

直边衍射驻波场中铬原子三维沉积特性分析

伊路福^{1,2}, 熊显名^{1,2}, 张文涛^{1,2*}, 占平平^{1,2}

¹ 桂林电子科技大学电子工程与自动化学院, 广西 桂林 541004;

² 广西高校光电信息处理重点实验室, 广西 桂林 541004

摘要 利用近共振激光驻波场操纵中性原子实现纳米级条纹沉积是一种新型的研制纳米结构长度标准传递方法。在会聚原子过程中,由于沉积基片的存在,激光驻波场内会产生直边衍射现象,从而影响原子的运动轨迹及沉积光栅。建立了直边衍射扰动下激光驻波场模型,通过四阶龙格-库塔法,对铬原子的三维运动轨迹及沉积效果进行仿真。考虑到激光功率与失谐量的影响,从半峰全宽(FWHM)和对比度入手,对铬原子运动轨迹及沉积条纹特性进行分析。结果表明,当激光功率为 3.93 mW,失谐量为 200 MHz 时,原子沉积光栅的 FWHM 为 6.043 nm,对比度为 0.863,原子沉积光栅的质量最佳。与经典模型相比,该模型考虑了驻波场中直边衍射的影响,所得模拟结果更接近实际,对实验有理论指导意义。

关键词 激光光学; 直边衍射; 三维沉积特性; 龙格-库塔法

中图分类号 O436 文献标识码 A

doi: 10.3788/AOS201737.0614004

Analysis of Three-Dimensional Deposition Characteristics of Chromium atoms in the Straight Edge Diffraction Standing Wave Field

Yi Lufu^{1,2}, Xiong Xianming^{1,2}, Zhang Wentao^{1,2}, Zhan Pingping^{1,2}

¹ School of Electronic Engineering and Automation, Guilin University of Electronic Technology, Guilin, Guangxi 541004, China;

² Key Laboratory of Optoelectronic Information Processing of Guangxi Colleges and Universities, Guilin, Guangxi 541004, China

Abstract Nanostructures stripe deposition technique is a new method to develop nanostructures length standard transmission with the near resonance laser standing wave field manipulation in neutral atoms. In the process of focusing atoms, due to the presence of deposition substrate, a straight edge diffraction phenomenon occurs in the laser standing wave field, which affects the atomic trajectory and deposition grating. The model of laser standing wave field is established under the straight edge diffraction disturbance, and the three-dimensional trajectory and deposition characteristics of chromium atoms are simulated using the Runge-Kutta method. Considering the influence of laser power and detuning amount, we analyze the trajectory and deposition characteristics of chromium atoms from the full width at half maximum (FWHM) and the contrast. The results show that when the laser power and the detuning amount are 3.93 mW and 200 MHz, the FWHM and contrast of atomic deposition grating are 6.043 nm and 0.863, respectively. Under this condition, the best quality of atomic sedimentary grating can be acquired. Compared with the classical model, this model has considered the influence of standing wave field of straight edge diffraction disturbance, the simulation results are closer to the actual situation and can be theoretical guidance to the

收稿日期: 2016-12-06; 收到修改稿日期: 2017-02-21

基金项目: 国家自然科学基金(61565004)、广西自然科学基金(2013GXNSFDA019002, 2014GXNSFGA118003)、桂林市科学研究与技术开发课题(20140127-1, 20150133-3)

作者简介: 伊路福(1989—), 男, 硕士研究生, 主要从事激光会聚铬原子沉积三维纳米光栅的特性方面的研究。

E-mail: phoenixlyf@hotmail.com

导师简介: 熊显名(1964—), 男, 研究员, 硕士生导师, 主要从事光电测量与光学仪器方面的研究。

E-mail: 5311128@qq.com

* 通信联系人。E-mail: glietzw@163.com

experiment.

