

文章编号 : 0253-2239(2001)10-1234-05

用时域有限差分方法研究光纤微探针近场分布特性

刘秀梅 王 佳

(清华大学精密仪器系精密测试技术及仪器国家重点实验室, 北京 100084)

摘要: 采用三维时域有限差分(FDTD)方法研究了扫描近场光学显微镜中光纤微探针的近场分布特性。研究表明, 锥形裸光纤探针的近场光中, 以从探针锥变区侧面泄露的光即传播场为主, 当在探针的侧面镀上一层金属膜对于从侧面泄露的光具有较好屏蔽效果, 因而比裸光纤探针具有更好的空间束缚能力; 无论是裸光纤探针还是金属膜探针, 入射偏振光从针尖出射后发生了退极化现象, 近场分布中产生与入射光偏振方向垂直的其它两个电场分量, 而且金属膜探针的退极化分量对近场分布的影响比裸探针显著得多。如果在近场成像中接收退极化分量而不是总场则可以提高近场成像的对比度。还详细地分析了微探针的近场分布特征与退极化之间的关系。

关键词: 近场光学; 时域有限差分; 倏逝波; 光探针

中图分类号: TH742 文献标识码: A

1 引 言

光纤探针作为扫描近场光学显微镜的关键元件, 在近场成像过程中具有十分重要的作用。首先, 以探针照明方式为例, 探针将传播场转化为非传播场即倏逝波场, 通过样品和探针之间的相互作用, 部分倏逝波场被转化为携带样品信息的传播场并为远端光电探测器所接收。不难看出, 光纤探针的针尖尺寸及其与样品的间距将直接影响仪器的分辨本领^[1], 而二者的尺度都远小于波长, 样品与探针相互作用的过程非常复杂, 严格的理论分析和解析方程表达十分困难。郭继华等^[2]运用解标量麦克斯韦方程和基尔霍夫边界条件等方法, 推导了平面微孔在单色平面波正照射条件下的简单衍射场公式。数值方法在近场光学的研究中占有重要地位。Novotny等^[3,4]利用多重多极子方法在二维空间内计算了照明工作方式下几种探针的场分布。Girard等^[5]以类似的物理模型采用积分方程方法同样在二维空间内分别计算了裸光纤探针和金属膜探针的光场分布, 给出了更为形象的光场分布结果。多重多极子方法的计算量虽然比其他近场光学研究方法小, 但是该方法对经验的依赖性较大, 难以熟练掌握, 而积分方程方法则计算量很大, 在计算空间比较大的情况下普通的微型计算机难以胜任。

Christensen^[6]和 Furukawa^[7]等曾分别将二维和三维时域有限差分方法运用到近场计算中。前者计

算了探针的场分布并给出了金属和介质样品的二维图像, 后者计算了圆柱形介质样品在集光工作模式下的成像过程。虽然上述作者及其它文献对近场光学中的某些理论问题进行了研究并得到了一些具有指导意义的结论, 但所提供的信息还不足以透彻地理解探针的场传播与分布特性, 特别是对近场中各电场分量的研究很少。然而, 分量场的分布特性对一些应用领域很重要, 如研究单分子谱特性^[8]、电偶极取向^[9]、或者分析探针的保偏特性、各偏振分量在成像中的作用等等。本文将基于真实光纤微探针建立基本的探针物理模型, 采用时域有限差分方法进行三维空间的数值仿真, 系统地研究扫描近场光学显微镜中常用的锥形裸光纤探针和金属膜光纤探针的内部场的传播与近场分布特性。着重研究分量电场的产生及其分布特性, 以尽量给出清晰的物理图像, 有助于更好地理解近场分布的复杂性。

由于近场分布及相互作用的复杂性, 需要在纳米局域空间解麦克斯韦方程组。在无源区, 麦克斯韦方程组可表示为^[10]

$$\nabla \times \mathbf{H} = \partial \mathbf{D} / \partial t + \mathbf{J}_e, \quad \mathbf{J}_e = \sigma \mathbf{E}, \quad (1)$$

$$\nabla \times \mathbf{E} = -\partial \mathbf{H} / \partial t - \mathbf{J}_m, \quad \mathbf{J}_m = s \mathbf{H}, \quad (2)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0, \quad (3)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{D} = 0, \quad (4)$$

