

光学設計のための電磁場解析の基礎検討*

目黒 和幸**

光波長と同程度の微細構造を有する LED の素子構造や反射防止構造の形成などの照明設計では、幾何光学だけでなく波動光学領域の計算が欠かせない。有限差分時間領域(FDTD)法を用いることによって波動光学解析環境を簡単・安価に構築できるが、複雑な解析には多くのメモリが要求される。本研究では、波動方程式から出発した WE (wave equation) -FDTD 法による波動光学解析ソフトウェアを開発した。その結果、WE-FDTD 法の計算速度は従来と比較して 1.1~1.25 倍に高速化され、メモリ使用量は 3/4 に低減された。

キーワード：電磁場解析、FDTD 法、波動光学、幾何光学

Fundamental Electromagnetic Field Analysis for Optical Devices

Kazuyuki Meguro

Designing optical elements with submicron structures (e.g., light emitting diodes, antireflection structures, etc.) requires an analysis based on wave optics. Although such an analysis can be built easily and cheaply by using the finite-difference time domain (FDTD) method, applying it to systems with complicated shapes requires considerable computer memory. In this study, we developed wave-optics analysis software using the wave-equation FDTD method. The calculation speed of the WE-FDTD method is 1.1%–1.25% faster than the conventional FDTD method and requires 75% less computer memory.

key words : electromagnetic field analysis, finite-difference time domain method, wave optics, geometric optics

1 緒 言

従来の白熱電球や蛍光灯に替わる白色発光ダイオード(LED)を用いた照明器具の開発が盛んに行われている。集光レンズや反射鏡の設計には幾何光学が用いられ、白色LEDの外部量子効率を向上させる素子構造や反射防止構造の設計ではそのサイズが光の波長程度にまで微細になることから物理光学・波動光学が必須となる。さらに、光導波路や表面プラズモン、屈折率の周期構造体であるフォトニック結晶などではスカラー回折近似が成り立たない領域に入ることや時間領域の解析が必要になることからより高度な光学設計が欠かせない。また、光学領域以外でも高周波領域における不要輻射対策やモータの磁気回路設計では電磁場解析技術が求められている。

光学領域でも電波領域でもその根幹となる基本法則はMaxwell方程式であり、違いは周波数と物質定数だけである。Maxwell方程式を解くことであらゆる電磁現象を理解することができるが、解析的に解くことができるのは極僅かの理想的な形状・状況のみである。そのため、現実の系での振る舞いをシミュレーションするにはコンピュータでの数値計算に頼らざるを得ない。電磁場解析シミュレータは数多く市販されているが、ユーザーが求めたい答えを得るためには電磁気学の知識と経験が必要な場合が多い。本研究は、電気電子分野におけるコンピュータ設計支援(CAE)の技術強化を図るため、波動方程式から出発したwave equation - FDTD法による低メモリ使用量の波動光学解析ソフトウェアの開発と波動光学-幾何光学の連携解析について実施した。

ユレーションするにはコンピュータでの数値計算に頼らざるを得ない。電磁場解析シミュレータは数多く市販されているが、ユーザーが求めたい答えを得るためには電磁気学の知識と経験が必要な場合が多い。本研究は、電気電子分野におけるコンピュータ設計支援(CAE)の技術強化を図るため、波動方程式から出発したwave equation - FDTD法による低メモリ使用量の波動光学解析ソフトウェアの開発と波動光学-幾何光学の連携解析について実施した。

2 方 法

2-1 FDTD 法

Maxwell方程式を数値計算的に解く方法として有限差分時間領域 (FDTD : Finite Difference Time Domain)法がある。この手法は、図1のように解析空間を各方向にメッシュ状に分割し、それぞれの単位セルに物質定数(誘電率 ϵ 、透磁率 μ 、導電率 σ)を設定することで複雑な形状を表現することができる。電場 E は辺に、磁場 H は面の中心に配置され、互いを結びつける空間微分を差分で表現す