Key words laser optics; straight edge diffraction; three-dimensional deposition characteristics; Runge-Kutta method

OCIS codes 140.3325; 050.1950; 220.4241

1 引言

纳米技术是目前研究广泛、发展迅速的一门科学技术,其目的是研究、发展和加工结构尺寸小于 100 nm 的材料、装置和系统,以获得所需要的功能和性能^[1]。在纳米计量过程中,受工作原理、测量环境等因素的影响,测量结果可能会截然不同。因此,研究准确适用的纳米传递标准具有重要意义。通常,纳米计量的传递标准采用光刻或其他微纳加工技术进行制定,再由国家计量院的高准确度计量型原子力显微镜进行测量和修正^[2-3]。

原子光刻^[4-6]是一种利用原子束实现刻印的技术,其基本原理是利用共振光的辐射压力,使原子束产生空间强度分布,而后使原子沉积在基片上,形成极细的纳米级的条纹、点阵或者特定图案。原子光刻作为一种新型的制作纳米沉积光栅技术,在纳米计量中得到了广泛应用。激光会聚原子沉积技术^[7]是利用激光操纵原子制作出纳米级的周期性沉积结构,有望制作出纳米长度传递标准^[8]。在利用激光会聚原子沉积技术得到纳米光栅时,沉积基片在激光束的中心位置处具有最理想的沉积效果。激光中轴线在沉积基片内,使得单向性非常好的激光在基片边缘产生衍射^[9],衍射现象的存在,必然会影响激光场强的分布和原子的运动轨迹^[10],进而影响最终的纳米光栅结构^[11]。因此,研究激光衍射扰动对纳米光栅结构的影响具有重要意义。

本文依据纳米光栅沉积的相关理论,以铬原子为例,对中性原子在衍射驻波场作用下的沉积特性进行了仿真分析。由于一维、二维的仿真分析不能给出激光驻波场作用下中性原子沉积纳米光栅的全部信息,因此,构建了铬原子在驻波场中运动轨迹的三维模型,分析了在偶极力作用下,铬原子在衍射驻波场中的三维运动轨迹;并探讨了在不同的功率和失谐量情况下,铬原子的三维运动轨迹,并采用半峰全宽(FWHM)和对比度两个参数对原子沉积效果进行分析。

2 原子在直边衍射驻波场中运动轨迹的计算模型

激光驻波场会聚原子沉积如图 1 所示,横向激光冷却后的原子束在通过由激光驻波场形成的原子透镜时,原子会在驻波场偶极力的作用下向低势阱处会聚,在基片上形成周期性纳米结构。

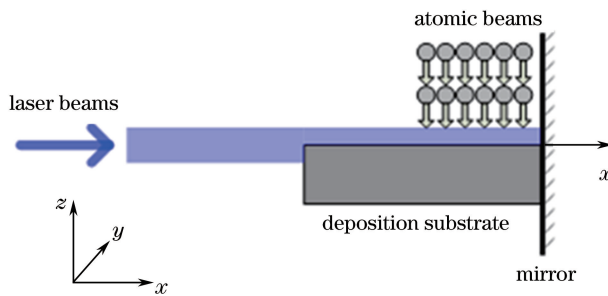


图 1 直边衍射驻波场原子沉积示意图

Fig. 1 Schematic of atomic deposition in standing wave field under straight edge diffraction

假设激光驻波场沿 x 方向传播,则沿 y 方向和 x 方向上的束腰尺寸均为 ω_0 ,激光驻波场是由入射光 E_1 和反射光 E_2 叠加而成。根据标量波理论,复合光场分布可以表示为

$$E(x, y, z) = E_1(x, y, z) + E_2(x, y, z)。 \quad (1)$$

根据光场复振幅与光强的关系,考虑到由于存在基片,在基片边缘产生的直边衍射,则光强为^[12]

$$I(x, y, z) = |E(x, y, z)|^2 = \left(\frac{A_0}{\lambda x \omega_1} \right)^2 \times \frac{\pi \lambda x R_1 \omega_1^2}{\sqrt{(\lambda x R_1)^2 + [\pi \omega_1^2 (R_1 - x)]^2}} \times$$

$$\exp\left\{\frac{-2\pi^2 R_1^2 \omega_1^2}{(\lambda x R_1)^2 + [\pi \omega_1^2 (R_1 - x)]^2} \times y^2\right\} \times \left| \int_b^\infty \exp\left(-\frac{z_1^2}{\omega_1^2}\right) \exp\left\{\frac{i\pi}{\lambda} \left[\frac{(z - z_1)^2}{x} - \frac{z_1^2}{R_1}\right]\right\} dz_1 \right|^2, \quad (2)$$

