

光偶极天线的远场方向性研究*

蒋双凤 孔凡敏[†] 李康 高晖

(山东大学 信息科学与工程学院, 济南 250100)

(2010年4月18日收到; 2010年5月26日收到修改稿)

用时域有限差分方法模拟了两种光偶极天线模型的场分布, 研究了光偶极天线的远场辐射特性随其长度增加而变化的规律以及影响其远场方向性的因素, 发现光偶极天线的远场方向性随其长度增加而变化的规律类似于经典对称振子天线的相应规律. 但高阶局域表面等离激元模式的存在使得光偶极天线的远场辐射图更快地出现了旁瓣. 这些发现对于提高光天线的性能具有重要意义.

关键词: 光偶极天线, 局域表面等离激元, 金纳米粒子, 远场方向性

PACS: 52.25.Tx, 52.40.Fd, 42.79.-e

1. 引言

近年来, 尺度在几十至几百纳米的金属结构及其新颖的光学性质越来越受研究者的关注. 金属/介质界面在光频入射下产生的表面等离激元 (surface plasmon polaritons, SPPs)^[1-6], 利用其强局域特性, 可以突破衍射极限, 减小拐角散射并且在纳米尺度上进行传播, 从而有可能制造出亚波长的光学器件并实现电路与光路的一体化, 因此金属纳米结构具有广泛的应用前景, 例如单分子光谱探测^[7,8]、超高灵敏传感器^[9,10]、高分辨率电子显微镜^[11,12]等. 本论文中研究的光天线是在纳米尺度范围的金属结构, 一般为金属纳米粒子, 由于 SPPs 的作用, 可以有效地将自由空间中的辐射能量耦合在亚波长尺度空间内的装置^[13]. 具体到光波与金属纳米粒子的耦合, SPPs 体现为局域表面等离激元 (localized surface plasmons, LSPs). LSPs 共振使电磁能量约束在亚波长的空间内, 导致金属纳米粒子表面出现强烈增强的局域电磁近场. 光天线的功能跟传统天线类似, 但由于 LSPs 的存在使得光天线具有自身的一些特性.

光天线的发展要求当前的研究重心致力于将经典的无线电波和微波天线理论移植到光波频

段^[14,15]. 目前已有很多研究者对金属纳米粒子光天线的近场^[16-18]以及远场辐射效率^[19-22]进行了详细的研究, 并给出了获取近场增强和远场辐射效率提高的关键的设计原则. 根据经典的天线理论^[23], 一个实用性的天线不仅需要具有好的远场辐射效率, 还需要具有相应的远场方向性. Taminiou 等人^[24]研究了单个金纳米粒子的远场特性, 并说明了粒子的等离体共振对其角度辐射有很大的影响. 在经典的天线理论中, 对称振子天线的远场方向性随其总长度的变化趋势具有一定的规律性, 例如当其总长度小于一个工作波长时, 其辐射图样不会出现旁瓣. 然而, 具有类似结构特征的光天线结构 (以下简称光偶极天线) 在其总长度小于一个入射波长下却出现了旁瓣.

为了探讨两者的差异性, 我们引入了两种光偶极天线 (optical dipole antenna, ODA) 模型, 用时域有限差分 (finite-difference time-domain, FDTD) 方法模拟了在不同长度下的 ODA 的远场方向性, 并重点探讨了 LSPs 对 ODA 的影响, 发现 ODA 的远场方向性随其长度变化的规律类似于经典对称振子天线, 但高阶的 LSPs 模式的存在使得光偶极天线的远场辐射图更快地出现了旁瓣. 这些结果对于掌握光天线的性能具有重要理论价值.

* 国家重点基础研究发展计划 (批准号: 2009CB930503, 2009CB930501, 2007CB613203), 国家教育部留学回国人员科研启动基金和山东省优秀中青年科学家科研奖励基金 (批准号: BS2009NJ002) 资助的课题.

