

文章编号: 1001-3806(2013)04-0421-04

基片衍射时原子速率对激光汇聚铬原子沉积的影响

张宝武¹, 支理想¹, 张文涛², 贾梦翔¹

(1. 中国计量学院 计量测试工程学院, 杭州 310018; 2. 桂林电子科技大学 电子工程学院, 桂林 541004)

摘要: 为了研究基片衍射对激光汇聚原子沉积的影响, 基于标量光学衍射理论, 采用数值计算对比分析了基片衍射与否两种情况下, 铬原子波包几率密度分布(表征了沉积条纹)特征值随原子波包速率的变化。结果表明, 当原子波包横向速率保持不变、而纵向最可几速率在考察范围内变化时, 基片衍射会使波包几率分布的最大值平均约有14.9%的增加量, 而半峰全宽平均约有14.3%的减小量; 当原子波包纵向最可几速率保持不变、而横向速率在考察范围内变化时, 基片衍射会使波包几率密度分布的最大值平均约有14.5%的增加量, 而半峰全宽平均约有16.9%的减小量。该研究成果为实验提供了有益的理论指导。

关键词: 激光技术; 基片衍射; 原子波包; 光学势阱

中图分类号: O43 文献标识码: A doi:10.7510/jgjs. issn. 1001-3806. 2013. 04. 002

Effect of atomic velocity at substrate diffraction on laser-focused Cr atom deposition

ZHANG Bao-wu¹, ZHI Li-xiang¹, ZHANG Wen-tao², JIA Meng-xiang¹

(1. College of Metrology & Measurement Engineering, China Jiliang University, Hangzhou 310018, China; 2. College of Electronic Engineering, Guilin University of Electronic Technology, Guilin 541004, China)

Abstract: In order to study the effect of substrate diffraction on laser-focused Cr atom deposition, simulation and comparative analysis were performed based on the scalar optical diffraction theory under the presence and absence of substrate diffraction. The variation of stripe value of atomic wave-packet probability distribution which stands for the deposited lines with different atomic wave-packet velocities was focused. The results show that because of substrate diffraction, the max value of wave-packet probability distribution has 14.9% average increase and the full width of half maximum (FWHM) has 14.3% average decrease for different longitudinal most probable velocities when transverse velocity remains constant; the max value of wave-packet probability distribution has 14.5% average increase and the FWHM has 16.9% average decrease for different transverse velocities when the most probable longitudinal velocity remains constant. The research results provide a richer theoretical guidance for the experiment.

Key words: laser technique; substrate diffraction; atomic wave-packet; optical potential

引言

激光汇聚铬原子沉积1维纳米光栅样板技术在国家纳米技术产业发展中具有非常重要的地位, 它

基金项目: 国家自然科学基金资助项目(10972210; 11064002); 浙江省钱江人才计划资助项目(2011R10094); 浙江省自然科学基金资助项目(LQ12E05018); 广西省自然科学基金资助项目(2012gxnsfaa53229)

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: 2012-12-01; 收到修改稿日期: 2013-01-05

为纳米测量仪器、纳米尺度器件的研究以及开发中纳米尺寸长度的精确测量问题的解决提供了一条崭新的思路, 将对开发新型纳米和微米结构标准尺寸元件起到极大的推动作用。相关的研究结果显示, 利用激光驻波场汇聚铬原子束沉积获得的1维纳米光栅结构可以用作原子力显微镜等纳米测量工具的计量标准^[1-2]。其主要原因在于这种技术使用的激光频率直接锁定在铬原子共振跃迁频率上, 汇聚沉积的纳米光栅结构在10⁻⁵量级上很好地复现了激光驻波场周期^[2]。不过这些研究同时指出, 虽然这种纳米光栅结构的平均节距非常准确, 但是在栅格线对上的单次测量会产生很大的不确定性, 其