* 平成 22 年度 基盤的・先導的技術研究開発事業

** 電子情報技術部 (現 機能表面技術部)

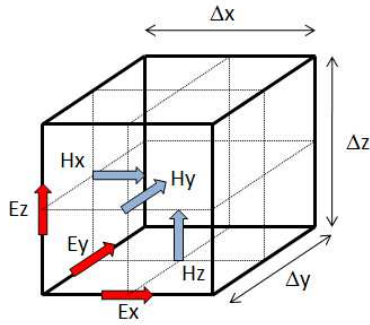


図1 単位セルと電磁場の配置

るのに適した構造となっているのが特徴である。式(1)に示す Maxwell 方程式を数値計算するために、時間および空間について 1 次の中心差分によって差分化する。一例として式(2)に 3 次元における電場の z 成分の差分式を示す。E 右肩の n は n ステップ目の時間であることを示しており、 E^{n-1} と $H^{n-1/2}$ が既知であれば E^n を計算することができる。このように FDTD 法では電場と磁場を交互に計算していくことで電磁場の時間発展を求めることができ、過渡現象も視覚的に解析することができる手法である。

FDTD 法では、計算誤差を低減させるためにメッシュの一边のサイズ(Δx)を電磁波の波長(光であれば 500 nm 程度)の 1/10 以下に設定することと、解が発散しないように時間ステップ(Δt)を $\Delta t \leq \Delta x / c$ (c : 光速)が満たされるようにしなければならない。一方で、遠方電磁界を評価するには波源や散乱体から十分に離れた位置に吸収境界を設置しなければならないため、必然的に巨大なセル数の解析空間を準備しなければならない。このように、各セルの電磁場の値を保持するためにはセルの一边の数の 3 乗に比例する膨大なメモリが必要となることと、計算時間も総セル数の 3~4 乗に比例することが知られていることから、現実的にはかなり強力な計算資源が要求される。通常の FDTD 法では $t = n$ (現在の時刻)と $t = n-1$ (過去の時刻)の電場 3 成分

$$\begin{aligned} \nabla \times \vec{E} &= -\mu \frac{\partial \vec{H}}{\partial t} && \text{(Faraday's laws)} \\ \nabla \times \vec{H} &= \epsilon \frac{\partial \vec{E}}{\partial t} + \sigma \vec{E} && \text{(Ampere's law)} \end{aligned}$$

式(1) Maxwell 方程式

$$E_z^n = \left(\frac{1 - \frac{\sigma \Delta t}{2\epsilon}}{1 + \frac{\sigma \Delta t}{2\epsilon}} \right) E_z^{n-1} + \frac{\Delta t}{1 + \frac{\sigma \Delta t}{2\epsilon}} \left(\frac{\partial H_y^{n-1/2}}{\partial x} - \frac{\partial H_x^{n-1/2}}{\partial y} \right)$$

式(2) 3次元における電場の z 成分の差分式

$$\nabla^2 \vec{E} - \epsilon \mu \frac{\partial^2 \vec{E}}{\partial t^2} = \mu \sigma \frac{\partial \vec{E}}{\partial t}$$

式(3) 電場に対する波動方程式

分(E_x, E_y, E_z)と、 $t = n-1/2$ と $t = n-3/2$ の磁場 3 成分(H_x, H_y, H_z)の計 12 成分を保持しなければならない。

光学領域では磁化が周波数に追従できないためほとんどの物質では透磁率 $\mu = 1$ となるので、通常は電場の振る舞いだけを議論すれば十分である。そこで、Maxwell 方程式から磁場に関する項を消して式(3)の電場に対する波動方程式のみを考えても結果に変わりはない。波動方程式は 2 階の偏微分方程式であるため、 $t = n, t = n-1, t = n-2$ の電場 3 成分(E_x, E_y, E_z)の計 9 成分を保持しておく必要がある。単純に比較するだけでもメモリの量が 3/4 に低減できる上、計算時間の短縮が期待できる。

