بیست و پنجمین کنفرانس اپتیک و
فوتونیک ایران و یازدهمین کنفرانس
مهندسی و فناوری فوتونیک ایران،
دانشگاه شیراز،
شیراز، ایران.
۹-۱۱ بهمن ۱۳۹۷

طراحی و بهینه‌سازی سیستم طیف‌سنجی رامان تقویت‌شده با تیپ

مریم بحرینی

دانشگاه حضرت معصومه (س)، قم، رایانامه: Bahreini_mm@yahoo.com

چکیده - روش طیف‌سنجی رامان تقویت‌شده با تیپ (TERS) با ترکیب حساسیت شیمیایی روش طیف‌سنجی رامان و تفکیک‌پذیری بالای روش میکروسکپی پروب روبشی (SPM)، تصاویر شیمیایی در مقیاس نانومتری از سطوح فراهم می‌کند. در این مقاله طراحی سیستم طیف‌سنجی رامان تقویت‌شده با تیپ (TERS) بهینه به‌صورت تئوری انجام گرفته است. به‌منظور طراحی و ساخت یک سیستم TERS با راندمان بالا و به‌دست‌آوردن بهترین تقویت سیگنال، نیاز به شناخت و شبیه‌سازی پارامترهای موثر می‌باشد. پارامترهای ساختاری تیپ، زیرلایه و همچنین زاویه تابش لیزر به تیپ از مهم‌ترین عوامل برای بدست‌آوردن یک پیکربندی TERS بهینه و شناسائی شده‌اند و سیستم TERS با دو جنس تیپ سیلیکون و طلا طراحی و ارائه شده است. سیستم TERS با استفاده از تیپ سیلیکونی ساده‌تر و کم‌هزینه‌تر است در حالی‌که در سیستم با تیپ طلا تقویت‌های بیشتری بدست می‌آید. امید است که سیستم‌های TERS با ضریب تقویت بالا که در این مقاله طراحی و ارائه شده‌اند، در پیکربندی تجربی بکار گرفته شوند.

کلید واژه- بهینه‌سازی، زیرلایه، سیلیکون، طلا، طیف‌سنجی رامان تقویت‌شده با تیپ.

Design and optimization of tip-enhanced Raman spectroscopy system

Maryam Bahreini

Hazrat-e Masoumeh University, Qom, Email: Bahreini_mm@yahoo.com

Abstract- Tip-enhanced Raman spectroscopy (TERS) method provides chemical images on a nanometer scale from different surfaces by combining the chemical sensitivity of Raman spectroscopy and high resolution of the scanning probe microscopy (SPM) techniques. In this paper, an optimization of tip-enhanced Raman spectroscopy (TERS) system has been studied theoretically. In order to design and to construct a high efficiency TERS system as well as to achieve the best signal enhancement, it is necessary to recognize and simulate effective parameters. The tip and substrate structural parameters as well as the angle of laser radiation to tip are the most important factors for obtaining an optimal TERS configuration and the TERS system with two material of silicon and gold has been designed. The TERS system with the silicon tip is simpler and less costly, while the system with gold tip brings more enhancement. Hope that the high-gain TERS systems designed and presented in this paper will be used in empirical configuration.

Keywords: Gold, Optimization, Silicon, Substrate, Tip-enhanced Raman spectroscopy.

[Downloaded from opsi.ir on 2025-07-13]

این مقاله در صورتی دارای اعتبار است که در سایت www.opsi.ir قابل دسترسی باشد.

