

FDTD 法を用いた電磁波の細胞構造における散乱解析

北川 晃^{*}, 倉田 薫子[†], 長田 拓之[‡]

Scattering analysis of the electromagnetic field in cell structures with FDTD method

Akira Kitagawa^{*}, Kaoruko Kurata[†], Hiroyuki Osada[‡]

概要

葉の表面に入射する光について数値シミュレーションを行い、葉内部の細胞構造による光の散乱の様子について調べた。細胞構造が密に詰まっている場合と空隙がある場合のモデルについて、有限差分時間領域法 (FDTD 法) による数値計算を行った。前者に比べて後者では、葉の表面での一次反射の他にも内部構造で特徴的な散乱が見られ、これにより反射光が強められていることがわかった。今回得られた数値シミュレーション結果は、波動光学の観点からも妥当であるといえる。以上の事実は、葉の表側と裏側で緑色の濃さに違いが見られることの一因となっていると考えられる。

1 はじめに

葉の表側と裏側を観察すると、ともに緑色ではあるものの、その色合いはかなり異なっていることが知られている。両面の様子を比較すると、表面は濃い緑色であるのに対し、裏面は白っぽい緑色を呈している。この色の違いは一般に、表側に葉緑体 (葉緑素) を多く持つ細胞が整列した柵状組織として存在するためであると説明されてきた。

しかしながら別の解釈として、葉緑体の量の他に葉の内部の細胞構造にも依存している可能性が指摘されている [1]。緑色が濃い葉の表側であっても、その表面に色の薄い斑紋が存在する場合があるが、原は植物の斑紋の形成には次の 4 つのパターンがあ

ると分類している [2]。

1. 葉緑素型：変色部分における葉緑素が欠損している
2. 細胞空隙型：表皮細胞直下に細胞空隙がある
3. 表皮型：表皮細胞の厚さによる
4. 色素型：葉緑素以外の色素による

このうちの 2 つ目の型では、葉肉細胞の細胞間に空隙が存在することが原因で、表から見たときに白い斑紋が現れると考えられている。筆者らはこれまでに、白い斑紋や白化した葉の切片構造を観察してきたが、その過程で白緑色を呈するもののなかにも葉緑体を通常と同程度持つ細胞が並んでいる場合があることを発見した。こうした例では、柵状組織内に海綿状組織のような空隙 (空気層) を持つこともわかった。

細胞構造に空隙がある場合、細胞の配列と合わ

^{*} 横浜国立大学教育学部 kitagawa-akira-xs@ynu.ac.jp

[†] 横浜国立大学教育学部

[‡] 横浜国立大学大学院先進実践学環

せて複雑な構造が形成されている。ここへ光（電磁波）が入射すると、葉の表面を透過した光の成分が内部で散乱される。この散乱光により、葉の表面で一次反射された光が強められ、色が白く見えている可能性がある。

本稿では、上記の過程の妥当性を検討するため、細胞構造へ入射する光（電磁波）の散乱の数値シミュレーションを行った（光とは狭義で可視光のことを示すが、以降では広く電磁波と同じ意味で用いることにする）。細胞構造の大きさ $\sim 50\mu\text{m}$ に対して可視光の波長 $\lesssim 1\mu\text{m}$ であり、この状況下では光の振る舞いは幾何光学の範疇でも扱えるものである。しかしながら今回考える細胞構造は複雑な形状であり、すべての光路を完全に追跡することは難しい。そこで今回の数値解析には波動光学に基づく手法である有限差分時間領域法（Finite-difference time-domain method, FDTD 法）[5] を用いた。FDTD 法は電磁波分布の時間発展を順次計算していくことができる手法であり、その光路が調べられるのはもちろん、電磁波同士の干渉についても再現できることが特長である。数値計算コードは、Python 言語を用いて実装している。

今回開発したコードを用いて、細胞の並びが密である場合と空隙がある場合の構造へ光が入射する様子について数値計算を行い、その内部構造の差による光の散乱の様子の違いについて調べた。数値シミュレーションの結果、後者の空隙をもつ構造では内部構造において複雑な散乱が起こっており、その結果強い反射光が得られることがわかった。またこの事実は、細胞構造が密である葉の表側よりも、空隙構造がある裏側の方が白っぽく見える一因となりうることを示す。

本稿の構成は以下の通りである。第 2 節では FDTD 法の概略についてまとめる。第 3 節で数値計算結果を示し、葉の表側よりも裏側の方が白っぽく見える理由について考察を加える。第 4 節では得られた数値計算結果の波動光学の観点からの妥当性について検討する。第 5 節で議論をまとめる。

2 有限差分時間領域法

本稿では光（電磁波）の振る舞いの解析に、有限差分時間領域法（FDTD 法）を用いている。FDTD 法は電磁場を数値的に扱い、その振る舞いを計算するための方法の一つである [3]。本節でその概要をまとめる。

電磁気現象は、以下のマクスウェル方程式により記述される。

$$\nabla \cdot \mathbf{D} = \rho, \quad (1)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0, \quad (2)$$

$$\nabla \times \mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t}, \quad (3)$$

$$\nabla \times \mathbf{H} = \mathbf{J} + \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t}, \quad (4)$$

ここで太文字は空間におけるベクトルであることを表しており、 ∇ は微分演算子である。

$$\nabla = \mathbf{i} \frac{\partial}{\partial x} + \mathbf{j} \frac{\partial}{\partial y} + \mathbf{k} \frac{\partial}{\partial z}. \quad (5)$$