2-2 幾何光学解析

光学シミュレータソフト ZEMAX™ は、レンズや照明の設計を行うことができるソフトウェアである。光線が入射する順番が決まっている結像系などの設計にはシーケンシャル光線追跡が、光線が光学素子に当たる場合と当たらない場合や多重反射を伴うような系の設計、また照明設計にはノンシーケンシャル光線追跡を行うことができる。さらにレーザなどのコヒーレントビームや光ファイバのモード設計には物理光学伝搬をシミュレーションすることも可能である。しかし、波動光学で議論しなければならない領域の光学素子を扱うことはできない。ZEMAX には任意の光源データを入力することができる機能を有しており、例えば外部の FDTD プログラムで仰角・方位角に対する光放出強度のデータを準備することができればそれを ZEMAX で読み込んで光源として扱うことができる。

3 結果と考察

FDTD 法のプログラムを開発するに当たり、以下の性能を有するパソコンを開発環境として使用した。CPU: Core2Quad 2.4GHz、メモリ: DDR2 8GB、OS: WindowsXP 64bit 版、Compiler: Intel Visual Fortran 10.0。3次元空間の FDTD シミュレータを開発し、動作確認のために微小ダイポールのシミュレーションを行った。解析空間の中心に $d = 30$ mm、振幅 1.0 V/m、周波数 1 GHz の正弦波を入力した結果を図 2 に示す。計算は時間ステップ $\Delta t = 2.0$ ns、Courant 数 0.200、解析領域の一边が 283 セルの立方体、16 層の PML (perfectly matched layer) 吸収境界条件で行った。画像表示は赤が正の位相、青が負の位相を表している。ダイ

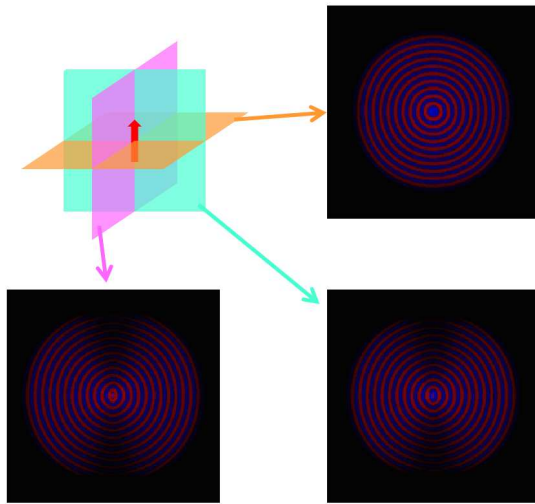


図2 微小ダイポールからの近傍放射パターン

ポールの輪切りにした面(図2のオレンジ)での放射パターンは同心円状に、ダイポールを含む面(図2のピンクおよび黄緑)では8の字パターンが明瞭に現れており定性的にはうまくシミュレーション出来ていると言える。

上記の放射パターンは波源に近い近傍電磁界を図示したものになっている。そこで、準静電界や誘導界を取り除いた遠方界のみを評価するため、界等価原理による近傍界-遠方界変換を試みた。界等価原理とは、波源を含む任意の閉曲面上に電流および磁流を配置することで閉曲面内部の電磁界を表現することができるもので、等価電磁流を積分することで遠方界の放射パターンに変換することが可能である。FDTD法では電磁場の時間発展データを取得できるが、通常は定常状態の放射パターンを知りたいのであるから周波数領域で計算を行うために高速フーリエ変換(FFT)を用いて評価した。解析空間

