

文章编号: 1001-3806(2012)03-0398-04

3孔预准直后铬原子束横向位置分布仿真

张宝武^{1,2}, 马艳³, 张萍萍³

(1. 中国计量学院 计量测试工程学院 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)

摘要: 为了研究⁵²Cr原子以外其它同位素对铬原子束横向位置分布的影响,采用蒙特卡罗方法对3孔预准直狭缝条件下的1维激光冷却进行了理论分析。由分析可知,在区分⁵²Cr原子和其它同位素条件下,原子束横向位置分布的基底会有所增加,每一部分原子束的特征值也有明显的变化,中心部分原子束中心最大值有9.5%的降低,半峰全宽有2.9%的增加;两侧每一部分原子束的中心最大值有25%的增加,半峰全宽略有增宽。结果表明,其它同位素的区分与否对中心部分原子束的中心最大值和半峰全宽影响很小。

关键词: 激光技术; 激光冷却; 蒙特卡罗方法; 铬原子束

中图分类号: O43 文献标识码: A doi: 10.3969/j.issn.1001-3806.2012.03.029

Simulation of transverse position distributions of Cr atomic beam pre-collimated by three apertures

ZHANG Bao-wu^{1,2}, MA Yan³, ZHANG Ping-ping³

(1. College of Metrology & Measurement Engineering, China Jiliang University, Hangzhou 310018, China; 2. State Key Laboratory of Precision Measurement Technology and Instruments, Tsinghua University, Beijing 100084, China; 3. Tongji University, Shanghai Key Laboratory of Special Artificial Microstructure Materials and Technology, Shanghai 200092, China)

Abstract: In order to study the effect of isotopes except for ⁵²Cr on the transverse position distribution of Cr atomic beam, simulation was carried out for 1-D transverse laser cooling with a three-aperture pre-collimating slit by means of Monte Carlo method. The results show that isotopes except for ⁵²Cr can make the background increased and affect characteristics of each part of the atomic beam: the central maximum value decreases 9.5% and its full width at half maximum (FWHM) increases 2.9% in the center; while the maximum value increases 25% with little increase of the FWHM in either side. It concludes that the existence of the isotopes except for ⁵²Cr has little effect on the center maximum value and FWHM of the center part atomic beam.

Key words: laser technique; laser cooling; Monte Carlo method; Cr atomic beam

引言

近年来,激光冷却和陷俘技术^[1-3]的快速发展促进了一些新的学科和技术的发展,例如原子光学、冷原子干涉仪、光镊、光格点和超精密加工等等。基于原子光学理论的激光汇聚铬原子沉积实验^[4-7],是一种新型的、自下而上制作物质结构的技术,其最简单的实验方案是利用1维驻波激光场所形成的原子透

镜阵列将入射的原子束沟道化,使其直接沉积在基板表面上,形成反映驻波周期(入射激光束波长的一半)的1维原子光栅结构。经研究,这种技术制作的原子光栅平均节距在 10^{-5} 量级上很好地复现了激光驻波场周期^[8]。另外,由于自保护性元素铬的采用,这种光栅在纳米测量仪器的现场和一般实验室校准方面凸显优势^[8-9]。激光汇聚铬原子沉积实验也已成为研制纳米传递标准技术的主流技术之一,目前许多国家都在直接或间接地加强财力物力,推动这种原子光栅实用化。

激光汇聚铬原子沉积实验中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峰全宽和对比度^[10-11]。为此,实验过程中原子束准直度和通量的在线监测显得非常重要。国内学者经过多年研究,在大尺寸预准直狭缝^[12-13]基础上提出了3孔预准直技术^[14]。

基金项目: 清华大学精密测试技术及仪器国家重点实验室开放基金资助项目(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资助项目(ammt2011A-3); 浙江省科技厅科技计划资助项目(2011R10094)

