

激光驻波场中钠原子沉积图样的理论研究^{*}

马 彬 马 艳 赵 敏 马姗姗 王占山[†]

(同济大学精密光学工程技术研究所, 上海 200092)

(2005 年 5 月 17 日收到, 2005 年 6 月 17 日收到修改稿)

原子在近共振激光驻波场中受光的作用力汇聚沉积, 形成以激光半波长为周期的光栅结构. 利用半经典模型对钠原子束在不饱和驻波场中的运动行为进行了理论研究, 用数值方法模拟出在考虑横向温度、纵向速度和自由飞程后钠原子沉积的光栅结构, 通过半高宽、对比度对最终沉积图样进行表征, 分析了这些因素对沉积的影响, 为正在开展的原子光刻实验提供了必要的理论依据.

关键词: 原子沉积, 半经典模型, 激光驻波场

PACC: 3280P, 3380P, 4250V

1. 引 言

对于激光驻波场中原子运动的研究由来已久, 早在 1968 年, Letokhov 就提出激光驻波场在波节(或波腹)处俘获原子的可能性^[1]. 之后, Kazantsev 预言在高强度激光驻波场中自发辐射力的存在^[2]. 从此, 利用激光驻波场冷却和俘获原子, 从而进行原子光刻的研究逐渐成为物理学中的热门课题^[3].

原子光刻是一种新颖的纳米级刻印方法, 它采用中性原子进行原子沉积, 不需要掩模板, 可以进行大面积刻印^[4], 而且原子具有的较低的能量能减小沉积过程对基片的损坏^[5]. 基于这些优越性, 原子光刻的应用前景广阔. 作为原子光刻技术的应用之一, 采用激光驻波场汇聚原子束, 能在基片上沉积出以激光波长的一半为周期的光栅结构^[6], 该光栅结构周期性好, 空间上相干一致.

描述原子沉积的计算模型包括量子模型, 经典模型^[7], 还有本文介绍的半经典模型. 半经典方法是忽略了原子的波动性, 假定原子在激光驻波场中的运动服从经典粒子运动规律. 这种把原子运动模型简单化的方法能和实验结果很好的吻合^[8,9], 因此在对原子沉积的研究中半经典模型被广泛采用.

本工作采用半经典模型方法, 模拟研究了波长为 589nm 的不饱和驻波场对钠原子的汇聚作用. 结

果表明, 当驻波光场频率接近于钠原子 $3^2S_{1/2} \rightarrow 3^2P_{3/2}$ 共振线时, 在光场空间中将产生以光波半波长为周期的势场, 该势场作用于钠原子, 使其以频率 Ω_{osc} 和周期 T 振动^[10]. 当作用时间达到 $t = T/4 = \pi/(2\Omega_{\text{osc}})$ 时^[11], 钠原子束被汇聚到势场的波节(波腹)处, 形成光栅结构. 本文不仅给出了在原子受力近似条件下, 理想沉积的解析表达, 还利用四阶龙格-库塔法数值模拟了不同实验条件下, 钠原子的沉积图样, 并对横向温度 T_c 、纵向速度 v_z 、作用距离 L_d 以及自由飞程 L_{ff} 对光栅线宽和对比度的影响进行了分析.

2. 不饱和驻波场中的原子汇聚

图 1 为原子光刻实验原理示意图^[8]. 钠原子束沿纵向 z 运动到激光驻波场 L_d 中, 在横向 x 方向上被汇聚, 最终经过自由飞程 L_{ff} 沉积在基片上.

将钠原子简化成二能级系统, 分析其在不饱和驻波场中的受力情况. 二能级原子在不饱和驻波场中运动, 受到的半经典力为^[12]

$$f = -\frac{\hbar\Delta k\Omega_{\text{max}}^2}{\Delta^2 + \Gamma^2/4} \times \sin(2kx) \times \left[1 + (\nu_x k) \frac{\Gamma}{\Delta^2 + \Gamma^2/4} \times \tan(kx)\right], \quad (1)$$

其中失谐量 $\Delta = \omega_L - \omega_0$, ω_L 为驻波场频率, ω_0 为原

^{*} 上海市科技发展项目(批准号 0259nm034)资助的课题.

