

doi:10.3788/gzxb20144303.0329002

# 金属纳米柱天线的快速电磁分析

方明<sup>1</sup>, 宋开宏<sup>1</sup>, 王娟娟<sup>1</sup>, 黄志祥<sup>1</sup>, 吴先良<sup>1,2</sup>

(1 安徽大学 电子信息工程学院 智能计算与信号处理重点实验室, 合肥 230039)

(2 合肥师范学院 物理电子系, 合肥 230061)

**摘 要:** 基于分段正弦基函数和矩量法, 通过求解离散电流节点格林函数的封闭解得到金属纳米柱天线激发表面等离子体的阻抗矩阵. 与使用其它基函数矩量法相比, 该方法可以减少矩阵方程的维数. 仿真结果表明: 使用此方法只需求解很小的矩阵方程就可以求解出纳米天线表面极化电流, 从而实现对纳米天线的散射特征及谐振模式的快速分析; 其结果与时域有限差分仿真结果吻合良好且速度具有显著的优势, 尤其在计算斜入射问题时计算优势更加明显. 本文的方法对文中计算的模型有效, 同样为其他形状纳米柱天线和碳纳米管器件散射特性仿真提供了快速有效的电磁分析方法.

**关键词:** 计算电磁学; 矩量法; 光学设备; 纳米棒; 碳纳米管; 表面等离子体共振; 散射特征; 正弦基函数

**中图分类号:** O441.4; O539

**文献标识码:** A

**文章编号:** 1004-4213(2014)03-0329002-6

## Plasmonic Nano-rod Antennas Based on Fast Electromagnetic Method

FANG Ming<sup>1</sup>, SONG Kai-hong<sup>1</sup>, WANG Juan-juan<sup>1</sup>, HUANG Zhi-xiang<sup>1</sup>, WU Xian-liang<sup>1,2</sup>

(1 Key Laboratory of Intelligent Computing and Signal Processing, Anhui University, Hefei 230039, China)

(2 Department of Physics and Electronic Engineering, Hefei Normal University, Hefei 230061, China)

**Abstract:** On the basis of the method of moments and segments sinusoidal basis functions, the impedance matrix of plasmonic nano-rod antennas can be obtained by solving the Green's function of the discretized current nodes in closed form formulations. Compared to the method of moments with different basis functions, this method can be utilized for reducing the size of matrix equations. The simulated results show that the polarization current and scattered fields can be computed accurately by employing a small-size matrix, which leads to a fast analysis for the scattering characteristic and resonant modes of nano-rod. The accuracy of the method was successfully demonstrated by comparing the simulated results with finite difference time domain technique, which is more time-consuming than the present method. Especially when dealing with the oblique incidence problem, the advantages become more apparently. The method is effective for the calculated models in this paper, and provides a fast and efficient electromagnetic analysis way for other nano-rod antennas and nanotube devices in different shapes when doing their scattering characteristics simulation.

**Key words:** Computational electromagnetic; Method of moments; Optical device; Nano-rods; Carbon nanotubes; Surface plasmon resonance; Scattering parameters; Macro basis functions

**OCIS Codes:** 290.5825; 050.1755; 240.6680

## 0 引言

纳米光学天线在纳米光子学领域具有广泛的应

用. 当入射光照射金属纳米柱天线时激发金属表面等离子体共振(Surface Plasma Resonance, SPR)<sup>[1]</sup>, 光可以存储在持久共振外部耦合的等离子纳米棒里, 利用

**基金项目:** 国家自然科学基金(Nos. 60931002, 61101064, 51277001)、安徽省杰出青年基金(No. 1108085J01)、教育部新世纪优秀人才基金(No. NCET-12-0596)和教育部博士点基金(No. 20123401110009)资助

**第一作者:** 方明(1990—), 男, 硕士研究生, 主要研究方向为纳米光学材料的电磁计算. Email: 458484623@qq.com

**导师(通讯作者):** 宋开宏(1969—), 男, 副教授, 主要研究方向为电磁高性能计算及新型材料电磁特性. Email: 1026180528@qq.com

**收稿日期:** 2013-08-15; **录用日期:** 2013-10-12

<http://www.photon.ac.cn>

多孔金属纳米柱层特殊光响应和传导模式还可以改进生物传感技术.同时,金属纳米天线在光子回路、生物学、数据传输等方面都有广泛的应用<sup>[2]</sup>.

