

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

我々は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」とその工学的な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の中で、特定の波長の光を選択的にかつほぼ完全に吸収する構造があり、このようなメタマテリアルはメタマテリアル吸収体と呼ばれている。新型コロナウイルス感染症の蔓延を受け、我々はメタマテリアル吸収体を用いてウイルスに由来する生体分子の存在をメタマテリアルが吸収する光の波長の変化、すなわちメタマテリアルの色の変化として可視化するデバイスを考案した。今年度は、アルミニウム薄膜と金ナノ微粒子によって構成されるメタマテリアル吸収体構造を基礎として、ウイルス由来の生体分子を高感度に検出するデバイスの検出感を最大化することを目的に、金ナノ微粒子のサイズや配置、密度などのパラメータと光吸収スペクトルとの関係を数値解析した。

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厚のSiO₂製透明誘電体薄膜を介してアルミニウム薄膜の上に配置された構造をモデル化し、金ナノ微粒子の径、凝

集密度(粒子間距離)、SiO₂膜の膜厚などを変化させながら可視光～近赤外光における光吸収特性を分割双極子近似法(DDA法)を用いて計算した。そしてその結果を別途研究室内の計算機を用いた有限要素法による計算結果と比較するとともに、光吸収スペクトルを色に変換して、人間の肉眼で認識しやすい色になるように構造パラメータの最適化を試みた。

3. 結果

ウイルスなどに由来する生体分子の存在によって、SiO₂薄膜上に金ナノ微粒子が凝集すると、メタマテリアル吸収体構造が自己組織的に形成され、無色だったアルミニウム薄膜の吸収スペクトルに局所的な吸収バンドが現れてデバイスが呈色することが確認できた(以下では、この無色から有色への変化を示すデバイスを第1世代デバイスとする)。構想時は金ナノ粒子とアルミニウム薄膜との電磁的な結合を高めるため、SiO₂薄膜の膜厚は50 nm程度と薄い方が良いだろうと想定していたが、計算の結果、SiO₂膜の膜厚は150 nm程度に高める方が良かった。

計算結果をもとに実際のデバイスを試作し、その色変化を分光器で確認したところ、計算結果と良い一致を示す事を確認した。

これらの結果を基に、単に金ナノ微粒子が凝集してメタマテリアル吸収体構造を構成して発色するだけでなく、予めある色に呈色するメタマテリアル吸収体を構成しておき、これに金ナノ粒子が凝集することで別の色に変色するタイプのデバイス(これを第2世代デバイスとする)を考案し、その構造設計のための数値計算と検証用デバイス試作を現在継続して実施中である。

4. まとめ

数値計算結果から、我々が提案したメタマテリアル吸収体を用いた生体分子の簡易検出デバイスについての概念実証と高い検出感度を持つ構造パラメータの洗い出しに成

功した.

5. 今後の計画・展望

今後は, 無色から有色へ変化する第1世代デバイスの設計・試作から得られた知見を元に, 色が変わる第2世代デバイスの構造最適化をその有効性の実証研究へ展開する予定である.