

·测试、试验与仿真·

色散金属的时域有限差分方法

文 明, 王新林, 罗 虎, 朱诗佳, 易陈林

(南华大学 电气工程学院, 湖南 衡阳 421001)

摘 要:表面等离子体激元具有使光场局域化和局域电磁场增强等特性,在纳米光子学和微观检测等诸多领域显示出广泛的应用潜力.时域有限差分(FDTD)数值计算方法能仿真激光与亚波长金属微结构相互作用的表面等离子体效应.金属具有色散性质,其相对介电常数模型有 Drude 模型和 Lorentzs 模型及它们相结合的 Drude-Lorentzs 模型,能拟合金属在可见光和近红外部分或全部波段的色散特性.FDTD 数值计算要采用增加辅助变量和相应的辅助差分方程的方法使 FDTD 迭代计算稳定.

关键词:时域有限差分;色散金属;表面等离子体;相对介电常数模型;辅助差分方程

中图分类号:TL65⁺3

文献标识码:A

文章编号:1673-1255(2010)05-0070-04

Finite-Difference Time-Domain Method of Dispersion Metal

WEN Ming, WANG Xin-lin, LUO Hu, ZHU Shi-jia, YI Chen-lin

(School of Electrical Engineering, University of South China, Hengyang 421001, China)

Abstract: Surface plasmon polaritons (SPPs) have some characteristics such as optical field localization and local electromagnetic field enhancement and so on, so it exhibits extensive potential application in nano-photonics and microscopic detection and many other domains. The finite-difference time-domain (FDTD) numerical method can simulate the surface plasmon (SP) effect of laser interaction with the subwavelength metal microstructure. The relative dielectric constant of metal is frequency dependent (dispersion). There are three dispersion models about metal's relative dielectric constant in visible light and near-infrared wave band, such as Drude model, Lorentzs model and Drude-Lorentzs mode. In order to get FDTD iterative computation stable, FDTD numerical method should increase the subsidiary variable and the corresponding auxiliary difference equation.

Key words: finite-difference time-domain; dispersion metal; surface plasmon polaritons; relative dielectric constant model; auxiliary difference equation

表面等离子体激元(surface plasmon polaritons, SPPs)是由光波和可迁移的表面电荷(特别是金属中的传导电子)相互作用产生的电磁模式^[1,2].表面等离子体是沿着导体表面传播的波,电磁场在垂直表面的两个方向上,均以指数式衰减,将电磁场(光场)能量聚集在很小的截面空间范围的特性,称之为光场局域化特性.传统光学器件受到衍射极限的制约,其尺寸的微小化和集成度的提高都受到限制.

SPPs 具有光场局域化的特点,可以突破衍射极限,使光在亚波长截面区域中向前传播,因而在纳米光子学领域显示出巨大的应用潜力,被喻为目前最有希望的纳米集成光子器件的信息载体,用于实现纳米光学器件^[3-7].SPPs 的另一突出特点是巨大的局域电磁场增强效应.这种局域电磁场增强效应已经在高灵敏生物化学传感、新型光源、高效光学元器件等领域获得了广泛应用^[6-8].当改变金属表面结构

收稿日期:2010-10-09

作者简介:文明(1985-),男,江西人,硕士研究生,主要研究方向为激光技术及光电子应用.

时,表面等离子体激元(SPPs)的性质、色散关系、激发模式、耦合效应等都将产生重大的变化.通过SPPs与光场之间相互作用,能够实现对光传播的主动操控^[2].表面等离子体光子学(plasmonics)已成为一门新兴的学科,它的原理、新颖效应以及机制的探究,都极大地吸引广大研究者的兴趣,包括物理学者、化学者、材料学者、生物学者和医学者等^[2-5].SPPs具有广阔的应用前景,例如:应用于制作各种SPPs元器件和回路,制作纳米波导、表面等离子体光子芯片、耦合器、调制器和开关^[2,4,7,9],应用于亚波长光学数据存储、新型光源、突破衍射极限的超分辨成像、SPPs纳米光刻蚀术、以及生物光学(作为传感器和探测器)等领域^[2-5].

