

13-NA26

大規模シミュレーションによるメタマテリアルを用いた プラズモンポラリトン技術の開発とその応用に関する研究

有馬卓司（東京農工大学）

概要

電磁波に対してこれまで自然界では発見されてなかった電気特性を示す構造が注目されている。これらはメタマテリアルと呼ばれている。この構造を用いることで、プラズモンポラリトンと呼ばれる波長よりも微小な電磁波をつくり、電磁波によって微小な現象を解明する電波顕微鏡への応用が期待されている。本研究はメタマテリアル構造の開発からプラズモンの応用までの一連の研究を行うものである。本研究では、課題遂行のために、大型計算機を用いたシミュレーションを行い、プラズモンポラリトン発生メカニズムの解明と効率的な生成方法の検討を行った。メタマテリアル構造には研究室で開発した構造を用いているが、その構造を用いてプラズモンポラリトンを効率よく生成するために、構造の近傍に回折格子を配置する方法と、プリズムを配置する方法を検討した。その結果、回折格子を用いることで効率よくプラズモンポラリトンを生成できることをシミュレーションにより確認した。中間報告時点からの進捗として、この現象を用いたアプリケーションについても検討した。

1. 研究の目的と意義

現在、マイクロ波領域で自然界にはない電気的特性を示す構造が注目されている。この構造を用いることで、これまでアンテナを配置できないと考えられていたところに配置できる事や、波長より細かな電界を局在させる事が出来ると報告されており注目を集めている。これら構造の総称としてメタマテリアルという言葉が使われる。申請者らは、メタマテリアルを用いて波長より細かな電界を局在させる事が出来る技術に注目している。この波長より細かな電界は“プラズモンポラリトン”と呼ばれる。プラズモンポラリトンを用いることで比較的低い周波数を用いながら微細な構造を検出するセンサー技術や、微小な電界により極微小な粒子を集める方法などに応用できる。

プラズモンポラリトンを発生させる手法はいくつか提案されている。研究代表者らが注目している発生手法は、電磁波が誘電率の異なる媒質に浸入しその際全反射をおこし、この全反射の際、浸み出してきた電磁波が共鳴を起こす現象を利用する。この時、共鳴は負の誘電率を持つ構造により

起こりこれにより効率的にプラズモンを起こせる事が知られている。

これまでプラズモンポラリトンを発生させるために負の誘電率を持つ構造の開発を FDTD 法を用いたシミュレーションを用いて行ってきた。

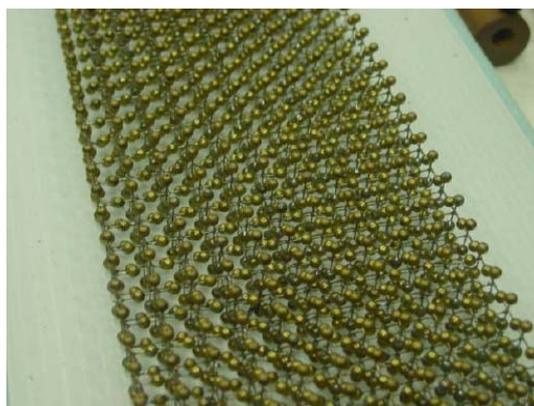


図 1. 周期構造

図 1 に研究代表者らが開発してきた構造を示す。この構造はある一つの構造を周期的に並べた周期構造となっている。周期構造を FDTD 法を用いて解析するには周期構造を構成する一つの構造を取り出し、その一つの構造が無限に続くという条件を

