

課題名(タイトル):

メタマテリアルの電磁気学特性解析

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. 本課題の研究の背景、目的

当研究室で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」と応用技術について研究を行っている。

光メタマテリアルには様々な機能を持つものが考案・提案されているが、その中で特定の波長の光を選択的に吸収するものは「メタマテリアル吸収体」と呼ばれている。メタマテリアル吸収体では、その構造を制御して吸収バンドの帯域幅が狭くなるように設計すると、これに白色光を照射した際に特定の波長の光のみが吸収されて、反射もしくは透過光には色が付いたように見える。すなわち狭帯域メタマテリアル吸収体は発色体として機能する。これが「メタマテリアル発色体」である。しかもその色は、メタマテリアル吸収体の構造の形状やサイズ、配置間隔等に対して鋭敏に変化する。

新型コロナウイルス感染症の蔓延を受け、我々はこのメタマテリアル発色体を既存のイムノクロマトグラフィックデバイスに適用することを考案した。具体的には、ウイルスに由来する生体分子の存在を示すイムノクロマトデバイスの色変化をメタマテリアル発色体によって肉眼でも識別しやすくするように拡大する。昨年度に続き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発色体を基礎として、その素子構造や配置、さらには生体分子によって吸着する金ナノ微粒子のサイズや付着場所と光吸収スペクトルとの関係を数値解析した。

光メタマテリアルを構成する1つ1つの素子のサイズは、数十～数百ナノメートルである。一方、メタマテリアル全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 $10^3 \sim 10^6$ になる。さらに、メタマテリアルの動作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、その特性の解析は単一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。

今年度は、特に HBW2 の能力を最大限活用するために、

ソースコードが公開されている離散双極子近似法(DDA)ソフトウェア DDSCAT を独自に改変し、我々の目的に特化した解析が行えるように修正した。そして、数個の金属ナノ微粒子がメタマテリアル発色体の共振器構造に付着した場合の反射スペクトル形状の変化を計算し、昨年度の計算結果や有限要素法による計算結果と比較することで、その整合性を確認するとともに、実際のデバイスの構造をモデル化した電磁解析計算に取りかかった。

2. 具体的な利用内容、計算方法

ソースコードが公開されている分割双極子解析法(DDA)ソルバの DDSCAT を入手し、これを HBW2 に最適化させるように改変を加えた。特にスペクトルの計算においては波長毎に完全に並列に計算が可能なため、並列計算のルーティンを最適化することで計算時間の短縮化を図った。

計算モデルとしては、金薄膜の上に膜厚 100 nm のフッ化マグネシウム層を介して直径 100～500 nm、厚さ 40 nm のアルミニウム製円形パッチ構造を積層したメタマテリアル発色体を過程し、その表面に、直径 20～60 nm の金ナノ微粒子が付着した際のメタマテリアル発色体の色変化を計算した。

3. 結果

数値解析の結果、アルミニウム製円形パッチ構造の直径を変える事で、青や緑、もしくは黄色に呈色する発色構造として機能することを確認した。そしてその表面に金ナノ微粒子が付着することで、青から紫、緑から赤紫、黄色から赤といった色変化を起こす事を確認した。

計算で得られたデバイス構造の色変化量が既存のデバイスに対して向上しているかどうかを比較するため、色変化前後の色の3次元色度図上での位置を求め、2つの色の間の距離を色変化量と定義した。計算の結果、既存のイムノクロマト法では、40 程度の色変化量に対して、メタマテリアル発色体を用いたデバイスの色変化量は70程度となり、約1.8倍程度に向上していることが解った。

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も確認した。

4. 今後の計画・展望

HBW2 用に修正した DDSCAT コードにより効率良くメタマテリアル発色体の光学特性を解析することができた。またその解析結果は実験結果とよく一致することも確認した。このデバイスの計算モデルはパラメータが多く、未だ最適構造を網羅的に調べた訳ではない。次年度以降では、ベイズ最適化法などの非線形最適化手段を利用して、色変化を最大化させるデバイス構造の洗い出しを行う予定である。