

## 介观尺寸原子链中的等离激元: 紧束缚模型\*

辛旺 吴仍来 薛红杰 余亚斌<sup>†</sup>

(湖南大学物理与微电子科学学院, 长沙 410082)

(2013年1月19日收到; 2013年5月28日收到修改稿)

本文运用紧束缚模型对介观尺寸原子链的等离激发进行了系统的研究, 通过量子响应理论和相无规近似得到了等离激元的本征频率方程, 通过该方程计算了系统中等离子体的激发能量, 并分别对体系的共振振荡以及外电场作用在原子链上发生共振的情况进行了研究. 结果表明, 体系在外场作用下发生共振时, 偶极矩的峰值与等离子体的激发态相对应, 说明外场此时激发了等离激元; 体系处在共振情况下, 电荷振荡的幅度远远大于非共振的情况, 相对来说体系的电荷虚部的共振更为明显. 对于体系的共振等离振荡频率, 同等长度时等离子体的激发能量总是大于同级的单电子激发能量; 等离激元的能谱与原子链的长度和电子密度以及系统的库仑关联强度都有很大关系; 在原子链长度保持不变的情况下, 等离子体的激发能量随电子数目的变化以半满为中心呈对称关系.

关键词: 纳米结构, 一维原子链, 等离激元

PACS: 73.20.Mf, 73.21.-b, 78.67.-n

DOI: 10.7498/aps.62.177301

## 1 引言

在过去的几年中, 纳米结构中的等离激元由于其具有重要的研究价值<sup>[1-13]</sup>, 以及广阔的应用背景, 被广泛应用于光学成像<sup>[14]</sup>, 单分子传感光谱学<sup>[1,2]</sup>, 光催化反应<sup>[15]</sup>和癌症治疗<sup>[16]</sup>等方面. 人们对此作出了大量的研究<sup>[17-22]</sup>. 徐红星的研究小组<sup>[20]</sup>的工作使纳米尺度上等离激元逻辑元件的实现成为可能. 此外, Nordlander和Halas<sup>[17]</sup>发现在Au-SiO<sub>2</sub>壳核纳米颗粒中, 等离激元的频率可以通过改变颗粒的大小从可见光区域调节到近红外区域. Muniz等<sup>[18]</sup>发现了系统的形状, 电子的填充和外部电场的驱动频率强烈影响等离子体集体激发的强度和频率, 表明可以通过控制系统的尺寸来控制等离子体共振的振幅和频率. 随着人们对纳米结构中的等离激元研究的深入, 很多重要的结论表明: 等离子体的激发能量除了受到外电场的影响外<sup>[18]</sup>, 与系统的尺度和电子数目也有很重要的关系. 通过改变纳米结构的几何参数<sup>[19-22]</sup>, 共振频率能够在很大范围内进行调节.

近来, 人们利用含时密度泛函理论研究等离激元<sup>[18,19]</sup>. 但是, 这种方法计算量较大, 且不能找出确切的等离激元的能量本征值. 只能通过能量损失谱的峰值来确定等离激元的能量, 并往往与所加外场有很大关系. 鉴于此, 在相关的理论知识基础上我们运用了一种新的方法, 给出了纳米结构体系中的等离激元本征频率方程. 求解该方程, 可直接算出与外场无关的等离激元本征能量的确切值, 并探究了原子链长度的变化和电子密度的变化以及其他参量对等离激元能谱的影响. 基于我们的计算结果, 对一维纳米体系等离激元的性质进行了系统的研究.

## 2 理论模型与公式

本章系统地给出了一维原子链等离激发能谱的计算公式. 在实际情形中, 电子与电子之间, 电子与原子核之间都存在相互作用, 其波函数也难以表达及运算, 为了简便, 本文采用紧束缚模型近似描述电子的运动情况, 且把不同原子的电子间的相互作用看作点电荷间的相互作用, 并运用紧束缚模型

\* 国家自然科学基金(批准号: 10774041)资助的课题.

<sup>†</sup> 通讯作者. E-mail: apybyu@hnu.edu.cn

对一维有限长原子链等离激发的能谱进行了推导. 本文采用的紧束缚原子链模型的哈密顿量为

$$H = \sum_{i,n} \varepsilon_{i,n}(t) d_{in}^\dagger d_{in} + \sum_{n,m,i < j} (V_{im,jn} d_{im}^\dagger d_{jn} + \text{h.c.}), \quad (1)$$

