

文章编号: 0253-2239(2003)12-1409-4

# 光子扫描隧道显微镜球形样品二维近场强度分析\*

王晓秋<sup>1,2</sup> 吴世法<sup>1</sup> 简国树<sup>1</sup> 王克逸<sup>3</sup> 王景芝<sup>1</sup> 潘石<sup>1</sup>

1 大连理工大学物理系, 大连 116024  
2 大连大学物理系, 大连 116622  
3 中国科学技术大学精密机械与精密仪器系, 合肥 230026

**摘要:** 采用时域有限差分方法计算全内反射和光子扫描隧道显微镜系统。光子扫描隧道显微镜的基本工作原理是隐失波的产生和探测, 当入射光在两种介质的分界面上发生全内反射, 并在界面处产生非辐射的电磁波——隐失波时, 采取对两界面入射光进行分别设置的方法即“三波法”设置入射激励元。分别计算一个球和两个球形样品的近场分布, 并计算散射小球为探针, 一个球为样品的扫描图像。结果表明: 采用二维时域有限差分方法计算能较直观地显示样品表面的近场分布。表明时域有限差分方法在光子扫描隧道显微镜理论研究中具有很大潜力。

**关键词:** 近场光学; 时域有限差分方法; 光子扫描隧道显微镜; 近场分布

中图分类号: TN26; O242.1; O766 文献标识码: A

## 1 引言

扫描近场光学显微镜(SNOM)通过光探针探测样品表面隐失波的超高频信息, 可获得纳米尺度的分辨图像。扫描近场光学显微镜成像方式多种多样, 通常可分为两大类: 一种是光源和探测器位于样品同侧的反射式扫描近场光学显微镜(RSNOM)<sup>[1]</sup>; 另一种是光源和探测器位于样品两侧的透射式扫描近场光学显微镜, 即光子扫描隧道显微镜。光子扫描隧道显微镜主要利用全内反射照射下的样品与探针之间的光子隧道信息, 在探针通过样品表面扫描时, 获得超衍射分辨的样品图像信息。光子扫描隧道显微镜可对生物样品进行无损探测, 维持生物样品的活性, 并能给出样品的形貌图像和折射率图像。

时域有限差分方法是当前电磁场领域应用最为广泛的数值方法之一, 其方法简单并适合模拟复杂的媒质结构, 而所需的存储量和中央处理器时间只与计算空间所包含的离散网格数成正比, 因此被广泛应用于电磁散射与辐射、电磁兼容和光学应用<sup>[2]</sup>等。

1996年 Christensen<sup>[3]</sup>首次将时域有限差分方法引入近场光学, 用二维时域有限差分方法计算了光纤探针的近场分布。2000年周庆<sup>[4]</sup>和2001年刘

秀梅<sup>[5]</sup>、刘凯<sup>[6]</sup>等采用三维时域有限差分方法计算光纤探针的光强分布。本文将二维时域有限差分方法应用于光子扫描隧道显微镜, 研究全内反射条件下光学近场表面的隐失波。给出球形样品光学近场强度的瞬态分布和等高度场强分布及小球为探针在样品上方的扫描图像。

## 2 时域有限差分方法

时域有限差分方法是1966年由 Yee<sup>[4]</sup>首先提出, 它直接将麦克斯韦方程作二阶精度的差分离散, 加上初始条件和边界条件按时间每一步推进交替地计算空间电场和磁场。时域有限差分方法可模拟波的传播及物体的相互作用, 可给出取样时刻的空间场分布图像。

在直角坐标系下, 时域麦克斯韦方程为

$$\nabla \times \mathbf{E} = -\mu(\partial \mathbf{H} / \partial t), \quad (1)$$

$$\nabla \times \mathbf{H} = \epsilon(\partial \mathbf{E} / \partial t) + \sigma \mathbf{E}, \quad (2)$$