入れればよい。そのため、少ない計算機資源で解析を行うことができる。しかし研究代表者らは実際の応用を視野に入れた開発を行っている。

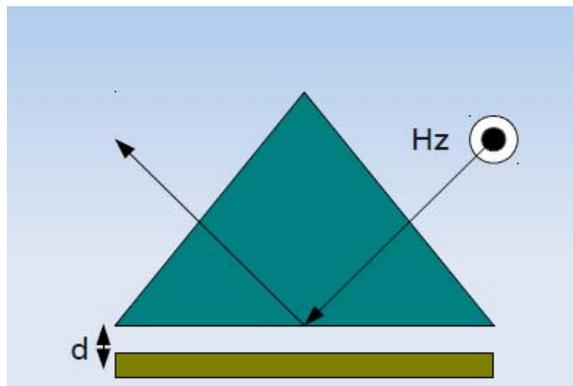


図 2. プリズムを用いたプラズモンの励起

研究代表者らは図 2 に示すように誘電体プリズムの下に開発したメタ材料を配置し、プラズモンポラリトンの発生を目指している。この構造を解析するには図 1 の構造すべてと、さらにその上に 3 次元的構造物である誘電体を解析しなければならない。これは FDTD 法で解析するには、大型計算機を用いても長い時間がかかる。これまで、計算精度を低下させることで、電磁解析を行ってきた。このような構造を用いると、誘電体プリズムの下に配置したメタ材料に電界が局在することが予想される。これはプラズモンポラリトンと考えられる。しかし、実際に応用するにはさらなるシミュレーションを行う必要がある。これらシミュレーションでは高精度化および高度化の観点からさらなる大規模計算が必要である。

本研究の意義は次のようにまとめられる。メタ材料は非常にプラズモンポラリトンだけではなくその他のユニークな特性を示す。例を示すと、電磁波の反射位相が 0 度になる効果：磁壁効果などがある。これら効果を用いることでアンテナを金属のごく近傍に設置することや、薄型で効率の良いアンテナが実現できる。本研究では、この非常にユニークな特性をさらに多くの分野に応用することを目的に FDTD 法を用いてその特性を明らかにするものである。たとえば、曲面構造のメタ材料などが開発できれば、その応用範囲は格段に上がると考えられる。このように本研究で

はプラズモンポラリトンだけではなく、メタ材料の特性を解析することによりその応用範囲を広げこれまでにないデバイスを開発する助けとなるものである。

2. 当拠点公募型共同研究として実施した意義

(1) 共同研究を実施した拠点名および役割分担

本研究は、東北大学サイバーサイエンスセンターと共同研究を実施している。下図に示す様に、研究代表者が物理現象を模擬できるシミュレーションアルゴリズムを検討し、東北大学サイバーサイエンスセンターがアルゴリズムの最適化を行った。

(2) 共同研究分野

「超大規模数値計算系応用分野」

(3) 当公募型共同研究ならではの事項など

共同研究を実施している拠点である、東北大学サイバーサイエンスセンターが非常に細かくかつ適切なアドバイスをしていただいたので、順調に研究が進んでいる。さらに、拠点と良好な関係を築くことが出来た。その結果、拠点である東北大学サイバーサイエンスセンターから講師を招いた講演会等も企画することが出来、研究の幅を広げることが出来た。

3. 研究成果の詳細と当初計画の達成状況

(1) 研究成果の詳細について

本研究はメタ材料構造の開発からプラズモンの応用までの一連の研究を行うものである。課題遂行のために、大型計算機を用いたシミュレーションを行い、プラズモンポラリトン発生メカニズムの解明と効率的な生成方法の検討を行った。これまで使用していたメタ材料構造を示す。この構造は、

1) 周期構造の効率的な解析手法の開発

本研究では、メタ材料の効率的なシミュレーション技術の開発が、研究遂行に向けて重要な要素技術となる。電磁界解析手法は、

未知電流を行列の形で求めるモーメント法や、時間領域でマクスウェルの方程式の微分形を直接差分する FDTD 法などがある。モーメント法を用いてメタマテリアルなどの複雑なモデルを解析するには非常に複雑な計算が必要になり、モデルによっては解析できなくなる。一方 FDTD 法はそのシンプルなアルゴリズムにより複雑なモデルも比較的容易に解析することができる。そのため本研究では FDTD 法を用いた。FDTD 法を用いてメタマテリアルなどの周期構造を解析するには、図 3 に示すように周期構造を構成する単位構造に周期境界条件を適用することで、効率よく解析できる。

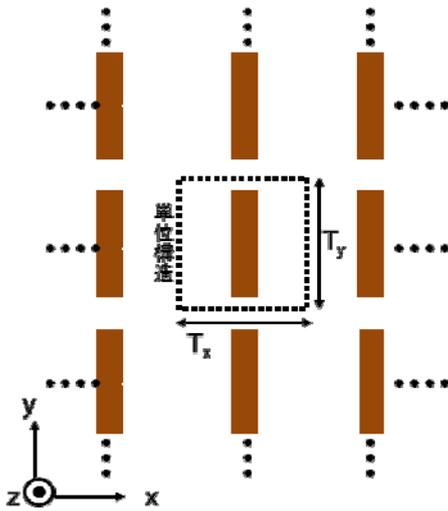


図 3. 周期構造と単位構造

この周期構造は、いくつか提案されているが、斜め入射に対しては有効なものはいくつか少なく、その有効性も十分明らかになっていない。そこでまず、解析手法の開発を行った。ここでは、constant-k FDTD 法を用いた。まず、周期境界条件は周波数領域で

