

汎用マルチフィジックス有限要素解析ソフトウェアCOMSOL Multiphysicsを取り上げて新しい計算科学工学の仕事の流れを解説していきます。今回は波動系を中心に解説していただきます。実験的な方法にも触れています。なお、前号よりチュートリアル記事は1ページ目のみを本誌掲載し、続きは日本計算工学会HP上で公開していますので、そちらも併せてご参照ください。

COMSOL Multiphysicsによる計算科学工学 – 波動系 (5)

橋口 真宜、藤井 知、平野 拓一、坂東 弘之

1 音場への適用

1.1 はじめに

今回は波動系を取り上げて解説します。波動は何らかの物理量の空間パターンが質量輸送を伴わずにエネルギーを伝播する現象です。音声や楽器によるコミュニケーションや芸術活動、携帯端末によるデータ転送、宇宙のかなたから地球に到達する背景放射の観測、光通信などに应用されています。これらはいずれも空気中あるいは真空中の波動伝播の応用ですが、固体の波

動伝播を利用すると、表面弾性波(SAW)の反射具合を観測することでパイプラインの腐食箇所の検出もできます。波は、各応用分野においては、音波、電磁波、弾性波と呼ばれます。光は電磁波の周波数が非常に高くなった場合に相当します。アインシュタインの予言から100年経過後に、重力波(gravitational wave)が検出されました。波は一般相対性理論とも関係しています。ここでは、音波、電磁波を取り上げます。

1.2 音波と電磁波の類似性と差異

音波における音圧 p (大気圧からの変動分)の支配方程式を図1に示します。音場全体が同じ周波数(角周波数 ω)で調和振動をする場合にはヘルムホルツ方程式に変換できます。この場合は空間微分を含む代数方程式になり、解きやすくなります。応用では時間的に変化する過渡状態よりは定常振動状態を考察する機会が多いのでこの性質は有用です。COMSOLは時間領域と周波数領域、いずれも解析を行なうことができます。

筆者紹介



第1章

はしぐち まさのり
計測エンジニアリングシステム(株)第1技術部部長。日本機械学会認定計算力学技術者上級アナリスト。



第2章

ふじい さとし
筑波大・基礎工卒、修士課程了。京工繊大学院博士課程了。住友電工、エプソンを経て平21千葉大特任教授、平26年東工大特任教授(現兼務)、平27年沖縄高専(現職)、電子デバイス、マイクロ波工学を専門とし、ダイヤモンドSAWやマイクロ波加熱の研究とドローンの社会実装に従事



第3章

ひらの たくいち
平成10名工大・工・電気情報卒。平成12東工大・電気電子・修士課程了。平成14-平成28東工大 国際開発工学専攻助教。平成28-30東工大 環境・社会理工学院助教。平成30現在 東京都市大学知識工学部准教授。博士(工学)。電磁界解析、ミリ波測定技術およびオンチップアンテナ等の研究に従事。著書(共著)「電磁気学」など。



第4章

ばんどう ひろゆき
早稲田大・博士課程了。博士(工学)。ポスドクとして大阪電気通信大学、理化学研究所(CRESTO)を経て、平13年千葉大工学部助手。千葉大大学院工学研究院助教(現職)。専門は、結晶成長、半導体物性。

音響	
時間領域	周波数領域
$\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 p}{\partial t^2} - \nabla^2 p = 0$	$\nabla^2 p + k^2 p = 0$
仮定	$p(x, y, z, t) = p(x, y, z)e^{j\omega t}$
境界条件	$p = 0$ or $\mathbf{n} \cdot \nabla p = 0$ on $\partial\Omega$ Sound soft Sound hard
平面波解	$p(x, t) = p^+ e^{j(\omega t - kx)} + p^- e^{j(\omega t + kx)}$
電磁波	
時間領域	周波数領域
$\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \mathbf{E}}{\partial t^2} - \nabla^2 \mathbf{E} = \mathbf{0}$	$\nabla^2 \mathbf{E} + k^2 \mathbf{E} = \mathbf{0}$
$\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \mathbf{H}}{\partial t^2} - \nabla^2 \mathbf{H} = \mathbf{0}$	$\nabla^2 \mathbf{H} + k^2 \mathbf{H} = \mathbf{0}$
	$k \equiv \frac{\omega}{c}$ $c = \sqrt{\frac{\rho_0}{\rho_0}}$ $c = \frac{1}{\sqrt{\epsilon_0 \mu_0}}$

図1 音波と電磁波の基礎方程式

続きはWebで

日本計算工学会誌「計算工学 (Vol.23, No.2)」HP:

<http://www.jsces.org/activity/journal/>

注. COMSOL, COMSOL Multiphysics, COMSOL DesktopおよびLivelinkはCOMSOL ABの商標または登録商標です。その他の製品名、サービス名、組織名は、各組織の商標または登録商標です。なお、本文中に™、®マークは明記していません。本稿の説明は著者独自の考えに基づいており他を代表するものではありません。

図1に示すように音圧の方程式は時間に関する2階微分を含みます。このことは波動にとって重要な事項です。質量-ダンパー-バネ系という機械振動系を思い出すと、質量による慣性項が無視できる場合、系はダンパによる時間1階微分をもつ時間遅れ系となり、指数関数解をもつだけで振動解を持ち得ません。また、時間に関する2階微分によって音波は遅延時間の形で因果律を満たします。そこには有限な伝播速度が存在し、音波は有限な音速で伝わります。

今度は電磁気における有名なマクスウェル方程式を見てみましょう。音圧 p はスカラー量ですが、マクスウェル方程式から導出される電磁波を支配する波動方程式は電場 E と磁場 H に関する各々のベクトル量に関する時間2階微分項を含む方程式となります。図1には真空中の波動方程式を示しています。この場合にも有限な伝播速度が存在し、それは光速になります。

このように式の形は全く同じです。一方で、大きな違いもあります。音圧 p は縦波です。つまり、波の進行方向に振動します。電磁波は横波です。進行方向に垂直な面内で振動しながら進んでいきます。電磁波ではTransverseという用語が良く出てきます。これは横波の特徴を表しています。

