FDTD 法の基礎とテラヘルツ波・光波デバイス解析の実践 Fundamentals of the FDTD Method and Practice of Terahertz and Optical Device Analysis

柴山 純

Jun SHIBAYAMA

法政大学 理工学部

概要

波動現象を扱う様々な電磁界問題の数値解法として有限差分時間領域(FDTD)法が広く用いられている. FDTD 法に基づくシミュレーターも数多く市販されており,企業の方々が電磁波デバイスの設計に利用 する機会も多くなっている.FDTD 法の定式化は極めて簡素であり,Maxwellの方程式をYee 格子(図) の電磁界配置に基づき差分法を用いて直接離散化するだけでよい.実際の計算では,連立方程式を解く などの処理は必要なく,導出された差分式を陽的に解くのみである.しかし,簡素な計算の代償として, 時間ステップの大きさが空間の離散間隔で決まる制限がある.空間の離散間隔を小さく選ばざるを得な い場合,時間ステップも必要以上に小さくなり,時間方向の計算数が増加することから,計算時間が長 大になることがある.

本基礎講座では、FDTD 法の定式化から始まり、吸収境界条件の設置、界の励振方法や界の表示方法な ど、FDTD 法を利用する際に必要となる知識の全体像を説明する.また、テラヘルツ波帯での水・半導 体や光波帯での金属など、周波数分散性を示す媒質を FDTD 法に組み込む方法も解説する.さらに、上 述した時間ステップの制限を取り去る陰的な FDTD 法についても触れる.テラヘルツ波・光波デバイス の解析結果も紹介する.



図 Yee 格子の電磁界配置

Abstract

In this basic course, we explain the big picture of the FDTD method, such as the formulation of the FDTD method, the addition of the absorbing boundary condition, the excitation method of the input field, and the representation of the calculated field. In addition, the incorporation of dispersive media into the FDTD method is discussed. The implicit FDTD method is also presented to remove the time step limitation. Several examples are given for the analysis of terahertz and optical devices.

MWE 2024 FDTD**法の基礎とテラヘルツ波・光波デバイス解析の実践** Fundamentals of the FDTD Method and Practice of Terahertz and Optical Device Analysis

柴山 純 Jun SHIBAYAMA 法政大学 理工学部

shiba@hosei.ac.jp

基礎編

- 1. 歴史的背景
- 2. マクスウェルの方程式
- 3. 方程式の展開
- 4. 差分法の基礎
- 5. Yee格子と離散化
- 6. 時間刻み幅の制限
- 7. 陰的FDTD法
- 8. 問題の次元
- 9. 吸収境界条件
- 10.励振方法
- 11.界の表示方法 12.分散性媒質の扱い

もくじ

実践編

13. プラズモニック波長分割器 14. プラズモニックグレーティングカップラ 15. 任意形状解析 16. THz導波路型表面プラズモン共鳴センサ 17. THz導波路型偏光子 18. 光伝導アンテナの複合物理解析 19. ディスク型THz表面波分割器 20. スプリットリング共振器 21. ディラック半金属を用いた導波路 22. 計算を行う際の注意点 23. 文献および著者紹介

1. 歴史的背景

✓ Yeeによる最初の論文

Numerical solution of initial boundary value problems involving Maxwell's equations in isotropic media IEEE Transaction on Antennas and Propagation, 1966

- ✓ 1990年代に入りコンピュータの発展と共に普及
- ✓ 書籍
 - A. Taflove and S.C. Hagness, Computational electrodynamics: the finitedifference time-domain method, Boston, MA : Artech House, 2005
 - A. Taflove, A. Oskooi, S.G. Johnson, Advances in FDTD computational electrodynamics: photonics and nanotechnology, Boston, MA : Artech House, 2013
 - 宇野亨, FDTD法による電磁界およびアンテナ解析,コロナ社, 1998
 - 宇野亨(編),何一偉(著),有馬卓司(著),数値電磁界解析のための FDTD法-基礎と実践,コロナ社,2016
 - 橋本修, 実践FDTD時間領域差分法, 森北出版, 2006

2. マクスウェルの方程式





$$E = (E_x E_y E_z)$$
 \mathcal{E} :誘電率
 $H = (H_x H_y H_z)$ μ :透磁率

3. 方程式の展開1

$$\nabla \times E(= \operatorname{rot} E) \leftarrow 外積の計算$$

$$\nabla = \left(\frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial}{\partial y} \frac{\partial}{\partial z}\right)$$

$$E = \left(E_x E_y E_z\right)$$

$$\nabla \times E = \begin{vmatrix} \mathbf{i} & \mathbf{j} & \mathbf{k} \\ \frac{\partial}{\partial x} & \frac{\partial}{\partial y} & \frac{\partial}{\partial z} \\ E_x & E_y & E_z \end{vmatrix} = \mathbf{i} \begin{vmatrix} \frac{\partial}{\partial y} & \frac{\partial}{\partial z} \\ E_y & E_z \end{vmatrix} - \mathbf{j} \begin{vmatrix} \frac{\partial}{\partial x} & \frac{\partial}{\partial z} \\ E_x & E_z \end{vmatrix} + \mathbf{k} \begin{vmatrix} \frac{\partial}{\partial x} & \frac{\partial}{\partial y} \\ \frac{\partial}{\partial y} & \frac{\partial}{\partial z} \\ E_x & E_y \end{vmatrix}$$