式中 A_0 为常数因子,影响激光光束的光强大小; λ 为激光波长; ω_1 为入射光光斑半径; R_1 为波平面的曲率半径。进入激光驻波场后,原子所受到的势能可表示为

$$U = \frac{\hbar \delta}{2} \ln \left[1 + \frac{I(x, y, z)}{I_s} \times \frac{\Gamma^2}{\Gamma^2 + 4\delta^2} \right], \quad (3)$$

式中 $\hbar = h/2\pi$ (h 为普朗克常量), δ 为失谐量, Γ 为自发辐射率, I_s 为饱和激光光强。则原子在高斯激光驻波场中的运动方程可表示为

$$\begin{cases} \dot{x} + \frac{1}{m} \frac{\partial U(x, y, z)}{\partial x} = 0 \\ \dot{y} + \frac{1}{m} \frac{\partial U(x, y, z)}{\partial y} = 0 \\ \dot{z} + \frac{1}{m} \frac{\partial U(x, y, z)}{\partial z} = 0 \end{cases} \quad (4)$$

又由于

$$\begin{cases} \dot{x} = \frac{dx}{dt} = \frac{dx}{dz} \frac{dz}{dt} = x' \dot{z} \\ \dot{y} = \frac{dy}{dt} = \frac{dy}{dz} \frac{dz}{dt} = y' \dot{z} \end{cases}, \quad (5)$$

$$\begin{cases} x'' \dot{z}^2 + x' \dot{z} + \frac{1}{m} \frac{\partial U(x, y, z)}{\partial x} = 0 \\ y'' \dot{z}^2 + y' \dot{z} + \frac{1}{m} \frac{\partial U(x, y, z)}{\partial y} = 0 \end{cases}, \quad (6)$$

式中 \dot{x} 、 \dot{y} 、 \dot{z} 为原子在 x 、 y 、 z 方向上的速度, x' 、 y' 为 x 、 y 对 z 的一阶微分, x'' 、 y'' 为 x 、 y 对 z 的二阶微分, m 为原子质量。

在偶极力作用下,根据能量守恒定律,铬原子的总能量为

$$W = E + U = \frac{1}{2} m (\dot{x}^2 + \dot{y}^2 + \dot{z}^2) + U. \quad (7)$$

化简(4)~(7)式得到

$$\begin{cases} x'' \frac{2(E_0 - U)}{m(1 + x'^2 + y'^2)} + x' \left(-\frac{1}{m} \frac{\partial U}{\partial z}\right) + \frac{1}{m} \frac{\partial U}{\partial x} = 0 \\ y'' \frac{2(E_0 - U)}{m(1 + x'^2 + y'^2)} + y' \left(-\frac{1}{m} \frac{\partial U}{\partial z}\right) + \frac{1}{m} \frac{\partial U}{\partial y} = 0 \end{cases}. \quad (8)$$

利用数值微分法,通过设定适应步长的四阶龙格-库塔法对(8)式进行求解,得到铬原子的运动轨迹,并对铬原子的三维沉积特性进行分析。

3 模拟结果及分析

以铬原子为例进行模拟分析,激光波长为 422.55 nm,在激光驻波场中的铬原子跃迁为 $^7S_3 \rightarrow ^7P_4^0$,自然线宽^[13] $\Gamma = 5$ MHz,饱和强度^[7] $I_s = 85$ Wm⁻²,激光驻波场失谐量 $\delta = 200$ MHz,激光束的束腰半径 $\omega_0 = 100$ μ m。当 $\delta \gg \Gamma$ 时,为了使经过光势阱作用后的铬原子在光强最弱的位置会聚,所需要的激光功率为^[8]

$$P_{\text{focus}} = 5.37 \frac{\pi E_k I_s \delta}{\hbar \Gamma k^2}, \quad (9)$$

