

文章编号: 0253-2239(2005)04-470-5

# 探针尖带金属微粒的光子扫描隧道显微镜 成像数值模拟\*

简国树 柏菲 潘石 吴世法  
(大连理工大学物理系, 大连 116024)

**摘要:** 引入了色散介质的时域有限差分法散射场方程, 并针对光子扫描隧道显微镜的带金属尖光纤扫描成像问题进行三维的数值模拟。在考虑了光纤和样品相互作用的情况下, 采用等效入射波法设置入射波, 探针扫描模式为等高扫描模式, 从成像分辨率和灵敏度的角度, 比较了不同入射角、不同的光纤-样品间距, 不同金属类型, 及不同金属尖大小的成像情况。数值模拟结果显示, 带金属颗粒光纤探针尖的光子扫描隧道显微镜在成像分辨率和灵敏度上有显著的改进, 而带不同类型金属颗粒情况下对分辨率影响不大, 灵敏度是银最好。

**关键词:** 近场光学; 时域有限差分法; 光子扫描隧道显微镜; 色散介质  
中图分类号: TN742; O242.1; O766 文献标识码: A

## The Numerical Simulation of Photon Scanning Tunnel Microscope's Image with Metallic Particle Probe

Jian Guoshu Bai Fei Pan Shi Wu Shifa

(Department of Physics, Dalian University of Technology, Dalian 116024)

**Abstract:** The image of photon scanning tunnel microscope (PSTM), which uses fiber probe with metallic nanoparticle tip, is analyzed with the finite-difference time-domain (FDTD) formulation of dispersive materials. With considering the interaction between the field of the fiber probe and the sample, the influences of different angle of incidence, different distance between probe and sample, different kinds of metal and different size of the metallic nanoparticle on the resolution and the sensitivity of PSTM are investigated with the equivalent incident wave method. The simulated results show that the image of PSTM with metallic nanoparticle tip has higher resolution and sensitivity. The influences of different kinds of metallic nanoparticle on the resolution are not obvious, while the image of PSTM which uses fiber probe with silvery nanoparticle tip has the best sensitivity.

**Key words:** near-field optics; finite-difference time-domain; photon scanning tunnel microscope; dispersive materials

### 1 引 言

光子扫描隧道显微镜(PSTM)是一种新近发展起来的高分辨光学显微镜, 它能突破传统的衍射极限, 对纳米尺度的样品成像, 且具有光学观察无损探测的特点, 可观察活的生物样品, 保持细胞活性<sup>[1]</sup>。由于影响光子扫描隧道显微镜成像的参量很多, 有必要分析研究这些参量对光场的影响。光子扫描隧道显微镜光纤探针有不镀膜、带金属尖、孔径镀膜和全镀膜等, 本文尝试用时域有限差分法数值模拟带金属

尖光纤探针扫描成像情况, 主要考察参量变化对分辨率与灵敏度的影响, 并初步探索有色散介质时的光子扫描隧道显微镜扫描模型的电磁场分布。

时域有限差分法(FDTD)<sup>[2,3]</sup>是一种十分有效的电磁场数值计算方法, 于1966年由Yee氏提出, 至1981年Mur边界条件的提出逐渐发展进入了成熟和广泛应用阶段。传统的时域有限差分法直接从麦克斯韦方程组出发, 针对非色散的均匀介质建立散射场差分方程, 对问题空间进行均匀正交网格划

\* 国家自然科学基金(30270367)和教育部博士点基金(20020141018)资助课题。

作者简介: 简国树(1939~), 男, 台湾省台南人, 大连理工大学物理系高级工程师, 主要从事近场光学显微镜研究和近场光学理论计算工作。E-mail: jiangs@mail.dlptt.ln.cn