[†] 通讯联系人. E-mail: kongfm@sdu.edu.cn

2. 计算模型和方法

我们选择金纳米粒子作为代表,结构模型如图 1 所示,它们分别由一对金纳米棒(a pair of gold nanorods, PNRs)和一对金纳米椭球体(a pair of gold nanoellipsoids, PNEs)组成. 图中 L 表示单个粒子的长度, D 为其短轴的长度, G 代表两个纳米粒子之间的间距. 通过计算坡印廷矢量,我们发现当电偶极子(如图 1 中两个纳米粒子中间的箭头所示)垂直于天线轴放置时,电偶极子处的坡印廷矢量为零,其能量只在电场和磁场之间相互转化而不是辐射到远场;而当电偶极子平行于天线轴放置时,其能量可以辐射到远场,并且这种情况有助于自发辐射的增强. 因此,为了研究 ODA 的远场方向性,我们仅考虑电偶极子平行于天线轴放置的情况.

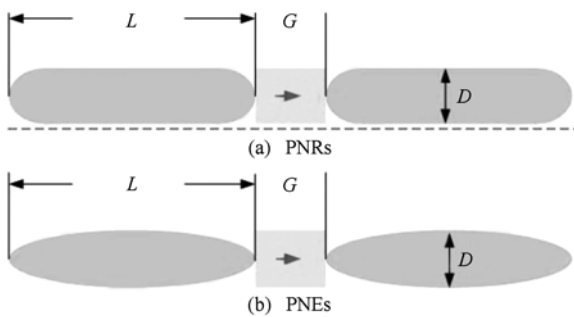


图 1 光偶极天线结构示意图 (a) 为 PNRs 模型;(b) 为 PNEs 模型

在计算中,金的介电常数采用修正的 Drude 模型来近似,该模型的介电常数定义为

$$\varepsilon(\omega) = \varepsilon_{\infty} - \frac{\omega_p^2}{\omega^2 + j\omega\gamma}, \quad (1)$$

这里的 ε_{∞} , ω_p 和 $1/\gamma$ 分别代表频率接近无穷大时的介电常数、等离子体振荡频率以及弛豫时间. 根据光学手册中的试验数据^[21]进行曲线拟合,选取金在可见光频段的参数分别为: $\varepsilon_{\infty} = 9.5$, $\omega_p = 8.948$ eV 和 $\gamma = 0.06909$ eV.

为了定量分析光天线的远场特性,我们通过计算 ODA 的角度方向性 $D(\varphi, \theta)$ 来表示远场分布对角度的依赖性,定义角度方向性 $D(\varphi, \theta)$ 为^[19]

$$D(\varphi, \theta) = \frac{4\pi P(\varphi, \theta)}{\iint P(\varphi, \theta) d\Omega}, \quad (2)$$

这里 $P(\varphi, \theta)$ 是系统辐射到远场的能量; φ 和 θ 分别是球坐标下的轴向角和极化角;(2) 式中的积分球面的半径要求远大于一个入射光波长.

我们的模拟使用了 FDTD^[25,27] 方法. 在网络的设置中,先将整个计算空间背景材料的网格步长设为 15 nm,并设置光偶极天线金属材料的网格步长为 1 nm. 接下来,为了确保计算的精确性和稳定性,并尽可能降低对计算资源的消耗,结合 Xie^[16], Mohammadi^[21] 等人的研究成果,我们只对模型中场值较强,变化较剧烈区域(图 1 中两个纳米粒子的中间区域)进行进一步地局部网格加密,加密后的网格步长设为 0.5 nm. 对 PNRs 和 PNEs 模型来说,我们的计算区域都为 2000 nm × 2000 nm × 2000 nm. 在整个计算区域的四周添加了完美匹配层(perfectly matched layer, PML)^[28,29],用来吸收外来波和避免非电磁反射.

3. 结果和讨论

首先,为了比较 ODA 与对称振子天线的远场方向性,我们研究了以上两种 ODA 远场方向性随其长度变化的关系. 图 2 给出了以上两种 ODA 模型在入射波长为 $\lambda = 600$ nm, $D = 40$ nm, $G = 10$ nm 时随着粒子长度 L 从 40 nm 增加到 200 nm 的远场辐射特性. 从图中可以看出,无论是 PNRs 还是 PNEs 模型,随着 L 的增加,其远场方向性图上的主瓣幅值均逐渐增大;当 L 增到足够长时,方向图上除了主瓣外,还出现了旁瓣,甚至原来的主瓣会完全消失,被四个同样大小的波瓣所代替. 通过以上的分析,ODA 的远场方向性随其天线总长度的变化趋势跟传统的对称振子天线类似. 然而根据经典天线理论,当对称振子天线的总长度小于一个工作波长时,其远场方向性图不会出现旁瓣. 但由于 ODA 表面 LSPs 模式的激发,使其远场方向性随 L 变化的趋势更快. 如图 2 (i) 和 (j) 显示,当 $L = 180$ nm 时, PNRs 和 PNEs 模型都出现了明显的旁瓣. 这时两个光天线的总长度为 $(2L + G)$ 仅等于 370 nm,其小于一个波长 600 nm.

