

Pythonを使った 光電磁場解析

博士(工学) 梶川浩太郎 共著
工学博士 岡本 隆之

コロナ社

ま え が き

微小な構造をもつ物質の光学応答を議論する際には、しばしば電磁場解析が必要となる。その原理は光学の教科書に記されているが、実際にそれを計算したり、可視化する際には、多くの場合に計算機を用いる必要がある。この計算には、これまで Fortran や BASIC, C 言語が用いられてきたが、プログラミングに慣れるまでは相当の時間を要していた。Mathematica を用いた電磁場解析は、見通しのよいプログラミングが可能であり、少ない労力で多くの知見を与えてくれるが、高価なソフトウェアであり、誰もが利用できるわけではない。

本書で用いるコンピュータ言語である Python は、プログラムコードの記述性がよく、誰でも見通しのよいプログラムを書くことができる（ことになっている）。また、科学技術計算用のさまざまな関数や解析結果の可視化のためのツールなど、多くのライブラリーが充実しており、利用することができる。また、機械学習や統計の分野でも広く用いられているため、インターネット上には情報が豊富に存在する。そして、多くの場合には十分な計算速度を提供してくれる。著者らのようなプログラミングの専門家ではないが、光学実験の解釈や光学構造の設計において、計算機の利用が必要な研究者には適した言語である。そしてなによりも、オープンソースであり、さまざまなプラットフォームで—Linux でも Windows でも、そして Mac OS でも—無料で自由に用いることができる。

本書では、Python を使ったプログラム例を挙げながら、微小な構造や系の光学応答を計算したり、可視化する手法について述べた。言語の仕様を知ることから実際にプログラミングすることの間に生じる「隙間」を埋めることを目的とした。掲載したプログラム例は最適なものではないかもしれないが、背景にある電磁界解析をわかりやすく解説して、それをプログラムに翻訳し、実際

の研究現場で役に立つ内容にしたつもりである。

解析的な計算に関する部分である 1～4 章と 7 章は梶川が、数値計算に関する部分である 5 章と 6 章を岡本が担当した。解析的な計算も数値計算もそれぞれ長所と短所があり、場合によって使い分けることが重要である。今後、本書を基にこの分野で新しい知見が得られることを期待したい。

なお、Python にはバージョン 2 とバージョン 3 があるが、本書に掲載したプログラムはすべてバージョン 3 に準拠している。また、プログラムコードは、コロナ社 Web ページの本書の紹介ページである、以下の URL からダウンロードできる（プログラムの使用については各自の責任で行うこと）。

<http://www.coronasha.co.jp/np/isbn/97843339009262/>

2019 年 6 月

梶川浩太郎，岡本隆之

目 次

1. 反射率や透過率の計算

1.1 電磁波としての光	1
1.2 反 射 と 屈 折	3
1.3 薄膜の反射と透過	12
1.4 等方性媒質の伝搬行列法	16
1.5 異方性媒質の伝搬行列法	21
1.5.1 固有伝搬モードと境界条件	21
1.5.2 異方性媒質の伝搬行列法	24
1.5.3 応用例 (ハイパボリックメタマテリアル)	27
引用・参考文献	36

2. 球の電磁場解析

2.1 理 論	38
2.1.1 長波長近似	38
2.1.2 遅延を取り入れた球の計算	39
2.1.3 コアシェル構造 (遅延を考慮しない場合)	41
2.1.4 コアシェル構造 (遅延を考慮する場合)	42
2.2 プログラミング	44
2.2.1 長波長近似	44
2.2.2 遅延を考えた球の計算	48
2.2.3 コアシェル構造	50

引用・参考文献	55
---------	----

3. 円柱の電磁場解析

3.1 長波長近似	56
3.2 遅延を取り入れた計算	57
3.2.1 円柱構造	57
3.2.2 コアシェル構造	59
3.3 プログラミング	61
3.3.1 円柱構造	61
3.3.2 コアシェル構造	63
引用・参考文献	68

