

贵金属材料电磁介电常数的波长变化关系曲线重建与应用*

刘媛媛 张冠茂†

(兰州大学信息科学与工程学院, 兰州 730000)

(2026 年 3 月 14 日收到; 2026 年 5 月 7 日收到修改稿)

贵金属 (Au)、银 (Ag)、铜 (Cu) 以及轻金属铝 (Al) 的复介电常数 $\varepsilon(\omega) = \varepsilon_1(\omega) + i\varepsilon_2(\omega)$ 决定其对电磁波的本征响应, 并直接影响表面等离子器件与纳米光子器件的设计. 针对现有参数化分析模型在全波段覆盖与精度上的局限, 本文基于公开实验数据, 提出了一种非参数建模方法. 该方法首先在对数波长轴上进行等距重采样, 然后依据奈奎斯特抽样定理执行带窗局部 sinc 重建, 并结合 Kaiser 窗函数与 Savitzky-Golay 滤波技术, 有效抑制了插值过程中的振铃效应与高频噪声. 相比于依赖特定物理机理的传统参数化方法, 该方法成功构建了覆盖从极紫外到太赫兹全波段的连续、平滑介电常数曲线, 具有更优的数据一致性, 并解决了在全波段任意频率点获取精确介电常数的难题, 适用于跨波段电磁仿真与器件设计. 为了验证本文重建模型的物理自洽性, 探讨了其关于 Kramers-Kronig 物理关系的一致性. 此外, 为了验证所构建介电常数计算模型的实用性与精确度, 将其应用于金属纳米粒子的局域表面等离子共振 (LSPR) 吸收与散射仿真, 并将结果与实验结果、Rakić 提出的 Lorentz-Drude 模型、Brendel-Bormann 模型进行了系统对比. 同时, 还结合表面等离子极化激元 (SPP) 的传播长度以及金属趋肤深度的计算, 对该模型进行了全面的性能验证. 结果表明, 本文构建的介电常数分析模型不仅能够更准确地预测 LSPR 共振峰位置与谱线形状, 且在 SPP 传播长度及金属趋肤深度的表征上均展现出高度的精确性与数据一致性. 这些结果进一步证明了本文方法在表面等离子器件与纳米光子器件设计中的有效性、优越性与物理可靠性.

关键词: 介电常数模型, sinc 信号重建公式, Kaiser 窗函数, Savitzky-Golay 滤波

DOI: 10.7498/aps.75.20260369

CSTR: 32037.14.aps.75.20260369

1 引言

金属材料的复介电常数 $\varepsilon(\omega) = \varepsilon_1(\omega) + i\varepsilon_2(\omega)$ 决定了金属对电磁波的反射、吸收和散射特性, 它是纳米光子与等离子器件设计与仿真计算的关键参数^[1,2]. 贵金属 (Au)、银 (Ag)、铜 (Cu) 和轻金属铝 (Al) 由于具有高自由电子密度和高等离子频率, 在紫外、可见光、近红外乃至红外和太赫兹波段均表现出强烈色散和显著损耗^[3], 因此被广泛应用于纳米粒子、超表面、纳米天线和传感器等光子结构设计^[4-9].

已有文献对同一金属材料给出的 $\varepsilon(\omega)$ 曲线常有较大差异, 这主要源于样品制备方式、测量方法和实验条件的差异, 例如材料是薄膜还是颗粒、多晶还是单晶, 使用椭圆偏振、反射、透射或干涉测量, 以及膜厚、表面粗糙度或样品温度等因素^[10]. 更关键的是, 很多公开数据仅覆盖可见光至近红外波段, 未能涵盖紫外到红外/太赫兹的宽频带, 这就难以满足跨波段电磁仿真和设计对连续、宽带 $\varepsilon(\omega)$ 的计算需求.

为了便于数值模拟 (如 FDTD, FEM, BEM), 研究常使用参数化模型来描述 $\varepsilon(\omega)$. Drude 模型^[11] 只考虑自由电子的响应, 在远红外或太赫兹

* 国家重点研发计划 (批准号: 2019YFA0405403) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: zhanggm@lzu.edu.cn

长波段能较好地反映金属的响应,然而在可见光到紫外区,价带电子带间的跃迁对介电函数影响显著,使得 Drude 模型明显偏离实验结果. Lorentz-Drude 模型^[12]通过同时考虑自由电子运动贡献和价带间电子跃迁(振子项),在可见到近红外区可以较好地拟合金属介电函数. 许多研究已采用该模型对 Au, Ag, Cu, Al 等进行拟合.

然而,这种参数化模型对振子数目、谐振频率、阻尼参数高度依赖,参数优化过程复杂^[13,14],且将其用于更宽频带或不同金属和样品上时,由于物理机制的不同,其通用性和可靠性明显不足^[15].

另一方面,在透明或弱吸收薄膜的光学常数测量中, Swanepoel 方法^[16–18]曾获得广泛应用. 该方法通过透射光谱干涉条纹的包络线推导薄膜的折射率、消光系数和厚度,对无机薄膜、半导体薄膜等非金属、弱吸收材料效果良好. 然而,对于吸收强、损耗大的金属薄膜或纳米结构而言,金属高吸收特性通常会使得干涉条纹严重衰减甚至消失,导致 Swanepoel 方法难以取得可靠结果. 即使在少数低吸收区波段获得有限数据,也仅能得到离散波长下的光学常数,无法生成跨紫外到红外乃至太赫兹波段的连续 $\varepsilon(\omega)$ 分布曲线.

鉴于上述挑战,本研究以 Au, Ag, Cu, Al 四种金属为研究对象,整合不同文献中的实验测量数据^[19],构建了一个覆盖紫外、可见、近红外、红外及太赫兹波段的离散 $\varepsilon(\omega)$ 数据集. 同时提出一种非参数重建方法,从异构、离散和多来源数据中恢复出平滑、连续并满足物理条件的 $\varepsilon(\omega)$ 曲线,对其

Kramers-Kronig 关系的一致性进行了分析. 为了验证所得 $\varepsilon(\omega)$ 曲线的工程适用性与仿真精度,以金属纳米粒子的局域表面等离子共振(localized surface plasmon resonance, LSPR)吸收和散射特性为例,将本文模型与 Rakić等^[20]提出的 Lorentz-Drude (Rakić-LD) 模型、Brendel-Bormann (Rakić-BB) 模型进行了系统对比,并与文献^[21]中的实验数据进行了对比验证,发现本文模型在预测共振波长及谱线形状方面具有更高的精确度. 此外,通过对表面等离子极化激元(surface plasmon polariton, SPP)传播长度及金属趋肤深度的性能验证,证明了该方法在表征金属本征电磁响应方面的有效性和可靠性. 本文提出的非参数化建模方法克服了传统参数化模型及测量方法在全波段通用性与外推性上的不足,为金属纳米光子、等离子激元及红外/太赫兹器件设计^[22,23]建立了一条通用、可复现且工程导向的“材料-仿真-器件”路径.

2 方法

2.1 数据集选择与预处理

为获取 EUV-THz 全波段连续可靠的介电常数,本文基于 refractiveindex.info^[19]数据库,综合选取了 Au, Ag, Cu 和 Al 四种金属的多个数据集进行拼接重建. 数据集选取准则包括: 1) 波段覆盖充分且相邻段真实交叠; 2) 测量/反演方法可靠,且交叠区趋势符合权威模型或第一性原理(如 Drude, DFT); 3) 谱形物理自洽,便于参数化或数

表 1 贵金属数据集选择

Table 1. Choice of selected noble metal datasets.

金属	数据集	波段/ μm	选用理由
Au	Windt ^[24]	0.0024—0.0176	EUV端锚点; 反射/透射联合测量
	Werner ^[25]	0.0176—0.20	VUV段与REELS/DFT一致
	Babar ^[26]	0.20—0.30	与KK/Drude一致, 过渡平滑
	Olmon (TS) ^[10]	0.30—24.9	薄膜(椭圆偏+FTIR), 谱形稳定
	Ordal ^[27,28]	24.9—286	FIR/THz段符合Drude 行为
Ag	Windt	0.0024—0.122	EUV端锚点; 反射/透射联合测量
	Werner	0.122—0.188	高能端参考; 与REELS/DFT一致
	Johnson ^[29]	0.188—1.94	可见-近红外经典集; 谱形平滑
	Yang ^[30]	1.94—24.9	中-远红外(椭圆偏+FTIR), 覆盖完整
Cu	Brimhal ^[31]	0.0101—0.039	软X射线端锚点
	Werner	0.039—0.188	VUV段与REELS/DFT一致
	Johnson	0.188—1.61	可见-近红外标准集, KK良好
	Ordal	2.00—55.6	中远红外-THz段与Drude-Lorentz一致
Al	Rakić (1995)	0.000123—200	Lorentz-Drude 参数化反演数据; 覆盖宽、KK自洽 本文对其表格化 ε 做拟合, 不重估LD参数

据驱动拟合. 选取数据集后, 为确保数据平滑性, 严格计算交叠区不同数据点之间的数值偏差, 并强制选取复介电常数 (同时包含实部与虚部) 欧氏距离最小, 且一阶导数趋势最一致的数据点. 最终数据集与波段选取结果如表 1 所列, 并在图 1 中展示了拼接后的 ε_1 , ε_2 曲线.

