

doi: 10.3788/gzxb20174606.0616006

典型金属纳米结构的电子能量损失谱研究

王丽华, 李小飞, 黄志祥, 吴先良

(安徽大学 计算智能与信号处理教育部重点实验室, 合肥 230039)

摘 要: 利用格林函数推导出金属纳米结构电子能量损失谱的计算公式, 基于时域有限差分方法对几种典型的结构进行建模仿真, 数值模拟运动电荷和结构的距离、液晶环境材料对电子能量损失谱的调节作用。仿真结果表明: 当增加电子与纳米结构的距离时, 电子能量损失谱谱峰降低; 当添加液晶材料或各向同性衬底材料时, 电子能量损失谱的峰值发生明显红移, 但液晶的光轴倾角改变对峰值的调制作用有限。通过计算电子能量损失谱研究金属纳米结构表面等离子激元共振特性, 为高度复杂的等离子体激元纳米结构的设计提供了理论基础。

关键词: 电子能量损失谱; 表面等离子激元; 时域有限差分方法; 纳米结构; 液晶; 格林函数

中图分类号: TN303

文献标识码: A

文章编号: 1004-4213(2017)06-0616006-7

Research on Electron Energy Loss Spectroscopy of Typical Metal Nanostructures

WANG Li-hua, LI Xiao-fei, HUANG Zhi-xiang, WU Xian-liang

(Key Laboratory of intelligent Computing & Signal Processing, Anhui University, Hefei 230039, China)

Abstract: The formula of electron energy loss spectroscopy of metal nanostructures was deduced by Green function. Several typical structural systems were simulated by finite difference time-domain method. The regulating effects of the distance between the moving charge and the structure, and the liquid crystal environment on the electron energy loss spectrum were numerical simulated. The simulation results show that the electron energy loss spectral peak decreases when the distance between electron and nanostructure is increased. When the liquid crystal material or isotropic substrate material is added, the peak value of electron energy loss spectrum is redshift, but with the tilt angle of the optical axis changes, the modulation effect is limited. The surface plasmon resonance on metal nanoparticles can be studied by calculating the electron energy loss spectrum, which provides a basis theoretical for the design of highly complex plasmonic nanostructures.

Key words: Electron energy loss spectroscopy; Surface plasmon resonance; Finite difference time-domain method; Nanostructure; Liquid crystal; Green function

OCIS Codes: 160.3710; 160.4236; 240.6680

0 引言

使用快速电子穿过材料时会导致其表面的原子内芯级电子、价带电子、价带电子集体振动和自由电子振动被激发等, 从而发生非弹性散射出现能量的损失, 通过这部分损失的能量来获取材料的表面原子信息的分析方法被称为电子能量损失谱(Electron Energy Loss Spectroscopy, EELS)^[1-2]。20 世纪 60 年代之后, 以电子非弹性碰撞理论为基础, 高分辨电子能量损失谱得到发展, 其有更高的灵敏度, 至今仍被广泛应用于研究

基金项目: 国家自然科学基金(Nos. 51277001, 61471001), 教育部新世纪优秀人才基金(No. NCET-12-0596), 安徽省高校优秀青年人才基金重点项目(No. 2013SQRL065ZD)资助

第一作者: 王丽华(1982—), 讲师, 硕士, 主要研究方向为计算电磁学和新型电磁材料研究。Email: lhwang@ahu.edu.cn

通讯作者: 黄志祥(1979—), 教授, 博士, 主要研究方向为电磁高性能计算、新型电磁材料和新型天线设计。Email: zxhuang@ahu.edu.cn

收稿日期: 2017-01-03; **录用日期:** 2017-03-09

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

物质的表面物理特性和化学特性^[3-5].