$$E(x-T_x, y-T_y, w) = E(x, y, w)e^{jk_x T_x} e^{jk_y T_y}$$

とあらわされる。この式は、周期構造中においては位相が周期的に異なることを示している。FDTD 法は時間領域の解放のために、この式をフーリエ変換する必要がある。しかし、斜め入射においては未来に時間の値が必要になってしまう。そのため、constant-k FDTD

法においては、波数を定数とみなすことでこの問題を回避する。そして波数を定数とした周期境界条件を図 4 に示すように FDTD 法に組み込む。

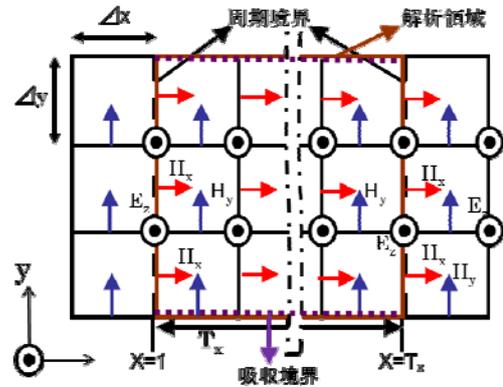


図 4. FDTD 法セル配置

しかし、この手法を用いても、斜め入射に対しては解が収束しないことが知られている。図 5 に解析例を示す。この例では、FDTD 法を用いて周期構造を解析し、ある点での電界の時間変化を調べた例である。

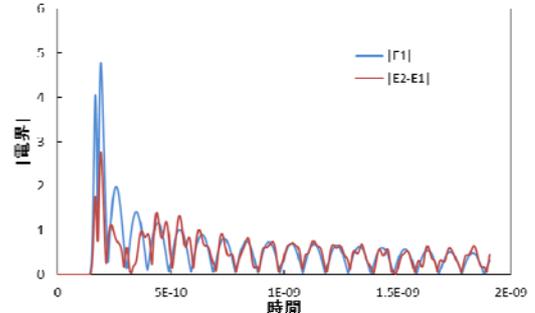


図 5. 時間領域波形

このように、電界は収束することなく周期的に変化し続ける。これでは、フーリエ変換することができない。斜め入射は現実の問題においては様々な角度特性に相当するために非常に重要である。そこで、本研究では constant-k FDTD 法に ARMA (自己回帰移動平均モデル) を用いた。ARMA アルゴリズムではこの問題に対して、有理関数近似を用いて予測する手法であり。ARMA アルゴリズムでは、電界の応答を伝達関数と考え、その伝達関数を

$$H(z) = \frac{a_0 + a_1 Z^{-1} + a_2 Z^{-2} + \dots + a_q Z^{-q}}{1 + b_1 Z^{-1} + b_2 Z^{-2} + \dots + b_p Z^{-p}}$$

と有理関数で近似する．ここで $Z = \exp(j\omega)$ である．このようにすることで，電界計算を収束する前に打ち切っても，電界の応答を予測し，解を得ることができる．

この手法を用いて解析した結果を示す．解析モデルは図 6 に示すような周期構造とした．このモデルは FSS (Frequency Selective Surface) と呼ばれメタマテリアルの一種である．