\mathbf{E} 为电场强度 (V/m), \mathbf{H} 为磁场强度 (A/m), \mathbf{J}_e 、 \mathbf{J}_m 分别为电流和磁流密度。 σ 为导电率 (Ω/m), s 为磁电阻率 (Ω/m), 分别对应电场和磁场的损耗。在无电损耗或无磁损耗的媒质中可使 σ 或 s 为零。直角

坐标系中,假定媒质参数 ϵ 、 μ 、 σ 、 s 不随时间改变,则(3)式和(4)式化为下列6个标量方程:

$$\partial H_z / \partial y - \partial H_y / \partial z = (\sigma + \epsilon \partial / \partial t) E_x, \quad (5)$$

$$\partial H_x / \partial z - \partial H_z / \partial x = (\sigma + \epsilon \partial / \partial t) E_y, \quad (6)$$

$$\partial H_y / \partial x - \partial H_x / \partial y = (\sigma + \epsilon \partial / \partial t) E_z, \quad (7)$$

$$\partial E_y / \partial z - \partial E_z / \partial y = (s + \mu \partial / \partial t) H_x, \quad (8)$$

$$\partial E_z / \partial x - \partial E_x / \partial z = (s + \mu \partial / \partial t) H_y, \quad (9)$$

$$\partial E_x / \partial y - \partial E_y / \partial x = (s + \mu \partial / \partial t) H_z. \quad (10)$$

时间域有限差分法作为分析电磁场分布的一种纯数值计算方法,其基本思想是将含时间变量的麦克斯韦旋度方程组直接转化为差分方程,即将(5)式~(10)式中的场分量对坐标和时间的偏导数用有限差分式表示。在差分格式中,每个网格上的电场(或磁场)分量仅与它相邻的磁场(或电场)分量及上一时间步该点的场值有关^[10]。在每一时间步计算网格

空间各点的电场和磁场分量,则随时间步的推进,直接模拟电磁波传播及其与物体间相互作用的过程。

2 物理模型

如图1所示,在计算中采用探针照明方式,波长为633 nm、沿y方向偏振的均匀平面波从探针的切平端耦合进探针,各电场分量分别为 $E_x = E_z = 0$, $E_y = -1$ V/m。光纤介质折射率为1.5,假设金属膜为理想导体,即金属膜具有无限大的导电率($\sigma \rightarrow \infty$),很薄的一层即可将光完全屏蔽。其次,将针尖顶点设为坐标原点并将锥度定义为探针锥面倾角的二倍。将整个所需计算的三维空间均匀地划分为N个网格单元,每个单元格沿坐标轴方向的空间步长分别为 Δx 、 Δy 、 Δz 。为了屏蔽计算中的杂光,在入射端口处附加很薄一层金属。

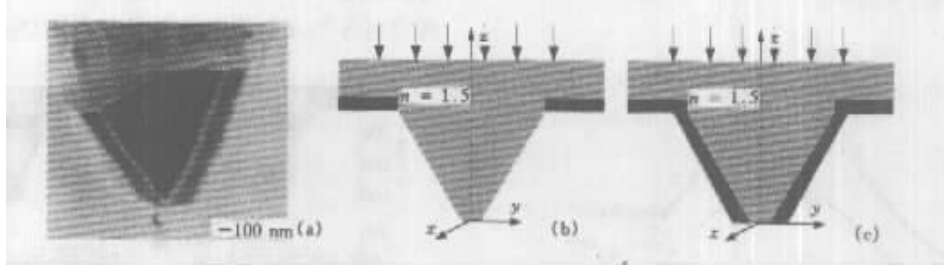


Fig.1 The cross section of fiber probe for SEM(a), simulation models of uncoated(b) and metal-coated probes(c)

3 裸光纤探针的场分布

计算采用 $\Delta x = \Delta y = \Delta z = 20$ nm 步长、 $120 \times 120 \times 120$ 网格阵列,针尖直径80 nm。图2所示为 $x=0$ 和 $y=0$ 两个平面内总电场 $|E_t|$ 的分布情况。分析对比两幅分布图可知:只要探针锥变部分的直径足够大,光就能够在探针内部传播,同时被探针内锥面反射光与入射光叠加沿探针的轴线方向形成不完全驻波,在探针内部形成一定的分布花样。当锥变区截面直径减小,有部分光从探针侧面泄露,随着截面直径进一步减小,特别是在 $x=0$ 平面内,当直径减小到约720 nm时光的泄露越来越严重,并且