1.3 音場計算の実際

では、COMSOL Multiphysicsの係数形式PDE (偏微分方程式) インターフェースを利用して、周波数領域での音波の式を使って平面波の伝播を計算してみましょう。本チュートリアルの第1回目では一般形式PDEを紹介しましたがそこを係数形式PDEに読み替えるだけです。空間次元2Dで係数形式PDEをスタディ：定常で、モデルビルダーに読み込んだ後、係数形式PDEの設定ウィンドウで、拡散係数 c に1、吸収係数 a に $-k^2$ を入力します。波数 k はグローバル定義のパラメタで音速、周波数による算出式を記述しておきます。ジオメトリは矩形とし、幅 L 、高さ H で作成します。ここでの従属変数は u という表式であり、音圧 p に相当します。境界条件は左右の境界を流束境界(ノイマン条件に相当)として、左側境界に $-i*k*(u-2)$ 、右側境界に $-i*k*u$ を設定します。有限要素メッシュは三角形メッシュとし、最大要素サイズを波長 λ の6分の1であるように設定します。波動を計算する場合の重要事項は波長の解像度です。真っ先にこの点を注意してください。仮に、波長の解像度は十分確保されているメッシュ系である場合には、領域内に物体がある場合にはその形状の曲率などを解像できるメッシュであるかを検討することが重要です。メッシュの役目は波動の解像と、物体形状の解像という二つの役目を果たさなければなりません。

いままで見てきた音圧の計算は音源が無いというものでした。実際には音源があります。ここでは、音源の取り扱い方を説明します。

音源には単極音源、二重極音源、四重極音源といったものがあります。単極音源は伸縮する物体が誘起するもの、二重極は2個の単極が近接しているようなもの、

4重極は空気中の渦から放射されるようなものです。

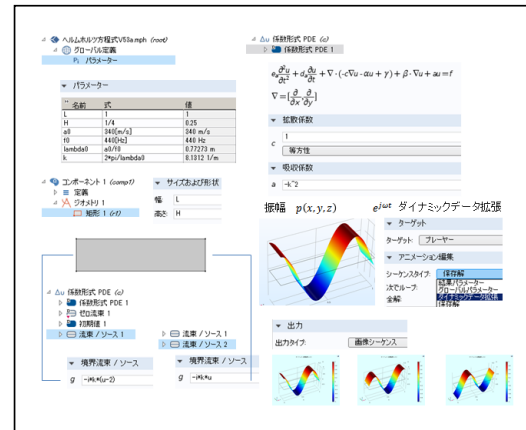


図2 係数形式PDEインターフェースによる音計算

英国の数理科学者であるライトヒルは当時問題であったジェット機の騒音発生機構の検討を依頼され、電車の中で解決法を思いつき、封筒に式を書いたようです。ここでも封筒が活躍しました。この式がライトヒル方程式です。圧縮性流体力学の式を変形して波動方程式を導出し、ヘルムホルツ方程式とのアナロジーからライトヒルテンソルが音源になる、つまり、流れの中に音源があるという類推をしました。ライトヒルが偉大なのはさらにその式から放射音のパワーがジェットノズルの吹き出し速度の8乗に比例するという8乗則を結論し、ジェットエンジンの騒音低減に関する設計指針まで導出した点です。このように、騒音には機械振動による騒音の他に、流体から出る流体騒音があります。吹き出し速度の大きさをマッハ数で表すと、マッハ数が0.2を超えるあたりから放射音のパワーが急に強くなるという実測と一致します。これは4重極音源によるものです。

それでは、実用的な系として、複数のギアで構成される機械振動系から放射される音場の計算を見てみます。これは、COMSOLのもつ応力変位も計算するマルチボディダイナミクスモジュールと圧力音響モジュールを連成させています。皆さんの興味は、音響と構造の連成メカニズムにあると思いますので、その部分を説明します。

ギアの運動は時間依存解析で行います。その部分で機械振動系の音響放射面での時間変位を算出できます。続いて、その時間変位をFFT解析によって周波数領域の振幅表現に変換します。音場は周波数領域で解析されるので、放射面の加速度振幅を音源として利用できます。あとは空気中の音場を解くだけです。結果を図3に示します[1]。

音場の計算は広い空間を計算する場合がありますが、波長の6分の1(2次の形状関数利用時)を満たす解像度を確保するには膨大な計算になる可能性があります。計算量を減らし、いままで困難であった計算を実現するためにCOMSOLでは境界要素法(BEM)を導入

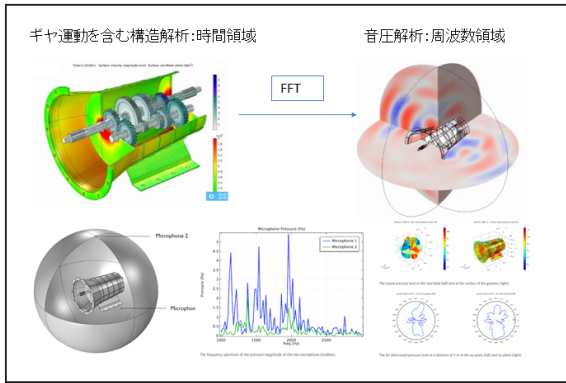


図3 振動系と放射音場の連成解析

し、有限要素法と境界要素法のハイブリッド解析ができます^[2]。一般に計算境界での波の不必要な反射をふせぐために完全整合層(PML)を利用しますが、BEMを利用できる場合であれば代替ができます。さらに周波数の高い音を計算する場合には幾何音響を利用します。COMSOLでは幾何音響は粒子のイメージで音線を追跡する方法を利用できます。

