

<https://dorl.net/dor/20.1001.1.23223871.1401.13.50.8.9>

Research Article

## **Simulation and Analysis of the Effect of Parameters on the Spectral Response of Electric Field Enhancement Factor in the Proposed AFM-TERS System**

**Mohsen Katebi Jahromi, Ph.D. Student, Rahim Ghayour, Professor, Zahra Adelpour, Assistant Professor**

Department of Electrical Engineering- Shiraz Branch, Islamic Azad University, Shiraz, Iran  
[mohsen.katebi@iausafashahr.ac.ir](mailto:mohsen.katebi@iausafashahr.ac.ir), [rghayour@shirazu.ac.ir](mailto:rghayour@shirazu.ac.ir), [adelpour@aut.ac.ir](mailto:adelpour@aut.ac.ir)

### **Abstract**

One of the most important advances in Raman spectroscopy in recent years has been its integration with scanning probe microscopes (SPM), especially atomic force microscopes (AFM). Currently, AFM is recognized as one of the best imaging methods for studying the distribution of heterogeneous surface in nanoscale dimensions. Scientists are now focused on obtaining more enhancement factor of electric field, to the extent that detection and mapping of only one molecule has become possible with this method. Therefore, spatial resolution is being improved in detecting sub-molecule levels. In this paper, using the finite difference time domain (FDTD) calculation method, the effect of changing the parameters of the probe such as cone angle, tip radius and its material on the electric field intensity near the apex of the probe is investigated. In addition, the effect of polarization of light on the increase of electric field has been analyzed. The simulation results obtained for different cone angles show that the cone angle of 30 degree creates the highest amount of electric field enhancement factor at the tip apex. Furthermore, the use of laser source with radially polarized light and the use of substrate are very effective factors on improving the electric field enhancement factor. Finally, the maximum value of electric field enhancement factor of the proposed configuration is  $3.2 \times 10^4$ , where this value has been improved significantly comparing to the results reported in the previous papers published in this field.

**Keywords:** atomic force microscopy, localized surface plasmon resonance (LSPR), tip enhanced Raman spectroscopy (TERS), tip apex

**Received:** 15 July 2021

**Revised:** 22 August 2021

**Accepted:** 21 September 2021

**Corresponding Author:** Prof. Rahim Ghayour

**Citation:** M. Katebi Jahromi, R. Ghayour, Z. Adelpour, "Simulation and analysis of the effect of parameters on the spectral response of electric field enhancement factor in the proposed AFM-TERS system", Journal of Intelligent Procedures in Electrical Technology, vol. 13, no. 50, pp. 123-132, September 2022 (in Persian).

## شبیه‌سازی و تحلیل پارامترهای موثر بر پاسخ طیفی فاکتور تقویت میدان الکتریکی در یک سیستم AFM-TERS پیشنهادی

محسن کاتبی جهرمی، دانشجوی دکتری، رحیم غیور، استاد، زهرا عادل‌پور، استادیار

گروه مهندسی برق - واحد شیراز، دانشگاه آزاد اسلامی، شیراز، ایران  
mohsen.katebi@iausafashahr.ac.ir, rghayour@shirazu.ac.ir, adelpour@aut.ac.ir

**چکیده:** یکی از پیشرفت‌های مهم سال‌های اخیر در دستگاه رامان، تلفیق آن با میکروسکوپ پروب روبشی (SPM) به‌خصوص میکروسکوپ نیروی اتمی (AFM) بوده است. میکروسکوپ نیروی اتمی در حال حاضر به‌عنوان یکی از بهترین روش‌های تصویربرداری برای مطالعه توزیع ناهمگون سطح در ابعاد نانو شناخته می‌شود. در سال‌های اخیر دانشمندان بر روی به‌دست آوردن فاکتور تقویت میدان الکتریکی بیشتر متمرکز شده‌اند تا آنجا که آشکارسازی و نقشه‌برداری از یک مولکول تنها با این روش امکان‌پذیر شده است. در نتیجه رزولوشن فضایی جهت تشخیص در مقیاس زیر مولکول در حال بهبود است. در این مقاله با استفاده از روش محاسباتی تفاضلی محدود در حوزه زمان (FDTD) اثر تغییر پارامترهای پروب مثل زاویه مخروط، شعاع تیپ و جنس آن بر میزان شدت میدان الکتریکی نزدیک به نوک پروب مورد بررسی قرار گرفته است. در نهایت پس از یافتن بهترین ساختار تیپ و نوع پلاریزاسیون نور تابشی، اثر استفاده از زیرلایه در سیستم طیف‌سنجی رامان تقویت شده سوزنی (TERS) پیشنهادی بررسی شده است. نتایج شبیه‌سازی‌ها نشان می‌دهد که با توجه به ابعاد تیپ انتخاب شده از بین زاویه‌های مخروط بررسی شده زاویه مخروط ۳۰ درجه بیشترین میزان تقویت میدان الکتریکی در نوک تیپ را ایجاد می‌کند. همچنین به‌کار بردن منبع نور تابشی با پلاریزاسیون دایره‌ای و استفاده از زیرلایه از عوامل بسیار موثر جهت بهبود فاکتور تقویت میدان الکتریکی هستند. در انتها برای ساختار طراحی شده ماکزیمم مقدار فاکتور تقویت میدان الکتریکی  $3/2 \times 10^4$  به‌دست آمده است، که این مقدار در مقایسه با نتایج گزارش شده در مطالعات قبلی بهبود قابل توجه داشته است.

