

Au(111) 薄膜表面等离子激元和热载流子 输运性质的理论研究*

张彩霞 马向超[†] 张建奇

(西安电子科技大学光电工程学院, 西安 710071)

(2022年6月13日收到; 2022年7月13日收到修改稿)

厚度低至原子层的金属薄膜具有优越的光吸收能力和导电特性, 尤其是在金属薄膜和介质界面激发的表面等离子激元, 可以很好地捕获光子并产生热载流子, 使其在提高太阳能电池的光电转换效率、设计近红外波段的光电探测器和基于表面等离子激元的传感器等方面表现出优异的性质. 然而, 目前还缺少对金属薄膜的表面等离子激元和热载流子性质的系统理论研究. 本文基于多体第一性原理计算方法, 系统地研究了1—5个原子层厚 Au(111) 薄膜的表面等离子激元特性, 以及由表面等离子激元产生的热载流子的能量分布和输运性质. 研究表明, Au(111) 薄膜具有低损耗的表面等离子激元特性. 同时, 在 Au(111) 薄膜和介质界面激发的表面等离子激元约束程度较强, 可以增强局部电场, 这在纳米光子学应用中至关重要. 此外, Au(111) 薄膜具有高热载流子产生效率, 且产生的热电子及热空穴能量较高, 具有优异的平均自由程和平均自由时间. 意外的是, Au(111) 薄膜的直流电导率显著优于块体 Au. 这些结果为 Au(111) 薄膜在光电子器件和能量转换设备等的设计和制造提供了新的思路和理论基础.

关键词: Au(111) 薄膜, 输运性质, 表面等离子激元, 热载流子**PACS:** 78.20.-e, 78.20.Ek, 77.22.Ch, 77.22.Gm**DOI:** 10.7498/aps.71.20221166

1 引言

金属薄膜作为一类广泛应用的二维纳米材料, 因其独特的物理化学性质和应用前景而受到越来越多的关注. 其中, 基于金属薄膜表面等离子激元 (surface plasmon, SP) 特性的应用最为广泛和重要. SP 是指特定频率的光照射到金属薄膜和电介质界面时, 金属薄膜中自由电子的集体振荡. SP 被光子激发后形成的表面等离极化激元 (surface plasmon-polariton, SPP) 沿着金属/介质界面传播. SPP 具有量子性质^[1], 在太阳能收集^[2]、光谱学和传感^[3]等方面具有广泛的应用. 在这些系统中, SPP 的电场限制在界面的法线方向, 从而打破了光学衍射极

限. 理想情况下, SPP 应易于激发且不易衰减, 但在传统材料如金、银等贵金属中, SPP 会发生辐射或非辐射衰减. SPP 的非辐射衰减伴随着电子-空穴对的产生, 这些电子和空穴的能量大于环境温度, 因此被认为是“热的”, 即热电子和热空穴, 统称为热载流子. 这些热载流子会在金属内部经历电声散射弛豫转换为热能, 也可以被注入到半导体或分子系统中, 从而在能量转换、光催化和光电探测等设备中得到应用. 特别地, 由热电子^[1,4,5]和热空穴^[6]驱动的光电应用迫切需要了解热载流子产生和传输的时间和空间尺度信息^[7-9].

目前为止, 人们对金属薄膜的表面等离子激元性质进行了很多实验和理论研究. 例如, Maniyara 等^[10]制备了几个纳米到十几个纳米厚的金薄膜, 并在这

* 国家自然科学基金 (批准号: 11704298, 61904138)、陕西省自然科学基金基础研究计划 (项目编号: 2022JZ-04) 和陕西省教育厅专项科研计划项目 (项目编号: 20JK0928) 资助的课题.

[†] 通信作者. E-mail: xcma@xidian.edu.cn

些纳米厚的超薄金薄膜中展示了表面等离子激元,同时提供了广泛的动态可调光学响应,可以在透明导体、等离子体增强光谱学、光学生物传感和电致变色器件中得到应用. Xue 等^[11]研究了具有可变晶格参数的六边形阵列中具有三角形纳米腔的 Ag 薄膜上的表面等离子激元分布,提出了一种将 SPP 集中在可扩展区域中的新方法,该方法在局部非线性光学、传感、等离子体逻辑电路和光学计算中具有潜在的应用. 同时,人们在研究基于金属 SPP 的太阳能电池、光电探测器以及传感等方面都取得了重要进展,例如:在太阳能电池的光电元件中使用金属薄膜可以显著地提高光电转换效率^[2,12–15]. 尽管目前金属薄膜的表面等离子激元性质有了初步的认知,但对于金属薄膜中由 SPP 驱动的热载流子的输运性质知之甚少,尤其是还没有人研究金属薄膜的 SPP 性质、热载流子的能量分布和输运性质以及这些性质对薄膜原子层数的依赖性. 因此,系统地研究金属薄膜的厚度(原子层数)对金属薄膜光学响应和 SPP 产生的热载流子输运性质的影响,有助于对纳米器件的设计制造提供新的见解. 另一方面,金属中电子和声子的相互作用对 SPP 非辐射衰减和热载流子输运性质有重要影响,因此,正确描述金属薄膜中的电子和声子之间的相互作用,可以显著地提高对金属薄膜的各种物理现象的理解.

由于金薄膜具有优越的导电性^[16],且贵金属金在环境条件下具有高光导率和高稳定性从而成为各种光学仪器的首选金属^[17,18];另一方面,目前已有研究人员报道制备了几个原子层厚的金薄膜^[19,20]. 因此,以 Au(111) 薄膜为例,利用多体第一性原理计算方法,系统地研究了 1—5 个原子层 Au(111) 薄膜与介质界面激发的 SPP 的色散特性、有效传播长度和约束程度,以及 SPP 驱动的热载流子的能量分布、平均自由程(mean free times, MFT)、平均自由时间(mean free paths, MFP)和 Au(111) 薄膜的直流电导率,从而全面表征 Au(111) 薄膜的光电响应和输运性质.

2 计算方法

2.1 计算细节

针对 Au(111) 薄膜的电子结构、声子谱和电子-声子相互作用矩阵元的第一性原理计算,采用

开源代码 JDFTx 软件^[21]实现. 计算中使用全相对论模守恒赝势, Perdew-Burke-Ernzerh(PBE) 的广义梯度近似函数来描述交换相关能量^[22]. 对于块体 Au 和 1—2 层 Au(111) 薄膜,平面波截止能量 30 Hartrees; 对于 3—5 层 Au(111) 薄膜,平面波截止能量 25 Hartrees. 使用 0.01 Hartrees 的费米-狄拉克展宽以解析费米面附近电子态的分布状况,对 d 带电子使用旋转不变的 DFT+*U* 校正^[23] ($U=2.04$ eV^[24]). 在计算电子结构时,对于块体 Au 和 Au(111) 薄膜,分别使用以 Gamma 点为中心的 $12 \times 12 \times 12$ 和 $24 \times 24 \times 1$ 均匀 k 点网格. 在计算声子能量和电子和声子矩阵元时,块体 Au 采用 $4 \times 4 \times 4$ 超晶胞,1 层 Au(111) 薄膜采用 $6 \times 6 \times 1$ 超晶胞,2 层 Au(111) 薄膜采用 $4 \times 4 \times 1$ 超晶胞,3—5 层 Au(111) 薄膜采用 $3 \times 3 \times 1$ 超晶胞. 然后,将通过 DFT 获得的所有电子能量、声子能量和电子-声子相互作用矩阵元分别转换为最大局域 Wannier 函数(maximally localized Wannier functions, MLWF)基表示^[25,26]. 具体地,使用 46 个 Wannier 带,精确地再现了块体 Au 和 Au(111) 薄膜费米能级附近一定能量范围内的电子能量和动量矩阵元. 本文使用温度 $T=300$ K 来计算电子的费米占据和声子的玻色占据.

2.2 光电响应

金属材料的光电响应主要由 Drude 电阻损耗、带间电子直接跃迁和声子辅助的电子跃迁贡献. 用依赖于频率的复电导率 $\sigma(\omega)$ 实部表示块体 Au 和 Au(111) 薄膜的介电函数虚部^[27,28]:

$$\text{Im}\epsilon(\omega) = \frac{\text{Re}\sigma(\omega)}{\epsilon_0\omega}, \quad (1)$$

其中复电导率实部 $\text{Re}\sigma(\omega)$ 如下所示^[27,28]:

$$\text{Re}\sigma(\omega) = \frac{\sigma_0\tau_{D_0}^{-1} \cdot \tau_D^{-1}(\omega)}{[\tau_D^{-1}(\omega)]^2 + \omega^2} + \text{Re}\sigma_{\text{inter}}(\omega). \quad (2)$$

(2) 式中右边第一项表示声子辅助的电子跃迁和 Drude 电阻损耗的贡献,第二项表示带间电子直接跃迁的贡献. 对于声子辅助的电子跃迁部分,用频率相关的动量弛豫率 $\tau_D^{-1}(\omega)$ 来表征^[27,29]:

$$\tau_D^{-1}(\omega) = \frac{2\pi}{\hbar g(\epsilon_F) b_T(\hbar\omega)} \sum_{\alpha} \int_{\text{BZ}} \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^d} \times G_{\mathbf{q}\alpha}^p b_T(\hbar\omega - \hbar\omega_{\mathbf{q}\alpha}), \quad (3)$$

