

文章编号: 1002-1582(2025)05-0592-04

劈裂方环二聚体表面等离子激元光谱特性

李玉海*, 李瑛, 盛定仪

(陆军工程大学 军械士官学校, 湖北 武汉 430075)

摘 要: 运用有限元法 (FEM) 和等离子激元杂化理论 (PHT) 模拟并分析了劈裂方环 (SSR) 纳米结构和劈裂方环二聚体的消光特性。模拟结果显示, 劈裂方环的偶极模式出现环流且磁场增强强度达到 39.5。通过引入对称性破缺, 劈裂方环二聚体的消光谱中出现新的共振模式且形成不对称的 Fano 线形。Fano 线形可以通过改变劈裂方环二聚体的几何参数和排列方式进行调控。基于劈裂方环二聚体的这些性质, 可以将其应用于光开关和表面增强光谱学领域中, 也可作为基于磁 Fano 共振器件中的元件。

关 键 词: 等离子激元; 磁 Fano 共振; 有限元法

中图分类号: O433.4

文献标识码: A

Spectral characteristics of split square ring dimer surface plasmons

LI Yuhai*, LI Ying, SHENG Dingyi

(Ordnance NCO Academy, Army Engineering University of PLA, Wuhan 430075, China)

Abstract: The extinction characteristics of the split square ring (SSR) nanostructure and the split square ring dimer are simulated and analyzed by finite element method (FEM) and the plasmon hybridization theory (PHT). The simulated results show that the dipole mode of the split square ring appears circular current and the magnetic field intensity attains a value of 39.5. Through the introduction of symmetry breaking, a new resonance mode and an asymmetric Fano line-type appear in the extinction spectrum of the split square ring dimer. Fano line-type can be manipulated by changing the geometric parameters and arrangement of the split square ring dimer. Based on these properties of the split square ring dimer, they can be used in the field of optical switching and surface-enhanced spectroscopy as well as a functional component in magnetic Fano resonance-based devices.

Keywords: plasmonic; magnetic Fano resonance; finite element method

0 引 言

金属纳米结构在入射光的激发下, 其表面的自由电子发生集体振荡形成局域表面等离子激元 (Localized Surface Plasmon, LSP)^[1], 当入射光的频率与 LSP 的本征频率相等时便会发生局域表面等离子激元共振 (Localized Surface Plasmon Resonance, LSPR)^[2]。在共振条件下, 外场与自由电子集体振荡形成强烈共振吸收使得金属纳米结构的表面产生明显的电磁场增强。基于此现象, 表

面等离子激元可应用于表面增强光谱学领域^[3]。

表面等离子激元共振模式的激发与纳米结构的形貌和尺寸有关, 通过改变纳米结构的几何参数和破坏结构的对称性可以调控等离子激元共振的频移和激发新的模式。截止目前, 研究者们已经设计出不同形貌的金属纳米结构、复合纳米结构以及多聚体纳米结构, 结果表明此类纳米结构显现出良好的光学特性。尤其在一些纳米结构中能同时激发出电共振模式和磁共振模式, 并产生了对称的 Fano 线形 (亮态模式和暗态模式的耦合),

收稿日期: 2025-04-24; 收到修改稿日期: 2025-06-06

作者简介: 李玉海 (1989—), 男, 讲师, 硕士, 从事微纳结构研究。

* 通讯作者: 2579166801@qq.com

其对环境折射率的变化非常敏感,这一发现使得其在生物传感领域^[4]具有潜在的应用价值。2020年Cao等设计了方体及环/盘阵列结构,发现该结构表现出明显的共振效应^[5]。2021年Shi等提出的非对称纳米双环结构在可见光-红外光区域产生了表面等离子激元共振^[6]。2022年Yang等设计的劈裂环-盘二聚体结构,通过引入对称性破缺,激发了多重Fano共振^[7]。2023年Li等利用短金属纳米棒的亮态偶极模式与长金属纳米棒的暗态四极模式之间的耦合在可见光区域产生了Fano共振^[8]。2023年Lv等研究了纳米环-七聚体金属-介电结构的参数和入射角度变化对多重Fano共振极为敏感^[9]。大量的研究表明引入对称性破缺导致纳米结构出现新的共振模式,产生不对称的Fano线形,但都是在可见光波段基于电共振模式产生Fano共振,其谱线特点限制了纳米结构在微纳光学器件的应用领域。基于磁共振模式在红外波段产生的Fano共振可以实现更加丰富的可调节的模式。

