

# 方体及环/盘阵列结构的表面等离子体共振特性研究

曹文, 潘庭婷, 邓亚利, 李梅, 郝辉, 夏巍, 王鸣\*

南京师范大学物理科学与技术学院, 江苏省光电技术重点实验室, 江苏南京 210023

**摘要** 局域表面等离激元共振是金属纳米粒子表面的自由电子在光子作用下发生集体震荡而产生的一种共振现象。提出了一种方体及环/盘阵列结构, 该结构主要由左侧单圆环和右侧方体及偏心圆环盘组成。利用时域有限差分算法(FDTD solutions)对该结构进行了光学性质的探究。仿真结果表明, 当线性偏振光入射到金属表面时, 在结构中激发局域表面等离激元共振现象, 表现出明显的共振效应, 在600~1700 nm范围形成了不同位置的共振谷。通过对结构电场电荷仿真图的对比分析, 发现共振谷是由圆环内所激发的偶极共振模式与方体及环/盘激发的四偶极共振模式相互耦合杂化产生的混合等离激元共振而形成的。当调整金属结构的各项参数时, 金属纳米颗粒之间的局域表面等离激元共振会因电场耦合效应发生改变, 因此法诺共振的产生对于金属结构的各项参数有着极大的依赖性(如左圆环直径 $L$ 、右圆环直径 $R$ , 结构高度 $H$ , 左圆环到方体的距离 $D$ 等), 通过对结构各项参数的改变, 可以实现对结构共振谷波长位置和共振强度的有效调控, 达到对结构光学性质可控的目的。由于该结构具有独特的非对称性, 进一步探究了入射光源偏振方向(即电矢量与 $x$ 轴的夹角)对结构的共振谷波长位置以及共振强度的影响。结果表明, 随着光源偏振角度的增加, 共振谷J2处的波长位置出现明显的红移现象。但当偏振角度为 $90^\circ$ 时, 共振谷J3处不能产生法诺共振现象。由此, 可以通过改变光源的偏振方向来实现对该结构的光谱的共振强度及共振波长位置的调控。更为重要的是, 该结构对周围的环境折射率有着较高的敏感度, 最高可达 $755 \text{ nm} \cdot \text{RIU}^{-1}$ , 传感的品质因数(figure of merit, FOM)为18.4, 该结构在环境折射率等生物传感器及微纳光子器件方面有着潜在的应用前景。

**关键词** 局域表面等离激元共振; 法诺共振; 阵列结构; 折射率传感

**中图分类号:** O433.3 **文献标识码:** A **DOI:** 10.3964/j.issn.1000-0593(2020)05-1345-06

## 引言

金属纳米颗粒能够产生局域表面等离激元共振(localized surface plasmon resonance, LSPR)的现象<sup>[1-2]</sup>且对周围环境有很高的敏感度, 能把光场能量局域到一个很小的范围内并产生巨大的场增强效应, 在纳米尺度实现对光能量传输的操纵, 由此受到众多研究人员的重视, 并广泛运用于等离激元激光、光开关、表面增强拉曼光谱等<sup>[3-5]</sup>方面。相邻金属纳米颗粒间的LSPR可以通过近场耦合产生一种独特的效应, 即法诺(Fano)共振效应。在LSPR中金属纳米颗粒的共振模式具有相同电荷分布且很容易与入射光发生强烈的耦合被称为超辐射模式(亮模式), 其光谱有较大的辐射展宽; 若颗粒的共振模式具有相反的电荷分布, 不易与入射光发生耦合, 则

被称为亚辐射模式(暗模式), 因其辐射损耗很弱, 光谱展宽较窄。当整个结构中超辐射和亚辐射模式发生光谱重叠产生相消干涉时, 会出现一种对周围介质环境和结构变化特别敏感的Fano共振效应。近年来基于LSPR实现Fano共振效应<sup>[6-8]</sup>有诸多研究, 例如, 朵儿门结构、同心Ag纳米环圆盘结构、非对称金属环盘纳米腔结构以及金分裂环六聚体等。其中环盘结构是可以激发高强度等离激元Fano共振模式较为突出的一种新型结构。

