

## 学位論文審査結果の概要

氏名	水戸部大地
学位論文審査委員氏名	主査 鈴木 裕史
	副査 宮永 崇史
	副査 御領 潤
	副査 小豆畑 敬
	副査 中澤 日出樹
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
審査結果の概要（2,000字以内）	
<p>本論文は近年注目されているメタマテリアルの先駆けともいえる金属不連続蒸着膜の赤外域における局所増大場の発現機構を数値シミュレーションにより解明したものである。シミュレーションには有限差分時間領域法(FDTD)より計算時間が早くより厳密な厳密結合波解析(RCWA)を採用した。</p> <p>まず、赤外域におけるメタマテリアル構造の局所増大場発現機構には、Plasmonの励起をその原因とする共鳴型機構と隙間への電場集中を考慮した非共鳴型機構が提案されている。そこで、蒸着膜に類似したスケール・形状を持つ四角柱における増大場が、共鳴型か非共鳴型かを明らかにすることに注目した。そのため、共鳴型の特徴である表面第一層効果(FLE)の検証を行った。その結果、この条件ではFLEが存在していないことを明らかにした。また、増大場は入射電場方向の粒子間ギャップに集中しており、かつギャップ内での強度が金属ナノ粒子壁面からの距離に従って振動していることがわかった。これは、局所増大場がギャップに閉じ込められた入射光電場の干渉によるものであることを示しており、提案されている非共鳴型機構である角柱配列モデル(SCM)の性質とよく一致していることを解明した。</p> <p>次に局所増大場がSCMによるものであることをさらに検証するため、粒子間ギャップサイズ/粒子サイズ比(<math>f</math>)と金属体積分率(<math>F</math>)のいずれの形態パラメータが最重要であるかの解明を行った。<math>f</math>はSCMに基づいたものであり、<math>F</math>はM-Gモデル等の有効媒質近似のものである。<math>f</math>と<math>F</math>は互いの関数になっており、例えば四角柱正方配列においては一方のみを独立に変化させることはできない。そこで、本論文では四角柱を回転させて四角柱間の最小ギャップを変化させるモデル(<math>F</math>を固定し<math>f</math>のみを変化させるモデル)、および電場方向に垂直な方向のみのギャップサイズを変化させるモデル(<math>f</math>を固定し<math>F</math>のみを変化させるモデル)を考案し、局所増大場が<math>f</math>にのみ依存していること、つまりSCMが増大機構であることを明らかにした。</p> <p>最後に赤外吸収増大分光の応用範囲をより広げる目的で、簡便な方法でさらに測定感度を上げるために金属四角柱配列構造と光学キャビティ効果との組み合わせの検証を行った。まず、真空(低屈折率相) - 透明ポリマー(中屈折率相) - Si基板(高屈折率相)からなる系が疑似光学キャビティとして振舞うことを確認した。さらに、この系における光学キャビティによる増大場がポリマー相上に配置した</p>	

四角柱アレイ層に作用し、四角柱アレイの隙間に配置されたモデル分子による赤外吸収が「アレイによる増大」×「キャビティによる増大」となることを明らかにした。さらに、光学キャビティの効果をより増すためにポリマー相と基板相の間に Au 平面層を配置した系においてもシミュレーションを行い、さらなる吸収増大が得られることを明らかにした。これらの系はスピンコート等の方法と蒸着を組み合わせることで実現可能であり、簡便な方法で赤外分光法の感度を向上させることが可能であることを明らかにした。

以上のように、機構を解明し工業的応用まで示した本論文は合格とする。

#### 学位論文の基礎となる参考論文

Local enhanced site in surface enhanced infrared absorption with gold nano particle array by Rigorous coupled-wave analysis, Daichi Mitobe\*, Yushi Suzuki, Toru Shimada, Journal of Physics Communications 4 (2020) 115009.

Computer simulation of key structural parameters for enhanced infrared absorption with Au nano-array Daichi Mitobe\*, Taku Ohshima and Yushi Suzuki, Journal of Physics Communications 5 (2021) 115001.

Gold Nanoparticles and Their Applications in Engineering [Working Title], edited by Dr. Safaa Najah Saud Al-Humairi, chapter: RCWA simulation study of enhanced infrared absorption spectroscopy by Au nanoparticle Array combined with optical cavity effect,

Daichi Mitobe\* and Yushi Suzuki, DOI: 10.5772/intechopen.105851