

周期多重極境界要素法を用いた ナノポーラスゴールドの光起電力解析

ANALYSES OF TRANSVERSE PHOTO-INDUCED VOLTAGES IN NANOPOROUS GOLD WITH THE PERIODIC FAST MULTIPOLE BOUNDARY ELEMENT METHOD

吉見 拓也¹⁾, 新納 和樹²⁾, 西村 直志³⁾, 石原 照也⁴⁾

Takuya YOSHIMI, Kazuki NIINO, Naoshi NISHIMURA and Teruya ISHIIHARA

- 1) 京都大学 情報学研究科 大学院生 (〒606-8501 京都市左京区吉田本町, E-mail: yoshimi@acs.i.kyoto-u.ac.jp)
 2) 京都大学 情報学研究科 助教 (〒606-8501 京都市左京区吉田本町, E-mail: niino@acs.i.kyoto-u.ac.jp)
 3) 京都大学 情報学研究科 教授 (〒606-8501 京都市左京区吉田本町, E-mail: nchml@i.kyoto-u.ac.jp)
 4) 東北大学 理学研究科 教授 (〒980-8578 仙台市青葉区荒巻字青葉 6-3, E-mail: t-ishihara@m.tohoku.ac.jp)

Transverse Photo-Induced Voltages (TPIV) in nanoporous gold are calculated with the periodic fast multipole method. Some experimental studies have shown that transverse photo-induced voltages, whose direction is transverse to the plane of incidence, are observed in nanoporous gold. In this paper, we construct meshes of nanoporous gold by solving the Cahn-Hilliard equations and make some numerical experiments with these meshes to analyse the transverse photo-induced voltages.

Key Words: Periodic Fast Multipole Method, Boundary Element Method, Nanoporous Gold, Transverse Photo-Induced Voltage

1. 序論

近年、メタマテリアル⁽¹⁾と呼ばれる光の波長より微細な構造を有する光学材料が注目されており、負の屈折率などの興味深い特性の研究が進んでいる。負の屈折は2重漁網構造をはじめとするいくつかの人工構造によってすでに実現されているが、最近、特異な光起電力現象がナノポーラスゴールド(NPG)において報告された⁽²⁾。NPGは、Fig.1に示す様に⁽³⁾、金の薄膜にランダムに孔の開いた構造を持つ材料である。石原のグループは、NPGに円偏光を照射した際に起電力(光起電力, photo-induced voltage)が発生することを見出し、そのうち、光の入射面に垂直な成分である横起電力は、特徴的な8の字型の角度依存性を持つことを実験的に示した^(2,4)(Fig.2)。通常1次元構造において起電力発生は光の並進運動量の受け渡しと平行な方向に起きる。しかしポーラス構造を有する場合、電子の周回運動によって物質表面に局在電磁場が生じ、その電磁場から電子がローレンツ力を受けることで横起電力が発生すると考えられる。

一方、我々はフォトニック結晶や光メタマテリアルの解析を効率よく行うことを目指して、周期構造のMaxwell方程式の波動散乱問題の高速解法である周期多重極法を開発してきた。本研究では、これを用いてNPGの電磁波散乱問題を

解くことを考える。そのためには複雑なNPGのモデルを作成する必要がある。NPGは一般にランダムな構造を有しているが、その第一近似として、2-周期的なモデルを使用することは妥当であると考えられる。そのためには2-周期性を有するNPGのモデルを作成することが必要になる。本研究ではNPGの形成過程のシミュレーションを周期境界条件の下に実行することでこの様なモデルを作成することを試みる。

ところで、NPGは金銀合金から銀だけを溶出することによって作成される。この際、多孔質の金が生成するプロセスは複雑であり、金属と電解質(溶液)の界面における合金の溶解と残った金原子の拡散、結合によってNPGが形成されるものと考えられている⁽⁵⁾。この様にして、界面においては純粋な金の部分と、合金が露出した部分が次第に分離してくる。このような現象はスピノーダル分解と呼ばれ、Cahn-Hilliard方程式によって現象論的に記述される。以上のプロセスを忠実にモデル化するならば、界面上で2次元的なCahn-Hilliard方程式を解きつつ、Cahn-Hilliard方程式の解で決まる界面の移動速度に従って界面を移動させることで溶出の進行をシミュレートすることが必要になる。これを周期境界条件の下に行えば、原理的にはNPGのモデルを作成することができると考えられる。この様なシミュレーションの研究は既に行われているが⁽⁶⁾、現状ではモデルのトポロジー変化を考慮することが難しく、電磁波解析に適用可能なモデルを作成す

