

(19) 日本国特許庁(JP)

(12) 特 許 公 報(B2)

(11) 特許番号

特許第4984586号  
(P4984586)

(45) 発行日 平成24年7月25日(2012.7.25)

(24) 登録日 平成24年5月11日(2012.5.11)

(51) Int.Cl.		F I			
GO 1 R	29/08	(2006.01)	GO 1 R	29/08	Z
GO 6 F	17/50	(2006.01)	GO 6 F	17/50	6 1 2 H
GO 6 F	19/00	(2011.01)	GO 6 F	19/00	1 1 0
			GO 6 F	17/50	6 6 6 V

請求項の数 6 (全 24 頁)

(21) 出願番号	特願2006-75291 (P2006-75291)	(73) 特許権者	000005223
(22) 出願日	平成18年3月17日(2006.3.17)		富士通株式会社
(65) 公開番号	特開2007-248391 (P2007-248391A)		神奈川県川崎市中原区上小田中4丁目1番1号
(43) 公開日	平成19年9月27日(2007.9.27)	(74) 代理人	100094514
審査請求日	平成20年6月5日(2008.6.5)		弁理士 林 恒徳
(出願人による申告)平成17年度、独立行政法人 新エネルギー・産業技術総合開発機構、「大容量光ストレージ技術の開発」委託研究、産業再生法第30条の適用を受ける特許出願		(74) 代理人	100094525
			弁理士 土井 健二
		(72) 発明者	小田島 渉
			神奈川県川崎市中原区上小田中4丁目1番1号 富士通株式会社内
		審査官	吉田 久

最終頁に続く

(54) 【発明の名称】 電磁界シミュレータ、及び電磁界シミュレートプログラム

(57) 【特許請求の範囲】

【請求項1】

時刻  $(n)$  における電界と時刻  $(n + 1 / 2)$  における磁界の空間分布を用いて、時刻  $(n + 1)$  の電界の空間分布を算出し、時刻  $(n + 1 / 2)$  における磁界と時刻  $(n + 1)$  の電界の空間分布を用いて時刻  $(n + 3 / 2)$  の磁界の空間分布を算出することを繰り返す電磁界シミュレータにおいて、

電磁界のシミュレーションにおける時間上及び空間上の粗さを設定する計算条件設定部と、

シミュレート空間上の各位置における電磁界の物理係数を設定する係数設定部と、

前記時刻  $(n)$  における電界の空間分布と、時刻  $(n - 1 / 2)$  における物質内部の分極電流の空間分布、及び前記係数設定部で設定された前記物理係数とを用いて、時刻  $(n + 1 / 2)$  における物質内部の分極電流の空間分布とを算出する分極算出部と、を備え、

前記係数設定部は、前記計算条件設定部にて設定された前記空間上の粗さに基づいて、分極算出部において前記分極電流の空間分布を算出するために使用する第1の計算式を第2の計算式に切り替えるようにし、

前記分極算出部は、前記第2の計算式を用いて、前記時刻  $(n + 1 / 2)$  における前記分極電流の空間分布を算出することを特徴とする電磁界シミュレータ。

【請求項2】

更に、前記電磁界の空間分布を算出するために電磁波の発生源を設定する波源設定部を備え、

前記分極算出部は、前記係数設定部で設定された前記物理係数と前記波源設定部で設定された前記波源の波長とに基づいて、前記第 1 の計算式から前記第 2 の計算式に切り替える、ことを特徴とする請求項 1 記載の電磁界シミュレータ。

【請求項 3】

前記係数設定部で設定した前記物理係数から導出される複素誘電率を  $\epsilon^*$  とし、前記波源設定部で夫々設定した前記波長を  $\lambda$ 、前記空間上の粗さを  $\Delta x$  とし、更に真空の誘電率を  $\epsilon_0$  とすると、前記係数設定部は、

【数 1】

$$\frac{1}{\Delta x} \frac{\lambda}{\sqrt{\epsilon^*/\epsilon_0}} = a \quad \dots (1)$$

10

から得られる変数  $a$  の大きさに基づいて、前記第 1 の計算式から前記第 2 の計算式に切り替えることを特徴とする請求項 2 記載の電磁界シミュレータ。

【請求項 4】

前記第 2 の計算式は前記時刻  $(n - 1 / 2)$  と前記時刻  $(n + 1 / 2)$  における分極電流の値から、時刻  $(n)$  における分極電流の値を求める算出方法を変更した式であることを特徴する請求項 1 乃至 3 記載の電磁界シミュレータ。

【請求項 5】

前記第 2 の計算式は時刻  $(n)$  における分極電流の値として前記時刻  $(n + 1 / 2)$  における分極電流の値を用いた計算式であることを特徴とする請求項 4 記載の電磁界シミュレータ。

20

【請求項 6】

時刻  $(n)$  における電界と時刻  $(n + 1 / 2)$  における磁界の空間分布を用いて、時刻  $(n + 1)$  の電界の空間分布を算出し、時刻  $(n + 1 / 2)$  における磁界と時刻  $(n + 1)$  の電界の空間分布を用いて時刻  $(n + 3 / 2)$  の磁界の空間分布を算出することを繰り返す電磁界シミュレートプログラムにおいて、

電磁界のシミュレーションにおける時間上及び空間上の粗さを設定する計算条件設定処理と、

シミュレート空間上の各位置における電磁界の物理係数を設定する係数設定処理と、

30

前記時刻  $(n)$  における電界の空間分布と、時刻  $(n - 1 / 2)$  における物質内部の分極電流の空間分布、及び前記係数設定部で設定された前記物理係数とを用いて、時刻  $(n + 1 / 2)$  における物質内部の分極電流の空間分布とを算出する分極算出処理と、をコンピュータに実行させ、

前記係数設定処理では、前記計算条件設定処理にて設定された前記空間上の粗さに基づいて、前記分極算出処理にて前記分極電流の空間分布を算出するために使用する第 1 の計算式を第 2 の計算式に切り替えるようにし、

前記分極算出処理では、前記第 2 の計算式を用いて、前記時刻  $(n + 1 / 2)$  における前記分極電流の空間分布を算出することをコンピュータに実行させることを特徴とする電磁界シミュレートプログラム。

40

【発明の詳細な説明】

【技術分野】

【0001】

本発明は、電磁界のシミュレートを行う電磁界シミュレータ、及び電磁界シミュレートプログラムに関する。詳しくは、FDTD法を用いてシミュレートを行う場合に、少ない計算コストで計算誤差も小さくするようにした電磁界シミュレータ等に関する。

【背景技術】

【0002】

従来から、電磁界をシミュレートする手法として、有限差分時間領域法（FDTD法：Finite Difference Time Domain）が知られている（例えば、以下の非特許文献 1 及び 2

50

)。

【0003】

FDTD法は、電磁界の時間変化を記述する基本方程式であるマクスウェルの方程式を、空間的および時間的に差分化し、電磁界の時間変化を追跡するものである。この場合に、空間および時間の離散化に用いるグリッド間隔(ステップ)を十分小さく設定することで、電磁界の時間変化を詳細にシミュレートすることができる。

【0004】

FDTD法によれば、マクスウェル方程式を直接計算するため3次元計算が容易であること、各グリッドの電磁界は空間的に隣接するグリッドの電磁界のみを参照して演算が行われるため計算原理も単純で演算の高速化も可能であること、従って、解析モデルを分割して夫々異なるコンピュータで一斉に計算する並列化も容易であること、更に原理的に時間波形を計算できること、等の利点がある。

10

【0005】

一方で、近年、光で情報記録媒体にアクセスする技術が発達し、光の波長より小さい構造の光学素子を用いる近接場光学が注目され、光の波長の数倍程度というマイクロな領域における光の振る舞いを解析することが増えてきた。

【0006】

このような近接場光学では、光を光線として扱うことができないため、FDTD法を用いた電磁界シミュレータにより、光を電磁波として解析することが有効である。昨今、このようなFDTD法を光学モデルに適用した近接場光学の研究等が盛んに行われている。

20

【0007】

しかし、FDTD法を、物質に光を照射してその振る舞いを解析するような光学解析に適用すると、マイクロ波などを対象とした一般の電波解析等とは異なり、物質の材料定数(誘電率や導電率)が原因となる問題が発生する。

【0008】

即ち、金属の誘電率は負の値を有することが多く、そのままFDTD法を適用すると、その演算式において時間ステップが進むにつれて指数関数的に値が発散するという問題があった。

【0009】

この問題を解決するために、例えば、電磁波を吸収することにより発生する物質内部の電流を、物質内部に誘起する分極電流として取り扱い、演算を行うようにしたものがある(例えば、以下の非特許文献3)。

30

【非特許文献1】Yee, K.S., "Numerical solution of initial boundary value problems involving Maxwell's equations in isotropic media", IEEE Trans. Antennas Propagat., Vol. Ap-14, p.302-307, 1966

【非特許文献2】宇野亨、「FDTD法による電磁界およびアンテナ解析」、1998、コロナ社

【非特許文献3】Justin B. Judkins and Richard W. Ziolkowski, "Finite-difference time-domain modeling of nonperfectly conducting metallic thin-film gratings", J. Opt. Soc. Am. A Vol. 12, No. 9, p1974-1983, 1995

