



## 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

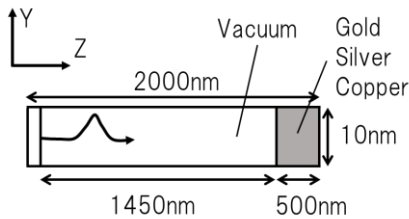


Fig.1 Simulation model

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。 $\omega$  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。

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

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

Table1. Dispersion parameters

	Gold	Silver	Copper
$\epsilon_\infty$	6.00	2.00	6.00
$\omega_{p1}$ [rad/sec]	$1.40 \times 10^{16}$	$1.30 \times 10^{16}$	$1.37 \times 10^{16}$
$\omega_{p2}$ [rad/sec]	$5.50 \times 10^{15}$	$7.00 \times 10^{15}$	$4.50 \times 10^{15}$
$\omega_{p3}$ [rad/sec]	$4.30 \times 10^{15}$		$3.60 \times 10^{15}$
$\nu_c$ [rad/sec]	$9.80 \times 10^{13}$	$7.36 \times 10^{13}$	$9.59 \times 10^{13}$
$\Delta\epsilon_2$	2.00	1.00	2.00
$\Delta\epsilon_3$	0.600		0.300
$\delta_{p2}$ [rad/sec]	$2.20 \times 10^{15}$	$2.10 \times 10^{15}$	$1.80 \times 10^{15}$
$\delta_{p3}$ [rad/sec]	$8.17 \times 10^{14}$		$5.40 \times 10^{14}$

Table.2 の解析条件で、電磁波解析ソフト KeyFDTD<sup>TR</sup> 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	$0.417537 \times 10^{-17}$ [sec]

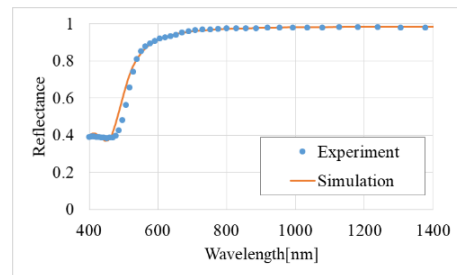


Fig.2 Reflectance spectra of gold

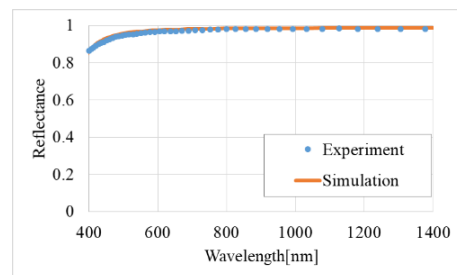


Fig.3 Reflectance spectra of silver

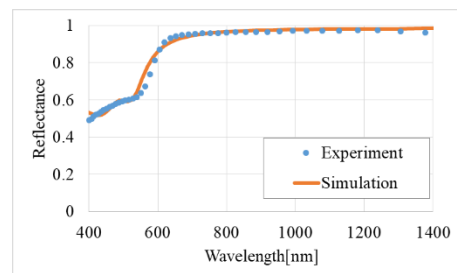


Fig.4 Reflectance spectra of copper