作者简介: 张宝武(1978-),男,博士,讲师,研究方向为原子光刻技术。

E-mail: zhangbaowu1978@gmail.com

收稿日期: 2011-08-23; 收到修改稿日期: 2011-09-07

作者采用经典粒子模型,从冷却激光场中铬原子所受的耗散力出发,利用适当步长的 4 阶 Runge-Kutta 算法求解铬原子的运动方程,对这种 3 孔预准直技术下铬原子束横向 1 维激光冷却进行仿真。与参考文献 [14] 中描述不同的地方是,作者利用蒙特卡罗随机思想确定铬原子初始位置、纵向速度和原子束发散角,区分 ^{52}Cr 原子和其它同位素(这些原子假设不参与激光冷却)。这些方面的综合考虑更加接近真实铬原子束,因此,能够为实验提供更丰富的理论指导。

1 理论基础

图 1a 中,坩埚(Cr oven)产生的铬原子束沿着 z 轴

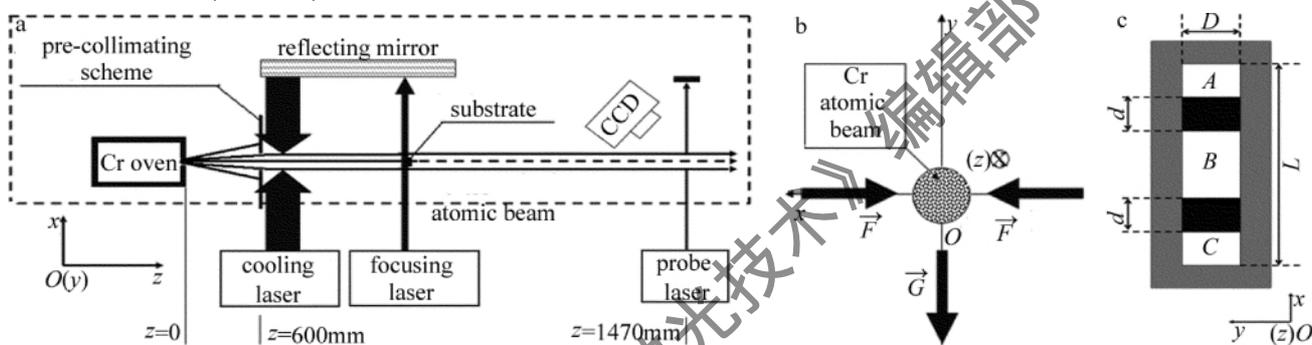


Fig. 1 a—experimental system b—the force exerted on atom within the laser cooling c—the three-aperture slit

$$\begin{cases} m \frac{d^2 \vec{x}}{dt^2} = \vec{F} + \vec{G} & (\text{冷却激光驻波场内}) \\ m \frac{d^2 \vec{x}}{dt^2} = \vec{G} & (\text{冷却激光驻波场外}) \end{cases} \quad (1)$$

式中 m 为铬原子的质量, \vec{x} 为原子的位置坐标, t 为原子运动时间, \vec{F} 和 \vec{G} 分别为原子受到的激光耗散力^[15]和重力。由于 \vec{F} 和 \vec{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。

2 蒙特卡罗随机思想获取铬原子初始运动状态

用 $(x_i, v_i, \alpha_i, r_i)$ 一组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 表示它的初始纵向速度; α_i 表示它初始发散角,它定义为原子横向速度和纵向速度的比值; r_i 表示这个原子是否为 ^{52}Cr 原子的同位素。对于实验用坩埚,其出口直径为 1mm,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。由参考文献 [11] 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:

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

正向水平传播。其中, $z = 0$ 的位置是坩埚口,它的直径为 1mm; $z = 600\text{mm}$ 的位置是大小为 $1\text{mm}(y \text{ 方向的 } D) \times 5\text{mm}(x \text{ 方向的 } L)$, 含有 3 个小孔的预准直狭缝(见图 1c, 其中 3 个小孔分别为 A、B 和 C, 其中 A 与 C 的尺寸相同,且分别与 B 的距离 d 相同), 其后表面就是截面边长为 $3\text{mm}(y \text{ 方向}) \times 24\text{mm}(z \text{ 方向})$ 的横向 1 维冷却激光驻波场,铬原子在其中受到的力如图 1b 所示; $z = 1470\text{mm}$ 的位置是考察铬原子束横向分布的截面。