$\mathbf{E}, \mathbf{H}, \mathbf{D}, \mathbf{B}$ はそれぞれ電場、磁場、電束密度、磁束密度を表しており、電束密度・磁束密度は、それぞれ電場・磁場と

$$\mathbf{D} = \varepsilon \mathbf{E}, \quad (6)$$

$$\mathbf{B} = \mu \mathbf{H} \quad (7)$$

のように関連付けられる。 ε は誘電率、 μ は透磁率を表すが、これらはそれぞれ電場、磁場の誘電体、磁性体との相互作用をマクロな視点から特徴付けるために導入されているパラメータである。また \mathbf{J}, ρ はそれぞれ電流密度と電荷密度である。

以上の四つのマクスウェル方程式のうち、(1) 式はガウスの法則、(2) 式は磁氣的単極子が存在しないことに対応する。(3) 式は電磁誘導の法則、(4) 式はアンペール・マクスウェルの法則を表しており、これらは電場と磁場のベクトルが互いに影響を及ぼし合っていることを意味している。実際、マクスウェル方程式から電場および磁場を解とする波動方程式が導かれることが知られている。FDTD 法は (3), (4) の 2 つの式から出発する。

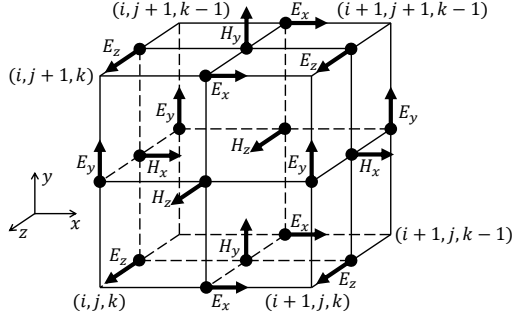


図1 Yee 格子上的における電磁場成分の配置.

電磁場の振る舞いを数値的に取り扱うために、空間座標の値 x, y, z と、時刻 t をそれぞれ離散的な値とみなす。すなわち i, j, k, n を整数として、

$$\begin{aligned} x_i &= x_0 + i\Delta x, \\ y_j &= y_0 + j\Delta y, \\ z_k &= z_0 + k\Delta z, \\ t_n &= t_0 + n\Delta t, \end{aligned}$$

および

$$\begin{aligned} x_{i+\frac{1}{2}} &= x_0 + \left(i + \frac{1}{2}\right) \Delta x, \\ y_{j+\frac{1}{2}} &= y_0 + \left(j + \frac{1}{2}\right) \Delta y, \\ z_{k+\frac{1}{2}} &= z_0 + \left(k + \frac{1}{2}\right) \Delta z, \\ t_{n+\frac{1}{2}} &= t_0 + \left(n + \frac{1}{2}\right) \Delta t \end{aligned}$$

のように表す ($\Delta x, \Delta y, \Delta z$ はセルサイズ, Δt は時間ステップ).

相互作用する電磁場を表現するために、図1のような Yee 格子を考える [4]. ここでは以下の通り、電場・磁場の $\alpha (= x, y, z)$ 成分を配置する.

$$E_\alpha : \begin{cases} \text{成分}\alpha\text{に一致する座標は半整数} \\ \text{その他の座標は整数} \\ \text{時刻は整数} \end{cases}$$

$$H_\alpha : \begin{cases} \text{成分}\alpha\text{に一致する座標は整数} \\ \text{その他の座標は半整数} \\ \text{時刻は半整数} \end{cases}$$

以上のルールに従えば、例えば電場及び磁場の x 座

標成分は、以下のように表せる.

$$\begin{aligned} E_x(x, y, z, t) &\rightarrow E_x(x_{i+\frac{1}{2}}, y_j, z_k, t_n) \\ &\equiv (E_x)_{i+\frac{1}{2}, j, k}^n, \end{aligned} \quad (8)$$

$$\begin{aligned} H_x(x, y, z, t) &\rightarrow H_x(x_i, y_{j+\frac{1}{2}}, z_{k+\frac{1}{2}}, t_{n+\frac{1}{2}}), \\ &\equiv (H_x)_{i, j+\frac{1}{2}, k+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}}, \end{aligned} \quad (9)$$

E_y, E_z, H_y, H_z も同様に表現できる.

こうした離散変数の下で、微分を差分で近似すると、(3) 式の各成分は次のように書ける.

$$\begin{aligned} \frac{1}{\mu_{i, j+\frac{1}{2}, k+\frac{1}{2}}} &\left[\frac{(E_z)_{i, j+1, k+\frac{1}{2}}^n - (E_z)_{i, j, k+\frac{1}{2}}^n}{\Delta y} \right. \\ &\quad \left. - \frac{(E_y)_{i, j+\frac{1}{2}, k+1}^n - (E_y)_{i, j+\frac{1}{2}, k}^n}{\Delta z} \right] \\ &= - \frac{(H_x)_{i, j+\frac{1}{2}, k+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}} - (H_x)_{i, j+\frac{1}{2}, k+\frac{1}{2}}^{n-\frac{1}{2}}}{\Delta t}, \end{aligned} \quad (10)$$

$$\begin{aligned} \frac{1}{\mu_{i+\frac{1}{2}, j, k+\frac{1}{2}}} &\left[\frac{(E_x)_{i+\frac{1}{2}, j, k+1}^n - (E_x)_{i+\frac{1}{2}, j, k}^n}{\Delta z} \right. \\ &\quad \left. - \frac{(E_z)_{i+\frac{1}{2}, j, k+\frac{1}{2}}^n - (E_z)_{i-\frac{1}{2}, j, k+\frac{1}{2}}^n}{\Delta x} \right] \\ &= - \frac{(H_y)_{i+\frac{1}{2}, j, k+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}} - (H_y)_{i+\frac{1}{2}, j, k+\frac{1}{2}}^{n-\frac{1}{2}}}{\Delta t}, \end{aligned} \quad (11)$$