其中  $\varepsilon_{i,n}(t) = \varepsilon_0 + eV_{i,m}(\omega)e^{-i\omega t}$ , 这里  $\varepsilon_0$  是原子链的格点能, 不失一般性在本文中取  $\varepsilon_0 = 0$ ,  $V_{im}(t) = V_{i,m}(\omega)e^{-i\omega t}$  表示外加电势及其诱导电势引起的格点能的变化,  $d_{in}(d_{in}^\dagger)$  为万尼尔表象中的湮没(产生)算符, 而指标  $i, j$  为格点指标,  $m, n$  为能级指标. 对于单能级模型, 且令  $V_{ij} = t$ ,

$$H = -t \sum_{i < j} (d_i^\dagger d_j + \text{h.c.}) + \sum_i eV_i(t) d_i^\dagger d_i. \quad (2)$$

为了使其对角化我们做如下变换:

$$d_l = \sum_n \psi_n(l) c_n, \quad (3)$$

其中  $c_n$  为体系本征函数的基函数  $\phi_n(\mathbf{r}) = \sum_l \psi_n(l) \phi(\mathbf{r} - \mathbf{R}_l)$  下的表象湮没算符, 这里  $\phi(\mathbf{r} - \mathbf{R}_l)$  为万尼尔波函数. 将(3)式代入(2)式中, 将哈密顿量  $H$  对角化, 可以得到

$$H = \sum_n E_n c_n^\dagger c_n + \sum_{mn} V_{mn}(t) c_m^\dagger c_n, \quad (4)$$

其中

$$V_{mn} = \sum_i \psi_m^*(l) \psi_n(l) [eV, (t)] \quad (5)$$

为系统的自洽场, 是外场和诱导内场的总和.  $\psi_n(l)$  是对应本征能量  $E_n$  的本征矢, 相应的本征能量为

$$E_n = -2t \cos\left(\frac{n\pi}{N+1}\right), \quad n = 1, 2, \dots, N, \quad (6)$$

本征波函数为

$$\psi_n(l) = \sqrt{\frac{2}{N+1}} \sin\left(\frac{n\pi}{N+1} l\right). \quad (7)$$

由于外加电场的存在, 将会使系统的电荷重新分布, 即出现所谓的诱导电荷. 而诱导电荷又会导致电场的重新分布, 这样会出现一个附加的内电场——诱导电场. 所以, 体系中的电子实际上是受到了外电场与诱导电场的共同作用, (2) 式的  $V_i(t)$  包括了外电场和诱导电场. 对于微扰  $V_i(t)$  在体系中引起的诱导电荷, 我们根据标准的线性响应理论和无规相近似 (RPA), 得到

$$\begin{aligned} \delta Q_l(\omega) &= e \delta n_l(\omega) \\ &= e^2 \sum_{l'} \Pi(l, l', \omega) (V_{l'}^{in}(\omega) + V_{l'}^{ex}(\omega)), \quad (8) \end{aligned}$$

其中  $V_l(\omega) = V_l^{in}(\omega) + V_l^{ex}(\omega)$ ,  $\Pi(l, l', \omega)$  为 Lindhard 函数, 它可表示为

$$\begin{aligned} \Pi(l, l', \omega) &= -2 \sum_{mn} \frac{f(E_m) - f(E_n)}{E_m - E_n - \omega - i\gamma} \psi_m^*(l) \psi_n(l) \psi_m^*(l') \psi_n(l'), \quad (9) \end{aligned}$$

式中 2 表示两个自旋. 另一方面, 按照电磁理论我们得到诱导电荷引起的电势分布为

$$V_i(\omega) = \sum_{l'} e \delta n_{l'} \int \frac{|\phi_l(r)|^2 |\phi_{l'}(r')|^2}{4\pi\epsilon_0 |r - r'|} d^3 r d^3 r'. \quad (10)$$

将(10)与(8)式联立方程可得

$$\begin{aligned} Q_l(\omega) &= e \delta n_l(\omega) \\ &= \sum_{l'l''} \Pi(l, l', \omega) \{V_{l'l''} \delta Q_{l''}(\omega) \\ &\quad + e^2 V_{l'}^{ex}(\omega)\}, \quad (11) \end{aligned}$$

其中

$$V_{l'l''} = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \int \frac{|\phi_l(r)|^2 |\phi_{l'}(r')|^2}{|r - r'|} d^3 r d^3 r'. \quad (12)$$

本文我们并不试图对具体的材料进行计算, 而主要关心一维原子链模型中等离激元的性质, 因此我们把  $V_{l'l''}$  作为模型参数引入. 为了使计算简单, 如下我们只考虑同格位和不同格位间的库仑相互作用, 即

$$V_{ll} = u_0, \quad V_{l'l} = \frac{u_1}{|l - l'|}, \quad (13)$$

其中  $u_0$  为对应同格点上的库仑相互作用,  $u_1$  为相邻隔点的库仑相互作用. 根据以上公式可得

$$\sum_{l'} M_{l'l'}(\omega) \delta Q_{l'}(\omega) = \sum_{l'} \Pi(l, l', \omega) V_{l'}^{ex}(\omega). \quad (14)$$

