周期多重極法とそのフォトニック結晶やメタマテリアルへの応用

大谷　佳広*・倉見　洋輔*・西村　直志*

Periodic Fast Multipole Methods and Their Applications to Photonic Crystals and Metamaterials

Yoshihiro Otani*, Yosuke Kurami* and Naoshi Nishimura*

Key words: Boundary element method, Fast multipole method, Maxwell's equations, Photonic Crystals, Metamaterials

1.　はじめに

近年，Maxwell 方程式の周期境界値問題に帰着される光学技術が種々開発されている．例えば，将来の光技術に革新をもたらす可能性があると期待されているフォトニック結晶[1]は光の波長程度の大きさの誘電体から成る周期構造であり，導波管としての性質を与えることができる．加えて，ストップバンドと呼ばれる波が透過しない周波数帯や，周期構造の乱れが作る局在モード，これに伴ってストップバンド中に存在する非常に狭い周波数範囲の透過帯などの現象が知られている．これらの性質は，光を導いたり，貯めたりといった制御を自由自在に行うための基礎技術として注目されている．さらに，近年，メタマテリアルと呼ばれる人工材料が盛んに研究されている[2]．メタマテリアルとは，自然界にはない新奇な物性を示す複合材料であり，多くの場合，誘電体中に電磁波の波長よりも小さい周期で金属が配列された構造をとる．このような構造はメタマテリアルに自然界の物質とは全く異なる特性を与える．例えば，自然界の殆どの物質の比透磁率が高周波において 1 であるのに対して，メタマテリアルではこれを任意の値にすることが出来ると言われる．極端な場合には誘電率と透磁率の値を共に負にすることにより負の巨視的屈折率を有する物質を作る事が可能であり，これを用いると高い解像度を有するスーパーレンズの製作が可能になると言われている[3]．

*　京都大学情報学研究科
Graduate School of Informatics, Kyoto University

光学の支配方程式である Maxwell 方程式の周期境界値問題の数値解法としては，FDTD 法，有限要素法，平面波展開法等があるが，n 次元における m 周期問題($m<n$)等の散乱問題においては境界要素法が有利であると考えられる．特に今後ナノテクノロジーがさらに進歩すれば複雑な幾何形状を有する微細構造の製造も可能になり，Maxwell 方程式の大規模周期境界値問題の解法への需要が増加するものと予想される．以上の事から，我々は Maxwell 方程式に対する周期多重極法に興味を持った．

実は，Laplace 方程式の高速多重極法においては，周期境界条件を扱うための基本的なアイデアが Greengard and Rokhlin[4]によって既に示されている．それは，構造の単位であるユニットセルのレプリカをユニットセルの周囲に無限個配置し，その効果を評価するというものである．彼らの方法は発散級数和を物理的考察によって求めているために，数学的曖昧さが残っていたが，この問題は 3 次元静弾性問題において，Houzaki 等や[5]，Otani and Nishimura[6]によって解決された．周波数域の波動問題の周期多重極法は，我々のグループにより 2 次元 Helmholz 方程式や[7]，3 次元 Maxwell 方程式[8,9]の場合が研究されている．本稿では 3 次元 Maxwell 方程式の周期多重極法を簡単に紹介し，そのフォトニック結晶やメタマテリアルの問題への応用例を示す．

2.　定式化

以下では 3 次元 Maxwell 方程式の周期多重極法の定式化を概観する．詳細は Otani and Nishimura[8,9]を見ら

れたい．以下ではデカルト座標系 $O-x_i$ を用い，反復された添字には総和規約を用いる．また，点 x の位置ベクトルを $\boldsymbol{x}$ または $\overrightarrow{Ox}$ と記す．

2.1 非周期問題の解

まず非周期問題から始める．D を $\mathbb{R}^3$ の領域とする．我々の問題は適当な条件の下に D におけるMaxwell方程式

$$\nabla \times \boldsymbol{E} = i\omega\mu\boldsymbol{H}, \quad \nabla \times \boldsymbol{H} = -i\omega\varepsilon\boldsymbol{E} \tag{1}$$

の解を求めることである．ここに $\boldsymbol{E}$ と $\boldsymbol{H}$ は，電場と磁場，ω は周波数(諸量の時間依存性は $e^{-i\omega t}$ とする)，ε と μ は誘電率と透磁率である．D が外部領域であれば散乱波 $\boldsymbol{E}^{\mathrm{sca}}, \boldsymbol{H}^{\mathrm{sca}}$ に対して放射条件を要求する．ここに，$(\boldsymbol{E}^{\mathrm{sca}}, \boldsymbol{H}^{\mathrm{sca}}) = (\boldsymbol{E}-\boldsymbol{E}^{\mathrm{inc}}, \boldsymbol{H}-\boldsymbol{H}^{\mathrm{inc}})$ であり，$\boldsymbol{E}^{\mathrm{inc}}$ と $\boldsymbol{H}^{\mathrm{inc}}$ は入射波である．式(1)の解は，$x \in D$ において次の形となることが知られている．