该泄露光从本质上讲应为传播场即远场光;而在 $y=0$ 平面开始产生严重泄露处的截面直径则小得多。这种场分布差异缘于入射光的偏振性质。当泄露光很强并在探针的近场中占绝对优势时,使探针的近场分布比针尖的实际尺寸更宽。

图3所示为 $z = -20$ nm, -40 nm, -80 nm, -200 nm的横截面内总场 $|E_t|$ 及各分量电场 $|E_x|$ 、 $|E_y|$ 、 $|E_z|$ 的分布情况,每幅小图的尺寸为 $1.6 \mu\text{m} \times 1.6 \mu\text{m}$ 。研究结果表明:入射光虽然为偏振光但近场光发生了退极化,产生与入射光偏振方向垂直的两个电场分量: $|E_x|$ 和 $|E_z|$ 。其中 $|E_x|$ 很小,并以对称的四瓣分布。 $|E_z|$ 在孔径边缘处沿入射光偏振方向形成显著的场增强,场强比 $|E_x|$ 大但仍比 $|E_y|$ 小得多。近场分布中的外围亮环及探针中心的出射光主要为 $|E_y|$ 分量。退极化分量 $|E_x|$ 、 $|E_z|$ 具有很强的近场特性:随着离开针尖距离的增加, $|E_x|$ 、 $|E_z|$ 急剧衰减,边缘增强特性很快消失使得光场分布主要表现为泄露光的特征。从探针锥形渐变区侧面泄露光沿探针孔径外围边缘形成两个半圆环,而靠近针尖所产生的泄露形

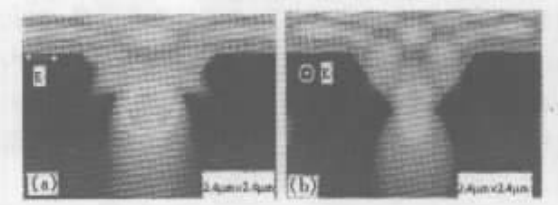


Fig.2 Electric-field distribution in the plane of $x=0$ (a) and $y=0$ (b)

成强中心光斑分布,其宽度大于针尖直径。

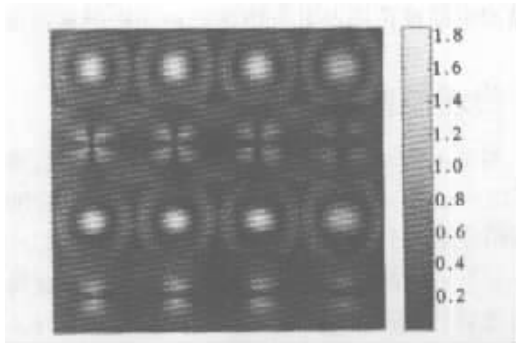


Fig. 3 Distribution of total electric-field and field components in the plane of $z = -20 \text{ nm}$, -40 nm , -80 nm , -200 nm (from left to right). From top to bottom: $|E_t|$, $|E_x|$, $|E_y|$, $|E_z|$

更加细致的计算表明从针尖直接出射的光比从侧面泄露光要弱得多,在泄露光的中心还存在一个相对暗场,如图4所示。

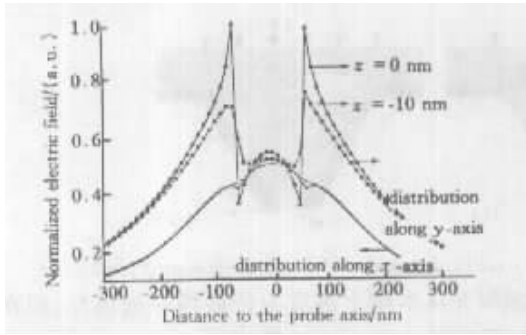


Fig. 4 Electric-field distribution of uncoated fiber-optic probe along x and y axis in the plane of $z = 0$ and $z = -10 \text{ nm}$

综上所述,光在裸光纤探针内传播时由于光的偏振特性,在两个垂直面内的场分布具有显著差别;内锥面反射光和部分入射光叠加形成分布图样;随着锥变区截面直径的减小,部分光从探针侧面泄露,该泄露光本质上讲为远场光;探针孔径边界条件突变使出射光产生了退极化,退极化分量在总场强中的比重很小呈现出显著的近场衰减特性;随着距离的增加,出射光逐渐表现出泄露光即远场光的分布特性。光探针侧面的泄露将对近场成像形成很强的背景,影响成像质量。正是由于这种原因研究人员提出应制作在顶端开孔的镀金属膜探针。