$$\begin{aligned} \frac{1}{\mu_{i+\frac{1}{2}, j+\frac{1}{2}, k}} &\left[\frac{(E_y)_{i+1, j+\frac{1}{2}, k}^n - (E_y)_{i, j+\frac{1}{2}, k}^n}{\Delta x} \right. \\ &\quad \left. - \frac{(E_x)_{i+\frac{1}{2}, j+1, k}^n - (E_x)_{i+\frac{1}{2}, j, k}^n}{\Delta y} \right] \\ &= - \frac{(H_z)_{i+\frac{1}{2}, j+\frac{1}{2}, k}^{n+\frac{1}{2}} - (H_z)_{i+\frac{1}{2}, j+\frac{1}{2}, k}^{n-\frac{1}{2}}}{\Delta t}, \end{aligned} \quad (12)$$

ここで一般に透磁率 μ も空間座標に依存する関数であるため、対応する添え字を与えている。また、両辺の添え字の中心 (平均) の値が一致するように取られていることに注意すべきである。例えば、(10) 式の左辺, Δy に関する差分の項では, E_z の y 軸方向の添え字として j と $j+1$ が現れているが、これらの中心は $j + \frac{1}{2}$ であり、他の項の対応する添え字と一致していることがわかる。他の添え字につ

いても同様である。両辺でこれらの添え字が異なるように定式化した場合でも、形式的に計算は可能であるが、数値的に不安定になる場合があるため、注意が必要である。

上式を変形すると、以下のような漸化式が得られる。

$$(H_x)_{i,j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}} = (H_x)_{i,j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}}^{n-\frac{1}{2}} - \frac{\Delta t}{\mu_{i,j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}}} \left[\frac{(E_z)_{i,j+1,k+\frac{1}{2}}^n - (E_z)_{i,j,k+\frac{1}{2}}^n}{\Delta y} - \frac{(E_y)_{i,j+\frac{1}{2},k+1}^n - (E_y)_{i,j+\frac{1}{2},k}^n}{\Delta z} \right] \quad (13)$$

$$(H_y)_{i+\frac{1}{2},j,k+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}} = (H_y)_{i+\frac{1}{2},j,k+\frac{1}{2}}^{n-\frac{1}{2}} - \frac{\Delta t}{\mu_{i+\frac{1}{2},j,k+\frac{1}{2}}} \left[\frac{(E_x)_{i+\frac{1}{2},j,k+1}^n - (E_x)_{i+\frac{1}{2},j,k}^n}{\Delta z} - \frac{(E_z)_{i+1,j,k+\frac{1}{2}}^n - (E_z)_{i,j,k+\frac{1}{2}}^n}{\Delta x} \right] \quad (14)$$

$$(H_z)_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k}^{n+\frac{1}{2}} = (H_z)_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k}^{n-\frac{1}{2}} - \frac{\Delta t}{\mu_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k}} \left[\frac{(E_y)_{i+1,j+\frac{1}{2},k}^n - (E_y)_{i,j+\frac{1}{2},k}^n}{\Delta x} - \frac{(E_x)_{i+\frac{1}{2},j+1,k}^n - (E_x)_{i+\frac{1}{2},j,k}^n}{\Delta y} \right] \quad (15)$$

以上の式は、左辺時間ステップ $n + \frac{1}{2}$ の磁場成分が、時間ステップ n の電場成分及び $n - \frac{1}{2}$ の磁場成分から計算できることを意味している。

同様に (4) 式についても差分化でき、これを整理すると以下ようになる。

$$(E_x)_{i+\frac{1}{2},j,k}^{n+1} = \left[1 - \frac{\sigma_{i+\frac{1}{2},j,k} \Delta t}{\varepsilon_{i+\frac{1}{2},j,k} + \frac{\sigma_{i+\frac{1}{2},j,k} \Delta t}{2}} \right] (E_x)_{i+\frac{1}{2},j,k}^n + \frac{\Delta t}{\varepsilon_{i+\frac{1}{2},j,k}} \frac{1}{1 + \frac{\sigma_{i+\frac{1}{2},j,k} \Delta t}{2\varepsilon_{i+\frac{1}{2},j,k}}} \times \left[\frac{(H_z)_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k}^{n+\frac{1}{2}} - (H_z)_{i+\frac{1}{2},j-\frac{1}{2},k}^{n+\frac{1}{2}}}{\Delta y} - \frac{(H_y)_{i+\frac{1}{2},j,k+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}} - (H_y)_{i+\frac{1}{2},j,k-\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}}}{\Delta z} \right], \quad (16)$$

$$(E_y)_{i,j+\frac{1}{2},k}^{n+1} = \left[1 - \frac{\sigma_{i,j+\frac{1}{2},k} \Delta t}{\varepsilon_{i,j+\frac{1}{2},k} + \frac{\sigma_{i,j+\frac{1}{2},k} \Delta t}{2}} \right] (E_y)_{i,j+\frac{1}{2},k}^n + \frac{\Delta t}{\varepsilon_{i,j+\frac{1}{2},k}} \frac{1}{1 + \frac{\sigma_{i,j+\frac{1}{2},k} \Delta t}{2\varepsilon_{i,j+\frac{1}{2},k}}} \times \left[\frac{(H_x)_{i,j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}} - (H_x)_{i,j+\frac{1}{2},k-\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}}}{\Delta z} - \frac{(H_z)_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k}^{n+\frac{1}{2}} - (H_z)_{i-\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k}^{n+\frac{1}{2}}}{\Delta x} \right], \quad (17)$$