40

【発明の開示】

【発明が解決しようとする課題】

【0010】

しかしながら、非特許文献3に開示された分極電流によるFDTD法での演算と、厳密な演算による場合とで計算誤差が生じる場合があった。

【0011】

例えば、金属薄膜に光を照射させるモデルをシミュレートする場合に、分極電流を用いたFDTD法により透過率を演算した場合と、厳密な演算による場合とでは、グリッド間隔を大きくすると計算誤差が増大するという問題があった。

【0012】

50

誤差を抑えるためには、グリッド間隔を十分に小さくすればよいが、それだけ計算速度が遅くなり、計算するためのメモリ容量も必要で、計算コストの増大という問題が発生する。一方で、グリッド間隔を大きくすると、誤差が大きくなり計算結果の信頼性も落ちるため、その結果を概算とみなすことが困難となる。

【0013】

FDTD法を用いたシミュレータを設計に効率的に活用するためには、グリッド間隔が十分大きい粗い計算でも概算値とみなせる計算結果を得る必要があり、そのような計算手法が強く望まれていた。概算を得る過程で解析モデルのグリッド間隔を大きくして計算時間を短縮することは設計工数の大幅な短縮に繋がるからである。

【0014】

そこで、本発明は、上記問題点に鑑みてなされたもので、その目的は、少ない計算コストで誤差の小さい解析を行い得る電磁界シミュレータ、及び電磁界シミュレートプログラムを提供することにある。

【課題を解決するための手段】

【0015】

上記目的を達成するために、本発明は、ある時刻（ $n - 1$ ）における電磁界の空間分布を用いて、次の時刻（ $n$ ）の電磁界の空間分布を算出することを繰り返す電磁界シミュレータにおいて、電磁界のシミュレーションにおける時間上及び空間上の粗さを設定する計算条件設定部と、シミュレート空間上の各位置における電磁界の物理係数を設定する係数設定部と、前記時刻（ $n - 1$ ）における電磁界の空間分布と物質内部の分極電流の空間分布、及び前記係数設定部で設定された前記物理係数とを用いて、前記時刻（ $n$ ）における電磁界の空間分布と物質内部の分極電流の空間分布とを算出する分極算出部と、を備え、前記係数設定部は、前記計算条件設定部にて設定された前記空間上の粗さに基づいて、分極算出部において前記分極電流の空間分布を算出するために使用する第1の計算式を第2の計算式に切り替えるようにし、前記分極算出部は、前記第2の計算式を用いて、前記時刻（ $n$ ）における前記分極電流の空間分布を算出することを特徴とする。

【0016】

また、本発明は、前記電磁界シミュレータにおいて、前記電磁界の空間分布を計算するために電磁波の発生源を設定する波源設定部を更に備え、前記分極算出部は、前記係数設定部で設定された前記物理係数と前記波源設定部で設定された前記波長の波長とに基づいて、前記第1の計算式から前記第2の計算式に切り替えることを特徴とする。

【0017】

更に、本発明は、前記電磁界シミュレータにおいて、前記係数設定部で設定した前記物理係数から導出される複素誘電率を  $\epsilon^*$  とし、前記波源設定部で夫々設定した前記波長を  $\lambda$ 、前記空間上の粗さを  $\Delta x$  とし、更に真空の誘電率を  $\epsilon_0$  とすると、前記係数設定部は、

【0018】

【数1】

$$\frac{1}{\Delta x} \frac{\lambda}{\sqrt{\epsilon^*/\epsilon_0}} = a \quad \dots (1)$$

【0019】

から得られる変数  $a$  の大きさに基づいて、前記第1の計算式から前記第2の計算式に切り替えることを特徴とする。

【0020】

更に、本発明は、前記電磁界シミュレータにおいて、前記第2の計算式は前後する2つの時間ステップの中間の値の算出方法を変更した式であることを特徴する。

【0021】

更に、本発明は、前記電磁界シミュレータにおいて、前記第2の計算式は前後する前記

10

20

30

40

50

時間ステップの中間の値を半整数ステップ進んだ時間ステップの値を用いた計算式であることを特徴とする。

【0022】

更に、本発明は、前記電磁界シミュレータにおいて、前記波源設定部で設定された前記波源に基づいて、前記電磁波が物質を透過するときの前記物質内の前記電磁波の波長を演算する波長演算部を更に備え、前記分極算出部は、前記係数設定部で設定された前記空間上の粗さを示すグリッド間隔が、前記波長演算部で演算した前記物質内の波長よりも十分大きいときは、前記第1の計算式から前記第2の計算式に切り替えることを特徴とする。

【0023】

更に、本発明は、前記電磁界シミュレータにおいて、前記分極算出部は、前記グリッド間隔が前記物質内部の波長の「1/10」以上のときに、前記第1の計算式から前記第2の計算式に切り替えることを特徴とする。

【0024】

また、上記目的を達成するために、本発明は、ある時刻(n-1)における電磁界の空間分布を用いて、次の時刻(n)の電磁界の空間分布を算出することを繰り返す電磁界シミュレートプログラムにおいて、電磁界のシミュレーションにおける時間上及び空間上の粗さを設定する計算条件設定処理と、シミュレート空間上の各位置における電磁界の物理係数を設定する係数設定処理と、前記時刻(n-1)における電磁界の空間分布と物質内部の分極電流の空間分布、及び前記係数設定部で設定された前記物理係数とを用いて、前記時刻(n)における電磁界の空間分布と物質内部の分極電流の空間分布とを算出する分極算出処理と、をコンピュータに実行させ、前記係数設定処理では、前記計算条件設定処理にて設定された前記空間上の粗さに基づいて、前記分極算出処理にて前記分極電流の空間分布を算出するために使用する第1の計算式を第2の計算式に切り替えるようにし、前記分極算出処理では、前記第2の計算式を用いて、前記時刻(n)における前記分極電流の空間分布を算出することをコンピュータに実行させることを特徴とする。

【発明の効果】

【0025】

本発明によれば、少ない計算コストで誤差の小さい解析を行い得る電磁界シミュレータ、及び電磁界シミュレートプログラムを提供することができる。

【発明を実施するための最良の形態】

【0026】

以下、図面を参照して本発明を実施するための最良の形態を説明する。

【0027】

図1は、本発明が適用されるコンピュータの概観斜視図である。コンピュータ100は、本体部101と、表示部102と、キーボード103と、マウス104とを備える。

【0028】

本体部101は、内部にCPU、RAMメモリ、ハードディスク等を内蔵する。本体部101には、フレキシブルディスク(FD)が挿入されるFD挿入口101aと、CD-ROM200が挿入されるCD-ROM挿入口101bと有する。

【0029】

表示部102は、本体部101からの指示により蛍光面(又は液晶面)102aに画面表示を行う。キーボード103は、コンピュータ100内にユーザの指示や文字情報を入力するためのものである。また、マウス104は、蛍光面102a上の任意の位置を指定することでその位置に応じた指示を入力する。

【0030】

本実施例では、CD-ROM200に電磁界シミュレートプログラムが記憶される。CD-ROM200がCD-ROM挿入口101bから挿入され、CD-ROM200に記憶された電磁界シミュレートプログラムが本体部101内のハードディスクにインストールされる。そして、電磁界シミュレートプログラムが起動されると、コンピュータ100は電磁界シミュレータとして機能する。

10

20

30

40

50

## 【 0 0 3 1 】

図2は、コンピュータ100のハードウェア構成図である。コンピュータ100は、CPU111と、RAM112と、ハードディスクコントローラ113と、FDドライブ114と、CD-ROMドライブ115と、マウスコントローラ116と、キーボードコントローラ117と、ディスプレイコントローラ118とを備え、各々バス110を介して接続される。

## 【 0 0 3 2 】

CPU111は、本実施例の電磁界シミュレートプログラムや、その他の種々のプログラムを実行する。

## 【 0 0 3 3 】

RAM112は、CPU111のワーキングメモリであり、ハードディスク220にインストールされた電磁界シミュレートプログラムが一旦ロードされる。CPU111は、RAM112から電磁界シミュレートプログラムを読み出して、当該プログラムを実行することができる。

## 【 0 0 3 4 】

ハードディスクコントローラ113は、ハードディスク220へのアクセスを制御するためのものである。FDドライブ114はFD挿入口101aから挿入されたFD210へのアクセスを、CD-ROMドライブ115はCD-ROM挿入口101bより挿入されたCD-ROM200へのアクセス制御する。

## 【 0 0 3 5 】

また、マウスコントローラ116はマウス104を制御し、キーボードコントローラ117はキーボード103を制御し、ディスプレイコントローラ118は表示部102を制御する。

## 【 0 0 3 6 】

ハードディスクコントローラ113等は、CPU111からの制御信号に基づいて、ハードディスク220等を制御することになる。

## 【 0 0 3 7 】

図3は、本実施例における電磁界シミュレートプログラムの一実施形態を示す図である。

## 【 0 0 3 8 】

電磁界シミュレートプログラム300は、コンピュータ100を、電磁界シミュレートとして動作させるものである。図3に示すように、本プログラム300は、シミュレート演算部310と、電磁界解析部320と、表示部330とを有する。この電磁界シミュレートプログラム300の各要素の詳細は後述する。