这里,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 1 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:

式中 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 , 首先在 3 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, 选取的 (v_i, α_i) 无效, 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, 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, 首先选取均匀分布于 $[0, 1]$ 之间的随机数 r_i , 如果 $r_i \in [0.16, 1]$, 认为此时产生的原子为 ^{52}Cr , 原子的轨迹按 (1) 式来计算; 如果 $r_i \in [0, 0.16]$, 此时认为原子的属性为 ^{52}Cr 的同位素。由于上述假定, 故此时同位素只在重力作用下运动。

到此, 也就实现了通过蒙特卡罗随机思想确定每条轨迹的初始条件 $(x_i, v_i, \alpha_i, r_i)$ 的目的。表 1 为下一节中仿真时所基于的 3 孔预准直狭缝典型实验参量。

Table 1 Typical experimental parameters for three-aperture slit/mm

$L \times D$	d	aperture A	aperture B	aperture C
4.2×1	0.7	0.7×1	1.4×1	0.7×1

3 模拟结果

3.1 铬原子的运动轨迹

在铬原子束横向 1 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 $^7\text{S}_3 \rightarrow ^7\text{P}_4^0$, 其对应的波长为 $\lambda = 425.55\text{nm}$, 自发辐射率为 $\Gamma = 5 \times 2\pi\text{MHz}$, 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°C , 对应的原子束具有 $v_0 = 960\text{m} \cdot \text{s}^{-1}$ 的最可几速率。

为清晰起见, 图 2 中给出了 25 条铬原子的运动轨迹。图 2a 和图 2b 分别为区分 ^{52}Cr 原子与其它同位素时横向激光冷却作用与否的情况, 其中的粗实线表示

的是其它同位素的运动轨迹。为了对比, 同时给出不区分 ^{52}Cr 原子和其它同位素时原子的运动轨迹, 见图 2c 和图 2d。图中每一条折线代表一个从坩埚口 $z = 0$ 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 0 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。从图 2 中可以看出, 不管 ^{52}Cr 原子与其它同位素区分与否, 不管冷却激光作用与否, 对应于图 1c 的 3 个小孔, 原子的轨迹分成三部分。与作用前相比, 经过激光驻波场的作用, ^{52}Cr 原子在激光作用下的运动轨迹都向着原子束中轴线发生了偏折, 而其它同位素因为不参与激光冷却而保持直线运动。

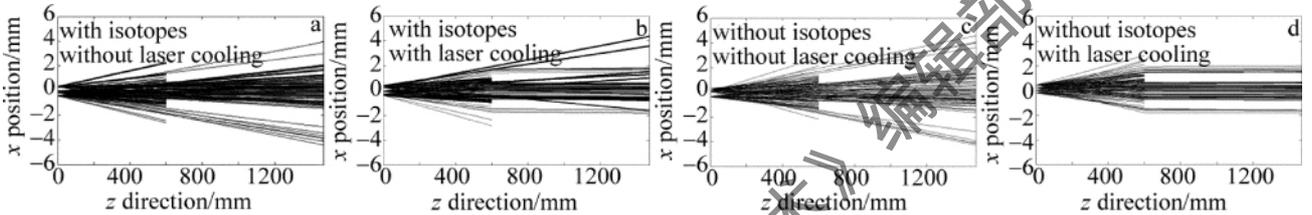


Fig. 2 Simulated atomic trajectories with of without laser cooling
a b—are that with isotopes c d—are that without isotopes

3.2 铬原子束横向分布轮廓

获得原子运动轨迹后, 利用柱状图将所有原子的落点累加起来得到原子束横向位置分布, 如图 3 所示, 粗实线为冷却作用前的分布(a b 和 c 三部分), 细实线为不区分同位素情况下冷却作用后的分布(a' b' 和 c' 三部分), 短划线为区分同位素情况下冷却作用后的分布(a'' b'' 和 c'' 三部分), 其中每一条曲线都以 b 部分中心峰值为归一化条件。

