بیست و هشتمین کنفرانس اپتیک و فوتونیک
ایران و چهاردهمین کنفرانس مهندسی و
فناوری فوتونیک ایران،
دانشگاه شهید چمران اهواز،
خوزستان، ایران.
۱۴-۱۲ بهمن ۱۴۰۰

بررسی تأثیر جنس تیپ و لایه‌نشانی آن بر تقویت میدان الکتریکی در طیف‌سنجی رامان تقویت‌شده با تیپ

عادله نوری، مریم بحرینی، سید هاشم عارف

دانشگاه قم، قم، ایمیل: a.noori1374@gmail.com

دانشگاه علم و صنعت ایران، تهران، ایمیل:M_Bahreini@iust.ac.ir

دانشگاه قم، قم، ایمیل: h-aref@qom.ac.ir

چکیده - در این مقاله از روش تفا ضل محدود در حوزه زمان برای تخمین شدت و توزیع میدان الکتریکی تقویت شده ب صورت مو ضعی در طیف سنجی رامان تقویت شده با تیپ (TERS) در مجاورت تیپ مخروطی شکل به قطر نوک ۱۰ نانومتر ا ستفاده شده ا ست. تأثیر ا ستفاده از مواد مختلف برای تیپ در مجاورت زیر لایه و همچنین اثر لایه‌ن شانی نازک فلزهای مختلف بر روی تیپ در میزان تقویت میدان الکتریکی برر سی شده ا ست. جنس تیپ در سیستم TERS از موادی نظیر طلا، نقره، آلومینیوم و سیلیکون و همچنین حالت ترکیبی از این مواد ب صورت لایه‌ن شانی در نظر گرفته شده ا ست. نتایج ن شان می‌دهد که در حالتی که لایه‌نشانی و بستر هر دو از جنس طلا با شند، بیشترین تقویت میدان ایجاد می شود و هر چه ضریب خاموشی ماده فلزی کمتر باشد تقویت میدان الکتریکی بیشتری ایجاد می‌شود.

کلید واژه- تقویت میدان الکتریکی، روش تفاضل محدود در حوزه زمان، طیف‌سنجی رامان تقویت شده با تیپ، طیف‌سنجی رامان

The impact of tip material and coating on electric field enhancement of tip-enhanced Raman spectroscopy (TERS)

Adeleh Noori, Maryam Bahreini, Seyed Hashem Aref

Qom University, Qom, Email: a.noori1374@gmail.com

Iran University of Science and Technology, Tehran, Email: M_Bahreini@iust.ac.ir

Qom University, Qom, Email: h-aref@qom.ac.ir

Abstract- In this paper, the finite difference time domain (FDTD) method is used to estimate the intensity and distribution of localized electric field enhancement in tip-enhanced Raman spectroscopy (TERS) in the vicinity of a conical tip with a diameter of 10 nm. The effect of using different tip materials in the vicinity of the substrate and also the effect of different tip coatings on the amount of electric field enhancement have been investigated. Tips in our TERS systems are made of materials such as gold, silver, aluminum and silicon, as well as a combination of these materials as coatings. Our simulation results show that the maximum enhancement produced with gold coating and substrate; and the lower the extinction coefficient of the metal material, the more electric field enhancement is created.

Keywords: Electric Field Enhancement, Finite Difference Time Domain, Raman Spectroscopy, Tip-Enhanced Raman Spectroscopy.

[Downloaded from opsi.ir on 2026-11-03]

