

回転楕円体金ナノ粒子の吸収断面積の数値計算と吸光度との比較

Numerical calculation of absorption cross-section of spheroid gold nanoparticle and comparison with the absorbance

静岡大工¹ ○中川 和哉, 近藤 淳

Shizuoka Univ.¹, ○Kazuya Nakagawa, Jun Kondoh

E-mail: j-kondoh@sys.eng.shizuoka.ac.jp

1. はじめに

近年, 金属ナノ構造物を利用した医療, バイオ, エネルギーなど様々な分野でその特性を利用・応用した研究が盛んに行われている。特に, 局在表面プラズモン共鳴 (LSPR: localized surface plasmon resonance) という現象が注目を集めている。LSPR とは, 金ナノ構造物中に存在する自由電子が特定の波長によって集団振動を起こし, その振動に付随して局在的な電場が発生する現象の事である。LSPR の波長は, 貴金属の種類, 形状, 近傍の誘電率に依存する。このことから, 金ナノ粒子は誘電率変化を利用した光センサへの応用が期待されている。しかし, LSPR による影響を評価するシミュレーションの研究はまだ少ししか行われていない。

本研究では, 金ナノ粒子の吸光度シミュレーションの基礎研究として, 吸収断面積の数値計算と規格化吸光度のピーク波長による関係性の評価を行った。

2. 吸収断面積

吸収断面積とは, 金ナノ粒子によって吸収される全パワーと等しくなる入射平面波の断面積の事である。吸収断面積は式 (1) から求める事ができる。

$$C_{abs} = k \operatorname{Im}(\alpha) \quad (1)$$

ここで, α は形状に依存した分極率である。また, k は波数である。回転楕円体に対する α は式 (2) で与えられる。

$$\alpha = V(\epsilon_1 - \epsilon_2) / (L(\epsilon_1 - \epsilon_2) + \epsilon_2) \quad (2)$$

ここで, V は粒子の体積であり, L は形状因子である。 ϵ_1 と ϵ_2 はそれぞれ, 金ナノ粒子と周囲の誘電率である。

3. 基板作成と評価

吸光度計測に用いる金ナノ粒子基板は, 膜厚 3.8nm となるように金を蒸着したガラス基板を, 500℃で 12 時間アニーリングを施すことで作成した。作成した基板の AFM 観察により, 吸収断面積の計算に用いる粒子の直径と高さを求めた。

4. 結果と考察

吸収断面積の計算結果と吸光度の実験結果を図 1 に示す。AFM で観察できたすべての微粒子サイズを含めた計算結果 (黒の実線) はピーク波長が 580nm となり, 実験結果で

ある吸光度 (計算結果①) のピーク波長 570nm とは一致しなかった。また, 波形の一致も見られなかった。この原因として, 直径に対して高さが小さい粒子の影響は実験結果に現れないと考えている。そこで, 高さが直径の 1/10 未満の粒子を省いて計算した (計算結果②)。この計算結果から得られたピーク波長は 570nm となり実験と一致した。濃度の異なる溶液を基板上に乗せた場合のピーク波長を表 1 に示す。周囲の誘電率の変化による吸光度のピーク波長の長波長方向へのシフトと同様に, 吸収断面積のピーク波長も長波長側へシフトした。そして, 各誘電率においてよい一致を示した。このことから, 吸収断面積の数値計算を用いて吸光度のピーク波長の波長位置を数値計算により求められる可能性を示すことができた。

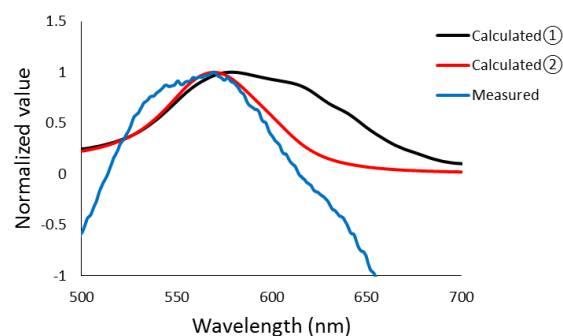


図 1. 数値計算した吸収断面積と実測で得られた吸光度

表 1. 濃度の異なる溶液でのピーク波長位置

	Air	Water	Glucose5wt%
Calculated	570nm	590nm	600nm
Measured	570nm	586.5nm	598.3nm

5. まとめ

数値計算による吸収断面積と吸光度のピーク波長の関連性を示すことができた。金ナノ構造物を用いたセンサの実用化には, 数値計算による結果の予測が必要不可欠である。今後, 計算に考慮すべき粒子サイズのより正確な選別方法の確立など, 計算精度向上に向けて検討する。

参考文献

[1] S. Asano, et al. Vol.14, pp.29-49 (1975)