

DPの一次元堆積モデルについて 「ドレスト光子」 大津元一著より 香取研究室 小林智裕

そもそもDP(ドレストフォトン)とは？

DPとは、ナノ寸法領域において光子と電子(または電子・正孔対)が結合した状態を表す準粒子である。ナノ寸法領域での、二つの物質の有効相互作用の大きさを求めるなかで、入射光とまわりを囲んだ巨視的物質を考慮し繰り返し込むと、近接場光相互作用と呼ばれる有効相互作用は、ナノ物質の寸法に依存した湯川関数のかたちになり、光波長によらないことがわかる。つまり、DPがナノ物質表面に局在することになり、ナノ物質間での電磁相互作用はDPのエネルギーがナノ物質間を移動することにより、生じると考えてよいことになる。また、ナノ寸法による格子振動、つまりフォノンは、DPの空間分布において影響を与える。DPとフォノンとが結合した準粒子をDPP(ドレスト光子フォノン)と呼ぶ。

一次元モデルの現象の原理

溝付きのSiO₂基盤にAlの微粒子を堆積させる。その際に、基盤表面に光子エネルギー2.33eV(波長532nm)、光パワー50mWの光を照射すると、ほぼ等しい寸法(平均直径100nm)をもったAlナノ物質がほぼ等間隔(平均間隔28nm)で、溝の各所に配列する。

また、基盤表面に光子エネルギー2.62eV(波長473nm)、光パワー100mWの光を照射した場合、平均直径84nm、平均間隔49nmのAlナノ物質の配列が得られる。

これは、基盤表面に発生するDPPとAlとの相互作用による自律的な物質形成・配列が可能であることを示して、空間分布が湯川関数で与えられるDPのエネルギー移動により、反結合性励起状態に遷移し、周囲のAl微粒子が脱離することによる。この現象について、モデルを作成して解析する。

新しいモデルの概要

「ドレスト光子」の中で提示されている一次元モデルとは別のモデルで、Alナノ物質の配列について考察していく。今回は、新しいモデルとして

1. Alナノ物質をピクセルとして、ランダムに堆積させる。(一次元のみ)
2. 光と物質の共鳴相互作用に対応した脱離を、ランダムに選択した堆積を消すことで再現する。

この二つのポイントをもとにモデルを作成した。このモデルは「ドレスト光子」にて提示されているモデルよりも、一度堆積し、DPの作用により反結合励起状態に遷移して、その後脱離するという一連の流れに対して、より忠実に再現していると考えられる。

具体的なシミュレーションについて

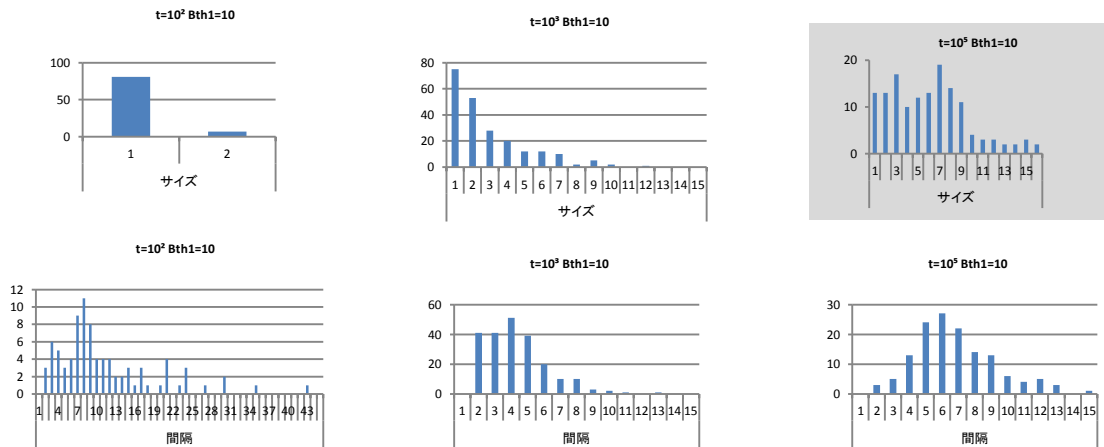
このモデルについての具体的なシミュレーションは、一次元配列を準備し、

1. 乱数を用いて一つの位置を選び、そこに堆積させる。ただし、一次元での考察のため、既に堆積してある場所には堆積を禁止する。
2. 1.で用いた乱数とは別の乱数を用いて、一つの場所を選ぶ。その選んだ場所がある長さBth1以上あるクラスターの一部の場合、その選んだ場所にある堆積を消す。

この、1と2を一回ずつ行う操作を単位時間tとして $t=10^2, 10^3, 10^4, 10^5, 10^6$ の操作を行う。また、一次元配列として、全ピクセル数を1000とし、Bth1を10とする。 $t=10^2$ のときについては、Bth1=6,8,10,12,14の五つの長さを試行した。

新しいモデルのシミュレーション結果

今回考察したモデルに関しても、「ドレスト光子」で提示されているモデル同様にそれぞれをグラフにまとめて結果を見してみる。縦軸はすべて発生頻度である。



この結果を踏まえての問題点

今回考察したモデルでは、間隔は一つの値に収束し、実際の現象に則した結果が得られた。しかし、クラスターサイズに関しては、一つの値に収束していきなく、いくつか大きすぎるクラスターも生じている。(色つきのグラフを参照)

また、グラフを載せてはいないが、 $t=10^6, 10^7$ の場合、 $t=10^5$ でBth1が6,8,12,14の場合も同様な結果となった。つまり、このモデルの問題点としては、

1. 大きすぎるクラスターが存在すること。
2. 小さいクラスターの数、特にサイズが1のものが明らかに多いこと。

と考える。

新しいモデル案

今回のモデルでの問題点を踏まえて、新しいモデルを考える。

問題点としては、小さいクラスターが多くなって実際の現象とは異なる結果となった。

そこで、塊で脱離するモデルが今回の問題を解決できると考えられる。

堆積する場所を決める乱数とは別の乱数を使い、その乱数で結合の場所を指定する。

その指定された場所の右か左側を、いくつかの条件を満たせば消す、というモデルを考えている。