



基于麦克斯韦方程组的纳米尺度电磁边界条件

赖煜成 陈苏琪 牟兰雅 王兆娜

Nanoscale electromagnetic boundary conditions based on Maxwell's equations

Lai Yu-Cheng Chen Su-Qi Mou Lan-Ya Wang Zhao-Na

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 70, 230301 (2021) DOI: 10.7498/aps.70.20211025

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.70.20211025>

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

---

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

## 基于麦克斯韦方程组的纳米尺度电磁边界条件\*

赖煜成 陈苏琪 牟兰雅 王兆娜†

(北京师范大学物理学系, 北京 100875)

(2021年5月31日收到; 2021年7月18日收到修改稿)

电磁边界条件是研究界面光学、电磁学性质的物理基础. 本文考虑界面上物质响应的非突变特性在两种材料界面上构建过渡层, 利用积分形式的麦克斯韦方程组, 推导出纳米尺度下的电磁边界条件, 得到的两个界面响应函数  $d_{\perp}, d_{\parallel}$  分别对应于界面等效极化电荷的中心位置和界面极化电流密度沿垂直界面方向的梯度中心位置, 根据界面响应函数的定义式分析了界面响应函数受界面两侧材料的介电常数、电场过渡线型、频率等因素的影响. 发现铜-银界面上的界面响应函数可以高达数纳米. 当界面响应函数可以忽略不计时, 纳米电磁边界条件退化为突变结给出的经典的边界条件. 在此基础上, 引入界面电偶极矩, 界面上的等效极化电荷面密度、界面极化电流线密度和磁荷流密度参量给出3种不同形式的纳米电磁边界条件. 该模型对研究纳米尺度电磁学、界面光学问题提供了清晰的物理图像和必要的理论基础.

**关键词:** 麦克斯韦方程组, 纳米电磁理论, 边界条件

**PACS:** 03.50.De, 79.60.Jv, 42.25.Gy, 41.20.Jb

**DOI:** 10.7498/aps.70.20211025

## 1 引言

电磁边界条件是麦克斯韦方程组的一个非常重要的应用, 描述了界面两侧的场量和界面上电荷、电流的关系. 大学教材《光学原理》和《电动力学》<sup>[1,2]</sup>中, 基于突变界面假设, 利用积分形式的麦克斯韦方程组, 在忽略电磁场沿着积分箱侧壁的积分贡献情况下推得宏观尺度下的经典电磁边界条件. 基于该经典电磁边界条件可以推得折射与反射定律、菲涅耳公式等重要的物理规律, 能很好地解释宏观尺度界面上的实验结果.

虽然在宏观尺度下, 经典电磁边界条件可以很好地描述介质分界面两侧场量的变化规律, 但在纳米尺度下, 经典电磁边界条件的预测和实验观测结果之间存在差异<sup>[3-9]</sup>. 这是由经典电磁边界条件推导过程中存在的不完备性所导致的. 其中, 突变界

面假设忽略了电子本征尺度的大小和两个介质界面上物理参数和物理量的过渡区, 导致电磁场量在界面两侧的突变和不连续; 而且电磁场沿着积分箱侧壁的积分贡献可忽略的假设在更小的尺度下也存在不合理性<sup>[4]</sup>. 尤其是在纳米尺度下, 界面上可能存在电子本征激发、电子波函数畸变等问题, 突变界面假设不再适用, 积分箱侧壁的贡献也不可忽略, 基于突变界面假设得到的电磁边界条件无法用于处理纳米尺度的界面上电磁场的变化问题. 另一方面, 随着纳米技术的不断发展, 器件不断小型化, 芯片和光电子学等元件也在不断趋于纳米尺度, 纳米尺度边界上电磁场变化规律的研究变得越发重要. 因此, 很有必要构建纳米尺度的电磁理论.

对于上述问题, 前人已做过一些研究. 1982年, Feibelman<sup>[7]</sup>通过一阶微扰近似推导了金属与空气表面的反射系数, 并提出了两个界面响应函数  $d_{\perp}, d_{\parallel}$  来描述界面上场的非跃变性; 1995年,

\* 国家自然科学基金 (批准号: 61975018, 11574033, 11674032) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: zhnwang@bnu.edu.cn

Liebsch<sup>[10]</sup>通过量子力学一阶近似计算出了界面响应函数  $d_{\perp}, d_{\parallel}$ , 并给出了界面响应函数的物理含义:  $d_{\perp}$ 表示极化电荷中心,  $d_{\parallel}$ 表示极化电流梯度中心; 2019年, Yang等<sup>[9]</sup>构建了考虑界面响应函数的纳米电磁理论框架, 并构建了用以模拟纳米电磁散射问题的物理模型, 为纳米结构散射问题的理论计算提供了指导. 该理论是对传统经典电磁波传播理论的修正, 并以经典的视角理解和计算纳米尺度界面对电磁波传播特性的调控作用, 大大简化了计算的负担. 但在纳米电磁理论框架中, 界面响应函数的给出具有一定随意性, 缺乏完备的理论基础. 实验上, 纳米金属球的散射谱峰值随着颗粒尺寸变化仍表现出很大的不确定性<sup>[11]</sup>. 因此, 很有必要重新理解和梳理界面响应函数, 找出影响界面响应函数的关键物理因素, 构建完备的纳米电磁理论和边界条件, 为精细调控电磁波场提供理论指导.