式中, ϵ_F 是费米能级; $g(\epsilon_F)$ 是费米能级附近的电

子态密度; \hbar 为约化普朗克常数; ω 是频率; $\hbar\omega$ 是入射光能量; $\hbar\omega_{q\alpha}$ 是极化指数为 α 、波矢为 \mathbf{q} 的声子能量; b_T 如下所示:

$$b_T(\varepsilon) \equiv \frac{\varepsilon}{1 - e^{-\frac{\varepsilon}{k_B T}}}, \quad (4)$$

式中, k_B 为玻尔兹曼常数; T 为绝对温度, 在 300 K 的温度下; $k_B T$ 约为 0.00095 Hartrees. $G_{\mathbf{q}\alpha}^p$ 表示每个声子模式与费米能级附近电子态的总耦合, 具体形式如下所示:

$$\begin{aligned} G_{\mathbf{q}\alpha}^p &\equiv \sum_{nn'} \int_{\text{BZ}} \frac{g_s \Omega d\mathbf{k}}{(2\pi)^d} \left| g_{(\mathbf{k}+\mathbf{q})n', kn}^{\mathbf{q}\alpha} \right|^2 \\ &\times \left(1 - \frac{v_{\mathbf{k}n} \cdot v_{(\mathbf{k}+\mathbf{q})n'}}{|v_{\mathbf{k}n}| \cdot |v_{(\mathbf{k}+\mathbf{q})n'}|} \right) \\ &\times \delta(\varepsilon_{\mathbf{k}n} - \varepsilon_F) \delta(\varepsilon_{(\mathbf{k}+\mathbf{q})n'} - \varepsilon_F), \quad (5) \end{aligned}$$

式中, $\varepsilon_{\mathbf{k}n}$ 是波矢为 \mathbf{k} 、能带为 n 的电子能量; $v_{\mathbf{k}n}$ 是波矢为 \mathbf{k} 、能带为 n 的电子群速度; Ω 是单位晶胞的体积, 对于二维材料, Ω 是单位晶胞的面积; $g_s = 2$ 是自旋简并因子; d 是维数, 对于二维材料, $d = 2$, 对于三维材料, $d = 3$; 积分符号右下方的 BZ 是指积分区间在布里渊区; $g_{(\mathbf{k}+\mathbf{q})n', kn}^{\mathbf{q}\alpha}$ 为电子和声子相互作用矩阵元; $1 - \frac{v_{\mathbf{k}n} \cdot v_{(\mathbf{k}+\mathbf{q})n'}}{|v_{\mathbf{k}n}| \cdot |v_{(\mathbf{k}+\mathbf{q})n'}|}$ 表示动量散射角. 对于 Drude 电阻损耗部分, 直流 (DC) 电导率与平均 Drude 动量弛豫时间的比值计算如下所示 [27]:

$$\frac{\sigma_0}{\tau_{D0}} = \int_{\text{BZ}} \frac{e^2 g_s d\mathbf{k}}{(2\pi)^d} \sum_n \delta(\varepsilon_{\mathbf{k}n} - \varepsilon_F) (v_{\mathbf{k}n} \otimes v_{\mathbf{k}n}). \quad (6)$$

带间电子直接跃迁引起的电导率实部计算如下所示 [27]:

$$\begin{aligned} \text{Re}\sigma_{\text{inter}}(\omega) &= \varepsilon_0 \cdot \omega \cdot \left(\frac{\pi e^2}{\omega^2} \int_{\text{BZ}} \frac{g_s d\mathbf{k}}{(2\pi)^d} \sum_{nn'} (f_{\mathbf{k}n} - f_{\mathbf{k}n'}) \right. \\ &\left. \times \delta(\varepsilon_{\mathbf{k}n'} - \varepsilon_{\mathbf{k}n} - \hbar\omega) (v_{\mathbf{k}nn'}^* \otimes v_{\mathbf{k}nn'}) \right), \quad (7) \end{aligned}$$

式中, $f_{\mathbf{k}n}$ 是波矢为 \mathbf{k} 、能带为 n 的电子费米-狄拉克分布函数; $v_{\mathbf{k}nn'}$ 是速度算符矩阵元; $\varepsilon_0 = 8.85 \times 10^{-6}$ 是真空介电常数. 被积函数中所有的项都使用 Wannier 函数表示以进行有效计算. 介电函数实部通过利用 Kramers-Kronig 关系对介电函数虚部进行转换得到 [28,30-32].

对于 (7) 式, 通过在布里渊区进行 Monte Carlo 采样来评估带间电子直接跃迁部分, 具体来说, 对于块体 Au 和 1—2 层 Au(111) 薄膜, 使用了 1.5×10^6 个 \mathbf{k} 值, 对于 3—5 层 Au(111) 薄膜, 使用了 8×10^5 个 \mathbf{k} 值. 对于 (3) 式中布里渊区的双积分, 在计算频率相关的动量弛豫率时, 对于块体 Au 和 1—2 层 Au(111) 薄膜, 使用了 2×10^6 个 $\{\mathbf{k}, \mathbf{q}\}$ 对进行 Monte Carlo 采样; 对于 3—5 层 Au(111) 薄膜, 使用了 1×10^6 个 $\{\mathbf{k}, \mathbf{q}\}$ 对进行 Monte Carlo 采样. 上述参数均保证了计算结果的收敛.

2.3 输运性质

通过考虑电子-声子散射的贡献表征热载流子的 MFT 和 MFP, 因此根据以下方程计算电子-声子散射的准粒子自能虚部 [33-35]:

$$\begin{aligned} \text{Im} \sum_{\mathbf{k}n}^{\text{e-ph}} &= \sum_{n'\alpha} \int_{\text{BZ}} \frac{d\mathbf{k}'}{(2\pi)^d} \left| g_{\mathbf{k}'n', kn}^{\mathbf{k}'-k, \alpha} \right|^2 \\ &\times \text{Im} \left[\frac{n_{\mathbf{k}'-k, \alpha} + 1 - f_{\mathbf{k}n'}}{\varepsilon_{\mathbf{k}n} - \varepsilon_{\mathbf{k}'n'} - \hbar\omega_{\mathbf{k}'-k, \alpha} - i\eta} \right. \\ &\left. + \frac{n_{\mathbf{k}'-k, \alpha} + f_{\mathbf{k}n'}}{\varepsilon_{\mathbf{k}n} - \varepsilon_{\mathbf{k}'n'} + \hbar\omega_{\mathbf{k}'-k, \alpha} - i\eta} \right], \quad (8) \end{aligned}$$

其中 $\eta = 25$ meV 是考虑了热振荡影响的一个小的洛伦兹展宽 [36]; $n_{\mathbf{q}, \alpha}$ 是波矢为 \mathbf{q} ($\mathbf{q} = \mathbf{k}' - \mathbf{k}$)、极化指数为 α 的声子态的玻色占据.

热载流子的 MFT 为 [33]

$$\tau_{\mathbf{k}n}^{\text{e-ph}} = \frac{\hbar}{2 \text{Im} \sum_{\mathbf{k}n}^{\text{e-ph}}}. \quad (9)$$

热载流子的 MFP 为 [33]

$$\lambda_{\mathbf{k}n} = v_{\mathbf{k}n} \cdot \tau_{\mathbf{k}n}, \quad (10)$$

其中 $v_{\mathbf{k}n} = \partial\varepsilon_{\mathbf{k}n}/\partial\mathbf{k}$ 是电子态 $|\mathbf{k}n\rangle$ 中热载流子的群速度.

根据 (8) 式计算电子-声子散射的准粒子自能虚部时, 对于 1 层 Au(111) 薄膜, 使用了 8×10^5 个 \mathbf{k}' 点, 对于块体 Au 和 2—5 层 Au(111) 薄膜, 使用了 6×10^5 个 \mathbf{k}' 点. 上述参数均保证了计算结果的收敛.

2.4 电导率

考虑到电子-声子散射的影响, 根据传输加权 Eliashberg 谱函数 (transport-weighted Eliashberg

spectral function) 来计算电导率. 传输加权 Eliashberg 谱函数如下所示^[37–39]:

$$\begin{aligned} & \alpha_v^2 F(\omega) \\ &= \frac{g_s^2}{N_{\mathbf{k}} N_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} g(\varepsilon_F)^2} \times \sum_{\mathbf{k} \mathbf{q} n n' \alpha} \delta(\hbar\omega - \hbar\omega_{\mathbf{q}\alpha}) \\ & \times \delta(\varepsilon_{\mathbf{k}n} - \varepsilon_F) \delta(\varepsilon_{(\mathbf{k}+\mathbf{q})n'} - \varepsilon_F) \\ & \times \left| g_{(\mathbf{k}+\mathbf{q})n', \mathbf{k}n}^{\mathbf{q}, \alpha} \right|^2 \left(1 - \frac{v_{\mathbf{k}n} \cdot v_{(\mathbf{k}+\mathbf{q})n'}}{|v_{\mathbf{k}n}| \cdot |v_{(\mathbf{k}+\mathbf{q})n'}|} \right), \quad (11) \end{aligned}$$

式中, $N_{\mathbf{k}}$ 为费米面附近的 \mathbf{k} 点数目. 传输加权 Eliashberg 谱函数可以测量具有能量 $\hbar\omega$ 的特定声子模, 将电子从费米表面中的特定状态散射到另一个状态的可能性.

表征电子和声子耦合强度的传输常数为^[37,38]

$$\lambda = 2 \int_0^\infty \frac{\alpha_v^2 F(\omega)}{\omega} d\omega. \quad (12)$$

电导率作为温度 T 的函数为

$$\sigma = \frac{e^2 v_F^2}{d} \left[\frac{2\pi}{\hbar} \int d\omega \alpha_v^2 F(\omega) \frac{\hbar\omega \exp \frac{\hbar\omega}{k_B T}}{\left(\exp \frac{\hbar\omega}{k_B T} - 1 \right)^2} \right]^{-1}, \quad (13)$$

式中, v_F 为费米速度, 即无质量的狄拉克费米子的传输速度.

