

# FDTD方法模拟金纳米球 及球壳的光学特性

---

南开大学物理实验中心

钱 钧

# 研究背景

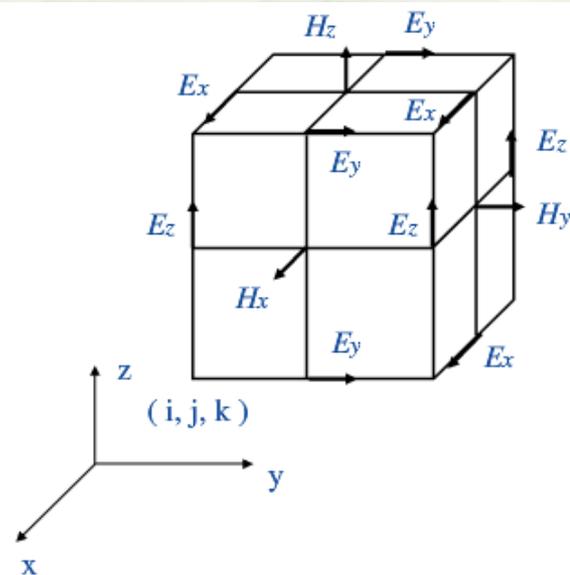
---

- \* 金纳米球壳（gold nanoshell）在生物传感，生物医学等方面有重要的应用前景。
- \* 局域表面等离子共振（localized surface plasmon resonance, LSPR）主导了金纳米球的光学性质。
- \* 金纳米球壳的表面等离子共振对几何参数，和介质折射率非常敏感。

# 研究方法

- \* 米氏 (Mie) 理论, 离散偶极近似(DDA)方法, 有限元(FEM)方法, 时域有限差分(FDTD)方法等.
- \* 时域有限差分(finite-difference time-domain, FDTD):

将麦克斯韦方程转化为差分方程。将时间与空间网格化, 把E和H的分量在空间和时间上采取交替抽样的离散方式进行处理。



FDTD离散中的Yee元胞

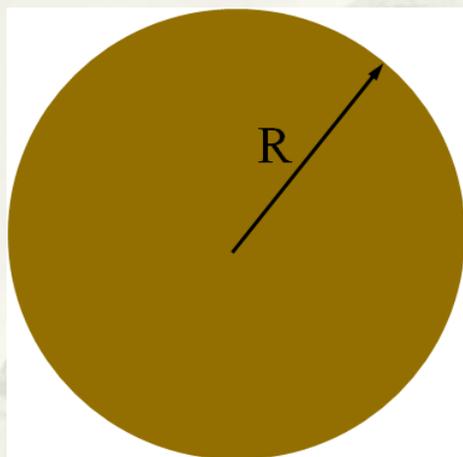
# 商业的FDTD软件

---

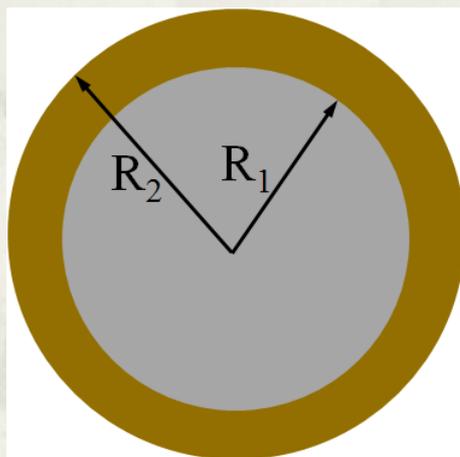
- \* XFDTD (美国 REMCOM 公司)
- \* OptiFDTD (加拿大 Optiwave 公司)
- \* FDTD Solutions (加拿大 Lumerical Solutions公司)
- \* EastFDTD (中国 东峻 公司)

# 几何结构

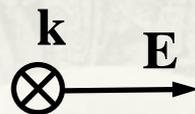
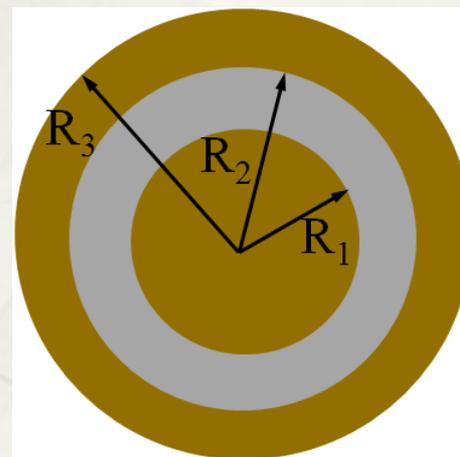
纳米球  
(Gold nanosphere)