基于以上思路, 本文提出一种方体及环/盘的金属阵列结构, 利用时域有限差分法(the finite difference time domain method, FDTD)进行仿真计算研究。结果表明, 结构中的Fano共振主要由圆环的偶极共振与方体及环/盘激发的四偶极共振模式之间的相互耦合杂化产生的混合等离激元共振形成。通过仿真结构参数对光学特性的影响, 实现了对共振波

收稿日期: 2019-04-19, 修订日期: 2019-07-30

基金项目: 国家自然科学基金项目(51775283), 江苏省自然科学基金项目(BK20161559), 江苏省高校自然科学基金项目(16KJB510018)资助

作者简介: 曹文, 女, 1994年生, 南京师范大学物理科学与技术学院硕士研究生 e-mail: saintycw@163.com

\* 通讯联系人 e-mail: wangming@njnu.edu.cn

长的有效调控。同时调整入射光的偏振方向能调控该结构的 LSPR, 从而改变透射率大小以及共振谷的强度。经计算分析可得出该结构对周围介质环境有较高的敏感度, 灵敏度最高达  $755 \text{ nm} \cdot \text{RIU}^{-1}$ , 品质因数 FOM 为 18.4。

## 1 计算模型与方法

方体及环/盘的金属阵列结构如图 1 右下角所示, 该结构由左右两不同的圆环, 以及圆盘和位于结构正中心的方体组成, 其中圆盘与右圆环中心偏心。左圆环直径  $L=100 \text{ nm}$ , 右直径圆环  $R=160 \text{ nm}$ , 内小圆盘直径  $r=60 \text{ nm}$ , 圆环高  $H=50 \text{ nm}$ , 环宽度  $W=20 \text{ nm}$ , 方体高  $h=25 \text{ nm}$ , 方体宽  $T=25 \text{ nm}$ , 方体长  $k=50 \text{ nm}$ , 左圆环与方体之间的距离  $D=35 \text{ nm}$ , 结构周期  $P=400 \text{ nm}$ , 衬底材料为  $\text{SiO}_2$ 。本文选取金 (Au) 作为金属薄膜的材料, 当金属的介电常数与频率相关时金属表现出色散特性。利用 FDTD Solutions 建立模型, 采用波长范围  $600 \sim 1700 \text{ nm}$  的平面波, 沿  $Z$  轴正方向向下垂直入射金属表面, 沿  $X$  方向偏振。 $X$  和  $Y$  方向设为周期边界条件, 相当于将计算区域内的模型结构、电磁场及光源强度分布进行周期性延拓。 $Z$  方向设置为吸收边界条件 (PML), 以保证边界上的介质连续分布。

## 2 结果与讨论

### 2.1 方体及环/盘结构的透射谱及电场分布分析

方体及环/盘结构的透射谱如图 1 所示, 观察到在整个波段中有三个共振谷, 对应的波长分别为  $727.94$ ,  $924.93$  和  $1224.54 \text{ nm}$  (分别记为  $J_1$ ,  $J_2$ ,  $J_3$ )。