金属等离子纳米柱天线的介电常量可以使用杜德材料模型描述.常规的电磁仿真方法往往不准确或耗时较长且占用内存大,而时域有限差分法(Finite-Different Time-Domain, FDTD)<sup>[3]</sup>或有限元法(Finite Element Method, FEM)<sup>[4]</sup>来求解问题都需要精巧的网格剖分技术.特别是对于细长的纳米柱即横截面宽度远小于纵向长度时,为了精确求解需要对横截面进行精巧的网格剖分,这就会使纳米柱纵向的网格数变大;而且这两种方法在处理斜入射问题时求解会更加复杂且耗时.采用矩量法(Method of Moments, MoM)仿真细长纳米柱,基于脉冲基函数或 RWG 基函数求解时同样会面临矩阵方程求解量大及奇异值处理导致效率不高的问题;另外求解出的矩阵方程可能是病态.近年来国外学者在使用 FDTD 对碳纳米管(Carbon Nanotubes, CNTs)<sup>[5]</sup>电磁仿真时,往往容易实现“较短”的 CNTs 仿真,即长度和界面比例相差不多.在碳纳米管的长度与截面的比例相差几个数量级仿真时存在着与上述分析金属细长纳米柱时相似的问题,想要准确高效地对它仿真也会面临很大的问题<sup>[6]</sup>,因此急需一种对这种结构的纳米天线进行高效准确电磁散射求解的新方法.

本文利用矩量法,选取改进正弦函数作为基函数,利用少量的基函数实现极化电流的离散.使用整段和半分段的正弦曲线对纳米柱天线进行建模,计算出离散节点格林函数的封闭解<sup>[7]</sup>可以快速得到矩阵方程,从而快速、有效地求解出细长等离子纳米柱天线的散射问题,该方法对 CNTs 件也同样适用.相对于 FDTD 和 FEM 方法,该方法求解速度具有明显的速度优势,特别是计算斜入射问题时.与普通矩量法相比只需求解很小的矩阵方程且能够消除阻抗矩阵中的奇异值.

## 1 计算模型

如图 1 所示,入射光  $E^{inc} = E_0 e^{-jk \cdot r}$  从任意入射方向  $k$  和电场极化方向  $E_0$  入射到金属纳米柱天线时天线表面会产生表面等离子体<sup>[8]</sup>,金属纳米柱的介电常量会随着波长变化,由杜德模型<sup>[9]</sup>有

$$\epsilon_r(f) = \epsilon_{\infty} - \frac{f_p^2}{f(f - j \cdot f_d)} \quad (1)$$

式中  $f_p$  和  $f_d$  分别表示等离子频率和损耗频率.当光波在特定波长下会使天线中自由电子集体振荡产生表面等离子体谐振,其波矢大于自由空间的光波矢,以消逝波的形式存在于天线和介质界面,电场会在天线中指数衰减.但是当天线的直径小于金属的趋肤深度<sup>[10]</sup>时,光波照射天线时会穿透天线,此时极化电流会存在

整个天线体中.可以假设极化电流  $I$  沿着天线纵向分布在天线截面来代替体电流  $J$ ,即  $J = I/(\pi a^2)$ .这里使用圆柱是为了更简单的验证此方法,此方法也可拓宽应用于任意横截面形状的细长柱天线,只需利用  $J = I/A$ ,  $A$  表示横截面的面积.