收稿日期: 2004-04-01; 收到修改稿日期: 2004-08-25

分来计算每一点的场量。2001 年刘秀梅<sup>[4]</sup>采用三维时域有限差分法计算光纤探针近场分布,2002 年洪涛<sup>[5]</sup>将三维时域有限差分法应用于模拟虚拟光纤光场分布,取得合理结果。2003 年王晓秋<sup>[6]</sup>将二维时域有限差分法方法应用于光子扫描隧道显微镜模型,其样品为球形,用小球近似模拟光纤探针。而实验中的物理模型更为复杂,且出现色散介质问题需要解决,如果直接应用非色散介质的时域有限差分法计算色散介质的散射场,会出现不收敛的情况。作者曾就二维的情况进行过探讨<sup>[7]</sup>,本文选用电磁理论中金属光学性质的 Drude 模型<sup>[8]</sup>,模拟了三维情况下探针尖带金属微粒的光子扫描隧道显微镜扫描样品产生的散射场的坡印亭矢量分布,在考虑了光纤尖与样品相互作用的情况下,就光子扫描隧道显微镜实验装置中的几种重要参量,如:入射角、探针-样品间距、光纤尖金属粒子的种类、尺度等的不同情况作了对比,得到参量变化对成像的影响。

## 2 数值模拟的物理模型

本文对光子扫描隧道显微镜进行数值模拟的物理模型如图 1 所示,当平行入射的激光束的入射角超过全内反射临界角时,在样品表面上方将产生隐失波。当光纤尖探头进入样品表面隐失波区域时,将产生光子隧道效应,探针尖将隐失场光耦合入光纤,转换为可传输光被收集,从而获得携带样品表面形貌和光学性质的信息。入射波的设置采用等效入射波法<sup>[9]</sup>,将截面上方的隐失波作为等效入射波激励样

品和探针尖,探针尖在样品上方做等高扫描,从而得到样品的形貌和光学性质信息。

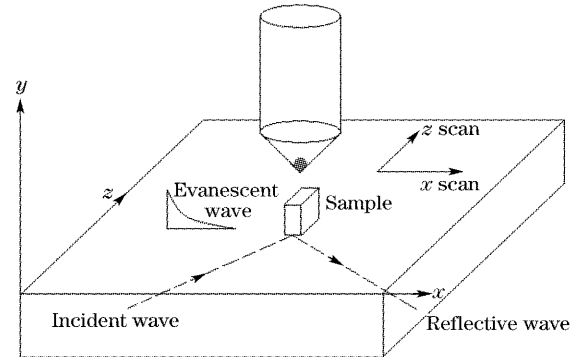


图 1 光子扫描隧道显微镜简化原理图

Fig. 1 The principle of photon scanning tunnel microscope

图 1 中入射光波长为 633 nm, P 极化波, 探针尖锥角为 90°, 直径 200 nm 以上为圆柱形。经模拟测试距离光纤 1000 nm 的截面上已形成较稳定的传输波, 在此截面计算坡印亭矢量 ( $S = E \times H$ ) 作为光子扫描隧道显微镜扫描图像。

使用的计算机是 Pentium 4, 主频 2.6 GHz, 内存 1 GB, 为提高运算速度和保持计算精度, 采用了渐变网格, 扫描范围内网格为 10 nm × 10 nm × 10 nm, 其他区域网格递增, 这样将同样大小的空间划分为 114 × 220 × 114 个网格, 一个点计算时间为 13 min。

## 3 散射场方程及边界条件

时域有限差分法通过解麦克斯韦方程组得到散射场分量的公式<sup>[2,3]</sup>, 以三维 P 波  $x$  方向为例,  $E_x$ 、 $H_y$  形式如下:

$$E_x^{s,n+1}(i,j,k) = \frac{\epsilon}{\epsilon + \sigma\Delta t} E_x^{s,n}(i,j,k) - \frac{\sigma\Delta t}{\epsilon + \sigma\Delta t} E_x^{i,n}(i,j,k) - \frac{(\epsilon - \epsilon_0)\Delta t}{\epsilon + \sigma\Delta t} \frac{\partial}{\partial t} E_x^{i,n}(i,j,k) + \frac{\Delta t}{\epsilon + \sigma\Delta t} \left[ \frac{H_z^{s,n+1/2}(i,j,k) - H_z^{s,n+1/2}(i,j-1,k)}{\Delta y} - \frac{H_y^{s,n+1/2}(i,j,k) - H_y^{s,n+1/2}(i,j,k-1)}{\Delta z} \right],$$

$$H_y^{s,n+1}(i,j,k) = H_y^{s,n}(i,j,k) - \frac{\Delta t}{\mu_0} \left[ \frac{E_z^{s,n+1/2}(i+1,j,k) - E_z^{s,n+1/2}(i,j,k)}{\Delta x} - \frac{E_x^{s,n+1/2}(i,j,k+1) - E_x^{s,n+1/2}(i,j,k)}{\Delta z} \right],$$