[†] 通讯联系人. E-mail: skyowner1@163.com

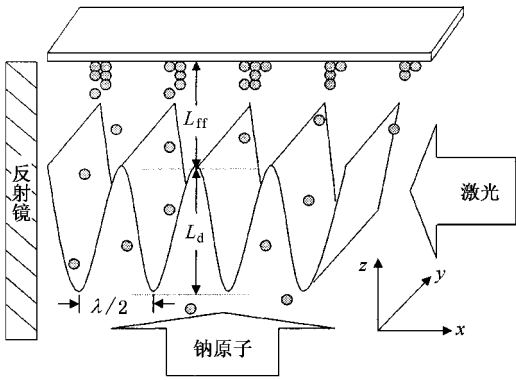


图 1 原子光刻实验原理示意图

子共振频率 $\Omega = \mu E/\hbar$ 是光场与原子耦合的拉比频率 Ω_{\max} 是驻波场波腹处的拉比频率, μ 为原子的偶极矩, E 为电场振幅, Γ 为原子共振的自然线宽, v_x 是原子在驻波场中运动的横向速度.

上式可分为两项, 一项是与速度无关的 F_0 称为偶极力, 来自原子的极化, 在不均匀的驻波场中, 其方向沿着光场梯度; 另一项是与速度有关的 F_v , 称为自发辐射力, 描述了自发辐射对于原子减速或是加速的作用. 在大失谐驻波场中, 即 Δ 具有较大值, 沿着原子的运动轨迹积分得到 $\int_{\text{path}} F_v dx \ll U(x_0)$, 可以认为 F_v 对原子最终沉积位置的影响非常小, 甚至忽略^[11], 所以起主要贡献的是 F_0 . 产生 F_0 的势场为

$$U(x) = -\hbar\Delta \frac{\Omega_{\max}^2}{\Delta^2 + \Gamma^2/4} \cos(kx).$$

该势场满足 $F_0 = -\nabla U$. 由于 Ω 中的 $E \sim \sin(kx)$ 因此变化的拉比频率引起驻波势场以 $\lambda/2$ 为周期变化. 当 $\Delta > 0$ 时, 势场的最小值出现在 $x = 2n\lambda/4$; 当 $\Delta < 0$ 时, 势场的最小值出现在 $x = (2n + 1)\lambda/4$.

3. 结果与讨论

3.1. 偶极力作用下原子的理想沉积

驻波场对钠原子的作用力将决定最终的沉积情况. 忽略自发辐射力 F_v 对原子运动的影响, 只考虑原子受偶极力作用, 则

$$f = -\frac{\hbar\Delta k\Omega_{\max}^2}{\Delta^2 + \Gamma^2/4} \times \sin(2kx). \quad (2)$$

对于这个具有简谐形式的表达式, 通过近似的方法可以得到原子运动的解析解. 首先将非线性项 $\sin(2kx)$ 做幂级数展开, 再根据 $m\ddot{x} = f$ 得到

$$\ddot{x} + \frac{2\hbar\Delta k^2\Omega_{\max}^2}{(\Delta^2 + \Gamma^2/4)m}x - \frac{4}{3}k^2 \frac{\hbar\Delta k^2\Omega_{\max}^2}{(\Delta^2 + \Gamma^2/4)m}x^3 = 0. \quad (3)$$

对于这个典型的 Duffing 方程^[13] 取二级近似后得到

$$x = x_0 \cos\left[\sqrt{\frac{2\hbar\Delta k^2\Omega_{\max}^2}{(\Delta^2 + \Gamma^2/4)m}} \times \left(1 - \frac{1}{4}k^2x_0^2 - \frac{7}{192}k^4x_0^4\right)t\right], \quad (4)$$

其中 $t = L_d/v_z$ 是原子在驻波场中的作用时间; x_0 为原子进入势场时的初始位置.

