



単分散白金ナノ粒子の再現に必要な粒子間隔の調査

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 単分散した金属ナノ粒子をシミュレーションする場合、効率化するため周期境界条件を用いる。この時、十分な粒子間隔を確保することが重要である。水中の白金ナノ粒子に関してこの粒子間隔を電磁波解析ソフト KeyFDTD を用いて検討する。

2. 解析条件 解析モデルを Fig.1 に示す。

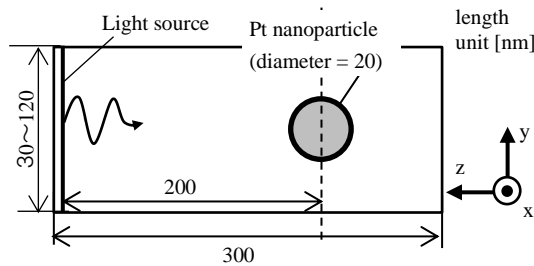


Fig.1 Simulation model

水中($n=1.33$)に粒径 20[nm]の白金ナノ粒子が周期的に整列した1層の粒子層を対象とする。粒子間隔は 20、40、60、80、100[nm]とし、解析領域の x 、 y 方向はそれぞれ 30~120[nm]とし、 z 方向を 300[nm]とする。各方向メッシュ幅は 0.625[nm]である。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 とした。白金の複素誘電率は文献[1]の分散モデルで近似した。

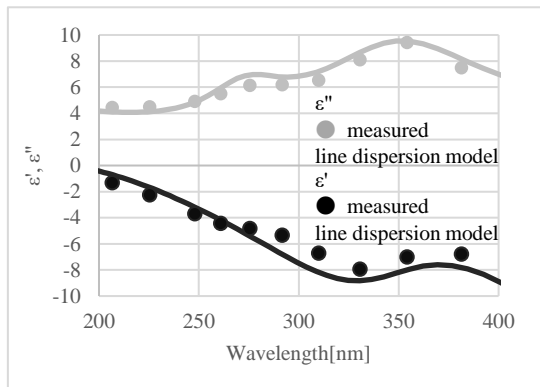


Fig.2 Relative permittivity of Platinum

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。中心周波数 1500[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した波形のフーリエ変換後のエネルギー比から紫外域 ($\lambda=200\sim 400$ [nm])の透過スペクトルを算出した。

3. 解析結果 Fig.3 に各粒子間隔のシミュレーションで得た透過率スペクトルを示す。

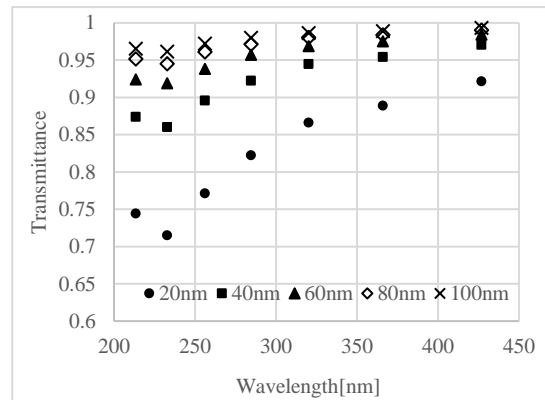


Fig.3 Transmittance spectra for the distance between each nanoparticle

各ケースで反射率は 3%以下で透過スペクトルは波長 230nm 近傍にピークを持つ吸収量が主に影響している。各ケースで電磁波進行方向に直交する解析領域断面 S に白金ナノ粒子形状を投影した面積 S_p の比率が異なる。これを考慮しそれぞれを直接比較するため、各透過率を $(S-S_p)/S$ で定義される透過面積パラメータで除して粒子形状が投影されない透過面積を考慮した規格化透過率 T_s をプロットしたのが Fig.4 である。

T_s は粒子間隔によらず波長が粒子径に比べて十分長い場合は回折による透過により 1 よりも大きくなることに注意されたい。理想的

な単分散に最も近い状況は粒子間隔 100nm の場合であり、このケースとの比較でそれぞれがどの程度単分散に近いかを評価する。

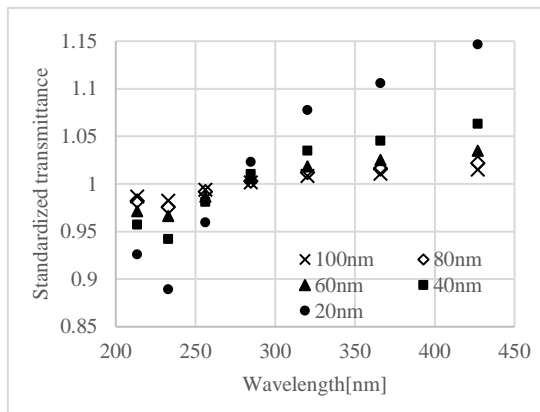


Fig.4 Standardized transmittance spectra for the distance between each nanoparticle

各波長で粒子間隔が 60nm 以上の場合 100nm との比較で±2%程度の差に留まる。一方で粒子間隔 40nm の場合±5%程度であり、粒子間隔 20nm の場合±10%以上異なる。短波長側の差は隣接粒子による電界強度増強の影響である。長波長側の誤差は投影面積で透過率を規格化しているために、波長が粒子径より十倍以上長い場合の透過現象を無視していることが原因である。

4. まとめ 水中の白金ナノ粒子について単分散の再現に必要な粒子間隔を電磁波解析ソフト KeyFDTD で検討した。以下の知見が得られた。

- ・ 透過面積パラメータを導入し粒子間隔の異なるシミュレーション結果に基づく透過率を直接比較した。
- ・ 粒径の 3 倍以上の粒子間隔をとることで 2%程度の誤差で単分散を再現できることが示された。
- ・ 透過面積パラメータを用いた検討は粒子径が波長に比べて小さい場合には不向きであることが分かった。

参考文献

[1] 株式会社科学技術研究所, 科学技術部, “白金ナノ粒子の FDTD 法による光学特性シミュレーション”, 2020, <https://www.kagiken.co.jp/analysis-keyfDTD/archives/39>