

令和 5 年 6 月 12 日現在

機関番号：82401

研究種目：挑戦的研究（萌芽）

研究期間：2018～2022

課題番号：18K19038

研究課題名（和文）メタマテリアル完全光吸収体の構造最適化と高効率放熱デバイスへの応用

研究課題名（英文）Optimization of structure of metamaterial perfect absorber and their application for high efficient heat radiator

研究代表者

田中 拓男（Tanaka, Takuo）

国立研究開発法人理化学研究所・開拓研究本部・主任研究員

研究者番号：40283733

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 4,900,000円

研究成果の概要（和文）：本研究では、メタマテリアル吸収体の構造最適化と熱輻射デバイスへの応用を行った。赤外線と可視光の両方の領域で動作するマルチスケールメタマテリアル吸収体の構造設計を行った。赤外線と可視光それぞれのメタマテリアル吸収体の構造を最適化した後、それらを組み合わせたマルチスケールメタマテリアル吸収体の最適構造を明らかにした。解析で得られた構造をもとに銀ナノパッチアレイ構造で構成される赤外吸収構造を試作した。このメタマテリアル吸収構造を熱電変換素子の端面に装荷したところ、メタマテリアル吸収体がない場合と比べて10倍以上の温度差が発生し1.09 mW/cm²の電力密度を得る事に成功した。

研究成果の学術的意義や社会的意義

複数のパラメータを持つ構造の最適化では、全てのパラメータの組み合わせを網羅的に探索することは困難である。そこで本研究ではトポロジカル最適化手法を用いて、大規模最適化問題の解法手法を開発した。この成果は、メタマテリアル吸収体構造の構造設計に留まらず、広く大規模最適化問題の解法手法として応用することが可能である。また、設計したメタマテリアル光吸収体を用いた熱電変換デバイスはメタマテリアル吸収体を持つ高い光吸収特性によって温度差を作り出す事ができるので、極めて温度差の小さい環境下においても動作する高効率熱電素子として応用できる可能性がある。

研究成果の概要（英文）：In this study, we conducted structural optimization of metamaterial absorbers and their application to thermal radiating devices. First of all, we performed structural optimization of multiscale metamaterial absorber that work in both the infrared and visible light regions individually. After the optimization, we designed the structure of a multiscale metamaterial by combining these two metamaterials and proposed its optimal configuration. Based on the obtained structures, we fabricated an infrared metamaterial perfect absorber composed of a silver nano-patch array. When this metamaterial absorber structure was attached onto the end face of a thermoelectric conversion device, we successfully achieved a temperature difference of more than 10 times and obtained a power density of 1.09 mW/cm² compared to the case without the metamaterial absorber.

研究分野：メタマテリアル，ナノフォトニクス

キーワード：メタマテリアル 光吸収 トポロジー最適化 有限要素法 マスクレスリソグラフィ

1. 研究開始当初の背景

物質による光の吸収は、その物質の複素屈折率の虚数項(消衰係数)で記述され、大きな消衰係数を持つ物質の中では光は強く吸収される。しかし光が空気(真空)中から消衰係数が大きな物質に入射すると、その境界面で光は強く反射されて物質内部には入らない。光が物質の内部に入らなければ、光は吸収されないので、本来光を強く吸収するはずの物質は実際には光の反射体として働き、光は吸収されないという矛盾が起こる。光を完全に吸収させるためには、物質の透磁率を人工的に制御してインピーダンスを整合させ、光の反射を抑制しなければならない。

メタマテリアルという人工構造体で物質のインピーダンスを制御して光の完全吸収体をつくるという試みは既にいくつか報告されている。ただ、そこで使われているメタマテリアルの構造は、アンテナ理論に基づいて設計されているので、いずれも、棒(ロッド)やリングか球、もしくは高々それらの組合せであって、決まり切った形状から脱却できていない。メタマテリアル分野全体を見ても様々な応用が提案されているが、その構造に着目すると、古典電磁気学、とりわけアンテナ素子の設計技術を基礎にしている事が多く、その形のバラエティは決して豊富ではない。これまでも光学の一部の分野では、計算機を利用してその素子を自動的に設計する手法が試みられてきたが、一般的にはパラメータが多くて計算量があまりにも膨大なので汎用的に利用することはできなかった。この状況を変えたのが、新しい最適化アルゴリズムの登場で、A.I. 技術などと共にここ数年急速に進歩している分野である。