**کلمات کلیدی:** تشدید پلاسمون‌های سطحی محلی، طیف‌سنجی رامان تقویت‌شده سوزنی، نوک تیپ، میکروسکوپ نیروی اتمی

تاریخ ارسال مقاله: ۱۴۰۰/۴/۲۴

تاریخ بازنگری مقاله: ۱۴۰۰/۵/۳۱

تاریخ پذیرش مقاله: ۱۴۰۰/۶/۳۰

نام نویسنده‌ی مسئول: دکتر رحیم غیور

نشانی نویسنده‌ی مسئول: کیلومتر ۵ شهر صدرا - پردیس دانشگاه آزاد اسلامی شیراز

## ۱- مقدمه

عموما در اثر برهمکنش تابش الکترومغناطیس با ماده، پدیده‌های مختلفی می‌تواند ایجاد شود که شامل جذب، انتقال، بازتاب و پراکندگی است. هر یک از این پدیده‌ها می‌تواند اطلاعات ضروری درباره اثرات شیمیایی در ماده را تامین کند [۱]. طیف‌نمایی رامان یک روش قدرتمند است که می‌تواند اطلاعات شیمیایی قابل توجهی در مورد مولکول‌های هدف ارائه دهد اما از آنجا که سیگنال‌های رامان ضعیف هستند لذا تمایل به افزایش سیگنال‌های رامان نیازمند رویکردی جدید و نو است [۲]. یکی از پیشرفت‌های اخیر - میر تلفیق می - کروسکوپ نیروی اتمی<sup>۱</sup> (AFM) همراه با طیف‌سنجی رامان در یک دستگاه است که زمینه‌ای مناسب برای تحقیقات جدید است [۳]. با اختراع میکروسکوپ پروب روبشی<sup>۲</sup> (SPM) در اواخر قرن بیستم علاوه بر مواد رسانا، امکان تصویربرداری از نمونه بدون نیاز به خلاء فراهم گردید و نقطه عطفی در نانوسکوپی اتفاق افتاد. میکروسکوپ‌های نیروی اتمی، دسته‌ای از میکروسکوپ‌های پروب روبشی هستند که علاوه بر امکان تصویربرداری در محیط غیر خلاء، می‌توانند از نمونه‌های زیستی و غیررسانا نیز تصویربرداری کرده و همچنین در تعیین خواص مختلف نمونه‌ها، آنالیزهای کاربردی در اختیار محققین قرار دهند [۴]. در حقیقت نتایج به دست آمده توسط میکروسکوپ نیروی اتمی و رامان مکمل هم هستند [۵]. اصل ساختار میکروسکوپ نیروی اتمی همراه با طیف‌سنجی رامان تقویت شده سوزنی<sup>۳</sup> (AFM-TERS) در شکل (۱) نشان داده شده است. همان‌طور که مشاهده می‌شود یک سوزن فلزی SPM در مرکز کانون یک لیزر واقع شده است.

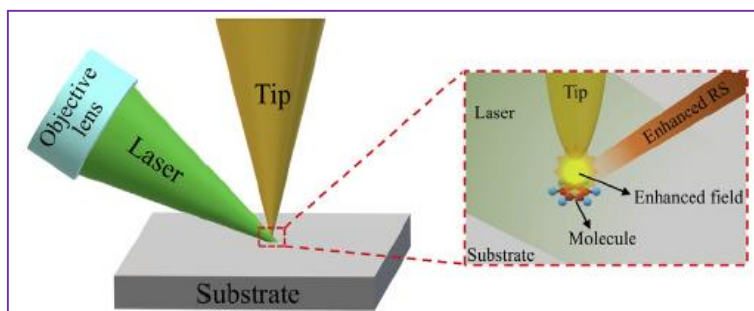
زمانی که تیپ میکروسکوپ نیروی اتمی با یک منبع خارجی مورد تابش قرار می‌گیرد شدت پراکندگی رامان مولکول هدف در نزدیکی تیپ تا حد زیادی افزایش می‌یابد که مربوط به تشدید پلاسمون‌های سطحی محلی<sup>۴</sup> (LSPR)، اثر میله روشنائی<sup>۵</sup> و تشدید حالت شکاف<sup>۶</sup> است. بنابراین تیپ نقش اساسی در طیف‌سنجی رامان تقویت شده سوزنی ایفا می‌کند [۷]. طیف‌نمایی رامان تقویت شده سوزنی می‌تواند رزولوشن فضایی در اسکیل چند نانومتر فراهم کند [۸]. در طول پانزده سال گذشته این روش برای مطالعه مسائل بیولوژیکی [۹]، فتوولتاییک [۱۰]، نیمه هادی [۱۱]، نانو تیوب کربنی [۱۲]، گرافن [۱۳] و تشخیص مولکول‌های تنها [۱۴] استفاده شده است.

اگر چه روش‌های میکروسکوپی فلورسانس نیز می‌تواند برای تصویربرداری از نمونه‌ها تحت محدودیت انکسار با رزولوشن بالا استفاده شود اما وجود برچسب فلورسنت مانع از مشاهده نمونه در حالت طبیعی می‌شود این در حالی است که تکنیک طیف‌نمایی رامان تقویت شده سوزنی یک روش بدون برچسب<sup>۷</sup> است و می‌تواند برای بررسی و مطالعه ترکیبات شیمیایی و رفتار مولکول‌ها بخصوص در نمونه‌های بیولوژیکی به‌طور مستقیم استفاده شود [۱۵، ۱۶]. طلا و نقره دو تا از بهترین ماده‌ها برای ساخت تیپ‌های طیف‌نمایی رامان تقویت شده سوزنی هستند که مربوط به چگالی الکترون‌های آزاد بالا و اثر تشدید پلاسمون‌های سطحی محلی قوی در ناحیه مرئی و مادون قرمز نزدیک است [۵، ۱۷].

در این مقاله با استفاده از روش تفاضلی محدود در حوزه زمان در حالت سه‌بعدی<sup>۸</sup> (3D-FDTD) که در آن از معادلات دیفرانسیلی محدود برای حل معادلات ماکسول در محدوده محاسباتی محدود استفاده می‌شود، فاکتور تقویت میدان الکتریکی در نوک یک تیپ نقره و طلا به دست آمده است. شبه‌سازی برای زاویه‌های مخروط<sup>۹</sup> مختلف و شعاع‌های تیپ<sup>۱۰</sup> متفاوت تحت تابش نور با پلاریزاسیون‌های خطی و دایره‌ای<sup>۱۱</sup> برای یافتن بهترین ساختار با بیشترین میزان تقویت میدان الکتریکی در نوک تیپ انجام شده است. جنبه‌های نوآوری در مطالعه انجام شده در این مقاله به‌صورت زیر است:

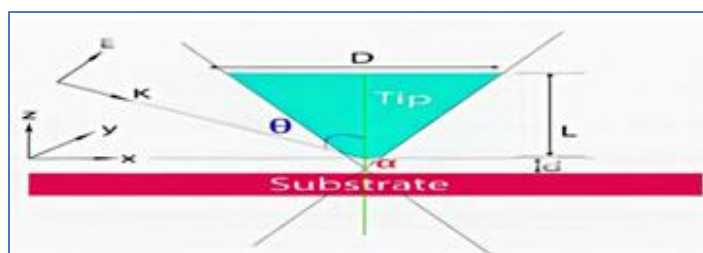
۱- در این مقاله از منبع نور با پلاریزاسیون دایره‌ای با پیکربندی تابش از کنار جهت نور تابشی به نوک تیپ استفاده شده است. نتایج به دست آمده در این مقاله در مقایسه با مطالعات انجام شده در این زمینه که عمدتاً از نور با پلاریزاسیون خطی با پیکربندی تابش از انتهای تیپ استفاده کرده‌اند، بهبود قابل توجه داشته است.

۲- در این مقاله فاصله نوک تیپ از زیرلایه<sup>۱۲</sup> برای داشتن بیشترین میزان فاکتور تقویت میدان الکتریکی بهینه شده است و با استفاده از بخش بهینه‌سازی در نرم‌افزار لومریکال فاصله بهینه ۲/۶۶ نانومتر به دست آمده است در حالی که در مقالات چاپ شده در این زمینه [۸، ۱۸] این فاصله به‌صورت فرضی در نظر گرفته شده است و تاثیر فاصله نوک تیپ از زیر لایه بر روی شدت میدان الکتریکی بررسی نشده است.