近年来,金属纳米结构由于其独特的表面等离子体光学特性,在光学器件中具有重要的作用,成为研究热点^[6-7].光在各种纳米金属系统中的传播特性的研究取得很大进步,为了确定各种纳米金属系统的光谱性质,表面等离子体共振模型一般使用光激发,这种情况下很难研究详细的空间模型,而采用快速电子激发,计算金属纳米结构的电子EELS,可以克服这一困难,因此EELS在研究金属微纳结构的表面等离子体方面有很大的优势.2006年,杨卫国等实现了利用电子能量损失谱计算过渡金属电子数的优化方法^[5].2007年,Steven J Barrow团队基于偶极子近似方法,利用电子能量损失谱测定了金纳米粒子链中的明暗模式^[8].2009年,Ai Leen Koh使用配有扫描透射电子显微镜单色仪和电子能量损失光谱仪研究了金属纳米颗粒中的等离子体效应,验证了明亮和暗等离子体能量的映射与Mie理论结果的一致性^[9].2014年,Ulrich Hohenester等利用基于边界元方法的Matlab工具箱对纳米颗粒的能量损失谱进行了仿真实验^[10].虽然这些方法在应用EELS进行仿真时,可以很好地解释和预测试验获得的电子能量损失谱,但是也存在各自的缺点,有的方法只能研究非穿透性电子轨迹的能量损失^[11-12],有的要求处理的问题需满足基本的解析解,对于复杂的问题只能分析其局部结构等^[8,10],研究方法具有局限性,使得EELS的实验结果通常要与光激发的数值仿真作比较.

本文首先通过格林函数推导出计算金属纳米结构电子能量损失谱的公式,然后基于时域有限差分(Finite Difference Time Domain, FDTD)方法^[13]对典型的金属纳米结构进行仿真,并与边界元方法(Boundary Element Method, BEM)仿真结果进行比较,以验证FDTD方法的可行性.

1 理论分析

1.1 EELS的理论推导

电子能量损失谱的分析过程可表示为^[1]:电子沿着 z 方向以速度 v 运动,纳米颗粒与电子相距 b ,此时产生的感应电场作用于运动电子上会产生能量损失,其结构如图1.其中图(a)表示电子运行轨迹;图(b)和(c)表示计算感应电场的计算方法,用总场减去背景场;图(d)表示仿真结构图.

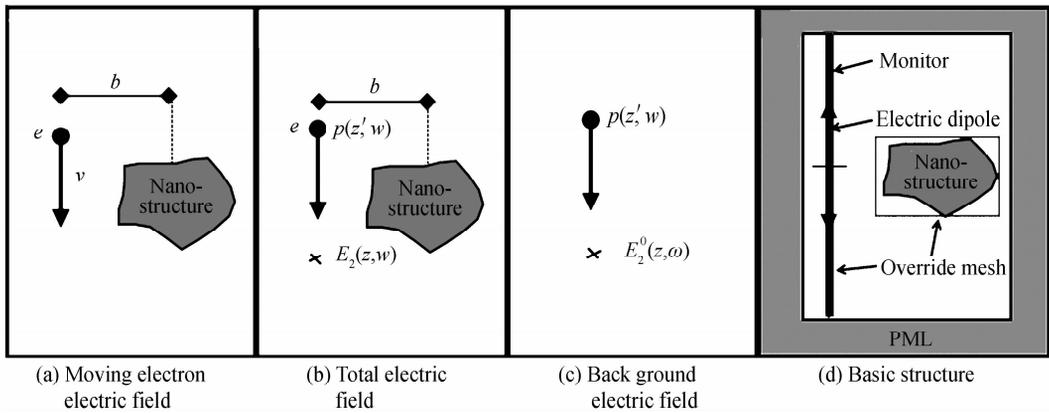


图1 电子能量损失谱的基本结构

Fig. 1 Basic structure of electronic energy loss spectrum

电荷沿直线轨迹 $\mathbf{r}=\mathbf{r}_e(t)$ 运动,其速度为 v ,纳米颗粒在其运动轨迹附近,产生的感应电场为 \mathbf{E}_{ind} ,此时电子的能量损失表示为^[14]

$$\Delta E_{\text{EELS}} = e \int \mathbf{v} \cdot \mathbf{E}_{\text{ind}}[\mathbf{r}_e(t), t] dt = \int_0^{\infty} \hbar \omega \Gamma_{\text{EELS}}(\omega) d\omega \quad (1)$$

式中, e 为电子电量, \hbar 为普朗克常量, ω 为电子的频率, $\Gamma_{\text{EELS}}(\omega)$ 为能量损失率,表示为

$$\Gamma_{\text{EELS}}(\omega) = \frac{e}{\pi \hbar \omega} \int \text{Re} \{ e^{-i\omega t} \mathbf{v} \cdot \mathbf{E}_{\text{ind}}[\mathbf{r}_e(t), \omega] \} dt \quad (2)$$

在高斯单位下并矢格林函数 $\mathbf{G}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega)$ 满足

$$\left(\nabla \times \nabla \times - \frac{\epsilon(\mathbf{r}, \omega) \omega^2}{c^2} \right) \mathbf{G}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) = -\frac{1}{c^2} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \mathbf{I} \quad (3)$$

