

遅延効果を考慮した複数金属ナノ構造中の局在プラズモンの理論

Theory of Localized Plasmons Considering Retardation Effect of the Potential

東大院工 ○ 市川 昌和

University of Tokyo, °Masakazu Ichikawa

E-mail: ichikawa@ap.t.u-tokyo.ac.jp

本発表では、スカラーポテンシャルの遅延効果を考慮した局在プラズモンの理論[1, 2]の複数金属ナノ構造への応用に関して報告する。

電磁場の遅延効果を考慮したとき、Random Phase 近似 (RPA)および高周波数（プラズモン周波数領域）近似において、有効スカラーポテンシャル $\varphi_{\text{eff}}(\mathbf{r}, \omega)$ と外部スカラーポテンシャル $\varphi_{\text{ext}}(\mathbf{r}, \omega)$ は、局所電子密度を $n(\mathbf{r})$ とすると、以下の方程式を満たす[1, 2]。

$$\varphi_{\text{eff}}(\mathbf{r}, \omega) = \varphi_{\text{ext}}(\mathbf{r}, \omega) + \int d\mathbf{r}_1 G_0(\mathbf{r} - \mathbf{r}_1, \omega) \rho(\mathbf{r}_1, \omega), \quad \because \rho(\mathbf{r}_1, \omega) \equiv -\frac{e^2}{m_e \omega^2} \nabla_1 \cdot [n(\mathbf{r}_1) \nabla_1 \varphi_{\text{eff}}(\mathbf{r}_1, \omega)] \quad (1)$$

ここで、 $G_0(\mathbf{r} - \mathbf{r}_1, \omega)$ は下記の Helmholtz の方程式を満たす遅延 Green 関数である。

$$(\nabla^2 + \omega^2/c^2) G_0(\mathbf{r} - \mathbf{r}_1, \omega) = -4\pi\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_1), \quad G_0(\mathbf{r} - \mathbf{r}_1, \omega) = \exp(i\omega/c \cdot |\mathbf{r} - \mathbf{r}_1|) / |\mathbf{r} - \mathbf{r}_1|$$

(1)式中の $\rho(\mathbf{r}_1, \omega)$ は、金属ナノ構造中の局在プラズモンによる誘起電荷密度である。局所電子密度 $n(\mathbf{r})$ として複数金属ナノ構造によるものを考え、固体電子のバンド理論における構造グリーン関数法(KKR 法) [3]を利用すれば、複数金属ナノ構造中におけるポテンシャルの遅延効果を考慮して局在プラズモン励起を取り扱うことができる。今、半径 a の金属球の表面において局所電子密度が階段関数的に変化すると仮定し、(1)式を球面調和関数で展開することによって、局在表面プラズモンの共鳴振動数は以下の行列式から求められる。

$$\det \left[\left(\omega^2 - \frac{\omega_p^2 l}{2l+1} \right) \delta_{ll'} \delta_{mm'} \delta_{ns} - \frac{\omega_p^2 (i)^{l-l'+1} \left(\frac{\omega a}{c} \right)^{l+l'+1} l'}{(2l+1)!!(2l'+1)!!} B_{lm;l'm'}(\mathbf{R}_n - \mathbf{R}_s, \omega) (1 - \delta_{ns}) \right] = 0 \quad (2)$$

$$\because B_{lm;l'm'}(\mathbf{R}_n - \mathbf{R}_s, \omega) = 4\pi \sum_{l'', m''} (-i)^{l''} C_{lm;l'm';l''m''} h_{l''}^{(1)} \left(\frac{\omega}{c} |\mathbf{R}_n - \mathbf{R}_s| \right) Y_{l''m''}^* (\theta_{\mathbf{R}_n - \mathbf{R}_s}, \phi_{\mathbf{R}_n - \mathbf{R}_s})$$

ここで、 $\delta_{ll'}$ などは Kronecker のデルタ記号、 $C_{lm;l'm';l''m''}$ は Gaunt 係数[3]、 $h_{l''}^{(1)}$ と $Y_{l''m''}^*$ はそれぞれ第1種の Hankel 関数と球面調和関数、 $\mathbf{R}_n$ と $\mathbf{R}_s$ は複数の金属球の中心位置である。(2)式の第1項目は単一金属球の表面プラズモン振動数を与え、第2項目は複数の金属球間の相互作用による振動数変化を与える。当日は、(2)式の導出、周期的金属ナノ構造に対する結果と、光速を無限とした準静的結果との比較に関して報告する。

参考文献：

[1] M. Ichikawa, e-J. Surf. Sci. Nanotech. **12**, 431 (2014), ibid. **13**, 391 (2015). [2] M. Ichikawa, Condens. Matter **1**, 9 (2016). [3] R. M. Martin, 物質の電子状態（下）、p. 132（丸善、2012年）。