doi:10.3788/gzxb20124111.1331

# 基于表面等离子体共振效应的椭圆柱银纳米线的 光力研究

## 高永毅<sup>a</sup>,钟慧<sup>b</sup>,周仁龙<sup>a</sup>,占世平<sup>a</sup>

(1湖南科技大学 a. 物理学院; b. 机电工程学院, 湖南 湘潭 411201)

摘 要:运用有限时域差分方法,研究了两椭圆柱银纳米线之间的光力及其物理机制,并且分析了 椭圆柱银纳米线的尺寸以及相对位置对光力的影响.结果表明:椭圆柱银纳米线的尺寸以及相对位 置等结构参量的变化导致两椭圆柱银纳米线之间光力的明显变化.由于局域耦合共振,Ag纳米颗 粒间的内壁上存在电子的振荡行为,将微腔中光子的能量转化成电子集体振荡的动能,这使得微腔 中的电磁场能量减小到负能态,从而产生收缩的负光力.因此,Ag纳米颗粒间相互吸引. 关键词:有限差分时域方法;表面等离子体共振;银纳米线;光力;局域耦合共振

**中图分类号**:O431.1 文献标识码:A

#### 0 引言

1871年,Maxwell发现当光照射物体时,会对 物体产生压力<sup>[1]</sup>.1900年Lebedev,1903年Nichols 和Hull分别用实验证明了这一结论<sup>[2-3]</sup>.由于等离 子体共振效应在纳米粒子表面附近可以引起很强的 局域场,近年来,人们利用各种小体积介质微腔封闭 的金属矩形腔组成的理想电导体,回音廊模式腔以 及法布里-珀罗光腔等,使光子在微腔内来回振荡, 从而发生等离子体共振来研究光力的情况<sup>[4-7]</sup>,这种 现象为金属材料纳米结构开辟了一个新的平台和潜 在的应用.文献[8]研究了金属纳米结构材料的光力 与其几何参量(如金属纳米结构材料的截面形状)的 关系.然而,相关几何参量变化对光力影响的研究, 还非常的有限.因此,探索由于表面产生等离子体共 振效应的纳米结构金属材料的更多电磁特性是非常 有价值的.

本文运用有限时域差分方法(Finite-Difference Time Domain,FDTD)<sup>[9]</sup>,研究了表面产生等离子体 共振效应的椭圆柱形银纳米线间的光力.为确保激 发等离子体共振效应,采用电场矢量垂直于纳米线 中心轴的入射波.文章详细计算并分析了纳米线的 尺寸以及相对位置等参量的变化对光力的影响.结 果表明:对于所研究的系统,两椭圆柱银纳米线之间 吸引力占主导地位.当外界的光子耦合进入银纳米 线微腔时,在银纳米线间的空气间隙腔内,存在腔共 **文章编号**:1004-4213(2012)11-1331-4 振,激发了银纳米线壁内部电子集体振荡,这将微腔 中光子的能量转化成电子集体振荡的动能,使得微 腔中电磁场能量减小到负能态,从而产生收缩的负 光压,表现为负的光力.

### 1 计算方法

基于 Maxwell 方程组的 FDTD 算法能严格地 处理色散效应.在由电介质或线性金属介质组成的 空间中, Maxwell 方程组可以表示为

$$\frac{\partial}{\partial t} \boldsymbol{E}(\boldsymbol{r},t) = \frac{1}{\varepsilon_{\text{eff}}(\boldsymbol{r},t)} \left[ \nabla \times \boldsymbol{H}(\boldsymbol{r},t) - \boldsymbol{J}(\boldsymbol{r},t) \right] (1)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\boldsymbol{H}(\boldsymbol{r},t) = -\frac{1}{\mu_0} \nabla \times \boldsymbol{E}(\boldsymbol{r},t)$$
(2)

$$\frac{\partial}{\partial t} \boldsymbol{J}(\boldsymbol{r},t) = \alpha(\boldsymbol{r}) \boldsymbol{J}(\boldsymbol{r},t) + \beta(\boldsymbol{r}) \boldsymbol{E}(\boldsymbol{r},t)$$
(3)

在金属区域,  $\epsilon_{\text{eff}}$ ,  $\alpha$  和  $\beta$  取金属特定的值. 具体 取值按如下表达式计算  $\epsilon_{\text{eff}} = \epsilon_0 \epsilon_{\infty}$ ,  $\alpha = -\Gamma$ ,  $\beta = \epsilon_0 \omega_{\text{P}}^2$ .