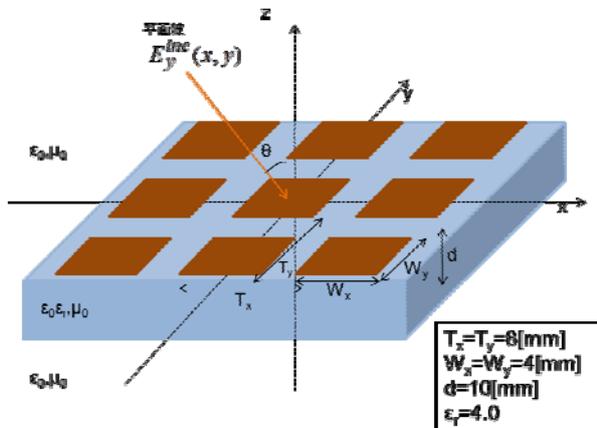


図 6. 解析モデル

この構造の反射係数を解析した．その結果を図 7 に示す．

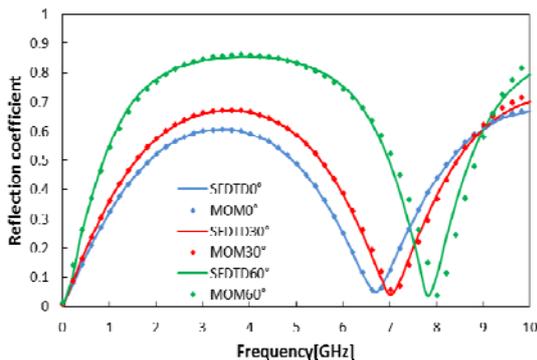


図 7. 解析結果

この結果は，図 6 の周期構造に対して，ARMA アルゴリズムを組み込んだ constant-k FDTD 法を適応し，構造からの反射係数を解析した結果である．電磁波の入射角度は， 0° （垂直入射）から 60° まで計算している．比較には，モーメント法を用いた．このモデルは比較的シンプルな構造のためにモーメント法を用い

た解析が可能である．また，モーメント法の計算精度は非常に高いことを確認している．解析結果より，入射角度が高くなっても constant-k FDTD 法に ARMA アルゴリズムを組み込んで解析した結果はよく一致しており手法の有効性がうかがえる．更なる有効性の確認のために EBG (electrical band gap) 構造を解析した．この構造は電磁波に対して高インピーダンス特性を示し，電磁波に対し絶縁体として用いることができるために，しばしば用いられている．この構造は，先ほどの FSS の裏に金属板で裏打ちした構造になっている．解析モデルを図 8 に示す．

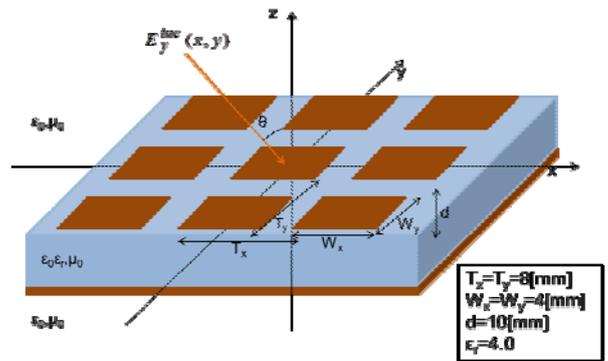


図 8. EBG モデル

このモデルは，金属で裏打ちされているために，反射係数は常に 1 である．そこで反射波の位相をシミュレーションした．その結果を図 9 に示す．

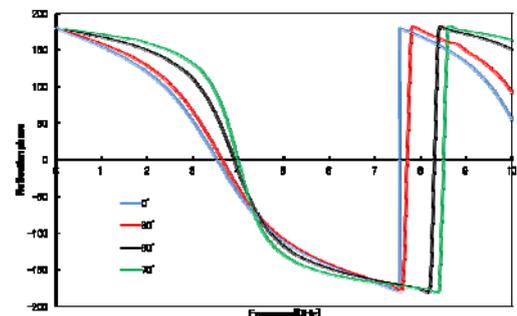


図 9. EBG の反射位相特性

この結果より，EBG 構造は入射角度が高くなると反射位相が 0 度となる周波数が高くなることがわかった．

2) プラズモンの励振方法に関する研究

上述したように、プラズモンの実用を考え、ここでは、我々が開発してきたメタマテリアル構造を用いてどのように、プラズモンを励起するかについて検討した。図 10 にこれまで開発してきたメタマテリアル構造を示す。

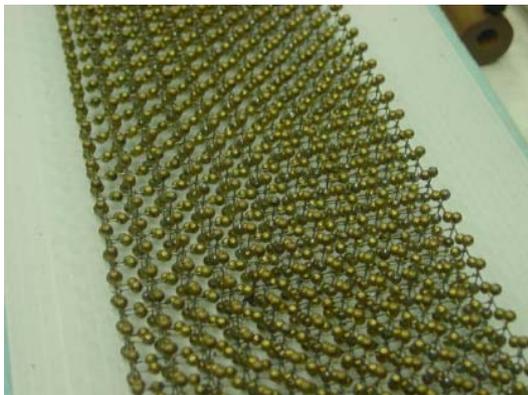


図 10. メタマテリアル構造

この構造は、マイクロ波領域において負の誘電率を示すことが示されている。この構造中では、自由空間中と波数と周波数の関係が異なるために、通常に電磁波を当てて、構造内に電界を励起することができない。この構造の波数と周波数の関係を図 11 に示す。