$$(E_z)_{i,j,k+\frac{1}{2}}^{n+1} = \left[1 - \frac{\sigma_{i,j,k+\frac{1}{2}} \Delta t}{\varepsilon_{i,j,k+\frac{1}{2}} + \frac{\sigma_{i,j,k+\frac{1}{2}} \Delta t}{2}} \right] (E_z)_{i,j,k+\frac{1}{2}}^n + \frac{\Delta t}{\varepsilon_{i,j,k+\frac{1}{2}}} \frac{1}{1 + \frac{\sigma_{i,j,k+\frac{1}{2}} \Delta t}{2\varepsilon_{i,j,k+\frac{1}{2}}}} \times \left[\frac{(H_y)_{i+\frac{1}{2},j,k+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}} - (H_y)_{i-\frac{1}{2},j,k+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}}}{\Delta x} - \frac{(H_x)_{i,j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}} - (H_x)_{i,j-\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}}}{\Delta y} \right], \quad (18)$$

ここで (6) 式とオームの法則の微視的な表現

$$\mathbf{J} = \sigma \mathbf{E} \quad (19)$$

を用いた (σ は電気伝導率)。また差分化の過程でステップ $n + \frac{1}{2}$ の電場成分が現れるが、例えば x 成分について、

$$(E_x)_{i+\frac{1}{2},j,k}^{n+\frac{1}{2}} = \frac{(E_x)_{i+\frac{1}{2},j,k}^{n+1} + (E_x)_{i+\frac{1}{2},j,k}^n}{2}$$

のようにステップ n と $n+1$ の場合の平均として表している (他の y, z 成分についても同様)。ここで得られた (16)~(18) の各式は、左辺時間ステップ $n+1$ の電場成分が、時間ステップ $n + \frac{1}{2}$ の磁場成分及び n の電場成分から計算できることを意味している。

以上より、ある時点での電場もしくは磁場を初期値として与えれば、それ以降の電磁波を順次計算で

きることがわかる。ただし、計算の精度を保つために空間のメッシュ幅を電磁波の波長 λ に比べて十分小さく、例えば

$$\Delta x, \Delta y, \Delta z \lesssim \frac{\lambda}{10} \quad (20)$$

のように取らねばならない。また有限差分項の数値的安定性のために

$$c\Delta t \leq \left(\frac{1}{\Delta x^2} + \frac{1}{\Delta y^2} + \frac{1}{\Delta z^2} \right)^{-\frac{1}{2}} \quad (21)$$

を満たす必要がある ($c = 1/\sqrt{\epsilon_0\mu_0}$ は真空中の光速, ϵ_0, μ_0 はそれぞれ真空中の誘電率, 透磁率)。

FDTD 法に限らず、電磁波を数値的に計算する場合には、計算する空間領域を有限に設定せざるを得ない。このような状況で数値的な計算を行うと、計算上の境界において、物理的起源を伴わない反射波が発生することがある。これを除くためには計算領域での反射がないような工夫が必要であるが、これまでにさまざまな条件が提案されている。今回は Mur の 2 次吸収境界条件 [6] を用いた。

また今回の解析では、空間に電荷分布や電流が存在しない場合を考えるので、 $\rho = 0$, $\sigma = 0$ とおく。誘電率は、物質の屈折率 n と

$$n = \sqrt{\frac{\epsilon}{\epsilon_0}}$$

で関係づけられる。また細胞構造は磁性体ではないため、透磁率は真空のものを用いる ($\mu = \mu_0$)。

3 数値計算結果

図 2 に今回の数値計算の領域設定と座標軸を示す。この解析では z 軸方向には一様である平面構造を考える。計算領域を xy 平面上の $50\mu\text{m}$ 四方の正方形領域に設定しており、 x 軸、 y 軸方向にそれぞれ領域を 500 分割して計算している ($\Delta x = \Delta y = 0.1\mu\text{m}$)。計算領域のサイズは細胞構造の典型的な大きさとなるように選んでいる。分割数をこれより増やせば計算精度は上がるが、その分計算時間がかかる。今回は現実的な時間で計算が終了するよう、この分割数を採用している。時間ス

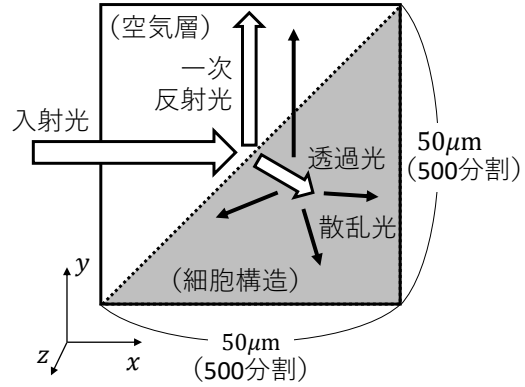


図 2 数値計算の領域設定.

