

課題名 (タイトル) :

光メタマテリアルの電磁場解析

利用者氏名 :

田中拓男\*,\*\*

所属 :

\* 田中メタマテリアル研究室

\*\*光量子工学研究領域 フォトン操作機能研究チーム

<p>1. 本課題の研究の背景、目的、関係するプロジェクトとの関係</p> <p>光メタマテリアルと呼ばれる波長よりも細かな人工構造を用いて物質の光学特性を制御する疑似光学材料について、その構造の設計と特性評価を行うために大規模な電磁気学計算が必要である。特に最近では、立体的な共振器構造を用いて光の入射角度に依存しない等方的な特性を持つメタマテリアルや、金ナノ微粒子を自己組織的に結合させて作製したメタマテリアルを開発すべく、その最適な構造の設計に電磁界シミュレーションを行っている。具体的には有限要素法 (FEM) や有限時間差分領域法 (FDTD), 厳密結合波解析法 (RCWA), Discrete Dipole Approximation (DDA) 法などを計算機上で実施している。</p>	<p>り、結果として表面プラズモン共鳴に起因する光吸収のピーク波長が長波長側にシフトすることがわかった。平行して行った実験では、Langmuir-Blodgett 膜を利用して金ナノダイマーを作製し、その光吸収特性を分光スペクトルを取得することで評価した。実験結果と計算結果とを比較したところ、両者は非常に良い一致を示すことを確認し、計算結果から実験で試作した金ナノダイマーの粒子間距離を推定することができた。現在その成果を論文に纏めている。</p>
<p>2. 具体的な利用内容、計算方法</p> <p>今年度は、金ナノ微粒子がナノギャップを隔てて接続された、金ナノダイマーの光学特性を、DDA 法を用いた電磁界解析ソフトウェア (DDSCAT) を利用して計算し、実験結果との整合性を調べた。直径 20~40nm の金ナノ粒子を 800 点ほどの双極子で近似し、この金ナノ粒子 2 つが 1~40nm の間隔を隔てて結合したダイマー構造について、その光学特性を紫外光から近赤外光までの波長 300nm~3000nm の範囲で計算した。さらに、金ナノダイマーが水やアルコールなどの中に分散している状況を仮定し、周囲の屈折率が変わった場合の光学特性の変化についても詳細に調べた。</p>	<p>4. まとめ</p> <p>ナノサイズの金属構造体の光学特性の計算においては、DDA 法は非常に高い精度でその特性を解析できる事がわかった。この結果を基に、数値計算によって光メタマテリアルに必要な粒子間距離等の構造パラメータを最適化できる可能性を確認できた。</p>
<p>3. 結果</p> <p>計算の結果、金ナノ微粒子間の間隔が 10nm 程度になると 2 つの電磁場モードの結合が顕著にな</p>	<p>5. 今後の計画・展望</p> <p>今年度は、金ナノダイマーの吸収スペクトルを計算するにあたり、各波長毎の計算を複数の CPU に割り振ることで高い効率で数値解析ができた。これも HOKUSAI の並列計算能力の利用方法の 1 つで非常に有効であった。今後は複数の金ナノ粒子が結合した構造などさらに複雑な構造を持つ物体の電磁界解析を行う予定で、その計算モデルも大規模化する事が必至であり、引き続き当システムの能力を最大点に引き出せるよう計算プログラムコードの最適化と、具体的なモデルを用いたシミュレーションを実施する予定である。</p>