不考虑横向速度即 $v_x = 0$, 假设纵向速度 v_z 具有单色性, 且认为所有钠原子在驻波场中运动的时间均为 $t = T/4$, 当 $\Delta = 100\text{MHz}$, $\Omega_{\max} = 100\text{MHz}$ 时, 得到初始位置和末位置的关系, 如图 2.

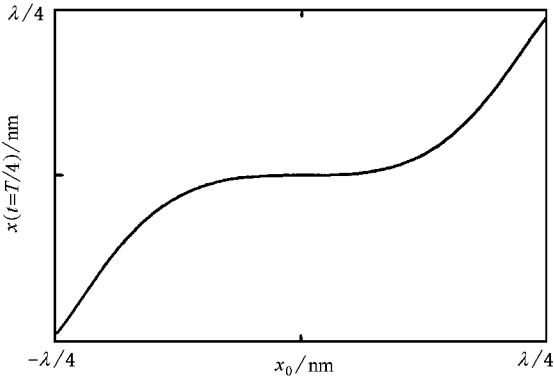


图 2 原子初始位置 x_0 和末位置 x_t 关系图

由图可见, 在势场最小值附近的原子做简谐振动, 周期约为 $T/4$. 经过 $t = T/4$ 后, 原子均运动到势场的最小值 $x_0 = 0$ 处. 由 (4) 式计算可知, 初始位置在远轴区的原子具有较大的运动周期, 在较短的时间内并没有汇聚到 $x_0 = 0$ 成为最终沉积光栅的本底.

为了更好的描述钠原子在光驻波场中的运动情况, 我们对原子的运动轨迹进行了追踪, 如图 3 所示. 钠原子进入光场, 受光场力作用, 大多数具有相同的运动周期, 在同一时间汇聚. 对于初始位置一定的原子, 其运动受失谐量的影响, 当失谐量为正时 (图 3(a)), 作用力把原子汇聚到强度较低的区域, 因此能减小速度修正项对势场的影响, 失谐量为负时 (图 3(b)) 则相反, 势场的失谐量越大, 俘获大范

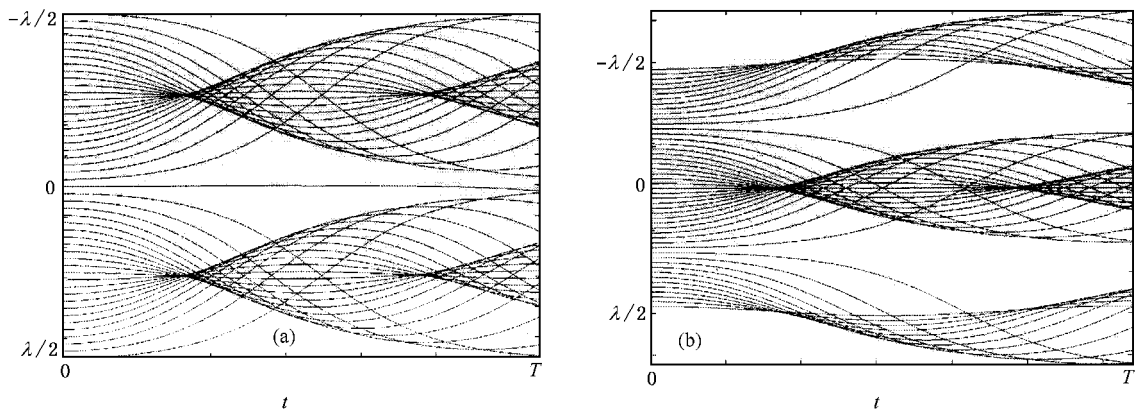


图 3 原子在势场中运动时间和位置关系图 (a) $\Delta = 100\text{MHz}$, $\Omega_{\text{max}} = 100\text{MHz}$, (b) $\Delta = -100\text{MHz}$, $\Omega_{\text{max}} = 100\text{MHz}$

围横向速度原子的能力越强 ,而且其形状越接近理想的抛物线型 ,所以通常采用正失谐且失谐量大的势场^[14] .