通过 (11) 式计算电导率时, 对于块体 Au 和 1—2 层 Au(111) 薄膜, 使用了 10^6 个 $\{\mathbf{k}, \mathbf{q}\}$ 对进行 Monte Carlo 采样, 对于 3—5 层 Au(111) 薄膜, 使用了 8×10^5 个 $\{\mathbf{k}, \mathbf{q}\}$ 对进行 Monte Carlo 采样. 上述参数均保证了计算结果的收敛.

3 分析与讨论

3.1 结构与稳定性

块体 Au 的晶体结构为面心立方, 如图 1(a) 所示, 其晶格常数为 4.08 \AA . 在计算块体 Au 的电子结构时, 使用了相应的原胞, 如图 1(b) 所示. 图 1(c) 显示了块体 Au 的第一布里渊区, 鉴于对称性, 块体 Au 的能带结构沿 \mathbf{k} 点路径 $W-L-G-X-W-K$ 计算. 将金原子近似地看成是等径的刚球, 其沿 [111] 晶向的堆叠序列为“ABC”形式, 如图 1(d) 所示. Au(111) 的晶格常数为 2.88 \AA . 图 1(e) 为 Au(111) 薄膜的第一布里渊区, 能带结构沿 \mathbf{k} 点路径 $G-M-K-G$ 计算.

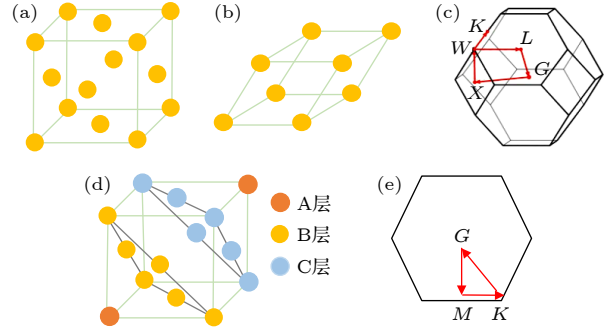


图 1 (a) Au 面心立方结构; (b) 计算块体 Au 电子结构使用的原胞; (c) 块体 Au 的第一布里渊区, 其能带结构和声子谱沿 \mathbf{k} 点路径 $W-L-G-X-W-K$ 计算; (d) Au(111) 薄膜按照“膜按照”方式堆积示意图; (e) Au(111) 薄膜的第一布里渊区, 其能带结构和声子谱沿 \mathbf{k} 点路径 $G-M-K-G$ 计算

Fig. 1. (a) Face-centered cubic structure of Au; (b) the primitive cell used to calculate the electronic structure of bulk Au; (c) the first Brillouin zone of bulk Au, and the irreducible \mathbf{k} -point path $W-L-G-X-W-K$ is used for calculating its band structure and phonon spectra; (d) Au(111) films stacked in "ABC" manner; (e) the first Brillouin zone of Au(111) films, the irreducible \mathbf{k} -point path $G-M-K-G$ is used for calculating its band structure and phonon spectra.

块体 Au 和 1—5 层 Au(111) 薄膜能带结构如图 2 所示, 其中, Au 的能带结构与之前的结果一致^[40–42]. 与块体 Au 相比, Au(111) 薄膜能带结构中的 d 带和 sp 带随原子层数增加而变得更加密集, 这与 Au(111) 薄膜单胞中的原子数目随原子层数增加而增加有关. 从图 2 中黑色方框标记的 sp 带可以看出, 随着原子层数增加, Au(111) 薄膜的 sp 带逐渐向费米能级靠近, 导致 d 带到 sp 带电子跃迁的能量减小, 从而可能增加带间电子直接跃迁的概率. 图 3 给出了块体 Au 和 Au(111) 薄膜的声子谱, Au(111) 薄膜声学支声子能量都大于等于 0, 说明本文建立的 Au(111) 薄膜的晶体结构是动力学稳定的.

3.2 光电响应和 SPP 特性

首先, 为了验证理论方法的准确性, 计算了块体 Au 的介电函数虚部. 如图 4(a) 所示, 在带间阈值以下, 我们的计算结果与文献 [43] 中的实验值非常接近, 在带间阈值以上, 我们的计算结果相对实验结果发生了红移, 这是因为我们所使用的 PBE 泛函低估了带间跃迁的能量. 图 4(b) 中给出了 Au(111) 薄膜在 0—4 eV 能量范围内的介电函数虚部. 在带间阈值以上, Au(111) 薄膜的介电函数值显著大于块体 Au, 且随层数增加而增大. 这是因为 Au(111) 薄膜的 sp 带随原子层数增加而靠

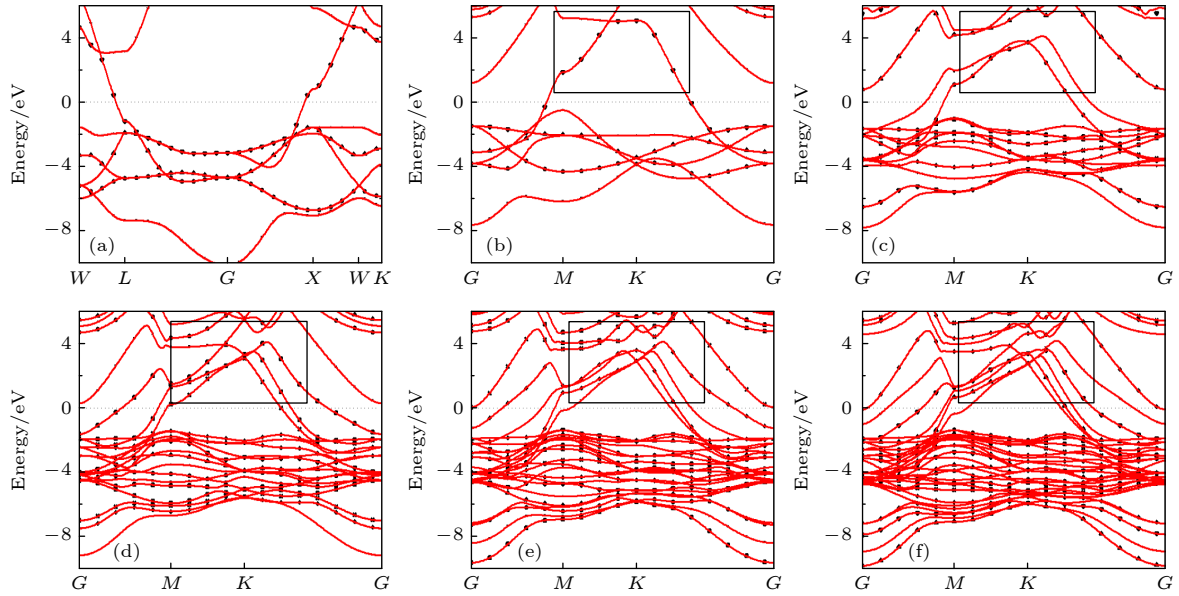


图 2 能带结构 (a) 块体 Au; (b)–(f) 1–5 层 Au(111) 薄膜

Fig. 2. Energy band structure of (a) bulk Au and (b)–(f) Au(111) films with thickness from 1 to 5 atomic layers.

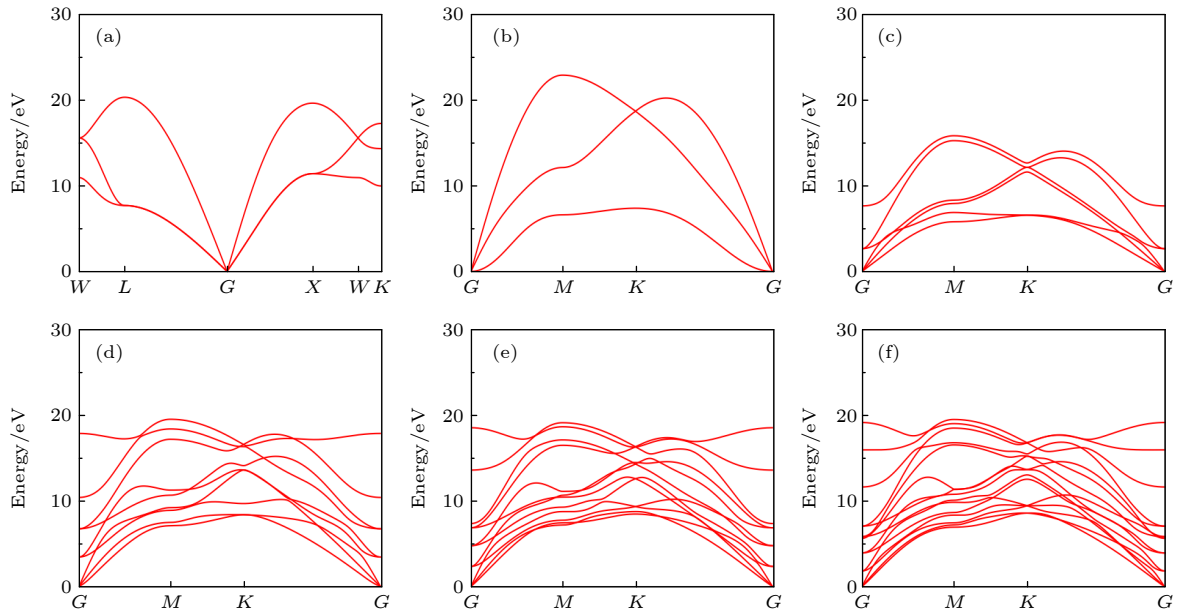


图 3 声子谱 (a) 块体 Au; (b)–(f) 1–5 层 Au(111) 薄膜

Fig. 3. Phonon structure of (a) bulk Au and (b)–(f) Au(111) films with thickness from 1 to 5 atomic layers .

