#### 平成 25 年度 産業利用トライアルユース:先端研究基盤共用・プラットフォーム形成事業 『みんなのスパコン』TSUBAME による日本再生 成果報告書

利用課題名 3次元ナノアーキテクチャの各種光デバイスへの応用の為の光学的解析 英文:Large-scale computational study of optics properties for optical devices with nano scale structure

# 利用課題責任者 沖 巌

Iwao Oki

## 所属 サイバネットシステム株式会社オプティカル事業部 Optical Division, CYBERNET SYSTEMS CO.,LTD. http://www.cybernet.co.jp

ナノスケールの微細構造を持つデバイスの光学特性を解析する場合、さまざまな制約から小さい領域のみの 計算をすることが多い。しかし、このような計算には理想状態や限定された条件が多く含まれることがよくあり、、 計算結果は現実的な測定と乖離することがよくある。今回はランダムな構造を持つナノファイバーの光学特性を 計算することで、計算結果が実測値と近似するかどうかの確認を試みた。これによってナノ構造が及ぼす光学 特性についての特異的な物理現象の再現性についての評価をすることができ、また計算サイズによる影響の 確認も試みることができた。

When we analyze optical properties of device which has microstructure of nano scale, we often calculate only small simulation domain by many limitations. However output result of this simulation has various limited condition and this result sometimes differs from actual measurement result. We tried to confirm whether we can calculate or cannot calculate specific physical phenomena of device which has random microstructure of nano scale at this time.

Keywords: FDTD, plasmon, FullWAVE, nano fiber

#### 背景と目的

3 次元ナノアーキテクチャ構造によって、特異な特性 を持たせるデバイスの光学的解析においては、膨大な 計算資源を必要とされるため形状や解析結果を限定し ながら簡易計算を行っているのが一般的である。今ま ではフォトニック結晶構造のように周期的な構造が多か ったが、製造の容易性等から、配置や構造がランダム な3次元ナノアーキテクチャを持つデバイスが検討され ることが多くなってきている。

構造が周期構造をとるようなものであれば、計算上 の境界条件や手法を工夫することで現実的な解が得ら れるが、ランダムな構造で特異な特性を持たせるような デバイスの場合、計算における簡略化が出来ず、干渉 の効果を厳密に計算する必要がある。そのため計算の 分解能を構造または光源波長の 1/10 以下に設定する 為、100um 角でも計算規模が大きくなり計算時間も膨 大で、単体の計算機や数台規模のクラスター計算機で は解析が困難である。 本プロジェクトでは、このような計算が困難なデバイ スの解析を、大規模並列計算環境の TSUBAME 上で 分散計算が可能なソルバー(Synopsys 社の FullWAVE)を使用してモデリングし特性の計算を行い 評価した。

#### 概要

3 次元ナノアーキテクチャの一種であるナノファイバ ーの堆積構造は、エレクトロスピニング等の方法により パラメータを制御し、ある程度の規則性を持った構造と して作成可能である。このような構造は光の散乱により、 表面プラズモン共鳴を起こすことが各種実験等により 確認されている。これらは新しい導電層や、太陽電池な どに応用できるが、構造の周期性が低いため特性の計 算には大きい計算領域が必要となる。ここでは、エレク トロスピニング法により金の表面上にコーティングされ る Poly(vinylpyrrolidone)(PVP)ナノファイバーによる 表面プラズモン共鳴効果を含んだ反射スペクトラムを 計算し検証する。

#### モデルと計算概要

本課題で取り上げるナノファイバーの堆積構造にお いて、PVPファイバーの構造が微細なため計算グリッド は細かくなければならない。

計算を行ったモデルは、BK7 のガラス基板上に 50nmの金薄膜を作り、その上にPVPナノファイバーを 3 層堆積した。PVP ナノファイバーの直径は 250nm と し、方向と間隔を変えて構造を作成した。ナノファイバ ーの置かれる方向(ファイバー長手方向)は1層ごとに 約 45 度回転させ、層内ではある一定範囲で方向にバ ラツキを与えた。これによって、3 層のナノファイバーに よって囲まれる何もない領域を、バラツキを持って作成 した。(Fig.1 参照)

検討する構造パラメータを絞り込むために参照論文 [1] におけるナノファイバーの生成状況を検討した結果、 今回の計算におけるナノファイバーの構造は直径一定 で直線の棒状の形状とした。(Fig.2 参照)



Fig.1 計算モデル 金属膜(黄色) ナノファイバー(緑色) このモデルを利用して、このような周期性の低い構 造を計算するときに、必要な計算資源と計算グリッドが どの程度なのかを検討し、評価を行う。



Fig.2 ナノファイバー1層のモデル

### 結果および考察

計算グリッドの最適化

本課題のモデルは表面プラズモン共鳴(以下 SPR)の 効果も考慮しないといけないため、計算グリッドは通常 よりも小さいものが必要になるが、どの程度の影響か を検証するため計算グリッドを変えて計算した。解析 波長の領域は 0.8eV から 3.2eV までの間であるが、こ の中の一番短波長側でも十分にグリッドをとっている (波長あたり7ポイント)。基本の計算グリッドは 20nm でナノファイバーの直径 250nm に対しても 10 ポイント 以上あるため通常の計算では問題になるレベルではな い。しかし、Fig.3 を見るとナノファイバー周辺に励起さ れるプラズモン現象のシミュレーションには十分ではな いようにみえる。(2.4eV 以上の領域においてモニター のデータの連続性が途切れて数値が 5 倍以上変化し ているため信頼性が無い)