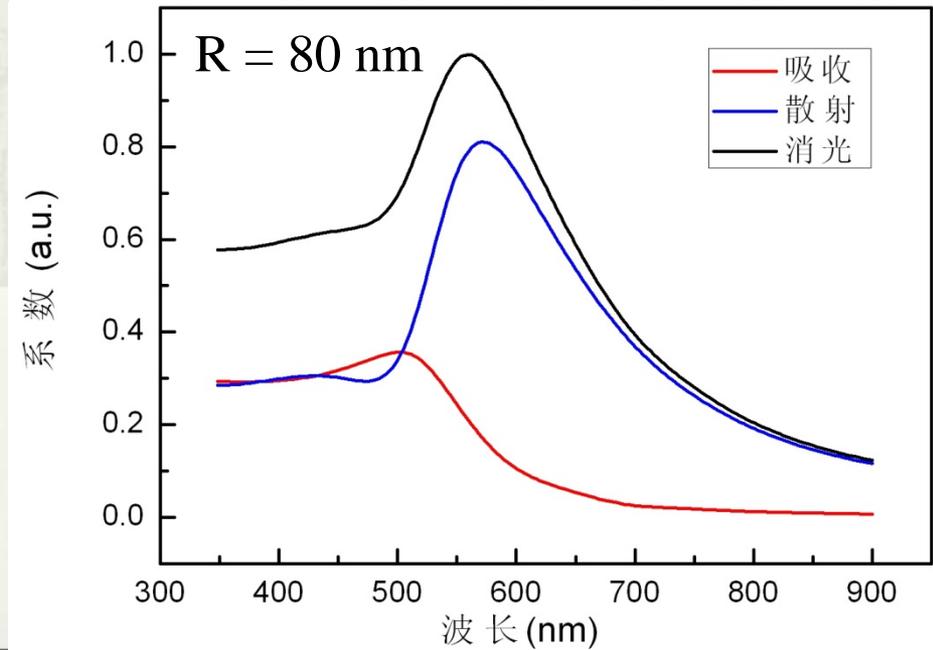
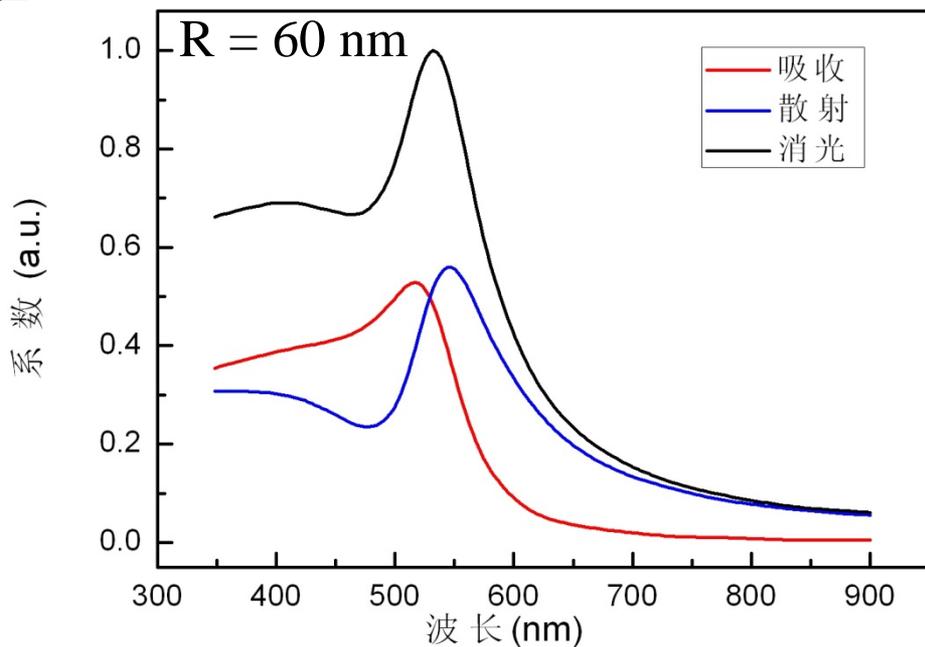
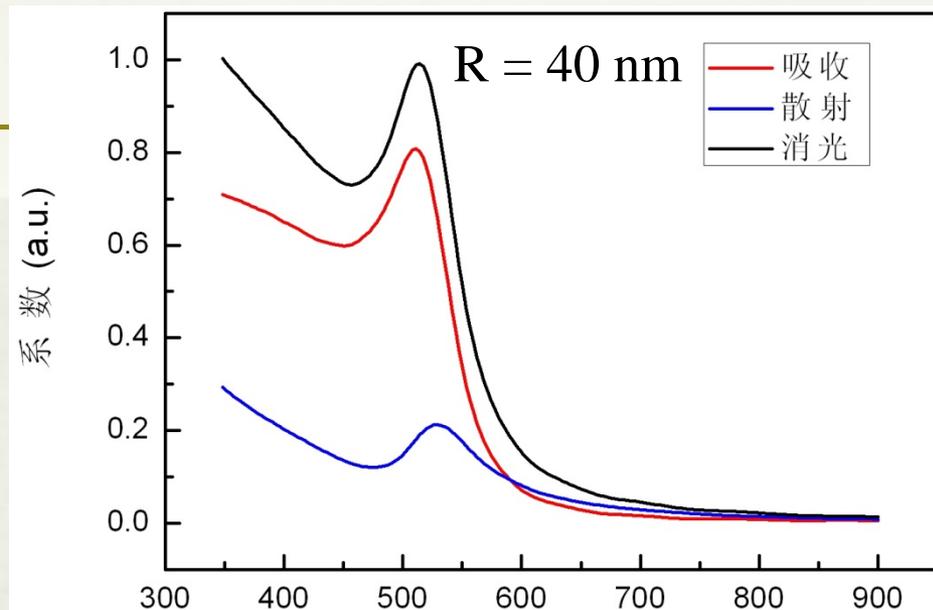
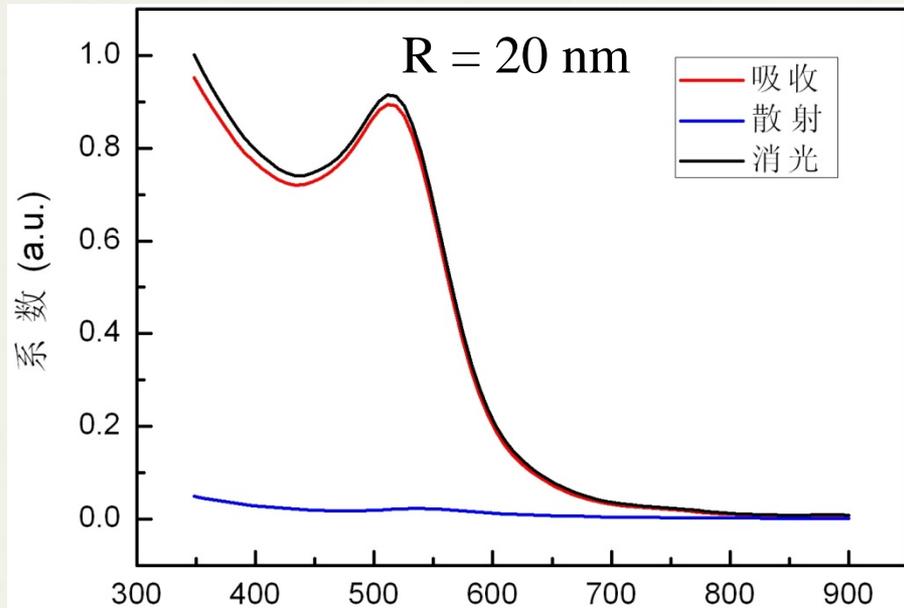
纳米球壳  
(Gold-Silica nanoshell)



