

DOI: 10.17586/1023-5086-2024-91-05-43-53

УДК 535.211:536.331

# Поверхностно-усиленное оптическое поглощение и индуцированный нагрев конического кремниевого нанозонда

Элина Александровна Избасарова<sup>1</sup>✉, Алмаз Рашитович Газизов<sup>2</sup>,  
Сергей Сергеевич Харинцев<sup>3</sup>

<sup>1, 2, 3</sup>Казанский федеральный университет, Казань, Россия

<sup>2, 3</sup>Институт прикладных исследований Академии наук Республики Татарстан, Казань, Россия

<sup>1</sup>izbasarova.E.A@mail.ru <https://orcid.org/0000-0001-8300-4725>

<sup>2</sup>equus.meteores@gmail.com <http://orcid.org/0000-0002-9542-8856>

<sup>3</sup>skharint@gmail.com <http://orcid.org/0000-0002-5367-1356>

## Аннотация

**Предмет исследования.** Взаимосвязь температуры нагрева с мезоскопической формой кремниевого зонда атомно-силового микроскопа при средних облученностях, создаваемых лазерным излучением ( $5 \text{ МВт/см}^2$ ), и наличием шероховатой металлической подложки. **Цель работы.** Исследование зависимости усиления оптического поля и вызванного им нагрева острия конического кремниевого нанозонда при лазерном облучении от радиуса кривизны и угла конуса вершины зонда, расстояния между ним и подложкой, параметра шероховатости поверхности золотой подложки. **Метод.** Локализация электромагнитного поля в зазоре между вершиной кремниевой наноантенны и неоднородностями на поверхности золотой подложки смоделирована методом конечных разностей во временной области. В качестве плазмонной поверхности используется тонкое золотое покрытие (толщина до 50 нм) на стеклянной подложке. Такое покрытие за счет возбуждения поверхностного плазмонного резонанса усиливает поглощение оптического излучения и увеличивает температуру нагрева кремниевой оптической антенны. **Основные результаты.** Исследовано влияние угла поляризации падающего лазерного излучения на распределение электрического поля вблизи вершины зонда. Установлено, что вблизи вершины кремниевого кантилевера усиливается только составляющая напряженности поля падающего оптического излучения вдоль направления оси зонда. Показано, что по мере увеличения расстояния между наконечником и подложкой температура снижается экспоненциально. Обнаружено понижение температуры зонда с уменьшением угла раствора вершины зонда. Найдена зависимость температуры от радиуса кривизны острия кремниевой наноантенны при наличии золотой подложки. Показано, что с увеличением размера шероховатости золотой пленки температура вершины кремниевой антенны возрастает, постепенно приближаясь к предельному значению. **Практическая значимость.** Результаты исследования могут быть применены для оптимального подбора параметров эксперимента, использующего нагретый зонд. Контролируемый нагрев кремниевого зонда может использоваться для изучения фазовых переходов в наноматериалах различного типа, а также для локального термохимического нанокатализа с целью создания новых структурных материалов с заданными свойствами.

**Ключевые слова:** термоплазмоника, оптический нагрев, кремниевый кантилевер, плазмонный резонанс

**Благодарность:** работа поддержана Российским научным фондом, проект № 19–12–00066.

**Ссылка для цитирования:** Избасарова Э.А., Газизов А.Р., Харинцев С.С. Поверхностно-усиленное оптическое поглощение и индуцированный нагрев конического кремниевого нанозонда // Оптический журнал. 2024. Т. 91. № 5. С. 43–53. <http://doi.org/10.17586/1023-5086-2024-91-05-43-53>

Коды OCIS: 350.5340, 250.5403, 240.6680

# Surface-enhanced optical absorption and induced heating in tapered silicon nanoprobe

ELINA A. IZBASAROVA<sup>1</sup>✉, ALMAZ R. GAZIZOV<sup>2</sup>, SERGEY S. KHARINTSEV<sup>3</sup>

<sup>1, 2, 3</sup>Kazan Federal University, Kazan, Russia

<sup>2, 3</sup>Institute of Applied Research of the Academy of Sciences of the Republic of Tatarstan, Kazan, Russia

<sup>1</sup>izbasarova.E.A@mail.ru <https://orcid.org/0000-0001-8300-4725>

<sup>2</sup>equus.meteores@gmail.com <http://orcid.org/0000-0002-9542-8856>

<sup>3</sup>skharint@gmail.com <http://orcid.org/0000-0002-5367-1356>

## Abstract

**Subject of study.** The relationship of the heating temperature with the mesoscopic shape of the silicon probe of an atomic force microscope under the influence of medium-intensity laser radiation ( $5 \text{ MW/cm}^2$ ) and the presence of a rough metal substrate. **Aim of study.** Quantitative evaluation of a dependence of both the optical field enhancement and induced heating of the tip of a tapered silicon nanoprobe under laser irradiation on the radius of curvature and cone angle of the probe tip, the distance between it and the substrate, and the surface roughness parameter of the gold substrate. **Method.** The localization of the electromagnetic field in the gap between the vicinity of a silicon nanoantenna and an inhomogeneity on the surface of a gold substrate is simulated using finite-difference time-domain method. As a plasmonic surface, a thin gold coating (thickness up to 50 nm) on the glass substrate is used. Such a coating, due to the excitation of the surface plasmon resonance, enhances the absorption of light and increases the heating temperature of the silicon optical antenna. **Main results.** The influence of the polarization angle of incident laser radiation on the distribution of the electric field near the tip of the probe is studied. It is found that only the component of the incident light field strength along the direction of the probe axis is enhanced near the tip of the silicon cantilever. The influence of various parameters, including the radius of curvature, the cone angle of the tip of the silicon nanoantenna, the distance between the probe and the substrate, as well as the presence of roughness on the surface of the gold substrate, on the maximum temperature in the region of the tip of the silicon probe is investigated. The probe temperature was found to be decreasing with decreasing cone angle of the probe. Also, the temperature of the tip of the cantilever decreased as the cone angle of the tip of the probe increased. The temperature dependence on the radius of curvature of the tip of a silicon nanoantenna in the presence of a gold substrate was found. With an increase in the size of the roughness of the gold film, the temperature of the tip of the silicon antenna increases, gradually approaching the limit value. **Practical significance.** The results of the study can be used for optimal selection of the parameters of an experiment using a heated probe. Controlled heating of a silicon probe can be used to study phase transitions in various types of nanomaterials, as well as for local thermochemical nanocatalysis in order to create new structural materials with specified properties.

