文章编号: 0253-2239(2008)02-0381-06

量子模型分析激光驻波原子透镜的像差

赵 敏 王占山 马 彬 李佛生

(同济大学物理系精密光学工程技术研究所,上海 200092)

摘要采用量子模型对近共振激光驻波原子透镜会聚 Cr 原子束、形成纳米量级光栅结构的物理过程进行数值模拟。为提高原子透镜的成像质量,对各种像差,如衍射像差、球差、色差、及原子束发散角、原子磁支能级、原子同位 素等因素引起的像差进行了理论分析。模拟结果表明,相比粒子光学模型,量子模型能更加精确地描述原子会聚 结果,且能解释原子在驻波光场中的衍射现象。在各种像差中,原子束发散角是最主要的因素,其影响大于衍射像 差、球差、色差。原子的磁支能级、同位素等因素对像差影响很小,可以忽略不计。激光冷却准直原子束的方法可 以减小束发散角引起的像差,压缩原子速度 V。分布范围的方法可以减小色差。

关键词 量子光学;像差;原子透镜;激光驻波场;半峰全宽;衬比度

中图分类号 O413.1 文献标识码 A

Quantum Mechanical Analysis of Aberration in Cr Atom Lens Generated by a Laser Standing Wave

Zhao Min Wang Zhanshan Ma Bin Li Fosheng

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

Abstract A grating nanostructure generated by focusing Cr atoms with nearly resonant laser standing wave (SW) atom lens was numerically simulated using the quantum-mechanical model. To improve the imaging quality of atom lens, theoretical analysis was performed to describe the aberration of atom lens, including diffractive aberration, spherical aberration, chromatic aberration, the aberration caused by atom beam divergence angle, by magnetic sublevel structure and by isotopes. It was shown that quantum approach is more precise to describe atom focusing compared with particle-optics approach. The diffraction of atoms in laser standing wave (SW) field was explained with quantum approach. It was also shown in simulation results that aberration originates mainly from beam divergence, which is much larger than the diffractive aberration, the spherical aberration and the chromatic aberration. The aberration caused by magnetic sublevel structure and isotopes are small enough to be neglected. It is a useful method of collimating atomic beams with laser cooling to decrease the aberration caused by beam divergence. Chromatic aberration can be decreased by narrowing the statistical distribution of atomic velocity V_z .

Key words quantum optics; aberration; atom lens; laser standing wave field; full width at half maximum; contrast

1 引 言

与传统光刻不同^[1],原子光刻技术采用中性原 子进行沉积,不易受实验系统中电荷影响;原子的物 质波波长短,衍射效应小,光刻分辨力得以提高;大 截面积原子流易获得,可进行大面积原子刻印。近 年来,原子光刻研究领域的热点之一,是将激光驻波 场作为原子透镜,利用共振光的光压力会聚原子束, 在基片上形成纳米级周期性的一维光栅或二维点阵 结构^[2~6]。

由于受到各种实际因素影响,部分原子偏离理 想会聚点,形成原子透镜的像差,影响纳米结构的成 像质量。实际应用中,对像差的评价主要为沉积峰 半峰全宽(FWHM)及衬比度(沉积峰高度/本底高 度)。半峰全宽越小,衬比度越大,光栅条纹越细锐,

收稿日期: 2007-05-21; 收到修改稿日期: 2007-09-11

基金项目:上海市科技发展项目(0259nm034,0452nm029)资助课题。

作者简介:赵 敏(1975-),女,山东东阿人,讲师,博士研究生,主要从事冷原子光刻方面的研究。

E-mail: minminzhao@mail.tongji.edu.cn

导师介简:王占山(1963-),男,辽宁人,教授,博士生导师,主要从事短波薄膜光学元件设计、制备与检测;短波光学系统的设计与制备;原子光刻等方面的研究。E-mail: wangzs@mail.tongji.edu.cn