شکل (۱): شماتیک نشان دهنده اصل میکروسکوپ نیروی اتمی-طیف‌سنجی رامان تقویت شده سوزنی [۶]

Figure (1): The schematic of AFM-TERS principle [6]



شکل (۲): هندسه پیکربندی تیپ و زیرلایه [۱۹]

Figure (2): Schematic diagram of the metal tip and substrate geometry [19]

۳- در این مقاله برای نخستین بار با استفاده از بررسی تاثیر پارامترهای هندسی تیپ و جنس زیرلایه و تیپ مورد استفاده بر میزان فاکتور تقویت میدان الکتریکی به صورت همگام، بهبود قابل توجهی بر میزان فاکتور تقویت میدان الکتریکی نسبت به مقالات چاپ شده [۱۹،۲۰] در این زمینه حاصل شده است.

ساختار مقاله به این شرح است. پس از بیان موضوع و اهمیت آن، در بخش دوم به شرایط شبیه‌سازی و روش طراحی اشاره می‌گردد. در بخش سوم با استفاده از تجزیه و تحلیل نتایج شبیه‌سازی‌های انجام شده اثر پارامترهای مختلف بر روی ماکزیمم مفدار فاکتور تقویت میدان الکتریکی بررسی شده است و نتایج ساختار پیشنهادی در این مقاله با نتایج مقالات چاپ شده قبلی مقایسه شده است. در نهایت در بخش چهارم نتیجه‌گیری مقاله بیان شده است.

## ۲- شرایط شبیه‌سازی و روش طراحی

روش تفاضلی محدود در حوزه زمان (FDTD) یک روش موثر به دلیل قابلیت آن برای بررسی هر هندسه دلخواه سه بعدی (3D) از جمله تیپ فلزی، زیر لایه فلزی و مدل‌های مشابه دیگر است [۲۱]. در این روش نیاز است که کل محدوده محاسباتی به المان‌های حجمی یا سلول‌ها تقسیم یا تفکیک شوند [۲۲]. در بسیاری از موارد روش تفاضلی محدود در حوزه زمان بر اساس فرمول شناخته شده YEE است [۲۳]. برای اینکه بتوان معادلات ماکسول را در فرم دیفرانسیل به سلول YEE اعمال کرد، مشتقات زمانی و مکانی از عبارات تفاضلی محدود استفاده می‌کنند که معادلات تفاضلی محدود در حوزه زمان را نتیجه می‌دهند [۲۴]. روش تفاضلی محدود در حوزه زمان نتایج را در متغیرهای میدانی E و H در تمامی نقاط در حوزه گسسته و در هر نقطه زمانی ارائه می‌دهد [۲۵].

شکل (۲) شماتیک هندسه پیکربندی تیپ فلزی و زیرلایه که در این مطالعه استفاده شده است را نشان می‌دهد. تیپ فلزی به‌عنوان یک مخروط وارونه که به یک نیمکره ختم می‌شود مدل شده است. D قطر بیس، L ارتفاع مخروط،  $\alpha$  زاویه مخروط، d فاصله نوک تیپ از زیر لایه و  $\theta$  زاویه نور تابشی منبع لیزر است که به صورت یک موج الکترومغناطیس مسطح است.

در این مقاله مانند مطالعه انجام شده در مرجع [۱۹] از ساختار تابش از کنار که مناسب‌ترین انتخاب برای آنالیز نمونه‌های غیرشفاف یا نمونه‌هایی که بر روی زیرلایه غیرشفاف در یک سیستم طیف‌سنجی رامان تقویت شده سوزنی (TERS) قرار گرفته‌اند، استفاده شده است. همچنین این ساختار روشی آسان‌تر در مقایسه با ساختار تابش از پایین برای تنظیم پلاریزاسیون پرتو نور

برخوردی در راستای محور تیپ است که باعث ماکزیمم شدن فاکتور تقویت میدان می‌شود [۱۹]. در این مقاله از یک منبع نور موج مسطح از نوع میدان کل- میدان پراکنده<sup>۱۳</sup> (TFSF) استفاده شده است که از کوپلینگ احتمالی با مرزهای ناحیه شبیه‌سازی جلوگیری نماید. منبع نور میدان کل- میدان پراکنده یک نوع خاص از موج مسطح است که ناحیه محاسباتی را به دو ناحیه مجزا تقسیم می‌کند. ناحیه اول شامل میدان کل است که مجموع میدان برخوردی و میدان پراکنده شده است و ناحیه دوم شامل میدان پراکنده است. پرتو لیزر یک موج مسطح با میدان الکتریکی با دامنه ۱ ولت بر متر است. برای تمام شبیه‌سازی‌ها شرایط مرزی لایه کاملاً جاذب<sup>۱۴</sup> (PML) برای تمام مرزها استفاده شده است. سائز YEE cell در رنج ۰/۵ تا ۱ نانومتر در نظر گرفته شده است. روش FDTD با مش از نوع غیر- یکنواخت<sup>۱۵</sup> برای بهبود دقت مدل‌سازی و برای کاهش منابع محاسباتی اعمال می‌شود. ثابت‌های نوری طلا و نقره از مرجع [۲۶] به دست آمده است. فاکتور تقویت میدان الکتریکی در نوک تیپ برای حالت‌های مختلف تحت تابش نور با پلاریزاسیون خطی و دایره‌ای در رنج طول موج ۴۰۰ تا ۱۰۰۰ نانومتر با توجه به معادله زیر محاسبه شده است [۱۸]:

$$M^2 = EF = \frac{|E_{loc}|^2}{|E_o|^2} \quad (۱)$$

در معادله بالا  $E_{loc}$  میدان الکتریکی موضعی در نوک تیپ و  $E_o$  میدان الکتریکی تابشی است. مقدار  $E_{loc}$  از جمع میدان‌های الکتریکی در راستای  $x$ ،  $y$  و  $z$  با توجه به معادله زیر به دست می‌آید:

$$|E_{loc}|^2 = |E_{locx}|^2 + |E_{locy}|^2 + |E_{locz}|^2 \quad (۲)$$

در این مقاله بر اساس تئوری پراش بردار ریچاردز-ولف<sup>۱۶</sup>، نور با پلاریزاسیون دایره‌ای ایجاد می‌شود [۲۷، ۲۸]. بنابراین، در این روش، میدان الکتریکی طولی کانونی ( $E_z$ ) و میدان الکتریکی عرضی کانونی ( $E_r$ ) را می‌توان با معادلات زیر ارائه داد [۱۸]:

