

一维原子光刻经典模型的优化

张萍萍 马 艳 李同保

(同济大学物理系, 上海 200092)

摘要 利用蒙特卡罗随机思想选取轨迹初始条件, 将铬原子束同位素、纵向速度分布和横向高斯发散角等因素综合考虑, 对原子光刻经典粒子模型进行了优化。将优化后的模型与原模型进行了对比, 同时定性分析了表面生长效应。利用新模型在不同激光功率下对沉积过程进行数值模拟, 结果表明模拟结果与实验符合得很好。进一步分析了失谐对沉积的影响, 当失谐选取 $250 \times 2\pi$ MHz 时, 可得到较好的沉积结果。该模型较好地整合了沉积过程中的各个影响因素, 这为正在进行的实验提供了更好的理论基础。

关键词 激光光学; 原子光刻; 纳米计量; 粒子光学; 蒙特卡罗方法

中图分类号 O436 **文献标识码** A **doi**: 10.3788/AOS201131.0514004

Optimization of Particle Optics Model for One-Dimensional Atom Lithography

Zhang Pingping Ma Yan Li Tongbao

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

Abstract Particle optics model for one-dimensional atom lithography is optimized with Monte-Carlo method. The initial condition of each trajectory is stochastically selected. The effects of isotope, longitudinal velocity distribution and transverse Gaussian divergence are systematically evaluated. Optimized model is compared with original model and the surface growth effect is described qualitatively. Excellent agreement is seen between numerical simulation and experiment under different laser powers. Furthermore, the effect of detuning is also discussed. It is found that good result can be obtained when the detuning is $250 \times 2\pi$ MHz. The model presented takes all the factors into consideration and it provides better theoretical guide for current experiment.

Key words laser optics; atom lithography; nanometrology; particle optics; Monte-Carlo method

OCIS codes 140.3325; 220.3740; 220.4241

1 引 言

对光学操纵粒子的研究极大地促进了纳米微结构制作的发展, 其中一个重要应用即为原子光刻。原子光刻是一种新型的沉积型光刻方法, 它利用激光光场作为掩膜, 能制作出与光场形状一致的纳米微结构。与传统刻蚀型光刻技术相比, 原子光刻技术的独特优越性在于: 1) 原子的德布罗意波长很小, 衍射效应对纳米结构的影响大为减弱; 2) 沉积过程中, 原子的电中性可以有效地阻止化学反应的发生, 从而减小对基板的破坏。经研究, 基于这种技术的

一维激光驻波场会聚铬原子沉积^[1]所制作的以半波长为周期的纳米光栅, 可用作原子力显微镜等纳米测量工具的计量标准^[2]。

研究激光驻波场 Cr 原子沉积过程的模型主要有经典粒子模型^[3~7]及量子模型^[8~10]。在低功率大失谐实验条件下, 一般采用经典粒子模型。本文基于粒子光学模型, 利用蒙特卡罗随机思想为铬原子轨迹提供初始位置、纵向速度、原子束发散角以及判断是否为同位素等初始条件, 更为精确地描述出原子沉积过程。

收稿日期: 2010-10-21; **收到修改稿日期**: 2010-12-15

基金项目: 国家自然科学基金(10804084)资助课题。

作者简介: 张萍萍(1987—), 男, 博士研究生, 主要从事原子光刻方面的研究。E-mail: zpp_789@163.com

导师简介: 李同保(1942—), 男, 中国工程院院士, 博士生导师, 主要从事原子操纵及纳米计量等方面的研究。

E-mail: tbli@tongji.edu.cn

2 理论模型

2.1 经典粒子光学模型

一维激光驻波场会聚 Cr 原子沉积如图 1 所示^[1], 横向激光冷却准直好的原子束在通过由激光驻波场(Standing wave)形成的原子透镜时, 原子会在驻波场偶极力的作用下向低势阱处会聚, 在基片上沉积形成周期性纳米结构(Deposited lines)。假设原子束沿 OZ 轴入射, 激光驻波场沿 OX 轴分布, 此时高斯激光驻波场光强的分布为

