近接場フォトン走査型トンネル顕微鏡シミュレーション

非会員 吉 田 貴 博 (岐阜大学)

正 員 田 中 嘉津夫 (岐阜大学)

非会員 田 中 雅 宏 (岐阜大学)

Simulation of Near Field Optical Scanning Microscope

Yoshida Takahiro, Non-member, Tanaka Kazuo, Member, Tanaka Masahiro, Non-member (Gifu University)

We constructed the simulation code of two-dimensional Photon Scanning Tunneling Microscope(2D-PSTM) based on integral equations called Guided-Mode Extracted Integral Equations. The code can treat the global-model of 2D-PSTM with a dielectric-probe and with a metal-coated dielectric-probe. Examples of simulations are shown for the case where the object is dielectric and metal. The simulation results shows that the interaction between the object and the probe is very complicated and that it is not easy to understand the physical process of 2D-PSTM intuitively.

キーワード：近接場光学，フォトン走査型トンネル顕微鏡，金属コーティング開口プローブ，シミュレーション，境界積分方程式，境界要素法

1. ま え が き

近年、光の回折限界を凌駕する目的で、波長より小さい領域に局在する近接場(エバネッセント)光を使った近接場光学(Near Field Optics：略してNFO)技術が注目を集めている。この光は光波長以下の空間で制御された電磁相互作用を媒介する場としてみなすことができる。NFO技術の中でも超高解像光学顕微鏡を目的としたフォトン走査型トンネル顕微鏡(Photon Scanning Tunneling Microscope:略してPSTM)に関する技術は興味深い。よく知られているように、通常の光学顕微鏡では回折限界のために光波長より小さい物体像の観測は困難であるが、PSTMはこの限界を超えることができる。PSTMは観測物体近接場をプローブ走査を利用して直接イメージングしようとする方法であり、逆散乱問題のように波の位相から物体形状を推定する方法とは異なる。このことが高解像力を得られる理由と考えられている。プローブ内導波モードの振幅測定だけで観測物体のイメージングができると考えられている。しかし、実際にプローブを使って得られた像と観測物体近接場との関連、プローブを使ったイメージングの過程とは理論的に明確ではない。PSTMについては、これまで数多くの実験的研究が報告されているが[1]~[6]、詳しい理論的研究は多くはない[4]~[6]。PSTM開発には、近接場光学回路用CAD(computer-aided design)ソフトやシミュレーションソフト開発が重要であると考えられる。我々はこれま

で、2次元PSTMのシミュレータ製作について報告してきた[7][8][9]。我々の手法の特徴は、著者らの研究室で開発されてきた導波モード分離型積分方程式(Guided-Mode Extracted Integral Equation:略してGMEIE)[10][11]に基づく境界要素法(モーメント法)を使うことにより、プローブ内の導波モードの振幅係数を陽に得られる。従って、PSTMグローバルモデルにおいて、プローブ内導波モードの出力で構成される出力像の精密シミュレーションが可能である。これまで開発してきたコードは、プローブは金属コーティングされていない誘電体スラブ、および物体は一個の誘電体という場合に限定されていた。このような限られた条件のもとではあるが、シミュレーションの結果近接場とプローブ内導波モードとの相互作用について興味深い現象を明らかにしてきた[7][8][9]。しかし、解像力特性については、これまで実験で報告されているような高い解像力はシミュレーションによって再現できなかった。本論文では、従来のコードを、観測物体は複数個で、かつ複素誘電率を持つ金属、プローブとして金属コーティングされた開口プローブ(以下、金属コーティング開口プローブと呼ぶ)の場合にも適用可能なように拡張し、このコードを利用して行ったシミュレーションについて報告する。シミュレーションでは、可視化ツールとしてAVS EXPress Vizを用い、走査に伴うプローブおよび物体周辺の電界強度分布の変化をグラフィック表示した。金属コーティング開口プローブの結果を金属コーティングされていない結果と比較しながら、2次元PSTMの詳しい性質

