## 金纳米球壳对的局域表面等离激元共振特性分析\*

邹伟博 周骏† 金理 张昊鹏

(宁波大学理学院物理系,宁波 315211)

(2011年7月29日收到;2011年9月20日收到修改稿)

应用有限元方法,研究金纳米球壳对的几何结构参数及物理参量对其表面等离激元共振的散射及消光光谱的 影响,并根据等离激元杂化理论进行了理论分析.结果表明,随着金壳厚度的增加,金纳米球壳对的散射及消光共振 峰先发生蓝移而后红移,而随着金纳米球壳间隙的减小,或者随着金纳米球壳的内核尺寸或内核介质折射率的增大, 散射及消光共振峰均发生红移;随着金壳厚度或内核尺寸减小,或者随着内核介质折射率增大,金纳米球壳对的散 射与消光共振强度减弱,而随着金壳间隙的减小,金纳米球壳对的散射共振强度先增强后减弱,而消光共振强度逐 渐增强,数值模拟与理论分析一致.

关键词: 金纳米球壳对, 局域表面等离激元共振, 等离激元杂化理论, 有限元方法

PACS: 78.67.-n, 73.20.Mf, 61.46.Bc, 36.40.Vz

1引言

众所周知, 在入射光辐照下, 金属纳米颗粒表 面产生感应电荷, 由感应电荷产生的回复力引起 自由电子的集体振荡而形成局域表面等离激元共 振 (localized surface plasmon resonance, LSPR), 颗粒 周围电磁场出现近场增强, 并产生强烈的光学散射 和吸收共振现象<sup>[1]</sup>.通过对金纳米棒<sup>[2]</sup>、金纳米 壳<sup>[3]</sup>、金纳米立方体<sup>[4]</sup>的研究发现, 光学散射和 光学吸收的共振峰位置会依据纳米颗粒的形状、 尺寸及介质环境的变化而改变. 因此, 贵金属纳米 颗粒具有的局域表面等离激元共振特性在表面增 强拉曼散射<sup>[5]</sup>、光学信号传输<sup>[6]</sup>、生物和化学传 感<sup>[7]</sup>、红外 LSPR 超灵敏生物传感<sup>[8]</sup> 及生物分子 探测和医学诊断<sup>[9]</sup>等方面有广阔的应用前景.

近年来,金纳米球壳结构的 LSPR 特性研究 在实验及理论上取得了重要进展.实验方面,Zhou 等<sup>[10]</sup>利用溶胶 - 凝胶法实验制备薄金壳包裹 的 Au<sub>2</sub>S 介质核,成功获得金纳米球壳. Halas 等<sup>[11]</sup> 运用 Mie 散射理论计算了金纳米球壳的表面等离 激元共振能量,与实验中使用高分辨扫描电子显微 镜和原子力显微镜的测量结果相匹配.理论方面, Prodan 等<sup>[12]</sup>提出的等离激元杂化理论为金纳米 球壳及其复合结构的表面等离激元共振行为提供 了很好的理论图像. 吴大建等 [13] 分析了金纳米球 壳的结构变化对吸收光谱的影响,并指出内核半径 处于 40-50 nm、壳厚约 5nm 的金纳米球空壳结 构具有较理想的共振吸收波长和较强的光学吸收, 可以作为理想的光热转换颗粒. Brandl 等<sup>[14]</sup> 将等 离激元杂化理论应用于金属纳米球壳对的表面等 离激元共振现象的研究,研究了两个金属纳米球壳 靠近时表面等离激元共振能量的变化, 计算了银纳 米球壳对的表面等离激元共振能量及其消光光谱. Nordlander 等<sup>[15]</sup> 实验探测了表面等离激元共振光 谱随金纳米壳对间隙的变化,并根据等离激元杂化 理论分析实验结果,提出了实现超灵敏分子传感的 新方法. Khoury 等<sup>[16]</sup> 使用有限元法研究了金纳米 球壳对的近场电场增强特性,获得相对精确的结果, 说明有限元法适合于研究具有曲面边界的金纳米 球壳模型.