考虑到原始采样分布在短波段密集、长波段稀疏, 直接在 λ 轴插值容易导致过/欠拟合与数值不稳, 本文改在对数波长域统一处理. 设

$$x \triangleq \log_{10} \lambda, \quad (1)$$

分别对 $\varepsilon_1(x)$, $\varepsilon_2(x)$ 进行自然边界三次样条插值, 记 $s_r(x) \approx \varepsilon_1(x)$, $s_i(x) \approx \varepsilon_2(x)$. 随后于区间 $[x_{\min}, x_{\max}]$ 构造等距网格

$$x_m = x_{\min} + mT, \quad m = 0, \dots, M-1, \quad (2)$$

其中, T 为网格间距. 并生成等距样本

$$y_r[m] \triangleq s_r(x_m), \quad y_i[m] \triangleq s_i(x_m). \quad (3)$$

上述“对数轴样条、等距重采样”既提升了跨数量级的平滑性, 又满足后续 sinc 重建对等距自变量的要求.

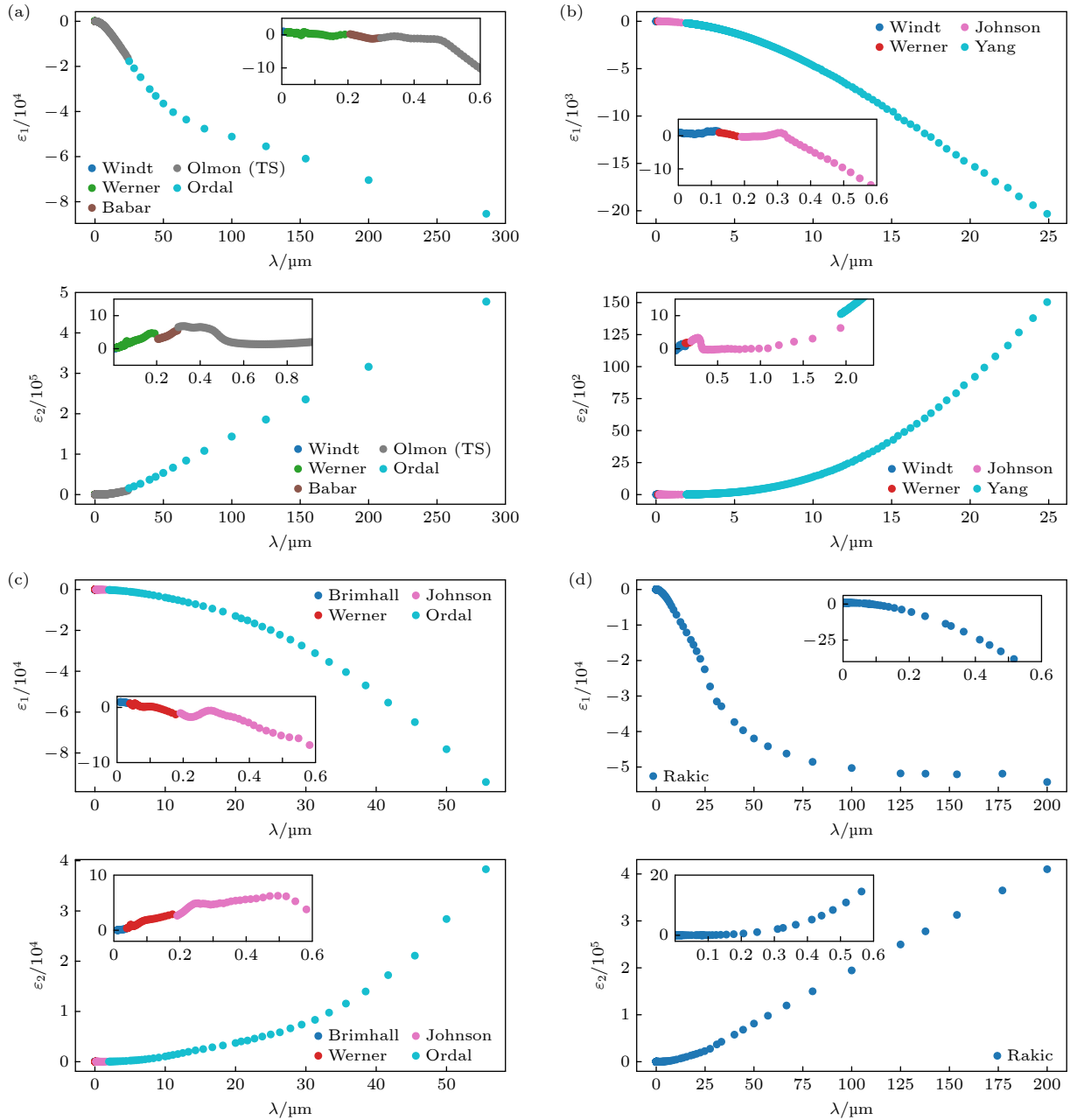


图 1 用于 ε 曲线重建的介电常数测量数据集 (a) Au; (b) Ag; (c) Cu; (d) Al

Fig. 1. Dielectric constant datasets for curve reconstruction: (a) Au; (b) Ag; (c) Cu; (d) Al.

2.2 奈奎斯特抽样与带窗 sinc 信号重建分析

设重建自变量为 x , 等距栅点与步长为 $x_m = x_{\min} + mT$, $T = 1/f_s$, 样本 $y[m] \in \{\varepsilon_1, \varepsilon_2\}$. 奈奎斯特抽样定理^[32-35]表明: 若连续信号的频谱带限于带宽 B , 当抽样频率 $f_s \geq 2B$ 时可由理想 sinc 核函数加权无失真重建:

$$y(x) = \sum_{m=-\infty}^{\infty} y[m] \operatorname{sinc}\left(\frac{x - x_m}{T}\right), \quad \operatorname{sinc}(u) = \frac{\sin(\pi u)}{\pi u}. \quad (4)$$

实际数据非严格带限且核函数需截断, 为抑制振铃与边界伪影, 采用 Kaiser 窗^[36,37]对重建数据进行局部化. 令 $m_0 = \operatorname{round}((x - x_0)/T)$, 仅在邻域 $[m_0 - L, m_0 + L]$ 内使用长度 $2L + 1$ 的加窗核函数:

$$w[k] = \frac{I_0[\beta \sqrt{1 - (k/L)^2}]}{I_0(\beta)}, \quad k = -L, \dots, L, \quad (5)$$

其中 $I_0(\cdot)$ 为零阶第一类修正贝塞尔函数, β 是 Kaiser 窗函数的形状参数, 用于调节 Kaiser 窗从矩形窗到类似高斯窗的过渡. 带窗局部 sinc 估计写作:

$$\hat{y}(x) = \frac{\sum_{k=-L}^L y[m_0 + k] \operatorname{sinc}\left(\frac{x - x_{m_0+k}}{T}\right) w[k]}{\sum_{k=-L}^L \operatorname{sinc}\left(\frac{x - x_{m_0+k}}{T}\right) w[k]}, \quad (6)$$

分母的归一化使 x 近采样点时增益约为 1. Kaiser 窗的窗长 L 与形状参数 β 通过二维网格敏感性分析优化确定. 以 $\varepsilon_1, \varepsilon_2$ 的均方根误差 (RMSE) 为评价指标, 遍历 $L \in \{10, 11, \dots, 36\}$, $\beta \in \{1, 2, \dots, 6\}$, 最终选取最优参数 $L = 28$, $\beta = 3$. 为了抑制 (6) 式重建过程中出现的局部振铃振荡, 并同时平滑原始数据中残留的高频随机噪声, 对重建序列施行 Savitzky-Golay (SG)^[38] 滤波处理. 在对称窗长 $W = 2M + 1$ 内, 对索引偏移 $m \in [-M, M]$ 的样本做 p 阶多项式最小二乘拟合:

$$\min_{\{a_r\}_{r=0}^p} \sum_{m=-M}^M \left(y[n+m] - \sum_{r=0}^p a_r m^r \right)^2, \quad \hat{y}[n] = a_0. \quad (7)$$

这种处理方式在物理上可以看作是将数据通过了一个中心对称的有限冲激响应 (FIR) 滤波器^[39,40]. 由于其对称性, 该系统具有线性相位特性, 且相频曲线的截距为零. 该式通过保留至 p 阶的多项式分

量, 在提取低频结构特征的同时, 能有效滤除高频随机扰动. 本文选取多项式阶数 p 为 3. W 的取值依据基于残差自相关分析的参数优化准则得到^[41]. 根据信号处理理论, 当平滑参数达到最优时, 滤波提取的残差序列应具备高斯白噪声的统计特性, 即残差的序列自相关性趋于最小. 本文通过迭代评估不同窗长下残差的一阶自相关系数, 实现了 W 的客观寻优, 在有效滤除高频随机噪声的同时, 最大限度地保留了原始数据的真实波动特征.