近费米能级, 极大地提高了电子从 d 带到 sp 带的跃迁概率; 在带间阈值以下, Au(111) 薄膜与块体 Au 的介电函数值相当, 且都主要由声子辅助的电子激发引起.

材料中的 SPP 具有非常吸引人的空间特性, 空间特性之间的联系源于色散关系的特征, 色散关系将表面等离激元振荡的允许频率与波矢量联系起来 [31]. SPP 的色散关系可表示为 [44,45]

$$\beta = k_0 \sqrt{\varepsilon_r \varepsilon(\omega) / (\varepsilon_r + \varepsilon(\omega))}, \quad (14)$$

式中, $k_0 = \omega/c$ 表示真空中传输波的波矢; c 为真空中的光速; $\varepsilon(\omega)$ 为复介电函数. 空气的介电常数 $\varepsilon_r = 1$, 因此当 $\text{Re}\varepsilon(\omega) = -1$ 时, $\beta \gg k_0$, 此时对应的 ω 为表面等离激元频率 ω_{sp} , ω_{sp} 表示 SPP 的响应能量上界. 根据介电函数实部 $\text{Re}\varepsilon(\omega)$ 计算结果图 5, 块体 Au 的 ω_{sp} 约为 6.25 eV, 与文献 [31] 中自由电子气模型计算出的 ω_{sp} 非常接近. 1–5 层 Au(111)

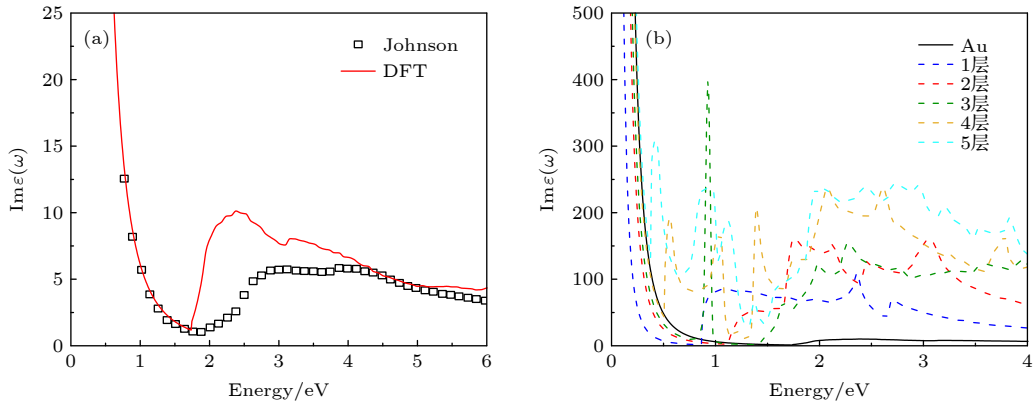


图 4 介电函数虚部 (a) 块体 Au 的 Johnson 实验测量结果和 DFT 理论计算结果; (b) 块体 Au 和 1—5 层 Au(111) 薄膜
 Fig. 4. (a) The imaginary part of the dielectric function of Johnson experimental measurement result and DFT theoretical calculation result of bulk Au; (b) the imaginary part of the dielectric function of bulk Au and Au(111) films with thickness from 1 to 5 atomic layers.

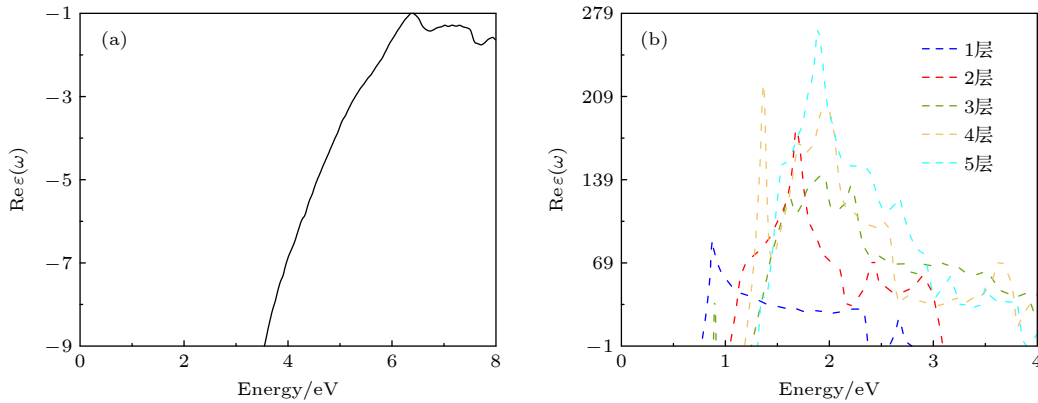


图 5 (a) 块体 Au 的介电函数实部; (b) 1—5 层 Au(111) 薄膜的介电函数实部
 Fig. 5. The real part of the dielectric function of (a) bulk Au and (b) Au(111) films with thickness from 1 to 5 atomic layers.

薄膜的 ω_{sp} 分别约为 0.77 eV, 1.04 eV, 1.25 eV, 1.19 eV, 1.31 eV. Au(111) 薄膜与空气界面激发的 SPP 的色散关系如图 6 所示, 纵坐标表示入射光频率, 横坐标表示电荷集体震荡的频率, 红色虚线处的能量表示 ω_{sp} . $\text{Im}(\beta)$ 表示 SPP 的耗散, $\text{Im}(\beta)$ 在横坐标上的值越大, 表示 SPP 的耗散越大. 根据图 6, Au(111) 薄膜 SPP 的响应能量范围随着原子层数增加而扩大, 同时, SPP 的损耗和波矢实部最大值随着原子层数增加先增加后减小并趋于稳定. 此外, 如图 7 所示, 当电介质为 SiO_2 时, $\epsilon_r = 2.25$ ^[3], 块体 Au 和 1—5 层 Au(111) 薄膜的 ω_{sp} 分别为 6.20 eV, 0.76 eV, 1.03 eV, 1.24 eV, 1.18 eV, 1.30 eV. 与在空气中的 ω_{sp} 非常接近, 而 Au(111)/ SiO_2 界面 SPP 的耗散和电荷密度波的波矢与 Au(111)/空气界面相比显著增大. 这是因为 SiO_2 的介电常数大于空气, Au(111)/ SiO_2 界面 SPP 通过极化界面附近电荷产生的损耗更多.

通常用比值 $\text{Re}(\beta)/\text{Im}(\beta)$ 表示 SPP 的有效传播长度^[28]. 有效传播长度表示 SPP 在损失大部分能量之前的传播长度, 传播长度越大表明 SPP 的损耗越低. 同时, 用 $\lambda_{\text{air}}/\lambda_{\text{sp}}$ ($\lambda_{\text{air}} = 2\pi c/\omega$, $\lambda_{\text{sp}} = 2\pi/\text{Re}(\beta)$ 为 SPP 的波长) 表示 SPP 的约束比^[28], 反映了 SPP 对电磁波的约束程度. 如图 8 所示, 在 SPP 响应能量范围内, 有效传播长度随着能量的增加而减小, 这是因为当能量接近 ω_{sp} 时, 衰减增加. Au(111) 薄膜中 SPP 的有效传播长度小于块体 Au, 并且随着原子层数增加逐渐接近块体 Au. 同时, 在能量靠近 ω_{sp} 时, Au(111) 薄膜中 SPP 的有效传播长度急剧减小, 而块体 Au 减小得较缓慢. 意外的是, 3 层 Au(111) 薄膜中 SPP 的有效传播长度在约 0.9 eV 处出现了明显的先减小后增大的趋势, 这与其介电函数 (图 4) 在约 0.9 eV 处出现的尖峰有关, 该尖峰来源于带间电子直接跃迁. 另外, 4 层和 5 层 Au(111) 薄膜中 SPP 的有效传播长度曲线不如 1 层和 2 层

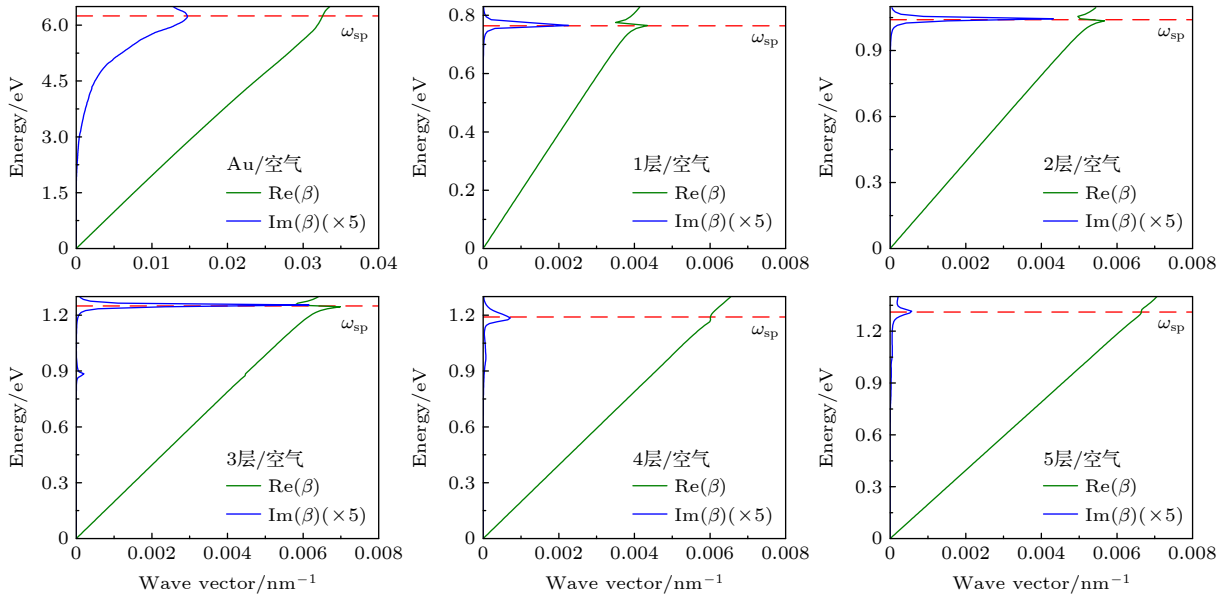


图 6 块体 Au 和 Au(111) 薄膜与空气界面激发的 SPP 色散关系

Fig. 6. Dispersion relation of SPP excited at the interface of Bulk Au and Au(111) films with air.

