

## 科学研究費助成事業 研究成果報告書

平成 29 年 6 月 10 日現在

機関番号：32665

研究種目：基盤研究(C) (一般)

研究期間：2014～2016

課題番号：26420321

研究課題名(和文) 古典・量子混合物理計算による光物質相互作用の解明と光直接記録への応用

研究課題名(英文) A Study of Light-Matter Interaction Using Hybrid Classical and Quantum Simulation and Its Application to All-Optical Magnetic Recording

研究代表者

大貫 進一郎 (OHNUKI, Shinichiro)

日本大学・理工学部・教授

研究者番号：80386002

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 3,900,000円

研究成果の概要(和文)：光を古典論、物質を量子論により時空間同時解析する混合物理計算法を開発し、物質の波動関数から求めた分極電流、トンネル効果などを考慮できる解析を実現した。本開発法を適用し、円偏光を照射して磁化反転を行う光直接記録の超高密度化に向けたシステム設計を行った。ナノメートルオーダの局所円偏光を生成するアンテナと粒子状記録媒体を利用することで、現行記録方式に比べ記録速度は最大10万倍、記録密度は数倍の向上が可能となる。また、提案システムは、アンテナおよび記録媒体の位置変化や、アンテナ製作プロセスで生ずる加工ずれに対して、高い記録安定性を有することも明らかにした。

研究成果の概要(英文)：A novel hybrid simulation based on the coupled classical and quantum theories has been developed. Various light-matter interactions were investigated by the proposed technique considering currents obtained by wave functions and tunnel effect. Performing the hybrid simulation, next generation technology of magnetic recording was studied. The proposed ultra-fast and high-density method is based on all-optical magnetic recording using nano antennas together with particulate recording media. In our system, the magnetic recording speed is about 100,000 times faster than that for conventional methods and the recording density becomes over a few Tbit/inch<sup>2</sup>. The system possesses high robustness for changing the position of antennas and recording media. We also clarified the condition of generating localized circularly polarized light for realistic nano-antenna models whose shapes are perturbed considering fabrication process.

研究分野：計算電磁気学

キーワード：混合物理計算 電磁界理論 量子論 光物質相互作用 磁気記録 光直接記録 データストレージ 電子・デバイス機器

### 1. 研究開始当初の背景

磁気ディスクの記録速度向上は理論的な限界を向かえ、その限界打破には円偏光による光直接記録方式が最有力と考えられていた。この方式において超高密度化を実現するには、ナノスケールの極微小領域、フェムト秒スケールの極短時間での時間発展および偏光依存を含む光物質相互作用の数値解析が残された大きな課題であった。そのため、古典・量子混合物理計算法、ナノ物質の共鳴吸収プロセス解析および非古典分散モデルを開発し、超高密度光直接記録システムのシミュレーション設計を行う必要性に迫られていた。本研究を遂行することで、記録速度は現行磁気記録方式の最大で 10 万倍、記録密度は数倍を越える、次世代磁気記録システムの実現が期待された。

### 2. 研究の目的

(1) 光を古典論(：マクスウェル方程式)物質を量子論(：シュレディンガー方程式)により時空間同時解析可能な、高精度混合物理計算法を開発する。

(2) 光とナノ粒子の相互作用を、粒子近傍に励起される近接場および電子の非局所性を考慮した数値計算により解析し、可視光域における微小金属の周波数分散モデルを確立する。

(3) 現行より最大で 10 万倍の磁気記録高速化かつ数倍の高密度化実現に向け、光直接記録方式を用いた次世代の記録システムをシミュレーション設計する。

### 3. 研究の方法

(1) マクスウェル方程式とシュレディンガー方程式を時空間同時解析可能な高精度混合物理計算法を差分法により開発する。更に、ナノ物質の波動関数より求めた分極電流、量子力学的トンネル効果などを考慮した光物質相互作用が解析可能な複合物理シミュレーションを実行する。

(2) 光とナノ粒子の相互作用を、粒子近傍に励起される近接場および電子の非局所効果を考慮して解析する。従来の分散モデルと非局所効果を考慮した新規分散モデルの解析結果を比較検討し、開発手法の妥当性を示す。更に、非局所効果が顕著に表れるナノ物質のモデル探索を行い、非古典分散モデルの正当性、有用性、およびその適用性を明らかにする。