مقدمه

طیف‌سنجی رامان تقویت‌شده با تیپ[1](TERS) یک روش اپتیکی میدان-نزدیک[2]است که برای تجزیه و تحلیل سطوح در مقیاس نانو اخیراً بسیار مورد توجه قرار گرفته است. به طور خلاصه در این روش، تابش نور لیزر متمرکز شده به نوک یک تیپ باعث افزایش میدان الکتریکی موضعی می‌شود. این افزایش میدان باعث افزایش شدت رامان از سطح نمونه در مجاورت تیپ می‌شود. شدت پراکندگی رامان به دو دلیل: ۱. تشدید پلاسمون سطحی موضعی[3]و ۲. اثر رعد و برق میله[4]تقویت می‌شود [۱]. برای طراحی یک سیستم TERS بهینه، تمامی عوامل مؤثر بر دو ویژگی حساسیت آشکارسازی و قدرت تفکیک مکانی باید مورد توجه قرار گیرند [۲]. در این پژوهش، از روش مدل‌سازی تفاضل محدود در حوزه زمان سه بعدی[5](3D-FDTD) برای تخمین دقیق تاثیر منبع نور قطبیده خطی در تقویت میدان الکتریکی استفاده شده است. شبیه‌سازی‌های ارائه شده در طول‌موج‌های مختلف ۵۳۲، ۶۳۳ و ۷۸۵ نانومتر برای تحریک LSPR تیپ انجام شده است. در کارهای اخیر دیگر پارامتر های ساختاری تیپ از جمله ضخامت لایه نشانی تیپ، ارتفاع، شعاع تیپ و ...مورد بررسی قرار گرفته است [۳]. در این مقاله از فلزاتی همچون طلا، نقره، آلومینیوم و سیلیکون به عنوان جنس تیپ و یا لایه‌نشانی تیپ استفاده شده و نتایج مربوط به میزان تقویت میدان الکتریکی در حالت های مختلف بررسی و مقایسه شده‌اند.

شبیه‌سازی

رویکرد تفاضل محدود در حوزه زمان، یک روش موثر برای حل معادلات ماکسول در هندسه‌های پیچیده است. در این روش، میدان الکترومغناطیسی و ساختار ماده موردنظر، بر روی یک شبکه گسسته متشکل از سلول‌های یی[6]توصیف می‌شوند. معادلات ماکسول مستقیماً در زمان حل می‌شوند و گام زمانی از طریق معیار پایداری[7]به اندازه مش وابسته است. این روش، یک نمایش دقیق از معادلات ماکسول می‌باشد در حدی که فاصله‌گذاری مش را به صفر می‌رساند. منطقه شبیه‌سازی به صورت یک سیستم سه‌بعدی توسط شرایط مرزی لایه کاملاً همسان[8](PML) احاطه شده است تا تاثیر آن بر تشدید سیستم را محدود کند. برای شبیه‌سازی تیپ TERS از یک مخروط گرد از جنس نقره (طلا) با قطر تیپ ۱۰ نانومتر و زاویه مخروط ۲۵ درجه استفاده می‌شود. دامنه میدان الکتریکی موج فرودی ۱v/m در نظرگرفته می شود. این پارامترها بر اساس تصاویر SEM[9] از تیپ معمولی که در اندازه‌گیری TERS استفاده می‌شوند تخمین زده می‌شود. بستری از جنس طلا یا نقره با ضخامت ۵ نانومتر در داخل منطقه شبیه‌سازی معرفی شده و ۱ نانومتر در زیر راس مخروط قرار می‌گیرد. مش مکانی، ۰,۲ نانومتر تنظیم شده است که همگرایی عددی نتایج را تضمین می‌کند. همچنین از میدان پراکنده-میدان کل[10] (TFSF) برای جلوگیری از اتصال احتمالی با مرزهای منطقه شبیه‌سازی استفاده شده است.

نتایج و بحث

ثابت‌های نوری مواد استفاده شده در شبیه‌سازی به ازای طول‌موج‌های ۵۳۲ nm، ۶۳۳ nm و ۷۸۵ nm در جدول (۱) ارائه شده است [۴].

جدول (۱): معرفی ثابت‌های نوری مواد استفاده شده در شبیه‌سازی در طول‌موج‌های ۵۳۲ nm، ۶۳۳ nm و 785 nm [۲].

