

厳密結合波解析による表面増大赤外吸収における 増大場分布の調査

Investigation of enhancement field distribution

in surface enhanced infrared absorption by Rigorous couple-wave analyses

弘前大院理工¹, 弘前大教育², [○]水戸部 大地¹, 島田 透², 鈴木 裕史¹

Grad. Sch. of Sci & Technol., Hirosaki Univ¹, Fac. of Edu. Hirosaki Univ².

[○]Daichi Mitobe¹, Toru Shimada², Yushi Suzuki¹

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

[緒言] 我々は、金属粒子表面付近に増大場が生じるとした物理的表面第一層効果[1]を、角柱配列を使用した厳密結合波解析(RCWA)[2]にて検証した。その結果、粒子表面付近で吸収強度は最大にならず、粒子間で強度が周期的に変化していることが判明した。これは表面増大赤外吸収(SEIRA)現象に物理的表面第一層効果が無いことを示唆しており[3]、これは実験結果[4]を支持するものである。

本研究では、さらに詳しい吸収強度の分布を調査するため、モデル分子の配置を変化させ、RCWAにより吸収スペクトルを計算した。

[計算手法] 真空層、Au ナノ粒子パターン層、Si 基板層の三層系の計算を RCWA で行った。パターン層(図 1(a))は粒子の底面を正方形とし、その一边を 50 nm、高さを 6 nm、粒子間隔を 20 nm とした。吸着分子にはポリアクリル酸を想定したローレンツ振動子モデルを採用した。まず、図 1(b)のように領域を分割し、それぞれの領域毎にモデル分子を配置した吸収スペクトルを計算した。その後、各領域内を細分化し、詳しい電場分布を求めた。計算にはフリーの RCWA 計算ソフト S4[5]を用い、Si、Au の誘電率は文献値[6,7]を使用した。

[計算結果]図 2 は領域毎の吸収スペクトルを示す。金属粒子がないときの吸収強度を 1 とした増大係数は、粒子間の隙間全体に分子があるときが約 10 であるのに対し、X 領域では約 19、Y 領域では約 1.5、Diag 領域では 9 と、X 領域が最も大きな増大を示した。X、Y 領域の粒子に最も近い位置の吸収強度は最大ではなかった。結果の詳細は当日報告する。

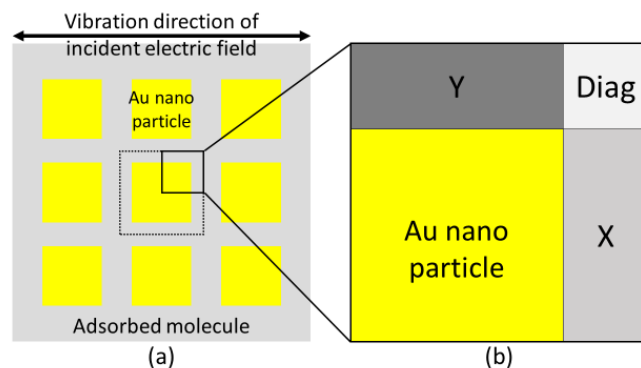


Figure 1. Periodic structure used for RCWA (dash line showed unit cell) (a) and divided and labeled areas (b).

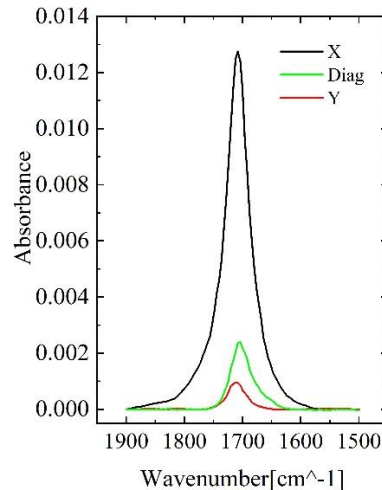


Figure 2. Infrared absorbance per divided areas.

- [1] Thomas G. Mayerhöfer and Jürgen Popp. Nanophotonics 2018; 7(1): 39–79
- [2] G. Moharam, Eric B. Grann, and Drew A. Pommet, J. Opt. Soc. Am. A/Vol. 12, No. 5/May 1995
- [3] D.Mitobe et al. 第 80 回応用物理学会秋季学術講演会 20p-E318-5
- [4] Yushi Suzuki and Hiroshi Nakashima. Mater. Res. Express 6 (2019) 085038
- [5] V. Liu and S. Fan, Computer Physics Communications 183, 2233-2244 (2012)
- [6] D. F. Edwards and E. Ochoa, Appl. Opt., 19, 4130-4131 (1980)
- [7] R. L. Olmon et.al, Phys Rev. B 86, 235147 (2012)