$$\boldsymbol{E}(x) = \int_{\partial D} \left(\boldsymbol{m} \times (\nabla_y G) - i\omega\mu\boldsymbol{j}G + \frac{i}{\omega\varepsilon}\nabla_y G\,\mathrm{div}_S\boldsymbol{j}\right) dS_y, \tag{2}$$

$$\boldsymbol{H}(x) = \int_{\partial D} \left(-\boldsymbol{j} \times (\nabla_y G) - i\omega\varepsilon\boldsymbol{m}G + \frac{i}{\omega\mu}\nabla_y G\,\mathrm{div}_S\boldsymbol{m}\right) dS_y, \tag{3}$$

ここに，G は3次元Helmholtz方程式の基本解：

$$G(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}) = \frac{e^{ik|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}|}}{4\pi|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}|},$$

であり，$\boldsymbol{j}$ と $\boldsymbol{m}$ は次式で定義される表面電流，及び表面磁流である：

$$\boldsymbol{j}(y) = \boldsymbol{n}(y) \times \boldsymbol{H}(y), \quad \boldsymbol{m}(y) = \boldsymbol{E}(y) \times \boldsymbol{n}(y).$$

$\boldsymbol{n}$ は D の境界 ∂D における外向き単位法線ベクトル，div_S は面発散である．領域 D が外部領域であれば(2)と(3)の右辺に入射波 $\boldsymbol{E}^{\mathrm{inc}}$ 及び $\boldsymbol{H}^{\mathrm{inc}}$ を加える．

今 $\boldsymbol{j}(y)$ と $\boldsymbol{m}(y)$ が与えられたとして，(2)と(3)の右辺を高速多重極法で評価する事を考える．Maxwell方程式の多重極法にはいくつかの種類があるが，ここでは周期多重極法の説明のために対角形式に現れる諸式を記すに止める．詳細は文献を参照されたい[10,11]．

考える領域の寸法が波長より大きい問題を「高周波問題」と呼ぶ．高周波問題の多重極法において標準的に用いられる対角形式は，Helmholtz方程式の基本解 G の平面波展開

$$G(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}) \approx \frac{ik}{(4\pi)^2} \int_{|\hat{k}|=1} e^{ik\cdot(x-X)} \left(\sum_{n=0}^{\tilde{p}} \sum_{m=-n}^{n} i^n (2n+1)\, \overline{Y_n^m}(\hat{\boldsymbol{k}})\, O_n^m(\boldsymbol{X}-\boldsymbol{Y})\right) e^{-ik\cdot(y-Y)} dS_{\hat{k}} \tag{4}$$

から出発する．ここに，$\boldsymbol{k} = k\hat{\boldsymbol{k}}$ であり($\hat{\boldsymbol{k}}$ は単位ベクトル)，$\boldsymbol{X}$ と $\boldsymbol{Y}$ は，それぞれ点 $\boldsymbol{x}$ と $\boldsymbol{y}$ の近傍の点，$\tilde{p}$ は打ち切り項数である．また，関数 O_n^m と I_n^m は次式で定義される：

$$O_n^m(\overrightarrow{Ox}) = h_n^{(1)}(k|\overrightarrow{Ox}|)\, Y_n^m\left(\frac{\overrightarrow{Ox}}{|\overrightarrow{Ox}|}\right),$$

$$I_n^m(\overrightarrow{Ox}) = j_n(k|\overrightarrow{Ox}|)\, Y_n^m\left(\frac{\overrightarrow{Ox}}{|\overrightarrow{Ox}|}\right).$$

ここに，$h_n^{(1)}$ と j_n はそれぞれ第1種 n 次球Hankel関数，及び n 次球Bessel関数である．また，Y_n^m は球面調和関数で，次式で定義する．

$$Y_n^m\left(\frac{\overrightarrow{Ox}}{|\overrightarrow{Ox}|}\right) = \sqrt{\frac{(n-m)!}{(n+m)!}}\, P_n^m(\cos\theta)\, e^{im\phi}.$$

ここに (r, θ, ϕ) はベクトル $\overrightarrow{Ox}$ の極座標，P_n^m はLegendreの陪関数である．

式(4)より，積分(2)と(3)の局所展開が以下のように求められる．

$$E_i(x) = \frac{1}{16\pi^2} \int_{|\hat{k}|=1} e_{ikj}\hat{k}_k e^{ik\cdot(x-X)} \tilde{H}_j(\hat{\boldsymbol{k}}, X)\, dS_{\hat{k}}, \tag{5}$$

$$H_i(x) = \frac{k}{16\pi^2\omega\mu} \int_{|\hat{k}|=1} e_{iuv} e_{vkj} \hat{k}_u \hat{k}_k e^{ik\cdot(x-X)} \tilde{H}_j(\hat{\boldsymbol{k}}, X)\, dS_{\hat{k}}, \tag{6}$$

