文章编号：0253-2239(2009)05-1379-05

亚波长银粒子/孔的光谐振特性

杨晶晶[1,2] 黄 铭[1] 吴中元[1] 宗 容[1] 彭金辉[2]

([1] 云南大学信息学院，云南 昆明 650091；[2] 昆明理工大学材料与冶金工程学院，云南 昆明 650093)

摘要 基于异质材料的有效介电常数理论，仿真了二维亚波长银粒子/孔的等效复介电常数，证实了亚波长金属银粒子/孔的光谐振特性。对于在介质内放置银粒子的模型，当光频率高于银的等离子体频率时，异质材料的等效介电常数的实部为负；在等离子体频率附近，等效介电常数的虚部存在谐振峰，粒子增大，谐振峰红移；在谐振频率点，银粒子周围局域场最大。在金属银上开孔，并填充不同介电常数的材料时，也存在类似的效应。并且孔内填充材料的介电常数增大，谐振峰红移，在相同介电常数的条件下，孔增大，谐振峰蓝移。光谐振现象与金属粒子/孔的形状有关，因此，光与亚波长金属粒子/孔相互作用的机理为等离子体模和谐振模，异质材料的有效介电常数理论是研究亚波长金属粒子/孔异常光增强现象的有力工具。

关键词 物理光学；光增强；有限元法；光谐振

中图分类号 O436 **文献标识码** A **doi**：10.3788/AOS2002905.1379

Optical Resonance for Subwavelength Ag Particle/Hole

Yang Jingjing[1,2] Huang Ming[1] Wu Zhongyuan[1] Zong Rong[1] Peng Jinghui[2]

([1] *School of Information Science and Engineering, Yunnan University, Kunming, Yunnan* 650091, *China*
[2] *Faculty of Materials and Metallurgical Engineering, Kunming University of Science and Technology, Kunming, Yunnan* 650093, *China*)

Abstract Based on effective permittivity theory of heterogeneous material, the effective complex permittivity of two-dimensional subwavelength Ag particle/hole has been simulated. The optical resonance properties of Ag particle/hole are verified. For the Ag particle-dielectric composite structure, the effective permittivity has a negative real part when the optical frequency is larger than the plasmon frequency of Ag. The imaginary part of the effective permittivity shows a resonance near the plasmon frequency of Ag, and the resonance peak displays a red shift with the increase of radius of Ag particle. By calculating the electric field distribution, it is found that optical resonance results in very strong local field enhancements around the Ag particle at the resonant frequency. Similar phenomena are observed for the structure of Ag block with a single hole filled with different materials, and resonant peak shows red shift with the increase of permittivity in the hole, while the resonant peak is blue-shifted with the increase of radius of the hole filled with the same material. In addition, the optical resonance can be controlled by adjusting the size and geometry of the particle/hole. Therefore, the mechanisms for the interaction of light with particle/hole are surface plasmon mode and resonant mode, and the effective-medium theory is a powerful tool for exploring the intriguing enhanced optical transmission phenomena.

Key words physical optics; optical enhancement; finite element method; optical resonance

1 引 言

自 1998 年 Ebbesen 等[1]首次报道光在二维亚波长金属小孔阵列上的异常穿透现象以来，光与金属表面亚波长小孔及金属粒子相互作用的机理成为人们研究的热点。迄今为止，已提出了包括表面等离子体模[2,3]和共振模[4,5]在内的多种理论模型。

收稿日期：2008-08-26；**收到修改稿日期**：2008-10-15

基金项目：国家自然科学基金重点项目(50734007)、国家 973 计划(2007CB613606)、教育部重点项目(208133)、云南省自然科学基金(2007F005M)和云南省教育厅基金(07Z10875)资助课题。

作者简介：杨晶晶(1983—)，女，博士研究生，主要从事电磁场数值计算方面的研究。E-mail：yjj8307@126.com

导师简介：彭金辉(1964—)，男，教授，博士生导师，主要从事电磁波与材料相互作用等方面的研究。
E-mail：huangming@ynu.edu.cn(通信联系人)