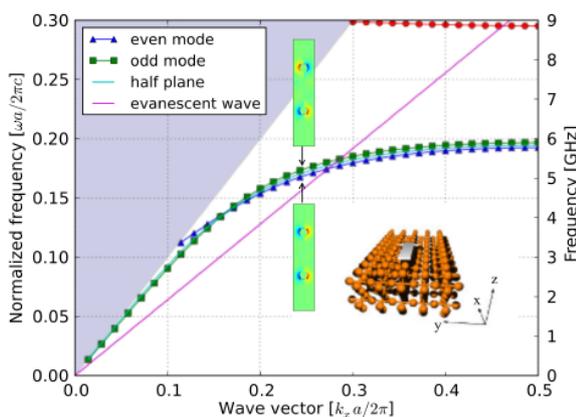


図 11. 波数と周波数の関係

図中の直線が、自由空間中での波数であるが、構造中での波数は、自由空間中と大きく異なっていることがわかる。そのために、自由空間中で波数を変化させる構造を用いることで、構造中に電界を発生させ、プラズモンを生成できると考えられる。自由空間中で、波数を変化させる方法としては、プリズム中に電磁波を照射して、プリズム内で全反射させる。すると、全反射したところから、エバセント波という、放射しない電磁波が染み出す。この波は波数が、自由空間と異なるために、メタマテリアルの中に電磁波を励起することができる。も一つの方法は、回折格子を用いる方法である。回折格子を通過した波は、メタマテリアル同様に波数が増加することが知られている。よって、この構造に電磁波を照射し、その近傍にメタマテリアルを配置することで、メタマテリアル中に電磁波を励起することができる。

まずは、図 12 に示すようにプリズムを用いたプラズモン励起について検討した。

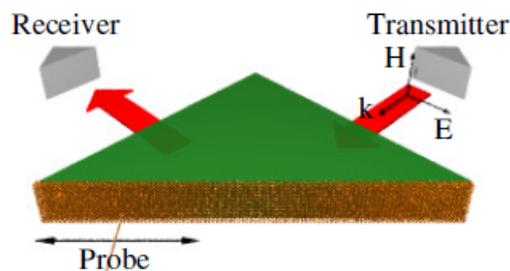


図 12 プリズムとメタマテリアル

そのシミュレーション結果を図 13 に示す。図 13 においては、メタマテリアルの近傍にプリズムを配置し、そのプリズムに電磁波を照射した結果を示している。この結果からわかるように、プリズムを用いることで、メタマテリアルの下方に局在した電磁波を発生させることができることが分かった。