式中 E_k 表示原子能量, k 为玻尔兹曼常数。对于铬原子而言,在原子炉温为 1650 $^{\circ}$ C 的条件下,最可几速率为 960 m/s,聚焦功率 $P_{\text{focus}} = 3.93$ mW。

在本文模型中,由于激光驻波场中基片的存在,在基片边缘将产生直边衍射,进而对场强分布产生影响,

因此,激光驻波场的场强分布不是理想的高斯分布。通过上述理论分析仿真,得到考虑基片直边衍射影响的驻波场场强分布,如图 2 所示。

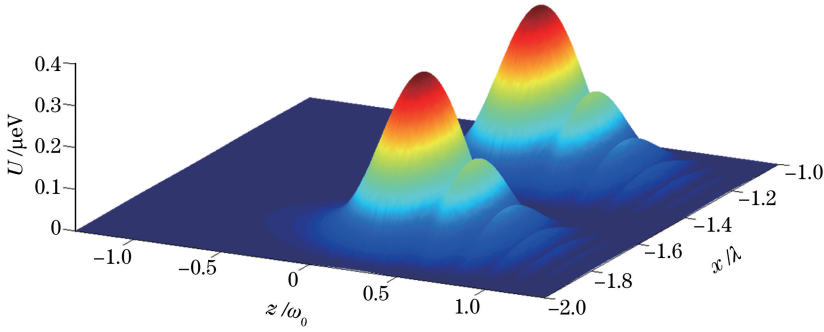


图 2 直边衍射扰动下高斯激光驻波场势能图

Fig. 2 Potential energy diagram of Gaussian laser standing wave field under the straight edge diffraction disturbance

当原子通过激光驻波场时,由于激光对原子偶极力的作用,使原子数的密度分布发生变化,原子会聚集至驻波场的波节或波腹处^[14]。由(3)式可知,原子与激光驻波场相互作用时,偶极力势阱深度由激光功率和失谐量决定。当激光驻波场束腰半径一定时,随着激光功率的增大,激光驻波场偶极力势阱深度增加,偶极力对原子的约束能力增强,原子会聚越密集。当激光功率一定时,激光频率失谐量的变化会影响势阱深度的大小。当失谐量 $\delta > 0$ 或 $\delta < 0$ 时,势阱的最低点位于驻波波节或波腹处,原子受到的力朝向阱底或阱外,受该力的作用,原子将被会聚到驻波波节或波腹处,进而沉积在基片表面形成纳米光栅结构。因此,利用激光驻波场与中性原子间的偶极相互作用,可实现对原子的激光操纵与控制。

图 3 为不同激光功率作用下(其他条件不变),铬原子在激光驻波场中的三维运动轨迹及沉积效果。由图可知,当功率为 2 mW 时,原子受到的偶极力较小,原子会聚在驻波场光束中心位置的效果较差;功率增大时,在直边衍射驻波场的作用下,入射的大部分铬原子都会聚在驻波场光束的中心位置附近,但铬原子的运动轨迹在激光驻波场光束方向上逐渐分散,原子会聚到驻波场光束中心位置的效果较差;此外,铬原子的沉积效果出现多个峰值,沉积光栅质量较差。