自動車に適用した例を図4に示します^[2]。

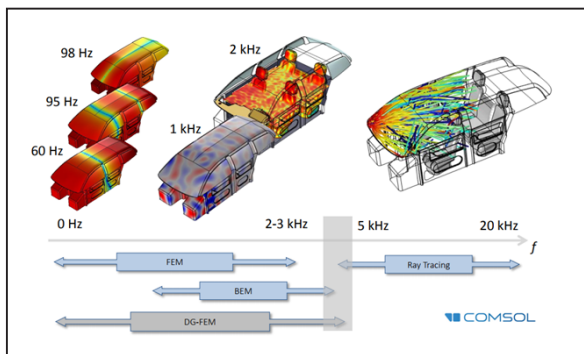


図4 FEM、BEMおよび粒子的手法による音場解析

周波数領域で音波の計算をする上での必須事項はメッシュ寸法の調整による波長の空間解像度の確保になります。波長は周波数が高くなると短縮するので周波数が低い方がメッシュ最大寸法を緩和でき、有限要素法を適用しても計算機のメモリを多く使わずに済みます。周波数が上がってくるとメッシュ最大寸法を小さくしてゆく必要があり、有限要素法では計算しづらくなってきます。不連続ガラキン法を利用すればメモリの使用量が減ります。BEMで計算できる場合には計算法をFEMからBEMに変更します。場を離散化する方法で扱えない場合には幾何音響の考え方に基づいて粒子運動による音線追跡をします。

COMSOL Multiphysicsは図4にあるようにこれらの手法を選択できます。

1.4 まとめ

音場は圧力音響を扱う場合にはスカラーであるので電磁波に比べて取扱いは容易です。一方で、狭い流路を通過する音場では壁境界層における粘性や熱の影響

を考慮する必要もあり、実際の系へ適用する際にはいろいろと注意を払う必要があります。

2 マイクロ波化学へのシミュレーションの適用

2.1 はじめに

マイクロ波化学では、マイクロ波を照射することで、迅速加熱、高効率、高速熱応答、局所もしくは選択加熱、非熱的効果などの現象が報告されています。これらの現象を解明し、劇的に化学反応に必要なエネルギーを削減出来る技術を完成することが求められています。特に、鉄鋼や化学などの素材製造する産業では、大量のエネルギー消費に加え、殆ど、省エネルギーが進んでない現状があります。^[3]

そこで、我々の東工大・和田研究グループでは、マイクロ波化学における物理・化学現象のモデル化を行い、シミュレーションと実験により検証や実証を繰り返し、マイクロ波化学を汎用的な技術として完成させることを目指しています。これまで、マイクロ波による加熱現象について、新しい知見を幾つか発見しました。^[4]その中で、複雑な物理現象を解析できるシミュレーションの役割は大きいですが、シミュレーション上では、実験室で実施する実験をすべての物理を取り込んでいるわけでないことやナノからメータサイズのマルチスケールまで考慮しなければならない課題があります。現実現象がシミュレーションできない場合、全て計算手法により達成できていないものか、マイクロ波による反応促進のような新しい物理現象なのかを区別することが極めて重要です。正確な実験データの取得や、シミュレーションで得られた解析結果を十分に比較しながら、検証を行うことが必要です。本解説では、幾つかのモデルについて解析した例を紹介し、今後のシミュレーションとしての課題について述べます。

2.2 マイクロ波化学における計算手法

解析手法については他の章の先生方にお任せし、今回、COMSOLマルチフィジックスをマイクロ波化学に適用した例を述べます。マイクロ波化学とは、その名前が示すとおり、マイクロ波照射による化学反応プロセスです。

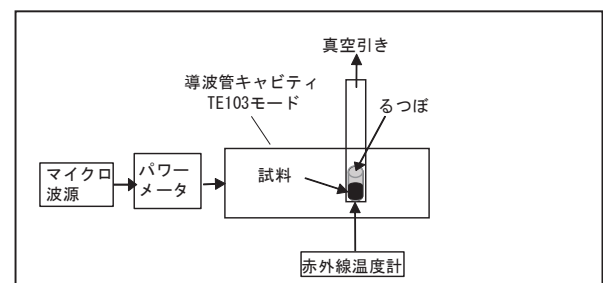


図5 シングルモードキャビティの実験装置

すなわち、支配方程式はマクスウエル方程式と伝熱方程式、材料の温度が決定されると化学反応はアレニウス則の速度方程式に支配されます。電磁場は

マクスウエルの方程式で記述するものの、周波数領域で計算することから、次のように簡略化できます。

$$\nabla \times (\mu^{-1} \nabla \times E) = \frac{\omega^2 \varepsilon}{c^2} \quad (1)$$

ここで、 E は電場、 μ は透磁率、 ε は誘電率、 ω は角速度、 c は光速です。次に、伝熱の方程式は、次のように記述されます。

$$\rho c_0 \frac{\partial T}{\partial t} - \nabla k \nabla T = Q \quad (2)$$

ここで、 ρ は密度、 c_0 は比熱、 k は熱伝達係数、 T は温度、 Q はマイクロ波加熱を扱うことから、

$$Q = \frac{1}{2} \sigma |E|^2 + \pi f \varepsilon_0 \varepsilon_r'' |E|^2 + \pi f \mu_0 \mu_r'' |H|^2 \quad (3)$$

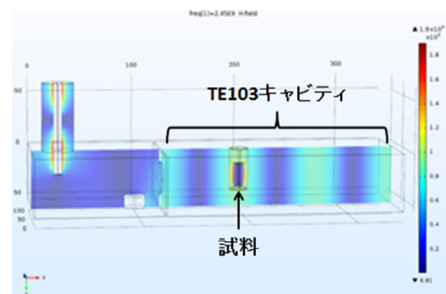
発熱量 Q は材料中の電磁波の損失、 H は磁場です。ここで、幸いなことに、マイクロ波は光速であることから、周囲の境界条件をマイクロ波は一瞬にて感じ取り、反応場が形成されます。一方、伝熱に関しては、大きさにもよるものの、今、扱う大きさとしては、秒単位以上の遷移状態を知りたい場合が殆どです。以上のことから、材料の温度変化による誘電率や導電率などの物性定数の変化がない場合、電磁波及び伝熱の支配方程式を別々に解き、解を求めます。それらが変化する場合には前述したように支配方程式の時間スケールが異なることから、一旦、伝熱計算まで求めたのち、再度、電磁波の方程式を解くことで、マルチフィジックスシミュレータとして収束させることが可能です。これ以外にも、例えば、電子レンジのように、マイクロ波を拡散・均一照射させるために、ターンテーブルやスタラファンがある場合、有限要素法ではそもそもメッシュが変わってしまう問題があり、小さい変化だと変形メッシュで対応できるものの、大きく形状が変化すると変形メッシュでは対応できなくなります。しかし、この場合も光速で電磁場の反応場が形成される現象と機械が動きの速度差から、統計力学の考え方であるエルゴードの仮説を適用し、時間による形状変化は場合の数(状態数)で置き換え、各状態をそれぞれ計算し、それらを平均すれば良いことになります。この手法は、パソコンの計算速度が劇的に向上したことで可能となったものであり、数十年前では考えられなかったものです。