4 金属膜探针的近场分布

以 10 nm 步长计算大小为 $120 \times 120 \times 100$ 网格单元内金属膜探针的场分布。探针孔径为 60 nm , 金属层厚 30 nm 。光波长和偏振方向与前相同。图5为金属膜探针在 $x = 0$ 和 $y = 0$ 平面内总电场模量

分布。分析表明:探针锥变区外侧金属膜可以完全阻止光的泄露,具有很好的空间束缚能力。其次,金属相对玻璃介质具有更强的反射能力,在光向针尖逐渐传播的过程中很大部分被金属膜向内部反射并与入射光叠加,在探针内部沿轴线方向形成很强的驻波场,该波场在探针锥度截面直径约为 330 nm 处达到极大。根据波导理论,在该直径处探针的纵向波数为零模式波完全被截止。随着锥变区直径进一步减小,纵向波数为虚数,光只能以倏逝波的形式沿轴线方向迅速衰减,称该段波导为过截止区。根据倏逝波的衰减特性,出射的光很弱。如果锥度变小,过截止区也随着变长,这将使出射光更加微弱。由于入射光为偏振光,使得 $y-z$ 和 $x-z$ 两个平面内的场分布具有较大的差异,特别是出射光在 $x-z$ 平面内仅沿探针轴线方向向前传播,而在 $y-z$ 平面内从针尖出射的光不仅向前传播而且可以绕过探针的金属膜向各个方向传播并形成很宽的空间分布。

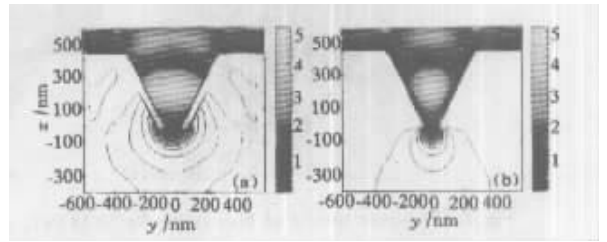


Fig. 5 Electric-field distribution of metal-coated probe in the plane of $x = 0$ (a) and $y = 0$ (b)

图6显示了更精细研究结果。采用 3 nm 步长进行计算,探针孔径和金属层厚度分别为 60 nm 和 30 nm 。图中显示了 $z = 0, -3 \text{ nm}, -6 \text{ nm}, -9 \text{ nm}$ 横截面内及 $x = 0$ 的平面内总电场及其各分量电场的分布。为了在同一标尺下显示4个场,其中 $x = 0$ 平面内的 $|E_x|$ 和 $|E_y|$ 比实际大小衰减了4倍, $|E_z|$ 则扩大了5倍,图中各小图的尺寸为 $180 \text{ nm} \times 180 \text{ nm}$ 。金属膜探针的场分布同样产生了退极化,而且退极化电场分量对近场分布的影响比裸光纤探针更显著。图6结果表明:

1) $|E_z|$ 主要分布在入射和出射端口处,在横截面内 $|E_z|$ 在孔径范围外形成的两个半圆弧,在孔径边缘表现出明显的场增强效应。 $|E_z|$ 在端口内外场强不连续,这种现象致使该分量在 $z = 0$ 平面内的场强很小,而在 $z = -3 \text{ nm}$ 面内的场强则大得多,并与相应平面内 $|E_y|$ 分量的数量级相当。

2) 在总场强 $|E_t|$ 中,孔径范围内的分布以 $|E_y|$ 为主。退极化产生的两个电场分量 $|E_x|$ 、

$|E_z|$ 衰减很快, $z = -9 \text{ nm}$ 平面内的总场分布为一椭圆光斑, 此时孔径边缘的场增强效应完全可以忽略, 而且总场的分布与 $|E_y|$ 的分布基本相同。

3) $|E_x|$ 、 $|E_z|$ 发散角很大。 $|E_z|$ 甚至可以逆着入射光方向“传播”。

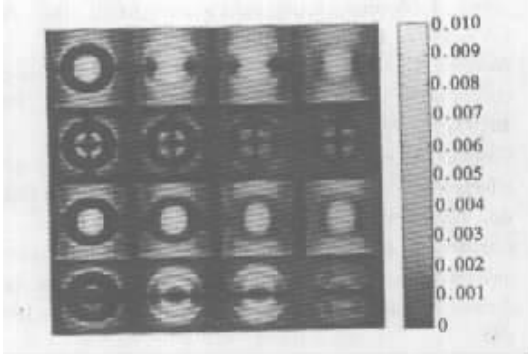


Fig. 6 Electric-field distribution in different planes of metal-coated probe. Electric-field distribution in the plane of $z = 0, -3 \text{ nm}, -6 \text{ nm}, -9 \text{ nm}$. From top to bottom: $|E_x|/4, |E_x|, |E_y|/4, |E_z|$