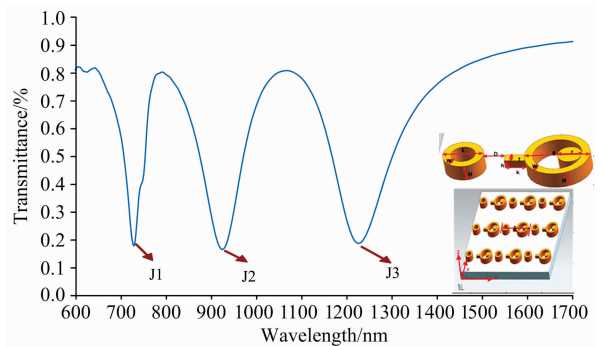


图 1 方体及环/盘结构的透射谱及阵列结构示意图

Fig. 1 Transmission spectrum of square and ring/disk and array structure diagram

为研究方体及环/盘结构的透射谱线中三个谷的产生原因, 分析了不同共振波长位置对应  $XY$  平面上的电场电荷分布图, 如图 2 所示, 在波长入射时电场增强主要集中在左圆环和方体上 [图 2(a)], 此时的电荷分布如图 2(d) 左圆环的内、外壁具有相同的电荷, 呈现对称偶极共振模式, 形成超辐射模式, 右侧为偶极环和偶极盘混合与方体辐射原子组成的整体, 呈现近四偶极共振模式, 形成亚辐射模式, 此时左右两结构激发的两种模式相互反应在  $J_1$  处产生一种混合等离子模式; 当在  $\lambda_{J_2}$  时电场增强 [图 2(b)] 主要存在于左圆环与方体之间以及内小圆盘与右圆环的夹缝处, 观察电荷分布 [图 2(e)], 此时近场耦合作用更明显, 左侧圆环内外壁具有相反的电荷, 呈偶极共振模式, 电荷分布不明显可忽略; 而此时, 右侧圆环/盘与方体结构呈现近四偶极共振模式, 形成亚辐射模式; 图 2(c) 和图 2(f) 是该结构在波长  $\lambda_{J_3}$  入射时

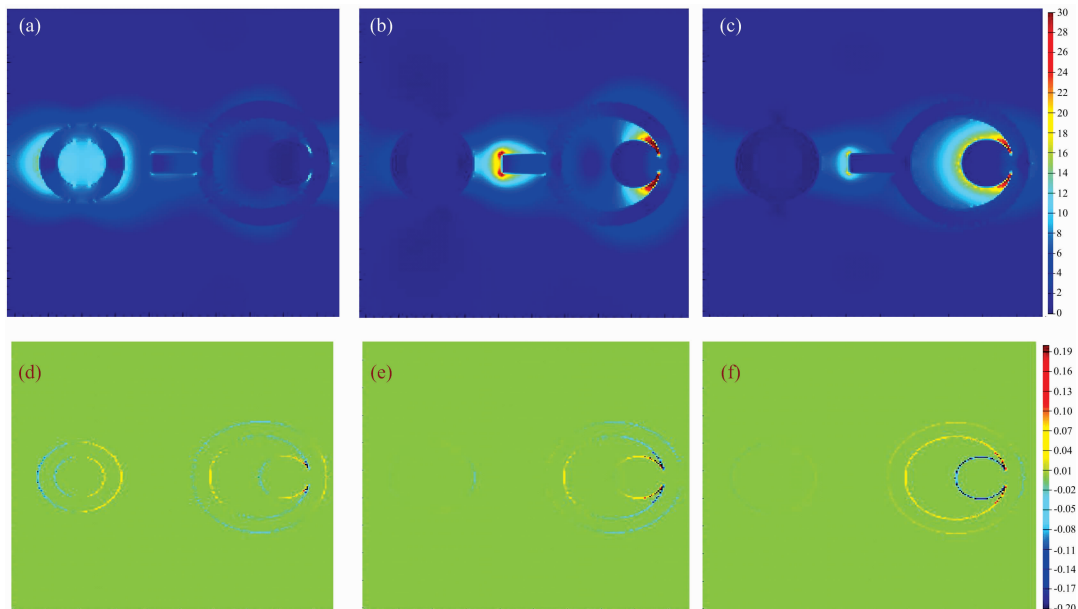


图 2  $XY$  平面上不同共振谷处的电场电荷分布图

(a, d):  $\lambda_{J_1}=727.94 \text{ nm}$ ; (b, e):  $\lambda_{J_2}=924.93 \text{ nm}$ ; (c, f):  $\lambda_{J_3}=1224.54 \text{ nm}$

Fig. 2 Electric field and charge distribution at different resonance valleys on  $XY$  plane

(a, d):  $\lambda_{J_1}=727.94 \text{ nm}$ ; (b, e):  $\lambda_{J_2}=924.93 \text{ nm}$ ; (c, f):  $\lambda_{J_3}=1224.54 \text{ nm}$