主要的原因是目前制造的样品沉积线比较粗,这将限制它在某些场合的应用,例如作为线宽标准。为此,国内外众多研究小组首先从理论上进行了条纹精细化的探讨。至今,描述这种光刻技术的模型有经典粒子模型^[3]和量子波动模型^[4];原子射入汇聚驻波场的初始状态的均匀分布选取方法^[5]和蒙特卡罗随机选取方法^[6];平面1维仿真^[3,5]和3维仿真^[7];高斯激光驻波场模型^[3-4]和椭圆型驻波场模型^[8]等等。这些研究一定程度上反映了上述各种参量对原子光栅精细化的影响,但是这些理论结果都存在一个共同的不足之处,就是在考虑基片这个参量的时候,没有考虑基片边缘对汇聚激光场的衍射效应,因此,也就没有考虑这种衍射效应对沉积条纹特性的影响。为此,参考文献[9]和参考文献[10]中从直边衍射物理模型入手,对比讨论了基片衍射与否两种情况下高斯激光驻波场及其光学势阱的特性。在此基础上,作者通过数值计算进一步研究了特定激光参量,即不同原子纵向速率和横向速率情况下,基片衍射对沉积条纹(用原子波包几率密度分布来表征)的最大值和半峰全宽(full width half maximum, FWHM)的影响。

1 理论分析

如图1所示,为了获得对比度好、能够准确反映激光驻波场光学势阱周期的纳米光栅,实验中一般要求入射激光束的中轴线正好位于基片表面内,并且和基片上表面严格平行,即汇聚激光束被基片沿轴切掉一半。如图坐标,铬原子束沿着z轴自上往下传输,汇聚激光束沿着x轴自左向右传播。图1中K表示激光和基片刚刚相遇时的垂轴截面,定义为衍射屏(坐标为 $y_1-O_1-z_1$),F表示镜面所在的平面,E表示K和F之间垂直于激光中轴线的某一个考察平面(坐标为y-O-z)。整个系统的x轴原点设置在反射镜所在平面处,坐标 z_1 和z相互平行,并且K和F两个平面之间的距离记为 x_0 ,E和F两个平面之间的距离记为x。

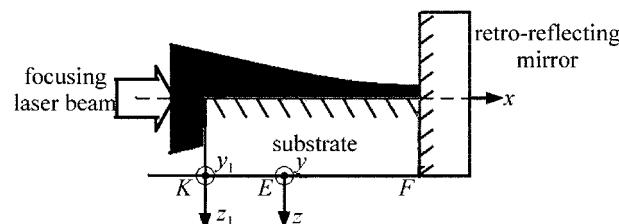


Fig. 1 Relative positions of laser, substrate and retro-reflecting mirror

从参考文献[9]中的理论分析可知,入射激光和其自身反射激光在考察面E上某一点P的复振幅 $\bar{E}_1(P)$ 和 $\bar{E}_2(P)$ 分别为:

$$\bar{E}_1(P) = \frac{\exp(i k x_1)}{i \lambda x_1} \iint_{\Sigma} \bar{E}_1(y_1, z_1) \times \exp\left\{\frac{i k}{2 x_1} [(z - z_1)^2 + (y - y_1)^2]\right\} dz_1 dy_1 \quad (1)$$

$$\bar{E}_2(P) = \frac{\exp(-ikx_2 + i\pi)}{i \lambda x_2} \iint_{\Sigma} \bar{E}_1'(y_1', z_1') \times \exp\left\{\frac{i k}{2 x_2} [(z - z_1')^2 + (y - y_1')^2]\right\} dz_1' dy_1' \quad (2)$$

式中,i是虚数单位; $k=2\pi/\lambda$ 是光波波数, λ 是光波波长;积分区域覆盖基片表面之上所有透光区 Σ : $y_1 \subset [-\infty, \infty]$, $z_1 \subset [-\infty, 0]$;(x_0, y_1, z_1)为入射激光起初衍射的任意一点Q的坐标,其复振幅记为 $\bar{E}_1(y_1, z_1)$,Q点相对于反射镜的镜像 Q' 必然是反射波的起始衍射点,其坐标记为 $(-x_0, y_1', z_1')$,复振幅记为 $\bar{E}_1'(y_1', z_1')$ 。如此,则考察平面上(x, y, z)位置处的P点分别与Q点和 Q' 点之间的垂直距离为 $x_1 = x - x_0$ 和 $x_2 = x + x_0$ 。这样,入射行波场和反射行波场相遇叠加后就会形成驻波场,其光强表达式为:

$$I(P) = [\bar{E}_1(P) + \bar{E}_2(P)][\bar{E}_1(P) + \bar{E}_2(P)]^* \quad (3)$$