这就是电荷的震荡方程, 其中

$$M_{l'l'} = \delta_{l'l'} - \sum_{l''} \Pi(l, l'', \omega) V_{l''l'}. \quad (15)$$

当无外场时, (14) 式变成

$$\sum_{l'} M_{l'l'}(\omega) \delta Q_{l'}(\omega) = 0. \quad (16)$$

这就是电荷的本征振动方程, 即等离振荡方程, 本征频率由  $\text{Re}[\det\{M_{l'l'}(\omega)\}] = 0$  决定. 对于无阻尼情况, 其解为实数. 而对于有阻尼的情况, 其解是一个复数. 实部代表等离激发频率, 虚部代表阻尼系数(亦即衰减因子). 对于小阻尼的情形, 我们可以使用上面(16)式求本征频率的近似解. 通过(6)式可得单粒子激发能

$$\omega_{mn} = 2t \left[ \cos \frac{m\pi}{N+1} - \cos \frac{n\pi}{N+1} \right], \quad (17)$$

通过 (17) 式可以计算单电子激发能量. 值得指出的是, 以上计算等离激元的公式推广到宏观尺度的原子链的等离激元的研究. 对于宏观尺寸我们可以采用周期性边界条件, 在把上面的公式在动量空间中表示出来, 就可以计算等离激元随动量的变化关系. 但是本文仅对介观尺度的原子链体系进行研究.

### 3 结果与分析

利用前面的模型和推导结果, 本节对该体系中等离子体的激发能量和单电子激发态的能量进行数值计算. 计算中以一维体系中的格点之间的跃迁矩阵元  $t$  为能量单位, 即取  $t = 1$ . 图中的  $N$  表示原子数目,  $Nm$  表示电子数目,  $n$  表示第  $n$  个等离激元,  $m$  表示等离激元的数目,  $\omega(n)$  表示第  $n$  个等离激元的激发能量. 在本文中同格点上的库仑相互作用  $u_0 = 1.5$ , 相邻隔点的库仑相互作用  $u_1 = 1$  (图 10 除外, 库仑相互作用单位为  $t$ ). 下面分别对计算结果进行分析, 说明和对比.

#### 3.1 体系的本征振荡

首先, 我们在图 1 中给出了系统尺度分别为原子数  $N = 12$  和原子数  $N = 15$  的原子链的第一个激发能量随电子数目的变化关系. 由图可见, 在电子密度达到半满之前, 等离子体的第一激发能量都随着电子数目的增加而增大. 电子密度大, 引起电子偏离平衡位置时形成的附加场增强, 赖以形成等离激元的恢复力增大, 导致激发能量增大. 而且还发现两条原子链的第一激发能量都以半满状态为中心呈现对称关系. 我们进一步做出原子数  $N = 12$  电子数  $Nm = 2$  和原子数  $N = 12$  电子数  $Nm = 22$  的原子链的能量损失谱 (分别显示在图 2(a) 和 (b)), 它由  $\text{Im}[1/\det\{M_{ll'}(\omega)\}]$  给出, 图 2 不是直接画出的, 直接画峰的高度相差很大, 有的显示不出来. 为了把每个峰都明显的显示出来, 我们实际上画的是  $\log(1 + |\text{Im}[1/\det\{M_{ll'}(\omega)\}]|)$  可以发现二者是完全相同的. 这表明尺度给定的原子链激发的所有能量都随电子数目的变化呈对称关系, 同时表明体系中的等离激元对于电子和空穴是对称的. 这种半满对称性是由于半满之后载流子浓度就是空穴浓度, 而这种现象自由电子模型是没有的, 因为自由电子模

型中电子能量的色散关系给不出空穴图像.