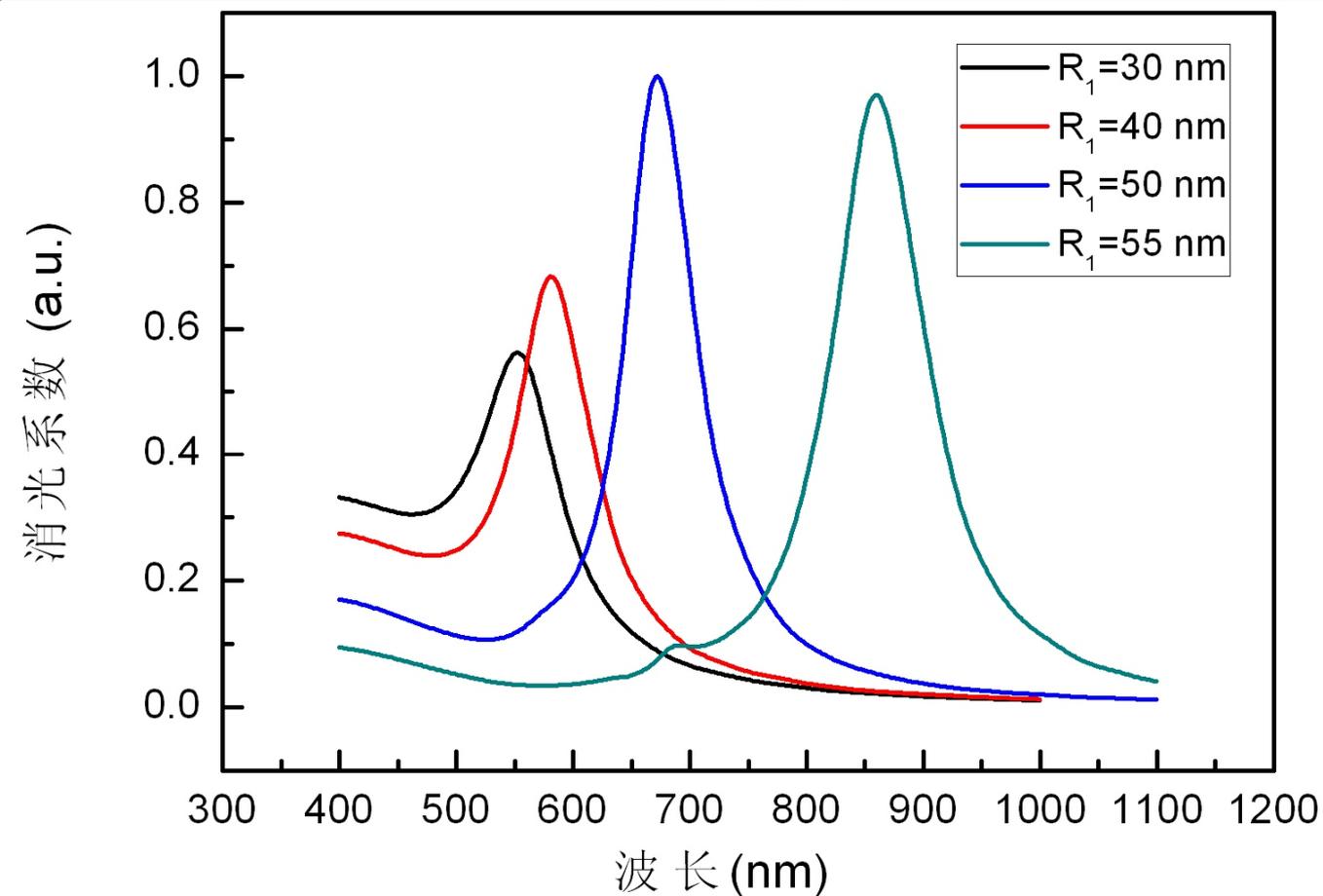
多层球壳  
(Gold-Silica-Gold  
multilayer nanoshells)



