

Au ナノアレイにおける SEIRA 現象のための重要な構造パラメータ

The Pivotal Structural Parameter for SEIRA on Au nano-array

弘前大学院理工 〇大島 卓, 水戸部大地, 鈴木裕史

Grad. Sch. of Sci. & Technol Hirosaki Univ.

〇Taku Oshima, Daichi Mitobe, Yushi Suzuki

[諸言] 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表面増大赤外吸収 (Surface Enhanced Infrared Absorption: SEIRA) [1]は、Square Columnar Model(SCM)[2,3]により粒子間隔/粒子サイズ 比(f)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分かっている[3-5]。しかし四角柱正方配列において、 f は体積分率(F)の関数で表すことができる[5]。以前の研究では金属角柱を回転させ、最小粒子間隔を変化させることで、 F の値を固定し、吸収強度の f への依存を検証した[6]。結果、角柱を回転させていくにつれ、吸収強度は上昇傾向を示した。これは電場方向の最小粒子間隔の変化、つまりは f に依存していることが分かった。本研究では、 f の値を固定し、 F の値のみを変化させたモデル(Figure 1(b))の吸収強度をシミュレーションし、回転モデルとの結果を比較することで、 F と f のどちらの値が SCM における SEIRA 増大への重要パラメータであるのかを調査する。

[計算方法]フリーRCWA シミュレーションソフトである S^4 [7]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。モデルは、まず金属角柱の1辺の長さを 250 nm とし、gap を 100 nm とした。パターン層の高さは 30 nm とし、入射電場方向は x 方向としている(Figure 1(a))。吸着分子としてポリアク

リル酸(PAA)の仮想分子を想定し、 x 方向の粒子間を満たすように配置した。次に、 f の値を変化させずに F の値のみを変化させるため、 y 方向の粒子間隔のみを変化させ、金属粒子間の分子の吸収スペクトルをシミュレートした。(gap_y を 100 nm ~ 35 nm まで変化させた。Figure 1(b))

[計算結果] y 方向の粒子間隔(gap_y)のみを変化させた場合、 F の値は変化しているが吸収強度に顕著な変化は見られなかった。このことから、 f を固定し F を変えた場合でも吸収強度は f に依存していることが分かる。さらに、Figure 1(b)の結果の検証のため、 x 方向の粒子間隔(gap_x)のみを変化させたモデルでシミュレーションを行い、 f への依存を検証する。詳細は当日報告する。

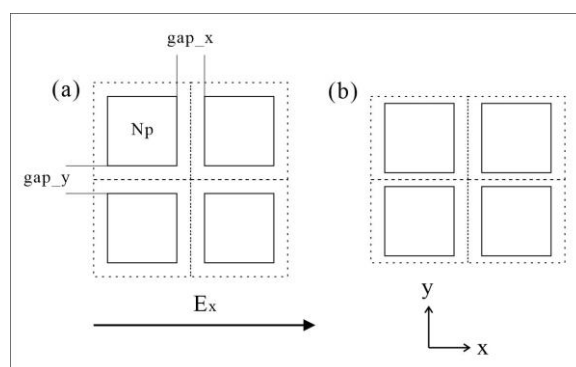


Figure 1. Schematic view of the proposed unit-cell.

(a) Square Columnar Model (gap_x = gap_y).

(b) Model that changes only gap_y.

- [1] A. Hartstein, J. R. Kirtley and J. C. Tsang, PHYSICAL REVIEW LETTERS 1980, 45, 201.
- [2]:Y.Suzuki,K.Kita,N.Matsumoto,Appl.Phys.A 77 (2003) 613–617.
- [3]:T.Shimada et.al., J. Phys. Chem. C, 120 (2016) 534–541.
- [4]:Y. Suzuki et.al.,Material Research Express 6 (2019) 1050d7.
- [5]: Yuta Ishigo et.al. Applied Physics A, 125 (2019) 863.
- [6]:T.Oshima, 第 81 回応用物理学会秋季学術講演会 9a-Z24-1
- [7]:Victor Liu, Shanhui Fan, Computer Physics Communications 183 (2012) 2223-224