4. その他の形状の解析的な計算

4.1 回転楕円体	69
4.2 基板上の球	73
4.3 2 連球	79
4.4 基板上の切断球	81
引用・参考文献	86

5. RCWA (厳密結合波解析) 法

5.1 基本理論	88
5.1.1 TE偏光の場合	89
5.1.2 TM偏光の場合	93
5.1.3 正しいフーリエ級数表記	97
5.2 S 行列法	100

5.2.1	T 行列, S 行列, R 行列	100
5.2.2	S 行列法	101
5.2.3	T 行列を経由しない方法	107
5.2.4	入射場, 反射場, 透過場との関係	109
5.2.5	格子領域における場	111
5.2.6	S 行列の入射側からの再帰的計算法	113
5.3	2次元格子	114
5.3.1	直交座標系における2次元格子	115
5.3.2	収束性の向上	122
5.3.3	斜交座標系における2次元格子	126
5.4	RCWA法の限界	132
5.5	プログラムコードの例	132
	引用・参考文献	134

6. FDTD 法

6.1	離散化と時間発展	136
6.1.1	計算機上では	140
6.1.2	セルサイズと時間ステップ	142
6.1.3	物体の Yee 格子への配置	143
6.1.4	完全電気導体と完全磁気導体	145
6.1.5	系の対称性を用いた計算量の低減	146
6.2	分散性媒質	149
6.2.1	ドローデ分散	149
6.2.2	ローレンツ分散	154
6.3	PML吸収境界	157
6.3.1	Split-Field PML	157
6.3.2	Un-Split PML	164

6.3.3	CPML	166
6.3.4	PML におけるパラメータ	172
6.4	波 源	174
6.4.1	双極子波源	174
6.4.2	TF/SF 法	175
6.4.3	TF/SF 境界を分散性媒質が横切る場合	182
6.4.4	数値分散の影響	183
6.4.5	斜入射平面波	185
6.4.6	励振波形	191
6.4.7	周波数解析	193
6.4.8	周期境界の下での斜入射	195
6.5	近接場から遠方場への変換	196
6.6	後 計 算	205
6.6.1	散乱, 吸収, 消衰断面積	205
6.6.2	吸 収 分 布	209
6.6.3	電荷密度分布	209
6.6.4	緩和調和振動の振幅と位相	210
6.7	局在表面プラズモン共鳴の計算例	214
6.8	サンプルプログラム	223
	引用・参考文献	224

7. DDA (離散双極子近似)

7.1	DDA の 原 理	228
7.2	DDSCAT の使い方の実際	230
7.3	DDSCAT のためのプログラム	232
	引用・参考文献	236

付 録	237
A.1 表面プラズモン共鳴のプログラム	237
A.2 多層 EMA の計算プログラム	238
A.3 2 連球の光学応答の計算プログラム	244
A.4 切断球の光学応答の計算プログラム	246
A.5 RCWA 法の計算プログラム	252
A.6 FDTD 法の計算プログラム	256
A.7 形状を可視化するプログラム (DDSCAT 用)	288
索 引	290

反射率や透過率の計算

光を媒質に入射した際の反射率や透過率の計算は、光学のみならず物理や化学、生物学、材料科学や電子工学などの幅広い分野で利用される。例えば、薄膜の厚さの測定や顕微鏡像の解析などで利用される。本章では、光の透過と反射について、Python を用いたプログラミングと計算の実際について述べる。

1.1 電磁波としての光

準備として電磁波としての光について簡単に紹介する^{†1}。光は粒子としての性質と波としての性質の両方を併せもつ。反射や透過、散乱などを考える際には波として考える。この場合、光はラジオ波などと同じような電磁波の一種である。真空中の波長 λ_0 と振動数 ν には以下のような関係がある。

$$\lambda_0 = \frac{c}{\nu} \quad (1.1)$$

ここで、 c は真空中の光速である。波の位相速度を決める屈折率 n は最も基本的な光学定数である。光が屈折率 n の媒質中を進む場合には、波長 λ は λ_0 に対して屈折率 n の分だけ変わり

