金属纳米结构波导激发表面等离子体的光学特性

高兴宇¹ 宁黎华²

(¹桂林电子科技大学机电工程学院光机电一体化研究所,广西 桂林 541004 ²桂林电子科技大学数学与计算科学学院,广西 桂林 541004

摘要 先后在脉冲平面波和环形高数值孔径聚焦倏逝场两种不同的入射场条件下,使用时域有限差分(FDTD)方 法对金属平行纳米棒结构和U型纳米结构的表面等离子体(SPs)激发特性进行了仿真研究。在脉冲平面波入射条 件下,发现两种纳米结构在可见光波段具有相同的表面等离子体共振(SPR)激发波长。在此波长的线偏振光环形 聚焦倏逝场中对这两纳米结构激发 SPs的特性进行了仿真。结果表明,U型纳米结构具有最佳的局域场增强和远 场传导能力,可构成等离子体光镊用以捕获纳米粒子。

关键词 表面光学;远场传导;时域有限差分方法;表面等离子体;纳米结构波导 中图分类号 O436 **文献标识码** A **doi**: 10.3788/LOP48.042401

Optical Properties of Surface Plasmons Excited by Metallic Nanostructure Waveguides

Gao Xingyu¹ Ning Lihua²

 ¹ Institute of Opto-Mechatronics, School of Mechanical & Electrical Engineering, Guilin University of Electronic Technology, Guilin, Guangxi 541004, China
² School of Mathematics and Computational Science, Guilin University of Electronic Technology, Guilin, Guangxi 541004, China

Abstract The excitation properties of the surface plasmons (SPs) excited by the metallic parallel-nanorod and U-shaped nanostructures are simulated under the illumination field conditions of pulse plane wave and circular high numerical aperture focal evanescent field using the finite difference time domain (FDTD) method. Under the illumination of pulse plane wave, the two nanostructures present the same surface plasmon resonance (SPR) wavelength in the visible range. After that, we simulate the excitation properties of SPs excited by the two nanostructures in the fields of the circular high numerical aperture focal evanescent beam with the same SPR wavelength. The simulation results indicate that the U-shaped nanostructure performs the best local field enhancement and far field transmission ability, which can be used to construct a plasmonic tweezer for trapping nanoparticles.

Key words optics at surfaces; far field transmission; finite difference time domain; surface plasmons; nanostructure waveguide

OCIS codes 240.6680; 310.6628; 180.4243; 310.2790

1 引 言

表面等离子体(SPs)是一种由入射光在金属表面激发的近场波^[1],具有场强增强、光场分布高度局域化和可沿金属表面传导的特点。近些年来随着对 SPs 研究的不断深入,对 SPs 的光学特性的研究及其在纳米光镊、超高密度光存储、生物传感、超分辨率成像和纳米光刻等领域的应用已经非常广泛^[2~7]。纳米棒是激发 SPs 的主要载体之一,已经有研究证明单个纳米棒的激发 SPs 的场增强与分布特性取决于入射波的偏振态和纳米棒的长宽比^[8]。对于平行纳米棒和 U 型纳米结构,由单个纳米棒激发的 SPs 在两个纳米棒之间耦

收稿日期: 2010-12-06; 收到修改稿日期: 2010-12-15

基金项目: 广西制造系统与先进制造技术重点实验室开放课题(桂科能 07109008_026_K)资助课题。

作者简介:高兴宇(1981—),男,博士,讲师,主要从事近场光学及三维超分辨率成像等方面的研究。

E-mail: gxy1981@guet.edu.cn

合,产生的 SPs 激发光谱与该纳米结构的几何尺寸有关,如纳米棒的长度、直径和间距等,其激发 SPs 的规 律和特性比单纳米棒更加复杂[9]。这两种基于纳米棒的波导可以看作为同类纳米结构,对二者的光学特性 的研究可以更深入地揭示纳米结构与 SPs 激发特性之间的关系。在大多数关于纳米棒的时域有限差分 (FDTD)方法仿真研究中都是直接用单偏振平面波入射到纳米棒结构上来激发 SPs,这样做的优点是 SPs 可以通过二维仿真研究,节省时间和内存空间。而在高数值孔径聚焦倏逝场中,三维光场在纳米棒结构中激 发 SPs 的特性比单偏振光入射条件下复杂很多,并且随着纳米棒结构的不同形式以及其在倏逝场内放置方 向的改变会产生超分辨率聚焦点等特殊光学现象^[10]。因此,对聚焦倏逝场中纳米结构的光学特性及其应用 的研究已经成为 SPs 的一个新的研究热点。