激光与亚波长金属微结构相互作用产生表面等离子体的物理过程复杂,激光参数和金属微结构的材料、形状、大小和周围介质的性质等因素共同决定其作用过程,对其物理机制还不是十分清晰,因而研究激光与亚波长金属微结构相互作用的物理过程有重要的科学意义,对其进一步研究和应用起到非常关键的作用.激发SPPs相应的微结构的尺寸在纳米到微米量级,在纳米结构的制备和观测纳米区域电磁场需要高性能的显微镜等,成本较高.然而经济实惠的计算机数值模拟方法提供了很好的分析手段.数值计算能非常直观地观察某个微小区域电磁场区域分布与变化.通过数值模拟和实验相结合的方法,数值计算模拟指导实验,实验又反作用于数值计算方法的修正,能很好地研究SPPs的相关特性.因而,数值计算是非常必要的.文中重点介绍数值计算色散金属的SPPs效应的时域有限差分(Finite-Difference Time-Domain, FDTD)方法.文章分为四部分,首先简要介绍SPPs的特性;其次简单地描述FDTD理论方法;再次详细介绍色散介质的相对介电常数模型及离散后的FDTD迭代方程;最后为全文的总结.

1 SPPs的特性

在金属和电介质界面为平面的情况下,从麦克斯韦方程组和界面连续性条件出发,推导出SPPs的色散关系及其4个特征长度^[1-3].SPPs色散关系为: $k_{spp} = (\omega/c) \sqrt{\epsilon_d \epsilon_m / \epsilon_d + \epsilon_m}$;从色散得出SPPs波失比真空中光波失大,因而在一般情况下SPPs没有被激发,只有增加入射光波的波失,使之相匹

配,才能激发SPPs.SPPs传播长度为 $\delta_{spp}: \delta_{spp} \cong 1/2k''_{spp}x \cong (c/\omega) \epsilon'_m \epsilon''_m$;SPPs波长 $\lambda_{spp}: \lambda_{spp} = \lambda_0 \sqrt{\epsilon_d + \epsilon'_m / \epsilon_d \epsilon'_m}$;金属和电介质中的穿透深度分别为 δ_d 和 $\delta_m: \delta_m = (c/\omega)[(\epsilon_d + \epsilon'_m) / \epsilon'^2_m]^{1/2}$; $\delta_d = (c/\omega)[(\epsilon_d + \epsilon'_m) / \epsilon_d^2]^{1/2}$.这些长度尺寸跨越了从纳米到厘米7个数量级^[1].SPPs在介质中穿透深度为半个波长量级,在金属中穿透深度为趋附深度左右,仅为几十纳米.因而可使光聚集在很小的空间范围的特性,这就是SPPs的光场局域化特性.

SPP可出现在任何形状的金属/电介质界面,其色散关系跟平面界面类似.局域表面等离子体(Localized Surface Plasmon, LSP)是纳米粒子等纳米结构附近的电荷密度震荡.当入射电磁场激发LSP时,会产生强的SPP吸收带、强的光散射和局域电磁场增强^[3].光通过金属薄膜上单孔径或者大小为亚波长尺寸的洞阵列结构的金属板时,实验上已经观察到透射增强现象^[2-5,10].在二维情形,一个亚波长尺寸的圆洞被同心周期槽状圆圈环绕时,也观察到透射增强现象^[2,4,11].在上述类似结构中也观察到光聚束效应,也就是说,此结构所辐射的电磁波出现很强的角度限制,当入射光频率接近SPPs模的共振频率时,光束的角发散度仅为 $\pm 3^\circ$ ^[2-5,10,11].

2 FDTD理论方法

时域有限差分(Finite-Difference Time-Domain, FDTD)是电磁场的一种时域计算方法.1966年K.S.Yee首次提出了电磁场数值计算的新方法——时域有限差分(FDTD)方法,对电磁场 E 、 H 分量在空间和时间上采取交替抽样的离散方式,每一个 E (或 H)场分量周围有4个 H (或 E)场分量环绕,应用这种离散方式并利用二阶的中心差分近似将含时间变量的麦克斯韦旋度方程转化为一组差分方程,并在时间轴上推进地求解空间电磁场^[12-14].具体的求解过程详见参考文献^[13,14]中.

