

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

金属ナノ構造体に特定の波長の光を照射すると、自由電子の集団振動である局在表面プラズモンが励起され、入射光が吸収/散乱される。金属ナノ構造体の光学特性はその大きさ、周囲媒質、形状に依存する。その中でも近赤外光に応答するダンベル状金ナノ粒子やそれらが連なった数珠つなぎ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を用いた解析ソフトを使用することにより予測することが可能であるが、ターゲット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る。金属ナノダンベルに関しても、その中心部の窪みが数ナノメートルぐらいの細さの場合、光学特性を理論的に解析することが困難であるため、シミュレーションを用いたナノ粒子の光学特性評価が行えないことがあった。この問題を解決するためには、形状が精緻に表現された金属ナノダンベルや数珠つなぎナノ粒子のモデルで電磁場解析を行うことが必須となるが、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数珠つなぎ金属ナノ粒子の電磁場解析を実施した。

## 2. 具体的な利用内容、計算方法

本研究では、金ナノダンベルや数珠つなぎ金ナノ粒子の電磁場解析を離散双極子近似(DDA)法により行った。まず、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ようなダンベル構造の消光スペクトル(吸収スペクトル+散乱スペクトル)や電場強度分布のシミュレーションを行った。さらに、シリカをコアとし、その周りを金が覆っているコアシェルナノ粒子が金で繋がったときの電磁場解析も行った。また、球状ナノ粒子以外の構造体として、キューブ形金ナノ粒子の二量体がその間隙(ギャップ)で励起されるモードを電場強度分布のシミュレーション結果から予

測し、それをもとにしてモデル化した連結金ナノキューブの消光スペクトルや電場強度分布のシミュレーションも行った。

## 3. 結果

金ナノダンベルのシミュレーションから、共鳴波長は構成ナノ粒子の直径と窪みの太さに依存することが明らかになった。また、構成粒子の個数が増加するに従って共鳴波長が長波長側にシフトした。構成粒子を球状金ナノ粒子から同じ直径を持つシリカ-金コアシェルナノ粒子に代えて、シミュレーションを行ったところ、金ナノダンベルの共鳴波長が 1200 nm 付近だったのに対して、コアシェルナノダンベルは、より長波長側である 2000 nm 付近で応答を示すことがわかった。この共鳴波長の違いは構成粒子の元々の共鳴波長に依存していると考えられる。最後に、金ナノキューブ二量体の電場強度分布図から金ナノキューブが連結した構造を予測し、モデル化してシミュレーションを行ったところ、連結によって新たに形成されたモードでは、電場強度が通常のナノキューブ二量体上で形成される電場強度に比べて 100 倍近く向上するという結果が得られた。

## 4. まとめ

金ナノダンベルの構成粒子の材質や形状を変化させることで、共鳴波長の調整や、形成される電場強度のさらなる向上が見込めることが結論として得られた。

## 5. 今後の計画・展望

本年度に行ったシミュレーションでは、金ナノ粒子が金で繋がった構造体を扱ってきたが、金以外で繋いだ場合、光学応答が変化すると考えられる。そこで、今後は金ナノ粒子を金以外の材料で繋ぐことによる光学特性への影響を調査していき、共鳴波長をより大きくシフトさせたり、形成される電場強度をさらに増強させることが可能な構造体の設計を行っていく。

2023年度 利用研究成果リスト

【口頭発表】

- 竹内 祐貴、武安 伸幸、田中 拓男、ナノの光が誘起する化学反応とそれを利用したナノフォトニクス的アプローチによる金属ナノ粒子表面の加工、第74回コロイドおよび界面化学討論会、2023年9月、信州大学 長野(工学)キャンパス
- Yuki Takeuchi, Nobuyuki Takeyasu, Takuo Tanaka, Fabrication of gold nanobridges between gold nanoparticles by localized light, JSAP-Optica Joint Symposia 2023, September 2023, Kumamoto-jo Hall