

## 1. はじめに

層構造粒子とは、光学的特性が異なる複数の材料の一つがコアを形成し、その他がコアの周囲を取り囲む構造をもつ粒子のことである。層構造粒子は、単独の材料から成る粒子とは異なる光学的特性を有することが期待できるため、層構造粒子を利用した新たな塗料、顔料、及び拡散粒子の開発が行われている。製造された粒子が、所望の光学的特性を有するかどうかを調べるには、光散乱法が有効な手段である。本研究では、 $n$  層構造粒子の Mie 散乱特性の数値計算アルゴリズムを開発する。開発したアルゴリズムを検証するとともに、層構造粒子で発生する特異な散乱特性について評価する、

## 2. Mie 散乱理論の拡張

Mie は、均一媒質中に存在する伝導球が単色平面波出照射されたときに発生する回折現象について、Maxwell 方程式の厳密解を得た。図 1 は、粒子、入射光および散乱光の関係を示す。入射光軸と散乱方向のなす角を散乱角  $\theta$  とするとき、散乱平面に垂直な偏光方向の散乱光強度関数  $i_1(\theta)$  と平行な偏光方向の散乱光強度関数  $i_2(\theta)$  はそれぞれ次式で与えられる。

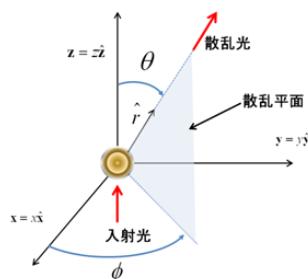


図 1. 散乱モデル図

$$i_1(\theta) = \left| \sum_{n=1}^{\infty} \frac{2n+1}{n(n+1)} [a_n \pi_n(\cos \theta) + b_n \tau_n(\cos \theta)] \right|^2 \quad (1)$$

$$i_2(\theta) = \left| \sum_{n=1}^{\infty} \frac{2n+1}{n(n+1)} [a_n \tau_n(\cos \theta) + b_n \pi_n(\cos \theta)] \right|^2 \quad (2)$$

ここで、 $a_n$  と  $b_n$  は散乱関数、 $\pi_n(\cos \theta)$  と  $\tau_n(\cos \theta)$  は角関数である。Mie 散乱特性は、散乱関数  $a_n$  と  $b_n$  により決定される。散乱関数を決定するためには、粒子とその周囲媒質との境界条件

$$\begin{cases} E_{\theta}^{(o)} = E_{\theta}^{(i)} & H_{\theta}^{(o)} = H_{\theta}^{(i)} \\ E_{\phi}^{(o)} = E_{\phi}^{(i)} & H_{\phi}^{(o)} = H_{\phi}^{(i)} \end{cases} \quad (3)$$

を用い 4 連立方程式を解くことによって算出される。ここで、O と I はそれぞれ粒子の外側と内側を表す。2 層

構造の場合には、コアと外層および外層と周囲媒質との間に、8 個の境界条件が必要となるため、8 連立方程式を解法しなければならない。 $n$  層構造粒子の場合は、同様に考えると  $4n$  連立方程式を解くことによって Mie 散乱特性を計算できることになる。

## 3. 数値計算

上述の  $n$  層構造粒子の Mie 散乱特性の数値計算アルゴリズムを確認するために、2 層構造粒子のコア径と外層幅との比に対する散乱効率を計算した。図 2(a)は本アルゴリズムで計算した結果であり、(b)は Kerker<sup>1)</sup> が計算した結果である。ここで、 $\alpha$  と  $\beta$  はそれぞれコア径と外層幅である。図 2 は、本研究で提案する計算アルゴリズムの正当性を示すものである。図 3 は、金粒子単体、コアと外層をそれぞれ金と銀とする層構造粒子、およびそれをシリカで覆った 3 層構造粒子に対する散乱図を示す。ここで、粒子半径は 160nm、照射平面波の

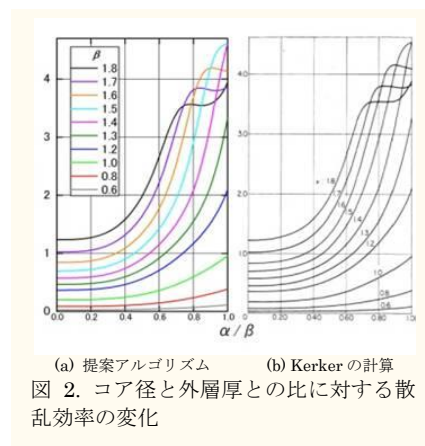


図 2. コア径と外層厚との比に対する散乱効率の変化

波長は 633nm、周囲媒質は水とした。図より、単粒子から層を増加させることにより、後方散乱光を抑制できることが分かる。このように層構造粒子によって散乱特性を制御できる可能性があることならびに層構造を設計するための計算アルゴリズムの正当性を示した。散乱特性の制御についての詳細は講演で報告する。

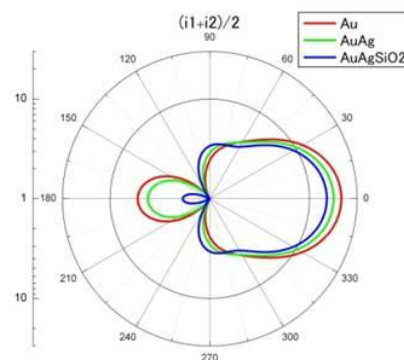


図 3. 層構造粒子の散乱強度分布

参考文献 1) M. Kerker: *The Scattering of Light*, Academic press, 1969.