図1 2次元フォトン走査型トンネル顕微鏡
Fig. 1. 2D-PSTM by using metal-coating probe

を調べる。

2. フォトン走査型トンネル顕微鏡

金属コーティング開口プローブのモデルとして、図1, 2のような半無限長誘電体導波路先端部だけコーティングした構造を考えた。理由は以下の通りである。半無限長プローブ全体を金属コーティングすると、複素屈折率をもつ誘電体導波路の伝搬モード解析を行う必要があり、解析は複雑なものとなる。さらに、そうした導波路を使った導波路不連続問題を取り扱うことは容易ではない。そこで、金属コーティングした部分を有限の範囲に限定し、この領域での複雑な電界分布は積分方程式の数値解として取り扱う。これは複素屈折率の領域が図2のように有限あれば可能である。すなわち図1, 2のような構造では、観測量はプローブ先端から十分離れた領域における誘電体導波路伝搬モードの振幅係数なので、遠方に伝搬するモードとしては基本モードを考えればよく、数値解析可能な問題となる。実際のシミュレーションで用いた2次元PSTMの原理および基本構造を図1に示す。シミュレーションでは、以下のようなPSTMのCollectionモード、およびIlluminationモードについて行った。Collectionモードでは、誘電体基盤上に観測物体を置き、基盤裏側から全反射条件を満たす入射角で光を照射する。このとき基盤表面に発生したエバネッセント光で照射された物体の周囲に近接場光が生じる。物体周囲の近接場光に先端を尖らせた誘電体プローブを挿入すると、近接場光の一部は誘電体プローブを伝搬する透過導波光に変換される。誘電体プローブを基盤および物体表面に沿って走査し、プローブ内の導波光強度を測定することにより物体形状等の情報を得ることができる。Illuminationモードでは、Collectionモードと同様に誘電体基盤、観測物体、誘電体プローブを配置し、プローブ遠方より伝搬光を入射し、プローブ先端に近接場光を発生させる。プローブを基盤表面および物体表面に沿って走査し、プローブ先端の近接場光と

図2 積分路, 仮想境界, 屈折率

Fig. 2. Integral boundaries, Virtual boundaries and indices

観測物体を相互作用させ、プローブ内部を伝搬する反射導波光の強度、あるいは散乱光を測定し物体の情報を得る。

3. 導波モード分離型積分方程式

近接場光学回路として、図1, 2に示すように先端部が金属コーティングされた開口プローブ、および誘電体基盤上に置かれた四角柱の観測物体からなる光学回路を考える。本論文では2次元問題を考え、図2の z 軸方向には一様とする。プローブと金属コーティングは密着しておらず、わずかな空隙 ($1/60$ 波長) が空いたものを取り扱う。入射波として Collection モードでは基盤側から入射する、電界が z 成分だけをもつ TE 平面波を、Illumination モードではプローブ上方 (図2の $y = \infty$) より同じく電界が z 成分だけを持つ TE 基本導波モードを仮定する。また一様導波路は

$$\lambda \geq \frac{\pi}{v_c} A n_2 \sqrt{2}$$

を満足する単一モード導波路とする。[12]. λ は入射波の波長、 v_c はカットオフ正規化周波数、 A, n_2 はそれぞれ導波路の幅、屈折率を表す

図2において、プローブ一様導波路を含む領域を領域 (I)、金属コーティングされた先端部および観測物体を含むそれを領域 (II)、基盤のそれを領域 (III) に分割して考える。領域 (I) および領域 (II) 間の境界を導波路外部で C_{11} 、同じく内部で C_{12} と表し仮想境界とよぶ。導波モード分離型積分方程式では、仮想境界 $C_{11} + C_{12}$ の位置は図2においてプローブ先端から遠く離れた位置に置く必要はなく、コーティングされていないプローブ一様導波路のどの位置に置いても構わない。[10][11] 本論文の計算では図2のようにコーティングされたすぐ上の部分に置いた。積分路 C_1, C_2 はそれぞれ領域 (I) すなわち一様導波路左側、右側の境界、 C_3, C_4 はプローブ先端部中心から仮想境界 C_{12} までの領域 (II) のそれぞれプローブ左側、同じく右側の境界、 C_5 は観測物体の境界、 C_6 は基盤の境界、 C_7, C_8 は金属コーティン

グ部のそれぞれ左部, 右部境界を表すしたがってプローブ先端部境界は C_3, C_4 に含まれる. 屈折率は外部領域の屈折率を n_1 , プローブ内部の屈折率を n_2 , 観測物体の屈折率を n_3 , 基盤内部の屈折率を n_4 , 金属コーティングの屈折率を n_5 とする. 金属コーティングの屈折率 n_5 および観測物体が金属のときの n_3 には, 複素屈折率を用いた. 本論文では Collection モードについて詳しく説明し, Illumination モードについては省略する. 基本的にはコーティングされていない場合の解析文献 [8][11] を参照されたい. 今, 図 2 の光学回路を境界要素法を用いて解析することを考える. このとき通常の境界積分方程式を用いると, 方程式の積分路は一樣導波路部の無限長境界である C_1, C_2 および C_6 を含み, またこれら境界では導波モードまたは平面波が存在するためそれを無視することができない. すなわち解析すべき積分路の長さが無限となり, 通常の境界要素法をそのまま適用することが困難である. 一樣導波路が単一モード条件 [12] を満足することを考慮して, Collection モードでは, 領域 (I) での境界 C_1, C_2 の全電界を次のように分離する.