的电场电荷分布图，发现电场增强更多的集中在内圆盘边缘，电荷图主要是方体与右偏心结构产生了一种新的偶极共振模式，形成超辐射模式，抑制辐射损耗减弱，光谱的线宽较宽。

### 2.2 结构参数改变对共振谷的调控分析

保持距离  $D$  等其他参数不变，直径  $L$  (70~110 nm) 变化，间隔 10 nm，如图 3 所示，由于左圆环与右侧结构的近

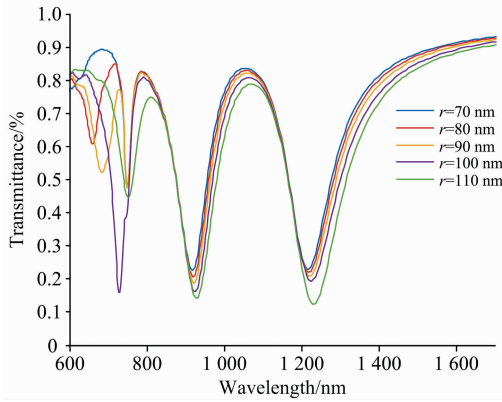


图 3 不同左圆环直径  $L$  的方体及环/盘结构的透射谱  
Fig. 3 Transmission spectra of the structure with different left ring diameters  $L$

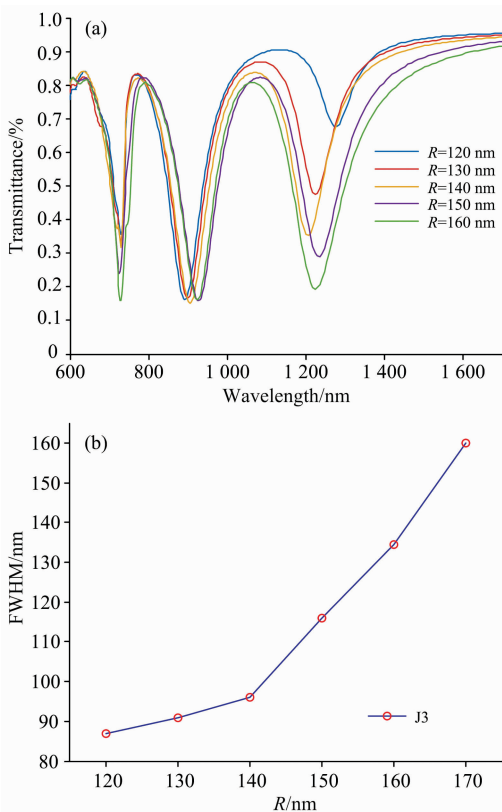


图 4 不同右圆环直径  $R$  的方体及环/盘结构的透射谱及共振谷 J3 的半高宽曲线

Fig. 4 Transmission spectra of the structure with different right ring diameters  $R$  and half maximum width curve at resonance valley J3

场耦合使其在 J1 处产生偶极共振和四偶极共振模式增强，所呈现的混合等离激元模式间的相互作用增强，且尺寸变大，共振的电磁场相位延迟增强导致红移，故透射谱随着直径  $L$  的变化发生红移，透射率值减小。

改变右圆环直径  $R$  的大小 (120~160 nm) 其谱线图如图 4 所示，J1 处的共振强度减小，J2 处的透射率没改变，但由于尺寸变大导致共振相位延迟共振谱线发生红移。J3 处的透射率明显减小，半高宽不断增加，谱线产生蓝移。这表明随着右圆环直径的增大，圆环与偏心圆盘的狭缝变大，近场耦合作用减弱，导致耦合到狭缝的能量减少，透射率值减小，且抑制辐射损耗能力减弱，故半高宽在不断增大。

改变结构的高度  $H$  (35~55 nm)，其透射谱如图 5 所示，随着  $H$  的增加，谱线基本都发生了蓝移，透射率基本呈现减小状态，这是因为随着结构高度的增加带来的迟滞效应在空间和频率上发生相消干涉，导致电场耦合作用不断减弱，最终 Fano 共振强度减弱。