(3) 光直接記録の偏光依存性を考慮して、現行の数倍を越える超高密度化の実現に向けた記録システムのシミュレーション設計を

行う。具体的には、粒子状記録媒体を含めた局所的円偏光生成用ナノアンテナの設計、超短光パルスの照射方法、アンテナの移動方法、アンテナおよび記録媒体位置に対する記録システムのロバスト性などより光直接記録システムを検証する。磁気記録に経験豊富なエキスパートとの協力で、形状実現性や磁性材料測定の観点から設計にフィードバックし、効率的なシミュレーション設計を行う。

### 4. 研究成果

(1) 光を古典論、物質を量子論により時空間同時解析する、信頼性の高い古典・量子混合物理計算法を開発した(図1参照)。これにより、光物質相互作用に物質の波動関数から求めた分極電流、量子力学的トンネル効果などを考慮した混合物理シミュレーションを実現した。図2に示すような多重井戸型のポテンシャルに電子が拘束される解析モデルでは、トンネル効果が顕著に表れることを明らかにし、開発手法でのみ物質中の電流密度やナノ物質近傍の電磁界を正確に評価できる。また、非調和型のポテンシャルに電子が拘束されるモデルに対しても、開発手法が有効であることを示した。計算の信頼性に関する検証を行い、シミュレーション結果は必要な計算精度内に制御できることを明らかにした。また、クラスタコンピュータを用いた分散コンピューティングを行い、高速化も併せて実現した。

(2) 古典・量子混合数値解析法を用いて、物質の量子状態制御に向けた新規光パルス設計法を開発した。図3に示す解析モデルは、

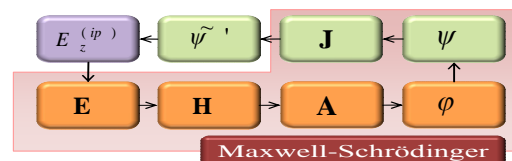


図1 古典・量子混合物理計算法

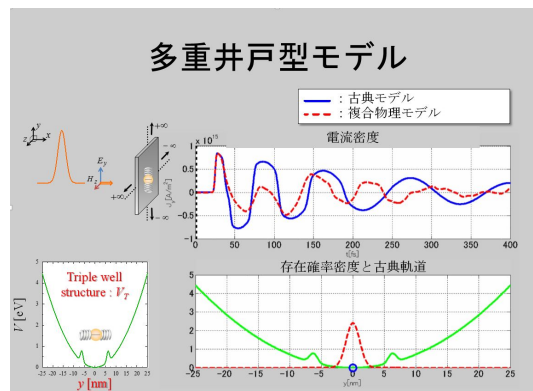


図2 多重井戸型モデルの電流密度

細管内に拘束された電子で、その基底状態ならびに第1励起状態間の光スイッチング動作を検証した。設計したパルスを入射した際の細管内量子波束の時間応答波形より、基底状態ならびに第1励起状態間のスイッチングはほぼ100%の精度で行えることを明らかにした。

(3) 古典・量子混合物理計算法の高精度化および計算時間と計算精度の最適化を検討した。光と物質の相互作用が量子論だけでは解析不能となり、混合物理計算が必須となる物理条件を導出した。簡易的な数式のみを用いる提案手法は、数値計算を実行することなく物理モデルだけで計算精度の推定が可能となる。本成果により、物質が生成する近接場は局所的であるものの、電子を拘束するポテンシャル構造などにより、その影響は大きく変化することを明らかにした。また、開発手法は物質の電子状態を制御する光パルスの設計などに応用できることも併せて示した。

(4) 局在表面プラズモンが励起された微小金円柱列に対して共鳴吸収プロセス解析と周波数分散性モデルの検討を行った(図4参照)。分極の局所的効果のみを考慮する従来モデルでは、円柱サイズが10 nm以下、円柱間距離が5 nm以下になると、共鳴吸収が起きる波長、そのピーク値ともに、数値結果と報告されている実験値に違いが現れた。図5に示すように、円柱間距離や円柱サイズが小さくなるにつれこの傾向は顕著となり、従来の

分散モデルは破綻することを確認した。非局所効果を考慮した提案モデルでは、共鳴吸収が起きる波長、ピーク値とも数値結果が改善され、実験値と一致する傾向が得られた。

(5) ナノアンテナに利用する微小金属を数nmまで隣接し、非局所効果を考慮した光学応答モデルの検証を行った。非局所効果を考慮すると、プラズモン共鳴時に分極電荷は金属の境界面から金属内部にも広がって分布すること(図6参照)、共鳴時のピーク値は低減し短波長側へシフトすることを明らかにした。

