

# 扫描隧道显微镜中分子光辐射的调控

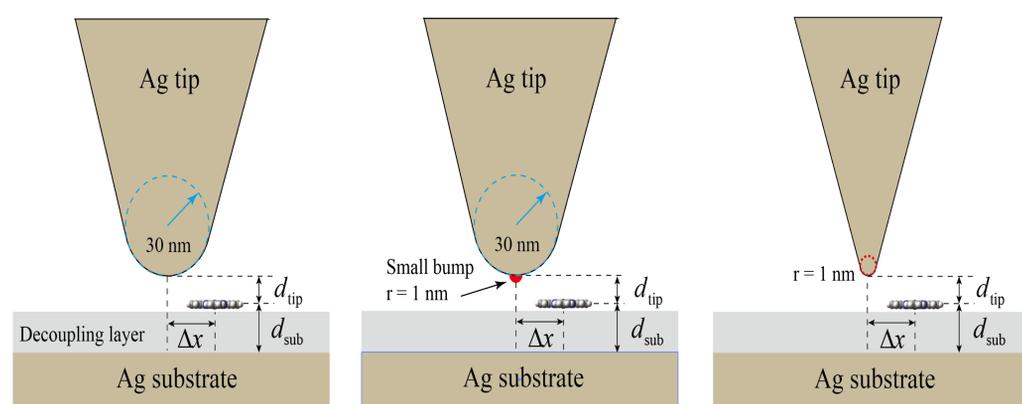
胡远章<sup>1</sup>, 陈功<sup>2, 3</sup>, 李晓光<sup>1</sup>

1. 深圳大学高等研究院

2. 郑州大学物理系

3. 中国科学技术大学微尺度国家实验室

**简介:** Tip-Enhanced Raman Scattering (TERS)和针尖增强荧光实验都表明, 光学探测可以实现亚纳米分辨<sup>1</sup>。其中一种解释从经典电磁学电场局域性出发, 认为这是由于针尖尖端存在(亚)纳米级凸起, 从而诱导了高度局域的电场<sup>2</sup>。如果针尖尖端真的存在亚纳米级小凸起, 这样的针尖会提高多强的局域电场? 当衬底和分子之间加入了一层脱耦合层以后, 分子辐射同样会有不同程度的增强, 那么是否存在一个最佳厚度, 能够让该分子辐射得到最大的增强



钝针尖 (尖端半径30nm)

30nm钝针尖 + 尖端1nm小凸起

尖针尖 (尖端半径1nm)

图 1. 三种STM针尖模型

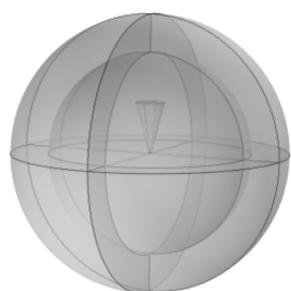
**计算方法:** 此研究使用电磁波, 频域接口, 所用到的方程如下:

$$\nabla \times (\nabla \times E) - k_0^2 \epsilon_r E = 0$$

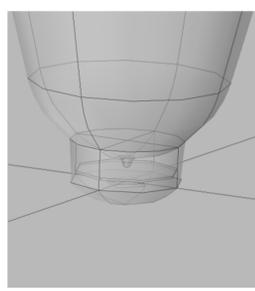
$$n \times E = 0$$

$$n \times (\nabla \times (E + E_b)) - jkn \times (E \times n) = 0$$

如图2为我们所建立的STM几何构型, 针尖与衬底之间有脱耦合层, 辐射分子用简单的电偶极子代替。



整体图



细节图 (纳腔和针尖部分)

图 2. COMSOL模拟的STM几何构型

**结果:** 如下图3和图4是我们用comsol中模拟出的三维图像, 我们分别模拟了针尖对于电场的增益和TERS对于分子辐射能流的强化。

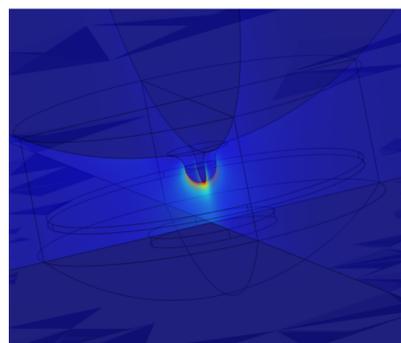


图 3. 针尖尖端周围的电场分布

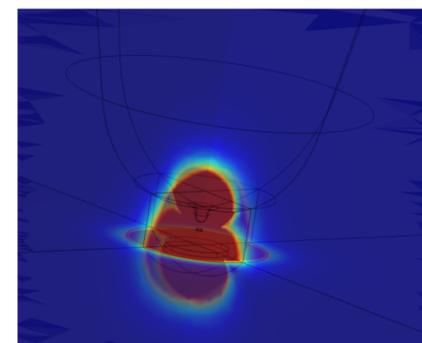


图 4. 分子辐射的能流分布

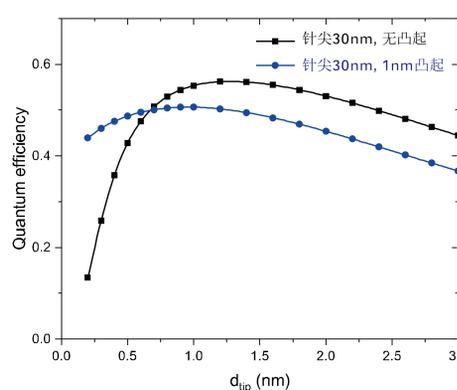


图 5. 针尖与辐射分子距离对量子效率增强的影响程度

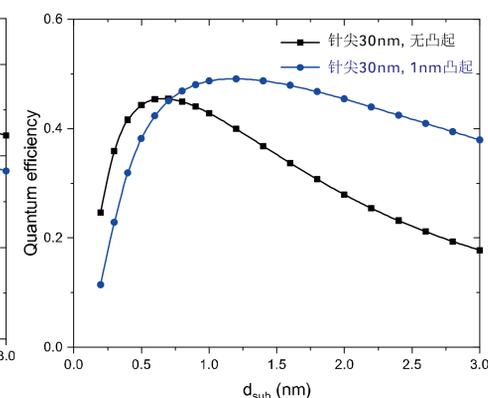


图 6. 脱耦合层厚度对于量子效率增强的影响程度

**结果:** 如上图5和图6是根据多次的comsol仿真所得出增益效果后绘制而成的线图, 我们可以看到针尖与分子的距离, 脱耦合层的厚度都明显存在一个最佳值。

**结论:** 钝针尖尖端的(亚)纳米级小突起不仅可以大大提高局域电场的空间分辨率, 并且大幅度增强分子辐射。脱耦合层厚度同时也能够对分子辐射的强度产生增强, 但是脱耦合层的厚度并非越大越好, 而是存在一个最优值, 这个最优值会随着我们选取的针尖脱耦合层的材料组合而变化, 这两个发现为TERS提供了更简单更有效的理论基础。

## 参考文献:

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., and Hou, J. G., "Chemical mapping of a single molecule by plasmon-enhanced Raman scattering", Nature, 498, 82-86(2013).

2. Gong Chen, Xiaoguang Li, Zhenyu Zhang, and Zhenchao Dong\*, "Molecular hot electroluminescence due to strongly enhanced spontaneous emission rates in a plasmonic nanocavity", Nanoscale 7, 2442-2449(2015).