为了更加深刻地理解和讨论纳米尺度下的电磁边界条件, 本文在两介质界面上构建介电过渡层模型, 利用积分形式的麦克斯韦方程组, 考虑了积分箱侧壁的贡献, 推导出了纳米尺度下的电磁边界条件. 该边界条件包含的两个界面响应函数  $d_{\perp}, d_{\parallel}$  分别代表界面上电场量跃变引入的等效极化电荷的中心位置和等效极化电流密度梯度的中心相对界面的位置. 进一步地, 把介电过渡层的贡献等效为界面电偶极矩, 构建界面偶极矩模型, 并把纳米电磁边界条件写成界面电偶极矩的表述形式; 把过渡层的贡献用界面上的等效极化电荷面密度、界面极化电流线密度和磁荷流密度参量来描述, 构建界面极化电流-极化电荷-磁荷模型, 并给出相应的纳米电磁边界条件. 在此基础上, 讨论了界面响应函数受界面两侧材料的介电常数、电场过渡线型、频率等因素的影响, 发现金属-金属界面的界面响应函数可高达数纳米, 远大于特定频率电磁波激发时金属-介质界面的界面响应函数, 结果为界面响应函数的调控提供了理论指导.

## 2 纳米尺寸电磁边界条件

假设界面存在于  $z = 0$  的位置, 界面两侧的各向同性体材料的介电常数分别为  $\varepsilon_1, \varepsilon_2$ , 两种材料的相对磁导率均为 1, 界面上无自由移动的电荷和电流存在. 考虑到两种材料界面上将存在扩散过程、应力释放、甚至缺陷层等过程, 使得突变界面在物理实体中很难存在, 用很薄的过渡层 (图 1 中

$z_{20}$  到  $z_{10}$ ) 来代替锐的突变面, 假设介电常数在界面法线方向快速而连续地变化, 对应的过渡层内物理场的变化也具有连续性 (如图 1 所示). 并把过渡层对电磁边界条件的影响当作经典电磁边界条件的一阶微扰处理, 即非过渡区的物理场满足经典电磁边界条件.

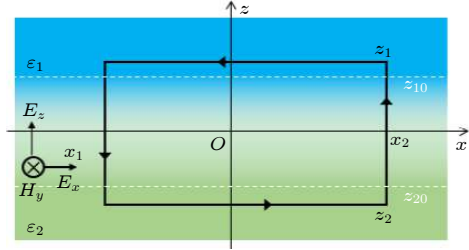


图 1 计算电场切向分量的跃变使用的积分区域  
Fig. 1. Integral area for calculating the tangential component discontinuity of the electric field.

### 2.1 电场切向分量的跃变

考虑角频率为  $\omega$  的时谐平面横磁 (transverse magnetic, TM) 波入射, 电场只有  $x, z$  方向的分量, 磁场只有  $y$  方向分量. 在垂直于界面的截面上选取积分箱, 使其尺度远小于入射电磁波波长以保证电磁场切向分量在积分箱上几乎不变, 从而具有纳米尺度特征, 且积分箱跨越了过渡层, 构建如图 1 所示的积分环路.

利用积分形式麦克斯韦方程组中的法拉第定律:

$$\oint \mathbf{E} \cdot d\mathbf{l} = - \iint \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} \cdot d\mathbf{S}, \quad (1)$$

可得:

$$\begin{aligned} & \int_{x_1}^{x_2} [E_x(z_2) - E_x(z_1)] dx \\ & + \int_{z_2}^{z_1} [E_z(x_2) - E_z(x_1)] dz \\ & = -i\omega \int_{x_1}^{x_2} dx \int_{z_2}^{z_1} B_y dz, \end{aligned} \quad (2)$$

$E_x(z_2), E_x(z_1)$  分别代表电场切向分量在  $z = z_2$  和  $z = z_1$  处的值, 由于积分箱长度  $\Delta l = x_2 - x_1$  远小于波长, 它们从  $x_1$  到  $x_2$  的变化可以忽略不计, (2) 式记为

$$\begin{aligned} & [E_x(z_2) - E_x(z_1)] \Delta l + \frac{\partial}{\partial x} \int_{z_2}^{z_1} E_z dz \Delta l \\ & = -i\omega \Delta l \int_{z_2}^{z_1} B_y dz, \end{aligned} \quad (3)$$

约去  $(x_2 - x_1)$ , 使用分部积分, (3) 式化为

$$\begin{aligned} \llbracket E_x \rrbracket = & \\ \frac{\partial}{\partial x} & \left[ z_{10} E_z(z_{10}) - z_{20} E_z(z_{20}) - \int_{z_{20}}^{z_{10}} z \frac{dE_z}{dz} dz \right] \\ & + i\omega \left[ (z_{10} B_y(z_{10}) - z_{20} B_y(z_{20})) - \int_{z_{20}}^{z_{10}} z \frac{dB_y}{dz} dz \right], \end{aligned} \quad (4)$$

其中,  $\llbracket E_x \rrbracket = E_x(z_1) - E_x(z_2) = E_x(z_{10}) - E_x(z_{20})$  表示电场强度切向分量在界面上的变化量,  $E_x(z_2)$ ,  $E_x(z_1)$  分别代表电场切向分量在  $z = z_2$  和  $z = z_1$  处的值. 考虑两种介质都是非磁性材料, 有  $\frac{dB_y}{dz} = 0$  和  $B_y(z_{10}) = B_y(z_{20})$ , 可以发现 (4) 式右侧磁感应强度贡献的第二项是一个微小量, 可以忽略不计, 则可以得到:

$$\llbracket E_x \rrbracket = \frac{\partial}{\partial x} \left[ z_{10} E_z(z_{10}) - z_{20} E_z(z_{20}) - \int_{z_{20}}^{z_{10}} z \frac{dE_z}{dz} dz \right]. \quad (5)$$

为了描述界面附近电场垂直分量的变化, 引入物理量  $\gamma(z) = \frac{E_z(z)}{E_z(z_{20})}$  描述电场的垂直分量在过渡层的变化. 由通常的电位移矢量法向分量连续性边界条件  $D_z(z_{10}) = D_z(z_{20})$  可知, 在介质 2 中的非过渡区  $\gamma(z) = 1$ ; 在介质 1 中的非过渡区则有  $\gamma(z) = \frac{\varepsilon_2}{\varepsilon_1} = \varepsilon_{B21}$ , 则  $\llbracket E_x \rrbracket$  的表达式可以记为

$$\llbracket E_x \rrbracket = -\frac{\partial}{\partial x} [d_{\perp} \llbracket E_z \rrbracket], \quad (6)$$