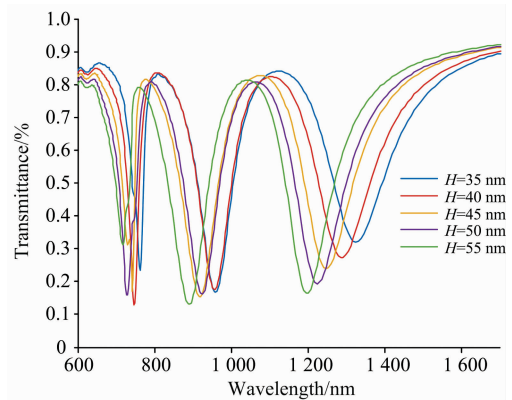


图 5 不同圆环盘高度  $H$  的方体及环/盘结构的透射谱  
Fig. 5 Transmission spectra of the structure with different ring disk heights  $H$

左圆环到方体的距离  $D$  从 20 增加到 40 nm，间隔为 5 nm，其透射谱如图 6 所示，随距离  $D$  的增加，J1 的透射率值减小，J2, J3 处的谱线基本蓝移且透射率略微增大。此时  $D$  发生变化，J1 处的偶极共振模式与四偶极子共振模式的相互

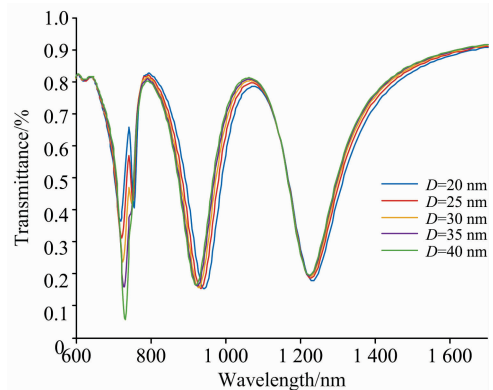


图 6 不同距离  $D$  的方体及环/盘结构的透射谱  
Fig. 6 Transmission spectra of the structure with different distances  $D$

作用增强,且左圆环的偶极共振与右侧的四偶极子共振随近场耦合能力减弱而减弱导致整个谱线发生蓝移及其值都有略微增加。由此,发现该结构可以通过调节结构的相关参数来调谐谱线共振波长位置和透射率大小。

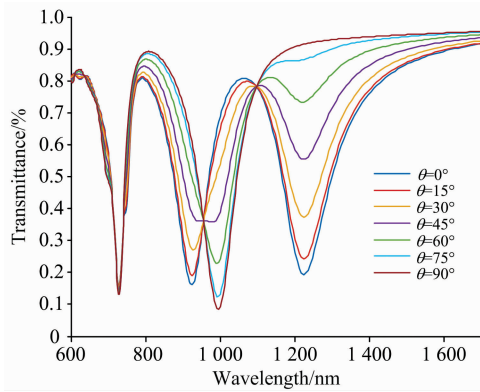


图 7(a) 不同偏振角度  $\theta$  的方体及环/盘结构的透射谱

Fig. 7(a) Transmission spectra of the structure with different polarization angle  $\theta$

### 2.3 入射光源的偏振方向角度 $\theta$ 对结构透射谱的影响

改变入射光源的偏振方向,即电矢量与  $x$  轴的夹角  $\theta$ ,其透射谱如图 7(a)所示,J1 因为圆环是中心对称的,随着光源偏振方向变化,J1 谱线及透射率基本无变化,但右侧是关于  $x$  轴对称的,所以 J2, J3 的谱线有较大的变化,J2 的值先增大到  $45^\circ$ 后减小,谱线发生了红移。而 J3 的值则不断减小直到消失。