テップはこの値を用いて、(21) 式を満たすように

$$c\Delta t = \frac{0.99999}{\sqrt{\frac{1}{\Delta x^2} + \frac{1}{\Delta y^2}}} \quad (22)$$

と選んでいる (z 方向には一様構造を仮定しているため、この方向については考えない)。

計算領域の左上部分が空気層、右下が細胞構造であり、領域の左下から右上への対角線がその境界線 (細胞表面) である。電磁波は領域の左から入射するが、細胞表面で反射・屈折透過し、透過光はさらに細胞内部で散乱される。細胞構造として、図 3 に示すように、(a) 密に詰まった構造と (b) 空隙がある構造の二通りを考えた。今回は細胞を模した構造を想定しており、屈折率 n が 1.45 の細胞壁 (紫)、1.33 の細胞液 (黄)、1.00 の空気層 (黒) の領域から構成されている。

FDTD 法による計算コードは、文献 [5] に記載されている Fortran の計算コードを参考にし、Python を用いて実装している。上述の (a)、(b) の細胞の構造に対応するように、屈折率分布を CSV (Comma Separated Value) 形式の外部ファイルとして作成し、計算コードに読み込ませている。

入射波としては波長 $\lambda = 1.0\mu\text{m}$ の電磁波を想定している。波長と空間の分割サイズはおおむね (20) 式の関係式を満たす必要があるが、今回は $\Delta x = \Delta y = 0.1\mu\text{m}$ であり、数値計算を安定させるためにはこれ以上短い波長を設定することは望ましくない。今回は波長のオーダーが可視光とほぼ

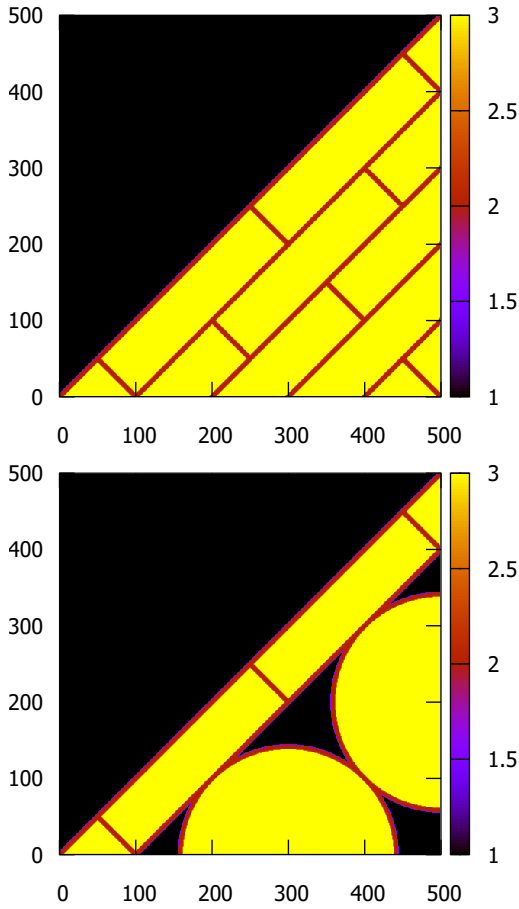


図3 細胞構造の (a) 密に詰まった場合と (b) 空隙がある場合の屈折率分布. 屈折率は細胞壁 (紫) が 1.45, 細胞液 (黄) が 1.33, 空気層 (黒) が 1.00.

同じということ、この値を採用している。また入射波は x 軸方向に進行する連続波であると考えているが、 y 軸方向にはガウス型の空間分布をしているものとした。入射波を数式で表せば、次のようになる。

$$E_z \propto \cos \left[\frac{2\pi}{\lambda}(x - ct) \right] \exp \left[-\frac{(y - y_1)^2}{2\sigma_1^2} \right], \quad (23)$$

ここで y_1 は適当な中心値、 σ_1^2 はガウス分布の分散である。

以上の条件の下、細胞構造に入射する電磁波のシミュレーションを行った。図4と5にそれぞれ (a) 密に詰まった構造と (b) 空隙がある構造について、 $t = 300\Delta t$ と $1000\Delta t$ における電場強度 $|E_z|^2$ の分布を示す (カラーバーの上限はそれぞれの例で異

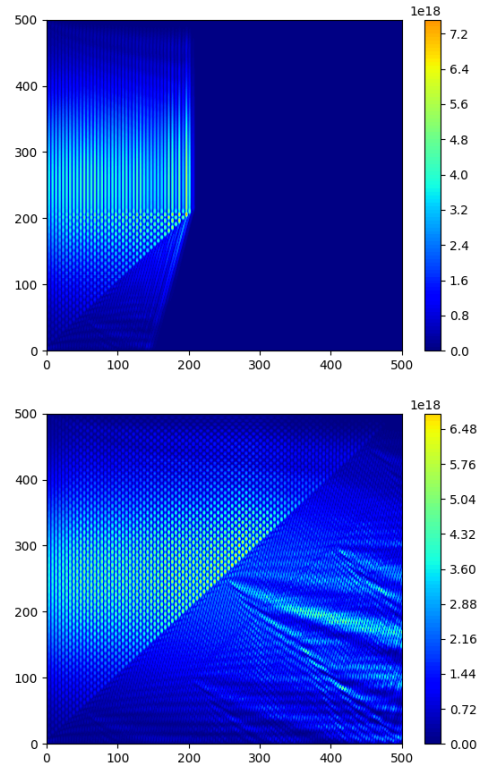


図4 細胞構造が (a) 密に詰まっている場合の電磁波の散乱の様子 (上: $t = 300\Delta t$, 下: $t = 1000\Delta t$).