ماده	ثابت دی الکتریک					
	بخش حقیقی			بخش موهومی (ضریب خاموشی)		
	۵۳۲ nm	۶۳۳ nm	۷۸۵ nm	۵۳۲ nm	۶۳۳ nm	۷۸۵ nm
سیلیکون	۴,۱۳	۳,۸۶	۳,۶۸	۰,۰۳	۰,۰۱۵	۰,۰۰۶
طلا	۰,۴۴	۰,۱۷	۰,۱۲	۲,۱۸	۳,۳۶	۴,۷۳

[1] Tip-Enhanced Raman Spectroscopy (TERS)
[2] Near-field
[3] Localized Surface Plasmon Resonance (LSPR)
[4] Lightening Rod Effect
[5] Three Dimensional Finite-Difference Time-Domain
[6] Yee cell
[7] Stability criterion
[8] Perfectly matched layer
[9] Scanning electron microscope
[10] Total field scattered field

[Downloaded from opsi.ir on 2026-11-03]

نقره	۰,۳۳	۰,۰۳۱	۰,۰۳۸	۳,۵	۴,۳۹	۵,۶
آلومینیوم	۰,۵۴	۰,۸۴	۱,۷۵	۵,۱	۶,۰۶	۷

تقویت میدان الکتریکی، با نماد M^2 نمایش داده می‌شود. اکنون به بررسی تقویت میدان الکتریکی با استفاده ازتیپ سیلیکون و آلومینیوم در حالت‌های مختلف می‌پردازیم.

۱. بررسی تقویت میدان الکتریکی در تیپ سیلیکون

در اندازه‌گیری‌های TERS، نمونه باید روی یک زیر لایه مشخص قرار بگیرد. حضور زیر لایه شرایطی را فراهم می‌کند که جفت‌شدگی الکترومغناطیسی میدان-نزدیک بین تیپ و زیر لایه به وجود آید. این جفت‌شدگی می‌تواند منجر به یک میدان الکتریکی تقویت شده شود که راه مؤثری را برای بهبود حساسیت آشکارسازی در سیستم TERS فراهم می‌کند. . از بین تمام فلزات، طلا و نقره به دلیل دارا بودن چگالی الکترونی آزاد بالا و اثر LSPR قوی در ناحیه مرئی، به عنوان بهترین مواد برای ساخت تیپ در سیستم TERS محسوب می‌شوند. به همین منظور، در شبیه‌سازی‌های صورت گرفته در این قسمت از طلا و نقره به عنوان زیرلایه یا لایه‌نشانی استفاده شده است. ضخامت لایه‌نشانی ۱ نانومتر در نظر گرفته شده است. همان‌طور که از نتایج مشخص است، تیپ سیلیکون به تنهایی نمی‌تواند میدان الکتریکی را زیاد تقویت کند. در اینجا تقویت ناچیزی که صورت می‌گیرد به دلیل اثر رعد و برق میله‌ای است [۵]. دلیل آن این است که با پایین بودن غلظت بار آزاد

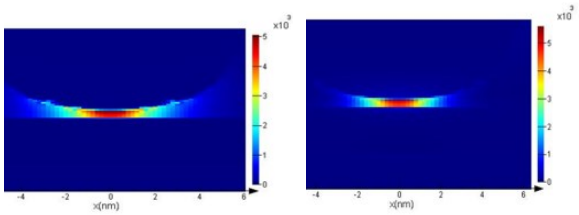
جدول (۲): نتایج تقویت میدان الکتریکی(M^2) در طول‌موج‌های مختلف با توجه به جنس زیرلایه و لایه‌نشانی روی تیپ سیلیکون

Tip	Substrate	Coating	$\lambda\ (nm)$	$M^2 = \frac{\lvert E\rvert^2}{\lvert E_0\rvert^2}$
Si	Au	-	۵۳۲	۳۰۰
			۶۳۳	۱۹۰
			۷۸۵	۱۴۰
		Au	۵۳۲	۵۵۰۰
			۶۳۳	۴۹۰۰
			۷۸۵	۳۹۰۰
		Ag	۵۳۲	۱۸۰۰
			۶۳۳	۲۹۰۰
			۷۸۵	۲۶۰۰
	Ag	Au	۵۳۲	۳۱۰۰
			۶۳۳	۵۰۰۰
			۷۸۵	۳۸۰۰
		-	۵۳۲	۲۱۰
			۶۳۳	۱۶۰
			۷۸۵	۱۳۰