本文对脉冲平面波入射条件下上述两种纳米结构的瞬态 SPs 激发响应特性进行仿真,对其光谱特性进 行了比较、分析和讨论。并利用 520 nm 波长处两种结构都有 SPs 激发峰这一特点,用 520 nm 波长的线偏 振光产生环形高数值孔径聚焦倏逝场,对在这两种纳米结构在环形聚焦倏逝场中激发 SPs 的特性进行了 仿真。

2 仿真建模与脉冲瞬态 SPs 场增强系数光谱

金属的相对介电系数 ε_m 可以用德鲁德-洛伦兹(Drude-Lorentz)模型来表示^[11]

$$\epsilon_{\rm m}(\omega) = \epsilon_{\infty} + \frac{\omega_{\rm d}^2}{j\omega\gamma_{\rm d} - \omega^2} + \frac{\Delta\epsilon\omega_{\rm L}^2}{\omega_{\rm L}^2 + 2j\omega\delta_{\rm L} - \omega^2}, \qquad (1)$$

式中 ϵ_{∞} 为频率无限大时的相对介电系数, ω_{ℓ} 为德鲁德等离子体频率, γ_{ℓ} 为电子碰撞几率, $\Delta \epsilon$ 是无限大频率 和零频率的相对介电系数之差, ω_1 为洛伦兹电偶极子振荡频率, δ_1 为衰减系数。本文采用银作为色散介质, 其德鲁德-洛伦兹模型参数取为: $\epsilon_{\infty} = 4.6$, $\omega_{d} = 1.401 \times 10^{16}$ Hz, $\gamma_{d} = 4.5371 \times 10^{13}$ Hz, $\Delta \epsilon = 3.428$, $\omega_{L} = 1.401 \times 10^{16}$ Hz, $\gamma_{d} = 4.5371 \times 10^{13}$ Hz, $\Delta \epsilon = 3.428$, $\omega_{L} = 1.401 \times 10^{16}$ Hz, $\gamma_{d} = 4.5371 \times 10^{13}$ Hz, $\Delta \epsilon = 3.428$, $\omega_{L} = 1.401 \times 10^{16}$ Hz, $\gamma_{d} = 4.5371 \times 10^{13}$ Hz, $\Delta \epsilon = 3.428$, $\omega_{L} = 1.401 \times 10^{16}$ Hz, $\gamma_{d} = 4.5371 \times 10^{13}$ Hz, $\Delta \epsilon = 3.428$, $\omega_{L} = 1.401 \times 10^{16}$ Hz, $\gamma_{d} = 4.5371 \times 10^{13}$ Hz, $\Delta \epsilon = 3.428$, $\omega_{L} = 1.401 \times 10^{16}$ Hz, $\gamma_{d} = 4.5371 \times 10^{13}$ Hz, $\Delta \epsilon = 3.428$, $\omega_{L} = 1.401 \times 10^{16}$ Hz, $\gamma_{d} = 4.5371 \times 10^{13}$ Hz, $\Delta \epsilon = 3.428$, $\omega_{L} = 1.401 \times 10^{16}$ Hz, $\gamma_{d} = 4.5371 \times 10^{13}$ Hz, $\Delta \epsilon = 3.428$, $\omega_{L} = 1.401 \times 10^{16}$ Hz, $\Delta \epsilon = 3.428$, $\omega_{L} = 1.401 \times 10^{16}$ Hz, $\Delta \epsilon = 3.428$, $\omega_{L} = 1.401 \times 10^{16}$ Hz, $\omega_{L} = 1.401 \times 10^{16}$ 2.1437×10¹⁶ Hz,δ_L=1.824×10¹⁸ Hz。使用分段线性递推卷积(PLRC)^[12,13]方法将德鲁德-洛伦兹模型实 现于 FDTD 程序中。平行纳米棒和 U 型纳米结构简图如图 1(a),(b)所示,图中各尺寸设置为 D=60 nm, H=1 µm 和 L=60 nm。为了研究在脉冲平面波入射条件下这两种纳米波导结构的瞬态 SPs 激发响应特 性,这里采用中心波长为400 nm,x 方向偏振的调制高斯脉冲 TE 波为入射波,频谱范围从300 nm 到 2.5 μ m。二维 FDTD 仿真即可满足计算精度要求,空间网格间隔为 $\Delta x = \Delta y = 2$ nm,计算运行步数为 1000 步。在两种结构中,SPs场增强系数定义为

$$\beta = \frac{|E_{\rm SP}|}{|E_{\rm in}|},\tag{2}$$

式中 $|E_{sp}|$ 为波导激发的 SPs 的电场强度, $|E_{in}|$ 为入射波的电场强度。当脉冲从上至下通过双纳米棒波导 结构时,E. 在金属表面会激发 SPs,而两边竖直纳米棒产生的 SPs 会在中间线上耦合,因此中间线的场增强 系数可以代表整体纳米棒结构所激发的 SPs 的场增强能力。