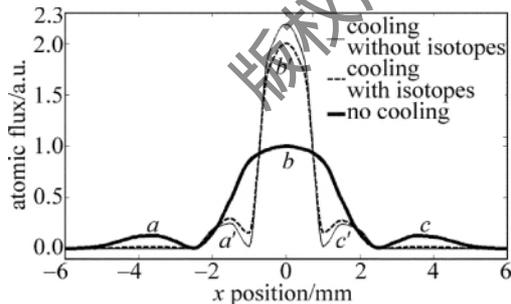


Fig. 3 Simulated transverse distribution of Cr atomic beam with or without laser cooling when considering the isotopes or not

图 3 在总的趋势上与参考文献 [14] 中图 3 的现象非常类似, 即对应于图 1c 的 3 孔, 不管同位素区分与否, 激光冷却作用与否, 铬原子束都被分成三部分, 激光冷却的作用使铬原子束横向分布宽度明显减小, 中心最大值明显提高, 每一部分中心最大值和半峰全宽(full width at half maximum, FWHM) 如表 2 所示。激光冷却作用与否, 原子束横向分布具有以下特征: (1) a 和 c 两部分相对于中心 b 部分的分布具有对称

Table 2 W_{FWHM} and maximum values of each part in Fig. 3 with or without laser cooling

name	center maximum value	FWHM/mm
part a or part c	0.13	1.75
part b	1	2.96
part a' or part c'	0.3	1.1
part b'	1.9	1.44
part a'' or part c''	0.24	1
part b''	2.1	1.4

性; a 部分和 c 部分相对于中心 b 部分的分布同样具有对称性; (2) b' 部分相对于 b 部分没有位移, 而 a' 部分相对于 a 部分, 或者 c' 部分相对于 c 部分都向着原子束中轴有一定的位移, 并且这两个位移量是对称相等的; (3) a' b' 和 c' 三部分和对应的 a b 和 c 三部分相比都有半峰全宽 W_{FWHM} 的减小和中心最大值的增大。

图 3 和表 2 显示出, 在区分同位素与否两种情况下, 原子束中心最大值和半峰全宽有明显的不同。同位素的存在可以使中心部分原子束的中心最大值降低 9.5%, 半峰全宽增加 2.9%; 同位素的存在使两侧部分原子束的中心最大值增加 25%, 半峰全宽有略微的增加。另外, 同位素的存在还使冷却作用后原子束横向分布的整个基底有一定的增加(见图 3 中 $\pm 4\text{mm}$

处)。上述中心最大值的降低和半峰全宽的增加原因在于,假定原子束中除 ^{52}Cr 原子以外,其它同位素都不参与激光冷却。

为了更加准确地反映激光冷却对原子束的作用和同位素区分与否的不同,此处采用简单的几何关系:由(3)式来确定原子束每一部分冷却作用前后发散角(全角) α_{full} ,其定义为条纹的半峰全宽 W_{FWHM} 与其炉口距离($z = 1470\text{mm}$)之比。计算结果如表3所示。

$$\alpha_{\text{full}} = \frac{W_{\text{FWHM}}}{z} \quad (3)$$

Table 3 Full divergences of each part in Fig. 3 with or without laser cooling

name	divergence/mrad	
part a or part c	1.2	
part b	2.0	
part a' or part c'	considering isotopes	0.7
	not considering isotopes	0.68
part b'	considering isotopes	0.98
	not considering isotopes	0.95

从表3中可以出,经过3孔预准直后,在激光冷却作用下,铬原子束横向发散角最终可以达到0.5mrad,达到参考文献[16]中所描述的要求。又因为通过两侧孔的原子束在冷却作用前后具有对称性,这种对称性与否就直接反映出通过中心孔原子束部分的冷却效果。所以,这种3孔装置在激光汇聚铬原子沉积实验中既可以用来预准直原子束,又可以用来实时监测沉积用原子束的冷却效果。

