

一维原子链局域等离激元的非线性激发

尹海峰 毛力

Nonlinear excitation of localized plasmon in one-dimensional atomic chain

Yin Hai-Feng Mao Li

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 65, 087301 (2016) DOI: 10.7498/aps.65.087301

在线阅读 View online: <http://dx.doi.org/10.7498/aps.65.087301>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn/CN/Y2016/V65/I8>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

基于金属-电介质-金属波导结构的等离子体滤波器的数值研究

Numerical study of plasmonic filter based on metal-insulator-metal waveguide

物理学报.2016, 65(5): 057301 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.65.057301>

基于纳米天线的多通道高强度定向表面等离子体波激发

High-intensity directional surface plasmonic excitation based on the multi metallic slits with nano-antenna

物理学报.2015, 64(24): 247301 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.247301>

梳状波导结构中石墨烯表面等离子体的传播性质

Propagation properties of the graphene surface plasmon in comb-like waveguide

物理学报.2015, 64(23): 237301 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.237301>

环形狭缝腔阵列光学特性的研究

Finite difference time domain simulation of optical properties of annular cavity arrays

物理学报.2015, 64(22): 227301 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.227301>

金纳米棒复合体的消光特性

Extinction properties of gold nanorod complexes

物理学报.2015, 64(20): 207301 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.207301>

一维原子链局域等离子激元的非线性激发*

尹海峰^{1)2)†} 毛力²⁾

1) (凯里学院物理与电子工程学院, 凯里 556011)

2) (武汉大学物理科学与技术学院, 武汉 430072)

(2015年11月2日收到; 2016年1月31日收到修改稿)

本文基于含时密度泛函理论, 研究了不同频率光脉冲场作用下一维钠原子链中电子的输运与等离子激元共振之间的耦合规律. 在等离子激元共振点附近约0.8 eV频率范围内的光脉冲场, 都可以激发体系的等离子激元共振. 这些不同频率外场激发的等离子激元共振强度大小在一个数量级. 外场频率越接近等离子激元共振频率, 外场激起的等离子激元振动的振幅越大. 对于线性原子链等离子激元的非线性激发现象, 本文用经典谐振子模型给出了定性解释.

关键词: 等离子激元, 一维原子链, 含时密度泛函理论

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

DOI: 10.7498/aps.65.087301

1 引言

随着现代工业的发展, 电子器件的尺度越来越小. 对于纳米器件, 当其大小和电子的波长相当时, 纳米器件的输运性质就会受到量子效应的影响^[1]. 在原子分子尺度上量子效应则更加明显, 体系中不同激发的相互作用都可能对输运性质产生影响. 原子分子尺度上不同激发的相互作用可以产生许多新奇的现象, 从而产生新的应用, 如分子开关、分子场效应管、分子传感器等^[2]. 从机理上理解小尺度体系中输运与激发的耦合是应用它们的关键. 等离子激元作为不同材料中广泛存在的一种元激发^[3,4], 在体系的输运过程中起着重要的作用^[5-7]. 等离子激元与电子输运之间的耦合可以产生许多新的物理现象, 如光催化、光增强电导等^[8-11]. 等离子激元参与光催化的原理之一是等离子激元诱导的电子输运, 一些等离子激元传感器则是基于等离子激元诱导的热电子输运^[9]. 所有这些应用均依赖于等离子激元对电子传输的影响. 因此, 近年来对于小体系下等离子激元与电子传输耦合的研究受到重视^[10-16]. 理论上,