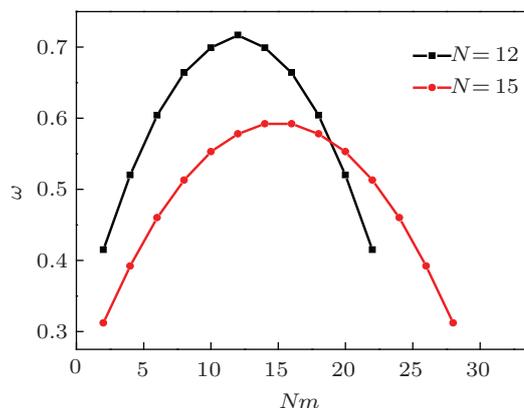


图 1 第一激发能量  $\omega$  随电子数目  $Nm$  的变化

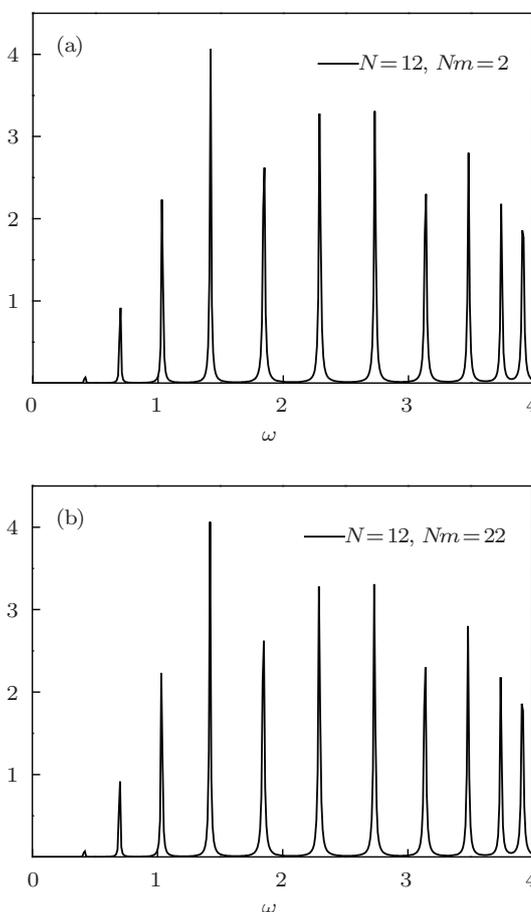


图 2 能量损失谱 (a)  $Nm = 2$ ; (b)  $Nm = 22$

然后, 在图 3 中给出了等离激元能量和单电子激发能量随原子链长度的变化关系.  $P_1$  和  $P_2$  分别表示电子密度为每原子一个电子 (原子数  $N$ : 电子数  $Nm = 1 : 1$ ) 的原子链的第一个和第二个等离激发能量;  $E_1$  和  $E_2$  分别表示同样电子密度下 (原子数  $N$ : 电子数  $Nm = 1 : 1$ ) 第一和第二个单电子激发能

量. 由图可见, 单电子激发能量和等离子体的激发能量随着原子链长度的增加有类似的尺寸效应. 其次, 在同等尺度下, 等离子体的激发能量总是大于同一级的单电子激发能量.

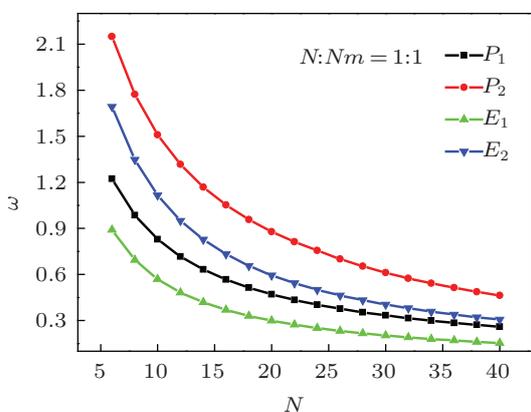


图3 激发能量  $\omega$  随原子链长度  $N$  的变化

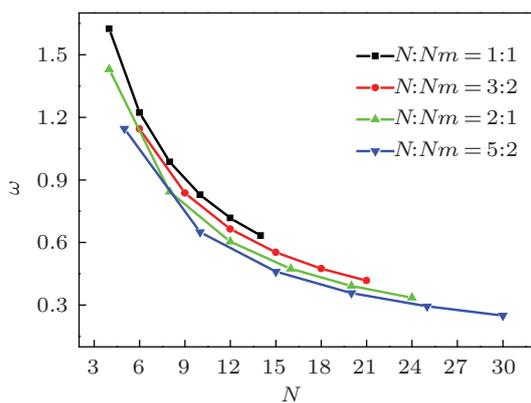


图4 第一激发能量  $\omega$  随原子链长度  $N$  的变化

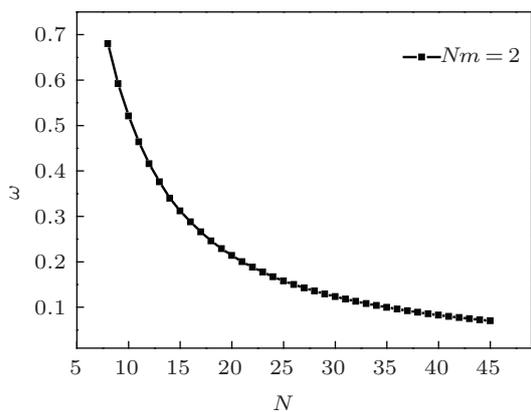


图5 第一激发能量  $\omega$  随原子链长度  $N$  的变化

图4给出了电子密度不同的原子链的第一激发能量随原子链长度的变化关系. 发现在原子链长度一定时, 等离子体的第一激发能量会随着电子密度的增大而增大, 与图1给出的结果一致. 此外, 图