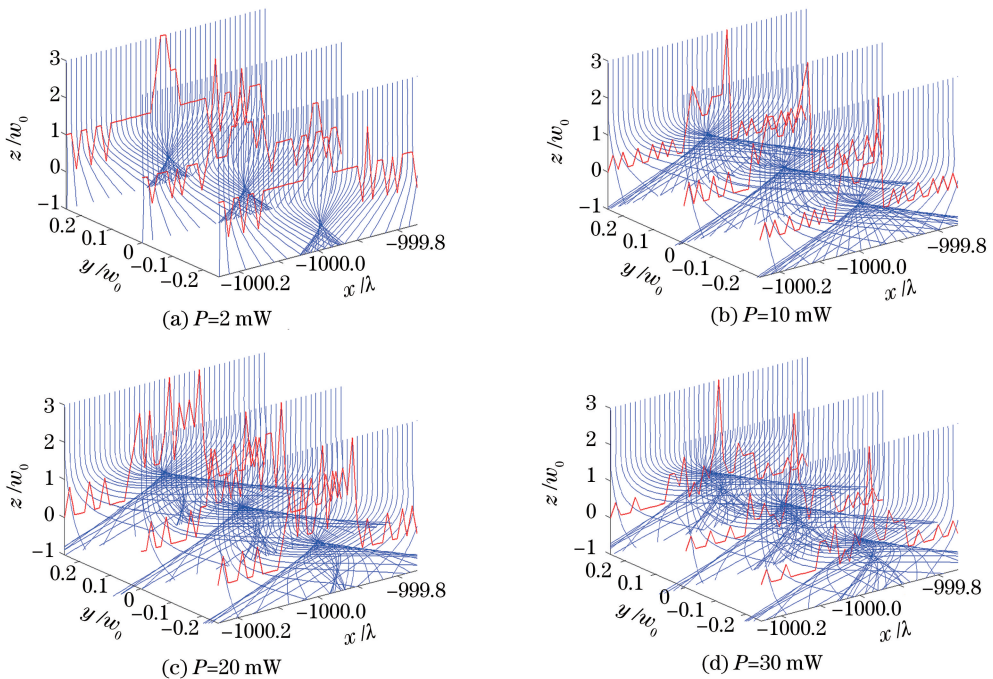


图 3 不同激光功率作用下铬原子的运动轨迹及沉积效果

Fig. 3 Motion trajectory and deposition effect of Cr atom with different laser powers

当激光功率一定时,驻波场的势阱深度受失谐量变化的影响。失谐量增大时,激光驻波场的势阱深度增大,但增大的趋势逐渐变小;当失谐量增大到一定数值时,势阱深度达到最大;失谐量继续增大,势阱深度将逐渐减小。当激光功率增大时,势阱深度会随着激光功率的增加而增大,且势阱深度的最大值会向失谐量大的方向移动。由于失谐量的变化导致激光驻波场势阱深度的改变,铬原子在激光驻波场中的运动轨迹和在基片上的沉积模型也会有所不同。不同失谐量时,铬原子在激光驻波场中的三维运动轨迹及沉积效果如图 4 所示。