式中 \mathbf{I} 为单位矩阵. 根据式(3)可得到运动电荷的电场为^[15]

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega) = -4\pi i \omega \int \mathbf{G}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) \mathbf{J}(\mathbf{r}', \omega) d\mathbf{r}' \quad (4)$$

不失一般性, 假设电荷沿 z 方向运动 $\mathbf{r}_e(t) = \mathbf{r}' + \mathbf{v}t, \mathbf{v} = v\mathbf{z}$. 所以其电流密度为^[14]

$$\mathbf{J} = v\rho = -e\delta(\mathbf{R} - \mathbf{R}') e^{i\omega(z - z')/v} \quad (5)$$

式中, \mathbf{R}, \mathbf{R}' 为 xy 平面的径矢. 将式(4)、(5)代入到式(1), 计算得到

$$\begin{aligned} \Gamma_{\text{EELS}}(\omega) &= \frac{e}{\pi\hbar\omega} \int \text{Re} \left\{ e^{-i\omega t} v z \cdot 4\pi i \omega \int -\mathbf{G}_{\text{ind}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) \mathbf{J}(\mathbf{r}', \omega) d\mathbf{r}' \right\} dt = \\ &= \frac{4e^2}{\hbar} \iint dz dz' \cos \left[\frac{\omega(z - z')}{v} \right] \times \text{Im} \left[-G_{\text{ind-zz}}(z, z', \omega) \right] \end{aligned} \quad (6)$$

式中, $G_{\text{ind-zz}}(z, z', \omega) = \mathbf{z} \cdot [\mathbf{G}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) - \mathbf{G}^0(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega)] \cdot \mathbf{z}$, $\mathbf{G}^0(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega)$ 为真空中的格林函数, $\Gamma_{\text{EELS}}(\omega)$ 与 xy 坐标变量无关. 在 \mathbf{r}' 位置的电偶极子 $p(\mathbf{r}', \omega)$ 在 \mathbf{r} 位置产生的格林函数为

$$G_{\text{ind-zz}}(z, z', \omega) = -\frac{1}{4\pi\omega^2} \frac{E_{\text{ind-z}}(z, \omega)}{p(z', \omega)} \quad (7)$$

将式(7)代入式(6)得到

$$\Gamma_{\text{EELS}}(\omega) = \frac{e^2}{\pi\hbar\omega^2} \iint dz dz' \cos \left[\frac{\omega(z - z')}{v} \right] \times \text{Im} \left[\frac{E_{\text{ind-z}}(z, \omega)}{p(z', \omega)} \right] \quad (8)$$

由式(8)可知运动电荷的速度只存在于余弦函数中, 虚部中 z 方向上的电场 $E_{\text{ind-z}}$ 是 z' 位置静止的电偶极子在 z 点产生的感应电场, 与速度 v 无关, 其中 $E_{\text{ind-z}} = E_z - E_z^0$, E_z 和 E_z^0 分别为 z 方向上的总场和背景电场. 因此在 FDTD 的仿真中, 只要扫描运动轨迹不同位置的静止电偶极子产生的感应电场, 得到其虚部, 就可以计算以不同速度运动的电荷产生的能量损失率. 在文中选择电子运动速度为真空中光速的一半.

1.2 液晶的光学特性

液晶的介电常数、折射率和电导率都具有各向异性的特性, 当施加外加电场时, 液晶分子主轴方向发生变化, 它的光学特性也随之变化, 即液晶的光电效应^[17]. 液晶分子长轴的平均取向的单位矢量称为指向矢, 当光轴在 xz 平面内, 倾角为 θ , 扭曲角为 ϕ , 液晶分子的空间位置如图 2, 则其介电常数可表示为^[18]

$$\tilde{\boldsymbol{\epsilon}} = \begin{bmatrix} n_o^2 \cos^2 \theta + n_e^2 \sin^2 \theta & 0 & (n_o^2 - n_e^2) \sin \theta \cos \theta \\ 0 & n_o^2 & 0 \\ (n_o^2 - n_e^2) \sin \theta \cos \theta & 0 & n_o^2 \sin^2 \theta + n_e^2 \cos^2 \theta \end{bmatrix} \quad (9)$$

式中, n_e 为平行于光轴的非寻常折射率, n_o 为垂直于光轴的寻常折射率, 且受温度和频率的影响. 在实际仿真中, 当外加电场作用时, 液晶的倾角和扭曲角发生变化, 介电常数随之变化, 进而影响液晶的各向异性特性.