5又给出了电子数目  $Nm = 2$  的情况下, 等离子体的第一个激发能量随原子链长度的变化关系, 发现与前者有着同样的变化趋势, 与文献 [19] 的结果定性一致. 通过以上对比表明: 原子链在电子密度或电子数目保持不变的情况下, 第一激发能量随系统尺度的增加而减小. 由于原子链长度增加, 系统的状态数就会增加, 引起每一个状态之间的能量间隔减小. 从而导致激发能量减小, 和单粒子激发的情况相类似. 而且随着原子链长度的增加, 这种变化趋势越来越小, 最终将趋于一个固定值.

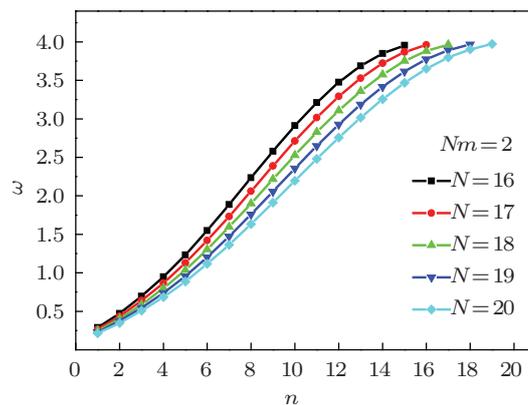


图6 电子数为  $Nm = 2$  时等离激元的能谱

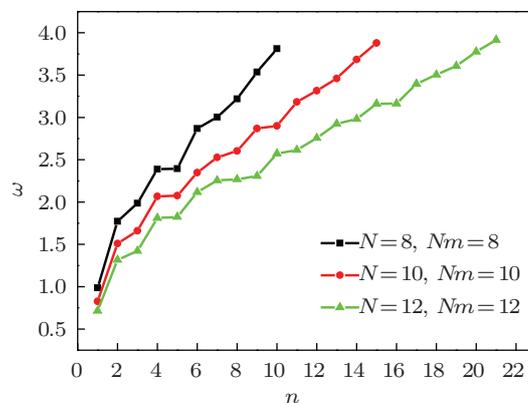


图7 电子密度为  $N:Nm = 1:1$  时等离激元的能谱

为进一步说明问题我们给出了图6和图7, 图6和图7中分别给出了在电子密度 ( $N:Nm = 1:1$ ) 和电子数目 (电子数  $Nm = 2$ ) 保持不变的情况下, 不同长度原子链激发的等离激元能谱. 可以看到尺度较长的原子链激发的能量较小, 通过与图4和图5的对比表明: 不只是第一激发态, 所有的激发态都一样, 激发能量都会随系统尺度的增加而减小. 在图6和图7中还可发现尺度较长的原子链激发的等离激元个数较多. 因为尺度较长的原子链系统状态数多, 对应等离激元的个数就多. 且随着原子链尺度的不断增大, 激发能量将趋于连续谱. 图6中

还可发现原子链中原子的数目每增加一个, 等离激元的个数就相应增加一个. 这说明在电子数目不变的情况下, 等离激元的个数随原子链长度线性增加, 这实际上反映了等离振荡模式数目的尺寸效应.