4 结论

利用蒙特卡罗随机思想为每一条原子轨迹提供初始条件,在3孔预准直条件下,分析了横向激光冷却作用与否铬原子束位置分布情况。理论结果复现了参考文献[14]中描述的现象。另外,同位素的区分能够增加整个原子束横向分布的基底,同时使中心部分原子束的中心最大值降低9.5%,半峰全宽增加2.9%,使两侧部分的中心最大值增加25%,半峰全宽有略微的增加。

综上所述,通过3孔预准直装置两侧小孔的原子束部分只是用来间接地监测中心原子束部分的横向冷

却程度,它们中心最大值的降低与否或者半峰全宽的增加与否并不影响监测效果。由理论分析可知,同位素的区分与否对中心部分原子束的中心最大值和半峰全宽影响很小,这正是作者所期望的。

参考文献

- [1] CHU S. The manipulation of neutral particles [J]. *Reviews of Modern Physics*, 1998, 70(3): 685-706.
- [2] COHEN-TANNOUDJI C N. Manipulating atoms with photons [J]. *Reviews of Modern Physics*, 1998, 70(3): 707-720.
- [3] PHILLIPS W D. Laser cooling and trapping of neutral atoms [J]. *Reviews of Modern Physics*, 1998, 70(3): 721-741.
- [4] TIMP G, BEHRINGER R E, TENNANT D M, *et al.* Using light as a lens for submicron, neutral-atom lithography [J]. *Physical Review Letters*, 1992, 69(11): 1636-1639.
- [5] McCLELLAND J J, SCHOLTEN R E, PALM C, *et al.* Laser-focused atomic deposition [J]. *Science*, 1993, 262(5135): 877-880.
- [6] LU X D, LI T B, MA Y. Broadening of Cr nanostructures in laser-focused atomic deposition [J]. *Chinese Physics*, 2010, B19(12): 123201/1-123201/6.
- [7] ZHANG B W, MA Y, ZHAO M, *et al.* 3-D simulation of nano-grating by Cr atom beam deposition [J]. *Laser Technology*, 2011, 35(3): 364-367 (in Chinese).
- [8] McCLELLAND J J, ANDERSON W R, BRADLEY C C, *et al.* Accuracy of nanoscale pith standards fabricated by laser-focused atomic deposition [J]. *Journal of Research of the National Institute of Standards and Technology*, 2003, 108(2): 99-113.
- [9] LI T B. Nanometrology and transfer standard [J]. *Shanghai Measurement and Testing*, 2005, 32(1): 8-13 (in Chinese).
- [10] ZHENG C L, LI T B, MA Y, *et al.* Analysis of Cr atom trajectory and focusing deposition in the standing wave field [J]. *Acta Physica Sinica*, 2006, 55(9): 4528-4534 (in Chinese).
- [11] McCLELLAND J J. Atom-optical properties of a standing-wave light field [J]. *Journal of the Optical Society of America*, 1995, B12(10): 1761-1767.
- [12] ZHANG B W, MA Y, LI T B. Collimation of chromium atomic beam by means of 1-D Doppler laser [J]. *Laser Technology*, 2009, 33(4): 347-350 (in Chinese).
- [13] ZHANG B W, ZHANG W T, MA Y, *et al.* Collimation of chromium beam by one-dimensional Doppler laser with large collimating slit [J]. *Acta Physica Sinica*, 2008, 57(9): 5485-5490 (in Chinese).
- [14] ZHANG B W, LI T B, MA Y. One-dimensional Doppler laser collimation of chromium beam with a novel pre-collimating scheme [J]. *Chinese Optics Letters*, 2008, 6(10): 782-784.
- [15] METCALF H J, STRATEN P. *Laser cooling and trapping* [M]. Berlin: Springer-Verlag, 1999: 88.
- [16] CAI W Q, LI C W, HUO Y S, *et al.* Atom lithograph [J]. *Acta Physica Sinica*, 1999, 48(4): 611-619.