式中,*表示共轭。将(3)式代入到汇聚原子的光势阱表达式^[11]中,可以得到衍射情况下激光驻波势阱表达式:

$$U(P) = \frac{\hbar \Delta}{2} \ln \left[1 + \frac{I(P)}{I_0} \frac{\Gamma^2}{\Gamma^2 + 4\Delta^2} \right] \quad (4)$$

式中, \hbar 为除以 2π 的普朗克常数, Δ 为激光频率失谐量, Γ 是原子跃迁的自然线宽, I_0 为原子跃迁的饱和强度。

按de Broglie关系,可以假定沿z轴方向传输的铬原子束对应的是一个平面波,原子在某一时刻出现在某一位置附近的几率分布在x方向上为一个高斯分布的波包^[4],其中心沿z方向具有一定的初始平均动量,则在坐标表象内波函数(记入时间相关因子)为:

$$\Psi(x, z, p_z, t) = \sqrt{\frac{1}{\sigma_x \sqrt{2\pi}}} \times \exp\left(-\frac{x^2}{4\sigma_x^2}\right) \exp(ik_{z_0} z - i\omega t) \quad (5)$$

式中, σ_x 为x方向上原子波包的初始宽度; k_{z_0} 为原子波包传播的波数; ω 为原子波包传播频率; t 为波

包传播时间。

参考文献[4]中详细推导了汇聚激光驻波场中原子波函数演化过程中满足的定态薛定谔方程,即:

$$\frac{\partial}{\partial z} \Phi(x, z) = \left(a \frac{\partial^2}{\partial x^2} + b \frac{i}{\hbar v_z} \right) \Phi(x, z) \quad (6)$$

式中, $a = \frac{i\hbar}{2mv_z}$; $b = \frac{-i}{\hbar v_z} U$; v_z 为原子波包的纵向速率; m 为原子质量; U 为(4)式表示的光学势阱, $\Phi(x, z)$ 为波函数中与时间无关的部分。

基于以上理论分析,参考文献[7]中设定好参数以后,即可仿真铬原子波包穿过汇聚激光驻波场的演化情况,最后所得的结果用原子波包相对几率密度 $p = |\Phi(x, z)|^2$ 来表示,即每一个位置处原子波包的几率密度以初始几率密度分布的最大值作为归一化条件。其中激光波长为 425.55nm, 束腰半径为 0.1mm, 功率为 3.93mW, 频率失谐量为 $2\pi \times 250\text{MHz}$ 。

2 模拟结果和讨论

图 2 是激光驻波场形成光学势阱的俯视图,其中,基片表面位于 z 方向上 0 位置处,反反射镜表面位于 x 方向上 0 位置处。图 2a 是衍射时的情况,图 2b 是非衍射时的情况。从图 2 中可以清楚地看出基片衍射对光学势阱的影响:在光轴方向上,衍射与否不会影响光学势阱形成驻波的特性;在垂直光轴方向上,衍射存在与否不影响光学势阱高斯分布的轮廓线特征,但是会使光学势阱产生强度的振荡,与此同时会使衍射情况的最大值向着原子束源方向移动,且略大于非衍射情况下的最大值。