(6) 非局所効果と物質が生成する近接場の関係を、様々な微小金属を配置した解析モデルに対して明らかにした。図7に示した解析モデルのように金属の配置及び形状を変化させることで、近接場光の共振波長および位相が正確に制御できる。また、伝搬するプラズモンの波長シフト量をゼロとする金属配置を提案した(図8参照)。

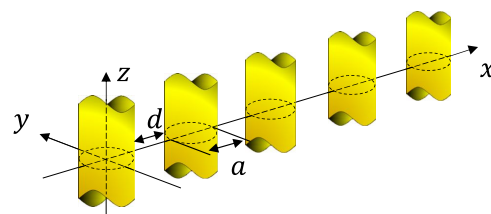
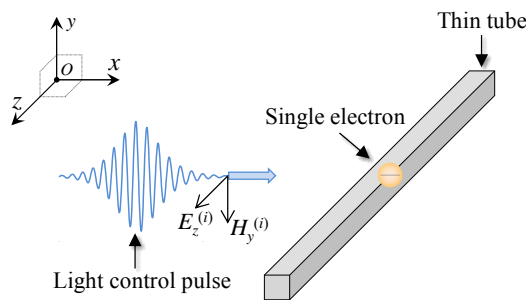
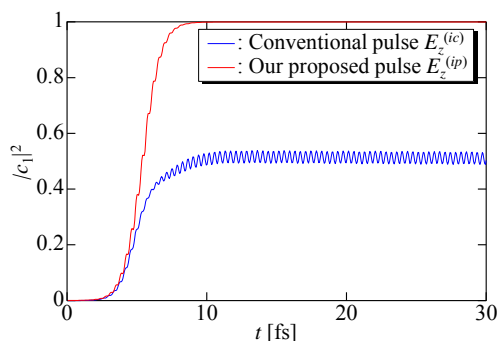


図4 微小金円柱列の解析モデル



(a) 解析モデルと座標系



(b) 量子状態制御

図3 光パルスによる量子状態制御

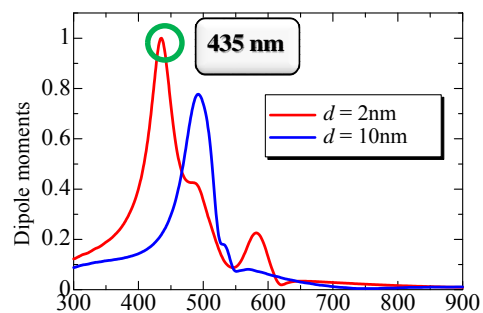


図5 共鳴周波数の推移

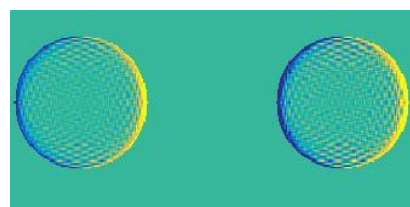


図6 微小金属内の電荷分布

(7) 光直接記録の偏光依存性を考慮して、超高密度化の実現に向けた記録システムのシミュレーション設計を行った。具体的には、直径 10nm の粒子状記録媒体を含めた局所的円偏光生成用アンテナを設計し、超短光パルスの照射方法を確立した。図 9 に示すような書込を想定したナノアンテナの移動方法、アンテナ及び記録媒体位置に対する記録システムのロバスト性をシミュレーションにより検証した。

(8) 円偏光を照射し磁化反転を行う光直接記録の高密度化に関するシミュレーション検証を行った。光直接記録の高密度化には、nm オーダの局所円偏光を生成するナノアンテナの利用が必須である。本研究では、アンテナ製作プロセスを考慮した加工ずれが生成光へ与える影響を解析した(図 10 参照)。シミュレーション設計した局所円偏光生成可能な理想形状のナノアンテナに、nm オーダの加工ずれを考慮する。理想形状からのずれに応じて円偏光度は低下し、最終的に直線偏光に近い楕円偏光となった。加工ずれを有するアンテナ形状に対しては、入射光の偏光度および入射角度を調整し、局所円偏光が生成可能な条件を求めた。導出した条件を満足させることで、加工ずれを有するナノアンテナにおいても局所円偏光は生成でき、高密度光直接記録に利用可能であることを明らかにした(図 11、図 12 参照)。

