

科学研究費助成事業 研究成果報告書

平成 28 年 5 月 30 日現在

機関番号：13701

研究種目：基盤研究(C) (一般)

研究期間：2012～2015

課題番号：24560073

研究課題名(和文) 超大規模非エルミート行列の内部固有値解析とメタマテリアル複合材料への応用

研究課題名(英文) Internal eigenvalue analysis of large-scale non-Hermitian matrices and its application to metamaterial composites

研究代表者

寺尾 貴道 (Terao, Takamichi)

岐阜大学・工学部・教授

研究者番号：40271647

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 4,300,000円

研究成果の概要(和文)：近年、メタマテリアルの材料特性およびその応用に注目が集まっている。メタマテリアルとは、材料の屈折率や体積弾性率などが負の値をとるなど、従来の材料には見られない特性を有する人工的な材料である。期待される応用として、光の回折限界を超えたスーパーレンズや、クローキング(光学迷彩)等に関する研究も盛んに行われている。本研究課題では、通常材料中にメタマテリアルを埋め込んだメタマテリアル複合材料の特性について、計算機シミュレーションを用いた解析を行った。また、上記の問題における解析に適したシミュレーション手法の開発も併せて行った。

研究成果の概要(英文)：Metamaterials are a new class of composite materials that can exhibit any desired electromagnetic or acoustic properties, including exotic behaviors such as negative refraction, negative bulk modulus or negative mass under certain excitations. Applications such as superlensing and cloaking have attracted significant attention. In this study, electromagnetic properties and vibrational properties of metamaterial composites have been investigated by computer simulations. A novel numerical method suitable for the analysis of metamaterial composites has also been developed.

研究分野：計算物理工学

キーワード：メタマテリアル 大規模固有値解析 FDFD法 フォトニック結晶

1. 研究開始当初の背景

近年、メタマテリアルの特性およびその光デバイス・超小型光回路等への応用が注目を集めている。メタマテリアルは、従来の材料には見られない特徴的な電磁気学的特性（電磁メタマテリアル）或いは音響特性（音響メタマテリアル）を示す。その具体的な性質の一例として、負の屈折率、負の体積弾性率、或いは特定の振動数領域における負の質量などが挙げられる。期待される応用として、スーパーレンズやクローキング（光学迷彩・音響迷彩）などに関する研究が行われている。また力学的メタマテリアルと総称される、材料のポアソン比が負の値をとる auxetic 物質や、体積弾性率は有限の値をとるが（固体であるにもかかわらず）せん断弾性率がゼロとなる pentamode 物質の研究も行われている。本研究課題では、メタマテリアル複合材料における計算機シミュレーション解析を行った。

2. 研究の目的

本研究課題の目的は、メタマテリアルを母体の材料に埋め込んだ「メタマテリアル複合材料」における物理的性質、具体的には電磁波や弾性波などの伝搬特性について、計算科学の立場から明らかにする事である。本研究課題においては、FDFD法 (Finite-difference frequency-domain: 有限差分・周波数領域法) を用いた大規模計算機シミュレーション解析を行った。具体的には、複雑な空間構造を有する分散性媒質（メタマテリアルにおける誘電率・透磁率の周波数特性）を組み込んだ人工材料における、波動伝搬特性およびモード解析を精密に行う事が可能となる。

具体的には Layer-by-Layer 構造など、実験的に注目されている複数のナノ構造を取り上げ、メタマテリアル複合材料のフォトニック・バンド構造について明らかにした。特に負の屈折率系において出現が予想されている、系の平均屈折率がゼロに近い領域における特異なバンドギャップについて探索を行った。また、該当する周波数領域近傍におけるモードパターン解析を行い、負の屈折率材料及びその境界面における電磁場の振る舞いについて、定量的に明らかにした。

3. 研究の方法

従来のフォトニック結晶などの研究においては、FDTD法（時間領域解法）が用いられてきた。FDTD法は汎用的な手法であるが、周波数分散を有する系における高精度の計算は比較的苦手である事が指摘されていた。一般にFDFD法を用いた方が、より精度の高い計算結果を得る事が可能となる。しかし現時点において、材料研究の分野における

FDFD法の適用は進んでいなかった。過去の研究において、フォトニック結晶の数値的研究において、FDFD法を用いた数値解析の事例はいくつか報告されていたが、いずれも非常に小規模の解析に留まっていた。その理由の一つとして、FDFD法の計算において実用的な問題を解こうとすると、非常に大規模な行列の固有値解析が必要となる点が挙げられる。