图 4 是基于上面的结果从理论上描绘出钠原子最终的沉积图样 . 其中 $\rho(x,t) \sim 1/\cos(\Omega_{\text{osc}}t)$ ^[11] , Ω_{osc} 是半经典方法中原子在驻波势场里振荡的周期 . 由图可知 ,原子在力的作用下经过 $T/4$,大多数都汇聚到势场最小值处 ,形成 δ 函数分布 ,峰值间距为 $\lambda/2$.

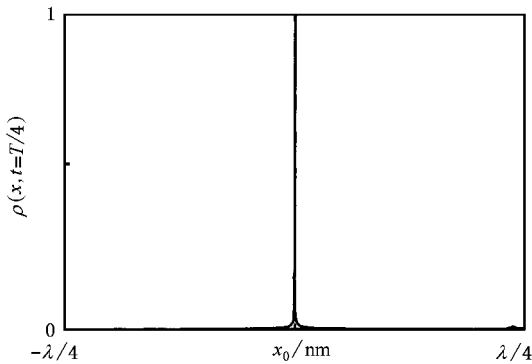


图 4 原子位置 x 和密度 ρ 关系图

但上面的解析表达式 ,只适合最理想的情况 . 如果考虑横向、纵向速度等因素时 ,鉴于运动方程的非线性项 ,就很难得到解析解的形式 ,所以通常采用数值模拟的方法来求解方程^[15] . 根据原子在势场中所受光力公式 (1) ,得到原子运动方程的准确表达式

$$\ddot{x} + \frac{\hbar \Delta k \Omega_{\text{max}}^2}{(\Delta^2 + \Gamma^2/4)m} \times \sin(2kx) \times \left[1 + \left(\frac{v_x k}{\Delta^2 + \Gamma^2/4} \times \tan(kx) \right) \right] = 0. \quad (5)$$

用四阶 Runge-Kutta 算法求得每一个原子在势

场中运动 t 时间后的所处的末位置 $x(t)$,由此得到原子的运动轨迹 ,以及最终的沉积位置 . 按照这样的方法 ,本文在考虑各种因素的理论计算中 ,分别数值模拟了 420000 个原子的运动情况 ,并得到了相应的沉积图样 .

3.2. 横向速度对原子汇聚的影响

从原子炉出射的钠原子束在传播方向不可避免的会有发散角 ,即横向速度 ,满足 Boltzman 分布

$$\mathcal{J}(v_x) = \left(\frac{m}{2\pi k_B T} \right)^{1/2} e^{-mv_x^2/2k_B T}.$$

原子束在进入驻波场前 ,首先经过机械准直 ,然后再进行横向的 Doppler 冷却 . 横向温度此时一般能够达到 $250\mu\text{K}$,为了能获得更低的温度 ,原子束还将进行偏振梯度冷却 ,其冷却极限为 $2\mu\text{K}$ ^[16] ,一般实验室能够达到 $35\mu\text{K}$. 下面我们将讨论原子所具有的横向温度对最后沉积的影响 .

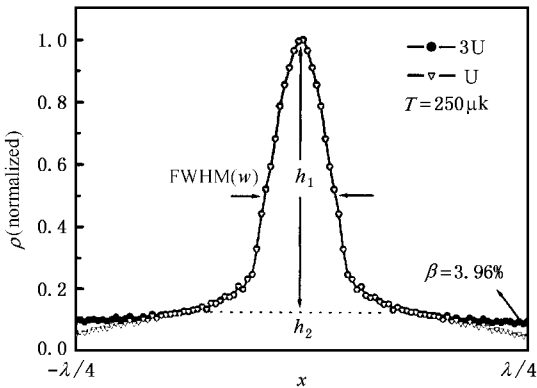


图 5 原子沉积图样($T_c = 250\mu\text{K}$)