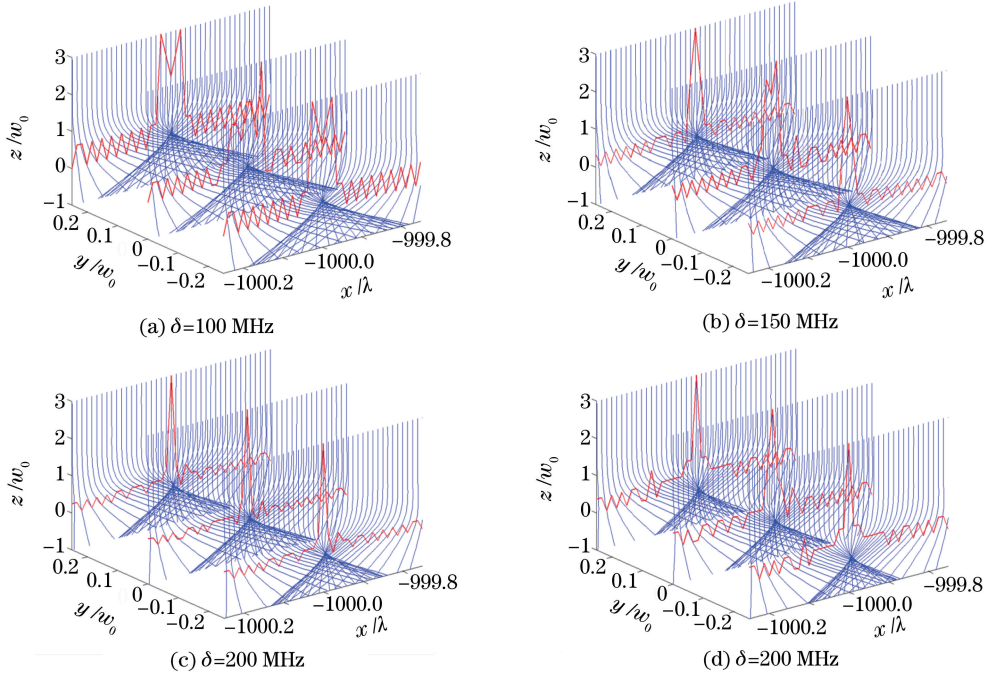


图 4 不同失谐量时铬原子的运动轨迹及沉积效果

Fig. 4 Motion trajectories and deposition effects of Cr atom with different detuning amounts

当失谐量不同时,图 4(a)和图 4(b)中铬原子的沉积模型出现多个峰值,沉积质量较差。图 4(c)与图 4(d)中的沉积模型相比,在激光中心位置处铬原子会聚效果较好,说明激光场的势阱深度对铬原子的约束能力较强,原子受到偶极力的作用较大,向中心运动的原子较多,沉积光栅质量较好。

在激光驻波场中,对于原子沉积纳米光栅质量好坏的评判,一般用沉积光栅的 FWHM 和对比度进行判断。沉积光栅的 FWHM 越小,对比度越大,沉积光栅的条纹越细锐,沉积光栅的质量越好;反之,原子沉积条纹展宽越大,成像质量越低,沉积光栅的质量也就越差。

在高斯激光驻波场束腰半径、失谐量等参数一定时,激光功率的改变会影响激光驻波场会聚铬原子沉积及纳米光栅的特性。图 5 为激光功率为 3~30 mW 时,沉积条纹的对比度与 FWHM 随激光功率的变化曲线。

由图 5 可知,铬原子沉积条纹的 FWHM 随着激光功率的增加而逐渐减小,当功率超过 20 mW 时,FWHM 变化变缓,甚至趋于不变。这种趋势来源于不同激光功率所形成的不同透镜模型:1)小功率(小于 20 mW)下,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,FWHM 变化显著;2)随着功率的增加,聚焦平面逐渐向基板移动,当功率为 20 mW 时,聚焦平面刚好在基板附近;3)大功率(大于 20 mW)下,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,由于在基板附近总会有相应的聚焦平面,因此 FWHM 变化缓慢。从图 5 还可以看出,原子沉积条纹的对比度随着激光功率的增加而逐渐增大,当功率超过 20 mW 时也趋于不变。

由图 4 可知,失谐量过低或过高时的沉积图形不再是单峰图形,实际研究价值不大,所以,对激光功率为 3.93 mW,失谐量为 150~220 MHz 时的沉积光栅做了参数测量,如图 6 所示。

根据失谐量与铬原子沉积条纹的 FWHM 和对比度的关系可知,在失谐量为 150~200 MHz 时,随着失谐量的增大,沉积光栅的 FWHM 减小,对比度逐渐增大,沉积光栅的质量变好。当失谐量为 200~220 MHz

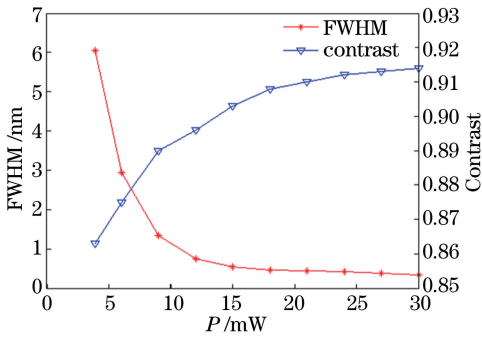


图 5 激光功率与沉积条纹的对比度和 FWHM 的关系
Fig. 5 Relationship of the laser power with FWHM and contrast of sedimentary grating