2. 研究の目的

本研究ではメタマテリアルと最適化問題による構造設計技術とを連携させ、これまでの設計手法の考え方を根本的に転換して、古典電磁気学に基づく固定観念を捨てて、最先端の数理学的最適化アルゴリズムを駆使して全く新しい視点からメタマテリアルに最適な構造を網羅的に洗い出してその機能の限界を追求する。そして、計算機が生み出すメタマテリアル構造を1つ1つ網羅的に試作・評価することで、メタマテリアルが持つポテンシャルを明らかにするとともにその限界を探る。そして、この構造設計技術の応用として、メタマテリアルを用いた完全吸収体の実現を1つのターゲットとして設定し、これを実現するための最適なメタマテリアル構造を、大規模計算に基づく構造設計手法によって求める。そして、高効率放熱デバイスの実現を通してその有効性を明らかにする。

3. 研究の方法

研究は、以下の2つのテーマを平行して実施しながら、その成果を互いにフィードバックさせながら進めた。

- (1) 自動最適化アルゴリズムに基づく、赤外メタマテリアル吸収体構造の最適設計
- (2) 広帯域赤外メタマテリアル吸収体の試作・特性評価

- (1) 自動最適化アルゴリズムに基づく、メタマテリアル吸収体構造の最適設計

電磁波伝搬問題に対するトポロジー最適化手法を、メタマテリアル吸収体の設計という目的に合わせて最適化させたソフトウェアを開発した。

メタマテリアル最適設計法では、計算コストの高い三次元の電磁場解析を繰り返し行うので強力な計算機環境が必要である。そこで電磁場解析部分はスーパーコンピュータ上で行った。

実際の構造設計では、設計案に多様性を持たせるため、乱数をベースとした発見的手法を初期形状創出に組み込んだ多段階的ソフトウェアを開発して、人間では到底思いつかない複雑で高性能な形状を求めた。

開発した自動設計技術のターゲットとして、赤外域と可視域の両方の波長域において高い光吸収特性を実現するマルチスケールメタマテリアルの構造設計を行った。また、メタマテリアル吸収体の分子検出デバイスへの応用を想定して、メタマテリアル吸収体表面に検体物質を流す際に、流体への抵抗が少なくなるメタマテリアル構造の設計に挑戦した。

- (2) メタマテリアル吸収体の試作・特性評価

計算機が生み出す構造を網羅的に試作・評価するためには、高いスループットが必要である。そこで、光リソグラフィで対応できるマイクロメートルサイズの構造に限定し、これまでの研究で構築したリソグラフィ法を利用したトップダウン的金属加工技術を応用して、赤外吸収メタマテリアルを効率よく試作できる一連の加工プロセスを立ち上げた。

この加工装置を利用して、計算機が設計したメタ材料吸収体の構造を、1つ1つ網羅的に試作した。そして試作したメタ材料の赤外吸収特性を既設設備の赤外分光器を用いて測定・評価し、その結果を自動設計ソフトウェアにフィードバックした。

また、試作した赤外メタ材料吸収体を実際のデバイスに装荷してその効果を評価した。具体的には実験では赤外メタ材料吸収体を熱電変換素子の端面に装荷して、その発電特性を評価した。

4. 研究成果

研究期間を通して、トポロジー最適化手法を導入した赤外吸収メタ材料の構造最適化ソフトウェアを開発し、可視～赤外の広い波長域に対応できるマルチスケールメタ材料吸収体の構造設計を行った。また、メタ材料吸収体の試作実験では銀ナノパッチアレイからなる赤外メタ材料吸収体を試作し、それを熱電変換素子の端面に装荷して発電特性を評価した。以下それぞれの研究成果である。