$$\lambda = \frac{\lambda_0}{n} = \frac{c}{n\nu} \quad (1.2)$$

となる。また、屈折率 n は媒質の誘電率 ε と $n = \sqrt{\varepsilon}$ の関係がある^{†2}。

^{†1} この分野の教科書を章末の引用・参考文献1)~10)に挙げる。

^{†2} 本書では単に「誘電率」と記す場合には、比誘電率を指すことにする。透磁率に関して同様である。

2 1. 反射率や透過率の計算

振動数 ν の代わりに、 2π を乗じた角振動数 ω がよく用いられる。角振動数 ω は、長さ 2π 当りの波の数を表す波数 k ($= 2\pi/\lambda$) に対応する。波数ベクトル \mathbf{k} は、大きさが波数 k で向きが波面の進む方向のベクトルである。光の運動量ベクトル \mathbf{p} に関連した量であり、プランク定数を 2π で割った量 \hbar を使うと $\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}$ の関係がある。一方、角振動数 ω は、光のエネルギー U に関連した量であり、 $U = \hbar\omega$ の関係がある。 ω と k の関係を分散関係という。境界をもたない屈折率 n の媒質中（自由空間）を伝搬する光には、 $k = nk_0 = n(\omega/c)$ の関係があるが、導波路やフォトニック結晶、表面などの境界のある構造中を伝搬する場合には分散関係は複雑になる。ここで、 k_0 は真空中の波数であり、 $k_0 = \omega/c$ である。

さて、波数ベクトル \mathbf{k} の光が屈折率 n の均一な媒質中を伝搬する場合を考える。位置 \mathbf{r} における自由空間中を伝搬する電磁波の電場 \mathbf{E} は以下のように表される。

$$\mathbf{E} = \mathbf{E}_0 \exp[i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)] \quad (1.3)$$

電場 \mathbf{E} の状態や方向を偏光と呼ぶ。自由空間中では電場 \mathbf{E} に対して垂直方向に磁場 \mathbf{H} が存在する。磁場もベクトルであり、電場 \mathbf{E} との間には以下の関係がある。

$$\mathbf{H} = \frac{\mathbf{k} \times \mathbf{E}}{\mu_0 \mu \omega} \quad (1.4)$$

$$\mathbf{E} = -\frac{\mathbf{k} \times \mathbf{H}}{\varepsilon_0 \varepsilon \omega} \quad (1.5)$$

ここで \times は外積を表す。 ε_0 と μ_0 はそれぞれ真空の誘電率と透磁率である。 ε_0 、 μ_0 、および真空中の光速 c の間の関係式 $c = 1/\sqrt{\varepsilon_0 \mu_0}$ を使えば、この二つの式は同じように電場と磁場の関係を与え、それは、真空のインピーダンス Z_0 を用いて

$$H = \frac{nE}{Z_0} \quad (1.6)$$

と表せる。ただし

$$Z_0 = \sqrt{\frac{\mu_0}{\varepsilon_0}} \quad (1.7)$$

である。

光は一般に光検出器などにより強度として観測される。単位時間に観測される光エネルギーの流れ（ポインティングベクトル） \mathbf{S} は以下のように表される。

$$\mathbf{S} = \mathbf{E} \times \mathbf{H} \quad (1.8)$$

ポインティングベクトルの方向はエネルギーの流れの方向であり，等方媒質中では波数ベクトル \mathbf{k} の方向に等しい。ポインティングベクトルの時間平均が強度（irradiance）として定義され，それを I とすれば以下のように表される^{†1}。

$$I = \int_0^{2\pi} \mathbf{S} \, dt = \int_0^{2\pi} \mathbf{E} \times \mathbf{H} \, dt = \frac{1}{2} |\mathbf{E}_0| |\mathbf{H}_0| = \frac{n}{2Z_0} |\mathbf{E}_0|^2 \quad (1.9)$$

比例定数を無視して $I = |\mathbf{E}|^2$ とすることが多く，本書でも特に断わらないかぎり，電場の2乗を強度と考える。ただし， \mathbf{E} は複素数であるため，一般には $I = \mathbf{E} \mathbf{E}^*$ である。ここで \mathbf{E}^* は \mathbf{E} の複素共役である。

1.2 反 射 と 屈 折

最も基本的な例として，図 1.1 に示すように，二つの媒質の界面に光を入射する場合を考える。入射側を媒質 1，透過側を媒質 2 とする。このとき，光の偏光方向は二つある。一つは入射面内^{†2}で振動する **p**-偏光であり，もう一つは入射面に垂直な方向に振動する **s**-偏光である。前者は **TM** (transverse magnetic) 偏光，後者は **TE** (transverse electric) 偏光とも呼ばれる。反射光の **p**-偏光の正の方向の定義は二つ考えられるが，本書では図 (a) に示すように定義する。