**Keywords:** thermoplasmonics, optical heating, silicon cantilever, plasmon resonance

**Acknowledgment:** this work was supported by the Russian Science Foundation, project № 19–12–00066.

**For citation:** Izbasarova E.A., Gazizov A.R., Kharintsev S.S. Surface-enhanced optical absorption and induced heating in tapered silicon nanoprobe [in Russian] // Opticheskiy Zhurnal. 2024. V. 91. № 5. P. 43–53. <http://doi.org/10.17586/1023-5086-2024-91-05-43-53>

OCIS codes: 350.5340, 250.5403, 240.6680

## ВВЕДЕНИЕ

Термофотоника является быстро развивающейся областью фотоники, которая занимается изучением взаимных превращений тепла и излучения в наноразмерных структурах. Она имеет множество применений, включая фототермическую терапию рака [1], детектирование локальных фазовых переходов [2], термоассистируемую магнитную запись информации [3], а также используется в биомедицине [4] и аналоговых вычислениях [5]. Создание оптического нагрева в наноразмерных объектах и управление транспортом тепловой энергии между ними являются в совокупности одной из ключевых задач современной термонанопотоники. Для ее решения могут быть использованы структурирование поверхности [6], фоточувствительные гетероструктуры [7], металлические нанополоски [8] и другие типы наноструктур [9, 10]. В последние годы в научной литературе появилось значительное количество статей, посвященных исследованию нагрева кремниевых наноструктур до высоких температур [6, 11, 12]. Тем не менее особенно важно при этом уметь управлять количеством передаваемой энергии от нагревателя к интересующему нанообъекту при его исследовании. Такому требованию удовлетворяет зонд сканирующего микроскопа, который можно перемещать по поверхности образца с большой точностью позиционирования. Он является ключевым элементом в ряде приложений, включая нанолитографию [13] и определение локальной температуры [11]. Поглощение лазерного излучения наноразмерным острием зонда приводит к его нагреву. Определение максимальной температуры нагрева, а также ее зависимость от различных параметров и условий эксперимента являются актуальными задачами.

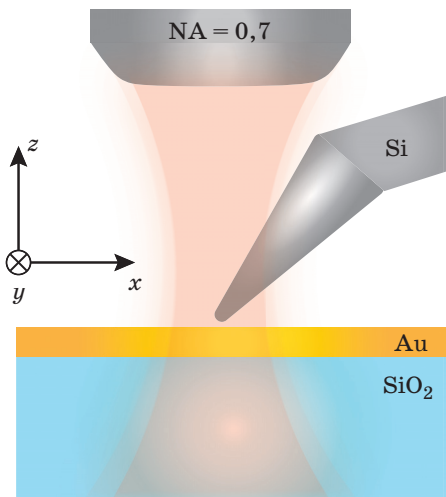
Целью настоящей работы является исследование зависимости усиления оптического поля и вызванного им нагрева острия конического кремниевого нанозонда при лазерном облучении от радиуса кривизны и угла конуса вершины зонда, расстояния между ним и подложкой, параметра шероховатости поверхности золотой подложки. В статье представлены результаты моделирования, позволяющие определить максимально достижимые температуры нагрева кремниевого зонда атомно-силового микроскопа. Важным

фактором оказывается форма кантилевера, которая существенно влияет на температуру нагрева. Также необходимо отметить значительное влияние на температуру нагрева наличия золотого покрытия на подложке. Моделирование выполнено в приближении линейной теплопроводности (коэффициент теплопроводности не зависит от изменения температуры), так как, главным образом, интересно влияние эффективности поглощения излучения вершиной кремниевого зонда на результирующие температуры. В экспериментах используется непрерывное лазерное излучение с абсолютным значением вектора Пойнтинга порядка  $1 \text{ мВт/см}^2$ , следовательно, нет необходимости в учете нелинейно-оптических эффектов.

Новизна проведенного исследования заключается в анализе взаимодействия кремниевого кантилевера с шероховатой золотой подложкой, влияние которой на процесс оптического нагрева не учитывалось. В недавнем нашем исследовании [14] было проведено моделирование, в котором использовалось только одно значение шероховатости, соответствующее условиям эксперимента. Однако зависимость поглощения энергии кремниевым кантилевером от среднего размера неровностей на поверхности золота не рассматривалась. Эта зависимость, найденная в настоящей работе, меняет представление о процессах нагрева кремниевого зонда в данной системе. Параметр шероховатости, выражаемый средним радиусом неровностей на поверхности золота, имеет существенное значение при рассмотрении данной проблемы, учитывая, что в эксперименте поверхность золота не является идеально гладкой.

## МОДЕЛИРОВАНИЕ ПОГЛОЩЕНИЯ ОПТИЧЕСКОГО ИЗЛУЧЕНИЯ И РАСПРОСТРАНЕНИЕ ТЕПЛА В СИСТЕМЕ ЗОНД–ПОДЛОЖКА

На рис. 1 изображена конфигурация кремниевого нанозонда и подложки с золотым покрытием, находящихся под воздействием лазерного излучения. Объектом моделирования является кремниевый зонд, форму которого можно приближенно представить как конус с вершиной конечного радиуса кривизны. Длина зонда составляет 1000 нм, угол при вершине



**Рис. 1.** Схематическое изображение моделируемой системы, состоящей из кремниевого конического зонда и подложки с золотым покрытием толщиной 50 нм, относительно выбранной системы координат, гауссов лазерный пучок сфокусирован на поверхности покрытия

**Fig. 1.** Schematic representation of simulated tapered silicon probe brought to a 50 nm thick gold coated substrate under illumination by Gaussian laser beam focused on the surface of the coating in respect to the reference system

в ходе моделирования изменяется от 5 до 45°, радиус вершины также меняется от 5 до 50 нм. Золотая пленка толщиной 50 нм размещается на поверхности стеклянной подложки.