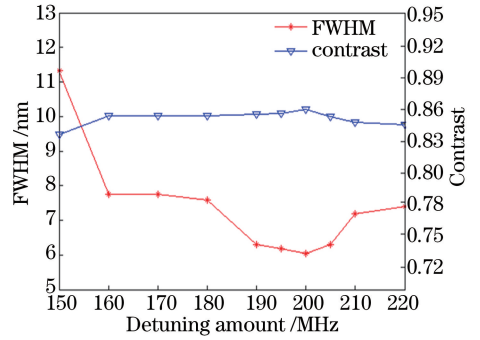


图 6 失谐量与沉积条纹的 FWHM 和对比度的关系
Fig. 6 Relationship of the detuning amount with FWHM and contrast of sedimentary grating

时,随着失谐量的增大,沉积光栅的 FWHM 增大,对比度逐渐减小,沉积光栅的质量变差。当失谐量为 200 MHz 时,沉积光栅的质量最佳。这与前述势阱深度随失谐量的增加而增大,当增大到一定程度后又随失谐量的增大而减小的结论一致。

通过仿真,在考虑了基板直边衍射影响的激光驻波场中,当激光功率为 3.93 mW,失谐量为 200 MHz 时,铬原子的沉积光栅的 FWHM 为 6.043 nm,对比度为 0.863。此时,铬原子的沉积效果最好,沉积光栅质量最佳,如图 7 所示。

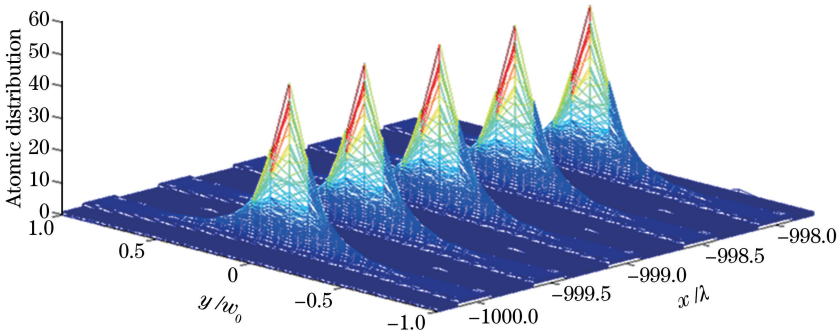


图 7 直边衍射扰动下铬原子的沉积光栅
Fig. 7 Sedimentary grating of Cr atoms under the straight edge diffraction disturbance

4 结 论

考虑到在沉积纳米光栅过程中,通常把基片放置于激光光束中心位置,基片的存在必然会产生直边衍射,因此,建立了直边衍射扰动下的激光驻波场模型:1)利用半经典理论,推导出在直边衍射影响下铬原子在驻波场中的运动方程;2)通过适应步长的四阶龙格-库塔法求解,并运用数值微分法,对直边衍射扰动下铬原子在驻波场中的运动轨迹进行了模拟;3)分析了直边衍射扰动下,激光功率和失谐量的变化对铬原子运动轨迹及沉积条纹 FWHM 和对比度的影响。结果表明,当激光功率为 3.93 mW,失谐量为 200 MHz 时,铬原子的沉积光栅的 FWHM 为 6.043 nm,对比度为 0.863,此时铬原子的沉积效果最好,沉积光栅质量最佳。与经典模型相比,直边衍射扰动下的激光驻波场模型考虑了驻波场中直边衍射的影响,模拟结果更接近于实际,对实验具有理论指导意义。

参 考 文 献

[1] 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.