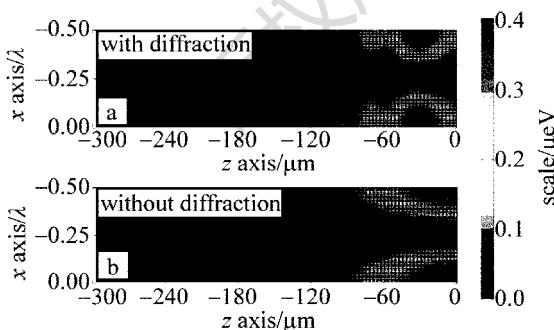


Fig. 2 Vertical view of optical potential of laser standing wave

在图 2 所示光学势阱中,原子波包几率密度沿着 $x = -0.25\lambda$ 这条线在 z 轴方向的变化情况如图 3 所示,其中还清晰地给出了这条线上光学势阱的轮廓线。仿真过程中原子波包纵向平均速率为 960m/s, 横向速率为 153.6mm/s (对应的发散角为 0.16mrad)。图 3 显示,基片会对光学势阱产生衍射,使之在 z 轴方向上出现一定的振荡,使其最大值

有所提高的同时还会发生一定的位移(图 3 中 $z = -50\mu\text{m}$ 位置处)。这样的结果就使得原子波包的几率密度相对于非衍射情况下有所提高(图 3 中 $z = 0$ 位置处)。这种变化情况可以由基片表面位置处 x 方向上原子波包几率密度分布来充分地显示,如图 4 所示,其中同时给出了光学势阱在这个平面内沿激光轴的强度分布。图 4 显示,衍射与否两种情况下原子波包几率密度分布轮廓(这表征了沉积条纹)有明显区别:衍射光学势阱会提高原子波包几率密度分布的中心值,使之变为非衍射情况下的 1.14 倍,减小原子波包几率密度分布的半峰全宽,使之变为非衍射情况下的 0.82 倍。

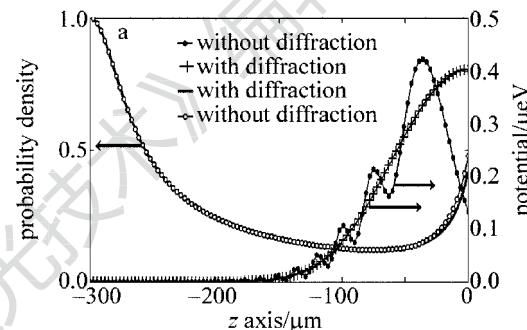


Fig. 3 Evolution of atom wave-packet before and after optical potential

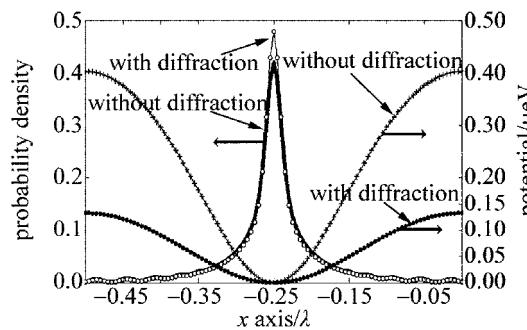


Fig. 4 Probability desity distribution of the atom wave-packet in x direction

图 5 中给出了衍射与否两种情况下,基片表面原子波包几率密度分布的最大值和半峰全宽随纵向

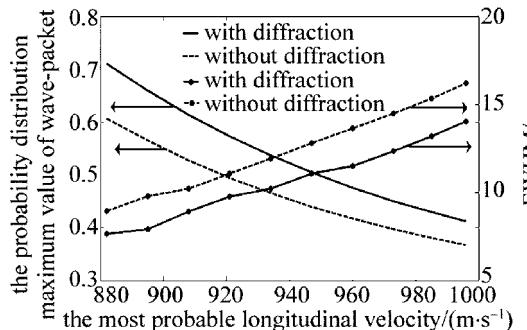


Fig. 5 Relationship between the probability distribution max value of wave-packet or FWHM and the most probable longitudinal velocity

最可几速率的变化,其中横向速率保持 153.6 mm/s 不变。

从图 5 中可以看出,不管基片衍射与否,在考察范围之内,纵向最可几速率的变化都会影响沉积条纹特征值:原子波包几率密度分布的最大值会线性地随着纵向最可几速率的增大而减小,而半峰全宽会随之线性地增加。不过,和非衍射情况相比,基片衍射时,同一个纵向最可几速率位置处,原子波包几率密度分布中心最大值平均约有 14.9% 的增加量,而其半峰全宽平均约有 14.3% 的减小量。