波源的加入有3种方法:硬源、软源和总场散射场(TF/SF)法^[13,14].吸收边界条件可采用Berenger完全匹配层(PML)吸收边界条件^[13-16].

FDTD数值计算方法已经在超快激光与亚波长金属微结构相互作用的表面等离子体效应模拟仿真得到一定应用,在某些特定亚波长金属微结构下激光与之相互作用的表面等离子体效应的光场分布仿

真结果与实验结果相吻合^[17-22].

3 色散介质的相对介电常数模型

金属的相对介电常数随着频率的变化而变化,直接应用 FDTD 迭代计算会使算法不稳定.适当地处理材料色散对光频区域中短脉冲传播和宽的频率范围内传播现象的仿真非常重要,直接影响到结果是否正确.采用增加变量及相应的辅助差分方程的方法,可有效地解决 FDTD 迭代方程中金属的色散问题.下面详细地介绍 Drude 模型、Lorentzs 模型和 Drude-Lorentzs 模型的色散金属的相对介电常数模型及其相应的 FDTD 离散方法.

3.1 Drude 模型

最简单的色散金属性质是用 Drude 函数表示金属的相对介电常数^[17-20].Drude 模型只考虑到金属的自由电子激发,没考虑到电子的带间跃迁,只适合于一定频率的光波(对应于一定光子的能量范围).对于银材料,Drude 模型适用于光子能量在 3.0~40 eV.而大于 4 eV 的光子能量,由于带间跃迁,Drude 模型就不适合^[19,22].

$$\epsilon_r(\omega) = \epsilon_\infty - \frac{\omega_p^2}{\omega^2 + i\omega\gamma} \quad (1)$$

其中, ϵ_∞ 为高频极限下的介电常数; ω_p 为等离子体频率, γ 为衰减常数.

把 Drude 函数式(1)表示相对介电常数式代入频域中麦克斯韦的磁场旋度方程得到

$$\nabla \times H(\omega) = -i\omega\epsilon_0\epsilon_r(\omega)E(\omega) = -i\omega\epsilon_0\epsilon_\infty(\omega)E(\omega) + J(\omega) \quad (2)$$

其中电流密度 J 为

$$J(\omega) = i\omega\epsilon_0(\omega_p^2/\omega^2 + i\omega\gamma)E(\omega) \quad (3)$$

分别对式(2)和式(3)傅里叶变换后得到时域电场迭代方程

$$\frac{\partial E(t)}{\partial t} = \frac{1}{\epsilon_{eff}}(\nabla \times H(t) - J(t)) \quad (4)$$

$$\frac{\partial J(t)}{\partial t} = \epsilon_0\omega_p^2 E(t) - \gamma J(t) \quad (5)$$

其中, $\epsilon_{eff} = \epsilon_0\epsilon_\infty(\omega)$.在自由空间或非色散介质材料区域,电流密度 J 在初始值为零处仍为零,且 $\epsilon_{eff} = \epsilon_0$.由于考虑是非磁损耗材料,磁场迭代方程不变

$$\frac{\partial H(t)}{\partial t} = -\frac{1}{\mu_0}(\nabla \times E(t)) \quad (6)$$

3.2 Lorentzs 模型

色散金属介质的相对介电常数用 N 项 Lorentzian 共振项表示^[21].电子带间跃迁效应很重要时,就必须引入 Lorentzian 项到相对介电常数模型中^[19,21].Lorentzs 模型能应用于近红外波段频率的金的相对介电常数拟合.

$$\epsilon_r(\omega) = \epsilon_\infty - \sum_{l=1}^N g_l \omega_l^2 (\epsilon_s - \epsilon_\infty) / (\omega^2 - \omega_l^2 + i2\gamma_l \omega) \quad (7)$$

其中, ϵ_∞ 为高频极限下的介电常数; ω_l 为等离子体频率; γ_l 为衰减常数; g_l 为各 Lorentzian 项系数;

$$\sum_{l=1}^N g_l = 1; \Delta\epsilon = \epsilon_s - \epsilon_\infty \text{ 为各项的介电常数差值.}$$