$$E(\mathbf{x}) = E^c(\mathbf{x}) + T \times E^{+(1)}(\mathbf{x}) \dots\dots\dots (1)$$

$$(\mathbf{x} \in C_1, C_2)$$

ここで, T はプローブの一樣導波路部に透過する導波モードの振幅係数 (以後, 透過係数と呼ぶ). $E^{+(1)}(\mathbf{x})$ は一樣導波路部で y 軸正方向に進む基本導波モード関数 [12] を表す. 式 (1) において, $E^c(\mathbf{x})$ は全電界から導波モード $T \times E^{+(1)}(\mathbf{x})$ を除いた電界, すなわち放射波, 高次導波モード等を含む複雑な波を表し, 解析的に取り扱うのは困難であり数値的に求める. これが導波モード分離型積分方程式のアイデアである. 次に図 2 で基盤表面の無限長積分路 C_6 では, 全電界を次式のように分離する. すなわち,

$$E(\mathbf{x}) = E^c(\mathbf{x}) + E^m(\mathbf{x}) \dots\dots\dots (2)$$

$$(\mathbf{x} \in C_6)$$

ただし観測点 $\mathbf{x}$ が屈折率 n_1 の領域 (II) にあるとき

$$E^m(\mathbf{x}) = E^t(\mathbf{x}) \dots\dots\dots (3)$$

観測点 $\mathbf{x}$ が屈折率 n_4 の領域 (III) にあるとき

$$E^m(\mathbf{x}) = E^i(\mathbf{x}) + E^r(\mathbf{x}) \dots\dots\dots (4)$$

とする. ここで $E^i(\mathbf{x}), E^r(\mathbf{x}), E^t(\mathbf{x})$ は, それぞれ基盤内部から入射し, 基盤表面で全反射する入射平面波, 反射平面波, 透過平面波を表し以下で与えられる.

$$E^i(\mathbf{x}) = \exp[jn_4 k_0 \cos \theta_i x + jn_4 k_0 \sin \theta_i y] \dots\dots\dots (5)$$

$$E^r(\mathbf{x}) = \frac{jn_4 k_0 \cos \theta_i - k_0 \sqrt{n_4^2 \sin^2 \theta_i - n_1^2}}{jn_4 k_0 \cos \theta_i + k_0 \sqrt{n_4^2 \sin^2 \theta_i - n_1^2}} \times \exp[jn_4 k_0 \cos \theta_i x - jn_4 k_0 \sin \theta_i y] \dots\dots\dots (6)$$

$$E^t(\mathbf{x}) = \frac{2jn_4 k_0 \cos \theta_i}{jn_4 k_0 \cos \theta_i + k_0 \sqrt{n_4^2 \sin^2 \theta_i - n_1^2}}$$

$$\times \exp[jn_4 k_0 \sin \theta_i x - k_0 \sqrt{n_4^2 \sin^2 \theta_i - n_1^2} y] \quad (7)$$

θ_i : 入射角, $k_0 = 2\pi/\lambda$ (λ : 波長)

また, 観測物体, プローブ先端および金属コーティングの境界上すなわち有限長境界上の全電界を便宜上, 式 (1) で定義された $E^c(\mathbf{x})$ と同じ記号で表す. すなわち

$$E(\mathbf{x}) = E^c(\mathbf{x}) \dots\dots\dots (8)$$

$$(\mathbf{x} \in C_3, C_4, C_5, C_7, C_8)$$

式 (1) で定義された $E^c(\mathbf{x})$ はプローブ無限遠方までは伝搬せず, プローブ先端, 観測物体近傍にだけ存在する波であると考えられる [10][11][13]. $E^c(\mathbf{x})$ の上添字 C は confined の意味を表し, Collection モードを表さない. また, 式 (8) のように全電界を $E^c(\mathbf{x})$ で表したのは単に表記を簡単にするためである. 式 (1), (2), (8) で定義された電界 $E^c(\mathbf{x})$ は, 屈折率 n_2 のプローブ内部, n_1 の外部領域において以下のような境界積分方程式 (導波モード分離型積分方程式) を満たすことが導出できる. 詳しい導出方法は文献 [8] とほとんど同じなので, ここでは, 結果だけを示す. 観測点 $\mathbf{x}$ がプローブ内側から境界 $C_1 + C_2 + C_3 + C_4$ に近づいたとき,

$$\frac{1}{2} E^c(\mathbf{x}) = \int_C \left[P_2(\mathbf{x}|\mathbf{x}') \frac{\partial E^c(\mathbf{x}')}{\partial \mathbf{n}'} - E^c(\mathbf{x}') \frac{\partial P_2(\mathbf{x}|\mathbf{x}')}{\partial \mathbf{n}'} \right] dl' \quad (9)$$

$$C = C_1 + C_2 + C_3 + C_4$$

で表される積分方程式が得られる. 観測点 $\mathbf{x}$ が屈折率 n_1 の外部領域から境界に近づいたときは以下の方程式が得られる.