其中, 电场强度的法向分量在界面上的跃变量为  $\llbracket E_z \rrbracket = E_z(z_{10}) - E_z(z_{20})$ , 界面响应函数  $d_{\perp}$  为

$$d_{\perp} \equiv \frac{\int_{z_{20}}^{z_{10}} z \frac{d\gamma}{dz} dz}{\varepsilon_{B21} - 1} - \frac{z_{10} \varepsilon_{B21} - z_{20}}{\varepsilon_{B21} - 1}. \quad (7)$$

可以看到, 在考虑了介电过渡层的情况下, 电场的平行分量在界面上将不再守恒, 而是发生跃变, 且跃变量通过界面响应函数  $d_{\perp}$  与电场垂直分量在界面上的梯度关联. 对 (7) 式进行坐标平移, 并考虑到过渡区只分布在界面上、下一薄层内, 所以可以将积分上、下限扩展至无穷, 并记为

$$d_{\perp} = \frac{\int_{-\infty}^{+\infty} z \frac{d\gamma}{dz} dz}{\varepsilon_{B21} - 1}. \quad (8)$$

可以看出, 界面响应函数  $d_{\perp}$  与体材料介电常数比、电场垂直界面方向分量在过渡区沿  $z$  方向的梯度有关. 这表明可以根据界面处垂直界面方向的电场分量的变化形式和幅度来调控和表征该界面响应函数.

## 2.2 磁场切向分量的跃变

考虑角频率为  $\omega$  的时谐平面横电 (transverse electric, TE) 波入射, 磁场只有  $x, z$  方向的分量, 电场只有  $y$  方向分量. 在垂直于界面的截面上构建积分环路, 基于安培-麦克斯韦定律:

$$\oint \mathbf{H} \cdot d\mathbf{l} = \iint \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t} \cdot d\mathbf{S}, \quad (9)$$

引入物理量  $\alpha = \frac{D_y(z)}{D_y(z_{10})}$  描述界面上电位移矢量平行分量的变化, 则磁场强度平行分量在界面上跃变量的表达式为

$$\llbracket H_x \rrbracket = H_x(z_{10}) - H_x(z_{20}) = i\omega d_{//} \llbracket D_y \rrbracket, \quad (10)$$

其中, 电位移矢量的切向分量在界面上的跃变量为  $\llbracket D_y \rrbracket = D_y(z_{10}) - D_y(z_{20})$ , 界面响应函数  $d_{//}$  为

$$d_{//} \equiv \frac{\int_{z_{20}}^{z_{10}} z \frac{d\alpha}{dz} dz}{1 - \varepsilon_{B21}} + \frac{z_{20} \varepsilon_{B21} - z_{10}}{1 - \varepsilon_{B21}} = \frac{\int_{-\infty}^{+\infty} z \frac{d\alpha}{dz} dz}{1 - \varepsilon_{B21}}. \quad (11)$$

由 (10) 式可以看出, 考虑了介电过渡层后, 磁场的平行分量在界面上的跃变和电位移矢量平行分量的跃变耦合在一起, 并与界面响应函数  $d_{//}$  有关. 界面响应函数  $d_{//}$  由体材料介电常数比、过渡区电位移矢量沿界面平行分量沿  $z$  方向的梯度决定. 由界面响应函数的定义 (7) 式和 (11) 式可以看出, 界面响应函数  $d_{\perp}$  和  $d_{//}$  在  $\varepsilon_{B21} \rightarrow 1$  时会趋近于无穷大. 该奇异性与推导界面响应函数时所用的一阶近似有关. 此时两个介质界面上电场量的突变逼近于零, 电场在垂直于界面方向的变化应该考虑高阶项的贡献, 相应的界面响应函数应该采用更高阶近似模型.

## 2.3 电位移矢量法向分量的跃变

为了研究电位移矢量法向分量的跃变, 构建如图 2 所示的积分箱与坐标系, 考虑入射角频率为  $\omega$  的 TM 波, 由麦克斯韦方程组中的高斯定律:

$$\oiint \mathbf{D} \cdot d\mathbf{S} = 0, \quad (12)$$

可得

$$\int_{z_{20}}^{z_{10}} (D_x(x_2) - D_x(x_1)) dz + \int_{x_1}^{x_2} dx \llbracket D_z \rrbracket = 0. \quad (13)$$

其中, 电位移矢量法向分量在界面处的跃变量  $\llbracket D_z \rrbracket = D_z(z_{10}) - D_z(z_{20})$ , 电位移矢量切向分量

在界面处的跃变量  $[[D_x]] = D_x(z_{10}) - D_x(z_{20})$ , 忽略电位移矢量在上、下积分面上的变化, 上式化简为

$$[[D_z]] = -\frac{\partial}{\partial x} \int_{z_{20}}^{z_{10}} D_x dz$$

$$= \frac{\partial}{\partial x} \left( \frac{z_{20}\varepsilon_{B21} - z_{10}}{1 - \varepsilon_{B21}} + \frac{\int_{z_{20}}^{z_{10}} z \frac{d\alpha}{dz} dz}{1 - \varepsilon_{B21}} \right) [[D_x]]. \quad (14)$$

利用界面响应函数的定义式, 边界条件可写为

$$[[D_z]] = d_{//} \frac{\partial}{\partial x} [[D_x]]. \quad (15)$$

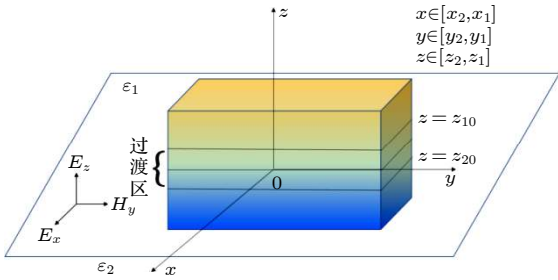


图 2 计算电位移矢量法向分量跃变使用的积分区域

Fig. 2. Integral box for obtaining the normal component discontinuity of the electric displacement vector.