本文使用有限元法计算金壳的间隙变化、厚 度变化、内核尺寸和内核介质变化时,金纳米球壳 对的散射光谱和消光光谱,研究在不同几何结构参 数和不同物理参数情形下金纳米球壳对的局域表

© 2012 中国物理学会 Chinese Physical Society

http://wulixb.iphy.ac.cn

<sup>\*</sup>国家自然科学基金(批准号: 60977048), 宁波市国际科技合作计划(批准号: 2010D10018), 浙江省重中之重学科开放基金(批准号: xkzl1012, xkzl1208), 浙江省研究生创新科研项目(YK2009046)和宁波大学王宽成幸福基金资助的课题.

<sup>†</sup> E-mail: ejzhou@yahoo.com.cn

面等离激元共振特性,并根据等离激元杂化理论对可见光 — 近红外区域内的散射和消光共振峰的位移规律等进行了理论分析.

#### 2 模型及理论

金纳米球壳对的模型如图 1 所示, 它是由两个 完全相同的金纳米球壳组成的体系, 图中  $r_1$  和  $r_2$ 分别为金纳米球壳的内核半径和外壳半径, 金壳 厚度为 s, 且  $s = r_2 - r_1$ , d 为金纳米球壳对的间 隙, n 为内核介质的折射率. 为简明起见, 定义记 号 NSP[ $r_1$ , s, d, n] 代表金纳米球壳对, 括号中的变 量与图 1 所示的结构参数相对应. 金属的介电常 数  $\varepsilon$  是与频率有关的复数, 本文中金的介电常数 采用文献 [17] 提供的实验数据. 图 1 中, k 为入射 的 TM 平面波的波矢量, 其电场矢量方向平行于连 接两个金壳圆心轴线的纵长轴.



图1 金纳米球壳对的结构模型

对于图1中的单个金纳米球壳,其表面等离激 元共振特性可以根据等离激元杂化理论 [12,18] 来解 释. 金纳米球壳等离激元杂化能级如图 2(a) 所示, 它是由振动能量为 $\omega_{c}$ 、半径为 $r_{1}$ 的空腔与振动能 量为 $\omega_{s}$ 、半径为 $r_{2}$ 的实心球杂化而成, $\omega_{c}$ 和 $\omega_{s}$ 的 反对称耦合形成能量高的反键模式  $\omega_+$ ;  $\omega_c$  和  $\omega_s$  的 对称耦合形成能量低的成键模式  $\omega_{-}$ . 根据等离激 元杂化理论, 金纳米球壳复合结构的表面等离激元 共振特性均可以理解为构成复合结构的多个简单 单元的表面等离激元共振间的相互耦合 [12,19]. 如 图 2(b) 所示, 金纳米球壳对的共振模式对应具有不 同角动量的两个金纳米球壳的表面等离激元共振 模式之间的相互作用<sup>[14,15]</sup>(图 2(b) 中的点线),形 成了成键与反键等离激元<sup>[20]</sup>,其能级分别为1,2 和1',2',图中1称为角量子数,与1对应的单个金 纳米球壳的两种共振模式为  $\omega_{l+}$  与  $\omega_{l-}$ . 从图 2(b) 看出,成键等离激元的能级低于反键等离激元的能

级,两者的能级间距表示两个金壳的相互杂化程度.图 2(b)中的成键等离激元能级1具有偶极共振能量,成键等离激元能级2具有四极共振能量,分别对应散射及消光光谱中的偶极共振峰和四极共振峰.