ることは困難である．他にも，モンテカルロシミュレーションを用いてNPGのシミュレーションを行った研究も知られているが⁽⁷⁾，手法が複雑であるので，モデル作成のために同様なシミュレータを開発することは現実的ではない．

そこで本研究では，3次元Cahn-Hilliard方程式を数値的に解くことで，NPGのメッシュを計算機上で作成し，これを用いて数値計算によりNPGの光起電力を解析することを試みる．元来Cahn-Hilliard方程式は水と油のような層分離を記述する現象論的方程式であるので，これを用いてNPGのモデルを作成することには一定の合理性がある．

NPGのメッシュ作成においては，非線形項を含むCahn-Hilliard方程式の解析に通常の差分スキームを用いると大きな誤差が含まれることが知られているため，構造保存型差分スキーム⁽⁸⁾⁽⁹⁾を用いる．さらにこれによって得られたNPGのメッシュを用いて，境界積分方程式法によりNPGの散乱解析を行う．特に周期構造の波動解析ツールである周期高速多重極法⁽¹⁰⁾を用いることで計算領域が複雑，大規模になるNPGにおいても現実的な時間で解を求めることができる．

本論文の構成は次のとおりである．第2節では，NPGの作成過程のモデル方程式であるCahn-Hilliard方程式及びこの方程式を解くための差分スキームについて述べる．第3節ではその数値計算結果と，計算結果を用いたNPG形状のメッシュの作成について述べる．第4節では，NPGにおける散乱解析を行うための境界要素法の定式化を行い，第5節で光起電力の計算について記す．第6節では第3節で得られたメッシュを用いて行った光起電力の計算結果を示し，第7節で結論と今後の課題を示す．

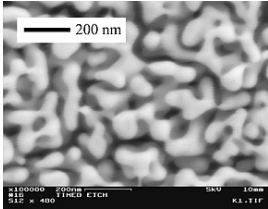


Fig.1 NPG

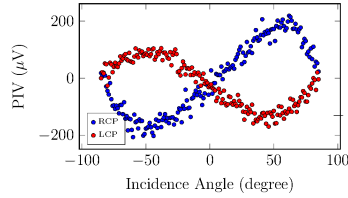


Fig.2 TPIV of NPG⁽⁴⁾

2. NPGメッシュの作成

2.1. Cahn-Hilliard方程式

まずNPGの形状メッシュを作成するために，モデル方程式から生成過程を再現する．NPGは金銀合金から銀を選択的にエッチング(脱成分腐食分解)することにより生成される．この過程を金と銀の二相の分離と捉え，Cahn-Hilliard方程式によって記述する．以下ではこのスピノードル分解のモデル方程式であるCahn-Hilliard方程式の定式化を行う．

$\Omega = [a_1, b_1] \times [a_2, b_2] \times [a_3, b_3]$ を考える領域とし，濃度変数を $u = u(x, t)$ とすると，Cahn-Hilliard方程式は

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \Delta \frac{\delta \tilde{G}}{\delta u} \quad \text{in } \Omega \quad (1)$$

$$G(u) = \frac{1}{2} p u^2 + \frac{1}{4} r u^4 \quad (2)$$

$$\tilde{G}(u) = G - \frac{1}{2} q \|\nabla u\|^2 \quad (3)$$

と表される．ただし， Δ は Laplacian であり

$$\frac{\delta \tilde{G}}{\delta u} := \frac{\partial \tilde{G}}{\partial u} - \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial \tilde{G}}{\partial u_x} \right) \quad \left(u_x := \frac{\partial u}{\partial x} \right) \quad (4)$$

である．式(4)を \tilde{G} の u に関する変分導関数または汎関数微分と呼ぶ．濃度変数 u は相転移の一般論を議論する際の秩序変数であり，例えば金銀合金の場合， $u = 0$ が一様に混合した状態， $u = r/|p|$ が金， $u = -r/|p|$ が銀を表す． G は Ginzburg-Landau 自由エネルギーと呼ばれ，相転移の現象論的モデルであり，粗視化したスケールの現象の理解に用いられる．拡張 Ginzburg-Landau 自由エネルギー \tilde{G} の付加項 $-\frac{1}{2} q \|\nabla u\|^2$ ($q < 0$) により2相の分離が抑制される．またパラメータ $p < 0, r > 0$ により u の概ね取りうる値の範囲 $u \in [-r/|p|, r/|p|]$ が決まる．原理的には Ginzburg-Landau 自由エネルギー $G(u)$ は double-well 型であれば何でもよいが，簡単のため最もパラメータ (p, q, r) の数が少ない例として式(2)を用いる．したがって式(2), (3)を用いると，式(1)は次式ようになる．