1.3 FDTD 理论

通常情况下, FDTD 法处理色散材料的介电常数可以用 Drude 模型进行模拟. 本文使用的金材料的 Drude 模型可以表示为

$$\boldsymbol{\epsilon}(\omega) = \boldsymbol{\epsilon}_\infty - \omega_D^2 / \omega(\omega + i\gamma) \quad (10)$$

式中, $\boldsymbol{\epsilon}_\infty$ 为频率趋于无限大时的介电常数, ω_D 是等离子体频率, γ 是碰撞频率. 将介电常数代入 Maxwell 方程中, 并在时间和空间上对其进行中心差分近似, 即

$$\nabla \times \mathbf{H} = \mathbf{J} + \partial \boldsymbol{\epsilon}_0 \boldsymbol{\epsilon} \mathbf{E} / \partial t \quad (11)$$

两边进行傅里叶变换, 得到

$$i\mathbf{k} \times \mathbf{H}(\mathbf{k}, \omega) = -i\omega \boldsymbol{\epsilon}_0 \boldsymbol{\epsilon}_\infty \mathbf{E}(\mathbf{k}, \omega) + \boldsymbol{\sigma} \mathbf{E}(\mathbf{k}, \omega) + \mathbf{J}_D(\mathbf{k}, \omega) \quad (12)$$

式中

$$\mathbf{J}_D(\mathbf{k}, \omega) = i\omega \boldsymbol{\epsilon}_0 \frac{\omega_D^2}{\omega(\omega + i\gamma)} \mathbf{E}(\mathbf{k}, \omega) \quad (13)$$

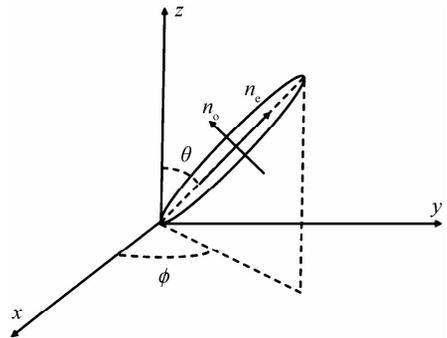


图 2 液晶分子的空间位置
Fig. 2 Spatial Position of liquid crystal molecule

式中 \mathbf{k} 为位置矢量, 对式(13)做傅里叶逆变换, 转换成时域偏微分方程

$$\frac{\partial^2 \mathbf{J}_D(t)}{\partial t^2} + \gamma \frac{\partial \mathbf{J}_D(t)}{\partial t} = \epsilon_0 \omega_D^2 \frac{\partial \mathbf{E}(t)}{\partial t} \quad (14)$$

式(14)为式(11)的辅助微分方程, 对其进行中心差分^[19], 可得 \mathbf{J}_D 的迭代表达式为

$$\mathbf{J}_D^{n+1} = \alpha_D \mathbf{J}_D^n + \beta_D (\mathbf{E}_D^n + \mathbf{E}_D^{n+1}) \quad (15)$$

式中, $\alpha_D = (2 - \gamma \Delta t) / (2 + \gamma \Delta t)$, $\beta_D = (\epsilon_0 \omega_D^2 \Delta t) / (2 + \gamma \Delta t)$, n 为时间轴 t 取样.

对式(12)做傅里叶逆变换后进行差分离散, 并将式(15)代入可得

$$\begin{aligned} (\nabla \times \mathbf{H})^{n+1/2} &= \frac{\epsilon_0 \epsilon_\infty}{\Delta t} (\mathbf{E}^{n+1} - \mathbf{E}^n) + \frac{\sigma}{2} (\mathbf{E}^{n+1} + \mathbf{E}^n) + \mathbf{J}_D^{n+1/2} = \frac{\epsilon_0 \epsilon_\infty}{\Delta t} (\mathbf{E}^{n+1} - \mathbf{E}^n) + \\ &\frac{\sigma}{2} (\mathbf{E}^{n+1} + \mathbf{E}^n) + \frac{\alpha_D + 1}{2} \mathbf{J}_D^n + \frac{\beta_D}{2} (\mathbf{E}_D^n + \mathbf{E}_D^{n+1}) \end{aligned} \quad (16)$$

利用麦克斯韦方程 $\nabla \times \mathbf{E} = -\frac{\partial \mu \mathbf{H}}{\partial t}$, 可以得到磁场的离散方程为

$$\mathbf{H}^{n+1/2} = \mathbf{H}^{n-1/2} - (\Delta t / \mu) (\nabla \times \mathbf{E})^n \quad (17)$$

结合式(16)和(17)可以求得任意时刻的电场和磁场.