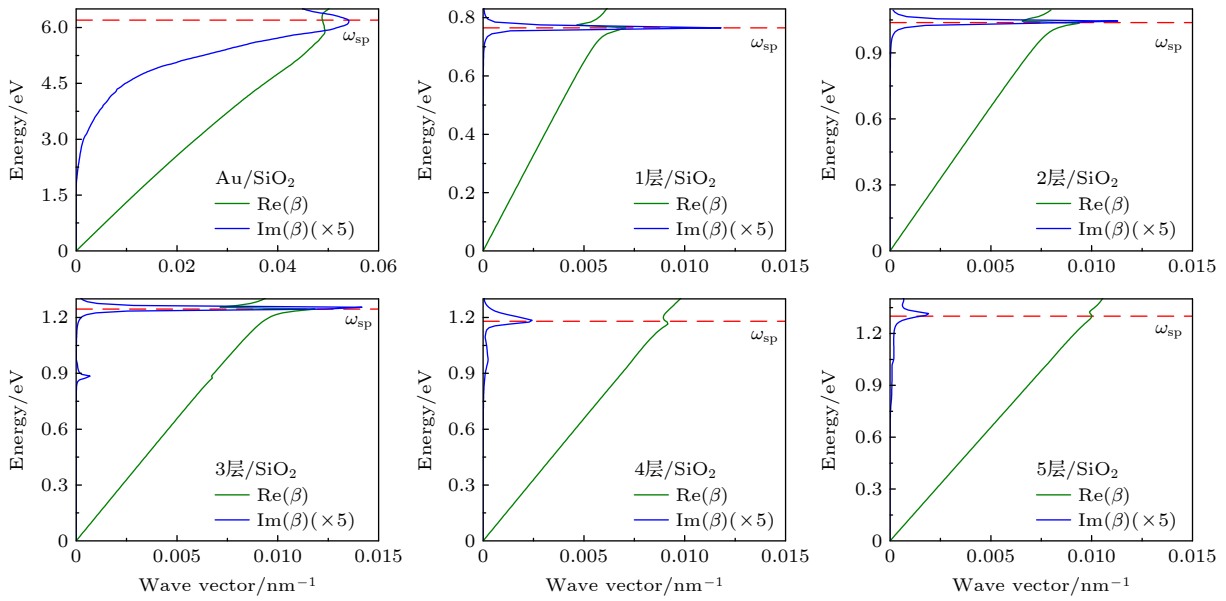


图 7 块体 Au 和 Au(111) 薄膜与 SiO₂ 界面激发的 SPP 色散关系

Fig. 7. Dispersion relation of SPP excited at the interface of bulk Au and Au(111) films with SiO₂.

光滑,这是因为在响应能量范围内,4层和5层 Au(111)薄膜的电子直接跃迁概率随入射光能量变化没有规律(图4). Au(111)薄膜与 SiO₂界面激发的 SPP 的有效传播长度明显小于在空气中.此外,如图9所示, SPP 的有效传播长度和约束比成反比关系,在实际应用中,需要找到等离子体材料中这两个指标达到平衡的能量范围.对于 Au(111)薄膜,1—5层都具有大约为 1 的约束比,且在 ω_{sp} 处出现了峰值,同

时随着原子层数增加, ω_{sp} 处的峰值减小.与传播长度相反, Au(111)/SiO₂界面 SPP 的约束比大于在空气中.上述结果表明 Au(111)薄膜在近红外区域可以产生低损耗的 SPP,适合用于近红外波段范围内基于 SPP 的光电设备和光催化反应器.另一方面,在 Au(111)/SiO₂界面激发的 SPP 的约束程度增强,从而增强局部电场,这一现象在等离激元学中至关重要.

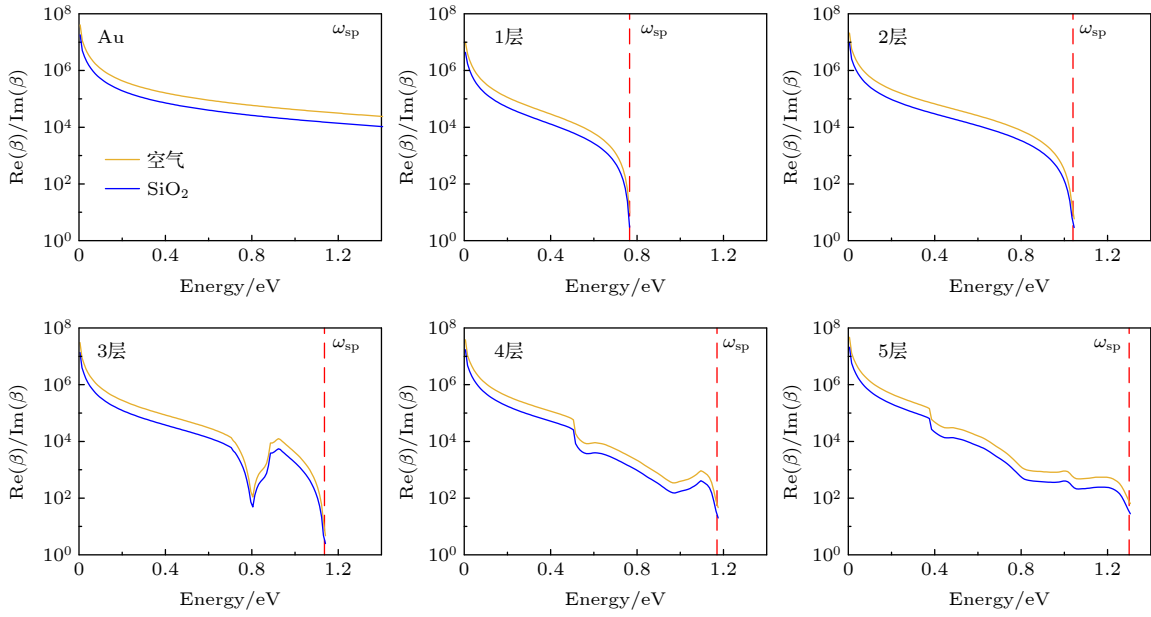


图 8 块体 Au 和 Au(111) 薄膜与介质界面激发的 SPP 有效传播长度

Fig. 8. SPP effective propagation length at the interface of bulk Au and Au(111) films.

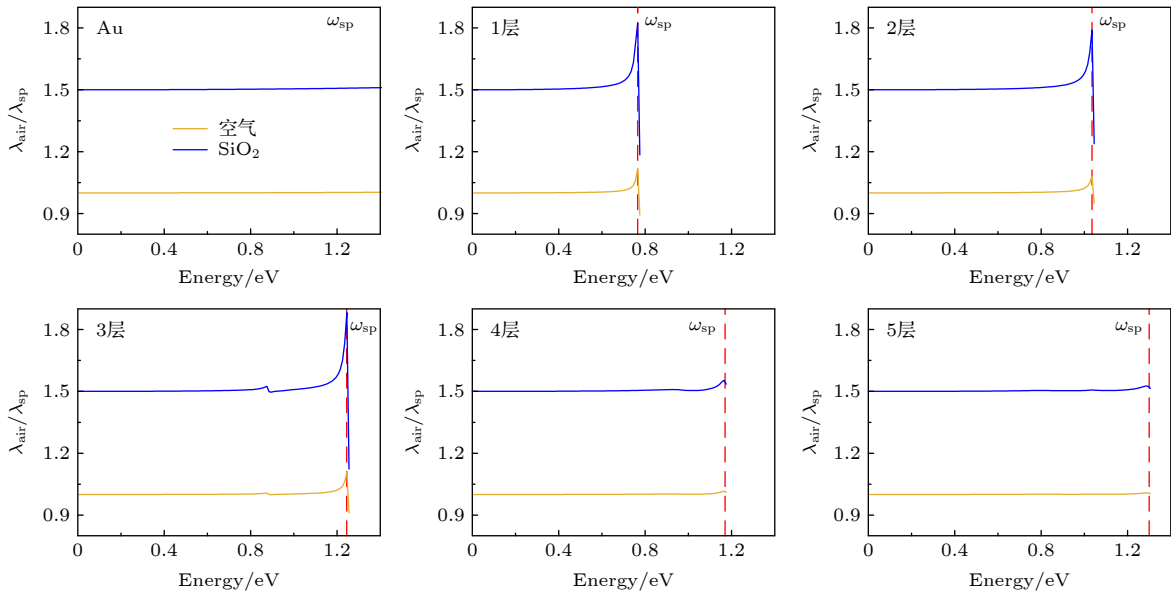


图 9 块体 Au 和 Au(111) 薄膜与电介质界面激发的 SPP 约束比

Fig. 9. SPP confinement ratio at the interface of bulk Au and Au(111) films with dielectrics.