本文中,设计的劈裂方环(Split Square Ring, SSR)纳米结构在外场的激发下消光谱中出现了磁模式。运用等离子激元杂化理论(Plasmon Hybridization Theory, PHT)分析了劈裂方环二聚体中杂化模式的产生机制。随后基于有限元法进一步研究了由劈裂方环组成二聚体的消光特性和电荷分布。与金纳米棒二聚体结构^[8]和纳米核壳二聚体结构相比^[10],通过引入对称性破缺,二聚体的消光谱中出现新的模式且在近红外区产生了不对称的Fano线形。Fano线形随着劈裂方环二聚体的几何参数变化而变化。改变二聚体的排列方式,消光谱的共振模式发生明显的变化且在可见光区域形成Fano共振。

1 模型与计算方法

设计的劈裂方环纳米结构模型如图1所示,该结构的几何参数 l 、 w 、 G_1 和 h 分别表示劈裂方环的长度、壁的厚度、劈裂间隙的宽度和劈裂方环的高度,其结构参数 $w=10\text{nm}$, $G_1=40\text{nm}$, $l=100\text{nm}$ 及 $h=30\text{nm}$ 。应用基于有限元法(Finite Element Method, FEM)的COMSOL Multiphysics软件,数值计算劈裂方环纳米结构和劈裂方环二聚体的消光特性。建模过程中,令劈裂方环纳米结构处于折射率为1的空气中,入射光(450~1900nm)水平入射沿 y 轴偏振。由于在可见光区域内,银的欧姆损耗比其它的贵金属小,因此选择银作为纳米结构的材料,银的折射率参数取自

JC的实验数据^[11]。

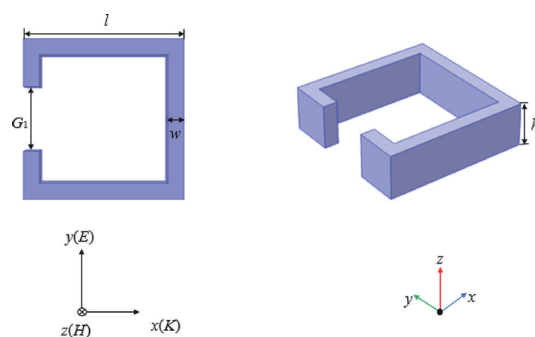


图1 劈裂方环的结构示意图和入射光的方向

2 结果讨论

2.1 劈裂方环的消光特性

计算结果如图2,在1760nm、700nm、530nm和470nm处出现四个峰,分别用1、2、3和4表示峰的位置,对应的电荷分布图(红色代表正电荷,蓝色代表负电荷)显示在图2右侧,从电荷分布图可以看出对应峰的共振模式为偶极,四极,八极和十六极模式,其中模式1形成环流(图中用黑色环形箭头标出)为磁共振模式,磁场增强达到39.50。插图中用 $|H|/|H_0|$ 表示磁场增强强度, H 表示劈裂方环纳米结构附近的局域磁场强度, H_0 表示入射磁场强度。

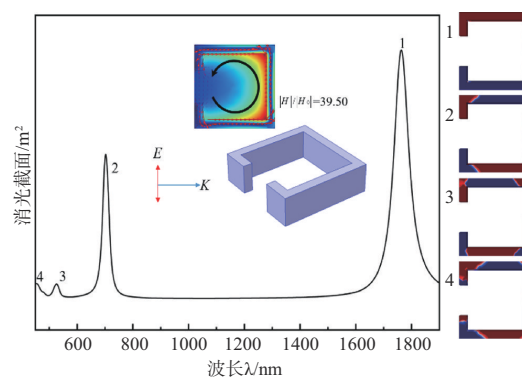


图2 劈裂方环的消光谱及共振模式的电荷密度分布

运用等离子激元杂化理论,分析了纳米结构出现的等离子激元杂化模式。图3为劈裂方环二聚体的杂化原理图,当两个劈裂方环组成二聚体时,形成绑定模式和反绑定模式,绑定模式用字母B表示,反绑定模式用AB表示,黑色的实线表示等离子激元共振模式的能级,红色虚线表示模式之间的杂化路径。图中显示劈裂方环的偶极模式杂化产生高能量的反绑定模式 D_{AB} 和低能量的绑定模式 D_B ,以此类推,四极模式之间的杂化产生高能量四极反绑定模式 Q_{AB} 和低能量的四极绑定模式 Q_B 。图中左侧用红色箭头表示能量的增加趋势。