なっているが、同じ色が同じ強度を表すように取っている。入射波は x 軸方向の周期構造 (縞模様) として表現されているが、 $t = 300\Delta t$ の時点では、(a), (b) の両方の場合で細胞表面上方向へ反射される一次反射成分と、境界を透過して右下の方向へ屈折しながら透過する成分が見られる。一次反射成分は y 軸の正方向への進行波 (周期構造) となり、入射波と干渉した結果、点状の空間分布として見えている。透過波は境界線の右下の領域に見られる斜め方向の縞模様であるが、この縞模様と直交する方向に伝搬している。伝搬する方向は、後述の (24) 式 (スネルの法則) に従っている。

時刻が $t = 1000\Delta t$ になると、透過波が細胞構造の奥深くまで浸透するが、(a) と (b) の場合で電磁波強度の分布が大きく異なっていることがわかる。これは細胞構造の内部での散乱の様子が異なるためである。透過波の散乱の結果、葉の表面方向へ戻る

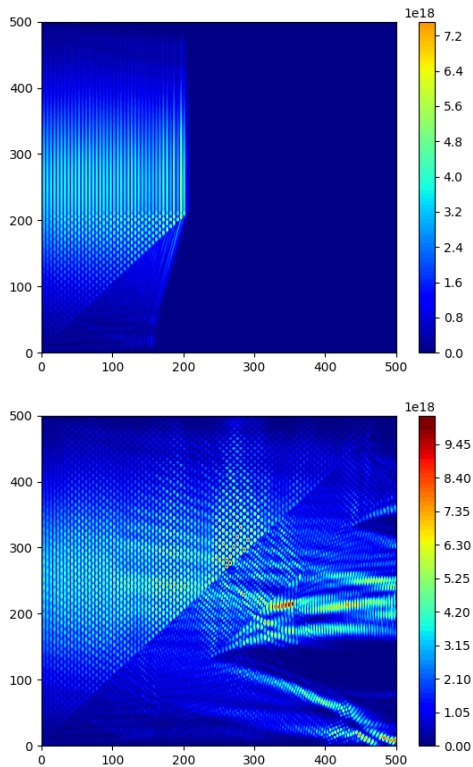


図5 細胞構造に (b) 空洞がある場合の電磁波の散乱の様子 (上: $t = 300\Delta t$, 下: $t = 1000\Delta t$).

成分も生じ、再び対角線の境界面を透過して y 軸の正方向 (上方向) へ進行する成分も存在しているが、(b) の空隙がある場合の方がこの影響が大きく、結果として実質の反射光強度が増強されていることがわかる。

以上の電磁波の散乱状況の違いから、次のように葉の色の見え方に差が出てくると考えられる (図6). 構造 (a) では内部が密に詰まっており、葉の表側の構造に対応している. 今回のシミュレーション結果から、この構造での反射光は一次反射成分によるものが支配的であることがわかる. 葉の表側には葉緑体が多く含まれているため、一次反射の過程で緑に対応する波長のみが選択的に反射されるが、それ以外の波長成分は吸収されてしまう (減法混色). 結果として葉の表側は緑色に見える.

もう一方の構造 (b) では内部に空隙があり、葉の裏側に対応しているが、細胞内部で二次的な散乱光

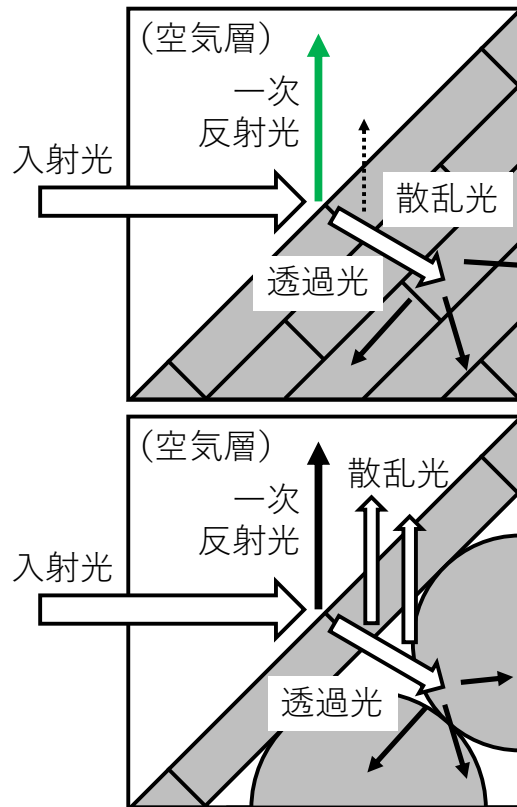


図6 細胞構造が (a) 密な場合 (上) と (b) 空隙がある場合 (下) による反射光の違い.

が生じる. この散乱光は表面で一次反射される成分と合わさって、結果として反射光が (a) の場合よりも強くなる. 葉の裏側では葉緑体が少ないため、可視光の緑以外の波長の電磁波も多く反射される. そしてこれらの電磁波が重ね合わせられることで白い光が形成され (加法混色), 葉の裏側が白く見えている.

以上の結果は、葉緑体が多く存在する葉の表側であっても、内部領域に空隙構造が存在すれば、白く見えることがあるという観察結果を支持するものである.