(9) 本提案システムは、ナノアンテナにより局所円偏光を生成し、高密度化が実現可能となる。システムの実験による検証を目的に、連携研究者がナノアンテナを試作した。試作

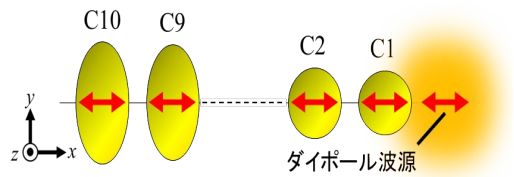


図 7 微小楕円柱列の解析モデル

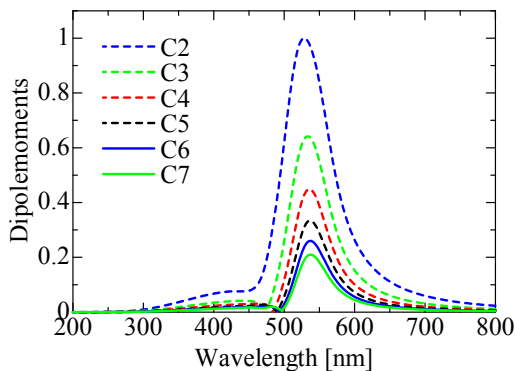
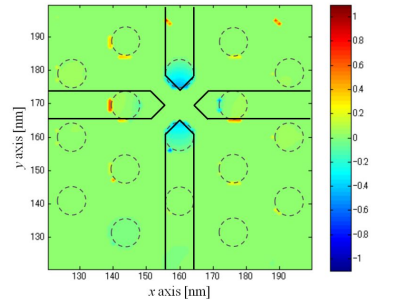
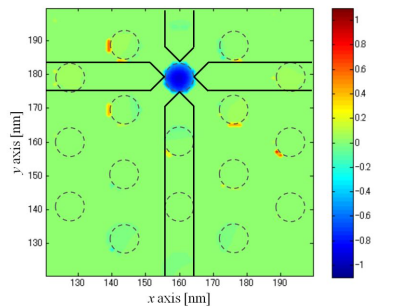


図 8 共鳴周波数の制御

アンテナは、シミュレーション設計した理想的な形状に比べて数ナノ程度の加工ずれが生じることを確認した。また、試作アンテナの加工ずれは局所生成光に影響を与え、安定した光直接記録を実現するためには位相補正が必須となることを明らかにした。これらの結果より、加工ずれを生じたナノアンテナに対して局所円偏光が生成できる入射光の条件を確立し、試作アンテナに対してもロバ



(a) アンテナ直下に粒子媒体がない場合



(b) アンテナ直下に粒子媒体がある場合

図 9 アンテナ位置に対する局所生成光

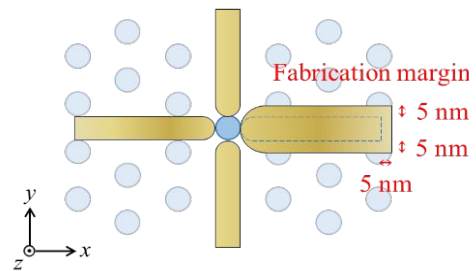
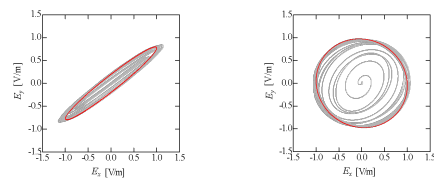