其中 $\epsilon$ 为媒质的介电常量,  $\mu$ 为媒质的磁导率,  $\sigma$ 为媒质的电导率。

将(1)式、(2)式中的总场分别表示为

$$\mathbf{E} = \mathbf{E}^{\text{total}} \equiv \mathbf{E}^{\text{inc}} + \mathbf{E}^{\text{scat}}, \quad (3)$$

$$\mathbf{H} = \mathbf{H}^{\text{total}} \equiv \mathbf{H}^{\text{inc}} + \mathbf{H}^{\text{scat}}, \quad (4)$$

式中 $\mathbf{E}^{\text{total}}$ 、 $\mathbf{H}^{\text{total}}$ 分别表示总电场和磁场,  $\mathbf{E}^{\text{inc}}$ 、 $\mathbf{H}^{\text{inc}}$ 分别为入射场分量,  $\mathbf{E}^{\text{scat}}$ 、 $\mathbf{H}^{\text{scat}}$ 为散射场分量。将(3)式、(4)式分别代入(1)式、(2)式中得到

\* 国家自然科学基金(60007011)资助课题。

E-mail: wangxqdl@sina.com

收稿日期: 2002-09-23; 收到修改稿日期: 2002-10-28

$$\nabla \times \mathbf{E}^{\text{scat}} = -\mu \frac{\partial \mathbf{H}^{\text{scat}}}{\partial t} - \left[ (\mu - \mu_0) \frac{\partial}{\partial t} + \sigma \right] \mathbf{H}^{\text{inc}}, \quad (5)$$

$$\nabla \times \mathbf{H}^{\text{scat}} = \left( \epsilon \frac{\partial}{\partial t} + \sigma \right) \mathbf{E}^{\text{scat}} + \left[ (\epsilon - \epsilon_0) \frac{\partial}{\partial t} + \sigma \right] \mathbf{E}^{\text{inc}}, \quad (6)$$

$\epsilon_0, \mu_0$  分别为空气中的介电常量和磁导率。(5) 式、(6) 式为时域有限差分散射场法的偏微分方程<sup>[5]</sup>, 将电磁场的各分量置于 Yee 网格中, 用中心差分公式代替各个偏微分方程中的偏微分运算。在以下所有计算中入射平面波均采用解析设置法。

在时域有限差分方法中, 为保证计算结果的精度, 空间增量  $\Delta x$  和  $\Delta y$  要远小于波长, 通常  $\Delta \leq \lambda/10$ 。同时为保证差分格式的稳定性, 时间增量  $\Delta t$  必须满足稳定性条件<sup>[6]</sup>

$$v_{\text{max}} \Delta t \leq \left( \frac{1}{\Delta x^2 + \Delta y^2} \right)^{-1/2}, \quad (7)$$

其中  $v_{\text{max}}$  为计算空间中电磁波最大速度。为避免网格截断处的反射, 本文采用二阶 Mur 吸收边界条件<sup>[7]</sup>。

### 3 计算模型及结果

光子扫描隧道显微镜基本工作原理是隐失波的产生和探测。当入射光在两种介质的分界面上发生全内反射时, 在界面处会产生非辐射的电磁波——隐失波。隐失波沿表面方向传播, 而沿纵向迅速消

失。这是对两半无限大界面进行模拟, 实际计算中应对两界面入射光进行分别设置, 本文采用 Wang<sup>[8]</sup> 的“三波法”。

图 1 所示为二维时域有限差分计算模型,  $n_1 = 1.458, n_2 = 1$  分别是两种半无限大介质交界面下和上折射率, 选取两相同的界面高度, 模拟的整个网格空间为  $200 \times 200$ , 每个网格的大小为  $\Delta x = \Delta y = 10 \text{ nm}$ , 入射光为 p-极化平面波, 波长为  $\lambda = 632.8 \text{ nm}$ , 入射角为  $\theta = 45^\circ$ 。用时域有限差分方法运算可同时获得整个计算空间的电场和磁场各分量的瞬时值、幅值和相位。在近场成像中, 光电探测器所接受的信号为光强, 即电场模量的平方, 因此, 本文主要讨论电场模量的分布特性。图 2 为计算达到稳定后某一瞬态两界面的全内反射场分布, 由图中的分布可以看到, 在介质 1 内中心处由于形成入射光和反射光的叠加, 造成某些部位场强增加和减弱现象。而在我们所关心的介质 2 则出现沿纵向指数衰减, 横向沿表面方向传播的隐失波。隐失波强烈局域在界面附近, 其衰减长度为  $586 \text{ nm}$ , 这与精确解的结果是完全一致的。