经过 $T/4$,只考虑横向温度 $T_c = 250\mu\text{K}$. 当 $\Delta = \Omega_{\text{max}} = 100\text{MHz}$ 时 ,原子束在驻波场中的沉积图样如

图 5. 通过数值模拟计算可以发现,原子所具有的横向速度,增大了沉积光栅的线宽. 这是因为初速度 v_x 使原子在横向的振动周期 T 发生了改变,相对于理想汇聚,很多原子沉积在势场最小处周围,因此造成具有一定宽度的光栅结构. 另外,对于横向动能比较大的原子,如果在初始条件下,有 $mv_x(0)^2/2 + U[x(t=0)] > U_{\text{depth}}$, 则原子将逸出所处势场的作用,最终成为密度分布的本底^[11]. 图中描述的是两种势场下的汇聚作用,其中中空三角曲线表示的是只考虑单个势场,实心圆点曲线表示的是考虑多个势场. 通过比较,有 3.96% 初始能量大的原子飞出了初始位置所处的势场,沉积成为另一个势场作用下光栅的本底.

为了能更好的表征沉积效果,我们定义几个描述光栅的参数,其中对比度 $\Gamma = h_1/h_2$, h_1 是光栅的高度, h_2 是本底的高度;分辨率 w 是光栅的半高宽 (FWHM)^[17]. 对于沉积图样,对比度越大、半高宽越小则沉积效果越好. 图中沉积光栅的对比度 $\Gamma = 9:1$,分辨率 w 为 44nm.

图 6 为在不同横向温度下驻波场对钠原子束的汇聚图样,其中对密度 ρ 进行了归一化. 很明显,横向温度越高对于最终沉积的光栅线宽影响越大,横向温度越小越接近理想情况. 不同横向温度的选取,由实验室可获得的条件决定.

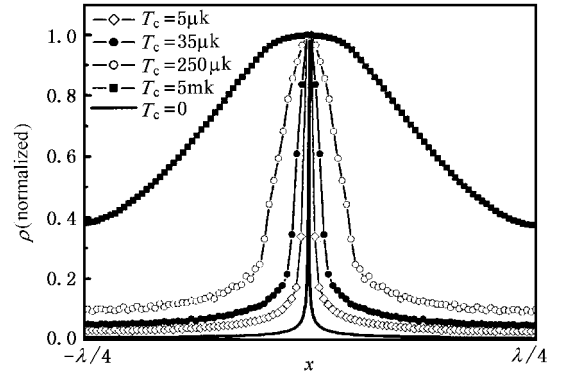


图 6 不同横向温度原子的沉积图样

表 1 不同横向温度下原子沉积图样的相关参数			
$T_c/\mu\text{K}$	对比度 Γ	分辨率 w/nm	飞出比率 $\beta/\%$
0	125:1	< 1	0
5	27:1	8	0.59
35	15:1	18	1.88
250	9:1	44	3.96
5000	2:1	205	20.7

表 1 给出了描述不同沉积光栅的相应参数. 当温度在 mK 量级时,半高宽已经大大超过沉积光栅周期 (294.5nm) 的一半,对比度只有 2:1,在此条件下的汇聚沉积失去了实际的意义. 因此在实验中应该尽可能的降低横向温度,采用激光冷却的方法减小 v_x 的作用.

3.3. v_z 与 L_d 对原子汇聚的影响

实验中,原子在驻波场中的作用时间 t 将由纵向速度 v_z 与作用距离 L_d 决定. 对于热原子束,纵向速度分布满足 Boltzman 分布

$$f(v_z) = 4\pi \left(\frac{m}{2\pi k_B T} \right)^{3/2} v_z^3 e^{-mv_z^2/2k_B T}.$$

在 L_d 一定的情况下,热原子束的纵向速度分布对应着不同的作用时间 t ,因此所有原子并不能同时满足 $T/4$ 的条件. 同样 v_z 一定, L_d 的不同也会造成 t 的分布. 凡是能满足 $(2n+1)T/4$ 作用时间的原子,都能在理论处沉积. 下面我们将分别讨论纵向速度 v_z 与作用距离 L_d 对原子最终沉积的影响.