为了突出显示 LSPs 对其远场方向性的影响,我们用在光频下不支持 LSPs 的理想导体(perfectly electric conductor, PEC) 纳米粒子来代替金纳米粒子,并保持 PNRs 和 PNEs 模型的几何参数不变($L = 180$ nm). 结果如图 3 所示, (a) 为 PEC 双纳米棒结构, (b) 为 PEC 双纳米椭球体结构. 图中主瓣幅值均有减小,但旁瓣完全消失. 这个现象说明 LSPs 的存在使 ODA 上更容易激发高阶多级模式,进而影响了

其远场方向性. 比较图 2 (i) 和 (j), PNEs 中出现更大的旁瓣的同时主瓣幅值也更小. 通过 Xie 等^[16]的研究成果, 我们发现具有相同几何参数的 PNEs 模型比 PNRs 模型具有更强的 LSPs. 从而进一步说明了 LSPs 越强, 对其远场方向性的影响就越大.

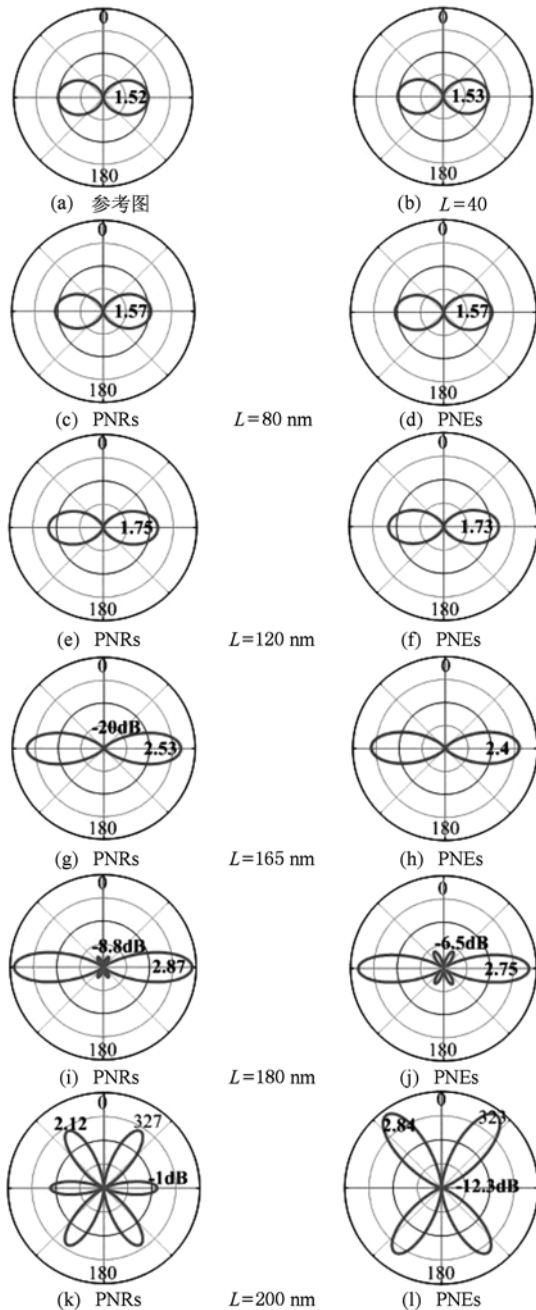
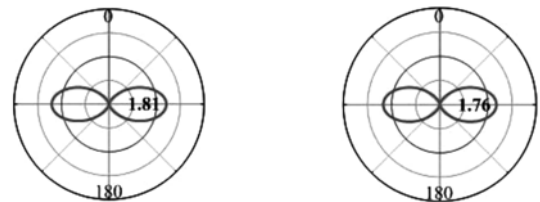