由图 1(c) 所示, 从可见光到近红外波段, 平行纳米 棒结构有4个表面等离子体共振(SPR)峰值,分别位于 420,520,750 和 1490 nm, 而 U 型纳米结构具有 5 个 SPR 峰值,分别位于 420,520,780,1060 和1790 nm,这 说明这两种纳米结构都具有多个共振特征频率。在近红 外波段 U 型纳米结构的 SPR 峰相对于平行纳米棒的 SPR 峰发生了红移,且数量增加了一个。在 520 nm 处 两种结构的共振峰值强度在整个可见光波段都是最强 的,且平行纳米棒波导的场强比 U 型纳米结构略强;但 在其他峰值波长处,U型纳米结构的场强却比平行纳米 棒结构明显增强。由此可见随着入射光波长的变化,这 Fig.1 Schemes of parallel-nanorod (a) and U-shaped 两种结构的 SPR 场增强能力也发生了变化。导致这种 变化的主要原因是 U 型纳米结构增加了横向纳米棒部



图 1 平行纳米棒(a)和 U 型约束棒(b)的结构简图及其 脉冲瞬态 SPs 的场增强系数光谱(c)

nanorods (b) structures and their pulse transient SPs field enhancement coefficients (c)

分,它有三个作用:第一是连接两个纵向纳米棒,使纵向纳米棒上激发的横向 SPs 通过它桥接传播,发生 SPs 的干涉;第二是入射光垂直入射到横向纳米棒上会直接激发横向纳米棒上的纵向 SPs,使得 U 型纳米结构 比平行纳米棒增加了一个纵向 SPR 模式^[7],因此多了一个共振峰值;第三是有部分入射光会被反射。前两 种作用使总的 SPs 场强增强,第三种会削弱 SPs 的强度。由图 1(c)中可见峰值场增强系数都大于 1,所以前 两种作用占主导地位。U 型纳米结构被横向纳米棒反射的波在向上传播时还会与纵向纳米棒作用激发 SPs,所以它的各共振峰处场增强系数都比平行纳米棒结构大。由上述分析可知,SPs 激发光谱与纳米结构 的形态有关,在 U 型纳米结构中横向纳米棒的加入对 SPs 激发的影响起主导作用。

3 环形聚焦倏逝场激发 SPs 的传播

环形入射的聚焦光束在满足全反射条件下可以在两种介质表面产生倏逝场^[14],而倏逝场由于在表面传播方向上的波矢大于入射光的波矢,常用来激发金属纳米结构的 SPs。将上述两种纳米结构波导垂直放置于两种介质的分界面上时,由聚焦倏逝场激发的 SPs 会在纳米棒波导表面激发和传播。接下来将仿真这一现象并讨论其物理机制。线偏振光高数值孔径聚焦光束入射场可以由德拜矢量理论计算^[10,15]。由于环形聚焦倏逝场为三维光场,因此接下来的仿真采用三维 FDTD 程序进行计算。具体仿真参数为:数值孔径 NA=1.65,环形光束相对直径 $\epsilon=0.606$,上方介质折射率 $n_1=1.78$,下方介质折射率 $n_2=1.0$,三维空间网格间隔 $\Delta x = \Delta y = \Delta z = 4.68$ nm,三维空间网格数为 400×400×400,入射波长为 SPR 波长 520 nm,运行步数 4000 步。最后得到两种结构的电场场强如图 2 和 3 所示。由于 E_y 分量比 E_x 和 E_z 分量小一个数量级, 对总场强的贡献极小,因此图中只给出了总电场 $E_i E_x$ 分量和 E_z 分量的场强分布。