$$\frac{1}{2} E^c(\mathbf{x}) = \int_C \left[P_1(\mathbf{x}|\mathbf{x}') \frac{\partial E^c(\mathbf{x}')}{\partial \mathbf{n}'} - E^c(\mathbf{x}') \frac{\partial P_1(\mathbf{x}|\mathbf{x}')}{\partial \mathbf{n}'} \right] dl' + \int_{C'} \left[G_1(\mathbf{x}|\mathbf{x}') \frac{\partial E^c(\mathbf{x}')}{\partial \mathbf{n}'} - E^c(\mathbf{x}') \frac{\partial G_1(\mathbf{x}|\mathbf{x}')}{\partial \mathbf{n}'} \right] dl' + E^t(\mathbf{x}) \quad (10)$$

$$C = C_1 + C_2 + C_3 + C_4$$

$$C' = C_5 + C_6 + C_7 + C_8$$

ただし,

$$P_i(\mathbf{x}|\mathbf{x}') = G_i(\mathbf{x}|\mathbf{x}') - g_2(\theta|\mathbf{x}') \frac{U_i^{+(1)}(\mathbf{x})}{u_2^{+(1)}(\frac{\pi}{2})} \quad (11)$$

$$U_i^{+(1)}(\mathbf{x}) = \int_{C_{1i}} \left[G_i(\mathbf{x}|\mathbf{x}') \frac{\partial E^{+(1)}(\mathbf{x}')}{\partial \mathbf{n}'} - E^{+(1)}(\mathbf{x}') \frac{\partial G_i(\mathbf{x}|\mathbf{x}')}{\partial \mathbf{n}'} \right] dl' \quad \dots\dots\dots (12)$$

$$u_2^{+(1)}\left(\frac{\pi}{2}\right) = \int_{C_{12}} \left[g_2\left(\frac{\pi}{2}|\mathbf{x}'\right) \frac{\partial E^{+(1)}(\mathbf{x}')}{\partial \mathbf{n}'} - E^{+(1)}(\mathbf{x}') \frac{\partial g_2\left(\frac{\pi}{2}|\mathbf{x}'\right)}{\partial \mathbf{n}'} \right] dl' \quad \dots\dots (13)$$

で表される. 式中の $G_i(\mathbf{x}|\mathbf{x}')$ ($i = 1, 2$) は屈折率 n_i ($i = 1, 2$) の領域における自由空間グリーン関数を表し, 次式で与えられる.

$$G_i(\mathbf{x}|\mathbf{x}') = -\frac{j}{4} H_0^{(2)}(k_0 n_i |\mathbf{x} - \mathbf{x}'|) \quad \dots\dots (14)$$

$H_0^{(2)}$ は 0 次第 2 種ハンケル関数を表す. ここで, 式 (12) の C_{1i} ($i = 1, 2$) は図 2 に示す仮想境界を表す. また式 (11), (13) 中の $g_2(\theta|\mathbf{x}')$ は, グリーン関数 $G_2(\mathbf{x}|\mathbf{x}')$ を円筒座標 (r, θ) で表したときの漸近展開

$$G_2(\mathbf{x}|\mathbf{x}') = G_2(r, \theta|\mathbf{x}') = A_2(r) g_2(\theta|\mathbf{x}') \quad \dots (15)$$

に表れる関数である. すなわち,

$$A_2(r) = -\frac{j}{4} \left[\frac{2j}{\pi n_2 k_0 r} \right]^{\frac{1}{2}} \exp(-j n_2 k_0 r) \quad \dots\dots (16)$$

$$g_2(\theta|\mathbf{x}') = \exp[j n_2 k_0 (x' \cos \theta + y' \sin \theta)] \quad \dots (17)$$

観測点 $\mathbf{x}$ を屈折率 n_3, n_5 の領域, すなわち観測物体および金属コーティング部内側から近づいたとき, 次式が導出できる [14].

$$\frac{1}{2} E^c(\mathbf{x}) = \int_{C_5} \left[G_3(\mathbf{x}|\mathbf{x}') \frac{\partial E^c(\mathbf{x}')}{\partial \mathbf{n}'} - E^c(\mathbf{x}') \frac{\partial G_3(\mathbf{x}|\mathbf{x}')}{\partial \mathbf{n}'} \right] dl' \quad \dots\dots (18)$$

$$\frac{1}{2} E^c(\mathbf{x}) = \int_{C_7+C_8} \left[G_5(\mathbf{x}|\mathbf{x}') \frac{\partial E^c(\mathbf{x}')}{\partial \mathbf{n}'} - E^c(\mathbf{x}') \frac{\partial G_5(\mathbf{x}|\mathbf{x}')}{\partial \mathbf{n}'} \right] dl' \quad \dots\dots (19)$$

また観測点 $\mathbf{x}$ が誘電体基盤内部領域から境界に近づいたときは次式で表される.