成像质量越高。已有粒子光学模型^[7~9]模拟激光驻 波原子透镜会聚原子的物理过程和像差,但这种方 法仅考虑原子作为经典粒子在经典电磁场中的运 动,忽略原子的波动性,无法对原子沉积过程中的各 种像差进行准确描述,更无法解释原子波动性带来 的像差。C.J.Lee^[10]采用量子模型模拟理想情况 下激光驻波场中的原子会聚过程,但并未对原子透 镜的像差进行分析。

采用量子模型,模拟激光驻波原子透镜对⁵² Cr 原子束的会聚过程,详细分析影响原子会聚的各种 像差,包括衍射像差、球差、色差、以及原子束发散 角、Cr 的能级精细结构、Cr 同位素等因素引起的像 差,提出了减小像差、提高沉积质量的方法。

2 基本原理

假设驻波光场由沿 *x* 方向入射的高斯激光光 束(束腰尺寸为 ω)及反射光束形成。⁵² Cr 原子沿 *z* 方向以速度 V_z 垂直进入驻波光场,如图 1 所示。





由于高斯光束的功率密度在激光传输轴线处最大,在远离轴线±1.5 ω 处迅速衰减到峰值的1%, 所以取3 ω 为原子与光场相互作用长度。取z=0在 原子刚进入驻波光场处,光功率密度峰值出现在 $z=1.5\omega$,取x=0在驻波光场波节处。驻波光场 的功率密度可描述为

$$I(x,z) = I_{\max} \exp\left[-2 \frac{(z-1.5\bar{\omega})^2}{\bar{\omega}^2}\right] \times \cos^2\left[k(x-\lambda/4)\right].$$
(1)

当驻波光场频率 ω_{L} 接近⁵² Cr 原子的⁷ S₃ →⁷ P⁰₄ 共振线频率 ω_{A} 时(对应的真空中共振波长为 425.55 nm),原子在 x 方向受到偶极梯度力 $F = -\hbar\Delta \nabla \Omega^2/(4\Delta^2 + 2\Omega^2 + \Gamma^2)$ 作用。其中 Γ 为自发辐 射线宽, Ω 为光场拉比频率,失谐量 $\Delta = \omega_{\text{L}} - \omega_{\text{A}}$ 。由 于驻波光场沿 x 方向的 $\nabla \Omega^2$ 远大于 z 方向,因此 x 方向原子所受偶极梯度力远大于 z 方向,相差约 3 个数量级,可以近似认为原子在 z 方向作匀速运动,即 $z=V_zt$ 。在大失谐驻波光场中,可忽略自发辐射 对原子波函数的影响,光势场可描述为^[10]

$$V(x,z) = \frac{\hbar\Delta}{2} \left\{ 1 + \frac{\Omega_{\max}^2}{\Delta^2} \exp\left[-2 \frac{(z-1.5\bar{\omega})^2}{\bar{\omega}^2}\right] \times \cos^2\left[k\left(x-\frac{\lambda}{4}\right)\right] \right\}^{1/2}, \qquad (2)$$

式中 Ω_{max} 为驻波光场波腹处的拉比频率, λ 为光波波 长。由上式可见,拉比频率 $\Omega = \Omega_{\text{max}} \cos[k(x-\lambda/4)]$ 使 势场作周期性变化。当 $\Delta > 0$ 时,势阱最小值出现在 $x = 2n\lambda/4$ 处,此处为激光驻波场波节;势阱最大值 出现在 $x = (2n+1)\lambda/4$ 处。因此偶极梯度力可将原 子以 $\lambda/2$ 为周期进行囚禁。这就是激光驻波原子透 镜的基本原理。

3 理论模型的建立

3.1 量子模型

量子模型引入原子波动性,模拟原子在驻波光场中的波函数及原子密度分布的变化。为简化研究,当 驻波光场频率 ω_L 接近 Cr 原子的⁷S₃ \rightarrow ⁷P⁴₄ 共振线 频率 ω_A 时,⁵²Cr 原子可被认为是二能级系统,仅有 一个基态⁷S₃ 与一个激发态⁷P⁴₄。原子态函数在驻 波光场中的演化过程可用含时薛定谔方程描述^[10]:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi_{g}(x,t) = \left[\frac{\hat{p}_{x}^{2}}{2m} + V(x,t)\right] \Psi_{g}(x,t). \tag{3}$$