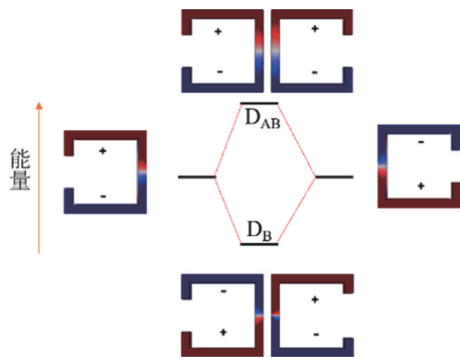


图3 绑定模式和反绑定模式的形成过程

2.2 二聚体结构的消光特性

图4显示劈裂方环二聚体的消光特性，黑色曲线表示劈裂方环二聚体对称性未破缺时的消光谱，即 $G_1=G=40\text{nm}$ 。模拟结果显示，峰的位置出现在 1760nm 、 850nm 、 660nm 和 560nm 处并用数字1、2、3和4表示，图4右侧给出对应峰的电荷分布。从电荷分布可以看出，当劈裂方环组成二聚体时，共振模式发生杂化形成了偶极-偶极反绑定模式 (ADD)，四极-四极绑定模式 (BQQ)，四极-四极反绑定模式 (AQQ) 和八极-八极绑定模式 (BOO)。红色曲线表示劈裂方环二聚体引入对称性破缺时的消光谱，即 $G_1=40\text{nm}$ ， $G=55\text{nm}$ ，与对称性未破缺时相比，出现一个新模式5。从电荷分布可以看出，新模式为偶极-偶极绑定模式 (BDD)，电荷异相振荡产生的净偶极矩几乎为零为暗态模式，而模式1为偶极-偶极反绑定模式 (ADD)，电荷同相振荡产生的净偶极矩最大为亮态模式。亮态模式和暗态模式之间相互耦合形成了不对称的 Fano 线形。

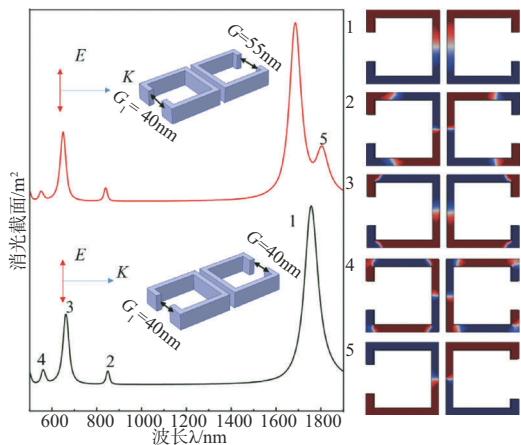


图4 劈裂方环二聚体的消光谱及对应模式电荷分布图

2.3 右劈裂方环开口间隙改变对消光谱的影响

为了系统研究二聚体消光谱中 Fano 线形随间隙 G 的变化，设置 G 的变化范围 $45\sim 75\text{nm}$ ，其他参数保持不变。图5显示当 $G=45\text{nm}$ 时，消光谱中并未出现 Fano 谷，增加 G 的数值达到 50nm ，在 1800nm 处出现新的共振峰且有明显的谷出现，随

着 G 的逐步增加出现的峰值和 Fano 谷越来越明显。新出现的峰为偶极-偶极绑定模式，其位置随 G 的变化没有发生移动，偶极-偶极反绑定模式发生明显的蓝移，其他杂化模式蓝移不是很明显。这种现象可用 LC 振荡电路进行解释，劈裂方环等效为 LC 振荡电路，共振频率表达式

$$f = \frac{1}{\sqrt{LC}} \quad (1)$$

式中， L 表示电感； C 表示电容^[12]。由于二聚体中右劈裂方环间隙的增加，电容减小，导致劈裂方环共振模式的频率增加，引起共振模式发生蓝移。为进一步研究 Fano 共振线形，定义 Fano 谷的半宽为 W ，高为 D ， D/W 为 Fano 线形因子。图6绘制 Fano 线形因子作为间隙的函数图像，从图中可以看出，当 $G=55\text{nm}$ 时， D/W 达到最大，即 Fano 线形最明显。

