

課題名 (タイトル) :

2 次元プラズモニック結晶の光学特性

利用者氏名 : ○岡本 隆之

所属 : 石橋極微デバイス工学研究室

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

表面プラズモンの科学と工学であるプラズモニクスは近年ナノフォトニクスにおいて急速に発展している分野である。表面プラズモンとは金属と誘電体界面に担持される表面電磁波である。この表面プラズモンの特性は金属表面のナノスケールでの形状に大きく依存する。我々は有機 EL 素子からの光取り出し効率の向上や有機薄膜太陽電池における光吸収効率の向上のために金属電極の表面にナノスケールの凹凸を設けたプラズモニック構造を提案している。プラズモニック構造を最適化することにより、有機 EL 素子や太陽電池の効率を大きく向上することが可能である。そのために種々のプラズモニック構造に対して光学的な応答を予め計算により知ることが重要である。

2. 具体的な利用内容、計算方法

想定した構造は直径 100nm の円開孔をランダムに配置した厚さ数 10nm の銀薄膜である。開孔の数は 40~50 個である。この銀薄膜に平面波を入射したとき透過率は開孔面積に応じて増加する。一方反射率はそれに依りて減少するが、その減少率は透過率の増加とは一致せず、より以上に減少する。この理由は入射光が銀薄膜の表面に担持される表面プラズモンに変換され銀薄膜に吸収されるためである。

3. 結果

本課題ではこの円開孔を有する銀薄膜の透過、反射、および吸収スペクトルを厳密結合波解析 (RCWA) 法を用いて計算した。RCWA 法では 1 次元方向または 2 次元方向に周期的な構造しか解析できないため、1 ミクロン平方を単位胞とする周期境界条件を用いた。得られた吸収スペクトルは

可視域全体に渡って表面プラズモン共鳴が生じていることを示唆するものであったが、実験結果を再現しているとは言い難いものであった。この理由として考えられることは計算精度の不足である。RCWA 法では解析構造を多層膜に分解し、各層の誘電率分布をそのフーリエ係数で表している。取り得る係数の次数は計算機のメモリ容量で制限され、最大で±25 次である。この値は本銀薄膜の構造を表現するには全く不十分である。

4. まとめ

RCWA 法を用いてランダムに配置された円開孔を持つ銀薄膜の光学特性をシミュレートした。しかし、メモリ容量で制限される計算精度により実験結果との乖離が見られた。この容量は単一ノードのそれで 9600 MByte である。単一ノードの容量に制限されるのは行列の固有値を求める計算に LAPACK 関数を用いているためである。多ノードのメモリを用いる ScaLAPACK を用いることで、この制限は解除されるが計算時間が膨大となり現実的でない。

5. 今後の計画・展望

来年度後半に導入が予定されている新規スーパーコンピュータではメモリ容量が大きくなると期待されるので、それによる計算精度の向上を試みる。また、現在、単一ノードで動いている有限差分時間領域 (FDTD) 法を MPI を用いて動作するようにしたいと考えている。

平成 25 年度 RICC 利用研究成果リスト

【論文、学会報告・雑誌などの論文発表】

T. Okamoto and K. Shinotsuka, "Improvement of light extraction efficiency and reduction of driving voltage in organic light emitting diodes using a plasmonic crystal," Appl. Phys. Lett. **104**, 093301 (2014).

【国際会議、学会などでの口頭発表】

T. Okamoto, "Plasmonics in organic light-emitting diodes," JSAP-OSA Joint Symposia 2013, Kyotanabe, September 18 (2013).