对于等离子激元与单个原子的传输耦合研究表明, 电荷传输、偶极和四极等离子激元模式可以分别与原子电子输运耦合, 对通过原子的光电流均有提升作用^[10,11]. 由金属纳米粒子和表面分子组成的体系, 在强激光照射下体系中会出现双等离子激元激发和低能电荷转移激发的非线性过程^[16]. 实验上, 近来Wu等^[17]研究了金修饰硒化镉纳米棒中的等离子激元诱导的热电子转移. 结果发现, 一定能量范围内的激发光子都可以促使体系中的等离子激元诱导界面电荷转移跃迁. 此外, Chakraborty等^[18]实验上研究了金修饰纳米线的光电流增强, 发现光电流增强谱的形状与金修饰纳米线的吸收光谱不完全一样. 在金纳米粒子等离子激元共振能量点附近, 光电流增强谱发生了展宽. 由于光电流增强谱在等离子激元共振点发生了展宽, 而与等离子激元共振吸收光谱不一致, Chakraborty等认为光电流的增强并不是由于等离子激元效应. 然而事实上, 目前等离子激元诱导的电子输运机理仍没有完全清楚. 本文将钠原子链为理想模型^[19], 研究在不同频率光场作用下, 体系中电子的输运与等离子激元共振之间的耦合.

* 国家自然科学基金(批准号: 11464023)、贵州省普通高等学校创新人才团队(黔教合人才团队字[2012]06号)和凯里学院原子与分子物理重点学科资助的课题.

† 通信作者. E-mail: meyhf@126.com

2 计算方法

第一性原理的计算是用实时、实空间的 OCTOPUS 软件来完成的^[20]. 钠原子用模守恒赝势来描述. 交换关联势使用的是局域密度近似 (local density approximation). 一维钠原子链位于实空间模拟所用立方体盒子的中心, 钠原子到盒子边界最近的距离为 10 Å. 在盒子内均匀格点的间距为 0.3 Å. 两个钠原子之间的间距为 2.89 Å, 取的是原子链在 NiAl(110) 表面的实验值^[21]. 通过计算一维钠原子链的基态, 得到电子的占据态信息后, 可以利用时间演化波函数的方法来计算体系的吸收光谱^[20]. 为了研究体系中电子的输运与等离激元共振之间的耦合规律, 一维钠原子链的 Kohn-Sham 波函数在外光脉冲场中演化了 20000 步, 时间演化步长为 3.3×10^{-18} s. 本文通过一个高斯波包来模拟沿一维钠原子链所在直线方向的光脉冲场

$$E(\omega, t) = E_{\max} \exp \left[-\frac{(t - t_0)^2}{2\tau^2} \right] \times \cos(\omega t - \omega t_0 + \varphi). \quad (1)$$

为简单起见, 令 $\varphi = 0$, 光脉冲的宽度 τ 是 4.84×10^{-15} s, 在时间 t 为 1.45×10^{-14} s 时, 光脉冲达到其最大强度 $E_{\max} = 0.5 \times 10^{-6}$ a.u., 由于光脉冲的强度足够小, 不会引起原子实的运动.

通过一维钠原子链中间处的电流 $I(t)$, 计算公式为

$$I(t) = \int_S \mathbf{j}(\mathbf{r}, t) \cdot d\mathbf{S}, \quad (2)$$

其中, S 为一维钠原子链中间处垂直于原子链方向的一个面; 电流密度为

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}, t) = -\frac{i\hbar}{2} \sum_k \{ \phi_k^*(\mathbf{r}, t) \nabla \phi_k(\mathbf{r}, t) - \phi_k(\mathbf{r}, t) \nabla \phi_k^*(\mathbf{r}, t) \}, \quad (3)$$

依赖于共振频率的电流大小 (对电流在某些共振频率做傅里叶变换) 公式为

$$I(\omega) = \int dt I(t) e^{i\omega t}.$$

3 计算结果与讨论

3.1 电子输运与等离激元之间的耦合

图 1 给出了沿平行于链方向 δ 外场激发时^[19] 线性钠原子链的偶极吸收光谱, 插图为钠原子链的

结构示意图. 本文选取该线性原子链为理想模型来研究体系中电子的输运与等离激元共振之间的耦合规律. Yan 等^[19] 利用含时密度泛函理论研究了一维钠原子链中的等离激元激发, 发现在体系中存在两个横向和一个纵向等离激元共振模式. 随后, Chung 等^[22] 在实验上观察到了这些等离激元共振模式. 这些研究表明含时密度泛函理论可以成功预测小体系中的等离激元激发特性. 对于如图 1 所示的线性钠原子链, 沿平行于链方向, 体系在 0.98 eV 处有一个主要的吸收峰, 同 Yan 等^[19] 的研究结果一致^[19]. 该吸收峰对应的等离激元共振模式具有偶极子共振的特性.