## 【 0 0 3 9 】

図4は、電磁界シミュレータの機能ブロック図の一例を示す図である。電磁界シミュレータ400は、図3に示す電磁界シミュレートプログラム300がコンピュータ100にインストールされて実行されることにより構成されるものである。

## 【 0 0 4 0 】

電磁界シミュレータ400の各ブロック部は、図3の電磁界シミュレートプログラム300の各要素に対応するが、CPU111等のハードウェアと、コンピュータ100で実行されるOSやアプリケーションプログラムとの組み合わせで構成される。図3の電磁界シミュレートプログラム300の各要素は、それらのうちアプリケーションプログラムのみにより構成される。

## 【 0 0 4 1 】

図4に示すように、電磁界シミュレータ400は、シミュレート演算部410と、電磁界解析部420と、表示部430と、記憶部440とを有する。

## 【 0 0 4 2 】

シミュレート演算部410は、更に、解析モデル設定部411と、波源設定部412と、計算条件設定部413と、波長演算部414と、係数算出部415と、FDTD演算部

10

20

30

40

50

4 1 6 とを有する。

【 0 0 4 3 】

解析モデル設定部 4 1 1、波源設定部 4 1 2、及び計算条件設定部 4 1 3 は、ユーザにより夫々入力された、解析モデル、波源、計算条件の各データから、解析モデル、波源、計算条件が各々設定される。例えば、これらのデータは記憶部 4 4 0 に記憶されることで設定される。

【 0 0 4 4 】

波長演算部 4 1 4 は、解析モデル設定部 4 1 1 により設定された解析モデルと、波源設定部 4 1 2 により設定された波源と、から物質内部（例えば、金属物質）の波長を演算する。

10

【 0 0 4 5 】

係数算出部 4 1 5 は、波長演算部 4 1 4 により演算された物質内部の波長と、計算条件設定部 4 1 3 により設定された計算条件とから種々の係数を算出する。

【 0 0 4 6 】

係数算出部 4 1 5 は、分極電流の第 1 の計算式における係数を算出する分極電流用の第 1 の係数算出部 4 1 5 1 と、分極電流の第 2 の計算式における係数を算出する分極電流用の第 2 の係数算出部 4 1 5 2 と、電界と磁界の計算式の係数を算出する電磁界係数算出部 4 1 5 3 とを有する。

【 0 0 4 7 】

分極電流用の各係数は、波長演算部 4 1 4 により演算された波長に基づいて、第 1 の係数算出部 4 1 5 1 又は第 2 の係数算出部 4 1 5 2 のいずれか一方において演算される。そして、その係数に基づいて、電磁界係数算出部 4 1 5 3 において、FDTD 法による電磁界の計算式における係数が算出される。

20

【 0 0 4 8 】

FDTD 演算部 4 1 6 は、係数算出部 4 1 5 により算出された各係数から、実際に FDTD 法における各種演算式を演算する。

【 0 0 4 9 】

電磁界解析部 4 2 0 は、FDTD 演算部 4 1 6 で演算された値を記憶部 4 4 0 に記憶する。例えば、FDTD 演算部 4 1 6 で時間ステップ毎に電界が演算され、電磁界解析部 4 2 0 においてその値を 2 乗し、各々記憶部 4 4 0 に積算した値を記憶することで、電界の平均強度を得ることができる。

30

【 0 0 5 0 】

表示部 4 3 0（図 1 の表示部 1 0 2 に対応）は、電磁界解析部 4 2 0 からの解析結果を表示する。例えば、表示部 4 3 0 は、光の強度分布が視覚的にわかるように表示する。

【 0 0 5 1 】

次に FDTD 法について説明する。電磁界におけるマクスウェル方程式は、以下の 2 式で示される。

【 0 0 5 2 】

【数 2】

$$\nabla \times \mathbf{H} - \varepsilon \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} = \sigma \mathbf{E} \quad \cdots (2)$$

40

【 0 0 5 3 】

【数 3】

$$\nabla \times \mathbf{E} + \mu \frac{\partial \mathbf{H}}{\partial t} = 0 \quad \cdots (3)$$

【 0 0 5 4 】

50

ここで、 $E$ は電界ベクトル、 $H$ は磁界ベクトル、 $\epsilon$ は誘電率、 $\sigma$ は導電率、 $\mu$ は透磁率を夫々示す。式(2)及び式(3)より得られる電磁界成分の時間変化をFDTD法で算出する式を以下に示す。(Allen Taflove, Susan C. Hagness : "Computational Electrodynamics" (ARTECH HOUSE, INC.)より)

【0055】

【数4】

$$E_x|_{i+1/2,j,k}^n = \left( \frac{1 - \frac{\sigma_{i+1/2,j,k} \Delta t}{2\epsilon_{i+1/2,j,k}}}{1 + \frac{\sigma_{i+1/2,j,k} \Delta t}{2\epsilon_{i+1/2,j,k}}} \right) E_x|_{i+1/2,j,k}^{n-1} + \left( \frac{\Delta t}{\epsilon_{i+1/2,j,k} + \frac{\sigma_{i+1/2,j,k} \Delta t}{2}} \right) \cdot \left( \frac{H_z|_{i+1/2,j+1/2,k}^{n-1/2} - H_z|_{i+1/2,j-1/2,k}^{n-1/2}}{\Delta y} - \frac{H_y|_{i+1/2,j,k+1/2}^{n-1/2} - H_y|_{i+1/2,j,k-1/2}^{n-1/2}}{\Delta z} \right) \dots (4)$$

【0056】

【数5】

$$H_x|_{i,j+1/2,k+1/2}^{n+1/2} = \left( \frac{1 - \frac{\sigma_{i,j+1/2,k+1/2}^* \Delta t}{2\mu_{i,j+1/2,k+1/2}}}{1 + \frac{\sigma_{i,j+1/2,k+1/2}^* \Delta t}{2\mu_{i,j+1/2,k+1/2}}} \right) H_x|_{i,j+1/2,k+1/2}^{n-1/2} + \left( \frac{\Delta t}{\mu_{i,j+1/2,k+1/2} + \frac{\sigma_{i,j+1/2,k+1/2}^* \Delta t}{2}} \right) \cdot \left( \frac{E_y|_{i,j+1/2,k+1}^n - E_y|_{i,j+1/2,k}^n}{\Delta z} - \frac{E_z|_{i,j+1,k+1/2}^n - E_z|_{i,j,k+1/2}^n}{\Delta y} \right) \dots (5)$$

【0057】

ここで、 $E_x$ 、 $E_y$ 、 $E_z$ は電界の各成分、 $H_x$ 、 $H_y$ 、 $H_z$ は磁界の各成分、 $\mu^*$ は磁気伝導率、 $\Delta x$ 、 $\Delta y$ 、 $\Delta z$ は空間グリッド幅、 $\Delta t$ は時間分割幅を夫々示す。電磁界成分の右下に付された添字 $i$ 、 $j$ 、 $k$ は空間グリッドの番号であり、シミュレート空間上の座標を示す。また、電磁界成分に付された添字 $n$ 、 $n+1$ は時間ステップを示す番号である。時間ステップが一つ進むと、時間が $\Delta t$ だけ進むことになる。

【0058】

図5は、FDTD法が適用される解析モデルを分割した一つのセル500を示す。そして、セル500における電界、磁界の各成分の空間配置を示している。シミュレート空間には、このようなセル500が複数存在する。

【0059】

FDTD法では、各セル500の辺の midpoint 520に、辺に平行な電界成分が配置され、セル500の各面の midpoint 530に、面に垂直な磁界成分が配置される。

【0060】

図5に示す例では、頂点510の位置座標を $(i, j, k)$ とすると、辺の midpoint 520である、 $(i+1/2, j, k)$ 、 $(i, j+1/2, k)$ 、 $(i, j, k+1/2)$ に電界の各成分 $E_x$ 、 $E_y$ 、 $E_z$ が夫々配置される。

【0061】

また、磁界の各成分 $H_x$ 、 $H_y$ 、 $H_z$ は、夫々面の midpoint 530である、 $(i, j+1/2, k+1/2)$ 、 $(i+1/2, j, k+1/2)$ 、 $(i+1/2, j+1/2, k)$ に配置される。「1/2」のグリッド上に電界、磁界の各成分が配置されることがFDTD法の特徴でもある。

## 【 0 0 6 2 】

本電磁界シミュレータ400は、ある時刻（ $n - 1$ ）における電磁界の空間分布を用いて、次の時刻（ $n$ ）における電磁界の空間分布を算出することを繰り返すことで対象モデルの解析を行うようにしている。