其中  $\mu_0$  表示真空中的磁导率,  $\epsilon$ 、 $\epsilon_0$  分别为媒质和真空中的介电常量,  $\sigma$  为电导率。  $\Delta x$ 、 $\Delta y$ 、 $\Delta z$  分别为三个坐标方向的空间网格步长。

在空气中  $\sigma = 0$ ,  $\epsilon = \epsilon_0$ 。

色散介质中  $D$  和  $E$  的关系<sup>[2,3]</sup> 为

$$D(t) = \epsilon_\infty \epsilon_0 E^n + \epsilon_0 \sum_{m=0}^{n-1} E^{n-m} \int_{m\Delta t}^{(m+1)\Delta t} \chi(\tau) d\tau,$$

其中  $\chi(\tau)$  是  $\chi(\omega)$  的傅里叶变换,  $\chi(\omega)$  为电极化率。

据 Drude<sup>[8]</sup> 模型,

$$\chi(\omega) = \omega_p^2 / \omega(j\nu_c - \omega),$$

其中  $\omega_p$  代表等离子的辐射频率,  $\nu_c$  代表等离子的碰撞频率。

将总场划分为入射场和散射场, 并将  $\chi(\omega)$  代入, 即可用于时域有限差分法中金属部分的散射场

模拟。

边界条件采用 Mur 吸收边界条件<sup>[2,3]</sup>,这是时域有限差分法中处理计算区域截断边界的一种有效的吸收边界条件。

### 4 结果分析

基本参量为:入射角为 60°,金属尖大小为 30 nm×30 nm×30 nm,样品与光纤尖的间距为 10 nm。以下依次改变这些参量中的某一项,观察不同参量对分辨力和灵敏度的影响。

#### 4.1 带金尖光纤探针与不带金尖光纤探针比较

下面以扫描小样品为例,比较两种光纤扫描的

效果,如图 2 所示。

图 2(a)为不镀膜光纤探针扫描单个小样品的数值模拟结果,由图上可见,其分辨力为 60 nm,灵敏度也不高。图 2(b)为带金尖光纤探针扫描单个小样品的结果,其分辨力可达 10 nm,比裸光纤扫描的分辨力高很多,而灵敏度也因为金属的增强效应而增大近千倍。图 2(c)为带金尖光纤探针扫描四个小样品的模拟结果图,图上小样品间隔 30 nm,已被完全分开。

图 2(a)~图 2(c)均用同一激励幅度,裸光纤探针给出正衬比度像,金属尖探针给出的是负衬比度像。本文中的金属探针尖扫描模拟结果图均用的是负衬比度图像。

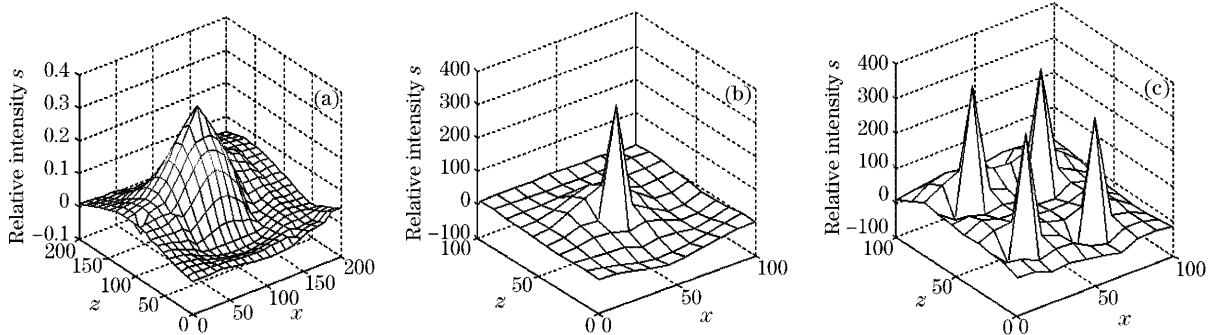


图 2 (a)裸光纤探针扫描单个小样品,(b)带金尖光纤探针扫描单个小样品,(c)带金尖光纤探针扫描四个小样品 (小样品大小 10 nm×10 nm×20 nm,四个样品间距 30 nm)