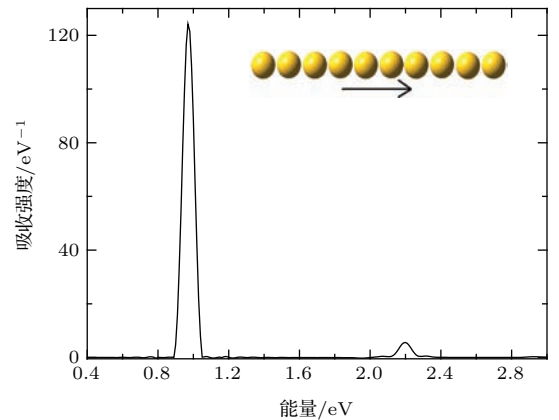


图 1 沿平行于链方向激发时, 线性钠原子链的偶极吸收光谱, 插图为钠原子链的结构示意图

Fig. 1. The optical absorption of the linear sodium chain, to an impulse excitation polarized in the direction that is parallel to the chain. The inset is the schematic diagram of the linear sodium chain.

图 2 所示为 δ 外场激发下, 时间演化到 2.43×10^{-14} s 时, 原子链等离激元引起的电场分布, 其中灰色圆表示原子所在的位置. 图 2 为原子链所在的一个平面. 电场的计算公式为

$$E_{\text{eff}}(x, t) = \frac{v_{\text{eff}}(x + \delta x, t) - v_{\text{eff}}(x, t)}{\delta x},$$

其中, v_{eff} 为有效势, δx 为均匀格点的长度. 电场的单位为 $\mu\text{V}/\text{m}$. 图 2 的结果表明, 等离激元引起的较大电场分布在原子链的两个端点附近. 这是由于沿链所在方向激发的等离激元, 主要为偶极共振模式^[19,23]. 此外, 电场在原子附近呈现剧烈的振荡行为, 这主要来自于原子势的局域调制.

图 3 作为示例给出了作用于一维钠原子链随时间演化的光脉冲场强. 这里的光脉冲的频率分别为 0.68, 0.98 和 1.27 eV. 其中, 0.98 eV 光脉冲的频率和一维钠原子链等离激元共振频率相同. 电子波函数的演化总时间为 6.6×10^{-14} s; 时间演化到

3.2×10^{-14} s时, 外光脉冲场的作用结束. 图4所示为外光脉冲场的频率分别为0.68, 0.98, 1.13和1.27 eV时, 通过一维钠原子链的电流 $I(t)$. 下面分

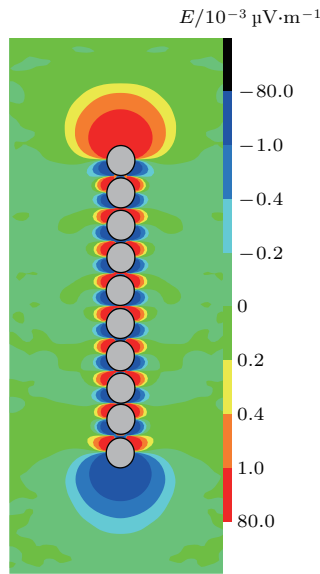


图2 (网刊彩色) 外场激发下时间演化到 2.43×10^{-14} s 时原子链等离激元引起的电场分布, 其中灰色圆表示原子所在的位置

Fig. 2. (color online) After the action of the δ pulse fields, the plasmon-induced electric field distribution at the time of 2.43×10^{-14} s. Wherein, the filled gray circles indicate the positions of the atoms.