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \Delta(pu + ru^3 + q\Delta u)$$

NPGの厚さ方向を x_1 とすると， $x_1 = a_1, x_1 = b_1$ なる Ω の境界では， x_1 軸方向に濃度 u と自由エネルギー \tilde{G} の出入りが無いという自然な境界条件

$$\frac{\partial u}{\partial n} \Big|_{x_1=a_1} = \frac{\partial u}{\partial n} \Big|_{x_1=b_1} = 0, \quad \frac{\partial \tilde{G}_u}{\partial n} \Big|_{x_1=a_1} = \frac{\partial \tilde{G}_u}{\partial n} \Big|_{x_1=b_1} = 0$$

を課す．ただし $\tilde{G}_u = \delta \tilde{G} / \delta u$ ．NPGの厚さは数100nmであるため，縦横の長さに比べ厚さ方向が非常に薄い金属である．そこで， x_2, x_3 軸方向には周期境界条件：

$$\frac{\partial u}{\partial n} \Big|_{x_i=a_i} = \frac{\partial u}{\partial n} \Big|_{x_i=b_i}, \quad \frac{\partial \tilde{G}_u}{\partial n} \Big|_{x_i=a_i} = \frac{\partial \tilde{G}_u}{\partial n} \Big|_{x_i=b_i}, \quad i = 2, 3$$

を課す．しかし実際にCahn-Hilliard方程式の数値解を計算する際には，同等な組み合わせの境界条件である次の条件に通常置き換えられることに注意する．

$$\frac{\partial u}{\partial x_1} \Big|_{x_1=a_1} = \frac{\partial u}{\partial x_1} \Big|_{x_1=b_1} = 0, \quad \frac{\partial^3 u}{\partial x_1^3} \Big|_{x_1=a_1} = \frac{\partial^3 u}{\partial x_1^3} \Big|_{x_1=b_1} = 0,$$

$$\frac{\partial u}{\partial x_i} \Big|_{x_i=a_i} = \frac{\partial u}{\partial x_i} \Big|_{x_i=b_i}, \quad \frac{\partial^3 u}{\partial x_i^3} \Big|_{x_i=a_i} = \frac{\partial^3 u}{\partial x_i^3} \Big|_{x_i=b_i} \quad (i = 2, 3).$$

2.2. 差分スキーム

本研究では上記のCahn-Hilliard方程式を構造保存型差分スキームによって離散化し，得られた方程式をNewton法によって解くことでNPGの形状を得た．Cahn-Hilliard方程式に対する構造保存型差分スキームは質量保存則と自由エネルギーの減少則が離散化後も成り立つように差分スキームを構成することで得られる安定な差分法である．詳しくは降旗ら⁽⁸⁾，降旗，森⁽⁹⁾を参照されたい．

3. NPG形状の計算結果

この節では構造保存型差分スキームに基づいたNPG生成過程の数値計算結果の一例を示す．Cahn-Hilliard方程式中のパラ

メータは $p = -1, q = -0.0001, r = 1$ とし, 差分スキームの時間, 空間方向の分割幅は $\Delta t = 1/12000, \Delta x_1 = \Delta x_2 = \Delta x_3 = 0.01$ とした. 濃度変数 u の値を 1000 ステップ計算し, 格子点上での u の値から金銀領域の境界となる $u = 0$ の点を線形近似により求めた. 初期状態として $|u| \leq 0.01$ の擬似一様乱数を与えた. 縦横厚比は 10:10:1 である.

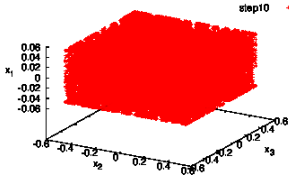


Fig. 3 Shape of NPG (step 10)

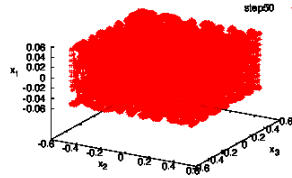


Fig. 4 Shape of NPG (step 50)

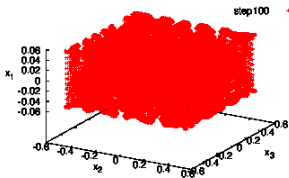


Fig. 5 Shape of NPG (step 100)

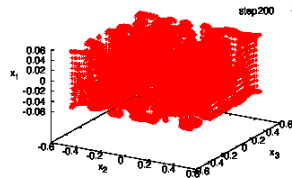


Fig. 6 Shape of NPG (step 200)

