近场光学中光纤探针的光强分布*

¹(云南大学物理系,昆明 650091) ²(北京大学物理系,人工微结构及介观物理国家重点实验室,北京 100871) ³(电子科技大学高能所,成都 610054)

(1999年6月14日收到;1999年7月9日收到修改稿)

光在亚微米尺度的光纤探针中的传播行为是一个迫切需要了解的重要问题.用时域有限差分法对三维光纤探 针的 Maxwell 方程直接进行求解,获得了光纤探针的光强分布.计算结果表明:光纤探针中的光强分布呈固定的花 样图形,花样图形的形状与光的偏振及针尖的结构形状等有关.该结果对深入理解光纤探针的辐射机理非常有益, 并对实际制作性能优良的光纤探针具有指导意义.

PACC:0760P;4110H;4110F

1 引 言

扫描近场光学显微镜是新近发展起来的新型高 分辨率显微镜¹¹. 与传统光学显微镜不同,近场光 学显微镜利用了极细小的光学探针——探针尖端的 孔径远小于光的波长. 当探针距样品表面在一个波 长以内,即近场区域时,可以探测到丰富的亚微米光 学信息. 这些精细结构信息仅仅存在于表面的非传 播场内. 由于是在近场,所以它的分辨率不受衍射的 限制,可以对在样品中的纳米尺度区域的各种光学 信息如散射、偏振等进行高分辨率成像,并且可以实 现超高密度的光学信息存储. 近场光学显微镜已引 起广泛注意,在凝聚态物理、生命科学、化学、材料科 学及信息产业有着广泛而重要的应用^[2-5].

孔径为亚微米尺度的锥型镀膜光纤探针是近场 光学显微镜的关键部件之一,它决定着近场光学显 微镜的分辨率、灵敏度及传输效率.因此迫切需要了 解光在亚微米尺度的光纤探针中的传播行为.在亚 微米尺度下,用几何光学或标量衍射理论均不能正 确描述光波的传播行为,必须从 Maxwell 方程组出 发,求解体系的电磁场分布.随着近场光学显微技术 的发展,如何运用电磁场理论来理解和说明近场光 学现象变得日益重要.以前的研究工作大多采取一 些简化处理办法,如Leviatar⁶3研究了无限大良导 体平板上的小孔衍射的近场结构 给出了小孔偶极 近似的适用范围;另外,Novotnv⁷]等人用多重多极 子方法(Multiple Multipole,MMP)计算了二维探针 的场分布,对二维问题 MMP 方法已证明是成功的, 然而该方法在处理三维问题时,由于对多极子阶数 及其位置的设定方法一般为经验方法,多极子的设 定是否恰当直接影响计算结果,而对非线性介质和 各向异性的复杂的非均匀材料的几何结构的问题, 尚未有多极子的设置的一般方法,因而 MMP 方法 对一般的三维问题的求解是较困难的,此外,已用到 的方法还有自洽计算的方法^[8]. 自洽计算法实际上 就是积分方程法,积分方程的求解通常是转化为一 个矩阵方程问题 因此 这种方法对复杂电磁结构的 计算无优越性 不易处理多种媒质共存的问题 对非 均匀媒质中的电磁波传播问题有很大困难,对存储 空间的要求高.

本 文 采 用 的 方 法 为 时 域 有 限 差 分 法 (FDTD)^{9-11]}.该方法的主要特点是:1)直接在时域 进行计算,物理图像清晰 2)可模拟各种复杂的电磁 结构,具有广泛的适用性;3)同一问题,与其他方法 相比,节约存储空间和计算时间.Christenserf^{12]}已 用二维FDTD计算场分布,但三维FDTD计算更能 反映真实的物理过程.

^{*}人工微结构及介观物理国家重点实验室和国家自然科学基金(批准号:19674004和19890380)资助的课题.

211

2 计算方法——FDTD

FDTD 是求解 Maxwell 方程的一种数值解法. FDTD 是 Yee 1966 年提出的^[9]. 以后 ,FDTD 主要应 用于微波领域 ,模拟雷达散射截面和天线辐射图 ,而 在光学领域并未得到广泛应用 ,其原因是一般的光 学问题都是在远场 ,而 FDTD 不适合于求解远场问 题. 近场光学研究的是小于一个波长以内的电磁场 分布 ,因而 ,采用 FDTD 研究近场问题是很合适的.

