

铬原子束横向一维激光冷却的蒙特卡罗方法仿真*

张宝武^{1)2)†} 张萍萍³⁾ 马艳³⁾ 李同保³⁾

1) (中国计量学院, 杭州 310018)

2) (清华大学精密测试技术及仪器国家重点实验室, 北京 100084)

3) (同济大学, 上海市特殊人工微结构材料与技术重点实验室, 上海 200092)

(2011年2月23日收到; 2011年5月23日收到修改稿)

激光汇聚铬原子沉积实验中, 铬原子束准直度的好坏非常重要. 利用蒙特卡罗随机思想选取原子轨迹初始条件, 将⁵²Cr原子以外的其他同位素、纵向速度分布和横向发散角等因素综合考虑, 对铬原子束横向一维激光冷却进行了优化分析. 经过与均匀取值法比较, 这种方法能够更好地体现原子运动的不确定性, 挑选出不参与冷却过程的同位素, 使考察界面内原子束的横向位置分布更好的符合实验结果. 结果显示, 冷却过程中其他同位素的存在使原子束横向位置分布的中心最大值减小 9.3%, 半高宽增加 11%, 并且增加轮廓曲线的基底.

关键词: 激光冷却, 蒙特卡罗方法, 铬原子束

PACS: 37. 10. Vz, 42. 50. Tx

1. 引言

中性原子的激光操纵为纳米结构物质的制作提供了便利的技术手段, 其中激光汇聚铬原子(Cr)沉积纳米光栅结构在纳米计量领域中具有潜在的应用价值^[1,2]. 经研究, 一维激光汇聚场情况下获得的铬原子纳米光栅结构在 10^{-5} 量级上很好地复现了激光驻波场周期, 可以用作原子力显微镜等纳米测量工具的计量标准^[3,4]. 激光汇聚铬原子沉积技术涉及原子束的产生、传输和表征, 原子的激光操纵等一系列技术^[5]. 铬原子束横向发散角和通量的大小会直接影响沉积纳米光栅标样条纹的半高宽和对比度^[1,6,7]. 为了获得超高精细化的沉积条纹, 实验中必须尽量减小原子束横向发散角, 提高原子通量. 横向激光冷却技术为此提供了很好的解决方案^[8,9]. 1984年, Balykin等^[10]用一种角锥反射器(axicone)装置同时实现了纳原子束的纵向和横向减速, 他们把钠原子束横向速度从 5.5 m/s 减小到 1.6 m/s. 1989年, Dalibard^[11]小组利用横向激光冷却技术实现了亚稳态⁴He原子束的准直, 获得了非

常接近理论极限的横向速度. 1990年, Sheehy等^[12]进行了铷原子的亚多普勒冷. 上海光机所马红玉等^[13]利用积分球漫散射光实现了铷原子的纵向和横向冷却. 美国 NIST 的 Scholten等^[9]在铬原子束横向激光冷却实验中利用刀口技术检测证实铬原子束的最终横向准直度达到了 0.16 mrad, 同时他们还理论推导了刀口技术中原子束准直度与坍塌温度以及横向冷却温度之间的关系式. 荷兰 Eindhoven 大学的 Bosch等^[14]利用经典的 Monte Carlo 方法对超声铁原子束的横向激光冷却进行了分析. 2002年起, 同济大学李同保教授^[3,5,6,8,15]课题组为了实现良好的激光汇聚沉积而对铬原子束的横向激光冷却进行了非常详尽的理论分析和实验研究, 并且提出了大尺寸^[16]和三孔预准直狭缝方案^[17]. 文献^[16]的理论结果与实验趋势符合的很好, 但是每个参数下原子束横向位置分布的理论中心最大值都略大于实验值, 而理论半高宽却略小于实验值. 这种差别至少来源于理论上的两个缺陷: 第一, 理论上没有考虑其他同位素的影响; 第二, 每一个原子初始状态没有考虑随机性. 本文基于蒙特卡罗随机思想初始化每个铬原子初始位置、纵向速度和原子

* 清华大学国家重点实验室开放基金项目(批准号: DL-003)、上海市特殊人工微结构材料与技术重点实验室开放基金项目(批准号: ammt2011A-3)资助的课题.

