

[共同研究成果]

ナノアンテナの数値解析のための
ブロックモーメント法的高速化今野 佳祐[†], 陳 強[†]東北大学大学院工学研究科 通信工学専攻[†]

1 まえがき

近年, ナノスケールの波長を有する帯域におけるアンテナ, すなわちナノアンテナの研究が盛んに行われている. ナノアンテナは, 光センサの高感度化や光電変換の高効率化など, ナノデバイスの高機能化に役立つと期待されている. また, 回折限界を超えたスポット径を実現できる局在型の表面プラズモンや, ナノアンテナ表面を伝播して放射にも寄与することが知られている表面プラズモンポラリトンなど, ナノアンテナ独特の現象も報告されており, 基礎科学の側面でも注目されている. ナノアンテナは, 主に金や銀, アルミニウム等の金属粒子からなるが, これらの粒子は特に可視光付近の帯域で誘電体として振舞うことが知られている. したがって, ナノアンテナの設計においては, 一般的なマイクロ波帯のように金属は完全導体とみなすことができず, 誘電体として扱う必要がある.

線状のナノアンテナにおいて, 誘電体として振る舞う金属の比誘電率や波数が満たすべき分散関係式を導出し, 表面プラズモンポラリトンモードの波数を求める研究がなされた [1]-[3]. このような表面プラズモンポラリトンモードは, 真空中から光波を入射しても励振できないことが分かっており, 誘電体を介して入射した光波によって励振される. Pocklington の積分方程式を用いた, 線状のナノアンテナの数値解析法に関する研究が行われた [4]-[7]. これらの研究では, 誘電体形状は線状とみなされ, その比誘電率や導電率は表面インピーダンスでモデリングされている. また, 線状のナノアンテナの表面プラズモンポラリトンモードの波数を分散関係式から求め, Pocklington の積分方程式と組み合わせてナノアンテナを解析する手法も提案されている [8], [9]. Pocklington の積分方程式を用いた線状ナノアンテナの数値解析法は, 簡便で扱いやすいという利点はあるが, 誘電体形状は線状とみなしているので, 分極電流や分極電荷のモデリングに問題がある.

誘電体内部の分極電流を直接モデリングする数値解析法として, 体積積分方程式を用いたモーメント法が挙げられる [10]-[12]. 体積積分方程式を用いたモーメント法は, 誘電体内部の分極電流を基底関数で展開し, その重みを数値的に求めることで誘電体内部の分極電流を得る手法である. Pocklington の積分方程式を用いたナノアンテナの数値解析法では, 誘電体の分極電流が1次元の線電流で展開されるのに対し, 体積積分方程式を用いたモーメント法では誘電体の分極電流が3次元の電流で展開されるので, 不均質な誘電体や厚みを持った誘電体の数値解析に向いている. 一方で, 体積積分方程式を用いたモーメント法は, 分極電流セグメント間の自己・相互インピーダンスの数値計算に非常に長い時間がかかるという問題点を持つことが知られている.

そこで本報告では, ナノアンテナの数値解析への応用を目指して, ベクトル型スーパーコンピュー

タによる体積積分方程式を用いたモーメント法的高速化を行う。誘電体内部の分極電流だけでなく、誘電体表面の分極電荷も考慮したブロックモーメント法のプログラムをベクトル化する [13], [14]. ベクトル化による高速化の有効性と、ベクトル化困難な部分を明らかにすることで、プログラムをチューニングする上での指針を示す。

2 体積積分方程式を用いたブロックモーメント法

本章では、端電荷を持つ線状モノポールセグメント間の自己・相互インピーダンス表示式を導出し、それを多重積分することでブロックモノポールセグメント間の自己・相互インピーダンス表示式を導出する [13], [14]. ブロックモノポールセグメント間の自己・相互インピーダンスの表示式に現れる 5 重積分は座標変換を用いて 3 重積分に変換し、数値計算に要する時間を削減する [15].