图 2 不同粒子长度 L 下 PNRs 和 PNEs 模型的远场方向图 (a) 为电偶极子单独放置时的参考情况; (b) 为两个模型粒子都为球状时的远场方向图

通过对以上模拟结果的比较和分析, 我们知道在金纳米粒子表面所激发的 LSPs 影响了 ODA 的远场方向性, 使其远场方向性随长度的增加更容易出



(a) PEC 双纳米棒 $L=180$ nm (b) PEC 双纳米椭球体
图 3 PEC 纳米粒子的远场方向性

现旁瓣, 且 LSPs 越强, 影响就越大. 接下来, 为了更具体更形象的研究 LSPs 对 ODA 的影响, 以 PNRs 模型为例, 我们研究了金纳米棒表面的电荷密度分布情况. 根据高斯定理, 法向电场反映表面电荷密度. 因此, 通过记录棒侧面附近的电场法向分量的稳态振幅分布 (以下将这个电场振幅分布简称为“场分布”) 即得到纳米棒表面的电荷密度. 理论上, 记录平面越接近棒表面, 电场越能真实反映表面的电荷密度, 但实际计算中太接近表面会受到有限的网格尺寸影响而导致结果误差太大, 因此本文中所有的场分布都选在距棒表面 4 nm 处记录 (如图 1 (a) 中纳米粒子下的虚线所示), 结果如图 4 所示.

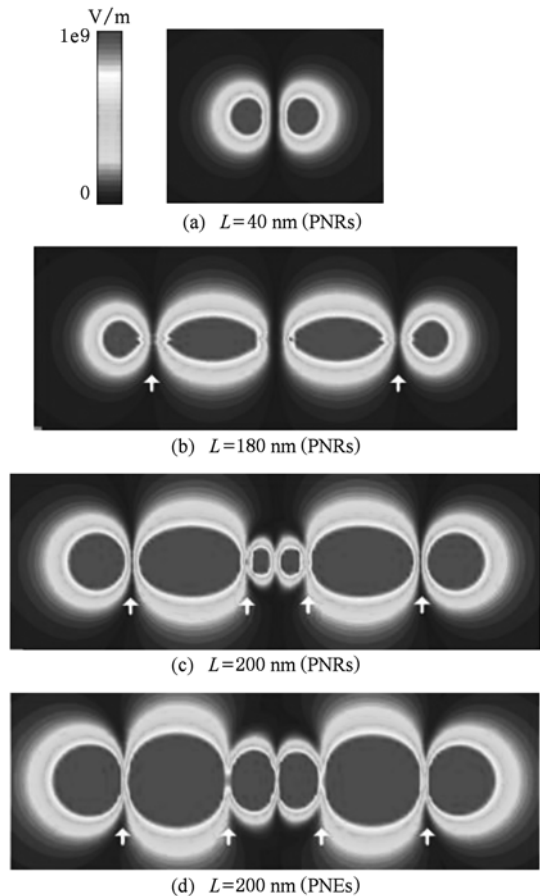


图 4 相应长度 L 下 ODA 模型侧面的电场法向分量的稳态振幅分布图 (a) — (c) 为不同长度下 PNRs 模型的分布图; (d) 为 200 nm 长度下 PNEs 模型的分布图

在场分布图中,我们观察到粒子表面出现了强烈的电场,表示有大量的电荷积聚,正是 LSPs 模式的特征.当 L 很短时($L = 40$ nm),对单个粒子来说,场分布图上没有节点,也即在表面电荷密度上没有节点,整个光天线系统类似电偶极子,我们称此时为零阶 LSPs 模式(用 $m = 0$ 来表示);随着 L 的增加,场分布慢慢会出现高阶 LSPs 模式.当 $L = 180$ nm 时,在单纳米棒的电场分布平面上出现了一个节点(如图 4(b)中的白色箭头所示),我们称此时天线上激发了 $m = 1$ 阶 LSPs 模式.当 L 继续增加时($L = 200$ nm),更高阶的 LSPs 模式($m = 2$)出现了.图 4 说明,随着光天线粒子长度 L 的增加,高阶的 LSPs 模式会被激发,并且 L 越大, LSPs 的模式越高.根据经典的天线理论,天线表面电流分布会强烈的影响天线的远场辐射.而高阶的 LSPs 的激发改变了天线表面的电荷密度,使其表面电流出现了反向电流,进而影响了其远场方向性. LSPs 的产生能强烈的增强粒子表面的局域电场^[30-32],也正是在天线附近高度局域的电场使得光天线除了能够支持基本的偶极辐射模式之外还支持高阶多级模式^[33,34],因此,可以说高阶 LSPs 的存在使得 ODA 的远场方向图更容易也更快的出现了旁瓣,进而影响了其远场方向性.比较图 4(c)与(d),不难发现同为 200 nm 的 PNR 与 PNE 模型都激发了二阶的表面等离激元模式.但是 PNE 激发的二阶表面等离激元模式幅值更强,更剧烈.这也导致了 200 nm 时的 PNE 远场辐射特性(如图 2(i)所示)比 PNR 的远场辐射特性(如图 2(k)所示)旁瓣更强且主瓣衰减更剧烈.