本文采用 Lorentz 色散材料模型,该模型主要 用于研究当色散效应非常显著时,各种电介质材料 的电磁学特性. Lorentz 色散材料的介电系数表达 式为

$$\varepsilon(\omega) = \varepsilon_{\infty} - \frac{\omega_{\rm p}^2}{\omega^2 + \mathrm{i}\omega_{\rm c}\omega} \tag{4}$$

式中: $\epsilon_{\infty} = 1$ 为频率足够高时的相对介电常量; $\tau$ 为碰撞频率; $\omega_{e}$ 为阻尼频率; $\omega_{p}$ 金属的等离子频率.

此外,在等离子体共振条件下,电场矢量(E)和 磁场矢量(H)满足下面的积分方程<sup>[10]</sup>

基金项目:国家自然科学基金(No. 51175172)和湖南省自然科学基金(No. 10JJ6101,No. 10JJ6008)资助 第一作者:高永毅(1958-),男,教授,博士,主要研究方向为机械振动、生物力学. Email:gaoyongyi5188@163.com 通讯作者:钟慧(1985-),女,硕士研究生,主要研究方向为材料物理化学. Email:zhonghui1217@163.com 收稿日期:2012-03-21;修回日期:2012-05-29

 $E(r) = E^{\text{inc}}(r) + k_0^2 \int d^2 r' G_e(r, r') \delta \varepsilon(r') E(r')$ (5) $H(r) = H^{\rm inc}(r) - ik_0^2 \int d^2 r' G_{\rm m}(r, r') \delta \varepsilon(r') E(r') \quad (6)$ 式中, $k_0 = \omega/c$ ,r = (x, y),积分中S为在真空中的 纳米线的封闭截面.自由电子的二阶格林方程  $G_{e}(r,r')$ 为二阶张量, 磁场二阶格林方程  $G_{m}(r,r')$ 的计算公式为  $G_{\mathbf{m}}(r,r') = \nabla \times [Ig_0(r,r')],$ 其中  $g_0(r,r') = (i/4) H_0(k_0\rho) \exp(ik_z z)$ . 入射场只在 x-y平面传播( $k_z = 0$ ),这将产生非零分量  $G_{xz}^m =$  $-i/(4\rho)k_0(y-y')H_1(k_0\rho) \pi G_{yz}^m = i/(4\rho)k_0(x-1)$ x') $H_1(k_0\rho)$ ,其中 $\rho = |r-r'|$ .其它分量运用反对 称关系得到  $G_{ii}^{m} = -G_{ii}^{m}$ . 根据  $\delta \epsilon(r) \equiv \epsilon - 1$  映射标量 介电常量,其中r完全符合纳米线介电常量ε.然后, 将纳米线表面离散化成细网格,方程(5)中的被积分 函数转换成线性矩阵方程组的形式.当散射介质中 存在电场,将 E(r)代入方程(6)中计算 H(r).这样 运用麦克斯韦-法拉第定律就可以通过电场 E 来计 算磁场H.

#### 2 数值结果分析

图1为椭圆柱银纳米线模型在 xy 平面的截面 图.其中 a 和 b 为椭圆长轴和短轴长度, A 为两椭圆 柱纳米线间的间距, 左边纳米线用数字 1 表示, 右边 纳米线用数字 2 表示. 在计算区域的 x 方向上采用 完全吸收匹配层, y 方向上采用周期边界,  $\lambda$ 射光波 沿 x 负方向传播.本文分别计算了模型在结构参量 为以下几种情况时纳米线之间的光力性质: 1) 椭圆 长轴和短轴长度分别为 a=16 nm 和 b=9 nm 时, 两椭圆柱纳米线间的间距 A 对纳米线之间的光力 性质的影响; 2) 椭圆长轴和短轴长度分别为 a=16nm 和 b=9 nm 时, 纳米线绕其自身中心轴旋转的 角度 a 对纳米线之间的光力性质的作用; 3) 两椭圆 柱纳米线表面间的间距 A 为 5 nm 时, 椭圆长轴长 度 a 和短轴长度 b 对纳米线之间的光力性质的作 用.



