

·光电器件与材料·

表面等离子体激元共振的场增强理论研究

刘家源,安志勇,李亚红,崔士宝

(长春理工大学 光电工程学院,长春 130022)

摘要:构建了一种绝缘体-金属-绝缘体的表面等离子体激元的产生界面,根据麦克斯韦方程组及边界条件,分析了金属表面的色散特性,同时利用时域有限差分(FDTD)方法分别模拟了Bow-tie纳米结构和矩形纳米结构在单光源辐射下的场增强效应,以及双Bow-tie纳米结构分别在单、双光源辐照下的场增强效果,通过对比分析模拟结果可发现,在等离子体激元共振的场增强中电荷的尖端效应发挥着重要作用,而且场增强幅度与纳米结构之间的距离有关,只有当纳米结构之间的距离合适时,才能使其获得最大场增强效应。

关键词:表面等离子体激元;色散特性;时域有限差分;场增强;尖端效应

中图分类号:O471.3

文献标识码:A

文章编号:1673-1255(2015)-04-0011-05

Theoretical Research on Field Enhancement of Surface Plasma Polariton

LIU Jia-yuan, AN Zhi-yong, LI Ya-hong, CUI Shi-bao

(School of Opto-electronic Engineering, Changchun University of Science and Technology, Changchun 130022, China)

Abstract: A type of insulator-metal-insulator surface plasma polariton interface is proposed. According to Maxwell equations and boundary conditions, the dispersion characteristics of metal surface are analyzed. Finite-difference-time-domain (FDTD) method is used to simulate the field enhancement effect of Bow-tie and rectangular nano-structure under a single light source radiation and the field enhancement effects of double Bow-tie nano-structure under single and double light sources radiation respectively. Comparing and analyzing the simulation results show that the point effect plays an important role in the field enhancement effect of plasma polariton, and the field enhancement effect is associated with the distance between the nano-structures. Only when the distance between the nanostructures is right, the maximum field enhancement can be obtained.

Key words: surface plasma polariton; dispersion characteristics; finite-difference-time-domain; field enhancement; point effect

1957年,Ritchie发现电子穿过金属薄片时存在“能量降低的”等离子体模式,第一次提出了“金属等离子体”的概念。随后,Powell等人用实验验证了Ritchie的理论,而Stem等人也研究了“表面等离子共振”的条件。1982年,Nylander和Liedberg在气体检测和生物传感领域中应用了表面等离子共振原理。表面等离子共振是金属纳米结构非常独特的光学特性,基于表面等离子共振的纳米结构体系的研究已成为了国际上迅猛发展的热点研究

领域之一,即表面等离子体光子学。

随着纳米科学技术的发展,表面等离子体光子学这一学科已经包含了非常广泛的研究内容,如表面光电场增强、表面增强光谱、增强拉曼散射、光透射增强、表面等离子体纳米波导、光学力增强、表面等离子体光催化、表面增强的能量转移及选择性光吸收等。这些研究,不但发现了许多新现象并提出许多新问题,也展示出了巨大的应用前景,有望为纳米表征技术和以其为基础的传感器技术提供新

原理和新方法,进而发展为具有超高检测灵敏度的新型表面等离子体和表面增强光谱传感器^[1]。因此,加强表面等离子体激元共振方面的理论及其物理方面的研究工作,对于提高科技竞争力有十分积极的作用。