† E-mail: zhangbaowu1978@gmail.com

束发散角,利用随机数来区分 ^{52}Cr 和其他同位素,以此对文献[16]描述的方法进行优化,更为准确地研究铬原子束横向一维多普勒激光冷却,为实验提供更丰富的理论指导.

2. 理论基础

图1给出了铬原子束传输路径(a)和横向一维

激光冷却区域内铬原子受到的力(b).图1(a)中,铬原子束沿着 z 轴正向水平传播, $z=0$ 的位置是产生铬原子束的原子炉口,它的直径为 1 mm ; $z=600\text{ mm}$ 的位置是大小为 1 mm (y 方向) $\times 5\text{ mm}$ (x 方向)的预准直狭缝,其后表面就是截面边长为 3 mm (y 方向) $\times 24\text{ mm}$ (z 方向)的横向一维冷却激光驻波场; $z=1470\text{ mm}$ 的位置是我们考察铬原子束横向分布的截面.

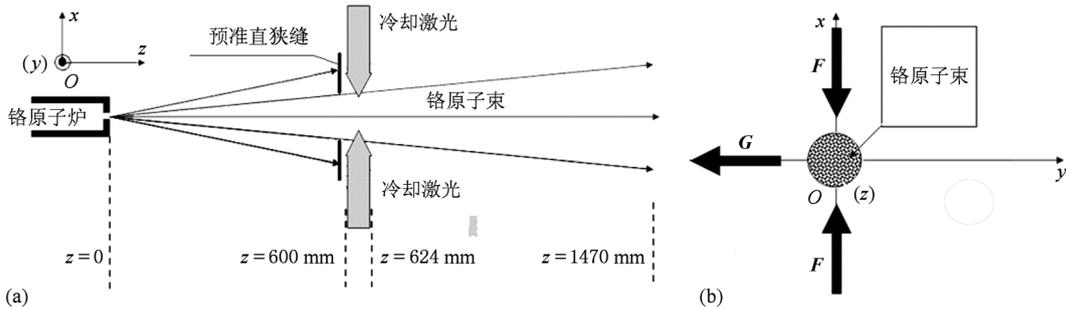


图1 (a) 铬原子束传输路径;(b) 激光冷却区域内铬原子受到的力

这里,我们定义原子束中轴线为 z 轴,其传输方向为 z 轴的正方向,横向一维冷却激光驻波场轴线为 x (在平行于地平面的平面内),这样,铬原子在各种力作用下的运动学方程可表示为

$$m \frac{d^2 \mathbf{x}}{dt^2} = \mathbf{F} + \mathbf{G} \quad \text{冷却激光驻波场内,}$$

$$m \frac{d^2 \mathbf{x}}{dt^2} = \mathbf{G} \quad \text{冷却激光驻波场外,} \quad (1)$$

其中 m 为铬原子的质量, \mathbf{x} 为原子的位置坐标, t 为原子运动时间, \mathbf{F} 和 \mathbf{G} 分别为原子受到的激光耗散力^[18]和重力.由于 \mathbf{F} 和 \mathbf{G} 方向都和 z 轴方向垂直,所以 z 方向上的速度 v_z 将不受外力影响.

3. 蒙特卡罗随即思想获取铬原子初始运动状态

我们用 $(x_i, v_i, \alpha_i, r_i)$ 一组随即数来表示每个原子初始运动状态,其中 x_i 表示原子进入光场的初始位置; v_i 表示原子的初始纵向速度; α_i 表示原子初始发散角,它定义为原子横向速度和纵向速度的比值; r_i 用于区分 ^{52}Cr 原子和其他同位素.对于实验用原子炉,其出口直径为 1 mm ,则 x_i 应选择 $[-0.5\text{ mm}, 0.5\text{ mm}]$ 当中的正态分布随机数.高温原子炉泻流出来的铬原子束纵向速度满足麦克斯韦玻尔

兹曼分布律,横向速度分布符合高斯分布,两者的比值可通过发散角 α_i 来表示.由文献[7]可知,纵向速度 v_i 与发散角 α_i 满足联合分布函数表示为

$$P(v_i, \alpha_i) \propto v_i^4 \exp[-(v_i^2/2v_0^2)(1 + \alpha^2/\alpha_0^2)], \quad (2)$$

其中 v_0 为原子束的纵向最可几速率, α_0 为铬原子束初始发散角.

