

FDTD 法によるリチウムナノロッドの SERS 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 リチウム電池は放電中に電極表面をリチウム(Li)が被覆し性能劣化を引き起こす。この被覆はナノスケールで発生し、in-situ なセンシング技術に SERS が期待されている。本レポートでは、可視光帯における Li ナノロッドの SERS について、表面増強効果を FDTD 法でシミュレートした結果を報告する。

2. 解析条件 Li ナノロッドのモデル図を Fig.1 に示す。y 方向に電界成分 E_y 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、ロッド間隔 60nm で平面上に正方形に並んだ Li ナノロッド被覆基板をシミュレーション対象とした。基板は完全導体、Li の複素屈折率は Drude モデル(eq.1)で近似した。

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

ω は入射光の角周波数、分散パラメータは $\epsilon_\infty = 1.0$ 、 $\omega_p = 9.4 \times 10^{15}$ 、 $\nu_c = 2.8 \times 10^{14}$ とした。Table.1 の解析条件で、電磁波解析ソフト KeyFDTD^{TR}を用いたシミュレーションを実行し 1 波長積算した電界分布を得た。

3. 解析結果 波長 638nm 又は 532nm の電磁波を照射した際の、Li ナノロッドの X 中心断面の電界分布を Fig.2 に示す。638nm ではロッドの高さ方向に等間隔に強電界が現れた。一方 532nm ではロッドの頭頂に強電界が現れたものの脚部にかけて著しい減衰が認められた。ラインコンターを用いてロッド表面の様子を明瞭にした図が Fig.3 である。638nm ではロッド全体にかけて内部電界がみられるが、532nm では頭頂部のみしか見られない。内部電界は Li の吸光を意味し、638nm のラマン散乱スペクトル強度が 532nm より強いという実験結果^[1]を説明する。

4. まとめ 電磁波解析ソフト KeyFDTD を用いて Li ナノロッドの SERS をシミュレートした。実験結果をよく説明する結果が得られた。

[1] S. Tang et al., "An electrochemical surface-enhanced Raman spectroscopic study on nanorod-structured lithium prepared by electrodeposition," *J. Raman Spectrosc.* **2016**, 47, 1017-1023

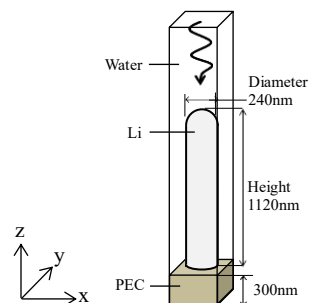


Fig.1 Simulation model

Table 1. Analysis condition

Frequency	469.89, 563.52[THz]
Boundary condition	x, y: PERIODIC, z: MUR1
Computational domain	300x300x2100[nm]
Mesh size	5[nm] = $\lambda / 106, 128$ = $\lambda / 82, 98$ (in Water)
Timestep	0.84×10^{-17} [sec]

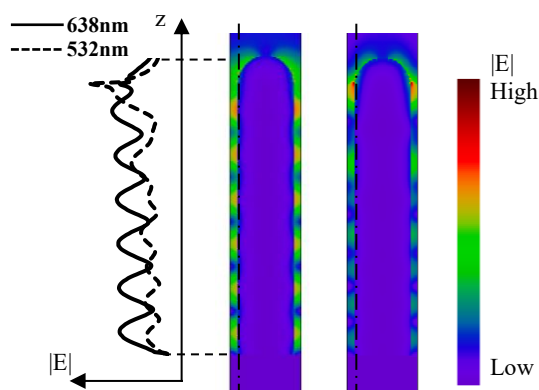


Fig.2 Electric field distribution with contour (Left : 638nm, Right : 532nm)

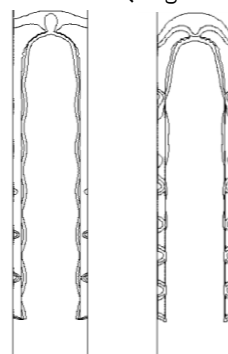


Fig.3 Electric field distribution with contour line (Left : 638nm, Right : 532nm)