由于实验中的热原子束自炉口喷射出来,其*x* 方向尺寸远大于驻波光场周期 $\lambda/2$,所以取进入驻 波光场前原子初始态函数为平面波 $\Psi(x,t=0) \sim \exp(i\mathbf{k}_{0x},x)$,其中 \mathbf{k}_{0x} 为*x* 方向的初始原子物质波 波矢。

鉴于实验条件的复杂性,该含时薛定谔方程难 以得到解析解,本文采用一维 Crank-Nicolson 方 法^[11]求其数值解,得到原子密度分布图样。

3.2 原子透镜对理想原子的会聚

理想原子即 x 方向速度为 0、z 方向速度单一、忽略同位素及磁支能级等因素影响的原子。图 2(a)与 图 2(b)分别为正失谐 Δ =+200 MHz 与负失谐 Δ =-200 MHz时的理想⁵² Cr 原子会聚结果,其余 参量分别为 V_z =926 m/s, $\bar{\omega}$ =195 μ m, Ω_{max} = $\Gamma \sqrt{I_{max}/(2I_s)}$ =0.564×10³ MHz。其中, I_{max} 为入 射激光最大功率密度, I_s 为饱和功率密度。由图 2 可见,正失谐时,⁵² Cr 原子以 $\lambda/2$ 为周期会聚在驻波 光场波节处($x = 2n\lambda/4$);负失谐时,原子会聚在驻 波光场波腹处[$x = (2n+1)\lambda/4$]。这是因为正失谐 时,作用于原子的偶极梯度力指向光强梯度▽Ω² 的 相反方向;负失谐时正好相反。



图 2 量子模型中原子密度分布的演化(黑色对应最大原子密度)。(a) Δ =+200 MHz, (b) Δ =-200 MHz Fig. 2 Evolution of the atomic density as predicted by quantum mechanics (black color corresponds to maximum density). (a) Δ =+200 MHz, (b) Δ =-200 MHz

3.3 量子模型与粒子光学模型的比较

与量子模型不同,粒子光学模型忽略原子的波动性,假定原子在激光驻波光场中的运动服从经典粒子运动规律。由 F=-▽U,得到原子在驻波光势阱中所受作用力^[9]

$$F = -\frac{\hbar\Delta k\Omega_{\max}^2}{4\Delta^2 + \Gamma^2} \exp\left[-2\frac{(z-1.5\bar{\omega})^2}{\bar{\omega}^2}\right] \sin(2kx),$$
(4)

采用四阶龙格-库塔算法进行数值计算,分别求得每 一个原子在势场中运动 *t* 时间后所处的末位置 *X(t)*,由此得到原子的运动轨迹,以及密度峰值 位置。

100

50

0

-50

-100

0

0.1

x position /mm

图 3 与图 4 分别为粒子光学模型及量子模型中

(a)

0.3

z position /mm

0.4

0.5

0.2

理想⁵²Cr 原子的会聚结果,实验参量与图 2(a)相同。由图 3(a)可见,粒子光学模型中,会聚峰出现在 z_f=259 μm 处。图 3(b)显示,在 z=z_f 处,原子密度呈现δ函数分布;在会聚峰之后 42 μm 处,原子密度峰分裂成两个。由图 2(a)及图 4 可见,量子模型中,会聚点出现在高斯光束传输轴线 z=1.5ω处,峰半峰全宽增加为 5.3 nm,衬比度降低为 15:1。在会聚峰之后,原子密度分布出现明显的干涉现象。两种模拟方法的区别在于粒子光学模型将原子作为经典粒子,量子模型则引入原子的波动性。综上所述可见,相比粒子光学模型,量子模型能更加精确地描述原子会聚结果,有必要利用量子模型进行详细探讨。