Для получения теоретических оценок температуры зонда моделирование проведено в два этапа: определение мощности поглощаемого оптического излучения из распределения электромагнитного поля (1) и определение температуры фотоиндуцированного нагрева в объеме острия зонда (2) с использованием программного обеспечения ©Ansys Lumerical. Оптические и тепловые параметры и характеристики Si, SiO<sub>2</sub> и Au взяты из работы [15]. Для определения мощности поглощаемого оптического излучения уравнения Максвелла решены численно методом конечных разностей во временной области в прямоугольной вычислительной области объемом 1300×1300×1000 нм<sup>3</sup>, в которой содержатся зонд и участок подложки с тонким слоем золота. В области вершины зонда была использована расчетная сетка с размером ячейки 0,2 нм, для остальной части модели использовалась расчетная сетка с размером ячейки 7 нм. Внешний источник

формирует электромагнитную волну с гауссовым распределением, сфокусированную на поверхности золотого слоя (нормальное падение). Длина волны 632,8 нм, числовая апертура NA = 0,7 и мощность излучения в перетяжке гауссова пучка 16 мВт. Электромагнитная волна имеет *p*-поляризацию, ось зонда лежит в плоскости падения и наклонена под углом 30° к нормали.

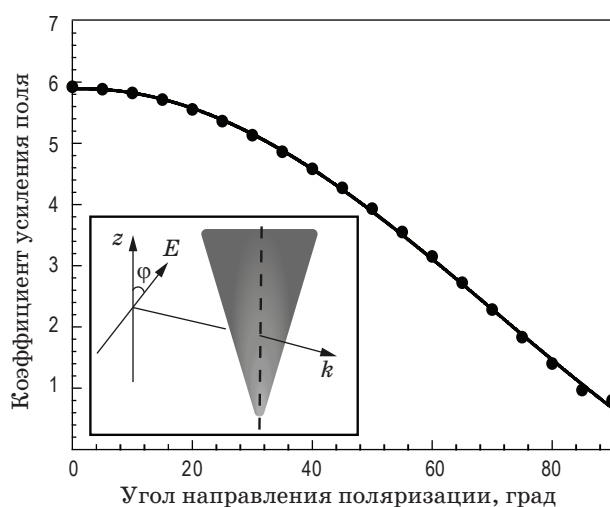
Во втором этапе, используя данные о мощности поглощенного оптического излучения, решено уравнение теплопроводности методом конечных элементов и найдено распределение температуры *T*. Область моделирования имела форму параллелепипеда и размер 16×16×50 мкм. Граничное условие  $T = 300$  К задано на нижней грани параллелепипеда при  $z_{\min} = -25000$  нм и на пересечении зонда с границей области моделирования при  $x_{\max} = 8000$  нм (см. рис. 1). На остальной поверхности параллелепипеда заданы изолирующие граничные условия.

Для того чтобы понять механизм повышения температуры кремниевого зонда, сначала было проведено численное моделирование усиления электромагнитного поля вблизи вершины с учетом поляризации лазерного излучения. Были проведены отдельные расчеты температуры фотонагрева кремниевого кантилевера при наличии и отсутствии золотого покрытия на стеклянной подложке с фиксированными параметрами зонда: радиус кривизны 30 нм, угол раствора конуса 25°. Поскольку поверхностный плазмонный резонанс зависит от нескольких геометрических факторов, тщательный подбор входных параметров играет решающую роль. Поэтому зависимость температуры в области вершины зонда при наличии золотого покрытия исследовалась при варьировании одного из этих параметров и при фиксированных значениях двух других.

Так как в эксперименте, как правило, поверхность золотой пленки не является идеально гладкой, также проведено моделирование с учетом шероховатости в виде полусфер на поверхности золотого слоя. При этом исследовалась зависимость температуры фотонагрева от радиуса золотых полусфер на поверхности подложки. Ширина зазора между вершиной зонда и ближайшей полусферой была постоянной и составляла 0,5 нм.

## ВЛИЯНИЕ ПОЛЯРИЗАЦИИ ЛАЗЕРНОГО ИЗЛУЧЕНИЯ НА УСИЛЕНИЕ ПОЛЯ ВБЛИЗИ КРЕМНИЕВОГО ЗОНДА

Усиление поля сильно зависит от поляризации падающего излучения. Новотный и соавторы показали, что составляющая электрического поля, направленная вдоль оси наконечника, приводит к усилению напряженности поля [16]. На рис. 2 приведена данная взаимосвязь между усилением напряженности поля вокруг вершины кремниевого зонда и направлением поляризации лазерного излучения (без учета наличия подложки). Угол при вершине кремниевого зонда составляет  $25^\circ$ , радиус кривизны вершины 10 нм. В качестве внешнего источника электромагнитного поля используется излучение с длиной волны 632,8 нм и гауссовым пространственным распределением ( $NA = 0,7$ ), сфокусированное в области острия наноантенны. Коэффициент усиления представляет собой отношение напряженности поля непосредственно под вершиной кантиле-



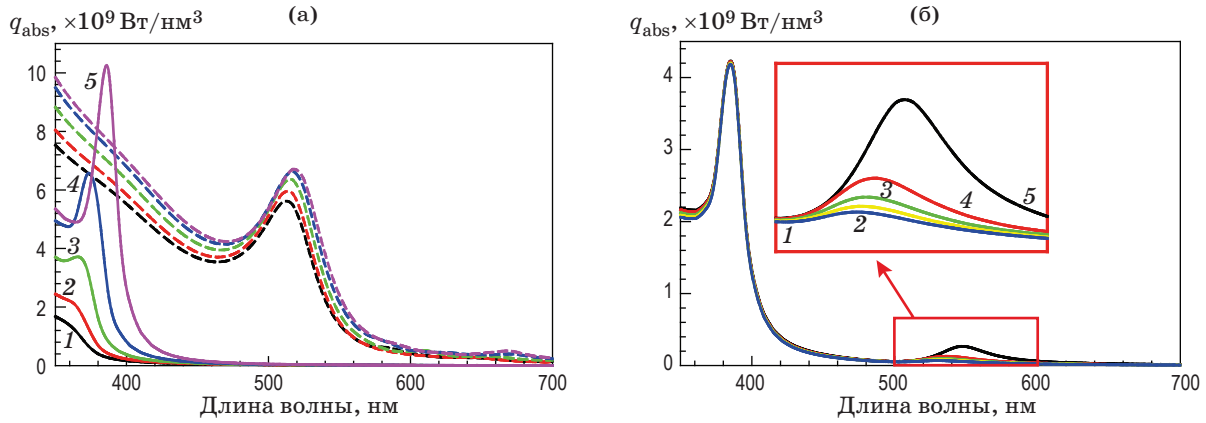
**Рис. 2.** Зависимость коэффициента усиления напряженности электрического поля (отношение напряженности под вершиной зонда к напряженности падающего электрического поля  $E/E_{in}$ ) от угла направления оси поляризации падающего излучения. На вставке показано — направление распространения волны и угол направления поляризации