在直角坐标系下,时域 Maxwell 方程为

$$\nabla \times E = -\mu \frac{\partial H}{\partial t},$$

$$\nabla \times H = \varepsilon \frac{\partial E}{\partial t} + \sigma E,$$
(1)

其中 ε 为媒质的电介常数 ,μ 为媒质的磁导率 ,σ 为 媒质的电导率.

将(1)式展开成六个偏微分方程,并将电磁场的 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,经整理后,可以得到六 个差分迭代公式.对非磁性媒质中的 FDTD 法的迭 代公式为^[9]

$$H_x^{n+1/2}(i,j+1/2,k+1/2) = H_x^{n-1/2}(i,j+1/2,k+1/2) + CD[E_y^n(i,j+1/2,k+1/2)] + CD[E_y^n(i,j+1/2,k+1/2)] = H_x^n(i,j+1/2,k) + E_z^n(i,j,k+1/2)],$$

$$E_x^{n+1}(i+1/2,j,k) = CA(i+1/2,j,k)E_x^n(i+1/2,j,k) + CD + CB(i+1/2,j,k)E_x^n(i+1/2,j,k) + CD + CB(i+1/2,j,k)E_x^n(i+1/2,j-1/2,k)) + H_y^{n+1/2}(i+1/2,j,k-1/2) = -H_y^{n+1/2}(i+1/2,j,k+1/2)].$$

其他电磁场分量满足的差分方程与此类似.其中

$$CA(i,j,k) = \left(1 - \frac{\sigma(i,j,k) \cdot \Delta t}{2\varepsilon(i,j,k)}\right) / \left(1 + \frac{\sigma(i,j,k) \cdot \Delta t}{2\varepsilon(i,j,k)}\right) / CD = \frac{\Delta t}{\Delta} \cdot \frac{1}{\sqrt{\varepsilon_0 \mu_0}},$$

$$CB(i,j,k) = \frac{\varepsilon_0}{\varepsilon(i,j,k) + \frac{\sigma(i,j,k) \cdot \Delta t}{2\varepsilon(i,j,k) \cdot \Delta t}}.$$

为保证计算结果的精度,空间增量 Δ 必须远小于波长,通常 $\Delta \leqslant \lambda/10$,为保证差分格式的稳定性,

时间增量 Δt 必须满足以下稳定性条件¹⁰:

$$v_{\max}\Delta t \leqslant \left[\frac{1}{\Delta x^2 + \Delta y^2 + \Delta z^2} \right]^{-1}$$
 ,

其中 v_{max} 为计算空间中电磁波的最大速度. 若 Δx = $\Delta y = \Delta z = \Delta$ 则

$$v_{\max}\Delta t \leqslant \frac{\Delta}{\sqrt{3}}.$$

为了不在网格截断处引起波的明显反射,从而 以有限的网格空间模拟出无界的电磁波传播空间, 一种行之有效的方法是在截断处设置吸收边界.吸 收边界对截断边界网格点处的场分量进行特殊计 算,使得传播到截断边界上的波不产生反射,就像被 边界完全吸收一样.本文采用二阶 Mur 吸收边界条 件¹¹¹.

3 计算模型、计算结果及讨论

图 1 为光纤探针的三维 FDTD 计算模型. 模拟 的光纤探针为一锥形结构,其中探针的长度为 H =600 nm,大端直径 $\Phi_1 = 700$ nm,针尖出口孔径为 Φ_2 = 100 nm,光纤的介电常数为 $\epsilon = 2.25$. 光纤外层的 Al 厚 T = 80 nm. 波长为 $\lambda = 500$ nm 的入射偏振光 沿 z 方向从光纤的大端入射,偏振方向为 y 方向. 模拟的整个网格空间的总数为 100 × 100 × 100. 每 个网格的大小为 $\lambda/50 = 10$ nm. 计算工作在 SGI/ IRIX 6.4 工作站上进行,该机内存 256 M byte A 个 CPU.



图 1 光纤探针的三维 FDTD 计算模型

用 FDTD 方法,运算一次可以同时获得整个计 算空间的电场、磁场六个分量的瞬时值、幅值及位 相.在光学中一般测量的是光强,即主要关心的是电 场的分布.由于我们加的入射光是沿 y 方向偏振 的,计算结果表明电场在 x 方向上的分量很小.图 2 为用 FDTD 方法的计算的光纤探针的光强分布.图 χ a)为过光纤中心在 y-z 平面上的光强分布 (b)为 过光纤中心 x-z 平面上的光强分布 (c)为针尖出口 处 x-y 平面上的光强分布.(d)为距光纤探针出口端 面 20 nm 处 x-y 平面上的光强分布.