图 2 (a) 金纳米球壳等离激元杂化能级图; (b) 金纳米球壳对的 等离激元杂化能级图

根据以上分析, 通过计算获得金纳米球壳对的 散射及消光光谱, 即可以表征金纳米球壳对的局域 表面等离激元共振特性.本文采用有限元方法在频 域条件下计算散射与消光光谱, 并假设图 1 中金纳 米球壳对模型的包埋介质为空气(相对介电常数 为 $\varepsilon = 1$ ), 包埋介质周围设置有完美匹配层 (PML), 其散射截面积的计算公式 <sup>[21]</sup> 为

$$C_{\text{scat}} = \frac{1}{E_{\text{inc}}^2} \frac{1}{R_{\text{f}}^2} \int |E_{\text{far}}|^2 R_{\text{f}}^2 \cdot \mathrm{d}\Omega, \qquad (1)$$

其中, *E*<sub>inc</sub> 为入射电场振幅, *R*<sub>f</sub> 是远场积分边界半径, *E*<sub>far</sub> 是采用的 Stratton-Chu 公式<sup>[22]</sup> 计算远场 的散射场矢量, dΩ 微分立体角, 表示对远场曲面积 分. 同样, 吸收截面积的计算公式<sup>[21]</sup> 为

$$C_{\rm abs} = \frac{2}{\sqrt{\varepsilon_0/\mu_0} E_{\rm inc}^2} \int (U_{\rm av}) \,\mathrm{d}V, \qquad (2)$$

其中,  $\varepsilon_0$  和  $\mu_0$  分别为真空介电常数和真空磁导率,  $U_{av} = \frac{1}{2} \operatorname{Re}(\sigma \boldsymbol{E} \cdot \boldsymbol{E}^* - j\omega \boldsymbol{E} \cdot \boldsymbol{D}^*)$ , 为平均时间热阻,  $\sigma$  为电导率,  $\omega$  为入射光频率,  $\boldsymbol{E}$  为入射光电场矢 量,  $\boldsymbol{D}$  为电位移矢量. 消光截面积  $C_{\text{ext}}$  亦称强度衰 减截面, 表示当电磁波入射到物体上, 被物体散射 和吸收的总的辐射通量, 是散射截面积和吸收截面 积的和, 即

$$C_{\rm ext} = C_{\rm abs} + C_{\rm scat}.$$
 (3)

由 (1), (2) 和 (3) 式可知, 散射、吸收及消光截面积 的大小可以表示对应于金纳米球壳对的散射、吸 收与消光表面等离激元共振的强度.

3 结果与分析

#### 3.1 金壳厚度对散射及消光光谱的影响

不同金壳厚度下,金纳米球壳对的散射及消光 表面等离激元共振与波长的对应关系,也即金纳米 球壳对的散射及消光光谱如图 3 所示.从图 3(a) 中看出,随金壳厚度从 2 nm 增加到 20 nm 时,偶极 共振峰位置从 1006 nm 蓝移到 624 nm,之后红移 到 *s* = 30 nm 时的 647 nm,散射强度逐渐增强,且 图 3(a)的插图给出了散射截面的线宽随金壳厚度 的增加从 65 nm 变化到 169 nm;从图 3(b)中看出, 随金壳厚度从 2 nm 增加到 20 nm,偶极共振峰位置 从 1006 nm 蓝移到 617 nm,之后红移到 *s* = 30 nm 时的 639 nm,消光强度也逐渐增强,图 3(b)的插图 给出了消光截面的线宽随金壳厚度的改变,其趋势 随金壳厚度的增加而增加.

图 3 中, 散射及消光共振峰位置随金壳厚度的 增加先蓝移后红移的现象可以由等离激元杂化理 论解释.由文献 [12], 对于单个金纳米球壳, 金壳厚 度与表面等离激元杂化模式的对应关系为

$$\omega_{l\pm}^{2} = \frac{\omega_{\rm B}^{2}}{2} \left[ 1 \pm \frac{1}{2l+1} \sqrt{1 + 4l \left(l+1\right) \left(\frac{r_{1}}{r_{1}+s}\right)^{2l+1}} \right],$$
  
(l = 1, 2, \dots), (4)