**Fig. 2.** The dependence of the intensity enhancement factor (the ratio of the electric field under the tip of the probe to the incident electric field  $E/E_{in}$ ) on the angle of polarization direction of the incident radiation. The inset shows the direction of wave propagation and the angle of polarization

вера ( $E$ ) к напряженности поля в фокусе падающего лазерного излучения в отсутствие зонда ( $E_{in}$ ). Очевидно, что усиление поля уменьшается по мере увеличения угла направления оси поляризации  $\varphi$ . Когда  $\varphi$  больше  $85^\circ$ , усиления поля под вершиной зонда не существует (т.е. коэффициент усиления поля меньше единицы). Это согласуется с результатами, полученными в случае металлического зонда [16, 17]. В свою очередь было продемонстрировано, что для компоненты, параллельной оси плазмонного зонда, коэффициент усиления поля примерно в десять раз больше, чем для компоненты, перпендикулярной оси наконечника [18]. В случае кремниевого зонда было показано, что вблизи вершины может быть достигнуто усиление напряженности электрического поля до 15 раз относительно падающего поля [19]. Причина данного усиления связана с эффектом громоотвода. Данное явление возникает из-за огромной неоднородности электрического поля вблизи острия в случае как металлического, так и кремниевого зонда. Поэтому для дальнейшего моделирования температуры нагрева кремниевого зонда при различных условиях применяется поляризация лазерного излучения, ось которой параллельна оси зонда.

## МОДЕЛИРОВАНИЕ ПОГЛОЩЕНИЯ ОПТИЧЕСКОГО ИЗЛУЧЕНИЯ КРЕМНИЕВОЙ И ЗОЛОТОЙ НАНОЧАСТИЦАМИ

Начнем наше обсуждение с рассмотрения простой модели сферических частиц золота и кремния с радиусом  $r$ . Это допущение оправдано тем, что вершина кремниевого кантилевера обычно имеет определенный радиус кривизны и вершину зонда в первом приближении можно считать сферической. Кроме того, шероховатость золотой поверхности можно моделировать добавлением Au полусфер на поверхность образца. Спектральная зависимость объемной плотности мощности поглощаемого оптического излучения ( $q_{abs}$ ) каждой сферы была смоделирована отдельно, варьируя длину волны излучения и радиус сферы (рис. 3а). В случае золотой наночастицы наблюдается лишь незначительное изменение объемной плотности мощности поглощаемого оптического излучения при увеличении размера сферы. Напротив, для кремниевой частицы характерна значительная зависимость



**Рис. 3.** Зависимости средней объемной плотности мощности поглощаемого оптического излучения от длины волны. Средняя объемная плотность мощности оптического излучения, поглощенного в кремниевой наночастице (сплошные линии) и золотой наночастице (пштриховые линии) различного радиуса, цветом и цифрами (1–5) обозначены радиусы наночастиц соответственно от 10 до 30 нм с шагом 5 нм (а). Средняя объемная плотность мощности оптического излучения, поглощенного в кремниевой наночастице, при различной ширине зазоров между Si и Au сферами радиусом 30 нм, цветом и цифрами (1–5) обозначена ширина зазора от 0,5 до 4,5 нм с шагом 1 нм (б). На вставке подробно показана область плазмонного резонанса золотой частицы. Величина  $q_{\text{abs}}$  нормирована с учетом объема сферы. Мощность падающего излучения в перетяжке гауссова пучка во всех случаях составляет 16 мВт

**Fig. 3.** Dependences of the mean absorbed optical power density on the radiation wavelength. (a) Average power density absorbed in silicon nanoparticle (solid lines) and gold nanoparticle (dashed lines) of different radius, color and numbers (1–5) indicate the radii of nanoparticles, respectively, from 10 to 30 nm with a step of 5 nm. (b) Mean power density absorbed in silicon nanoparticle at different gap widths between Si and Au spheres of 30 nm radius, color and numbers (1–5) show the gap width from 0.5 to 4.5 nm with 1 nm step. The inset shows the plasmon resonance region of the gold particle in detail. The absorbed optical power density is normalized with respect to the volume of the sphere. Radiant flux of the Gauss beam in all cases is 16 mW

поглощения от размера сферы: с ростом радиуса наблюдается увеличение поглощения и сдвиг максимального поглощения в сторону больших длин волн.

Далее исследовалась спектральная зависимость объемной плотности мощности поглощаемого кремниевой сферой оптического излучения в присутствии золотой сферы на некотором расстоянии (радиус обеих сфер 30 нм). Обнаружено, что благодаря ближнепольному взаимодействию с золотой сферой у кремниевой сферы появляется пик поглощения в области плазмонного резонанса золота (рис. 3б). Более того, с уменьшением расстояния между сферами увеличивается амплитуда этого пика и происходит сдвиг пика в сторону больших длин волн.

### СТАЦИОНАРНАЯ МОДЕЛЬ

В установившемся режиме уравнение термодиффузии записывается в виде [20, 21]

$$\nabla \cdot [\kappa(\mathbf{r}) \nabla T(\mathbf{r})] = -q(\mathbf{r}), \quad (1)$$

где  $T(\mathbf{r})$  — распределение температуры, создаваемой внешним источником тепла с объемной плотностью мощности  $q(\mathbf{r})$  в неоднородной среде, характеризующейся зависящей от положения теплопроводностью  $\kappa(\mathbf{r})$ .