3 结果与讨论

3.1 sinc 重建公式的应用与优化分析

如前所述, 为了将 sinc 重建公式有效应用于贵金属介电常数的重建过程, 需要依次经过三次样条插值、Kaiser 加窗以及 SG 滤波等步骤. 图 2 展示了基于上述步骤得到的金 (Au) 在不同处理阶段下的介电常数曲线内部特征图像, 包括: 图 2(a) 纯 sinc 重建结果, 图 2(b) 经过 Kaiser 加窗后的结果, 及图 2(c) 经过 SG 滤波优化后的结果.

从图 2 可以看出, 经过 Kaiser 加窗与 SG 滤波后的介电常数分布曲线在平滑性与实验数据一致性方面均有显著提升, 能够更加准确地反映介电常数在未测量波长区间内的变化趋势. 优化后的 sinc 重建公式表现出优异的普适能力, 不仅能够准确地实现金的介电常数重建, 也可推广至其他金属及非金属材料体系. 本文主要阐述该优化重建方法的原理与效果, 因此仅以金属金 (Au) 为例进行展示.

3.2 全波段介电常数重建曲线分析

为直观展示本文方法在波长覆盖范围上的广泛性, 绘制了金属 Au, Ag, Cu 和 Al 的 sinc 重建介电常数随波长变化的完整分布曲线, 如图 3 所示. 该图横轴采用对数坐标, 从而更加直观地展示模型在全波段的物理演变趋势.

从图 3 可以看出, 重建曲线在横轴波长 λ 上实现了极大的跨度, 从 10^{-4} m (属于射线/极紫外波段) 一直延伸至 $10^2 - 10^3$ m (属于远红外/微波波段). 这种跨越覆盖 7 个数量级的范围, 意味着该方法能够无缝衔接金属在不同频域的特征响应.

此外, 图 3 展示了贵金属 (Au, Ag, Cu) 以及轻金属 (Al) 的重建结果. 可以看出, 尽管这些金属的能带结构 (如带间跃迁波长点) 差异巨大, 经过

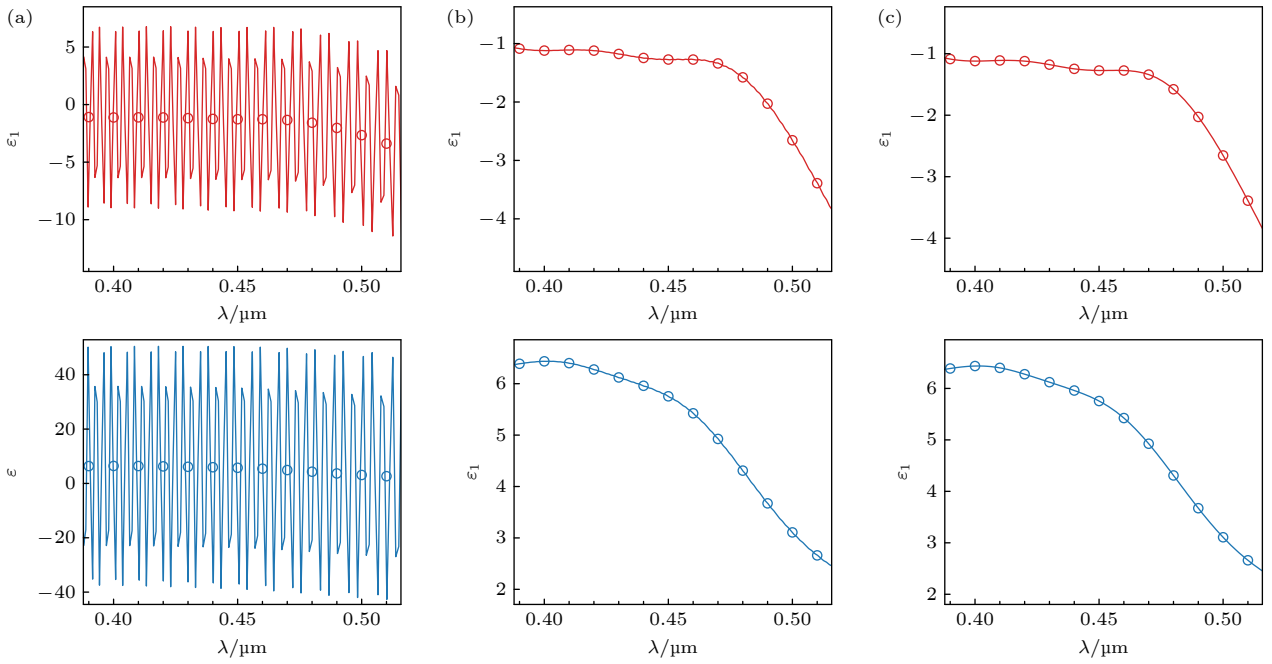


图 2 Au 的介电常数局部分布图像 (a) 纯 sinc 重建; (b) 经过 Kaiser 加窗; (c) 经过 SG 滤波

Fig. 2. Internal views of the dielectric constant of Au: (a) Pure sinc reconstruction; (b) Kaiser windowing; (c) SG filtering.

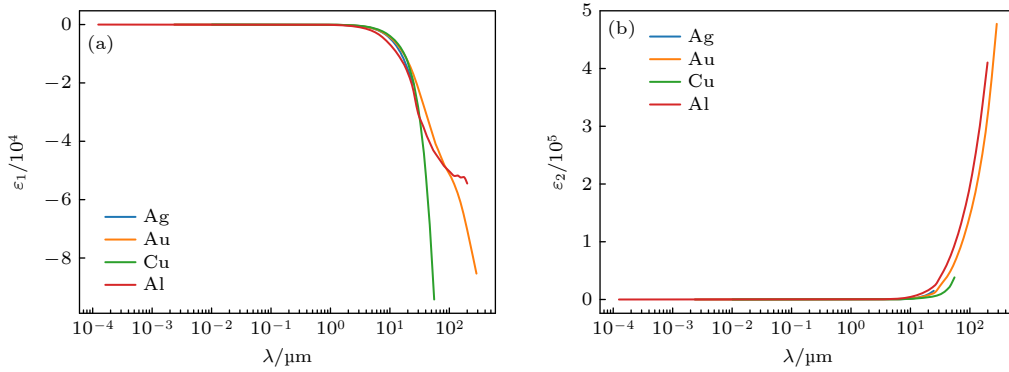


图 3 对 Au, Ag, Cu, Al 进行 sinc 重建的完整曲线

Fig. 3. Complete reconstructed dielectric spectra of Au, Ag, Cu, and Al by using the sinc reconstruction method.

Kaiser 加窗与 SG 滤波后 sinc 重建方法依然能够平滑且准确地捕捉到各自介电常数随波长变化的特征走势. 优化后的 sinc 重建公式表现出优异的普适能力, 不仅能够准确地实现金的介电常数重建, 也可推广至其他金属及非金属材料体系.

3.3 重建曲线的精度对比分析

为了验证本文模型的有效性, 选取当前学界公认的几种具有代表性的贵金属介电常数模型进行对比分析, 包括 Rakić 等^[20]提出的 Lorentz-Drude 模型、Brendel-Bormann 模型以及 Werner 等^[25]提出的基于第一性原理的 DFT 模型. 我们从 refractiveindex.info 数据库中获取公开的模型数据, 并

与基于奈奎斯特抽样定理的 sinc 重建模型结果进行对比. 图 4 展示了在 0—1.0 μm 波段内, 各模型分析结果与实验测量数据之间的对比.