Fig. 3 Atomic density distribution in SW as predicted by particle optics approach (normalized). (a) Trajectory of atoms. Density peak appears at $z_f = 259 \ \mu m$, (b) atomic density distribution at $z = z_f$ and $z = z_f + 42 \ \mu m$





Fig. 4 Atomic density distribution at $z = 1.5\tilde{\omega}$ and z =1. $5\tilde{\omega}$ +42 μ m in the laser standing wave predicted by quantum mechanics

量子模型中的像差分析 4

原子与光势场的非理想性导致部分原子偏离理 想会聚点,因而会聚峰半峰全宽增加,形成原子透镜 的像差。

4.1 衍射像差

与图 3(b)相比,图 4 中的原子会聚峰半峰全宽 有明显展宽,这种展宽称为原子透镜的衍射像差,它 来自原子固有的波动性,无法消除。

4.2 球差

若作用于理想原子的势阱为

 $V(x,t) = C_1 + C_2 \exp[-2(z-1.5\bar{\omega})^2/\bar{\omega}^2]x^2$, 如图 5 所示,为抛物线型。其中,系数 C₁、C₂ 保证在势 场最小值 x = 0 附近,抛物线型势场与驻波光势场差 别很小,对近轴原子的影响可忽略不计,会聚结果见 图 6,其余参量与图 4 相同。图 6(a)、图 6(b)显示,会 聚峰仍然出现在 $z=1.5\omega$ 处,半峰全宽为 3.4 nm,衬



比度为 23:1。比较图 4 与图 6(b)可见,相比抛物线 型势场,驻波光势场中会聚峰的本底与半峰全宽较 大。这是由于在非抛物线型势场中,V(x,t)可以看 作由抛物线型势场及高阶微扰项共同组成,因此远 轴原子(从远离势能最低点 $x = 2n\lambda/4$ 处入射的原 子)的实际运动轨迹偏离了由近轴方程得到的运动 轨迹,形成扩散,这种像差被称为球差^[8]。由于原子

束截面积远大于驻波光场周期,不可能借助近轴情

形来减小球差,因此球差在实验中无法完全消除。





Fig. 5 Comparison of parabolio potential and standing wave optical potential

以上讨论的像差来源于势场非理想性。此外, 实验中原子所具有的非理想性,包括纵向及横向速 度的统计分布、原子的同位素等因素,均对原子会聚 有影响。

4.3 热原子纵向速度统计分布造成的像差

实验所用原子来自于高温炉,其Vz并不单一, 而是遵循麦克斯韦-玻尔兹曼(Maxwell-Boltzmann) 统计分布[9]:



图 6 抛物线型势场内的原子分布情况(Δ =+200 MHz)。(a)原子密度分布的演化,(b) z=1.5 ω 处原子密度分布 Fig. 6 Atomic density distribution in harmonic potential. $\Delta = \pm 200$ MHz. (a) Evolution of the atomic-density distribution, (b) atomic density distribution at $z=1.5\tilde{\omega}$

(5)

图 7 为热原子纵向最可几速率为 926 m/s 时的 原子密度分布,其余参量同图 4。由图可见,会聚峰 在 x 方向与 z 方向上的半峰全宽分别为 10 nm 和 250 μ m,会聚面 $z=1.5\omega$ ψx 方向的衬比度为8:1。 比较图 2(a)、图 4 与图 7 可以发现,会聚峰在 z 方向 的半峰全宽增加明显,x 方向的衬比度明显降低,本 底增加。这是因为原子具有单一纵向速度 V_z 时, 虽然存在球差,近轴原子仍然可以同时到达势场最 小值 $x = 2n\lambda/4$ 处。引入 V_z 的统计分布后,不同 V_z 的原子到达 $x = 2n\lambda/4$ 所走过的 L_d 不同(L_d 为原子 在驻波光场中 z 方向走过的距离),因而会聚峰在 z方向的半峰全宽增加;在 L_d 一定的情况下,不同 V_z 的原子并不能都到达 x = 0 处,许多原子沉积在势 场最小值周围,成为密度分布的本底。实验中可通 过压缩 V_z 分布范围的方法减小 V_z 统计分布造成 的像差^[8]。