В данном случае тепловая мощность равна мощности поглощенного оптического излучения, которая пропорциональна квадрату напряженности электрического поля и мнимой части диэлектрической проницаемости  $\varepsilon$  [21, 22]. Для монохроматической волны с частотой  $\omega$  и напряженностью электрического поля, зависящей от времени  $t$  как  $\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = 2\text{Re}\{\mathbf{E}(\mathbf{r})\exp(-i\omega t)\}$ , объемная плотность мощности поглощенного оптического излучения составит

$$q(\mathbf{r}) = \frac{\omega \varepsilon_0}{2} \text{Im}[\varepsilon(\mathbf{r}, \omega)] |\mathbf{E}(\mathbf{r})|^2. \quad (2)$$

При решении уравнений Максвелла можно получить данную физическую величину  $q$ , которая, в свою очередь, подставляется в уравнение (1), чтобы определить  $T$ .

### ВРЕМЯ, НЕОБХОДИМОЕ ДЛЯ ДОСТИЖЕНИЯ УСТОЙЧИВОГО РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ТЕМПЕРАТУРЫ

Полезно оценить время, необходимое для достижения стационарного распределения температуры. Во время переходного состояния распределение температуры по всей частице и ее окружению определяется зависящим от времени уравнением теплопроводности

$$\rho c_p \frac{\partial T}{\partial t} + \nabla \cdot [\kappa \nabla T] = -q, \quad (3)$$

где  $\rho$  — массовая плотность (кг/м<sup>3</sup>), а  $c_p$  — теплоемкость (Дж/(кг К)).

Размерный анализ этого уравнения приводит к оценке типичного временного интервала, необходимого для достижения установившегося режима [21],

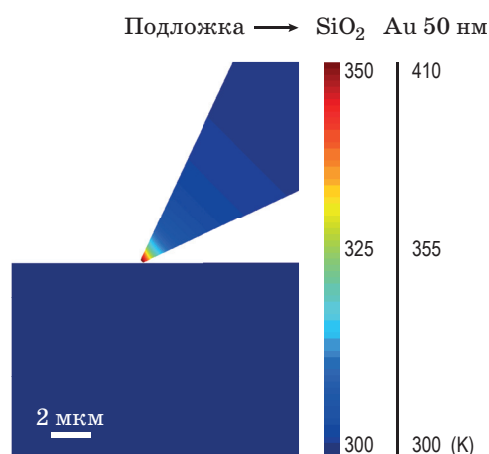
$$\tau \sim R^2 \frac{\rho c_p}{\kappa}, \quad (4)$$

где  $R$  — типичная длина системы, такая же, как радиус частицы в случае сферы.

Используя  $\rho = 2330$  кг/м<sup>3</sup> кремния,  $c_p = 711$  Дж/(кг К),  $\kappa = 148$  Вт/(м К) и  $R = 30$  нм, находим  $\tau \sim 10^{-11}$  с. Эта временная шкала много меньше временной модуляции внешнего облучения, поэтому при типичных условиях облучения непрерывной электромагнитной волной можно считать, что распределение температуры стационарное. Следует отметить, что квадратичная зависимость  $R^2$  делает этот временной масштаб сильно зависимым от размера системы.

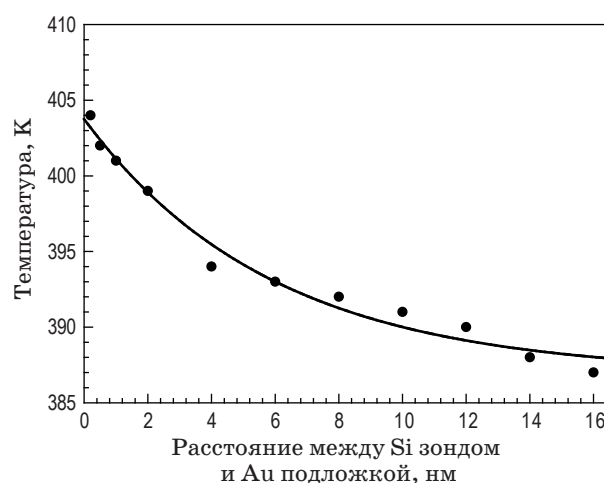
### ВЛИЯНИЕ ЗОЛОТОЙ ПОДЛОЖКИ НА НАГРЕВ

Зная распределение объемной плотности мощности поглощенного оптического излучения, можно численно решить уравнение тепловой диффузии и найти температуру нагрева. Предполагается, что теплопроводность всех используемых в моделировании материалов не зависит от температуры (их параметры взяты из работы [15]). На рис. 4 представлено стационарное распределение температуры в сечении кремниевого зонда и подложки в плоскости падения излучения. Нагрев наблюдается и при наличии, и при отсутствии золотой пленки, однако наличие пленки золота позволяет поднять температуру зонда еще на 60 К.



**Рис. 4.** Стационарное распределение температуры по сечению в плоскости  $XZ$  зонда при помещении его над поверхностью стекла или пленки золота толщиной 50 нм. Радиус кривизны зонда составляет 30 нм, угол раствора конуса —  $25^\circ$

**Fig. 4.** Stationary temperature distribution over the cross section in the  $XZ$  plane of the probe when brought to the surface of a glass or gold film with a thickness of 50 nm. The radius of curvature of the probe is 30 nm and the cone angle is  $25^\circ$



**Рис. 5.** Зависимость температуры вершины кантилевера от расстояния между зондом и подложкой. Радиус кривизны зонда составляет 30 нм, угол раствора конуса —  $25^\circ$

**Fig. 5.** Dependence of the temperature of the tip of the cantilever on the distance between the probe and the substrate. The radius of curvature of the probe is 30 nm, and the cone angle is  $25^\circ$

Еще одним важным фактором, влияющим на температуру нагрева острия зонда, является расстояние между вершиной кантилевера и подложкой. Ранее исследовалась зависимость

усиления напряженности электрического поля от расстояния между зондом и подложкой и было обнаружено его монотонное увеличение [22] или экспоненциальный рост [23] по мере приближения вольфрамового зонда к границе раздела. На рис. 5 приведен результат исследования влияния расстояния между вершиной зонда и подложкой на температуру нагрева кремниевого кантилевера. Видно, что с увеличением расстояния между зондом и подложкой температура падает экспоненциально.

