

プロジェクト名(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)

理研における所属研究室名:

(1) 光量子工学研究領域 フォトン操作機能研究チーム

(2) 開拓研究本部 田中メタマテリアル研究室

1. 本プロジェクトの研究の背景、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した「光メタマテリアル」とその応用技術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、メタマテリアルがターゲットする光の波長領域は赤外から紫外域の広い波長領域にわたるため、その特性の解析は1つの波長の光のみに限定されず、広い波長領域で行わなければならない。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計算は必然的に大規模なものになる。このような光メタマテリアルについて、今年度は、化学的に大量に合成できる金ナノ微小球を基礎構造として、これを複数個結合させた複合構造をメタマテリアルの基本素子として機能させる事で、メタマテリアルを高速かつ大量に生成する手法の開発を目的とした研究を行った。その中で、複数の金ナノ微小球が複合体構造を形成した場合の電磁気学的特性の解析を行った。特に2つの金ナノ微小球の間を金によってダンベル形状に接続した金ナノダンベルの光応答特性に着目し、それを数値解析した。

2. 具体的な利用内容、計算方法

直径5～40 nmの真球状の金ナノ微小球が数nmの間隔を保って配置された2量体構造を基本として、その微小球間を金によって接続した形状をモデル化し、これの可視光～近赤外光における光学特性を分割双極子近似法(DDA法)を用いて計算した。計算では、球の半径や接続部の太さ、間隔などの構造パラメータを網羅的に変化させて、これらの構造が大量にランダムに分散した構造についてその光学的な応答特性を解析した。また、構造

近傍の電磁界分布も計算し、光電場が金ナノ構造のどの部分に局在しているかを調べた。

3. 結果

まずは、直径5～40 nmの金ナノ微小球単体の光吸収スペクトルを計算して、実験結果と比較することでその整合性を確認した。

金ナノ微小球は緑色領域に局在型表面プラズモン共鳴に伴う共鳴吸収を持つため、緑色の光を吸収し赤色を呈する。DDA法を用いた計算においてもこの吸収ピークを正確に再現できた。また、この吸収ピークは粒径の増大とともに長波長側にシフトするが、これもDDA法で正確に再現できた。

次に2つの金ナノ微小球が数ナノメートルの間隔を保って配置された2量体構造の光学特性を計算した。2つの金ナノ微小球が相互作用すると、それぞれの微粒子内の自由電子が対称的に振動するモードと反対称的に振動するモードの2つに分裂する。その結果、金ナノ微小球の単量体では緑色域にあった局在型表面プラズモンに伴う吸収ピークが近赤外域にシフトする事が先行研究から解っている。DDA法を用いた計算においても、この傾向を確認することができた。また照射光の偏光方向に対する依存性についても実験結果と良く一致する事が確認できた。さらに、構造近傍の電磁場を確認したところ、金ナノ微小球間のナノギャップ領域に入射電場の数十～数万倍の強度を持つ局在増強場が生成されていることがわかった。

金ナノ微小球間のギャップを金で接続した際の光学応答特性を解析した。接続部の太さを1 nmから順に金ナノ微小球の直径まで変化させた。その結果、接続部を太くするにつれて、2量体では近赤外域にシフトした吸収ピークが短波長方向にブルーシフトすることが確認できた。

接続部の太さが微粒子の直径と等しい構造では、長軸

方向に金ナノ微小球の直径の2倍の長さ, 短軸方向には金ナノ微小球と同じ径を持つ金ナノロッドと同じ形状になる. 金ナノロッドの光学特性については既に多くの報告があるが, 計算結果はそれらと良い一致を示す事も確認できた.

これら一連の解析結果から, 2つの金ナノ微小球を接続した金ナノダンベル構造ではその接続部の太さを制御することで, その吸収バンドを緑色から近赤外域の間において制御できることが明らかになった.

4. 今後の計画・展望

今後は, 3つ以上の金ナノ微粒子が接続された多量体構造や, 金ナノ微粒子間を別の物質 (例えば銀など) で接続した構造について, それらの電磁気学的特性を解析する予定である.