

激光驻波场中 Cr 原子运动轨迹与汇聚沉积的分析*

郑春兰[†] 李同保 马 艳 马珊珊 张宝武

(同济大学物理系, 上海 200092)

(2005 年 12 月 14 日收到, 2006 年 2 月 6 日收到修改稿)

利用半经典模型, 从铬原子在激光驻波场中的运动方程出发, 通过数值解方法模拟了铬原子在驻波场中的运动轨迹, 并分析了原子的纵向速度分布和准直程度及球差对沉积条纹结构的影响, 同时也讨论了基片摆放位置对沉积条纹结构的影响, 并通过实验得到了纳米光栅条纹结构.

关键词: 激光驻波场, 原子沉积, 运动轨迹, 沉积分布

PACC: 3280, 4250V, 3280P, 3380P

1. 引 言

通过激光汇聚中性原子沉积纳米结构的原子光刻技术是一种新型的纳米结构加工技术. 其基本原理^[1]是利用共振光的辐射压力(就金属型原子光刻而言)使原子束产生空间强度分布, 然后使原子束沉积在基板上, 在基板上形成纳米级的条纹、点阵或特定图案. 由于任何一种原子的共振跃迁频率是极其稳定的, 相应的在激光汇聚原子沉积实验中用来汇聚原子束的驻波激光频率也是十分精确的, 进而由此驻波光场复制出来的纳米光栅结构也是很精确的, 即它可以直接溯源于绝对原子跃迁频率, 而这正合乎作为纳米传递标准的要求. 这些使得利用激光汇聚原子沉积计数成为研制准确适用的纳米传递标准一个新的技术路线^[2]. 激光汇聚中性原子沉积纳米结构的示意图如图 1 所示^[3], 从原子炉中喷射出的原子源, 经过光学黏胶的准直, 进入一个激光驻波场后沉积在基板上.

1992 年 Timp 等人^[4]报道了利用激光汇聚 Na 原子沉积纳米结构的实验. 1993 年 McClelland 等人^[5]利用铬原子制作了纳米光栅结构, 光栅间距为 212nm. 随后, McClelland 等通过两束相互正交的激光驻波作用于原子束, 得到等距离的正方形的格子纳米结构^[6]. 通过同样的方式, Mlynek 研究小组^[7]利用三束互成 120° 激光束作用于原子, 得到成等六边

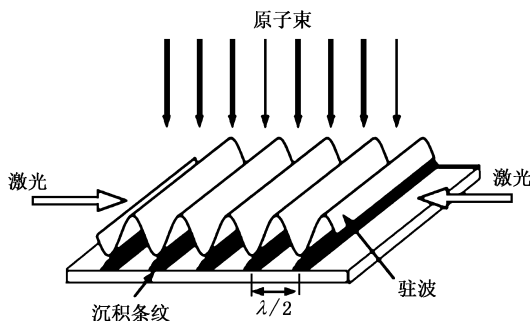


图 1 激光汇聚原子沉积示意图

形的纳米结构. 利用铝原子^[8]和铁原子^[9]直接沉积制作纳米线型结构也有报道.

在开展的实验中, 利用激光汇聚铬原子沉积纳米光栅结构. 为了更好地了解激光作用汇聚原子沉积过程, 给实验提供一些参考性的数据, 本文利用半经典模型, 运用数值方法对铬原子在激光驻波场中的运动轨迹进行了跟踪模拟, 讨论分析了像散因素及沉积基片摆放位置对最后沉积条纹结构特征的影响, 并通过实验得到了光栅条纹结构, 这是国内通过激光汇聚铬原子沉积得到纳米光栅条纹结构.

2. 原子在驻波场中运动轨迹的计算模型

在半经典的近似中, 在激光场中运动的原子受

* 上海市科技发展项目(批准号 0259nm034, 0452nm029)资助的课题.