2.1 端電荷を持つモノポールセグメント間の自己・相互インピーダンス

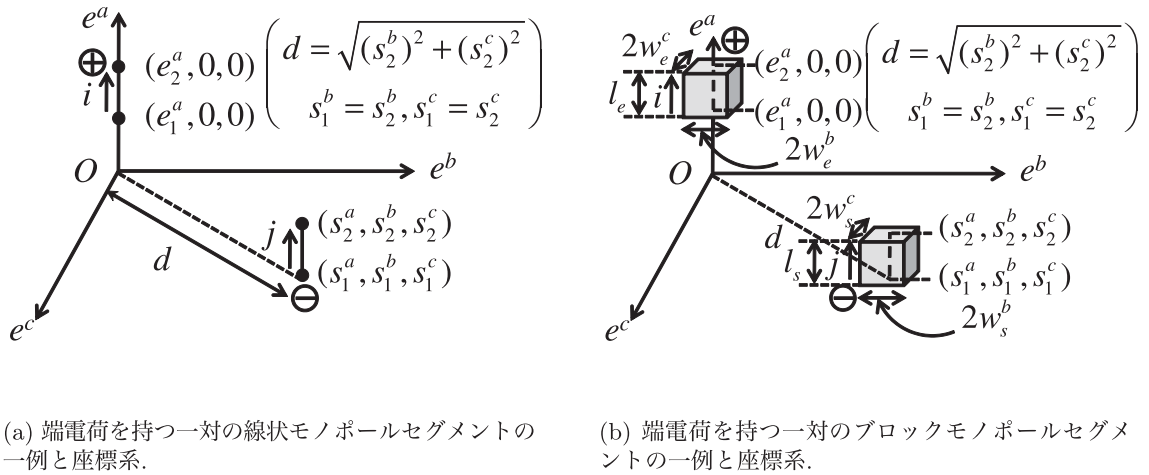


図 1: 自己・相互インピーダンス表示式の座標系。

ここでは、端電荷を持つ線状モノポールセグメント間の自己・相互インピーダンス表示式を導出する。図 1(a) に、端電荷を持つ一対の平行なモノポールセグメントを示す。e 系の座標が観測セグメント、s 系の座標が波源セグメントを意味し、座標変換と平行移動をすれば、互いに平行な位置関係にあるモノポールセグメントの座標は全てこの座標に変換できる。なお、本論文におけるモノポールセグメントの配置は平行あるいは垂直に限定する。また、図 1(a) に示したのはあくまで一例であり、電流の向きと電荷の組み合わせに応じて、平行配置の組み合わせは他に 7 種類、垂直配置の組み合わせは 4 種類ある。

さて、図 1(a) の観測セグメント上の電流分布を表す基底関数として、以下の区分正弦関数を利用する。

$$\mathbf{f}_e(e^a) = \frac{\sinh jk_0(e^a - e_1^a)}{\sinh jk_0|e_2^a - e_1^a|}. \quad (1)$$

同様に、波源セグメント上の電流分布を表す基底関数として、以下の区分正弦関数を用いる。

$$\mathbf{f}_s(s^a) = \frac{\sinh jk_0(s_2^a - s^a)}{\sinh jk_0|s_2^a - s_1^a|}. \quad (2)$$

次に、(1) 式を連続の式に代入することによって、観測セグメント上の線電荷密度を以下のように得る。

$$\begin{aligned} \nabla \cdot \mathbf{f}_e(e^a) + j\omega\rho_e(e^a) &= \delta(e^a - e_2^a) \\ \rho_e(e^a) &= \frac{1}{j\omega} \left\{ -jk_0 \frac{\sinh jk_0(e^a - e_1^a)}{\sinh jk_0|e_2^a - e_1^a|} + \delta(e^a - e_2^a) \right\}. \end{aligned} \quad (3)$$

同様に、(2) 式を連続の式に代入することにより、波源セグメント上の線電荷密度を以下のように得る。

$$\begin{aligned} \nabla \cdot \mathbf{f}_s(s^a) + j\omega\rho_s(s^a) &= -\delta(s^a - s_1^a) \\ \rho_s(s^a) &= \frac{1}{j\omega} \left\{ jk_0 \frac{\sinh jk_0(s_2^a - s^a)}{\sinh jk_0|s_2^a - s_1^a|} - \delta(s^a - s_1^a) \right\}. \end{aligned} \quad (4)$$