在各向异性介质中, 介电常数是张量, 电位移矢量与电场强度之间的关系为^[19]

$$\begin{bmatrix} D_x \\ D_y \\ D_z \end{bmatrix} = \epsilon_0 \begin{bmatrix} \epsilon_{xx} & \epsilon_{xy} & \epsilon_{xz} \\ \epsilon_{yx} & \epsilon_{yy} & \epsilon_{yz} \\ \epsilon_{zx} & \epsilon_{zy} & \epsilon_{zz} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} E_x \\ E_y \\ E_z \end{bmatrix} \quad (18)$$

不失一般性, 计算 z 方向上的分量 D_z , 需要知道在同一位置 x, y 方向上的电位移矢量 E_x 和 E_y , 根据式(18)的矩阵关系式进行中心差分近似后解得

$$D_z^{n+1} \left(i, j, k + \frac{1}{2} \right) = \epsilon_0 \epsilon_{xx} E_x^{n+1} \left(i, j, k + \frac{1}{2} \right) + \epsilon_0 \epsilon_{xy} E_y^{n+1} \left(i, j, k + \frac{1}{2} \right) + \epsilon_0 \epsilon_{zz} E_z^{n+1} \left(i, j, k + \frac{1}{2} \right) \quad (19)$$

式中, i, j, k 分别表示 x, y, z 轴的空间分量取样, $E_x^{n+1} \left(i, j, k + \frac{1}{2} \right)$, $E_y^{n+1} \left(i, j, k + \frac{1}{2} \right)$ 与 $E_z^{n+1} \left(i, j, k + \frac{1}{2} \right)$ 具有相同的空间坐标, 在 Yee 网格中, E_x 和 E_y 分量的节点位置为 $E_x^{n+1} \left(i + \frac{1}{2}, j, k \right)$, $E_y^{n+1} \left(i, j + \frac{1}{2}, k \right)$, 与式(19)的不一致, 因此不能够直接用式(19)来求解场值, 需要对两变量的相邻空间值进行插值运算求解, 结果为

$$\begin{cases} E_x \left(i, j, k + \frac{1}{2} \right) = \frac{E_x \left(i - \frac{1}{2}, j, k \right) + E_x \left(i + \frac{1}{2}, j, k \right) + E_x \left(i + \frac{1}{2}, j, k + 1 \right) + E_x \left(i - \frac{1}{2}, j, k + 1 \right)}{4} \\ E_y \left(i, j, k + \frac{1}{2} \right) = \frac{E_y \left(i, j - \frac{1}{2}, k \right) + E_y \left(i, j + \frac{1}{2}, k \right) + E_y \left(i, j + \frac{1}{2}, k + 1 \right) + E_y \left(i, j - \frac{1}{2}, k + 1 \right)}{4} \end{cases} \quad (20)$$

把式(20)的结果带入离散方程就可以求得电场分量 E_z , 利用相同的方法也能得到 xy 方向上的场分量. 在 FDTD 仿真中, 使用完全匹配层 (Perfect Matching Layer, PML)^[20] 边界匹配, 防止反射出现. 只要扫描运动轨迹不同位置的静电偶极子产生的总场和背景电场, 计算感应电场得到其虚部, 就可以计算以不同速度运动的电荷产生的能量损失率.

2 数值结果及分析

2.1 单个金纳米球的 EELS 分析

图 3 给出了单个纳米金球 FDTD 算法仿真的截面图, 金球半径 $a = 80$ nm, 球心距离电子 $b = 82$ nm, 电子的频率范围为 $1 \sim 3$ eV, 在此频率范围内金的介电常数采用 Drude 模型拟合. 对金球的覆盖网格为 $\Delta x = \Delta y = \Delta z = 5$ nm, 运动电荷轨迹的网格 $\Delta z = 2$ nm, $\Delta t = 0.007\ 595\ 67$ fs, 总的仿真时间为 100 fs, 监测的总长度为 $z = 1\ 500$ nm, 运算后得到总的电场后再除去金球测量背景电场, 保存 z 方向上的电场虚部, 代入电子能量损失谱的计算公式中, 得到计算结果.