مقدمه

طیف‌سنجی رامان تقویت‌شده با تیپ (TERS)[1] یک روش اپتیکی میدان-نزدیک[2] است که به‌طور گسترده برای تجزیه و تحلیل شیمیایی نمونه‌های مختلف در مقیاس نانومتری به‌کار می‌رود. این روش، با ترکیب حساسیت شیمیایی روش طیف‌سنجی رامان و تفکیک‌پذیری بالای روش‌های مختلف میکروسکوپی پروب روبشی[3] از جمله میکروسکوپ تونل‌زنی روبشی[4] و میکروسکوپ نیروی اتمی[5]، تصاویر شیمیایی از سطوح در مقیاس نانو فراهم می‌کند. تابش نور لیزر متمرکزشده به نوک یک تیپ باعث افزایش میدان الکتریکی موضعی می‌شود. این افزایش میدان باعث افزایش شدت رامان از سطح نمونه در مجاورت تیپ می شود. این روش می‌تواند اطلاعات شیمیایی در سطح تک مولکول با قدرت تفکیک مکانی از مرتبه چند نانومتر (زیر حد پراش) فراهم کند [۱]. در این مقاله به طراحی سیستم طیف‌سنجی رامان تقویت‌شده با تیپ (TERS) بهینه به‌صورت تئوری می‌پردازیم. برای طراحی یک سیستم TERS بهینه، تمام فاکتورهای موثر بر افزایش سیگنال باید مورد توجه قرار گیرند. پارامترهای ساختاری تیپ (جنس و ابعاد) و زیرلایه (جنس و ضخامت)، به‌همراه هندسه تابش لیزر به تیپ مهم‌ترین عوامل برای بدست‌آوردن یک پیکربندی TERS بهینه هستند. در این مقاله، ما دو سیستم TERS مختلف با استفاده از تیپ‌های از جنس سیلیکون و طلا را معرفی و بهینه می‌کنیم. سیلیکون ماده‌ای است که برای ساخت تیپ‌های AFM تجاری استفاده می‌شود. در تمام اندازه-گیری‌های TERS، نمونه‌ها باید بر روی یک زیرلایه قرار بگیرند که حضور زیرلایه باعث افزایش سیگنال می‌شود. هدف نهایی از انجام این شبیه‌سازی‌ها، طراحی سیستم TERS بهینه می‌باشد تا یک مرجع خوب برای ساخت و چگونگی بکارگیری تیپ‌های TERS در پیکربندی تجربی باشد.

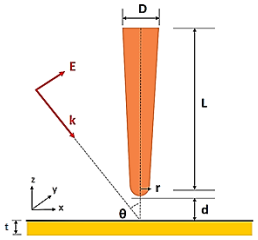
[1] Tip-Enhanced Raman Spectroscopy (TERS)
[2] Near-field
[3] Scanning Probe Microscopy (SPM)
[4] Scanning Tunneling Microscopy (STM)

شبیه‌سازی

برای شبیه‌سازی از روش 3D-FDTD که معادلات دیفرانسیل ماکسول را به‌صورت عددی حل می‌کند، استفاده شده است. در این روش، میدان الکترومغناطیسی و مواد ساختاری موردنظر در یک مش‌بندی گسسته متشکل از سلول‌هایی به نام سلول یی[6] توصیف می‌شوند. معادلات ماکسول مستقیماً در زمان حل می‌شوند و گام زمانی با استفاده از معیار پایداری[7] به اندازه مش وابسته است. روش مش FDTD غیریکنواخت و شرایط مرزی لایه کاملاً همسان[8] در تمام مرزها برای شبیه‌سازی‌ها استفاده شده‌اند که مرزهای باز (بدون انعکاس) را مدل می‌کند. ثوابت اپتیکی برای سیلیکون، آلومینیوم، طلا و نقره از مراجع مرتبط گرفته شده‌اند [۲و ۳]. تیپ به‌صورت یک مخروطی که نوک آن را دایره‌ای به شعاع r تشکیل می‌دهد با طول L و شعاع بالای D، که در فاصله d از سطح زیرلایه با ضخامت t قرارگرفته، مدل‌سازی می‌شود (شکل ۱). از یک موج تخت با قطبش p که از کنار با زاویه θ بر نانوکاواک تشکیل شده بین تیپ و زیرلایه فرود می-آید، برای تحریک رامان استفاده می‌شود. دامنه میدان الکتریکی موج فرودی ۱ V/m انتخاب می‌شود.