传统的天线设计是利用其长度 L 跟入射波长 λ 之间的对应关系来设计的,例如,理想的半波偶极天线的设计长度 $L = (1/2)\lambda$.然而,天线长度 L 与波

长 λ 简单的对应关系对光天线来说却不成立了.这是因为光天线是由金属纳米粒子构成的,金属纳米粒子在光频下已不再是理想导体,而是振荡的自由电子气.当入射光入射到金属纳米粒子表面时,入射光不再被金属表面完全的反射,而是入射到金属中产生为自由电子气的振荡,也就是我们前面所说的 LSPs.因此在光频下,光天线的长度不再是本身的实际长度而是取决于材料特性的等效长度 L_{eff} ,从上面的模拟实验看,该等效长度 L_{eff} 往往要比其实际长度要长,如我们研究的 ODA 模型中,其实际长度 $L = 370$ nm,而对应的等效长度 L_{eff} 却大于 600 nm.从金属纳米粒子在光频下的等效长度方面也可以解析 ODA 的远场方向性图更快出现旁瓣这一现象.这些研究发现对于金属纳米光天线和等离激元学的研究都有重要的理论价值.

4. 结 论

我们用 FDTD 方法模拟了两个 ODA 模型随其长度 L 增加的远场方向图,并通过记录纳米棒侧面附近的场分布探讨了 LSPs 对 ODA 的影响.我们发现 ODA 的远场辐射图样可用传统的对称振子天线来近似,但由于 LSPs 的激发使得其随 L 变化的趋势变化的更快;当 L 越长时,ODA 上激发的 LSPs 模式越高阶,也正是高阶的 LSPs 模式使得 ODA 的表面电流分布出现了反向电流,进而影响了远场方向性,使其更容易出现旁瓣.这些发现也可以用光天线在光频下的等效长度比其实际长度更长来解析.因此,ODA 相应的远场方向性可以通过选择合适的天线长度以及控制在纳米粒子表面的 LSPs 的模式来获得.我们的结果对于光天线性能的提升起到了一个极大的推进作用.

- [1] Barnes W L, Dereux A, Ebbesen T W 2003 *Nature* **424** 824
- [2] Xue W R, Guo Y N, Zhang W M 2010 *Chin. Phys. B* **19** 017302
- [3] Zhang H F, Cao D, Tao F, Yang X H, Wang Y, Yan X N, Bai L H 2010 *Chin. Phys. B* **19** 027301
- [4] Cao L R, Geng W D, Huang Q, Sun J, Wang J, Xiong S Z, Zhang X D, Zhao Y 2009 *Acta Phys. Sin.* **58** 1980 (in Chinese) [曹丽冉、耿卫东、黄茜、孙建、王京、熊绍珍、张晓丹、赵颖 2009 物理学报 **58** 1980]
- [5] Bai W L, Cai L K, Gan Q Q, Guo B S, Song G F 2009 *Acta Phys. Sin.* **58** 8021 (in Chinese) [白文理、蔡利康、甘巧强、郭宝山、宋国峰 物理学报 **58** 8021]
- [6] Wang J Q, Liang H M, Fang L, Li M, Niu X, Du J L 2009 *Chin. Phys. B* **18** 4870
- [7] Nie S, Emory S R 1997 *Science* **275** 1102
- [8] Kneipp K, Wang Y, Kneipp H, Perelman L T, Itzkan I, Dasari R R, Feld M S 1997 *Phys. Rev. Lett.* **78** 1667
- [9] Lee K S, El-Sayed M A 2006 *J. Phys. Chem. B* **110** 19220
- [10] Haes A J, Van Duyne H, R P 2002 *J. Am. Chem. Soc.* **124** 10596
- [11] Betzig E, Trautman J K, Harris T D, Weiner J S, Kostelak R L 1991 *Science* **251** 1468