引入电位移矢量 D 和极化强度矢量 P 为

$$D(r, t) = \epsilon_0\epsilon_\infty E(r, t) + P(r, t) \quad (8)$$

把式(7)代入式(8)后得到极化强度

$$\epsilon_0 \left(\sum_{l=1}^N \frac{g_l \omega_l^2 (\epsilon_s - \epsilon_\infty)}{\omega_l^2 - \omega^2 - i2\gamma_l \omega} \right) E(\omega) = \sum_{l=1}^N P_l(\omega) \quad (9)$$

式(9)傅里叶变换到时域后得到

$$P'_k + 2\gamma_k P'_k + \omega_k^2 P_k = \omega_k^2 b_k (D - \sum_{l=1}^N P_l) \quad (10)$$

其中, P'_k 表示对时间求偏导; $b_k = g_k(\epsilon_s - \epsilon_\infty)/\epsilon_\infty, k = 1, 2, \dots, N$.

离散化后并整理后得到迭代公式为

$$P_k^{n+1} = a_{1,k} P_k^n + a_{2,k} P_k^{n-1} + a_{3,k} (D^n - \sum_{l=1}^N P_l^n) \quad (11)$$

其中系数为

$$a_{1,k} = (2 - \omega_k^2 \Delta t^2) / (\gamma_k \Delta t + 1)$$

$$a_{2,k} = (\gamma_k \Delta t - 1) / (\gamma_k \Delta t + 1)$$

$$a_{3,k} = \omega_k^2 \Delta t^2 b_k / (\gamma_k \Delta t + 1)$$

完整的电场迭代过程为

$$D^{n+1} = D^n + \Delta t \nabla \times H^{n+1/2}$$

$$P_k^{n+1} = a_{1,k} P_k^n + a_{2,k} P_k^{n-1} + \epsilon_0 \epsilon_\infty a_{3,k} E^n \quad (12)$$

$$E^{n+1} = (D^{n+1} - \sum_{l=1}^N P_l^{n+1}) / \epsilon_0 \epsilon_\infty$$

3.3 Drude-Lorentzs 模型

采用 Drude 模型和 Lorentzs 模型相结合的 Drude-Lorentzs 模型,能更大波长范围内有效地拟合某些金属的相对介电常数,在同样较高的精度下,

引入较少的辅助变量,从而提高计算速度和效率.例如:在整个光波段(300~1 000 nm)的银的相对介电常数用 Drude 和 2 项 Lorentzian 就可以有效地拟合^[21],而用 Lorentz 模型要用 4 项 Lorentzian 或更多项去拟合. Drude - Lorentz 模型色散金属的相对介电常数为^[22]

$$\epsilon_r(\omega) = \epsilon_\infty - \frac{\omega_p^2}{\omega^2 + i\omega\gamma_d} - \sum_{l=1}^N \frac{g_l \omega_l^2 \Delta\epsilon}{\omega^2 - \omega_l^2 + i2\gamma_l \omega} \quad (13)$$

相应的引入变量极化强度矢量 P_d 、电位移矢量 D 和极化强度矢量 P_l

$$D(r, t) = \epsilon_0 \epsilon_\infty E(r, t) + P_d(r, t) + P_l(r, t) \quad (14)$$

其中, P_l 处理与 Lorentz 模型完全一致,不再重复. 现讨论极化强度矢量 P_d

$$-\epsilon_0 \left(\frac{\omega_p^2}{\omega^2 + i\omega\gamma_d} \right) E(\omega) = P_d(\omega) \quad (15)$$

