

FDTD 法による金属の反射シミュレーション

株式会社 科学技術研究所 科学技術部 (<https://www.kagiken.co.jp>)

1. 解析概要 金属は低い周波数の電磁波をほぼ 100% 反射する。しかし、物質固有のプラズマ周波数を超える電磁波は透過・吸収する。プラズマ周波数前後の金や銀の物性値は Drude や Lorentz 分散モデルで近似できる。本レポートでは金、銀、銅の物性値を分散モデルで近似し、各金属平滑面への垂直入射および反射を FDTD 法でシミュレートした。

2. 解析条件

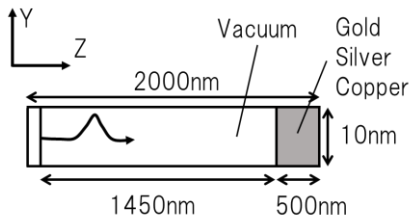


Fig.1 Simulation model

Fig.1 にシミュレーションモデルを示す。金と銅の複素誘電率は Drude-Lorentz-Lorentz モデル (eq.1)、銀は Drude-Lorentz モデル (eq.2) で近似した。 ω は入射光の角周波数である。金、銀、銅の式中の各係数を Table1. に示す。

$$\epsilon_r(\omega) = \epsilon_\infty + \frac{\omega_{p1}^2}{\omega(\omega + j\nu_c)} + \Delta\epsilon_2 \frac{\omega_{p2}^2}{\omega_{p2}^2 + j\omega\delta_{p2} - \omega^2} + \Delta\epsilon_3 \frac{\omega_{p3}^2}{\omega_{p3}^2 + j\omega\delta_{p3} - \omega^2} \dots \text{(eq.1)}$$

$$\epsilon_r(\omega) = \epsilon_\infty + \frac{\omega_{p1}^2}{\omega(\omega + j\nu_c)} + \Delta\epsilon_2 \frac{\omega_{p2}^2}{\omega_{p2}^2 + j\omega\delta_{p2} - \omega^2} \dots \text{(eq.2)}$$

Table1. Dispersion parameters

	Gold	Silver	Copper
ϵ_∞	6.00	2.00	6.00
ω_{p1} [rad/sec]	1.40×10^{16}	1.30×10^{16}	1.37×10^{16}
ω_{p2} [rad/sec]	5.50×10^{15}	7.00×10^{15}	4.50×10^{15}
ω_{p3} [rad/sec]	4.30×10^{15}		3.60×10^{15}
ν_c [rad/sec]	9.80×10^{13}	7.36×10^{13}	9.59×10^{13}
$\Delta\epsilon_2$	2.00	1.00	2.00
$\Delta\epsilon_3$	0.600		0.300
δ_{p2} [rad/sec]	2.20×10^{15}	2.10×10^{15}	1.80×10^{15}
δ_{p3} [rad/sec]	8.17×10^{14}		5.40×10^{14}

Table.2 の解析条件で、電磁波解析ソフト KeyFDTD^{TR} を用いて各金属の反射スペクトルを導出した。反射スペクトルは、ガウシアンパルスの入射波形と反射波形のフーリエ変換後のエネルギー比から計算した。

3. 解析結果 金、銀、銅の反射スペクトルを Fig.2,3,4 に示す。実線がシミュレーション、点

線が測定した複素屈折率から光学理論式で求めた反射率である。銀はシミュレーションと測定値から求めた反射率が全体的によく一致した。金と銅は一部の波長域で数%の違いがあるものの全体的には概ね一致する結果が得られた。

4. まとめ 電磁波解析ソフト KeyFDTD を用いて金、銀、銅の可視光～近赤外の反射スペクトルを導出した。これにより今回解析に用いた分散パラメータと、KeyFDTD の多極分散性物質に対する解析の 2 つの妥当性を確認できた。

Table2. Analysis condition

Incident pulse	Gaussian pulse: $\tau_0 = 2 \times 10^{-15}$ [sec]
Boundary condition	x, y: PERIODIC z: MUR1
Computational domain	10x10x2000 [nm]
Mesh size	2.5 [nm] = $\lambda / 160 \sim 480$
Timestep	0.417537×10^{-17} [sec]

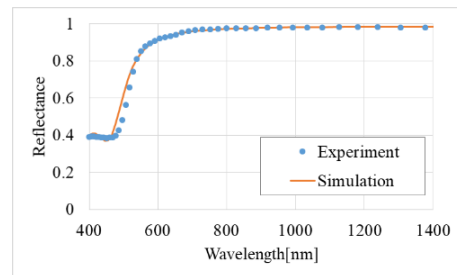


Fig.2 Reflectance spectra of gold

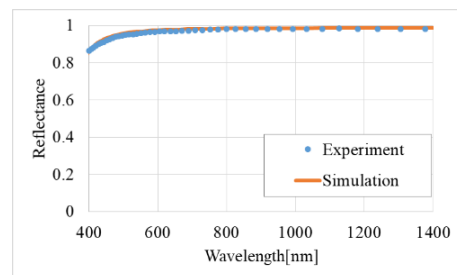


Fig.3 Reflectance spectra of silver

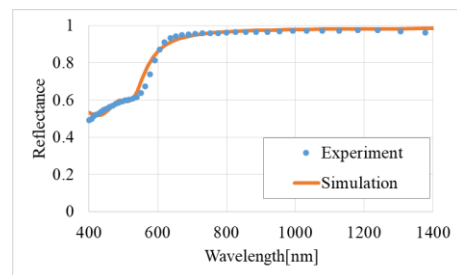


Fig.4 Reflectance spectra of copper