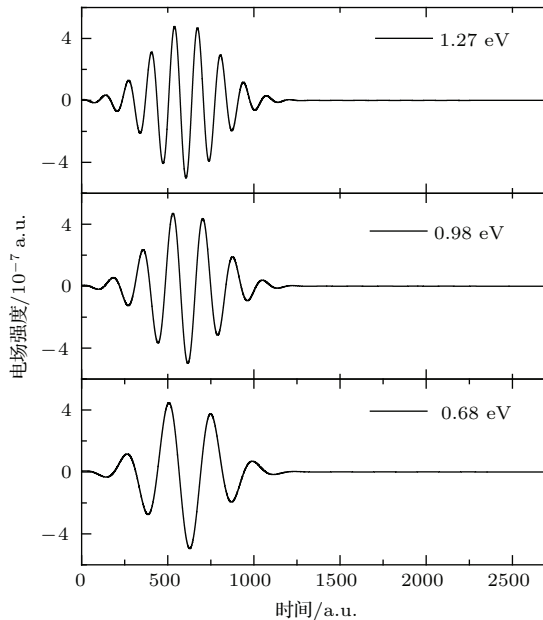


图3 随时间演化的光脉冲场强. 光脉冲最大强度 $E_{\max} = 0.5 \times 10^{-6}$ a.u., 光脉冲的频率分别为0.68, 0.98和1.27 eV

Fig. 3. Light pulse field strength with the evolution of time. The largest light pulse field strength $E_{\max} = 0.5 \times 10^{-6}$ a.u.. The frequency of the light pulses are respectively 0.68, 0.98, and 1.27 eV.

析在不同频率光脉冲场作用下, 电流 $I(t)$ 随时间的演化规律. 在0.98 eV光脉冲场的作用期间, 虽然电场的幅值先由零增大, 在时间 t 为 1.45×10^{-14} s 时, 幅值达到最大值, 然后再减小到零, 但是一维钠原子链电流 $I(t)$ 的幅值在光脉冲整个作用期间却一直增大, 直到外光脉冲场作用结束时, 电流 $I(t)$ 的幅值达到最大值. 这主要是由于该外光脉冲场的频率和线性钠原子链等离激元的共振频率相同, 激起了体系的等离激元共振. 在外场作用结束后, 随着时间演化, 电流 $I(t)$ 的幅值基本保持不变, 一直为最大值. 在外场作用期间以及外场作用结束后, 电流 $I(t)$ 两个峰值之间的时间间隔一直为 4.18×10^{-15} s, 即电流 $I(t)$ 的频率保持不变. 在0.68 eV光脉冲场的作用期间, 随着电场的幅值由零增加到最大值, 然后再减小为零, 电流 $I(t)$ 的幅值先是增大随后也逐渐减小. 然而有意思的是, 即使在0.68 eV光脉冲场作用结束之后, 随着时间演化, 电流 $I(t)$ 的幅值并没有减小到零, 而是保持一定的大小. 在外场作用期间, 电流 $I(t)$ 两个峰值之间的时间间隔逐渐减小; 外场作用结束后, 电流 $I(t)$ 两个峰值之间的时间间隔也基本保持不变, 大小同样为 4.18×10^{-15} s. 该结果表明, 在0.68 eV光脉冲场开始作用时, 体系中的电子由于受到外场驱动开始振动, 并且和外场振动的频率基本一致. 然而随着外场驱动时间的增加, 一部分电子的能量不断聚集, 激发了体系0.98 eV处的等离激元共振. 因此, 在外场作用期间, 一维钠原子链中的电子逐渐参与了两种振动, 两种振动的合成促使观察到的电流 $I(t)$ 两个峰值之间的时间间隔逐渐减小. 0.68 eV的光脉冲场激起体系0.98 eV处等离激元共振的过程, 类似于上转换发光过程.

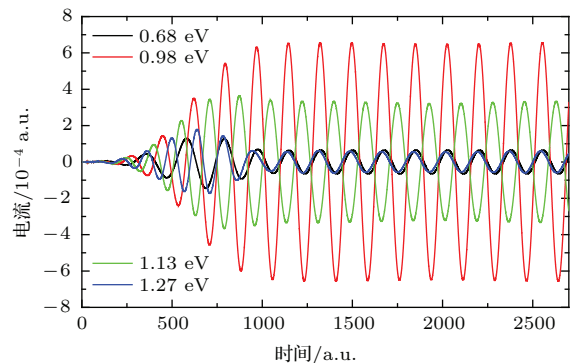


图4 (网刊彩色) 光脉冲场的频率分别为0.68, 0.98, 1.13和1.27 eV时, 通过一维钠原子链中间处的电流 $I(t)$

Fig. 4. (color online) The current $I(t)$ across the middle of the linear atomic sodium chain, at the light pulse frequencies of 0.68, 0.98, 1.13, and 1.27 eV, respectively.