## 2.4 磁感应强度法向分量的跃变

考虑时谐平面 TE 波入射到界面上, 由方程

$$\oint \mathbf{B} \cdot d\mathbf{S} = 0, \quad (16)$$

可得

$$[[B_z]] = 0. \quad (17)$$

## 2.5 纳米电磁边界条件

对于一般情况, 上述纳米电磁边界条件可以写为

$$[[\mathbf{E}_{//}]] = -d_{\perp} \nabla_{//} [[E_{\perp}]], \quad (18)$$

$$[[\mathbf{H}_{//}]] = i\omega d_{//} [[\mathbf{D}]] \times \hat{\mathbf{n}}, \quad (19)$$

$$[[D_{\perp}]] = d_{//} \nabla_{//} \cdot [[\mathbf{D}_{//}]], \quad (20)$$

$$[[B_{\perp}]] = 0, \quad (21)$$

其中,  $\hat{\mathbf{n}}$  为从介质 2 指向介质 1 的法向单位向量。

与经典突变界面的电磁边界条件对比, 纳米边界条件引入了两个界面响应函数  $d_{\perp}$  与  $d_{//}$ , 将界面附近的电磁场量耦合起来, 更完善地反映了界面的电磁响应特性. 而当界面由纳米尺度逐渐增大到宏

观尺度时,  $d_{\perp}$  与  $d_{//}$  可以忽略不计, 电磁边界条件退化到经典的突变模型对应的边界条件 ( $[[\mathbf{E}_{//}]] = 0$ ,  $[[\mathbf{H}_{//}]] = 0$ ,  $[[D_{\perp}]] = 0$ ,  $[[B_{\perp}]] = 0$ ).

目前, 纳米电磁理论中的界面响应函数对于场量的影响可以解释表面光子发射<sup>[7]</sup>, 固体与表面上的范德瓦耳斯作用力<sup>[12]</sup>, 表面等离激元共振频率频移等经典电磁边界条件无法解释的实验现象. 本文推导出的纳米电磁边界条件与文献<sup>[9]</sup>报道的结果一致, 表明推导结果的正确性. 文献<sup>[9]</sup>通过直接引入界面电流密度和偶极子密度重写了介观尺度的边界条件, 而本文在麦克斯韦方程组的基础之上推导纳米尺度电磁边界条件, 通过考虑积分箱侧壁的贡献获得界面上电磁场量的跃变, 推导过程简洁, 给出了界面响应函数的定义式, 物理图像更为直观, 有助于纳米电磁边界条件的进一步推广使用.

## 3 界面响应函数的物理意义及讨论

在过渡区, 电场散度满足:

$$\nabla \cdot \mathbf{E} = \rho_{\text{ind}}/\varepsilon_0, \quad (22)$$

其中,  $\rho_{\text{ind}}$  表示界面诱导极化电荷密度. 考虑到  $\frac{dE_x}{dx} \ll \frac{dE_z}{dz}$ ,  $d_{\perp}$  的表达式可写为

$$d_{\perp} = \frac{\int_{-\infty}^{+\infty} z \rho_{\text{ind}} dz}{\varepsilon_0 [[E_z]]} = \frac{\int_{-\infty}^{+\infty} z \rho_{\text{ind}} dz}{\int_{-\infty}^{+\infty} \rho_{\text{ind}} dz}, \quad (23)$$

由 (23) 式可以看出, 界面响应函数  $d_{\perp}$  表示界面过渡层诱导的等效极化电荷中心相对界面的偏移位置, 也表示界面过渡层诱导的极化电荷产生极化强度的法向分量与等效极化电荷量的比值. 根据电偶极矩的定义, 定义如图 3 所示的界面电偶极矩的法向分量:

$$\pi_{\perp} \equiv \int_{-\infty}^{+\infty} z \rho_{\text{ind}} dz \mathbf{e}_z = \varepsilon_0 d_{\perp} [[E_z]] \mathbf{e}_z. \quad (24)$$

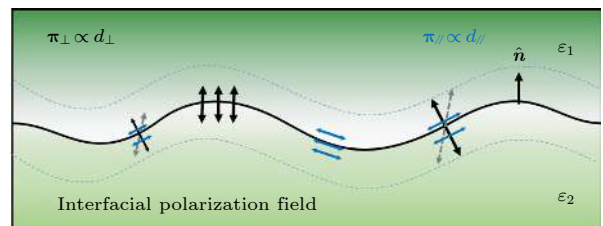


图 3 界面电偶极矩  $\pi_{\perp}$ ,  $\pi_{//}$  的物理图示

Fig. 3. Equivalent interfacial electric dipole moment  $\pi_{\perp}$ ,  $\pi_{//}$ .

而根据  $D_y = E_y \varepsilon_0 + P_y$ , 可知:

$$d_{//} = \frac{\int_{-\infty}^{+\infty} z \frac{d}{dz} P_y dz}{\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dP_y}{dz} dz} = \frac{\int_{-\infty}^{+\infty} z \frac{d}{dz} j_{py} dz}{\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dj_{py}}{dz} dz}. \quad (25)$$

可以看出,  $d_{//}$  表示过渡区域的局域不均匀极化产生的极化强度切向分量沿界面法线方向的梯度中心, 也表示界面极化电流密度梯度的中心位置<sup>[4]</sup>. 对于表面光滑的理想界面, 且在均匀光场照明时, 对称性决定过渡层内的极化电荷在平行于界面的方向是均匀分布的, 界面电偶极矩的切向分量为 0, 所以  $d_{//}$  可以忽略不计. 但是, 对于分子排布不均匀的表面、粗糙的表面或者界面上不均匀光场照明时, 由于极化电荷在平行于界面方向上对称性被打破, 会产生电偶极矩的切向分量, 使得  $d_{//}$  开始起作用. 这在原子或分子层面设计界面提供了新的途径. 在此基础上, 定义如图 3 所示的界面电偶极矩的平行分量  $\pi_{//}$ :

$$\pi_{//} \equiv -d_{//} [[D_{//}]]. \quad (26)$$

它是由于过渡层内的极化电荷在平行于界面方向分布的不均匀性产生的, 等效于存在平行界面方向的电偶极子.