Fig. 2 (a) The result with bare probe to scan a single sample, (b) the result with metallic particle tip probe to scan a single sample result, (c) the result with metallic particle tip probe to scan four samples (the single sample's size is 10 nm×10 nm×20 nm and the separation of the four samples is 30 nm)

#### 4.2 探针尖端金属颗粒大小对成像的影响

图 3(a)~图 3(c)为不同尺寸金尖探针扫描结果图,通过比较可见,金属微粒尺度大,扫描图像随

颗粒增大而变形,分辨力变差,但灵敏度由于光纤尖金属散射体增大而增强。

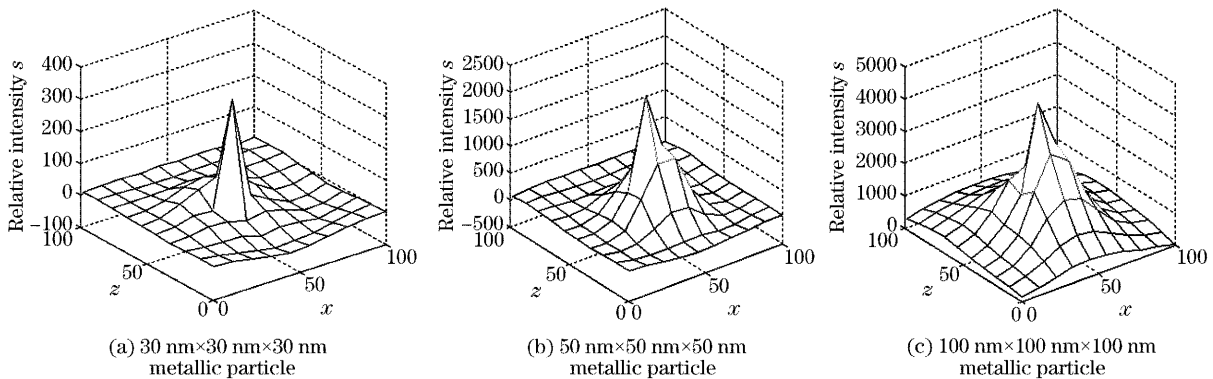


图 3 为不同尺寸金尖探针扫描图

Fig. 3 The scanning image with different metallic particle probes

#### 4.3 光纤与样品间距改变对成像的影响

以金微粒为例,模拟三种光纤尖与样品间距下的坡印亭矢量分布,如图 4 所示。

图 4(a)~图 4(c)为不同光纤-样品间距下的带金尖光纤探针扫描结果图。由图 4 可见,由于金属表面近场强度波振幅衰减很快,当间距为 10 nm 时,

分辨力及灵敏度都很好,而当光纤尖与样品间距增至20 nm范围时,分辨力和灵敏度都快速下降,当间距达到40 nm时,几乎分辨不出样品的存在。

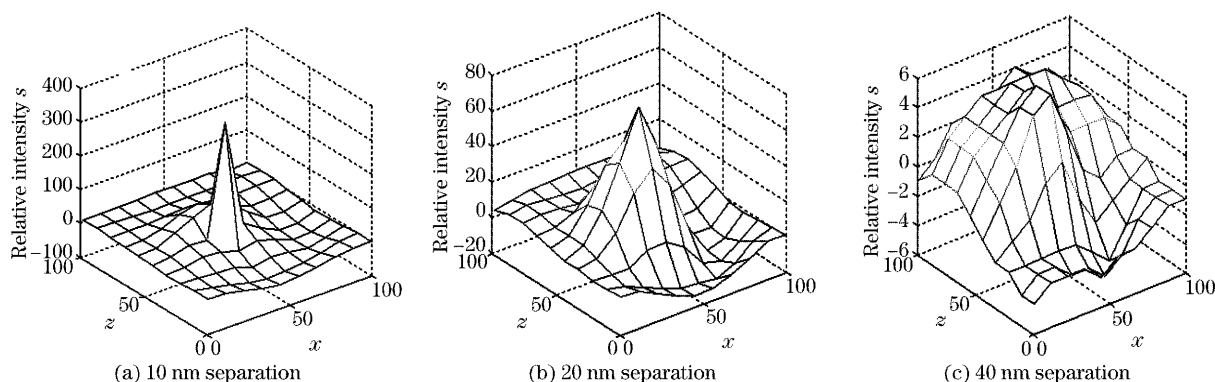


图4 不同样品间距的扫描结果

Fig. 4 The scanning result with different separations

#### 4.4 入射角对成像的影响

图5(a)~图5(c)为入射角分别在 $50^\circ$ 、 $60^\circ$ 、 $70^\circ$ 时带金尖光纤探针扫描单个小样品结果图。从图上看,在满足大于临界角情况下,角度越大,灵敏度越差,但对分辨力影响不是很明显。在计算隐失场 $E_s^i$