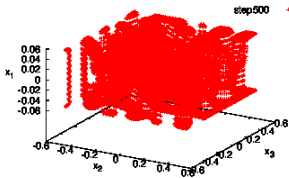


Fig. 7 Shape of NPG (step 500)

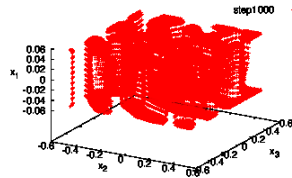


Fig. 8 Shape of NPG (step 1000)

Fig. 3~8 はそれぞれ 10, 50, 100, 200, 500, 1000 ステップ目における金と銀の境界にあたる $u = 0$ の点をプロットした図である. 至るところ $u = 0$ のように混合した状態から $u = 0$ の点が徐々に減っていき, ステップを追うごとに孔が空いていく様子がみられる. また構造型差分スキームを用いたことにより解の不安定性なども見られないことがわかる. このようにして得られた格子点上の u の値から, 隣り合う格子点で u の符号が異なる辺の中点を $u = 0$ の点とし, 格子の各立方体内で $u = 0$ の点から得られる面を貼り合わせることで NPG の境界とした. これは極端に歪んだ要素分割が生成されることを防ぐためである. さらにこうして得られた境界を三角形要素に分割することで NPG のメッシュを作成した. 例としてステップ 50 (Fig. 4) のときのメッシュを Fig. 9 に示す.

なお, メッシュ作成に要する計算時間はごく短く, 電磁波動解析に要する計算時間に比較して無視できる程度である.

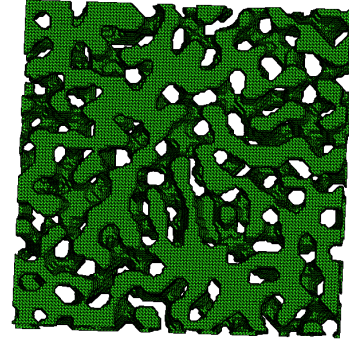


Fig. 9 Mesh of NPG

4. 散乱問題の定式化

本節では前節で得た NPG メッシュを用いた散乱問題の定式化について述べる.

4.1. Maxwell 方程式

Fig. 10 に示す様な 3 次元中の 2 重周期構造を考える. $\Omega =$

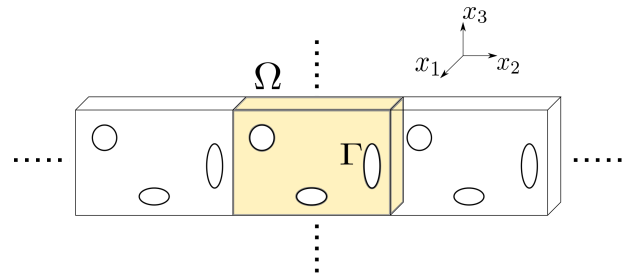


Fig. 10 Periodic domains

$(-\infty, \infty) \times (-L_2/2, L_2/2) \times (-L_3/2, L_3/2)$ を一つの周期単位とする. Ω は先に作成した NPG の領域内部 Ω_2 と $\Omega_1 = \Omega \setminus \bar{\Omega}_2$ の 2 領域から成るとし, その境界を Γ とする. つまり Ω_1 は真空, Ω_2 は金で占められているとする. このとき以下の Maxwell 方程式の境界値問題を考える:

$$\nabla \times \mathbf{E} = i\omega\mu_l \mathbf{H}, \quad \text{in } \Omega_l, \quad l = 1, 2$$

$$\nabla \times \mathbf{H} = -i\omega\epsilon_l \mathbf{E}, \quad \text{in } \Omega_l, \quad l = 1, 2$$

$$\mathbf{m} := \mathbf{E}^1 \times \mathbf{n} = \mathbf{E}^2 \times \mathbf{n}, \quad \mathbf{j} := \mathbf{n} \times \mathbf{H}^1 = \mathbf{n} \times \mathbf{H}^2 \quad \text{on } \Gamma$$

ここに \mathbf{E}, \mathbf{H} はそれぞれ電場, 磁場, ϵ_l, μ_l は領域 Ω_l における誘電率と透磁率, k_l は Ω_l での波数 $k_l = \omega \sqrt{\epsilon_l \mu_l}$ である. ω は周波数であり, 諸量の時間挙動は $e^{-i\omega t}$ とした. $\mathbf{E}^l, \mathbf{H}^l$ はそれぞれ \mathbf{E}, \mathbf{H} の Ω^l から Γ への極限である.

