Анализ альтернативных схем микроскопа полного внутреннего отражения

Н. В. Гришина^{1,*a*}, Ю. А. Еремин^{2,*b*}, А. Г. Свешников¹

Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, ¹ физический факультет, кафедра математики; ² факультет вычислительной математики и кибернетики, кафедра математической физики. Россия, 119991, Москва, Ленинские горы, д. 1. E-mail: ^a ngrishina@inbox.ru, ^b eremin@cs.msu.ru

Статья поступила 05.10.2009, подписана в печать 19.11.2009

Методом дискретных источников проводится численный анализ альтернативных схем микроско-

па, основанного на трансформации неизлучающих волн в области полного внутреннего отражения.

Ключевые слова: численный анализ, метод дискретных источников, неизлучающие волны, микроскоп полного внутреннего отражения.

УДК: 535.42, 535.13. PACS: 42.25.-р, 42.25.Fx.

Введение

В последние 15 лет была разработана новая экспериментальная технология, позволяющая определять расстояние между коллоидной частицей, находящейся в растворе, и плоской поверхностью с точностью до 1 нм. Эта технология получила название микроскопия полного внутреннего отражения (МПВО), в английской литературе — total internal reflection microscopy (TIRM) [1]. Метод МПВО позволяет восстанавливать потенциал взаимодействия между частицами и поверхностями и используется для выявления различных сил взаимодействия [2]. Метод МПВО основан на эффекте полного внутреннего отражения, когда частицу помещают на пленку, нанесенную на стеклянную призму, в поле неизлучающей волны и она начинает конвертировать энергию неизлучающей волны в рассеянное поле, собираемое объективом, который располагается над частицей [1, 2]. Для восстановления потенциала взаимодействия до недавнего времени использовалась простейшая модель задачи рассеяния, основанная на предположении, что интенсивность поля, рассеянного частицей, пропорциональна интенсивности неизлучающей волны в области, занятой частицей. Однако в экспериментах обнаружилось различие в поведении потенциала взаимодействия частиц для Р-и S-поляризованного излучения [3]. Было установлено, что это обусловлено переотражением излучения между частицей и поверхностью, которое не учитывалось простейшей моделью. Последнее обстоятельство привело к необходимости использовать строгую математическую модель рассеяния, основанную на методе дискретных источников (МДИ), для восстановления потенциала взаимодействия частицы с поверхностью пленки [4]. Было показано, что строгая модель позволяет в точности восстанавливать потенциал взаимодействия [3, 4].

В последнее время возникла идея альтернативной схемы МПВО, когда рассеянное поле собирается объективом, расположенным не над частицей, а в нижней части стеклянной призмы. В этом случае ось объектива располагается в направлении волны, зеркально отраженной от поверхности стеклянной призмы, а сам объектив непосредственно примыкает к поверхности призмы. Для уменьшения интенсивности отраженной волны предлагается использовать явление плазмонного резонанса в золотой пленке, нанесенной на поверхность стеклянной призмы, подбирая соответствующим образом толщину пленки, длину волны света и угол падения [5]. В настоящей работе МДИ адаптирован для анализа двух описанных выше схем МПВО для выбора наиболее эффективной из них с точки зрения определения расстояния между частицей и пленкой. Установлена предпочтительность использования схемы МПВО с объективом, расположенным в нижнем полупространстве.

Математическая модель задачи рассеяния

Будем рассматривать конфигурацию, состоящую из призмы (полупространство D_1 , z < 0), из нанесенной на нее металлической пленки толщины d (область D_i , d > z > 0) и оставшейся области пространства D_0 , z > d. Будем полагать, что в области D_0 находится проницаемая осесимметричная частица, внутреннюю область которой будем обозначать как D_i . Пусть поверхность частицы обозначена как ∂D_i . Выберем декартову систему координат с началом на поверхности призмы, а ось OZ направим вдоль оси симметрии частицы. В качестве внешнего возбуждения рассмотрим линейно поляризованную плоскую волну $\{ \mathbf{E}^0, \mathbf{H}^0 \}$, которая распространяется в призме под углом θ_1 к оси OZ. Тогда математическая постановка задачи рассеяния принимает вид