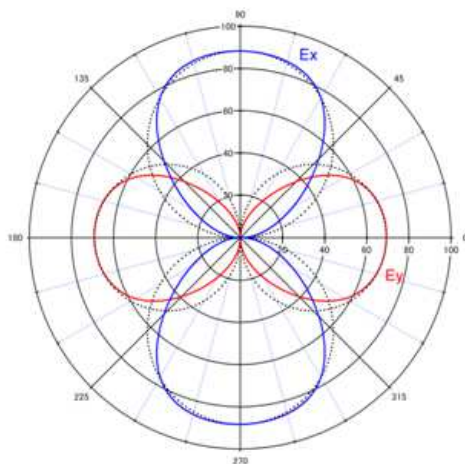


図3 微小ダイポールの遠方放射パターン

の中心に E_x あるいは E_y の微小ダイポールを置いて遠方放射パターンを計算した結果を図3に示す。この結果を見て、まず E_x と E_y に同じ量を置いたにも関わらず放射強度が異なっていることが分かる。また、放射パターンも \cos 分布からずれが生じていることが見て取れる。この原因を追及するために、波源近傍の位置での電場強度の時間発展をプロットしたものが図4である。上のグラフは波源のある位置、下のグラフは解析空間の端の位置での電場強度である。これを見ると波源直上では理想的に電場が振動しているが、端まで伝播すると右に進む波と左に進む波で電場強度にずれが生じていることが判明した。このプログラムのバグの影響と考えられるが、研究実施期間中には改善することができなかった。以下で行う計算資源の評価では、このプログラムのままの結果を用いて議論を行う。

FDTD法においては現在と過去合わせて合計12成分の電磁場のデータを保持しなければならないのに対して、波動方程式から出発した wave equation (WE) - FDTD法は合計9成分と保持するデータ量を減少させることができる。この検証を行うために2次元 Transverse Magnetic (TM)モードの FDTD および WE-FDTD プログラムを構築し、解析空間の一辺の長さ n に対する CPU 計算時間をプロットしたものを図5に示す。

$n = 500$ 程度までは FDTD の方が高速であるが、 $n = 1,000$ 以上では1~2割程度 WE-FDTD の方が高速であることが分かる。この理由として、データ

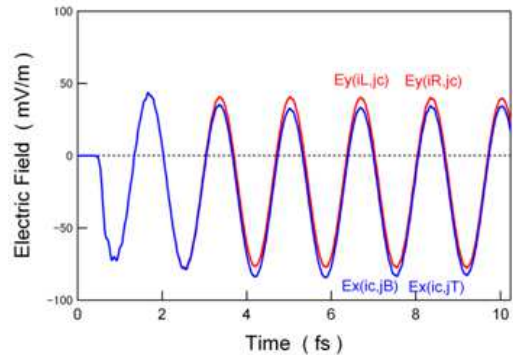
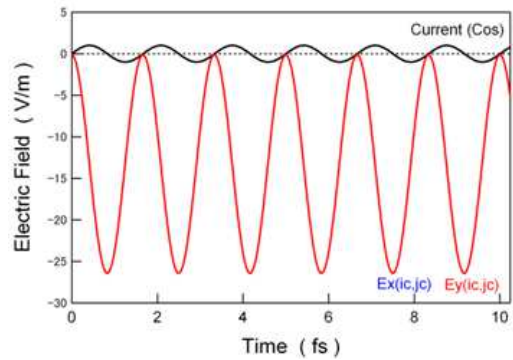


図4 微小ダイポールの電場伝播の様子

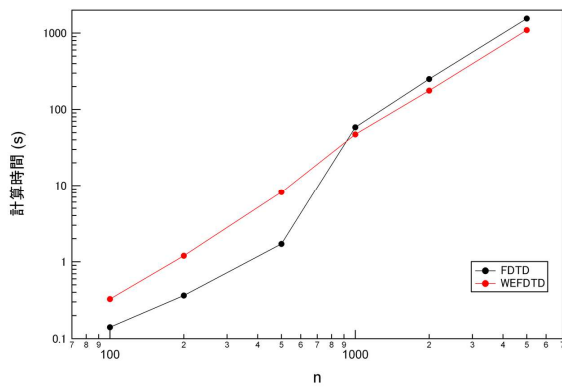


図5 FDTD法とWE-FDTD法の計算時間の比較

量が少ないために全体的に WE-FDTD の方が高速であるが、WE-FDTD は初期条件の設定項目が多いため n が小さい場合には計算時間にロスが出る原因であると考えられる。セル数が多い状況下での計算時間が短縮できることは大きなメリットであり、さらにメモリも少なく済むため限られた計算資源の下では有効な手段であることが証明された。