然而，人们仍然不能完全理解 Ebbesen 效应。最近，Lalanne 等[6]证明表面等离子体模和爬行模是驱动这种相互作用的原因，并且在可见光频段表面等离子体模起主要作用。Genet 等[7]综述了光与小孔相互作用的研究进展，并将这种光传输增强现象归结为光与金属表面电子的谐振相互作用。这种相互作用受孔的形状和大小限制。García de Abajo[8]分析了光与二维周期粒子阵和小孔阵的相互作用，并证明粒子阵和导体表面孔阵具有相同的特征。Matsui 等[9]实验证明，与周期阵比较，非周期阵也能获得类似的传输谐振现象。虽然这种光传输增强现象的机理存在争议，然而这种迷人的效应打开了从亚波长光学和光电子学到传感器和超材料领域的新应用空间[10~18]。

本文基于异质材料有效介电常数理论计算了亚波长金属银粒子/小孔模型的等效介电常数和光谐振特性。结果表明，金属银粒子/小孔的光谐振特性与金属粒子/孔的大小、形状和频率有关，并且介质材料介电常数增大时，其谐振峰红移。异质材料的有效介电常数理论是研究亚波长金属粒子/孔的异常光增强现象的有力工具。

2 计算模型

图 1 为计算模型，模型中圆柱形填充物沿 z 方向放置，长度为 b，上下极板电压分别为 φ_1 和 φ_2，板间的距离为 c，极板面积为 $S=a\times b$，模型左右边界条件为$\partial\varphi/\partial n=0$。从电路理论的观点看，平行板电容器模型内存储的电能为

$$W_c=\frac{1}{2}\varepsilon_0\varepsilon_e\frac{S}{c}(\varphi_1-\varphi_2)^2, \tag{1}$$

式中 $\varepsilon_0=8.85\times10^{-12}$ F/m；ε_e 为平行板间填充材料的等效复介电常数；W_c 为由电路理论计算得到的电

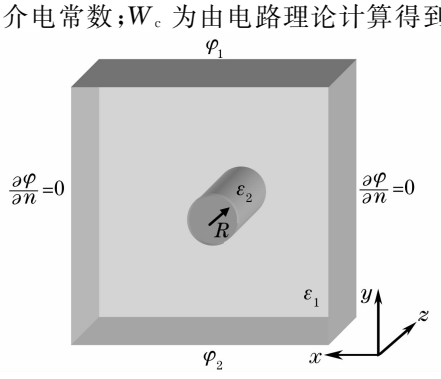

图 1 亚波长银粒子/孔仿真模型

Fig. 1 Simulation model of subwavelength Ag particle/hole

容器内的储能。从电磁场理论的观点看，由于平行板间填充材料的影响，电容器内的电位分布 φ 不均匀，电场分布 $\boldsymbol{E}=-\nabla\varphi$ 亦不均匀，电容器内电位分布 φ 满足 Laplace 方程：

$$\nabla\cdot(\varepsilon\nabla\varphi)=0, \tag{2}$$

式中 ε 为电容器内材料的介电常数分布。因此，求解(2)式，即可得出电容器内材料存储的电能：

$$W_F=\frac{1}{2}\int_v(\varepsilon_0\varepsilon_1E_1^2+\varepsilon_0\varepsilon_2E_2^2)\mathrm{d}v, \tag{3}$$

上式中，E_1、E_2 分别对应图 1 模型中材料 ε_1 和 ε_2 内的电场分布；v 为平行板电容器的体积；W_F 为由电磁场理论计算得到的储能。令 $W_C=W_F$，则电容器内填充材料的等效复介电常数 ε_e 为

$$\varepsilon_e=c\int_v(\varepsilon_1E_1^2+\varepsilon_2E_2^2)\mathrm{d}v/S(\varphi_1-\varphi_2)^2=$$

$$c\int_{s'}(\varepsilon_1E_1^2+\varepsilon_2E_2^2)(b\mathrm{d}s')/(ab)(\varphi_1-\varphi_2)^2. \tag{4}$$

假设沿 z 方向材料特性不变，$\varphi_1=1$ V，$\varphi_2=0$ V，$c=1$，$a=c$，则(4)式的计算简化为

$$\varepsilon_e=\int_{s'}(\varepsilon_1E_1^2+\varepsilon_2E_2^2)\mathrm{d}s', \tag{5}$$