$$I = I_0 \sin^2(kx) \exp(-z^2/2\omega_0^2), \quad (1)$$

式中 $k = 2\pi/\lambda$ (λ 为激光波长), ω_0 为激光束腰宽度, I_0 为高斯光中心处光强。

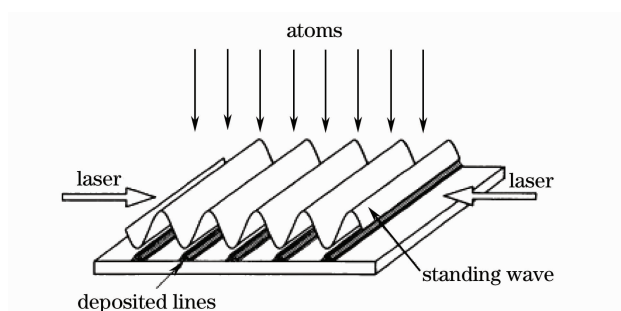


图 1 激光驻波场会聚 Cr 原子沉积示意图

Fig. 1 Geometry for laser-focused atomic deposition

根据量子理论分析^[8], 在低功率、大失谐实验条件下, 激发态原子在激光驻波场中的比例不足 10%, 所以此时可以忽略激发态对沉积的影响。基态原子所受到的光学势能为

$$U = (h\Delta/2) \ln(1 + p), \quad (2)$$

式中 $h = h/2\pi$, h 为普朗克常量, Δ 为失谐。 $p = (I/I_s)[\Gamma^2/(\Gamma^2 + 4\Delta^2)]$ 为饱和参数, 其中 Γ 为自发辐射率, I_s 为饱和激光光强。

根据经典粒子理论, 二能级原子在激光驻波场中的运动轨迹方程为^[3]

$$\begin{cases} x' = \alpha \\ \alpha' = \frac{1 + \alpha^2}{2(E_0 - U)} \left(\alpha \frac{\partial U}{\partial x} - \frac{\partial U}{\partial z} \right), \end{cases} \quad (3)$$

式中 $x' = dx/dz$, α 为初始发散角, $E_0 = mv^2/2$, m 为原子质量, v 为原子的纵向速度。

2.2 蒙特卡罗随机思想提供初始条件

文献[3~7]利用的经典粒子模型或多或少涉及一些随机思想, 但在原子束初始状态选取上一般只是定性离散地考虑各个参量, 难以综合考虑各个初始参量, 另外, 这种思想模型难以考虑同位素效应。本文将依据蒙特卡罗随机思想, 用一组随机数来表示原子初始状态。此模型的优点是综合考虑了表征

原子初始状态的各个参量, 并包含了同位素效应。本文用 $(x_i, v_i, \alpha_i, T_i)$ 来表示每条轨迹的初始条件。其中 x_i 表示原子进入光场的初始位置。在文中, 如果对 n 个周期内的沉积进行模拟, 那么初始位置 x_i 应选择 $[-0.25m\lambda, 0.25m\lambda]$ 当中的随机数。 v_i 表示初始纵向速度, α_i 表示初始发散角。在原子光刻实验中, 原子纵向速度满足麦克斯韦-玻耳兹曼分布律, 其最可几速率与原子炉温度有关。横向速度分布符合高斯分布, 发散角应为横向速度与纵向速度的比值。纵向速度 v_i 与发散角 α_i 满足联合分布函数^[3]

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

式中 v_0 为原子纵向最可几速率,

$$\alpha_0 = \alpha_{\text{FWHM}} / (2\sqrt{\sqrt{2}-1}),$$

α_{FWHM} 为激光冷却实验中原子束发散角分布的半峰全宽。

为了选取符合(4)式分布的随机数序列, v_i 与 α_i 按如下思路进行: 首先在三维空间中选取随机点 (v_i, α_i, P_i) , 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。这样即可产生符合(4)式分布的随机数序列。