图 7 驻波光场内的热原子密度分布。(a)原子密度分布的演化,(b) z=1.5应处原子密度分布 Fig. 7 Atomic density distribution in standing wave optical potential with V_z in Maxwell distribution. (a) Evolution of the atomic density distribution, (b) atomic density distribution at z=1.5应

4.4 热原子的束发散角造成的像差

从原子炉出射的热原子束在传播方向不可避免 地会有束发散角,即存在初始横向速度 V_x,满足高 斯分布^[9]

$$f(V_x) = \left(\frac{m}{2\pi k_{\rm B} T_{\rm c}}\right)^{1/2} \exp\left(-\frac{m V_x^2}{2k_{\rm B} T_{\rm c}}\right), \quad (6)$$

发散角越大,原子束的初始横向速度 V_x 与横向温 度 T_c 越大。图 8(a)为不同热原子横向温度下的沉 积结果,图 8(b)为横向温度为 35 μ k 时的原子沉积结 果,其余实验参量同图 4。横向温度为 2 μ k、35 μ k、 120 μ k 时的沉积条纹线宽与衬比度分别为 7.9 nm 和 16.4:1、23.7 nm 和 7.6:1、44.7 nm 和 8.7:1;原 子横向温度为2mk时的沉积峰完全消失,本底显 著增加。由此可见,随着原子束发散角的增大,会聚 峰的半峰全宽明显增加,衬比度降低。

比较图 4、图 6、图 7 与图 8 可知,束发散角造成 的像差远大于衍射像差、球差及原子纵向速度统计 分布造成的像差。对原子束进行机械准直,然后利 用多普勒冷却和偏振梯度冷却等方法^[12]对原子束 进行高度准直,是降低此类像差的有效方法之一。 经机械准直后,原子的横向温度可达到 mk 量级,Cr 原子的多普勒冷却极限为 120 μk,偏振梯度冷却及 速度选择相干布居捕陷冷却可达到更低的横向冷却 温度,满足原子光刻光栅对分辨力的要求。



图 8 不同横向温度对 $z=z_f$ 处(a),横向温度为 35 μ k (b)的原子会聚结果 Fig 8 Atomic density distribution at the focal plane $z=z_f$ under various $T_c(a)$, $T_c=35 \mu$ k (b)

⁵²Cr 的⁷S₃能级具有磁支能级(J=3, m=0, ±1, ±2, ±3),⁷P₄能级具有磁支能级(J=4, m= 0, ±1, ±2, ±3, ±4)。不同磁支能级具有不同 的粒子布居数,能级跃迁的共振波长不同,因此原子 与驻波光场的相互作用偶极梯度力也不同,造成会 聚峰展宽。若驻波光场由两束线偏振光形成,则能 级跃迁只考虑 Δm=0 情形,跃迁概率分别为 m=0 时为 4/7, m=±1 时为 15/28, m=±2 时为 3/7, m=±3时为 1/4。⁷S₃的不同磁支能级上的粒子布 居数分别为 m=0 时为 0. 2083, m=±1 时为 0. 2083, m=±2 时为 0. 1459, m=±3 时为 0. 0417。 根据原子受磁场作用所引起的附加能量, ΔE = $Mg\mu_{\rm B}B$ 磁支能级造成的附加频率只有原子共振频 率 ω_0 的 10⁻³数量级。由此可见,磁支能级对沉积 峰的展宽影响可以忽略。