$$E_z = 2iA_0 \int_0^\alpha P(\theta) \cos^{1/2} \theta \sin^2 \theta J_0(K_r \sin \theta) \exp(ik_z \cos \theta) d\theta \quad (۳)$$

$$E_r = A_0 \int_0^\alpha P(\theta) \cos^{1/2} \theta \sin(2\theta) J_1(K_r \sin \theta) \exp(ik_z \cos \theta) d\theta \quad (۴)$$

$$K = \frac{2\pi}{\lambda} \quad (۵)$$

در معادله بالا  $A_0$  یک ثابت،  $k$  بردار موج،  $\alpha$  ماکزیمم زاویه تمرکز و  $J_0$  و  $J_1$  به ترتیب توابع بسل نوع اول از مرتبه‌های صفر و یک هستند.  $P(\theta)$  تابع مردمک یک پرتو بسل گوسی است که به صورت زیر تعریف می‌شود [۲۹]:

$$P(\theta) = \exp\left[-\beta^2 \left(\frac{\sin \theta}{\sin \alpha}\right)^2\right] J_1\left(\frac{2\beta \sin \theta}{\sin \alpha}\right) \quad (۶)$$

در معادله بالا  $\beta$  که نسبت بین تمرکز پرتو و شعاع مردمک است برابر یک در نظر گرفته می‌شود. با حل معادله‌های (۳) و (۴) نور با پلاریزاسیون دایره‌ای درون ناحیه شبیه‌سازی ایجاد می‌شود.

### ۳- نتایج و بحث

در این قسمت اثر تغییرات زاویه مخروط، شعاع نوک تیپ، نور تابشی با پلاریزاسیون دایره‌ای و اثر زیرلایه بر روی ماکزیمم مقدار فاکتور تقویت میدان الکتریکی ارائه شده است.

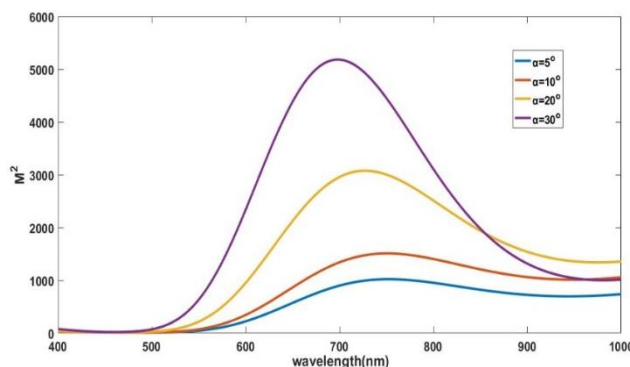
#### ۳-۱- بررسی اثر تغییرات زاویه مخروط

در ابتدا شبیه‌سازی برای تیپ طلا و نقره با شعاع تیپ ۱۰ نانومتر بدون زیرلایه برای زاویه‌های مخروط ۵، ۱۰، ۲۰ و ۳۰ درجه با نور پلاریزه شده خطی عمود بر محور تیپ ( $\theta$  برابر ۹۰ درجه) انجام شده است. ابعاد تیپ استفاده شده به صورت زیر در نرم افزار لومریکال در نظر گرفته شده است [۸، ۱۸]:

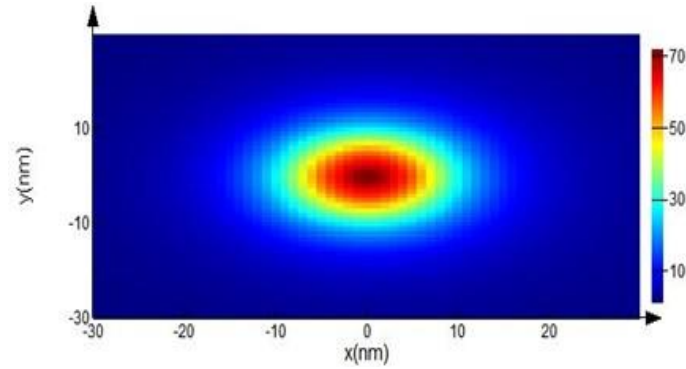
$$\begin{cases} \text{cladding radius} (\frac{D}{2}) = 800 \text{ nm} \\ \text{z span} (L) = 3000 \text{ nm} \end{cases} \quad (7)$$

در رابطه بالا،  $D$  قطر بیس و  $L$  ارتفاع مخروط است که در شکل (۲) نیز نشان داده شده است. با توجه به ابعاد انتخاب شده جهت تیپ مورد نظر که منطبق با حالت واقعی نیز است در صورتی که زاویه مخروط کمتر از ۵ درجه و بیشتر از ۳۰ درجه انتخاب شود ساختار هندسی تیپ مورد نظر از حالت مخروطی خارج می‌شود و در محدوده محاسباتی نرم‌افزار قرار نمی‌گیرد. همچنین در افزایش زاویه مخروط اثر نامطلوبی که این افزایش بر میزان رزولوشن فضایی سیستم می‌گذارد نیز در نظر گرفته شده است [۸]. در شکل (۳) پاسخ طیفی فاکتور تقویت میدان الکتریکی برای تیپ طلا نشان داده شده است. همان‌طور که نشان داده شده با افزایش زاویه مخروط از ۵ درجه به ۳۰ درجه ماکزیمم مقدار فاکتور تقویت میدان الکتریکی افزایش یافته است. در شکل (۴) توزیع میدان الکتریکی در اطراف نوک تیپ طلا با زاویه مخروط ۳۰ درجه که با توجه به شکل (۳) بیشترین میزان فاکتور تقویت میدان الکتریکی را ایجاد می‌کند، نشان داده شده است. همان‌طور که مشخص است میدان الکتریکی در نوک تیپ نسبت به اطراف آن قوی‌تر بوده که باعث ایجاد نقطه داغ در نوک تیپ می‌شود و با دور شدن از نوک تیپ شدت میدان الکتریکی کاهش می‌یابد. در شکل (۵) پاسخ طیفی فاکتور تقویت میدان الکتریکی برای تیپ نقره نشان داده شده است. همان‌طور که دیده می‌شود برای تیپ نقره نیز با افزایش زاویه مخروط ماکزیمم مقدار فاکتور تقویت میدان الکتریکی روند صعودی دارد. در شکل (۶) توزیع میدان الکتریکی در اطراف نوک تیپ نقره با زاویه مخروط ۳۰ درجه که با توجه به شکل (۵) بیشترین میزان فاکتور تقویت میدان الکتریکی را ایجاد می‌کند، نشان داده شده است. با توجه به نتایج شکل‌های (۳) و (۵) بیشترین مقدار ضریب تقویت میدان الکتریکی برای تیپ‌های طلا و نقره با زوایای مخروط متفاوت در جدول (۱) خلاصه شده است. با توجه به نتایج ارائه شده، شدت میدان الکتریکی در نوک تیپ با افزایش زاویه مخروط افزایش می‌یابد. همچنین ماکزیمم مقدار شدت میدان الکتریکی در نوک تیپ نقره نسبت به تیپ طلا افزایش بیشتری دارد. تقویت میدان الکتریکی موضعی در نوک تیپ زمانی بسیار زیاد خواهد بود که طول موج پلاسمون‌های سطحی محلی (LSP) با طول موج لیزر تحریک یکسان باشد. طول موج پلاسمون‌های سطحی محلی برای تیپ در یک سیستم طیف‌سنجی رامان تقویت شده سوزنی می‌تواند با تغییر جنس تیپ، ساختار تیپ و پلایرازیون نور تابشی و پیکربندی آن تغییر کند تا با طول موج لیزر منطبق شود.