由图 2 和图 3 可以观察到,这两种波导结构在 SPR 峰值 520 nm 波长的聚焦倏逝场入射下,激发的 SPs 场呈周期性局域近场分布与远距离传播现象。在没有纳米棒波导结构的情况下,介质 n₂ 中的倏逝场将会以 指数规律沿 z 轴方向衰减,传播长度在 100 nm 左右。由于倏逝场不能传播能量,入射光的能量通过全反射 返回原光路中,所以在两种介质分界面的近场范围内的近场波无法自然传播到远场,这就是无法用普通远场



图 2 聚焦倏逝场在平行纳米棒结构激发 SPs 场强分布。(a)~(c)xz 平面内,(d)~(f)yz 平面内 Fig. 2 Intensity distributions of SPs excited by the parallel-nanorod structure under the evanescent focal beam illumination. (a)~(c) in the xz plane, (d)~(f) in the yz plane

光学成像方法观察到超过衍射极限的物体细节的原因。然而,当双纳米棒结构加到界面上时,聚焦倏逝场的 场强分布被纳米棒波导结构激发的 SPs 进行调制,场强也由于 SPs 的共振作用而大大增强。图 2(a)和 图 3(a)所示的两种结构在 xz 平面内的总电场场强分布可以清楚看到,由于两个竖直纳米棒激发的 SPs 在 内侧耦合,使得内侧的场强更强;而在图 2(d)和图 3(d)所示的两种结构在 yz 平面内的 SPs 耦合总电场场强 分布可以看到沿着波导结构中心线形成的节形光场分布,聚焦倏逝场就以这样的方式被传播到距离焦点区 域 1 μ m 以外的区域。图 2(b)和图 3(b)中两种纳米结构激发的 SPs 的 E_x 分量沿金属棒外表面传播,并且 在竖直纳米棒的垂直于 E_x 分量的表面激发了增强局域倏逝场;而图 2(c)和图 3(c)显示的 SPs 的 E_z 分量主 要在金属棒内部传播,并且在垂直于 E_z 分量的纳米结构的上下端面上激发了增强局域倏逝场,这说明 SPs 主要在垂直于该偏振电场分量的表面产生增强激发效应。由于是沿 x 方向的线偏振光的聚焦倏逝场,所以 E_x 分量的场强大于 E_z 分量,合成后的总场强近似于 E_x 分量的场强分布。



图 3 聚焦倏逝场在 U 型纳米结构激发 SPs 场强分布。(a)~(c)xz 平面内,(d)~(f)yz 平面内 Fig. 3 Intensity distributions of SPs excited by the U-shaped nanostructure under the evanescent focal beam illumination. (a)~(c) in the xz plane, (d)~(f) in the yz plane

在图 1(d)中 520 nm 峰值处,平行纳米棒结构的激发强度比 U 型纳米结构高,但是在聚焦倏逝场条件下,它们的场强大小关系发生了变化。在图 2(a)中所示,平行纳米棒与分界面连接的端面边缘处产生了非常强的场强,并且衰减非常快。这是由于 SPs 在金属结构的尖锐处中激发密度最大,沿着纳米棒圆柱端面圆周有很强的场强,使得大部分 SPs 的能量都集中到这里,而向下传播的 SPs 相对较少。在图 3(a)中的 U 型纳米结构中,它的上端面和平行纳米棒结构分布类似,然而当 SPs 传播到下端时,由于有横向纳米棒的连接和反射作用,使得 SPs 又向上传播,从而使往返的 SPs 干涉而形成驻波,其空间分布周期由此大约为平行纳米棒的一半。U 型纳米结构与上方的介质分界面一起构成了一个纳米微腔,聚焦倏逝场的能量在此微腔中反复振荡叠加,因此其内部耦合场光强约为平行纳米棒结构的 2 倍。以上分析说明:虽然这两种纳米结构都可以将焦点区倏逝场以 SPs 形式远距离传播,但是其 SPs 激发的强度及其传播能力却不同。该现象可以指导我们利用 U 型纳米结构来将聚焦倏逝场在保持足够强度的条件下进行远距离传播,这在近场纳米波导、纳米传感和纳米光镊技术中有潜在的应用价值。