[†] E-mail: janelzel@hotmail.com

到的力包括与速度有关和速度无关的力两部分.前者称为自发辐射力,是非保守力,主要用于冷却原子束纵向和横向速度.通过冷却原子束的横向速度,可得到一个相当准直的原子束.利用激光冷却和俘获原子的实验和应用见文献[8].后者本质上是保守力,它被认为是感生原子偶极矩与激光电场之间的相互作用,常被称作偶极力.在半经典的近似中,通常忽略自发辐射的影响.

在驻波激光场中一个两能级的原子受到的平均偶极力可以从一个光学势 $U(x, y, z)$ ^[10] 中得出,即

$$U(x, y, z) = \frac{\hbar\Delta}{2} \ln[1 + \rho(x, y, z)], \quad (1)$$

其中,

$$\rho(x, y, z) = \frac{I(x, y, z)}{I_s} \frac{\Gamma^2}{\Gamma^2 + 4\Delta^2} = \rho_0 \alpha(x, y, z), \quad (2)$$

$$\rho_0 = \frac{I_0}{I_s} \frac{\Gamma^2}{\Gamma^2 + 4\Delta^2} \text{ 称为饱和参数. } \Delta = \omega_L - \omega_0 \text{ 是}$$

激光频率 ω_L 对原子共振频率 ω_0 的失谐量, Γ 是原子跃迁的自然线宽, I_s 为原子跃迁的饱和强度,对铬而言, $\Gamma/2\pi = 5\text{MHz}$, $I_s = 85\text{W/m}^2$. 对高斯激光驻波而言

$$\alpha(x, z) = \exp(-2Z^2) \sin^2(kx), \quad (3)$$

其中 $Z = z/w_0$, $k = 2\pi/\lambda$ 是激光光波的波矢.在此,忽略了 y 向激光强度的影响,是因为沿 y 向原子所受到的力与驻波 x 向所受到的力相比,非常小,因此认为沿 y 向具有平移对称性,将问题简化为二维问题.原子在激光驻波场中的拉格朗日函数^[11] 为 $L =$

$\frac{1}{2}m(\dot{x}^2 + \dot{z}^2) - U(x, z)$, 这里, \dot{x} , \dot{z} 分别指原子在 x, z 轴向的速度, $U(x, z)$ 是原子在驻波场中的势能.本文在处理时只考虑保守力(偶极力)的作用,所以在整个过程中,原子的总能量保持不变,即认为它是一个保守系.利用保守系的拉格朗日方程有

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{x}} \right) - \frac{\partial L}{\partial x} = 0, \quad (4)$$

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{z}} \right) - \frac{\partial L}{\partial z} = 0, \quad (5)$$

化简,得到原子在驻波场中的运动方程为

$$\ddot{x} + \frac{1}{m} \frac{\partial U(x, z)}{\partial x} = 0, \quad (6)$$

$$\ddot{z} + \frac{1}{m} \frac{\partial U(x, z)}{\partial z} = 0. \quad (7)$$

由(6)式可得

$$x''z'^2 + x'z'' + \frac{1}{m} \frac{\partial U}{\partial x} = 0, \quad (8)$$

其中 x' 是 x 对 z 的微分.另外有动能

$$T = E_0 - U(x, z) = \frac{1}{2}m(\dot{x}^2 + \dot{z}^2) = \frac{1}{2}mz'^2(1 + x'^2), \quad (9)$$

E_0 是原子的总能量.

将(7)(9)式代入(8)式并化简得

$$x'' = \frac{1 + x'^2}{\chi(E_0 - U)} \left(x' \frac{\partial U}{\partial z} - \frac{\partial U}{\partial x} \right). \quad (10)$$

利用数值方法,通常是设定恰当的步长的四阶 Runge-Kutta 算法,来解答上述方程,估算原子的运动轨迹.

本文引入参数 $a = \frac{\eta\Delta}{2E_0} \rho_0 k^2 w_0^2$, 它包含了激光驻波场几乎所有信息量,通过选取不同的量值,可以改变原子在激光场中的运动.

