



金ナノワイヤーの電磁波シミュレーション

株式会社 科学技術研究所 科学技術部 (<https://www.kagiken.co.jp>)

概要 金ナノワイヤーは、ベンゼン環を含む化合物の酸化触媒として金ナノ粒子よりも活性が高いことが報告されている。この触媒活性の起源を調査するために、電磁波を入射した際の金ナノワイヤーの周辺の電界分布を FDTD 法で計算した。

1. はじめに 金ナノワイヤーとは直径数 [nm]、長さ数[μm]の円筒状のナノ物質であり、ベンゼン環を持つ化合物の酸素酸化触媒として通常の金ナノ粒子より高い触媒性能を持つことが報告されている^[1]。このナノワイヤーの触媒性能の起源について調べるために、金ナノワイヤーに 300 [THz]の電磁波を入射した際の電界強度を、電磁波解析ソフト KeyFDTD を用いて解析し、金ナノワイヤーのどこに触媒活性が期待されるか、また金ナノワイヤー同士を近接させた場合にどのように電界強度が変化するかを調べた。

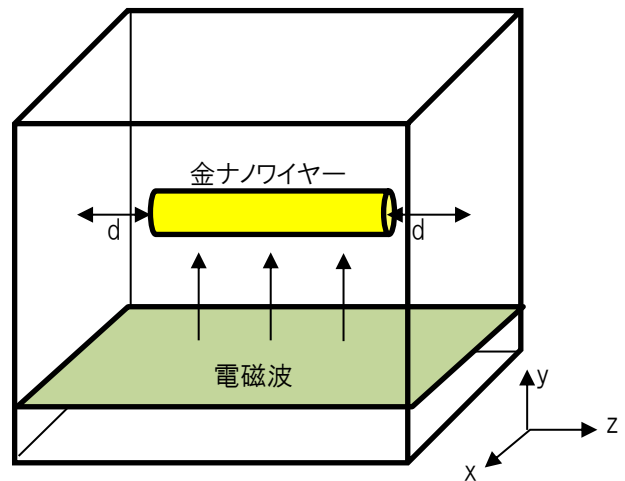


図 1. 解析モデル

2. 解析条件 図 1 に解析モデルを示す。可視光帯における金の物性は Drude-Lorentz-Lorentz モデルを用いて近似した^[2]。x,z 方向を周期境界条件に設定したため図 2 に示すように金ナノワイヤーが軸上に近接している。そこでワイヤー同士が近傍に存在するときの影響を調べるために、金ナノワイヤー間の x 方向の距離 2d について 100 [nm] (解析 a) と 10 [nm] (解析 b) の 2 つのパターンに分け、それぞれ金ナノワイヤーの辺と入射光の電界成分が平行な場合と、磁界成分が平行な場合について電界分布を調査した。ただし金ナノワイヤーの長さを一定にして距離 d を変化させるために、解析領域とメッシュを解析 a と解析 b で変更した。

表 1. 解析設定

金ナノワイヤー	直径:10 [nm] 長さ:100 [nm]
励振源	300 [THz], sin 波
物性	金:Drude-Lorentz-Lorentz モデル
解析領域 a	200 × 200 × 200[nm]
メッシュ a	x:100、y:100、z:100
解析領域 b	110 × 200 × 200[nm]
メッシュ b	x:55、y:100、z:100
境界条件	x、z : 周期境界条件 y : 吸収境界条件 MUR1
タイムステップ	3.34e-18 [sec]