メタマテリアル複合材料においては、一般に系の屈折率が複雑な周波数依存性を示す。FDFD法の長所としては、従来用いられている他の計算手法に比べて (i) 計算精度が極めて高い、(ii) 材料の屈折率における複雑な周波数依存性について、理論的な取り扱いを行う事が容易となる事、が指摘される。本研究課題に関する理論解析は、超大規模非エルミート行列の内部固有値問題に帰着される。この問題に関して、本研究代表者は拡張リッツ部分空間法という独自の数値計算手法を提案して、超大規模な非エルミート行列の内部固有値・固有ベクトルを正確に求めている。本研究課題を遂行する上で、上記の計算手法に関する更なる精度向上を行うことに成功している。超大規模非エルミート行列の「内部」固有値問題を数値的に解く為に、「拡張リッツ部分空間法」に関して超並列スーパー・コンピュータにおける計算に適したプログラムの並列化を行い、同時にその高速化に関する性能評価を行った。

4. 研究成果

本研究課題においては、メタマテリアル複合材料の理論解析を行った。並行して、大規模非エルミート行列における固有値解析手法の改良に関する研究も行った。

(1) メタマテリアル・フォトニック結晶に関する電磁波伝搬特性の解析

正の屈折率を有する材料と、負の屈折率を示すメタマテリアルから構成されるメタマテリアル・フォトニック結晶に関する研究を行った。メタマテリアルにおける誘電率と透磁率の周波数依存性を扱う上では、Drudeモデルを採用した数値シミュレーションを行い、材料中を伝搬する電磁波の伝搬特性について数値的に明らかにした。計算結果より、正の屈折率を有する材料を母体として、その中に負の屈折率を示すメタマテリアルを周期的に埋め込んだ系においては、明確なストップバンドが存在することが確認された。それに対して、逆にメタマテリアルが母体となり、正の屈折率を有する材料を埋め込んだ系においては、同様のストップバンドは現れないことが明らかとなった。また、この系における電磁波モードの空間分布について計算を行い、正の屈折率材料と負の屈折率材料の境界付近における電場・磁場の振る舞いにつ

いて明らかにした。

(2) 分散性媒質を導入したフォトニック結晶の解析に適した、一般化平面波展開法の開発

メタマテリアルにおいては一般に、材料の誘電率や透磁率が共に複雑な周波数依存性を示す、分散性媒質であるという特徴がある。フォトニック結晶に関する従来の数値的研究において、平面波展開法が多くの研究者によって用いられてきた。しかし、従来適用されてきた平面波展開法においては、上記の材料に関する周波数依存性を直接取り扱うことが困難であった。本研究ではこの問題に関して、拡張された平面波展開法（一般化平面波展開法）の開発を行う事により、誘電率と透磁率が共に任意の周波数依存性を有する材料を、数値的に取り扱う事が容易となった。

本研究においては、上記の計算手法を3次元メタマテリアル・フォトニック結晶の問題に適用して、計算結果の収束性について確認するとともに、電磁波の伝搬に関する物理的性質について適用可能である事を示した。特に、メタマテリアルの誘電率がゼロとなる特徴的な周波数近傍における、系の物理的性質について定量的に明らかにした。本研究で開発した、一般化平面波展開法に基づく数値計算手法は、本研究において取り扱ったメタマテリアル複合材料における電磁界解析にとどまらず、系の誘電率や透磁率が周波数依存性を示す一般の分散性媒質に幅広く適用可能である汎用的な手法であり、今後の応用が期待される。

(3) 非周期系メタマテリアル多層膜の解析

正の屈折率を有する材料と、負の屈折率を示すメタマテリアルから構成される周期的多層膜においては、系の平均屈折率がゼロとなる周波数領域において電磁波の透過率がゼロとなる現象（zero-n gap）が報告されている。

一般に光多層膜において、周期系ではなく非周期系（例：フィボナッチ格子）に関する研究が行われており、その場合周期系とは異なる透過特性が現れることが知られている。本研究では、Rudin-Shapiro系などの非周期構造を有するメタマテリアル多層膜の問題に関して、系の透過率の振る舞い、特にその非周期系における世代依存性や入射角依存性について数値的に明らかにした。また、正の屈折率を有する材料の部分に非線形光学媒質を導入した多層膜系に関する問題についても議論を行った。

(4) 大規模非エルミート行列の固有値・固有ベクトル解析の高精度化に関する研究

本研究課題においては、DFFD法（有限差

分・周波数領域法）を用いた大規模計算機シミュレーション解析に基づき、複雑な構造を有するメタマテリアル材料における波動伝搬解析および固有モード解析を行う。DFFD法に基づく計算を行う上では、巨大行列の固有値・固有ベクトル解析が必要となる。従来の研究より、非対称ランチョス法は数値計算における計算誤差に極めて弱く、行列の次数が大きくなるにつれて固有値・固有ベクトルの精度が悪化する傾向にある事が知られている。本研究代表者は上記の問題を解決する上で、「3. 研究の方法」でも述べた通り、拡張リッツ部分空間法という独自の手法を発展させることにより、上記の問題に対処することを提案していた。本研究課題においてはこの問題について、計算手法の更なる改良を行うことにより、行列の次元が大きな問題に関しても、系統的により高精度な解を得られる様なソフトウェアの開発に成功した。