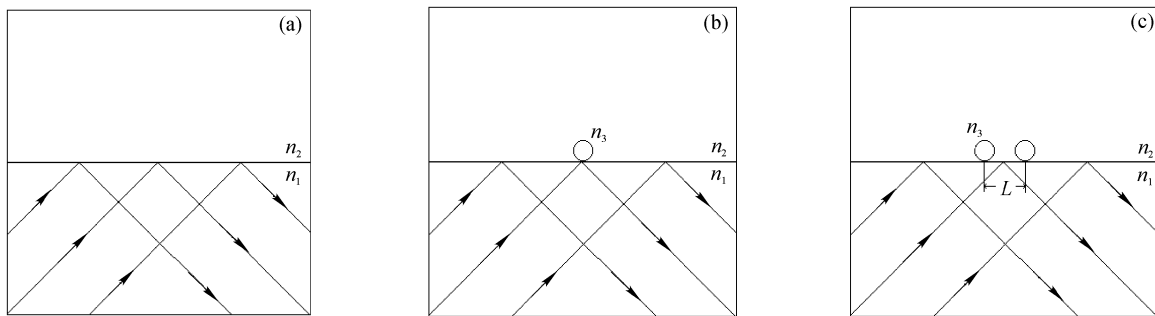


Fig. 1 The calculation models of 2-D FDTD. (a) Total internal reflection mode  $n_1 = 1.458, n_2 = 1$ ; (b), (c) Calculation models of one sphere and two-sphere samples respectively, radius of the sphere  $50 \text{ nm}$ ,  $L = 200 \text{ nm}$ ,  $n_3 = 2$

图 3 和图 4 分别为一个和两个球形样品的瞬态场分布, 图 5 和图 6 分别为一个和两个球形样品上方  $20 \text{ nm}$  高度的近场光强分布。从图 3 和图 5 中可以看出两图是一致的, 图 4 和图 6 与前面类似。由图 5 可看出球边缘场强加强是由于球横向处于较强隐失场中, 小于波长的散射体产生的隐失波与全内反射隐失波叠加的结果, 随着远离散射体而迅速衰减至全内反射隐失场。球处于很快衰减的纵向隐失

场中, 因此散射强度没有增加。图 6 是在图 5 基础上再加一相同球, 显示靠近第一球间隙处场强再加强。两图都是散射体的体积小于入射波长, 因此由球散射的近场是隐失场并包含超衍射分辨信息。近场探测就是把局域于近场区的隐失场中的超分辨信息转换为能够探测的传播场。这就是光子扫描隧道显微镜系统所用的在样品上再加一小于波长的物体如探针, 可把隐失波转换成含有超分辨信息的传导