(1) 可視・赤外マルチスケールメタ材料吸収体の構造設計

光メタ材料の導入によって、赤外線波長領域と可視光波長領域の光の反射と吸収を制御できるような構造を探索した。はじめに赤外線メタ材料、可視光メタ材料の解析手法の検討を行った。その後、それぞれの波長領域で動作するメタ材料について実際にその反射特性を調べた。そして最終的に赤外線と可視光線の両方の領域で動作するマルチスケールメタ材料について解析方法を検討し、理想的な反射率分布をもつメタ材料吸収体の構造を設計した。

赤外吸収体の特性は、デバイス内部での熱伝導特性とも密接に関係しているため、単なる光(電磁波)の放射特性の計算のみでは正確な見積もりができない。光吸収特性については有限要素法を用いて解析を行い、さらに温度変化とその後の熱拡散を考慮して、全体の特性を評価した。そしてその結果をメタ材料の構造へフィードバックした。

赤外線メタ材料と可視光メタ材料の解析を行い、先行研究で得られているそれぞれの反射特性の結果をほぼ再現することができた。また、2つのメタ材料を組み合わせたマルチスケールメタ材料の構造を設計し、その光学特性の解析を行ったところ、それぞれ波長域において可視ならびに赤外それぞれのメタ材料と同等の反射特性を持つマルチスケールメタ材料吸収体構造を得る事ができた。

図1, 2はその結果である。図1は可視光域における光学特性の評価結果であり、図1(a)は可視光用メタ材料の反射スペクトルである。一方図1(b)は、設計したマルチスケールメタ材料吸収体の可視光領域の反射スペクトルである。これらの結果から、設計したマルチスケールメタ材料吸収体が可視光において、可視光(専用)のメタ材料吸収体と同等の光反射特性を持っていることが確認できた。図2は赤外領域の評価結果である。図2(a)は赤外用メタ材料吸収体の反射特性の入射角依存性を求めた結果である。図2(b)は設計したマルチスケールメタ材料吸収体の赤外域の反射特性の入射角依存性を図2(a)と同様にプロットしたものである。赤外メタ材料吸収帯の光学特性に見られる波長6.5 μm 付近の反射率低下(水色のライン)がマルチスケールメタ材料吸収体では弱くなっているものの、大まかな光学特性はほぼ一致している事がわかる。