为了获取随机数 v_i 和 α_i ,我们首先在三维空间中选取随机点 (v_i, α_i, P_i) ,然后将 P_i 与 $P(v_i, \alpha_i)$ 相比较.如果 $P_i < P(v_i, \alpha_i)$,则选取的 (v_i, α_i) 有效;反之,则重复上述过程,直到选取的随机点满足 $P_i < P(v_i, \alpha_i)$ 为止.

在铬的自然同位素中, ^{52}Cr 原子所占比重最大,其丰度为 84% 左右,剩下的同位素如 ^{50}Cr , ^{53}Cr 和 ^{54}Cr 等总和只占 16% .在本文中,我们的研究对象为 ^{52}Cr ,并且假定只有这种同位素与激光驻波场相互作用,参与冷却过程.为此,我们首先选取均匀分布于 $[0, 1]$ 之间的随机数 r_i ,如果 $r_i \in [0.16, 1]$,我们认为此时产生的原子为 ^{52}Cr ,原子的轨迹按方程(1)来计算;如果 $r_i \in [0, 0.16)$,此时我们认为原子的属性为其他同位素.由于上述假定,故此时原子只在重力作用下运动.

到此,我们也就实现了通过蒙特卡罗随即思想确定每条轨迹的初始条件 $(x_i, v_i, \alpha_i, r_i)$ 的目的,本文第4节就是我们据此获得的理论结果.

4. 模拟结果

4.1. 铬原子的运动轨迹

在铬原子束横向一维多普勒激光冷却过程中, ^{52}Cr 原子的工作谱线对应与共振能级跃迁 $^7S_3 \rightarrow ^7P_4^0$, 辐射波长为 $\lambda = 425.55 \text{ nm}$, 自然线宽为 $\Gamma = 2\pi \times 5 \text{ MHz}$, 饱和光强为 $I_s = 8.5 \text{ mW/cm}^2$. 形成冷却激光驻波场的入射激光功率为 $P = 43 \text{ mW}$. 铬原子炉温度通常设定为 $1650 \text{ }^\circ\text{C}$, 此时, 出射的原子束具有 $v_0 = 960 \text{ m/s}$ 的纵向最可几速率.

图 2 给出了蒙特卡罗随即思想模型中原子的运动轨迹: (a) 和 (b) 分别为冷却作用前和冷却作用后的情况, 其中粗实线表示的是其他同位素的运动轨迹. 为了对比, 我们同时给出了文献 [16] 方法 (均匀取值法) 中冷却作用前后原子的运动轨迹, (c) 和 (d) 分别为冷却作用前和冷却作用后的情况. 图中每一条折线代表一个从原子炉口 $z = 0$ 位置出发, 具有一定

初始运动状态的铬原子到达 $z = 1470 \text{ mm}$ 位置的运动轨迹. $x = 0$ 的直线代表这个方向上初始横向发散角 (也就是横向速度) 为零的铬原子轨迹, 折线的初始角度越大说明这个原子的初始横向发散角的绝对值就越大. 从中可以看出, 不管哪种方法, 与冷却作用前相比, 经过激光驻波场的作用, 冷却作用后原子的运动轨迹都向着原子束中轴线发生了偏折. 其次, 对比两种方法的轨迹图, 我们很容易看出, 不管冷却作用与否, 在蒙特卡罗方法中, 坐标选取的随机性使原子初始位置和横向发散角呈现出非均匀性; 在同样设定数目的原子 (125 个) 中, 只有那些满足 (2) 式分布的原子才会被挑选出来, 在图中留下轨迹. 另外, 如上所述, 这部分原子中还包含有 ^{52}Cr 以外的其他同位素, 即图中粗实线给出的运动轨迹. 相比之下, 文献 [16] 的方法使原子的初始位置和横向发散角均匀分布; 对所有设定数目的原子没有选择性, 更不能挑选出 ^{52}Cr 以外的其他同位素. 因此, 我们说本文采用的蒙特卡罗方法能够体现出原子运动的不确定性, 更好地反映铬原子束横向激光冷却过程.