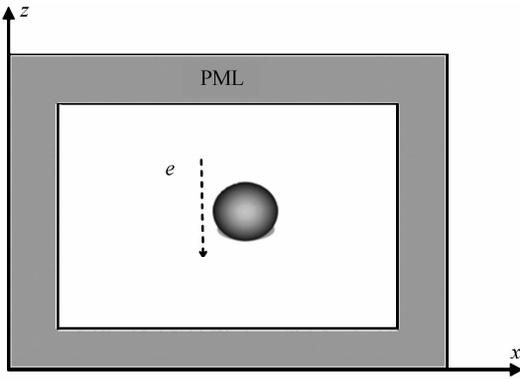


图3 金球仿真结构
Fig. 3 Simulation structure of gold ball

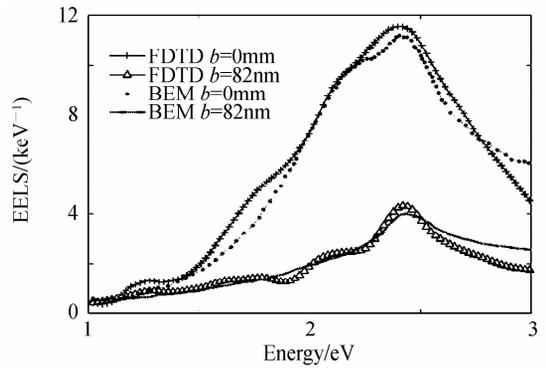


图4 球心与电子距离不同时金球电子能量损失谱
Fig. 4 EELS of gold ball with different distance between the ball centre and electron

图4给出了不同距离 b 对于电子能量损失谱的影响, $b=0$ nm时,表示电子从金纳米球的球心穿过; $b=82$ nm时,由于金球的半径为80 nm,表示电子从金纳米球旁边经过.为了验证FDTD方法计算电子能量损失谱的有效性,同时给出了BEM的仿真结果.由图4可知,电子能量损失谱的强峰位置为2.4 eV,FDTD方法计算结果与BEM结果^[10]一致,表明FDTD方法也可以处理电子穿透轨迹.另外当改变运动电荷与纳米颗粒的距离时,不同的 b 值对谱的峰值会有影响.由于延迟的作用,当从球心经过时,电子能量损失谱较大;当从金纳米球旁边经过时,电子能量损失谱降低.

图5给出了在 $b=82$ nm时,改变液晶环境中光轴倾角,电子能量损失谱的变化情况.由图5可以看出,随着液晶光轴角度 θ 变化,电子能量损失谱变化不大,在模拟液晶环境时选取光轴角度为 0° .图6给出了 $b=82$ nm时,金球周围环境对电子能量消失谱的影响,仿真了空气和液晶两种环境,由图可以看出,当金球周围介质为空气时,电子能量损失谱峰值对应的频率为2.4 eV,当金球周围介质为液晶时,电子能量损失谱峰值对应的频率为2.3 eV,发生红移,并且纳米粒子的偶极模式对应的肩峰增强,对于表面等离子激元共振具有调制作用.

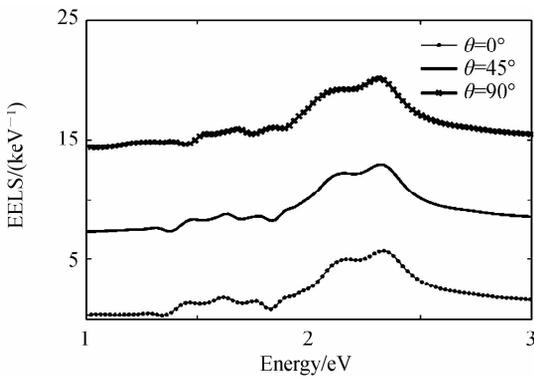


图5 液晶环境下不同光轴倾角对应的金球电子能量损失谱
Fig. 5 EELS of gold ball in liquid crystal environment with different tilt angle of optical axis