为了保证比较的公平性与一致性, 在各模型与实验数据的有效交集波段内, 将模型曲线插值至实验数据对应波长处进行逐点对比, 并分别计算实部 (ε_1) 与虚部 (ε_2) 的 RMSE. 此外, 为了更准确地衡量模型在不同波段区间的拟合性能, 同时计算了平均绝对误差 (MAE). 与 RMSE 相比, MAE 对孤立的异常偏差不敏感, 更能反映整体偏移的平均水平. 本文将实验波段内最短的 35% 区间定义为短波段, 最长的 35% 区间定义为长波段, 并分别计算了对应的 MAE 值, 以定量评估各模型在谱端

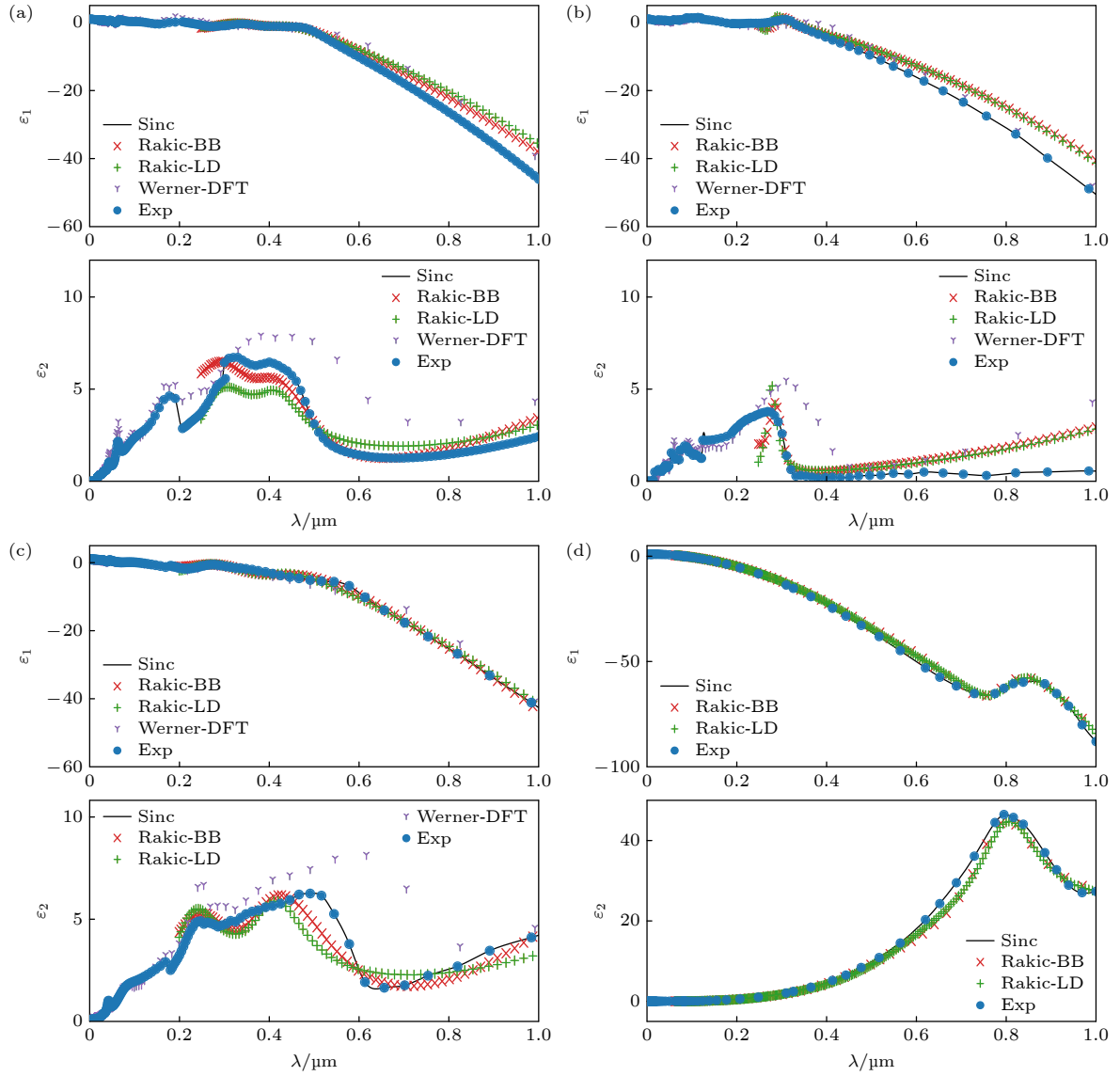


图 4 sinc 模型与现有模型的对比 (a) Au; (b) Ag; (c) Cu; (d) Al

Fig. 4. Comparison of dielectric functions obtained by sinc reconstruction and existing models: (a) Au; (b) Ag; (c) Cu; (d) Al.

区域的拟合表现. 各项误差的定量分析结果如表 2 所列.

从表 2 可以看出, 在数值指标上, sinc 模型表现出了非参数模型特有的精度优势. 首先分析 RMSE 可以看出, 以 Au 为例, sinc 模型的 RMSE(ϵ_1) 仅为 0.4029, 而传统 Rakić-BB 模型则高达 109.3, 两者相差近 270 倍. 在 Ag, Cu, Al 等金属上, sinc 模型同样保持了比参考模型低 2—3 个数量级的误差水平. 其次观察 MAE(短端) 与 MAE(长端) 指标, sinc 模型在复杂多变的端点区域依然能维持极低偏差 (如 Al 的短端 MAE 达到 10^{-6} 量级). 这充分证明了通过 Kaiser 窗加权与 S 滤波处理后, sinc 重建能够有效解决传统方法在数据边界处易出现的振铃效应的问题.

3.4 sinc 重建模型与 Kramers-Kronig 关系的一致性分析

为了评估重建模型的物理自洽性, 本文进行了 sinc 模型与 Kramers-Kronig (K-K) 关系的一致性分析. K-K 关系^[42]是线性响应理论中的基本物理准则, 它要求复介电常数 $\epsilon(\omega) = \epsilon_1(\omega) + i\epsilon_2(\omega)$ 的实部与虚部必须满足严格的积分映射关系. 具体的积分方程表达如下^[42]:

$$\epsilon_1(\omega) - 1 = \frac{2}{\pi} \mathcal{P} \int_0^\infty \frac{\omega' \epsilon_2(\omega')}{\omega'^2 - \omega^2} d\omega', \quad (8)$$

式中, ω 为角频率, $\mathcal{P}$ 表示柯西主值积分. 由于本文的非参数化建模方法直接建立在经过实验测量的离散物理数据之上, 而这些真实物理数据天然

表 2 各模型拟合误差对比分析
Table 2. Error comparison analysis of different models.

金属	模型	波段/ μm	RMSE(ε_1)	RMSE(ε_2)	MAE(短端)	MAE(长端)
Au	sinc	0.0024—286	0.4029	1.424	3.39×10^{-4}	0.4999
	Rakić-BB	0.248—6.20	109.3	6.264	7.772	161.9
	Rakić-LD	0.248—6.20	126.0	10.29	9.376	188.7
	Werner-DFT	0.0176—2.48	5.313	10.73	0.3211	18.04
Ag	sinc	0.0024—286	0.4753	0.1761	5.504×10^{-2}	0.2505
	Rakić-BB	0.248—12.4	330.4	38.29	27.52	444.5
	Rakić-LD	0.248—12.4	284.0	43.68	23.76	382.2
	Werner-DFT	0.0176—2.48	9.009	21.36	0.4528	36.41
Cu	sinc	0.0024—286	0.7431	0.3702	5.20×10^{-5}	0.4487
	Rakić-BB	0.207—12.4	54.48	26.23	0.6776	57.81
	Rakić-LD	0.207—12.4	66.94	17.67	0.7220	62.52
	Werner-DFT	0.0176—2.48	4.553	3.446	9.11×10^{-2}	4.851
Al	sinc	0.0024—286	0.5699	2.669	8.54×10^{-6}	1.027
	Rakić-BB	0.062—200	927.1	2559	0.3509	2890
	Rakić-LD	0.062—200	1010	2984	0.3323	3264