ここで、以下に示すセグメント間の自己・相互インピーダンスの一般的な表示式に (1)-(4) 式を代入して整理すると、端電荷を持つ線状モノポールセグメント間の自己・相互インピーダンス表示式が、単積分の形で (5) 式のように得られる [13].

$$\begin{aligned} Z_{ij} &= \frac{j\omega\mu_0}{4\pi} \int_{e_1^a}^{e_2^a} \int_{s_1^a}^{s_2^a} \mathbf{f}_e(e^a) \cdot \mathbf{f}_s(s^a) \frac{e^{-jk_0 R_{ij}}}{R_{ij}} ds^a de^a + \frac{j\omega}{4\pi\epsilon_0} \int_{e_1^a}^{e_2^a} \int_{s_1^a}^{s_2^a} \rho_e(e^a) \rho_s(s^a) \frac{e^{-jk_0 R_{ij}}}{R_{ij}} ds^a de^a \\ &= C_A I_A + C_B I_B + C_C I_C - C_D I_D. \end{aligned} \quad (5)$$

ただし、(5) 式中の $C_A \sim C_D$, $I_A \sim I_D$, そして R_{ij} はそれぞれ、 $R_{ij} = \sqrt{(e^a - s^a)^2 + (s_2^b)^2 + (s_2^c)^2}$, $C_A = \frac{7.5}{\sin k_0|e_2^a - e_1^a| \sin k_0|s_2^a - s_1^a|}$, $I_A = \sum_{p=1}^2 \sum_{q=1}^2 e^{-jk_0(ne_1^a + ms_2^a)} mn I_{pq}$, $C_B = \frac{15}{j \sin k_0|s_2^a - s_1^a|}$, $I_B = \sum_{p=1}^2 I_{Bp}$, $I_{Bp} = -me^{jk_0(me_2^a - ms_2^a)} \int_{v(s_1^a, e_2^a)} \frac{e^{-z}}{z} dz$, $C_C = \frac{15}{j \sin k_0|e_2^a - e_1^a|}$, $I_C = \sum_{q=1}^2 I_{Cq}$, $I_{Cq} = -ne^{jk_0(-ne_1^a + ns_1^a)} \int_{w(s_1^a, e_1^a)} \frac{e^{-z}}{z} dz$, $C_D = \frac{30}{jk_0}$, $I_D = \frac{e^{-jk_0 R_{21}}}{R_{21}}$ である。なお、 I_A の表示式に含まれる I_{pq} は以下ようになる。

$$\begin{aligned} I_{pq} &= jk_0 \frac{1+mn}{mn} \int_{e_1^a}^{e_2^a} \int_{s_1^a}^{s_2^a} \frac{e^{jk_0(ms^a + ne^a - R_{ij})}}{R_{ij}} ds^a de^a \\ &= \sum_{h=1}^2 (-1)^h \left\{ -e^{jk_0 e_h^a(n+m)} \int_{v(s_1^a, e_h^a)} \frac{e^{-z}}{z} dz - e^{jk_0 s_h^a(m+n)} \int_{w(s_h^a, e_1^a)} \frac{e^{-z}}{z} dz \right. \\ &\quad \left. + e^{jk_0 ju_0} \int_{x(s_h^a, e_1^a)} \frac{e^{-z}}{z} dz + e^{-jk_0 ju_0} \int_{y(s_h^a, e_1^a)} \frac{e^{-z}}{z} dz \right\}. \end{aligned} \quad (6)$$