$$\frac{1}{2} E^c(\mathbf{x}) = \int_{C_6} \left[G_4(\mathbf{x}|\mathbf{x}') \frac{\partial E^c(\mathbf{x}')}{\partial \mathbf{n}'} - E^c(\mathbf{x}') \frac{\partial G_4(\mathbf{x}|\mathbf{x}')}{\partial \mathbf{n}'} \right] dl' + E^i(\mathbf{x}) + E^r(\mathbf{x}) \quad \dots\dots (20)$$

以上, 式 (9), (10), (18), (19), (20) が Collection モードに關する TE モード入射の境界積分方程式である. これらの式は式 (1), (2), (8) で定義された電界, $E^c(\mathbf{x})$ およびその導関数 $\partial E^c(\mathbf{x})/\partial \mathbf{n}$ を未知関数とする積分方程式である. したがって式 (9), (10) におけるプローブ様導波路部の無限長境界 $C_1 + C_2$ および基盤の無限長境界 C_6 上の電界は原点から遠方ではゼロとなると考えられ, 無限長積分路 $C_1 + C_2$ および C_6 は有限長とみなすことができる. すなわち式 (9), (10) は境界要素法を直接適用することができ, また式 (18)~(20) の積分路は有限長なのですべての境界上の $E^c(\mathbf{x})$ および $\partial E^c(\mathbf{x})/\partial \mathbf{n}$ を数値的に求めることができる. 境界 $C_1 + C_2 + C_3 + C_4$ 上の $E^c(\mathbf{x})$, $\partial E^c(\mathbf{x})/\partial \mathbf{n}$ がわかれば, 以下の式から透過係数 T を求めることができる [8].

$$T = \frac{\int_C \left[g_2\left(\frac{\pi}{2}|\mathbf{x}'\right) \frac{\partial E^c(\mathbf{x}')}{\partial n_2'} - E^c(\mathbf{x}') \frac{\partial g_2\left(\frac{\pi}{2}|\mathbf{x}'\right)}{\partial n_2'} \right] dl'}{u_2^{+(1)}(\theta)} \quad (21)$$

ただし

$$C = C_1 + C_2 + C_3 + C_4$$

任意の点における電界は積分表現から求めることができる. 以上, Collection モードについて述べたが, Illumination モードについても同様な積分方程式が得られる [8].

4. シミュレーション

ここでは 2 次元 PSTM シミュレーション結果を示す. 数値解析においては, 展開関数として二次関数, 試験関数としてデルタ関数 (ポイントマッチング) を利用した境界要素法を用いた. 解析結果の妥当性は, $E^c(\mathbf{x})$ および $\partial E^c(\mathbf{x})/\partial \mathbf{n}$ がプローブ先端部から離れるのにしたがって十分小さくなること, さらに光学回路要素が無損失誘電体だけの場合は数値結果が光学定理, エネルギー保存則および相反則を, 同じく金属が使われている場合は相反則を適度な精度で満足することにより確かめた [8]. 図 1 に示すパラメータは以下のように入れた.

プローブ先端と物体との y 方向距離: $k_0 l_y = 0.1$

(0.016 波長)

プローブ先端の尖り角: $\theta = 120^\circ$

プローブ先端の曲率半径: $k_0 R = 0.3$ (0.048 波長)

プローブ幅: $k_0 A = 2.4$ (0.38 波長)

観測物体の高さ: $k_0 a = 0.5$ (0.08 波長)

観測物体の幅: $k_0 b = 1.0$ (0.16 波長)

観測物体の間隔: $k_0 d = 1.0 \sim 3.0$ (0.16 ~ 0.48 波長)

プローブ外部空間の屈折率: $n_1 = 1.0$

プローブ内部の屈折率: $n_2 = 1.5$

観測物体の屈折率: $n_3 = 1.5$ (誘電体), $1.44 - j5.23$ (金属)

誘電体基盤内部の屈折率: $n_4 = 1.5$

金属コーティングの厚さ: $k_0 w = 1.0$ (0.16 波長)

コーティング部の長さ: $k_0 h = 4.0$ (0.64 波長)

屈折率: $n_5 = 1.44 - j5.23$

Collection モード基盤内部平面波入射角度: $\theta_i = 60^\circ$ ただし k_0 は真空中の波数 $k_0 = 2\pi/\lambda$ (λ : 波長) を表し, 金属の屈折率は波長 589.3nm のアルミニウムの屈折率である. シミュレーションでは, プローブ中心軸と観測物体中心との x 方向距離 $k_0 l_x$ を変化させたときの, 式 (1) で定義した透過波のエネルギー $|T|^2$ の変化, すなわち図 1 の 2 次元 PSTM の Collection モード出力像を求めた. さらに図 2 に示すようにプローブ上方より基本導波モードを入射し, $k_0 l_x$ を変化させたときの反射導波モードのエネルギー $|R|^2$ の変化 (R は基本導波モードの反射係数), すなわち 2 次元 PSTM の Illumination モードの出力像を求めた. 前述したように, プローブ先端部から十分離れた一様導波路部では誘電体スラブ導波路基本モードだけが存在する. シミュレーションは誘電体プローブを利用した観測物体が複数個の場合, 金属