نتایج و بحث

پارامترهای موثر بر عملکرد سیستم TERS شامل جنس و ابعاد تیپ، جنس و ضخامت زیرلایه، زاویه تابش لیزر به تیپ و ... می‌باشند. در این قسمت اثر جنس تیپ و زاویه تابش لیزر بررسی می‌شود. درنهایت با بهینه‌سازی کل پارامترها، دو سیستم TERS با بیشینه تقویت میدان معرفی می‌شود.



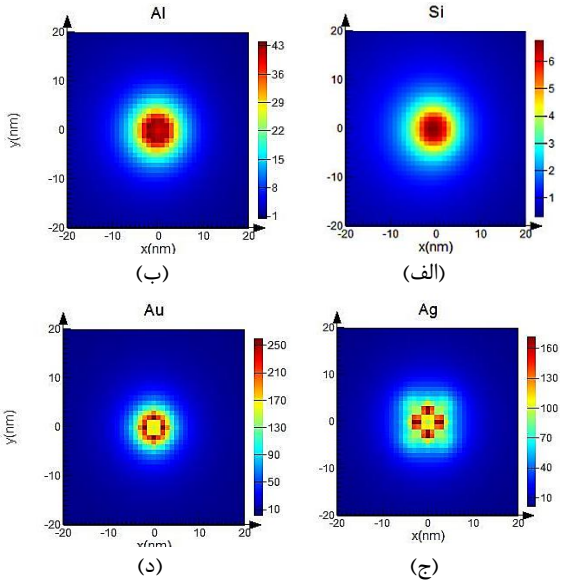
شکل ۱: هندسه شبیه‌سازی

[5] Atomic Force Microscopy
[6] Yee cell
[7] Stability Criterion
[8] Perfectly Matched Layer (PML)

این مقاله در صورتی دارای اعتبار است که در سایت www.opsi.ir قابل دسترسی باشد.
[Downloaded from opsi.ir on 2025-07-13]

۱. بررسی اثر جنس تیپ

در این قسمت به مقایسه تیپ سیلیکون با سه فلز آلومینیوم، طلا و نقره می‌پردازیم. نتایج مربوط به محاسبه مربع مؤلفه z میدان الکتریکی در صفحه زیر تیپ‌های با جنس‌های مختلف در شکل ۲ آورده شده است. زاویه مخروطی تیپ ۳۰ درجه و شعاع آن ۵ نانومتر تنظیم شده است. طول مخروطی تیپ ۵۰۰ نانومتر و شعاع بالای تیپ ۲۰۰ نانومتر، اندازه سلول یی ۱ نانومتر و زاویه تابش لیزر ۵۰ در محاسبه مورد استفاده قرارگرفته است. با توجه به نتایج، میدان الکتریکی توسط تیپ‌های سیلیکونی نمی‌تواند زیاد تقویت شود. تقویت ناچیز صورت گرفته به‌دلیل اثر رعد و برق میله‌ای است. دلیل آن این است که با پایین بودن غلظت بار آزاد (10^{16}~10^{13} cm^{-3}) در سیلیکون خالص، رزونانس پلاسمون سطحی[۹] به‌سختی می‌تواند در ناحیه مرئی برانگیخته شود. از بین تمام فلزات، طلا و نقره به دلیل دارا بودن چگالی الکترونی آزاد بالا و اثر LSPR قوی در ناحیه مرئی، به‌عنوان بهترین مواد برای ساخت تیپ‌های TERS محسوب می‌شوند. بی‌ثباتی نقره در هوا تا حدی کاربرد آن را محدود می‌کند. در نتیجه، تیپ‌های طلا کاربرد فزاینده‌ای در TERS پیداکرده‌اند.



