

## ナノ構造中電子の量子振動の局在プラズモンへの効果

### Quantum Oscillation Effect of Electrons in Nanostructures on Localized Plasmons

東大院工 ○ 市川 昌和

Univ. Tokyo, ○ Masakazu Ichikawa

E-mail: ichikawa@ap.t.u-tokyo.ac.jp

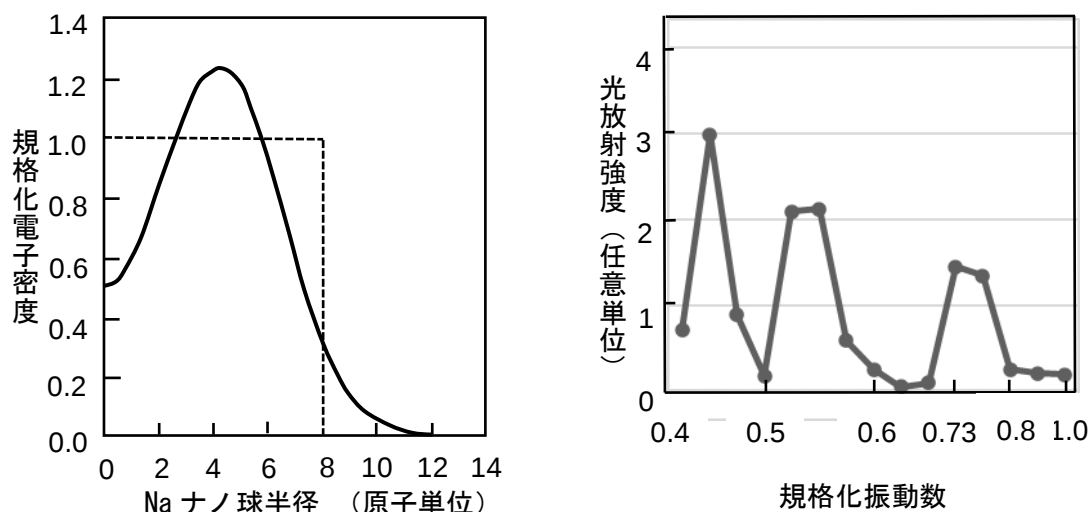
金属ナノ構造内の電磁場の遅延効果を無視する準静的近似を用いると、乱雑位相近似 (RPA) における高周波数条件 (プラズモン周波数領域) において、有効スカラーポテンシャル  $\varphi_{\text{eff}}(\mathbf{r}, \omega)$  と外部スカラーポテンシャル  $\varphi_{\text{ext}}(\mathbf{r}, \omega)$  は、量子論で導いた金属ナノ構造中の局所電子密度を  $n(\mathbf{r})$  とすると、ある積分方程式を満たす[1]。

本講演では、金属ナノ構造中の連続的な電子密度変化を考慮してこの積分方程式を数値的に解くことにより、ナノ構造中電子の量子振動の局在プラズモンへの効果について詳しく調べた。

金属ナノ球中の局在プラズモンに注目し、スカラーポテンシャルやクーロンポテンシャルを球面調和関数で展開すると、スカラーポテンシャルの動径方向  $r$  成分に関して積分方程式が得られる。さらに、中点法を用いてこれを離散化することにより、スカラーポテンシャル  $\varphi_{\text{eff}}^{\text{lm}}(r_i, \omega)$  に関する以下の線型連立方程式が得られる。

$$[N(r_i) - \lambda] \varphi_{\text{eff}}^{\text{lm}}(r_i, \omega) + f_l(r_i) d \sum_{j=1}^i g_l(r_j) \varphi_{\text{eff}}^{\text{lm}}(r_j, \omega) + h_l(r_i) d \sum_{j=i+1}^n k_l(r_j) \varphi_{\text{eff}}^{\text{lm}}(r_j, \omega) = -\lambda \varphi_{\text{ext}}^{\text{lm}}(r_i, \omega)$$

ここで上式中の複数の関数は、局所電子密度とこの半径  $r$  に関する微分や半径  $r$  を含む関数である。ここでは、第一原理計算による Na ナノ球の局所電子密度  $n(r)$  [2] を使用してこれらを数値的に解いた。また、上式の右辺をゼロとすると  $\lambda = (\omega/\omega_p)^2$  に関する固有値問題となり、共鳴振動数  $\omega$  が求まる。ここで、 $\omega_p$  はバルクプラズモンの振動数である。



左図はバルクの電子密度で規格化した Na ナノ球 (半径: 0.42 nm) の局所電子密度であり、内部において大きな量子振動が存在する。右図は  $l=1, m=0$  において、バルクプラズモンの振動数で規格化した振動数  $(\omega/\omega_p)$  における光放射強度である。量子振動に起因する電子密度の大きな変化により、複数の共鳴振動数が現れている。当日は、この詳しい数値計算結果と、異なる大きさの Na ナノ球に関する結果についても報告する。

[1] M. Ichikawa; e-J. Surf. Sci. Nanotech. **19**, 88 (2021). [2] M. Brack; Rev. Mod. Phys. **65**, 677 (1993).