2.3 解析の事例紹介

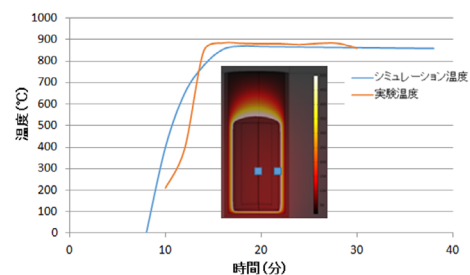
マイクロ波照射の事例について2つ紹介します。1つ目はシングルモードキャビティを用い、電磁場と伝熱のマルチフィジックスシミュレーションを行った例です。この実験では、マイクロ波照射下によりフッ化スカンジウムをカーボンにより還元する実験を行いました。従来法では、フッ化スカンジウムは、カルシウム金属を使って凡そ1600℃の反応温度により還元が実施されています。我々の試みた還元技術では、還元材をカルシウムから扱いやすいカーボンに変更し、マイクロ波照射下において反応温度850℃にて還元が出来る

という画期的なものです。^[5]まず、図5のシングルモードの実験設備に示す通り、反応温度はアルミナ製のつぼの表面温度から推測するしかなく、次の疑念が生じます。真空雰囲気下で断熱状態にあるものの、試料の内部温度は違うのではないかとこの点があります。この試料の内部温度を確からしい理由で推定するために、マルチフィジックスシミュレーションを行いました。その結果を図6に示します。図6(a)に示すとおり、試料はキャビティ中の磁場が最も強いところに置かれていること、また、図6(b)からは、マイクロ波照射中の温度変化について、実測とシミュレーション結果について、立上りについては、やや不一致が見られるものの、マイクロ波照射後、約17分前後で試料温度が飽和していること、また、試料内部とるつぼ温度を計算した結果を示しているものの、差がないためグラフが重なっており、シミュレーションの結果ではるつぼ側壁と試料内部の温度の差は殆どないことが示されました。つまり、従来法では、1600℃で還元をおこなっていたものが、マイクロ波照射では安い還元材のカーボンを使って約半分に近い850℃で還元が出来ることが示されました。

2つ目の事例として、マルチモードキャビティにて、電磁場照射中に電磁波を拡散させる目的で導入されているスタラファンの回転を組み込んだ計算について示します。前述の例では、マイクロ波による還元反応が非常にうまく行った例を示しました。しかしながら、還元した材料は1g未満です。キャビティも小さいことから、実用化には程遠い。そこで、図7に示すマルチモードキャビティを使って少し大きい実験装置の場合について示します。ここでの解析の目的は、実際に試



(a) キャビティ内の磁場分布



(b) 試料内部の温度変化

図6 シミュレーション結果

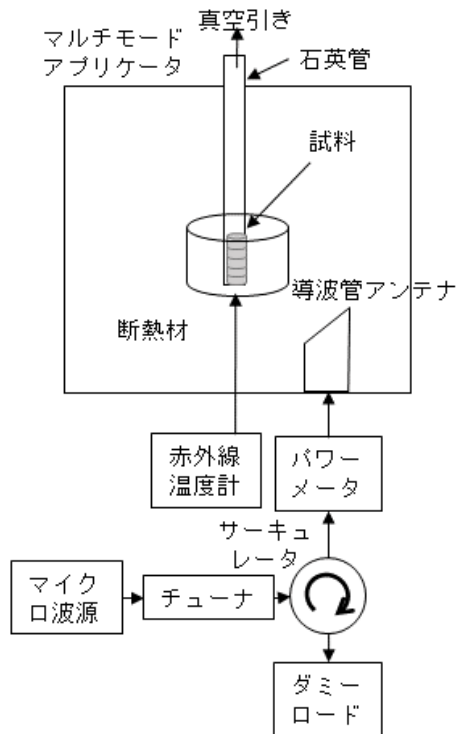


図7 マルチモードキャビティの実験装置

料は均一に電磁波が照射されているかどうかです。結局、平均的に試料に偏りなく照射されていることを確認し、さらには、反応温度を知りたいことが、解析のポイントです。そこで、前節で述べたように、スタラファンという構造体が回転するため、スタラファンの回転状態を細かく分け、それぞれについて計算し、それらの平均を取れば解が得られると考えました。どのくらい細かく分けるのかは、例えば、細分化の指標は平均した電場強度が飽和したところになります。その結果を図8に示します。結果のとおり、状態数が9くらいでよいことになります。状態数9は回転体を 10° ずつ計算してそれを平均化しました。

2.4 まとめ

簡単ではあるものの、COMSOL マルチフィジックスによるシミュレーションを使い、マイクロ波化学における問題について解析を行った例について紹介しました。ICT技術の劇的な進展より、過去モデルが複雑すぎて解析できないものが簡単に出来るようになってきました。適切にツールを使い、現象との比較から新しい発見が見つかる可能性が十分にあると考えています。

3 電磁界シミュレーターを上手く使いこなす

3.1 はじめに

コンピュータの性能が劇的に向上し、現在シミュレーションはあらゆる分野で実用的になっています。支配方程式としてマクスウェルの方程式を扱う電磁界分野においても同様であり、電磁界シミュレーターは高周波回路やアンテナ等の素子設計に必要な不可欠となっ