式中 $s'=a\times c$，$\mathrm{d}s'$ 为 xy 平面内面积元，本文采用软件 COMSOL 求解(5)式，计算得到模型的等效介电常数。

为了研究亚波长银粒子/孔的光谐振特性，本文分别仿真了频率、面积比($A=\pi R^2/ac$)、介质材料介电常数和形状对银粒子模型(基底 ε_1 为介质材料，填充物 ε_2 为银)和小孔模型(基底为银，填充物为介质材料)等效介电常数及场强分布的影响。金属银的介电常数为 $\varepsilon(\omega)=1-\omega_p^2/[\omega(\omega+\mathrm{i}\Gamma)]$，其中 ω 为角频率，$\omega_p=1.236\times10^{16}$ S^{-1}为金属银的等离子体频率，$\Gamma=1.3\times10^{14}$ S^{-1}为碰撞频率。

3 结果与讨论

3.1 银粒子模型

当银粒子的大小不变时(面积比为 0.01)，基底材料介电常数对银粒子模型等效介电常数的影响见图 2 所示。从图中可以看出，基底材料介电常数增大，银粒子模型等效介电常数实部增大，在谐振频率点处等效介电常实部经历了从小到最大、从最大到负、从负到正的变化，且谐振频率发生了红移；银粒子模型的等效介电常数虚部出现谐振峰，基底材料

的介电常数越大，谐振峰强度越大，银粒子内场强越大。有趣的是，在谐振频率和金属银的等离子体频率之间，异质材料等效介电常数的实部出现负数，基底材料的介电常数越小，谐振频率和等离子体频率越靠近。

当基底材料介电常数为 1，银粒子面积比增大时，银粒子模型等效介电常数与频率的关系见图 3 所示。图 3 表明面积比增大，银粒子模型的等效介电常数实部和虚部都增大，并且谐振峰发生了红移，其变化趋势与图 2 相似。随着银粒子半径的增大，谐振模式发生了改变，当银粒子面积比为 0.01、0.04、0.16 时，谐振频率点的电场分布分别对应图 3(b)中插图Ⅰ，Ⅱ，Ⅲ。从图中可以看出，当银粒子面积比小于 0.01 时，最大电场强度分布于银粒子内部，随着面积比增大，最大电场分布逐渐集中于银粒子表面上下两侧。

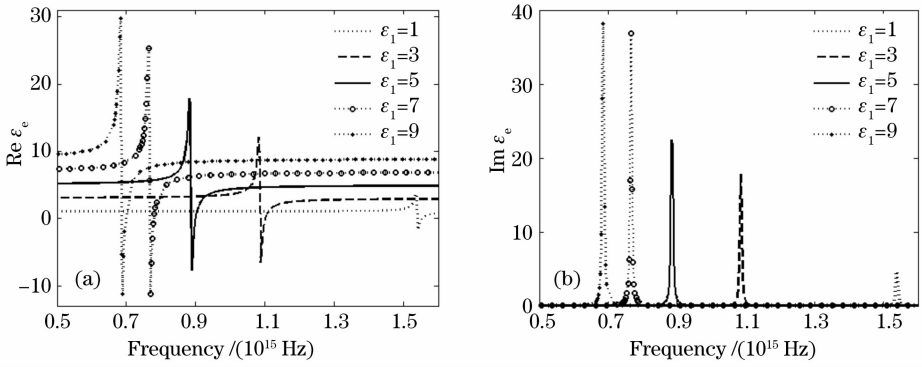

图 2　基底材料介电常数对银粒子模型等效介电常数的影响（A=0.01）。(a) 介电常数实部；(b)介电常数虚部

Fig. 2　Influence of the permittivity of the surrounding host matrix on the effective permittivity of the Ag particle-dielectric composite structure (A=0.01). (a) real part; (b) Imaginary part