1 表面等离子体共振

当光波入射到金属与介质分界面时,金属表面的自由电子发生集体振荡,光波与金属表面的自由电子耦合而形成一种沿着金属表面传播的近场电磁波,如果电子的振荡频率与入射光波的频率一致,就会产生共振,在共振状态下电磁场的能量被有效地转变为金属表面自由电子的集体振动能,这时就形成了一种特殊的电磁模式:电磁场被局限在金属表面很小的范围内并发生增强,这种现象被称为表面等离子体共振现象。通常利用光波照射三棱镜的方法来产生表面等离子体共振,当入射光的角度合适时,光波便可以在分界面处发生全反射,这时在界面的另一端就会出现半个波长的倏逝波。这个倏逝波会激发金属表面的自由电子产生表面等离子体激元^[2]。当光波的频率与等离子体激元的频率和波数吻合时,便可激发表面等离子共振,入射光波强度急剧衰减,在探测器中显示为共振吸收峰。这里之所以要用棱镜产生的倏逝波,是因为要激发表面等离子体共振,必须要使表面等离子体共振和入射光波的频率和波矢同时相等,这时二者将发生能量耦合,发生共振。

产生表面等离子体激元的界面如图1所示。由一个厚度为 d ,介电常数为 ε_1 的金属薄膜夹在介电常数分别为 ε_0 和 ε_2 的两介质之间构成。其电场可

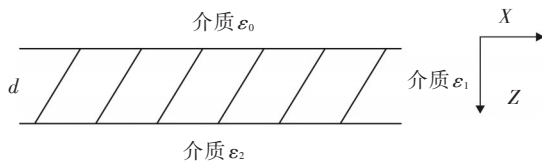


图1 产生表面等离子体激元的界面示意图

以表示为

$$E = E_0 \exp[i(k_x x \pm k_z z - \omega t)] \quad (1)$$

根据麦克斯韦方程组及边界条件,对于金属表面($\varepsilon_1 = \varepsilon_1' + i\varepsilon_1''$),可得色散关系如下

$$\frac{k_{z1}}{\varepsilon_1} + \frac{k_{z2}}{\varepsilon_2} = 0 \quad (2)$$

$$\varepsilon_1 \left(\frac{\omega}{c} \right)^2 = k_x^2 + k_z^2 \quad (3)$$

其中, k_{zi} ($i=1,2$)为垂直于两介质交界面的波矢; k_x 为平行于两介质交界面的波矢。如图1所示金属夹在介电常数为 ε_0 和 ε_2 的两种介质之间,因此 k_{z1} 和 k_{z2} 均为虚数,因此可以得到

$$k_{z1} = ik_p \left[\left(\frac{k_x}{k_p} \right)^2 - \varepsilon_1 \left(\frac{\omega}{\omega_p} \right)^2 \right]^{1/2} \quad (4)$$

$$k_{z2} = ik_p \left[\left(\frac{k_x}{k_p} \right)^2 + \varepsilon_2 \left(\frac{\omega}{\omega_p} \right)^2 \right]^{1/2} \quad (5)$$

其中, k_p 和 ω_p 分别为等离子体激元的波矢和角频率。以 ω/ω_p 和 k_x/k_p 作图,可得到如图2所示的表面等离子体色散曲线。由式(5)可得表面等离子体振荡模式为

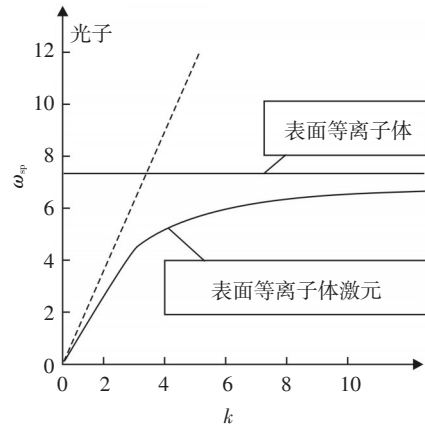


图2 表面等离子体的色散曲线

$$(\varepsilon_1 k_{z2} + \varepsilon_2 k_{z1}) \pm (\varepsilon_1 k_{z2} - \varepsilon_2 k_{z1}) \exp(2ik_{z1}d) = 0 \quad (6)$$

2 利用FDTD模拟场增强效应

时域有限差分(FDTD)方法是1966年K S Yee提出的,对麦克斯韦方程作差分处理,来解决电磁脉冲在电磁介质中传播和反射问题^[12]。文中采用时域有限差分(FDTD)方法分别模拟了Bow-tie纳米结构和双Bow-tie纳米结构的场增强效应及其产生的物理机制。