## 【 0 0 6 3 】

尚、前述の式（4）と式（5）は、電界、磁界のX成分のみの計算式を示しているが、電界、磁界のY成分、Z成分の計算式もこれらの式に対応するように示すことができる。

## 【 0 0 6 4 】

FDTD法は、一般に電波解析に用いられるものの、上述したように、金属を含んだ光学解析に適用することも可能である。しかし、この場合、金属物質の材料定数が原因で、式（4）と式（5）から算出される電界磁界の各成分値が発散する問題が生ずる。

10

## 【 0 0 6 5 】

誘電率や導電率などの材料定数は、電磁波の周波数によって変化するが、金属の誘電率は光の周波数において負の値を有する場合が多い。真空の誘電率を $\epsilon_0$ とすると、波長400nmの光に対して、金、銀、アルミニウムの誘電率は、夫々「 $-1.08\epsilon_0$ 」、「 $-3.77\epsilon_0$ 」、「 $-23.4\epsilon_0$ 」となる。

## 【 0 0 6 6 】

具体的には、誘電率が負のとき、式（4）の右辺第1項の係数内（カッコ内）における分子の部分が正となる。右辺第1項は、同位置座標にける電界成分 $E_x$ の前の時間ステップ（ $n - 1$ ）を参照する頁（ $E_x |^{n-1}$ ）であり、係数が正の大きな値をとると、計算ステップが進むに従い、値が指数関数的に増大する。したがって、計算を繰り返すと電界・磁界の各成分値は発散する。

20

## 【 0 0 6 7 】

このような発散の問題に対して、前述の非特許文献3に示されるように、分極電流を用いたFDTD法による計算式がある。以下詳細に説明する。

## 【 0 0 6 8 】

一般に、複素誘電率 $\epsilon^*$ は、物質の誘電率 $\epsilon_r$ と導電率 $\sigma$ の双方を含んだ材料定数であり、次式で示すことができる。

## 【 0 0 6 9 】

## 【数6】

$$\epsilon^* = \epsilon_r - j \frac{\sigma}{\omega} \quad \dots (6)$$

30

## 【 0 0 7 0 】

ここで、 $\omega$ は光の角周波数である。

## 【 0 0 7 1 】

電界 $E$ に複素誘電率 $\epsilon^*$ を掛けると電束密度 $D$ が得られる。この電束密度 $D$ を用いると、上述の式（2）は、次のようにも表記できる。

## 【 0 0 7 2 】

## 【数7】

$$\nabla \times \mathbf{H} - \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t} = 0 \quad \dots (7)$$

40

## 【 0 0 7 3 】

物質が負の誘電率を有するとは、式（6）の $\epsilon_r$ が負であることを意味する。分極を導入した場合に、電束密度 $D$ と分極とは次の関係にある。

## 【 0 0 7 4 】

【数 8】

$$\mathbf{D} = \varepsilon_{\infty} \mathbf{E} + \mathbf{P} \quad \dots (8)$$

【0075】

は、分極が発生しない高い周波数の電磁波における物質の誘電率であり、瞬間誘電率と呼ばれる。Pは分極である。分極Pは、電界Eとともに時間変化し、その変化は物質の分極特性により決まる。例えば、ドルーデ型の分散特性を仮定すると、分極Pは次の微分方程式に従う。

【0076】

10

【数 9】

$$\frac{\partial^2 \mathbf{P}}{\partial t^2} + \Gamma \frac{\partial \mathbf{P}}{\partial t} = \varepsilon_0 \omega_p^2 \mathbf{E} \quad \dots (9)$$

【0077】

ここで、 $\Gamma$  と  $\omega_p$  は分散特性を決める定数である。

【0078】

または、

【0079】

【数 10】

20

$$\mathbf{J}_p = \partial \mathbf{P} / \partial t \quad \dots (10)$$

【0080】

で定義される分極電流を用いると、分極電流Jは次の微分方程式に従う。

【0081】

【数 11】

$$\frac{\partial \mathbf{J}_p}{\partial t} + \Gamma \mathbf{J}_p = \varepsilon_0 \omega_p^2 \mathbf{E} \quad \dots (11)$$

30

【0082】

式(9)と式(11)における物質の誘電率  $\varepsilon_r$ 、導電率  $\sigma$ 、定数  $\Gamma$  及び  $\omega_p$  は、次式の関係がある。

【0083】

【数 12】

$$\varepsilon_r = \varepsilon_{\infty} - \frac{\varepsilon_0 \omega_p^2}{\omega^2 + \Gamma^2} \quad \dots (12)$$

【0084】

40

【数 13】

$$\sigma = \frac{\varepsilon_0 \omega_p^2 \Gamma}{\omega^2 + \Gamma^2} \quad \dots (13)$$

【0085】

2つの材料定数  $\varepsilon_r$  (誘電率)と  $\sigma$  (導電率)に対して、3つの変数  $\Gamma$ 、 $\omega_p$ 、 $\varepsilon_{\infty}$ があるため、変数の設定には自由度がある。そこで、瞬間誘電率  $\varepsilon_r$  を正の値に設定し、式(12)で物質の誘電率  $\varepsilon_r$  が負の値になるように、定数  $\Gamma$  及び  $\omega_p$  を設定することで、FDTD法による負の誘電率  $\varepsilon_r$  を有する物質の計算が可能となる。

50

【 0 0 8 6 】

式 ( 8 ) を式 ( 7 ) に適用すると、

【 0 0 8 7 】

【 数 1 4 】

$$\nabla \times \mathbf{H} - \varepsilon_{\infty} \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} = \frac{\partial \mathbf{P}}{\partial t} = \mathbf{J}_p \quad \dots (14)$$

【 0 0 8 8 】

となる。この式 ( 1 4 ) から、式 ( 4 ) に対応する式を求めると、次式が得られる。

10

【 0 0 8 9 】

【 数 1 5 】

$$\begin{aligned} E_x|_{i+1/2,j,k}^n &= E_x|_{i+1/2,j,k}^{n-1} \\ &+ \left( \frac{\Delta t}{\varepsilon_{\infty i+1/2,j,k}} \right) \cdot \left( \frac{H_z|_{i+1/2,j+1/2,k}^{n-1/2} - H_z|_{i+1/2,j-1/2,k}^{n-1/2}}{\Delta y} - \frac{H_y|_{i+1/2,j,k+1/2}^{n-1/2} - H_y|_{i+1/2,j,k-1/2}^{n-1/2}}{\Delta z} \right) \\ &- \left( \frac{\Delta t}{\varepsilon_{\infty i+1/2,j,k}} \right) \cdot J_p|_{i+1/2,j,k}^{n-1/2} \end{aligned}$$

... ( 1 5 )

20

【 0 0 9 0 】

この式 ( 1 5 ) では、前の時間ステップ ( n - 1 ) を参照する右辺第 1 項 ( E x | <sup>n - 1</sup> ) の係数が「 1 」であるため、上述した発散の問題を回避することができる。

【 0 0 9 1 】

分極電流 J については、式 ( 1 1 ) より、次式を得る。

【 0 0 9 2 】

【 数 1 6 】

$$J_{Px}|_{i+1/2,j,k}^{n+1/2} = \frac{2 - \Gamma \Delta t}{2 + \Gamma \Delta t} J_{Px}|_{i+1/2,j,k}^{n-1/2} + \frac{2 \Delta t}{2 + \Gamma \Delta t} \varepsilon_0 \omega_p^2 E_x|_{i+1/2,j,k}^n \quad \dots (16)$$

30

【 0 0 9 3 】

式 ( 1 6 ) において、分極電流 J<sub>p</sub> の時間ステップは「 n + 1 / 2 」、 「 n - 1 / 2 」 など半整数の値を取る。尚、磁界 H の計算は通常の F D T D 法と同様に式 ( 5 ) を用いる。

【 0 0 9 4 】

F D T D 法を用いて金属を含むモデルの光学解析の一般的な手法は、磁界 H は式 ( 5 ) を使い、電界 E は式 ( 1 5 ) を使い、分極電流 J は式 ( 1 6 ) を用いて計算を行う。

【 0 0 9 5 】

次に、このような式を用いて解析を行う場合の問題点について考察する。

40

【 0 0 9 6 】

図 6 は、解析モデルの例を示す。F D T D 法を用いた光学解析の例として、薄膜 5 5 0 の透過率を、上述した分極電流 J<sub>p</sub> を用いた F D T D 法で計算する。

【 0 0 9 7 】

薄膜 5 5 0 の厚さは「 8 0 n m 」であり、屈折率を「 1 」、光の波長を「 7 8 0 n m 」とし、薄膜 5 5 0 に垂直に光を入射させ、その入射光と透過光との強度の比をとり、薄膜 5 5 0 の透過率 ( | E<sub>t</sub> | <sup>2</sup> / | E<sub>i</sub> | <sup>2</sup> ) を計算した。但し、消衰係数 ( 光が物質内を透過するときどれだけ光を吸収するかの度合い ) を「 1 . 5 」から「 5 」まで変化させ、透過率を変化させる。また、解析空間を分割するグリッド間隔を「 2 0 n m 」と「 5 n m 」の 2 種類の条件で計算する。

50

【0098】

上述の式(15)と式(16)内には、屈折率  $n$  と消衰係数  $\kappa$  は示されていない。一般に、屈折率  $n$  と消衰係数  $\kappa$  とは、