- [12] Anderson N, Bouhelier A, Novotny L 2006 *J. Opt. A: Pure Appl. Opt.* **8** 227
- [13] Huang C, Bouhelier A, France G C d, Bruyant A, Guenot A, Finot E, Weeber J C, Dereux A 2008 *Phys. Rev. B* **78** 155407
- [14] Li J J, Salandrino A, Engheta N 2007 *Phys. Rev. B* **76** 245403
- [15] Brongersma M L 2008 *Nature Photonics* **2** 270
- [16] Xie H, Kong F M, Li K 2009 *Journal of Electromagnetic Waves and Applications* **23** 535
- [17] Crozier K B, Sundaramurthy A, Kino G S 2003 *J. App. Phys.* **94** 4632
- [18] Robert D G, Daniel E P 1997 *Appl. Phys. Lett.* **70** 1354
- [19] Rogobete L, Kaminski F, Agio M, Sandoghdar V 2007 *Opt. Lett.* **32** 1623
- [20] Wang J Y, Wu Z Y, Yang Y T 2010 *Acta Phys. Sin.* **59** 1890 (in Chinese) [汪家友、吴振宇、杨银堂 2010 物理学报 **59** 1890]
- [21] Mohammadi A, Sandoghdar V, Agio M 2008 *New J. Phys.* **10** 105015
- [22] Chen C, Xu Y M, Zhao G W 2007 *Acta Phys. Sin.* **56** 5298 (in Chinese) [陈 诚、徐跃民、赵国伟 2007 物理学报 **56** 5298]
- [23] Huang Y, Boyle K 2008 *Antennas: From Theory to Practice* p129
- [24] Taminiou T H, Stefani F D, Hulst N F V 2008 *New J. Phys.* **10** 105005
- [25] Johnson P B, Christy R W 1972 *Phys. Rev. B* **12** 4370
- [26] Yee K 1996 *IEEE Trans. Antennas Propag.* **3** 302
- [27] Taflov A, Hagness S C 2000 *Computational Electrodynamics: The Finite-difference time-domain Method* (Boston: Artech House)
- [28] Berenger J P 1996 *J. Comput. Phys.* **127** 363
- [29] Berenger J P 1994 *J. Comput. Phys.* **114** 185
- [30] Sherry L J, Jin R, Mirkin C A, Schatz G C, VanDuyne R P 2006 *Nano Lett.* **6** 2060
- [31] Yang J, Zhang J, Wu X, Gong Q 2005 *Opt. Express* **15** 16852
- [32] Muskens O L, Giannini V, Gomez Rivas. 2007 *J. Opt. Express.* **15** 17736
- [33] Hohenau R, Krenn, Schider G, Dittlacher H, Leitner A, Aussenegg F R, Schaich W L 2005 *Euro. Phys. Lett.* **69** 538
- [34] Dittlacher H, Krenn J R, Felidj N, Lamprecht B, Schier G, Salerno M, Leiter A, Aussenegg F R 2005 *Phys. Rev. Lett.* **95** 257403

Study of far-field directivity of optical dipole antenna *

Jiang Shuang-Feng Kong Fan-Min[†] Li Kang Gao Hui

(School of Information Science and Engineering, Shandong University, Jinan 250100, China)

(Received 18 April 2010; revised manuscript received 26 May 2010)

Abstract

By simulating the field distributions of two optical dipole antenna models with the finite-difference time-domain (FDTD) method, the variation regularity of their far-field radiation with their length increasing and the factors which can influence their far-field directivity are studied. The results show that the variation regularity of optical dipole antenna is analogous to that of classic symmetrical dipole antenna. But in the far-field directivity plot of optical dipole antenna, side-lobes occur much more quickly, owing to the existence of high-order localized surface plasmon modes. These results hold a significant promise of improving the performance of optical antennas.

Keywords: optical dipole antenna, localized surface plasmons, gold nano-particles, far-field directivity

PACS: 52.25.Tx, 52.40.Fd, 42.79.-e

* Project supported by the National Basic Research Program of China (Grant Nos. 2009CB930503, 2009CB930501, 2007CB613203), the Scientific Research Staring Foundation for the Returned Overseas Chinese Scholars, Ministry of Education of China and the Reward Fund of Outstanding Youth and Middle Age Scientist of Shandong Province (Grant No. BS2009NJ002).

[†] Corresponding author. E-mail: kongfm@sdu.edu.cn