ただし、 $v(s_i^a, e_h^a) = jk_0(-ms_i^a + me_h^a + R_{hi})$, $w(s_h^a, e_i^a) = jk_0(-ne_i^a + ms_h^a + R_{ih})$, $x(s_h^a, e_i^a) = jk_0(-ms_h^a - ne_i^a + R_{ih} + ju_0)$, $y(s_h^a, e_i^a) = jk_0(-ms_h^a - ne_i^a + R_{ih} - ju_0)$, $u_0 = d\sqrt{\frac{1+mn}{1-mn}}$, $d = \sqrt{(s_2^b)^2 + (s_2^c)^2}$, $m = (-1)^{p-1}$, $n = (-1)^{q-1}$ であり、(6) 式において、 $1+mn = 0$ なら $I_{pq} = 0$, $1-mn = 0$ なら最後の 2 項を無視する。 I_{pq} , I_B , I_C の表示式において、 z を含む全ての積分は 2 つの指数積分の差を取ることで数値的に積分できる。この指数積分の数値計算が最も時間のかかる部分である。なお、モノポールセグメントの配置が垂直の場合も同様の定式化が必要だが、そこらは省略する。

2.2 ブロックモノポールセグメント間の自己・相互インピーダンス

図 1(b) に、端電荷を持つ一対の平行なブロックモノポールセグメントを示す。観測・波源モノポールセグメントにおける電流の向き、端電荷の符号と位置は前項の図 1(a) と同じである。観測ブロックモノポールセグメントの電流分布を表す基底関数は、以下のように定義される。

$$\mathbf{f}_e(e^a) = \frac{1}{4w_e^b w_e^c} \frac{\sinh jk_0(e^a - e_1^a)}{\sinh jk_0|e_2^a - e_1^a|}. \quad (7)$$

同様に、波源モノポール上の電流分布を表す基底関数は以下の式で定義される。

$$\mathbf{f}_s(s^a) = \frac{1}{4w_s^b w_s^c} \frac{\sinh jk_0(s_2^a - s^a)}{\sinh jk_0|s_2^a - s_1^a|}. \quad (8)$$

これらの基底関数は、先頭の係数部分を除けばそれぞれ (1) 式, (2) 式と一致する。従って、ブロックセグメント中央を通る線状モノポールセグメント間の相互インピーダンス Z_{ij} を (5) 式によって求め、 Z_{ij} を 4 重積分すると、ブロックモノポールセグメント間の自己・相互インピーダンス表示式が以下のように得られる。

$$Z_{ij}^{block} = \frac{1}{16w_e^b w_e^c w_s^b w_s^c} \int_{-w_e^b}^{w_e^b} \int_{-w_e^c}^{w_e^c} \int_{s_1^b - w_s^b}^{s_1^b + w_s^b} \int_{s_1^c - w_s^c}^{s_1^c + w_s^c} Z_{ij} ds^c ds^b de^c de^b. \quad (9)$$

Z_{ij} の計算には単積分が含まれるため、(9) 式は 5 重積分を含む表示式である。この 5 重積分は、座標変換を用いて 3 重積分の和に変換することができ、数値計算の収束性および計算時間が改善する [15]。詳細は省略するが、本報告ではこの 3 重積分の表現を用いて数値計算を行う。ナノアンテナの数値解析では、これらの式を用いて誘電体ブロックセグメント間の自己・相互インピーダンス行列要素を計算し、得られた行列方程式を解くことで電流を求める。

3 数値計算結果

銀でできた幅 10 nm、長さ 100 nm のナノダイポールアンテナを垂直入射の TM 波で励振し、その BRCS(Bistatic Radar Cross Section) を求めた。銀の複素比誘電率は Drude モデルによって与え、周波数は 500 THz とした [9]。ナノダイポールアンテナはブロックダイポールおよびブロックモノポールセグメントに分割した。アンテナ表面での分極電流の不連続性がナノアンテナの数値解析結果におよぼす影響を明らかにするため、アンテナ表面にブロックモノポールセグメントを配置したモデル (w/monopole) とそうでないモデル (w/o monopole) のそれぞれを数値解析した。

