

時間依存密度汎関数法による微小金属周期配列の光物性解析

Optical Responses of Metallic Nano Array by Time-Dependent Density Functional Theory

筑波大計科セ¹ ○竹内 嵩¹, 矢花 一浩¹

Cent. for Comp. Sci., Univ. of Tsukuba¹, °Takashi Takeuchi¹, Kazuhiro Yabana¹

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

近年、微小金属を周期的に配列したメタ表面が注目されている[1]。メタ表面は、微小金属の構造と周期の変化により光物性を大きく変えることが出来る。一方、ここ 10 年、微小金属ダイマーの光学応答について実験と理論の双方で活発に研究されている[2]。この系では、ダイマー間距離が 1nm より短くなると量子効果が顕著に現れはじめ、古典電磁気学と大きく異なる光学応答が得られる。この様な量子効果について、ダイマーや少数孤立系に対してはこれまでに広く検討されてきたが、メタ表面のような周期構造に対しては、まだ十分に検討されていない。

本研究では、微小金属球を周期配列したメタ表面を時間依存密度汎関数法により解析し、量子効果が光物性に与える影響を明らかにする。時間依存密度汎関数法には、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[3]。Fig. 1は解析対象である。ここではJelliumモデルにより記述した微小金属球を周期配列しており、 xy 平面上における距離パラメータ d を用いて球間距離を制御する。発表では、 d の変化に対する光物性の変化として、透過率、反射率、光吸収率を評価する。また、古典電磁気学による計算との比較から、これらの物理量に量子効果が与える影響を明らかにする。

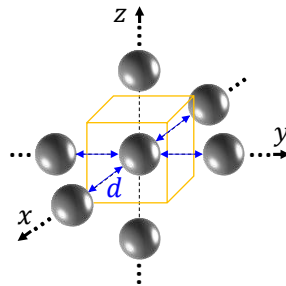


Fig. 1: A schematic illustration of the studied system consisting of jellium spheres that are periodically arrayed with spacing d as drawn by blue arrows on the xy -plane.

- [1] S. M. Choudhury, D. Wang, K. Chaudhuri, C. DeVault, A. V. Kildishev, A. Boltasseva, and V. M. Shalae, *Nanophotonics* **7**, 959 (2018).
- [2] W. Zhu, R. Esteban, A. G. Borisov, J. J. Baumberg, P. Nordlander, H. J. Lezec, J. Aizpurua, and K. B. Crozier, *Nat. Commun.* **7**, 11495 (2016).
- [3] 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).