其中, l 称为角量子数, 表征角动量大小,  $\omega_{\rm B} = \sqrt{4\pi e^2 n_0/m_{\rm e}}$  为金的体等离子体频率, e 为电子 电荷,  $m_{\rm e}$  为电子质量,  $n_0$  为自由电子密度.  $\omega_{l+}$  模 式对应于实心球  $\omega_{\rm s}$  和空腔  $\omega_{\rm c}$  的反对称耦合,  $\omega_{l-}$ 模式对应于两者的对称耦合. 由 (4) 式可知, 随着金 壳厚度增加, 将减小内核半径与外壳半径的比值, 使得金纳米球壳表面等离激元共振模式  $\omega_+$  减弱,

而模式  $\omega_{-}$  增强, 进而模式  $\omega_{+}$  和  $\omega_{-}$  对应的能级间 隔减小,进而金纳米球壳杂化程度减弱.而对于金 纳米球壳对,其表面等离激元共振特性由两个金纳 米球壳的共振耦合决定, 增大金壳厚度将使金纳米 球壳对的耦合作用减弱,使成键等离激元能级上升, 导致共振峰蓝移. 然而, 随着金壳厚度的进一步增 加,金纳米球壳的尺寸变大使影响表面等离激元共 振的电磁场相位延迟作用增强,从而金纳米球壳对 的散射及消光共振峰向长波长方向移动<sup>[23]</sup>.因此, 当等离激元的杂化作用大于相位延迟的影响时,表 面等离激元共振峰表现为蓝移;反之,表现为红移. 此外,随着金壳厚度的增加,相位延迟作用增强,散 射及消光截面谱线半高宽明显有增大趋势<sup>[23]</sup>,如 图 3 中插图所示. 并且由相位延迟作用可知, 光学 吸收逐渐减弱,散射作用逐渐占主导地位,正如图3 所示, 散射与消光的共振强度逐渐增强.



图 3 不同金壳厚度下, NSP(30 nm, s, 5 nm, 1.44)的散射及消光 共振与波长对应关系 (插图: NSP[30 nm, s, 5 nm, 1.44]的散射及 消光截面的线宽与不同金壳厚度的对应关系) (a)散射共振与 波长对应关系; (b) 消光共振与波长的对应关系

#### 3.2 内核尺寸对散射及消光光谱的影响

对于不同的内核尺寸,金纳米球壳对的散射 及消光光谱如图 4 所示.由图 4(a)可以看出,随 着内核尺寸从 25 nm 增加到 45 nm, 散射强度逐 渐增强,偶极共振峰位置对应地从 696 nm 红移 到 892 nm, 散射截面的线宽从 42 nm 增加到 84 nm; 当内核尺寸 35 nm 增加到 45 nm, 四极共振峰位置 从 615 nm 红移到 656 nm. 由图 4(b) 可以看出, 随 着内核尺寸从 25 nm 增加到 45 nm, 消光强度逐渐 增强, 偶极共振峰位置从 695 nm 红移到 892 nm, 消光截面的线宽从 42 nm 增加到 85 nm; 当内核尺 寸 30 nm 增加到 45 nm. 四极共振峰位置从 597 nm 红移到 660 nm. 以上金纳米球壳对的散射及消光共 振峰随内核尺寸的变化趋势可以由等离激元杂化 理论得到解释.因为随着内核尺寸增加,内核半径 与外壳半径的比值将增大,使得金纳米球壳表面等 离激元共振模式  $\omega_{l+}$  增强, 模式  $\omega_{l-}$  减弱, 从而模 式  $\omega_{l_{\perp}}$  与  $\omega_{l_{\perp}}$  对应的能级间距增大, 进而金纳米球 壳的表面等离激元杂化逐渐增强. 然而, 两个金纳 米球壳的共振耦合将形成金纳米球壳对的共振特 性,由此,增加内核尺寸使金纳米球壳对的表面等



图 4 不同内核尺寸下, NSP(r1, 5 nm, 5 nm, 1.44)的散射及 消光共振与波长对应关系 (上插图: NSP[30 nm, s, 5 nm, 1.44] 的散射及消光截面线宽与内核半径尺寸的对应关系; 下插图: NSP(30 nm, s, 5 nm, 1.44)的散射及消光截面的四极共振峰与波 长的对应关系) (a)散射共振与波长对应关系; (b) 消光共振与 波长的对应关系