图 7 为三个分量电场在某一传播瞬间的场分布示意图。 $|E_x|$ 、 $|E_z|$ 主要沿着与探针的轴线近似为 45° 的方向“传播”, 除了沿探针轴线外其它各方向都存在退极化产生的两个电场分量。 $|E_y|$ 沿入射光方向“传播”, 金属膜探针的出射光在 $x = 0$ 平面内的各方向几乎都可“传播”。



Fig. 7 From left to right: instantaneous field distribution of $|E_x|, |E_y|, |E_z|$

4) 金属膜探针的退极化比裸探针更显著。金属膜探针的出射光中 $|E_y|$ 的最大值比 $|E_z|$ 要小, 与裸探针中 $|E_y|$ 占绝对优势的场分布特性明显不同, 即裸针的退极化比较微弱。该差异的产生原因在于金属膜的存在引起边界条件的变化更大, 因而引起更强的退极化。

5) 退极化分量电场 $|E_x|$ 、 $|E_z|$ 衰减比 $|E_y|$ 快得多。

图 8 中两种探针沿 z 轴衰减的比较表明, 金属膜探针对光的空间束缚能力更强。光不仅不存在横向泄漏, 而且出射光沿横向和纵向的衰减都比裸探针快得多。前者在 44 nm 的范围内衰减到最大值的 $1/e$, 而后者为 330 nm 。差别的原因在于波导结

构及出射光的边界条件不同。对裸探针无论直径多小, HE_{11} 都能传播, 没有将传播波和倏逝波分开的明显“截止面”, 而金属膜探针使光的传播模式发生了改变, 并且在纵向波数为零处的传播波(或模式波)完全被截止, 随着直径的进一步减小纵向波数变为虚数, 光只能以沿 z 轴迅速衰减的倏逝波形式存在。图 8 中曲线的拟合方程为:

$$y_0 + A_1 \exp[-(x - x_0)t_1],$$

对于裸探针

$$y_0 = 0.51603, x_0 = 0, A_1 = 1.249, t_1 = 327.40471,$$

对于金属膜探针:

$$y_0 = 0, x_0 = 0, A_1 = 0.40443, t_1 = 44.16236.$$

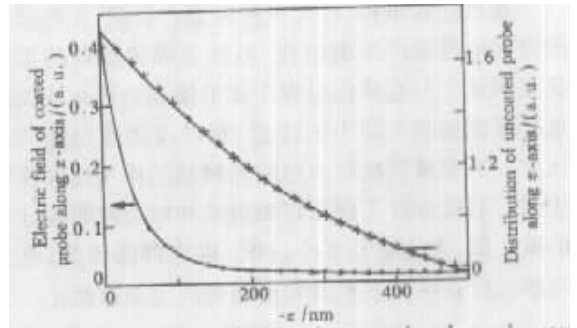


Fig. 8 Electric-field distribution of uncoated and metal-coated fiber-optic probe along z -axis

本文在计算时假设金属膜为理想导体, 即光在金属中的穿透深度为零, 很薄的一层金属即可将光完全屏蔽。这与实际情况有差异。特别是在靠近针尖端部分, 如果金属膜的厚度不够, 则可能有部分光从探针中泄露出来对近场分布产生一定的影响。

5 讨论与总结

局域场增强、边缘退极化和传播场与非传播场之间的转化等物理现象对任何小于波长的精细结构都存在。任何具有高空间频率特征的结构都会产生退极化现象, 即退极化是入射光对突变边界条件响应的结果。物体的实际尺寸及材料特性决定了退极化分量在总场强中所占的比例, 即物体的尺寸越大退极化的影响越小。正是近场光学主要研究小于波长的结构特征, 使得退极化及倏逝场对总场强的影响不容忽视。

由于材料特性不同, 退极化程度也存在很大的差异。本文研究结果表明, 裸光纤探针产生的退极化比金属膜探针要弱, 这表明介质材料的边缘增强效应比金属弱。两媒质的边界差异(折射率差异)越大, 则引起的退极化越强。正是由于金属产生更明