为探究仿真 J2 处的偏振角度为  $0^\circ, 30^\circ, 60^\circ, 90^\circ$  的稳态电场分布图,图 7(b)所示,在 J2 处的电场强度随着偏振角度的增加而增大甚至在偏振角度为  $45^\circ$  时在原谷处之外的  $981.1 \text{ nm}$  处产生了一个新的谷,并随之在  $45^\circ$  之后谷值逐渐减小,原 J2 谷值消失。而 J3 处的电场强度基本出现在方体和右侧圆环圆盘的夹缝处,它们的电场则是随入射光源偏振角度的增加而减小,导致此处的偶极共振模式强度减弱,故谷 J3 随偏振角度增加逐渐变小直至消失。因此超辐射和亚辐射模式相消干涉形成的 Fano 共振在偏振角度  $\theta=0^\circ$  时最容易激发且最明显。由此可见,结构的光学特性严重依赖于入射光的偏振方向,偏振方向的改变导致电场强度分布位置及大小的变化引起透射率大小及位置的变化,从而实现偏振方向对结构共振效应的调控。

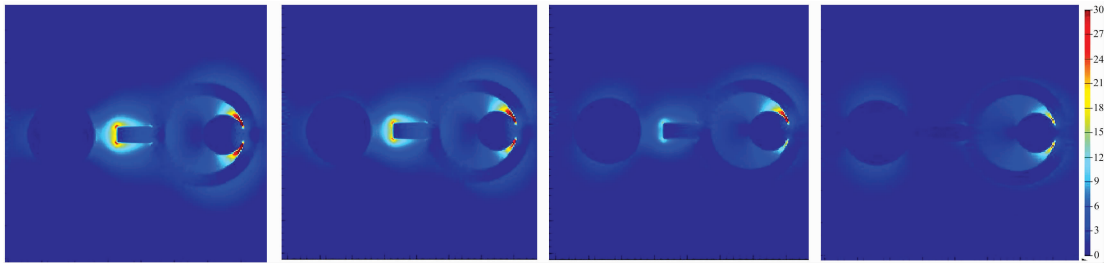


图 7(b) 不同偏振角度谷 J2 处的稳态电场分布图

(a):  $0^\circ$ ; (b):  $30^\circ$ ; (c):  $60^\circ$ ; (d):  $90^\circ$

Fig. 7(b) Steady-state electric field distribution at different polarization angle valley J2

(a):  $0^\circ$ ; (b):  $30^\circ$ ; (c):  $60^\circ$ ; (d):  $90^\circ$

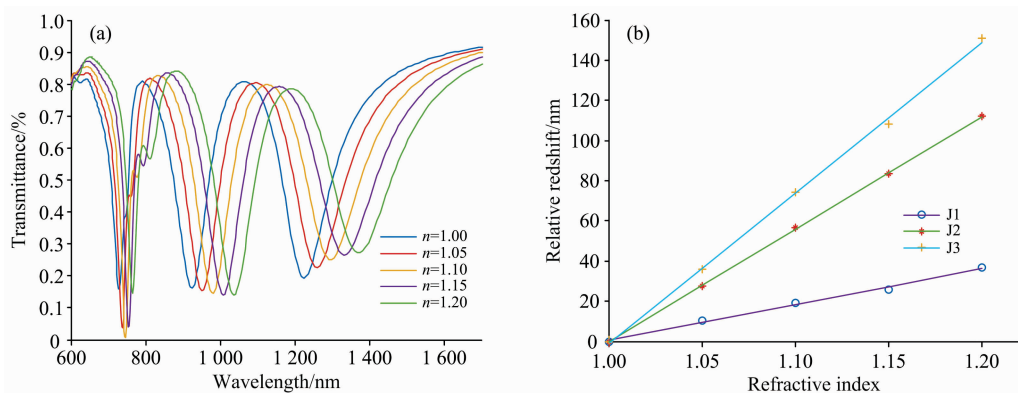


图 8 不同环境折射率下结构的透射谱及各共振谷相对于  $n=1.00$  折射率灵敏度

Fig. 8 Transmission spectra of the structure with different refractive index conditions and the Refractive Index sensitivity of different resonance valleys relative to Refractive Index  $n=1.00$