$$\operatorname{rot} \boldsymbol{H}_{\zeta} = jk\varepsilon_{\zeta}\boldsymbol{E}_{\zeta}, \quad \operatorname{rot} \boldsymbol{E}_{\zeta} = -jk\mu_{\zeta}\boldsymbol{H}_{\zeta} \quad \operatorname{B} \ D_{\zeta}, \quad \zeta = 0, f, 1, i,$$
$$\boldsymbol{n}_{p} \times (\boldsymbol{E}_{i}(p) - \boldsymbol{E}_{0}(p)) = 0, \qquad p \in \partial D_{i}, \qquad (1)$$
$$\boldsymbol{n}_{p} \times (\boldsymbol{H}_{i}(p) - \boldsymbol{H}_{0}(p)) = 0, \qquad p \in \partial D_{i}, \qquad (1)$$
$$\boldsymbol{e}_{z} \times (\boldsymbol{E}_{\alpha}(p) - \boldsymbol{E}_{\beta}(p)) = 0, \qquad p \in \Xi_{\alpha\beta},$$

с условиями излучения (затухания) для рассеянного поля на бесконечности. Здесь $\{E_{\zeta}, H_{\zeta}\}$ — полное поле в соответствующей области D_{ζ} , $k = \omega/c$, n_p внешняя единичная нормаль к поверхности ∂D_i , e_z единичный вектор декартовой системы координат, направленный вдоль оси Z, а $\Xi_{\alpha\beta}$ — плоскость раздела областей D_{α} и D_{β} , $\alpha, \beta = 0, 1$. Подчеркнем, что в области D_1 полное поле включает в себя падающую и зеркально отраженную от поверхности призмы плоские волны, а в области D_0 — преломленную по закону Снеллиуса волну, которая при определенных условиях превращается в неизлучающую. Полагаем, что поверхность частицы является гладкой $\partial D_i \subset C^2$, а параметры сред удовлетворяют условиям Im ε_{ζ} , $\mu_{\zeta} \leq 0$ (что соответствует зависимости полей от времени tвида $e^{j\omega t}$). В этом случае граничная задача (1) имеет единственное решение.

Для построения приближенного решения будем следовать основным этапам схемы, подробно изложенной в [6]. Сначала решим задачу дифракции поля плоской волны $\{E^0, H^0\}$ на плоскослоистом интерфейсе (в отсутствие частицы). Это возможно сделать аналитически и получить в результате поле внешнего возбуждения $\{ E_{c}^{0}, H_{c}^{0} \}$ в каждой из областей D_{c} , которое в точности удовлетворяет условиям сопряжения на плоскостях раздела сред (z = 0, d) и условиям на бесконечности. После этого перейдем к построению приближенного решения граничной задачи (1) для рассеянного поля $\{ {m E}^{
m s}_{\zeta}, {m H}^{
m s}_{\zeta} \}$ в областях $D_{\zeta}, \ \zeta = 0, f, 1,$ и полного поля внутри частицы. Будем строить представления для полей в виде конечной линейной комбинации мультиполей, расположенных внутри области D_i , поля которых удовлетворяют системе уравнений Максвелла в областях $D_{\zeta}, \ \zeta = 0, f, 1, i$, условиям на бесконечности для рассеянного поля в областях $D_{0,f,1}$, а также условиям сопряжения для тангенциальных компонент полей всюду на границах слоистого интерфейса Ξ_{1f} и Ξ_{f0}. Тогда решение задачи (1) сводится к решению́ задачи аппроксимации поля внешнего возбуждения на поверхности частицы полями заданных мультиполей. Таким образом, определение неизвестных амплитуд ДИ производится из условий сопряжения только на поверхности частицы ∂D_i :

$$\boldsymbol{n}_{p} \times (\boldsymbol{E}_{i} - \boldsymbol{E}_{0}^{s}) = \boldsymbol{n}_{p} \times \boldsymbol{E}_{0}^{0}, \quad \boldsymbol{n}_{p} \times (\boldsymbol{H}_{i} - \boldsymbol{H}_{0}^{s}) = \boldsymbol{n}_{p} \times \boldsymbol{H}_{0}^{0}$$
 Ha $\partial D_{i}.$
(2)

Здесь $\{E_0^0, H_0^0\}$ представляет собой поле преломленной волны в области D_0 . Следовательно, задача дифракции (1) сведена к решению задачи аппроксимации поля преломленной в области D_0 волны на поверхности частицы (2) полями заданных мультиполей.