ここに，$\tilde{H}_j(\hat{\boldsymbol{k}}, X)$ は対角形式における局所展開係数であり，F2H(M2L)公式

$$\tilde{H}_j(\hat{\boldsymbol{k}}, X) \approx \tilde{F}_j(\hat{\boldsymbol{k}}, Y) \sum_{n=0}^{\tilde{p}} i^n (2n+1) P_n\left(\hat{\boldsymbol{k}} \cdot \frac{\boldsymbol{X}-\boldsymbol{Y}}{|\boldsymbol{X}-\boldsymbol{Y}|}\right) h_n^{(1)}(k|\boldsymbol{X}-\boldsymbol{Y}|), \tag{7}$$

によって多重極モーメント

$$\tilde{F}_j(\hat{\boldsymbol{k}}, Y) = \int \left(k^2 e_{pqr} e_{rsj} \hat{k}_q \hat{k}_s m_p(y) + k\omega\mu e_{pqj} \hat{k}_q j_p(y)\right) e^{-ik\hat{k}\cdot(y-Y)} dS_y. \tag{8}$$

と関連している．

2.2 周期境界値問題

次に周期境界値問題を考える．今，考える領域が x_2, x_3 方向に周期的で，周期長はそれぞれ L_2, L_3 であるとする．一般性を失うことなく $L_2 \le L_3$ と仮定する．さて，D を

$$D = (-\infty, \infty) \otimes (-L_2/2, L_2/2) \otimes (-L_3/2, L_3/2),$$

とし，これをさらに N 個の部分領域に分解する．$D = D_1 \cup D_2 \cup \cdots \cup D_N$ (**図1**)．このうちの一つの領域 D_l は $x_1 \to -\infty$ 方向に無限まで続いているとする．考える問題は，部分領域 D_i で Maxwell 方程式(1)を満たし($\varepsilon = \varepsilon^i$, $\mu = \mu^i$ とする．ここに，ε^i と μ^i は D_i の誘電率と透磁率)，

無限まで続く部分領域では放射条件(D_I においては散乱波に対する放射条件)を満たし，領域の界面では $\boldsymbol{E}, \boldsymbol{H}$ の接線成分の連続性を満たし，かつ，周期境界 $S_p = \{\boldsymbol{x} \mid \boldsymbol{x} \in \partial D,\ |x_2| = L_2/2$ または $|x_3| = L_3/2\}$ で周期境界条件

$$\boldsymbol{E}(x_1, L_2/2, x_3) = e^{i\beta_2}\boldsymbol{E}(x_1, -L_2/2, x_3),$$
$$\boldsymbol{E}(x_1, x_2, L_3/2) = e^{i\beta_3}\boldsymbol{E}(x_1, x_2, -L_3/2),$$
$$\boldsymbol{H}(x_1, L_2/2, x_3) = e^{i\beta_2}\boldsymbol{H}(x_1, -L_2/2, x_3),$$
$$\boldsymbol{H}(x_1, x_2, L_3/2) = e^{i\beta_3}\boldsymbol{H}(x_1, x_2, -L_3/2),$$

を満たす $\boldsymbol{E}, \boldsymbol{H}$ を求めるものである．ここに，β_i は $x_i = -L_i/2$ と $x_i = L_i/2$ における位相差を表し，平面入射波の問題では $\beta_i = L_i k_i^{\mathrm{inc}}, i = 2, 3$ となる．ここに，$k_i^{\mathrm{inc}} (i = 2, 3)$ は，入射波の波数である．

上に定義した2周期問題の解は，(2),(3)において，G を2周期条件を満たすHelmholtz方程式のGreen関数

$$G^P(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}) = \sum_{\omega \in \mathcal{L}} \frac{e^{ik|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}-\omega|}}{4\pi|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}-\omega|} e^{i\beta\cdot\omega}$$

で置き換えて得られる．ここに $\mathcal{L}$ は $\mathcal{L} = \{(0, \omega_2, \omega_3) \mid \omega_2 = pL_2, \omega_3 = qL_3,\ p, q \in \mathbb{Z}\}$ で定義された格子点である．