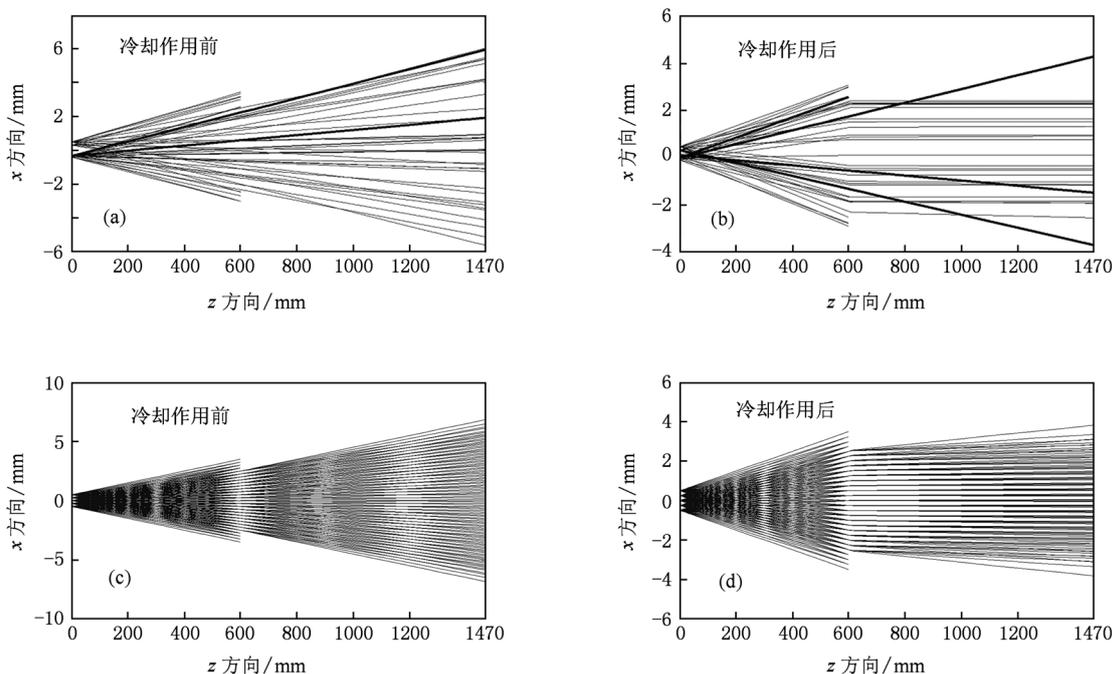


图 2 横向激光冷却作用前后原子的运动轨迹 (a) 蒙特卡罗法: 冷却作用前; (b) 蒙特卡罗法: 冷却作用后; (c) 均匀取值法: 冷却作用前; (d) 均匀取值法: 冷却作用后

4.2. 铬原子束的横向位置分布

图 3 给出了不区分 ^{52}Cr 和其他同位素情况下, 两种方法模拟的横向激光冷却作用前后铬原子束横向

分布轮廓, 其中虚线为均匀取值法冷却作用前的分布, 细实线为蒙特卡罗法冷却作用前的分布, 点划线为均匀取值法冷却作用后的分布, 粗实线为蒙特卡罗法冷却作用后的分布, 各轮廓曲线的归一化条件是冷

却作用前原子束横向分布的中心最大值.