(10^{16}~10^{13} cm^{-1}) در سیلیکون خالص، SPR به سختی می‌تواند در ناحیه مرئی برانگیخته شود. وجود زیرلایه طلا به دلیل اثرات پلاسمونیک باعث بهبود تقویت میدان الکتریکی شده است. نتایج تقویت میدان الکتریکی(M^2) در طول‌موج‌های مختلف با توجه به جنس زیرلایه و لایه‌نشانی تیپ روی تیپ سیلیکون در جدول (۲) نشان داده شده است. هنگامی که تیپ سیلیکون و زیرلایه نقره می‌باشد نسبت به سایر شرایط تقویت میدان الکتریکی کمتری را ایجاد کرده است. به منظور بهبود حساسیت سیستم TERS، از لایه نشانی فلز روی تیپ سیلیکون استفاده شده است. لایه‌نشانی طلا نسبت به لایه‌نشانی نقره تقویت میدان الکتریکی بیشتری را نشان می‌دهد. این مشاهدات می تواند بدلیل مقادیر ضرایب خاموشی برای نقره و طلا باشد. نقره سهم بزرگی از نور ورودی را در مقایسه با طلا جذب می‌کند، در نتیجه تقویت میدان الکتریکی را کاهش می دهد. پس هر چه ضریب خاموشی فلز کوچکتر باشد، تقویت میدان الکتریکی آن بیشتر است. با مقایسه نتایج به نظر می رسد جنس لایه‌نشانی با ضریب خاموشی کمتر نسبت به جنس زیرلایه در افزایش میزان تقویت میدان اهمیت ویژه ای دارد. واضح است که بیشترین تقویت با استفاده از زیر لایه طلا و لایه‌نشانی طلا اتفاق می‌افتد که این تقویت میدان الکتریکی ناشی از اثر جفت‌شدگی دوقطبی–دوقطبی بین لایه‌نشانی طلا و زیرلایه طلا می‌باشد.

در شکل (۱) بهترین نتایج بدست آمده برای توزیع میدان الکتریکی برای تیپ سیلیکون نشان داده شده است.

(ب) (الف)



شکل (۱): توزیع میدان الکتریکی راس تیپ سیلیکون با لایه‌نشانی طلا الف) زیر لایه طلا در طول‌موج ۵۳۲ nm ب)زیرلایه نقره طول‌موج ۶۳۳nm

[Downloaded from opsi.ir on 2026-11-03]

۲. بررسی تقویت میدان الکتریکی در تیپ آلومینیوم

در این قسمت به مقایسه حالت‌های مختلف (الف) تیپ آلومینیوم و زیرلایه طلا، (ب) تیپ آلومینیوم با لایه‌نشانی نقره و زیرلایه طلا، و (ج) تیپ آلومینیوم با لایه‌نشانی طلا و زیرلایه نقره و (د) تیپ آلومینیوم زیرلایه نقره می‌پردازیم (جدول (۳)). مطابق جدول، تیپ آلومینیوم و زیرلایه طلا، تقویت الکتریکی در حدود ۸۲۰ را ایجاد کرده است و با افزایش طول‌موج تقویت میدان الکتریکی افزایش یافته است. ولی زمانی که زیرلایه نقره باشد، تقویتی در حدود ۸۱۰ ایجاد می کند و با افزایش طول‌موج شدت کاهش می‌یابد. از لایه‌نشانی آلومینیوم بر روی تیپ سیلیکونی AFM برای اندازه‌گیری TERS قبلا هم استفاده شده و یک سیگنال واضح TERS نزدیک به UV مشاهده شده است [۱]. وجود زیرلایه طلا باعث تقویت بیشتر میدان الکتریکی می‌شود. هنگامی که تیپ آلومینیوم با لایه‌نشانی نقره و زیرلایه طلا باشد تقویت میدان الکتریکی به خوبی بهبود یافته و تقویتی در حدود ۳۰۰۰ ایجاد می‌شود.

