

課題名(タイトル):

光メタマテリアルの電磁場解析

利用者氏名:○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

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光メタマテリアルについて研究を行っている。光メタマテリアルの構造は光の波長よりも微細なため、可視光をターゲットとしたメタマテリアルの場合、それを構成する素子のサイズは数十～数百ナノメートルになる。一方、メタマテリアル自体はこのような基本素子の集積体なので、素子とメタマテリアル全体のサイズ比は $10^3 \sim 10^6$ にも及ぶ。さらに、メタマテリアルの特性は1つの波長の光のみに限定されず、赤外から紫外域の広い波長領域にわたって解析する必要がある。そのため、メタマテリアルの構造の設計や特性評価を行うためには大規模なメモリと強力な演算能力を持った計算機が必要になる。このような光メタマテリアルについて、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高次構造体を用いた光メタマテリアルの光学特性について電磁界解析を実施した。

2. 具体的な利用内容、計算方法

複数の金属ナノ微粒子が結合して形成された高次構造体の光学的特性と、それらが樹脂中に高密度に分散された際の実効的な屈折率を計算した。具体的には、金属ナノ粒子として粒径 10～200 nm の金ナノ微粒子を想定し、粒子単体(一量体)に加えて、これらが粒子間距離 1～10 nm を介して二量体構造、三量体構造(正三角形)、四量体構造(正方形)に結合したものについて、その光反射、透過特性を可波長 400nm～1000nm の範囲で解析した。計算には、分割双極子近似法(DDA 法)を利用した。また、研究室内の計算機にて有限要素法を用いた解析も行い、両者の整合性を比較検討した。得られた反射・透過スペクトルから、これらの金属ナノ構造を樹脂中に分散させた際の実効的な屈折率を求めた。

3. 結果

DDA 法を用いた一量体ならびに二量体構造の解析に

ついては、比較的すみやかに解が収束して安定した解が得られたが、三量体ならびに四量体の構造において、特に微粒子径が 100nm を上回ると、解の収束性が極端に低下し、予め設定した反復回数内で解が得られないものがあった。ただ、必ずしも粒径の大きな構造体の収束性が低下するわけではなく、解が求まるものもあったため、引き続き構造パラメータと解の収束性については解析・検討が必要であることがわかった。

DDA 法のメリットは、解析する構造を有限個数の双極子に分割して解析するので、計算モデルには構造体の周囲の空間のサイズを規定する必要がない。一方で、有限要素法では解析を行う空間を設定しなければならないので、解析空間の端の影響を除去するためには、周期境界条件を導入して仮想的に解析空間を無限に拡張するか、解析空間の端に吸収境界条件を設定して解析空間が有限であることに起因する光の反射や散乱の影響を除去しなければならない。しかし光の反射・透過特性を正確に求めるには、光の吸収を伴う後者の手法は使えない。一方前者の手法では解析すべき構造が周期的に並ぶことになるため、回折光の発生など、本来起こらない現象が計算結果に重畳してしまう。このような DDA 法と有限要素法間のアルゴリズムの特性の違いにより、これまでは両者の計算結果を直接比較することができなかった。

そこで、新たに DDA 法に周期境界条件を導入した計算モデルを設定し、有限要素法の解析結果と比較した。すべての構造パラメータに対する計算は未だ完了していないが、金属微粒子の粒径についておよそ直径が 40nm 程度の小さい粒径については、DDA 法と有限要素法の結果が良い一致を示すものの、粒径が大きくなると両者の計算結果に違いがでることが明らかになった。

4. 今後の計画・展望

アルゴリズムによって計算結果に違いが出たものについては、次年度以降その原因を追及するとともに、平行して進めている実験結果との整合性についても検討してゆく。