光が屈折率の異なる界面を通るとき，屈折が生じて入射角 θ_1 と屈折角 θ_2 は等しくならない。これらの間には

$$n_1 \sin \theta_1 = n_2 \sin \theta_2 \quad (1.10)$$

の関係がある。これをスネルの法則という。これは，界面をまたいで波数ベク

^{†1} 光の強度 I は単位時間に単位面積に降り注ぐ光子数に比例する。一方，光のパワーはその総量であり，光の強度 I を面積で積分したものである。

^{†2} 入射光の波数ベクトルと表面の法線ベクトルを含む面を入射面という。

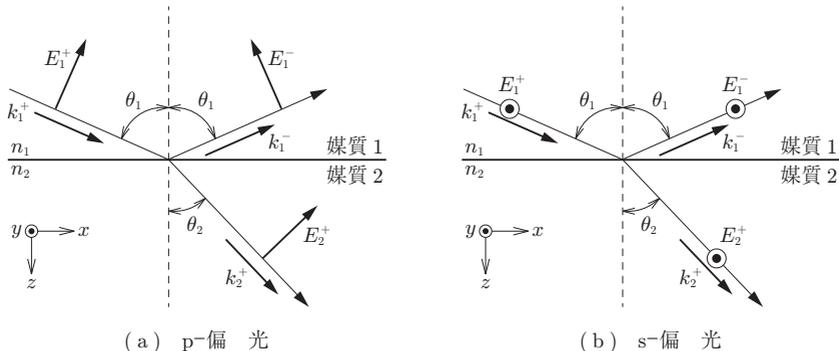


図 1.1 反射や透過計算で用いる光学配置

トルの接線方向成分が保存されるということであり，最小作用の法則より導き出される。よって，スネルの法則は， $k_{1x} = k_{2x}$ と書くこともできる。ここで， k_{ix} ($i = 1$ または 2) は，媒質 i を進む光の波数ベクトルの接線方向 (x 方向) 成分である。

電場はベクトルで表されるが，透過や反射の問題を考える際には，p-偏光と s-偏光で区別し，それぞれの偏光の大きさ E として扱うほうが便利である。入射光の電場の大きさを E_1^+ ，反射光の電場の大きさを E_1^- ，透過光の電場の大きさを E_2^+ とする。下付きの添字は媒質の番号，上付きの $+$ と $-$ はそれぞれ下向きと上向きに伝搬する光を表している。入射光に対する反射光の電場の大きさの比を反射係数と呼び，媒質 1 から媒質 2 に入射する際の反射係数を添字を加えて r_{12} と書くことにする。同様に，入射光に対する透過光の電場の比を透過係数と呼び，媒質 1 から媒質 2 に入射する際の透過係数を t_{12} と書く。反射係数および透過係数は複素数である。

以下，反射係数 r_{12} ，透過係数 t_{12} を示す。反射係数や透過係数は偏光により異なるため，s-偏光に対しては，それぞれ r_{12}^s ， t_{12}^s ，p-偏光に対しては，それぞれ r_{12}^p ， t_{12}^p と表す。入射角を θ_1 ，屈折角を θ_2 ，媒質 1，媒質 2 の屈折率を n_1 ， n_2 とすれば，それらは以下ようになる。

$$r_{12}^s = \frac{n_1 \cos \theta_1 - n_2 \cos \theta_2}{n_1 \cos \theta_1 + n_2 \cos \theta_2} = \frac{k_{1z} - k_{2z}}{k_{1z} + k_{2z}} \quad (1.11)$$

$$t_{12}^s = \frac{2n_1 \cos \theta_1}{n_1 \cos \theta_1 + n_2 \cos \theta_2} = \frac{2k_{1z}}{k_{1z} + k_{2z}} \quad (1.12)$$

$$r_{12}^p = \frac{n_2 \cos \theta_1 - n_1 \cos \theta_2}{n_2 \cos \theta_1 + n_1 \cos \theta_2} = \frac{\varepsilon_2 k_{1z} - \varepsilon_1 k_{2z}}{\varepsilon_2 k_{1z} + \varepsilon_1 k_{2z}} \quad (1.13)$$

$$t_{12}^p = \frac{2n_1 \cos \theta_1}{n_2 \cos \theta_1 + n_1 \cos \theta_2} = \frac{2n_1 n_2 k_{1z}}{\varepsilon_2 k_{1z} + \varepsilon_1 k_{2z}} \quad (1.14)$$