图 1 两椭圆柱形 Ag 纳米线在 x-y 平面上的计算区域 Fig. 1 The cross section geometries in x-y plane of two elliptic silver wires

在图 2 中,椭圆截面尺寸为 16 nm×9 nm. 光照 射到银纳米线上时,在波长为 338 nm 时存在等离

子体共振,此时由于该金属内部的等离子体共振,会 将微腔中光子的能量转化成电子集体振荡的动能, 使得微腔中电磁场能量减小到负能态,从而产生收 缩的负光力,本文研究三种不同两椭圆柱纳米线表 面之间的间距 A=5 nm,7.5 nm 和 10 nm,通过计 算来分析两椭圆柱银纳米线之间的间距对光力的影 响. 随着两椭圆柱银纳米线间距增大,椭圆柱银纳米 线之间的光力减小,并且峰值位置发生微弱的红移. 当两椭圆柱银纳米线间距为5nm时,纳米线2的光 力几乎都是负值,这说明纳米线2所受到的光力的 方向沿 x 负方向. 根据力的相互作用原理,纳米线1 所受光力与纳米线 2 所受光力大小相同方向相反, 所以两纳米线间为吸引力. 增大两椭圆柱银纳米线 间距到 7.5 nm 时,相互吸引的光力强度变小.继续 增大间距到 10 nm 时,在波长为 395 nm 时,相互吸 引的光力由负值转为相互排斥力,表现为正值,即两 纳米线间光力由吸引力转为排斥力,但吸引力很微 弱,几乎为0,这说明两纳米线之间的相互吸引光力 的强度比一般相互排斥力大很多.



图 2 椭圆截面尺寸为 16 nm×9 nm 时,Ag 纳米线间 间距对纳米线 2 光力的影响

Fig. 2 The optical forces on wire 2 with the elliptic cylindrical dimension is 16 nm $\times$ 9 nm change with the gap distance

前文考虑了椭圆柱银纳米线间的光力与两椭圆 柱银纳米线间距的关系.下面研究了椭圆柱银纳米 线绕其自身中心轴旋转不同角度时,两纳米线之间 光力的变化情况.

在图 3 中,分析了不同旋转角度时,两纳米线之 间的光力.结果表明:两椭圆柱形银纳米线之间的光 力随着旋转角度  $\alpha$  的改变而变动得很明显.当 $\alpha$ 为0 和 45°时,在整个研究波长范围内的光力几乎都为 负值,光力大小急剧减小.在 300~600 nm 波段内, 纳米线间的光力几乎都是负值,即两椭圆柱银纳米 线间的相互吸引.当 $\alpha$ 为 90°时,在 450~600 nm内 光力出现正值,这说明两纳米线间为排斥力,但很小 近似为 0.从 0 增大到 45°,力减小,且峰中心位置发 生微弱的蓝移;继续增大到 90°,力明显增大,红移 现象显著.另外,当α为45°时所对应的光力曲线有 明显的两个峰出现,且力的大小近乎相等.







两椭圆柱银纳米线间的光力特性也受银纳米线 尺寸的影响,如图 4. 主要探讨了 Ag 纳米线间的间 距取 5 nm,椭圆截面尺寸取 30 nm×19 nm,24 nm ×16 nm 以及 16 nm×9 nm 三组尺寸情况下的光 力.发现在所研究波段内,这三组尺寸的纳米线间的 光力几乎都是负值,这说明纳米线 2 所受到的光力 的方向沿 x 负方向,也即两纳米线间的作用力是吸 引力.从曲线图中还可以看出,随着椭圆柱形尺寸的 增大,光力减小,且减小的幅度也越来越小.所有曲 线还表明峰值中心位置发生蓝移.



图 4 Ag 纳米线间间距为 5 nm 时,纳米线截面尺寸对纳米 线 2 光力的影响

Fig. 4 The optical forces on wire 2 change with the elliptic cylindrical dimensions when the gap distance is 5 nm

负光力即说明两椭圆柱银纳米线间表现为吸引 力.图 5 所示为椭圆截面长轴长度为 16 nm,短轴尺 寸为 9 nm,Ag 纳米颗粒间的间距为 5 nm,Ag 纳米 颗粒绕其自身中心轴旋转 90°,Ag 纳米线间相互吸 引力达到最大时的电场分布.其中图 5(a)电场  $E_y$ 的分布,图 5(b)为电场分量  $E_x$  的分布.由图 5(b) 可知,此时表面等离子体共振模式为局域耦合共振. 在 Ag 纳米颗粒间的内壁上存在电子的振荡行为, 将微腔中光子的能量转化成电子集体振荡的动能, 这使得微腔中电磁场能量减小到负能态,从而产生 收缩的负光力.