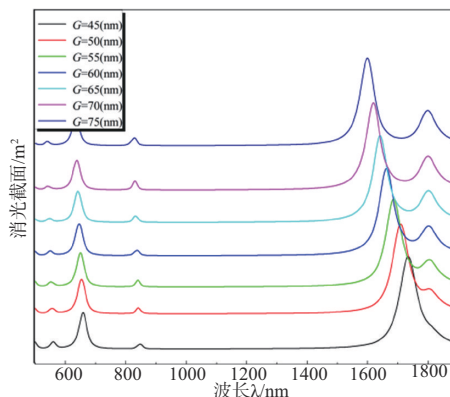


图5 间隙的改变对消光谱的影响

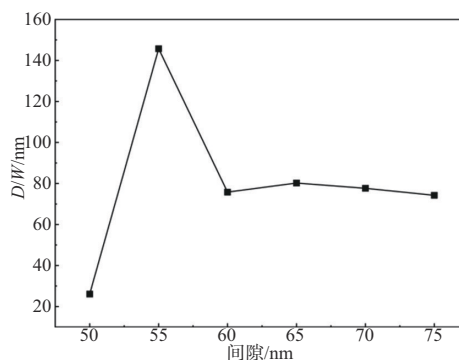


图6 间隙对 Fano 共振的影响

2.4 右劈裂方环缩小对消光谱的影响

图7显示了劈裂方环二聚体的消光谱随参数 s 变化，参数 s 表示右劈裂方环相对左劈裂方环整体缩小倍数，变化范围从 1.0 到 0.5 。计算结果显示，随着 s 减小，大约在 1800nm 处出现新的共振模式，当 $s=0.9$ 时，新出现的偶极-偶极绑定模式强度很弱，逐渐缩小 s ，偶极-偶极绑定模式的强度逐渐增强，偶极-偶极反绑定模式和四极-四极绑定模式都发生明显的蓝移，偶极-偶极反绑定的强度逐

渐减少而四极-四极绑定模式的强度逐渐增加。这主要原因是右劈裂环的缩小, 导致电荷数量减少引起电场减弱, 但电荷密度增加引起四极-四极绑定模式对应谱的高度增加, 新出现的偶极-偶极绑定模式所对应峰的强度增加。

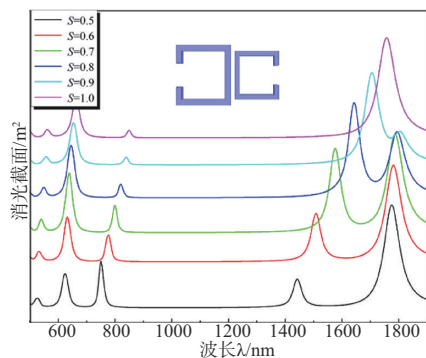


图7 右劈裂方环缩小对消光谱的影响

2.5 二聚体排列方式改变对消光谱的影响

图8显示了劈裂方环二聚体的消光谱随排列方式的改变而变化, 计算结果显示, 不同的排列方式所对应的消光谱不同。图中黑色连续实线表示劈裂方环尾对尾组成的二聚体消光谱, 红色连续实线表示头对头组成的二聚体消光谱。与尾对尾排列方式相比, 头对头排列方式消光谱的在可见光区域形成了Fano共振, 并且偶极-偶极绑定模式发生明显的蓝移, 这主要由于二聚体中劈裂方环之间的电容耦合, 相比二聚体尾对尾排列方式中的电感耦合频率而言, 头对头排列方式的电容耦合中的耦合频率更高。偶极-偶极绑定模式的峰高和半宽几乎没有变化, 只是峰的位置发生移动, 四极-四极绑定模式的峰高和共振位置发生明显的增强和移动, 这主要归因于电容耦合使得电场增强, 振幅增加以致共振吸收增强而导致。