4.2. 積分方程式

$k_l (l = 1, 2)$ に対応する Maxwell 方程式の周期グリーン関数 Γ_l は,

$$\Gamma_l(x, y) = \left(I + \frac{1}{k_l^2} \nabla \nabla \right) G_l^p(x - y)$$

である．ただし I は単位作用素， G_l^p は波数 k_l の Helmholtz 方程式の周期 Green 関数

$$G_l^p(\mathbf{x}-\mathbf{y}) = \sum_{n_2, n_3 \in \mathbb{Z}} \frac{e^{ik_l|\mathbf{x}-\mathbf{y}-n_2\mathbf{e}_2-n_3\mathbf{e}_3|}}{4\pi|\mathbf{x}-\mathbf{y}-n_2\mathbf{e}_2-n_3\mathbf{e}_3|} e^{i(\beta_2 n_2 L_2 + \beta_3 n_3 L_3)}$$

であり， $\mathbf{e}_2, \mathbf{e}_3$ はそれぞれ x_2, x_3 軸方向単位ベクトルを表す． Γ 上の接ベクトル場 \mathbf{t} に関する作用素 $P_l, Q_l (l = 1, 2)$ を以下のように定義する．

$$P_l \mathbf{t}(\mathbf{x}) = -\mathbf{n}(\mathbf{x}) \times \int_{\Gamma} \left\{ \nabla_y G_l^p(\mathbf{x}-\mathbf{y}) \times \mathbf{t}(\mathbf{y}) \right\} ds_y$$

$$Q_l \mathbf{t}(\mathbf{x}) = \mathbf{n}(\mathbf{x}) \times \int_{\Gamma} \left\{ G_l^p(\mathbf{x}-\mathbf{y}) \mathbf{t}(\mathbf{y}) - \frac{1}{k_l^2} \nabla_y G_l^p(\mathbf{x}-\mathbf{y}) \operatorname{div}_y \mathbf{t}(\mathbf{y}) \right\} ds_y$$

これらを用いると，4.1 節で定義した問題に対応する PM-CHWT (Poggio-Miller-Chang-Harrington-Wu-Tsai) 型境界積分方程式は次式となる．

$$(P_1 + P_2)\mathbf{m} - i\omega(\mu_1 Q_1 + \mu_2 Q_2)\mathbf{j} = -\mathbf{E}^{\text{inc}} \times \mathbf{n}$$

$$i\omega(\epsilon_1 Q_1 + \epsilon_2 Q_2)\mathbf{m} + (P_1 + P_2)\mathbf{j} = -\mathbf{n} \times \mathbf{H}^{\text{inc}}$$

5. 光起電力計算

光起電力の発生要因には諸説あり，メカニズムが全て解明されたわけではない．この節では，本論文で用いた光起電力の計算式について述べる．

光は電場と磁場を有し，運動量を持つ．そのため，自由電子が介在する物質中に光を照射すると，この運動量により電子の移動が生じ，光起電力が発生する．この光起電力は通常光の並進方向に発生する（縦方向起電力）．しかしナノポーラスゴールドのようなポーラス構造を有する物質の場合，電子の周回運動によってサンプル表面に局在電磁場が生じると考えられる．この電磁場によって電子がローレンツ力を受け，光の入射面と垂直な方向への起電力が発生することが考えられる⁽¹¹⁾．本論文ではこのような横起電力（横方向起電力）の発生メカニズムを採用する．

入射波を円偏光としたときに領域内部に生じる電場分布を \mathbf{E}_{cir} とする．畑野⁽¹²⁾ は構造が受ける力 \mathbf{F} として

$$\mathbf{F} \sim -\nabla |\mathbf{E}_{\text{cir}}(\mathbf{x})|^2 = -\nabla (\mathbf{E}_{\text{cir}} \mathbf{E}_{\text{cir}}^*)$$

を用いている．従って，光の入射面を $x_1 x_2$ 平面とすると円偏光入射時の横起電力 $V_{\text{TPIV}}^{\text{cir}}$ は x_3 軸方向に生ずるから，

$$V_{\text{TPIV}}^{\text{cir}} \sim - \int_{\Omega_2} \nabla_{x_3} |\mathbf{E}_{\text{cir}}|^2 dV$$

$$= - \int_{\Gamma} |\mathbf{E}_{\text{cir}}|^2 n_3 dS \quad (5)$$

のように計算できる．ここに n_3 は法線ベクトルの第三成分である．なお， n_3 を n_2 に置き換えれば縦起電力 (Longitudinal PIV, LPIV) の表現式が得られる．