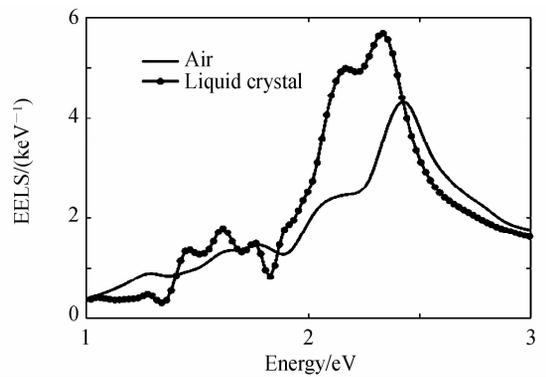


图6 不同环境下金球电子能量损失
Fig. 6 EELS of gold ball with different environment

2.2 金盘与衬底组合的EELS分析

金纳米盘结构如图7,其半径为 $a=25$ nm,高为 $h=15$ nm,放在30 nm厚的衬底上,衬底材料的相对介电常数分别为1.56和2.金纳米盘轴心距离电子为 $b=27$ nm,电子的频率范围为1~3 eV,金纳米盘的离散网格为 $\Delta x=\Delta y=\Delta z=2$ nm,其它参数设置与纳米金球模型一致.

图8给出了三种不同衬底对金纳米盘的电子能量损失谱的影响,由图可知,随着衬底材料介电常数的增加,电子能量损失谱的峰值红移,从2.4 eV移动到1.8 eV.当去除衬底,将金属圆柱盘浸入液晶时计算结果如图9,由图9可知,当金纳米盘周围环境为液晶时,其电子能量损失谱的峰值红移,通过改变衬底和周围环境可以对金纳米盘的表面等离子体共振起到更强的调制作用.

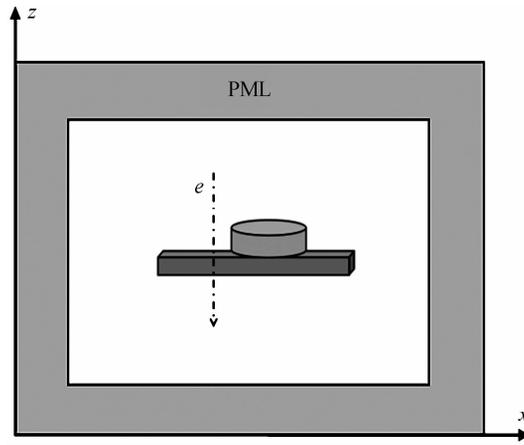


图7 金盘结构

Fig. 7 Structure of gold plate

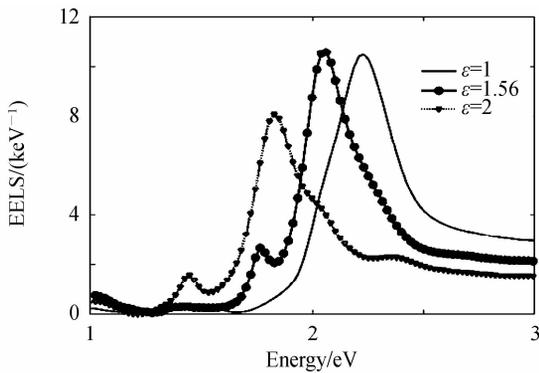


图8 不同衬底金纳米盘的电子能量损失谱

Fig. 8 EELS of gold plate with different substrate

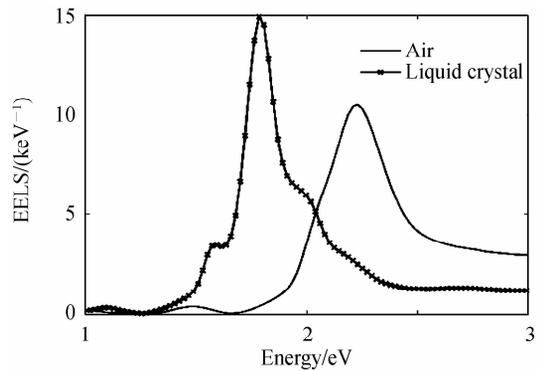


图9 不同环境下金盘的电子能量损失谱

Fig. 9 EELS of gold plate with different environment

3 结论

本文首先通过格林函数对 EELS 的计算公式进行了推导,然后基于 FDTD 方法结合电子能量损失谱研究了不同金属纳米结构的表面等离子体共振特性.数值结果表明:当改变运动电荷与纳米颗粒的距离时,因为延迟的作用,其 EELS 谱的峰值发生变化;当添加液晶材料或者各向同性的衬底材料时,电子能量损失谱的峰值会红移.通过计算电子能量损失谱研究金属纳米颗粒表面等离子体激元共振的影响,可为高度复杂的等离子体激元纳米结构的设计提供理论基础.