目前存在有多种样式的纳米结构,如“#”形、球形、矩形、梯形结构等。文中则是以目前较为关注的Bow-tie纳米结构为基础,进行了相应的模拟实

验。Bow-tie 纳米结构如图 3 所示。其参数设置为:高 $h=175$ nm, 顶角 $\theta=30^\circ$, 厚度 $z=50$ nm。模拟过程中采用面光源, 波长范围为 790~810 nm, 脉冲持续时间为 5.126 4 fs, 脉冲峰值时间延迟 14.468 fs, 边界

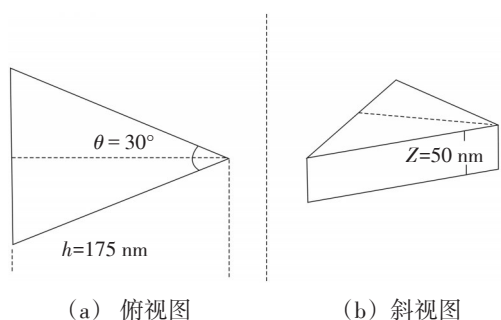


图 3 Bow-tie 纳米结构示意图

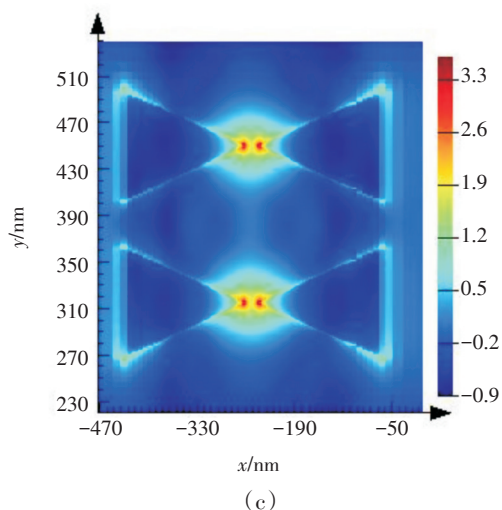
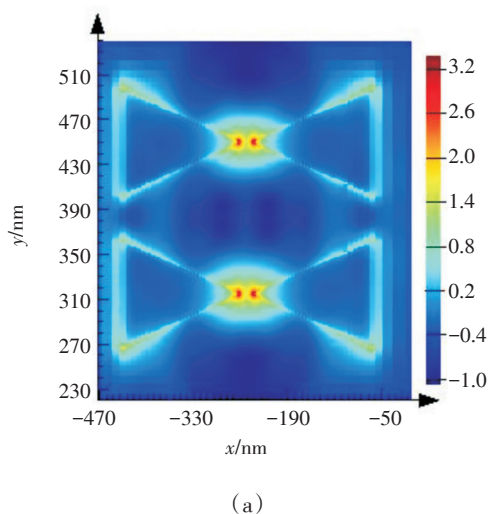
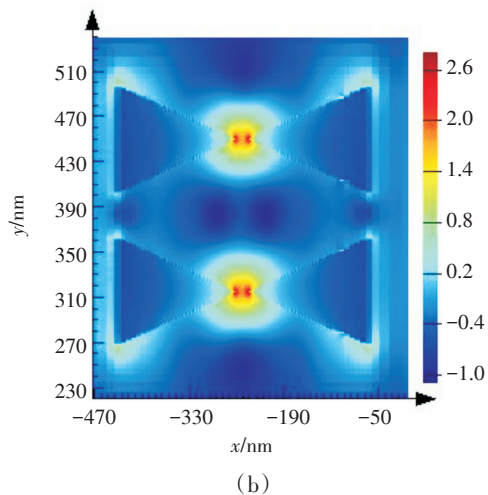