図3 透過エネルギー $|T|^2$ (a) 観測物体:ガラス
(b) 観測物体:アルミニウム

Fig.3. Transmitted Power $|T|^2$ (a) Objects:Glass
(b) Objects:Aluminium

図4 反射エネルギー $|R|^2$ (a) 観測物体:ガラス
(b) 観測物体:アルミニウム

Fig.4. Reflected Power $|R|^2$ (a) Objects:Glass
(b) Objects:Aluminium

コーティング開口プローブを利用した観測物体が一個の場合について行った。

〈4・1〉 誘電体プローブの場合 図3, 4は, 同一形状の観測物体を三個並べシミュレーションを行った結果である。図3の縦軸は, Collection モードの透過エネルギー, すなわち $|T|^2$ を表し, 横軸は図2の $k_0 l_x$ を表す。基盤内部からの入射平面波は図2に示す方向から入射角 $\theta_i = 60^\circ$ で入射する。図3 (a) は観測物体が誘電体 (ガラス), 図3 (b) は観測物体が金属 (アルミニウム) のときの出力像すなわち $|T|^2$ の $k_0 l_x$ 依存性である。またグラフ中の矩形は観測物体の形状、位置を示しており、観測物体の大きさは前述したものである。観測物体の間隔 $k_0 d$ は $3.0(0.48\lambda)$ で、この間隔では、観測物体が誘電体 (ガラス), 金属 (アルミニウム) とも、出力像において、物体は三個に分離した像として認識できることが分かる。しかし物体間隔をさらに小さくしていくと、観測物体が誘電体では物体間隔が $k_0 d = 1.0(0.16\lambda)$ で、金属では同じく $k_0 d = 1.6(0.25\lambda)$ で物体出力像が重なり初め、三個に分離した像として認識できなくなった。すなわち期待したほどの解像力は得られなかった。Collection モード出力像において物体像の位置と実際の位置は一致していない。また物体の像の大きさも観測物体の像を反映していない。これは後に示す光強度分布の結果から、プローブ側面

から入る光の影響と考えられる。誘電体プローブの場合は、出力像には入射エバネッセント波と、観測物体、プローブからの散乱波との干渉の影響があらわれる。Collection モードにおいて、出力像と観測物体との関係は、誘電体、金属の場合について非常に複雑であり、誘電体プローブを利用した場合は出力像の解釈が容易ではないことを示している。

図4は, Illumination モードの結果を示す。図4の縦軸は、プローブ導波路部における反射導波モードのエネルギー $|R|^2$ を表し、横軸は $k_0 l_x$ を表す。図4 (a) は観測物体が誘電体 (ガラス), 図4 (b) は観測物体が金属 (アルミニウム) の結果である。物体間隔 $k_0 d = 3.0(0.48\lambda)$ では、観測物体が誘電体、金属の場合、出力像は三個の分離した像として見えることが分かる。また、図4では誘電体はネガ像、金属はポジ像の出力像 ($|R|^2$ の $k_0 l_x$ 依存性) となることが分かる。しかしこのような性質は観測物体の誘電率に依存し、出力像の一般的な性質については今後の研究が必要である。Illumination モードでも、物体間隔をさらに小さくしていくと、観測物体が誘電体では、物体間隔が $k_0 d = 1.6(0.25\lambda)$ で、金属では同じく $k_0 d = 2.0(0.32\lambda)$ で物体出力像が重なり初め、観測物体が三個に分離した像として認識できなくなった。Illumination モード出力像において物体像の位置と実際の位置は一致し、また物体の像の大きさも観測物体の大きさを反映している。Collection モードと比較して、

図5 観測物体(ガラス) (a)Collectionモード透過エネルギー $|T|^2$ (b)Illuminationモード反射エネルギー $|R|^2$

Fig. 5. Object: Dielectric (Glass) (a) Collection-mode Transmitted Power $|T|^2$ (b) Illumination-mode Reflected Power $|R|^2$

Illuminationモードにおいては、出力像と観測物体との関係は比較的単純であり像の解釈が容易であることを示している。

〈4・2〉 金属コーティング開口プローブの場合 次に、金属コーティング開口プローブを利用した出力像を示す。図5 (a) は Collection モードで観測物体が一つの誘電体(ガラス)の場合の出力像である。実線が金属コーティング開口プローブの場合を、破線は金属コーティングされていない誘電体プローブの場合を示す。金属コーティング開口プローブを用いると、出力像での観測物体の位置と実際の位置は一致し、干渉の影響も減少していることが分かる。また、物体の出力像の広がりも減少し、解像力も上がっていることが分かる。しかし、透過エネルギーは減少し出力像のコントラストは減少する。図5 (b) は図5 (a) と同じ条件の Illumination モードの結果である。実線、破線は図5 (a) と同じである。Collection モードと異なり、Illumination モードでは、実線、破線とも出力像の観測物体の位置と実際の位置は一致している。誘電体プローブに比べ金属コーティング開口プローブの出力像は非常に複雑な形状をしているが、これはシミュレーションにおいて金属コーティングされたプローブ側面の範囲が十分ではなく、被覆されていない部分