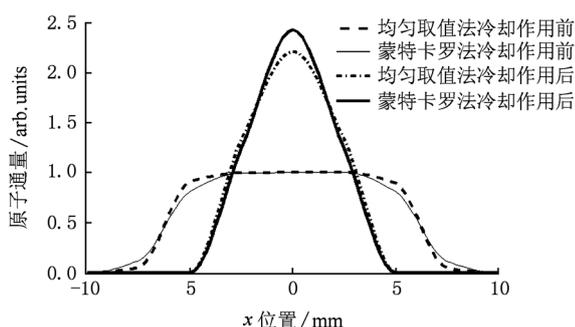


图3 不区分⁵²Cr 和其他同位素情况下,均匀取值法和蒙特卡罗法分别模拟的横向激光冷却作用前后铬原子束横向分布轮廓

图3 显示,激光冷却作用前,与均匀取值法相比,蒙特卡罗法使原子束的位置分布更加向中心区域集中,两边尾部减小的趋势明显变缓,基底增加.激光冷却作用后,蒙特卡罗方法的中心最大值明显大于均匀取值法,半高宽略小于均匀取值法,并且两者的基底没有明显的差别.这种现象的原因作者认为来自于蒙特卡罗方法对原子束初始状态的随机设定:位置取值的正态分布和公式(2)使原子束的中心区域聚集大部分原子,进而经过激光作用后,这种聚集状态更加突出.这也说明蒙特卡罗方法能够正确地反映原子束分布轮廓.表1 给出了图3 冷却作用后分布曲线特征值和冷却作用前分布曲线对应特征值之间的比值.

表1 不区分⁵²Cr 和其他同位素情况下,两种方法模拟的冷却作用后分布曲线特征值和冷却作用前分布曲线对应特征值之间的比值

不区分 ⁵² Cr 和其他同位素	中心最大值之比	半高宽之比
蒙特卡罗法	2.43	0.45
均匀取值法	2.21	0.67

图4 给出了区分⁵²Cr 和其他同位素时两种方法模拟的横向激光冷却作用前后铬原子束横向分布轮廓,其中虚线为均匀取值法冷却作用前的分布,细实线为蒙特卡罗法冷却作用前的分布,点划线为均匀取值法冷却作用后的分布,粗实线为蒙特卡罗法冷却作用后的分布,各轮廓曲线的归一化条件是冷却作用前原子束横向分布的中心最大值.

对比图3,我们可以看出,对于冷却作用前原子束的横向位置分布来说,不管区分同位素与否,两种方法给出的模拟结果没有差别.对于冷却作用后原子束的横向位置分布来说,图4 中两种方法给出的模拟结果与图3 至少有如下差别:第一,两种方法

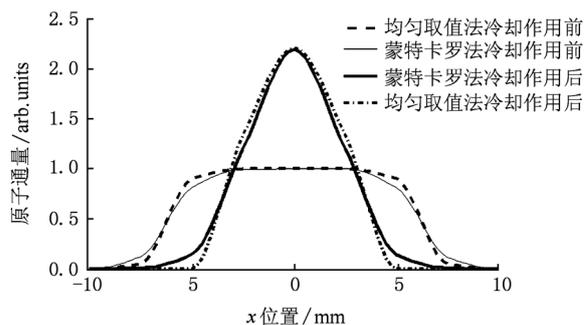


图4 区分⁵²Cr 和其他同位素情况下,均匀取值法和蒙特卡罗法分别模拟的横向激光冷却作用前后铬原子束横向分布轮廓

给出的曲线中心最大值几乎相等;第二,蒙特卡罗法给出的曲线本底明显增高.这其中的原因来自于其他同位素不参与激光冷却过程.同样数目的原子,如果不区分同位素,那么所有的原子都会参与激光冷却过程,对原子束横向分布的中心最大值有贡献;如果区分同位素,由于它们不参与激光冷却过程,那么这些原子不但不会对原子束横向分布的中心最大值有贡献,反而降低中心最大值,增加基底.表2 给出了图4 冷却作用后分布曲线特征值和冷却作用前分布曲线对应特征值之间的比值.

表2 存在同位素情况下,两种方法模拟的冷却后分布曲线特征值和冷却前分布曲线对应特征值之间的比值

区分 ⁵² Cr 和其他同位素	中心最大值之比	半高宽之比
蒙特卡罗法	2.20	0.5
均匀取值法	2.21	0.67

对比表1 和表2,我们可以看出,同位素的存在使原子束横向分布的中心最大值减小9.3%,半高宽增加11%.

对应于上述理论结果,图5 和表3 给出了实验结果,其中(a)为横向激光冷却作用前后,铬原子束荧光斑点照片,(b)为各荧光斑点照片沿虚线上的强度轮廓曲线.图中轮廓曲线的归一化条件是冷却作用前原子束横向分布的中心最大值.