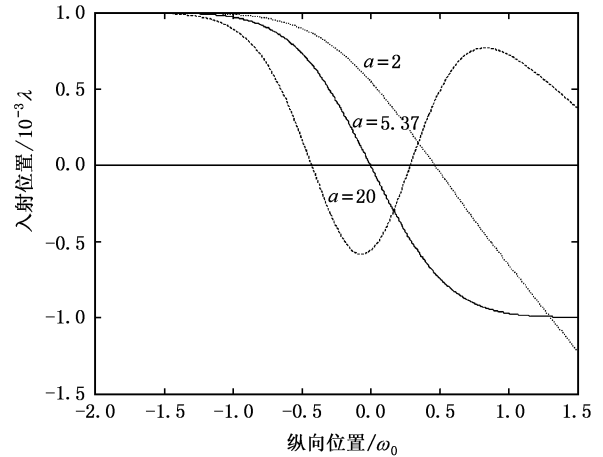


图2 参数 $a=2, a=5.37, a=20$ 时的原子的运动轨迹

图2给出了原子的运动轨迹,分别对应于 $a=2, a=5.37, a=20$, 原子的入射速度为 957m/s , 初始入射位置为 $x = 10^{-3} \times \lambda$. 从图中可发现,当 a 较小时,原子在激光驻波场中运动,与光轴只有一个交点,当 a 足够大时,原子在未到达激光光束中心时,就已与光轴相交,随后,继续在光场中运动,并再次与光轴相交,而且随着 a 的增加,近轴的第一个焦点会向原子源的方向移动,这一点也可从近轴第一个焦点的位置与参数 a 的关系图中看出,如图3所示.通过选择合适的参数 a ,就可以使原子在激光光束中心沉积.图2和图3都表明,在 $a \approx 5.37$ 时,原子与激光束的中心相交.

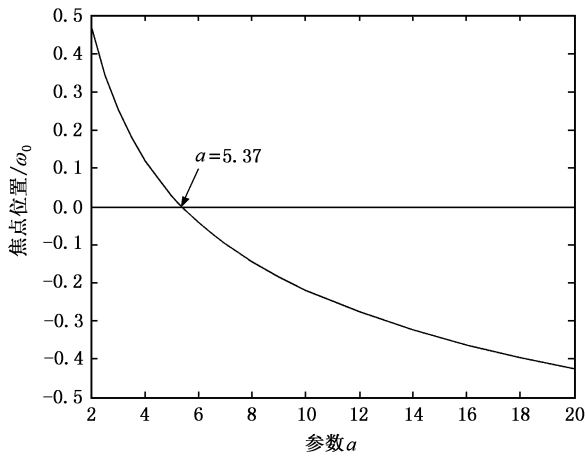


图3 近轴第一个焦点的位置与参数 a 的关系

3. 模拟结果分析

本文以 Cr 原子为例进行模拟分析并给出沉积原子流分布. 激光的波长 $\lambda = 425.55\text{nm}$, 对应的 ^{52}Cr 原子跃迁为 $^7\text{S}_3 \rightarrow ^7\text{P}_4^0$, 自然线宽 $\Gamma/2\pi = 5\text{MHz}$, 饱和强度 $I_s = 85\text{Wm}^{-2}$, 失谐量为 $\Delta/2\pi = 250\text{MHz}$. 光腰半径 $W_0 = 100\mu\text{m}$. 给定 Z 以后, 激光汇聚的原子通量通过跟踪 64000 条随机入射的原子的经典轨迹来估算. 这里仅考虑驻波的一个周期. 为了描述沉积原子流的特征, 引入两个非常有用的参数, 结构宽度 ω 和对比度 ζ .