### ВЛИЯНИЕ ГЕОМЕТРИИ ЗОНДА НА НАГРЕВ

Другим фактором, который может влиять на распределение температуры вершины зонда, кроме источника тепла, является его геометрическая форма. Зависимости максимальной температуры вершины от радиуса кривизны острия и угла раствора конуса приведены на рис. 6. При моделировании зависимости температуры от угла раствора конуса радиус кривизны вершины составлял 30 нм, зависимости температуры от радиуса кривизны вершины угол раствора конуса —  $25^\circ$ , расстояние между зондом и подложкой 2 нм.

С увеличением радиуса кривизны зонда поглощение кремния увеличивается, как было показано на рис. 3а, в то же время тепло легче распространяется в радиальном направлении [23]. Эти два фактора конкурируют между со-

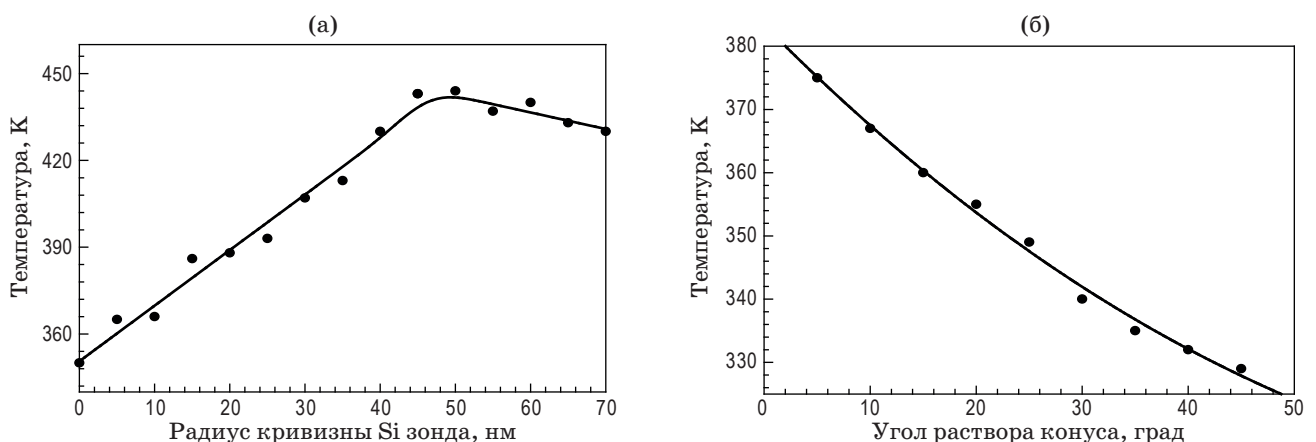
бой, в связи с чем сначала наблюдается повышение температуры с увеличением радиуса кривизны зонда, но после достижения критического значения радиуса, температура постепенно начинает снижаться.

На рис. 6б видно, как при радиусе кривизны острия 30 нм температура вершины кантилевера снижается по мере увеличения угла раствора конуса от  $5^\circ$  до  $45^\circ$ , что аналогично результатам, полученным для вольфрамовых зондов с наличием и отсутствием алюминиевого покрытия [23, 24].

### ВЛИЯНИЕ РАЗМЕРА НЕРОВНОСТЕЙ ЗОЛОТОЙ ПЛЕНКИ НА ФОТОНАГРЕВ

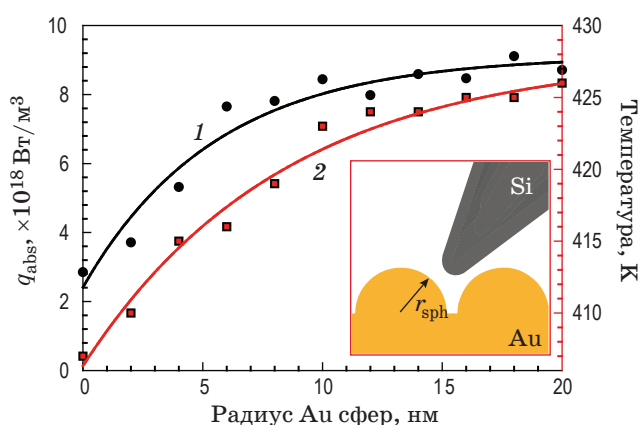
Учет наличия шероховатости золотой пленки может быть значимым, так как изменение высоты неровностей может влиять на усиление поля и теплообмен между вершиной зонда и золотым слоем. В процессе моделирования шероховатость поверхности была учтена введением Au полусфер на поверхности золотого слоя. Такой подход дает возможность более точного описания геометрии реальной поверхности.

В данном расчете параметры зонда составляли: радиус кривизны вершины конуса 10 нм, угол раствора конуса  $25^\circ$ . Радиус золотых полусфер ( $r_{\text{sph}}$ ) изменялся в диапазоне от 2 до 20 нм с шагом 2 нм. На рис. 7 демонстрируется результат моделирования объемной плотности мощности поглощаемого опти-



**Рис. 6.** Максимальные температуры вершины кремниевого зонда в зависимости от радиуса кривизны вершины (а) и угла раствора конуса (б) при расстоянии между зондом и подложкой 2 нм

**Fig. 6.** Maximum temperatures of the tip of the silicon probe depending on (a) the radius of curvature of the vertex and (b) the angle of the cone solution at a distance between the probe and the substrate of 2 nm



**Рис. 7.** Результаты моделирования объемной плотности мощности поглощаемого оптического излучения (1) и температуры (2) при различных размерах шероховатости поверхности  $r_{sph}$ . На вставке — модель шероховатости в виде полусфер на поверхности золотой подложки

**Fig. 7.** The plot of (1) simulated volumetric power density of absorbed optical radiation and (2) the simulated temperature at different values of the surface roughness parameter  $r_{sph}$ . The inset shows the model of roughness in the form of hemispheres on the surface of the Au substrate

ческого излучения от  $r_{sph}$  и от температуры: по форме кривые зависимостей практически не отличаются, так как характеристики зонда остаются неизменными, а скорость оттока тепла не будет меняться с увеличением размеров золотых сфер. Также можем заметить, что скорость изменения температуры с увеличением  $r_{sph}$  постепенно снижается и рассмотрение наличия шероховатости более 20 нм не является необходимым, так как дальнейшее увеличение радиуса золотых сфер не дает существенного вклада в увеличение температуры.

