

学位論文の要旨

専攻	機能創成科学 専攻	ふりがな 氏名	みとべ だいち 水戸部 大地
学位論文題目	厳密結合波解析を用いた金ナノ粒子アレイによる 赤外吸収増大機構の解明		
学位論文要旨			
<p>近年、「メタマテリアル」が注目を集めつつある。メタマテリアルとは光の波長以下のサイズをもつ人工構造物であり、電磁気学的特性を操作したものである。これが注目を集める以前に、蒸着膜のようなメタマテリアル的構造をもった薄膜で吸収増大が起きることが既に報告されている。その中でも、ナノサイズの金属構造や金属島状膜等に吸着した分子が、強い赤外吸収を示す現象を表面増大赤外吸収(SEIRA)という。この現象を利用することで、赤外分光法の感度向上が期待できる。しかし、SEIRAの増大機構は決定されていない。この増大機構を解明することは分析手法としての赤外分光法の発展のみならず、メタマテリアルの発展の双方に大きく寄与する。</p> <p>分子の赤外吸収強度は、分子に作用する電場強度に比例する。すなわち、より大きな電場を得る必要がある。近年、メタマテリアルを用いた SEIRA の研究が多くある。それらの多くは、特殊な構造を用いて表面プラズモンを励起することで、ホットスポットと呼ばれる大きな場を生成すると報告している。しかしながら、SEIRA 発見時の実験では、金属ナノ粒子(NP)には蒸着膜が使用されていた。メタマテリアルを使用した SEIRA の増大機構が表面プラズモンであることに疑いはないが、スケールや形状が大きく異なる蒸着膜での SEIRA に、同様の増大機構が適用できるかは定かではない。さらに、蒸着膜をモデル化した Square Columnar Model(SCM)では、粒子間隔/粒子サイズ比(f)に依存する粒子間へ電場集中による増大と報告しており、実験の結果ともよく一致している。赤外分光法への SEIRA の利用を考えると、大規模な装置を使用してメタマテリアルのような金属構造を製造するよりも、実験室レベルで作成できる蒸着膜のような金属構造の方が、工業的にも望ましい。そのため、蒸着膜における SEIRA の増大機構の解明は非常に大きな意義がある。よって本論文では、厳密結合波解析を使用したシミュレーションにより、蒸着膜をモデル化した正方配列における SEIRA の増大機構を調査、解明する。</p> <p>参考文献に報告されるように、表面プラズモンによる増大が起きているのであれば、その性質から NP 表面近傍で強い場が生成される。よって初めに、正方配列した NP 周りの電場分布を調査し、表面第1層効果が存在するか否かを検証する。また、メタマテリアルや赤外吸収増大で用いられる基板など、波長より小さなスケールのナノ構造を持つ薄膜の巨視的な光学定数は有効媒質近似で記述される。それらの代表的なモデルでは、例えば誘電体マトリックス中に金属が分散している2相系の場合、マトリックスの誘電率、金属の誘電率と金属の体積分率(F)の3つのパラメータで有効誘電率が決定される。そして、これらのモデルを用いて SEIRA 現象はうまく再現できることが分かっている。また SCM においては、有効誘電率は粒子間隔/粒子サイズ比の関数で表される。しかしながら、正方配列において f は F の関数であり、どちらのパラメータが重要な因子であるかが決定できない。そこで、f と F を独立して変化させるモデルを用いて、この問題を調査する。これらの結果から、メタマテリアルの先駆けである蒸着膜類似構造における SEIRA の増大機構の解明を目的とする。さらに、これを基にメタマテリアル及び赤外分光法の発展をもたらす足掛かりを築く。</p> <p>これらの検証の結果、入射電場方向の粒子間で増大が起きており、金属粒子表面近傍で最大の増大は示さず、電場強度は周期的に変化していることも明らかとなった。この振る舞いはプラズモンの挙動とは大きく異なっている。また、f と F を独立して変化させる2つのモデルのどちらにおいても f への依存性を示した。したがって、正方配列における SEIRA の重要パラメータが粒子間隔/粒子サイズ比(f)であることが明らかとなった。よって、蒸着膜のようなスケールにおける SEIRA は SCM により記述できることが明らかとなった。蒸着膜における SEIRA の増大機構は、これまで決定されていなかった。しかし本研究で、メタマテリアルの先駆けともいえる蒸着膜類似構造における SEIRA の増大機構が SCM により記述できることを明らかにした。この結果は赤外分光法の発展、加えてメタマテリアルの発展に貢献することが期待できる。</p>			