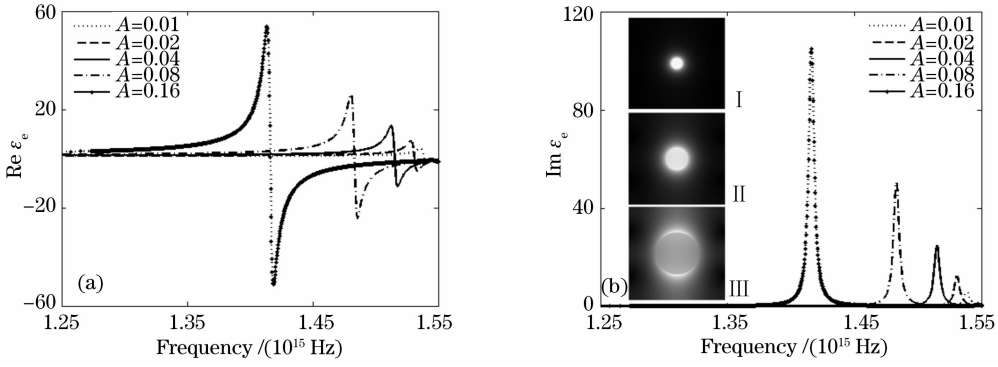

图 3　银粒子面积比对模型等效介电常数的影响(ε_1=1)。(a)实部；(b)虚部，插图Ⅰ：A=0.01，Ⅱ：A=0.04，Ⅲ：A=0.16

Fig. 3　Influence of the surface area fraction of the Ag particle on the effective permittivity of the Ag particle-dielectric composite structure (ε_1=1). (a) real part; (b) imaginary part. Inset Ⅰ: A=0.01, Ⅱ: A=0.04, Ⅲ: A=0.16

3.2　小孔模型

圆形小孔尺寸固定(面积比为 0.01)时，孔内填充材料介电常数对小孔模型等效介电常数的影响见图 4 所示。图 4(a)表明，孔内填充材料介电常数增大，小孔模型的等效介电常数实部增大，小于谐振频率时，等效介电常数实部为正，且谐振频率红移；大于谐振频率时，等效介电常数的实部几乎全部为负数，这主要是受到金属银复介电常数实部为负的影响。图 4(b)表明，小孔模型的等效介电常数虚部出现谐振峰，孔内填充材料的介电常数增大，谐振峰强度增大，并发生红移。参考文献[8]中，作者研究了亚波长单孔内填充介质对光增强特性的影响，并发现孔内填充材料介电常数增大，光传输增强，谐振峰红移，图 4 所示仿真结果与之趋势一致。这表明有效介电常数理论可用于解释光谐振增强现象。

当孔内填充材料介电常数为 1，小孔面积比增大时，小孔模型等效介电常数与频率的关系见图 5 所示。仿真结果表明，面积比增大，小孔模型的等效介电常数实部和虚部都增大，并且谐振峰蓝移，其变化趋势与银粒子模型相反。在相同面积比时，小孔模型电场强度分布与银粒子模型类似。

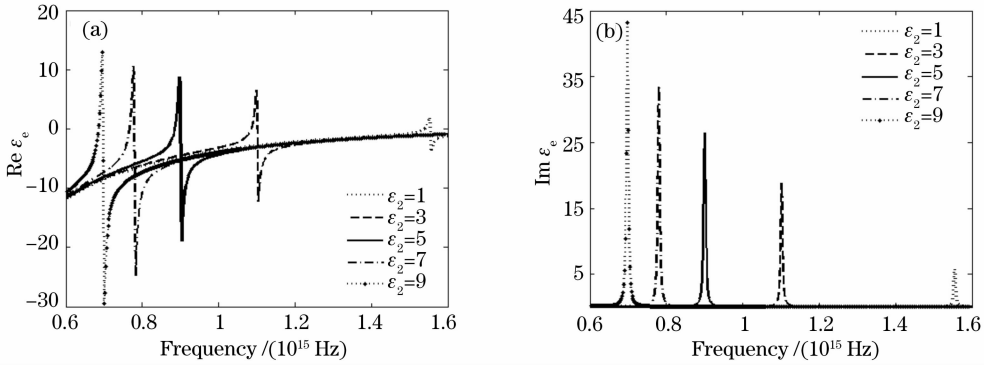

图 4 孔内填充材料介电常数对小孔模型等效介电常数的影响(A=0.01). (a) 实部; (b)虚部

Fig. 4 Influence of the dielectric materials in the hole on the effective permittivity of the structure of Ag block with a single hole (A=0.01). (a) real part; (b) imaginary part