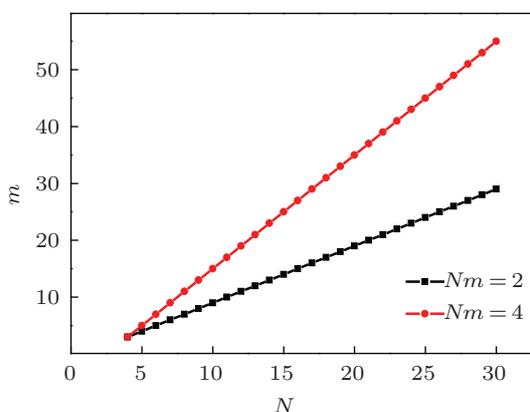


图 8 等离激元数目  $m$  随原子链长度  $N$  的变化

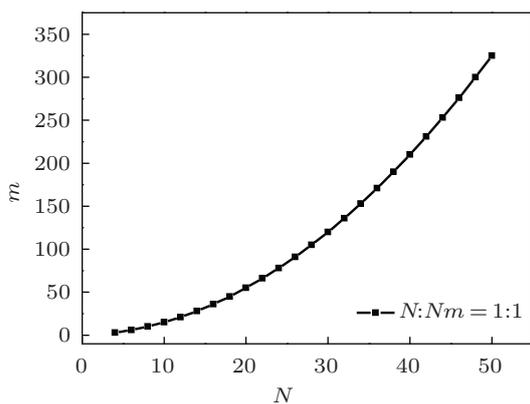


图 9 等离激元数目  $m$  随原子链长度  $N$  的变化

图 8 给出了电子数分别为  $Nm = 2$  和  $Nm = 4$  的原子链的等离激元数目随原子链长度的变化关系. 图 9 又给出了电子密度为 ( $N:Nm = 1:1$ ) 的原子链的等离激元数目随原子链长度的变化关系. 发现在这两种情况下, 等离激元的数目都随着原子链长度的增加而增加, 与图 6 和图 7 给出的结果一致. 而且在图 8 中发现当原子链长度一样时, 等离激元的数目随着电子数目的增加而增加. 图 9 中还可以看到在电子密度不变的情况下, 随着原子链长度的增加这种变化趋势越来越大.

我们在图 10 中给出了不同库仑相互作用下原子链 (原子数  $N = 12$ , 电子数  $Nm = 2$ ) 激发的等离激元能谱. 我们通过改变库仑相互作用  $u_0$  和  $u_1$  的大小, 发现原子链的激发能量会随着库仑相互作用增大而增大, 这是因为增大库仑相互作用, 电子间的相互作用就会变大, 从而引起等离振荡频率增

大. 表明库仑相互作用对于激发能量来说是一个正效应.

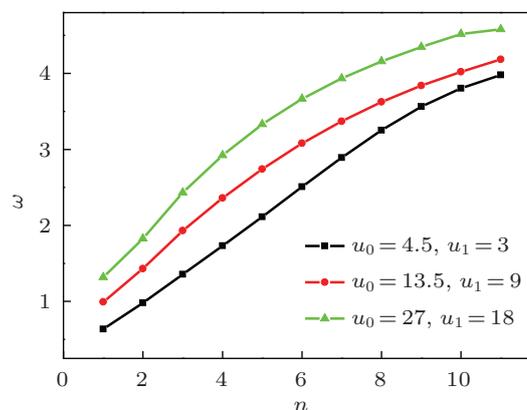


图 10 不同库仑相互作用下等离激元的能谱

### 3.2 电荷及电偶极矩的共振

我们沿原子链的方向加一个场强为  $E e^{-i\omega t}$  的电场我们利用 (11) 式, 其中  $V_l^{\text{ex}} = -El$ , 算出  $Q_l$ . 然后, 根据公式计算出偶极矩  $p = \sum_l l Q_l$ . 图 11 和图 12 分别给出了不同长度的原子链在半满的情况下, 偶极矩  $p$  的实部和虚部随外场频率的变化关系. 通过图 11、图 12 与图 7 的比较发现偶极矩的峰值对应于等离子体的激发态. 说明外场和等离激元在此发生共振. 同时发现较长原子链产生的偶极矩比较短原子链的偶极矩大. 即使单位长度的偶极矩, 较长原子链看起来还是要大一些. 偶极矩虚部都是正的, 而实部在共振频率两侧有  $\pi$  的相位差. 在小于共振频率时, 偶极矩的实部方向和外场的方向一致, 而在稍大于或稍小于共振频率时, 则与外场的方向相反.

图 13 和图 14 分别给出了不同外电场频率下原子链 ( $N = 10, Nm = 10$ ) 实部和虚部体系电荷的分布. 图中的曲线分别表示作用在系统的外电场在

