

プロジェクト名(タイトル):

SLAMON を用いたナノ構造設計

利用者氏名:○川崎 大輝

理研における所属研究室名: 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

光の波長未満のサイズの金属ナノ構造をプラズモニック構造と呼ぶ。プラズモニック構造を用いて光を制御するメタフォトニクスと呼ばれる技術はセンサ、エネルギーデバイス、光通信など種々の技術分野で注目されている。光の制御に関わるプラズモニック構造の光学特性は、単一の金属ナノ構造の形状や材料、また、それらを基板表面に配列させる際の幾何学や構成要素の数など、多種のパラメータにより調整できる。目的の機能を発現する構造設計には、有限差分時間領域(FDTD)法が利用できる。また、プラズモニック構造における光-物質相互作用がセンシングやエネルギーデバイスへの応用に重要であり、この理論解析には、密度汎関数理論(DFT)計算が利用できる。FDTD と DFT 計算を組み合わせることで、光-物質相互作用に着目したプラズモニック構造設計の実現が期待できる。電磁場解析ソフトウェア”SALMON”はこれを実現できる数値計算法を提供している。SALMON は、これまでの研究で用いてきた商用電磁場解析ソフトウェア(LumericalFDTD)と比較して、電磁場計算方法がいくらか異なる点もある。そこで、今年度は、SALMON の利用方法の学習と、簡単なモデルで Lumerical FDTD との計算結果を比較し、プラズモニック構造設計における SALMON の利用可能性と計算結果の信頼性について検証した。

2. 具体的な利用内容、計算方法

SALMON と Lumerical で直径 50 nm の金ナノ粒子の吸収・散乱断面積を比較することで、プラズモニック構造の構成要素に対する計算整合性を検討した。また、金ナノ粒子を二次元平面に正方配置で周期的に配列した周期構造体の反射率・透過率を比較することで、プラズモニック構造の光学特性に関する計算整合性を検討した。ここでは計算に用いる波長帯域(400~800 nm)、計算領域分割サイズ、計算時間、各材料のデータベースを同一にし、可能な限り計算方法をそろえた。一方で、SALMON では HOKUSAI を利用し、Lumerical では、研究室所有のワークステーションを利用しているため、計算速度は評価の対象から除外しているが、計算結果への影響がない計算コストの範囲で評価した。

3. 結果

まず、金ナノ粒子の散乱・吸収断面積では、ピーク波長の差が 2 nm、強度の差が 3%未満であった。また、周期構造の反射率・吸収率の差は 2%程度であった。これらの誤差は、計算における条件設定の少しの違いから生ずるものと考えられ、構造設計において顕著な影響を与えるものではなく、SALMON の利用可能性が高いことを示している。一方で、SALMON では、周期系において光の入射角度の変更が現状では困難であることから、角度に依存する光学特性評価には利用できないことが分かった。本研究で設計するプラズモニック構造の光学特性は入射角度依存性を持つため、SALMON による設計は断念した。

4. まとめ

本研究では、プラズモニック構造の設計における SALMON の利用可能性を、これまで利用してきた商用ソフトウェア LumericalFDTD と比較することで、その精度や汎用性を比較・評価した。光の入射角が固定の場合には、金ナノ粒子・周期構造体ともに良好な整合性を示し、利用可能性が高いことが分かった。しかし、SALMON は入射角度の変更への対応が困難であり、光学特性の角度依存性の評価には利用できない。したがって、利用範囲には制限がある。

5. 今後の計画・展望

HOKUSAI を利用した SALMON での計算は、ワークステーションでの商用ソフトウェアでの計算に比べ、計算コストの高い問題に非常に有利である。今後は、光の入射角を固定する系での大規模な電磁場計算に応用し、ソフトウェアをうまく使い分けることで、ナノ構造設計の計算効率を向上させる。

6. 利用がなかった場合の理由