铬元素各自然同位素中, ^{52}Cr 原子所占比重最大, 其丰度约为 84%, 剩下的同位素如 ^{53}Cr , ^{54}Cr 等总和只占 16%。本文的研究对象是能与会聚激光相互作用的原子 ^{52}Cr , 其他同位素均不与激光驻波场发生作用。为此, 首先选取均匀分布于 $[0, 1]$ 之间的随机数 r , 如果 $r \in [0.16, 1]$, 则认为此时产生的原子为 ^{52}Cr , 原子的轨迹方程按(3)式来计算; 如果 $r \in [0, 0.16)$, 此时认为原子的属性为 ^{52}Cr 的同位素。由于同位素不与光场耦合, 在这里也忽视重力的作用, 故同位素的运动轨迹应是一条直线, 其运动轨迹应满足方程 $x' = \alpha$ 。

这样, 通过蒙特卡罗随机方法确定了每条轨迹的初始条件 $(x_i, v_i, \alpha_i, T_i)$ 之后, 即可通过轨迹方程来追踪原子运动。

3 模拟结果

3.1 优化模型与原模型的对比

激光驻波场 Cr 原子沉积过程中, ^{52}Cr 原子的工作谱线对应共振能级跃迁 $^7S_3 \rightarrow ^7P_1^0$, 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 $I_s = 85 \text{ mW/cm}^2$ 。会聚激光束入射功率为

$P=7.86$ mW(对应高斯激光驻波场中心光强为 $I_0 = 1.37 \times 10^3$ mW/cm²),失谐为 $\Delta=250 \times 2\pi$ MHz,束腰半径 $w_0=60$ μm 。

从高温原子炉中泄流出来的铬原子束,其纵向最可几速率可表示为 $v = \sqrt{3k(t+273)/m}$,其中 k 为玻耳兹曼常数, t 为原子炉温度, m 为原子质量。在实验中,原子炉温度通常设定为 1550 $^{\circ}\text{C}$,所对应的最可几速率 $v_0 \approx 950$ m/s。铬原子束的准直是通过一维多普勒^[11]或亚多普勒激光冷却^[12]的方式来实现的,本文选取最佳结果为 $\alpha_{\text{FWHM}}=0.16$ mrad。

图 2(b)显示了蒙特卡罗随机思想模型中 30 条原子轨迹。为了对比,图 2 同时给出了一般离散化

思想模型中原子轨迹[图 2(a)]。从中可以看出在一般离散化思想模型中,初始条件的选择是很局限的:轨迹的初始位置的间隔是均匀的,纵向速度一般是一个固定值,横向发散角的分布只是选取几个离散的值,并不能体现高斯分布这一特性。另外,这种模型无法体现同位素效应。而蒙特卡罗随机思想模型中,初始条件都是根据实验条件随机选择的,不仅能将纵向速度的麦克斯韦玻耳兹曼分布、横向发散角的高斯分布特性以及同位素效应[图 2(b)中粗实线描述的轨迹]都能体现出来并考虑进去,而且还符合不确定的原子行为。因此,这种思想模型更能精确地反映原子的沉积过程。

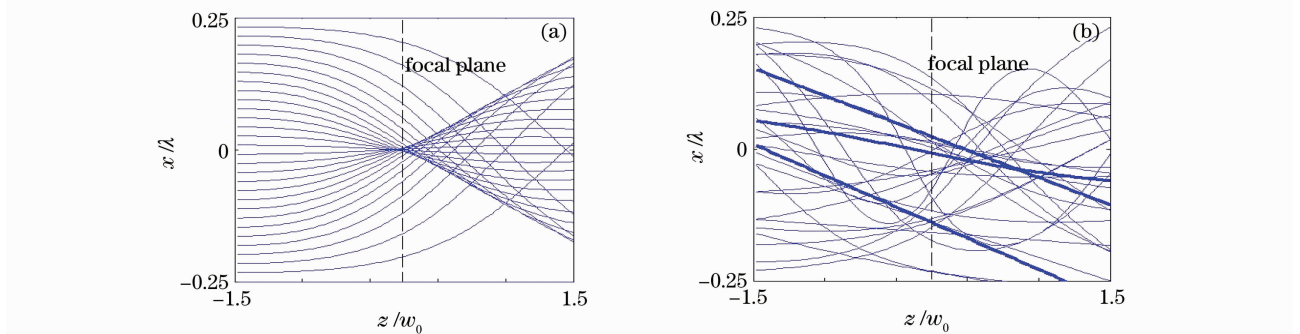


图 2 原模型与优化后模型的对比。(a)原模型,(b)优化后的模型

Fig. 2 Comparison between original model and optimized model. (a) original model, (b) optimized model