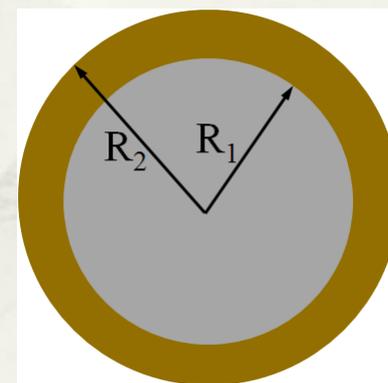
# 金纳米球（半径为R）光谱



# 金纳米球壳 ( $R_1/R_2$ ) 光谱

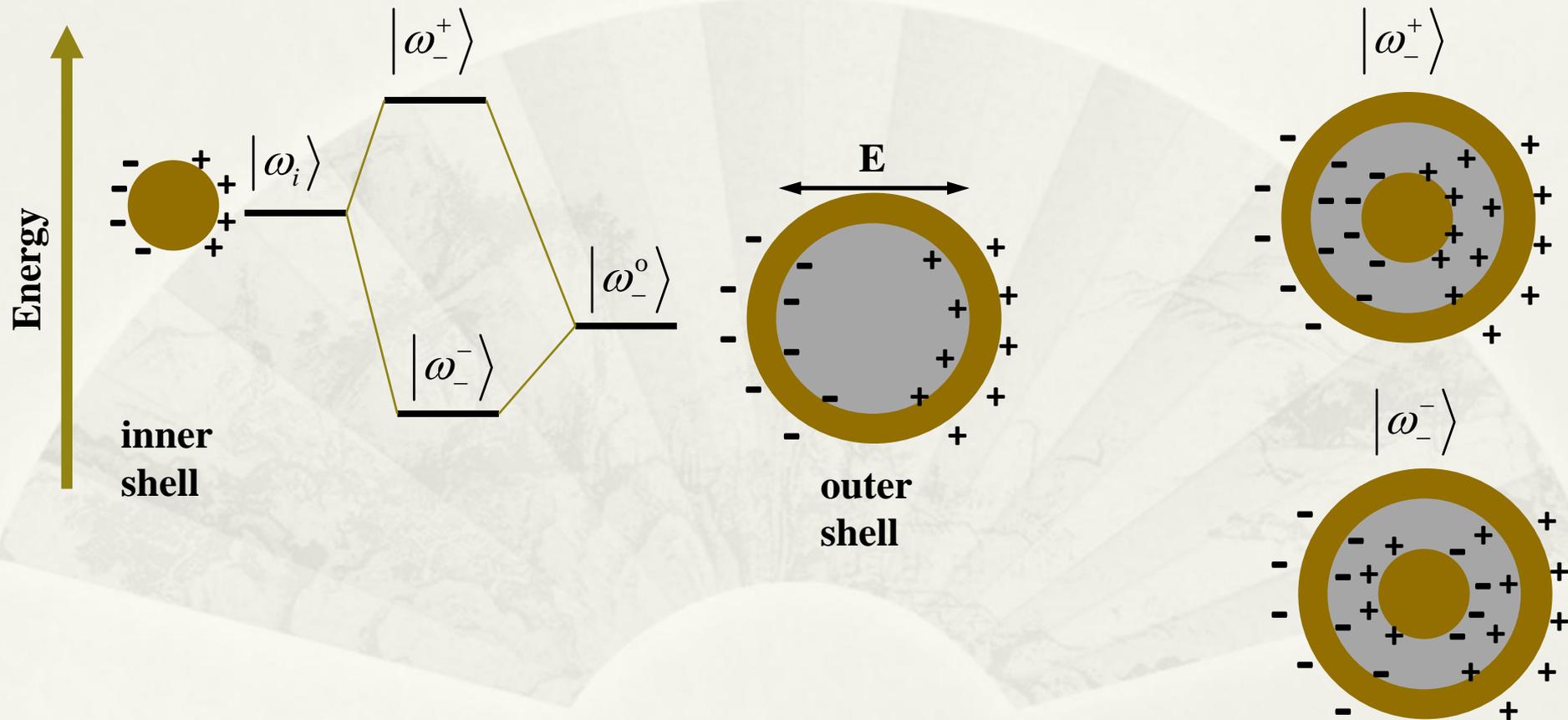