图 4 Bow-tie 纳米结构的场增强模拟结果



(a)



(b)

选择完美边界匹配层, monitor 选择默认设置。Bow-tie 纳米结构的 FDTD 模拟结果如图 4 所示。

图 4 这三幅图分别来自于不同位置的三个 monitor。它们各自的坐标分别为 $z_1=25$ nm, $z_2=0$ nm, $z_3=-25$ nm, 即这三个 monitor 分别位于 Bow-tie 的上表面、中间和下表面。从图 4 中可以看出, 在 Bow-tie 的不同位置处的场增强效果并不相同, 中间区域处的场增强了 102.6 倍, 而上、下表面的场增强分别为 103.2 倍和 103.3 倍。对于这种现象, 可能的解释是电子的趋肤效应使大多数的电子集中于金属的上下表面, 从而使这两部分的增强效果要强于中间。同时需要明确的是, 这些强度分布图并不是某一时刻的强度分布, 而是在总的模拟时间内场强的平均值。

为了进一步研究 Bow-tie 结构的尖端电荷积聚效应, 进行了理论假设: 当入射光源为电场方向平

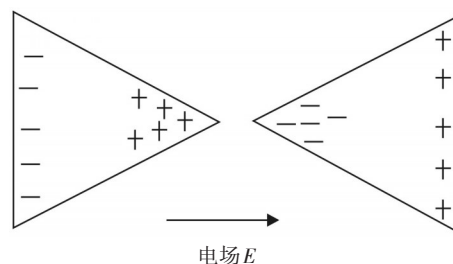


图 5 单光源下 Bow-tie 纳米结构的电荷分布图

行于 x 轴的飞秒激光源, 照射 Bow-tie 纳米结构时, 会产生如图 5 所示的电荷分布。

为了验证这一猜想, 设计了双 Bow-tie 纳米结构, 并预测在单光源照射下和双光源照射下会有不

同的结果,分别如图6a和图6b所示。由于飞秒激光源的电场方向随着时间变化,因此,在设置光源时

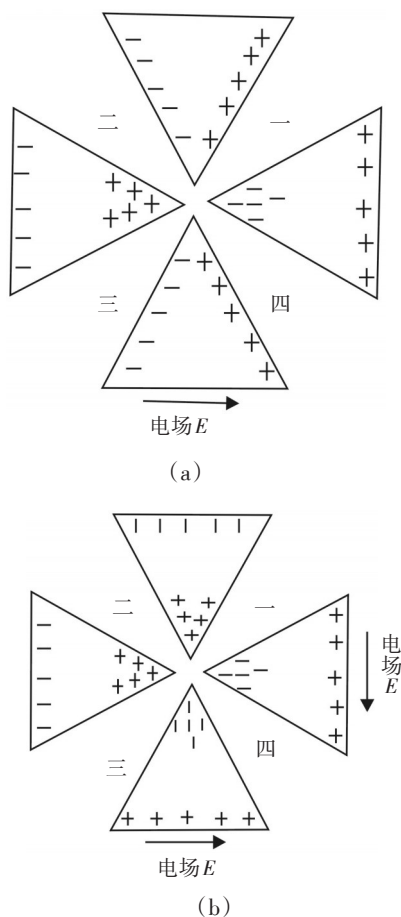


图6 单、双光源下双Bow-tie纳米结构的电荷分布图

使得第一个光源的电场方向沿 x 轴正向,第二个光源电场方向沿 y 轴负方向。

如图6a所示的四个区域(一、二、三、四),由电荷的分布情况可以看出,四个区域中不会出现一个或几个强于其他区域的特殊区域。而在图6b所示的四个区域内,场增强区域应该集中在一和三两个区域中。

图7a对应的是单光源照射双Bow-tie结构时的FDTD模拟场强示意图。从图中可以清楚的看出,模拟结果与图6a示的预测结果吻合,即没有特殊的增强区域。图7b所示为双光源照射双Bow-tie结构时的FDTD模拟场强示意图。从图中可以看出,模拟结果与图6b所示的预测结果完全吻合,即在一、三区域内出现了高于二、四区域的特殊的场增强。