此外,⁵²Cr 在天然 Cr 中的丰度为 84%,其同位 素与本工作所述的驻波光场不耦合,这部分原子由 于不受力,在会聚中形成密度背景,减小图形的衬比 度。

5 结 论

在原子光刻中,量子模型比粒子光学模型能更加 精确地描述原子会聚峰的位置及会聚峰的半峰全宽 等结果。采用量子模型,模拟了波长为425.55 nm的 激光驻波原子透镜对⁵² Cr 原子束的会聚沉积过程, 详细分析了原子透镜的各种像差。结果表明,在各 种像差中,光势阱的非抛物线型是球差产生的主要 原因,衍射像差由原子固有的波动性引起,色差和束 发散角带来的像差来源于热原子束的非理想性,原 子磁支能级与同位素的存在对沉积结果影响不大。 此外,在各种像差中,束发散角引起的像差远大于其 他像差。在原子进入光场前采用多普勒冷却及偏振 梯度冷却方法对原子束进行高度准直,是降低此类 像差的有效方法。

参考文献

- 1 Zhang Dognqing, Wang Xiangzhao, Shi Weijie et al.. New technique for aberation in-situ measurement of a lithographic projection system[J]. Acta Optica Sinica, 2006, 26(5): 680~ 684
- 张冬青,王向朝,施伟杰等.光刻机投影物镜的像差原位检测新 技术[J].光学学报,2006,**26**(5):680~684
- 2 J. J. McClelland, R. E. Scholten, E. C. Palm et al.. Laserfocused atomic deposition[J]. Science, 1993, 262(5153): 877~ 880
- 3 Windell H. Oskay, Daniel A. Steck, Mark G. Raizen. Observation of cumulative spatial focusing of atoms[J]. *Phys. Rev. Lett.*, 2002, **89**(28): 283001-1~283001-4
- 4 E. te Sligte, B. Smeets, R. C. M. Bosch *et al.*. Progress towards atom lithography on iron[J]. *Microelectron. Engng.*, 2003, 67~68: 664~669
- 5 Zeng Qinglin, Huo Yunsheng, Cai Weiquan *et al.*. Atom lithography in red far-detuning high-power standing wave[J]. *Acta Optica Sinica*, 2001, 21(8): 918~922
 曾庆林, 霍芸生, 蔡惟泉等. 红移高功率大失谐驻波光场原子光 刻[J]. 光学学报, 2001, 21(8): 918~922
- 6 Huo Yunsheng, Cai Weiquan, Zeng Qingling et al.. Study on a chromatic atom lens for thermal atom beams [J]. Chin. J. Lasers, 2001, A28(3): 245~248
 霍芸生,蔡惟泉,曾庆林等.用于热原子束的消色差原子透镜的研究[J]. 中国激光, 2001, A28(3): 245~248
- 7 J. J. McClelland. Atom-optical properties of a standing-wave light field[J]. J. Opt. Soc. Am. B, 1995, **12**(10): 1761~1768
- 8 K. K. Behringer, M. Prentiss, G. L. Timp *et al.*. Calculation of atomic positions in nanometer-scale direct-write optical lithography with an optical standing wave[J]. J. Opt. Soc. Am. B, 1994, **11**(7): 1166~1176
- 9 Ma Bin, Ma Yan, Zhao Min *et al.*. Simulation of sodium atom deposition pattern in a laser standing wave field[J]. *Acta Physica Sinica*, 2006, 55(2): 667~672
 马 彬,马 艳,赵 敏等. 激光驻波场中钠原子沉积图样的理
- 论研究[J]. 物理学报, 2006, **55**(2): 667~672
- 10 Chang Jae Lee. Quantum-mechanical analysis of atom lithography [J]. Phys. Rev. A, 2000, 61: 063604-1~063604-9
- 11 William H. Press, Saul A. Teukolsky, William T. Vetterling *et al.*. Numerical Recipes in C [M]. New York: Cambridge University Press, 1992
- 12 William D. Phillips. Laser cooling and trapping of neutral atoms [J]. Reviews of Modern Physics, 1998, 70(3): 721~741