そこで不等分メッシュ機能を利用し、ナノファイバーの 堆積方向の軸において不等分メッシュ計算グリッドの最 小値を基本グリッドの 1/10 の 2nm として計算し多結果 も同時に Fig. 3 に示す。結果が示すように、3.2eV まで の間で十分プラズモン現象を含む現象をシミュレーショ ン出来ていることが確認できた。

Compare Spectrum at different grid size



Fig.3 計算グリッドの影響

計算サイズの影響の検討

ナノファイバーの構造による表面プラズモン 共鳴は、ナノファイバーで囲まれる間隙(穴)のサイズと 関係があることは実験結果<sup>[1]</sup>でも明らかであるが、シミ ュレーションにおいては計算領域のサイズとの関係も あり、そのため計算サイズを変えて影響を検証した。 Fig.4 と Fig.5 のグラフは、2 種類の計算サイズで穴の サイズを変えて計算した結果である

これらの結果からわかることは、今回のモデルのよう なランダムな構造の場合、周期的な構造と違って、プラ ズモンの励起が起こる場所が少ないために、解析領域 にナノファイバーが存在しても、ある一定以上の密度が ないと現象を拾い出すことが出来ないということである。 これは、Fig.4 のグラフに示されているが、密度を変え たとしてもほとんどモニターの出力に違いがみられない ことからもわかる。







Fig.5 計算領域75um角の各穴サイズの反射スペクトラム

## モデル計算結果

今までの計算パラメータの検討を踏まえて最終的なモ デルの計算結果を示す。最初に解析的に表面プラズモ ンの分散と入射光と散乱光の関係を考える。Fig.6を見 ると、入射光が 70 度の角度で入射したときに、 0.5,1,1.5,2eV付近と、2.2eV~2.4eV付近に共鳴が起 こる可能性があることがわかる。



Fig. 6 表面プラズモンと入射光の関係

Fig.7にSPR 共鳴時の金薄膜付近の電界強度分布 を示す。これを見ると、ナノファイバーに沿って SPR 共鳴で起こった強い強度の電界があることがわか る。



Fig. 7 SPR 時の電界強度分布

PVP ナノワイヤーの構造と金薄膜の直上にモニターを 設置し、パワーを計算した結果を Fig.8 と Fig.9 に示 す。



Fig. 8 PVP ナノファイバー直上のパワー

Fig.8、Fig.9 を見れば PVP ナノファイバーの密度と表 面プラズモン共鳴の強さは比例していることがわかる。 また、Fig.6 で表された点の付近のエネルギーのところ に特性のピークが出ていることが確認できる。

これらを総合すると、適切な計算領域とグリッドをとるこ とで、このようなランダムな微細構造をもつデバイスの 特性や現象を十分にシミュレーションすることが可能で あることが確認できた。



## Fig.9 金薄膜直上のパワー

Fig.9 のパワーは間隙のサイズによって、モニターの 値が正負にまたがって分布している。モニター上のパ ワーの方向を示しており、マイナスの値は、反射方向を 示し、プラスは金属膜方向にパワーが向いていることを 示している。これは、ナノファイバーの堆積密度がある ー定値を超えてくると、光が局在してくる確率が増える ことを示している。

#### まとめ、今後の課題

今回のような構造を持つデバイスを計算する場合、 やはり計算時間等がポイントとなってくる。これを解決し ていくには分散計算が必要だが、ノード間のデータ通信 の量や、メモリアクセス速度、CPU の能力などにより、 単純に数多く分割すればよいわけではない。今回は、 本計算を行う前に、これらの要因によってどのように計 算スピードが変わっていくかを簡単なモデルで検証した。 Fig.10 に結果を示すが、ノード数と1ノードあたりのプ ロセス数と計算スピードの関係を検証した結果である。 (TSUBAME上で計算を行っているが、1ノードには12 個のコアがある)

このモデルはモニターがない単純なモデルだが振り分 け方でも計算時間に差が出るのがわかる。

1ノード1プロセスが一番早い結果になっているが、ノ ード間通信にはオーバーヘッドがあるため、モデルの 作り方や計算の状況によっては変わってくる。そのため モデルが別な場合は再検討が必要である。





今回のモデルの計算はTSUBAMEにおいて1回の 計算を平均メモリ 110GByte, 5node, 10 プロセス /node でクラスター50 並列にて約 3.5 時間で行われた (S クラスノードにて)。 15µm 角でのモデル(使用メモ リ約 9 GB)では、4node, 4 プロセス/node でクラスター 16 並列で純粋な処理時間 9.4 分、ポスト・プリ処理を含 めた時間(Wall Time)は 13.16 分で終了した。これを同 等の CPU を持つワークステーション(Windows7 OS) で分散計算を行わないで計算した結果、448.3 分で (Wall Time も同じ)となった。CPU のクロックの違いを 補正すると、493.13 分(TSUBAME と同等)になり、 37.4 倍の計算時間の短縮効果が得られた。この様に モニターの設定や構造、計算設定が異なる場合は、最 終的な計算スピードも変わってくるが、TSUBAME の

#### (様式第20)成果報告書

ような大規模分散計算環境を利用することで、今まで は実質上計算不可能であった大規模モデルを十分な 精度を確保しながら、現実の結果に近い結果が短時間 で得られた。よって、今回のようなランダムな微細構 造を持つデバイスの特性を解析したい場合、 TSUBEME のような大規模分散計算環境は非常に有 用であることが確認できた。

今後は、より大きな計算量を必要とするモデルに対 して、さらに効率的な計算が出来るようにするには何が 必要なのかを検討したい。

## <参考文献>

1. **Tsuboi.** Light scattering assisted surface plasmon resonance at electrospun nanofiber-coated gold surfaces.: Applied Physics Latters 98, 2011.  $\sim - :: 241109$ .