3.1 光强分布特点

根据波导理论,光在单模介质光纤波导中以 HE₁₁模传播.当光进入有金属包层的光纤探针部分 时,就变成光在充有介质的金属波导中的传播问题, 光就耦合到金属波导的 TE₁₁模,TE₁₁模的截止波 长

 $\lambda_{\rm c}=2\pi a/1.84$,

其中 *a* 为圆波导半径.该模式对 330 nm 的光(入射 光在介质中的波长为 500 nm/1.5)的截止直径约为 200 nm.从计算结果可以看出,在光纤探针直径为 200 nm 处形成了最大光强,一部分光在截止平面反 射,一部分光穿过截止面以指数形式衰减.计算发 现,沿着传播方向上的电场分量(即 *E*_z)在光纤探针 孔径可以与波长比拟时(即截止面附近),其大小变 得可以和横向分量(即 *E*_y)相比拟,即光的传播分量 一部分变成了不能传播的分量.这是由光纤探针的 波导结构决定的.因而,截止面将光纤探针分成了两 部分,在光纤探针中直径大于截止直径的部分,光在 给定形状及结构尺寸的光纤探针中的传播形成了不 完全驻波,一部分光在传播过程中受到边界的反射, 与行进的入射波叠加,形成驻波图样;另一部分通过 截止面以指数衰减形式传出去.



图 3 为光强沿光纤探针中心轴的分布图,光强 用光纤探针中的最大值进行了归一化.从图 3 中可 以看出,对所计算的探针结构而言,光强最大处距光 纤探针出口为 80 nm,约为光在介质中的波长的四 分之一.由此可见,光纤探针的出口面相当于一反射 面.而从光纤探针出口透出去的电磁波比光纤探针 中的电磁波要小得多,且衰减很快.

在光纤探针中直径大于截止直径的部分,在沿 z 方向的驻波波长(定义为两个波节点之间的距离 的两倍 测量值约为 400 nm,在垂直于锥面方向也 形成驻波,其构成较复杂.而在光纤探针中直径小于 截止直径的部分,光以指数形式衰减.因此,光纤探 针中的电场既不单纯为驻波的场,也不单纯为行波 的场,而是一种由它们叠加成的场.



图 3 光强沿光纤探针中心轴的分布图

总之,在光纤探针形成的光强分布呈固定的花 样图形,即形成固定的模式,且与光纤探针的形状及 结构尺寸有关.这与 Novotny^[7]的结果一致.

3.2 光的偏振对光强分布的影响

从光纤探针中截取的两个截面正好分别为与入 射偏振光平行(y=z 平面)和与入射偏振光垂直(x=z 平面)的横截面.由于光的偏振,使光强在y=z 平面 和x=z 平面上的分布是很不同的.首先,由于光的偏 振,形成的光斑不是圆对称的.在图2(c)及(d)中也 可以看出这一点.对于与入射偏振光平行的横截面, 由电磁场的边界条件知,由于电场的法向分量不连 续,因而,在光纤探针介质与金属包层的交界面上, 有极大值出现,故可以清楚地看到金属包层的界面; 而在与入射偏振光平行的横截面上,光纤探针介质 与金属包层的交界面与入射电场平行,由于电场的 切向分量连续,而在xz 截面上金属与介质的交界 面处正好是极小值,因而,看不到金属包层.在其他 截面的场分布也可作类似分析. 在光纤探针中的不 同位置与光的偏振方向的关系是不同的 ,因此光在 探针中的传播行为也不一样 ,从而表现出来的场分 布花样也不一样.

在探针针尖的金属包层的两侧,在与入射偏振 光平行的方向上会出现场的增强.其中金属包层内 侧的情况,上面已经分析.对外侧的情况,由电磁场 的边界条件,从探针针尖沿极化方向泄漏出去的电 磁波会绕射到金属包层外表面,在金属包层的棱角 处,由于"尖端效应",会出现场的增强.若金属包层 较厚,由于电磁波的衰减,则场的增强相应较弱.若 金属包层无限厚,即无限大导体平板,就看不到第二 次边缘增强效应.