在 1.13 和 1.27 eV 光脉冲场的作用期间, 电流 $I(t)$ 的幅值也是先增大随后逐渐减小; 在光脉冲场作用结束之后, 电流 $I(t)$ 的幅值同样保持了一定的大小. 与 0.68 eV 光脉冲场作用不同的是, 在 1.13 和 1.27 eV 外场作用期间, 电流 $I(t)$ 两个峰值之间的时间间隔逐渐增大, 作用结束后, 电流 $I(t)$ 两个峰值之间的时间间隔也基本保持不变, 大小同样为 4.18×10^{-15} s. 该结果表明, 在大于 0.98 eV 的光脉冲场作用时, 同样会激发体系在 0.98 eV 处的等离激元共振. 这主要是由于电子与电子之间以及电子与原子实之间的相互作用, 会促使在外场驱动下形成的一部分高能电子的能量逐渐损失, 当振动电子的能量降低到 0.98 eV 附近时会激起体系的等离激元共振. 此外, 通过对比 1.13 和 1.27 eV 光脉冲场激起等离激元共振电流 $I(t)$ 的幅值, 发现频率越接近 0.98 eV 的外光脉冲场, 激起等离激元共振电流的幅值越大.

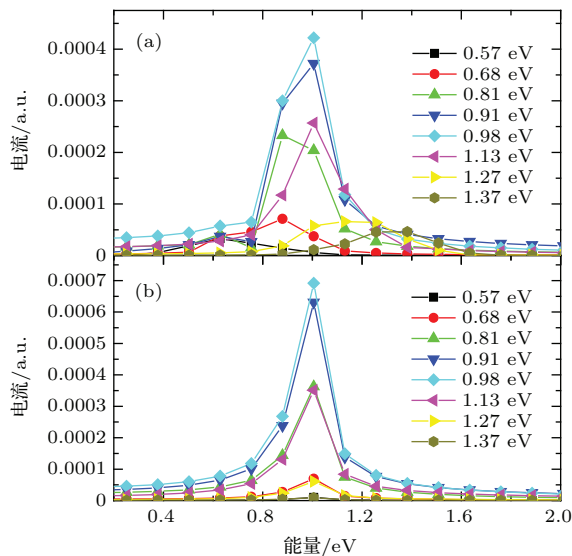


图5 (网刊彩色) (a) 在不同频率的光脉冲场作用下, 时间演化到 3.3×10^{-14} s 时, 依赖于共振频率的电流; (b) 不同频率外场作用结束后, 时间由 3.3×10^{-14} s 演化到 6.6×10^{-14} s 时, 依赖于共振频率的电流
Fig. 5. (color online) Current as a function of excitation energy: (a) Under the action of the light pulse fields of different frequencies $t = 3.3 \times 10^{-14}$ s; (b) after the action of the light pulse fields of different frequencies $t = 3.3 \times 10^{-14} - 6.6 \times 10^{-14}$ s.

为了更进一步说明在 0.98 eV 附近, 不同频率光脉冲场对一维钠原子链等离激元的激发特性, 本文计算了依赖于共振频率的电流大小. 图 5(a) 所示的是在不同频率的光脉冲场作用下, 时间演化到 3.3×10^{-14} s 时, 一维钠原子链中间处依赖于共振频率的电流. 图 5(b) 所示的是在不同频率外

光脉冲场作用结束后, 时间由 3.3×10^{-14} s 演化到 6.6×10^{-14} s 时, 依赖于共振频率的电流. 图 5(a) 的结果表明, 在高频和低频的外光脉冲场作用期间, 依赖于共振频率的电流峰值都发生了展宽, 但是展宽的形式不同, 即分别向低能和高能方向发生了展宽. 这也说明在外场作用期间, 激起了体系在 0.98 eV 的等离激元共振. 图 5(b) 的结果表明, 在一维钠原子链等离激元共振点附近一定范围内, 不同频率的外光脉冲场都可以激发体系 0.98 eV 处的等离激元共振; 所不同的是, 频率越接近 0.98 eV 的外场, 激发等离激元共振的强度越大.