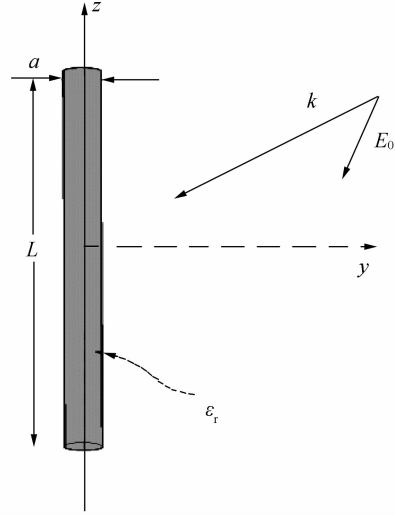


图 1 平面波入射光照射金属纳米柱天线

Fig. 1 A plasmonic nano-rod antenna illuminated by a plane wave

## 2 算法原理

如图 2 所示,将天线  $L$  分成  $N$  个节点共  $N-1$  段每段长度为  $H$ ,使用  $N$  个正弦基函数离散电流  $I_s (s \in \{x, y, z\})$ ,其中末端的两个基函数是半分段的正弦函

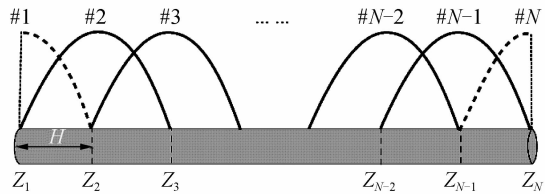


图 2 使用半分段正弦基函数离散天线极化电流

Fig. 2 Representation of polarization current by  $N$  triangular sinusoidal basis functions

数,  $I_s$  可表示为

$$t_n = \sin[\beta(H - |z - z_n|)] \quad (2)$$

这里  $I_s^n$  表示第  $N$  个基函数对应电流  $s$  分量的待求系数.  $t_n(z)$  为正弦基函数,即

$$t_n = \sin[\beta(H - |z - z_n|)] \quad (3)$$

$\beta = (2\pi/\lambda_{eff} - 4a)$  表示在纳米柱中的波数大于自由空间的波数  $k$ ,它与有效波长  $\lambda_{eff}$  和纳米柱的直径有关.通过  $I_s^n$  和正弦基函数离散电流下的格林函数  $G_{s's,n}^{MBF}$  可以得到  $s'$  场点的散射电场,即

$$E_s^{scat} = \sum_{s=x,y,z} \sum_{n=1}^N I_s^n G_{s's,n}^{MBF} \quad (4)$$

通过极化电流和散射电场即可得到散射截面和散射场的分布.要得到这些参量,首先需要求解  $G_{s's,n}^{MBF}$ .

以一个完整的正弦分段为例,如图 3. 假设电流只存在于  $z$  轴上,一个基函数对应长度为  $H$ ,电流是按照

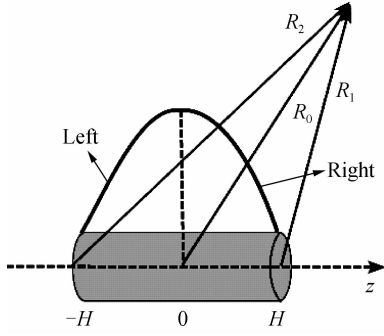


图 3 包含左分段正弦和右分段正弦的整段基函数

Fig. 3 Full-triangular sinusoidal basis function including right and left basis functions

正弦函数分布在  $-H < z' < H$ , 即  $I_s = \sin[\beta(H - |z'|)]$ . 可以得到右半段正弦基函数对柱体外任意一点的辅助磁矢位  $A_w^{[11]}$  为

$$A_s = \int_0^H \sin[\beta(H - z')] g dz' \quad (5)$$

式中  $g = \mu \exp(-jkR)/(4\pi R)$  为标量格林函数,  $R = \sqrt{(z - z')^2 + \rho^2}$ . 将式(4)中的正弦函数展开成两个指数函数可以得到

$$A_s = \frac{\mu_0}{8\pi j} [\text{Int}(z, \rho; H) + \text{Int}(-z, \rho; -H)] \quad (6)$$

根据磁矢位  $\mathbf{A}$  可以得到电场为

$$\mathbf{E} = \frac{\nabla \times \nabla \times \mathbf{A}}{j\omega\mu_0\epsilon_0} \quad (7)$$

电场的  $x$  分量可以表示为

$$E_x = \frac{-1}{j\omega\mu_0\epsilon_0} \left( \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) A_x \quad (8)$$