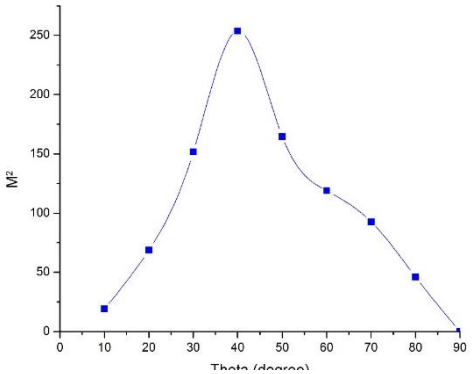
شکل ۲: مربع مؤلفه z میدان الکتریکی در صفحه زیر تیپ‌های از جنس: الف) سیلیکون، ب) آلومینیوم، ج) نقره و د) طلا

۲. بررسی زاویه تابش لیزر

نتایج مربوط به وابستگی تقویت میدان (M^2) به زاویه تابش نور فرودی (θ) با قطبش p از کنار به تیپ طلا با زاویه رأس تیپ مخروطی ۳۰ درجه، طول تیپ مخروطی ۵۰۰، شعاع نوک تیپ ۵۰، شعاع بالای تیپ ۲۰۰ و اندازه سلول یی ۱ نانومتر در شکل ۳ نشان داده شده است. از آن‌جا که مؤلفه عمودی میدان در راستای محور تیپ، نقش غالب در اثر جفت‌شدگی تیپ-زیرلایه را دارد، انتظار می‌رفت که بیشینه تقویت میدان در زاویه فرودی ۹۰ درجه رخ دهد. ولی با توجه به نمودار، بیشینه تقویت میدان برای یک تیپ طلا در فاصله ۲ نانومتری از زیرلایه طلا تحت تابش نور با قطبش p از کنار، در زاویه تابش ۴۰ درجه رخ می‌دهد. این مقدار بهینه در تابش قطری به‌دلیل وجود زیرلایه و بازتاب از سطح آن رخ می‌دهد. میدان عمودی کل در فاصله بین تیپ و زیرلایه، حاصل تداخل نور بازتابی و فرودی است. وقتی زاویه تابش به سمت ۹۰ درجه می‌رود، با اینکه دامنه میدان عمودی بازتابی بیشینه می‌شود، ولی فاز آن مخالف میدان فرودی است و شدت نور تداخلی در سطح زیرلایه کاهش می‌یابد [۴].

۳. طراحی سیستم TERS بهینه

از دو تیپ با جنس سیلیکون و طلا به‌همراه زیرلایه طلا برای طراحی دو سیستم بهینه استفاده می‌کنیم. پارامترهای مهم مربوطه شامل شعاع تیپ (r) ، زاویه تابش لیزر از کنار(θ) ، زاویه رأس تیپ (α) و ضخامت زیرلایه طلا (t) را بهینه می‌کنیم. ابتدا شعاع تیپ بهینه را با ثابت بودن بقیه پارامترها (طول تیپ ۵۰۰ نانومتر، شعاع بالایی تیپ ۲۰۰



شکل ۳: وابستگی تقویت میدان (M^2) به زاویه تابش لیزر فرودی (θ) با موج تخت و قطبش p برای تیپ طلا

این مقاله در صورتی دارای اعتبار است که در سایت www.opsi.ir قابل دسترسی باشد.

[Downloaded from opsi.ir on 2025-07-13]

جدول ۱: نتایج بهینه‌سازی سیستم TERS با استفاده از تیپ با جنس الف) سیلیکون و ب) طلا

الف)

	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	$\|M\|^2$
r (nm)	1 0.9e+3	5 2.3e+3	10 3.7e+3	**20** **7.8e+3**	30 7.7e+3	50 6.1e+3	70 5.1e+3	90 4.4e+3	100 4.4e+3	-	7.8e+3
α (degree)	5 3.7e+3	10 4.9e+3	20 6.0e+3	30 7.8e+3	40 6.4e+3	**50** **9.1e+3**	60 8.6e+3	-	-	-	9.1e+3
r (nm)	1 4.0e+3	5 7.7e+3	10 7.0e+3	20 9.2e+3	**30** **10.8e+3**	50 9.1e+3	70 7.7e+3	90 8.2e+3	100 8.6e+3	-	10.8e+3
θ (degree)	0 0.074e+3	10 1.7e+3	20 5.6e+3	30 8.4e+3	40 10.8e+3	**50** **16.2e+3**	60 2.1e+3	70 1.8e+3	80 2.0e+3	90 0.1	16.2e+3
t (nm)	5 1.6e+3	50 17.1e+3	100 16.2e+3	200 17.7e+3	**500** **17.8e+3**	-	-	-	-	-	**17.8e+3**