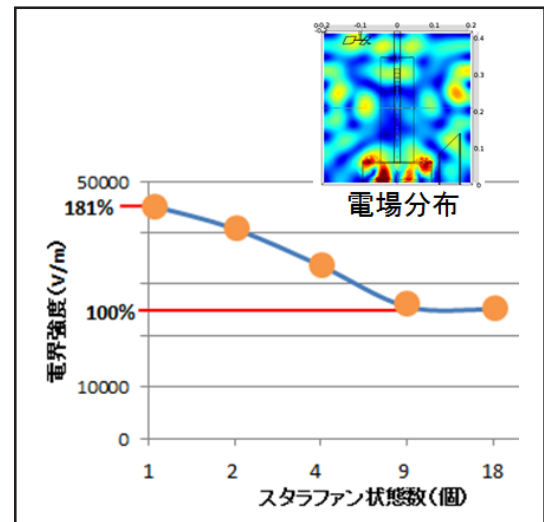


図8 試料近傍の電場強度とスタラファン状態数

ています。

本稿では、電磁界シミュレーターを上手く使いこなすために必要な知識と技術について解説します。電磁界シミュレーターで使われる電磁界解析手法にもいくつかあり、それらの違いについて説明することは紙面の都合上不可能なので、電磁界解析手法として有限要素法を用いたシミュレーターの使い方について説明します。

3.2 電磁界シミュレーターの発展と有限要素法解析の特徴

電磁界解析法の代表的なものとして、本稿で取り上げる有限要素法 (FEM; Finite Element Method) の他に、モーメント法 (MoM; Method of Moments) および FDTD 法 (Finite Element Time Domain Method) があります。FEM、MoM は周波数領域の解析法、FDTD 法は時間領域の解析法です。FDTD 法ではメッシュを自在に切ることができませんが、FEM、MoM は自在に切れます。また、FEM、MoM ともに行列方程式を解く問題に帰着されます (陰解法と呼びます。対して FDTD は陽解法です)。MoM では媒質境界のみに未知数を配置すればよいですが密行列になり、FEM は空間全体に未知数を配置する必要がありますが、疎行列が得られるという違いがあります。与えられた問題により、FEM、MoM、FDTD のどれが適しているか違いが生じる場合もありますが、一般的にどの解析方法が優れていると判断することは難しいです。FEM では導波路ポート (導波路モードを出入力とする励振方法) の解析が先行して研究されていたことがあり、FEM シミュレーターでは導波路ポートのサポートが充実しています。

3.3 電磁界シミュレーターを使いこなすための知識について

電磁界シミュレーターを使いこなすために、電磁界シミュレーターの原理を理解している必要があるかという質問に対し、少し前であれば基礎をしっかり勉強する必要があるという意見が大半でありました。しかし、

電卓を使うのにブール代数と論理回路のロジックを理解している人はどれだけいるでしょうか。この問題を考えても、内部の原理を知らず、ツール(シミュレータ)の内部はブラックボックスであっても上手く使える可能性があるのではないのでしょうか。ただし、上手く使うためには最低限の知識も必要となります。電卓の例を見るならば、電卓というツール自体はブラックボックスであっても、時間をかければ筆算をして結果を検証する能力をユーザーは持っていなけりょうまく使えないでしょう。電磁界シミュレータを電卓と対比させるならば、扱う問題が異なるために多少考慮しなければならないことも増えます。この点について、3.4節で述べます。また、電卓と同様に、結果に対して検証が行える必要もあり、そのためには解析的に解ける、あるいは実験の精度が保証されている問題(規範問題)の結果と比較することは有効な手段です^[6,7]。

3.4 電磁界シミュレーションにおける準備とモデル化

次のことに注意してシミュレーションの準備およびモデル化を行うことをお勧めします。

3.4.1 時間領域と周波数領域

シミュレータの種類(解析手法)によって、時間領域あるいは周波数領域のどちらの解析を行うか選択することになります。時間波形と周波数はフーリエ変換で関係づけられているので、理論的にはどちらの情報も得られますが、現実問題としては計算時間に差が出てきます。例えば、広帯域な信号を扱いたい場合は、周波数領域の解析で多くの周波数での解析を行うよりも、パルス波形を入力して出力波形をフーリエ変換する時間領域の解析法を用いた方が計算時間は短くて済みます。狭帯域で良い場合は逆に周波数領域の方が計算時間が短くて済みます。広帯域信号を扱う場合かそうでないかによって使い分けるのが良いと考えます。

3.4.2 解析の種類

電磁界シミュレーションというと、どこかで励振してどのように電磁波が広がっていくかをシミュレーションすることを想像すると思います。しかし、解析にも次のようにいくつかの種類があります。

- 励振問題
- 非励振問題(励振波源がない問題。固有値問題に帰着される)
 - ▶ 導波路モードの解析(2次元問題)
 - ▶ 共振器の共振モードの解析(3次元問題)

どの解析を行っているのか、明確に把握しておく必要があります。多くのシミュレータでは特に指定しない場合、よく使われる「励振問題」をデフォルトとしていることが多いです。

3.4.3 モデル化(境界条件、励振モデル)

アンテナからの放射を考えた場合、電磁波は広い外部空間まで飛んでいきます。FEMなどの有限領域の解

析に帰着せざるを得ない電磁界シミュレータでどのようにモデル化すればよいか、実際にモデル化を始めると思悩むと思います。また、実際のアンテナの励振部はケーブルで給電していますが、どの部分で打ち切って、どのようにモデル化すべきか悩むと思います。これに関しては、実際の測定と比較することを考えますと、Sパラメータの測定ではネットワークアナライザの校正について理解し、対応させたモデル化を行う必要があります。導波路ポートで励振すると、導波路の途中で校正した測定値と直接比較できるSパラメータが得られます。

3.4.4 規範問題を用いた解析例

図9に導波管スロットアンテナ^[7]のCOMSOL Multiphysicsでの解析例を示します。方形導波管の上壁からグラウンド板まで長方形スロットが開いており、外部空間に放射する構造となっています。この問題を例として解析の手順について説明します。