[2] Cai Weiquan, Li Chuanwen, Huo Yunsheng, et al. Atom lithography[J]. Acta Physica Sinica, 1999, 48(4): 611-619.
蔡惟泉, 李传文, 霍芸生, 等. 原子光刻[J]. 物理学报, 1999, 48(4): 611-619.

[3] Wang Yuzhu, Xu Zhen. Laser cooling and it's applications in science and technology[J]. Progress in Physics, 2005, 25

(4): 347-352.

王育竹, 徐 震. 激光冷却及其在科学技术中的应用[J]. 物理学进展, 2005, 25(4): 347-352.

- [4] Fioretti A, Camposeo A, Tantussi F, *et al.* Atomic lithography with barium atoms[J]. Applied Surface Science, 2005, 248(1-4): 196-199.
- [5] Chen X Z, Yao H M, Chen X N. Classical simulation of atomic beam focusing and deposition for atom lithography[J]. Chinese Optics Letters, 2004, 2(4): 187-189.
- [6] McClelland J J, Hill S B, Pichler M, *et al.* Nanotechnology with atom optics[J]. Science and Technology of Advanced Materials, 2004, 5(5-6): 575-580.
- [7] McClelland J J, Scholten R E, Palm E C, *et al.* Laser-focused atomic deposition[J]. Science, 1993, 262(5135): 877-880.
- [8] Lu Xiangdong, Li Tongbao, Ma Yan. Study of channeling atoms in laser-focused atomic deposition technology[J]. Acta Optica Sinica, 2011, 31(s1): s100515.
卢向东, 李同保, 马 艳. 激光会聚原子沉积技术的原子沟道化研究[J]. 光学学报, 2011, 31(s1): s100515.
- [9] Zhang Baowu, Yao Luyu, Chen Jun, *et al.* Effects of non-collimation of Gaussian laser on laser-focused Cr atom deposition[J]. Acta Optica Sinica, 2015, 35(6): 0602001.
张宝武, 姚芦鹁, 陈 君, 等. 高斯激光非准直性对激光会聚铬原子沉积的影响[J]. 光学学报, 2015, 35(6): 0602001.
- [10] Zhang Wentao, Zhu Baohua, Xiong Xianming. The research of motorial characteristic of sodium atoms in standing wave field[J]. Acta Physica Sinica, 2011, 60(3): 183-189.
张文涛, 朱保华, 熊显名. 中性钠原子在激光驻波场中的运动特性研究[J]. 物理学报, 2011, 60(3): 183-189.
- [11] Zhang Baowu, Zhang Wentao, Wang Daodang, *et al.* Effect of substrate position on laser-focused Cr atom deposition [J]. Acta Optica Sinica, 2014, 34(8): 0805002.
张宝武, 张文涛, 王道档, 等. 基片位置对激光会聚铬原子沉积的影响[J]. 光学学报, 2014, 34(8): 0805002.
- [12] Huang Changbing. The influence of the diffraction effect of sedimentary substrate to the deposited Chromiumatom effect[D]. Guilin: Guilin University of Electronic Technology, 2012: 10-16.
黄长兵. 沉积基片衍射效应对铬原子沉积效果的影响[D]. 桂林: 桂林电子科技大学, 2012: 10-16.
- [13] Zhang Pingping, Ma Yan, Zhang Baowu, *et al.* Properties of 3D nanostructures fabricated by laser-focused Cr atomic deposition[J]. Acta Optica Sinica, 2011, 31(11): 1114001.
张萍萍, 马 艳, 张宝武, 等. 激光会聚铬原子光栅三维特性分析[J]. 光学学报, 2011, 31(11): 1114001.
- [14] Chen Sheng, Ma Yan, Zhang Pingping, *et al.* Production of double-layer light mask in atom nano-lithography[J]. Infrared and Laser Engineering, 2014, 43(7): 2070-2073.
陈 晟, 马 艳, 张萍萍, 等. 原子纳米光刻中双层光学掩膜的实现方法研究[J]. 红外与激光工程, 2014, 43(7): 2070-2073.