

ナノ構造における赤外吸収増大の重要構造因子

The Key Structural Parameter for Infrared Absorption Enhancement on Nanostructures

弘前大学院理工 〇大島 卓, 水戸部大地, 鈴木裕史

Fac. of Sci. & Technol. Grad. Sch. of Sci & Technol.

〇Taku Oshima, Daichi Mitobe, Yushi Suzuki

E-mail: uc@hirosaki-u.ac.jp

[諸言] 表面増大赤外吸収(Surface Enhanced Infrared Absorption: SEIRA)とは金属ナノ粒子薄膜上に吸着した分子の赤外吸収強度が飛躍的に増大する現象である。この増大現象は Square Columnar Model (SCM) [1,2]により粒子間隔/粒子サイズ比に依存する粒子間への電場集中に依るものであることが明らかになった。[2-4] SCM 理論では、金属粒子間における誘電率から有効媒質近似を用いて有効誘電率を求めることができ、有効誘電率は粒子間隔/粒子サイズ比で表すことができる[4]。正方配列においては粒子間隔/粒子サイズ比と粒子が空間を占める割合(体積分率)は同じものとして扱ってしまう[5,6]ため、SEIRA 現象の増大効果は体積分率と粒子間隔/粒子サイズ比のどちらに依存しているのかが不明である。以前、我々は金属粒子を配置する角度を変えることで、粒子サイズ一定にし、粒子間隔のみの依存を検証した。[7] 本研究ではさらに詳しく粒子間隔の増大の依存を検証するため、計算する金属角柱角度を増やし、シミュレートした。

[計算方法]フリーの RCWA シミュレーションソフトである S⁴[8]を用い、真空層、Au 粒子パ

ターン層 Si 基板層の三層系で計算した。パターン層は、1 ユニットセルの 1 辺を 350 nm、粒子サイズは 250×250×30 nm としユニットセルの中心に配置した。金属粒子間には全て吸着分子としてポリアクリル酸(PAA)の仮想分子を配置し、金属粒子を 0 から 37° まで回転させ、吸収スペクトルをシミュレートした。

[計算結果]金属角柱の回転角が小さい場合(0–20°)程度までは吸収スペクトルに顕著な変化は見られず、このときの粒子間隔では吸収増大に大きな影響がないことが明らかになった。また、それ以上の角度では、徐々に増大が大きくなることを確認された。詳細は当日報告する。

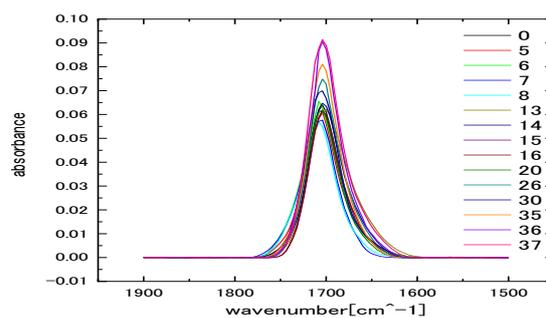


Figure 1. Infrared absorption spectrum of model molecules (Particle size 250×250×30 nm, Gap size 100 nm,)

- [1]: Y.Suzuki, K.Kita, N.Matsumoto, Appl.Phys.A 77 (2003) 613–617.
 [2]: T.Shimada et.al., J. Phys. Chem. C, 120 (2016) 534–541.
 [3]: Y. Suzuki et.al., Material Research Express 6 (2019) 1050d7.
 [4]: Yuta Ishigo et.al. Applied Physics A, 125 (2019) 863
 [5]: Victor Liu, Shanhui Fan, Computer Physics Communications 183 (2012) 2223–2244

- [6]: Bruggeman, D.A.G. "Dielectric constant and conductivity of mixtures of isotropic materials." Annalen der physic. (Leipzig) 24 (1935): 636-679.
 [7]: T.Oshima, 第 67 回応用物理学会春季学術講演会 14a-D215-1
 [8]: Victor Liu, Shanhui Fan, Computer Physics Communications 183 (2012) 2223–2244