3.3 热载流子的产生和分布

由 SPP 的非辐射衰减驱动的热载流子是一个非常重要的应用,尤其是要知道特定能量下产生的热载流子中占主导地位的是高能热电子还是高能热空穴.因此给出了 Au(111) 薄膜中来源于带间电子直接跃迁的热载流子能量分布.如图 10 所示,水平轴表示热载流子的能量,其中负值表示热空穴,正值表示热电子,垂直轴为入射光能量,色标表示热载流子的产生效率.块体 Au 带间电子跃迁

产生热载流子的能量分布与文献 [46] 中理论计算结果一致. Au(111) 薄膜带间电子跃迁产生热载流子的初始入射光能量相比于块体 Au 显著减小. 1—3 层 Au(111) 薄膜在较低入射光能量下主要产生的是高能热空穴,而随着入射光能量增加,出现了能量相当的高能热电子和高能热空穴. 4 层和 5 层 Au(111) 薄膜在低入射光能量处产生了高能热电子,在约 2—4 eV 入射光能量范围内具有高产生效率的高能热空穴,而入射光能量在 3 eV 以上

时, 出现了与高能热空穴能量相当的高能热电子. 总的来说, Au(111) 薄膜主要适宜产生高能热空穴, 有利于在 p 型半导体中对高能热空穴进行收集和利用.

3.4 热载流子的输运性质

在实验中, 由 SPP 非辐射衰减产生的热载流子必须存活足够长的时间或行进足够远的距离才能被收集或检测到. 这种热载流子传输的 MFT 和

MFP 一直是人们讨论的主题 [1,47,48], 也是指导制备高性能光电器件的关键参数. 因此, 我们也计算了 Au(111) 薄膜的 MFT 和 MFP. 如图 11 所示, 水平轴表示热载流子的能量, 其中负值表示热空穴, 正值表示热电子, 垂直轴为入射光能量. 块体 Au 的 MFT 与文献 [49] 中理论计算结果一致. Au(111) 薄膜中热电子和热空穴的 MFT 随着原子层数增加而增大并趋近于块体 Au. 此外, 原子层数对高能热电子 MFT 的影响比对高能热空穴

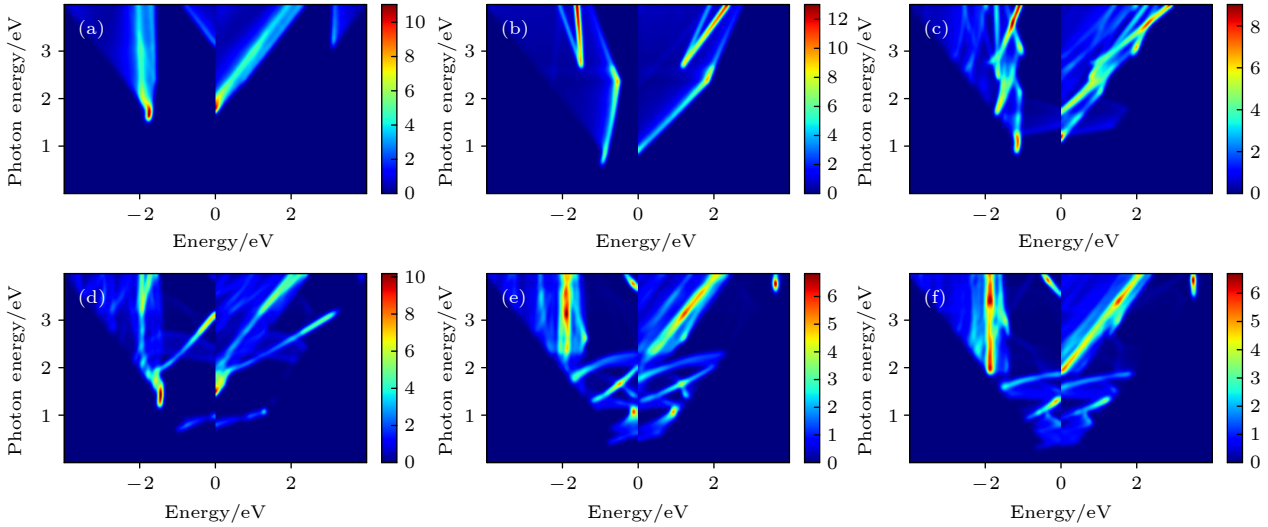


图 10 热载流子的能量分布 (a) 块体 Au; (b)–(f) 1–5 层 Au(111) 薄膜

Fig. 10. The energy distribution of hot carriers generated by direct interband electronic transitions for (a) bulk Au and (b)–(f) Au(111) films with thickness from 1 to 5 atomic layers.

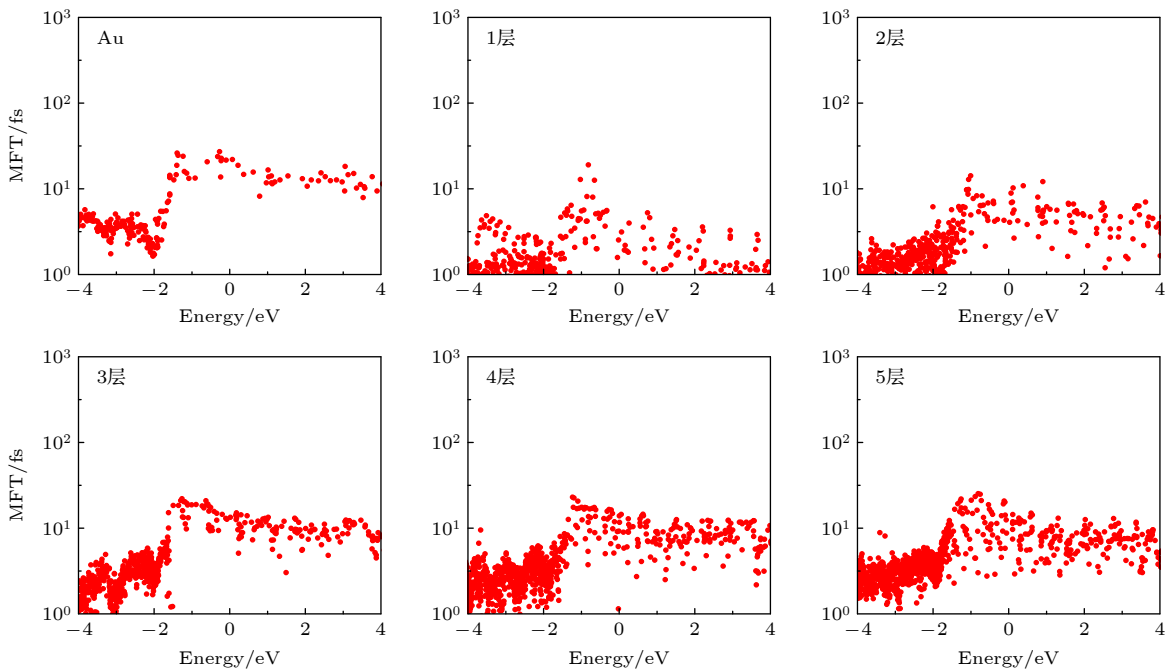


图 11 块体 Au 和 Au(111) 薄膜中热载流子的平均自由时间

Fig. 11. Mean free times of hot carriers in bulk Au and Au(111) films with thickness from 1 to 5 atomic layers .

MFT的影响更明显,例如,高能热电子的MFT从1层的2 fs增大到5层的8 fs,而高能热空穴的MFT始终维持在约1—3 fs范围之间.另一方面,如图12所示,Au(111)薄膜中热电子和热空穴的MFP分布趋势与MFT一致,且随原子层数的增加而增加.通过上述分析可知,原子层数对Au(111)薄膜中高能热电子的影响较大,并且Au(111)薄膜中高能热电子的输运性质优于高能热空穴.除此之外,原子层数的增加显著地提高了Au(111)薄膜中热载流子的MFT和MFP,并且接近块体Au.因此在实际应用中,考虑到成本问题可以选择5层的Au(111)薄膜.

