

## C-12 DDA法による鏡像による疑似的な金ナノ二量体構造の光学特性調査

小出 真叶, 田中 大輔

(大分工業高等専門学校)

## 1. はじめに

電子線リソグラフィ技術の発展に伴い、複雑なナノ構造を作製可能になり、プラズモン共鳴由来の特異的な光学特性が明らかになってきている[1]. そのような魅力的な光学特性を発現する簡素なsurface-immobilized gold nanosphere(SIGN)構造が提案されている[1]. SIGN構造は、金属基板と金ナノ粒子間の鏡像を利用することで、基板とナノ粒子のギャップ長や入射偏光状態に依存した光学特性を示す. これまでに解析的理論計算の結果やその増強電場を応用した非線形光学特性については報告されている[2]が、粒子サイズによる遅延を含んだ光学特性は明らかとなっていない. 本研究では、電磁場シミュレーション法である離散双極子近似(DDA)計算により、SIGN構造のサイズによる遅延効果まで考慮した散乱, 吸収, 増強電場分布などの光学特性調査を行う.

## 2. 離散双極子近似(DDA)法

DDA法は、対象構造を電気双極子の集合体として近似し、双極子による局所電場と外部電場の総和から、光の吸収や散乱, 電場分布特性等を数値計算する方法である. 曲率を有する構造について実験結果を再現する計算結果を短時間に得られるという特徴を有する. 本研究では、行列計算法とDDA法を組み合わせた計算が可能なソフトウェアであるADDA[3]によるSIGN構造の電磁場シミュレーションを実施した.

## 3. SIGN構造

局在プラズモン共鳴(LPR)とは、金属中の自由電子が、適切な境界条件下で特定波長の光波と相互に作用する共鳴現象のことである. 共鳴時に、金属表面に局在する電子の疎密波である表面プラズモンが発生し、これにより金属表面近傍に強い増強光電場が伴う[4].

SIGN構造の光学特性は、微粒子の粒径と粒子-基板間の距離の比率に依存し、距離が近くなる、または粒径が大きくなる程、ピーク波長が長波長側へシフトする. これは、図1のように微粒子とその鏡像による四重極子型の共鳴に由来した光学特性を示すためである.

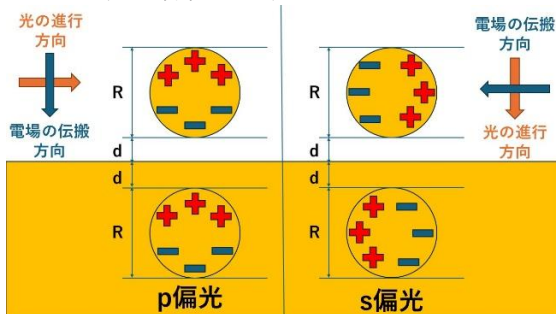


図1. SIGN構造に励起される四重極子型LPR

## 4. 計算モデルと計算条件

本研究では、Au基板とその表面から離れた位置に真球形状のAu微粒子が固定化されたSIGN構造を計算モデルに採用した. 周辺媒質を真空、基板表面から微粒子表面までの距離を2 nm一定とした. 入射光は基板に対して $30^\circ$ , Auの誘電率は文献値[5]を参考にし、計算波長域は350 nm~770 nmとした. 粒子の大きさによる消光スペクトルの違いを観察するため、粒径が20 nm, 40 nm, 80 nmの場合の計算を行った. 計算は、ADDAのsurf modeによって実施し、計算モデルである微粒子の要素間隔は1 nm

とした.

## 5. 計算結果と考察

計算により得られた消光スペクトルを偏光の成分ごとに図2, 図3に示す. x偏光成分の場合、粒径20 nm, 40 nm, 80 nmのそれぞれの消光の最大値を示すピーク波長は、534 nm, 559 nm, 642 nmであった. また、粒径40 nm, 80 nmでは、消光の最大値の他に短波長側にピークがあることが確認できる. y偏光成分の場合、ピーク波長は、529 nm, 534 nm, 562 nmであった. このことから両成分とも粒径が大きくなるほどピーク波長は長波長側へシフトしていることが分かる.

x偏光成分では消光の最大値とそれより短波長側の一か所でピークを確認することができた. これは、解析的理論計算による結果とよく一致している.

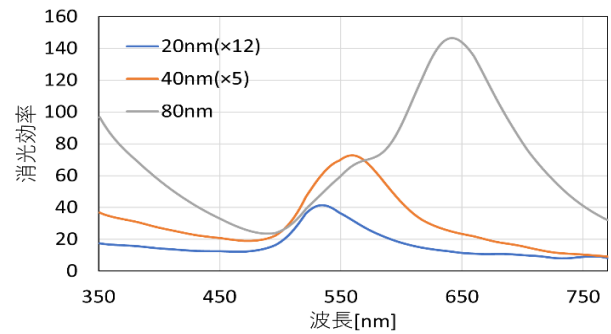


図2. x偏光成分の消光スペクトルの比較

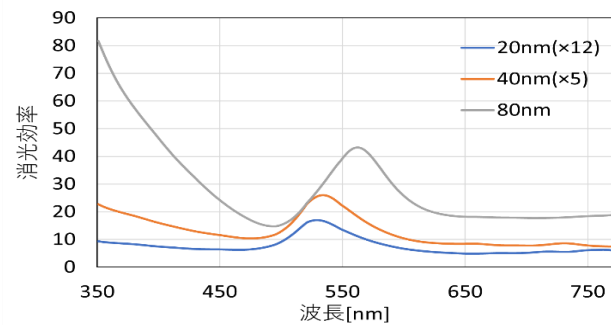


図3. y偏光成分の消光スペクトルの比較

## 6. まとめ

本研究では、フリーソフトのADDAを用いたSIGN構造の光学スペクトルの計算を行い、粒径による差異について比較した. その結果、ピーク波長やピーク強度と粒径の関係を明らかにすることができた. 今後は、更に粒径が大きくなる場合についての計算を追加し、遅延効果ははっきり表れるのかについて調査する. また、各ピーク波長での電場分布からも遅延効果について考察する.

## 参考文献

- [1] 梶川浩太郎 表面プラズモンのバイオ・化学センシングへの応用 分光研究, 64, 436(2015)
- [2] Y. Uchiho, *et al.*, J. Phys. Chem. C, **114**, 4816 (2010).
- [3] M. Yurkin, *et al.*, J. Phys. Chem. C, **119**, 29088 (2015).
- [4] 岡本隆之, 梶川浩太郎著, “プラズモニクス—基礎と応用—”, 講談社
- [5] P. B. Johnson, *et al.*, Phys. Rev. B, **6**, 4370 (1972).