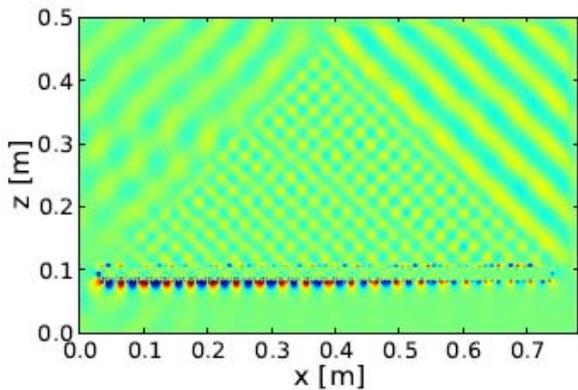


図 13 プリズムを用いた励振

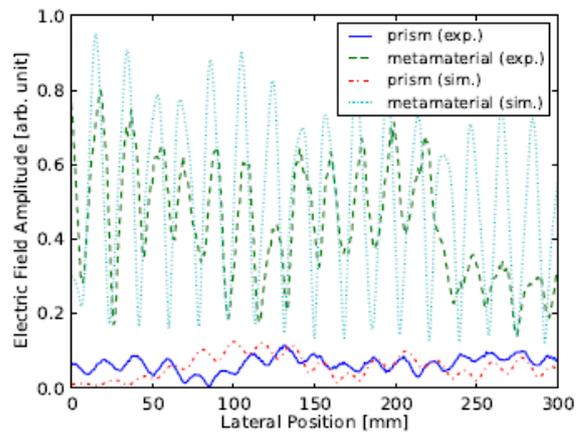


図 15 プリズム近傍の電界分布

次にこの効果を実験的に確認するために実験用の治具を作成した。作成したプリズムを図 14 に示す。これは比誘電率 4 の誘電体基板で作製した。



図 14 プリズム

このプリズムの断面に我々の作成したメタマテリアルを配置すれば、メタマテリアルの直下にプラズモンを生成することができると思われる。このプリズム近傍の電磁界分布をシミュレーションおよび測定した結果を図 15 に示す。この結果は、縦軸が電界強度、横軸が位置である。この結果より、プリズムとメタマテリアルを組み合わせることにより、非常に強い電界を局在させることができていくことがわかる。

次に回折格子を用いた励振法について検討した。回折格子を用いた励振のモデル図を図 16 に示す。このモデルでは、メタマテリアルのごく近傍に回折格子を配置している。これはプリズムのような立体的な構造を必要としないので、プリズムを用いた構造よりも簡易な構造であると考えられる。回折格子の間隔は、シミュレーションにより最適な値を設計した。また、回折格子は金属のみで作製されるために費用も安価であると考えられる。

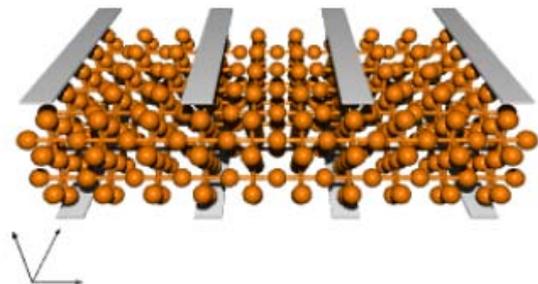


図 16 回折格子とメタマテリアル構造

この構造に電磁波を照射し、プラズモンを励起する。

一方実験的検討も行った。まず実験に必要な回折格子はアルミ фольで作製した。その写真を図 17 に示す。

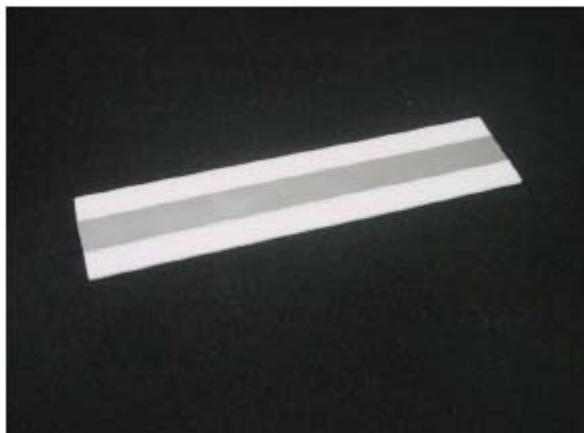


図 17 作成した回折格子

この回折格子は、形状保持のために、発泡スチロール上に作成されている。また、発泡スチロールの厚みは 1mm 程度であり、その比誘電率は約 1 であるために、シミュレーションにおいて、発泡スチロールはモデル化していなが、妥当であると考えられる。

次に実験のために実際に作製したメタマテリアル構造を示す。

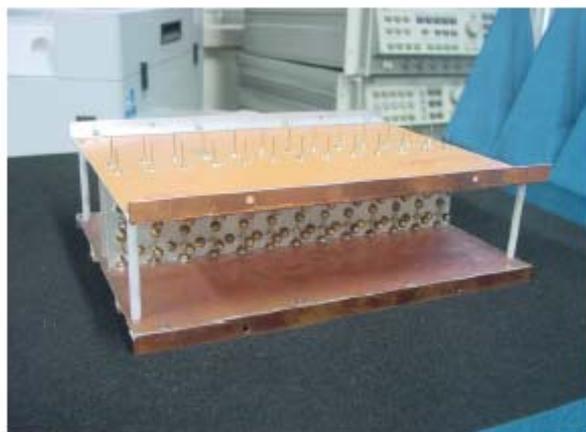


図 18 作成した構造

この図では、周期構造を模擬するために上下に金属板を配置し、この金属板によってイメージを作成し、無限周期を模擬している。金属平行平板内の内部に配置している構造は 4 周期程度配置している。