光的偏振对成像会产生很大影响.因此,为了正 确地解释近场光学图像,考虑光的偏振是十分重要 的.Betzig 的实验也证实了这一点^[4].

3.3 对实际应用的指导意义

对透射式近场光学显微镜来说,对光纤探针的 要求是希望从探针针尖通过小孔泄漏出去的能量越 多越集中越好.从计算结果可以得出,对于有金属包 层的光纤探针,直径小于截止直径的部分对场的衰 减是很快的,因此,从实际应用的角度来说,应当尽 量减小这段长度,以减小能量的衰减,从而获得较强 的光源,这就要求光纤探针的锥角较大.但是还需综 合考虑分辨率的要求以及制作上的方便等其他因 素.改变针尖的形状及结构参数,利用 FDTD 方法 可方便求得相应结构的场分布,从而寻求较佳的探 针结构以满足实际应用的需要.因此,该项工作对探 针的制作具有指导意义.

4 结 论

我们利用 FDTD 分析了近场光学显微镜的光 纤探针的光强分布,计算结果表明:光纤探针中的光 强分布形成了不完全驻波,且与光的偏振及针尖的 结构有关.该结果对实际制作性能优良的光纤探针 具有指导意义.

当前近场光学研究最重要也最困难的一环,也 就是近场范围内光的传播以及与物质的相互作用的 理论研究.由于近场问题的复杂性,目前只有数值方 法才是现实可行的.我们在对可用的数值方法进行 对比分析的基础上,选用 FDTD 作为对近场光学作 理论研究的方法,因为 FDTD 可模拟各种复杂的电磁结构.从本文的计算实例——光纤探针的场分布计算来看,FDTD 对近场光学理论问题能够进行有效的模拟,从而获得了有关问题的近场光学清晰的物理图像,因此,FDTD 是研究近扬光学理论问题的强有力工具.对于用 FDTD 对近场光学的其他一些理论问题的研究,将另文发表.

- [1] E. Betzig et al., Science ,257(1992),189.
- [2] Th. Enderle et al. , Ultramicroscopy ,71(1998), 303.
- [3] Zhu Xing et al. J. Micro. ,194(1999) A39.

- [4] E. Betzig ,R. J. Chichester ,*Science* ,262(1993),1422.
- [5] L. Novotny et al. , Phys. Rew. Lett. 79(1997) 645.
- [6] Y. Leviatan J. Appl. Phys. 60(1986),1577.
- [7] L. Novotny et al., Ultramicroscopy 57(1995),180.
- [8] C. Girard , D. Courjon , Phys. Rev. , B42(1990), 9340.
- [9] K. S. Yee ,IEEE Trans. Antennas Propagat. ,AP-14(1966), 302.
- [10] A. Taflove, M. E. Brodwin, IEEE Trans. Micro. Theory Tech. MITT-23 (1975) 623.
- [11] G. Mur, IEEE Trans. Electromagn. Compat., EMC-23 (1981) 377.
- [12] D. A. Christensen , Ultramicroscopy 57 (1995), 189.

STUDY ON LIGHT INTENSITY DISTRIBUTION OF TAPERED-FIBER IN NEAR-FIELD SCANNING MICROSCOPY*

ZHOU $QING^{1/2}$) ZHU XING²) LI HONG-FU³)

¹ (Department of Physics, Yunnan University, Kunming 650091)

² (Department of Physics and State Key Lab for Mesoscopic Physics, Peking University, Beijing 100871)

³ (Institute of High Energy Electronics, University of Electronic Science and Technology of China, Chengdu 610054)

(Received 14 June 1999; revised manuscript received 9 July 1999)

ABSTRACT

Scanning near-field optical microscopy (SNOM) can provide optical imaging with ultrahigh resolution due to its breakthrough of the limit of optical diffraction. Metal-coated optical fiber probe is one of the most important parts in SNOM. In this paper, we have investigated a three-dimensional (3D) probe model by solving Maxwell equations with the finite-difference time-domain method. The 3D computation reveals that some patterns of field distributions of light in the probe are formed due to the polarization of light and the structure of the probe. This calculation is very helpful for understanding the radiation mechanism of light in the near-field region and the behavior of light propagation in the probe. The result can also help us to find optimized tip design.

PACC:0760P;4110H;4110F

^{*} Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 19674004 and 19890380).