6. 数値計算結果

6.1. 横起電力の計算結果

前節までの結果を用いて NPG における起電力の計算を行った．入射波は波長 $\lambda = 550[\text{nm}]$ である円偏光の平面波とし， $\epsilon_1 = 1, \mu_1 = \mu_2 = 1$ ，また金の誘電率 ϵ_2 は，Johnson-Christy の表⁽¹³⁾ に従い $\epsilon_2 = -5.8421 + 2.1113i$ とした．散乱体として Fig. 9 に示す厚さ 100nm，空隙率 50 % の NPG において，表面を約 10 万個の三角形に分割したメッシュを用いた．また積分方程式を解く際の線形方程式の解法として許容誤差 10^{-5} ，リスタート無しの GMRES (Generalised Minimal RESidual) 法を用いた．横起電力の計算結果を Fig. 11 に示す．

なお，NPG の構造は入射波の波長に比べて十分に細かいため，メッシュの要素長は NPG の境界形状を十分に表せるように決定すれば，入射波の波長に対して十分に小さな値になる．実際，この数値例では入射波の波長 550[nm] に対して，3 節で用いた差分スキームの格子間隔は 10[nm] である．

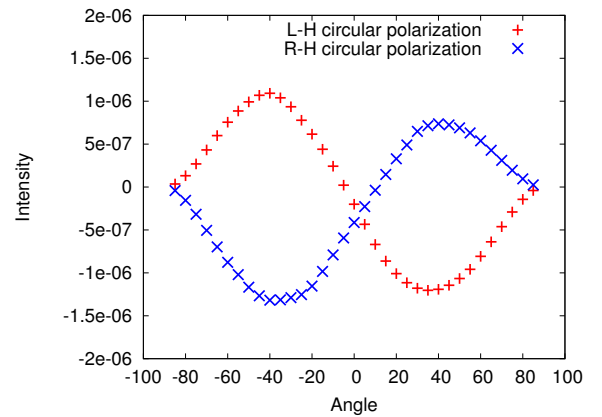


Fig. 11 TPIV of NPG (thickness: 100nm) illuminated by a circular-polarised incident wave

Fig. 11 中の赤い点は時間定義（即ち，時間の経過に伴って，ある点における電場が光の進行方向に向かって（反）時計回りに回転するものを右（左）円偏光とする）における左円偏光入射時の横起電力（正確には (5) の右辺）を，青い点は右円偏光入射時の横起電力を表す．入射波の入射面は $x_1 x_2$ 平面であり，横軸は入射角 θ ($x_1 x_2$ 平面内において入射波の波数ベクトルと x_1 軸の成す角)，縦軸は横起電力の強度である．なおこの例において GMRES の反復回数は約 200 回程度であった．Fig. 2 の実験結果と同様に右円偏光と左円偏光で符号が逆転する結果となり， ∞ の字を描くような概形となっている．数値計算による横起電力の値と実験値に大きな違いが見られるが，これは (5) が比例関係式であるためである．なお，畑野⁽¹²⁾ における別の光メタマテリアルの実験において，比例係数を合理的に見積もると，数値計算結果と実験結果がある程度一致することが報告されている．NPG で同様な比較を行うことは，試料と計算モデルを合わせることが困難であるので，今後の課題である．

次に同じ条件で厚さ 200nm の NPG について計算を行った．用いたメッシュの図を Fig. 12 に，横起電力の計算結果を Fig. 13 に示す．メッシュの要素数は約 14 万要素、空隙率は約 51.6% である．Fig. 13 もやはり ∞ の字を描いていることがわかる．

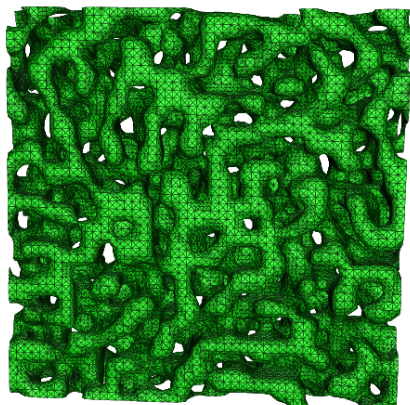


Fig. 12 Mesh of NPG (thickness: 200nm)