图 7 描述了横向速度和纵向速度对钠原子汇聚的影响. 其中考虑纵向速度 v_z 后,光栅线宽变大,尤其是底部,沉积图样半高宽为 13nm. 通过比较可以发现, v_x 对沉积的影响要比 v_z 更大一些. 综合横向速度和纵向速度的影响,得到半高宽为 54nm 的光栅 (其中 $T_c = 210\mu\text{K}$, $\Delta = \Omega_{\text{max}} = 100\text{MHz}$, 最大概然速率 $v_{zp} = 840\text{m/s}$, $L_d = 67\mu\text{m}$).

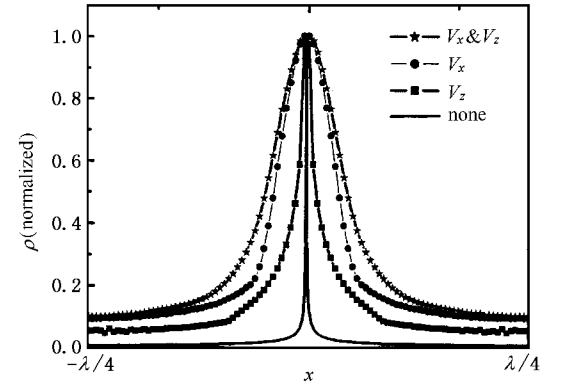


图 7 速度因素对原子沉积图样的影响

表 2 考虑速度因素原子沉积图样的相关参数		
因素	对比度 Γ	分辨率 w/nm
none	125:1	< 1
v_z	16:1	13
v_x	10:1	43
$v_x + v_z$	8:1	54

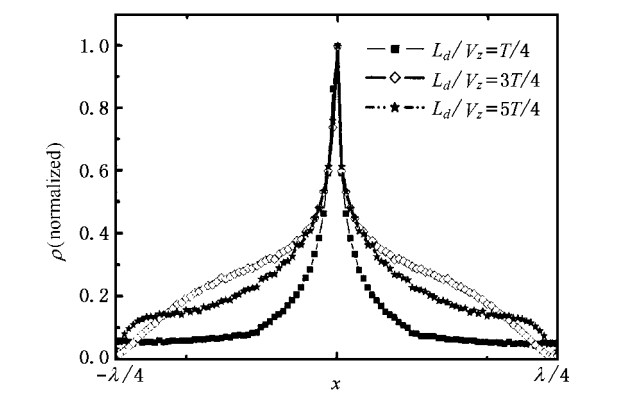


图 8 L_d 一定时, 纵向速度对原子沉积图样的影响

图 8 为作用距离一定时, 作用时间满足 $t = L_d/v_z = T/4, 3T/4$ 和 $5T/4$ 时钠原子沉积的图样 ($T_c = 0, \Delta = \Omega_{\max} = 100\text{MHz}$, 最大概然速率 $v_{\text{qp}} = 840\text{m/s}$). 对比度和分辨率分别为 16:1 和 13nm, 7:1 和 19nm 和 6:1 和 19nm. 由此可见, 原子在势场中运动 $T/4$ 时能较好的汇聚到理论处, 而运动时间越长造成的沉积本底越大.