将式(6)代入式(7)中求解  $E_x$  即可得到  $G_{xx}^{\text{MBF}}$  的右半段正弦部分为

$$G_{xx}^{\text{MBF, right}} = \frac{\eta}{8\pi k} \left\{ -k^2 [\text{Int}(z, \rho; H) + \text{Int}(-z, \rho; -H)] + \frac{j2kx^2}{\rho^2} \left[ \frac{e^{-jR_1}}{R_1} - \frac{e^{-jR_0}}{R_0} \left( \cos(kH) + \frac{jz}{R_0} \sin(kH) \right) \right] + \frac{2(x^2 - y^2)}{\rho^4} \left[ e^{-jR_1} - e^{-jR_0} \left( \cos(kH) + j \frac{z}{R_0} \sin(kH) \right) \right] \right\} \quad (9)$$

同理可以求解出其他  $G_{ss',n}^{\text{MBF, right}}$  分量,从图 3 可以看出只要将  $H$  换成  $-H$  即可得到  $G_{ss',n}^{\text{MBF, left}}$ ,从而得到整个基函数对应的格林函数为

$$G_{ss'}^{\text{MBF}} = G_{ss'}^{\text{MBF, right}} + G_{ss'}^{\text{MBF, left}} \quad (10)$$

$G_{ss'}^{\text{MBF}}$  各分量中只有  $G_{xx}^{\text{MBF}}$  和  $G_{yy}^{\text{MBF}}$  两个分量包含积分函数,其他分量都可以得到封闭解.

将式(10)中的  $z$  替换为  $z - z_n$  即可得到  $n$  节点的格林函数  $G_{ss',n}^{\text{MBF}}$ . 注意对于两端的两个节点都只包含半分段弦基函数,所以  $n$  节点的格林函数可以表示为

$$G_{ss',n}^{\text{MBF}} = \begin{cases} G_{ss'}^{\text{MBF, right}} & n=1 \\ G_{ss'}^{\text{MBF, left}} & n=N \\ G_{ss'}^{\text{MBF, right}} + G_{ss'}^{\text{MBF, left}} & n=\text{others} \end{cases} \quad (11)$$

得到格林函数  $G_{ss',n}^{\text{MBF}}$  后,为了求解  $I_s^n$ ,结合式(4)和体极化电流  $\mathbf{J}$  与散射场和入射场的关系式<sup>[12]</sup>为

$$j\omega\epsilon_0(\epsilon_r - 1)(\mathbf{E}^{\text{inc}} + \mathbf{E}^{\text{scat}}) = \mathbf{J} \quad (12)$$

令  $\rho = a$ ,在纳米柱表面对式(12)使用 Galerkin 法进行检验<sup>[13]</sup>,将等式两边都乘以  $t_m(z)$  得到一个  $3N \times 3N$  的矩阵方程,即

$$\begin{bmatrix} [z_{xx}] - [z_{\text{res}}] & [z_{xy}] & [z_{xz}] \\ [z_{yx}] & [z_{yy}] - [z_{\text{res}}] & [z_{yz}] \\ [z_{zx}] & [z_{zy}] & [z_{zz}] - [z_{\text{res}}] \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} [I_x] \\ [I_y] \\ [I_z] \end{bmatrix} = - \begin{bmatrix} [V_x] \\ [V_x] \\ [V_x] \end{bmatrix} \quad (13)$$

这里  $[z_{ss'}]$  和  $[V_s]$  分别是  $N \times N$  和  $N \times 1$  的矩阵,其元素可表示为积分上下限为  $z_{m-1}$  到  $z_{m+1}$  的积分为

$$[z_{ss'}]_{nm} = \int_{z_{m-1}}^{z_{m+1}} t_m(z) G_{ss',n}^{\text{MBF}} dz \quad (14)$$

$$[V_s]_m = \int_{z_{m-1}}^{z_{m+1}} E_s^{\text{inc}}(z) t_m(z) dz \quad (15)$$

$[z_{\text{res}}]$  是由式(12)等式右边  $\mathbf{J}$  经过权函数检验得到的  $N \times N$  矩阵,即

$$[z_{\text{res}}] = \frac{-j\eta}{\pi a^2 k(\epsilon_r - 1)} \begin{bmatrix} s_{ff}/2 & s_{h+h^-} & 0 & \cdots & 0 \\ s_{h+h^-} & s_{ff} & s_{h+h^-} & \ddots & \vdots \\ 0 & s_{h+h^-} & s_{ff} & \ddots & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & s_{h+h^-} \\ 0 & \cdots & 0 & s_{h+h^-} & s_{ff}/2 \end{bmatrix} \quad (16)$$

