

サブ nm ギャップを有するプラズモニックメタ表面の屈折率変動機構の解明

Clarification of Refractive Index Variation for Plasmonic Metasurface with Sub-nm Gaps

筑波大計科セ¹ 竹内 嵩¹, 野田 真史¹, [○]矢花 一浩¹

Cent. for Comp. Sci., Univ. of Tsukuba¹, Takashi Takeuchi¹, Masashi Noda¹, [○]Kazuhiro Yabana¹

E-mail: take@ccs.tsukuba.ac.jp

金属ナノ粒子を 2 次元周期配列したプラズモニックメタ表面は、構成粒子の光増強効果に基づく特異な屈折率および nm オーダーの膜厚、さらには粒子の形状・周期から決まる幅広い光物性制御性を有し注目されている[1]。一般にメタ表面では、金属ナノ粒子の周期長を入射光の波長からサブ波長程度に選ぶことが多いが、近年、周期長が極端に短く、金属ナノ粒子間にサブ nm のギャップを持つメタ表面が実験で作成された[2]。このメタ表面はサブ nm ギャップで高い光増強効果を発揮し、自然界では見られない高い屈折率を有するため、光学素子の小型化に有望だと示された。このようなサブ nm ギャップに対し、二量体に代表される孤立系の研究が 10 年前より実験・理論の双方で活発に行われており、結果、ギャップ 0.4nm 付近を境に金属ナノ粒子間にトンネル電流による電子輸送が生じ、光増強効果が失われることが知られている[3]。一方、メタ表面ではサブ nm ギャップの研究は未だ十分な検討が行われておらず、先行研究における 0.45nm のギャップを持つ系の報告に留まる[2]。そこで著者らは、前回の春季学術講演会にて、初期検討として、メタ表面の基礎物理量である透過率・反射率・吸収率のギャップ依存性を時間依存密度汎関数理論(TDDFT)で解析し、電子輸送がこれらの物理量に及ぼす影響を調査した[4]。

本研究では、前回同様にサブ nm ギャップを有するメタ表面を TDDFT により解析し、電子輸送による屈折率変動の機構を明らかにする。TDDFT には、昨今我々のグループが開発した実時間・実空間光励起電子ダイナミクス第一原理計算プログラム、SALMON を用いた[5]。結果、孤立系ではギャップ 0.4nm 付近で電子輸送が生じ光増強効果が失われたのに対し、メタ表面では半分の 0.2nm 付近まで光増強が保たれ高い屈折率を維持できることを明らかにした。発表ではこれらに加え、昨今我々が調べている同種メタ表面の非線形応答についても進捗を報告する。

[1] N. Meinzer, W. L. Barnes, and I. R. Hooper, Nat. Photonics **8**, 889 (2014).

[2] D. Doyle, N. Charipar, C. Argyropoulos, S. A. Trammell, R. Nita, J. Naciri, A. Piqué, J. B. Herzog, and J. Fontana, ACS Photonics **5**, 1012 (2018).

[3] J. Zuloaga, E. Prodan, and P. Nordlander, Nano Letters **9**, 887 (2009).

[4] T. Takeuchi and K. Yabana, The 65th JSAP Spring Meeting **10a-W621-5**, 03-209 (2018).

[5] M. Noda, S. A. Sato, Y. Hirokawa, M. Uemoto, T. Takeuchi, S. Yamada, A. Yamada, Y. Shinohara, M. Yamaguchi, K. Iida, I. Floss, T. Otobe, K. Lee, K. Ishimura, T. Boku, G. F. Bertsch, K. Nobusada, and K. Yabana, Comput. Phys. Commun. **235**, 356 (2019). <https://salmon-tddft.jp/>