离激元共振耦合作用加强,形成的反键与成键等离激元能级间距增大,从而成键等离激元能级间距增大,从而成键等离激元能级降低,导致共振峰红移.另一方面,内核尺寸增大而产生的相位延迟作用的增强也导致共振峰的红移,并且随着相位延迟作用的增强,散射及消光截面谱线半高宽大小有显著增加<sup>[23]</sup>,如图 4(a)和 (b)中的上方插图所示.

#### 3.3 金壳间隙对散射及消光光谱的影响

对于不同的金壳间隙, 金纳米球壳对的散射及 消光光谱如图 5 所示. 从图 5(a) 可以看出, 单个金 纳米球壳的偶极散射共振峰对应波长 668 nm, 最 大散射截面积为 1.15 × 10<sup>-14</sup> m<sup>2</sup>, 而对于金纳米球 壳对, 随着金壳间隙从 15 nm 减小到 2 nm, 偶极散 射共振峰位置从 707 nm 红移到 783 nm, 最大截面 积从 3.93 × 10<sup>-14</sup> m<sup>2</sup> 增加到 4.46 × 10<sup>-14</sup> m<sup>2</sup>. 从 图 5(a) 的上插图可见, 对于与金纳米球壳对相同尺



图 5 不同球壳间隙下, NSP(30 nm, 5 nm, d, 1.44)的散射及 消光共振与波长的对应关系 (上插图:不同间隙情况下, 半径 为 35 nm 的金纳米球对的散射及消光共振与波长的对应关系; 下插图:金纳米球壳对的四极散射共振峰及四极消光共振峰与 波长的对应关系) (a) 散射共振与波长对应关系; (b) 消光共振 与波长的对应关系

寸的金纳米球对结构,随着间隙从15 nm 减小 到 2 nm, 偶极散射共振峰位置从 536 nm 红移 到 582 nm, 最大散射截面积从 8.24 × 10<sup>-15</sup> m<sup>2</sup> 增 加到 1.97 × 10<sup>-14</sup> m<sup>2</sup>. 对比以上三种结构的散射特 性可知,金纳米球壳对的散射强度比单个金纳米球 壳及金纳米球对结构的散射强度更强,且从随间隙 变化的红移趋势可见, 金纳米球壳对结构比金纳米 球对结构红移更加显著. 从图 5(b) 可以看出, 单个 金纳米球壳的偶极消光共振峰对应波长为 666 nm, 最大截面积为 4.1 × 10<sup>-14</sup> m<sup>2</sup>, 而对于金纳米球壳 对,随着金壳间隙从15 nm 减小到2 nm,偶极消光 共振峰位置从 707 nm 红移到 783 nm, 最大截面积 从  $9.54 \times 10^{-14}$  m<sup>2</sup> 增加到  $1.12 \times 10^{-13}$  m<sup>2</sup>. 图 5(b) 的上插图可见,对于金纳米球对的间隙从 15 nm 减 小到 2 nm 时, 偶极消光共振峰位置从 524 nm 红 移到 575 nm, 最大截面积从 2.92 × 10<sup>-14</sup> m<sup>2</sup> 增加 到  $5.38 \times 10^{-14}$  m<sup>2</sup>. 对比三种结构的消光特性, 分 析所得结果与散射特性相似.