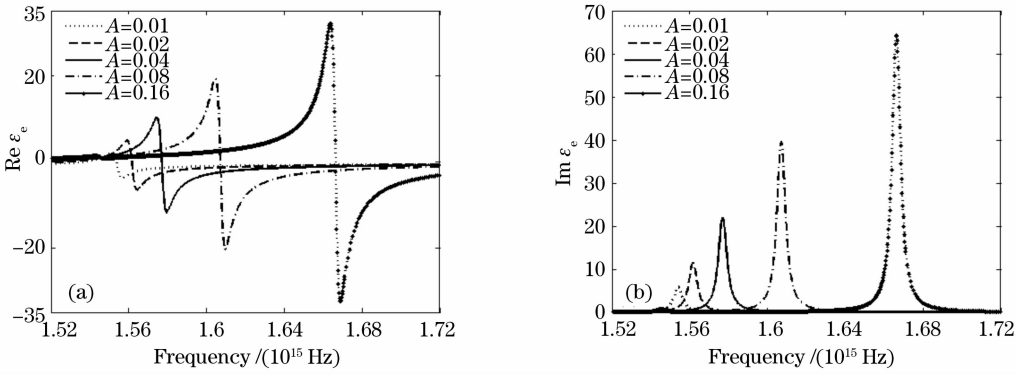

图 5 小孔面积比对等效介电常数的影响(ε_1=1)。(a)实部;(b)虚部

Fig. 5 Influence of the surface fraction of the hole on the effective permittivity of the structure of Ag block with a single hole (ε_1=1). (a) real part; (b) imaginary part

当小孔尺寸固定(面积比为 0.01),孔内填充不同介质材料时,最大电场与频率的关系见图 6 所示。随孔内填充材料介电常数增大,最大电场谐振峰值先增大后减小,即在特定频段内,通过改变孔内填充材料的介电常数能够使光增强现象达到最大。这一仿真结果与参考文献[19]中图 4 采用 FDTD 法计算得到的结果相符。对比图 6 与图 4 可得,光增强现象发生在等效介电常数实部或虚部的谐振频率点。当 ε_2=3,面积比为 0.01 时,谐振峰左侧(6.37×10^{14} Hz),谐振峰(1.1×10^{15} Hz),谐振峰右侧 (1.59×10^{15} Hz)对应的场分布见图 6 中插图所示。从图中可以看出,在谐振频率点最大电场强度分布在小孔内;在谐振频率点前,小孔内电场虽然为最大值,但孔外电场强度极不均匀;在谐振频率点后,孔内场强弱,最大电场分布在小孔外上下两侧。即谐振前后,场模式不同。

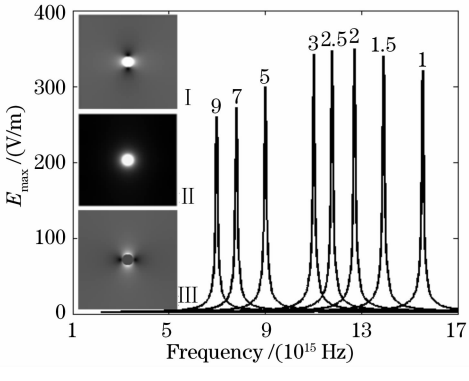

图 6 孔内填充材料介电常数对最大电场强度的影响(A=0.01),图中数字为 ε_2 的值

Fig. 6 Influence of permittivity of the dielectric materials in the hole on the maximal electric field intensity of the structure of Ag block with a single hole (A=0.01). Numbers correspond to different values of ε_2

4 结 论

基于有效介质理论研究了二维银粒子/孔的光谐振现象。结果表明,光与亚波长金属粒子/孔的相互作用受其大小、形状和频率等因素影响。对于二维小孔模型,孔内填充材料的介电常数增大,其等效介电常数增大,谐振峰红移;在特定频段范围内通过

调整孔内填充材料的介电常数可以使电场强度峰值达到最大。上述结果与文献结果趋势一致，有效介电常数理论是研究亚波长金属粒子/孔异常光增强现象的有力工具。今后的研究将致力于三维模型的计算，考虑模型厚度及不均匀性等因素的影响，使模型更精确。