$$\mathbf{i}, \mathbf{j}, \mathbf{k} \mathrm{d} \xi \mathrm{h} \tilde{\xi} \mathrm{h}$$

$$\mathbf{j} \mathrm{h} \mathrm{d} \tilde{\xi} \mathrm{h} \tilde{\xi} \mathrm{h}$$

$$\mathbf{j} \mathrm{h} \mathrm{h} \mathrm{d} \tilde{\xi} \mathrm{h} \tilde{\xi} \mathrm{h}$$

$$\mathbf{j} \mathrm{h} \mathrm{h} \mathrm{h} \mathrm{h} \mathrm{h}$$

3. 方程式の展開 2





3. 方程式の展開 3



4. 差分法の基礎



5. Yee格子と離散化 1



i, *j*, *k*: 空間の位置(*x*=*i*Δ*x*, *y*=*j*Δ*y*, *z*=*k*Δ*z*) *n*:時間の位置(*t*=*n*∆*t*) それぞれ0から始まる整数



電磁界の時間配置

9

5. Yee格子と離散化 2



(a), (b), (c)を(1)に代入し時間的に
 最も進んでいるH^{n+1/2}を左辺に
 残りの項を右辺に移項



5. Yee格子と離散化 3

$$\begin{split} H_{x,i,j+1/2,k+1/2}^{n+1/2} &= H_{x,i,j+1/2,k+1/2}^{n-1/2} \\ &+ \frac{\Delta t}{\mu \Delta z} \Big(E_{y,i,j+1/2,k+1}^n - E_{y,i,j+1/2,k}^n \Big) \\ &- \frac{\Delta t}{\mu \Delta y} \Big(E_{z,i,j+1,k+1/2}^n - E_{z,i,j,k+1/2}^n \Big) \end{split}$$

- ●時間n, n-1/2での界は初期値として与えられ, 上式より時間n+1/2でのH_xが求まる
- 他の5本の式も同様に差分化
- 四則演算のみで計算できる(陽解法)
- 初期値の与え方は励振方法で説明

6. 時間刻み幅の制限

Courant-Friedrichs-Lewy (CFL) 条件
 時間刻み幅(∆t)に制限が加わり、制限を超えると
 計算は破綻(Blow up)



- **v**:解析領域内で最も早く伝搬する電磁波の速度(v = c/最小の屈折率) 空気領域がある場合は c(光速)
- CFL条件が完全に除去された陰的FDTD法
 空間の刻み幅が小さい場合に有効
 Δtの制限無、ただし計算精度が維持される範囲で選択
- CFL条件が緩和された半陰的FDTD法 特定の空間の刻み幅が小さい際にその方向のみに陰解法を適用

- Courant-Friedrichs-Lewy (CFL) 条件を完全に除去
- 連立方程式を解く必要
- 未知数3の連立方程式をThomasアルゴリズムで効率よく求解
 交互方向陰解法に基づくADI-FDTD法(富士通、カナダダルハウジー大学)
 局所的一次元法に基づくLOD-FDTD法(法政大)[1], [2]

● TM波に対する2次元マクスウェルの方程式(∂/∂y=0)

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} = ([A] + [B])\varphi$$

$$\varphi = \begin{bmatrix} H_y \\ E_x \\ E_z \end{bmatrix}, \quad [A] = \begin{bmatrix} 0 & 0 & -\frac{\partial}{\varepsilon \partial z} \\ 0 & 0 & 0 \\ -\frac{\partial}{\mu \partial z} & 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad [B] = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{\partial}{\varepsilon \partial x} \\ 0 & \frac{\partial}{\mu \partial x} & 0 \end{bmatrix}$$

● 電界と磁界を同じ時間におく(半ステップシフトしない)



ADI

Step 1: $\varphi^{n+1/2} = \frac{\left([I] + \frac{\Delta t}{2}[A]\right)}{\left([I] - \frac{\Delta t}{2}[B]\right)}\varphi^{n}$

Step 2:

$$\varphi^{n+1} = \frac{\left([I] + \frac{\Delta t}{2}[B]\right)}{\left([I] - \frac{\Delta t}{2}[A]\right)}\varphi^{n+1/2}$$

T. Namiki, *IEEE Trans. Microw. Theory Tech.*, 47, 10, 2003-2007, 1999.

Step 1:

$$\varphi^{n+1/2} = \frac{\left([I] + \frac{\Delta t}{2}[B]\right)}{\left([I] - \frac{\Delta t}{2}[B]\right)}\varphi^n$$

LOD

Step 2:

$$\varphi^{n+1} = \frac{\left([I] + \frac{\Delta t}{2}[A]\right)}{\left([I] - \frac{\Delta t}{2}[A]\right)}\varphi^{n+1/2}$$

J. Shibayama et al., *Electron. Lett.*, 41, 19, 1046-1047, 2005.

ADI

LOD

• Step 1:

$$\frac{\frac{E_x^{n+1/2} - E_x^n}{\Delta t/2}}{\frac{\Delta t/2}{\Delta t/2}} = -\frac{1}{\varepsilon} \frac{\frac{\partial H_y^{n+1/2}}{\partial z}}{\frac{\partial z}{\partial z}}$$
$$\frac{\frac{E_z^{n+1/2} - E_z^n}{\Delta t/2}}{\frac{H_y^{n+1/2} - H_y^n}{\Delta t/2}} = \frac{1}{\varepsilon} \frac{\frac{\partial H_y^{n+1/2}}{\partial x}}{\frac{\partial z}{\partial x}} + \frac{\frac{\partial E_x^n}{\partial z}}{\frac{\partial z}{\partial x}}$$