【0099】

【数17】

$$\varepsilon_r = \varepsilon_0 (n^2 - \kappa^2) \quad \dots (17)$$

【0100】

【数18】

$$\sigma = 2\varepsilon_0 n \kappa \omega \quad \dots (18)$$

10

【0101】

の関係があるため、これを用いて式(15)、式(16)を計算する。

【0102】

図7(A)は、この解析結果を示すグラフである。横軸は消衰係数  $\kappa$ 、縦軸はFDTD法による透過率と厳密な演算による透過率との相対誤差(FDTD法の計算誤差)を示す。薄膜550の透過率は屈折率  $n$  と、消衰係数  $\kappa$  と、厚さ  $d$  から正確に演算できるため、この演算により得た値が厳密な演算による透過率となる。

20

【0103】

一般に、消衰係数が大きいほど光強度が減衰するため、相対誤差は大きくなるものの、図7(A)に示すように、グリッド間隔が「5nm」のとき、消衰係数を大きくしても、相対誤差は小さく抑えることができた(消衰係数「5」のとき誤差は約「2%」)。

【0104】

しかし、グリッド間隔が「20nm」としたとき消衰係数が大きいと、誤差は大きく増大する。図7(A)の例では、消衰係数が「5」のとき誤差は約「30%」となった。

【0105】

図7(A)に示すような誤差を抑えるためには、グリッド間隔を小さくすればよいことは明らかである。しかし、例えば、グリッド間隔を「1/2」にすると、3次元解析ではグリッド数は「8」倍になる。

30

【0106】

一方、時間ステップ  $\Delta t$  については、FDTD法の計算が発散せずに安定に計算を行うために、一般に、以下の条件を満たす必要がある。

【0107】

【数19】

$$\Delta t \leq \frac{1}{v \sqrt{\left(\frac{1}{\Delta x}\right)^2 + \left(\frac{1}{\Delta y}\right)^2 + \left(\frac{1}{\Delta z}\right)^2}} \quad \dots (19)$$

40

【0108】

ここで、 $v$  は電磁波の速度を示す。

【0109】

これにより、式(19)からグリッド間隔を「1/2」にすると、時間ステップ  $\Delta t$  も「1/2」小さくする必要がある。これでは、計算時間も多くなり、使用される値が増加することでメモリ容量を増大しなければならない。従って、計算コストを増加させる。

【0110】

次に、グリッド間隔が粗い場合でも、計算誤差を小さく抑えるとともに計算コストも低くするようにした計算手法について述べる。

50

【 0 1 1 1 】

物質内部の分極電流 P を示す式 ( 1 1 ) において、時間微分を差分に置き換えると、

【 0 1 1 2 】

【 数 2 0 】

$$\frac{J_{i+1/2,j,k}^{n+1/2} - J_{i+1/2,j,k}^{n-1/2}}{\Delta t} + \Gamma J_{i+1/2,j,k}^n = \varepsilon_0 \omega_p^2 E_{i+1/2,j,k}^n \quad \dots (20)$$

【 0 1 1 3 】

となる。

10

【 0 1 1 4 】

式 ( 2 0 ) に着目すると、左辺第 1 項の分極電流  $J_p$  の時間ステップは、「  $n + 1 / 2$  」、 $n - 1 / 2$ 」で半整数となっている。一方、左辺第 2 項の分極電流  $J_p$  の時間ステップは「  $n$  」と整数となっている。一方、電界 E は時間ステップが整数値をとる。

【 0 1 1 5 】

そこで、時間的に前後する、分極電流  $J_p$  の 2 つの半整数ステップの値 ( 「  $n + 1 / 2$  」と「  $n - 1 / 2$  」 ) から次式により整数ステップの値「  $n$  」を求めるようにする。

【 0 1 1 6 】

【 数 2 1 】

$$J_{i+1/2,j,k}^n = f J_{i+1/2,j,k}^{n+1/2} + (1-f) J_{i+1/2,j,k}^{n-1/2} \quad \dots (21)$$

20

【 0 1 1 7 】

但し、パラメータ f は、( 0 < f < 1 ) を満たす。

【 0 1 1 8 】

式 ( 2 1 ) に示すように、整数ステップの分極電流の値 (  $J_p^n$  ) には、パラメータ f の範囲で任意性がある。通常の計算では、平均である  $f = 1 / 2$  で式 ( 2 1 ) を計算する。図 7 ( B ) はその概念図である。そのときの漸化式が上述の式 ( 1 6 ) である。

【 0 1 1 9 】

一方、分極電流 (  $J_p^n$  ) の置き換えとして、 $f = 1 / 2$  ではなく、 $f = 1$  の場合を考える。すなわち、整数ステップの値として、半整数ステップ進んだ値を用いて計算する。この場合、分極電流  $J_p$  の式 ( 1 6 ) に対応する式は次のように示すことができる。

30

【 0 1 2 0 】

【 数 2 2 】

$$J_{i+1/2,j,k}^{n+1/2} = \frac{1}{1+\Gamma\Delta t} J_{i+1/2,j,k}^{n-1/2} + \frac{\Delta t}{1+\Gamma\Delta t} \varepsilon_0 \omega_p^2 E_{i+1/2,j,k}^n \quad \dots (22)$$

【 0 1 2 1 】

分極電流  $J_p$  の式を式 ( 1 6 ) から式 ( 2 2 ) に変更することで、誤差の発生する傾向が変化し、グリッド間隔が大きい条件でも誤差の発生を低減することができる。次に、この点について考察する。

40

【 0 1 2 2 】

図 8 は、上述の図 6 に示すモデルにおいて、グリッド間隔を「 2 0 n m 」とし、式 ( 1 6 ) により計算した場合 ( 通常の計算式 ) と、式 ( 2 2 ) を用いて計算した場合 ( 本発明の計算式 ) との比較結果である。

【 0 1 2 3 】

図 8 に示すように、消衰係数が小さいときには、通常の計算式による式 ( 1 6 ) を用いた方が誤差は小さい。消衰係数が約「 3 . 4 」になると、式 ( 2 2 ) を用いた場合は誤差が最小となる。そして、消衰係数がそれより大きくなると、式 ( 2 2 ) を用いた方が、通常の計算式である式 ( 1 6 ) を用いた場合よりも、誤差は小さくなる。

50

## 【 0 1 2 4 】

つまり、式(22)を用いるとグリッド間隔を「20nm」と大きくとっても誤差を低減することができる。但し、グリッド間隔が十分小さい場合は、式(16)を用いても誤差は十分小さくすることができる(図7(A)参照)。

## 【 0 1 2 5 】

従って、グリッド間隔を何らかの手法により評価し、式(16)を用いる場合と式(22)を用いる場合とでどちらが適切かを判断し、誤差の小さい方を適用するようにすれば、計算コストの増加等の問題は回避することができる。

## 【 0 1 2 6 】

本実施例では、このグリッド間隔の評価、即ち、式(16)を用いればよいか、式(22)を用いればよいかの判断は、金属物質に入射する光の波長  $\lambda$  により行う。

## 【 0 1 2 7 】

物質内部の光の波長  $\lambda'$  は、

## 【 0 1 2 8 】

## 【数23】

$$\lambda' = \frac{\lambda}{\sqrt{\epsilon^*/\epsilon_0}} \quad \dots (23)$$

## 【 0 1 2 9 】

により得ることができる。この式(23)において、複素誘電率  $\epsilon^*$  は、屈折率  $n$  と消費係数  $\kappa$  から次式で算出される。

## 【 0 1 3 0 】

## 【数24】

$$\epsilon^* = \epsilon_0 (n - j\kappa)^2 = \epsilon_0 (n^2 - \kappa^2) - 2j\epsilon_0 n\kappa \quad \dots (24)$$

## 【 0 1 3 1 】

図9は、図8のデータに対して、物質内部の波長  $\lambda'$  をグリッド間隔  $x$  で割った値を横軸にとり、縦軸を相対誤差としたときのグラフである。グラフの左側ほど物質内部の波長に対するグリッド間隔は大きくなる。

## 【 0 1 3 2 】

横軸  $\lambda'/x$  の「10」に着目すると、分極演算を示す式(16)の計算式(通常の計算式)を用いた場合の誤差は約「-15.7%」であった。一方、同様に分極演算を示す式(22)の計算式(本発明の計算式)を用いた場合の誤差は約「-7.5%」となった。つまり、横軸「10」の値では、式(22)の方が誤差は低減できる。

## 【 0 1 3 3 】

また、横軸「10」より小さい領域でも、式(22)の方が式(16)を用いた場合よりも誤差を低減することができる。

## 【 0 1 3 4 】

すなわち、図9から、グリッド間隔  $x$  が物質内部の波長  $\lambda'$  の「1/10」以上のとき(「 $\lambda'/x = 10$ 」より小さい領域)は、式(22)を用いた方が式(16)を用いるよりも誤差を低減できる。

## 【 0 1 3 5 】

一方、グリッド間隔  $x$  が物質内部の波長  $\lambda'$  の「1/10」より小さいとき(「 $\lambda'/x = 10$ 」よりも大きい領域)は、通常の計算式である式(16)を用いた方が誤差を低減できる。