図 10 加工ずれを考慮した高密度光直接記録用アンテナ



(a) 直線偏光入射

(b) 楕円偏光入射

図 11 局所生成光の制御



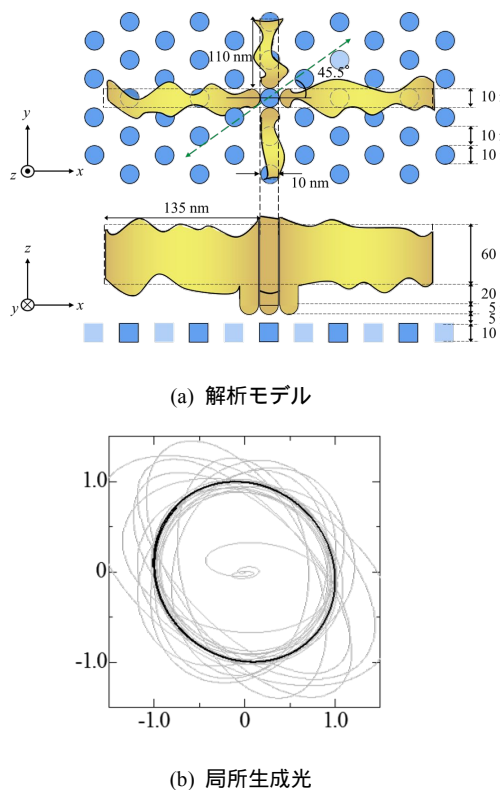


図 1.2 加工ずれを考慮した高密度光直接記録用アンテナによる局所偏光制御

スト性の高い、超高密度な光直接記録の実現可能性を示した。

## 5. 主な発表論文等

### 〔雑誌論文〕(計 14 件)

T. Yamaguchi, M. Ebisawa, and S. Ohnuki, "Precise Finite Difference Analysis of Lorentz Force Acting on Metal Nanoparticle Irradiated with Light," *Progress In Electromagnetics Research C*, vol. 73, pp. 81-86, 2017 (査読有).

T. Takeuchi, S. Ohnuki, and T. Sako, "A simple formula to predict the influence of the near-field in the optical control of confined electron systems," *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*, vol. 50, no. 4, pp. 045002-1 - 045002-13, 2017 DOI: 10.1088/1361-6455/aa55f4 (査読有).

S. Ohnuki, Y. Kitaoka, and T. Takeuchi, "Time-Domain Solver for 3D Electromagnetic Problems Using the Method of Moments and the Fast Inverse Laplace Transform," *IEICE Transaction Electron.*, vol. E99-C, no. 7, pp.797-800, 2016 (査読有).

K. Nagasawa, T. Takeuchi, and S. Ohnuki, "Nonlocal Effects Occurred in the Metallic Nano Chain Driven by Longitudinal or Transverse Modes," *IEICE Electronics*

*Express*, vol. 13, no. 8, pp.1-7, 2016.

Doi: 10.1587/elex.13.20160216 (査読有).

T. Takeuchi, S. Ohnuki, T. Sako, "A Quantum Switching System Manipulated by a Light Pulse Pair Maxwell-Schrödinger hybrid Algorithm," *URSI-Bulletin*, the issue of the *URSI Radio Science Bulletin*, no. 356, pp. 13-19, 2016 (査読有, 依頼).

H. Mano, H. Yoshikawa, H. Hashiba, Y. Ashizawa, A. Tsukamoto, Y. Sasaki, S. Saito, M. Takahashi, S. Ohnuki, and K. Nakagawa, "Thermally Assisted Magnetic Recording using Plasmon Antenna with Ultra Short Laser Pulse" *Journal of the Magnetic Society of Japan*, vol. 39, no. 5, pp.192-195, 2015 (査読有).

T. Takeuchi, S. Ohnuki, T. Sako, "Maxwell-Schrödinger hybrid simulation for optically controlling quantum states: A scheme for designing control pulses," *Physical Review A*, vol.91, pp.003400-1 - 003400-13, 2015. Doi: 10.1103/PhysRevA.91.033401 (査読有).

S. Ohnuki, T. Kato, Y. Takano, Y. Ashizawa, and K. Nakagawa "Design and Numerical Verification of Plasmonic Cross Antennas to Generate Localized Circularly Polarized Light for All-Optical Magnetic Recording," *Radio Science*, vol. 50, pp. 29-40, 2015, Doi:10.1002/2014RS005563 (査読有).

塚本新、大貫進一郎、中川活二、伊藤彰義, "次世代超高速・超高密度磁気記録への挑戦" *電子情報通信学会誌*, 平成 27 年 2 月号, pp. 138-143, 2015 (査読無, 依頼).

T. Takeuchi, S. Ohnuki, T. Sako, "Hybrid Simulation of Maxwell-Schrödinger Equations for Multi-physics Problems Characterized by Anharmonic Electrostatic Potential," *Progress In Electromagnetics Research*, vol. 148, pp. 73-82, 2014, Doi: 10.2528/PIER14063001(査読有, 招待論文).

S. Kishimoto, T. Okada, S. Ohnuki, Y. Ashizawa, K. Nakagawa, "Efficient Analysis of Electromagnetic Fields for Designing Nanoscale Antennas by Using a Boundary Integral Equation Method with Fast Inverse Laplace Transform," *Progress In Electromagnetics Research*, vol. 146, pp. 155-165, 2014(査読有).