参考文献

- [1] ZHU Yong-fa. Electron Energy Loss Spectroscopy(EELS)[M]. Beijing: Tsinghua University, 2005
朱永法. 电子能量损失谱(EELS)[M]. 北京: 清华大学, 2005.
- [2] HILLIER J, BAKER R F. Microanalysis by means of electrons[J]. *Journal of Applied Physics*, 1944, 15(9):663-675.
- [3] GARCIA F J. Optical excitations in electron microscopy[J]. *Reviews of Modern Physics*, 2010, 82: 209-276.
- [4] RITCHIE R H. Plasma losses by fast electrons in thin films[J]. *Physical Review*, 1957:106-874.
- [5] YANG W G, ZHANG X Z, YUAN J. Optimization of the method to measure d electron occupancy in transition elements from electron energy loss spectrum[J]. *Acta Physica Sinica*, 2006,55(7):3413-3419
杨卫国,章晓中,袁俊.一种由电子能量损失谱计算过渡金属电子数的优化方法[J].物理学报,2006,55(7):3413-3419.
- [6] LEE K S, EL-SAYED M A. Gold and silver nanoparticles in sensing and imaging: sensitivity of plasmon response to size, shape, and metal composition[J]. *Journal of Physical Chemistry B*, 2006,111(39):19220-19225.
- [7] WEI Lai, LI Fang, ZHOU Jian-xin. Design of surface plasmon polariton nano-lase[J]. *Acta Optica Sinica*, 2016,46(10),10141004
魏来,李芳,周剑心.基于表面等离子体激元的纳米激光器设计[J].光子学报,2016,46(10),10141004.
- [8] BARROW S J, ROSSOUW D, FUNSTON A M, et al. Mht anapping brigd dark modes in gold nanoparticle chains using electron energy loss spectroscopy[J]. *Nano Letter*, 2007, 40: 3799-3808.

- [9] KOH A L, BAO K, KHAN I, SMITH W E, *et al.* Electron Energy-Loss Spectroscopy (EELS) of surface plasmons in single silver nanoparticles and dimers: influence of beam damage and mapping of dark modes[J]. *ACS Nano*, 2009, 3(10): 3015-3022.
- [10] HOHENESTER U. Simulating electron energy loss spectroscopy with the MNPBEM toolbox[J]. *Computer. Physical Communication*, 2014, 185(3): 1177-1178.
- [11] REED N W, CHEN J M, MACDONALD N C, *et al.* Fabrication and STEM/EELS measurements of nanometer-scalesilicon tips and filaments[J]. *Physical Review B*, 1999, 60: 5641.
- [12] MATYSSEK C, NIEGEMANN J, HERGERT W, *et al.* Computing electron energy loss spectra with the discontinuous Galerkin time domain method[J]. *Photonics and Nanostructures-Fundamentals and Applications*, 2011, 9: 367-373.
- [13] YANG C, MANJAVACAS A, LARGE N, *et al.* Electron energy-loss spectroscopy calculation in finite-difference time-domain package[J]. *ACS Photonics*, 2015, 2:369-375.
- [14] BIGELOW N, VASCHILLO A, CAMDEN J. P, *et al.* Signatures of Fano interferences in the electron energy loss spectroscopy and cathodoluminescence of symmetry-broken nanorod dimers[J]. *ACS Nano*, 2013, 7(5): 4511-4519.
- [15] NOVOTNY L, HECHT B. Principles of nano-optics[M]. New York:Cambridge University Press, 2006.
- [16] GARCIA DE ABAJO F J, HOWIE A. Retarded field calculation of electron energy loss in inhomogeneous dielectrics [J]. *Physical Review B*, 2002, 65:115418.
- [17] WANG H, ALEXANDRE V. Tunability of LSPR using gold nano-particles embedded in a liquid crystal cell[J]. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 2014, 146:492-498.
- [18] EMMANOUIL E, KRIEZIS S J. Light wave propagation in liquid crystal displays by the 2D finite difference time domain method[J]. *Optics Communications*, 2000, 177: 69-77.
- [19] GE De-bao, YAN Yu-bo. Finite-difference time-domain method for electromagnetic waves[M]. Xi'an:Xi'an Electronic Science & Technology University Press, 2005.
葛德彪,闫玉波. 电磁场时域有限差分法[M]. 西安:西安电子科技大学出版社, 2005.
- [20] BÉRENGER J P. Perfectly Matched Layer (PML) for computational electromagnetics[M]. Synthesis Lectures on Computational Electro-magnetic, 2007.