的公式里有 $\exp\left(-\frac{2\pi}{\lambda}\sqrt{n_1^2\sin^2\theta_1-1}\right)$ 这一项,其中 $\theta_1$ 是入射角。从式中可以看出, $\theta_1$ 越大, $E_s^i$ 越小,灵敏度也就越差。

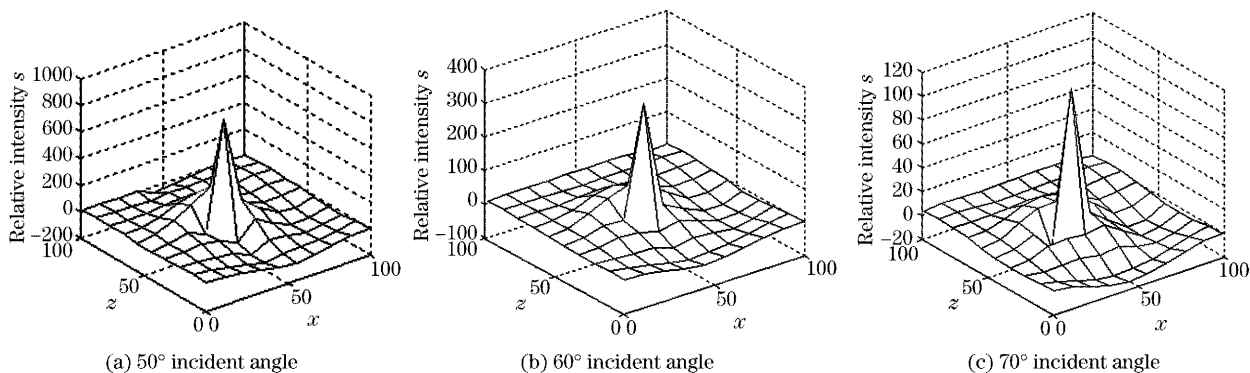


图5 不同入射角的扫描结果

Fig. 5 The scanning result with different incident angles

#### 4.5 光纤尖带不同金属微粒成像情况比较

再以扫描单个 $10\text{ nm}\times 10\text{ nm}\times 20\text{ nm}$ 的小样品为例,分别以不同金属尖光纤探针扫描。结果显示,这三种金属微粒光纤尖扫描结果的分辨力很高,都在20 nm以下,差别不是很明显,而从灵敏度上看,银的效果最好,分别是金的25倍和铝的40倍。如表1所示。

表1 不同金属颗粒成像灵敏度比较

Table 1 Different sensitivities of three kinds of PSTM with different metallic particle probe

The metal partic kind	Permittivity	Sensitivity
Au	$\epsilon = -9.89 + 1.05i^{[10]}$	348
Al	$\epsilon = -17.5 + 0.7i^{[11]}$	223
Ag	$\epsilon = -23.2 + 8.1i^{[12]}$	8942

## 5 结 论

本文用色散介质的时域有限差分法数值模拟探针尖带金属微粒光子扫描隧道显微镜成像,分别就四种情况讨论了不同金属尖,不同的金属颗粒大小,不同样品-光纤间距,不同入射角对成像分辨力和灵敏度的影响。数值结果表明:采用探针尖带金属微粒显著地提高了光子扫描隧道显微镜成像的灵敏度和分辨力。所得的参量变化对成像分辨力和灵敏度的影响趋势可为光子扫描隧道显微镜实验选择参量提供参考。得出结果如下:

1) 带金属尖比不带金属光纤尖扫描结果无论在分辨力还是灵敏度上都提高很多倍,其中银的增强最大,金、铝次之;

2) 金属颗粒小分辨力好,但灵敏度降低;