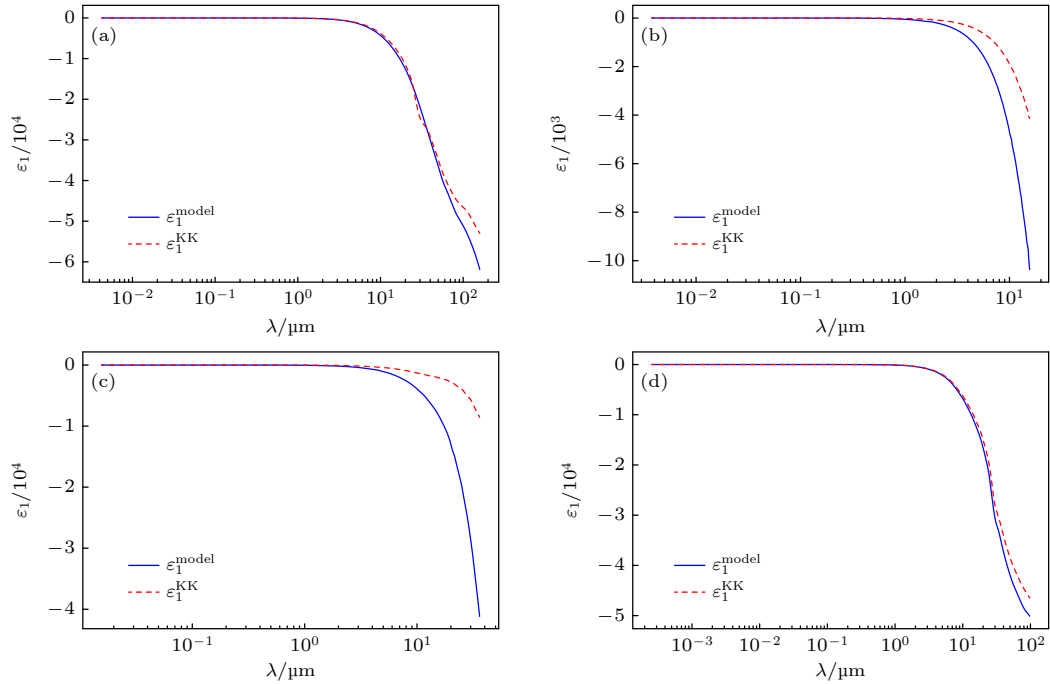


图 5 Kramers-Kronig 关系验证结果 (a) Au; (b) Ag; (c) Cu; (d) Al

Fig. 5. Kramers-Kronig relation verification results: (a) Au; (b) Ag; (c) Cu; (d) Al.

满足 K-K 关系, 因此, 本文采用的高保真度局部 sinc 重建及滤波策略, 在极大程度上继承了原始实验数据的物理一致性.

为了定量分析, 本文基于 (8) 式, 利用模型重建得到的虚部序列 $\varepsilon_2(\omega)$ 数值反推出对应的实部序列, 记为 $\varepsilon_1^{\text{KK}}(\omega)$, 并将其与模型直接重构的实部序列 $\varepsilon_1^{\text{model}}(\omega)$ 进行了交叉对比. 四种金属的 K-K 关系验证结果如图 5 所示.

对比图 5 中的结果可见, 对于 Au 和 Al, 通过虚部积分计算得到的实部 $\varepsilon_1^{\text{KK}}(\omega)$ 与模型重建的实部 $\varepsilon_1^{\text{model}}(\omega)$ 在主要波段内展现出高度的吻合, 而对于 Ag 和 Cu 而言, $\varepsilon_1^{\text{KK}}(\omega)$ 与 $\varepsilon_1^{\text{model}}(\omega)$ 的偏差较大. 通过比较图示结果和理论分析可知, 两者之间存在的偏差并非源于非参数化插值方法的数学缺陷, 而是由 K-K 数值积分的有限带宽截断效应所致. 理论上, 严格的 K-K 积分要求频率域覆盖从零

到无穷大 ($0 \rightarrow \infty$). 然而, 任何真实的实验数据集均受限于有限的测量谱宽. 在有限的频率区间内进行数值积分, 不可避免地会缺失带外振子强度的贡献, 从而引起边缘区域的失真.

上述验证结果充分表明, 尽管本文提出的非参数化模型在数学形式上未像传统的 Lorentz-Drude 等模型那样将 K-K 关系作为强制解析约束, 但凭借对离散真实数据的忠实还原, Au 和 Al 的重构结果在有效光谱范围内依然良好地保持了 K-K 物理一致性, 而尽管 Ag 和 Cu 的重构结果在某些波段内存在偏差, 但随着未来测量范围的扩大, 这一偏差有望进一步减小. 这一特性进一步保证了本文重构介电常数方法在等离激元与微纳光子器件设计仿真中的可靠性与严谨性.

4 sinc 重建模型在 LSPR 仿真中的性能验证

4.1 介电常数模型对比

选取文献 [21] 中基于修正 Drude 模型得到的 $\varepsilon(\lambda)$ 作为对照模型, 如图 6(a) 所示. 该模型仅考虑

束缚电子的带间跃迁贡献. 同时, 文献中利用该 ε 模型, 通过 Mie 理论计算 Ag 纳米球的吸收光谱, 并将仿真结果与实验结果进行对比.

图 6(b) 展示了本文基于 sinc 重建模型得到的介电常数曲线, 图 6(c) 和图 6(d) 汇总了多组经典实验数据 (包括 Johnson, Hagemann, Babar, Werner, Windt 等).

4.2 基于 Mie 理论的 LSPR 仿真

文献 [21] 以半径 $R = 30$ nm 的 Ag 纳米球在空气 ($n = 1.0$) 中为例, 利用经典 Mie 理论与图 6(a) 中的 ε , 计算得到归一化吸收光谱, 即图 7 的红色曲线. 本研究同理, 将 sinc 模型重建的 ε 代入文献所用 Mie 理论, 得出半径 $R = 30$ nm 的 Ag 纳米球在空气 ($n = 1.0$) 中的吸收谱, 即图中蓝色曲线. 文献列出实验曲线为图中黑色曲线. 结果显示, 修正的 Drude 模型仿真出的 LSPR 吸收峰与实验峰相比有明显偏移. 本文 sinc 模型重建 ε 的仿真峰位置约为 $\lambda \approx 410$ nm, 与修正的 Drude 模型相比, sinc 模型与实验共振波长的差距更小, 且谱线形状

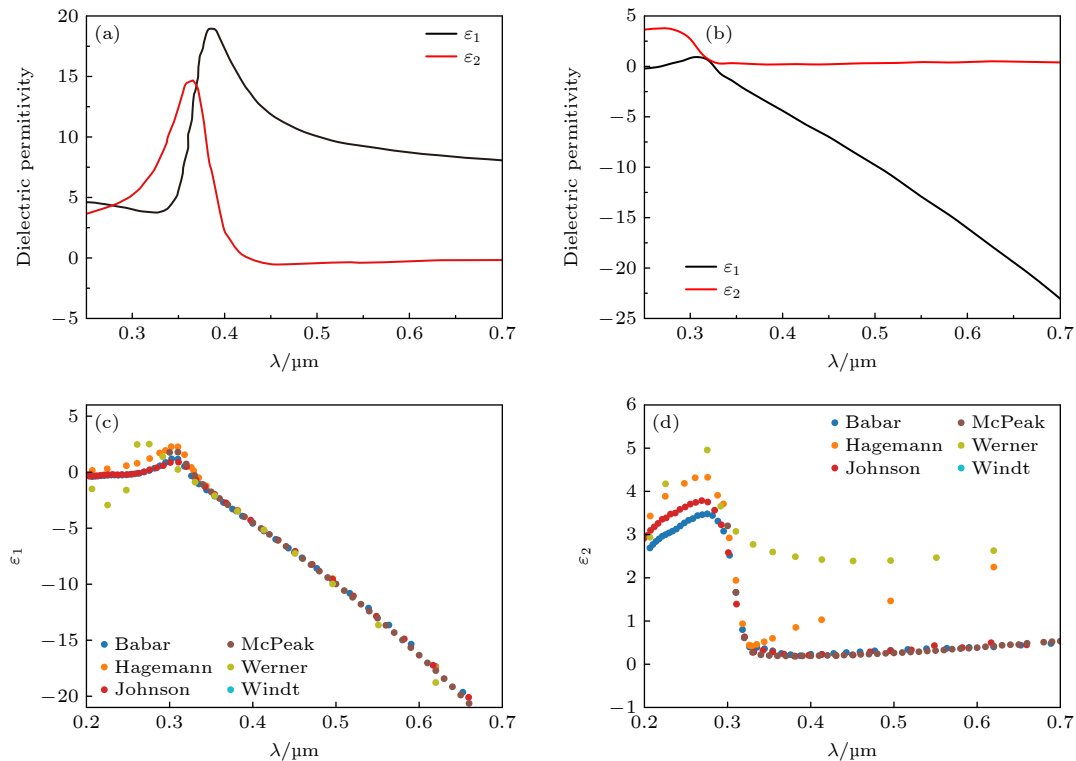


图 6 Ag 介电常数曲线 (a) 文献 [21] 中 Ag 的介电常数分布 (基于修正的 Drude 模型); (b) sinc 重建模型中 Ag 的介电常数分布; (c) 实验测量的 Ag 的介电常数实部分布; (d) 实验测量的 Ag 的介电常数虚部分布

Fig. 6. Dielectric function of Ag: (a) Real and imaginary parts of permittivity reproduced from Ref.[21] by using a modified Drude model; (b) reconstructed by sinc model; (c) experimental measurements of real part of permittivity; (d) experimental measurements of imaginary part of permittivity.