实验中,原子数与沉积时间成正比,为了显示纳米结构在不同时间段的生长情况,将基片设置在会聚驻波场中心,在三个周期的长度上,分别选取了

10000,30000,50000 和 100000 个原子来模拟沉积条纹,结果如图 3 所示。所得的半峰全宽(FWHM)分别为 112,84,60 及 58 nm。与原模型模拟结果相

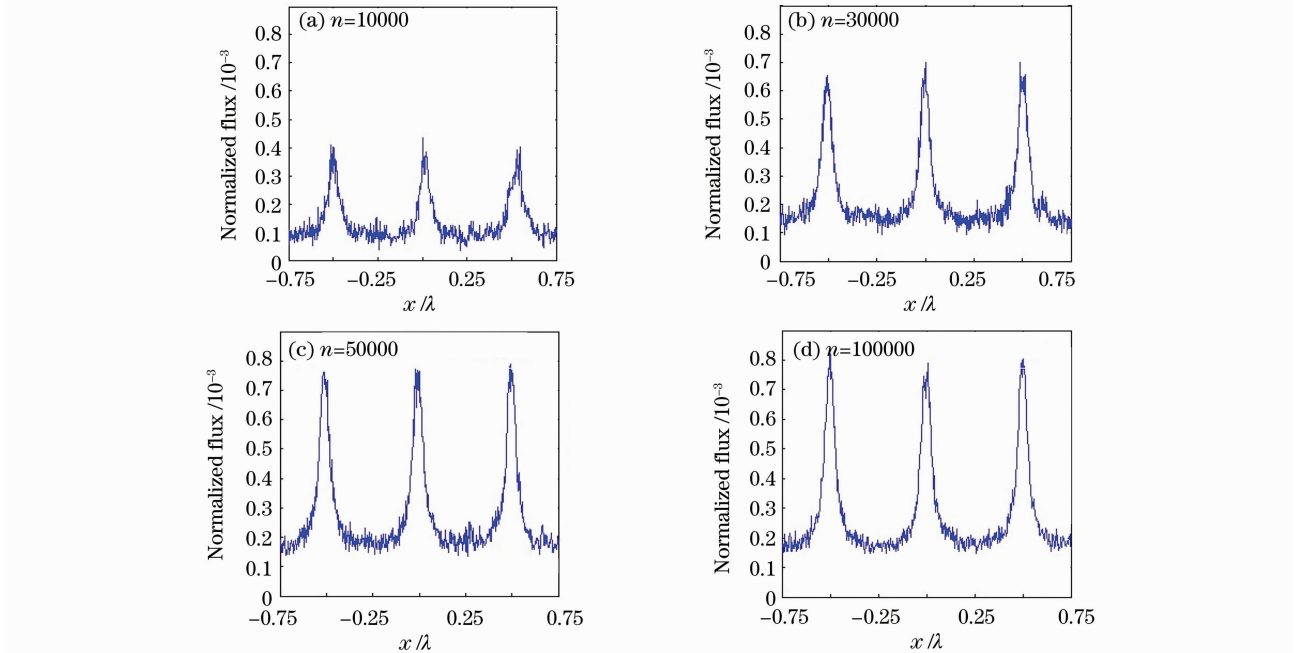


图 3 不同轨迹条数下沉积情况

Fig. 3 Flux distributions with varying trajectories

比,模拟所得基底较厚,这是由于考虑了同位素影响的缘故。当沉积原子数为 10000 时,所得微结构轮廓粗糙,高度较小;当沉积原子数增加时,微结构轮廓变平滑,高度增加。这说明沉积的时间越长,所得结果越好。如图 3(d)所示,当沉积原子数为 100000 时,归一化的原子通量分布与 $n=50000$ 时[图 3(c)]并无显著差别。这说明由于基板表面生长机制的作用,微结构的质量并不是随着沉积原子数增加一直改善。当在一个周期内的沉积原子数大于 16000 时,所得微结构形状将保持一致。