• Step 2:

$$\frac{E_x^{n+1} - E_x^n}{\Delta t/2} = -\frac{1}{\varepsilon} \frac{\partial H_y^{n+1/2}}{\partial z}$$
$$\frac{E_z^{n+1} - E_z^{n+1/2}}{\Delta t/2} = \frac{1}{\varepsilon} \frac{\partial H_y^{n+1/2}}{\partial x}$$
$$\frac{H_y^{n+1} - H_y^{n+1/2}}{\Delta t/2} = \frac{1}{\mu} \left(\frac{\partial E_z^{n+1/2}}{\partial x} + \frac{\partial E_x^{n+1}}{\partial z} \right)$$

• Step 1:

• Step 2:

$$\begin{aligned} E_z^{n+1} &= E_z^{n+1/2} \\ \frac{E_x^{n+1} - E_x^{n+1/2}}{\Delta t/2} &= -\frac{1}{\varepsilon} \left(\frac{\partial H_y^{n+1}}{\partial z} + \frac{\partial H_y^{n+1/2}}{\partial z} \right) \\ \frac{H_y^{n+1} - H_y^{n+1/2}}{\Delta t/2} &= -\frac{1}{\mu} \left(\frac{\partial E_x^{n+1}}{\partial z} + \frac{\partial E_x^{n+1/2}}{\partial z} \right) \end{aligned}$$

表 演算回数

Method	Implicit		Explicit		Total	
	M+D	A+S	M+D	A+S	M+D	A+S
ADI	3+3	6+6	1+2+1+2	2+4+2+4	12	24
CNAD	3+3	8+12	2	8	8	28
CNCS	1+2	3+11	3+3	8+12	9	34
LOD	2+2	6+6	1+1	4+4	6	20

CNAD: Crank-Nicolson Approximated-Decoupling FDTD CNCS: Crank-Nicolson Cycle-Sweep FDTD

LOD-FDTD法の計算時間は陽的FDTD法の半分から1/10程度に短縮 (解析モデルに依存)



8. 問題の次元





9. 吸収境界条件 (ABC)

- 実際の空間は無限の広さ
- 計算空間は有限のため、境界条件で打ち切る必要がある
- ✓ 微分方程式を用いる方法(厚みがない)
 - Mur-ABC: 簡単、精度中

一方向伝搬の波動方程式

- Higdon-ABC: 簡単、Murより良い
 - 一方向伝搬の波動方程式(斜め入射)
- ✓ 仮想的な媒質を用いる方法(厚みがある)
 - PML(Perfectly Matched Layer)-ABC: 多少複雑、精度良 インピーダンスマッチング条件を課す 実装にはいくつか方法がある(split field法)
 - Convolutional PML

界をsplitせず、帰納的畳み込み法で計算する

10. 励振方法 1

- 解く問題により様々な技法がある
- ✓ 導波問題にしばしば使われる一方向励振
- ✓ 散乱問題に対する全電磁界・散乱界領域分割法 (Total Field/Scatter Field (TF/SF) excitation scheme)

10. 励振方法 2 (一方向励振)



高反射(HR)コーティング付導波路

10. 励振方法3(一方向励振)



10. 励振方法 4 (一方向励振)



24

10. 励振方法 5(全電磁界·散乱界領域分割法)

● 一方向励振で計算領域を囲む



- 1. TF/SF境界上の各サンプル点で、入射 界成分を保持する。例えば、解析的に 入射界を作っても良いし、TF領域を空 にして、平面波等を入射し、そのとき の界の時間遷移の情報を保持しても 良い。
- 2.保持している入射界成分を一方向励振手法と同様に各辺(3Dの場合は面)から入射する。

11. 界の表示方法

- FDTD法では実数計算

 → 連続波、パルス波の界を、ある時間でそのまま表示
 絶対体をまこ
- 絶対値を表示
 - →連続波の実数界を複素界に変換しその絶対値を表示 界を適切な時間で積分し、実部・虚部を算出 (交流回路の正弦波交流での複素解析と同様、複素振幅の絶対値)



12.分散媒質の扱い1

- ex: THz帯より低い周波数では金属は完全導体(PEC)で近似 → 金属表面上の電界成分をゼロ
- ●より高い周波数では、金属を分散性媒質として扱う
 → 周波数により誘電率が変化する効果を取り込む
 <u>周波数依存型FDTD法</u>
 ■
 ■
 ■
 ■
 ■
 ■
 ■
 ■
 ■
 ■
 ■
 ■
 ■
 ■
 ■
 ■
 ■
 ■
 ■
 ■
 ■
 ■
 ■
 ■
 ■
 ■
 ■
 ■
 ■
 ■
 ■
 ■
 ■
 ■
 ■
 ■
 ■
 ■
 ■
 ■
 ■
 ■
 ■
 ■
 ■
 ■
 ■
 ■
 ■
 ■
 ■
 ■
 ■
 ■
 ■
 ■
 ■
 ■
 ■
 ■
 ■
 ■
 ■
 ■
 ■
 ■
 ■
 ■
 ■
 ■
 ■
 ■
 ■
 ■
 ■
 ■
 ■
 ■
 ■
 ■
 ■
 ■
 ■
 ■
 ■
 ■
 ■
 ■
 ■
 ■
 ■
 ■
 ■
 ■
 ■
 ■
 ■
 ■
 ■
 ■
 ■
 ■
 ■
 ■
 ■
 ■
 ■
 ■
 ■
 ■
 ■
 ■
 ■
 ■
- ✓ Debyeモデル
 人体@マイクロ波帯、水@THz帯
 ✓ Cole-Coleモデル
 - 人体@マイクロ波帯
- ✓ Drudeモデル
 金属@光波帯、半導体@THz帯
- ✓ Drude-Lorentzモデル