Построим приближенное решение таким образом, чтобы учесть осевую симметрию геометрии задачи (1). В основу представления для рассеянного поля положим мультипольные источники, удовлетворяющие условиям сопряжения для тангенциальных компонент полей на плоскостях $\Xi_{0,1}$, что позволит учесть аналитически всевозможные переотражения между частицей и плоскостями раздела сред [6]. В данном случае структура полей будет определяться тензором Грина слоистой среды [7]. Его азимутальные гармоники Фурье имеют вид интегралов Вейля-Зоммерфельда [6].

При построении приближенного решения задачи (1) будем также учитывать не только осевую симметрию рассеивателя, но и одновременно поляризацию внешнего возбуждения. В этом случае используем специальные комбинации векторных потенциалов, различных для *P*- и *S*-поляризации внешнего возбуждения, аналогично [6]. Построенное таким образом представление для приближенного решения удовлетворяет всем условиям граничной задачи (1), за исключением условий сопряжения на поверхности частицы. Удовлетворяя этим условиям (2) в некоторой норме, определяем амплитуды ДИ. Заметим, что, определив таким образом амплитуды ДИ, мы построим представление для рассеянного поля в каждой из областей $D_{0,f,1}$.

Так как мультиполи локализованы на оси симметрии, то представления для полей имеют вид конечной суммы ряда Фурье по азимутальной переменной. Разлагая в ряд Φ урье внешнее возбуждение (2), сводим задачу поверхностной аппроксимации для полей к последовательному решению задач одномерной аппроксимации для гармоник Фурье полей на образующей поверхности вращения. Для решения одномерных задач используется обобщенный метод коллокаций [8]. В рамках этого подхода определение Фурье-гармоник амплитуд ДИ сводится к решению переопределенных линейных систем и вычислению нормального псевдорешения [9]. Оценка погрешности полученного решения осуществляется вычислением невязки выполнения граничных условий (2) на поверхности частицы в среднеквадратичной норме [6].

Для вычисления характеристик рассеянного поля в верхнем и нижнем полупространствах на бесконечности необходимо иметь диаграммы рассеяния для полей $F_{0,1}(\theta, \varphi)$. В данном случае они определяются в областях $D_{0,1}$ как

$$\frac{\boldsymbol{E}_{0,1}^{s}(M)}{|\boldsymbol{E}^{0}(z=0)|} = \frac{\exp\{-jk_{0,1}r\}}{r} \boldsymbol{F}_{0,1}(\theta,\varphi) + o(r^{-1}),$$

$$r = |M| \to \infty.$$

 $F_{0,1}(\theta,\varphi)$ определены на единичной сфере и имеют компоненты (θ,φ) . Для получения конкретного вида диаграмм рассеяния для приближенного решения задачи (1) достаточно использовать асимптотические представления для интегралов Вейля–Зоммерфельда. Как следствие компоненты диаграмм рассеяния в верхнем и нижнем полупространстве не содержат интегралов и после определения неизвестных Фурье гармоник амплитуд ДИ для расчета характеристик рассеяния достаточно вычислять лишь комбинацию элементарных функций [6].

Результаты моделирования

Интенсивность рассеянного поля определяется как

$$I_{0,1}^{P,S}(\theta_1,\theta,\varphi) = \left| \boldsymbol{F}_{0,1}^{P,S}(\theta_1,\theta,\varphi) \right|^2,$$
(3)

где $F_{0,1}^{P,S}(\theta_1, \theta, \varphi)$ — диаграмма рассеяния, соответствующая P/S-поляризации возбуждающей плоской волны, размерность интенсивности мкм². Также нас интересует сечение рассеяния (СР) — интенсивность, рассеянная в определенный телесный угол Ω , определяемый апертурой объектива

$$\sigma_{0,1}^{P,S}(\theta_1) = \int_{\Omega} I_{0,1}^{P,S}(\theta_1, \theta, \varphi) \, d\omega.$$
(4)