$\boldsymbol{E}$ と $\boldsymbol{H}$ の連続性より，$\boldsymbol{j}^d$ と $\boldsymbol{m}^d$(添字は領域番号を表す)に関する次の積分(変分)方程式が得られる．

$$\begin{aligned}0 = \sum_d \Bigg(& \delta_{dI} \int_{\partial D_d \setminus S_p} \boldsymbol{t}^d(x) \cdot \boldsymbol{E}^{\mathrm{inc}}(x)\, dS_x \\ & + \int_{\partial D_d \setminus S_p} \int_{\partial D_d \setminus S_p} \Big\{ \boldsymbol{t}^d(x) \cdot \left(\boldsymbol{m}^d(y) \times \nabla_y G_d^P(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y})\right) \\ & - i\omega\mu^d \boldsymbol{t}^d(x) \cdot \boldsymbol{j}^d(y)\, G_d^P(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}) \\ & + \frac{i}{\omega\varepsilon^d} \mathrm{div}_S \boldsymbol{t}^d(x)\, \mathrm{div}_S \boldsymbol{j}^d(y)\, G_d^P(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}) \Big\}\, dS_y\, dS_x \Bigg),\end{aligned} \tag{9}$$

$$\begin{aligned}0 = \sum_d \Bigg(& \delta_{dI} \int_{\partial D_d \setminus S_p} \boldsymbol{t}^d(x) \cdot \boldsymbol{H}^{\mathrm{inc}}(x)\, dS_x \\ & + \int_{\partial D_d \setminus S_p} \int_{\partial D_d \setminus S_p} \Big\{ -\boldsymbol{t}^d(x) \cdot \left(\boldsymbol{j}^d(y) \times \nabla_y G_d^P(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y})\right) \\ & - i\omega\varepsilon^d \boldsymbol{t}^d(x) \cdot \boldsymbol{m}^d(y)\, G_d^P(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}) \\ & + \frac{i}{\omega\mu^d} \mathrm{div}_S \boldsymbol{t}^d(x)\, \mathrm{div}_S \boldsymbol{m}^d(y)\, G_d^P(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}) \Big\}\, dS_y\, dS_x \Bigg),\end{aligned} \tag{10}$$

ここに $\boldsymbol{t}^d$ はtest関数であり，境界における接ベクトル場である．

2.3 周期FMM

周期多重極法は，(9),(10)における被積分関数が格子和の形であることを利用して積分計算を高速に行うものである．

今，ある部分領域 D_a の境界 $\partial D_a \setminus S_p$ が，x_i 座標軸方向の辺の長さが，順に$(L_1 =)L_2, L_2, L_3$ であるような直方体に含まれる場合を考え，この直方体をユニットセルと呼ぶ．

周期問題のGreen関数の構造から，周期境界値問題の解はユニットセルのレプリカが無限に繰り返したものと理解することができる(**図2**参照)．

次に，レプリカセルをユニットセルの近傍にあるもの(C_N と表す)と，その他(C_F と表す)に分ける．ここに，同レベルの2つのセルが近傍にあるとは，セルの中心間の距離 R とセルの半対角長 r が $R/r < 4/\sqrt{3}$ を満たすことと定義する．この定義は，立方体セルの場合のGreengard and Rokhlinの定義と一致する．対応して，周期Green関数に含まれる和も C_N の寄与と C_F の寄与(G^{PF} と表す)に分けることができる．(9),(10)に含まれる積分のうち C_N の寄与は従来の多重極法で評価する．一方，G^{PF} の多重極展開は次式のようになる．

$$\begin{aligned}& G^{PF}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}) \\ & = \frac{ik}{(4\pi)^2} \int_{|\hat{k}|=1} e^{ik\cdot x} \\ & \times \underbrace{\left(\sum_n \sum_m i^n (2n+1)\, \overline{Y_n^m}(\hat{\boldsymbol{k}}) \left(\sum_{\omega \in \mathcal{L}'} O_n^m(-\omega)\, e^{i\beta\cdot\omega}\right)\right)}_{\text{Periodised F2H formula}} e^{-ik\cdot y}\, eS_{\hat{k}}.\end{aligned}$$

ここに，$\mathcal{L}'$ は C_F に属する格子点の集合である．従って，遠方のレプリカセルの影響は次の周期F2H公式によって評価できることが分かる．

$$\begin{aligned}& \tilde{H}_j(\hat{\boldsymbol{k}}, O) = \Xi(\hat{\boldsymbol{k}})\, \tilde{F}_j(\hat{\boldsymbol{k}}, O), \\ & \Xi(\hat{\boldsymbol{k}}) = \sum_{n=0}^{\tilde{p}} \sum_{m=-n}^{n} i^n (2n+1)\, \overline{Y}_n^m(\hat{\boldsymbol{k}}) \left(\sum_{\omega \in \mathcal{L}'} O_n^m(-\omega)\, e^{i\beta\cdot\omega}\right),\end{aligned} \tag{11}$$