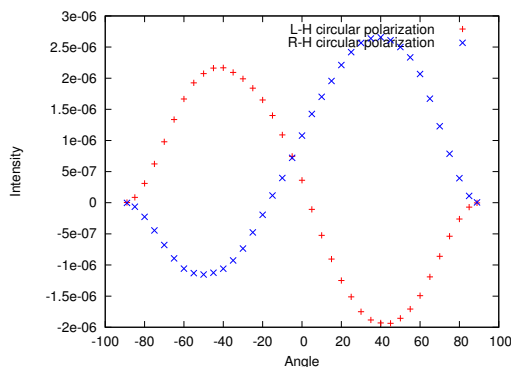


Fig. 13 TPIV of NPG (thickness: 200nm) illuminated by a circular-polarised incident wave

更に 100nm 厚で空隙率を約 35 %にしたメッシュ (Fig. 14) での横起電力の計算結果を Fig. 15 に示す。メッシュの要素数は約 9 万要素である。Fig. 15 から左円偏光と右円偏光で符号が逆転していることがわかる。なおこの例での GMRES の反復回数は約 200 回であった。

また Fig. 11 のピークである左円偏光入射で入射角 -40 度の際の電場強度 $|E|$ を Fig. 16 に図示した。Fig. 16 は電場強度が大きいほど黄色に、小さいほど黒くなっている。NPG の細かい円柱状にくびれた部分やエッジの立った部分が特に大きな電場強度を示している。これは入射光により力を受けた電子が移動する際、これらの部分に集中するためと考えられる。

6.2. 縦起電力の計算結果

縦起電力の例として、Fig. 11 と同様に 100nm 厚の場合の計

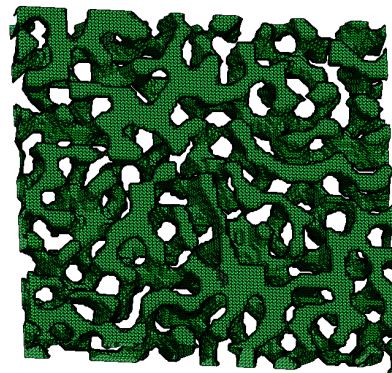


Fig. 14 Mesh of NPG (thickness: 100nm, void ratio: 35%)

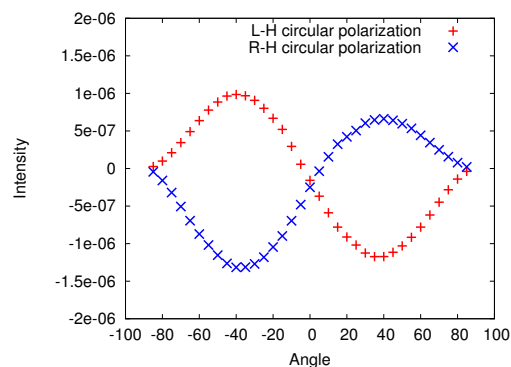


Fig. 15 TPIV of NPG (thickness: 100nm, void ratio: 35%) illuminated by a circular-polarised incident wave

算結果を Fig. 17 に示した。横軸は入射角 θ 、縦軸は縦起電力

$$V_{\text{LPIV}}^{\text{cir}} \sim - \int_{\Gamma} |\mathbf{E}_{\text{cir}}|^2 n_2 dS$$

である。ここに n_2 は法線ベクトルの第二成分である。メッシュは Fig. 9 を用いた。この例では横起電力と異なり、左円偏光と右円偏光で符号が逆転することはなかった。縦起電力の大きさも横起電力と比較すると小さくなっている。

また 100nm 厚、空隙率 35 % のメッシュ (Fig. 14) を用いた場合の縦起電力を Fig. 18 に示した。左右の円偏光で近い概形になっているが、全く同じではなく、構造による違いが現れている。

これらの例からも分かるように、縦起電力は構造依存性が高いと考えられ、横起電力のような傾向を読み取ることは難しい。今後、実験・数値計算ともにサンプル数を増やすことが課題であると言えよう。