显的场增强效应,文献 [1] 中采用金属小球作为近场探针,比采用介质小球所得到的图像对比度好。

Novotny 曾在计算金属膜探针靠近介质样品时的场分布发现,出射光不仅沿入射光方向向前传播,而且在大于全内反射角的方向也存在两个很强的旁瓣。基于该原理提出并实现了的“禁戒光”近场光学显微镜,接收禁戒光所得到的图像比沿轴向传播的“允许光”的图像对比度和分辨率高^[3]。本文的研究结果表明,所谓禁戒光,是由于近场光学所特有的退极化现象产生了沿探针轴线方向偏振的纵向电场分量 $|E_z|$ 。接收禁戒光则能够很好地反映样品的边缘特性,因而可以改善图像的对比度。

通过比较可得:1)无论探针是否镀膜,光在传播的过程中都将产生退极化,但镀金属膜探针的退极化更明显。2)在成像过程中如果提高退极化或倏逝场分量在接收光强中的比重,则可以提高图像的对比度。3)金属膜探针对空间局域场的作用比裸探针更强。4)裸探针不存在将辐射波和倏逝波明显分开的截止面,无论直径多小, HE_{11} 模式都能传播;镀金属膜探针在纵向波数为零处辐射波完全被截止。

本文的仿真数值计算使用了 Remcom 公司提供的 XFDTD V.5.0 软件。本文的研究工作得到日本精工仪器株式会社(SII)的资助。

参 考 文 献

- [1] Courjon D, Bainier C. Near field microscopy and near field optics. *Rep. Prog. Phys.*, 1994, **57**:989~1028
- [2] 郭继华, 郭峰, 朱兆明. 微小孔衍射——近场光学理论. *光学学报*, 1998, **18**(10):1395~1398
- [3] Novotny L. Allowed and forbidden light in near-field optics. 1. A single dipolar light source. *J Opt. Soc. Am. (A)*, 1997, **14**(1):91~104
- [4] Novotny L, Pohl D W, Hecht B. Scanning near-field optical probe with ultrasmall spot size. *Opt. Lett.*, 1995, **20**(9):970~972
- [5] Castiaux A, Girard C, Spajer M *et al.*. Near-field optical effects inside a photosensitive sample coupled with a SNOM tip. *Ultramicroscopy*, 1998, **71**(1~4):49~58
- [6] Christensen D A. Analysis of near-field tip patterns including object interaction using finite-difference time-domain calculations. *Ultramicroscopy*, 1995, **57**:189~195
- [7] Furukawa H, Kawata S. Analysis of image formation in a near-field scanning optical microscope effects of multiple scattering. *Opt. Commun.*, 1996, **132**(1~2):170~178
- [8] Dumm R C, Allen E V, Joyce S *et al.*. Near-field fluorescent imaging of single proteins. *Ultramicroscopy*, 1995, **57**(1):113~117
- [9] Betzig E, Trautman J K, Harris T D *et al.*. Breaking the diffraction barrier, optical microscopy on a nanometric scale. *Science*, 1991, **251**(5000):1468~1470
- [10] 王长清, 祝西里. 电磁场计算中的时域有限差分法. 北京: 北京大学出版社, 1994
- [11] Gu M, Ke P C. Image enhancement in near-field scanning optical microscopy with laser-trapped metallic particles. *Opt. Lett.*, 1999, **24**(2):74~76

Characterization of Near-Field Distribution of Optical Fiber Probe by FDTD

Liu Xiumei Wang Jia

(Department of Precision Instruments, State Key Laboratory of Precision Measurement Technology and Instruments, Tsinghua University, Beijing 100084)

(Received 16 June 2000; revised 23 August 2000)

Abstract: The near-field distribution of uncoated and metal-coated fiber-optic probes were characterized by the method of three dimensional finite-difference time-domain (FDTD). The result reveals that, for an uncoated probe, propagating wave emitting from the conic side dominates the near-field distribution, while a film of metal is coated, the coated probe can confine the wave more strictly inside it. Second, the polarized incident wave becomes depolarized after emitting from the small aperture of two kinds of probes. In other words, there are two electric-field components whose polarization direction is perpendicular to that of the incident one. Accordingly, the image contrast can be improved if the polarized components instead of the total field are detected. The relationship between the distribution characteristics of near-field distribution and the phenomenon of depolarization is analyzed in detail.

Key words: near-field optics; finite-difference time-domain; evanescent wave; optical probe