入射铬原子的纵向速度 v_z 服从 Maxwell-Boltzmann 分布, 所以速度 v_z 服从下面的分布,

$$\rho_0(v_z) = \frac{1}{2} \left(\frac{M_a}{k_B T_0} \right)^2 v_z^3 \exp\left(-\frac{M_a v_z^2}{2k_B T_0} \right), \quad (11)$$

其中 k_B 是 Boltzmann 常数. 炉子的温度 $T_0 = 1923\text{K}$, 最可几速率 $v_z \approx 957\text{m/s}$. 若使焦平面处于激光中心处, 则 $a \approx 5.37$, 此时需要一个比较适中的激光功率值 3.93mW .

入射原子的横向速度分布服从高斯分布,

$$\rho_c(v_x) = \sqrt{\frac{M_a}{2\pi k_B T_c}} \exp\left(-\frac{M_a v_x^2}{2k_B T_c} \right), \quad (12)$$

T_c 是原子束的横向温度, 它与准直角 α_0 的半高宽之间的关系为

$$T_c = T_0 \frac{\alpha_0^2}{4(\sqrt{2} - 1)}, \quad (13)$$

α_0 是一个在实验中可测量的量, 在 MacCland 等人^[5] 的文献中, α_0 为 0.16mrad .

通过图 2 和图 3, 我们对原子在驻波场中的聚

焦沉积有一个简单的图形概念, 原子轨迹是在近轴近似条件下得到的. 在激光汇聚沉积原子的实验中, 我们最关心的最后沉积得到结构的特征(半高宽和对比度). 而入射到驻波场中的原子束具有一定的纵向和横向速度分布. 根据粒子光学原则, 把不满足近轴条件的因素都归为像差因素. 它决定着最后所得到的沉积结构的特征. 像差因素包括球差、色差、衍射和原子束的分散.

3.1. 球 差

球差是由于运动方程的高阶项引起的, 它导致原子的实际运动轨迹偏离了由近轴方程得到的运动轨迹. 估计球差的传统方法是展开运动方程, 将运动方程中的高阶项作为对近轴方程的一种微扰来处理. 这里, 从原子在驻波场中的运动方程的数值解中可以看到球差对原子束成像的影响.

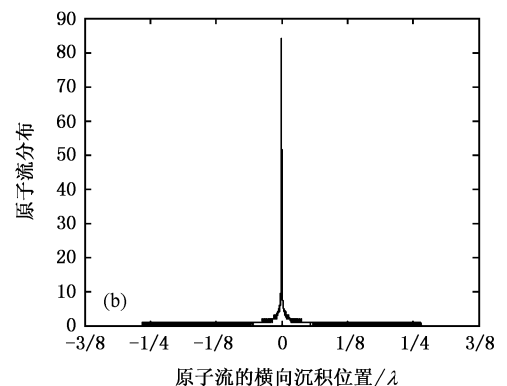
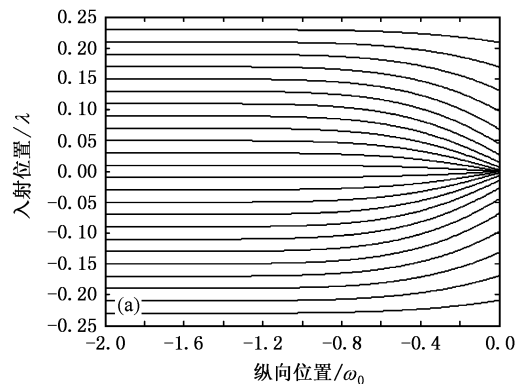


图4 (a)无速度分布的原子束运动轨迹 (b)无速度分布的沉积原子流分布

图 4(a) 给出了一束只有一个纵向速度且无横向速度分布的原子束的运动轨迹, 最初原子以最可几速率平行于 z 轴传播, 进入激光驻波场与驻波相交于不同的位置, 远离光轴入射的原子在势场中受

到的力要比汇聚到焦点处所需的力弱,其结果就是并非所有的原子都能汇聚到近轴方程解出的焦点上,因此焦点就会弥散开来,从而导致最后沉积条纹的加宽,此时晶片置于激光束中心.这一点也可以从图 4(b)看出.极大部分的原子沉积在焦点处,极小部分原子由于球差而沉积基底.这种通过运动方程的数值解观察到球差对沉积结构的影响,既直接又准确,不足的是不能给出描述线半高宽的简单的表达式.运用累计的方法得到图 4(b)中最后沉积条纹的结构宽度约为 0.8nm.