以上情形是由于当金壳间隙较大时,金纳米球 壳的表面等离激元共振相互耦合比较弱,成键与反 键等离激元的能级差较小,因此只存在角动量*l*=1 对应的偶极共振模式;当金壳间隙较小时,金纳米 球壳对的表面等离激元相互耦合,对应不同角动量 模式之间的相互作用(图2(b)点线),从而出现了表 面等离激元四极共振模式,如图5(a)所示,当金纳 米球壳对间隙为2 nm时,在波长为603 nm处出 现四极共振峰,图5(b)中当金纳米球壳对的间隙 从5 nm减小到2 nm时,四极共振峰位置从597 nm 红移到607 nm,与图2(b)中*l*=2的成键等离激 元的能级2 对应.金纳米球壳的表面等离激元共

 $\begin{array}{c} 600 \\ & &$ 

振相互耦合过程表明,随着金壳间隙的减小,金纳 米球壳之间共振耦合作用加强,进而共振耦合形 成的反键与成键等离激元能级间隔增大,从而成 键等离激元能级降低,导致共振峰红移.以上结果 与文献 [15] 中使用边界单元法研究两个金纳米球 壳靠近时的表面等离激元共振杂化而导致的消光 峰红移现象相一致.考虑到当金壳间隙小于1 nm 时,相邻近的金纳米球壳之间将会发生电子遂穿效 应<sup>[24]</sup>,影响金纳米球壳相互间的表面等离激元的 杂化,此时经典电磁学理论将不再适用,所以我们 这里只讨论金纳米球壳之间的最小间隙尺寸 为2 nm 的情况.

### 3.4 内核介质折射率对散射及消光光谱的 影响

当内核介质折射率改变时, 金纳米球壳对的散 射及消光光谱关系如图 6 所示. 从图 6(a) 看出, 随 着内核介质折射率从 1 增大到 2.04 时, 散射强度逐 渐减弱, 偶极共振峰位置从 705 nm 红移到 818 nm; 而从图 6(b) 看出, 对于同样的内核介质折射率的增 加, 消光强度逐渐减弱, 偶极共振峰位置从 705 nm 红移到 818 nm.

等离激元杂化理论表明,随着内核介质折射率 的增加,球壳内表面感应电荷数相应减少,金纳米 球壳对的表面等离激元共振耦合能量降低,进而反 键与成键等离激元能级均降低,从而导致共振峰红 移.因此,图6的结果与文献 [25] 讨论的内核介质 介电常数增大对单个金纳米球壳的局域表面等离 激元共振特性的影响类似.



图 6 不同内核介质折射率下, NSP[30 nm, 5 nm, 5 nm, n] 的散射及消光共振与波长对应关系 (a) 散射共振与波长对应关系; (b) 消光共振与波长的对应关系

#### 4 结 论

采用有限元方法研究了金纳米球壳对的散射 及消光光谱特性,讨论了金纳米球壳对的几何结构 参数及物理参量对其局域表面等离激元共振特性 的影响.研究表明,散射与消光共振峰位置不仅与 金纳米球壳对的几何参数有关,而且与内核介质材 料有关,金纳米球壳对的散射及消光共振峰位置随 金壳厚度的增大先产生蓝移后发生红移,而在金壳

- Kelly K L, Coronado E, Zhao L L, Schatz G C 2003 J. Phys. Chem. B 107 668
- [2] Link S, El-Sayed M A 1999 J. Phys. Chem. B 103 8410
- [3] Jain P K, El-Sayed M A 2007 Phys. Chem. C Lett. 111 17451
- [4] Cao M, Wang M, Gu N 2009 J. Phys. Chem. C 113 1217
- [5] Talley C E, Jackson J B, Oubre C, Grady N K, Hollars C W, Lane S M, Huser T R, Nordlander P, Halas N J 2005 Nano. Lett. 5 1569
- [6] Zhang H X, Gu Y, Gong Q H 2008 Chin. Phys. B 17 2567
- [7] Zhou J, Zhang X Y, Yonzon C R, Haes A J, Van Duyne R P 2006 Nanomedicine 1 219
- [8] Larsson E M, Alegret J, Kall M, Sutherland D S 2007 Nano. Lett. 7 1256
- [9] Haes A J, Hall W P, Chang L, Klein W L, Van Duyen R P 2004 Nano. Lett. 4 1029
- [10] Zhou S, Honma HSI, Komiyama H 1994 Phys. Rev. B 50 12052
- [11] Nehi C L, Grady N K, Goodrich G P, Tam F, Halas N J, Hafner J H 2004 Nano. Lett. 4 2355
- [12] Prodan E, Radloff C, Halas N J, Nordlander P 2003 Science 302 419