金属@光波帯

12.分散媒質の扱い2

● 電束密度が誘電率と電界の畳み込み積分

 $D = \varepsilon(\omega)E(\omega) \implies D(r,t) = \int_0^t \varepsilon(r,\tau)E(r,t-\tau)d\tau$

✓ 時間領域に変換し帰納的に評価

 \rightarrow Recursive Convolution (RC)法

- 電東密度と電界の関係をFDTDと連立 $D = \varepsilon(\omega)E$
- ✓ 時間領域に変換しFDTDに組み込む
 - → Auxiliary Differential Equation (ADE)法($j\omega \rightarrow \partial/\partial t$) Z-transform 法

12.分散媒質の扱い3

表 各手法の特徴

手法	利点	欠点	文献	LOD-FDTD への応用
Recursive Convolution (RC) 法	 電界と誘電率の関係 を1度の畳み込み積 分で効率よく評価 	 分散性が強い場合 に精度悪化(1次精 度) 	R. J. Luebbers et al., <i>IEEE T-</i> <i>AP</i> , 32, 222-227, 1990.	J. Shibayama et al., <i>Electron.</i> <i>Lett.</i> , 42, 1084-1086, 2006.
Piecewise Linear RC (PLRC) 法	 RC法に比べ精度改 善(2次精度) 	• 2度の畳み込み積分 で定式化煩雑	D. F. Kelly and R. J. Luebbers, <i>IEEE T-AP</i> , 44, 792-797, 1996.	<i>EL</i> , 42, 1084- 1086, 2006. <i>IEEE PTL</i> , 20, 824-826, 2008.
Trapezoidal RC (TRC) 法	 1度の畳み込み積分 でPLRC法と同精度 		R.Siushansian and J.LoVetri, <i>IEEE MGWL</i> , 5, 426-428, 1995.	<i>IEEE PTL</i> , 21, 100-102, 2009 .[3], [4]
Auxiliary Differential Equation (ADE) 法	 定式化が比較的簡素 	 高次の時間微分(多 極の分散)が現れる 場合は、差分する時 刻に注意 	T. Kashiwa and I. Fukai, <i>MOTL</i> , 3, 203-205, 1990.	<i>Electron. Lett.</i> , 42, 1084- 1086, 2006.
Z Transform (ZT) 法	 ADE法に比べ差分す る時刻が一意に決定 精度良 	 メモリ負荷が増大 	D. M. Sullivan, IEEE T-AP, 40, 223-1230, 1992.	<i>Electron. Lett.,</i> 44, 16, 949-950, 2008.

12.分散媒質の扱い4(LOD-FDTD法)



12.分散媒質の扱い4(連続波励振)



12.分散媒質の扱い5(パルス励振)



13.プラズモニック波長分割器1

● 目的

3次元金属-誘電体-金属(MIM)導波路を用いて1.31、1.55µmを分割[5]

● 計算手法

GP-GPUを用いた周波数依存型陽的FDTD法(TRC法)

- 課題
 2次元MIM導波路での研究が主流、3次元導波路では設計が困難
- 工夫 空洞共振器構造に誘電体を挿入、減衰極(スタブ)を導入
- 結果

3次元構造で双方の波長で消光比20dB以上を達成



13.プラズモニック波長分割器2



✓ スリット型バンドパスフィルタを応用した波長分割器* ✓ 3次元構造では未検討

* X. Mei et al., J. Opt. Soc. Am. B, vol. 27, no. 12, pp. 2707-2713, 2010.

13.プラズモニック波長分割器3


13.プラズモニック波長分割器4



✓ 2次元構造と比べて3次元構造では長波長帯で高い透過率
 ✓ 波長分割器として設計する際のクロストークの要因

13.プラズモニック波長分割器5



13.プラズモニック波長分割器6



✓ 金属膜を厚くすることで透過ピークより長波長側の 不要透過が低減



13.プラズモニック波長分割器8







14.プラズモニックグレーティングカップラ(PGC)1

● 目的

グレーティングに結合する界の一方向伝搬[6]