図6 光強度分布 $|E|^2$ Collectionモード誘電体プローブ (a) $k_0 l_x = 0.0$ (0.0λ) (b) $k_0 l_x = -5.0$ (0.8λ)

Fig. 6. distribution of field intensity $|E|^2$ Collection-mode dielectric probe (a) $k_0 l_x = 0.0$ (0.0λ) (b) $k_0 l_x = -5.0$ (0.8λ)

から漏れた光が基盤表面で反射されプローブ内に入ったためと考えられる。しかし、出力像での観測物体を示す $|R|^2$ の減少範囲は誘電体プローブの場合のそれに比べ狭くなっており、解像力が上がっていると考えられるが明確な結果は得られなかった。金属コーティング開口プローブ利用による解像力改良についてより詳しく調べるには、より広い金属コーティングの採用、図3,4のような複数観測物体のシミュレーションを行う必要があるが、離散化すべき金属コーティング部分の増加、すなわち未知数の増加のため研究室のシステム (DEC Alpha Chip 21164 500MHz, RAM 256MB) で、適正な計算時間 (数週間以内) で実行することは現時点では困難であり今後の課題としたい。

〈4・3〉 光強度分布の可視化 境界要素法により得られた結果は数値結果であり、これを可視化することは PSTM の物理過程を理解するために重要である。得られた物体近傍における光強度分布 $|E|^2$ を商用可視化ツール AVS Express Viz を用いて可視化した。図6～8に観測物体を一つの誘電体(ガラス)として、物体 プローブ近傍の光強度 ($|E|^2$) の分布を表示する。図6, 7は Collection モード、図8は Illumination モードの光強度分布である。図6 (a)(b) は、誘電体プローブの場合の光強度分布を表示している。これらの結果からプローブに取り込まれる光は、プローブの

図7 光強度分布 $|E|^2$ Collection モード 金属コーティング開口プローブ (a) $k_0 l_x = 0.0$ (0.0λ) (b) $k_0 l_x = -5.0$ (0.8λ)

Fig. 7. Distribution of field intensity $|E|^2$ Collection-mode metal coated probe (a) $k_0 l_x = 0.0$ (0.0λ) (b) $k_0 l_x = -5.0$ (0.8λ)

先端部からではなく、プローブの側面から取り込まれていることが分かる。また、プローブが観測物体とかなり離れていても観測物体による影響を受けてプローブに光が取り込まれている様子が分かる。以上のように、誘電体プローブでは、出力像は複雑な散乱過程の結果を表しており、出力像の結果を解釈することが難しいことが分かる。図7 (a)(b)は、金属コーティング開口プローブの場合の光強度分布を表示している。プローブ側面の金属コーティングにより、プローブに取り込まれる光の大部分はプローブ先端開口部から取り込まれ、誘電体プローブに比べ、出力像ははるかに単純な過程から構成されていることが分かる。しかし、プローブに取り込まれる光エネルギーは減少していることも分かる。図8は同じ条件下の Illumination モードの観測物体・プローブ近傍の光強度 $|E|^2$ の分布を表示したもので、プローブ内に入射波と反射波による定在波ができていることがわかる。図8 (a)が誘電体プローブ、図8 (b)が金属コーティング開口プローブの結果を示す。図8 (b)では、図8 (a)に比較し、金属コーティングによりプローブ先端に光を局在していることがわかるが、金属コーティングの範囲が十分でなくプローブ側面部から光が漏れていることが確認できる。これにより、図5のように出力像が複雑な結果になったと考えられる。

図8 光強度分布 $|E|^2$ Illumination モード (a) 誘電体プローブ $k_0 l_x = 0.0$ (0.0λ) (b) 金属コーティング開口プローブ $k_0 l_x = 0.0$ (0.0λ)

Fig. 8. Distribution of field intensity $|E|^2$ Illumination-mode (a) dielectric probe $k_0 l_x = 0.0$ (0.0λ) (b) metal coated probe $k_0 l_x = 0.0$ (0.0λ)