## 【 0 1 3 6 】

分極電流  $J_p$  の計算式(式(16)と式(22))を切り替える基準としては、グリッド間隔が波長の「1/10」とすることで、グリッド間隔が大きい場合でも、演算結果に

10

20

30

40

50

よる誤差を低減することができるのである。

【 0 1 3 7 】

グリッド間隔が同じであれば、図 7 ( A ) に示すように、消衰係数が大きいほど誤差が大きくなる。負の誘電率を有する金属は大きな消衰係数を持つ。一部にでも材料として金属が含まれるモデルの光学解析のために F D T D 法で計算する場合は、金属のような消衰係数の大きな物質の分極を計算しなくてはならない。従って、上述した計算式の切り替えは光学解析で特に有用である。

【 0 1 3 8 】

図 1 0 は、以上のような F D T D 法による計算を行う場合の処理の動作を示すフローチャートを示す図である。図 4 に示す電磁界シミュレータ 4 0 0 において実行される処理である。

10

【 0 1 3 9 】

まず、解析モデル設定部 4 1 1 に解析モデルの各値が入力される ( S 5 0 1 )。具体的には、物体の形状と、透過率 と、透磁率  $\mu$ 、導電率 等の各値が入力される。これにより、解析対象の解析モデルが設定される。

【 0 1 4 0 】

また、波源設定部 4 1 2 に波源を定義する各値が入力される ( S 5 0 2 )。具体的には、波源の位置と形状、電界振幅  $E_0$ 、光の角周波数、光の初期位相 等の各値が入力される。これにより、解析モデルにおける波源が設定される。また、波源設定部 4 1 2 により、電磁界の空間分布 ( 式 ( 4 ) や式 ( 5 )、更に、式 ( 1 6 ) や式 ( 2 2 ) など) を計算するために電磁波を発生させるの波源位置と強度とが設定される。これらを示す値が各々入力される。

20

【 0 1 4 1 】

更に、計算条件設定部 4 1 3 に計算条件の各値が入力される ( S 5 0 3 )。具体的には、空間的なグリッド幅  $x$ 、 $y$ 、 $z$  と、時間分割幅  $t$  の各値が入力される。解析モデルにおける空間的なきざみ量 ( 粗さ ) と時間的なきざみ量 ( 粗さ ) が入力される。この  $x$  等により、電磁界シミュレーションにおける時空間的な粗さが設定されるため、計算条件設定部 4 1 3 はグリッド設定部の機能を含む。

【 0 1 4 2 】

次いで、波長演算部 4 1 4 において、入力された解析モデルと波源とから、物質内部における波長  $\lambda$  を計算する ( S 5 0 4 )。具体的には、式 ( 2 3 ) を演算する。

30

【 0 1 4 3 】

次いで、係数算出部 4 1 5 において、物質内部の波長  $\lambda$  と、設定された計算条件とから分極電流の計算式の係数を算出する ( S 5 0 5 )。

【 0 1 4 4 】

この S 5 0 4 と S 5 0 5 の処理の詳細を図 1 1 に示す。S 5 0 4 が図 1 1 の S 6 0 1 と S 6 0 2 に対応し、S 5 0 5 が S 6 0 3 乃至 S 6 0 5 に対応する。

【 0 1 4 5 】

まず、波長演算部 4 1 4 において複素誘電率  $\epsilon^*$  を計算する ( S 6 0 1 )。式 ( 2 4 ) により演算する。そして、複素誘電率  $\epsilon^*$  から式 ( 2 3 ) を用いて波長  $\lambda$  を演算する ( S 6 0 2 )。

40

【 0 1 4 6 】

次いで、係数算出部 4 1 5 において、セルサイズの評価を行う ( S 6 0 3 )。即ち、上述した、グリッド間隔が波長  $\lambda$  の「 $1 / 10$ 」以上否かを判断する。グリッド間隔は計算条件設定部 4 1 3 に入力され、波長  $\lambda$  は S 6 0 2 ( S 5 0 4 ) で計算されるため、これらと比較することで判断可能である。

【 0 1 4 7 】

グリッド間隔が波長  $\lambda$  の「 $1 / 10$ 」以上のとき ( S 6 0 3 で Y E S )、分極電流用の第 1 の係数算出部 4 1 5 1 において、分極演算の式 ( 2 2 ) での係数値を算出する ( S 6 0 4 )。一方、グリッド間隔が波長  $\lambda$  の「 $1 / 10$ 」より小さいとき ( S 6 0 3 で N

50

○)、分極電流用の第2の係数算出部4152において、分極演算の式(16)での係数値を算出する。

【0148】

分極電流の式(16)と式(22)とを一般化すると、

【0149】

【数25】

$$J_{i+1/2,j,k}^{n+1/2} = A_{i+1/2,j,k} \cdot J_{i+1/2,j,k}^{n-1/2} + B_{i+1/2,j,k} \cdot E_{i+1/2,j,k}^n \quad \dots (25)$$

【0150】

となる。式(16)と式(22)の違いは係数だけである。S603の条件に従い、まず係数を算出し、その後、後段のFDTD法による式(16)又は式(22)を計算する。

【0151】

式(25)と式(22)とから、係数は

【0152】

【数26】

$$A_{i+1/2,j,k} = \frac{1}{1 + \Gamma \Delta t} \quad \dots (26)$$

【0153】

【数27】

$$B_{i+1/2,j,k} = \frac{\Delta t}{1 + \Gamma \Delta t} \varepsilon_0 \omega_p^2 \quad \dots (27)$$

【0154】

となる。

【0155】

即ち、グリッド間隔が波長 $\lambda$ の「1/10」以上のとき(S603でYES)、グリッド間隔が大きいとして、式(26)と式(27)を用いて係数を求める(S604)。

【0156】

一方、式(25)と式(16)とから、係数は、

【0157】

【数28】

$$A_{i+1/2,j,k} = \frac{2 - \Gamma \Delta t}{2 + \Gamma \Delta t} \quad \dots (28)$$

【0158】

【数29】

$$B_{i+1/2,j,k} = \frac{2 \Delta t}{2 + \Gamma \Delta t} \varepsilon_0 \omega_p^2 \quad \dots (29)$$

【0159】

となる。

【0160】

即ち、グリッド間隔が波長 $\lambda$ の「1/10」より小さいとき(S603でNO)、グリッド間隔が小さいとして、式(28)と式(29)を用いて係数を求める(S605)。

【0161】

尚、分散特性を決める定数 $\beta$ 、 $\rho$ は、屈折率 $n$ と消衰係数 $\alpha$ と、瞬間誘電率 $\varepsilon$ 、及

10

20

30

40

50

び光の各周波数 から次式で求めることができる。

【 0 1 6 2 】

【 数 3 0 】

$$\Gamma = \frac{2\omega n\kappa}{\varepsilon_{\infty}/\varepsilon_0 - n^2 + \kappa^2} \quad \dots (30)$$

【 0 1 6 3 】

【 数 3 1 】

$$\omega_p^2 = \frac{\omega^2 (\varepsilon_{\infty}/\varepsilon_0 - n^2 + \kappa^2)^2 - (\sigma/\varepsilon_0)^2}{\varepsilon_{\infty}/\varepsilon_0 - n^2 + \kappa^2} \quad \dots (31)$$

10

【 0 1 6 4 】

また、算出した各係数 A、B は、アクセス速度の速い記憶部 4 4 0 ( 図 2 での R A M 1 1 2 ) に記憶される。

【 0 1 6 5 】

図 1 0 に戻り、係数算出部 4 1 5 で各係数を求めると ( S 5 0 5、5 0 6 )、次いで、F D T D 演算部 4 1 6 において、F D T D 法による計算が実行される ( S 5 0 7 )。上述したように、グリッド間隔が大きいときは、式 ( 2 2 ) を用いて分極演算を行う。グリッド間隔が小さいときは、式 ( 1 6 ) を用いて分極演算を行う。

20

【 0 1 6 6 】

次いで、電磁界解析部 4 2 0 で、計算結果を解析する ( S 5 0 8 )。具体的には、各々演算した電磁界の各値 E、H を 2 乗した値を記憶部 4 4 0 に記憶し、積算した値を記憶部 4 4 0 に保持する。

【 0 1 6 7 】

次いで、電磁界解析部 4 2 0 から解析結果が出力される ( S 5 0 9 )。例えば、表示部 4 3 0 に出力され解析結果が表示される。或いは、ハードディスク 2 2 0 に解析結果が記憶される。

【 0 1 6 8 】

図 1 2 の各図は、表示部 4 3 0 に表示される解析結果の例である。即ち、頂角 9 0 ° のプローブに、厚さ「 7 0 . 7 n m 」の金の薄膜を設定したモデルについて、簡易的に 2 次元空間で計算した結果である。光の波長は「 4 0 0 n m 」とし、光は各図の左側から右側に伝播する。