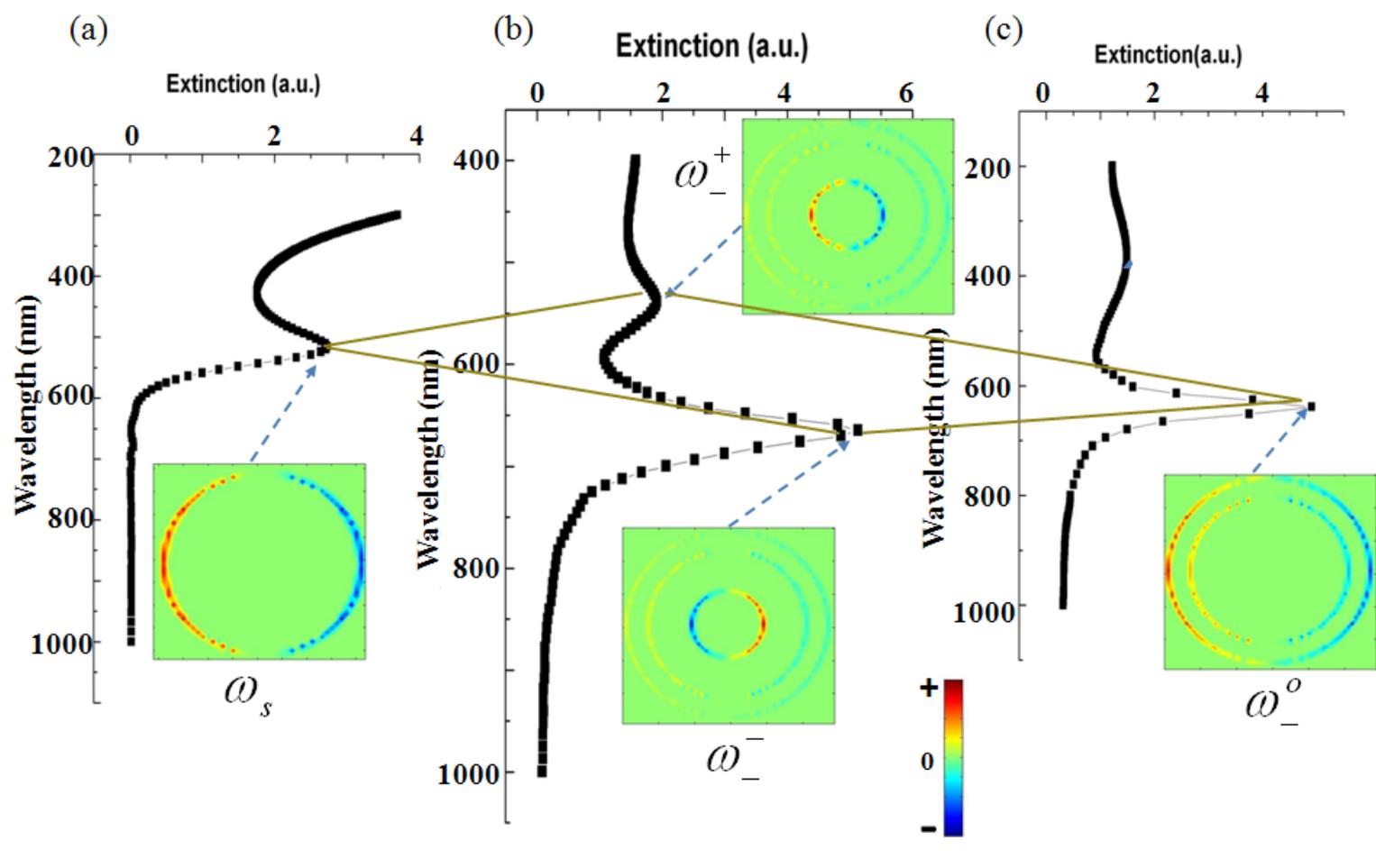
$R_2 = 60$  nm



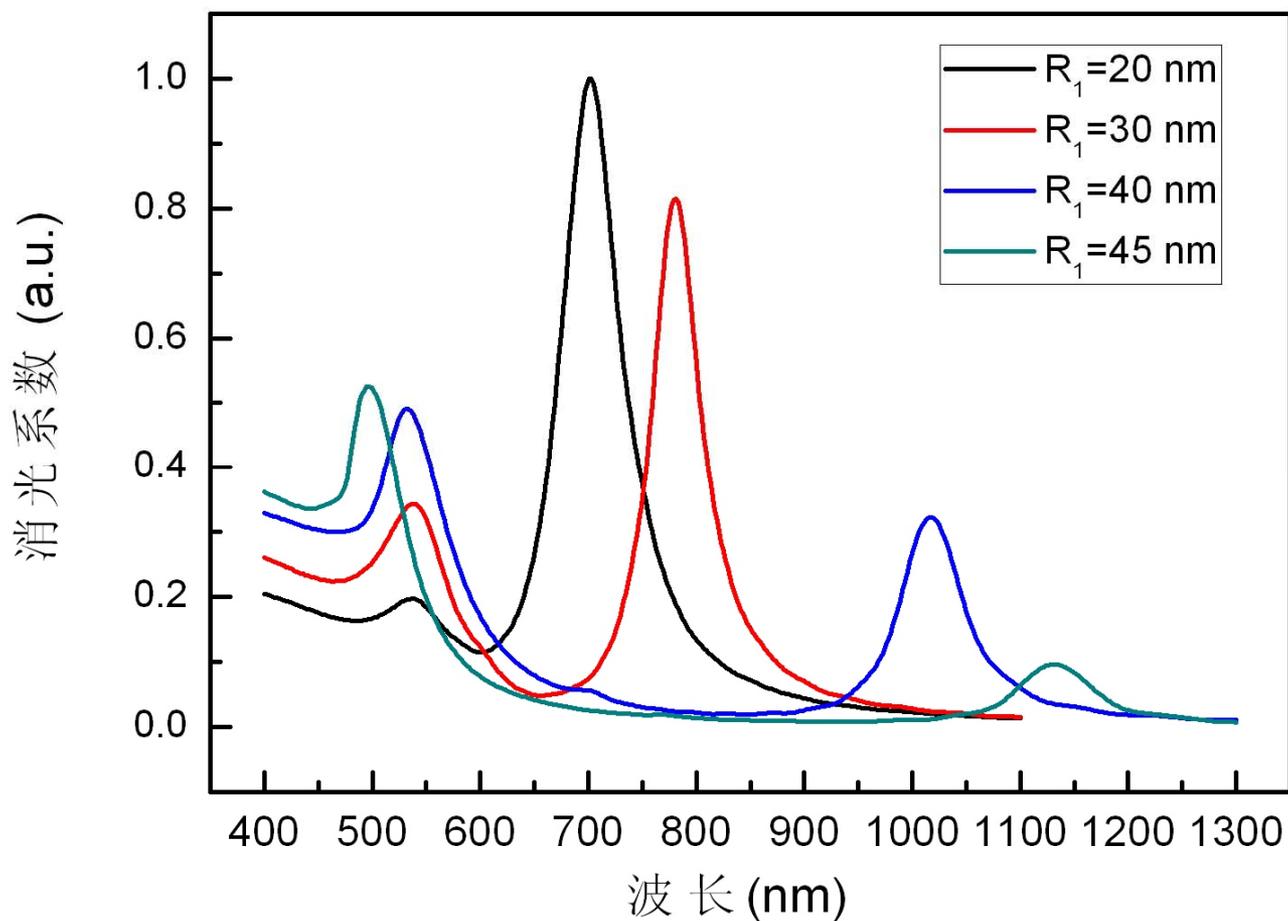
Near-infrared biological window (650 nm—950 nm)