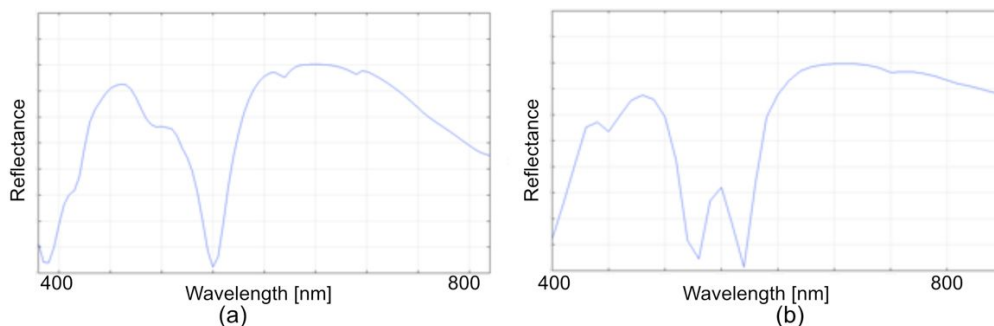


図1 可視光域の光学特性の比較。(a) 可視光メタ材料吸収体の反射スペクトル、(b) マルチスケールメタ材料吸収体の反射スペクトル。

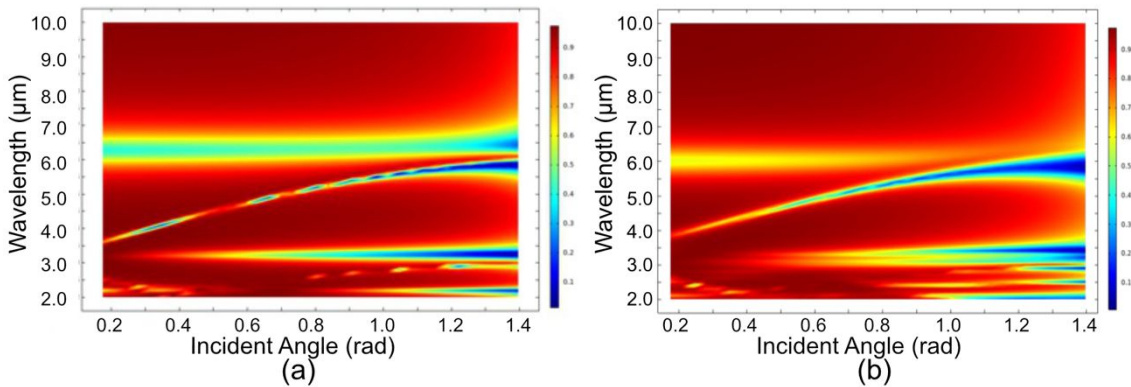


図2 赤外領域での光学特性の比較．(a) 赤外メタマテリアル吸収体の反射スペクトル，(b) マルチスケールメタマテリアル吸収体の反射スペクトル．

これらの結果より，可視光域と赤外光域の両方の波長領域において動作する広帯域メタマテリアル吸収体の実現できることを示した．

(2) 流れへの抵抗の少ないメタマテリアル吸収体構造に関する研究

メタマテリアル吸収体を赤外分光技術に応用してその表面を流れる分子を検出するデバイスへの応用を念頭に，流れへの抵抗の少ないメタマテリアル吸収体を導出する研究を行った．(1)で開発した解析手法に組み込んだ熱拡散の評価技術は，流体の数値解析にも応用できるため，ポラス構造中の流体の解析を行い，Forchheimer drag を考慮したポラス状流路のユニットセルの最適化を行った．

具体的には流れの解析には低流速に対応する Darcy モデルと，高速流に対応する Darcy-Forchheimer モデルを導入し比較を行った．その結果，Darcy モデルによる最適解は低速で抵抗が小さく，Darcy-Forchheimer は高速で抵抗が小さくなることが確認できた．

(3) 赤外メタマテリアル吸収体の試作と熱電変換素子の高効率化実験

(1)での解析結果を利用して，銀ナノパッチアレイ構造で構成される赤外メタマテリアル吸収構造を電子ビームリソグラフィ等を利用して試作した．試作した赤外メタマテリアル吸収構造は，直径 $1.75\ \mu\text{m}$ の銀パッチが CaF_2 層（膜厚 $60\ \text{nm}$ ）を挟んで銀薄膜上に形成してあり，波長 $6\ \mu\text{m}$ に吸収ピークを持つように設計した．この吸収波長は $500\ \text{K}$ の黒体放射のピーク波長と一致させてある．このメタマテリアル吸収構造を大きさ $1\ \text{cm}$ 角，厚さ $1\ \text{mm}$ の Bi_2Te_3 の熱電変換素子の片方の端面に装荷した．このデバイスでは，赤外メタマテリアル吸収体の有無で光吸収効率が異なるので，均一な熱放射下においても電極間に温度差を生じさせることができる．

実験では，このデバイスを均一な熱放射が得られる電熱炉の中に設置して熱電特性を評価した．メタマテリアル吸収体を装荷したユニットセルの数を変えたデバイスを準備して，メタマテリアル吸収体構造の効果を調べた．図4がその実験結果の一例である．実験の結果，ユニットセルの数を増やすとともに，電極間の温度差は大きくなり，最大でメタマテリアル吸収体を装荷しない場合と比べて10倍以上の温度差が発生することを確認した．そして，トータルの電力密度として $1.09\ \text{mW}/\text{cm}^2$ の電力密度を得る事に成功した．