### 2.4 环境介质折射率 $n$ 对透射谱的调控

对折射率传感器的传感性能的评价可用几个重要的参数

表示。传感器的灵敏度  $S$  可定义为单位介质折射率变化与谐振波长的关系,表示为  $S = \Delta\lambda/\Delta n$ ,品质因数定义为灵敏度

与谐振波谷的半高宽的关系, 即  $FOM = S/\Delta\lambda$ 。为探究该结构对环境折射率的敏感性, 仿真了环境折射率  $n$  分别为 1.00, 1.05, 1.10, 1.15, 1.20 时所对应的透射光谱, 如图 8 所示, 随着环境折射率  $n$  的增加谱线呈现红移现象, 观察透射谱相对折射率  $n=1.00$  处的折射率灵敏度曲线, 共振谷 J3 处的灵敏度最高可达  $755 \text{ nm} \cdot \text{RIU}^{-1}$ , 品质因数  $FOM = 18.4$ , 所以, 该结构可用于生物化学传感和微纳光子学器件方面的应用。

### 3 结 论

利用时域有限差分法研究了方体及环/盘结构的光学特

性。研究表明, 当光入射到金属表面时, 能够激发局域表面等离子体共振现象, 表现出明显的共振效应。Fano 共振是由超辐射模式与亚辐射模式相互作用而形成, 该结构中可以通过调节结构的相关参数来调谐谱线共振波长位置和共振强度, 同时发现调控入射光的偏振方向可以改变结构的 LSPR 从而控制光谱的透射率大小以及共振谷的消存。此外, 分析了该结构在不同周围环境介质下的光学特性, 发现光谱随着折射率的改变发生了偏移, 进一步得到该结构的传感性能, 即灵敏度  $S$  最高可达  $755 \text{ nm} \cdot \text{RIU}^{-1}$ , 品质因数  $FOM = 18.4$ 。该结构不仅设计简单高效, 还具有较好的传感特性, 在生化传感器、微纳光子器件有重要的应用价值。

### References

- [1] Chen Wen, Hu Huatian, Jiang Wei, et al. Chinese Phys. B, 2018, 27(10): 107403.
- [2] Liu Zhengqi, Yu Meidong, Huang Shan, et al. Journal of Mater. Chem. C, 2015, 3: 4222.
- [3] Zhao Qian, Yang Zhongjian, He Jun. Frontiers of Phys., 2018, 13: 137801.
- [4] Yi Zao, Xu Xibin, Kang Xiaoli, et al. Surf. Coat. Technol., 2017, 324: 257.
- [5] Chen Jing, Zha Tangqun, Zhang Tao, et al. Journal of Lightwave Technol., 2017, 35: 71.
- [6] Bao Yanjun, Hu Zhijian, Li Ziwei, et al. Small, 2015, 11: 2177.
- [7] Zheng Chunjie, Jia Tianqing, Zhao Hua, et al. Plasmonics, 2018, 13: 1121.
- [8] Yi Zao, Niu Gao, Ye Xin, et al. Plasmonics, 2017, 12: 889.

## Study on the Surface Plasmon Resonance of Square and Ring/Disc Array Structure

CAO Wen, PAN Ting-ting, DENG Ya-li, LI Mei, HAO Hui, XIA Wei, WANG Ming\*

Key Laboratory on Opto-Electronic Technology of Jiangsu Province, School of Physics Science and Technology, Nanjing Normal University, Nanjing 210023, China