式中  $\eta$  为自由空间特性波阻抗,  $s_{ff}$  和  $s_{h+h^-}$  为

$$s_{ff} = \int_{z_{m-1}}^{z_{m+1}} t_m^2(z) dz = H \left( 1 - \frac{\sin(2kH)}{2kH} \right) \quad (17)$$

$$s_{h+h^-} = \int_{z_{m-1}}^{z_{m+1}} t_m(z) t_{m+1}(z) dz = \frac{H}{2} \left( \frac{\sin(kH)}{kH} - \cos(kH) \right) \quad (18)$$

考虑到纳米柱的极化电流沿着  $z$  轴上分布,而求解纳米柱表面电流时设置求解坐标  $\rho = a$  为纳米柱和介质的分界面<sup>[14]</sup>,这样就可以保证求解过程不会产生奇异值.同时待求矩阵方程式(13)阻抗矩阵只有  $3N \times 3N$  个元素,而且除了  $G_{xx}^{\text{MBF}}$  和  $G_{yy}^{\text{MBF}}$  分量中含有积分式需要通过 8 点高斯积分<sup>[15]</sup>求解,  $G_{ss',n}^{\text{MBF}}$  中的其他各分量可以通过封闭解得到.

## 3 数值结果

### 3.1 平面光波正入射仿真

以图 1 所示的纳米柱为计算模型几何体,其材料参量为:  $\epsilon_{\infty} = 1$ ,  $f_p = 2751$  THz 和  $f_d = 1.326$  THz, 纳米柱长度  $L = 300$  nm, 半径  $a = 10$  nm. 入射波为沿着

$x$ 轴方向传播,电场沿着 $z$ 方向极化的平面波.将天线分别剖分为15、21和41个节点,计算不同频率下极化电流和散射场得到散射截面.

图4为本文计算结果和FDTD方法结果的对比.随着剖分节点数的增加计算准确度越高,使用41个节点仿真结果与FDTD方法基本吻合.同时可以发现图中共有两个散射截面波峰分别位于204 THz和415 THz,在这两个频点下纳米柱达到谐振.为了研究这两个谐振频率下谐振模式,绘制了谐振频点下的极化电流分布及天线附近场值分布如图5.

从图5中可以发现在204 THz下达到谐振时,天线为一个偶极子;在415 THz频点下天线为四极子<sup>[16]</sup>.