3.2 激光功率对沉积的影响

不同激光功率下,沉积条纹的半峰全宽变化如图 4 所示。为了进行比较,同时给出了美国 NIST 的实验结果^[4]。参数与 3.1 节相同,基板位置位于高斯光强中心处。在一个周期内,沉积原子数 $n=20000$ 。由图 4 可以看出,当激光功率小于 10 mW 时,半峰全宽显著减小;当激光功率大于 10 mW 时,半峰全宽逐渐递增。这种趋势来源于不同激光功率所形成的不同透镜模型:小功率下(小于 10 mW)原子透镜属于薄透镜,此时原子透镜焦距较大,聚焦平面远离基板,这对沉积影响很大,半峰全宽变化显著;当功率增加时,聚焦平面逐渐向基板移动,当功率为 10 mW 时,聚焦平面刚好在基板附近,此时沉积质量最好。大功率下(大于 10 mW)原子透镜属于沟道化厚透镜,此时,原子透镜聚焦能力变强,焦距变小,并会在高斯光束范围内形成多个聚焦平面,不过在基板附近总会有相应的聚焦平面,因此半峰

全宽变化缓慢。实验与理论计算都表明,当激光功率选取 5~40 mW 时,利用上述参数可以得到较好的沉积结果。另外,模拟结果与实验数据符合得很好,这说明改进后的模型更加符合原子沉积的物理过程。

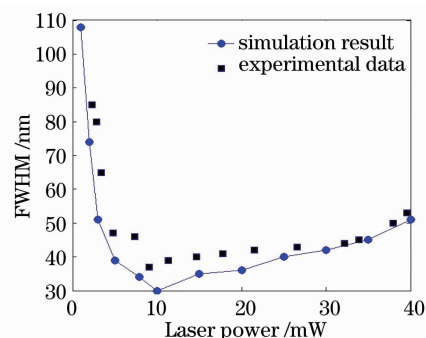


图 4 激光功率对沉积条纹的半峰全宽的影响

Fig. 4 FWHM of deposition fringe versus laser power

3.3 失谐对沉积的影响

不同激光失谐量情况下沉积条纹如图 5 所示,基板位于高斯光强中心处。参数与 3.1 节相同,在一个周期内,沉积原子数为 20000。其中图 5(a)为 $\Delta_1 = 250 \times 2\pi$ MHz,图 5(b)为 $\Delta_2 = 500 \times 2\pi$ MHz。经计算,条纹的半峰全宽分别为 34 nm 和 56 nm。这说明在当前实验条件下,利用 Δ_1 所得的沉积结果相对较好。当然,实验中采用大失谐可以进一步减小激发态原子的比重,减弱其对沉积的影响。使用大失谐,可使原子透镜聚焦能力减弱,从而使得聚焦平面向激光驻波场光强较弱处移动,这样基板衍射效应^[4]可以在一定程度上避免。

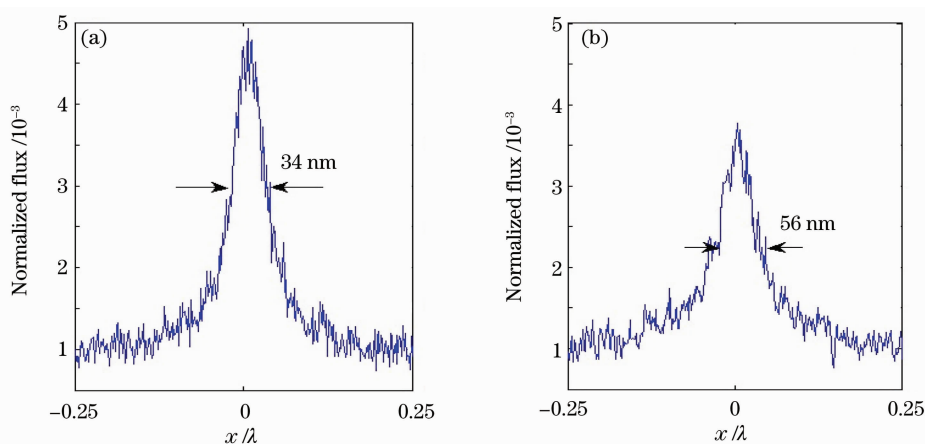


图 5 失谐对沉积条纹的半峰全宽的影响。(a) $\Delta_1 = 250 \times 2\pi$ MHz, (b) $\Delta_2 = 500 \times 2\pi$ MHz