3.2. 色差

由于真实的原子束并非单能射线束,原子束在纵向有一个速度分布,由原子纵向速度引起的运动轨迹的偏差^[10]

$$\delta x = -2\phi a \frac{df}{da} \frac{\delta v_z}{v_z}, \quad (14)$$

从图 3 可知,对高斯驻波厚透镜来说,利用数值方法可得到 df/da ,而且通常 ϕ 的大小是焦距长度与透镜尺寸大小的比值 $2f/\lambda$.

图 5(a)给出的一束均匀入射原子轨迹中,图中没有考虑原子的横向速度分布,原子的入射纵向速度满足(11)式,取 $\delta v_z/v_z \sim 0.4$.图 5(a)中具有不同纵向速度的平行入射的原子在经驻波透镜汇聚后,并不交于透镜光轴的同一点,而是在一个区域内,即焦距长度会有一个变化的范围,导致沉积条纹变宽,从图 5(b)给出的原子在激光束中心沉积流的分布中也可以看出.较之图 4(b),沉积条纹的宽度加宽.同样利用累计的方法也可以得到图 5(b)最后沉积条纹的结构宽度约为 1.4nm,对比度约为 40.

3.3. 原子束的分散

入射到汇聚的驻波场前原子束也不可能完全被准直,总是存在一个发散角 α_0 ,存在横向速度分布,由发散角导致条纹增加的宽度为^[10]

$$s = f\alpha_0, \quad (15)$$

f 为驻波透镜的焦距.当发散角很小时,可以作为近轴近似处理,所以严格来说,原子束的发散并不能作为像散处理.但是,从图 6(a)和(b)中可以看出因原子束的发散而引起的对最终沉积条纹宽度变化影响较大.