30

【 0 1 6 9 】

図 1 2 ( A ) は、グリッド間隔を「 5 n m 」とし、通常の演算式である、式 ( 1 6 ) により演算した結果を示す。また、同図 ( B ) は、グリッド間隔を「 2 0 n m 」で本実施例による式 ( 2 2 ) により演算した結果、同図 ( C ) はグリッド間隔を同じく「 2 0 n m 」で通常の演算式である式 ( 1 6 ) により演算した結果を夫々示す。

【 0 1 7 0 】

この場合に、金の薄膜内部の波長  $\lambda$  は式 ( 2 3 ) より、「 1 5 6 . 0 n m 」となった。「 2 0 n m 」のグリッド間隔は波長  $\lambda$  の「 1 / 1 0 」より大きく、図 1 1 に示す適用条件を満たしている。

40

【 0 1 7 1 】

矢印 M で示す領域に着目すると、式 ( 2 2 ) を用いた演算結果 ( 同図 ( B ) ) と式 1 6 を用いた演算結果 ( 同図 ( C ) ) とでは、式 ( 2 2 ) を用いた方が、グリッド間隔を小さくした演算結果 ( 同図 ( A ) ) に近いことが理解される。

【 0 1 7 2 】

即ち、グリッド間隔が大きい場合には、式 ( 2 2 ) による演算を行った方がより誤差が小さく、概算値として用いることが可能な値を得ることができる。

50

## 【 0 1 7 3 】

以上説明したように、空間グリッド間隔が大きい場合には、式(22)を用いて分極によるFDTD法の演算を行い、空間グリッド間隔が小さい場合には、式(16)を用いて分極によるFDTD法の演算を行うようにしたので、本電磁界シミュレータ400は、計算コストを小さくすることができるとともに、演算による誤差も小さい解析結果を得ることが可能となる。

## 【 0 1 7 4 】

尚、このような解析モデルは、金属薄膜の針から光を照射してサンプルの表面を測定するSNOM(Scanning Near-field Optical Microscope)顕微鏡に適用して好適である。本電磁界シミュレータ400はこのようなSNOM顕微鏡における光の振る舞いを解析するの役に立つ。

10

## 【 0 1 7 5 】

上述した例において、分散モデルとしてドルーテ型分散モデルを例にして説明したが、それ以外にも、ローレンツ型等の他の分散モデルでも同様に本電磁界シミュレータ400において解析可能であり、上述した例と同様の作用効果を奏する。

## 【 0 1 7 6 】

また、上述した例において、空間グリッド間隔が大きいか否かの基準として、グリッド間隔が金属物質内部の光の波長 $\lambda$ の「 $1/10$ 」以上か否かで説明した。勿論、それ以外にも「 $1/10$ 」近傍の値を基準としても、上述した例と同様に実施可能で同様の作用効果を奏する。

20

## 【 0 1 7 7 】

更に、上述した例では、CD-ROM200に本実施例における電磁界シミュレートプログラムが記憶されるものとして説明した。勿論、例えば、フレキシブルディスク210などCD-ROM200以外の記録媒体に記録されていてもよい。コンピュータ100でそのプログラムを読み出して実行することができれば、上述の例と同様に実施可能で、同様の作用効果を奏する。

## 【 0 1 7 8 】

以上まとめると付記のようになる。

## 【 0 1 7 9 】

(付記1)

ある時刻( $n-1$ )における電磁界の空間分布を用いて、次の時刻( $n$ )の電磁界の空間分布を算出することを繰り返す電磁界シミュレータにおいて、

電磁界のシミュレーションにおける時間上及び空間上の粗さを設定する計算条件設定部と、

シミュレート空間上の各位置における電磁界の物理係数を設定する係数設定部と、

前記時刻( $n-1$ )における電磁界の空間分布と物質内部の分極電流の空間分布、及び前記係数設定部で設定された前記物理係数とを用いて、前記時刻( $n$ )における電磁界の空間分布と物質内部の分極電流の空間分布とを算出する分極算出部と、を備え、

前記係数設定部は、前記計算条件設定部にて設定された前記空間上の粗さに基づいて、分極算出部において前記分極電流の空間分布を算出するために使用する第1の計算式を第2の計算式に切り替えるようにし、

30

40

前記分極算出部は、前記第2の計算式を用いて、前記時刻( $n$ )における前記分極電流の空間分布を算出することを特徴とする電磁界シミュレータ。

## 【 0 1 8 0 】

(付記2)

更に、前記電磁界の空間分布を計算するために電磁波の発生源を設定する波源設定部を備え、

前記分極算出部は、前記係数設定部で設定された前記物理係数と前記波源設定部で設定された前記波源の波長とに基づいて、前記第1の計算式から前記第2の計算式に切り替える、ことを特徴とする付記1記載の電磁界シミュレータ。

50

【 0 1 8 1 】

( 付 記 3 )

前記係数設定部で設定した前記物理係数から導出される複素誘電率を  $\epsilon^*$  とし、前記波源設定部で夫々設定した前記波長を  $\lambda$ 、前記空間上の粗さを  $\Delta x$  とし、更に真空の誘電率を  $\epsilon_0$  とすると、前記係数設定部は、

【 0 1 8 2 】

【 数 1 】

$$\frac{1}{\Delta x} \frac{\lambda}{\sqrt{|\epsilon^*|/\epsilon_0}} = a \quad \dots (1)$$

10

【 0 1 8 3 】

から得られる変数  $a$  の大きさに基づいて、前記第 1 の計算式から前記第 2 の計算式に切り替えることを特徴とする付記 2 記載の電磁界シミュレータ。

【 0 1 8 4 】

( 付 記 4 )

前記第 2 の計算式は前後する 2 つの時間ステップの中間の値を求める算出方法を変更した式であることを特徴する付記 1 乃至 3 記載の電磁界シミュレータ。

【 0 1 8 5 】

( 付 記 5 )

前記第 2 の計算式は前後する前記時間ステップの中間の値を半整数ステップ進んだ値を用いた計算式であることを特徴とする付記 4 記載の電磁界シミュレータ。

20

【 0 1 8 6 】

( 付 記 6 )

更に、前記波源設定部で設定された前記波源に基づいて、前記電磁波が物質を透過するときの前記物質内の前記電磁波の波長を演算する波長演算部を備え、

前記分極算出部は、前記係数設定部で設定された前記空間上の粗さを示すグリッド間隔が、前記波長演算部で演算した前記物質内の波長よりも十分大きいときは、前記第 1 の計算式から前記第 2 の計算式に切り替えることを特徴とする付記 1 又は 2 記載の電磁界シミュレータ。

30

【 0 1 8 7 】

( 付 記 7 )

前記分極算出部は、前記グリッド間隔が前記物質内部の波長の「1 / 10」以上のときに、前記第 1 の計算式から前記第 2 の計算式に切り替えることを特徴とする付記 6 記載の電磁界シミュレータ。

【 0 1 8 8 】

( 付 記 8 )

ある時刻 (  $n - 1$  ) における電磁界の空間分布を用いて、次の時刻 (  $n$  ) の電磁界の空間分布を算出することを繰り返す電磁界シミュレートプログラムにおいて、

電磁界のシミュレーションにおける時間上及び空間上の粗さを設定する計算条件設定処理と、

40

シミュレート空間上の各位置における電磁界の物理係数を設定する係数設定処理と、

前記時刻 (  $n - 1$  ) における電磁界の空間分布と物質内部の分極電流の空間分布、及び前記係数設定部で設定された前記物理係数とを用いて、前記時刻 (  $n$  ) における電磁界の空間分布と物質内部の分極電流の空間分布とを算出する分極算出処理と、をコンピュータに実行させ、

前記係数設定処理では、前記計算条件設定処理にて設定された前記空間上の粗さに基づいて、前記分極算出処理にて前記分極電流の空間分布を算出するために使用する第 1 の計算式を第 2 の計算式に切り替えるようにし、