7. 結論

本研究では周期高速多重極境界要素法を用いて光起電力の数値計算を行った。数値計算からも光起電力のうち横方向起電力に角度依存性があり、円偏光の向きによって横起電力

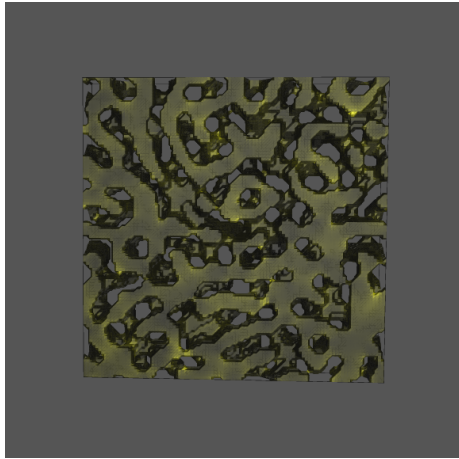


Fig. 16 Electric intensity $|E|$

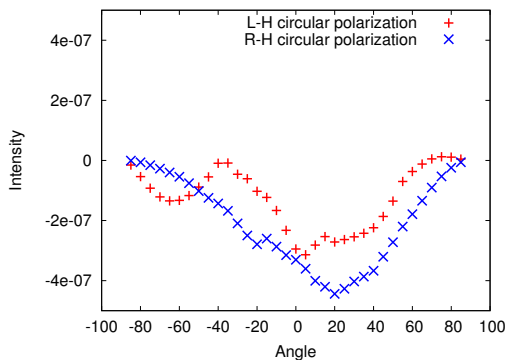


Fig. 17 LPIV of NPG (thickness: 100nm)

の符号が反転する様子が観察された。また光起電力を生み出す要因に関連すると予想される電場強度の分布はナノポーラスゴールドのエッジや特に細くなっている部分に集中していることがわかった。

今後の課題として、次の各項が考えられる。1) より現実のNPGに近い形状メッシュを作成すること。本研究では、最も簡単な3パラメータのCahn-Hilliard方程式を用いており、実際のNPGに即したCahn-Hilliard方程式の形や、パラメータ値の選び方について、詳細な議論が必要である。2) 起電力の数値計算結果の定量的な評価。横起電力の数値計算結果の実験結果との定性的な一致については確認できたが、メッシュの品質や分割数が精度に与える影響などは今後の課題である。3) 他の実験結果との比較。入射光として円偏光以外にp偏光、s偏光等を用いた場合の実験との比較が望まれる。4) 前処理法の検討。本論文では直接計算部分を用いた単純な前処理法⁽¹⁰⁾を用いているので、今後、Calderonの前処理法⁽¹⁴⁾を使用して計算効率を更に向上させることを検討している。

なお、本研究は科学研究費新学術領域研究 22109005 の研究成果、及び基盤研究(B)15H03604 の研究成果を含んでいる。

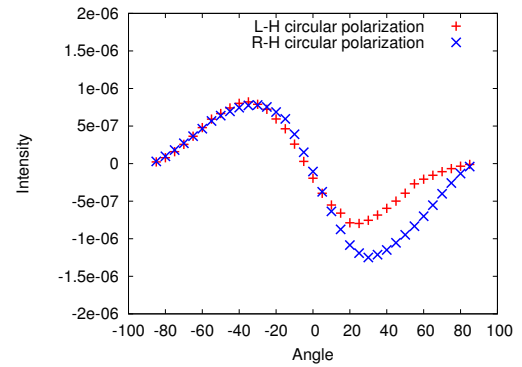


Fig. 18 LPIV of NPG (thickness: 100nm, void ratio: 35%)

参考文献

- (1) J.B. Pendry, Physical Review Letters, 85, 3966–3969, 2000
- (2) M. Akbari, M. Onoda and T. Ishihara, Optics Express, 23, 823–832, 2015
- (3) http://pages.jh.edu/news_info/news/home01/mar01/images/gold.jpg
- (4) M. Akbari, Master Thesis, 東北大学, 2014
- (5) J. Erlebacher, M.J. Aziz, A. Aarma, N. Dimitrov and K. Sieradzki, Nature, 410, 450–453, 2001
- (6) C. Eilks and C.M. Elliott, Journal of Computational Physics, 227, 9727–9741, 2008
- (7) O. Zinchenko, H.A. De Raedt, E. Detsi, P.R. Onck, J.T.M. De Hosson, Computer Physics Communications, 184, 1562–1569, 2013
- (8) 降旗大介, 恩田智彦, 森正武, 日本応用数学会論文誌, 3, 217–228, 1993
- (9) 降旗大介, 森正武, 日本応用数学会論文誌, 8, 317–340, 1998
- (10) Y. Otani and N. Nishimura, Journal of Computational Physics, 227, 4630–4652, 2008
- (11) T. Hatano, T. Ishihara, S. Tikhodeev and N. A. Gippius, Physical Review Letters, 103, 103906, 2009
- (12) 畑野敬史, 東北大学学位論文, 2010
- (13) P.B. Johnson and R.W. Christy, Physical Review B, 6, 4370, 1972
- (14) K. Niino and N. Nishimura, International Journal of Numerical Modelling: Electronic Networks, Devices and Fields, 25, 558–572, 2012