根据与 Lorentz 模型中 P_l 类似处理后得到迭代公式

$$P_d^{n+1} = a_{1,d} P_d^n + a_{2,d} P_d^{n-1} + a_{3,d} E^n \quad (16)$$

其中系数为

$$a_{1,d} = (2 + \gamma_d \Delta t) / (\gamma_d \Delta t + 1)$$

$$a_{2,d} = -1 / (\gamma_d \Delta t + 1)$$

$$a_{3,d} = \Delta t^2 \epsilon_0 \omega_p^2 / (\gamma_d \Delta t + 1)$$

完整的电场迭代过程为

$$D^{n+1} = D^n + \Delta t \nabla \times H^{n+1/2}$$

$$P_d^{n+1} = a_{1,d} P_d^n + a_{2,d} P_d^{n-1} + a_{3,d} E^n$$

$$P_k^{n+1} = a_{1,k} P_k^n + a_{2,k} P_k^{n-1} + \epsilon_0 \epsilon_\infty a_{3,k} E^n \quad (17)$$

$$E^{n+1} = (D^{n+1} - P_d^{n+1} - \sum_{l=1}^N P_l^{n+1}) / \epsilon_0 \epsilon_\infty$$

计算非磁损耗材料时,磁场的迭代方程跟 Drude 模型相同,后两个模型没有重复叙述.

4 结 论

简述了 SPPs 具有光场局域化和局域电磁场增强等特性和 FDTD 数值计算理论方法. SPPs 主要在金属表面激发,但是金属具有色散性质,因而要采用增加变量和辅助差分方程的方法使 FDTD 迭代计算稳定. 重点介绍了 Drude 模型、Lorentz 模型和 Drude - Lorentz 模型的色散金属的相对介电常数及其 FDTD 离散方法,适应于金属材料(金和银等)

在可见光和近红外波段的(某个频段或全频段)的电磁场数值模拟. 采用 Drude 模型和 Lorentz 模型相结合的 Drude - Lorentz 模型,能在更大波长范围内,在同样的精度下,引入较少的辅助变量,从而提高 FDTD 计算速度和效率.

参考文献

- [1] Barnes W L, J. Opt, A 2006, 8: S87 - S93.
- [2] 顾本源. 物理[M], 2007, 36(4).
- [3] Dragomana M, Dragomanb D. Progress in Quantum Electronics[J], 2008, 32: 1 - 41.
- [4] Ozbay E. Science, 2006, 311: 189.
- [5] Barnes W L, Dereux A, Ebbesen T W. Nature, 2003, 424: 824 - 830.
- [6] Pitarke J M, Silkin V M, Chulkov E V, et al. Rep. Prog. Phys, 2007, 70: 1 - 87.
- [7] 汪国平. 物理, 2006, 35(6).
- [8] Maier S A, Atwater H A. J. Appl. Phys, 2005, 98: 011101.
- [9] Krasavin A V, Zayats A V, Zheludev N I. J. Opt. A: Pure Appl. Opt, 2005, 7: S85 - S89.
- [10] Ebbesen T W, Lezec H J, Ghaemi H F, et al. Nature, 1998, 391: 667.
- [11] Lezec H J, Degiron A, Devaux E, Science, 2002, 297: 820.
- [12] Yee K S, IEEE Trans. Antennas Propag, 1966, 14: 302.
- [13] Taflove A, Hagness S C. Computational Electrodynamics: The Finite - Difference Time - Domain Method [M]. 2nd ed, Boston, Artech House. 2000.
- [14] 葛德彪, 闫玉波. 电磁场时域有限差分方法[M]. 2版. 西安: 西安电子科技大学出版社, 2005: 11 - 147.
- [15] Berenger J - P. J. Comput. Phys, 1994, 114: 185
- [16] Berenger J - P. Perfectly Matched Layer (PML) for Computational Electromagnetics [M]. France, Centre d'Analyse de Défense Arcueil, 2007: 1 - 117
- [17] Gray S K, Kupka T. Phys. Rev, B 2003, 68: 045415
- [18] Shuford K L, Ratner M A, Gray S K, et al, Appl. Phys, B 2006, 84: 11 - 18.
- [19] Lee T W, Gray S K. Phys. Rev, B 2005, 71: 035423.
- [20] Chang S - H, Gray S K, Schatz G C. Opt. Express, 2005, 13: 3150.
- [21] Montgomery J M, Lee T W, Gray S K. J. Phys. Condens. Matter, 2008, 20: 323201.
- [22] Lee T W, Gray S K. Opt. Express, 2005, 13: 9652 - 9659.