ここで、 k_{iz} は波数ベクトルの z 方向成分であり、 $k_{iz} = n_i k_0 \cos \theta_i$ である。

入射光強度に対する反射光強度の比を反射率 R 、透過光強度の比を透過率 T と呼ぶ。 R と T は $0 \sim 1$ の実数である。光の強度は式 (1.9) で示されるので

$$R = rr^* \quad (1.15)$$

$$T = \frac{n_2 \cos \theta_2}{n_1 \cos \theta_1} tt^* \quad (1.16)$$

である。透過率の計算で $\cos \theta$ の比をとるのは、屈折により光の波数の z 方向成分が変わるためである。これらの式から、媒質に吸収がなければエネルギー保存則

$$R + T = 1 \quad (1.17)$$

が成り立つことが確認できる。

以上を基に、まず、屈折率 1.0 の媒質 1 から屈折率 1.5 の媒質 2 に光が入射された際の各偏光における反射係数 r 、透過係数 t を計算する。本書で紹介する初めのプログラムなので、少し詳しく説明する。プログラム 1.1 にその例を示す。1 行目で数値計算ライブラリ `scipy` を読み込む。数値計算だけなら、これらで十分であるが、計算結果をグラフに表すため 2 行目で `matplotlib` ライブラリを読み込む。4 行目と 5 行目でそれぞれのライブラリで用いる関数を記述する。まず、7 行目で媒質 1 の屈折率を変数 `n1` に、8 行目で媒質 2 の屈折率を変数 `n2` に代入する。つぎに、10 行目の `linspace` コマンドで入射角度の配列である `t1Deg` を作成する。`linspace` コマンドの引数は (最初の値, 終わりの値, 分割数) である。これを、11 行目でラジアンに直した配列が `t1` である。配列を使った単純な計算では、Fortran や C 言語のように成分について一つずつ代入するプロセスを書かなくてもよい。12 行目で式 (1.10) で示したスネルの法則

索 引

	グリッド分散	142, 183			
【い】	【け】		【せ】		
異常光	21	厳密結合波解析	88	切断球	81
異常光屈折率	21			全電磁場/散乱場法	174
異常光主屈折率	21	【こ】		全反射	11
位相シフト効率	232	コアシェル構造	41, 73		
位相シフト断面積	232	格子ベクトル	89	【そ】	
		効 率	39	双極子モード	219
【え】		コニカル回折	115	層 S 行列	102
エバネッセント光	11	固有伝搬モード	23		
エバネッセント波	91	【さ】		【た】	
円偏光効率指数	232	再帰的コンボリューション		体積分法	196
		法	149	【ち】	
【か】		サイズパラメータ	40, 42, 58	中心差分	138
回折次数	89	散乱効率	39	長波長近似	38
回転楕円体	69	散乱断面積	39, 205		
界面 S 行列	102	【し】		【て】	
界面 T 行列	103	時間領域差分法	136	電気双極子	174
ガウスパルス	193	準静電近似	38	伝搬行列法	12, 16, 24
完全磁気導体	145, 147	常 光	21	電流源	196
完全電気導体	145, 147	常光屈折率	21		
緩和調和振動	210	消光効率	39	【と】	
		消光断面積	39	透過回折効率	110
【き】		消衰断面積	206	透過係数	4
吸収効率	39	消衰波	11	透過率	5
吸収断面積	39, 206	磁流源	196	ドルーデ分散	150
強 度	3	真空のインピーダンス	2		
共変ベクトル	126	侵入長	11	【は】	
共鳴角	19			ハイパボリックメタマテリ	
局在表面プラズモン共鳴				アル	27
	39, 214			八重極モード	223
局所電場	229			波動インピーダンス	198
				葉巻型	69, 70
【く】				パンケーキ型	69, 72
クラウジウス・モソッティ		【す】		反射回折効率	110
の式	230	数値分散	183		
		スネルの法則	3		