3.5 电导率

电导率是研究各种金属材料时关注的基本性质之一,研究金属薄膜厚度对导电性能的影响也是纳米结构物理学中重要的方向之一^[50,51].因此,给出了块体Au和1—5层Au(111)薄膜的电导率随温度变化的关系曲线和加权传输Eliashberg谱函数 $\alpha_v^2 F(\omega)$,如图13所示.本文对电导率的计算只考虑500 K以内的温度范围,在该温度范围内,Au(111)薄膜不易熔化,且电子和声子相互作用对电导率的影响最大,并且在纯净金属晶体中,电子和电子散射与电子和杂质散射可以忽略.在图13(a)中,

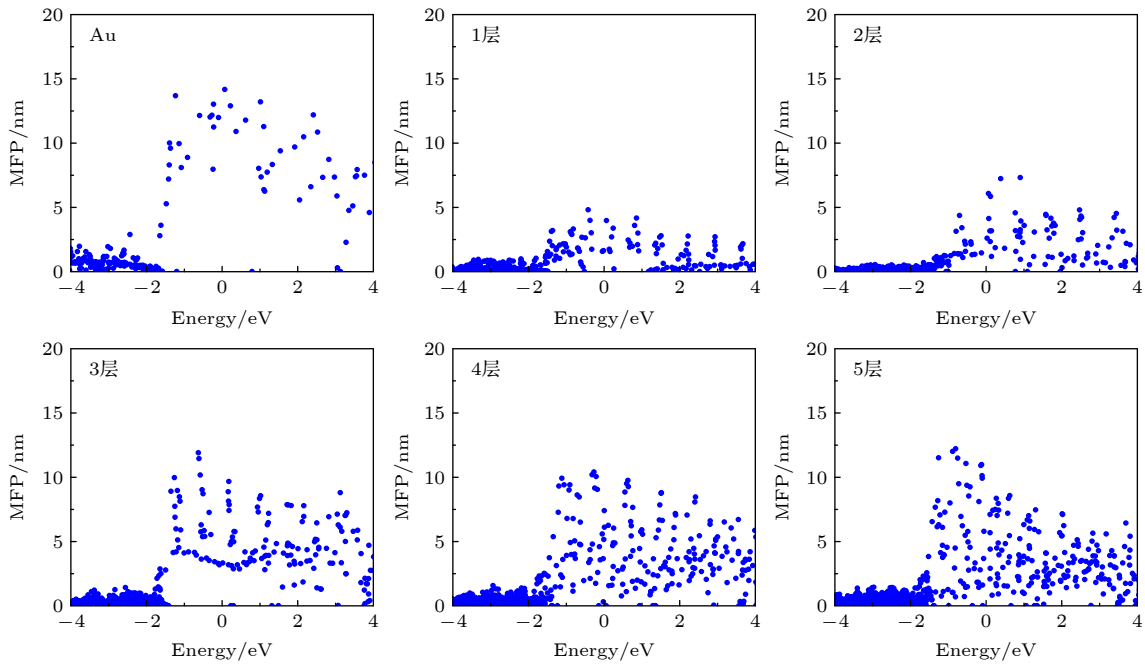


图12 块体Au和Au(111)薄膜热载流子的平均自由程

Fig. 12. Mean free paths of hot carriers in bulk Au and Au(111) films with thickness from 1 to 5 atomic layers.

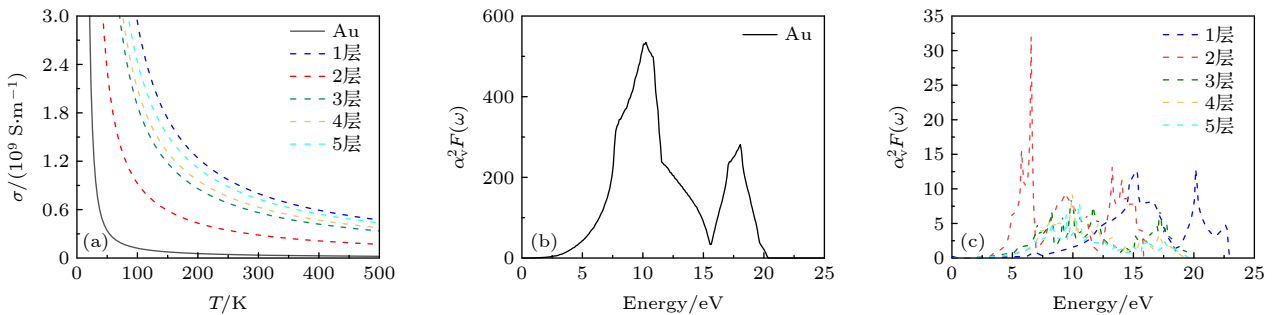


图13 (a) 块体Au和1—5层Au(111)薄膜在0—500 K温度范围内的直流电导率; (b) 块体Au和 (c) 1—5层Au(111)薄膜加权传输Eliashberg谱函数 $\alpha_v^2 F(\omega)$

Fig. 13. (a) DC conductivity of bulk Au and Au(111) films with thickness from 1 to 5 atomic layers in the temperature range of 0–500 K, the transport-weighted Eliashberg spectral function of (b) bulk Au and (c) Au(111) films with thickness from 1 to 5 atomic layers.

块体 Au 的电导率随温度变化的理论计算结果与文献 [38] 中的理论计算结果非常接近, 同时, 本文计算的块体 Au 在 $T=298$ K 时的电导率约为 3.65×10^7 S/m, 与文献 [24] 中的理论计算值 (4.48×10^7 S/m) 和文献 [52] 中的实验值 (4.42×10^7 S/m) 非常接近. 显然, 随着温度升高, 块体 Au 和 Au(111) 薄膜的电导率都急剧减小, 且块体 Au 减小得更快. 此外, Au(111) 薄膜的电导率大于块体 Au, 这是因为块体 Au 的 $\alpha_v^2 F(\omega)$ 大于 Au(111) 薄膜, 如图 13(b) 和图 13(c) 所示. 块体 Au 的 $\alpha_v^2 F(\omega)$ 大于 Au(111) 薄膜是因为动量散射角 $1 - \frac{v_{kn} \cdot v_{(k+q)n'}}{|v_{kn}| \cdot |v_{(k+q)n'}|}$ 考虑了不同的散射方向, 而二维 Au(111) 薄膜减小了电子-声子散射发生的相空间 [37,38], 如表 1 中表征电子-声子耦合强度的传输常数 λ 所示, 块体 Au 的 λ 明显大于 Au(111) 薄膜. 另外, 1 层 Au(111) 薄膜的电导率最大, 2—5 层 Au(111) 薄膜的电导率随原子层数增加而增大, 并且逐渐靠近 1 层的电导率, 这与传输常数 λ 和费米速度 v_F 有关, 如表 1 和表 2 所列. 1 层和 3—5 层 Au(111) 薄膜的 λ 相差较小, 而与 2 层相差较大; 2—5 层 Au(111) 薄膜的 v_F 非常接近, 而 1 层较大, 电子传输速度较快, 使得电导率较大. 至于为什么传输常数 λ 和费米速度 v_F 随着 Au 原子层数会有如此奇特的变化, 还需要未来更深入的研究. 上述研究结果表明, Au(111) 薄膜的导电特性优于块体 Au, 尤其是 1 层 Au(111) 薄膜, 因此 Au(111) 薄膜更有利于在纳米电路和纳米电子器件等领域的应用.

表 1 传输常数 λ

Table 1. The transport constant λ .

块体Au	1层	2层	3层	4层	5层	
λ	629.52	10.24	18.27	8.85	7.75	6.39

表 2 费米速度 v_F

Table 2. The Fermi velocity v_F .

块体Au	1层	2层	3层	4层	5层	
v_F	0.62	0.68	0.51	0.50	0.49	0.48

4 结 论

基于多体第一性原理计算方法, 系统地研究了 Au(111) 薄膜的光电响应、SPP 和热载流子输运性质. 研究表明, Au(111) 薄膜的带间电子直接跃迁阈值均小于块体 Au, 且随原子层数增加而减

小; 薄膜的带间电子直接跃迁概率显著大于块体 Au 且随原子层数增加而增加, 而声子辅助的电子跃迁概率相当. 在 Au(111) 薄膜/空气界面激发的 SPP 响应能量范围和有效传播长度随原子层数增加而增加, 而 SPP 的约束程度相当. 同时, SPP 具有低损耗特点. 此外, 在 Au(111) 薄膜/SiO₂ 界面激发的 SPP 有效传播长度与 Au(111) 薄膜/空气界面相比减小, 而约束程度显著增强, 这可能增强局部电场. 其次, Au(111) 薄膜产生的热电子和热空穴的能量分布显著依赖于入射光能量和薄膜厚度; 另一方面, Au(111) 薄膜中热电子和热空穴的 MFT 和 MFP 随原子层数增加而增加并趋于块体 Au, 且热电子的输运性质优于热空穴. 意外的是, Au(111) 薄膜的导电特性显著优于块体 Au, 这源于二维 Au(111) 薄膜中电子-声子散射相空间的减少. 上述结果为 Au(111) 薄膜在低损耗光子器件和高效光电应用的设计提供了理论基础和指导.

参考文献

- [1] Moskovits M 2015 *Nat. Nanotechnol.* **10** 6
- [2] Kulkarni A P, Noone K M, Mumechika K, Guyer S R, Ginger D S 2010 *Nano Lett.* **10** 1501
- [3] Maier S A 2007 *Plasmonics: fundamentals and applications* (Bath: Springer) pp177–191
- [4] Mukherjee S, Libisch F, Large N, Neumann O, Brown L V, Cheng J, Lassiter J B, Carter E A, Nordlander P, Halas N J 2013 *Nano Lett.* **13** 240
- [5] Robatjazi H, Bahauddin S M, Doiron C, Thomann I 2015 *Nano Lett.* **15** 6155
- [6] Christopher P, Xin H L, Linic S 2011 *Nat. Chem.* **3** 467
- [7] Babicheva V E, Zhukovsky S V, Ikhsanov R S, Protsenko I E, Smetanin I V, Uskov A 2015 *ACS Photonics* **2** 1039
- [8] Zheng B Y, Zhao H Q, Manjavacas A, McClain M, Nordlander P, Halas N J 2015 *Nat. Commun.* **6** 7797
- [9] Leenheer A J, Narang P, Lewis N S, Atwater H A 2014 *J. Appl. Phys.* **115** 134301
- [10] Maniyara R A, Rodrigo D, Yu R, Canet-Ferrer J, Ghosh D S R, Yongsunthon R, Baker D E, Rezikyan A, de Abajo F J G, Prumeri V 2019 *Nat. Photonics* **13** 328
- [11] Xue X T, Fan Y H, Segal E, Wang W P, Yang F, Wang Y F, Zhao F T, Fu W Y, Ling Y H, Salomon A, Zhang Z 2021 *Mater. Today* **46** 54
- [12] Mandal P, Sharma S 2016 *Renewable Sustainable Energy Rev.* **65** 537
- [13] Zhang C, Guney D O, Pearce J M 2016 *Mater. Res. Express* **3** 105034
- [14] Li Z J, Lü W, Zhang C, Qin J W, Wei W, Shao J J, Wang D W, Li B H, Kang F Y, Yang Q H 2014 *Nanoscale* **6** 9554
- [15] Shahjamali M M, Salvador M, Bosman M, Ginger D S, Xue C 2014 *J. Phys. Chem. C* **118** 12459
- [16] Tsysar K M, Andreev V G, Vdovin V A 2016 *International Conference on Micro- and Nano-Electronics 2016 Zvenigorod, Russia, October 3-7, 2016* pp40–45