3) プラズモン現象を利用したアプリケーションに関する研究

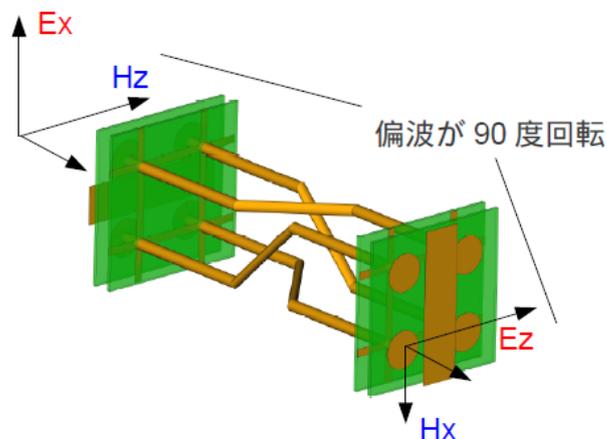


図 19 偏波ローテータ

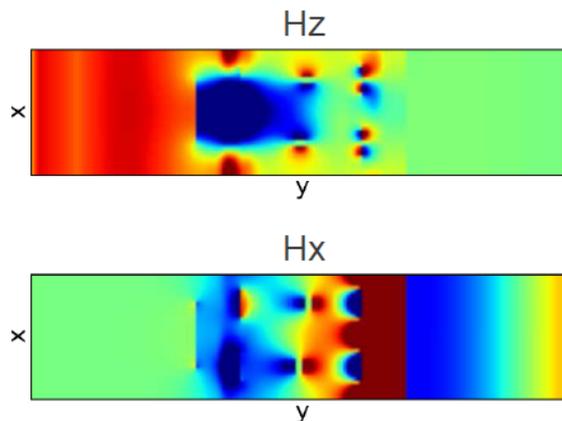


図 20 偏波面の回転

中間報告時点からの進捗として、プラズモン現象を利用したアプリケーションに関する研究をおこなった。電磁波は一般的に電界が振動しながら伝搬していく現象だが、電界の進行方向が地面に対して垂直なものを垂直偏波、水平なものを水平偏波という。この偏波は通常電磁波の放射の際に決まってしまう。この偏波は、独立しているために水平偏波と垂直偏波をそれぞれ違う電磁波としてもいえることが出来る。一方、使用状況において偏波面を回転させることが出来れば非常に有効な場合がある。この偏波を回転させるデバイスとしては、フェライト等を用いた物があるが非常に大掛かりになる。本研究では、プラズモン現象を用いた偏波ローテータを示す。

図 19 に偏波ローテータの概略図を示す。偏波が回転する様子を図 20 に示す。これら結果より、偏波が回転しており、プラズモン現象を用いたアプリケーションを開発できたと考える。

(2) 当初計画の達成状況について

本研究では

- 1) シミュレーション手法の開発
- 2) 励振方法の検討
- 3) プラズモン現象の応用

に関する一連の研究ですべての項目において成果を示しており定量的に見て当初の目的を達成したと言える。

4. 今後の展望

本研究では、シミュレーション技術のもとに新しい物理現象を解明し、その応用デバイスを開発した。今後大型計算機技術が大きく進めば、これまで予想できなかったデバイスの開発につながると思う。

5. 研究成果リスト

(1) 学術論文

Hiroaki Sakamoto, Toru Uno, Takuji Arima, and Yujiro Kushiyama, "Classification of Degenerate and Non-degenerate Modes of Photonic Crystals in FDTD Analysis by Group theory" IEICE Communication express, Vol.2, No.5, pp.211-216, 2013.5,

(2) 国際会議プロシーディングス

Takuji Arima, Yugo Tanno, Toru Uno, "An efficient edge structure of finite size EBG structure", Proc. Vietnam-Japan International Symposium on Antennas and Propagation, 2014.1.10,

(3) 国際会議発表

なし

(4) 国内会議発表

丹野雄悟, 有馬卓司, 宇野 亨 "有限 EBG 構造における構造端部の取り扱いについて", 2013 年 電子情報通信学会 ソサイエティ大会講演予稿集, B-1-130, p. 130, 2013. 9

坂本寛明, 宇野 亨, 有馬卓司, "ASM-FDTD 法を用いた周期構造解析空間中の非周期アンテナの入力インピーダンス解析", 2014 年電子情報通信学会総合大会論文集, B-1-134, p.134, 2014.3.19,

(5) その他 (特許, プレス発表, 著書等)

なし