数値解析によって得られた BRCS は図 2 に示す。アンテナ表面における端電荷を考慮したモノポールセグメントの有無によって、BRCS が異なっていることが分かる。モノポールセグメントをアンテナ表面に配置しないと、誘電体の表面における分極電流の法線成分の不連続性が無視されてしまう。その結果、誘電体アンテナの共振周波数にずれが生じ、波長に対するアンテナ長が変わるため、BRCS が変化したと考えられる。このように、誘電体の表面における分極電流の法線成分の不連続性のモデリングはナノダイポールアンテナの特性に大きく影響することが分かる。

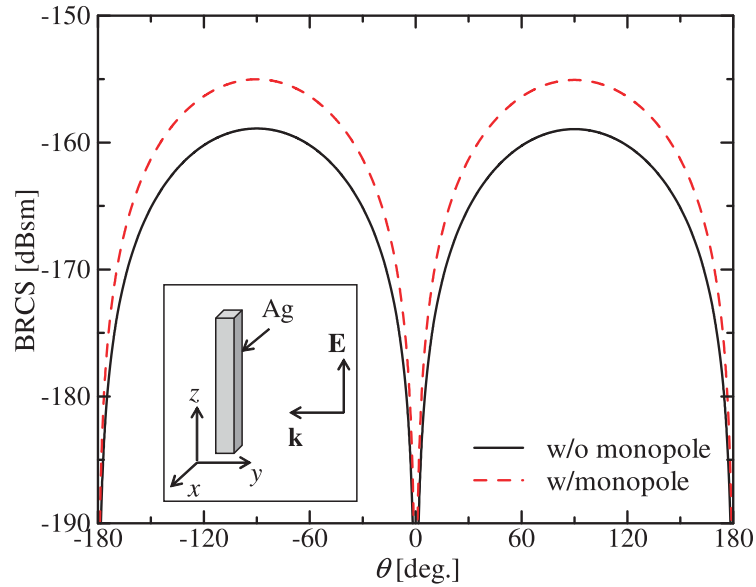


図 2: ナノダイポールアンテナの BRCS.

したがって、ナノアンテナの高精度な数値解析のためには、アンテナ表面へのブロックモノポールセグメントの配置が不可欠であると言える。

次に、ナノダイポールアンテナの数値解析に用いたプログラムをベクトル化チューニングした。サイバーサイエンスセンターのベクトル型スーパーコンピュータ SX-ACE を用いて、ブロックモノポールセグメント間の相互インピーダンスを数値計算したところ、ベクトル化チューニングを行わないときのベクトル演算率が約 0.03%、計算時間が 0.92 sec. であった。一方で、ベクトル化チューニングを行ったときは、ベクトル演算率が 2.7%、計算時間が 0.43 sec. であった。ベクトル演算率が向上したものの、最も計算時間を要する指数積分の箇所のベクトル化ができなかったため、計算時間は十分に低減できなかった。指数積分の箇所を除いた部分のベクトル演算率は 82.4% であり、計算時間は 0.02 sec. となるので、指数積分の箇所のベクトル化が今後の課題である。

まえがきでも述べた通り、体積積分方程式を用いたモーメント法は、分極電流セグメント間の自己・相互インピーダンスの数値計算に非常に長い時間がかかることが知られている。分極電流セグメント間の自己・相互インピーダンスの数値計算は全ての分極電流セグメントの組み合わせに対して行うことになるので、その数値計算回数はセグメント数の 2 乗に比例する。また、誘電体に含まれるセグメント数はその体積に比例するので、数波長程度の誘電体の数値解析であっても、自己・相互インピーダンスの数値計算回数は 100 万回以上に達する。このような膨大な数値計算量を汎用のワークステーションで実施するのは極めて困難であるため、体積積分方程式を用いたモーメント法をベクトル型スーパーコンピュータ向けにチューニングすることは、ナノアンテナの数値解析の高速化において重要である。

4 まとめ

本報告では、ナノアンテナの数値解析のための体積積分方程式を用いたモーメント法の高速化を行った。プログラムにベクトル化チューニングを施した結果、指数積分の数値計算を除いた箇所のベクトル化に成功した。今後は、指数積分の箇所のベクトル化を行うなどして、SX-ACEの後継機である SX-Aurora におけるプログラムのベクトル化を行う。