- [17] Shipway A N, Katz E, Willner I 2000 *ChemPhysChem* **1** 18
- [18] Chu F H, Cai H W, Qu R H, Fang Z J 2009 *Laser Optoelectron. Prog.* **46** 58 (in Chinese) [初凤红, 蔡海文, 瞿荣辉, 方祖捷 2009 激光与光电子进展 **46** 58]
- [19] Zhu Q, Hong Y, Cao G, Zhang Y, Wang J W 2020 *ACS Nano* **14** 17091
- [20] Forti S, Link S, Sthir A, Niu Y, Zakharov A A, Coletti C, Starke U 2020 *Nat. Commun.* **11** 2236
- [21] Sundararaman R, Letchworth-Weaver K, Schwarz K A, Gunceler D, Ozhabes Y, Arias T A 2017 *Software* **6** 278
- [22] Perdew J P, Ruzsinszky A, Csonka G I, Vydrov O A, Scuseria G E, Constantin L A, Zhou X L, Burke K 2009 *Phys. Rev. Lett.* **102** 136406
- [23] Dudarev S L, Botton G A, Savrasov S Y, Humphreys C J, Sutton A P 1998 *Phys. Rev. B* **57** 1505
- [24] Brown A M, Sundararaman R, Narang P, Goddard W A, Atwater H A 2016 *ACS Nano* **10** 957
- [25] Marzari N, Vanderbilt D 1997 *Phys. Rev. B* **56** 12847
- [26] Giustino F, Cohen M L, Louie S G 2007 *Phys. Rev. B* **76** 165108
- [27] Sundararaman R, Christensen T, Ping Y, Rivera N, Joannopoulos J D, Soljacic M, Narang P 2020 *Phys. Rev. Mater.* **4** 074011
- [28] Jian C C, Ma X C, Zhang J Q, Jiang J L 2022 *Nanophotonics* **11** 531
- [29] Habib A, Florio F, Sundararaman R 2018 *J. Opt.* **20** 064001
- [30] Shore K, Chan D 1990 *Electron. Lett.* **26** 1206
- [31] Kolwas K, Derkachova A 2020 *Nanomaterials* **10** 1411
- [32] Laref S, Cao J, Asaduzzaman A, Runge K, Deymier P, Ziolkowski R W, Miyawaki M, Muralidharan K 2013 *Opt. Express* **21** 11827
- [33] Jian C C, Ma X C, Zhang J Q, Yong X 2021 *J. Phys. Chem. C* **125** 15185
- [34] Bernardi M, Vigil-Fowler D, Lischner J, Neaton J B, Louie S G 2014 *Phys. Rev. Lett.* **112** 257402
- [35] Bernardi M, Vigil-Fowler D, Ong C S, Neaton J B, Louie S G 2015 *Proc. Natl. Acad. Sci. U. S. A.* **112** 5291
- [36] Bernardi M, Mustafa J, Neaton J B, Louie S G 2015 *Nat. Commun.* **6** 7044
- [37] Bauer R, Schmid A, Pavone P, Strauch D 1998 *Phys. Rev. B* **57** 11276
- [38] Giri A, Gaskins J T, Li L Q, Wang Y S, Prezhdo O V, Hopkins P E 2019 *Phys. Rev. B* **99** 165139
- [39] Allen P 1971 *Phys. Rev. B* **3** 305
- [40] Rangel T, Kecik D, Trevisanutto P E, Rignanese G M, Van Swygenhoven H, Olevano V 2012 *Phys. Rev. B* **86** 125125
- [41] Xu M, Yang J Y, Zhang S Y, Liu L H 2017 *Phys. Rev. B* **96** 115154
- [42] Ma X C, Sun H, Wang Y C, Wu X, Zhang J Q 2018 *Nano Energy* **53** 932
- [43] Wang Y, Chen L Y, Xu B, Zheng W M, Zhang R J, Qian D L, Zhou S M, Zheng Y X, Dai N, Yang Y M, Ding K B, Zhang X M 1998 *Thin Solid Films* **313** 232
- [44] Zhang Z Y, Wang H Y, Du J L, Zhang X L, Hao Y W, Chen Q D, Sun H B 2015 *IEEE Photonics Technol. Lett.* **27** 821
- [45] Jablan M, Soljacic M, Buljan H 2013 *Proc. IEEE* **101** 1689
- [46] Jian C C, Zhang J Q, He W M, Ma X C 2021 *Nano Energy* **82** 105763
- [47] Khurgin J B 2015 *Nat. Nanotechnol.* **10** 2
- [48] Brongersma M L, Halas N J, Nordlander P 2015 *Nat. Nanotechnol.* **10** 25
- [49] Bernardi M, Mustafa J, Neaton J B, Louie S G 2015 *Nature Communications* **6** 7044
- [50] Gladskikh I A, Leonov N B, Przhibel'skii S G, Vartanyan T A 2014 *J. Opt. Technol.* **81** 280
- [51] Antonets I V, Kotov L N, Nekipelov S V, Golubev Y A 2004 *Tech. Phys.* **49** 306
- [52] Robert C W, Melvin J A, William H B 2003 *CRC Handbook of Chemistry and Physics* (84th Ed.) (Florida: Boca Raton) pp13-14

Theoretical study on surface plasmon and hot carrier transport properties of Au(111) films*

Zhang Cai-Xia Ma Xiang-Chao[†] Zhang Jian-Qi

(School of Optoelectronic Engineering, Xidian University, Xi'an 710071, China)

(Received 13 June 2022; revised manuscript received 13 July 2022)

Abstract

Metal films with a thickness as low as atomic layer have superior light absorption capabilities and conductive properties, especially the surface plasmons excited at the interface between metal film and dielectric can well capture photons and generate hot carriers, making them more efficient in improving the photoelectric conversion efficiency of solar cells, designing photodetectors in the near-infrared band, and sensors based on surface plasmon. However, there is still a lack of systematic theoretical studies on the surface plasmon and hot carrier properties of metal thin films. Based on the many-body first-principles calculation method, in this paper studied systematically are the surface plasmon properties of Au(111) films with thickness in a range from monolayer to 5 monolayers, and the energy distribution and transport properties of hot carriers generated by surface plasmons. The study results show that Au(111) films have low-loss surface plasmon properties. Meanwhile, the surface plasmons excited at the interface between the Au(111) film and the dielectric are strongly confined, which can enhance the local electric field, thus being crucial in nanophotonics applications. In addition, Au(111) film has a high efficiency generating hot carriers, and the generated hot electrons and hot holes are high in energy, and excellent in mean free path and mean free time. Unexpectedly, the direct current conductivity of Au(111) film is significantly better than that of bulk Au. These results provide new ideas and theoretical basis for the design and fabrication of Au(111) films in optoelectronic devices and energy conversion devices.

Keywords: Au(111) films, transport properties, surface plasmon, hot carriers

PACS: 78.20.-e, 78.20.Ek, 77.22.Ch, 77.22.Gm

DOI: 10.7498/aps.71.20221166

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 11704298, 61904138), the Natural Science Basic Research Program of Shaanxi Province, China (Grant No. 2022JZ-04), and the Special Scientific Research Program of Education Department of Shaanxi Provincial, China (Grant No. 20JK0928).

[†] Corresponding author. E-mail: xcma@xidian.edu.cn



Au(111)薄膜表面等离激元和热载流子输运性质的理论研究

张彩霞 马向超 张建奇

Theoretical study on surface plasmon and hot carrier transport properties of Au(111) films

Zhang Cai-Xia Ma Xiang-Chao Zhang Jian-Qi

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 71, 227801 (2022) DOI: 10.7498/aps.71.20221166

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.71.20221166>

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

基于超表面的Tamm等离激元与激子的强耦合作用

Strong coupling between metasurface based Tamm plasmon microcavity and exciton

物理学报. 2020, 69(1): 010201 <https://doi.org/10.7498/aps.69.20191225>

拓扑表面等离激元

Topological surface plasmon polaritons

物理学报. 2019, 68(22): 224101 <https://doi.org/10.7498/aps.68.20191085>

等离激元共振能量转移与增强光催化研究进展

Plasmon resonance energy transfer and research progress in plasmon-enhanced photocatalysis

物理学报. 2019, 68(14): 147301 <https://doi.org/10.7498/aps.68.20190276>

等离激元能带结构与应用

Plasmonic band structures and its applications

物理学报. 2020, 69(15): 157301 <https://doi.org/10.7498/aps.69.20200193>

旋转对称表面等离激元结构中极端局域光场的准正则模式分析

Quasinormal mode analysis of extremely localized optical field in body-of-revolution plasmonic structures

物理学报. 2019, 68(14): 147104 <https://doi.org/10.7498/aps.68.20190434>

表面等离激元调控化学反应

Surface plasmon mediated chemical reaction

物理学报. 2019, 68(14): 147102 <https://doi.org/10.7498/aps.68.20190345>