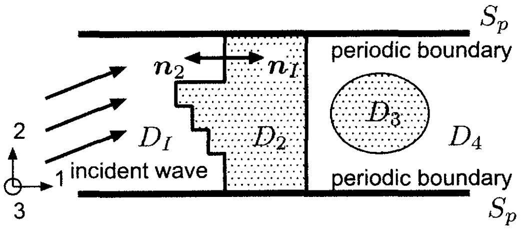

図1　周期境界値問題

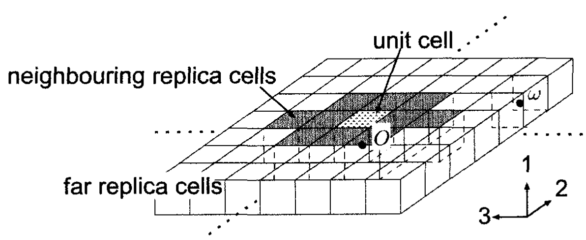

図2　レプリカセル

ここに $\tilde{F}_j(\hat{\boldsymbol{k}}, O)$ はレベル0のセル(すなわちユニットセル)の多重極モーメントである．

周期F2H公式を利用するためには同式の( )内の格子和を精度良く評価する必要がある．この和をそのまま足すと非常に収束が遅いので，我々はこれをFourier解析を用いて変形し，評価している．

2.4 周期 FMM のアルゴリズム

周期多重極法のアルゴリズムは従来の多重極法と大きくは異ならない．以下要点をまとめる．

- レベル0のセルを周期境界値問題のユニットセルと同一視する．
- 上向きパスは従来の多重極法と同じであるが，レベル0まで計算を実行する．
- レベル0のセルの局所展開係数が，F2H(M2L)公式(11)によって計算される．
- それ以下の下向きパスは C_N のセルの影響を，ユニットセル内のセルの局所展開係数として評価する以外は従来の多重極法と同じ．

以上が周期多重極法の概要である．

3. 数値解析例

本節では，周期多重極法のフォトニック結晶やメタマテリアルの問題への適用例を示す．

3.1 数値解法に関する注意事項

本稿で示す数値例においては，線形方程式の反復解法として FGMRES(Flexible GMRES)を使用している．前処理行列としては，係数行列のうち，多重極法のアリゴリズムの中で直接計算によって陽に構成される部分を用いた．前処理行列の逆は GMRES(Generalised Minimal RESidual Method)によって近似的に評価した．また，境界積分方程式の離散化には RGW 基底(1 次の Raviart-Thomas 基底)を用いた．

3.1.1 フォトニック結晶：ウッドパイル構造[8)]

フォトニック結晶のモデル問題への適用例として，ウッドパイル構造を考える．最初にシリコン(屈折率：3.45) 製のウッドパイル(高さ：200nm，幅：180nm) からなる5層構造を考える(**図3**)．構造は厚さ 70nm，屈折率2の窒化シリコンの薄膜上に乗っており，x_2, x_3 方向のウッドパイルの中心間隔は650nm である．構造の上は空気，下はシリコン基盤(屈折率：3.45)となっている．入射波としては平面偏光を考え，入射角は20°，電場が入射面内にあるものとする(図3参照)．このモデルはGralak 等[12)]によって取り扱われた．我々の計算では，$x_{2,3}$ 方向の2周期分をユニットセルとした．使用したメッシュは43104エッジで，未知数の数は86208である．

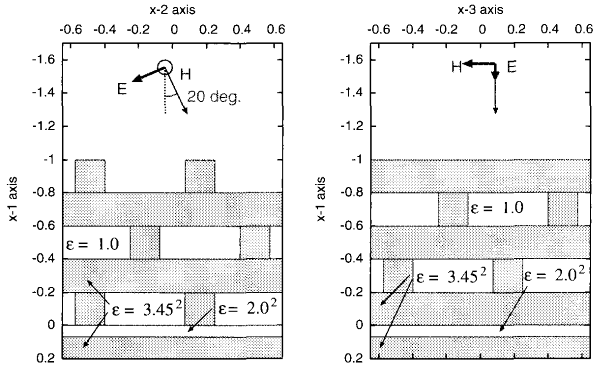

図3 ウッドパイル構造の $x_1 - x_2$ 及び $x_1 - x_3$ 断面
長さの単位：μm

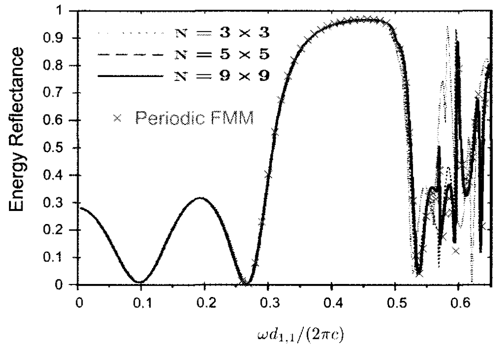

図4 ウッドパイル構造のエネルギー反射率

エネルギー反射率の計算結果を波数の関数としてプロットしたのが，**図4** である．我々の結果は Gralak 等が計算したもっとも高精度の結果($N = 9 \times 9$ と書かれているもの)とよく一致している．