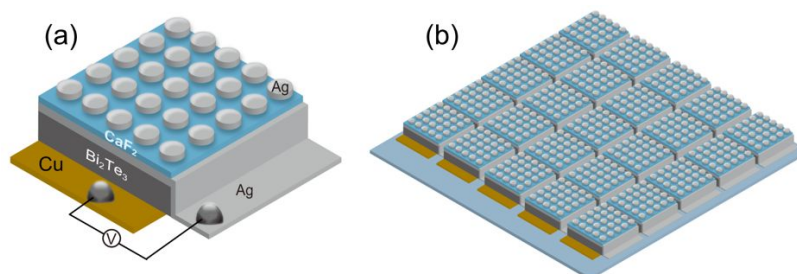


図3 銀ナノパッチアレイ構造を用いた赤外メタマテリアル吸収体を装荷した熱電変換素子．

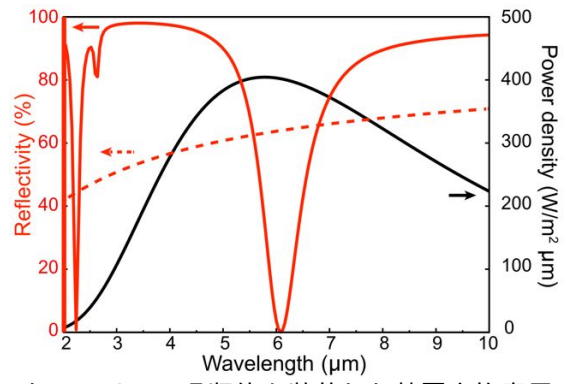


図4 赤外メタマテリアル吸収体を装荷した熱電変換素子の発電特性。

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計2件（うち査読付論文 2件/うち国際共著 0件/うちオープンアクセス 1件）

1. 著者名 Shohei Katsumata, Takuo Tanaka, and Wakana Kubo	4. 巻 29
2. 論文標題 Metamaterial perfect absorber simulations for intensifying thermal gradient across a thermoelectric device	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Optics Express	6. 最初と最後の頁 16396-164065
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1364/OE.418814	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている（また、その予定である）	国際共著 -

1. 著者名 Akihiro Takezawa, Xiaopeng Zhang, Takuo Tanaka, and Mitsuru Kitamura	4. 巻 34
2. 論文標題 Topology optimization of a porous unit cell in a fluid flow considering Forchheimer drag	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 International Journal of Computational Fluid Dynamics	6. 最初と最後の頁 50-60
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1080/10618562.2019.1705968	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

〔学会発表〕 計6件（うち招待講演 5件/うち国際学会 4件）

1. 発表者名 田中拓男
2. 発表標題 メタマテリアル吸収体と高感度分光法への応用
3. 学会等名 第241回 有機エレクトロニクス材料研究会（招待講演）
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 田中拓男
2. 発表標題 メタマテリアル吸収体と高感度分光技術
3. 学会等名 分子科学研究所 先端光科学研究分野勉強会（招待講演）
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Takuo Tanaka
2. 発表標題 Metamaterial Absorber with Nanofluidic Channel for Attomole Nanoconfined Molecular Detection
3. 学会等名 2019 MRS Spring Meeting & Exhibit (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Takuo Tanaka
2. 発表標題 Metamaterials-enhanced ultra-sensitive vibrational spectroscopy using polarization, nanofluidics, and chirality
3. 学会等名 The 9th International Conference on Surface Plasmon Photonics (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Takuo Tanaka
2. 発表標題 Plasmon assisted improvement of figure of merit of magneto-optical Kerr effect and magnetic anisotropy in Au/Co/Au multilayered nanorectangular array structures
3. 学会等名 The 10th International Conference on Metamaterials, Photonic Crystals and Plasmonics (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Takuo Tanaka
2. 発表標題 Metamaterial absorber for ultrasensitive spectroscopy
3. 学会等名 Optics and Photonics Congress 2019 OSK-OSA-OSJ Joint Symposia (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

-

6. 研究組織

	氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
研究 分担 者	竹澤 晃弘 (Takezawa Akihiro) (10452608)	広島大学・工学研究科・准教授 (15401)	

7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計0件

8. 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関
---------	---------