まずはモデル化です。FEMでは解析空間を3次元物体の組み合わせ(結合、切抜きなどの論理演算も可能)で作成します。デフォルトでは物体の周囲境界は電気壁(PEC; Perfect Electric Conductor)となっています。物体の内部の媒質を設定します。物体は完全に他の物体の内部に入れることができ、その場合、内部の物体の媒質定数が優先されます。そして、内部物体の周囲境界のPECは除去され、外部の媒質との境界となります。物体同士を接するように配置した場合は、接した面のPECは除去され、接した2つの媒質境界となります。このようにして、図9の導波管スロットアンテナは3つの直方体(Box1~Box3)で組み立てられます。この問題ではBox1~Box3の媒質は空気(Air)に設定しています。そして、次に境界条件の設定です。デフォルトでは周囲境界はPECなので、そうでない境界を上書き指定する必要があります。外部領域(Box3)の下面以外の境界を吸収境界条件(COMSOLでは散乱境界条件と呼ばれる)に設定します。完全整合層(PML; Perfectly Matched Layer)という、より高性能な吸収境界条件も

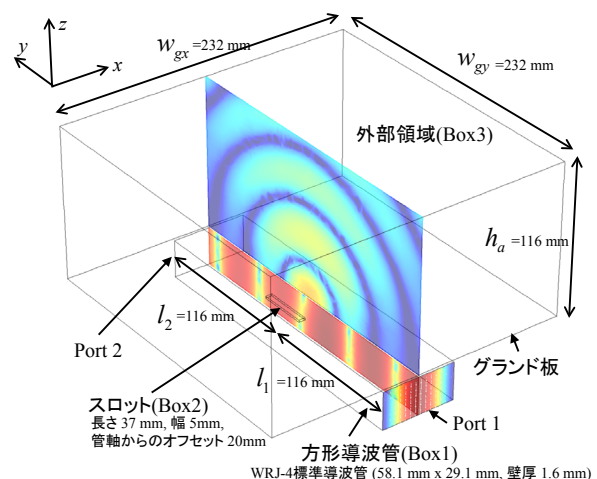


図9 導波管スロットアンテナの解析例(4 GHz)

ありますが、後で目的を述べますように、今回はどちらを用いても結果に大きな違いはありません(大きな違いにならないようにモデル化を工夫します)。次に、励振波源の設定として方形導波管(Box1)の前後2面をポート(Port)に設定します。各Portからは基本モードのTE₁₀モードで励振します。ポートは無限に長い導波路を模擬するのでポートから外に進行する波は無反射となるように動作します。これで、媒質および解析空間の境界条件全体の境界条件の設定が完了しました。図9中のBox3のサイズは解析の都合上有限サイズに打ち切ったものであり、サイズは大きいほど実験環境に近いですが、大きすぎると計算に時間がかかります。目的は広い空間を模擬し、スロットから放射された電磁波を吸収境界壁で吸収することなので w_{gx} 、 w_{gy} 、 h_a をスロット放射部からある程度(指標として、散乱部から1/2波長以上)大きくすれば放射電磁界は吸収境界条件に垂直に近い角度で入射するようになって吸収特性は良くなり、Sパラメータは十分収束します。同様に、ポートも無限に長い線路を模擬して吸収する必要があるため、スロットのある散乱部(不連続部)で生じた高次モードが十分減衰するように l_1 、 l_2 を大きくしてある程度離す(指標として、基本モードの1/2管内波長以上)必要があります。最後に、解析周波数範囲を設定して解析します。FEMシミュレータは内部で細かいメッシュを切り、解析を行います。得られたSパラメータをプロットすると図10のようになります。MoMは著者のモーメント法解析の結果であり、両者はよく一致しています。実験との一致を確認する前に、前述したように w_{gx} 、 w_{gy} 、 h_a 、 l_1 、 l_2 を大きくし、かつメッシュ分割も変えて収束が十分であることを確認すると安心です。また、図9のように電磁界の瞬時値分布を見たり、アニメーションを描いて吸収していることを確認することも検証のために有効な手段です。種々の規範問題のモデル化の詳細およびシミュレータのファイルの例は[8]でダウンロードすることができます。

3.5 まとめ

電磁界シミュレーションを使いこなすための知識に

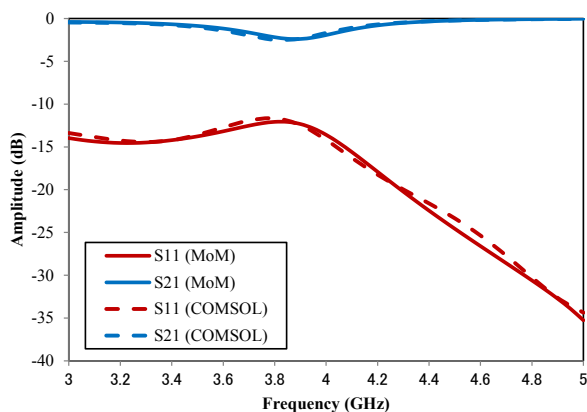


図10 導波管スロットアンテナの反射係数 S_{11} と透過係数 S_{21} の振幅の周波数特性

ついて、境界条件と励振モデルが重要であり、有限空間による打ち切りの影響について導波管スロットアンテナを例として説明しました。また、結果を検証するための規範問題について紹介しました。

4 光領域、非線形光学のシミュレーションへの適用

4.1 はじめに

情報通信量の増大に伴い、通信速度のより高速化・広帯域化が求められており、応答速度が1ps以下の超高速な光デバイスの研究が行われています。我々、千葉大・坂東研究グループでは、電子デバイスの応答速度の限界を超えるべく、電気信号を使用せず光信号を光信号のままスイッチングする全光スイッチの研究を行っており、この原理として2光子吸収の利用を検討しています^[9, 10]。2光子吸収は、3次の非線形光学現象であり、光強度が強くなると物質の光吸収係数が増大し透過光強度が低下する物理現象です。そのため、2光子吸収効率のよい物質やデバイス構造を利用することにより、光信号の遮断・通過を光強度の強い制御光にて制御できます。当研究室では、半導体を結晶成長しそれらを半導体プロセスにて導波路形状などに加工した試料について、2光子吸収特性を測定し、3次非線形感受率テンソル $\chi^{(3)}$ を求めています。しかしこれらの測定には、フェムト秒レーザーをレンズで集光した光を使用するため、光強度が空間的にも時間的にも変化し、さらに2光子吸収を生じながらの光伝搬するため、厚膜試料に適用できる解析式がありません。そのため我々は、実験データから $\chi^{(3)}$ を求めるために、いくつかの仮定をいれた伝搬モデルを考案し定式化することにより求めています。そこで、求めた $\chi^{(3)}$ の値を使ってシミュレーションし実験結果と比較検討することで、提唱モデルや得られた $\chi^{(3)}$ 値、実験方法などの妥当性の検討を行う必要があります。以下に、我々が検討した例を紹介します。