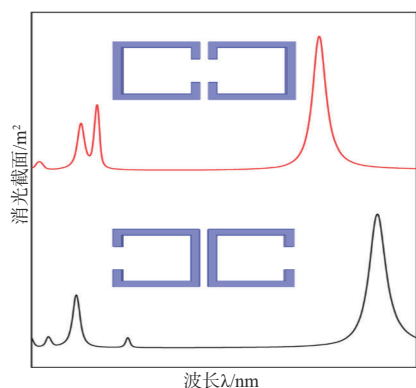


图8 排列方式对消光谱的影响

3 结 论

利用有限元法计算了劈裂方环纳米结构和劈裂方环二聚体的消光特性, 运用等离激元杂化理

论分析了劈裂方环二聚体的杂化模式的产生机理。阐述了Fano共振产生的原因即亮态模式和暗态模式之间的相互耦合导致劈裂方环二聚体的消光谱形成不对称的Fano线形。进一步改变劈裂方环二聚体的几何参数(劈裂的开口间隙 G , 右环整体缩小 s)引入对称性破缺, 导致劈裂方环二聚体产生新的杂化模式进而在红外波段出现Fano线形。随着几何参数值增加Fano线形越来越明显。更主要的是改变劈裂方环二聚体的空间排列方式在可见光区域产生不对称的Fano线形。

参考文献:

- [1] Barnes W L, Dereux A, Ebbesen T W. Surface plasmon sub-wavelength optics[J]. Nature, 2003, 424:824—830.
- [2] Jain P K, El-Sayed M A. Plasmonic coupling in noble metal nano-structures[J]. Chemical Physics Letters, 2010, 487:153—164.
- [3] Wang X, Huang S C, Hu S, et al. Fundamental understanding and applications of plasmon-enhanced raman spectroscopy[J]. Nature Reviews Physics, 2020, 2(5):253—271.
- [4] Koya A N, Cunha J, Guo T L, et al. Novel plasmonic nano-cavities for optical trapping-assisted biosensing applications[J]. Advanced Optical Materials, 2020, 8(7):1901481(1-18)
- [5] 曹文, 潘庭婷, 邓亚利, 等. 方体及环/盘阵列结构的表面等离激元共振特性研究[J]. 光谱学与光谱分析, 2020, 40(05):1345—1350.
- [6] Cao Wen, Pan Tingting, Deng Yali, et al. Study on the surface plasmon resonance of square and ring/disc array structure[J]. Spectroscopy and Spectral Analysis, 2020, 40(05):1345—1350.
- [7] 史冬冬, 张悦, 孙诚. 非对称纳米双环表面等离激元光谱特性[J]. 光谱学与光谱分析, 2021, 41(5):1566—1573.
- [8] Shi Dongdong, Zhang Yue, Sun Cheng. Spectral characteristics of asymmetric silver double nanorings surface plasmons [J]. Spectroscopy and Spectral Analysis, 2021, 41(5):1566—1573.
- [9] 杨其利, 张兴坊, 刘凤收, 等. 劈裂环-盘二聚体结构的多重Fano共振[J]. 物理学报, 2022, 71(02):305—313.
- [10] Yang Qili, Zhang Xingfang, Liu Fengshou, et al. Multiple Fano resonance in gold split ring disk dimers[J]. Acta Phys Sin. 2022, 71(02): 305—313.
- [11] 李星童, 程昱, 马强, 等. 金纳米棒二聚体结构的Fano共振[J]. 量子光学学报, 2023, 29(2):82—90.
- [12] Li Xingtong, Chen Yu, Ma Qiang, et al. Fano resonance of gold nanorod dimers[J]. Journal of Quantum Optics, 2023, 29(2):82—90.
- [13] 吕靖薇, 王德宝, 刘超, 等. 纳米环-七聚体金属-介电结构的多重Fano共振特性[J]. 中国光学, 2023, 16(1):214—227.
- [14] Lv Jingwei, Wang Debao, Liu Chao, et al. Multiple Fano resonance properties of nanoring-heptamer metal-dielectric structures[J]. Chinese Optics, 2023, 16(1):214—227.
- [15] 姜继玉, 姜莎莎, 吕靖薇, 等. 对称性破缺纳米核壳二聚体的近场特性研究[J]. 光散射学报, 2020, 32(3):251—258.
- [16] Jiang Jiuyu, Jiang Shasha, Lv Jingwei, et al. Research on near field characteristics of symmetry breaking multilayered nanoshells dimer[J]. The Journal of Light Scattering, 2020, 32(3):251—258.
- [17] Johnson P B, Christy R W. Optical constants of the noble metals[J]. Physical Review B, 1972, 6(12):4370—4379.
- [18] Stefan L, Christian E, Martin W, et al. Magnetic response of metamaterials at 100 Terahertz[J]. Science, 2004, 306(5700):1351—1353.