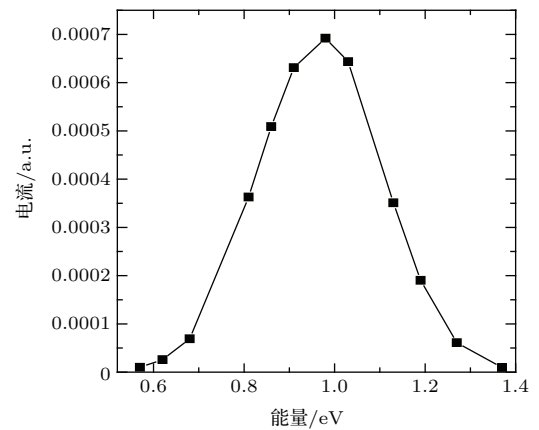


图6 不同频率光脉冲场激发的等离激元共振所对应电流的幅值
Fig. 6. The current amplitudes corresponding to the plasmon resonance which are stimulated by different frequency light pulse fields.

图 6 所示为随着频率变化时, 外光脉冲场激发的等离激元共振所对应电流的幅值. 图 6 表明, 不同外场激发的等离激元共振电流的幅值大体上关于 0.98 eV 呈对称分布, 外场频率接近 0.98 eV 的电流幅值较大, 远离 0.98 eV 的电流幅值迅速降低. 大约在 0.8 eV 频率范围内的外光脉冲场, 都可以激起体系在 0.98 eV 处的等离激元共振, 这些不同外场激发的等离激元共振电流的幅值大小在一个数量级. 为了说明图 6 所示的不同频率光场作用下体系中电子的输运与等离激元共振之间耦合规律的普适性, 本文还计算了外光脉冲场的最大强度 E_{\max} 分别为 0.5×10^{-5} a.u. 和 0.1×10^{-4} a.u. 时, 且外光脉冲场的频率分别为 0.57, 0.68, 0.98, 1.27 和 1.37 eV 时, 通过一维钠原子链的电流 $I(t)$. 计算结果表明, 对于不同的最大强度 E_{\max} , 这些频率的外场同样可以激起体系在 0.98 eV 的等离激元共振. 对于相同频率的外场, 当强度 E_{\max} 不同时, 它激发的等离激元共振所对应电流的幅值也不同, 电流的幅

值大小同强度 E_{\max} 成正比. 此外, 本文还研究了不同频率光场作用下, 原子间距为自由双原子间距 3.72 \AA 的一维钠原子链, 以及原子半径较大的一维钾原子链中电子的输运与等离激元共振之间的耦合, 结果同样发现, 一定频率范围内的外光脉冲场都可以激起体系的等离激元共振.

3.2 经典谐振子的定性解释

为了说明在不同频率外场作用下, 一维钠原子链中电子的输运与等离激元共振之间的耦合规律, 本文利用经典谐振子模型给出一个定性的解释. 在以前的研究中, 人们也曾提出不同的谐振子模型来描述纳米颗粒的等离激元共振特征^[24]. 对于如图 1 所示的线性钠原子链, 沿平行于链方向激发时, 把 0.98 eV 的等离激元共振模式看作一个经典的谐振子. 在外场作用下, 该谐振子的运动学方程为

$$\frac{d^2x}{dt^2} + \omega_0^2 x = A \cos(\omega t). \quad (4)$$

方程右边为所加的外场, 其中 ω_0 为谐振子的本征振动频率, ω 为外场的振动频率, A 为外场的振幅, x 为谐振子的位置矢量. 为简单起见, 设作用于体系的外场呈余弦振动, 并设初始时刻谐振子静止, 速度为 0, 则 (4) 式的解为

$$x = \frac{A}{\omega_0^2 - \omega^2} \cos(\omega t) - \frac{A}{\omega_0^2 - \omega^2} \cos(\omega_0 t). \quad (5)$$