4.2 2光子吸収の計算手法

光と物質の相互作用や物質中の光伝搬はマクスウェル方程式にて記述できるが、今回の場合、主に2つの注意すべき点があります。1つは光伝搬距離の長さであり、もう1つは非線形光学の記述です。

光領域のシミュレーション、特に光伝搬に関するシミュレーションで問題となるのが、屈折率 n の物質中での波長 $\lambda = \lambda_0 / n$ ($\sim 0.1 - 0.5 \mu\text{m}$)とモデル系サイズ L ($> \sim 100 \mu\text{m}$)が大きく異なることです。光の位相情報を考慮して計算するには、有限要素法では各場所での波長の1/6以下にメッシュサイズを設定しなければ正しく計算出来ないが、それに比べて L が大きすぎるため、必要となるメモリ量が膨大になります。しかしながら、今回対象としているような系では、光強度の変化は伝搬方向に対しては非常に緩やかです。このような場合には、COMSOL Multiphysicsの波動光学モジュールに用意されているBeam envelopeインターフェイスの使用が有効で

す。これは、 x 方向に伝搬している電界 $E(x)$ を、エンベロープ関数 $E_1(x)$ とフェイザ $\exp(-jk_1x)$ にて、例えば $E(x) = (0, 0, E_1(x) \cdot \exp(-jk_1x))$ と表し、 $E_1(x)$ について計算を行うものです。この手法により、伝搬方向のメッシュサイズは $E_1(x)$ の変化に合わせた程度でよくなるため、計算時間と使用メモリの大幅な低減ができます。

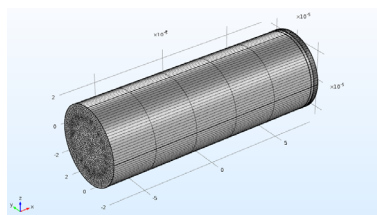
次に、2光子吸収は3次の非線形光学現象であるため、通常のマクスウェル方程式に非線形項を追記しなければならないが、COMSOL Multiphysicsでは、そのようなユーザー独自による式の変更などが簡単にできます。非線形光学現象は、分極 P に非線形分極 P^{NL} 成分が生じることであり、2光子吸収などの3次非線形分極は、1光束のみを使用する場合には、

$$P_i^{NL} = \frac{\epsilon_0}{4} \sum_{ijkl} \chi_{ijkl}^{(3)}(\omega; -\omega, \omega, \omega) \cdot E_j^*(\omega, \mathbf{k}) E_k(\omega, \mathbf{k}) E_l(\omega, \mathbf{k})$$

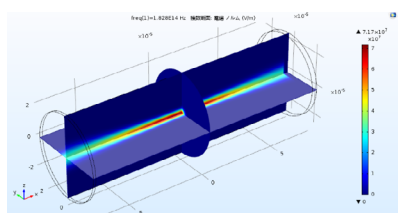
と表されます。ここで、 $\chi_{ijkl}^{(3)}$ は3次非線形感受率テンソル、 $i, j, k, l = a, b, c$ (結晶軸方向)です。COMSOLでは、 P^{NL} をユーザーが独自定義し、通常電束密度 $D = \epsilon_0 E + P$ を $D = \epsilon_0 E + P^L + P^{NL}$ となるよう追記します。なお、試料の座標系として結晶方位に合わせた第2座標軸を定義し、電界や分極などの各成分や計算についてはグローバル座標系 (x, y, z) と第2座標系 (a, b, c) の変換を行う必要があります。

4.3 解析の事例紹介

最初に、光吸収のない場合のガウスビームの伝搬をシミュレートしました。ガウスビームは、伝搬方向に垂直な面内の電界強度(光強度)分布がガウシアンになっている光であり、レーリー長と呼ばれる長さを指標とした伝搬距離に応じてそのビーム径やピーク強度が変化します。実験で使用する凸レンズによる集光レーザーはこのような光になっています。図11に、計算に使用した(a)モデル(メッシュ)と(b)計算結果を示します。波長 $\lambda_0 = 1.64 \mu\text{m}$ 、屈折率 $n = 3.14$ 、試料長 $L = 150 \mu\text{m}$ 、試料径 $44 \mu\text{m}$ 、スポット径 $2w_0 = 5 \mu\text{m}$ ϕ



(a)シミュレーションモデル(メッシュ)



(b)シミュレーション結果

図11 ガウスビームの伝搬シミュレーション例

(レーリー長 $11.972 \mu\text{m}$)であり、出射面(右端)はPMLにて終端しています。計算結果は、電解強度やビーム径がガウスビームの理論式通りに変化していることを確認しました。図11より分かるように、面内のメッシュサイズは、 λ_0/n に対応して細かく設定しなければならないが、Beam envelope インターフェイスを使用しているため、伝搬方向は5分割($30 \mu\text{m}$ ごと)でもガウスビームの挙動が計算出来ていることが分かります。

次に、2光子吸収係数 $\beta = 25 \text{ cm/GW}$ となる $\chi_{ijl}^{(3)}$ を設定し、入射ガウスビームのビームウェスト位置(集光位置) x_1 に対する光透過率を計算した結果を、図12に示します。これは、実際のZ-scan測定に対応するものであり、この結果を我々の解析式にてフィッティングすることで β を求めています。今回、シミュレーション結果をフィッティングすることで β_{fit} を求め、設定値 β と比較しました。図12から分かるように、シミュレーション結果は我々の解析式にて非常によくフィッティングされており、 β と β_{fit} の値も相対誤差3.98%にて一致しています。この誤差の原因は解析モデルの仮定に含まれる誤差と考えられるが、今回の結果は、現実的な β 値に対して、厚膜試料における光伝搬モデルの仮定および導出された解析式は概ね正しいことを示していると考えられます。