Результаты настоящей работы применимы при условии отсутствия квантово-размерных эффектов. В случае тех размеров золотых сфер, которые рассмотрены в рамках задачи, преобладает ближнепольное взаимодействие поверхностных зарядов, локализованных в полости между поверхностями кремния и золота. Как только размеры сфер уменьшатся до определенного значения, система переходит в квантовый режим, а туннелирование открывает канал проводимости между поверхностями, изменяя распределение заряда плазмонов [25].

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе численно исследовано поглощение оптического излучения и перенос тепла в системе кремниевого кантилевера атомно-силового микроскопа и золотой подложки при лазерном облучении. Продемонстрировано, что возникающий на острие эффект громоотвода приводит к усилению компоненты ближнего поля кремниевого зонда вдоль его оси. На результирующее распределение температуры кремниевого кантилевера влияют три фактора: источник тепла, обусловленный поглощением лазерного излучения, геометрическая форма зонда, а также средняя высота неровностей золотой подложки. При удалении острия кремниевого зонда от поверхности подложки происходит экспоненциальное падение пиковой температуры острия. Это свидетельствует о весомом вкладе поверхностных плазмонов, возбуждаемых на золотом покрытии, в интенсивность поля внутри объема зонда. При варьировании радиуса кривизны острия и угла раствора конической формы меняются и усиление ближнего поля, и отвод тепла от вершины зонда к основанию. При этом с увеличением радиуса кривизны острия кремниевого зонда пиковая температура в области вершины возрастает, однако при достижении определенного критического значения радиуса дальнейшее повышение температуры прекращается и она постепенно начинает снижаться. Это явление связано с увеличением теплопереноса в радиальном направлении.

Отдельно исследовано влияние шероховатости золотой поверхности на эффективность поглощения оптического излучения. Показано, что более шероховатые поверхности приводят к большему нагреву за счет возбуждения локализованных плазмонов на неоднородностях поверхности и переносу энергии на кремниевое острие посредством их ближнего поля. Оптимизируя геометрию кремниевого нанозонда и золотого покрытия, можно достичь наибольшего диапазона изменения температуры фотонагрева острия при повороте плоскости поляризации падающего лазерного излучения. Также эти результаты могут быть использованы для оптимизации теплоотвода, когда нагрев кремниевого зонда в ходе эксперимента не желателен.

## СПИСОК ИСТОЧНИКОВ

1. Бучарская А.Б., Маслякова Г.Н., Чехонацкая М.Л. и др. К вопросу об эффективности плазмонной фототермической терапии экспериментальных опухолей // *Опт. и спектроск.* 2020. Т. 128. № 6. С. 846–851. <https://doi.org/10.21883/OS.2020.06.49419.34-20>  
Bucharskaya A., Maslyakova G., Chekhonatskaya M., et al. Efficiency of plasmonic photothermal therapy of experimental tumors // *Opt. Spectrosc.* 2020. V. 128. P. 849–854. <https://doi.org/10.1134/S0030400X2006003X>
2. Chernykh E.A., Kharintsev S.S. Sensing phase transitions in solids using thermoplasmonics // *Bulletin of the RAS: Phys.* 2022. V. 86. № Suppl 1. P. S37–S40. <https://doi.org/10.3103/S1062873822700356>
3. Okamoto S., Kikuchi N., Furuta M., et al. Microwave assisted magnetic recording technologies and related physics // *J. Phys. D: Appl. Phys.* 2015. V. 48. Art. № 353001. <http://doi.org/10.1088/0022-3727/48/35/353001>
4. Martirosyan D., Osychenko A., Zalessky A., et al. The use of a fluorescent dye for controlling the laser absorption in the femtosecond laser nanosurgery of cells // *JETP Lett.* 2023. P. 1–6. <http://doi.org/10.1134/S0021364023600970>
5. Zhang X., Zhou Y., Zheng H., et al. Reconfigurable metasurface for image processing // *Nano Lett.* 2021. V. 21. № 20. P. 8715–8722. <https://doi.org/10.1021/acs.nanolett.1c02838>
6. Aouassa M., Mitsai E., Syubaev S., et al. Temperature-feedback direct laser reshaping of silicon nanostructures // *Appl. Phys. Lett.* 2017. V. 111. № 24. Art. № 243103. <http://doi.org/10.1063/1.5007277>
7. Харитонов А.В., Харинцев С.С. Оптическая запись двумерных температурных профилей в массивах TiON наноструктур // *10 Междунар. сем. по волоконным лазерам.* 2022. С. 233–234. <http://doi.org/10.31868/RFL.2022.233-234>  
Kharitonov A.V., Kharintsev S.S. Optical printing of two-dimensional temperature profiles in arrays of TiON nanostructures // *Russ. Fiber Lasers.* 2022. V. 2. № 1. P. 98. <http://doi.org/10.31868/2782-2354-RFL2022-2-1-98-99>
8. Novotny L. Effective wavelength scaling for optical antennas // *Phys. Rev. Lett.* 2007. V. 98. № 26. Art. № 266802. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.98.266802>
9. Кучеренко М.Г., Налбандян В.М., Мушин Ф.Ю. и др. Влияние плазмонных оболочечных наночастиц на безызлучательный перенос энергии электронного возбуждения в донорно-акцепторной паре // *Оптический журнал.* 2022. Т. 89. № 11. С. 3–16. <http://doi.org/10.17586/1023-5086-2022-89-11-03-16>  
Kucherenko M.G., Nalbandyan V.M., Mushin F.Yu., et al. Effect of plasmonic-shell nanoparticles on the nonradiative transfer of electron excitation energy in donor/acceptor pairs // *J. Opt. Technol.* 2022. V. 89. № 11. P. 642–650. <https://doi.org/10.1364/JOT.89.000642>
10. Замковец А.Д. Широкополосные плазмонные поглощающие наноконкомпозиты // *Оптический журнал.* 2014. Т. 81. № 6. С. 78–83.  
Zamkovets A.D. Broad-band plasmonic absorbing nanocomposites // *J. Opt. Technol.* 2014. V. 81. № 6. P. 361–364. <https://doi.org/10.1364/JOT.81.000361>
11. Chen X., Wang X. Microscale spatially resolved thermal response of Si nanotip to laser irradiation // *J. Phys. Chem. C.* 2011. V. 115. № 45. P. 22207–22216. <https://doi.org/10.1021/jp2070979>
12. Malkovskiy A.V., Malkovsky V.I., Kisiuk A.M., et al. Tip-induced heating in apertureless near-field optics // *J. Raman. Spectrosc.* 2009. V. 40. № 10. P. 1349–1354. <http://doi.org/10.1002/jrs.2388>
13. Jersch J., Dickmann K. Nanostructure fabrication using laser field enhancement in the near field of a scanning tunneling microscope tip // *Appl. Phys. Lett.* 1996. V. 68. № 6. P. 868. <https://doi.org/10.1063/1.116527>
14. Избасарова Э.А., Газизов А.Р., Харинцев С.С. Управление оптическим нагревом кремниевого зонда с помощью ближнеполевого транспорта энергии локализованными поверхностными плазмонами // *Известия РАН. Сер. физическая.* 2023. Т. 87. № 12. С. 1788–1795. <https://doi.org/10.31857/S0367676523703088>  
Izbasarova E.A., Gazizov A.R., Kharintsev S.S. Controlling the optical heating of a silicon probe using near-field energy transport carried by localized surface plasmons // *Bulletin of the RAS: Phys.* 2023. V. 87. № 12. P. 1862–1868. <https://doi.org/10.1134/S106287382370418X>
15. Palik E.D. Handbook of optical constants of solids. V. 3. N.Y.: Academic Press, 1998. 999 p.
16. Novotny L., Bian R.X., Xie X.S. Theory of nanometric optical tweezers // *Phys. Rev. Lett.* 1997. V. 79. № 4. P. 645. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.79.645>
17. Royer P., Barchiesi D., Lerondel G., et al. Near-field optical patterning and structuring based on local-field enhancement at the extremity of a metal tip // *Philos. Trans. Royal Soc. A.* 2004. V. 362. № 1817. P. 821–842. <https://doi.org/10.1098/rsta.2003.1349>
18. Govorov A.O., Richardson H.H. Generating heat with metal nanoparticles // *Nano Today.* 2007. V. 2. № 1. P. 30–38. [http://doi.org/10.1016/S1748-0132\(07\)70017-8](http://doi.org/10.1016/S1748-0132(07)70017-8)
19. Bohn J.L., Nesbitt D.J., Gallagher A. Field enhancement in apertureless near-field scanning optical microscopy // *JOSA A.* 2011. V. 18. № 12. P. 2998–3006. <https://doi.org/10.1364/JOSAA.18.002998>
20. Baffou G., Quidant R., Garcia de Abajo F.J. Nanoscale control of optical heating in complex plasmonic systems // *ACS Nano.* 2010. V. 4. № 2. P. 709–716. <https://doi.org/10.1021/nn901144d>
21. Baffou G., Quidant R. Thermo-plasmonics: Using metallic nanostructures as nano-sources of heat // *Laser Photonics Rev.* 2013. V. 7. № 2. P. 171–187. <https://doi.org/10.1002/lpor.201200003>
22. Demming F., Jersch J., Dickmann K., et al. Calculation of the field enhancement on laser-illuminated scanning probe tips by the boundary element method // *Appl. Physics-Section B-Lasers and Optics.* 1998. V. 66. № 5. P. 593–598. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.53.3654>
23. Chen X., Wang X. Near-field thermal transport in a nanotip under laser irradiation // *Nanotechnol.* 2011. V. 22. № 7. Art. № 075204. <https://doi.org/10.1088/0957-4484/22/7/075204>
24. Kurpas V., Libenson M., Martsinovskiy G. Laser heating of near-field tips // *Ultramicroscopy.* 1995. V. 61. № 1–4. P. 187–190. <https://doi.org/10.1117/12.205920>
25. Savage K.J., Hawkeye M.M., Esteban R., et al. Revealing the quantum regime in tunnelling plasmonics // *Nature.* 2012. V. 491. № 7425. P. 574–577. <https://doi.org/10.1038/nature11653>