● 計算手法

周期境界条件を用いたFDTD法、TF/SF境界を導入したFDTD法、TRC法

● 課題

グレーティングに結合する界は結合した導波路の両方向に伝搬

- 工夫
 台形グレーティングの導入
- 結果
 垂直励振にもかかわらず界の一方向伝搬を達成



14. PGC 2(従来の台形グレーティング)



14. PGC3 (反射特性)



✓ θ = 0,10,20°においてディップを確認
 ✓ 入射角を大きくするとディップ波長が長波長側にシフト

14. PGC 4 (界分布)



14. PGC 5 (ポインティングベクトル)



✓ 傾斜励振では界は一方向に伝搬→垂直励振で一方向伝搬を得たい

14. PGC 6 (台形グレーティング)



14. PGC 7 (設計)



長方形誘電体



$$\phi_2 = \sin^{-1} \left(\frac{1.0}{1.444} \sin 20^\circ \right)$$

 \approx 13.7°



$$\theta_1 = \theta_2 + \theta_3 \quad (2)$$

$$n_{\rm air} \cdot \sin \theta_1 = n_{{\rm SiO}_2} \cdot \sin \theta_3$$

$$\theta_3 = \sin^{-1} \left(\frac{1.0}{1.444} \sin \theta_1 \right)$$
 (3)

台形誘電体

 $\therefore \theta_1 \approx 40.3^\circ$, $h_2 \approx 1.42 \ \mu m$

14. PGC 8 (結果)



49

14. PGC 9(有限周期、TF/SF境界)



15. 任意形状解析 1

● 目的

柱状、球などの曲面、傾斜面を持つ構造を比較的大きな刻み幅で解析

- 計算手法 誘電体:Contour-Pass Effective-Permittivity(CP-EP)法[7] 分散性媒質:Dispersive Contour-Pass(DCP)法[8]
- 課題 2次元のみの定式化、DCP法では計算負荷の大きいZ変換での定式化
- 工夫
 3次元問題へ拡張、効率よいTRC法でDCP法を再定式化
- 結果 比較的大きな刻み幅で3次元曲面構造を精度良く解析可能

15. 任意形状解析 2(CP-EP法:誘電体)



15. (Hereford)
Ampere's law

$$\int_{(k-1)\Delta z}^{k\Delta z} \int_{(j-\frac{1}{2})\Delta y}^{(j+\frac{1}{2})\Delta y} D_{x|i,y,z} dy dz$$

$$= \int_{(k-1)\Delta z}^{(k-1)\Delta z+h} \left\{ \int_{(j-\frac{1}{2})\Delta y+d}^{(j-\frac{1}{2})\Delta y+d} D_{x|i,y,z} dy dz$$

$$+ \int_{(k-1)\Delta z+h}^{(j+\frac{1}{2})\Delta y} D_{x|i,y,z} dy dz$$

$$+ \int_{(k-1)\Delta z+h}^{k\Delta z} \int_{(j-\frac{1}{2})\Delta y}^{(j+\frac{1}{2})\Delta y} D_{x|i,y,z} dy dz$$

$$= \left(\frac{hd}{\Delta y\Delta z} \right) \varepsilon_{2} E_{2} + \left(1 - \frac{hd}{\Delta y\Delta z} \right) \varepsilon_{1} E_{1} = \left[\frac{hd}{\Delta y\Delta z} \varepsilon_{2} + \left(1 - \frac{hd}{\Delta y\Delta z} \right) \varepsilon_{1} \right] E_{x|i,j,k-1/2} (3)$$



$$\varepsilon_{\perp} = \left[\frac{\frac{f}{\Delta x}}{\varepsilon_2} + \frac{(1 - \frac{f}{\Delta x})}{\varepsilon_1}\right]^{-1}$$

15. 任意形状解析 5 (3次元問題への拡張)



✓ 3次元構造では14通りの場合分けが必要

15. 任意形状解析 6 (誘電体球の解析)



$$\varepsilon_{2} = 5$$

$$\varepsilon_{1} = 1$$

$$d = 240 \text{ nm}$$

$$N : \text{ varied}$$

$$\Delta = d / N$$

散乱断面積の評価式

$$\sigma_{scat} = \frac{W_{scat}}{I_{inc}}$$
 $W_{scat} = \frac{1}{2} \iint \operatorname{Re} \{ E_{scat} \times H^*_{scat} \} \cdot ndS$
 $I_{inc}: 入射界の電力密度$

15. 任意形状解析7(結果)



15. 任意形状解析 8(DCP法:分散性媒質) TRC-FDTD 法へのDrude-Lorentzモデルの導入

$$\boldsymbol{E}^{n} = \frac{1 - C_{a}}{1 + C_{a}} \boldsymbol{E}^{n-1} + \frac{D_{a} c \Delta t}{1 + C_{a}} \boldsymbol{\nabla} \times \boldsymbol{H}^{n-\frac{1}{2}} + \frac{1 - C_{b}}{1 + C_{a}} \boldsymbol{\eta}^{n-1} + \frac{1}{1 + C_{a}} \boldsymbol{\phi}^{n-1}$$

$$\boldsymbol{\eta}^n = C_a(\boldsymbol{E}^n + \boldsymbol{E}^{n-1}) - \boldsymbol{\phi}^{n-1} + C_b \boldsymbol{\eta}^{n-1}$$

$$\boldsymbol{\phi}^n = \boldsymbol{\phi}_{\mathrm{D}}^n + \mathrm{Re}(\boldsymbol{\phi}_{\mathrm{L}}^n)$$

$$\boldsymbol{\phi}_{\mathrm{D}}^{n} = C_{c}(\boldsymbol{E}^{n} + \boldsymbol{E}^{n-1}) + e^{-\nu_{\mathrm{D}}\Delta t}\boldsymbol{\phi}_{\mathrm{D}}^{n-1} + C_{d}(\boldsymbol{\eta}^{n} + \boldsymbol{\eta}^{n-1})$$
$$\boldsymbol{\phi}_{\mathrm{L}}^{n} = C_{e}(\boldsymbol{E}^{n} + \boldsymbol{E}^{n-1}) + e^{\left(-\nu_{\mathrm{L}}/2 + j\sqrt{\omega_{\mathrm{L}}^{2} - (\nu_{\mathrm{L}}/2)^{2}}\right)\Delta t}\boldsymbol{\phi}_{\mathrm{L}}^{n-1} + C_{f}(\boldsymbol{\eta}^{n} + \boldsymbol{\eta}^{n-1})$$