更趋一致. 如图 7(a) 所示, 在 Ag 的紫外-可见光波段, 传统的 Drude 模型在拟合带间跃迁附近的特征时, 往往由于预设振子方程的限制, 无法完美匹配实验数据的精细结构. 这种介电常数的微小偏差在 LSPR 仿真中被进一步放大.

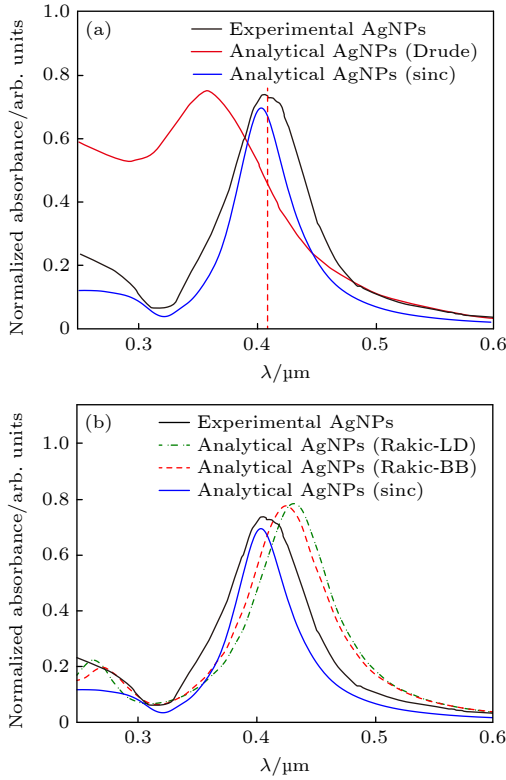


图 7 纳米球归一化吸收光谱对比 (a) 基于文献 [21] 的对比; (b) 基于不同介电常数模型的对比

Fig. 7. Comparison of normalized absorption spectra of Ag nanospheres: (a) Comparison based on Ref. [21]; (b) comparison based on different dielectric constant models.

为了进一步验证非参数 sinc 重建模型在纳米光子器件仿真中的优越性, 本文对比了主流的参数化模型, 包括 Rakić-LD 模型与 Rakić-BB 模型. 如图 7(b) 所示, 当使用 Mie 理论计算半径为 30 nm 的银纳米球吸收谱时, 基于 sinc 模型的仿真峰位与实验测量值最为接近, 产生了约 7 nm 的偏移. 相比之下, Rakić-BB 模型和 Rakić-LD 模型的共振峰分别产生了约 15 nm 和 22 nm 的偏移, 且峰值强度也存在一定失真. 这证明了本文提出的非参数化方法由于忠实于原始抽样数据, 在处理对介电常数高度敏感的表面等离激元共振仿真时, 具有比传统参数化模型更高的预测精度和工程参考价值.

4.3 误差分析与物理解释

在准静态近似下, LSPR 共振条件满足 $\text{Re}[\varepsilon(\omega)] \approx -2\varepsilon_m$ [1,43], 其中 ε_m 为介质的介电常数. 因此即便是介电函数的微小偏差, 也会导致共振波长显著偏移 [44]. Drude 模型中的参数假设与拟合误差, 在带间跃迁区尤其明显 [3]; 而数据驱动重建 $\varepsilon(\lambda)$ 则能更真实地反映材料的物理响应, 减少了系统偏差 [45]. 由此, 本文方法在实际纳米光子器件设计与仿真中更为有效.

5 sinc 重建模型在 SPP 传播长度和金属趋肤深度仿真中的性能验证

为进一步验证本文提出的非参数介电常数模型在全波段的工程适用性, 本文选取仿真波段最长的金的 sinc 重建模型, 将其应用于 SPP 传播长度以及金属电磁场趋肤深度的仿真计算中, 并与 Olmon, Ordal 等的介电常数实验数据以及 Rakić-LD 模型、Rakić-BB 模型计算所得的结果进行对比分析. 在金属-介质 (Au/Air) 界面上, SPP 的传播长度 L_{spp} 决定了等离激元波导的损耗特性 [46], 其计算公式为

$$L_{\text{spp}} = \frac{1}{2\text{Im}(k_{\text{spp}})}, \quad (9)$$

其中, $k_{\text{spp}} = k_0 \sqrt{\frac{\varepsilon_m \varepsilon_d}{\varepsilon_m + \varepsilon_d}}$ 为 SPP 的复波矢, k_0 为真空中的自由空间波矢, ε_m 和 ε_d 分别为金属和周围介质 (空气, $\varepsilon_d = 1$) 的介电常数.

此外, 在太赫兹等长波波段, 电磁波在金属内部的穿透特性通常用趋肤深度 δ_{field} 来衡量 [1], 其定义为

$$\delta_{\text{field}} = \frac{\lambda}{2\pi k}, \quad (10)$$

其中, λ 为真空中波长, $k = \text{Im}(\sqrt{\varepsilon_m})$ 为金属复折射率的消光系数.

仿真得到的 SPP 传播长度与金属趋肤深度结果如图 8 所示. 图 8(a) 展示了金/空气 (Au/Air) 界面上 SPP 传播长度 L_{spp} 在近/中红外波段的演化规律. SPP 的传播长度直接决定了等离激元波导器件的能量损耗特性, 其数值对金属复介电常数的虚部极为敏感. 从图中可以观察到, sinc 模型能较好地符合 Olmon 等的实验基准数据, 而 Rakić-LD 模型和 Rakić-BB 模型计算出的 L_{spp} 均严重偏

低,且误差随波长增加呈放大趋势.这种偏差的物理根源在于:传统多振子模型在进行全波段宽频拟合时,为了兼顾紫外/可见光区的带间跃迁特征,往往牺牲了红外区带内自由电子吸收的拟合精度,导致长波段的消光系数被高估,进而计算出过大的传播损耗.相比之下,本文提出的 sinc 模型在所示频段内与实验数据的偏差显著小于传统模型.

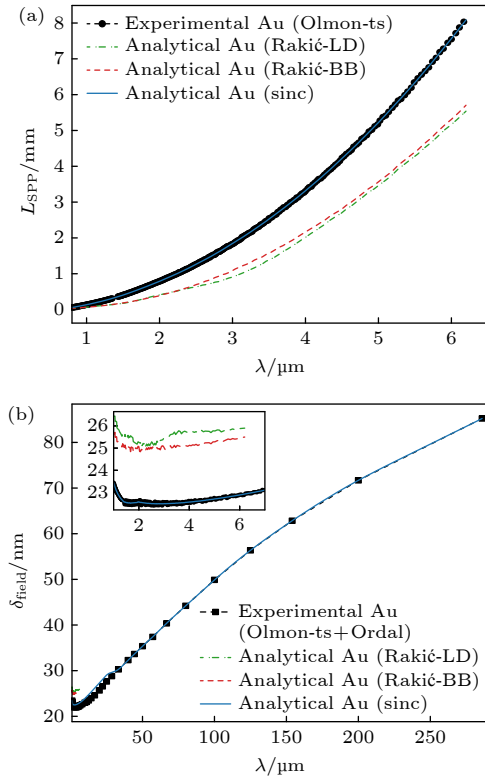


图 8 (a) 不同模型的 SPP 传播长度对比; (b) 不同模型的趋肤深度对比

Fig. 8. (a) Comparison of SPP propagation lengths based on different models; (b) comparison of skin depths based on different models.

为了验证模型在长波区域的泛化能力,图 8(b)进一步计算了金在太赫兹波段的电磁场趋肤深度 δ_{field} . 趋肤深度反映了太赫兹波在金属表面的穿透能力,是太赫兹超材料和天线设计的关键参数.如图 8(b) 所示,在极宽太赫兹频段内,基于 sinc 模型计算的趋肤深度曲线与 Olmon, Ordal 等的实验测量值高度吻合.太赫兹频段的介电常数绝对值极大,对插值算法的稳定性提出了严苛要求. sinc 模型不仅有效避免了数值溢出与发散问题,还精准捕捉到了趋肤深度随波长非线性缓慢增长的物理趋势.

综合上述 SPP 传播长度与金属趋肤深度的仿真对比可知,本文基于奈奎斯特抽样定理和信号重

建公式构建的非参数介电常数模型,突破了传统物理模型在“全频段”与“高精度”之间难以兼顾的瓶颈,具备全波段器件仿真的工程应用价值.