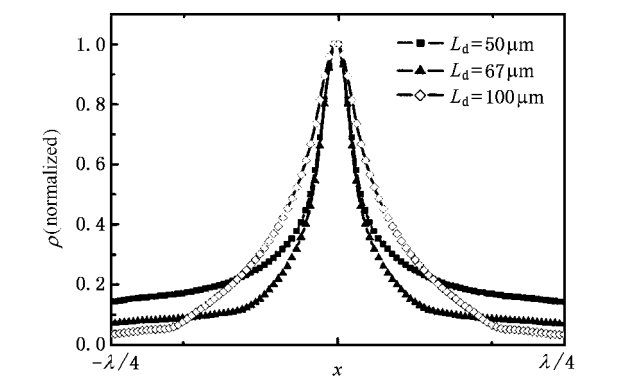


图 9 作用距离 L_d 对原子沉积图样的影响

如图 9 所示, L_d 的改变对原子的汇聚效果有明显影响. (其中 $T_c = 35\mu\text{K}$, $\Delta = \Omega_{\max} = 100\text{MHz}$, 最大概然速率 $v_{\text{qp}} = 840\text{m/s}$).

表 3 不同作用距离 L_d 下原子沉积图样的相关参数		
$L_d/\mu\text{m}$	对比度 Γ	分辨率 w/nm
50	5:1	35
67	9:1	29
100	16:1	53

$L_d = 67\mu\text{m}$ 时, 速率 $v_z = 840\text{m/s}$ 的原子正好满足在作用时间 $t = T/4$ 时沉积在势场最小处; $L_d = 50\mu\text{m}$ 时, 因 $t = L_d/v_z$, 此时大多数原子都未能满足

$T/4$ 作用时间, 所以很多在较大范围上沉积在基底, 成为本底; $L_d = 100\mu\text{m}$ 时, 大多数原子的作用时间均超过 $T/4$, 汇聚到势场最小处附近, 而两端却只有较少的原子沉积成本底, 因此形成半高宽很大, 本底较小的光栅结构.

3.4. 自由程 L_{ff} 对原子汇聚的影响

光驻波场与基片之间的距离 L_{ff} 称为自由程, 因为在这个区域内原子不受任何力而自由运动. 经过激光驻波场后的钠原子由于横向速度的存在, 将在这个区域内偏离本已汇聚到的位置继续运动, 最终以一定的偏差沉积到基片上. 因此, 自由程的存在将导致沉积光栅线宽的大大增加.

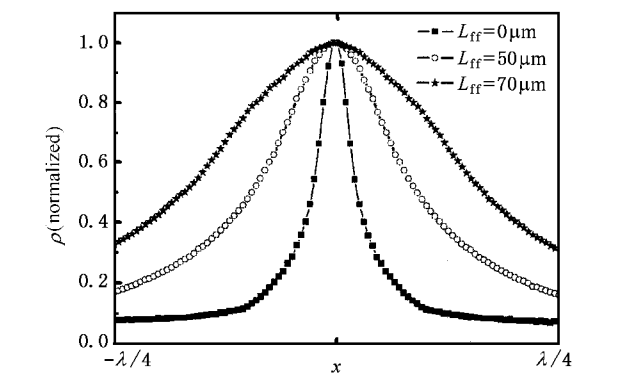


图 10 自由程 L_{ff} 对原子沉积图样的影响

图 10 中 $T_c = 35\mu\text{K}$, $\Delta = \Omega_{\max} = 100\text{MHz}$, 最大概然速率 $v_{\text{qp}} = 840\text{m/s}$, $L_d = 67\mu\text{m}$.

表 4 不同自由程 L_{ff} 下原子沉积图样的相关参数		
$L_{\text{ff}}/\mu\text{m}$	对比度 Γ	分辨率 w/nm
0	10:1	29
50	5:1	108
70	2:1	194

4. 结 论

本工作根据半经典模型, 用数值方法模拟了在考虑横向温度、纵向速度和自由程等因素后的光栅结构, 并分析了各种因素对钠原子最终沉积的影响, 为我们正在开展的原子光刻实验提供了必要的理论依据. 模拟结果表明, 理想的钠原子束在作用时间 $t = (2n + 1)T/4$ 时, 全部聚焦在势场能量的最小(大)处. 而对于热原子束, 横向速度和纵向速度

分布的影响不能忽略,其中,横向速度使光栅的半高宽和本底大大增加,因此要采用激光冷却的办法尽可能降低横向速度,纵向速度的分布造成原子与势场作用时间的分布,同样作用距离 L_d 也影响到能否

满足 $(2n+1)T/4$ 的作用时间,从而增大沉积的本底,考虑到自由程 L_{ff} 对光栅线宽的巨大影响,基片在实验中一定要校准到恰当位置,尽可能的靠近驻波场,才能获得更好的沉积图样.