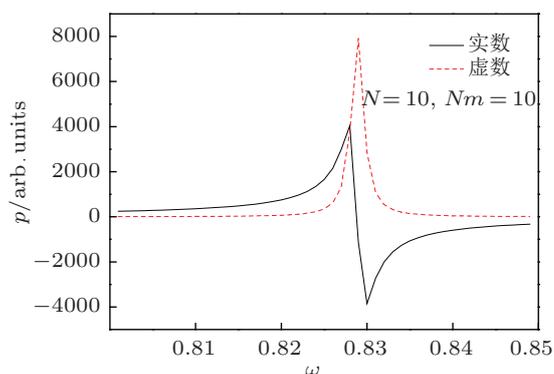


图 11 偶极矩  $p$  随外场频率的变化

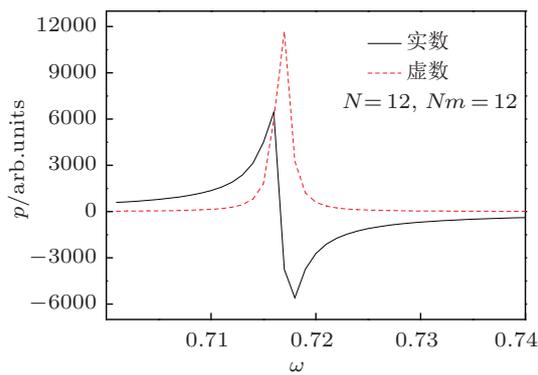


图 12 偶极矩  $p$  随外场频率的变化

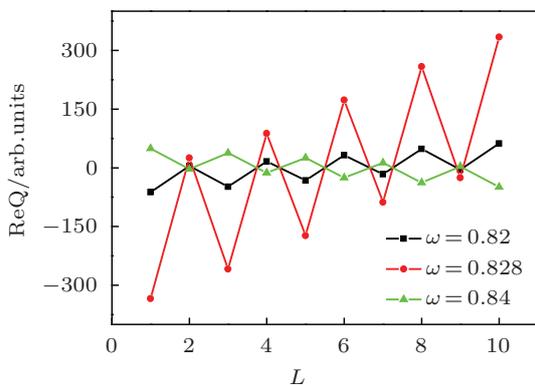


图 13 体系实部电荷的分布

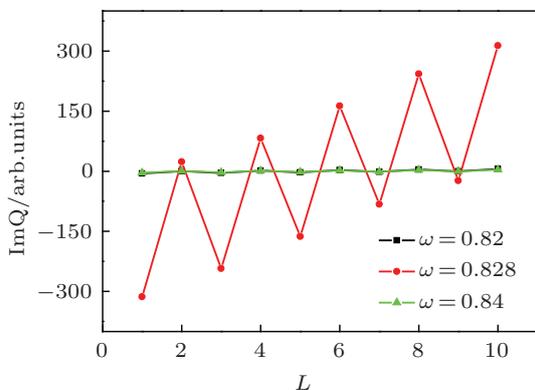


图 14 体系虚部电荷的分布

共振频率以及共振频率两侧, 电荷的分布. 发现系统处在共振频率下, 电荷振荡的幅度远远大于非共

振的情况. 对比发现电荷虚部共振更明显, 不共振时电荷几乎是零. 众所周知, 电容器中出现电荷虚部会导致能量损耗. 因此, 这里出现电荷虚部应该对应能量损耗. 也就是说在共振的情况下, 系统的能量损耗将急剧增加. 这里我们并没有考虑到电子运动过程中受到散射的情况, 所以这里出现的能量损耗所对应的应该是电荷的弛豫电阻引起的. 事实上图 11 和图 12 中的电偶极矩的实部曲线对应的就是体系的能量吸收谱 [21].

## 4 结论

本文利用紧束缚模型研究了纳米结构中一维原子链的等离激元, 采用量子响应理论得到了等离激元的本征频率方程, 并数值计算了该体系中等离激元的能谱. 研究了体系的本征振荡和外电场作用在原子链上发生共振的情况. 根据这些计算结果, 我们得出以下结论: 1) 对于体系在本征振荡来说, 同等尺度下, 等离子体的激发能量总是大于同级的单电子激发能量. 而且随着原子链长度的增加, 二者有着相同的尺寸效应; 原子链长度的变化和电子密度的变化以及系统的库仑相互作用都对等离激元能谱有显著的影响. 在原子链电子密度或电子数目一定的情况下, 等离子体的激发能量随着原子链长度的增加而减小, 然而较长的原子链激发的等离激元个数较多. 等离子体的激发能量随着库仑相互作用的增大而增大; 尺度给定的原子链的激发能量随电子数目的变化以半满为中心对称, 而且在达到半满之前电子密度越大其等离子体的第一激发能量越大. 2) 外场作用下, 体系的电荷和电偶极矩响应达到共振时, 偶极矩的峰值与等离子体的激发态相对应, 表明外场和等离激元在此发生共振; 体系在共振频率下, 电荷振荡的幅度远远大于非共振的情况, 相对来说体系虚部的变化更明显一些. 这样就可以通过在原子尺度上对一维原子链的调节来控制它的激发能量.