间隙的减小以及内核尺寸或内核介质折射率的增 大过程中共振峰位置只发生单调红移.另外,金纳 米球壳对的散射及消光共振强度的变化也与几何 参数及介质材料有关,即散射及消光共振强度会随 着金壳厚度或内核尺寸的减小以及内核介质折射 率的增大逐渐减弱,而当金壳间隙减小时,散射共 振强度先增强后减弱,消光共振强度则逐渐增强. 以上结果应用等离激元杂化理论均可以得到合理 的解释.

- [13] Wu D J, Liu X J 2008 Acta Phys. Sin. 57 5138 (in Chinese) [吴大 建, 刘晓峻 2008 物理学报 57 5138]
- [14] Brandl D W, Oubre C, Nordlander P 2005 J. Chem. Phys. 123 024701
- [15] Lassiter J B, Aizpurua J, Hernandez L I, Brandl D W, Romero I, Lal S, Hafner J H, Nordlander P, Halas N J 2008 Nano Lett. 8 1212
- [16] Khoury C G, Norton S J, Vo-Dinh T 2009 ACS Nano 3 2776
- [17] Johnson P B, Christy R W 1972 Phys. Rev. B 6 4370
- [18] Prodan E, Nordlander P 2004 J. Chem. Phys. 120 5444
- [19] Wu D J, Liu X J 2009 Appl. Phys. B 97 193
- [20] Nordlander P, Oubre C 2004 Nano. Lett. 4 899
- [21] Knight M W, Halas N J 2008 New J. Phys. 10 105006
- [22] Stratton J 1941 *Electromagnetic Theory* (New York: McGraw-Hill)
- [23] Grady N K, Halas N J, Nordlander P 2004 Chem. Phys. Lett. 399 167
- [24] Zuloaga J, Prodan E, Nordlander P 2009 Nano. Lett. 9 887
- [25] Prodan E, Lee A, Nordlander P 2002 Chem. Phys. Lett. 360 325

# Properties of localized surface plasmon resonance of gold nanoshell pairs\*

Zou Wei-Bo Zhou Jun<sup>†</sup> Jin Li Zhang Hao-Peng

(Institute of Optics and Optoelectronics, Ningbo University, Ningbo 315211, China) (Received 29 July 2011; revised manuscript received 20 September 2011)

#### Abstract

The characteristics of scatting and extinction spectra of gold nanoshell pairs, dependent on the its geometry and physical parameters, are investigated by the Finite Element Method based on the plasmon hybridization theory. The numerical results indicate that the resonante peaks in the scattering spectra and the extinction spectra emerge from blue-shift to red-shift with the increases of the thickness of gold nanoshells, whereas they present the red-shift with the decrease of the interparticle separation or with the increases of the size and the refractive index of inner core of gold nanoshells. In the same time, for the case of decreasing the inner core size and the shell thickness or increasing the refractive index of inner core, the intensity of the scattering resonance and the extinction resonance decrease. And, with the decrease of the interparticle separation, the intensity of the scattering resonance of gold nanoshell pairs trends to first increase and then decrease, while the intensity of the extinction resonance increases gradually. All the above is in agreement with the analysis of the plasmon hybridization theory.

**Keywords:** gold nanoshell pairs, plasmon resonance, plasmon hybridization theory, FEM **PACS:** 78.67.–n, 73.20.Mf, 61.46.Bc, 36.40.Vz

<sup>\*</sup> Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 60977048), the International Collaboration Program of Ningbo (Grant No. 2010D10018), the Project of Key Subject of Zhejiang (Grant Nos. xkz11012, xkz11208), the graduate innovative research project of Zhejiang (Grant No. YK2009046), and the K. C. Wong Magna Foundation of Ningbo University, China.

<sup>†</sup> E-mail: ejzhou@yahoo.com.cn