最後に、InP基板において(a)[100]方向、(b)[110]方向にガウスビームを伝搬させ、入射光の直線偏光方向を0度から90度まで変えたときの、 β の偏光方向依存性の結果を、図13に示します。測定結果は実際の試料で測定された結果であり、シミュレーションは別実験にて研究室で測定された $\chi^{(3)}$ の値^[11]を使用して計算した結果です。 β_0 は、Dvorakら^[12]による β の理論式に今回の実験条件および $\chi^{(3)}$ の値^[11]を適用した結果です。いずれの結果も、調整パラメータは何もなく結果をそのままプロットしたものです。どちらの伝搬方向でも、シミュレーション結果と理論式による β_0 、実際の測定結果が非常によく一致していることが分かります。

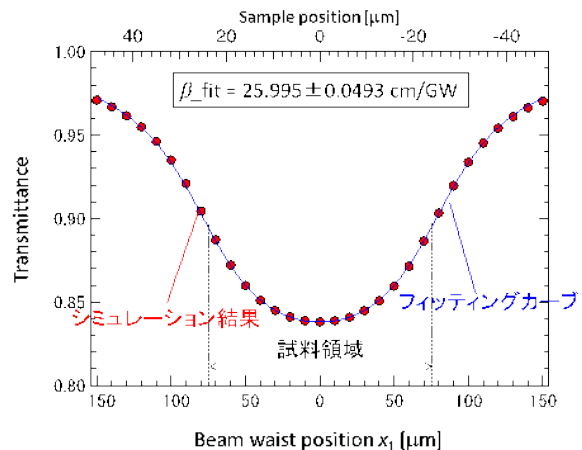


図12 透過率のビームウェスト位置依存線(Z-scanシミュレーション)

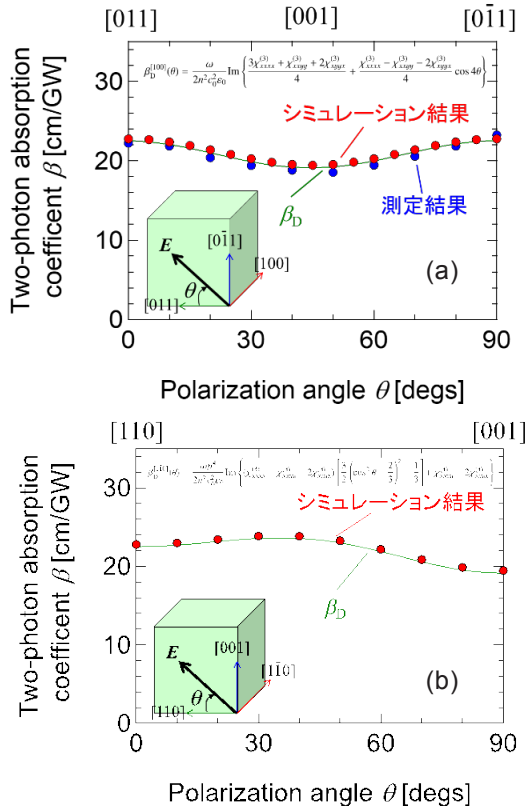


図13 2光子吸収係数 β の偏光方向依存性。
(a)[100]方向伝搬、(b)[110]方向伝搬

4.4 まとめ

簡単ではあるが、COMSOL Multiphysicsによる2光子吸収を生じる場合の光伝搬シミュレーションの方法とそれらの結果を紹介しました。これらの結果は、実際の測定結果や理論式と非常に良く一致することを紹介しました。これらは、シミュレーション方法や実験方法、得られた $\chi^{(3)}$ の値、仮定した伝搬状態や導出した解析式など、いずれもが矛盾ないことを意味していると考えられます。今後は、導波路構造などデバイス形状にてシミュレーションを行い、デバイス設計などへの利用も期待されます。

参考文献

- [1] <https://www.comsol.jp/blogs/how-to-model-gearbox-vibration-and-noise-in-comsol-multiphysics/>
- [2] http://www.aes.org/conferences/2017/automotive/downloads/AES_Modeling_Car_Cabin_Acoustics_2017.pdf
- [3] 経済産業省資源エネルギー庁、平成25年度エネルギーに関する年次報告(エネルギー白書2014)
- [4] Y. Wada, S. Fujii, E. Suzuki, M. M. Maitani, S. Tsubaki, S. Chonan, M. Fukui, & N. Inazu, "Smelting Magnesium Metal using a Microwave Pidgeon Method," Scientific Reports, 7, 46512; doi:10.1038/srep46512(2017)
- [5] S. Fujii, S. Tsubaki, E. Suzuki, S. Chonan M. Fukui, and Y. Wada, "Study on Metal Refining Process of Sc metal using by Microwave Irradiation", Progress in Electromagnetic Research Symposium (PIERS), pp. 4203-4203 (2016)
- [6] 平野拓一、"電磁界シミュレータ利用の勘所"、電子情報通信学会誌、小特集 電磁界シミュレーション技術の進展、Vol.100, No.5, pp.342-348, 2017年5月
- [7] http://www.ieice.org/es/est/activities/canonical_problems/
- [8] http://www.takuichi.net/em_analysis/canonical/
- [9] T. Matsusue, H. Bando, S. Fujita and Y. Takayama, "Polarization dependence of two-photon absorption coefficient and nonlinear susceptibility tensor in InP", Phys. Status Solidi C, 7, pp. 387-389 (2011).
- [10] M. Oishi, T. Shinozaki, H. Hara, K. Yamamoto, T. Matsusue and H. Bando, "Measurement of polarization dependence of two-photon absorption coefficient in InP using extended Z-scan technique for thick materials", Jpn. J. Appl. Phys., 57, 030306, (2018); doi: 10.7567/JJAP.57.030306
- [11] 原皓、坂東弘之、篠崎智文、大石真樹、松末俊夫、「1光束楕円偏光を用いたZ-scan法による3次非線形感受率テンソルの虚部の測定」、第75回応用物理学会春季学術講演会、19a-A26-10、(2014).
- [12] M. D. Dvorak et al., "Measurement of the anisotropy of two-photon absorption coefficients in zincblende semiconductors", IEEE J. Quantum Electron, 30, pp. 256-268 (1994).