表3 横向冷却作用前后铬原子束横向分布的半高宽比率和中心最大值比率

	中心最大值之比	半高宽之比
冷却作用前	1	1
冷却作用后	2.4	0.56

图5(a)显示,横向激光冷却作用后,铬原子束荧光斑点沿虚线方向上的展宽明显减小,亮度随之增大.图5(b)显示荧光斑点的轮廓曲线在 ± 5 mm

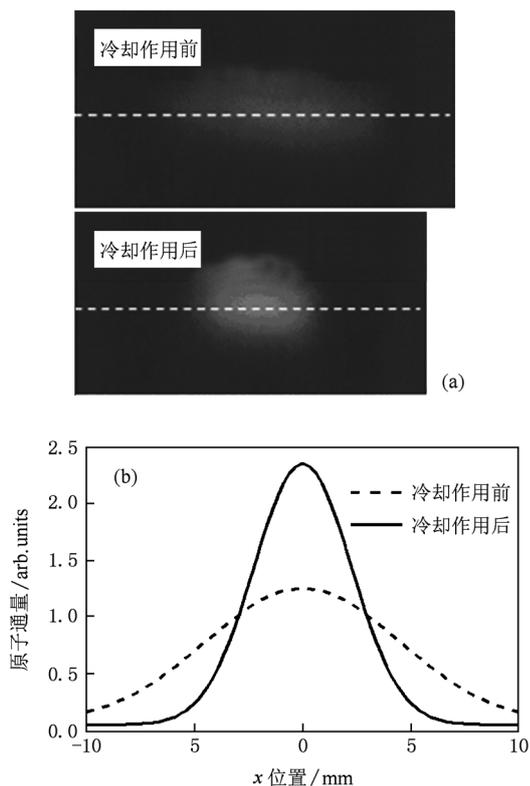


图5 横向激光冷却作用前后,铬原子束实验荧光斑点照片(图a)和各荧光斑点照片沿虚线上强度轮廓曲线(图b)

位置处具有明显的基底,这与蒙特卡罗方法给出的理论结果非常吻合.从表3量化的结果可以看出,横向激光冷却作用后,铬原子束横向分布的半高宽减小为冷却作用前的一半,中心最大值提高到冷却作用前的2.4倍.这非常接近蒙特卡罗方法给出的理论结果.由此我们认为蒙特卡罗方法能够较好地整合了原子束的各个影响因素,为实验提供更好的理论基础.

5. 结 论

本文利用蒙特卡罗思想为每一条原子轨迹提供初始条件,着重分析了 ^{52}Cr 以外其他同位素对铬原子束横向激光冷却的影响.与均匀取值法相比较可知,由于能够综合考虑原子束的各个方面,这种方法给出的理论结果与实验符合得更好.另外,理论结果还显示,与冷却作用前相比,同位素的存在使冷却作用后原子束横向位置分布的中心最大值降低9.3%,半高宽增加11%.这种方法由于更加符合原子运动不确定性的物理过程,修正了均匀取值法只能单一分析某一种影响因素的缺陷,对实验有很好的指导作用.