# 等离子子杂化 (Plasmon Hybridization)

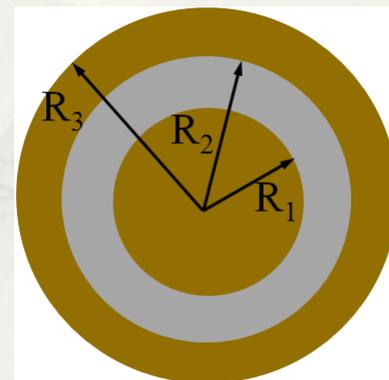


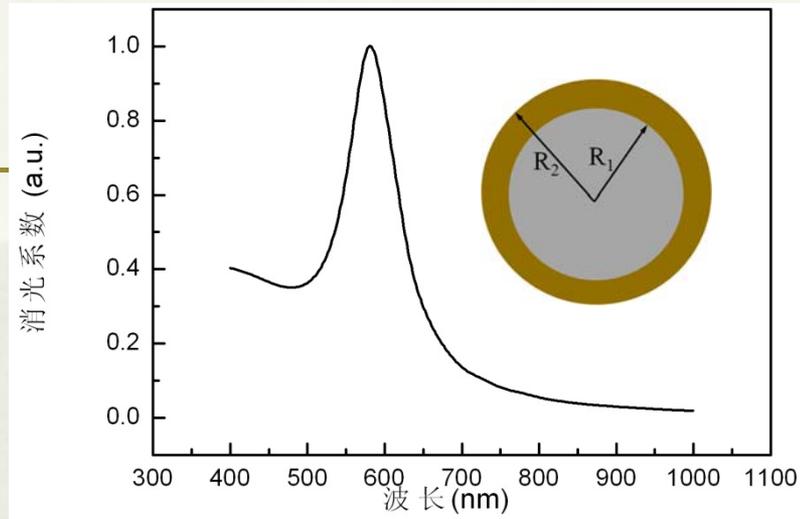
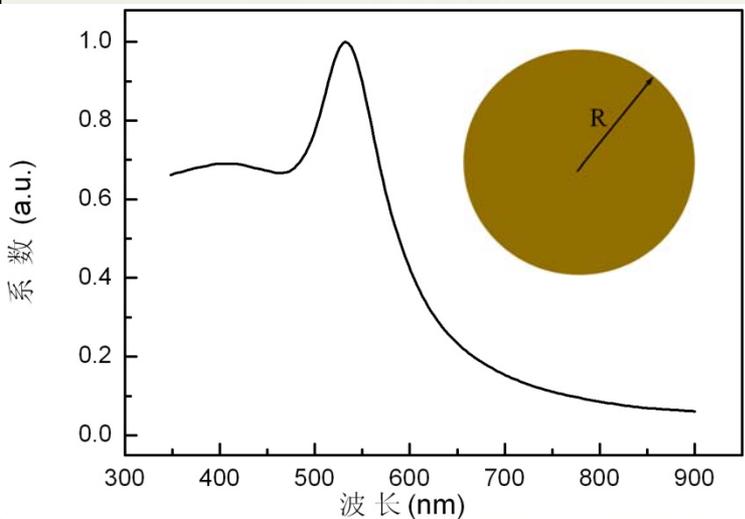