با این تنظیمات حالت رزونانس به وجود می‌آید که در این شرایط شدت میدان الکتریکی مشاهده شده در نوک تیپ چندین مرتبه بالاتر از حالتی است که شرایط رزونانس نداشته باشد [۵،۷]. با توجه به توضیحات بالا اگرچه رزونانس پلاسمون‌های سطحی محلی برای تیپ طلا و نقره در محدوده طول موج مرئی لیزر تحریک ایجاد می‌شود اما همان‌طور که در شکل‌های (۳) و (۵) نیز مشخص است طول موج رزونانس برای تیپ طلا ۶۹۸/۶ نانومتر و برای تیپ نقره ۵۱۰/۷ نانومتر است. همچنین همان‌طور که نتایج جدول (۱) نشان می‌دهد ماکزیمم مقدار فاکتور تقویت میدان الکتریکی برای تیپ نقره بیشتر از تیپ طلا است که دلیل آن رزونانس پلاسمون‌های سطحی محلی قوی‌تر جهت تیپ نقره در ساختار انتخاب شده در مقاله جهت شبیه‌سازی است.

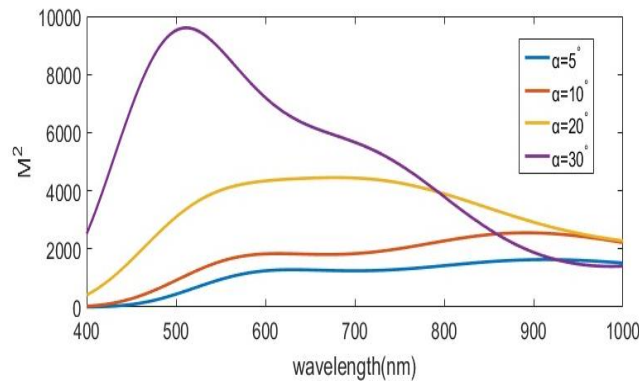


شکل (۳): پاسخ طیفی فاکتور تقویت میدان الکتریکی برای تیپ طلا در زاویه‌های مخروط ۵، ۱۰، ۲۰ و ۳۰ درجه  
Figure (3): Spectral responses of the electric field enhancement factor for the gold tip of cone angles of 5°, 10°, 20° and 30°



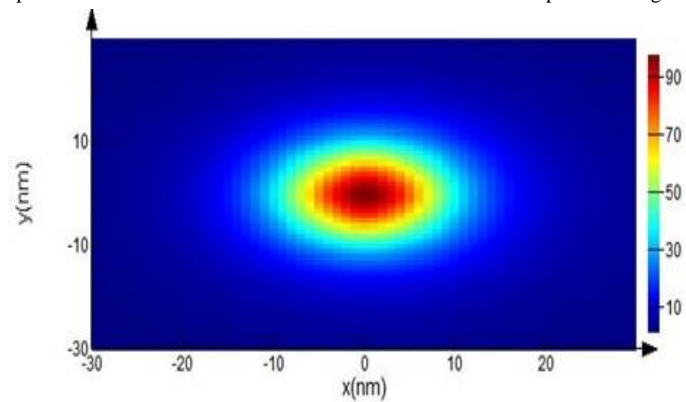
شکل (۴): توزیع میدان الکتریکی در نوک تیب طلا با زاویه مخروط ۳۰ درجه

Figure (4): Electric field distribution of the gold tip of cone angle of 30°



شکل (۵): پاسخ طیفی فاکتور تقویت میدان الکتریکی برای تیب نقره در زاویه‌های مخروط ۵، ۱۰، ۲۰ و ۳۰ درجه

Figure (5): Spectral responses of the electric field enhancement factor for the silver tip of cone angles of 5°, 10°, 20° and 30°



شکل (۶): توزیع میدان الکتریکی در نوک تیب نقره با زاویه مخروط ۳۰ درجه

Figure (6): Electric field distribution of the silver tip of cone angle of 30°

Table (1): The largest amounts of electric field enhancement factors for the gold and silver tips at different cone angles

جدول (۱): بیشترین مقدار فاکتور تقویت میدان الکتریکی برای تیب طلا و نقره با زاویه‌های مخروط متفاوت

جنس تیب	زاویه مخروط (درجه)	ماکزیمم مقدار فاکتور تقویت میدان الکتریکی
طلا	۵	$1/0.2 \times 10^3$
	۱۰	$1/5.0 \times 10^3$
	۲۰	$3/0.8 \times 10^3$
	۳۰	$5/1.8 \times 10^3$
نقره	۵	$1/6.3 \times 10^3$
	۱۰	$2/5.5 \times 10^3$
	۲۰	$4/4.5 \times 10^3$
	۳۰	$9/6.0 \times 10^3$

### ۳-۲- بررسی اثر تغییرات شعاع نوک تیپ

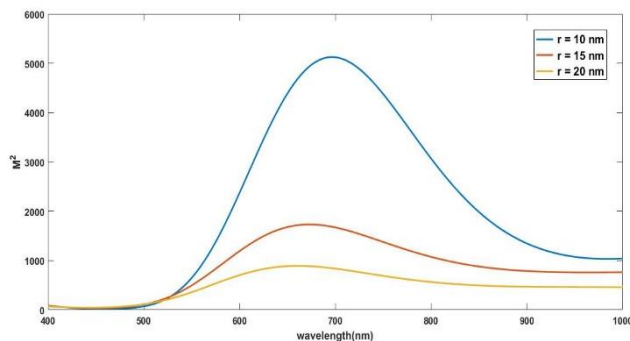
در این بخش شبیه‌سازی برای تیپ طلا و نقره با زاویه مخروط ۳۰ درجه بدون زیرلایه برای شعاع‌های تیپ ۱۰، ۱۵ و ۲۰ نانومتر با نور پلاریزه شده خطی عمود بر محور تیپ ( $\theta$  برابر ۹۰ درجه) انجام شده است. کمترین شعاع تیپ به دلیل در نظر گرفتن محدودیت‌های ساخت ۱۰ نانومتر و بیشترین شعاع تیپ براساس مرجع [۸] برابر ۲۰ نانومتر در نظر گرفته شده است. در شکل‌های (۷) و (۸) پاسخ‌های طیفی فاکتور تقویت میدان الکتریکی برای تیپ طلا و نقره نشان داده شده است. همان‌طور که در شکل‌ها مشخص است با افزایش شعاع تیپ از ۱۰ نانومتر به ۲۰ نانومتر ماکزیمم مقدار فاکتور تقویت میدان الکتریکی کاهش یافته است.