图 5 电场分量  $E_y$  的分布和电场分量  $E_x$  的分布 Fig. 5 The electric field  $E_y$  distribution and the tangential electric field  $E_x$  distribution

#### 3 结论

本文研究了表面产生等离子体共振效应的椭圆 柱形银纳米线间的光力.分析了纳米线的尺寸以及 相对位置等结构参量对银纳米线之间光力的影响. 结果发现,随着 Ag 纳米颗粒的形状以及相对位置 的变化,纳米颗粒间的电磁力峰值中心位置发生红 移、蓝移现象,峰值大小出现衰减、增强现象.还发现 等离子体共振与 Ag 纳米线的结构参量有关,这为 实现人为调控等离子体共振提供了依据.

#### 参考文献

- [1] LIU H, NG J, WANG S B, Strong light-induced negative optical pressure arising from the kinetic energy of conduction electrons in plasmonic cavities [J]. *Physical Review Letters*, 2011, 106(8):7401-7404.
- WOOLF D, LONCAR M, CAPASSO F, et al. The forces from coupled surface plasmon polaritons in planar waveguides
   [J]. Optics express, 2009, 1(22):19996-20011.
- [3] LAMOTHE É, LÉVÊQUE G, MARTIN O J F, et al. Optical forces in coupled plasmonic nanosystems: Near field and far field interaction regimes[J]. Optics express, 2007, 15(15): 9631-9644.
- [4] ZELENINA A S, QUIDANT R, NIETO-VESPERINAS M. Enhanced optical forces between coupled resonant metal nanoparticles [J]. Optics Letters, 2007, 32(9):1156-1158.
- [5] ARIAS-GONZALEZ J R, NIETO-VESPERINAS M. Optical forces on small particles: attractive and repulsive nature and plasmon resonance conditions [J]. Journal of the Optical Society of America A, 2003, 20(7):1201-1209.
- [6] EICHENFIELD M, MICHAEL C P, PERAHIA R, et al. Actuation of micro-optomechanical systems via cavity-enhanced optical dipole forces [J]. Nature Photonics, 2007, 1,416 -422.
- [7] KIPPENBERG T J, VAHALA K J. Cavity opto-mechanics[J]. Optics Express, 2007, 15(25):17172-17205.
- [8] HALTERMAN K, ELSON J M, SINGH S, Plasmonic

resonances and electromagnetic forces between coupled silver nanowires[J]. *Physical Review B*, 2005, 72(7):5429-5434.
[9] 葛德彪,闫玉波. 电磁波时域有限差分法[M]. 西安:西安电子

科技大学出版社,2002.

[10] 赵凯华,陈熙谋. 电磁学[M]. 2版. 北京:高等教育出版社, 2006.

#### Plasma Resonance and Optical Forces Between Two Ellipsoidal Silver Nanowires

GAOYong-yi<sup>a</sup>, ZHONG Hui<sup>b</sup>, ZHOU Ren-long<sup>a</sup>, ZHAN Shi-ping<sup>a</sup>

(a. College of Physic; b. College of Electromechanical Engineering, Hunan University of Science and Technology, Xiangtan, Hunan 411201, China)

Abstract: Based on the finite-difference time-domain method, the optical forces between two ellipsoidal silver nanowires and the physical mechanism were investigated. The effect of the relative position and the dimention of two ellipsoidal silver nanowires on the optical forces were analyzed. A slight change of them would result in an obvious change of the optical force. The silver internal electrons were oscillated due to local coupling resonance. The plasma resonance would convert the photon energy in cavity into the kinetic energy of electronic collective oscillation. The electromagnetic field energy was reduced to negative state, which caused the contractive and negative optical force. Therefore, ellipsoidal silver nanowires attracted each other.

**Key words**: Finite-Difference Time-Domain(FDTD); Plasma resonance; Silver nanowire; Optical force; Local coupling resonance