

プロジェクト名(タイトル):

金属ナノダンベルの電磁場解析

利用者氏名:

○竹内 祐貴(1)

理研における所属研究室名:

(1) 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

金属ナノ構造体は、電子の集団振動である表面プラズモンを介して特定の波長を持つ光と強く相互作用する。金属ナノ構造体の光学特性はその形状に依存することが知られている。そのような形状の中でも近赤外光に応答するダンベル状金ナノ粒子の創製に関する研究を申請者は行っている。このような金属ナノ構造体のユニークな光学応答はMaxwell方程式に基づく電磁場解析により予測可能である。その中で、この金属ナノダンベルの光学特性を予測するために電磁場解析ソフトを使用しているが、その形状の表現がラフな場合、正しいシミュレーション結果が得られないことが多々あり、ナノダンベルの光学特性を理論的に解析することが困難であった。この問題を解決するためには、形状が精緻にモデル化された金属ナノダンベルで電磁場解析を行うことが重要となるが、これは大幅な計算コストの増加に繋がってしまう。従って、本研究ではスーパーコンピュータHBWを使用して、精緻にモデル化された金属ナノダンベルやそれに準ずる構造体の電磁場解析を実施した。

2. 具体的な利用内容、計算方法

シミュレーションのターゲット構造として、球状金ナノ粒子がその粒径と同じかそれより細い金の円柱で繋がっている構造を想定し、その電磁場解析を離散双極子近似(DDA)法により行った。まず、直径が10 nmの2個の球状ナノ粒子が1個の円柱で繋がっている金ナノダンベルの消光スペクトルのシミュレーションを円柱の太さを6, 8, 10 nmと変化させながら行った。さらに、それらの円柱で、球状ナノ粒子の直径を大きくしたときの共鳴波長のシフトを調査した。最後に、3個の構成粒子が2個の円柱で繋がっているような数珠つなぎ金ナノ粒子の共鳴波長がどのように変化するかを求めた。

3. 結果

まず、シミュレーション結果から、直径が10 nmの球状金ナノ粒子を太さが6 nmの金の円柱で繋げた金ナノダンベルは近赤外領域で共鳴を示すことが明らかになった。また、同じ粒径と粒子間の距離で、円柱の太さを変化させたときの消光スペクトルを比較した場合、円柱が細いほど、その共鳴波長が長波長側にシフトするという傾向が得られた。次に、直径が40 nmの金ナノ粒子と太さが6, 8, 10 nmの円柱で構成された金ナノダンベルの消光スペクトルをシミュレーションしたところ、直径が10 nmの粒子で構成されたダンベルに比べて、より長波長側に共鳴波長がシフトした。最後に、ダンベルに準ずる構造体として、構成粒子の個数を3個にして、2個の円柱でつないだ数珠つなぎ金ナノ粒子の消光スペクトルをシミュレーションしたところ、同じ粒径の金ナノ粒子で構成されたダンベル構造に比べて、数珠つなぎ金ナノ粒子の共鳴波長は約200 nmほど長波長側にシフトすることが明らかになった。

4. まとめ

金ナノダンベルや数珠つなぎ金ナノ粒子の消光スペクトルのシミュレーション結果から、①円柱の太さ、②構成粒子の粒径、③粒子の個数によって、その共鳴波長が可視から近赤外領域まで調整できることが結論として得られた。

5. 今後の計画・展望

これまでのシミュレーションでは、球状ナノ粒子により構成されたダンベルや数珠つなぎ金ナノ粒子を扱ってきたが、「構成粒子の形状」によっても共鳴波長がシフトすると考えられる。そこで、今後は構成粒子の形状を変化させたときの共鳴波長への影響を調査する。また、これらのシミュレーション結果をもとに、近赤外から中赤外に共鳴波長を変化させることができるような金ナノ粒子の設計を行っていく。