相比于体材料的极化强度  $P$ , 界面诱导偶极矩  $\pi_{\perp}, \pi_{//}$  是界面上的性质, 在传统突变界面的边界条件中, 界面极化电荷被视为“极化面电荷”. 而在界面过渡层模型中, 界面极化电荷是分布在过渡区这一薄层内, 由极化电荷在垂直/平行于界面方向上的不均匀分布所导致的, 其对远场产生额外的界面电偶极矩  $\pi_{\perp}, \pi_{//}$  (如图 3 所示). 因此, 基于界面偶极矩模型, 纳米电磁场边界条件可表示为

$$[[E_{//}]] = -\frac{1}{\varepsilon_0} \nabla \times \pi_{\perp} \times \hat{n}, \quad (27)$$

$$[[H_{//}]] = \frac{\partial \pi_{//}}{\partial t} \times \hat{n}, \quad (28)$$

$$[D_{\perp}] = -\nabla_{//} \cdot \pi_{//}, \quad (29)$$

$$[B_{\perp}] = 0. \quad (30)$$

由 (27) 式—(30) 式描述的纳米电磁边界条件可以看出, 电场平行分量在界面上的突变量与界面诱导偶极矩的垂直分量的旋度相关, 电位移矢量的垂直分量由界面诱导偶极矩的平行分量的平行分量散度决定, 而磁场强度平行分量的跃变量则由界

面诱导偶极矩的平行分量的时间变化率决定; 该边界条件很好地呈现了界面电磁响应特性对纳米电磁边界条件的影响.

在时谐电磁波入射时, 界面内的电偶极矩随时间变化, 根据经典电动力学, 电偶极矩随时间的变化等价于界面极化电流线密度, 则引入界面极化电流线密度

$$\mathbf{K}_1 = \frac{\partial \pi_{//}}{\partial t} = i\omega d_{//} [[D_{//}]]. \quad (31)$$

在考虑等效磁荷流的情况下, 根据电磁场对偶的性质, 界面内电偶极矩的旋度可以等效于磁荷流密度, 因此定义界面磁荷流密度

$$\mathbf{K}_{m1} = -\frac{1}{\varepsilon_0} \nabla \times \pi_{\perp} = -d_{\perp} \nabla_{//} [[E_{\perp}]] \times \hat{n}, \quad (32)$$

根据经典电动力学, 电偶极矩的散度等效于界面电荷的分布, 因此, 定义界面等效极化电荷面密度

$$\sigma_{IP} = \frac{1}{i\omega} \nabla_{//} \cdot \mathbf{K}_1 = -\nabla_{//} \cdot \pi_{//} = d_{//} \nabla_{//} \cdot [[D_{//}]], \quad (33)$$

基于界面极化电流-极化电荷-磁荷模型, 纳米电磁边界条件也可表示为:

$$[[E_{//}]] = -\mathbf{K}_{m1} \times \hat{n}, \quad (34)$$

$$[[H_{//}]] = \mathbf{K}_1 \times \hat{n}, \quad (35)$$

$$[D_{\perp}] = \sigma_{IP}, \quad (36)$$

$$[B_{\perp}] = 0. \quad (37)$$

由 (34) 式—(37) 式描述的纳米电磁边界条件可以看出, 电场平行分量在界面上的突变量与界面磁荷流密度有关, 电位移矢量的垂直分量由界面诱导等效极化电荷的面密度决定, 而磁场强度平行分量的跃变量则由界面极化电流密度决定; 体现了电学、磁学性质的高度对偶性.

在 (18) 式—(21) 式的基础上, 根据电动力学中各场量之间的内在联系, 进一步构建界面偶极矩模型和界面极化电流-极化电荷-磁荷模型, 给出了纳米电磁边界条件的不同表述形式. 构建的界面偶极矩模型有助于从界面极化的角度认识界面对电磁场的调控作用; 而界面极化电流-极化电荷-磁荷模型清楚揭示了界面极化电流、界面磁荷流、界面极化电荷的微观形成机制, 得到的纳米电磁边界条件更好地展示电磁之间的对偶性, 使界面物理图像更直观.

由界面响应函数的定义式可知, 界面响应函数受到界面上两材料的介电常数比和界面性能的影响. 因而, 界面响应函数  $d_{\perp}$  受光波频率、过渡层介电函数的函数形式和构成界面的材料的影响. 其中, 过渡区介电函数通过电场垂直于界面方向的分量在过渡区变化的函数形式影响界面响应函数  $d_{\perp}$ . 为此, 构建电场垂直分量在过渡区线性、指数和正弦函数形式变化的界面, 假设界面过渡区范围为  $[z_{20}, z_{10}]$ , 且界面均完成过渡, 探究电场垂直分量过渡函数形式对界面响应函数的影响. 若界面上过渡区电场垂直分量的函数形式为线性, 且满足  $\gamma(z) = \frac{\varepsilon_{B21} - 1}{z_{10} - z_{20}}(z - z_{20}) + 1$ , 由界面响应函数的定义式可得:

$$d_{\perp} = \frac{z_{10} + z_{20}}{2} - \frac{z_{10}\varepsilon_{B21} - z_{20}}{\varepsilon_{B21} - 1}. \quad (38)$$