Fig. 5 FWHM of deposition fringe with varying degrees of detuning. (a) $\Delta_1 = 250 \times 2\pi$ MHz, (b) $\Delta_2 = 500 \times 2\pi$ MHz

4 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,综合考虑了同位素、纵向速度分布和横向高斯发散角等因素对沉积的影响。改进后的经典模

型更符合沉积的物理过程,填补了原模型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。本模型的分析中,忽略了原子间的碰撞、基板衍射等因素的影响,这些都是将来努力的方向。

参 考 文 献

- 1 J. J. McClelland, R. E. Shorten, E. C. Palm *et al.*. Laser-focused atomic deposition [J]. *Science*, 1993, **262** (5135): 877~880
- 2 Li Tongbao. Nanometrology and transfer standard [J]. *Shanghai Measurement and Testing*, 2005, **32**(1): 8~13
李同保. 纳米计量与传递标准 [J]. 上海计量测试, 2005, **32**(1): 8~13
- 3 J. J. McClelland. Atom optical properties of a standing-wave light field [J]. *J. Opt. Soc. Am. B*, 1995, **12**(10): 1761~1768
- 4 W. R. Anderson, C. C. Brandley, J. J. McClelland *et al.*. Minimizing feature width in atom optically fabricated chromium nanostructures [J]. *Phys. Rev. A*, 1999, **59**(3): 2476~2485
- 5 Erich Jurdik. Laser Manipulation of Atoms and Nanofabrication [M]. Netherlands: Katholieke University, 2001
- 6 Chen Xianzhong, Yao Hanmin, Chen Xunan. Classical simulation of atomic beam focusing and deposition for atom lithography[J]. *Chin. Opt. Lett.*, 2004, **2**(4): 187~189
- 7 Zhang Baowu, Ma Yan, Li Tongbao *et al.*. Effect of laser power on one-dimensional deposition of chromium atomic beam[J]. *Acta Optica Sinica*, 2009, **29**(2): 421~424
张宝武, 马 艳, 李同保 等. 激光功率对铬原子束一维沉积的影响[J]. 光学学报, 2009, **29**(2): 421~424
- 8 Chang Jae Lee. Quantum-mechanical analysis of atom lithography [J]. *Phys. Rev. A*, 2000, **61**(6): 1331~1338
- 9 Min Zhao, Zhanshan Wang, Ma Yan *et al.*. Quantum simulation for peak broadening in atom lithography[J]. *Chin. Opt. Lett.*, 2007, **5**(10): 602~604
- 10 Zhao Min, Wang Zhanshan, Ma Bin *et al.*. Quantum mechanical analysis of aberration in Cr atom lens generated by a laser standing wave [J]. *Acta Optica Sinica*, 2008, **28**(2): 384~386
赵 敏, 王占山, 马 彬 等. 量子模型分析激光驻波原子透镜的像差 [J]. 光学学报, 2008, **28**(2): 384~386
- 11 Ma Yan, Zhang Baowu, Zhen Chunlan *et al.*. Experimental study of laser collimation of Cr beam [J]. *Acta Physica Sinica*, 2007, **55**(8): 4086~4090
马 艳, 张宝武, 郑春兰 等. 激光准直 Cr 原子束的实验研究 [J]. 物理学报, 2007, **55**(8): 4086~4090
- 12 R. E. Scholten, R. Gupte, J. J. McClelland *et al.*. Laser collimation of a chromium beam [J]. *Phys. Rev. A*, 1997, **55**(2): 1331~1338