图 6 中给出了衍射与否两种情况下,基片表面原子波包几率密度分布中心最大值和半峰全宽随横向速率的变化,其中纵向速率保持 960 m/s 不变。

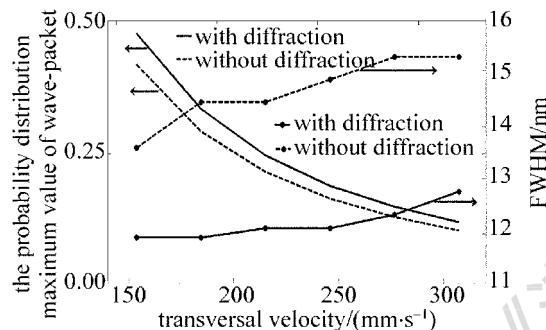


Fig. 6 Relationship between the probability distribution max value of wave-packet or FWHM and transverse velocity

从图 6 中可以看出,不管基片衍射与否,在考察范围之内,横向速率的变化都会影响原子波包几率密度分布的特征值:原子波包几率分布的最大值会随着横向速率的增大而线性地减小,而其半峰全宽会随之增大。不过,和非衍射情况相比,基片衍射时,每一个横向速率位置处,原子波包几率密度分布的最大值平均约有 14.5% 的增加量,而其半峰全宽平均约有 16.9% 的减小量。

3 结 论

基于标量光学衍射理论,理论分析了激光汇聚铬原子沉积技术中基片对汇聚激光场的衍射情况,以原

子波包理论为基础进一步分析了基片衍射影响与否两种情况下,铬原子波包几率密度分布的特征值随原子波包纵向最可几速率和横向速率的变化情况。仿真结果充分显示了基片衍射对原子波包几率密度分布的特征值的影响:和非衍射情况相比,基片衍射会提高原子波包几率密度分布的最大值,减小其半峰全宽。该研究结果为实验提供了更加丰富的理论指导。

参 考 文 献

- [1] LI T B. Nanometrology and transfer standard[J]. Shanghai Measurement and Testing,2005,32(1): 8-13 (in Chinese).
- [2] McCLELLAND J J,ANDERSON W R,BRADLEY C C,*et al.* Accuracy of nanoscale pitch standards fabricated by laser-focused atomic deposition[J]. Journal of Research of the National Institute of Standards and Technology,2003,108(2):99-113.
- [3] 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.
- [4] KIDAN T,ADLER J,RON A. Numerical simulations of an atomic beam focused by an optical potential[J]. Computers in Physics,1998,12(5):471-477.
- [5] ZHANG W T,ZHU B H,XIONG X M,*et al.* Characteristics of deposition for neutral atoms in laser standing wave with different velocities[J]. Acta Physica Sinica,2011,60(6):063202 (in Chinese).
- [6] ZHANG P P,MA Y,LI T B. Optimization of particle optics model for one-dimensional atom lithography [J]. Acta Optica Sinica,2011,31(5): 0514004 (in Chinese).
- [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] ZHANG W T,ZHU B H,HUANG J,*et al.* Chromium atom deposition in elliptical standing wave field[J]. Acta Physica Sinica,2011,60(10): 103203 (in Chinese).
- [9] ZHANG B W,MA Y,ZHANG P P,*et al.* Simulations of Gaussian laser standing wave based on diffraction by straight edge[J]. Laser Technology,2012,36(6): 810-813 (in Chinese).
- [10] ZHANG B W,ZHI L X,ZHANG W T. Simulations of optical potential formed resulted from Gaussian laser standing wave based on diffraction by straight edge[J]. Acta Physica Sinica,2012,61(18): 183201 (in Chinese).
- [11] ANDERSON W R,BRADLEY C C,MCCLELLAND J J,*et al.* Minimizing feature width in atom optically fabricated chromium nanostructures[J]. Physical Review,1999,A59(3): 2476.