

回転 Au ナノアレイの簡略モデルにおける表面増大赤外吸収の RCWA シミュレーション

RCWA simulation of surface enhancement infrared absorption

in simplified model of a rotated Au nanoarray

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]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(G/P 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分かっている[2-4]。SCM では、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られ、G/P 比でも表すことができる[4]。また正方配列において、G/P 比は体積分率と同じものとして扱ってしまう[5,6]ため、以前の研究で、金属角柱を回転させることで体積分率を変化させずに増大率の G/P 比への依存を検証した[7]。その際、粒子間隔が小さくなる領域(A)と大きくなる領域(B)ができた。(増大率は粒子間全体の平均となる。)本研究では、その特徴を簡潔に表したモデル(Figure1)を用い、独立した2つの領域における粒子間隔の変化による赤外吸収の増大率への影響を RCWA によりシミュレートする。

[計算方法]フリー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、ユニットセルの1辺を 350 nm、基準とする金属粒子サイズは 250×250×30 nm としユニットセルの中心に配置し、領域 B を x 軸方向に 1 nm 大きくする毎に領域 A を同方向に 2 nm 小さくする。吸着分子としてポリアクリル酸(PAA)の仮想分子を想定し、A 領域、B 領域にそれぞれ配置し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。

[計算結果]金属粒子間隔が小さくなる領域 A のみに仮想分子を配置した際、粒子間隔が狭まるほど赤外吸収強度の増大率が大きくなることが確認できた。粒子間隔が大きくなる B 領域にのみ仮想分子を配置した場合には、粒子間隔を大きくしても増大率に顕著な変化は見られなかった。詳細は当日報告する。

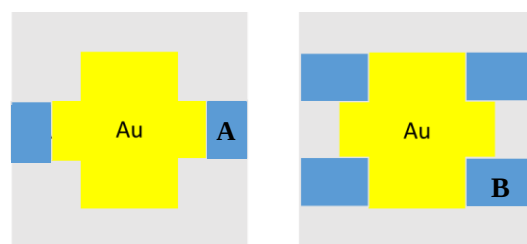


Figure 1. Schematic view of the proposed unit-cell.
(A)region where gap-size decrease.
(B)region where gap-size increase.

- [1]:Y.Suzuki,K.Kita,N.Matsumoto,App
l.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 81 回応用物理学会
秋季学術講演会 9a-Z24-1
- [8]:Victor Liu, Shanhui Fan, Computer
Physics Communications 183
(2012) 2223-224