K. Tamura, Y. Ashizawa, S. Ohnuki, K. Nakagawa, "Design of Highly Efficient Plasmonic Waveguide and Antenna for Thermally Assisted Magnetic Recording," *Journal of the Magnetics Society of Japan*, vol. 38, pp. 131-134, May 1, 2014(査読有).

T. Takeuchi, S. Ohnuki, T. Sako, "Comparison Between Maxwell - Schrödinger and Maxwell - Newton Hybrid Simulations for Multi - Well

Electrostatic Potential,” IEEE Journal of Quantum Electronics, no.5, vol.50, pp.533-544, May 2014. DOI: 10.1109/JQE.2014.2310196 (査読有).  
S. Ohnuki, K. Kobayashi, S. Kishimoto, and T. Yamasaki “Analysis of Electromagnetic Scattering from a Conducting Spherical Shell by the 3D Point Matching Method with Mode Expansion,” IEICE Transaction Electron., vol. E97-C, no.07, pp.714-717, Jul. 2014 (査読有).

〔学会発表〕(計 9 8 件)

大貫進一郎, 立澤圭輔, 芦澤好人, 中川活二, “次世代超高速磁気記録用ナノアンテナの設計,” 2017 年電子情報通信学会総合大会, BCI-1, 2017 年 3 月 23 日, 名城大学天白キャンパス, 愛知県名古屋市 (依頼講演).

S. Ohnuki, R. Oida, A. Kuma, “Numerical Verification of Magnetization Reversal Process of Bit-Patterned Media,” 2016 URSI Asia-Pacific Radio Science Conference, Aug. 21-25, Seoul, Korea, 2016 (招待講演).

S. Ohnuki, K. Nagasawa, R. Takahashi, “Optical Property of Gold Nano-Cylinder Chains,” 2016 URSI Asia-Pacific Radio Science Conference, Aug. 21-25, Seoul, Korea, 2016 (招待講演).

S. Ohnuki, K. Nakagawa, and A. Tsukamoto, “Development of Ultrafast and High-Density Magnetic Recording System Using Multi-physics Simulation,” World Engineering Conference and Convention 2015, Nov. 29 – Dec. 2, Kyoto International Conference Center, Kyoto-shi, Kyoto-fu, Japan, 2015 (依頼講演).

竹内 嵩, 大貫進一郎, 佐甲徳栄, 芦澤好人, 中川活二, 田中雅宏, “マルチフィジックスシミュレーションによる光と電子の相互作用の解析,” 2015 年電子情報通信学会総合大会, CS-5-1, 2015 年 3 月 11 日, 立命館大学びわこ・くさつキャンパス, 滋賀県草津市 (依頼講演).

他 9 3 件

〔図書〕(計 1 件)

S. Ohnuki, K. Tatsuzawa, Y. Takano, Y. Ashizawa and K. Nakagawa, “Evaluation of Localized Polarized Light Generated by Nano Antennas for High-Density All-Optical Magnetic Recording,” Genetic and Evolutionary Computing, Advances in Intelligent Systems and Computing, ed. T. T. Zin, J. C.-W. Lin, J.-S. Pan, P. Tin, and M. Yokota, Springer, vol. 387, pp. 383-389, 2015.

〔産業財産権〕

取得状況 (計 1 件)

名称: 情報記録ヘッド、情報記録装置、情報記録方法及び光デバイス

発明者: 中川活二, 芦澤好人, 大貫進一郎, 伊藤彰義, 塚本新

権利者: 同上

種類: 特許

番号: 5812380

取得年月日: 2015 年 10 月 02 日

国内外の別: 国内

〔その他〕

ホームページ等

<http://www.cem.ele.cst.nihon-u.ac.jp>

<http://kenkyu-web.cin.nihon-u.ac.jp/Profiles/65/0006410/profile.html>

6. 研究組織

(1) 研究代表者

大貫 進一郎 (OHNUKI, Shinichiro)

日本大学・理工学部・教授

研究者番号: 8 0 3 8 6 0 0 2

(2) 連携研究者

中川 活二 (NAKAGAWA, Katsuji)

日本大学・理工学部・教授

研究者番号: 2 0 2 2 1 4 4 2

佐甲 徳栄 (SAKO, Tokuei)

日本大学・理工学部・准教授

研究者番号: 6 0 3 6 1 5 6 5