若电场垂直分量在过渡区以指数形式变化, 且满足  $\gamma(z) = \varepsilon_{B21}^{\frac{z_{20}-z}{z_{10}-z_{20}}}$ , 由界面响应函数的定义式可得:

$$d_{\perp} = (z_{20} - z_{10}\ln)/\varepsilon_{B21}. \quad (39)$$

如果电场垂直分量在过渡区以正弦函数形式变化, 且满足

$$\gamma(z) = \frac{1}{2}(\varepsilon_{B21} - 1) \sin \left[ \frac{\pi}{z_{10} - z_{20}} \left( z - \frac{z_{10} + z_{20}}{2} \right) \right] + \frac{1}{2}(\varepsilon_{B21} + 1),$$

则有:

$$d_{\perp} = \frac{z_{10} + z_{20}}{\varepsilon_{B21} - 1} - \frac{z_{10}\varepsilon_{B21} - z_{20}}{\varepsilon_{B21} - 1}. \quad (40)$$

针对银<sup>[13]</sup>-真空界面, 假设界面过渡区范围为  $[-0.7, 0.5]$  nm, 基于 (38) 式 — (40) 式可得到界面响应函数  $d_{\perp}$  的实部、虚部随入射电磁波频率的变化规律, 如图 4(a) 和 4(b) 所示. 可以看出, 在银-真空界面上,  $d_{\perp}$  随入射光频率的增大先缓慢增大而后快速增大, 当达到金属等离子体共振频率附近时,  $d_{\perp}$  实部、虚部同时达到局域最大值, 这是由于银的相对介电函数的实部在等离激元共振频率 (3.8 eV) 附近趋近于 1 所导致的. 随着频率的继续增大,  $d_{\perp}$  先快速减小, 而后又缓慢增大.  $d_{\perp}$  随入射电磁波频率变化规律本质上是由 Ag 的体介电常数随频率变化规律所决定的. 结果表明, 可以选择合适频率的电磁波入射, 以便更好地观察  $d_{\perp}$  对界面光学性质的影响. 同时, 过渡区介电常数的函数形式对界面响应函数也有影响, 这也为界面响应函

数的调控提供了一种途径.

为了展示模型的有效性, 在过渡区尺寸不变的情况下, 利用界面响应函数表达式 (39) 计算了金-真空界面的界面响应函数, 可以看出, 界面响应函数的虚部在其等离子体共振频率附近出现了峰值, 但  $d_{\perp}$  实部也在等离子体共振频率附近存在一个局域极值. 其中, 在频率范围为  $[1.0, 2.0]$  eV 时, 金-真空界面  $d_{\perp}$  实部随频率的增大几乎不变, 保持在  $-0.2$  nm 左右, 而  $d_{\perp}$  虚部随频率的增大从 0 nm 几乎线性增大到 0.2 nm, 该结果与文献 [9] 中基于实验测量给出的结果几乎一致, 体现了指数过渡模型的合理性和有效性.

对单一界面来说, 过渡区域的范围并不影响界面响应函数随频率的变化规律, 且相比于文献 [9] 中的金-氧化铝薄层-金耦合界面, 对应的单一界面具有相对较小的过渡层厚度. 为此, 我们固定过渡区域范围为  $[-0.4, 0.2]$  nm, 探究指数过渡的情况下不同金属 (金, 银, 铜)-介质 (真空, 二氧化硅) 界面上  $d_{\perp}$  的实部、虚部随入射电磁波频率的变化规律, 得到如图 5(a), (b) 所示结果. 对于银-真空/二氧化硅界面上,  $d_{\perp}$  的实部与虚部在低频和高频时都较小, 但是在靠近金属等离子体共振频率时会出现一个明显的尖峰, 且银-二氧化硅界面的界面响应函数大于银-真空界面的  $d_{\perp}$ . 该结果与文献 [9] TDDFT 计算的结果一致, 表明可以通过增大介质的介电常数在金属-介质界面上获得相对较大的界面响应函数  $d_{\perp}$ . 不同于银-真空界面, 铜-真空界面的界面响应函数  $d_{\perp}$  较小, 这是由于铜在  $[0.66, 6.6]$  eV 的频率范围内介电常数均小于 0 造成的. 这表明, 铜-介质界面不适合用于观察界面响应函数的影响. 对比计算了金-真空/二氧化硅界面的界面响应函数 (绿线), 可以看出, 在频率区间  $[0.66, 6.6]$  eV 内, 金-二氧化硅界面的  $d_{\perp}$  虚部总是大于金-真空界面, 但  $d_{\perp}$  的实部却表现出丰富的行为.

基于坐标平移后的界面响应函数的推广表达式 (8) 式, 计算发现在频率范围为  $[0.6, 1.5]$  eV 时金-二氧化硅的  $d_{\perp}$  为金-真空界面的 2.25 倍, 与文献 [9] TDDFT 计算的结果相符合. 但是图 5 所示的结果表明, 增大金属-介质界面上介质的介电常数并不能按照介电常数的比例增大界面响应函数. 这一差异是由于两种分析方法基于不同形式的界面响应函数所导致的. 本文基于界面响应函数的定

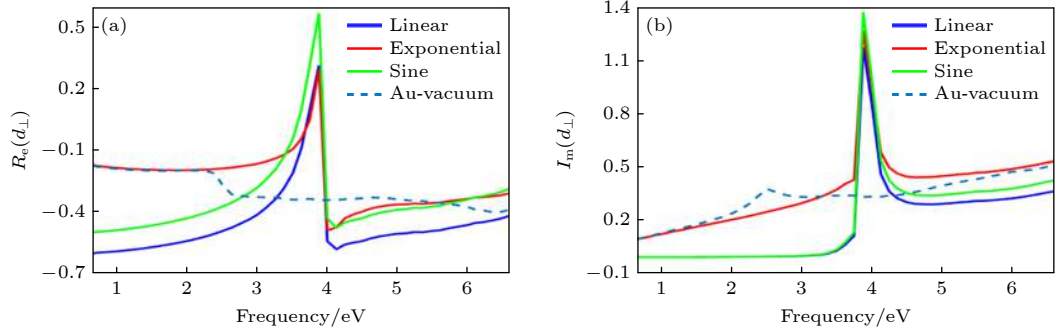


图 4 不同函数形式下银-真空界面上  $d_{\perp}$  (实线) 以及金-真空界面以指数形式过渡的  $d_{\perp}$  (虚线) 实部 (a), 虚部 (b) 随频率的变化  
 Fig. 4. Real part (a) and image part (b) variations of the interfacial response function  $d_{\perp}$  with the frequency for different function forms. Solid lines are for the Ag-vacuum interface and the dashed line represents  $d_{\perp}$  at the interface of Au-vacuum.