5. 結 論

本論文では、以前に作成した2次元フォトン走査型トンネル顕微鏡 (PSTM) シミュレーションコードをプローブが金属コーティングされた開口プローブ、および観測物体が複数の金属の場合でも適用可能なように拡張した。シミュレーションには、導波モード分離型積分方程式に基づく境界要素法を用いた。入射 TE 波 (s 偏光) で Collection モードにおけるプローブ内導波モードの透過係数、Illumination モードにおける同じく反射係数を求め、それぞれのモードで出力像と観測物体の関係を調べた。誘電体プローブと金属コーティング開口プローブの結果と比較し、開口プローブを用いることによる出力像の改善を調べた。シミュレーションでは、実際のフォトン走査型トンネル顕微鏡では測定することが難しいと思われる光強度分布を可視化し、その結果、Collection モードの複雑な物理過程を容易に理解することができた。しかし、実験で報告されているような高解像力 [4][6] を再現することは出来なかった。今後の詳しいシミュレーションが必要であるが、この結果は、筆者らはシミュレーションが2次元入射 TE 波 (s 偏光) に限られていることではないかと考えている。本研究は1998年、1999年度の文部省科学研究費 (特定研究) の援助を受けた。

(平成12年3月27日受付、同13年2月21日再受付)

文 献

- (1) D.W.Pohl and D.Courjun ed, "Near Field Optics", Kluwer Academic (1993)
- (2) E.Betzig, J.K.Trautmam, T.D.Harris, J.S.Weiner and R.L.Kostelak, "Breaking the Diffraction Barrier: Optical Microscopy on a Nanometric Scale", Science 251, pp.1468-1470 (1991)
- (3) E.Betzig, J.K.Trautmam, "Near-Field Optics: Microscopy, Spectroscopy, and Surface Modification Beyond the Diffraction Limit", Science 257 pp.189-195 (1992)
- (4) 大津元一, "フォトン走査型トンネル顕微鏡", 応用物理 vol.65, pp.2-12 (1996)
- (5) M.A.Paesler and P.J.Moyer, "Near-Field Optics:Theory, Instrumentation and Application", John Wiley & Sons, Inc. (1996)
- (6) Motoichi Ohtsu and Hirokazu Hori, "NEAR-FIELD NANO-OPTICS", Kluwer Academic / Plenum Publishers (1999)
- (7) Kazuo Tanaka, Masahiro Tanaka and Tatsuya Omoya, "Application of VR technology to near-field optics", Proceeding of International Conference on Virtual System and Multi Media, pp.101-106 (1996)
- (8) Kazuo Tanaka, Masahiro Tanaka and Tatsuya Omoya, "Boundary integral equations for a two-dimensional simulator of a photon scanning tunneling microscope", Journal of Optical Society of America A, vol.15, pp.1918-1931 (1998)
- (9) 田中嘉津夫, 田中雅宏, 面谷竜弥, "近視野光学シミュレータのための積分方程式—二次元 STOM/PSTM", 近接場光学研究グループ第五回討論会予稿集, pp.65-70 (1996)
- (10) 田中嘉津夫, "誘電体導波曲り回路設計の新しい積分方程式—導波モード分離型積分方程式—", 電子情報通信学会論文誌 C-I Vol.J76-C-I No.1 pp.1-9 (1993)
- (11) 田中雅宏, 田中嘉津夫, "近視野光学用 CAD のための境界積分方程式", 電子情報通信学会論文誌 C-I Vol.J79-C-I No.4 pp.101-108 (1996)
- (12) Robert E. Collin, "FIELD THEORY OF GUIDED WAVES", Chap 11, McGRAW-HILL BOOK COMPANY, INC., 1960
- (13) Masahiro Tanaka and Kazuo Tanaka, "Boundary integral equations for computer-aided design and simulations of near-field optics: two-dimensional optical manipulator", Journal of Optical Society of America A, vol.15, pp.101-108 (1998)
- (14) 熊田信昭, 森田長吉, 電磁波と境界要素法, 森北出版, (1987)

田 中 雅 宏 (非会員) 1969 年生.1992 年 3 月 岐阜大学工学部
電子情報工学科卒業. 1994 年 3 月 同大学院修士課程了. 同年常葉学園浜松大学助手. 1997 年～
1998 年 アリゾナ大学研究員. 現在, 岐阜大学工学部助手. 主として光導波回路及び近接場光学 CAD
に関する研究に従事.

吉 田 貴 博 (非会員) 1975 年生.1998 年 3 月 岐阜大学工学部
電子情報工学科卒業. 現在, 同大学院博士課程に在学中. 平成 11 年 電気関係学会東海支部連合大会奨励賞受賞. 近接場光学 CAD に関する研究に従事.

田 中 嘉 津 夫 (正員) 1948 年生.1970 年 3 月 阪大通信卒. 1975
年同大学院博士課程了. 同年 岐阜大・電気・助手. 1994 年トロント大学在外研究員, 相対論的電磁界理論, 弾性表面波, 放射線画像工学, 光回路及び近接場光学 CAD の研究に従事. 現在, 岐阜大応用情報工学科教授. 1985 年, 平 4 医用画像情報学会内田論文賞受賞. 情報処理学会, 米国 IEEE, 日本物理学会, 医用画像情報学会各会員.