6 结 论

本文构建了一套包含 Au, Ag, Cu 和 Al 四种金属的介电函数数据集,覆盖紫外、可见、近红外、红外到太赫兹波段.基于该数据集,提出了一种基于奈奎斯特采样定理的局部 sinc 重建(结合 Kaiser 加窗与 SG 滤波处理)的介电常数重建方法,与传统参数化模型相比,该方法具有优越的计算精度与更好的通用性.此外,数值积分交叉验证表明,在实验数据的波段较为宽泛的情况下,重构结果在有效光谱范围内高度契合 Kramers-Kronig 关系的物理自洽要求.为了验证所得介电函数模型的实际适用性,将其应用于金属纳米粒子的 LSPR 吸收仿真,并与传统的 Rakić-LD 和 Rakić-BB 模型进行了系统对比.同时,通过评估 SPP 的传播长度及金属的趋肤深度,对该模型进行了综合性能验证.仿真结果显示,该模型不仅能够更为准确地预测 LSPR 共振峰波长、谱线宽度以及吸收强度,而且在表征 SPP 传播长度和金属趋肤深度方面也展现出高度的准确性与数据一致性,与已报道的实验和文献结果高度一致.综上,本文工作实现了从材料光学常数构建到器件光学性能预测的闭环流程,为金属纳米光子、等离子激元、红外/太赫兹器件设计提供了规范、可复现、物理自洽且仿真效果良好的 $\varepsilon(\omega)$ 数据基础和系统建模方案.

参考文献

- [1] Maier S A 2007 *Plasmonics: Fundamentals and Applications* (New York: Springer) pp5–88
- [2] Novotny L, Hecht B 2012 *Principles of Nano-Optics* (Cambridge: Cambridge University Press) pp369–413
- [3] Khurgin J B 2015 *Nat. Nanotechnol.* **10** 2
- [4] Naik G V, Shalae V M, Boltasseva A 2013 *Adv. Mater.* **25** 3264
- [5] Knight M W, King N S, Liu L, Everitt H O, Nordlander P, Halas N J 2014 *ACS Nano* **8** 834
- [6] Anker J N, Hall W P, Lyandres O, Shah N C, Zhao J, Van Duyne R P 2008 *Nat. Mater.* **7** 442
- [7] Yu N, Capasso F 2014 *Nat. Mater.* **13** 139
- [8] Biagioni P, Huang J S, Hecht B 2012 *Rep. Prog. Phys.* **75** 024402
- [9] Willets K A, Van Duyne R P 2007 *Annu. Rev. Phys. Chem.* **58** 267
- [10] Olmon R L, Slovick B, Johnson T W, Shelton D, Oh S H,

- Boreman G D, Raschke M B 2012 *Phys. Rev. B* **86** 235147
- [11] Bade W L 1957 *J. Chem. Phys.* **27** 1280
- [12] Sehmi H S, Langbein W, Muljarov E A 2017 *Phys. Rev. B* **95** 115444
- [13] Li J M 2014 *M.S. Thesis* (Lanzhou: Lanzhou University) (in Chinese) [李建明 2014 硕士学位论文 (兰州: 兰州大学)]
- [14] Zhao H 2015 *M.S. Thesis* (Lanzhou: Lanzhou University) (in Chinese) [赵海 2015 硕士学位论文 (兰州: 兰州大学)]
- [15] Lee A, Wu S, Yim J E, Zhao B, Sheldon M T 2024 *ACS Nano* **18** 19077
- [16] Swanepoel R 1983 *J. Phys. E: Sci. Instrum.* **16** 1214
- [17] Fang Y, Jayasuriya D, Furniss D, Tang Z Q, Sojka Ł, Markos C, Sujecki S, Seddon A B, Benson T M 2017 *Opt. Quantum Electron.* **49** 237
- [18] Sánchez-González J, Díaz-Parralejo A, Ortiz A L, Guiberteau F 2006 *Appl. Surf. Sci.* **252** 6013
- [19] Polyanskiy M N 2024 *Sci. Data* **11** 94
- [20] Rakić A D, Djurišić A B, Elazar J M, Majewski M L 1998 *Appl. Opt.* **37** 5271
- [21] Alzoubi F Y, Ahmad A A, Aljarrah I A, Migdadi A B, Al-Bataineh Q M 2023 *J. Mater. Sci.: Mater. Electron.* **34** 2128
- [22] Jing J Y, Liu K, Wu Z Y, Liu Y M, Jiang J F, Xu T H, Yan W C, Xiong Y Y, Zhan X H, Xiao L, Liu J C, Liu T G 2023 *Acta Phys. Sin.* **72** 214206 (in Chinese) [井建迎, 刘琨, 吴张羿, 刘玥萌, 江俊峰, 徐天华, 晏伟铤, 熊艺扬, 战晓寒, 肖璐, 刘津畅, 刘铁根 2023 物理学报 **72** 214206]
- [23] Li K, Sun J, Du Z F, Qian F S, Tang P H, Mei Y, Xu C, Yan Q, Liu M, Li L F, Guo W L 2023 *Acta Phys. Sin.* **72** 038101 (in Chinese) [李凯, 孙捷, 杜在发, 钱峰松, 唐鹏昊, 梅宇, 徐晨, 严群, 柳鸣, 李龙飞, 郭伟玲 2023 物理学报 **72** 038101]
- [24] Windt D L, Cash W C Jr, Scott M, Arendt P, Newnam B, Fisher R F, Swartzlander A B 1988 *Appl. Opt.* **27** 246
- [25] Werner W S M, Glantschnig K, Ambrosch-Draxl C 2009 *J. Phys. Chem. Ref. Data* **38** 1013
- [26] Babar S, Weaver J H 2015 *Appl. Opt.* **54** 477
- [27] Ordal M A, Bell R J, Alexander R W Jr, Long L L, Querry M R 1985 *Appl. Opt.* **24** 4493
- [28] Ordal M A, Long L L, Bell R J, Bell S E, Bell R R, Alexander R W Jr, Ward C A 1983 *Appl. Opt.* **22** 1099
- [29] Johnson P B, Christy R W 1972 *Phys. Rev. B* **6** 4370
- [30] Yang H U, D'Archangel J, Sundheimer M L, Tucker E, Boreman G D, Raschke M B 2015 *Phys. Rev. B* **91** 235137
- [31] Brinshall N, Herrick N, Allred D D, Turley R S, Ware M, Peatross J 2009 *Opt. Express* **17** 23873
- [32] Shannon C E 1949 *Proc. IRE* **37** 10
- [33] Nyquist H 1928 *Trans. Am. Inst. Electr. Eng.* **47** 617
- [34] Unser M 2000 *Proc. IEEE* **88** 569
- [35] Maymon S, Oppenheim A V 2011 *IEEE Trans. Signal Process.* **59** 4745
- [36] Avci K, Nacaroglu A 2013 *Int. J. Adv. Electr. Electron. Eng.* **2** 308
- [37] Oppenheim A V, Lim J S 1981 *Proc. IEEE* **69** 529
- [38] Savitzky A, Golay M J E 1964 *Anal. Chem.* **36** 1627
- [39] Schafer R W 2011 *IEEE Signal Process. Mag.* **28** 111
- [40] Luo J, Ying K, He P, Bai J 2005 *Digit. Signal Process.* **15** 122
- [41] Vivó-Truyols G, Schoenmakers P J 2006 *Anal. Chem.* **78** 4598
- [42] Mu Y, Wu Z S, Zhang G, Gao Y Q, Yang Z Q 2017 *Acta Phys. Sin.* **66** 120202 (in Chinese) [牟媛, 吴振森, 张耿, 高艳卿, 阳志强 2017 物理学报 **66** 120202]
- [43] Amendola V, Pilot R, Frascioni M, Maragò O M, Iati M A 2017 *J. Phys.: Condens. Matter* **29** 203002
- [44] Sarhan A R, Yousif B B, Areed N F F, Obaya S S 2020 *Plasmonics* **15** 1699
- [45] Kolwas K, Derkachova A 2020 *Nanomaterials* **10** 1411
- [46] Yu H K, Liu B D, Wu W L, Li Z Y 2019 *Acta Phys. Sin.* **68** 149101 (in Chinese) [余海康, 刘斌东, 吴文龙, 李志远 2019 物理学报 **68** 149101]

Reconstruction and application of wavelength-dependent complex permittivity for noble metals^{*}

LIU Yuanyuan ZHANG Guanmao[†]

(School of Information Science and Engineering, Lanzhou University, Lanzhou 730000, China)

(Received 14 March 2026; revised manuscript received 7 May 2026)