3) 光纤-样品之间的间距在 10~30 nm 时图像分辨力比较好,大于 30 nm 时其分辨力和灵敏度锐减,表明其等高扫描模式动态范围约 30 nm;

4) 入射角对灵敏度影响较明显。在大于临界角情况下,角度越大,灵敏度越差。

就一种数值模拟而言,本文仍存在一定误差,比如:等效入射波法不是自洽场解,可看作一级近似;网格划分造成的光纤尖形状的误差等。由于本文的设置条件没有相应其他方法的结果相比较,也无相应的实验结果,所以本文是作为一个理论上的探索,得出了一些有意义的结果,而方法的误差分析有必要做进一步的探讨。

### 参 考 文 献

- 1 Wu Shifa, Yao Junen, Jian Guoshu. The progress in PSTM[J]. *Acta Optica Sinica*, 1998, **18**(2): 191~198 (in Chinese)  
吴世法,姚骏恩,简国树. 光子扫描隧道显微镜的进展[J]. *光学学报*, 1998, **18**(2): 191~198
- 2 Karl S. Kunz, Raymond J. Luebbers. *The Finite Difference Time Domain Method for Electromagnetics* [M]. Tokyo: CRC Press. 1993
- 3 A. Taflove. *Computational Electrodynamics: The Finite-Difference Time-Domain Method* [M]. Boston: Artech House. 1995
- 4 Liu Xiumei, Wang Jia. Characterization of near-field distribution of optical fiber probe by FDTD[J]. *Acta Optica Sinica*, 2001, **21**(10): 1234~1238 (in Chinese)  
刘秀梅,王 佳. 用时域有限差分法研究光纤微探针近场分布特性[J]. *光学学报*, 2001, **21**(10): 1234~1238
- 5 Hong Tao, Wang Jia, Sun Liqun *et al.*. Numerical simulation analysis of near-field optical virtual probe[J]. *Acta Optica Sinica*, 2002, **22**(12): 1415~1420 (in Chinese)  
洪 涛,王 佳,孙利群等. 近场光学虚拟光探针的数值分析[J]. *光学学报*, 2002, **22**(12): 1415~1420
- 6 Wang Xiaoqiu, Wu Shifa, Jian Guoshu. Analysis of near field intensity of sphere samples in photon scanning tunneling microscope[J]. *Acta Optica Sinica*, 2003, **23**(12): 1409~1412  
王晓秋,吴世法,简国树. 光子扫描隧道显微镜球形样品二维近场强度分析[J]. *光学学报*, 2003, **23**(12): 1409~1412
- 7 Jian Guoshu, Bai Fei, Pan Shi. The FDTD numerical simulation of PSTM imaging[J]. *Opt. Technique*, 2005, **31**(1): 62~64 (in Chinese)  
简国树,柏 菲,潘 石. PSTM 成像的 FDTD 数值模拟[J]. *光学技术*, 2005, **31**(1): 62~64
- 8 John T. Krug II, Erik J. Sanchez, X. Sunney Xie. Design of near-field optical probes with optimal field enhancement by finite difference time domain electromagnetic simulation[J]. *J. Chem. Phys.*, 2002, **116**(24): 10895~10901
- 9 Jian Guoshu, Wang Jingzhi, Wang Xiaoqiu *et al.*. An equivalent incident wave method of FDTD for PSTM[J]. *J. Chin. Electron. Microsc. Soc.*, 2003, **22**(3): 226~228 (in Chinese)  
简国树,王景芝,王晓秋等. FDTD 等效入射波法分析 PSTM [J]. *电子显微学报*, 2003, **22**(3): 226~228
- 10 A. Madrazo, R. Carminoti, M. Neco-Vesperinos. Polarization effects in the optical interaction between a nanoparticle and a corrugated surface: implications for apertureless near-field microscopy[J]. *J. Opt. Soc. Am. (A)*, 1998, **15**(1): 109~119
- 11 E. Oesterschulze, G. Georgiev, M. Muller-Wiegand. Transmission line probe based on a bow-tie antenna[J]. *J. Microscopy*, 2001, **202**(1): 39~44
- 12 Richard A. Watts, Trevor W. Preist, J. Roy Sambles. Sharp surface-plasmon resonances on deep diffraction gratings [J]. *Phys. Rev. Lett.*, 1997, **79**(20): 3978~3984