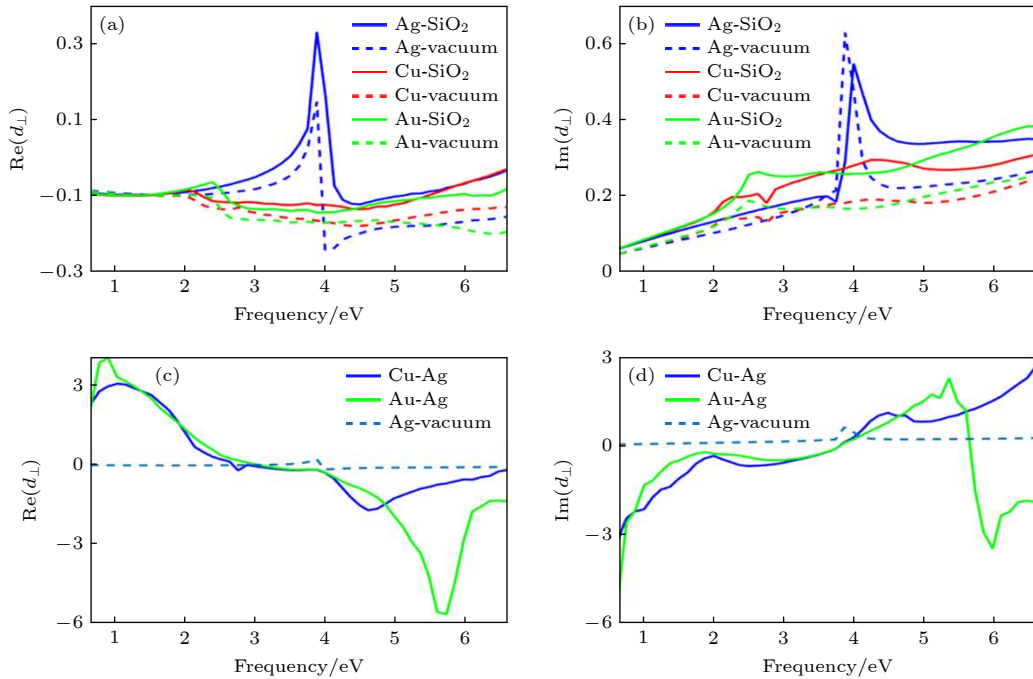


图 5 不同金属-真空界面  $d_{\perp}$  (实线) 以及金属-二氧化硅界面的  $d_{\perp}$  (虚线) 实部 (a) 与虚部 (b) 随频率的变化; (c) (d) 金属-金属界面  $d_{\perp}$  (实线) 以及金属-介质界面的  $d_{\perp}$  (虚线) 的实部 (c) 与虚部 (d) 随频率的变化  
 Fig. 5. Real part (a) and image part (b) variations of the interfacial response function  $d_{\perp}$  with the frequency of metal-vacuum interface in contrast with metal-SiO<sub>2</sub> interface. Real part (c) and image part (d) variations of the interfacial response function  $d_{\perp}$  with the frequency of metal-metal interface in contrast with metal-dielectric interface.

义 (7) 式进行讨论的, 而对比文献 [9] 是基于界面响应函数的推广 (8) 式得到的. 需要指出的是, 文献 [9] 在计算中认为金属-介质界面的介电响应函数是金属-真空界面与介质-真空界面加权平均的结果, 但实际上, 在金属-真空界面和介质-真空界面上获得界面响应函数的推广 (8) 式对应的平移量不完全相同, 所以并不能使用推广式给出的两个界面响应函数加权平均的结果进行简单处理.

在指数过渡的情况下, 金属-金属 (金-银, 铜-银) 界面  $d_{\perp}$  的实部、虚部随入射电磁波频率的变化

规律 [13], 如图 5(c), (d) 所示. 相比于金属-介质 (银-空气) 界面, 金属-金属界面上可能出现的  $\varepsilon_{B21}$  的符号变化, 为界面响应函数的调控带来有趣的结果. 金属-金属界面上的  $d_{\perp}$  的实部与虚部的最大值远大于相应的金属-介质界面, 某些频率下甚至达到了数纳米量级, 远大于设定的过渡区范围. 当入射光的频率为 1.02 eV 时, 铜-银界面的  $d_{\perp}$  是银-真空界面上  $d_{\perp}$  的 21.92 倍. 结果表明, 合理选择材料和工作频率是构建超大界面响应函数界面的一种可能的途径.

## 4 总 结

本文基于界面介电过渡层模型, 利用积分形式的麦克斯韦方程组重新推导了纳米电磁边界条件, 利用电磁场变化的一阶近似计算出了电场强度、磁场强度切向分量和电位移矢量、磁感应强度法向分量的跃变, 通过引入两个界面响应函数  $d_{\perp}, d_{\parallel}$ , 得到了纳米尺度下的电磁边界条件, 将传统的由突变界面模型得到的电磁边界条件扩展到了纳米尺度, 把纳米电磁边界条件建立在麦克斯韦方程组的基础之上. 研究为纳米电磁理论提供了完备的物理基础, 也拓展了麦克斯韦方程组的应用尺度范围.