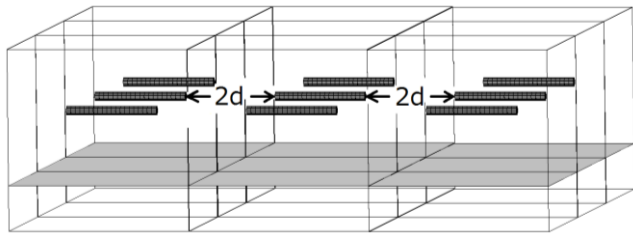


図 2. 近接している金ナノワイヤー

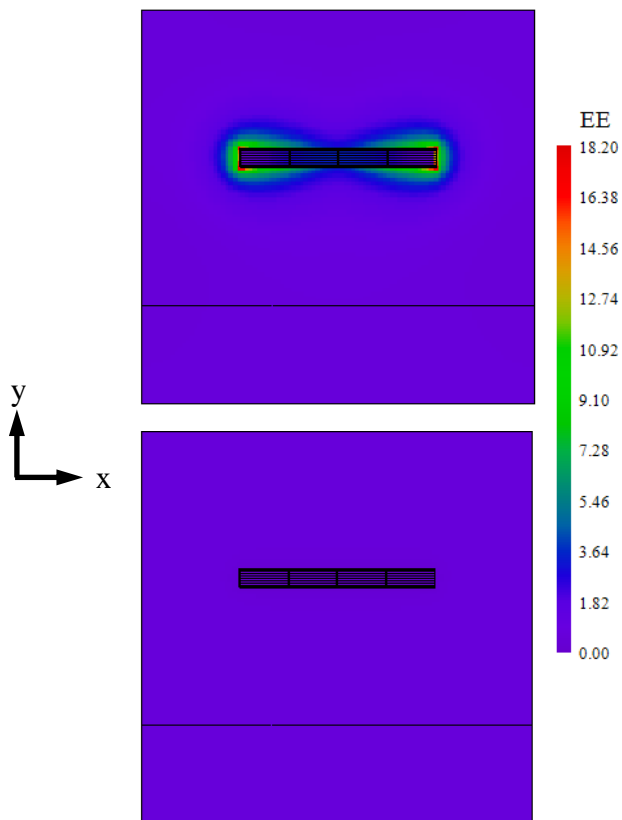


図 3. 電磁波解析 a ($2d=100$ [nm]) の結果
(上：電界成分と平行、下：磁界成分と平行)

3. 解析結果と考察 図 3、4 から解析 a、b ともに、金ナノワイヤーと磁界成分が平行の場合には強い電界は現れなかったが、電界成分が平行の場合にはナノワイヤーの両端に強い電界が確認された。これは金ナノワイヤーにおける電界成分の共振と考えられる。強い電界により原子間の電荷授受が素早く起こるとすれば、金ナノワイヤーを触媒として用いた際にワイヤ

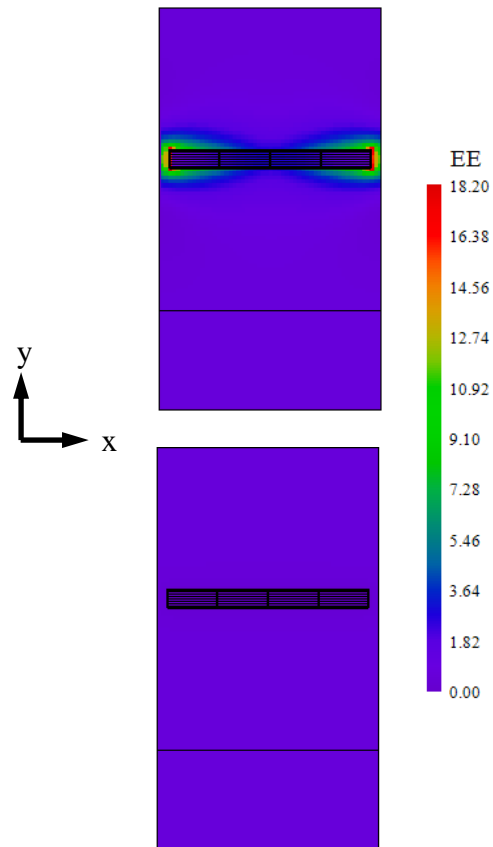


図 4. 電磁波解析 b ($2d=10$ [nm]) の結果
(上：電界成分と平行、下：磁界成分と平行)

一の両端が触媒活性点として振る舞う可能性がある。

図 3、4 の上図を比較すると、10 [nm]までワイヤーを近接させた場合は周期境界まで強い電界が現れており、ワイヤーの隙間全体が強い電界分布している。この現象に関してナノワイヤー間距離をパラメータとして定量化するには更なる解析を要する。

4. 今後の課題 本報告書では 100 [nm] の金ナノワイヤーを対象とした。今後はナノワイヤー間距離やナノワイヤーの径、長さをパラメータとして比較・検討したい。

参考文献

- [1] Hu, L. et al., *Chem. Commun.* **2011**, 47, 1303.
- [2] 株式会社 科学技術研究所 科学技術部, 金、銀、銅の反射シミュレーション, <https://www.kagiken.co.jp/analysis-keyfddd/archives/33>