ب)

	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	$\|M\|^2$
r (nm)	**5** **7.5e+4**	10 5.3e+4	20 2.9e+4	30 2.3e+4	50 1.8e+4	70 1.5e+4	90 1.8e+4	100 1.7e+4	-	-	7.5e+4
α (degree)	5 2.1e+4	10 6.7e+4	20 6.0e+4	30 16.7e+4	**40** **13.4e+4**	50 7.5e+4	60 5.1e+4	-	-	-	13.4e+4
r (nm)	**5** **13.4e+4**	10 7.9e+4	20 4.2e+4	30 3.1e+4	50 2.6e+4	70 2.8e+4	90 3.0e+4	100 3.0e+4	-	-	13.4e+4
θ (degree)	0 0.0052e+4	10 1.7e+4	20 6.5e+4	30 12.5e+4	**40** **13.4e+4**	50 8.2e+4	60 1.7e+4	70 0.18e+4	80 0.08e+4	90 0.007	13.4e+4
t (nm)	5 5.4e+4	50 13.5e+4	100 13.4e+4	**200** **22.2e+4**	500 13.8e+4	-	-	-	-	-	**22.2e+4**

نانومتر، زاویه رأس تیپ ۳۰ درجه، زاویه تابش لیزر ۴۰ درجه و ضخامت زیرلایه ۱۰۰ نانومتر) بدست آوردیم. بعد از آن به سراغ بهینه کردن زاویه رأس تیپ رفتیم. بعد از بدست آوردن زاویه رأس بهینه دوباره شعاع را بهینه کردیم. نتایج بهینه‌سازی سیستم TERS در جدول ۱ آورده شده است. در هر خانه عدد بالا مربوط به مقدار متغیر مورد بررسی و عدد پائین مربوط به M^2 و در ستون آخر هم ماکزیمم M^2 برای هر متغیر نوشته شده است. در تیپ سیلیکونی بیشینه سیگنال TERS از مرتبه بزرگی حدود $۱۰^{۶}$ و در تیپ طلا، بیشینه سیگنال TERS از مرتبه بزرگی حدود $۱۰^{۸}$ می‌باشد که دو مرتبه بزرگی بهبود یافته است.

نتیجه‌گیری

در این مقاله، سیستم TERS با دو جنس تیپ سیلیکون و طلا طراحی و ارائه شده است که بیشینه تقویت بدست آمده برای تیپ سیلیکون با شعاع ۳۰ نانومتر، زاویه راس ۵۰ درجه، زاویه تابش ۵۰ درجه و ضخامت زیرلایه ۵۰۰ نانومتر از مرتبه $۱۰^{۶}$ و برای تیپ طلا با شعاع ۵ نانومتر، زاویه راس ۴۰ درجه، زاویه تابش ۴۰ درجه و ضخامت زیرلایه ۲۰۰ نانومتر از مرتبه $۱۰^{۸}$ میباشد. امید است که این سیستم‌ها در پیکربندی تجربی بکار گرفته شوند.

مرجع‌ها

[1] Zhang, R.; Zhang, Y.; Dong, Z. C.; Jiang, S.; Zhang, C.; Chen, L. G.; Zhang, L.; Liao, Y.; Aizpurua, J.; Luo, Y.; Yang, J. L.; Hou, J. G. (2013). Nature 498, pp. 82−86.

[2] Johnson, P.B. and R.-W. Christy, Optical constants of the noble metals. Physical review B 6(12): p. 4370 (1972).

[3] Palik, E.D., Gallium Arsenide (GaAs). Handbook of optical constants of solids, 1: p. 429-443. (1985).

[4] O. J. F Martin, C. Girard, Appl. Phys. Lett. 70, 10 (1997).

این مقاله در صورتی دارای اعتبار است که در سایت www.opsi.ir قابل دسترسی باشد.

[Downloaded from opsi.ir on 2025-07-13]