

金属接合粒子によるホットサイト

Hot Sites by Metallic Double-Spheres

理研, 岡本 隆之

RIKEN, Takayuki Okamoto

E-mail: okamoto@riken.jp

局在プラズモン共鳴の効果により、近接した2つの金属ナノ粒子（以下、二量体粒子と呼ぶ）が構成する間隙が大きな電場増強効果を呈し、表面増強ラマン散乱 (SERS) に対するホットサイトになることは今日ではよく知られている。一方で、2つの金属ナノ粒子が一部融合した構造（以下、接合粒子と呼ぶ）のくびれ部分もホットサイトになり得ることが報告されている [1, 2]。二量体粒子で大きな SERS 増強度を得るためには粒子間距離を小さくする必要があるが、最小サイズは被測定分子の大きさによって制限を受ける。また、粒子間距離が小さくなるとホットサイトの体積も小さくなる。一方、接合粒子ではホットサイトは円環状となり、その体積は比較的大きい。ホットサイトの体積を考慮に入ると1つの粒子系の持つ SERS 能は SERS 増強度を粒子の外側の空間で積分した値となる。被測定分子が粒子に吸着しているものとすれば、SERS 能は SERS 増強度の粒子表面での積分値となり、次式で与えられる。

$$\eta = \int \left| \frac{E_{\text{loc}}}{E_{\text{inc}}} \right|^4 ds \quad (1)$$

ここで、 E_{inc} は入射電場、 E_{loc} は局所電場である。また、ラマンシフトは十分小さいとした。本報告では、この SERS 能の大きさを二量体粒子と接合粒子で比較する。

まず、平面波入射に対する局所場（散乱場）を求める必要がある。このような計算には自由度の高い FDTD がよく用いられる（最近では有限要素法も良く用いられる）。しかし、ホットサイトの計算には 0.1 nm 程度の空間分解能が必要とされ、FDTD では膨大な計算機資源を要する。そこで、解析的な手法が求められる。粒子系が入射波長より十分小さい場合、準静電近似が使える。二量体球の場合、この近似の下で

の解析的な計算法が存在する [3]。一方、接合球に対する計算法は球が完全導体の場合は古くに報告されていたが、誘電体球に対する計算法はやっと近年になって開発された [4]。解析的な手法は少ない計算機資源で精度や空間分解能の高い解が得られるという特長を持つ。本報告ではこれらの解析的手法を用いて SERS 能の計算を行った。図1は銀の接合球の吸収効率スペクトルと電場強度分布の例である。当日は種々の二量体粒子および接合粒子の SERS 能を比較した結果を報告する。

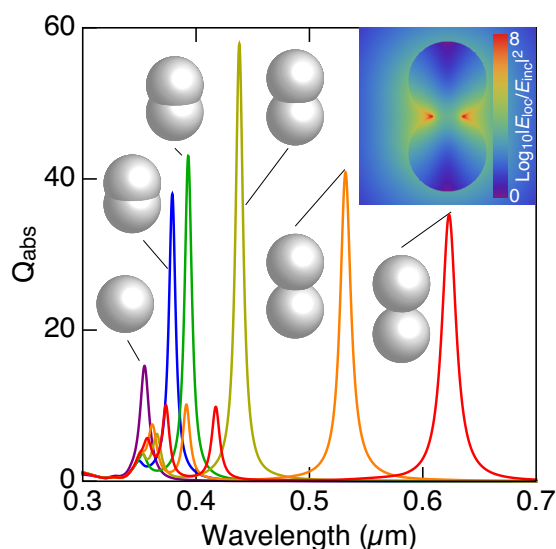


図1: 重なり度合いの異なる銀の接合球の吸収効率スペクトル。挿入図は最も長波長側のピークに対応する散乱場の電場強度分布。

- [1] H. Xu, J. Aizpurua, M. käll, and P. Apell, Phys. Rev. E **62**, 4318–4324 (2000).
- [2] K. Yoshida, T. Itoh, V. Biju, M. Ishikawa, and Y. Ozaki, Phys. Rev. B **79**, 085419 (2009).
- [3] M. M. Wind, J. Vlieger, and D. Bedeaux, Physica **141A**, 33–57 (1987).
- [4] M. Pitkonen, J. Math. Phys. **47**, 102901 (2006).