**Abstract** Local surface plasmon resonance is a kind of resonance phenomenon caused by collective oscillation of free electrons on the surface of metal nanoparticles under the action of photons. A kind of square and ring/disc array structure is proposed in this paper, which is composed of the left single ring, the right square and the eccentric ring disk. The optical properties of the structure are investigated by the finite difference time domain (FDTD) method. Fano resonances appear in the transmission spectra due to the electric field couplings between the arrays when linearly polarized light is incident to the metal surface. Obvious resonant valley characteristics are formed at different positions in the wavelength range of  $600 \sim 1700 \text{ nm}$ . Comparison and analysis of electric field and charge simulation diagram, it is found Fano resonance is formed by the coherent interference between the dipole resonance of the ring and the four dipole resonance modes excited by the square and the ring/disc. The local surface plasmon resonance between metal nanoparticles changed by the coupling effect of the electric field. Therefore, the Fano resonance is dependent on the parameters of the structure (such as the diameter of the left ring  $L$ , the diameter of the right ring  $R$ , the height of the structure  $H$ , the distance from the left ring to the square  $D$ , etc.). By changing the parameters of the structure, the wavelength position and the resonant intensity of the resonant valley can be effectively controlled and the optical properties also can be controlled. Because of the unique asymmetry of the structure, the influence of the polarization direction of the incident light source (the angle between the electric vector and the  $x$  axis) on the position of the resonant valley wavelength and the resonant intensity of the structure is further investigated. The structure shows that with the increase of the polarization angle of the light source, the wavelength position at the resonant valley J2 appears obvious red shift phenomenon. However, when the polarization angle is  $90^\circ$ , the Fano resonance can not occur at the resonance valley J3. Therefore, the resonant intensity and the resonant wavelength position of the structure can be controlled by changing the polarization direction of the light source. More im-

portantly, the structure has a high sensitivity to the environmental refractive index, up to  $755 \text{ nm} \cdot \text{RIU}^{-1}$ , and the figure of merit (FOM) can reach 18.4. The results show that the structure has potential application prospects in the applications of environmental refractive index sensors and micro-nanophotonic devices.

**Keywords** Localized surface plasmon resonance; Fano resonance; Array structure; Refractive index sensing

\* Corresponding author

(Received Apr. 19, 2019; accepted Jul. 30, 2019)

欢迎投稿

欢迎订阅

欢迎刊登广告

## 《光谱学与光谱分析》2020年征订启事

国内邮发代码: 82-68

国外发行代码: M905

《光谱学与光谱分析》1981年创刊,国内统一刊号: CN 11-2200/O4,国际标准刊号: ISSN 1000-0593, CODEN 码: GYGFED,国内外公开发刊,大16开本,332页,月刊;是中国科协主管,中国光学学会主办,钢铁研究总院、中国科学院物理研究所、北京大学、清华大学共同承办的学术性刊物。北京大学出版社出版,每期售价95元,全年1140元。刊登主要内容:激光光谱测量、红外、拉曼、紫外、可见光谱、发射光谱、吸收光谱、X射线荧光光谱、激光显微光谱、光谱化学分析、国内外光谱化学分析领域内的最新研究成果、开创性研究论文、学科发展前沿和最新进展、综合评述、研究简报、问题讨论、书刊评述。

《光谱学与光谱分析》适用于冶金、地质、机械、环境保护、国防、天文、医药、农林、化学化工、商检等各个领域的科学研究单位、高等院校、制造厂家、从事光谱学与光谱分析的研究人员、高校有关专业的师生、管理干部。

《光谱学与光谱分析》为我国首批自然科学核心期刊,中国科协优秀科技期刊,中国科协择优支持基础性、高科技学术期刊,中国科技论文统计源刊,“中国科学引文数据库”,“中国物理文摘”,“中国学术期刊文摘”,同时被国内外的CJCR, CNKI, CSCD, SCI, AA, CA, Ei, AJ, PJK, MEDLINE, Scopus等文献机构收录。根据中国科学技术信息研究所发布信息,中国科技期刊物理类影响因子、引文量及综合评价总分《光谱学与光谱分析》都居前几位。欢迎国内外厂商在《光谱学与光谱分析》发布广告(广告经营许可证:京海市监广登字20170260号)。

《光谱学与光谱分析》的主编为高松院士。

欢迎新老客户到全国各地邮局订阅,若有漏订者可直接与《光谱学与光谱分析》期刊社联系。

联系地址:北京市海淀区学院南路76号(南院),

《光谱学与光谱分析》期刊社

邮政编码: 100081

联系电话: 010-62181070, 62182998

电子信箱: chngpxygpfx@vip.sina.com

修改稿专用邮箱: gp2008@vip.sina.com

网 址: <http://www.gpxygpfx.com>

