

課題名(タイトル):

光メタマテリアルの電磁場解析

○田中拓男(1,2)

(1) 開拓研究本部 田中メタマテリアル研究室

(2) 光量子工学研究領域 フォトン操作機能研究チーム

1. 本課題の研究の背景、目的

光メタマテリアルと呼ばれる波長よりも細かな人工構造を用いて物質の光学特性を制御する疑似光学材料について研究を行っている。メタマテリアルの構造は微細なため、その構造の設計や特性評価を行うためには大規模な電磁気学計算が必要である。特に最近では、立体的な共振器構造を持ち、その光学特性が光の入射角度に依存しないメタマテリアルや、金ナノ微粒子を自己組織的に結合させて作製したメタマテリアルを開発しているが、これらは立体的かつナノメートルスケールの極微細構造を持つため、その計算機モデルは大規模なものとなる。さらに波長領域においても赤外から紫外域の広い波長範囲にわたってその分光特性を計算する必要があるため、結果として高い計算性能を持った計算機が必要である。このような背景のもと、今年度は、金ナノ微粒子の自己組織化結合によって構成されるダイマー、トリマー、テトラマー構造の光学特性について分割双極子近似法 (Discrete dipole approximation: DDA) を利用した数値解析を実施した。

2. 具体的な利用内容、計算方法

粒径 10~200 nm の金ナノ微粒子が粒子間距離 1~10 nm でダイマー構造, トリマー (正三角形) 構造, テトラマー (正方形) 構造に結合したナノ構造体について、その光吸収, 散乱特性を可視光から近赤外光の範囲で網羅的に解析した。計算には、DDA 法を用いた電磁界解析ソフトウェア (DDSCAT) を利用して計算し、計算結果と実験結果との整合性を比較した。また、研究室内の計算機にて有限要素法を用いて同様の構造の光学特性を解析し、その結果とも比較検討した。また金ナノ微粒子近傍の電磁界分布についても両アルゴリズムで計算を行い、その結果を比較した。

3. 結果

DDA 法では、用いる光の波長が長くなると解の収束性

が悪くなり、計算時間が極端に長くなったり、あらかじめ設定した反復回数制限内で解が収束せずにエラーとなる事があり、計算モデルならびに光の波長に応じて計算モデルをチューニングしなければならないという制約があった。一方、有限要素法では光の反射、透過係数を求めるためには、計算モデルの境界部に周期境界条件を導入してその界面の影響を取り除く必要があるが、構造間の相互作用を除去するために構造の周期を広くとると、光の回折の影響が解に重畳してしまうという問題があるのに対し、DDA 法にはそのような制約がなく、孤立した金微粒子構造体の光特性を計算できるという特徴が明らかになった。

現時点では、テトラマー構造など計算が完了していないパラメータの組み合わせもあるが、ダイマー構造に関しては全ての構造パラメータの組み合わせについてその光学スペクトルの計算が完了した。実験にて実際に金ナノ微粒子を合成し、そのいくつかの構造対の光学スペクトルと計算結果を比較したところ、両者がよく一致することが確認できた。これらの結果から、実験で検証できていないパラメータの組み合わせを持つ構造についてもその光学特性を高い精度で解析できているとの確証を得た。

4. まとめ

メタマテリアルを実際の光学デバイスに応用するに際して、必要となる光機能を得るには、どこにどのような屈折率を持つ構造を配置すべきかの構造設計が必要になる。そのためには、構造と光学特性の対応関係を網羅的に知る必要がある。今回の計算結果はその足がかりとして重要な情報になる。

5. 今後の計画・展望

今後は、テトラマー以上のさらに高次の構造体について、その光学特性を解析するとともに、解析波長域も中赤外さらには遠赤外域にまで拡張して、金ナノ構造で構成されるメタマテリアルの各波長域での光機能を明らかにしてゆく予定である。