分散性媒質内の係数

$$D_a = \frac{1}{\varepsilon_{\infty}}, C_a = \frac{\chi^0}{2\varepsilon_{\infty}}, C_b = 1, C_c = \frac{\Delta \chi_D^0}{2\varepsilon_{\infty}}, C_d = 0, C_e = \frac{\Delta \chi_L^0}{2\varepsilon_{\infty}}, C_f = 0$$

 $\chi^0, \Delta \chi_D^0, \Delta \chi_L^0$: 電気比感受率から決まる定数

15. 任意形状解析 9(DCP法)

$$E'_{x|i,j,k-1/2} = \frac{\varepsilon_{\infty}}{\varepsilon_{||,q,r}\varepsilon_{\perp,p}} D_{x}|_{i,j,k-\frac{1}{2}} - \varepsilon_{\infty} \left(\frac{\varepsilon_{\infty}c_{||,q,r}}{\varepsilon_{||,q,r}\varepsilon_{\perp,p}} - \frac{c_{\perp,p}}{\varepsilon_{b}} \right) \eta_{2}$$

<u>例:分散性媒質が計算セルの中心を含む場合</u>



15. 任意形状解析 10 (DCP法)

<u>例:分散性媒質が計算セルの中心を含まない場合</u>

$D_{a(a)} = \frac{\varepsilon_{\infty}}{\varepsilon_{ }\varepsilon_{\perp}}$	$C_{a(b)} = \frac{\chi^0}{2\varepsilon_{\infty}} \frac{\varepsilon_{\perp}}{\varepsilon_{\rm b}} \left\{ \frac{\varepsilon_{\rm b}}{\varepsilon_{\infty}} p^2 + (1-p^2) \right\} \frac{D_{a(b)}\varepsilon_{\infty}g_{ } + g_{\perp}}{1 - C_{g(b)}}$
$C_{b(b)} = \frac{1 + C_{g(b)}}{1 - C_{g(b)}}$	$C_{c(b)} = \frac{\Delta \chi_{\rm D}^0}{2\varepsilon_{\infty}} \frac{\varepsilon_{\perp}}{\varepsilon_{\rm b}} \left\{ \frac{\varepsilon_{\rm b}}{\varepsilon_{\infty}} p^2 + (1-p^2) \right\} \frac{D_{a(b)}\varepsilon_{\infty}g_{ } + g_{\perp}}{1 - C_{h(b)}}$
$C_{d(b)} = \frac{\frac{\Delta \chi_{\rm D}^0}{2\varepsilon_{\infty}} \left(\frac{\varepsilon_{\infty}}{\varepsilon_{\rm b}} g_{\perp} - p^2\right)}{1-\varepsilon_{\rm c}}$	$C_{e(b)} = \frac{\Delta \chi_{\rm L}^0}{2\varepsilon_{\infty}} \frac{\varepsilon_{\perp}}{\varepsilon_{\rm b}} \left\{ \frac{\varepsilon_{\rm b}}{\varepsilon_{\infty}} p^2 + (1-p^2) \right\} \frac{D_{a(b)}\varepsilon_{\infty}g_{ } + g_{\perp}}{1 - C_{i(b)}}$
$\frac{\Delta \chi_{\rm L}^0}{2c} \left(\frac{\varepsilon_{\infty}}{c} g_{\perp} - p^2 \right)$	$C_{g(b)} = \frac{\chi^0}{2\varepsilon_{\infty}} \left[\frac{\varepsilon_{\perp}}{\varepsilon_{\rm b}} g_{\perp} \left\{ \frac{\varepsilon_{\rm b}}{\varepsilon_{\infty}} p^2 + (1-p^2) \right\} - p^2 \right]$
$C_{f(b)} = \frac{2\varepsilon_{\infty} \left(\varepsilon_{b} - \frac{1}{2}\right)}{1 - C_{i(b)}}$	$C_{h(b)} = \frac{\chi_{\rm D}^0}{2\varepsilon_{\infty}} \left[\frac{\varepsilon_{\perp}}{\varepsilon_{\rm b}} g_{\perp} \left\{ \frac{\varepsilon_{\rm b}}{\varepsilon_{\infty}} p^2 + (1-p^2) \right\} - p^2 \right]$
	$C_{i(b)} = \frac{\chi_{\rm L}^0}{2\varepsilon_{\infty}} \left[\frac{\varepsilon_{\perp}}{\varepsilon_{\rm b}} g_{\perp} \left\{ \frac{\varepsilon_{\rm b}}{\varepsilon_{\infty}} p^2 + (1-p^2) \right\} - p^2 \right]$

15. 任意形状解析 11 (金属球の解析)



 $\varepsilon_{b} = 1$ a = 120 nm N : varied $\Delta = d/N$



16. THz導波路型表面プラズモン共鳴(SPR)センサ1

● 目的

THz帯でのSPRセンサの開発[9],[10]

