RCWAを用いたAuアレイ上分子の赤外吸収増大シミュレーション

Infrared absorption enhancement of molecule on Au array by RCWA simulation

弘前大院理工[1]，弘前大教育[2],
○千葉 豪[1], 中嶋 洋[1]，石郷 侑汰[1]，津島 将導[1],
島田 透[2]，鈴木 裕史[1]

Grad. Sch. of Sci. & Technol., Hirosaki Univ[1]. Fac. of Edu., Hirosaki Univ[2].

○Suguru Chiba[1], Hiroshi Nakashima[1], Yuta Ishigo[1], Masamichi Tsushima[1],

Toru Shimada[2], Yushi Suzuki[1]

E-mail: uc@cc.hirosaki-u.ac.jp

[緒言] 金属ナノ粒子配列付近に堆積した分子による赤外吸収が著しく増大する現象を表面増大赤外吸収（SEIRA）という。この現象について我々は過去に様々な研究を行い、増大の大きさが粒子の間隔/サイズ比に依存すること(図1黒丸)を発見し [1]、Square Columnar Model (SCM)増大機構[2](図1点線)で説明されることを明らかにした。さらに、厳密結合波解析(RCWA)法[3]を用いても、同様な結果が得られる(図1白丸)ことを検証した。 [4,5]しかし研究を進めるうちに、同一の間隔/サイズ比においてもサイズによって増大率にわずかな変化が見られることなど、SCMでは考慮していない要素が実験値やRCWAに存在していることも明らかになってきた。そこで今回は、バックグラウンド吸収のディップ位置と分子の吸収ピークとの相対的位置関係に着目しRCWAシミュレーションによってSCMでは考慮できない効果の影響を探る。

[実験方法]粒子高さ29nm（Cr接着層 3 nm, Au層 26 nm）、粒子サイズ100–4000 nm、粒子間隔100–4000 nmの角柱金ナノ粒子配列をSi基板上に電子線リソグラフィを用いてリフトオフ法で作成した。赤外吸収スペクトルの測定はVarian 670/610-IR顕微赤外分光器を用いて垂直入射の透過法で行った。

[計算手法]Au上仮想分子の赤外吸収スペクトルをシミュレートするために、RCWA法を用いて3層系（Si基板層/角柱金ナノ粒子配列&仮想分子層/空気層）の透過率を計算し、得られた吸収強度から増大率を求めた。計算にはフリーのRCWA計算ソフトS^4[6]を用いた。Si、金の誘電率は文献値[7][8]を使用した。

[結果]シミュレーションによって得られた結果より、透過率のディップを境目に低波数側においてはっきりとした増大が見られることが明らかになった。また、低波数側であってもディップに近いほど吸収ピークが増大されていることがわかり、これは実験で得られた増大傾向ともある程度一致することが確認できた。

[謝辞]本研究で用いた金ナノ粒子配列は、東京大学の微細加工プラットホームの施設を利用して作成された。

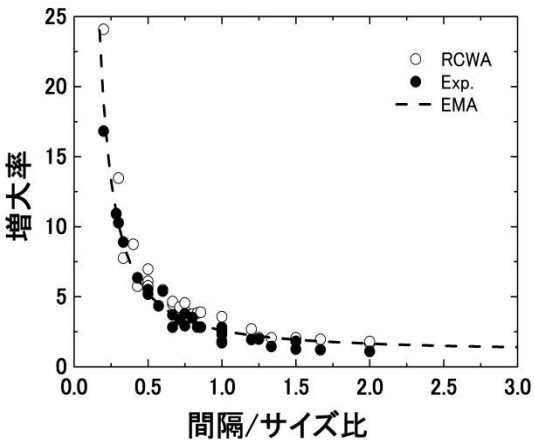

図 1 赤外吸収増大率の比較

[1]:M.Tsushima et.al. , 第77回応用物理学会秋季学術講演会13p-A25-8.
[2]: Y. Suzuki, K. Kita, N. Matsumoto, Appl. Phys. A 77, 613–617 (2003).
[3]: M. G. Moharam, Eric B. Grann, and Drew A. Pommet, J. Opt. Soc. Am. A/Vol. 12, No. 5/May 1995
[4]: S.Chiba et.al. 第 77 回応用物理学会秋季学術講演 13p-A25-10.
[5]: S.Chiba et.al. 第 78 回応用物理学会春季学術講演 15p-514-3
[6]: Victor Liu and Shanhui Fan, “S^4: A free electromagnetic solver for layered periodic structures,” Computer Physics Communications 183, 2233-2244 (2012)
[7]: D. F. Edwards and E. Ochoa , Appl. Opt., 19, 4130-4131 (1980)
[8]: R. L. Olmon, B. Slovick, T. W. Johnson, D. Shelton, S.-H. Oh, G. D. Boreman, and M. B. Raschke. Phys Rev. B 86, 235147 (2012) (see Supplemental Material for numerical data)