(5) 式表明, 即使外场的频率和谐振子的本征频率不同, 在外场作用时, 同样会激起体系本征模式的振动. 图 7 所示的是不同频率外场激发的谐振子本

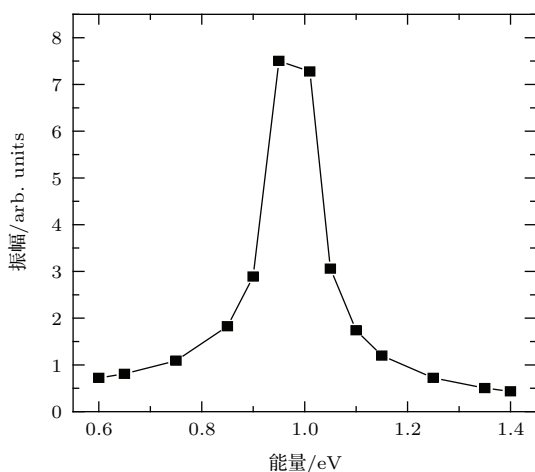


图 7 不同频率外场激发的谐振子本征共振所对应的幅值
Fig. 7. The amplitudes corresponding to the intrinsic frequency of harmonic oscillator which are stimulated by different frequency outfields.

征共振所对应的幅值. 激起本征模式振动的振幅和外场的振动频率、外场的振幅以及本征振动频率有关. 外场振动频率与本征振动频率差别越大时, 外场激起的本征振动模式的振幅越小; 反之, 外场振动频率越接近本征振动频率时, 外场激起的本征振动模式的振幅越大. 该经典谐振子模型表明, 不同频率的外光脉冲场确实可以激发体系的等离激元共振.

4 结 论

本文用含时密度泛函理论系统地研究了不同频率外光脉冲场作用下, 一维钠原子链中电子的输运与等离激元共振之间的耦合规律. 通过对计算结果的分析, 得出以下主要结论: 在等离激元共振点附近, 大约 0.8 eV 频率范围内的外光脉冲场都可以激发体系在 0.98 eV 的等离激元共振; 这些不同频率外场激发的等离激元共振电流的幅值大体上关于 0.98 eV 呈对称分布, 大小在一个数量级; 对于相同频率不同强度的外场, 所激发的等离激元共振电流的幅值大小同外场的强度成正比. 对于线性原子链等离激元的非线性激发现象, 本文利用经典谐振子模型给出了定性解释. 该经典谐振子模型表明, 不同频率的外场可以激发体系的等离激元共振; 外场频率与等离激元共振频率差别越小时, 外场激起的等离激元振动的振幅越大. 这些发现可以帮助理解实验中观察到的现象, 并对实验研究有一定的指导意义. 比如, 等离激元参与太阳能电池增强的机理之一是等离激元导致的电荷转移. 一定频率范围内的光都可以激发体系的等离激元共振这一特性, 可以使太阳能电池吸收更大频率范围内的光, 提高太阳能电池的转化效率.

感谢武汉大学物理科学与技术学院徐红星教授在分析计算结果方面给予的热心帮助.

参考文献

- [1] Park J, Pasupathy A N, Goldsmith J I, Chang C, Yaish Y, Petta J R, Rinkoski M, Sethna J P, Abruna H D, McEuen P L, Ralph D C 2002 *Nature* **417** 722
- [2] Balzani V, Credi A, Venturi M 2009 *Chem. Soc. Rev.* **38** 1542
- [3] Li Z Q, Piao R Q, Zhao J J, Meng X Y, Tong K 2015 *Chin. Phys. B* **24** 077303