### ۳-۳- بررسی اثر نور تابشی با پلاریزاسیون دایره‌ای

با توجه به نتایج بخش قبل در این قسمت از تیپ طلا و نقره با زاویه مخروط ۳۰ درجه و شعاع تیپ ۱۰ نانومتر جهت شبیه‌سازی استفاده شده است. در شکل (۹) پاسخ طیفی فاکتور تقویت میدان الکتریکی برای تیپ طلا و نقره تحت تابش نور با پلاریزاسیون دایره‌ای نشان داده شده است. با توجه به نتایج خلاصه شده در جدول (۱) ماکزیمم مقدار فاکتور تقویت میدان الکتریکی برای تیپ طلا و نقره تحت تابش نور با پلاریزاسیون خطی به ترتیب  $5/18 \times 10^3$  و  $9/60 \times 10^3$  در طول موج رزونانس است، حال اگر تیپ مورد نظر تحت تابش نور با پلاریزاسیون دایره‌ای تحریک شود همان‌طور که در شکل (۹) نشان داده شده است ماکزیمم مقدار فاکتور تقویت میدان الکتریکی برای تیپ طلا و نقره به ترتیب  $1/7 \times 10^4$  و  $2/1 \times 10^4$  است، بنابراین استفاده از نور با پلاریزاسیون دایره‌ای به جای نور با پلاریزاسیون خطی باعث افزایش قابل توجه در ماکزیمم مقدار فاکتور تقویت میدان الکتریکی می‌شود.

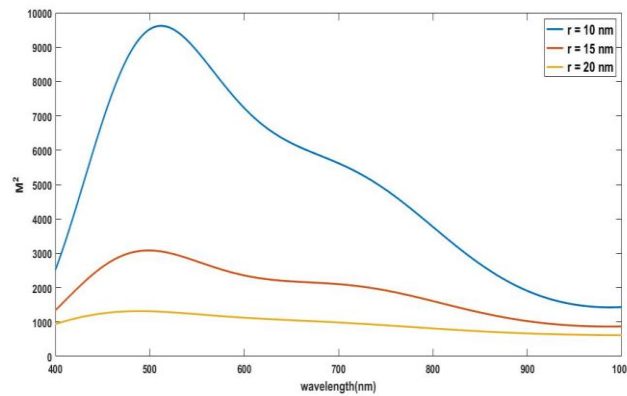
### ۳-۴- بررسی اثر زیرلایه بر روی ماکزیمم مقدار فاکتور تقویت میدان الکتریکی

با توجه به نتایج به دست آمده در بخش‌های قبلی در این قسمت از یک تیپ نقره با زاویه مخروط ۳۰ درجه تحت تابش نور با پلاریزاسیون دایره‌ای که بیشترین میزان شدت میدان الکتریکی را ایجاد می‌کند، همراه با زیرلایه‌هایی از جنس طلا، نقره و سیلیکا با ضخامت ۵۰ نانومتر مطابق شکل (۲) استفاده شده است. فاصله نوک تیپ از زیر لایه با استفاده از بخش بهینه‌سازی در نرم‌افزار لومریکال چنان انتخاب شده است که بیشترین میزان شدت میدان الکتریکی در نانوگپ بین زیرلایه و نوک تیپ ایجاد شود. در شکل (۱۰) پاسخ‌های فرکانسی فاکتور تقویت میدان الکتریکی در نانوگپ بین تیپ نقره و زیرلایه‌های طلا، نقره و سیلیکا در حالت بهینه نشان داده شده است. با توجه به شکل (۱۰) بیشترین مقدار فاکتور تقویت میدان الکتریکی در نانوگپ بین تیپ نقره و زیرلایه طلا در شرایط بهینه  $3/2 \times 10^4$  حاصل می‌شود در حالی که همین مقدار در حالتی که از زیرلایه نقره استفاده می‌شود  $2/8 \times 10^4$  و برای زیرلایه سیلیکا  $2/5 \times 10^4$  و با توجه به شکل (۹) ماکزیمم مقدار فاکتور تقویت میدان الکتریکی در حالتی که از زیرلایه استفاده نشده است  $2/1 \times 10^4$  است.

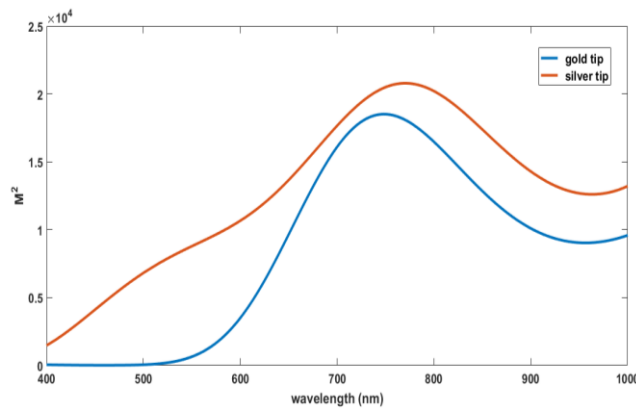


شکل (۷): پاسخ طیفی فاکتور تقویت میدان الکتریکی برای تیپ طلا در شعاع‌های تیپ ۱۰، ۱۵ و ۲۰ نانومتر  
Figure (7): Spectral responses of the electric field enhancement factor for the gold tip for tip radiuses of 10 nm, 15 nm and 20 nm



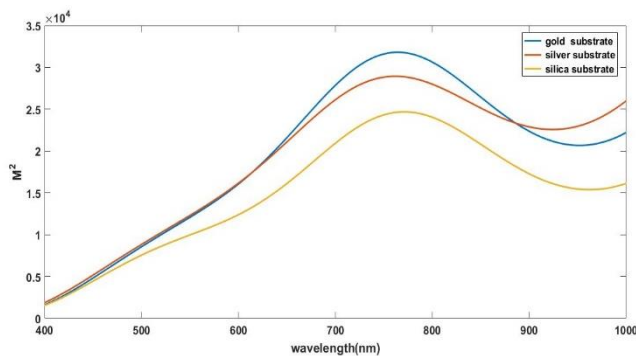


شکل (۸): پاسخ طیفی فاکتور تقویت میدان الکتریکی برای تپ نقره در شعاع‌های تپ ۱۰، ۱۵ و ۲۰ نانومتر  
Figure (8): Spectral responses of the electric field enhancement factor for the silver tip for tip radiuses of 10 nm, 15 nm and 20 nm