本文在推导纳米电磁边界条件时, 考虑了完全过渡的界面、界面曲率半径的影响可以忽略和场量变化的一阶微扰近似 3 个假设. 因此, 纳米电磁边界条件适用于揭示电磁场量在平直界面上的跃变. 当界面上存在未完全过渡 (即介质本身厚度小于过渡层厚度, 如单分子层界面) 的情况时, 可以用等效介电函数代替材料的体介电函数并作为单一界面进行分析, 或者看作靠得很近的两个耦合界面进行处理. 当界面存在不可忽略的曲率变化 (如曲率半径小于 1 nm), 或者重点研究曲率变化对界面光学性质影响时, 界面上的平移对称性被打破, 需要考虑曲率半径对电磁场量跃变的贡献, 修正该纳米电磁边界条件. 此外, 当界面上场量的变化过于剧烈或存在特殊的高阶近似不能忽略 (例如, 界面上两介质的相对介电函数比  $\epsilon_{B21}$  趋近于 1) 的情况下, 也需要对本文的电磁边界条件进行高阶近似修正.

基于麦克斯韦方程组, 根据界面响应函数的定义式进一步讨论了界面响应函数  $d_{\perp}, d_{\parallel}$  的物理意义, 它们分别是等效极化电荷中心和界面极化电流密度的梯度中心. 讨论了界面两侧材料的介电常

数、电场过渡线型、频率等因素对界面响应函数的调控作用. 发现金属-介质界面上界面响应函数随频率的变化规律主要是由金属的介电常数的色散特性确定的, 金属-金属界面上的界面响应函数在一定频率光波激发下可以高达数纳米, 为界面响应函数的实验观测提供了可能的方向. 此外, 引入了界面处过渡层诱导的等效电偶极矩  $\pi_{\perp}, \pi_{\parallel}$ , 引入了界面上的等效极化电荷面密度、界面极化电流线密度和磁荷流密度等参量, 并用这些参数重新表示了纳米电磁边界条件, 为纳米电磁理论提供了清晰的物理图像, 为系统构建纳米电磁理论提供了基础, 为精细调控纳米颗粒的散射问题提供了理论指导.

## 参考文献

- [1] Born M, Wolf E 1999 *Principles of Optics: Electromagnetic Theory of Propagation, Interference and Diffraction of Light* (7th Expanded Edition) (Cambridge: Cambridge University Press)
- [2] Guo S H 2008 *Electrodynamics* (3rd Ed.) (Beijing: Higher Education Press) pp24–28 (in Chinese) [郭硕鸿 2008 电动力学 (第三版) (北京: 高等教育出版社) 第24—28页]
- [3] Chikkaraddy R, de Nijs B, Benz F, Barrow S J, Scherman O A, Rosta E, Demetriadou A, Fox P, Hess O, Baumberg J J 2016 *Nature* **535** 127
- [4] Christensen T, Yan W, Jauho A-P, Soljacic M, Mortensen N A 2017 *Phys. Rev. Lett.* **118** 157402
- [5] Ciraci C, Hill R T, Mock J J, Urzhumov Y, Fernandez-Dominguez A I, Maier S A, Pendry J B, Chilkoti A, Smith D R 2012 *Science* **337** 1072
- [6] Cottancin E, Celep G, Lerme J, Pellarin M, Huntzinger J R, Vialle J L, Broyer M 2006 *Theor. Chem. Acc.* **116** 514
- [7] Feibelman P J 1982 *Prog. Surf. Sci.* **12** 287
- [8] Feibelman P J 1994 *Phys. Re. Lett.* **72** 788
- [9] Yang Y, Zhu D, Yan W, Agarwal A, Zheng M, Joannopoulos J D, Lalanne P, Christensen T, Berggren K K, Soljacic M 2019 *Nature* **576** 248
- [10] Liebsch A (Edited by Halevi P) 1995 *Photonic Probes of Surfaces* (Amsterdam: Elsevier)
- [11] Scholl J, Koh A, Dionne J 2012 *Nature* **483** 421
- [12] Apell P 1981 *Physica Scripta* **24** 795
- [13] Johnson P B, Christy R W 1972 *Phys. Rev. B* **6** 4370

# Nanoscale electromagnetic boundary conditions based on Maxwell's equations\*

Lai Yu-Cheng    Chen Su-Qi    Mou Lan-Ya    Wang Zhao-Na<sup>†</sup>

(*Department of Physics, Beijing Normal University, Beijing 100875, China*)

( Received 31 May 2021; revised manuscript received 18 July 2021 )

## Abstract

The electromagnetic boundary conditions have great important applications in many physical branches. Here, the nanoscale electromagnetic boundary conditions are derived by using the integral Maxwell's equations through constructing the dielectric transition layer across the interface between the two materials. The two interface response functions are obtained to reflect the electromagnetic field response characteristics of the interface. Based on the Maxwell's equations, the physical meanings of the interface response functions are given as the position of the equivalent interfacial polarization charge and the gradient position of interfacial polarization current density, respectively. The influence of the dielectric constant of the medium, the transition line shape of the electric field and the frequency on the interface response functions are analyzed. When the material scale is large, the interface response function can be ignored, and the nanoscale electromagnetic boundary conditions degenerate to the classical boundary conditions given by the abrupt junction. On this basis, the interface electric dipole moment, the equivalent interfacial polarization charge area density, the equivalent interfacial polarization current density and the equivalent interfacial magnetic current density are introduced, leading to three forms of nanoscale electromagnetic boundary conditions. The results provide a clear physical picture and necessary theoretical basis for nanoscale electromagnetism and interface optics.

**Keywords:** Maxwell's equations, boundary conditions, nanoscale electromagnetic theory

**PACS:** 03.50.De, 79.60.Jv, 42.25.Gy, 41.20.Jb

**DOI:** [10.7498/aps.70.20211025](https://doi.org/10.7498/aps.70.20211025)

---

\* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 61975018, 11574033, 11674032).

<sup>†</sup> Corresponding author. E-mail: [zhnwang@bnu.edu.cn](mailto:zhnwang@bnu.edu.cn)