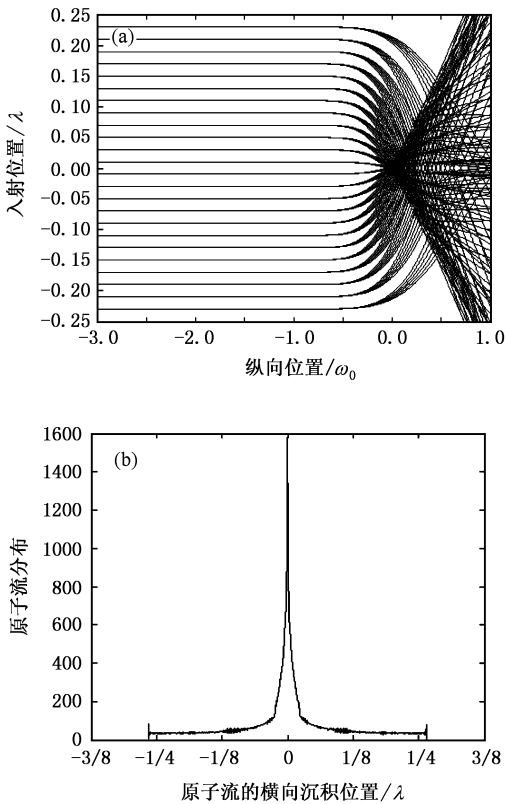


图 5 (a)含纵向速度分布的原子束运动轨迹;(b)含纵向速度分布的沉积原子流分布

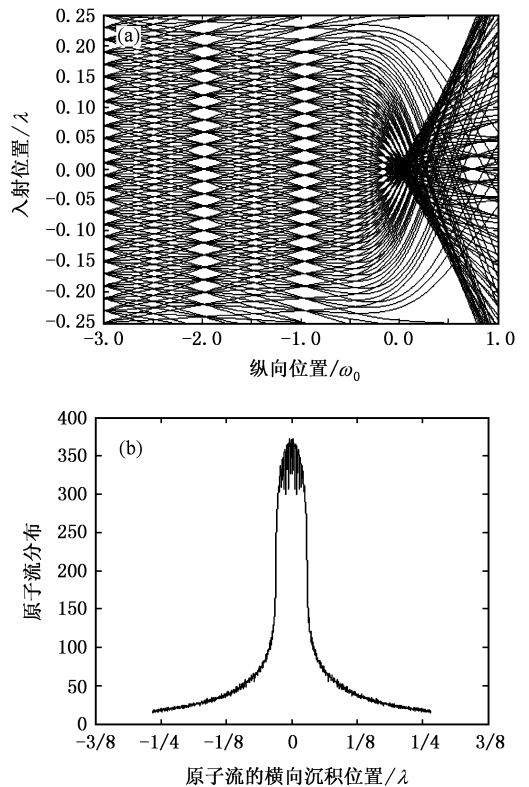


图 6 (a)含横向速度分布的原子束运动轨迹;(b)含横向速度分布的沉积原子流分布

图 6(a)模拟了由发散角较小的原子束在驻波场中的运动轨迹.入射原子束具有一个小的发散角,即具有一个横向速度分布,满足(12)式,取 α_0 为 0.16mrad .图 6(a)对于一个具有发散角的原子束,将在焦点处被聚焦成很小但仍有一定宽度.当焦距 $f = w_0 = 100\mu\text{m}$,利用式估算得到这束原子沉积所得条纹的宽度为 16nm .图 6(b)给出了最后原子流沉积的分布图.同样,利用累计的方法也可以得到图 6(b)最后沉积条纹的结构宽度约为 22nm ,对比度约为 28 .较之由纵向速度分布对沉积条纹宽的影响,原子束发散对它的影响比较大,也可从图 5(b)和图 6(b)的比较中直接观察到.

图 7(a)和(b)中同时考虑了原子纵向速度的分布和横向速度(原子束发散)的分布,得到最后沉积条纹的结构宽度约为 23nm ,对比度约为 13 .

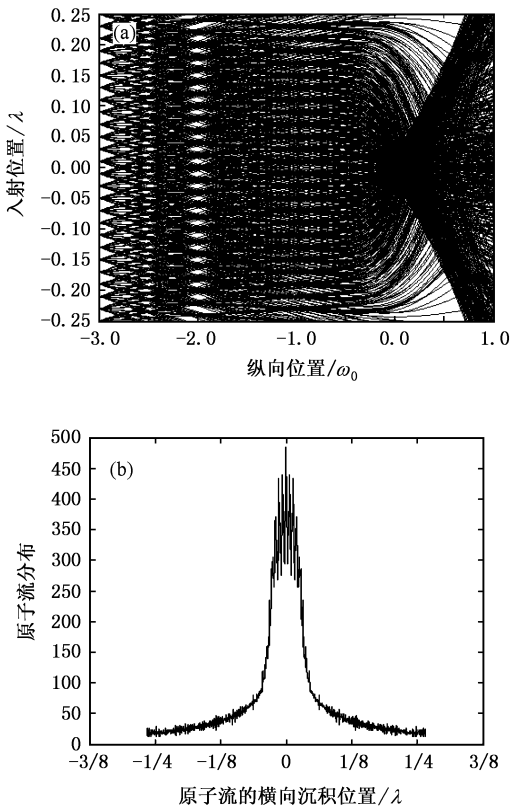


图 7 (a)有速度分布的原子束运动轨迹 (b)有速度分布的沉积原子流分布

3.4. 基片位置对沉积条纹的影响

在上述的模拟分析中,将沉积基片的位置至于激光强度最大的激光束中心处,现在考虑将沉积基片位置移出激光束中心,得到最后沉积条纹的结构

特征,如图所示,分别给出了将基片位置置于 $Z = -0.5$, $Z = 0.5$ 时所得到的原子流的沉积分布,如图 8 所示.原子在不同位置分布存在差异,沉积条纹的特征也有所改变,在激光中心处的条纹宽度最小,对比度最好,离中心 $0.5w_0$ 处次之,离中心 $-0.5w_0$ 处最差.