شکل (۹): پاسخ‌های طیفی فاکتور تقویت میدان الکتریکی برای تپ طلا و نقره در زاویه مخروط ۳۰ درجه تحت تابش نور با پلاریزاسیون دایره‌ای

Figure (9): Spectral responses of enhancement factors for the gold and silver tips with cone angles of 30° under radially polarized light



شکل (۱۰): پاسخ فرکانسی فاکتور تقویت میدان الکتریکی در نانوگپ بین تپ نقره و زیرلایه‌های طلا، نقره و سیلیکا در حالت بهینه  
Figure (10): Spectral responses of the enhancement factor within the nanogap between the silver tip and gold, silver and silica substrate in the optimal conditions

Table (2): Comparison of the results obtained in the published papers with the outcome of the method used in this article

جدول (۲): مقایسه نتایج به دست آمده در مقالات چاپ شده با نتیجه روش استفاده شده در این مقاله

این مقاله	[۲۰]	[۱۸]	[۸]	منابع
$3/3 \times 10^4$	$2/8 \times 10^4$	$1/5 \times 10^4$	$1/15 \times 10^4$	ماکزیمم مقدار فاکتور تقویت میدان الکتریکی

بنابراین استفاده از زیرلایه با توجه به کوپلینگ خازنی بین دو فلز به دلیل ایجاد نقطه داغ در نانوگپ بین تپ و زیرلایه، فاکتور تقویت میدان الکتریکی را به دلیل تشدید مد- شکاف افزایش می‌دهد [۳۰] و وجود زیرلایه باعث بهبود عملکرد سیستم

میکروسکوپ نیروی اتمی - طیف سنجی رامان تقویت شده سوزنی در شناسایی مواد می‌شود. مقایسه نتایج به‌دست آمده در این مقاله با نتایج گزارش شده در مقالات چاپ شده قبلی در جدول (۲) نشان داده شده است. قابل توجه است که شرایط شبیه‌سازی در مقالات ذکر شده کاملاً مشابه با شرایط در نظر گرفته شده در این مقاله است و در آنها نیز از روش تفاضلی محدود در حوزه زمان برای شبیه‌سازی استفاده شده است. نتایج نشان می‌دهد که طراحی و بهینه‌سازی انجام شده در این مقاله ماکزیمم مقدار فاکتور تقویت میدان الکتریکی را نسبت به مطالعات انجام شده در این زمینه به شکل موثری بهبود داده است.

#### ۴- نتیجه گیری

در این مقاله با استفاده از روش تفاضلی محدود در حوزه زمان تاثیر پارامترهای موثر بر شدت میدان الکتریکی در نوک تیپ مانند زاویه مخروط تیپ، شعاع تیپ و جنس آن در جهت بهینه‌سازی سیستم میکروسکوپ نیروی اتمی همراه با طیف‌سنجی رامان تقویت شده سوزنی مورد بررسی قرار گرفت، با توجه به نتایج به‌دست آمده، برای تیپ نقره با زاویه مخروط ۳۰ درجه بیشترین میزان شدت میدان الکتریکی در نوک تیپ ایجاد می‌شود. نتایج به‌دست آمده در مقاله نشان می‌دهند که استفاده از منبع نور با پلاریزاسیون دایره‌ای به‌جای تابش نور با پلاریزاسیون خطی، همچنین استفاده از زیرلایه با فاصله بهینه نسبت به نوک تیپ باعث تقویت بیشتر میدان الکتریکی در نانو گپ بین تیپ نقره و زیرلایه می‌شود، به‌طوری‌که با توجه به سیستم پیشنهادی در این مقاله امکان شناسایی و تشخیص مولکول نمونه با دقت بسیار بالا قابل دسترس است. در نهایت امیدواریم که نتایج به‌دست آمده در مقاله قادر باشد در ساخت تیپ پلاسمونیک با عملکرد مناسب کمک کند.

#### References

##### مراجع

- [1] M. Schmitt, J. Popp, "Raman spectroscopy at the beginning of the twenty- first century", *Journal of Raman Spectroscopy*, vol. 37, no. 1-3, pp. 20-28, Jan. 2006 (doi: 10.1002/jrs.1486).
- [2] C. Gao, W. Lin, J. Wang, R. Wang, J. Wang, "Principle and application of tip-enhanced raman scattering", *Plasmonics*, vol. 13, pp. 1343-1358, 2018 (doi: 10.1007/s11468-017-0638-6).
- [3] F. Shao, R. Zenobi, "Tip-enhanced raman spectroscopy: Principles, practice, and applications to nanospectroscopic imaging of 2D materials", *Analytical and Bioanalytical Chemistry*, vol. 411, pp. 37–61, 2019 (doi: 10.1007/s00216-018-1392-0).
- [4] Z. Shen, X. Zi, M. Du, L. Zhang, Y. Shen, M. Hu, "Virtual probe stimulated tip-enhanced raman spectroscopy: The extreme field enhancement in virtual-real probe dimer", *Journal of Applied Physics*, vol. 129, Article Number: 133104, April 2021 (doi: 10.1063/5.0046647).
- [5] N. Mauser, A. Hartschuh, "Tip-enhanced near-field optical microscopy", *Chemical Society Reviews*, vol. 43, pp. 1248-1262, Feb. 2014 (doi: 10.1039/C3CS60258C).
- [6] R. Petry, N.C. Oliveira, A.C. Alves, A.G.S. Filho, D.S.T. Martinez, G. Hwang, F.A. Sousa, A.J. Paula, "Chapter 2- Nanomaterials properties of environmental interest and how to assess them", *Advanced Nanomaterials*, pp. 45-105, 2019 (doi: 10.1016/B978-0-12-814829-7.00002-1).
- [7] N. Kumar, S. Mignuzzi, W. Su, D. Roy, "Tip enhanced Raman spectroscopy: principles and applications", *EPJ Techniques and Instrumentation*, vol. 2, Article Number: 9, July 2015 (doi: 10.1140/epjti/s40485-015-0019-5).
- [8] N. Kazemi-Zanjani, S. Vedraïne, F. Lagugné-Labarthe, "Localized enhancement of electric field in tip enhanced raman spectroscopy using radially and linearly polarized light", *Optics Express*, vol. 21, no. 21, pp. 25271–25276, Oct. 2013 (doi: 10.1364/OE.21.025271).
- [9] S. Najjar, D. Talaga, L. Schue, Y. Coffinier, S. Szunerits, R. Boukherroub, L. Servant, V. Rodriguez, S. Bonhommeau, "Tip-enhanced raman spectroscopy of combed double-stranded DNA bundles", *The Journal of Physical Chemistry C*, vol. 118, no. 2, pp. 1174–1181, 2014 (doi: 10.1021/jp410963z).
- [10] X. Wang, D. Zhang, K. Braun, H. J. Egelhaaf, C.J. Brabec, A.J. Meixner, "High-resolution spectroscopic mapping of the chemical contrast from nanometer domains in P3HT: PCBM organic blend films for solar-cell applications", *Advanced Functional Materials*, vol. 20, no. 3, pp. 492–499, Feb. 2010 (doi: 10.1002/adfm.20-0901930).
- [11] N. Lee, R. D. Hartschuh, D. Mehtani, A. Kisliuk, J.F. Maguire, M. Green, M.D. Foster, A.P. Sokolov, "High contrast scanning nano-Raman spectroscopy of silicon", *Journal of Raman Spectroscopy*, vol. 38, no. 6, pp. 789–796, June 2007 (doi: 10.1002/jrs.1698).