综上所述,可以证实,当飞秒激光照射双Bow-tie结构时,在双Bow-tie结构的尖端部位确实也存在

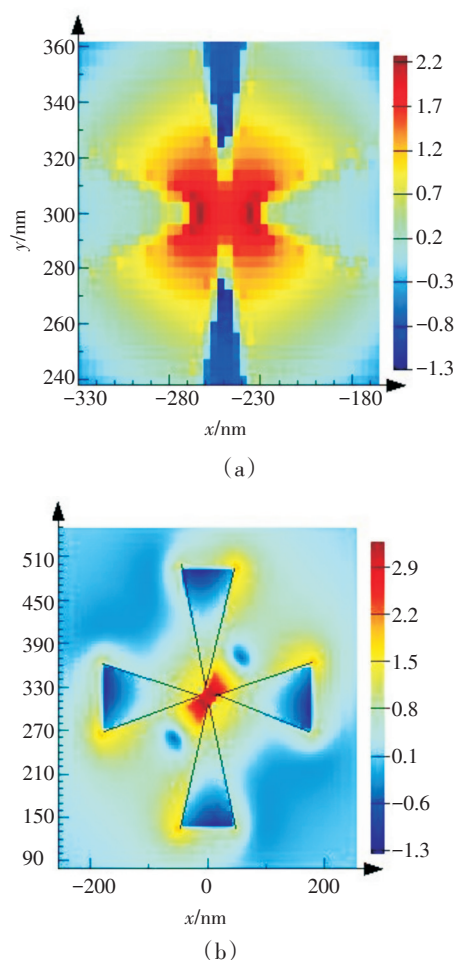


图7 单、双光源下双Bow-tie纳米结构的场增强模拟结果

着电荷的大量聚集,这些电荷的聚集对场增强有一定的作用。而这种尖端效应在场增强中有多大的作用,将在后面的试验中予以模拟验证。

3 尖端效应对场增强的作用

为了验证在没有尖端效应的情况下,纳米结构在飞秒激光的照射下能否产生场增强,文中以矩形纳米结构为基础,在飞秒激光的照射下矩形纳米结构的电荷分布如图8所示。在飞秒激光照射下,电荷向两边平行于 z 轴的表面汇聚,此时在 A 、 B 两表面之间会形成与入射电场方向 E 相同的电场 E'' 。由于外部电场的影响,在每个矩形纳米结构内部会形成与入射光源电场方向相反的电场 E' ,并且在无其他作用的影响下,会有如下关系式

$$E = E' + E'' \quad (7)$$

由此可以清楚地看出, $E'' < E$, 也就是说, 并不能产生场增强。

然而, 从模拟结果中可以清楚地看出, 在A、B两表面之间存在着相对于入射光有增强的电场, 模拟结果如图9所示。把图9与图4b相比较(图9是monitor位于矩形的中间, 与图4b设置一致)可以清楚地看出, 在没有尖端效应的作用下, 场强提高有所减小, 下降了10倍以上。因此可以看出, 尖端效应在提高场强上有重要的作用。

