

## 中空銀ナノ粒子の FDTD 法によるシミュレーション

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 ナノスケールでサイズ制御した金や銀粒子は、可視光付近の波長で LSPR (局在表面プラズモン共鳴)により、電磁波を強く吸収する。中でも中空銀ナノ粒子は、粒子サイズが大きいほど、また外径と内径の差であるシェル厚が薄いほど LSPR 波長が長波長側にシフトする。本レポートでは、シェル厚の異なる2種類の中空銀ナノ粒子を FDTD 法でシミュレートした結果を報告する。

2. 解析条件 中空銀ナノ粒子のモデル図を Fig.1 に示す。x 方向に電界成分 Ex を持つ可視光の偏波を z 軸正側から負側に向けて入射する。x、y 方向に周期境界条件を適用し、粒子間隔 80nm で平面上に正方に並んだ中空銀ナノ粒子層をシミュレーション対象とした。銀の複素屈折率は Drude モデル(eq.1)で近似した。

$$\epsilon_r(\omega) = \epsilon_\infty + \frac{\omega_p^2}{j\omega\nu_c - \omega^2} \dots(\text{eq.1})$$

ここで  $\omega$  は入射光の角周波数であり、分散パラメータは、 $\epsilon_\infty = 5.00$ 、 $\omega_p = 1.36 \times 10^{16}$ 、 $\nu_c = 7.70 \times 10^{13}$  とした。このパラメータを (eq.1) に適用し近似した複素屈折率と、銀の複素屈折率を Fig.2 に示す。Table.1 の解析条件で、電磁波解析ソフト KeyFDTD<sup>TR</sup> を用いたシミュレーション結果から散乱と吸収を合わせた消光度 Q のスペクトルを導出した。

3. 解析結果 消光度 Q は、透過率 T を中空銀ナノ粒子層透過後のポインティングベクトルから計算し、 $Q=1-T$  から求めた。得られた消光度 Q のスペクトルと文献値<sup>[1]</sup>を Fig.3 に示す。シミュレーションでは、シェル厚 5nm は波長 710nm 付近、シェル厚 10nm は波長 530nm 付近で、LSPR による急峻な消光度の上昇が得られた。また、シェル厚を薄くすることで LSPR 波長が長波長側にシフトする結果が得られた。文献値と比較すると、シェル厚 10nm はピーク波長や形状がよく一致している。シェル厚 5nm の場合は、ピーク位置にずれが生じているが、メッシュ幅を小さくすることでより一致すると考えられる。

4. まとめ 電磁波解析ソフト KeyFDTD を用いて中空銀ナノ粒子の消光特性を解析した。実験結果とよく一致する結果が得られた。

[1] 門 晋平, “中空銀ナノシェルの簡便合成とプラズモン特性”, 化学工業 Vol.67 No.6 p23,2016/6

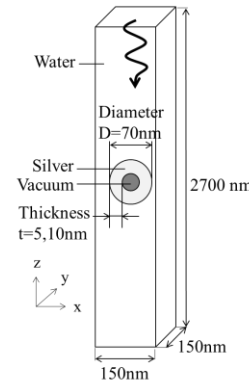


Fig.1 Simulation model

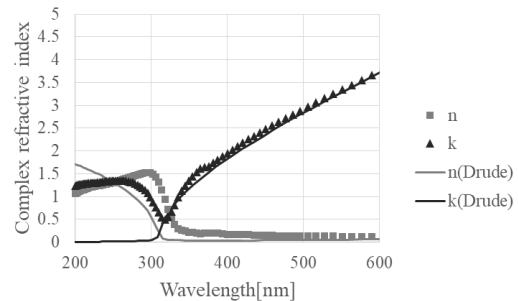


Fig.2 Complex refractive index of silver

Table 1. Analysis condition

Frequency	350~750[THz]
Boundary condition	x, y: PERIODIC z: MUR1
Computational domain	150x150x2700[nm]
Mesh size	2.5 [nm]= $\lambda / 160 \sim 400$ $= \lambda / 120 \sim 300$ (in Water)
Timestep	$0.417188 \times 10^{-17}$ [sec]

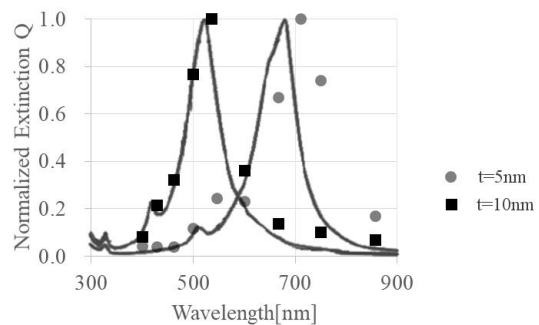


Fig.3 Experimental and simulated normalized extinction spectra