4 電磁波散乱の波動光学からの検討

前節では数値計算により、細胞内部の構造が密な場合と空隙が存在する場合の電磁波の振る舞いを調べたが、本節では波動光学の観点から、数値計算結

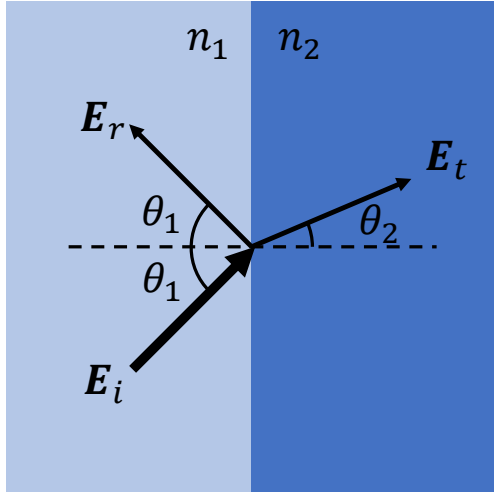


図7 屈折率境界面での電磁波の反射・透過.

果の妥当性の検討を行う.

電磁波は屈折率が異なる空間中では直進するが、屈折率境界面で反射・屈折透過が起こる(図7). 入射側・透過側の屈折率をそれぞれ n_1, n_2 とすると、入射光の一部の成分は境界面で反射する一方、残りの成分は屈折しながら透過する. 境界面に対する入射角・屈折角(境界面法線と入射・屈折成分がなす角)をそれぞれ θ_1, θ_2 とすると、これらの間には

$$n_1 \sin \theta_1 = n_2 \sin \theta_2 \quad (24)$$

が成り立つ(スネルの法則). また入射波 ($\mathbf{E}_i, \mathbf{H}_i$) および反射波 ($\mathbf{E}_r, \mathbf{H}_r$)・屈折透過波 ($\mathbf{E}_t, \mathbf{H}_t$) の境界面の接線成分が連続であることから、対応する電磁波振幅の間に一定の関係式が成り立つ. 電場の振動方向が境界面と平行の場合(s波)では、

$$r_s = \frac{|\mathbf{E}_r|}{|\mathbf{E}_i|} = \frac{n_1 \cos \theta_1 - n_2 \cos \theta_2}{n_1 \cos \theta_1 + n_2 \cos \theta_2}, \quad (25)$$

$$t_s = \frac{|\mathbf{E}_t|}{|\mathbf{E}_i|} = \frac{2n_1 \cos \theta_1}{n_1 \cos \theta_1 + n_2 \cos \theta_2} \quad (26)$$

が得られる(フレネル係数)[7]. 裏側からの入射に対しても同様の式が得られ ($n_1 \leftrightarrow n_2, \theta_1 \leftrightarrow \theta_2$), 以下の関係を満たす.

$$r'_s = \frac{|\mathbf{E}'_r|}{|\mathbf{E}'_i|} = -r_s, \quad (27)$$

$$t'_s = \frac{|\mathbf{E}'_t|}{|\mathbf{E}'_i|} = \frac{n_2 \cos \theta_2}{n_1 \cos \theta_1} t_s. \quad (28)$$

境界面の両側で透過振幅の係数が異なるのは、屈折により電磁波のビーム径が変化し、エネルギー密度が変わるためである. この効果を規格化し、電磁波強度に関する反射率・透過率を計算すると、

$$R_s = |r_s|^2 = \frac{(n_1 \cos \theta_1 - n_2 \cos \theta_2)^2}{(n_1 \cos \theta_1 + n_2 \cos \theta_2)^2}, \quad (29)$$

$$T_s = \left| \sqrt{\frac{n_2 \cos \theta_2}{n_1 \cos \theta_1}} t_s \right|^2 = \frac{4n_1 n_2 \cos \theta_1 \cos \theta_2}{(n_1 \cos \theta_1 + n_2 \cos \theta_2)^2} \quad (30)$$

が得られる[8]. 入射波, 反射波, 透過屈折波のエネルギー保存の観点から、

$$R_s + T_s = 1 \quad (31)$$

が成り立っていることがわかる.

反射率 R_s を整理すると、

$$R_s = \frac{[(n_1/n_2) \cos \theta_1 - \cos \theta_2]^2}{[(n_1/n_2) \cos \theta_1 + \cos \theta_2]^2} \quad (32)$$

となるが、 θ_2 は θ_1 と(24)式で関係づけられていて

$$\theta_2 = \sin^{-1} \left(\frac{n_1}{n_2} \sin \theta_1 \right) \quad (33)$$

であるから、入射角 θ_1 が決まれば、反射率は入射角と屈折率比によって一意に決まることがわかる. 図8に入射角 $\theta_1 = 30^\circ, 45^\circ, 60^\circ$ の場合についての R_s の n_1/n_2 依存性を示す. これより、いずれの入射角の場合も $n_1/n_2 = 1$ すなわち屈折率差がない場合で最小値0をとり、そこから離れるに従って大きくなっていくことは明らかである. このことは屈折率比が大きいほど、反射率が大きくなることを示している. 特に入射角 45° と 60° の場合について、 n_1/n_2 が大きくなるにつれて R_s が急峻に増加している様子が見られるが、これは屈折率が高い領域から低い領域への入射の場合で、かつ入射角が特定の角度、すなわち臨界角を超えている場合には全反射が起こるためである(臨界角は(24)式から定まる). 全反射の条件を満たすと、屈折率境界面ですべての電磁波成分は完全に反射される. このとき反射率は、その大きさが1となる複素数として計算される ($|R_s| = 1$).

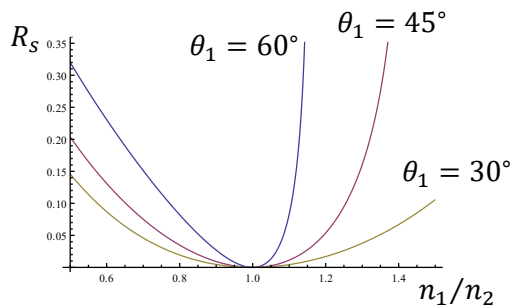


図8 R_s の n_1/n_2 に対する依存性.