● 計算手法

TRC法に基づく周波数依存型FDTD法

- 課題
 THz帯では金属/誘電体界面に表面プラズモンポラリトン(SPP)が励起されない
- 工夫
 半導体InSbを利用するとSPPを励起可能
- 結果

温度の検知、水溶液濃度の検知の可能性





光波帯でのSPRセンサ

- 金属と誘電体の界面にSPPは励起不可
- 半導体InSbと誘電体の界面にSPPが励起(TM波励振)
- InSb、H₂Oの誘電率の温度依存性



$$n_{co} = 3.4 \text{ (Si)}$$

$$n_{sub} = 1.94 \text{ (SiO}_2\text{)}$$
Sample: H₂O
$$w = 50\mu\text{m}$$

$$w_{I} = 5 \mu\text{m}$$

$$L = 400 \mu\text{m}$$

周波数分散性媒質 InSb: Drudeモデル H₂O: 二極のDebyeモデル





17. THz導波路型偏光子 1

● 目的

THz帯でのSPRセンサへのTM波入射[11]

- 計算手法 TRC法に基づく周波数依存型FDTD法、半陰的FDTD法
- 課題 どのようにTE波のみを除去するか
- 工夫
 TE波を高次モードに変換し除去
- 結果

TM-pass/TE-stop偏光子の可能性



17. THz導波路型偏光子 2(3次元構造)



TM波(透過)

17. THz導波路型偏光子 3



70

18. 光伝導アンテナの複合物理解析 1

● 目的

THz波を放射する光伝導アンテナの動作を忠実に、効率よく再現[12]

● 計算手法

ドリフト拡散法とFDTD法を連成した解析

- 課題 細かい空間刻み幅の利用により計算コストが増大
- エ夫

必要な領域のみ細かい刻み幅を利用するSubgrid法の適用

● 結果

計算時間・メモリを80%削減


18. 光伝導アンテナの複合物理解析 2





18. 光伝導アンテナの複合物理解析 4





18. 光伝導アンテナの複合物理解析 6



● 目的

疑似表面プラズモンを利用しTHz波の周波数分割[13], [14]

● 計算手法

円筒座標系FDTD法、円筒座標系半陰的FDTD法

● 課題

従来は板状グレーティングの利用、THz波の結合領域が小さい 円筒座標では中心軸に近い周方向の刻みが小さく、時間刻み幅も小さい →計算が長時間にわたる

● 工夫

金属円盤に放射状にグレーティングを設置、結合領域の拡大 円周方向にのみ陰解法を適用したSemi-Implicit FDTD法

● 結果

周波数分割の可能性





Z. YongJin et al., Sci China Inf Sci, vol. 55, no. 1, pp. 79-89, 2012.





$h_{ m L}$	$= 30 \mu\mathrm{m}$
h_{R}	$= 50 \mu\mathrm{m}$
$\phi_{ m L}$	= 135°
$\phi_{ m R}$	= 135°
ϕ_m	= 45°
r	$= 80 \mu\mathrm{m}$
р	$= 50 \mu\mathrm{m}$
d	$= 20 \ \mu m$
w _b	$=480\mu\mathrm{m}$
w _t	$= 200 \mu\mathrm{m}$
l	$=400 \mu\mathrm{m}$
Numbe	er of gratings: 9



0.1

0.2

 $k_{\chi}(2\pi/p)$

0.3

0.5

0.4







f = 9.5 or 12.5 GHz $l_1 = 10 \text{ mm} \quad l_2 = 25 \text{ mm}$ $w_T = 16 \text{ mm} \quad w_B = 25 \text{ mm}$ $r = 8 \text{ mm} \quad h_R = 6 \text{ mm}$ $h_L = 4 \text{ mm} \quad d = 2 \text{ mm}$ $p = 5 \text{ mm} \quad \phi_R = \phi_L = 135^\circ$ $\phi_m = 45^\circ$



 H_{ω} field distributions at 9.5 GHz. (a) FDTD method (b) SI-FDTD method.

半陰的(SI)FDTD法:時間刻み幅を陽的FDTD法の10倍に選択 CFLN=10



 H_{ω} field distributions at 12.5 GHz. (a) FDTD method (b) SI-FDTD method.

半陰的(SI)FDTD法:時間刻み幅を陽的FDTD法の10倍に選択 CFLN=10



Radiation pattern (E_{θ} , f = 9.5 GHz).

Radiation pattern (E_{θ} , f = 12.5 GHz).



Computation time.

半陰的FDTD法の計算時間は陽的FDTD法に比べて CFLN = 10で18%に短縮

20. スプリットリング共振器 1



対称構造が崩れると非放射モードが励振されFano共鳴が生じる

20. スプリットリング共振器 2



界振幅

周期境界条件を用いた3次元FDTD法

21. ディラック半金属を用いた導波路1



Band structure

21. ディラック半金属を用いた導波路2

√ 導電率

 \checkmark

$$\operatorname{Re}\sigma(\Omega) = \frac{e^2 g k_F}{24\pi\hbar} G\left(\frac{\Omega}{2}\right)$$
$$\operatorname{Im}\sigma(\Omega) = \frac{e^2 g k_F}{24\pi\hbar} \left\{ \frac{4}{\Omega} \left[1 + \frac{\pi^2}{3} \left(\frac{T}{E_F}\right)^2 \right] + 8\Omega \int_0^3 \left[\frac{G(\varepsilon) - G(\frac{\Omega}{2})}{\Omega^2 - \varepsilon^2} \varepsilon d\varepsilon \right] \right\}$$