В качестве внешнего возбуждения будем рассматривать плоскую P/S-поляризованную волну с длиной волны $\lambda = 633$ нм, а в качестве материала призмы — стекло с высоким индексом рефракции для данной длины волны LASF46A ($n_1 = 1.904$). Мы проведем анализ рассеивающих свойств сферических частиц по-

листерола латекса (PSL), индекс рефракции которых $(n_i = 1.59)$, диаметр D = 1 мкм, 500 и 200 нм, расположенных в воде $(n_0 = 1.33)$, на золотой пленке $(n_j = 0.18 - 3.26j)$ толщиной d = 49 нм. Величина критического угла $\theta_c = \arcsin(n_0/n_1)$, за которым начинается область неизлучающих волн, составляет 44.31°. В этом случае легко вычислить, что плазмонный резонанс, соответствующий минимуму коэффициента отражения от интерфейса призма-пленка, с учетом воды для P-поляризации

$$R_{01}^{P}(\theta_{1}) = \frac{r_{1f}^{P} + r_{f0}^{P} \exp\{-2jk_{f}\cos\theta_{f}d\}}{1 + r_{1f}^{P}r_{f0}^{P}\exp\{-2jk_{f}\cos\theta_{f}d\}}$$

достигается при угле падения $\theta_1 = 50^\circ$. Здесь $r^P_{\alpha\beta}$ — коэффициенты отражения от границ $\Xi_{\alpha\beta}$, θ_f — угол преломления волны внутрь пленки, k_f — волновое число пленки. В качестве коллекторов рассеянного поля рассматривались объективы с углами раствора 23 или 32° (одинаковые вверху и внизу), при этом по технологическим соображениям у коллектора, который располагается в нижнем полупространстве, блокирован центральный угол в 5°, чтобы не захватывать отраженный луч лазера. Последнее означает, что внизу располагается коллектор кольцевого типа.

На рисунках приведены результаты вычислительных экспериментов, апостериорная оценка погрешности которых не превышает 0.5%.

На рис. 1 приведены результаты расчета СР в зависимости от высоты частицы h (мкм) диаметром D = 1 мкм, расположенной над поверхностью пленки, для коллектора 23° и для P- и S-поляризованного излучения. Из рисунка видно, что СР для P-поляризации превышает СР для S-поляризации на 2–3 порядка. Кроме того, СР для нижнего коллектора для P-поляризации превышает во всем диапазоне СР для верхнего. Следует также отметить, что СР для верхнего коллектора носит колебательный характер, в то время как СР для нижнего убывает практически эпспоненциально без каких-либо осцилляций.

На рис. 2 приведены аналогичные результаты для частицы диаметром D = 500 нм. Характерной особенностью в этом случае является немонотонное поведение



Рис. 1. Сечение рассеяния $\sigma_{0.1}^{P,S}(\theta_1)$ (4) в зависимости от угла падения θ_1 и поляризаций. Частица диаметром D = 1 мкм, коллекторы 23°. σ_0^P соответствует кривая 1, σ_0^S — кривая 2, σ_1^P — кривая 3, σ_1^S кривая 4



Рис. 2. Сечение рассеяния $\sigma_{0,1}^{P,S}(\theta_1)$. Частица диаметром D = 500 нм, коллекторы 23°. σ_0^P — кривая 1, σ_0^S — кривая 2, σ_1^P — кривая 3, σ_1^S — кривая 4



коллекторов 32°

СР как для *P*-, так и для *S*-поляризации для верхнего коллектора. В то же время СР для нижнего коллектора убывает эпспоненциально. Аналогичные результаты приведены на рис. 3 для коллекторов 32°.

Рисунок 4 посвящен результатам расчета СР для частицы диаметром D = 200 нм для коллекторов 23° . Как следует из расчетов, в этом случае колебательный характер кривых для верхнего коллектора приводит к тому, что в области высот, превышающих 315 нм, СР для верхнего коллектора оказывается больше, чем для нижнего. Отметим, что колебательный характер СР для небольших частиц уже отмечался ранее в нашей работе [10].