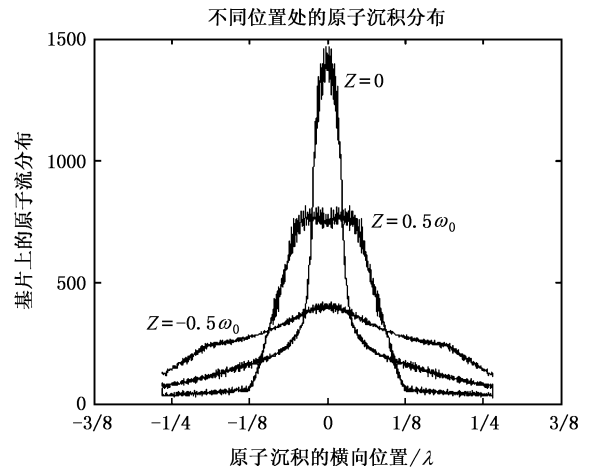


图 8 不同位置处的原子沉积分布

通过上述分析可知,在实验中,通过激光冷却使原子束准直效果比较好,即原子束发散角较小,并且尽量使基片位置置于激光束中心处,这样有利于得到沟道效应较明显的条纹,制作特征较好的纳米光栅结构.

4. 纳米光栅结构样品

图 9 为利用原子力测量的光栅样品结构.制作这片样品时,高速稳定的 Cr 原子束是通过辐射加热输出孔径为 1mm 的坩埚产生的(德国 CreaTec Fischer 公司提供的型号为 HTC-40-10 商用高温铬原子蒸发炉),实验中采用的工作温度为 1650°C .同时利用 coherent 公司的激光器 Verdi-10, MBR-110 和倍频器 MBD-200 获得与铬原子 $^7\text{S}_3 \rightarrow ^7\text{P}_4^0$ 跃迁相对应的 425.55nm 的蓝光.并利用激光诱导荧光稳频的方法将激光频率稳定在铬原子 $^7\text{S}_3 \rightarrow ^7\text{P}_4^0$ 跃迁的共振频率上.稳定性优于 0.26MHz ,并利用多普勒冷却的方法对原子束进行准直,用于准直原子束的激光功率为 60mW ,光束束腰为 $3 \times 24\text{mm}$,最后用于汇聚的激光功率为 50mW ,光束束腰半径为 $100\mu\text{m}$,并且将沉积基片置于激光光束中心处.从图 9 可以明显看出存在光栅条纹,图中两个条纹之间的间距大约为