次に、ZEMAXによる光源シミュレーションの結果について述べる。現状の FDTD プログラムからは定量性の面で満足できる放射パターンデータを得ることができなかつたため、市販の砲弾型 LED 素子の配光パターンデータを取り込んで照度分布のシミュレーションを行った。LED のデータは、Ledman Optoelectronic Co., Ltd.の InGaN 白色 LED (LL1516HCWW1-151)を用いた。LED の前面に $100,000 \times 100,000$ の検出面を設定し、1,000,000 本の光線を射出してモンテカルロシミュレーションすることで、検出面のどの点に何本の光線が横切るかを見て照度分布を計算するものである。シミュレーションの結果を図 6 に示す。用いた LED は 50% power angle(最大強度の半分の強度になる放角)が 15° であるため非常に指向性が高いが、シミュレーションでも良く再現できている。放射パターンを設定した LED チップの他に電極やレンズを配置することで現実の LED 素子をシミュレーションすることも可能である。将来的には波動光学部分を WE-FDTD で、マクロな幾何光学部分を ZEMAX で連携解析することで照明設計の支援ができるものと考えられる。

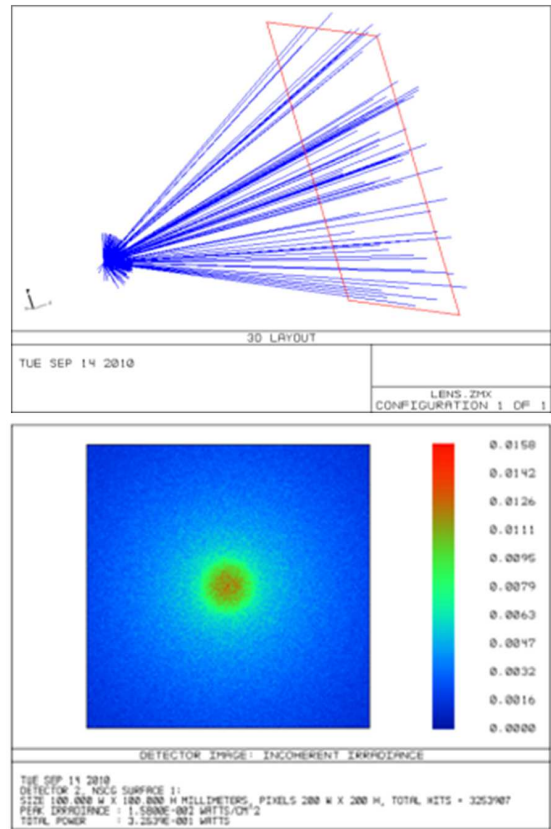


図6 LEDの照度分布シミュレーション

4 結 言

FDTD法および波動方程式から出発した WE-FDTD法を用いて微小な構造を有する光学素子の設計支援シミュレーションを開発した。FDTDからWE-FDTDにすることでメモリ量を3/4程度、CPU計算時間を1~2割低減することができた。これによりパソコンでも計算資源を有効に利用して電磁場解析を行うことができる。しかしながら、近傍界-遠方界変換の際にプログラムにバグがあることが判明したものの、研究実施期間中には改善することができなかった。

また、ZEMAXに外部からLEDなどの発光放出パターンデータを入力することによる照度分布シミュレーションの方法を身に付けた。波動光学シミュレーションの結果を読み込むことには障害はなく、FDTDプログラムの改善によりZEMAXにおける幾何光学シミュレーションとの連携が可能な状況となった。