参 考 文 献

1 T. W. Ebbesen, H. J. Lezec, H. F. Ghaemi *et al*.. Extraordinary optical transmission through sub-wavelength hole arrays[J]. *Nature*, 1998, **391**: 667～670

2 W. L. Barnes, A. Dereux, T. W. Ebbesen. Surface plasmon subwavelength optics[J]. *Nature*, 2003, **424**: 824～830

3 P. Andrew, W. L. Barnes. Energy transfer across a metal film mediated by surface plasmon polaritons [J]. *Science*, 2004, **306**(5698): 1002～1005

4 E. Popov, M. Neviere, S. Enoch *et al*.. Theory of light transmission through subwavelength periodic hole arrays [J]. *Phys. Rev. B*, 2000, **62**(23): 16100～16108

5 B. Sturman, E. Podivilov, M. Gorkunov. Eigenmodes for the problem of extraordinary light transmission through subwavelength holes[J]. *EPL*, 2007, **80**: 24002

6 P. Lalanne, J. P. Hugonin. Interaction between optical nano-objects at metallo-dielectric interfaces[J]. *Nature Physics*, 2006, **2**(8): 551～556

7 C. Genet, T. W. Ebbesen. Light in tiny holes[J]. *Nature*, 2007, **445**(7123): 39～46

8 García de Abajo F J. Light scattering by particle and hole arrays [J]. *Rev. Mod. Phys.*, 2007, **79**(4): 1267

9 T. Matsui, A. Agrawal, A. Nahata *et al*.. Transmission resonances through aperiodic arrays of subwavelength apertures [J]. *Nature*, 2007, **446**(7135): 517～521

10 S. I. Bozhevolnyi, V. S. Volkov, E. Devaux *et al*.. Channel plasmon-polariton guiding by subwavelength metal grooves[J]. *Phys. Rev. Lett.*, 2005, **95**: 046802

11 P. Mühlschlegel, H. J. Eisler, O. J. F. Martin *et al*.. Resonant optical antennas[J]. *Science*, 2005, **308**: 1607～1609

12 Y. Alaverdyan, B. Sepúlveda, L. Eurenius *et al*.. Optical antennas based on coupled nanoholes in thin metal films[J]. *Nature Physics*, 2007, **3**: 884～889

13 H. X. Xu, E. J. Bjerneld, M. Käll *et al*.. Spectroscopy of single hemoglobin molecules by surface enhanced raman scattering[J]. *Phys. Rev. Lett.*, 1999, **83**: 4357～4360

14 A. J. Haes, L. Chang, W. L. Klein *et al*.. Detection of a biomarker for alzheimer′s disease from synthetic and clinical samples using a nanoscale optical biosensor[J]. *J. Am. Chem. Soc.*, 2005, **127**(7): 2264～2271

15 T. Rindzevicius, Y. Alaverdyan, A. Dahlin *et al*.. Plasmonic sensing characteristics of single nanometric holes [J]. *Nano Lett.*, 2005, **5**(11): 2335～2339

16 Li Yiyu, Gu Peifu, Li Mingyu *et al*.. Near-field subwavelength imaging in wave-like two-dimensional photonic crystal[J]. *Acta Optica Sinica*, 2006, **26**(9): 1409～1413
厉以宇，顾培夫，李明宇 等. 波状结构二维光子晶体近场亚波长成像的研究[J]. 光学学报, 2006, **26**(9): 1409～1413

17 Zhou Lin, Zhu Yongyuan. Propagation characteristics of surface plasmon polaritons in a metal heterowaveguide array[J]. *Acta Optica Sinica*, 2008, **28**(6): 1047～1050
周　林，朱永元. 金属异质波导阵列中的表面等离激元传播特性[J]. 光学学报, 2008, **28**(6): 1047～1050

18 G. Dolling, C. Enkrich, M. Wegener *et al*.. Simultaneous negative phase and group velocity of light in a metamaterial[J]. *Science*, 2006, **312**(5775): 892～894

19 Yuegang Chen, Yanhua Wang, Yan Zhang *et al*.. Numerical investigation of the transmission enhancement through subwavelength hole array[J]. *Opt. Commun.*, 2007, **274**: 236～240