4 结 论

用 FDTD 方法,对平行纳米棒结构和 U 型纳米结构波导在脉冲平面波入射和环形高数值孔径聚焦倏逝 场入射情况下激发 SPs 的光学特性及其物理机制进行了系统的研究。由分析可以得出,这类基于纳米棒结 构的波导可以将聚焦倏逝场以 SPs 的节形共振场模式沿金属表面传导,且 U 型纳米结构的光场增强和远距 离传导能力强于平行纳米棒结构。在纳米光镊技术中可以应用 U 型纳米结构构成等离子体纳米光镊,利用 其内部耦合的高度局域化增强电磁场形成纳米光阱来捕获纳米粒子。其主要优点有:1)纳米波导表面产生 的 SPs 使局域场增强,且沿垂直金属表面方向衰减很快,这就使得沿金属表面光场强度的梯度大大增加,满 足了纳米光镊产生光压所需的场强梯度条件;2)焦点附近的近场波通过波导结构可以远距离传播,从而使纳 米光镊的作用范围不仅仅局限于传统的焦点区域,可以达到更远的空间区域,例如在具有一定深度的空间内 捕获纳米粒子的情况中。将本文讨论的纳米棒波导结构应用于纳米光镊技术中将会显著提高光镊捕获效率 和适用范围。

参考文献

- 1 William L. Barnes, Alain Dereux, Thomas W. Ebbesen. Surface plasmon subwavelength optics [J]. Nature, 2003, 424(6950): 824~830
- 2 Peter J. Reece. Plasmonics: Finer optical tweezers[J]. Nature Photon., 2008, 2(6): 333~334
- 3 Peter Zijlstra, James W. M. Chon, Min Gu. Five-dimensional optical recording mediated by surface plasmons in gold nanorods[J]. *Nature*, 2009, **459**(7245): 410~413
- 4 Lü Qiang, Huang Dexiu, Yuan Xiuhua et al.. Sensitivity of surface plasmon resonance sensor for different wavelengths[J]. Chinese J. Lasers, 2007, 34(7): 972~976
- 吕 强,黄德修,元秀华等.不同波长下表面等离子体共振传感器的灵敏度[J].中国激光,2007,34(7):972~976
- 5 Yuanfong Chau, Dinping Tsai, Guangwei Hu *et al.*. Subwavelength optical imaging throught a silver nanorod[J]. *Opt.* Eng., 2007, **46**(3): 039701
- 6 Li Ying, Zhong Jingang, Zhang Yonglin. Fingerprint image aequisition based on surface plasmon resonance imaging[J]. *Chinese J. Lasers*, 2006, **33**(8): 1143~1147

李 莹,钟金刚,张永林. 基于表面等离子体共振成像的指纹采集[J]. 中国激光, 2006, 33(8): 1143~1147

- 7 Zhao Chengqiang, Xu Wendong, Hong Xiaogang *et al.*. Probe inducing surface plasmon resonance nanolithographic system [J]. Acta Optica Sinica, 2009, **29**(2): 473~477
- 赵成强,徐文东,洪小刚等.探针诱导表面等离子体共振纳米光刻系统[J].光学学报,2009,29(2):473~477
- 8 Yuan-Fong Chao, Min Wei Chen, Din Ping Tsai. Three-dimensional analysis of surface plasmon resonance models on a gold nanorod[J]. *Appl. Opt.*, 2009, **48**(3): 617~622
- 9 Zhongyue Zhang, Yiping Zhao. Optical properties of U-shaped Ag nanostructures [J]. J. Phys: Condens. Matter, 2008, 20(34): 345223
- 10 Xingyu Gao, Xiaosong Gan. Modulation of evanescent focus by localized surface plasmons waveguide[J]. Opt. Express, 2009, 17(25): 22726~22734
- 11 A. Taflove, S. C. Hagness. Computational Electrodynamics: The Finite-Difference Time-Domain Method[M]. 3rd ed, Norwood, MA: Artech House, 2005. 354~355
- 12 David F. Kelley, Raymond J. Luebbers. Piecewise linear recursive convolution for dispersive media using FDTD[J]. IEEE Trans. Antennas Propag., 1996, 44(6): 792~797
- 13 Jun Shibayama, Taichi Takeuchi, Naoki Goto *et al.*. Numerical investigation of a kretschmann-type surface plasmon resonance waveguide sensor[J]. J. Lightwave Technol., 2007, 25(9): 2605~2611
- 14 James W. M. Chon, Min Gu. Scanning total internal reflection fluorescence microscopy under one-photon and two-photon excitation: imaging formation[J]. *Appl. Opt.*, 2004, **43**(5): 1063~1071
- 15 Gao Xingyu, Liu Shugui. Study on focusing of radially polarized beam by high numerical aperture objective[J]. Laser & Optoelectron. Progress, 2010, 47(10): 101801

高兴宇,刘书桂.径向偏振光高数值孔径物镜聚焦的研究[J].激光与光电子学进展,2010,47(10):101801

042401 - 5