# 金纳米多层球壳 ( $R_1/R_2/R_3$ ) 光谱

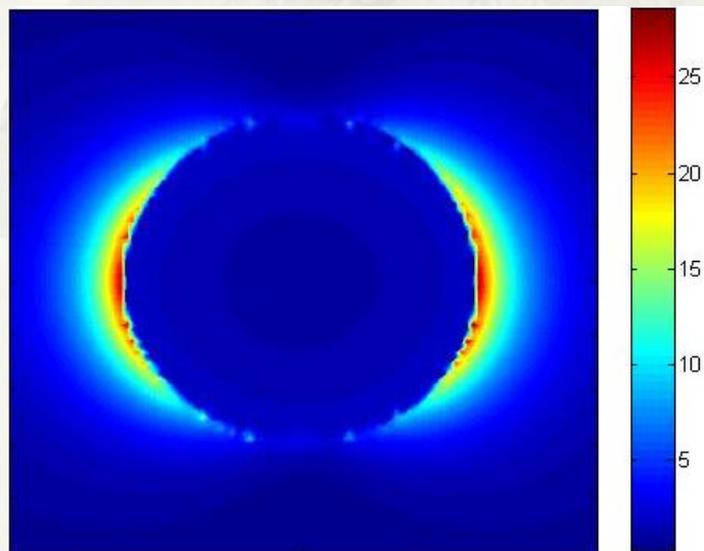


$R_2/R_3=50/60$  nm

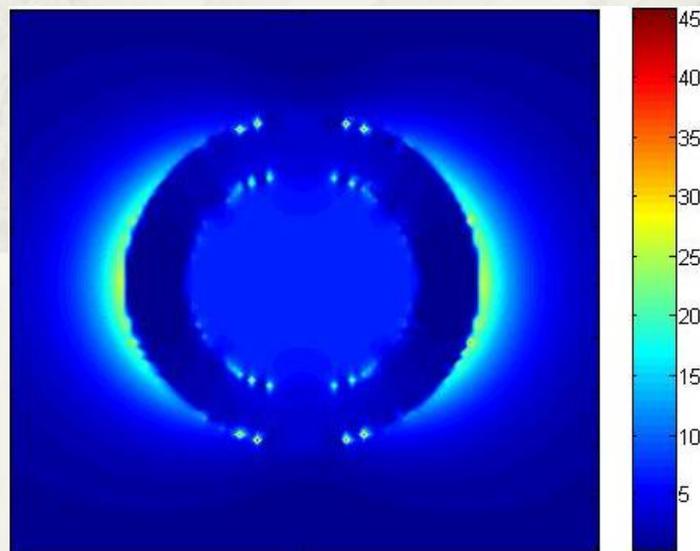


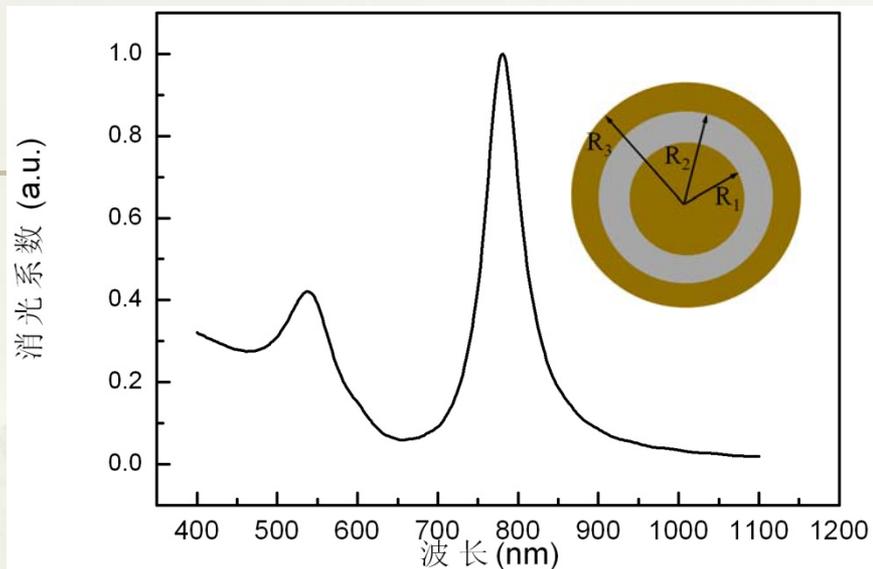


$R=60$  nm 波长: 515 nm



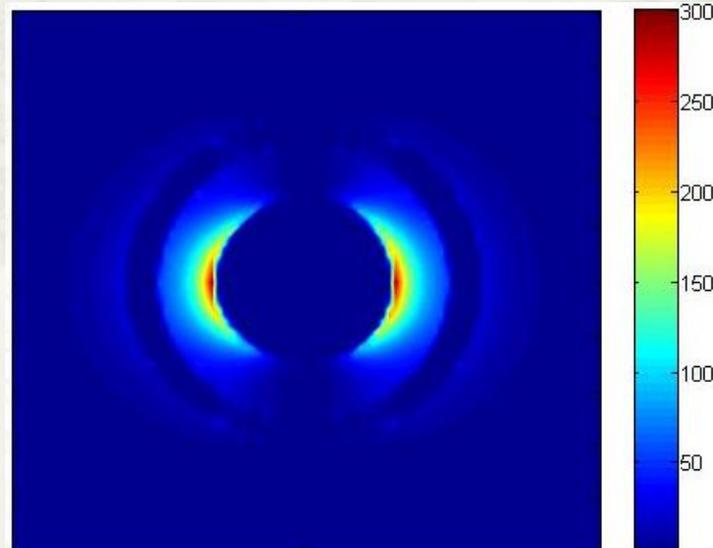
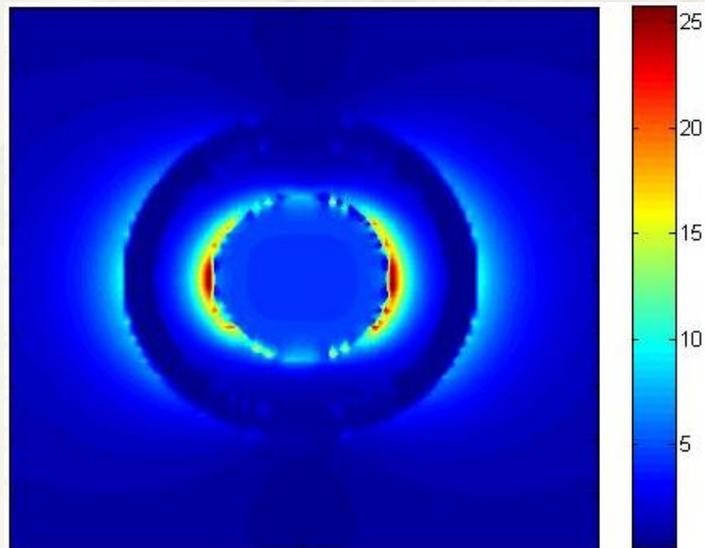
$R_1/R_2=40/60$  nm 波长: 570 nm





$R_1/R_2/R_3=30/50/60$  nm 波长: 530 nm

$R_1/R_2/R_3=30/50/60$  nm 波长: 780 nm



# 总结

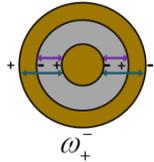
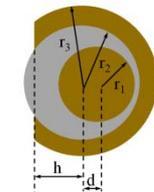
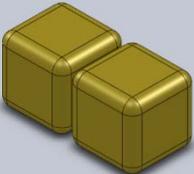
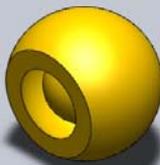
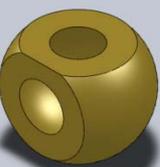
- \* 本实验利用FDTD方法，计算了金纳米球，球壳，及多层球壳的消光特性以及电场分布。给出颗粒几何参数对几种结构的消光谱的影响。
- \* 结果表明:
  - (1) 随着半径 $R$ 增大，金纳米球的消光峰微弱红移，在 $R$ 较小时（20nm），吸收占主导，在 $R$ 较大时（80nm），散射占主导；
  - (2) 随着二氧化硅核心 $R_1$ 的增大，Silica-Gold金纳米壳的消光峰显著红移；
  - (3) 随着金核心 $R_1$ 的增大，Gold-Silica-Gold多层球壳消光谱的低能峰显著红移，而高能峰蓝移。