参考文献

- [1] Q. Cao and J. Jahns, “Azimuthally polarized surface plasmons as effective terahertz waveguides,” *Opt. Exp.*, vol. 13, no. 2, pp. 511-518, 2005.
- [2] L. Novotny, “Effective wavelength scaling for optical antennas,” *Phys. Rev. Lett.* 98(26), 266802 (2007).
- [3] V. D. Miljković, T. Shegai, P. Johansson, and M. Käll, “Simulating light scattering from supported plasmonic nanowires,” *Opt. Exp.*, vol. 20, no. 9, pp. 10816-10826, 2012.
- [4] A. Locatelli, C. D. Angelis, D. Modotto, S. Boscolo, F. Sacchetto, M. Midrio, A.-D. Capobianco, F. M. Pigozzo, and C. G. Someda, “Modeling of enhanced field confinement and scattering by optical wire antennas,” *Opt. Exp.*, vol. 17, no. 19, pp. 16792-1680, 2009.
- [5] A. Locatelli, “Analysis of the optical properties of wire antennas with displaced terminals,” *Opt. Exp.*, vol. 18, no. 9, pp. 9504-9510, 2010.
- [6] K. Costa and V. Dmitriev, “Simple and efficient computational method to analyze cylindrical plasmonic nanoantennas,” *Int. J. Antennas Propag.*, vol.2014, Article ID 675036, pp.1-8.
- [7] J. L. de Souza and K. Q. da Costa, “Broadband wireless optical nano-link composed by dipole-loop nanoantennas,” *IEEE Photonics Journal*, vol. 10, no. 2, pp. 1-8, April 2018.
- [8] J. Dorfmueller, R. Vogelgesang, W. Khunsin, C. Rockstuhl, C. Etrich, and K. Kern, “Plasmonic nanowire antennas: experiment, Simulation, and Theory,” *Nano Lett.*, vol. 10, no. 9, pp.3596-3603, 2010.
- [9] M. Nafari, and J. M. Jornet, “Modeling and performance analysis of metallic plasmonic nano-antennas for wireless optical communication in nanonetworks,” *IEEE Access*, vol. 5, pp. 6389-6398, 2017.
- [10] K. Tanaka and M. Tanaka, “Simulations of nanometric optical circuits based on surface plasmon polariton gap waveguide,” *Appl. Phys. Lett.* 82, 1158 (2003).

- [11] K. Tanaka and M. Tanaka, “Simulation of an aperture in the thick metallic screen that gives high intensity and small spot size using surface plasmon polariton,” J. Microsc., Vol. 210, Pt 3 June 2003, pp. 294–300.
- [12] K. Tanaka and M. Tanaka, “Simulation of practical nanometric optical circuits based on surface plasmon polariton gap waveguides,” Opt. Exp., vol. 13, no. 1, pp. 256-266, 2005.
- [13] M.A. Tilston and K.G. Balmain, “On the suppression of asymmetric artifacts arising in an implementation of the thin-wire method of moments,” IEEE Trans. Antennas Propag., vol.38, no.2, pp.281-285, Feb. 1990.
- [14] 陳 強, ザイ フィチン, 袁 巧微, 澤谷 邦男, “誘電体に対するガラーキンモーメント法-端部電荷を考慮した直方体モノポール間の自己・相互インピーダンスの単積分化-, ” 信学論 (B), Vol. J91-B, No. 9, pp. 926-939, 2008 年 9 月.
- [15] A. Köksal and J.F. Kauffman, “Mutual impedance of parallel and perpendicular coplanar surface monopoles,” IEEE Trans. Antennas Propag., vol.39, no.8, pp.1251-1256, Aug. 1991.
- [16] J.H. Richmond and N.H. Geary, “Mutual impedance of nonplanar-skew sinusoidal dipoles,” IEEE Trans. Antennas Propag., vol.AP-23, no.3, pp.412-414, May 1975.