次に層の数を8に増やし，4, 5層のウッドパイルの一部を切り取った例を解析した．使用したモデルを**図5**に示す．この問題は必ずしも現実のフォトニック結晶の問題とは対応しない思考実験上のモデルであるが，Gralak 等の方法では解けない事に注意する．使用したメッシュは 60720 エッジ，121440 自由度を有する．

この構造のエネルギー反射率を波数の関数としてプロットして**図6** を得た．同図には欠陥のない構造の計算結果も合わせてプロットしてある．$\omega d_{1,1}/(2\pi c) \approx 0.3935$ 付近に鋭い透過帯が存在することが分かる．

この透過帯のメカニズムを理解するために，構造内部の観測面(図 5 中に表示)における Poynting ベクトルの実部 $\boldsymbol{S} = 1/2(\boldsymbol{E} \times \bar{\boldsymbol{H}})$ の絶対値の分布を調べる．**図7** には passband である $\omega d_{1,1}/(2\pi c) \approx 0.3935$ と少し passband を外れた $\omega d_{1,1}/(2\pi c) \approx 0.4035$ の結果が示されている．これより，明らかに $\omega d_{1,1}/(2\pi c) \approx 0.3935$ の場合には局在モードが発生している事が分かる．

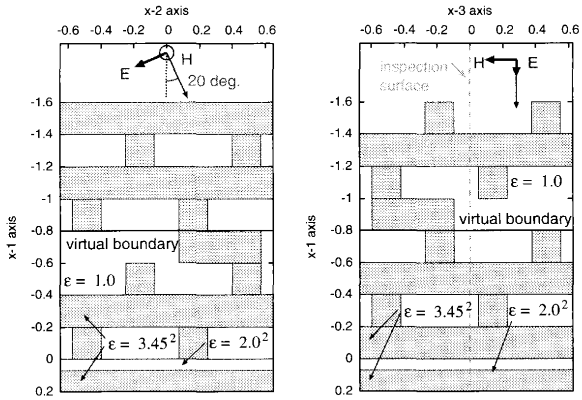

図5　欠陥のあるウッドパイル構造の x_1-x_2 及び x_1-x_3 断面

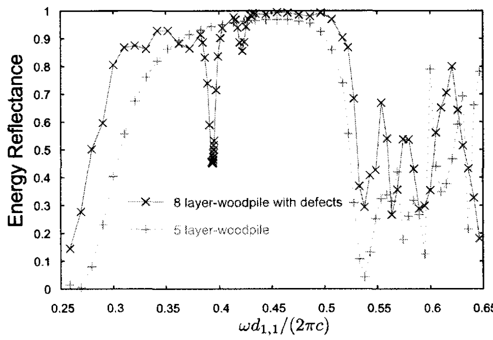

図6　欠陥のあるウッドパイル構造のエネルギー反射率

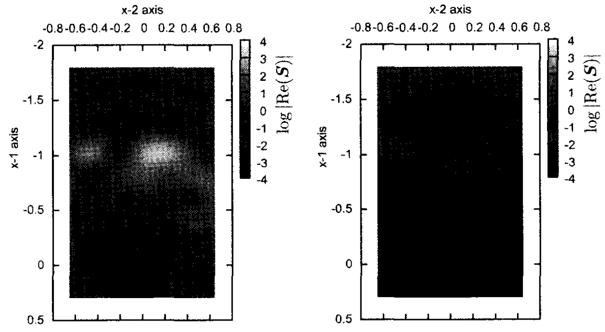

図7　Poyntingベクトルの時間平均の大きさ
$\omega d_{1,1}/(2\pi c) \approx 0.3935$(左), $\omega d_{1,1}/(2\pi c) \approx 0.4035$(右)

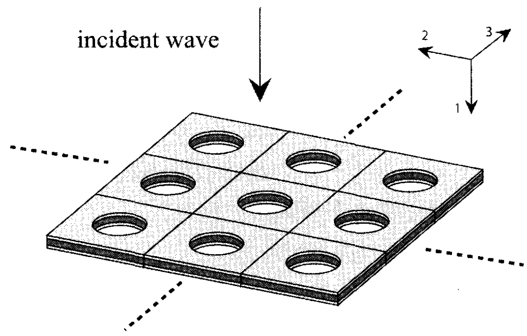

図8　DF構造モデル
誘電体層(厚さ60nm)が金属層(厚さ30nm)に挟まれている．円孔の直径は360nm，x_2, x_3 方向の周期は $L_2 = L_3 = 838$nm.