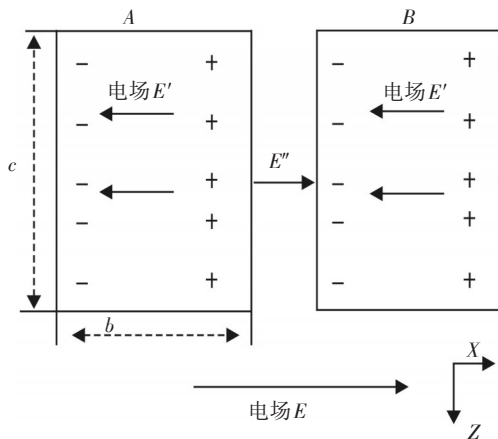


图8 单光源下矩形纳米结构的电荷分布图

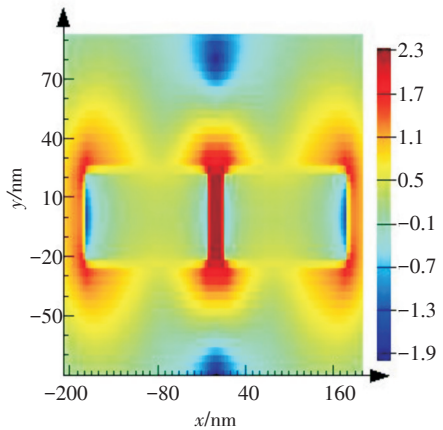


图9 在单光源矩形纳米结构的场增强模拟结果

表1 monitor位于矩形上、中、下表面时的场增强模拟结果

a/nm	b/nm	c/nm	m_1	m_2	m_3
50	170	45	2.39	2.33	2.44
50	170	90	2.33	2.28	2.39
100	170	45	2.06	1.97	2.15
50	340	45	1.67	1.20	1.37
50	85	45	1.49	1.34	1.49

改变矩形纳米结构的各项参数, 其中 a 为矩形在 z 轴方向的厚度, m_1 、 m_2 、 m_3 分别为 monitor 位于矩形纳米结构的上表面、中间和下表面, 场增强模拟结果如表1所示。

由电磁学中的场强度公式^[13]可知, 当改变两矩形之间的间距时, 场增强效果也不同, 即

$$\vec{E} = \frac{Q}{4\pi\epsilon_0 r^2} \hat{r} \quad (8)$$

其中, r 为电荷与场点之间的距离; \hat{r} 表示方向。场强度表现为距离电荷越近, 场强度 E 越大。但是模拟发现, 一味地减小两矩形之间的间距并不能使场增强幅度有明显提高。如表2所示。对于这种现象, 可能的解释是电场耦合率的改变。即只有在金属结构之间的距离合适时, 才能使两个面产生的电场有最大限度的耦合率。

表2 将间距距离 D 减小到 10 nm 和 15 nm 时的场增强模拟结果

	a/nm	b/nm	c/nm	m_1	m_2	m_3
$D=10 \text{ nm}$	50	85	45	1.77	2.01	1.68
$D=15 \text{ nm}$	50	85	45	1.61	1.49	1.60

4 结 论

通过结合边界条件求解 Maxwell 方程组可获得激发表面等离子体共振的条件即色散关系方程。并利用 FDTD Solutions 软件分别模拟了 Bow-tie 纳米结构在单光源辐射下的场增强效果, 双 Bow-tie 纳米结构分别在单、双光源辐照下的场增强效果, 以及矩形纳米结构在单光源辐射下的场增强效果。模拟结果表明, 由于电子的趋肤效应使得大多数的电子集中于金属上下表面, 即电荷的尖端效应, 导致 Bow-tie 纳米结构不同位置处的场增强效果并不相同; 在没有尖端效应的作用下, 场强提高有所减小, 下降了10倍以上。因此可以看出, 尖端效应在提高场强上面有重要的作用; 场增强效果与金属结构之间的距离有关, 只有当距离达到一定值时, 才能获得最大场增强效果, 即两个面产生的电场耦合率最大。

(下转第54页)