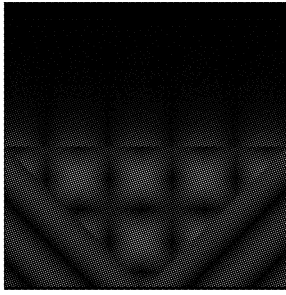


Fig. 2 The field distribution of total internal reflection

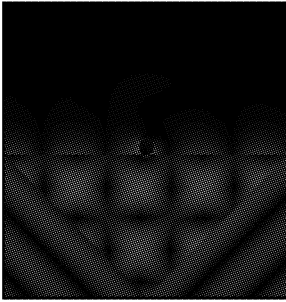


Fig. 3 The field distribution of one sphere sample

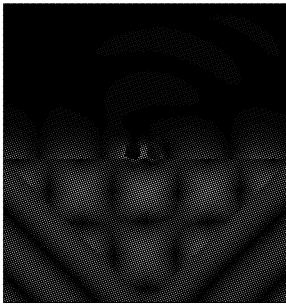
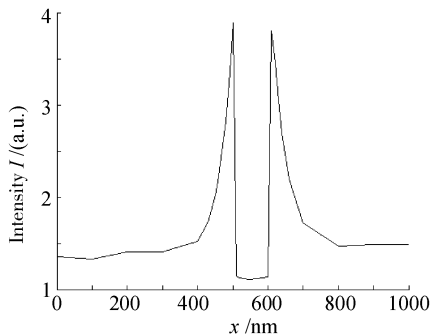


Fig. 4 The field distribution of two-sphere sample

Fig. 5 The near-field intensity distribution along a line at a constant height  $z = 20$  nm above one sphere sample

波,为远处探测器所接收。图 7 就是考虑散射小球为探针,在样品上方扫描时的计算模型。图 8 分别为球上方  $z=150$  nm 的强度分布,实线为探针在样品上方  $z$  处逐点扫描而获得的强度分布,虚线为没有探针的近场强度分布。很明显小尺寸的探针扫描图线有助于获取样品真实的信息。

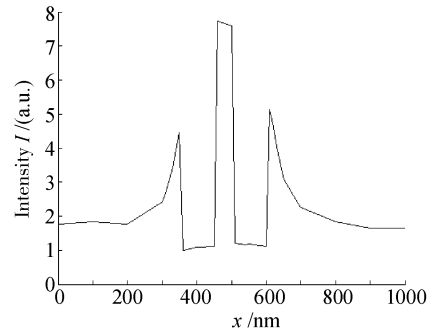
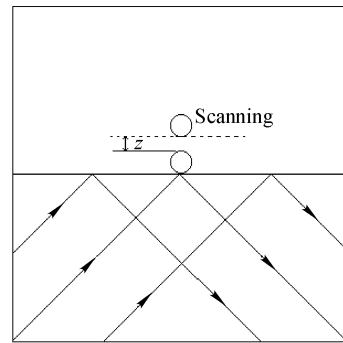
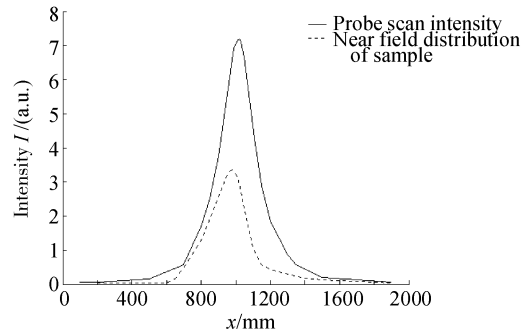
Fig. 6 The near-field intensity distribution along a line at a constant height  $z=20$  nm above two-sphere sample

Fig. 7 The calculation model of sphere considered as probe tip

Fig. 8 The scanning intensity along a line at a constant height  $z = 150$  nm above the sample. Solid line corresponds to scanning intensity distribution by sphere probe tip, whereas dashed line is for intensity distribution without probe tip

**结论** 1) 时域有限差分方法应用于光子扫描隧道显微镜系统全内反射能够得到令人满意的结果。对光子扫描隧道显微镜的理论研究表明,时域有限差分方法是一种可行的有效的数值方法,是近场光学理论研究中的强有力工具。2) 给出小球样品的瞬态近场分布和等高度场强分布。结果表明,与无样品的场分布相比,由于样品散射作用使场分布随着样品的形状改变,进一步解释了光子扫描隧道显微

