

## ロジウムナノ粒子の FDTD 法によるシミュレーション

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 金属ナノ粒子は、貴金属を中心に鉄やニッケルなど多数の材料が研究されている。本報告書では自動車の三元触媒などに使用されるロジウムについてナノ粒子の光学特性を電磁波解析ソフト KeyFDTD を用いて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。解析領域は、x、y 方向を粒径の 2 倍とし、z 方向を 520nm 固定とした。ロジウムの複素誘電率と分散モデルによる近似を Fig.2 に示す。複素誘電率の近似は Eq.(1)、パラメータを $\epsilon_\infty=1.00$ 、 $\omega_{p1}=2.05 \times 10^{16}$  [rad/sec]、 $v_c=2.05 \times 10^{15}$  [rad/sec]、 $\Delta\epsilon_1=1.00$ 、 $\omega_{p2}=1.20 \times 10^{16}$  [rad/sec]、 $\delta_{p1}=7.20 \times 10^{15}$  [rad/sec]、 $\Delta\epsilon_2=2.50$ 、 $\omega_{p3}=4.30 \times 10^{15}$  [rad/sec]、 $\delta_{p2}=2.15 \times 10^{15}$  [rad/sec]とした。境界条件は x、y 方向に周期境界条件、z 方向に吸収境界条件 MUR1 とした。粒径 20、40、60、80[nm]のナノ粒子に対して透過・反射スペクトルを導出した。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。

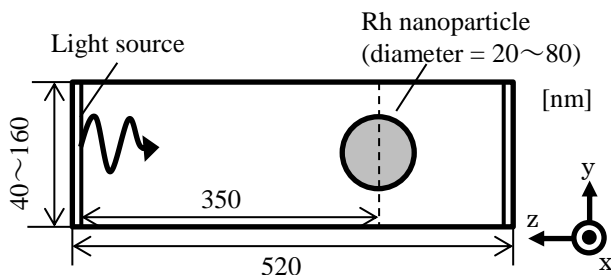


Fig.1 Simulation model

$$\epsilon_r(\omega) = \epsilon_\infty + \frac{\omega_{p1}^2}{\omega(\omega + jv_c)} + \Delta\epsilon_1 \frac{\omega_{p2}^2}{\omega_{p2}^2 + j\omega\delta_{p1} - \omega^2} + \Delta\epsilon_2 \frac{\omega_{p3}^2}{\omega_{p3}^2 + j\omega\delta_{p2} - \omega^2} \dots \text{(Eq.1)}$$

3. 解析結果 Fig.3に各粒径の透過・反射スペクトルを示す。可視光域はどの粒径でも 60% 以上透過しており、紫外域で透過率の減少が見られた。粒径を拡大させると反射率が增大している。反射率の増大と比較して透過率の減少が大

きいため、吸収率が大きく上昇していると考えられる。粒径 80[nm]、波長 250、700[nm]について電界強度の最大値で規格化した電界分布を Fig.4、5 に示す。波長 250[nm]では粒子近傍に電界集中が見られ、吸収率の増大は局在表面プラズモンにより生じたと考えられる。

4. まとめ ロジウムの物性を分散モデルで近似し、FDTD 法により透過・反射スペクトルを導出した。紫外域で局在表面プラズモンによる透過率の低下が確認できた。

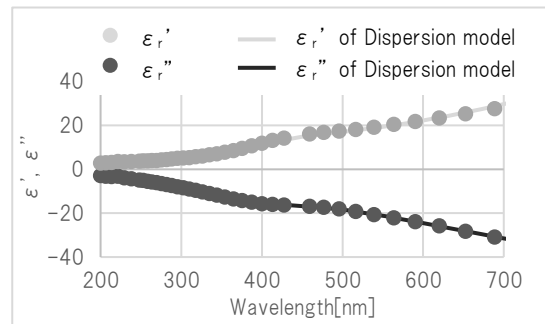


Fig.2 Relative permittivity of Rhodium

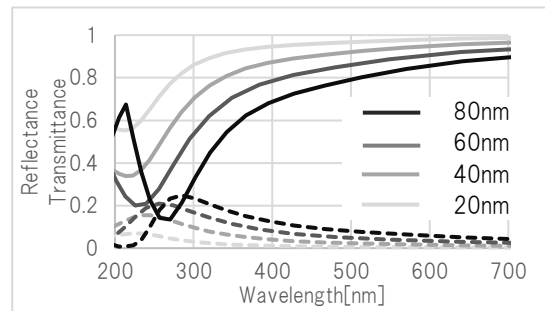


Fig.3 Spectra (dotted line: reflectance, solid line: transmittance)

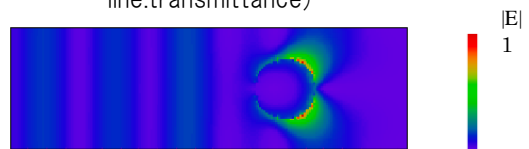


Fig.4 Electric field distribution (Diameter=80nm,  $\lambda=250$ [nm])

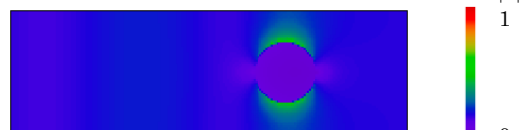


Fig.5 Electric field distribution (Diameter=80nm,  $\lambda=700$ [nm])