本計算手法を適用することにより、DFFD法を用いた波動伝搬解析や、メタマテリアル複合材料（電磁メタマテリアル、音響メタマテリアルなど）に関する物質設計、およびその大規模計算機シミュレーションにおいて有効性を発揮することが確認された。

(5) 音響メタマテリアルにおける弾性波の伝搬解析

近年、固体のコア粒子をソフトマテリアルで被覆した微細構造ユニットを用いた材料を用いた実験的研究が行われている。系の母体としてエポキシ樹脂を使用して、その中に上記の球体（共鳴粒子）を周期的に配置した材料における、特徴的な音響特性について明らかにされている。具体的には、特定の振動数領域において、入射した音波の透過率が非常に小さくなるという現象が観測されている。

このような人工材料を理論的にモデル化する上で、mass-in-massモデルが提案されている。本研究ではまず、このような人工材料と通常の固体材料が周期的に配置されている音響メタマテリアル多層膜の振動特性について、数値的に明らかにした。その結果、系に特徴的なソニック・バンドギャップが存在する事、またそのバンドギャップ内にフラットな分散関係のモードが出現する事を確認した。後者の性質は、音響メタマテリアル多層膜に特有の性質であり、出現するモードの本数は多層膜の構造を変えることにより、自由に制御可能である事が明らかとなった。また、このような系の振動に関するモードパターンに関して明らかにすることにより、フラットな分散関係のモードに関する物理的起源についても議論を行った。また多層膜のみならず、2次元系の音響メタマテリアル複合材料に関して同様の研究を行った。

次に、音響メタマテリアルを用いた二重障壁系に関して、波の伝搬特性に関する数値的

研究を行った。その結果、バンドギャップ内に波の透過率が非常に大きくなる鋭いピークを示す特徴的な振動数が現れることが明らかとなった。弾性波の問題において、通常の固体材料を用いた二重障壁系よりも、特定の振動数の波を選択的に透過させる振動数フィルタとして優れている事が示された。この問題に関連して、二重障壁を構成する音響メタマテリアルの厚さや、二重障壁間の距離を変えることにより、効率的な振動数フィルタを構築するための適切な条件についても定量的な検討を行った。

また、共鳴粒子を母体となる材料の中にランダムに分散させた3次元系における振動特性についても、数値的に明らかにした。具体的には、上記の系における振動状態密度の計算などを行った。その結果、粒子内部の物性定数を変えた複数の共鳴粒子を導入することにより、指定した複数の振動数領域に関して、ソニック・バンドギャップが現れる材料を人工的に作成することが可能となる事が示された。一連の研究成果は、特定の振動数領域における弾性波のみを選択的に伝搬させる、高性能の振動数フィルタの設計を行う上で、有力な知見を与える事が期待される。

5. 主な発表論文等

(研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線)

[雑誌論文](計 8 件)

Takamichi Terao and Yoshikazu Ohnishi, "Vibrational properties of acoustic metamaterial multilayers", *Journal of Applied Physics* **117**, 134305-1-134305-7 (2015). (査読有)
DOI : 10.1063/1.4916987

Takamichi Terao, "Structural formation of dendritic polymer brushes: analysis using an explicit solvent model", *Chemistry Letters*, **44**, 1092-1094 (2015). (査読有)
DOI:10.1246/cl.150305

Takamichi Terao, "Numerical study of photonic metamaterial composites", *NEMO2014 conference proceedings 1-4* (2014). (査読有)
DOI:10.1109/NEMO.2014.6995675

Takamichi Terao, "Tetratic phase of Hertzian spheres: Monte Carlo simulation", *Journal of Chemical Physics*, **139**, 134501-1-134501-5 (2013). (査読有)

DOI:10.1063/1.4822101

Takamichi Terao, Ai Kono, and Wataru Takahashi, "Non-equilibrium dynamics of Coulomb glass: Kinetic Monte Carlo simulation", *AIP conference proceedings*, **1518**, 320-323 (2013). (査読有)
DOI:10.1063/1.4794591

Takamichi Terao, "Numerical study of two-dimensional metamaterial composites: the existence of a stop band", *Journal of Modern Optics*, **60**, 1997-2000 (2013). (査読有)
DOI:10.1080/09500340.2013.871758