镜超衍射分辨的探测机理,对指导实验具有一定的实际意义。3) 给出探针扫描图像,本工作的进一步研究应是继续考虑样品与各种光纤探针形状对扫描图像分辨力的影响等。

### 参 考 文 献

- 1 Wu Qinghua, Wang Guiying, Xu Zhizhan. Influence of polarization of the incident light on imaging of the RSNOM. *Acta Optica Sinica* (光学学报), 2003, **23**(5): 513~516 (in Chinese)
- 2 Zhu Zhihong, Ye Weimin, Yuan Xiaodong *et al.*. Study of transmission characteristics of 2-D photonic crystals by the finite-difference time-domain method. *Acta Optica Sinica* (光学学报), 2003, **23**(5):522~525 (in Chinese)
- 3 Christensen D A. Analysis of near field tip patterns including object interaction using finite-difference time-domain calculations. *Ultramicroscopy*, 1995, **57**:189~195
- 4 Zhou Q, Zhu X, Li H F. Study on light intensity distribution of tapered-fiber in near-field scanning microscopy. *Acta Physica Sinica* (物理学报), 2000, **49**(2):210~214 (in Chinese)
- 5 Liu Xiumei, Wang Jia. Characterization of near-field distribution of optical fiber probe by FDTD. *Acta Optica Sinica* (光学学报), 2001, **21**(10):1234~1238 (in Chinese)
- 6 Liu K, Bai M, Lu Y H *et al.*. Electromagnetic propagation of fiber probe for near-field optical recording using 3-D FDTD method. *Chin. J. Lasers* (中国激光), 2001, **28**(3):253~256 (in Chinese)
- 7 Yee K S. Numerical solution of initially boundary value problem involving Maxwell's equations in isotropic media. *IEEE Trans. Antennas Propagat.*, 1966, **AP-14**:302~307
- 8 Kunz K S, Luebbers R J. *The Finite Difference Time Domain Method for Electromagnetics*. Boca Raton, FL: CRC Press, 1993. 22~23
- 9 Taflove A, Brodwin M E. Numerical solution of steady-state electromagnetic scattering problems using the time-dependent Maxwell's equation. *IEEE Trans. Micro. Theory Tech.*, 1975, **MTT-23**:623~630
- 10 Mur G. Absorbing boundary conditions for the finite-difference approximation of the time-domain electromagnetic field equations. *IEEE Trans. Electromagn. Compat.*, 1981, **EMC-23**:377~382
- 11 Wang P B, Leonard G, Baron J E. A three-wave FDTD approach to surface scattering with applications to remote sensing of geophysical surfaces. *IEEE Trans. Antennas Propagat.*, 1996, **44**(4):504~513
- 12 Jian Guoshu, Pan Shi, Wang Yuguang. Numerical simulation of eliminating PSTM pseudo-image in constant-intensity scanning imaging mode. *Acta Electro-Microscopy Sinica* (电子显微学报), 1999, **18**(1):13~17 (in Chinese)

## Analysis of the Near Field Intensity of Sphere Samples in Photon Scanning Tunneling Microscope

Wang Xiaoqiu<sup>1,2</sup> Wu Shifa<sup>1</sup> Jian Guoshu<sup>1</sup> Wang Keyi<sup>3</sup> Wang Jingzhi<sup>1</sup> Pan Shi<sup>1</sup>

$\left[ \begin{array}{l} 1 \text{ Department of Physics, Dalian University of Technology, Dalian 116024} \\ 2 \text{ Department of Physics, Dalian University, Dalian 116622} \\ 3 \text{ Department of Precision Machinery \& Precision Instrumentation,} \\ \text{University of Science and Technology of China, Hefei 230026} \end{array} \right]$

(Received 23 September 2002; revised 28 October 2002)

**Abstract:** The total internal reflection and the system of photon scanning tunneling microscope (PSTM) are simulated using finite difference time domain (FDTD) method. The basic principle of photon scanning tunneling microscope is that the surface evanescent wave generated under total internal reflection condition and the surface evanescent wave is explored. The incident wave is set throughout the problem space in photon scanning tunneling microscope into three-wave included the incident wave, reflective wave and transmitted evanescent wave. The intensity distribution of near field of sphere samples is calculated. And the scanning images can be obtained when the probe of sphere scans along a line above the sphere samples. The results show that the finite difference time domain method is an efficient tool for photon scanning tunneling microscope.

**Key words:** near field optics; finite difference time domain method (FDTD); photon scanning tunneling microscope (PSTM); near field distribution