Au アレイ上増大場の RCWA によるシミュレーション Local Enhanced Field on Au array by RCWA simulation 弘前大院理工¹, 弘前大理工²⁰鈴木裕史¹, 工藤蓮太郎² Grad. Sch. of Sci. & Technol., Hirosaki Univ. ¹, Dept. of Sci. & Technol., Hirosaki Univ. ² [°]Yushi Suzuki¹, Rentaro Kudo² E-mail: uc@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、増大率が粒子の間 隔/サイズ比に依存することを発見し[1]、Square Columnar Model (SCM)増大機構[2] で説明される ことを明らかにした。SCMはSimpleなModelであるがゆえにナノ粒子配列膜外部(図1のB, C)の電場 を評価することができない。しかし、過去の研究によりナノ粒子配列膜外部にも増大場が存在し ているであろうことが示唆されている。[3] 厳密結合波解析(RCWA)法[4]は複雑なモデルであるが、 ナノ粒子配列膜内のみならず膜外の電場も評価できる方法である。我々は、膜内の電場に関して はSCMとRCWAの結果が一致することを明らかにし[5,6]、ナノ粒子配列膜外の増大減衰場を RCWAにより確認した。今回はこの減衰場とナノ粒子配列膜内の増大場との関連をRCWAにより 検証する。

[計算手法] ナノ粒子配列膜上に存在する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4層系(Si基板層/角柱金ナノ粒子配列/仮想分子配列&空気層/空気層)の透過率 を計算する。Au粒子サイズを250x250 nm、粒子間隔(ギャップ)は100 nmとし、高さを20 - 300 nm とした。この時、図1に示したA, B, Cの位置それぞれに1707.5 cm⁻¹に吸収を持つ仮想分子を配置し、 得られた吸収強度からA, B, Cそれぞれの位置における吸収強度および増大率を求めた。計算には フリーのRCWA計算ソフトS4[8]を用いた。Si、金の誘電率は文献値[9,10]を使用した。

[結果] 20-300 nmの高さをもつAuアレイ上のSite BおよびCに仮想分子層をその厚さを変えながら 設定し、それぞれの場合の吸収強度をシミュレーションによって得、それらの結果を仮想分子が Aにのみある場合(吸収増大が起こっている場合: SCMと一致する)と比較した。その結果、粒子上 (B)には増大場は存在しないが、ギャップ上(C)に減衰増大場が存在していることが明らかにした。 これは過去に実験で得られた結果[11]を支持するものである。しかし、この減衰場の強度が膜内電 場の強度には関連していないことが明らかになった。詳細は当日報告する。

С В С В С В С A A A A A Si Subst. Au Particle	 [1]: T.Shimada et.al., J. Phys. Chem. C, 2016, 120 (1), pp 534–541. [2]: Y. Suzuki, K. Kita, N. Matsumoto, Appl. Phys. A 77, 613–617 (2003). [3]: Y. Suzuki, S. Goto, and H. Umetsu, Eur. Phys. J. D, 33, 201–205 (2005) [4]: M. G. Moharam, Eric B. Grann, and Drew A. Pommet, J. Opt. Soc. Am. A/Vol. 12, No. 5/May 1995 [5]: S.Chiba et.al. 第 77 回応用物理学会秋季学術講演 13p-A25-10. [6]: S.Chiba et.al. 第 64 回応用物理学会春季学術講演 15p-514-3
Fig.1 計算モデルの模式図	[7] Y. Suzuki et al. 第 65 回応用物理学会春季学術講演 17p-202-5 [8]: Victor Liu and Shanhui Fan, "S4: A free electromagnetic solver for layered periodic structures," Computer Physics Communications183,
仮想分子の位置	2233-2244 (2012) [9]: D. F. Edwards and E. Ochoa , Appl. Opt., 19, 4130-4131 (1980)
A: 粒子間 (Au Array 膜内: ギャップ)	[10]: R. L. Olmon, B. Slovick, T. W. Johnson, D. Shelton, SH. Oh, G. D. Boreman, and M. B. Raschke. Phys Rev. B 86, 235147 (2012) (see
B: 粒子上 (Au Array 膜外)	Supplemental Material for numerical data)
C: ギャップ上 (Au Array 膜外)	[11]: Y. Suzuki, K. Kita, N. Matsumoto, Phys. Low Dim. Struc., 1/2, 1-8, (2001)