- [12] Y. Okuno, Y. Saito, S. Kawata, P. Verma, "Tip-enhanced Raman investigation of extremely localized semiconductor-to-metal transition of a carbon nanotube", *Physical Review Letters*, vol. 111, no. 21, Article Number: 216101, Nov. 2013 (doi: 10.1103/PhysRevLett.111.216101).
- [13] W. Su, D. Roy, "Visualizing graphene edges using tip-enhanced Raman spectroscopy", *Journal of Vacuum Science and Technology B*, vol. 31, Article Number: 041808, July 2013 (doi: 10.1116/1.4813848).
- [14] R. Zhang, Y. Zhang, Z.C. Dong, S. Jiang, C. Zhang, L.G. Chen, L. Zhang, Y. Liao, J. Aizpurua, Y. Luo, J.L. Yang, J.G. Hou, "Chemical mapping of a single molecule by Plasmon-enhanced Raman scattering", *Nature*, vol. 498, pp. 82–86, June 2013 (doi: 10.1038/nature12151).
- [15] B. Huang, M. Bates, X.W. Zhuang, "Super-resolution fluorescence microscopy", *Annual Review of Biochemistry*, vol. 78, pp. 993–1016, 2009 (doi: 10.1146/annurev.biochem.77.061906.092014).
- [16] N. Kumar, B.M. Weckhuysen, A.J. Wain, A.J. Pollard, "Nanoscale chemical imaging using tip-enhanced Raman spectroscopy", *Nature Protocols*, vol. 14, pp. 1169–1193, 2019 (doi: 10.1038/s41596-019-0132-z).
- [17] D. Kim, C. Lee, B.G. Jeong, S.H. Kim, M.S. Jeong, "Fabrication of highly uniform nanoprobe via the automated process for tip-enhanced Raman spectroscopy", *Nanophotonics*, vol. 9, no. 9, pp. 2989-2996, 2020 (doi: 10.1515/nanoph-2020-0210).
- [18] F. Lu, W. Zhang, J. Zhang, M. Liu, L. Zhang, T. Xue, C. Meng, F. Gao, T. Mei, J. Zhao, "Grating-assisted coupling enhancing plasmonic tip nanofocusing illuminated via radial vector beam", *Nanophotonics*, vol. 8, no. 12, pp. 2303–2311, 2019 (doi: 10.1515/nanoph-2019-0329).
- [19] Z. Yang, J. Aizpurua, X. Hongxing, "Electromagnetic field enhancement in TERS configurations", *Journal of Raman Spectroscopy*, vol. 40, pp. 1343–1348, 2009 (doi: 10.1002/jrs.2429).
- [20] L.Y. Meng, T.X. Huang, X. Wang, S. Chen, Z.L. Yang, B. Ren, "Gold-coated AFM tips for tip enhanced Raman spectroscopy: Theoretical calculation and experimental demonstration", *Optics Express*, vol. 23, no. 11, pp. 13804–13813, 2015 (doi: 10.1364/OE.23.013804).
- [21] S. Bruzzone, M. Malvaldi, G.P. Arrighini, C. Guidotti, "Theoretical study of electromagnetic scattering by metal nanoparticles", *The Journal of Physical Chemistry B*, vol. 109, 9, pp. 3807-3812, 2005 (doi: 10.1021-/jp045451a).
- [22] K.S. Kunz, R.J. Luebbers, "The finite difference time domain method for method for electromagnetics", CRC Press, 1993 (ISBN: 9780367402372).
- [23] K. Yee, "Numerical solution of initial boundary value problems involving Maxwell's equations in isotropic media", *IEEE Trans. on antennas and propagation*, vol. 14, no. 3, pp. 302-307, May 1966 (doi: 10.1109/T-AP.1966. 1138693).
- [24] D.M. Sullivan, "Electromagnetic simulation using the FDTD method", 2<sup>th</sup> Edition, John Wiley and Son, 2013 (doi: 10.1002/9781118646700).
- [25] F. Monsefi, M. Otterskog, S. Silvestrov, "Direct and inverse computational methods for electromagnetic scattering in biological diagnostics", *arXiv Preprint arXiv*, vol. 1312, Article Number: 4379, 2013.
- [26] P.B. Johnson, R.W. Christy, "Optical constants of the noble metals", *Physical Review B*, vol. 6, pp. 4370-4379, 1972 (doi: 10.1103/PhysRevB.6.4370).
- [27] Q. Zhan, "Cylindrical vector beams: from mathematical concepts to applications", *Advances in Optics and Photonics*, vol. 1, no. 1, 2009 (doi: 10.1364/AOP.1.000001).
- [28] B. Richards, E. Wolf, "Electromagnetic diffraction in optical systems. II. Structure of the image field in an aplanatic system", *Proceedings of the Royal Society A : Mathematical Physical*, vol. 253, pp. 358–379, 1959 (doi: 10.1098/rspa.1959.0200).
- [29] K. Youngworth, T. Brown, "Focusing of high numerical aperture cylindrical-vector beams", *Optics express*, vol. 7, pp. 77–87, 2000 (doi: 10.1364/oe.7.000077).
- [30] M. M. Sartin, H. Su, X. Wang, B. Rena, "Tip-enhanced Raman spectroscopy for nanoscale probing of dynamic chemical systems", *The Journal of Chemical Physics*, vol. 153, Article Number: 170901, 2020 (doi: 10.1063/5.0027917).

#### زیر نویس ها

- |  |  |
|--|--|
| 1. Atomic force microscopy                         | 9- Cone angles                         |
| 2. Scanning probe microscopy                       | 10. Tip radiuses                       |
| 3. Tip enhanced Raman spectroscopy                 | 11. Linearly and radially polarization |
| 4. Localized surface plasmon resonance             | 12. Substrate                          |
| 5. Lighting rod                                    | 13. Total field scattered field        |
| 6. Gap-mode  | 14. Perfectly match layer              |
| 7. Label-free                                      | 15. Nonuniform                         |
| 8. Three-dimensional finite difference time domain | 16. Richards-wolf                      |