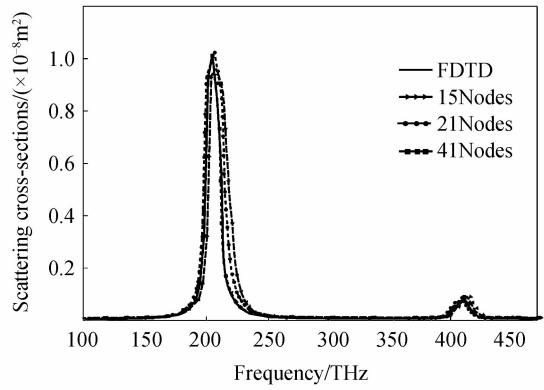
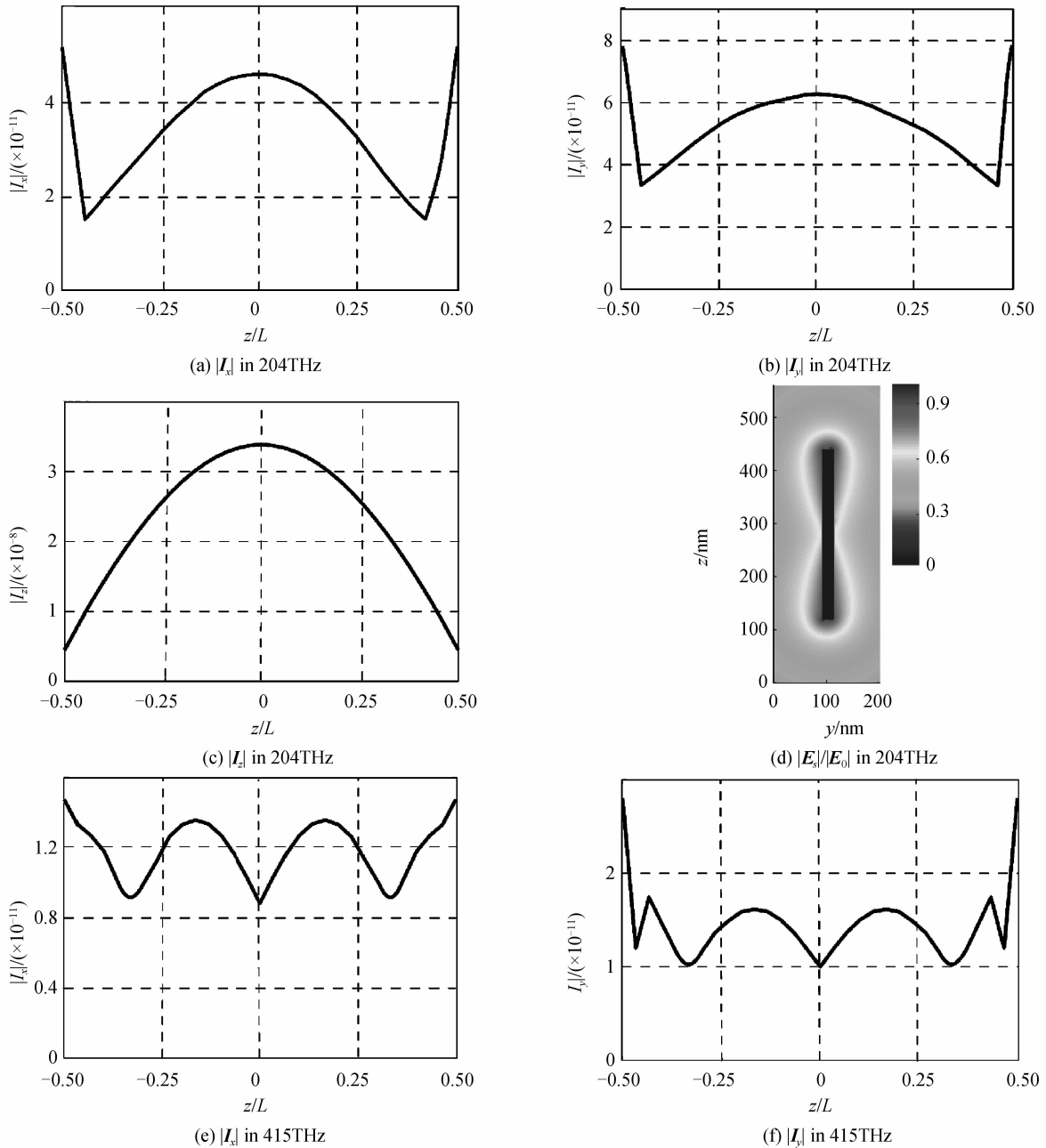


图4 垂直极化平面波正入射时金属纳米柱天线散射截面随频率变化曲线  
Fig. 4 Scattering cross section of the plasmonic nanorod illuminated by a normal incident vertically polarized plane wave