参考文献

- [1] 刘宝廷,程树康. 步进电动机及其驱动控制系统[M]. 哈尔滨:哈尔滨工业大学出版社,1997.
- [2] 李贺然,王黎,高晓蓉,等. 基于FPGA的步进电机控制器设计[J]. 信息技术,2012(6):68-70,75.
- [3] 黄露,杨秀增. 基于FPGA的两相步进电机控制器设计[J]. 广西民族师范学院学报,2010,27(5):43-45.
- [4] 余燎原. Q2BYG403CM两相步进电机驱动器[J]. 企业技术开发,2007,26(6):32-35.
- [5] 李朝青. 单片机原理及接口技术[M]. 北京:航天航空大学出版社,2007.
- [6] 秦伟刚. 光电耦合隔离技术与应用[J]. 仪器仪表学报,2006,27(6):2603-2604.
- [7] 秦佳. 基于单片机的步进电机控制器制作[J]. 科教导刊,2013(4):168-169.
- [8] 曹彩萍,李钢. 基于单片机的键盘接口的设计与实现[J]. 电脑知识与技术,2006(32):105.
- [9] 张勇喜,金秀,蒋伯华,等. 基于单片机的可通信步进电机控制器设计[J]. 2014(2):35-37.
- [10] 徐金梧. Turbo c 使用大全[M]. 北京:机械工业出版社,1998.

(上接第15页)

参考文献

- [1] 魏红,徐红星. 表面等离子体光子学研究的新进展[J]. science in china press,2008,53.
- [2] 张天浩,尹美荣. 表面等离子体共振技术的一些新应用[J]. 物理学和高新技术,2005,34.
- [3] 赵凯华,陈熙谋. 电磁学(上册)[M].2版. 北京:高等教育出版社,2005.
- [4] SHU-Wei, CHANG Chi-Yu, Adrian Ni, et al. Theory for bow-tie plasmonic nanolasers[J]. Optics Express, 2008, 10580.
- [5] Corkum P B. Plasma perspective on strong-field multiphoton ionization[J]. Phys. Rev. Lett. 1993, 1994-1997.
- [6] Lewenstein M, Balcou P, Ivanov, et al. Theory of high-harmonic generation by low-frequency laser fields[J]. Phys. Rev. A., 1994: 2117-2132.
- [7] Chang Z, Rundquist A, Wang H, et al. Generation of coherent soft X rays at 2.7 nm using high harmonics[J]. Phys. Rev. Lett, 1997, 79: 2967-2970.
- [8] Seungchul Kim. High-harmonic generation by resonant plasmon field enhancement [J]. Nature Letters, 2008, 07012.
- [9] F F 陈. 等离子体物理学导论[M]. 林光海,译.北京:人民教育出版社,1980.
- [10] 黄昆原,韩汝琦. 固体物理学[M]. 北京:高等教育出版社,1988:522-528.
- [11] 赵晓君,陈焕文,宋大千,等. 表面等离子体共振传感器基本原理[J]. 分析仪器,2000,4.
- [12] Kunz, Luebbers. The Finite Difference Time Domain Method for Electromagnetics[M]. US:CRC Press LLC.
- [13] 郭硕鸿. 电动力学[M].2版. 北京:高等教育出版社,1997.
- [14] 张国平. 原子、分子和纳米材料中非线性高次谐波的产生:一个潜在的极超快和高能量的新型光源[J]. 物理,2006,5(35).
- [15] Bandrauk A, Yu H. High-order harmonic generation by one- and two-electron molecular ions with intense laser pulses[J]. Phys. Rev. A., 1999, 59.

(上接第23页)

- 价预测程序(SmokeEIA)设计[J]. 华东船舶工业学院学报(自然科学版),2005,19(3).
- [4] 宋仔标. 重力作用下的粒子扩散模型及数值模拟[J]. 空气动力学学报,2010(4):209.
- [5] 陈兵,李澄俊. 一种基于诊断风场模式的烟幕浓度估算方法[J]. 南京理工大学学报,2004,28(4).
- [6] 李宗恺. 空气污染气象学原理与应用[M]. 北京:气象出版社,1985.
- [7] 陈兵,李澄俊. 发烟弹扩爆过程及其扩散影响因素分析[J]. 火工品,2005(3).
- [8] 朱晨光,潘功配. 对烟幕微粒的终端沉降速度研究[J]. 含能材料,2005,13(6).