、誘電率
$$\varepsilon(\omega) = 1 + j \frac{\sigma(\Omega)}{\varepsilon_0 \omega}$$

 \checkmark Na₃Bi, Cd₃As₂ ✓ フェルミ準位により誘電特性が変化 ✓ THz帯において表面プラズモンポラリトンが励起

*(***1**)

21. ディラック半金属を用いた導波路3



3.40	$n_{\rm SiO_2}$	= 1.94	n _{Air}	= 1.00
20 <i>µ</i> m	$h_{\rm Si}$	$= 50 \ \mu m$	$h_{\rm SiO2}$: varied
70 µm	Δx	$= 0.5 \ \mu m$	Δy	$= 0.5 \mu m$
	20 μm 70 μm	$\begin{array}{ccc} 3.40 & h_{SiO_2} \\ 20 \ \mu m & h_{Si} \\ 70 \ \mu m & \Delta x \end{array}$	$ \begin{array}{llllllllllllllllllllllllllllllllllll$	$\begin{array}{llllllllllllllllllllllllllllllllllll$

21. ディラック半金属を用いた導波路 4



- ✓ The real part of the effective index of the PWG for a Fermi level of 0.02 eV, as a function of h_{SiO2}
- ✓ The quasi-TE mode shows an almost constant effective index, while the quasi-TM mode yields an increase in the effective index as h_{SiO2} is reduced
- ✓ It is shown that there exists a large difference of the effective index of the quasi-TE and quasi-TM mode
- ✓ Application to polarization splitter

21. ディラック半金属を用いた導波路5







✓ The field is localized in the SiO2 butter layer

22. 計算行う際の注意点

- 先行事例の追試 解こうとする類似問題を追試して同じデータが得られるか?<
 信頼できる論文の計算結果・所属先の先行事例
- 空間刻み幅△に対する数値結果の収束 刻みを小さくしても結果が大きく変わらないか? 変わる場合は空間刻みが大きい
- パルス波解析での波長(周波数)応答の計算
 モデルによっては中心波長から離れた波長で誤差大
 連続波(CW)励振(波長固定)で精度を確認

● 必ず界分布を確認
 波長・周波数応答などのデータの源

10. 文献および著者紹介

[1] J. Shibayama et al., "Efficient implicit FDTD algorithm based on locally one-dimensional scheme," Electron. Lett., vol.41, no. 19, pp. 1046-1047, 2005.

[2] (Invited) J. Shibayama, "Introduction to the FDTD method and its application to implicit locally one-dimensional calculations," IEICE NOLTA, vol. 15, no. 1, pp. 2-16, 2024.

[3] J. Shibayama et al., "Simple trapezoidal recursive convolution technique for the frequency-dependent FDTD analysis of a Drude-Lorentz model," IEEE Photon. Technol. Lett., vol. 21, no. 2, pp. 100-102, 2009.

[4] J. Shibayama et al., "A frequency-dependent LOD-FDTD method and its application to the analyses of plasmonic waveguide devices," IEEE J. Quantum Electron., vol. 46, no. 1, pp. 40-49, 2010.

[5] J. Shibayama et al., "Analysis of a 3D MIM waveguide-based plasmonic demultiplexer using the TRC-FDTD method," Opt. Comm., vol. 452, pp. 360-365, 2019.

[6] (招待論文)中坂他, "長方形または台形誘電体を装荷したプラズモニックグレーティングカプラのFDTD解析," 信学論(採録決定).

[7] K. Takeya et al., "Extension of the CP-EP FDTD method to three-dimensional problems for the analysis of arbitrarily-shaped dielectric media," Microw. Opt. Tech. Lett., vol. 65, no.12, pp.3113-3119, 2023

[8] 竹谷他, "任意形状分散性媒質解析のためのDCP-FDTD法の3次元問題への拡張," 信学技報, EST2022-86, pp.64-69, 2023.

[9] J. Shibayama et al., "Surface plasmon resonance waveguide sensor in the terahertz regime," IEEE/OSA J. Lightw. Technol., vol. 34, no. 10, pp. 2518-2525, 2016.

[10] J. Shibayama et al, "Kretschmann- and Otto-type surface plasmon resonance waveguide sensors in the terahertz regime," Microw. Opt. Tech. Lett., vol. 63, no.1, pp. 103-106, 2021.

[11] 宮尾他, "3次元半陰的FDTD法によるTM透過型THz導波路偏光子の解析," 信学論C, vol. J107-C, no. 5, pp.200-208, 2024.

[12] 小林他, "Subgrid法を用いた光伝導アンテナの連成解析," 査読中.

[13] J. Shibayama et al., "Metal disc-type splitter with radially placed gratings for terahertz surface waves," Electron. Lett., vol. 51, no. 4, pp. 352-353, 2015.

[14] J. Shibayama et al., "Improved cylindrical HIE-FDTD method and its application to a metal disc-type surface wave splitter," IEEE Microw. Wireless Compon. Lett., vol. 29, no. 3, pp. 177-179, 2019.

• 柴山純 法政大学理工学部教授, shiba@hosei.ac.jp