[1] Nie S, Emory S R 1997 *Science* **257** 1102  
 [2] Xu H X, Bjerneld E J, Käll M, Börjesson L 1999 *Phys. Rev. Lett.* **83** 4357  
 [3] Zhang X F, Yan X 2013 *Acta Phys. Sin.* **62** 037805 (in Chinese) [张兴坊, 闫昕 2013 物理学报 **62** 037805]  
 [4] Han Q Y, Tang J C, Zhang C, Wang C, Ma H Q, Yu L, Jiao R Z 2012 *Acta Phys. Sin.* **61** 135202 (in Chinese) [韩清瑶, 汤俊超, 张弢, 王川,

马海强, 于丽, 焦荣珍 2012 物理学报 **61** 135202]  
 [5] Sun Y, Xia Y 2002 *Science* **298** 2176  
 [6] Sönnichsen C, Franzl T, Wilk T, Plessen G V, Feldmann J, Wilson O, Mulvaney P 2002 *Phys. Rev. Lett.* **88** 077402  
 [7] Cong C, Wu D J, Liu X J, Li B 2012 *Acta Phys. Sin.* **61** 037301 (in Chinese) [丛超, 吴大建, 刘晓峻, 李勃 2012 物理学报 **61** 037301]  
 [8] Hervieux P A, Bigot J Y 2004 *Phys. Rev. Lett.* **92** 197402

- [9] Barnes W L, Dereux A, Ebbesen T W 2003 *Nature*(London) **424** 824  
 [10] Pendry J B, Martin-Moreno L, Garcia-Vidia F J 2004 *Science* **305** 847  
 [11] Yao H M, Chen X N, Chen X Z 2005 *Acta Phys. Sin.* **54** 2645 (in Chinese) [姚汉民, 陈旭南, 陈献忠 2005 物理学报 **54** 2645]  
 [12] Wang R Z, Li P F, Yan X H 2002 *Acta Phys. Sin.* **51** 2139 (in Chinese) [王如志, 李鹏飞, 颜晓红 2002 物理学报 **51** 2139]  
 [13] Chen Y, Yu L P, Zhu Z Y 2002 *Acta Phys. Sin.* **51** 1571 (in Chinese) [陈一, 余礼平, 朱志远 2002 物理学报 **51** 1571]  
 [14] Fang N, Lee H, Sun C, Zhang X 2005 *Science* **308** 534  
 [15] Bell A T. 2003 *Science* **299** 1688  
 [16] Hirsch L R, Stafford R J, Bankson J A, Sershen S R, Rivera B, Price R E, Hazle J D, Halas N J, West J L 2003 *Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A.* **100** 13549  
 [17] Nordlander P, Halas N J 2010 *Phys. Chem. C* **114** 7378  
 [18] Muniz R A, Haas S 2009 *Phys. Rev. B* **80** 045413  
 [19] Cassidy A, Grigorenko I, Haas S 2008 *Phys. Rev. B* **77** 245404  
 [20] Xu H X, Käll M 2002 *Phys. Rev. Lett.* **89** 246802  
 [21] Yan J, Gao S W 2008 *Phys. Rev. B* **78** 235413  
 [22] Yan J, Yuan Z, Gao S W 2007 *Phys. Rev. Lett.* **98** 216602

## Plasmonic excitations in mesoscopic-sized atomic chains: a tight-binding model\*

Xin Wang Wu Reng-Lai Xue Hong-Jie Yu Ya-Bin<sup>†</sup>

(School of Physics and Microelectronics Science, Hunan University, Changsha 410082, China)

(Received 19 January 2013; revised manuscript received 28 May 2013)

### Abstract

Plasmonic excitations in mesoscopic-sized atomic chains are investigated by employing the tight-binding model. Based on the quantum response theory and random phase approximation, a plasma oscillation eigen-frequency equation is derived for calculation of the plasmon energy spectrum. The plasmon energy spectrum has been numerically calculated, and the eigen-oscillation of the system and the resonance behavior under the external electric field applied on the atom chain are investigated, respectively. Dependence of plasmonic excitation energy on the length of systems and electron density has been discussed. Results suggest that in the case of resonance, the resonant peak of dipole moment is corresponding to the plasmonic excitation, and this indicates that the external electric field excites the plasmon of the system. In resonance the oscillation amplitude of the charge is much larger than that in the case of non-resonance, especially the imaginary part of the charge has a more obvious enhancement. For the eigen-oscillations, the plasmonic excitation energy is greater than the single-particle excitation state at the same level; the length of atomic chains, the electron density, and the strength of Coulomb correlation have significant effects on the plasmon spectroscopy. For the given atom-chain length, with variation of number of electrons, the plasmonic excitation energy varies symmetrically around the half-filling. This indicates that the plasmon spectrum of the system is symmetrical for the electrons and holes.

**Keywords:** nanostructure, one-dimensional atomic chains, plasmon

**PACS:** 73.20.Mf, 73.21.-b, 78.67.-n

**DOI:** 10.7498/aps.62.177301

\* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 10774041).

<sup>†</sup> Corresponding author. E-mail: apybyu@hnu.edu.cn