# 用于实验教学

---

- \* 利用FDTD软件，学生可以自行设计微纳光学结构，设定入射光源及光场记录截面，分析各参量对微纳结构光学特性的影响。
- \* 电磁场实时记录，学生能直观的观测电磁场的传播及与光学结构的相互作用。
- \* 有助于培养学生的创新意识和基本科研能力，有助于学生了解前沿的科学知识。

# 相关科研

发表时间	期刊	题目	结构
2014	Journal of Physical Chemistry C	Localized Hybrid Plasmon Modes Reversion in Gold-Silica-Gold Multilayer Nanoshells	
2014	Plasmonics	Dual Symmetry Breaking in Gold-Silica-Gold Multilayer Nanoshells	
2013	Plasmonics	Effect of Edge Rounding on the Extinction Properties of Hollow Metal Nanoparticles	
2012	Journal of Physical Chemistry C	Optical Extinction Properties of Perforated Gold-Silica-Gold Multilayer Nanoshells	
2012	Optics Express	Two-dimensional angularly selective optical properties of gold nanoshell with holes	

# 基金支持

---

- \* “对称性破缺的金纳米球核/球壳结构表面等离子共振特性研究”，2014-2016年，国家自然科学基金青年基金项目。
- \* “基于有限差分的光学虚拟实验设计与研究” 2012-2014年，南开大学教改专项。

---



谢谢大家!