- [1] Cai W Q, Li C W, Huo Y S, Wang Y Zh 1999 *Acta Phys. Sin.* **48** 611 (in Chinese) [蔡惟泉、李传文、霍芸生、王育竹 1999 物理学报 **48** 611]
- [2] Kazantsev A P 1974 *Sov. Phys. JETP* **39** 784
- [3] Salomon C, Dalibard J, Aspect A, Metcalf H, Cohen-Tannoudji C 1987 *Phys. Rev. Lett.* **59** 1659
- [4] Prentiss M, Timp G, Bigelow N, Behringer R E, Cunningham J E 1992 *Appl. Phys. Lett.* **60** 1027
- [5] Natarajan V, Behringer R E, Tennant D M, Timp G 1995 *J. Vac. Sci. Technol. B* **13**
- [6] Prentiss M G, Ezekiel S 1986 *Phys. Rev. Lett.* **56** 46
- [7] Jurdik E 2001 *Ph. D. Thesis* University of Nijmegen pp 19–42
- [8] Timp G, Behringer R E, Tennant D M, Cunningham J E 1992 *Phys. Rev. Lett.* **69** 11
- [9] McClelland J J, Scholten R E, Palm E C, Celotta R J 1993 *Science*

262 877

- [10] Tanguy C, Reynaud S, Matsuo M *et al* 1983 *Opt. Commun.* **44** 249
- [11] Berggren K K, Prentiss M, Timp G, Behringer R E 1994 *J. Opt. Soc. Am. B* **11** 7
- [12] Gordon J P, Ashkin A 1980 *Phys. Rev. A* **21** 1606
- [13] He J H 1999 *Chin. J. Comput. Phys.* **16** 122 (in Chinese) [何吉欢 1999 计算物理 **16** 122]
- [14] Natarajan V, Behringer R E, Timp G 1995 *Phys. Rev. A* **53** 4381
- [15] Stütze R, Jürgens D, Habenicht A, Oberthaler M K 2003 *J. Opt. B: Quantum Semiclass. Opt.* **5** S164
- [16] Aspect A, Arimondo E, Kaiser R, Vansteenkiste N, Cohen-Tannoudji C 1998 *Phys. Rev. Lett.* **61** 826
- [17] Behringer R E 1998 *Ph. D. Thesis* Columbia University pp10–38

Simulation of sodium atom deposition pattern in a laser standing wave field^{*}

Ma Bin Ma Yan Zhao Min Ma Shan-Shan Wang Zhan-Shan[†]

(Institute of Precision Optical Engineering, Tongji University, Shanghai 200092, China)

(Received 17 May 2005; revised manuscript received 17 June 2005)

Abstract

A grating structure with the period of half of the laser wavelength is formed by focusing the atoms with a nearly resonant laser standing wave field. The motion of sodium atoms traversing an unsaturated potential are studied by the semi-classical approximation. The structures of gratings under various conditions were simulated using numerical method. By characterizing the grating with FWHM and contrast, the influence of some factors, such as the transverse temperature, the longitudinal velocity, and the free flight to the atom deposition are analysed. Our work provides a theoretical basis to the ongoing atom lithography experiment.

Keywords: atom deposition, semi-classical approximation, laser standing wave field

PACC: 3280P, 3380P, 4250V

^{*} Project supported by the Shanghai Foundation for Development of Science and Technology, China (Grant No.0259nm034)

[†] Corresponding author. E-mail: skyowner1@163.com