



## 白金ナノ粒子の FDTD 法による光学特性シミュレーション

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 本報告書では電磁波解析ソフト KeyFDTD を用いて白金ナノ粒子の光学特性をシミュレートした結果を報告する。

2. 解析条件 解析モデルを Fig.1 に示す。

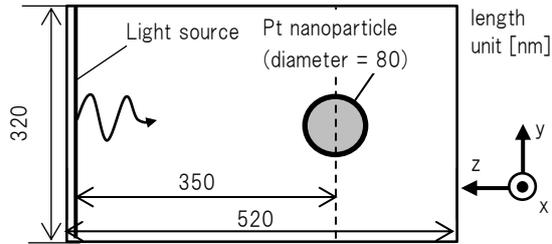


Fig.1 Simulation model

水中(n=1.33)に粒径 80[nm]の白金ナノ粒子が周期的に整列した粒子層をシミュレーション対象とした。解析領域は x, y 方向を 320[nm]、z 方向を 520[nm]、メッシュ幅は 2.5[nm]とした。境界条件は x, y 方向が周期境界条件、z 方向が吸収境界条件 MUR1 である。白金の複素誘電率は 1 つの Drude モデルと 3 つの Lorentz モデルの線形和でモデル化した(Eq.1)に Table.1、2 のパラメータを設定して近似した。ここで右下添え字の数字は分散モデルの番号である。白金の複素誘電率と分散モデルで近似した複素誘電率を Fig.2 に示す。

$$\epsilon_r(\omega) = \epsilon_\infty + \frac{\omega_{p1}^2}{\omega(\omega + j\nu_{c1})} + \Delta\epsilon_2 \frac{\omega_{p2}^2}{\omega_{p2}^2 + j\omega\delta_{p2} - \omega^2} + \Delta\epsilon_3 \frac{\omega_{p3}^2}{\omega_{p3}^2 + j\omega\delta_{p3} - \omega^2} + \Delta\epsilon_4 \frac{\omega_{p4}^2}{\omega_{p4}^2 + j\omega\delta_{p4} - \omega^2} \dots \text{(Eq.1)}$$

Table.1 Dispersion parameters(Drude)

	$\epsilon_\infty$	$\omega_p$ [rad/sec]	$\nu_c$ [rad/sec]
Model1	2.00	$2.05 \times 10^{16}$	$3.08 \times 10^{14}$

Table.2 Dispersion parameters(Lorentz)

	$\Delta\epsilon$	$\omega_p$ [rad/sec]	$\delta_p$ [rad/sec]
Model2	2.00	$5.40 \times 10^{15}$	$1.62 \times 10^{15}$
Model3	0.500	$6.90 \times 10^{15}$	$1.24 \times 10^{15}$
Model4	4.00	$1.40 \times 10^{16}$	$1.26 \times 10^{16}$

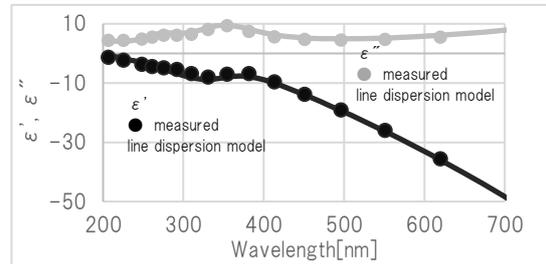


Fig.2 Relative permittivity of Platinum

この条件で中心周波数 800[THz]のガウシアンパルスを入射し、入射波形と白金ナノ粒子層を透過・反射した波形のフーリエ変換後のエネルギー比から透過・反射スペクトルを算出した。

3. 解析結果 Fig.3に透過・反射スペクトルを示す。透過率は波長 570[nm]より短波長側で低下し 430[nm]で最小値を示した。反射率は小さく、透過率低下の要因は吸収である。Fig.4 に波長 430、700[nm]の正弦波を入射した時の粒子近傍電界分布を示す。430[nm]で粒子表面に電界集中が見られ、局在表面プラズモン共鳴(LSPR)による吸収が捉えられている。

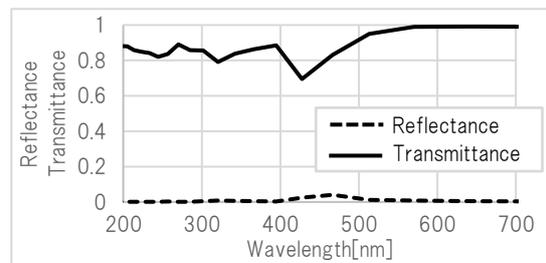


Fig.3 Reflectance and transmittance spectra

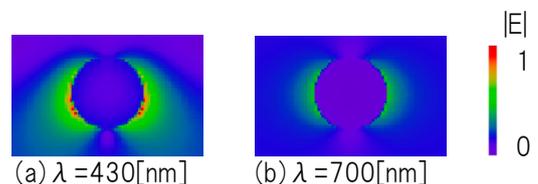


Fig.4 Electric field distribution(Diameter=80nm)

4. まとめ 分散モデルで近似した白金ナノ粒子の光学特性を FDTD 法により導出した。粒径 80[nm]では LSPR により波長 430[nm]で最小値となる可視～紫外域の透過率低下が確認された。