なお，前処理における逆行列の計算はGMRESによって近似的に行い，反復計算は30回の反復後，または誤差が初期値の 10^{-1} 倍になった時点で打ちきった．一つの波数に対する一件の計算に要する計算時間はおよそ4時間44分ほどであった．

3.2　メタマテリアル：2重漁網構造

典型的なメタマテリアルの例として，2重漁網(double-fishnet: DF)構造を取り上げる．使用したDF構造のモデルを**図8**に示す．これはZhang等が近赤外線を用いて負の屈折率を実験的に実現した際に使用したモデルであり，金属層で挟まれた誘電体に周期的に円孔をあけた構造が真空中に配置されている．モデルの形状は[13]を参考にして与えた．

金属部分は金とし，構成関係としてDrudeモデル[14]

$$\varepsilon(\omega) = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega(\omega + i\gamma)} \qquad (12)$$

を用いた．ここに，ω_p, γ はそれぞれプラズマ周波数と減衰定数であり，それぞれ，$13.8 \times 10^{15}\,\mathrm{s}^{-1}$，$107.5 \times 10^{12}\,\mathrm{s}^{-1}$ とした．また，透磁率は全領域で1である．また，誘電体部分は酸化アルミニウムを想定してその誘電率は1.65とした．

入射波は x_1 軸方向に進む平面波を考え，その偏光方向は電界の振動方向が x_2 軸を向くようにとった．

3.2.1　計算結果

DF構造に対して周波数 ω を変化させた際の数値計算結果を以下に示す．FGMRESの反復終了の条件は相対誤差が 10^{-3} 以下になることとした．また，境界要素としてはRWG要素を使用し，その数は周波数に依らずに4272要素とした．**図9**にはエネルギー反射率を周波数の関数としてプロットした．**図10**には見かけの屈折率(実部，虚部)を波長の関数としてプロットした．滑らかな線は周期多重極法による解析結果であり，ノイズの乗った結果はZhang等の実験結果である．波長 2μm 付近で負の屈折率が実現しており，実験と解析はほぼ一致している．なお，波長 2μm は周波数にして約150THであり，図9においてもアノマリとして認識することが出来る．

3.3　メタマテリアル：分割リング共鳴器

次に，縦横の周期長の異なっている問題の例として，2重漁網構造と並んで典型的な分割リング共鳴器(SRR)

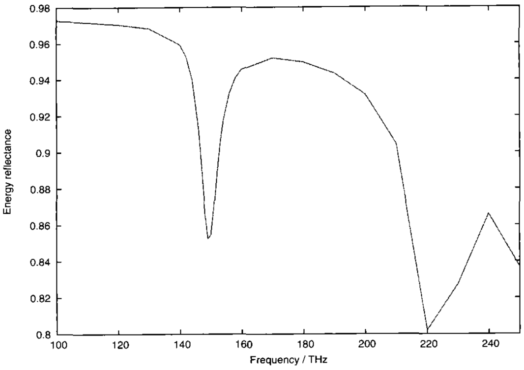

図9　DF構造のエネルギー反射率

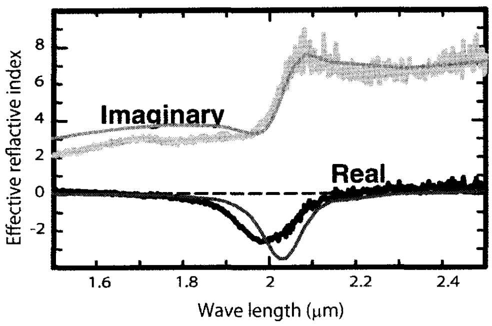

図10　DF構造の見かけの屈折率

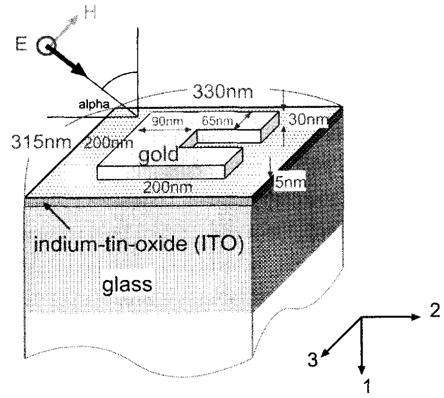

図11　SRRモデル

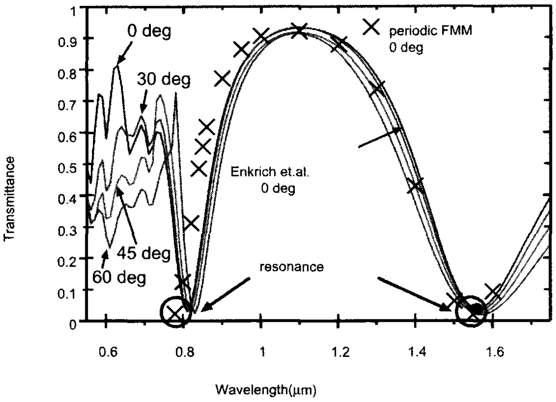

図12　SRR構造のエネルギー透過率

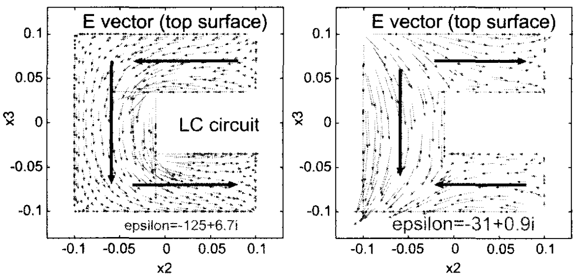

図13　SRR表面の電場(波長：(左)1.55μm，(右)0.78μm)

