RCWAを用いたAuアレイ上PAAの赤外吸収増大シミュレーション

Infrared absorption enhancement of PAA 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。この現象は長らく増大機構が不明瞭であったが我々の研究によって徐々に解明されつつある。具体的に我々は過去の研究において、金属ナノ粒子の粒子間隔／粒子サイズの比が増大に大きく寄与し、とりわけその値が小さいほど吸収強度が増大することを明らかにした。[1,2] また、厳密結合波解析(RCWA)法[3]を用いた赤外透過率のシミュレーション結果が実験値を非常に高く再現する[4]ことから、今回の研究ではAu上のPAAの赤外吸収増大率を引き続きRCWA法を用いてシミュレーションすることで、SEIRA研究におけるRCWAの優位性を示す。

[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PAA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&PAA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][5]を用いた。Si、金の誘電率は文献値[6][7]を使用した。

[結果]RCWAを用いて得られた計算値から示される赤外吸収増大率は実験値から得られた増大率を非常によく再現した。また、実験値、計算値共に我々が過去に提唱したSquare Columnar Model (SCM)増大機構[9]から得られた理論値に非常に近似しており、SCMのさらなる妥当性が得られた。

[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。

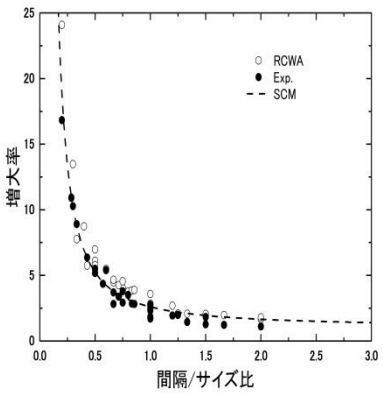

図 1 赤外吸収増大率の比較

[1]: H.Nakashima et.al. ,第75回応用物理学会秋季学術講演会19p-A6-14.
[2]:M.Tsushima et.al. , 第77回応用物理学会秋季学術講演会13p-A25-8.
[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会13p-A25-10.
[5]: Victor Liu and Shanhui Fan, “S4: A free electromagnetic solver for layered periodic structures,” Computer Physics Communications 183, 2233-2244 (2012)
[6]: D. F. Edwards and E. Ochoa , Appl. Opt., 19, 4130-4131 (1980)
[7]: 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)
[8]: Y. Suzuki, K. Kita, N. Matsumoto, Appl. Phys. A 77, 613–617 (2003).

© 2017年 応用物理学会