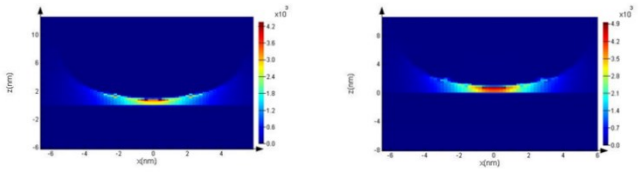
مطابق جدول (۱)، ضریب خاموشی نقره کمتر از آلومینیوم می‌باشد در نتیجه نقره تقویت بهتری ایجاد می‌کند. در حالتی که تیپ آلومینیوم با لایه‌نشانی طلا و زیرلایه نقره باشد، تقویتی در حدود ۴۹۰۰ را ایجاد می‌کند. با مقایسه این حالت‌ها با یکدیگر، از آنجایی که ضریب خاموشی طلا کمتر از نقره می‌باشد، هنگامی که طلا به عنوان لایه‌نشانی استفاده شود، تقویت بهتری را از خود نشان می‌دهد. همانطور که نتایج قبلی هم نشان می‌دادند جنس لایه‌نشانی تیپ با ضریب خاموشی کمتر نسبت به جنس زیرلایه، در افزایش میزان تقویت میدان تاثیر بیشتری دارد. در شکل (۲) بهترین حالت‌های بدست آمده توزیع میدان الکتریکی برای تیپ آلومینیوم نیز نشان داده شده است.

جدول (۳): نتایج تقویت میدان الکتریکی(M^2) در طول‌موج‌های مختلف با توجه به جنس زیرلایه و لایه‌نشانی روی تیپ آلومینیوم

Tip	Substrate	Coating	$\lambda\,(nm)$	$M^2=\frac{\lvert E\rvert^2}{\lvert E_0\rvert^2}$
Al	Au	-	532	799
			633	800
			785	820
		Ag	532	1800
			633	3000
			785	2900
	Ag	Au	532	3100
			633	4900
			785	4200
		-	532	810
			633	805
			785	780

نتیجه‌گیری

هدف از این (الف) بررسی تأثیر جنس و لایه (ب) نیپ در طیف‌سنجی تقویت شده با تیپ است. مطابق نتایج بدست آمده، در حالتی که لایه‌نشانی و بستر هر دو از جنس طلا باشند، بیشترین تقویت میدان ایجاد می شود و به طور کلی همانطور که نشان داده شد هر چه ضریب خاموشی ماده فلزی کمتر باشد تقویت میدان الکتریکی بیشتری ایجاد می‌شود.



شکل (۲): توزیع میدان الکتریکی تیپ الومینیوم با لایه نشانی طلا و زیرلایه نقره در الف) طول‌موج ۶۳۳ nm ب) طول‌موج ۵۳۲nm

مراجع

[1] M. Bahreini, “Investigating the Effect of Gold Coating on the Silicon Tip in Electric Field Enhancement of Tip-enhanced Raman Spectroscopy System”, 1st Inter Conf on Opt, 2019.

[2] J. Stadler, B. Oswald, T. Schmid, R. Zenobi, “Characterizing unusual metal substrates for gap-mode tipenhanced Raman spectroscopy”, Raman Spectrosc, Vol. 44, No. 2, pp. 227–233, 2013.

[3] M. Bahreini, “Design and optimization of tip-enhanced Raman spectroscopy system”, 25th Iranian conference of optic and photonic (ICOP2019) 2019.

[4] P. B. Johnson, R. W. Christy, “Optical constants of the noble metals”, Phys. Rev. B, Vol. 6, No. 12, pp. 4370, 1972.

[5] M. Bahreini, “The effect of substrate on electric field enhancement of tip-enhanced Raman spectroscopy (TERS)”, AIP Conf Pro, Vol. 1920, No. 1, pp. 020013, 2018.

[Downloaded from opsi.ir on 2026-11-03]