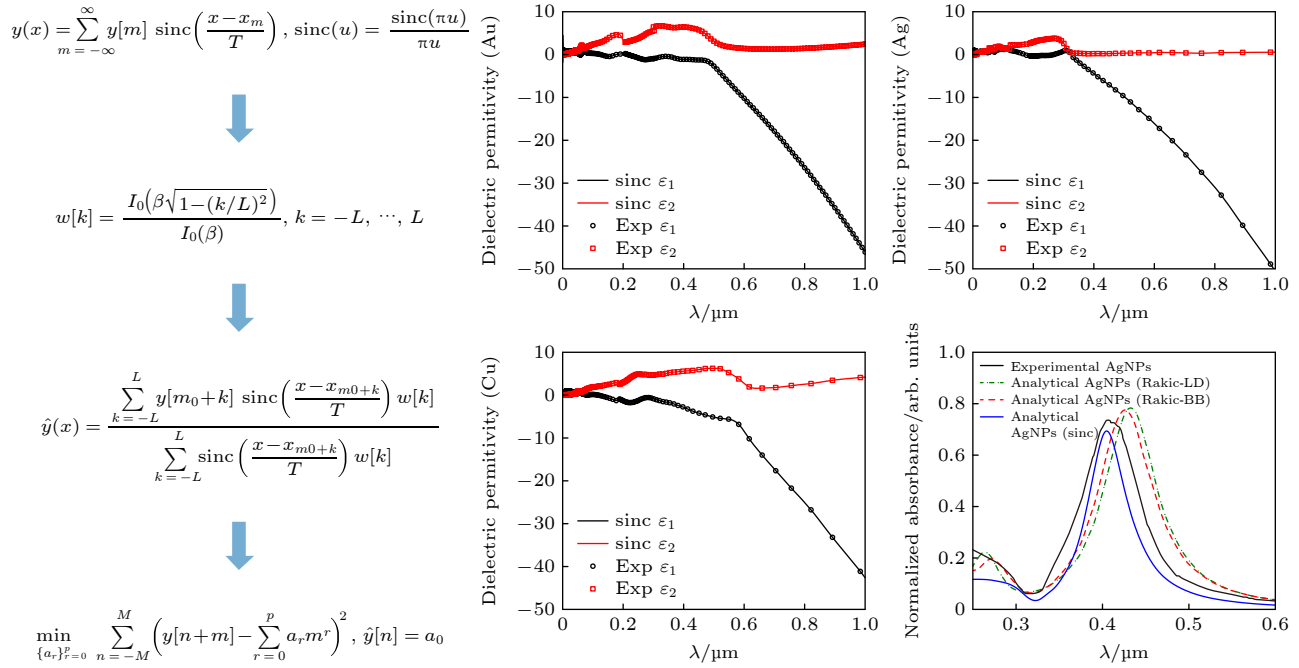
Abstract

Accurate complex-permittivity data are essential for electromagnetic simulation and device design in plasmonics, nanophotonics, infrared optics, and terahertz technologies. The complex permittivity, $\varepsilon(\omega) = \varepsilon'(\omega) + i\varepsilon''(\omega)$, determines the intrinsic electromagnetic response of metallic materials, including reflection, absorption, scattering, surface-plasmon excitation, propagation loss, and field penetration. However, reported optical constants of metals often exhibit significant discrepancies. These discrepancies arise from differences in sample preparation, film thickness, surface roughness, measurement methods, and spectral ranges. Moreover, many available datasets are limited to narrow wavelength intervals, which makes it difficult to obtain continuous and reliable permittivity curves over a broad spectral range. Conventional parametric models, such as the Drude, Lorentz-Drude, and Brendel-Bormann models, can describe free-electron and interband-transition responses. Nevertheless, their accuracy strongly depends on the assumed oscillator form, fitting range, and optimized parameters. Their applicability to broadband and cross-band simulations is therefore limited. To address these issues, a data-driven non-parametric reconstruction method is proposed in this work to obtain continuous, smooth, and physically consistent complex-permittivity curves for Au, Ag, Cu, and Al from the extreme ultraviolet to the terahertz regime. Publicly available experimental optical-constant datasets are first integrated. Reliable spectral segments are then selected according to spectral coverage, overlap, traceability, physical consistency, minimal complex-permittivity deviation, and derivative continuity. Since the original data are highly nonuniformly distributed over several orders of magnitude in wavelength, the wavelength variable is transformed onto a logarithmic scale. Natural cubic-spline interpolation and equidistant resampling are subsequently performed along the logarithmic wavelength axis. In this way, uniformly sampled data suitable for signal reconstruction are generated. Based on the Nyquist sampling theorem, a local sinc reconstruction formula is introduced to recover continuous dielectric spectra from the resampled data. To suppress truncation-induced oscillations and high-frequency noise, the sinc kernel is localized using a Kaiser window. The reconstructed sequence is further smoothed using a Savitzky-Golay filter. The window length and shape parameter are optimized through reconstruction-error analysis, so that the main dispersion features are retained while numerical artifacts are reduced. The reconstructed permittivity curves of Au, Ag, Cu, and Al exhibit continuous and smooth wavelength-dependent behavior across the ultraviolet, visible, infrared, and terahertz regions. Compared with representative Rakić-LD, Rakić-BB, and Werner-DFT reference models, the proposed sinc-based method achieves lower errors in both the real and imaginary parts of the dielectric function. This improvement is particularly evident near spectral boundaries, where conventional models often show noticeable deviations. Kramers-Kronig consistency analysis further confirms that the reconstructed spectra preserve physical self-consistency within the effective experimental bandwidth. To evaluate the practical value of the reconstructed model, the obtained permittivity data are applied to localized surface plasmon resonance simulations of metallic nanoparticles, surface plasmon polariton propagation-length calculations, and metallic

^{*} Project supported by the Nation Key Research and Development Program of China (Grant No. 2019YFA0405403).

[†] Corresponding author. E-mail: zhanggm@lzu.edu.cn

skin-depth analysis. The results indicate that the proposed model predicts the LSPR resonance wavelength and spectral line shape more accurately than traditional parametric models. The calculated SPP propagation length and metal skin depth also agree well with reported experimental and literature data. These results demonstrate that the combination of logarithmic-wavelength resampling, local sinc reconstruction, Kaiser windowing, and Savitzky-Golay filtering provides a data-driven, non-parametric, and reproducible route for broadband complex-permittivity reconstruction. Dependence on predefined physical fitting models is reduced, while the measured dispersion characteristics of metals are preserved. The reconstructed permittivity curves provide accurate and continuous material parameters for plasmonic, nanophotonic, infrared, and terahertz device simulations. They also offer a practical route from material-data reconstruction to device-performance prediction in broadband electromagnetic design.



Keywords: permittivity model, sinc signal reconstruction formula, Kaiser window function, Savitzky-Golay filter

DOI: [10.7498/aps.75.20260369](https://doi.org/10.7498/aps.75.20260369)

CSTR: [32037.14.aps.75.20260369](https://cstr.org.cn/32037.14.aps.75.20260369)

贵金属材料电磁介电常数的波长变化关系曲线重建与应用

刘媛媛 张冠茂

Reconstruction and application of wavelength-dependent complex permittivity for noble metals

LIU Yuanyuan ZHANG Guanmao

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 75, 190401 (2026) DOI: 10.7498/aps.75.20260369

CSTR: 32037.14.aps.75.20260369

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.75.20260369>

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

基于迭代反演的非磁性材料复介电常数测量及初值选取方法

A method of measuring complex ermittivity of nonmagnetic materials and selecting its initial value based on iterative inversion

物理学报. 2023, 72(7): 070601 <https://doi.org/10.7498/aps.72.20222224>

基于可重构硅光滤波器的计算重建片上光谱仪

Computational reconstruction on-chip spectrometer based on reconfigurable silicon photonic filters

物理学报. 2024, 73(14): 140701 <https://doi.org/10.7498/aps.73.20240224>

基于自适应区域权重混合模型的燃烧场温度和气体浓度二维重建方法

Two-dimensional reconstruction method of combustion field temperature and gas concentration based on adaptive region weight mixing model

物理学报. 2025, 74(21): 214203 <https://doi.org/10.7498/aps.74.20250988>

基于超声RF信号熵分析的声空化时空监测方法

Method of spatiotemporally monitoring acoustic cavitation based on radio frequency signal entropy analysis

物理学报. 2022, 71(17): 174301 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20220558>

基于Ga₂O₃-SiC-Ag多层结构的介电常数近零超低开关阈值光学双稳态器件

Ultralow switching threshold optical bistable devices based on epsilon-near-zero Ga₂O₃-SiC-Ag multilayer structures

物理学报. 2024, 73(5): 054201 <https://doi.org/10.7498/aps.73.20231534>

基于正交全息台阶相位原位重建

In-situ reconstruction of step phase based on orthogonal holograms

物理学报. 2025, 74(6): 064204 <https://doi.org/10.7498/aps.74.20241629>