今回考えている構造では、空気層に 1.00、細胞壁に 1.45、細胞液に 1.33 の屈折率を設定している。細胞構造が (a) 密である場合と (b) 空隙がある場合の双方で、電磁波が空気層から表面の細胞壁へ入射した箇所でも反射が起こるが（一次反射）、ともに屈折率比が $1.00/1.45 \sim 0.690$ であるから、同じ割合で反射成分が生ずる。しかしながら透過した成分のその後の振る舞いは、二つの場合でかなり異なってくる。

(a) の構造が密である場合は、境界面での屈折率比は $1.33/1.45 \sim 0.917$ もしくは $1.45/1.33 \sim 1.09$ であるが、図 8 より入射角 45° の場合で反射率 $R_s \lesssim 0.01$ であることがわかる。このことは、葉の表面を透過した電磁波成分は、内部構造であまり散乱されることなく、奥深くへ浸透していくことを示している。

一方 (b) の空隙がある場合は、空気層と細胞壁の境界が存在しており、屈折率差が前述の 0.690 とその逆数の $1.45/1.00 = 1.45$ となる。典型的な入射角の例として $\theta_1 = 45^\circ$ の場合を考えると、前者は $R_s \simeq 0.08$ で、(a) の密な場合よりも反射率は高いことがわかる。さらに後者（細胞壁→空気層）の場合は全反射が起こっており（臨界角は 43.6° ）、すべての成分が完全に反射される。入射角 θ_1 が 45° とは異なっている場合でも、(a) 構造が密な場合と比べて強く散乱されるという傾向は同じである。

以上より、内部構造に (b) 空隙がある場合は、(a) 密な場合よりも電磁波が強く散乱されることがわかる。この散乱により、電磁波がもともと入射してきた方向へ進行する成分も生じうるが、再び葉の表面

を透過して外へ出るため、これが葉の表面で一次反射を起こした成分と合わさって、反射光を強める要因となっていると考えられる。

5 まとめ

本稿では細胞構造に電磁波が入射する様子について数値シミュレーションを行い、その散乱の様子について考察した。細胞構造には (a) 密に詰まっている場合と、(b) 内部に空隙が存在するモデルを考えた。数値計算の結果、細胞表面で一次反射する成分と細胞内部に透過する成分が見られるのは両方の場合に共通であるが、(a) では透過成分があまり散乱されずに浸透していくのに対し、(b) では内部の空隙で強く散乱される様子が見られた。後者では空隙での散乱成分の一部は細胞表面から再び外に出て行き、一次反射光と一緒にすることでこれを強めている。今回のシミュレーション結果では、空隙での散乱過程によって、一次反射よりもかなり強い散乱光が加わっていることがわかった。この結果は、波動光学の観点からも妥当な結果であるといえる。以上のことは、(b) 細胞内部に空隙が存在するほうが、電磁波を強く反射することを示している。

今回得られた知見は、葉の色の見え方が葉緑体の量以外に、内部構造にも依存しているという解釈を支持するものであると考えられる。通常、葉の表側は裏側と比較して葉緑体の量が多く、細胞構造も密な場合が多い。このような構造の場合は光の反射は表面での一次反射による過程が支配的であるが、このとき葉緑体によって緑色の波長の電磁波成分のみが選択的に反射され、見た目に濃い緑色として観察される。しかしながら裏側については、葉緑体が少なく、細胞構造内部に空隙がある。このような場合には、内部構造であらゆる波長成分の電磁波が強く散乱される。これらが加法混色することにより、白い光が観察されるものと考えられる。

原による植物の斑紋の形成の 4 つのパターンが提案されているが、最近これに加えて

5. 付属物型：表皮細胞の表面にうろこ状などの構造物が形成される

という可能性が示されている [9]. これは構造色が形成される状況に近いと考えられるが, 今後こうした場合についてもシミュレーションを行うことで, その可能性について検討していきたいと考えている.

参考文献

- [1] 園池 公毅, 「植物の形には意味がある」, ベレ出版 (2016).
- [2] N. Hara, “Study of the Variegated leaves with Special reference to those caused by Air Spaces,” *Japanese Journal of Botany* **16**, pp. 86-101 (1957).
- [3] A. Taflove and S. C. Hagness, “Computational Electrodynamics: The finite difference time-domain method (2nd Ed.),” Artech House (2000).
- [4] K. S. Yee, “Numerical solution of initial boundary value problems involving Maxwell’s equations in isotropic media,” *IEEE Trans. Antennas Propag.* **14**, pp. 302-307 (1966).
- [5] 宇野 亨, 何 一偉, 有馬 卓司, 「数値電磁界解析のための FDTD 法 - 基礎と実践 -」, コロナ社 (2016).
- [6] G. Mur, “Absorbing boundary conditions for the finite-difference approximation of the time-domain electromagnetic-field equations,” *IEEE Trans. Electromagn. Comp.* **EMC-23**, pp. 377-382 (1981).
- [7] J. D. Jackson, “Classical electrodynamics (3rd Ed.),” Wiley (1998).
- [8] A. Kitagawa, “Quantum description of electromagnetic fields in waveguides,” arXiv:1510.06836 (2015).
- [9] J.-H. Zhang, J.-C. Zeng, X.-M. Wang et al., “A revised classification of leaf variegation types,” *Flora* **272**, 151703 (2020).