- [4] Zhang Y L, Wang X Z 2015 *Chin. Phys. B* **24** 057301
- [5] Tong L M, Xu H X 2012 *Physics* **41** 582 (in Chinese) [童廉明, 徐红星 2012 物理 **41** 582]
- [6] Wang Z L, Chen Z, Tang C J 2012 *Physics* **41** 648 (in Chinese) [王振林, 陈卓, 唐超军 2012 物理 **41** 648]
- [7] Fang Z Y, Zhu X 2011 *Physics* **40** 594 (in Chinese) [方哲宇, 朱星 2011 物理 **40** 594]
- [8] Kowalska E, Mahaney O O P, Abe R, Ohtani B 2010 *Phys. Chem. Chem. Phys.* **12** 2344
- [9] Knight M W, Sobhani H, Nordlander P, Halas N J 2011 *Science* **332** 702
- [10] Song P, Meng S, Nordlander P, Gao S W 2012 *Phys. Rev. B* **86** 121410
- [11] Song P, Nordlander P, Gao S W 2011 *J. Chem. Phys.* **134** 074701
- [12] Yin H F, Zhang H, Yue L 2014 *Acta Phys. Sin.* **63** 127303 (in Chinese) [尹海峰, 张红, 岳莉 2014 物理学报 **63** 127303]
- [13] Yin H F, Zhang H 2012 *Appl. Phys. Lett.* **101** 061906
- [14] Yin H F, Zhang H, Cheng X L 2013 *J. Appl. Phys.* **113** 113107
- [15] Xu D H, Hu Q, Peng R W, Zhou Y, Wang M 2015 *Acta Phys. Sin.* **64** 097803 (in Chinese) [徐地虎, 胡青, 彭茹雯, 周昱, 王牧 2015 物理学报 **64** 097803]
- [16] Gao S W 2015 *J. Chem. Phys.* **142** 234701
- [17] Wu K, Chen J, McBride J R, Lian T 2015 *Science* **349** 632
- [18] Chakraborty R, Greullet F, George C, Baranov D, Fabrizio E D, Krahne R 2013 *Nanoscale* **5** 5334
- [19] Yan J, Yuan Z, Gao S W 2007 *Phys. Rev. Lett.* **98** 216602
- [20] Marques M A L, Castro A, Bertsch G F, Rubio A 2003 *Comput. Phys. Commun.* **151** 60
- [21] Nazin G F, Qiu X H, Ho W 2003 *Phys. Rev. Lett.* **90** 216110
- [22] Chung H V, Kubber C J, Han G, Rigamonti S, Sanchez-Portal D, Enders D, Pucci A, Nagao T 2010 *Appl. Phys. Lett.* **96** 243101
- [23] Yan J, Gao S W 2008 *Phys. Rev. B* **78** 235413
- [24] Zuloaga J, Nordlander P 2011 *Nano Lett.* **11** 1280

Nonlinear excitation of localized plasmon in one-dimensional atomic chain*

Yin Hai-Feng^{1)2)†} Mao Li²⁾

1) (*College of Physics and Electronic Engineering, Kaili University, Kaili 556011, China*)

2) (*College of Physical Science and Technology, Wuhan University, Wuhan 430072, China*)

(Received 2 November 2015; revised manuscript received 31 January 2016)

Abstract

At different frequencies of light pulse field, the coupling between plasmon resonance and electron transport of one-dimensional sodium atomic chain is investigated by using time-dependent density functional theory. Light pulse field, whose frequency is in about 0.8 eV range around the plasmon resonance point, can stimulate plasmon resonance of the system. Plasmon resonance intensity magnitude which is stimulated by these different frequency light pulse fields are in the same order of magnitude. The more closely the external field frequency approaches to plasmon resonance frequency, the larger plasmon resonance amplitude stimulated by the external field fields will be. With regard to the nonlinear excitation phenomenon of linear atomic chain plasmon, using a classical harmonic oscillator model, we gives a qualitative explanation.

Keywords: plasmon, one-dimensional atomic chains, time-dependent density functional theory

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

DOI: [10.7498/aps.65.087301](https://doi.org/10.7498/aps.65.087301)

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 11464023), the Innovative Talent Team of Colleges of Guizhou Province, China (Grant No. [2012]06), and the Atomic and Molecular Physics Key Discipline of Kaili University, China.

† Corresponding author. E-mail: meyhf@126.com