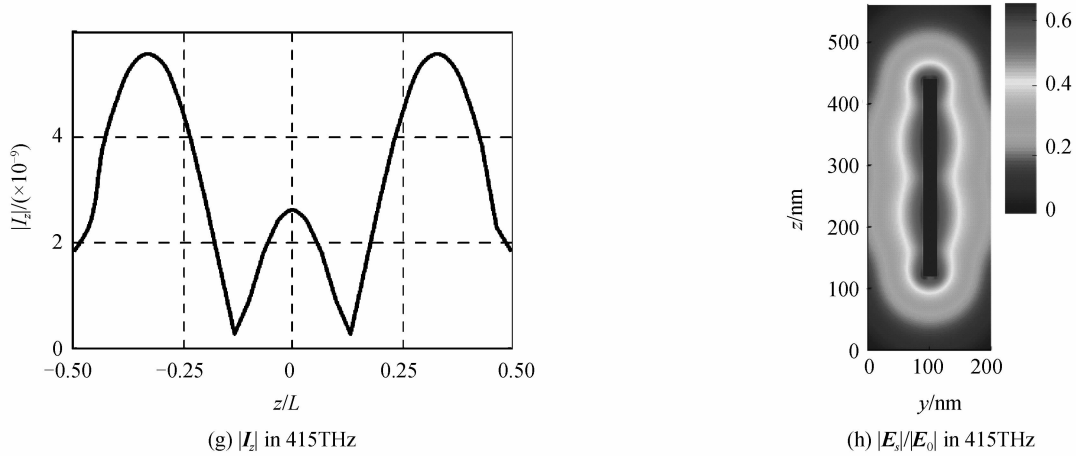


图5 204 THz 和 415 THz 频点下天线极化电流分布和近场值分布  
 Fig. 5 The polarization current and distribution in near field of plasmonic nanorod for the configuration depicted in 204 THz and 415 THz

3.2 平面光波斜入射仿真验证

现考察入射波以任意入射方向及极化方向照射纳米柱. 假设入射波传播方向  $k = (x + 3y - 2z) / \sqrt{14}$ , 电场极化方向  $E_0 = (x + y + z) / \sqrt{6}$ , 通过计算 415 THz 频

率下远场场值验证方法结果与 FDTD 方法结果也很好的吻合(如图 6). 但是在计算斜入射时此方法使用 15 个节点离散只需 20 s 而使用 FDTD 方法需要大约 30 min. 由此可见, 本文的方法快速且有效.

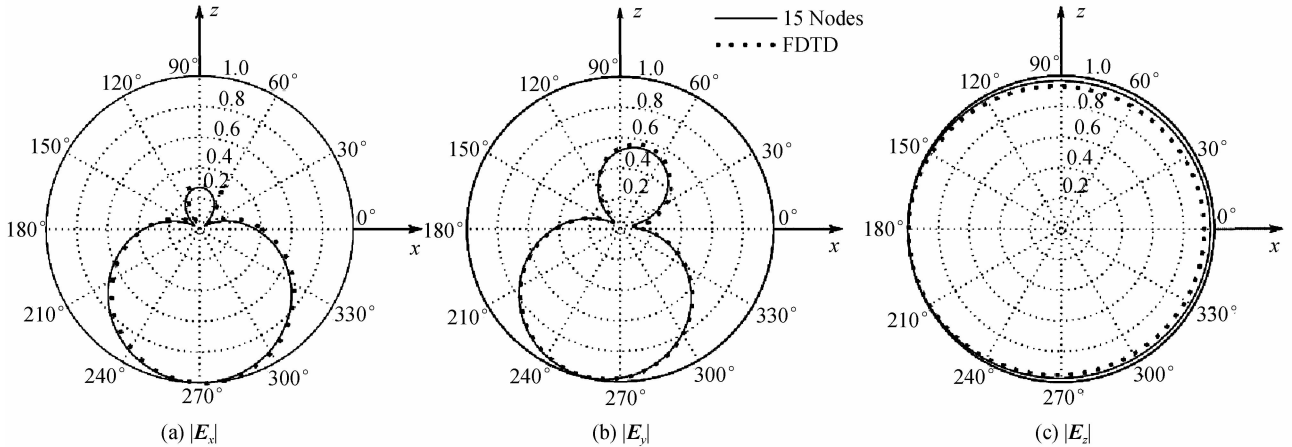


图6 y=0 平面单位化远场分布  
 Fig. 6 Normalized far-field in y=0 plane

4 结论

本文使用半分段正弦函数作为基函数计算色散媒质纳米柱天线散射特征, 通过少量基函数离散极化电流, 可以快速求解纳米柱天线散射参量, 其结果和 FDTD 仿真结果吻合良好而且速度具有明显的优势. 尤其在计算斜入射问题时计算优势更加明显. 另外, 本文的方法不仅对文中计算的模型有效, 同样为其他形状纳米柱天线和碳纳米管器件散射特性仿真提供了一种新的快速有效的方法.