前記分極算出処理では、前記第 2 の計算式を用いて、前記時刻 (  $n$  ) における前記分極

50

電流の空間分布を算出することをコンピュータに実行させることを特徴とする電磁界シミュレートプログラム。

【図面の簡単な説明】

【0189】

【図1】本発明の一実施形態が適用されるコンピュータの外観斜視図である。

【図2】コンピュータのハードウェア構成図の例を示す図である。

【図3】本発明の電磁界シミュレートプログラムの一実施形態を示す図である。

【図4】本発明の電磁界シミュレータの一実施形態の機能ブロック図である。

【図5】セルに配置された電磁界の各成分を示す図である。

【図6】解析モデルの例を示す図である。

10

【図7】同図(A)は解析結果の例を示す図、同図(B)はパラメータ $f$ の取り得る値の範囲を示す概念図である。

【図8】解析結果の例を示す図である。

【図9】解析結果の例を示す図である。

【図10】処理の動作を示すフローチャートの例である。

【図11】処理の動作を示すフローチャートの例である。

【図12】同図(A)乃至(C)は、解析結果の例を光の強度の分布により示す図である。

。

【符号の説明】

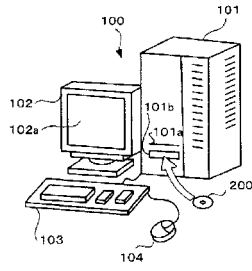
【0190】

20

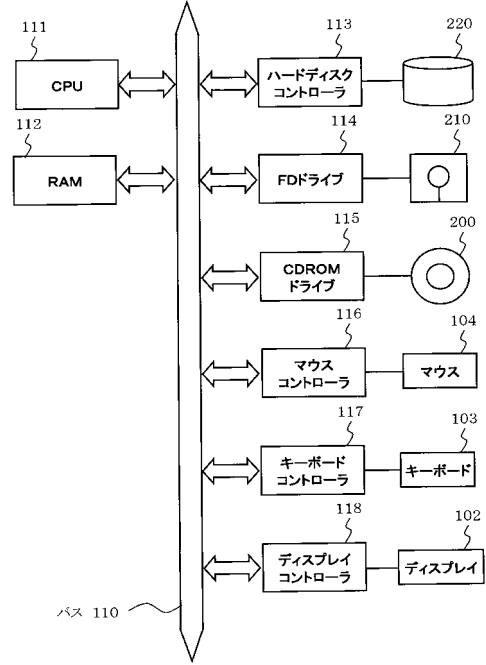
- 100 コンピュータ
- 111 CPU
- 112 RAM
- 113 ハードディスクコントローラ
- 115 CD-ROMドライブ
- 200 CD-ROM
- 220 ハードディスク
- 300 電磁界シミュレートプログラム
- 310、410 シミュレート演算部
- 314、414 波長演算部
- 315、415 係数算出部
- 316、416 FDTD演算部
- 320、420 電磁界解析部
- 330、430、102 表示部
- 400 電磁界シミュレータ
- 500 セル

30

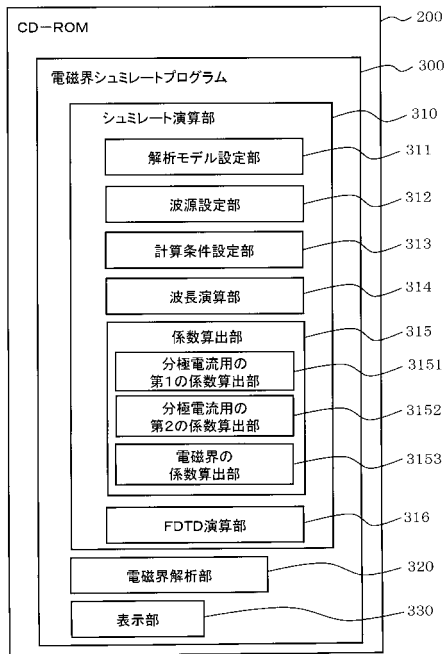
【図1】



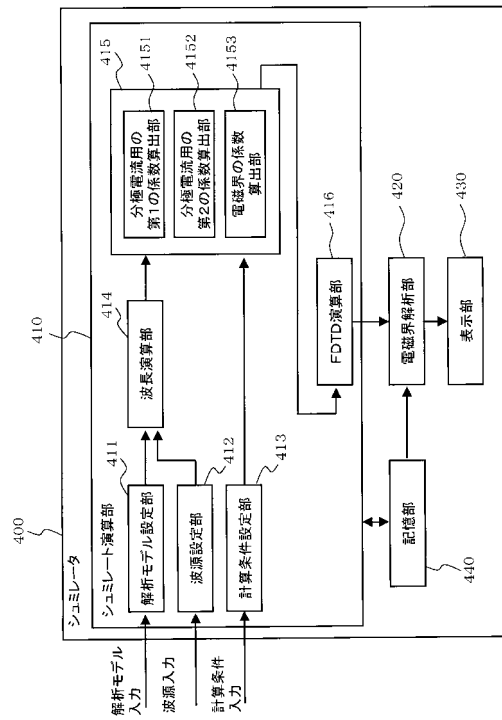
【図2】



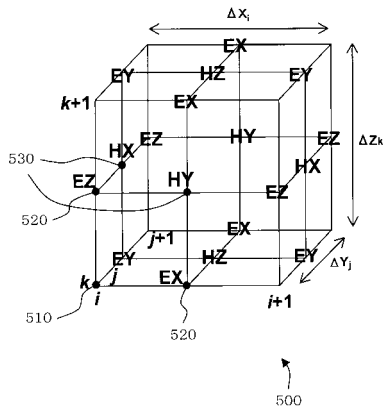
【図3】



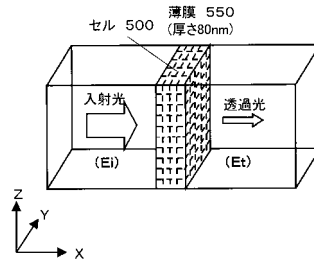
【図4】



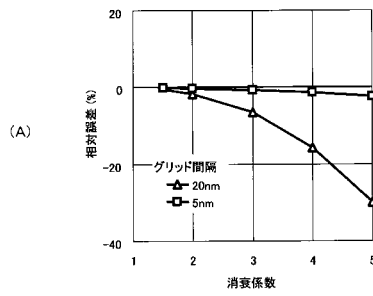
【図5】



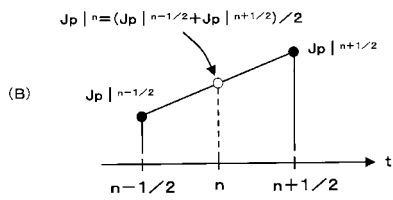
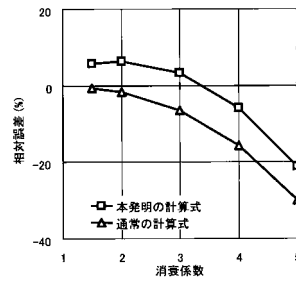
【図6】



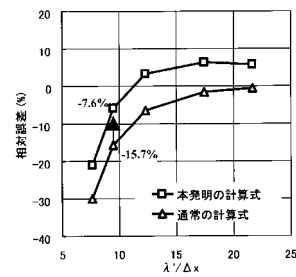
【図7】



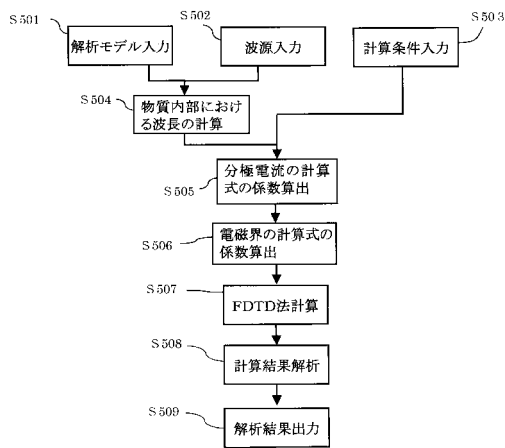
【図8】



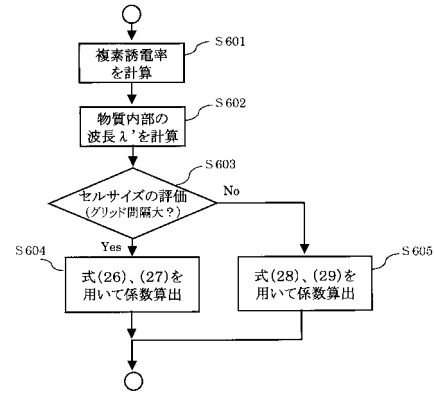
【図9】



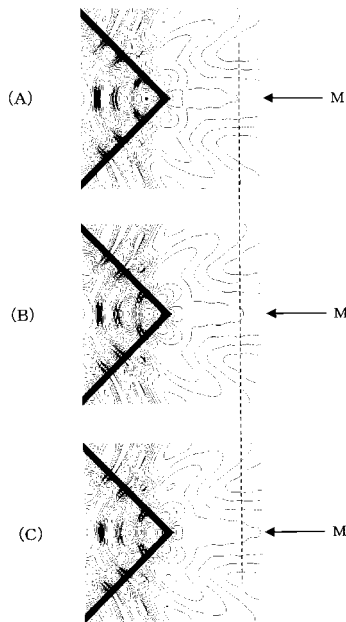
【図10】



【図11】



【図12】



## フロントページの続き

- (56)参考文献 特開2005-274233(JP,A)  
特開平11-352166(JP,A)  
特開2004-38774(JP,A)  
特開2003-78326(JP,A)  
特開2005-345119(JP,A)  
小林 勲, 深井 慎一郎, 小嶋 敏孝, 何 一偉, “光磁気ディスク媒質による光散乱特性のFDTD法解析”, 電子情報通信学会論文誌C, 社団法人電子情報通信学会, 2000年 1月25日, Vol.J83-C, No.1, p.95-97  
長谷川 信也 Shinya Hasegawa, “光ナノテクノロジー分野での解析を支援する光シミュレータ Optics Simulator for Use in Nano-Optics Analysis”, FUJITSU VOL.56 NO.4, 富士通株式会社, 2005年 7月 8日, 第56巻第4号, p.299-306

## (58)調査した分野(Int.Cl., DB名)

G01R 29/08、31/00  
G06F 17/50、19/00  
Cinii  
JSTPlus(JDreamII)