反射係数	4	偏 光	2	有効媒質近似	28, 33
反射率	5	偏光効率指数	232	【よ】	
反電場係数	70	【ほ】		四重極モード	223
反変ベクトル	126	ポインティングベクトル	3	【り】	
【ひ】		補助微分方程式	150, 154	リアクタンス行列	101
微分散乱効率	231	補助微分方程式法	149	離散双極子近似	228
表面積分法	196	【ま】		離心率	70
表面プラズモン共鳴	19	窓関数	218	リッカチ・ベッセル関数	
【ふ】		【み】			40
部分線形再帰的コンポリュ		ミー理論	39	臨界角	9, 11
ーション法	149	【も】		【ろ】	
プリユースター角	9	モジュール	44	六重極モード	221
分極率	70	【ゆ】		ローレンツ分散	154
分散関係	2	有限差分時間領域法	136		
【へ】					
ベルマンベクトル	25				

【A】		【F】		【R】	
ADE	150, 154	FDTD 法	136	R 行列	101
ADE 法	149	【H】		RC 法	149
【C】		H セル	143	RCWA 法	88
CFS-PML	166	HMM	27	【S】	
Complex Frequency Shifted PML	166	【L】		S 行列	100
Convolutional PML	166	Laurent's rule	98	S 行列法	100
Courant 条件	142	【N】		Sin-Cosine 法	195
CPML	166	Nuttall 窓	219	Spectral FDTD 法	195
【D】		【P】		Split-Field 法	195
DDA	228	PEC	145	Split-Field PML	164
DDSCAT	228	PLRC 法	149	Stretched-Coordinate Formulation	165
【E】		PMC	145	s-偏光	3
E セル	143	PML 吸収境界	157	【T】	
ENZ 媒質	154	p-偏光	3	T 行列	100
				T 行列法	100
				TE 偏光	3

— 著者略歴 —

梶川 浩太郎 (かじかわ こうたろう)	岡本 隆之 (おかもと たかゆき)
1987年 東京工業大学工学部有機材料工学科卒業	1981年 大阪大学工学部応用物理学科卒業
1989年 東京工業大学大学院修士課程修了 (有機材料工学専攻)	1986年 大阪大学大学院博士後期課程修了 (応用物理学専攻)
1989年 東京工業大学教務職員	工学博士
1991年 東京工業大学助手	1986年 理化学研究所研究員
1992年 博士(工学)(東京工業大学)	現在に至る
1993年 理化学研究所フロンティア研究員	
1994年 理化学研究所基礎科学特別研究員	
1996年 名古屋大学助手	
1999年 東京工業大学助教授	
2007年 東京工業大学准教授	
2008年 東京工業大学教授	
現在に至る	

Python を使った光電磁場解析

Optical Electromagnetic Field Analysis Using Python

© Kotaro Kajikawa, Takayuki Okamoto 2019

2019年8月8日 初版第1刷発行



検印省略

著者 梶川 浩太郎
岡本 隆之
発行者 株式会社 コロナ社
代表者 牛来 真也
印刷所 三美印刷株式会社
製本所 有限会社 愛千製本所

112-0011 東京都文京区千石 4-46-10

発行所 株式会社 コロナ社
CORONA PUBLISHING CO., LTD.

Tokyo Japan

振替 00140-8-14844 · 電話(03)3941-3131(代)

ホームページ <http://www.coronasha.co.jp>

ISBN 978-4-339-00926-2 C3054 Printed in Japan

(金)



<出版者著作権管理機構 委託出版物>

本書の無断複製は著作権法上での例外を除き禁じられています。複製される場合は、そのつど事前に、出版者著作権管理機構(電話 03-5244-5088, FAX 03-5244-5089, e-mail: info@jcopy.or.jp)の許諾を得てください。

本書のコピー、スキャン、デジタル化等の無断複製・転載は著作権法上での例外を除き禁じられています。購入者以外の第三者による本書の電子データ化及び電子書籍化は、いかなる場合も認めていません。落丁・乱丁はお取替えいたします。