参考文献

[1] SARID D, CHALLENGER W. Modern introduction to surface plasmons: theory, mathematica modeling, and applications [M]. New York: Cambridge University, 2010: 4-14.  
 [2] GAO Lai-xu, YE Hong-an, LIU Shu-gang, et al. Sufece plasmon resonance based on microobjective[J]. *Acta Photonica Sinica*, 2013, **42**(9): 1113-1117.

高来勋, 叶红安, 刘书钢, 等. 基于显微物镜的表面等离子共振[J]. *光子学报*, 2013, **42**(9): 1113-1117.  
 [3] TAFLOVE A, HAGNESS S C. Computational electrodynamics: the finite-difference time-domain method [M]. 3rd ed. Norwood, MA: Artech House, 2005.  
 [4] VOLAKIS J, HATERJEE A, EMPEL L C. Finite element method for electromagnetic: antennas, microwave circuits, and scattering applications[M]. New York: IEEE Press, 1998.  
 [5] LI Yu-kui, WANG Feng-ge, ZANG Fan-guang, et al. Preparation and characteristic of second-printing type carbon nanotube cathode for triode field emission display[J]. *Acta Photonica Sinica*, 2013, **42**(5): 570-575.  
 李玉魁, 王凤歌, 曾凡光, 卢文科. 三极场发射显示器中二次印刷型碳纳米管阴极的制备及特性[J]. *光子学报*, 2013, **42**(5): 1442-1445.  
 [6] HAI Lin, MARIO F. An FDTD thin-wire model for modeling carbon nanotube dipoles at THz regime[J]. *IEEE Antenna and Wireless Propagation Letters*, 2012, **11**: 708-711.

- [7] RASGHIDI A, MOSALLAEI H, MITTRA R. Scattering analysis of plasmonic nanorod antennas: A novel numerically efficient computational scheme utilizing macro basis functions [J]. *Journal of Applied Physics*, 2011, **109**(12): 123109.
- [8] MA Wen-ying, YANG Huan, YAO Jun, *et al.* Organic vapor sensing methods based on silver triangular nano-prisms[J]. *Acta Photonica Sinica*, 2010, **39**(9): 1557-1561.  
马文英, 杨欢, 姚军, 等. 三角银纳米柱阵列传感乙醇气体方法[J]. *光子学报*, 2010, **39**(9): 1557-1561.
- [9] RASHIDI A. Scattering performance of plasmonic nanorod antennas in randomly tilted disordered and Fibonacci configurations[J]. *Applied Physics Letters*, 2012, **101**(6): 062401.
- [10] ALU A. Multifrequency optical invisibility cloak with layered plasmonic shells[J]. *Physical Review Letters*, 2008, **100**(11): 113901.
- [11] RAETHER H. Surface plasmons [M]. Berlin: Springer Verlage, 1988.
- [12] HARRINGTON R. Time-harmonic electromagnetic fields[M]. New York: IEEE Press, 2001.
- [13] HARRINGTON R. Field computation by moment method [M]. New York: IEEE Press, 1992.
- [14] WANG Yi-ping. 2002 Fundamentals of electromagnetic fields and waves[M]. Xi'an: Xi'an University, 2002: 38-44.
- [15] CAO Zhen-xin, XIA Ji-jiang. Resonant wavelength red shifting of optical fiber surface plasmon resonance sensing system[J]. *Acta Photonica Sinica*, 2008, **37**(10): 1997-2000.  
曹振新, 夏继江. 光纤秒面等离子体共振传感检测系统共振波长的红移[J]. *光子学报*, 2008, **37**(10): 1997-2000.
- [16] SADIKU M N O. Numerical techniques in electroagnetics [M]. Boca Raton: CRC Press, 2000.