- [1] McClelland J J, Anderson W R, Bradley C C, Walkiewicz M, Celotta R J 2003 *J. Res. Natl. Inst. Stand. Technol* **108** 99
- [2] Li T B 2005 *SMT* **185** 8 (in Chinese) [李同保 2005 上海计量测试 **185** 8]
- [3] Ma Y, Zhang B W, Zheng C L, Ma S S, Li F S, Wang Z S, Li T B 2007 *Acta Phys. Sin.* **56** 1365 (in Chinese) [马艳、张宝武、郑春兰、马珊珊、李佛生、王占山、李同保 2007 物理学报 **56** 1365]
- [4] Zhang W T, Zhu B H, Xiong X M 2009 *Acta Phys. Sin.* **58** 8199 (in Chinese) [张文涛、朱宝华、熊显名 2009 物理学报 **58** 8199]
- [5] Lu X D, Li T B, Ma Y 2010 *Chin. Phys. B* **19** 123201
- [6] Zheng C L, Li T B, Ma Y, Ma S S, Zhang B W 2006 *Acta Phys. Sin.* **55** 4528 (in Chinese) [郑春兰、李同保、马艳、马珊珊、张宝武 2006 物理学报 **55** 4528]
- [7] McClelland J J 1995 *J. Opt. Soc. Am. B* **12** 1761
- [8] Ma Y, Zhang B W, Zheng C L, Ma S S, Li F S, Wang Z S, Li T B 2006 *Acta Phys. Sin.* **55** 4086 (in Chinese) [马艳、张宝武、郑春兰、马珊珊、李佛生、王占山、李同保 2006 物理学报 **55** 4086]
- [9] Scholten R E, Gupta R, McClelland J J, Celotta R J, Levenson M S, Vangel M G 1997 *Phys. Rev. A* **55** 1331
- [10] Balykin V I, Letokhov V S, Minogin V G, Zuera T V 1984 *Appl. Phys. B* **35** 149
- [11] Dalibard J, Salomon C, Aspect A, Arimondo E, Kaiser R, Vansteenkiste N, Cohen-Tannoudji C 1989 *Atomic Physics* (Singapore: World Scientific) 199
- [12] Sheehy B, Shang S Q, van der Straten P, Metcalf H 1990 *Chem. Phys.* **145** 317
- [13] Ma H Y, Cheng H D, Zhang W Z, Liu L, Wang Y Z 2009 *Acta Phys. Sin.* **58** 1569 (in Chinese) [马红玉、成华东、张文卓、刘亮、王育竹 2009 物理学报 **58** 1569]
- [14] Bosch R C M 2002 *Technische Universiteit Eindhoven*
- [15] Wang Z S, Ma S S, Ma Y, Zhao M, Liu H B 2006 *Optics and Precision Engineering* **14** 63 (in Chinese) [王占山、马珊珊、马艳、赵敏、刘恒彪 2006 光学精密工程 **14** 63]
- [16] Zhang B W, Zhang W T, Ma Y, Li T B 2008 *Acta Phys. Sin.* **57** 5485 (in Chinese) [张宝武、张文涛、马艳、李同保 2008 物理学报 **57** 5485]
- [17] Zhang B W, Li T B, Ma Y 2008 *Chin. Opt. Lett.* **6** 782
- [18] Metcalf H J, Straten P 1999 *Laser Cooling and Trapping* (Berlin: Springer-Verlag), p88

Simulations of one-dimensional transverse laser cooling of Cr atomic beam with Monte Carlo method*

Zhang Bao-Wu^{1)2)†} Zhang Ping-Ping³⁾ Ma Yan³⁾ Li Tong-Bao³⁾

1) (China Jiliang University, Zhejiang 310018, China)

2) (State Key Laboratory of Precision Measurement Technology and Instruments, Tsinghua University 100084, China)

3) (Tongji University, Shanghai Key Laboratory of Special Artificial Microstructure Materials and Technology, Shanghai 200092, China)

(Received 23 February 2011; revised manuscript received 23 May 2011)

Abstract

A well collimated atomic beam plays an important role in laser focused Cr atom deposition. The simulations of one-dimensional (1D) transverse laser cooling of Cr atomic beam is performed with the Monte Carlo method. Taking into account the stochastic initial conditions of each atom, isotopes other than ^{52}Cr , longitudinal velocity distribution and transverse divergence, the atomic beam cooled by laser is optimized and evaluated. The obtained results are consistent with experimental. In addition, with picking out the trajectories of isotopes other than ^{52}Cr that are not cooled by the laser the center maximum value can be reduced by 9.3%, and the FWHM is increased by 11% of the transverse distribution.

Keywords: laser cooling, Monte Carlo method, Cr atomic beam

PACS: 37.10.Vz, 42.50.Tx

* Project supported by the State Key Laboratory of Precision Measurement Technology and Instruments, Tsinghua University (Grant No. DL-003) and the Opening Project of Shanghai Key Laboratory of Special Artificial Microstructure Materials and Technology (Grant No. ammt2011A-3) .

† E-mail: zhangbaowu1978@gmail.com