Takamichi Terao, "Monte Carlo simulation of polymer-nanoparticle composites", *Chemistry Letters* **41**, 1425-1427 (2012). (査読有)
DOI:10.1246/cl.2012.1425

Takamichi Terao and Yuuki Oguri, "Two-stage melting transition of bilayer systems under geometrical confinement: multicolor domain-decomposition Monte Carlo simulation", *Molecular Simulation* **38**, 928-933 (2012). (査読有)
DOI:10.1080/08927022.2012.672740

[学会発表](計 15 件)

Takamichi Terao, "Numerical studies of acoustic metamaterial multilayers", 80th Annual Conference of the DPG and DPG Spring Meeting, Regensburg (ドイツ). (平成 28 年 3 月 7 日).

寺尾 貴道,
「微粒子および分岐高分子が関与する機能性材料の分子シミュレーション」
第 2 回「京」を中核とする HPCI システム利用研究課題 成果報告会への出席,
日本未来科学館(東京).(平成 27 年 10 月 26 日)

Takamichi Terao, "Monte Carlo simulation of dendron-coated colloids", 15th Conference of the International Association of Colloid and Interface Scientists (IACIS 2015),

Mainz (ドイツ). (平成 27 年 5 月 25 日)

Takamichi Terao,
“Numerical method to study metamaterial Composites”, The 5th International Topical Meeting on Nanophotonics and Metamaterials (Nanometa 2015), Seefeld (オーストリア). (平成 27 年 1 月 6 日)

寺尾 貴道,
「マルチカラー領域分割モンテカルロ法による超並列化と微粒子集積化への適用」第 1 回「京」を中核とする HPCI システム利用研究課題 成果報告会, コクヨホール(東京). (平成 26 年 10 月 31 日)

Takamichi Terao,
“Numerical study of photonic metamaterial composites”, IEEE International Conference on Numerical Electromagnetic Modeling and Optimization for RF, Microwave, and Terahertz Applications (NEMO2014), Pavia (イタリア). (平成 26 年 5 月 16 日)

Takamichi Terao,
“Tetratic phase of bilayer systems under geometrical confinement: Monte Carlo simulation”, 3rd International conference on molecular simulation (ICMS2013), 神戸国際会議場(神戸). (平成 25 年 11 月 18 日).

寺尾 貴道,
「マルチカラー領域分割モンテカルロ法による超並列化と微粒子集積化への適用」平成 25 年度「京」を中核とする HPCI システム利用研究課題第 2 回中間報告会, タイム 2 4 ビル(東京). (平成 25 年 10 月 2 日) (HPCI 運用事務局によるポスター掲示)

Takamichi Terao,
“Computer simulation of dendritic polymer brushes”, Polymer Interphases in Research and Technology, Frankfurt (ドイツ). (平成 25 年 9 月 30 日).

寺尾 貴道,
「コロイド粒子系の秩序形成に関するモンテカルロ・シミュレーション」第 64 回コロイド界面化学討論会, 名古屋工業大学(名古屋). (平成 25 年 9 月 20 日)

Takamichi Terao,
“Numerical method to study three-dimensional metamaterial

photonic crystals”, Progress In Electromagnetics Research Symposium (PIERS 2013) in Stockholm, Stockholm (スウェーデン). (平成 25 年 8 月 14 日).

寺尾 貴道,
「マルチカラー領域分割モンテカルロ法による超並列化と微粒子集積化への適用」平成 24 年度「京」を中核とする HPCI システム利用研究課題中間報告会, イイノカンファレンスセンター(東京). (平成 25 年 3 月 15 日)

Takamichi Terao,
“Finite-difference frequency-domain method to study metamaterial composites”, 4th International Topical Meeting on Nanophotonics and Metamaterials (NANOMETA2013), Seefeld (オーストリア). (平成 25 年 1 月 4 日).

Takamichi Terao, Ai Kono, and Wataru Takahashi,
“Non-equilibrium dynamics of Coulomb glass: Kinetic Monte Carlo simulation”, The 4th International Symposium on Slow Dynamics in Complex Systems, 東北大学(仙台). (平成 24 年 12 月 6 日).

Takamichi Terao,
“Monte Carlo simulation of polymer-nanoparticle composites”, International Association of Colloid and Interface Scientists (IACIS 2012), 仙台国際センター(仙台). (平成 24 年 5 月 16 日).

〔図書〕(計 0 件)

〔産業財産権〕
出願状況(計 0 件)

取得状況(計 0 件)

〔その他〕
なし

6. 研究組織

(1) 研究代表者

寺尾 貴道 (TERAO TAKAMICHI)
岐阜大学・工学部・教授

研究者番号: 40271647