На рис. 5 приведено распределение интенсивности рассеяния в плоскости падения для частицы диаметром D = 500 нм. Диапазон углов наблюдения $270^\circ \ge \theta \ge 90^\circ$ относится к нижней полуплоскости, а $360^\circ \ge \theta \ge 270^\circ \cup 90^\circ \ge \theta \ge 0^\circ$ – к верхней. Видно, что максимум в верхней полуплоскости направлен в сторону «преломленного» угла θ_0 , а в нижней полуплоскости максимум направлен в сторону зеркально отраженной



Рис. 4. Те же результаты, что и на рис. 2, но для частицы диаметром D = 200 нм



Рис. 5. Интенсивность рассеяния $I^{P.S}(\theta)$ (3) в плоскости падения волны для частицы диаметром D = 500 нм. *Р*-поляризация — кривая 1, *S*-поляризация — кривая 2

волны 130°. Из рисунка ясно, что верхний коллектор, локализованный в направлении $\theta = 0^{\circ}$, собирает гораздо меньшую интенсивность рассеяния, чем коллектор, центрированный в направлении $\theta = 130^{\circ}$, даже несмотря на вырез в 5° в середине нижнего коллектора. Аналогичные результаты имеют место и для частиц других диаметров.

В заключение отметим, что использование коллектора, центрированного в направлении зеркально отраженной волны, имеет целый ряд преимуществ. Во-первых, его СР превосходит СР для верхнего коллектора. Во-вторых, СР в этом случае монотонно и экспоненциально убывает, что дает возможность однозначно определять высоту частицы.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант 09-01-00318).

Список литературы

- 1. *Prieve D.C.* // Adv. in Colloid and Interface Science. 1999. **82**, N 1–3. P. 93.
- Hertlein C., Helden L., Gambassi A. et al. // Nature. 2008. 451. P. 172.
- Helden L., Eremina E., Riefler N. et al. // Applied Optics. 2006. 45. P. 7299.
- Hertlein C., Riefler N., Eremina E. et al. // Langmuir (Letter). 2008. 24, N 1. P. 1.
- 5. *Raether H.* Surface plasmon on smooth and rough surfaces and on gratings. Berlin, 1988. Chap. 2.
- 6. Гришина Н.В., Еремин Ю.А., Свешников А.Г. // Вестн. Моск. ун-та. Физ. Астрон. 2009. № 1. С. 32.
- 7. Дмитриев В.И. Поля в слоистых средах. М., 1963.
- 8. Бахвалов Н.С. Численные методы. М., 1987.
- 9. Воеводин В.В., Кузнецов Ю.А. Матрицы и вычисления. М., 1984.
- Eremina E., Grishina N., Eremin Yu. et al. // J. Opt. A: Pure Appl. Opt. 2006. 8. P. 999.

Analysis of alternative schemes of total internal reflection microscope

N. V. Grishina^{1,a}, Yu. A. Eremin^{2,b}, A. G. Sveshnikov¹

¹Department of Mathematics, Faculty of Physics, M. V. Lomonosov Moscow State University, Moscow 119991, Russia.

² Department of Mathematical Physics, Faculty of Computational Mathematics and Cybernetics, M. V. Lomonosov Moscow State University, Moscow 119991, Russia. E-mail: ^a ngrishina@inbox.ru, ^b eremin@cs.msu.ru.

E mun. ngrishniu@noox.ru, cremin@cs.msu.ru.

Using the discrete sources method, numerical analysis of alternative schemes of microscopy based on evanescent waves transformation in the total internal reflection area is being performed.

Keywords: numerical analysis, discrete sources method, evanescent waves, total internal reflection microscopy. PACS: 42.25.-p, 42.25.Fx. *Received 5 October 2009*.

English version: Moscow University Physics Bulletin 1(2010).

Сведения об авторах

- 1. Гришина Наталья Владимировна канд. физ.-мат. наук, ст. науч. сотр., ст. науч. сотр.; тел.: (495) 939-10-33, e-mail: ngrishina@inbox.ru.
- 2. Еремин Юрий Александрович докт. физ. мат. наук, вед. науч. сотр.; тел.: (495) 939-17-76, e-mail: eremin@cs.msu.ru.
- 3. Свешников Алексей Георгиевич докт. физ. мат. наук, профессор, профессор; тел.: (495) 939-10-33, e-mail: sveshnikov@phys.msu.ru.