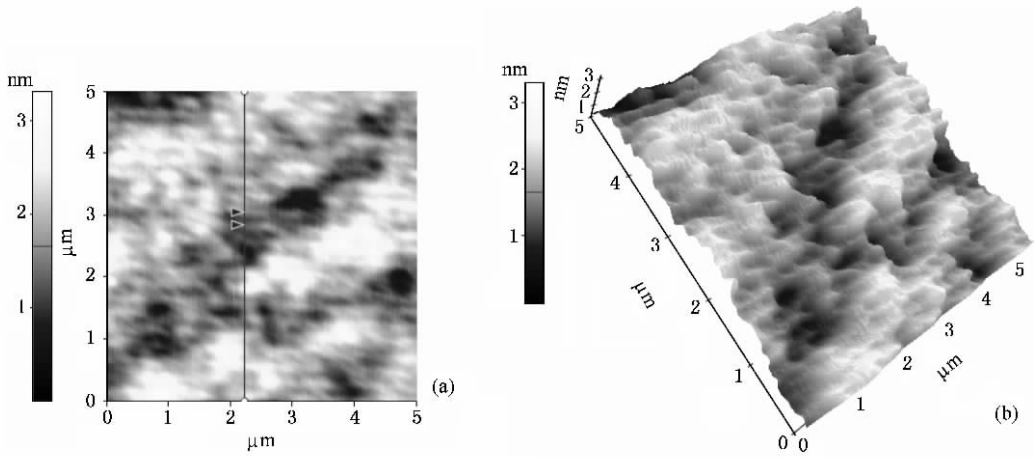


图9 原子力测量的光栅样品结构

215nm, 峰值高度为 0.463nm. 实验中测量的条纹间距稍大于预期的 213nm, 主要是由光栅条纹太宽而且峰值高度太低造成的测量误差. 我们分析造成这种结果主要的原因是由于汇聚激光束的光斑形状较差.

5. 结 论

本文利用半经典模型, 运用数值方法对铬原子

在激光驻波场中的运动轨迹进行了跟踪模拟, 讨论分析了像散因素及沉积基片摆放位置对最后沉积条纹结构特征的影响, 给实验提供一些参考性的数据, 同时也更好地了解激光作用汇聚原子沉积过程. 通过激光汇聚铬原子沉积实验得到纳米光栅条纹结构. 在接下来的工作中, 将进一步改善激光光束质量, 以得到质量更好光栅条纹结构, 并且研究实验中各参数(如汇聚光的光功率, 沉积基片的位置等)的改变对光栅条纹结构的影响.

- [1] Cai W Q, Li C W, Huo Y S, et al 1999 *Acta Phys. Sin.* **48** 611 (in Chinese) [蔡惟泉、李传文、霍芸生等 1999 物理学报 **48** 611]
- [2] Li T B 2005 *SMT* **32**(1)8 (in Chinese) [李同保 2005 上海计量测试 **32**(1)8]
- [3] Anderson W R, Brandley C C, McClelland J J, Celotta R J 1999 *Phys. Rev A* **59** 2476
- [4] Timp G, Behringer R E, Tennant D M, Cunningham J E, Pretiss M, Berggren K K 1992 *Phys. Rev. Lett.* **69** 1636
- [5] McClelland J J, Scholten R E, Palm E C, Celotta R J 1993 *Science*

262 877

- [6] Gupta R, McClelland J J, Jabbour Z, Celotta R J 1995 *Appl. Phys. Lett.* **67** 1378
- [7] Drodofsky U, Stuhler J, Brezger B, Schulze Th, Drewsen M, Pfau T, Mlynek J 1997 *Appl. Phys. B* **65** 755
- [8] McGowan R W, Giltner D M, Lee S A 1995 *Opt. Lett.* **20** 2535
- [9] Bosch R C M 2002 Ferromagnetic nanostructures by laser manipulation Technische Universiteit Eindhoven
- [10] McClelland J J 1995 *J. Opt. Soc. Am. B* **12** 1761

Analysis of Cr atom trajectory and focusing deposition in the standing wave field^{*}

Zheng Chun-Lan[†] Li Tong-Bao Ma Yan Ma Shan-Shan Zhang Bao-Wu

(*Department of Physics , Tongji University , Shanghai 200092 ,China*)

(Received 14 December 2005 ; revised manuscript received 6 February 2006)

Abstract

The laser-focused atomic deposition is a new way to build the nano transfer standard of high reliability adequate for application . Based on the semi-classical model , this paper starts from the motion equation of chromium atom in the laser standing wave field to get the trajectory of the atoms in the standing wave field by analytical simulation . The effects on focal line features are discussed as a result of the angular collimation , velocity spread in the atomic beam and the spherical aberration . The effects from different deposition positions are also discussed . This paper also gives a sample of the grating structure nanofabricated by laser focusing of Cr atoms

Keywords : laser standing wave field , atomic deposition , motion trajectory , deposition diffusion

PACC : 3280 , 4250V , 3280P , 3380P

^{*} Project supported by the Shanghai Foundation for Development of Science and Technology , China (Grant Nos. 0259nm034 , 0452nm029).

[†] E-mail : janelzcl@hotmail.com