**АВТОРЫ**

**Элина Александровна Избасарова** — студент, Казанский федеральный университет, Казань, 420008, Россия; <https://orcid.org/0000-0001-8300-4725>; [Izbasarova.E.A@mail.ru](mailto:Izbasarova.E.A@mail.ru)

**Алмаз Рашитович Газизов** — кандидат физико-математических наук, ассистент, Казанский федеральный университет, Казань, 420008, Россия; Институт прикладных исследований Академии наук Республики Татарстан, Казань, Россия; Scopus ID: 55990807400; <http://orcid.org/0000-0002-9542-8856>; [equus.meteores@gmail.com](mailto:equus.meteores@gmail.com)

**Сергей Сергеевич Харинцев** — доктор физико-математических наук, профессор, Казанский федеральный университет, Казань, 420008, Россия; Институт прикладных исследований Академии наук Республики Татарстан, Казань, Россия; Scopus ID: 6603562847; <http://orcid.org/0000-0002-5367-1356>; [skharint@gmail.com](mailto:skharint@gmail.com)

*Статья поступила в редакцию 12.11.2023*

*Одобрена после рецензирования 08.02.2024*

*Принята к печати 27.03.2024*

**AUTHORS**

**Elina A. Izbasarova** — Student, Kazan Federal University, Kazan, 420008, Russia; <https://orcid.org/0000-0001-8300-4725>; [Izbasarova.E.A@mail.ru](mailto:Izbasarova.E.A@mail.ru)

**Almaz R. Gazizov** — PhD (Physics and Mathematics), Assistant, Kazan Federal University, Kazan, 420008, Russia; Institute of Applied Research of the Academy of Sciences of the Republic of Tatarstan, Kazan, Russia; Scopus ID: 55990807400; <http://orcid.org/0000-0002-9542-8856>; [equus.meteores@gmail.com](mailto:equus.meteores@gmail.com)

**Sergey S. Kharintsev** — Dr. Sci. (Physics and Mathematics), Professor of the Kazan Federal University, Kazan, 420008, Russia; Institute of Applied Research of the Academy of Sciences of the Republic of Tatarstan, Kazan, Russia; Scopus ID: 6603562847; <http://orcid.org/0000-0002-5367-1356>; [skharint@gmail.com](mailto:skharint@gmail.com)

*The article was submitted to the editorial office 12.11.2023*

*Approved after review 08.02.2024*

*Accepted for publication 27.03.2024*