の解析例を示す．解析に用いたモデルを**図11**に示す．このモデルはEnkrich等[15]によって扱われたものであり，ガラスの基盤上に作成されたSRRは金製である．Enkrich等は実験に加えて有限要素法による解析も行っている．入射波の電場の偏光方向がx_3方向，入射角が0度の場合を周期多重極法によって解析した．**図12**は，エネルギー透過率を入射波の波長の関数としてプロットしたものである．多重極法による解析結果は×記号により示した．同図にはEnkrich等の計算結果も合わせて示してあるが，これらは概ね一致している．図12には波長1.55μm付近にエネルギー透過率が非常に低い所があり，ある種の共鳴現象を表している．さらにこれの半波長共鳴と思われる現象も波長0.78μm付近に見られる．**図13**には，これらのケースのSRR表面の電場をプロットした．ちょうど共振回路を構成するような場が発生している事が理解出来る．

4.　終わりに

本稿ではMaxwell方程式における周期多重極法の紹介を行い，フォトニック結晶やメタマテリアルの問題への応用例を示した．電磁波は周期境界値問題の特性がもっとも顕著に現れ，興味深い応用も多数ある．一方，機械的な波動現象(弾性波動，音響問題など)においても周期性に関わる興味深い現象が知られており，フォノニック結晶などの研究が進められている．本稿で示した方法は，これら周期構造の波動一般に適用可能であり，時間域への拡張も含めて，今後，その適用範囲を広げてゆきたい．

参　考　文　献

1) J.D. Joannopoulos, R.D. Meade, J.N. Winn: Photonic Crystals, Princeton University Press (1995)

2) 石原照也(監修): メタマテリアル —最新技術と応用—, シーエムシー出版 (2007)
3) J.B. Pendry: Negative refraction makes a perfect lens, Phys. Rev. Lett., **85**, 3966/3969 (2000)
4) L. Greengard and V. Rokhlin: A fast algorithm for particle simulations, J. Comp. Phys., **73**, 325/348 (1987)
5) K. Houzaki, N. Nishimura and Y. Otani: An FMM for periodic rigid-inclusion problems and its application to homogenisation, In: Inverse Problems, Multi-Scale Analysis and Effective Medium Theory, Contemporary Mathematics 408 (Eds. H. Ammari and H. Kang), 81/98, AMS (2006)
6) Y. Otani and N. Nishimura: A fast multipole boundary integral equation method for periodic boundary value problems in three dimensional elastostatics and its application to homogenisation, Int. J. Multiscale Comput. Eng., **4**, 487/500 (2006)
7) Y. Otani and N. Nishimura: An FMM for periodic boundary value problems for cracks for Helmholtz' equation in 2D, Int. J. Num. Meth. Eng., **73**, 381/406 (2008)
8) Y. Otani and N. Nishimura: A periodic FMM for Maxwell's equations in 3D and its applications to problems related to photonic crystals, J. Comp. Phys., **227**, 4630/4652 (2008)
9) Y. Otani and N. Nishimura: An FMM for orthotropic periodic boundary value problems for Maxwell's equations, Waves in Random and Complex Media, **19**, 80/104 (2009)
10) N. Nishimura: Fast multipole accelerated boundary integral equation methods, Appl. Mech. Rev., **55**, 299/324 (2002)
11) W.C. Chew, J.-M. Jin, E. Michielssen, J. Song (Eds): Fast and Efficient Algorithms in Computational Electromagnetics, Artech House (2001)
12) B. Gralak, M. de Dood, G. Tayeb, S. Enoch and D. Mastre: Theoretical study of photonic band gaps in woodpile crystals, Phys. Rev. E, **67**, 066601 (2003)
13) S. Zhang, W. Fan, N. C. Panoiu, K. J. Malloy, R. M . Osgood and S. R. J. Brueck: Experimental demonstration of near-infrared negative-index metamaterials, Physical Review Letters, **95**, 137404 (2005)
14) P.B. Johnson and R.W. Christy: Optical constants of the noble metals, Physical Review B, **6**, 4370/4379 (1972)
15) C. Enkrich et al.: Magnetic metamaterials at telecommunication and visible frequencies, Phys. Rev. Lett., **95**, 203901 (2005)