

02;10

Фокусировка атомных и молекулярных пучков в электрических полях некоторых конфигураций

© В.В. Смирнов

Научно-исследовательский институт физики Санкт-Петербургского государственного университета,
198904 Санкт-Петербург, Россия
e-mail: smir@snoopy.phys.spbu.ru

(Поступило в Редакцию 4 октября 2000 г.)

Исследованы свойства осесимметричной электрической линзы для пучков атомов или молекул, образуемой провалом электрического поля в осевом направлении. Рассмотрены два варианта взаимодействия частиц пучка с полем: квадратичное и линейное по полю. Дана аналитическая аппроксимация фокусного расстояния линзы от параметров поля и энергии пучка. Определены хроматическая и сферическая аберрации линзы.

Введение

В атомной оптике используется фокусировка атомов на различных системах, таких как френелевская зонная решетка [1] и поле электромагнитной макроскопической линзы. В последнем случае применяется либо сфокусированное излучение лазера [2] либо, как в электронной микроскопии, магнитная линза [3]. Наибольшее разрешение достигнуто при фокусировке на магнитной линзе. Предельное разрешение определяется аберрациями фокусирующей линзы, в основном хроматической аберрацией. Предполагается, что использование техники охлаждения пучка атомов может позволить получить разрешение около 50 nm при дифракционном пределе в этих же условиях 6.5 nm [3]. В [4] развивается идея использования объекта атомного масштаба в качестве линзы для пучка частиц, выдвинутая ранее в работе [5].

Представляет также интерес изучение аксиально-симметричных конфигураций электрического поля, которые приводят к фокусировке атомов или молекул. В настоящей работе теоретически изучаются свойства таких линз.

Квадратичное по полю взаимодействие

Взаимодействие атома или молекулы с электрическим полем \mathbf{E} много меньшим, чем атомное, имеет вид [6]

$$V = -\frac{1}{2}\alpha E^2, \quad (1)$$

где α — поляризуемость атома или молекулы.

Это взаимодействие определяет квадратичный эффект Штарка в атоме.

Как известно, вблизи оси линзы, имеющей цилиндрическую симметрию, потенциал поля U находится по его значению на оси U_0

$$U(r, z) = U_0(z) - \frac{r^2}{4}U_0''(z), \quad (2)$$

где (r, z) — цилиндрические координаты.

Для напряженности поля получим

$$E_z(r, z) = E_0(z) - \frac{r^2}{4}E_0''(z), \quad E_r(r, z) = -\frac{r}{2}E_0'(z),$$

где $E_0 = -U_0'$.

Поскольку для потенциала (2)

$$\Delta U(r, z) = \frac{r^2}{4}E_0'''(z),$$

то он определяет приближенное решение уравнения Лапласа при условии

$$r \ll 2\sqrt{\left|\frac{E_0'}{E_0'''}\right|}. \quad (3)$$

Пусть $f(z)$ — обозначает безразмерный профиль осевого распределения поля, так что $E_0(z) = E_e f(z)$. Отсюда получается следующее выражение для потенциала взаимодействия (1):

$$V(r, z) = -\frac{1}{2}\alpha E_e^2 g(r, z), \quad g = \left(f - \frac{r^2}{4}f''\right) + \frac{r^2}{4}f'^2. \quad (4)$$

Величина αE_e^2 задает масштаб взаимодействия, а g — распределение по координатам. На оси имеем $g(0, z) = f(z)^2$. Поскольку движение атома определяется силой, т.е. производной от потенциала, то можно и удобно сместить потенциал так, чтобы он был равен нулю для падающих на линзу атомов, двигающихся вдоль оси. Для этого следует положить $g \rightarrow g - f(-\infty)^2$.

Рассмотрим семейство распределений поля вдоль оси с провалом вблизи начала координат. Зададим их в виде следующей аппроксимации:

$$f = \left(1 - \varkappa S^{-\frac{3}{2}}\right), \quad S = 1 + \left(\frac{z}{R}\right)^2, \quad (5)$$

где \varkappa — параметр, задающий относительную величину провала поля в центре; R — протяженность области изменения поля.

При $0 < \varkappa < 1$ распределение имеет минимум вблизи центра линзы, т.е. собственно провал, а при

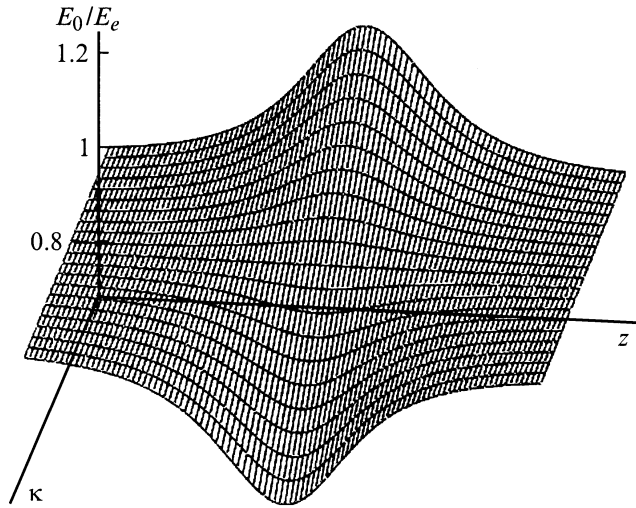


Рис. 1. Семейство распределений относительной величины напряженности электрического поля $E_0(z)/E_e$ на оси линзы при различных значениях параметра в интервале $-0.3 < \kappa < 0.3$.

остальных κ — максимум, т.е. горб. На рис. 1 представлено семейство распределений относительной величины напряженности поля на оси линзы при различных значениях параметра в интервале $-0.3 < \kappa < 0.3$. В связи с выбором аппроксимации отметим, что, с одной стороны, поля подобной конфигурации могут быть созданы соответствующим подбором электродов, а с другой, ее конкретный вид не очень существен, важнее ее качественное поведение.

Для аппроксимации (5) условие (3) сводится к

$$\frac{r}{R} \ll \frac{2S}{\sqrt{5|4S - 7|}},$$

т.е. практически к $r \ll R$. Это значит, что осевая протяженность провала поля R определяет верхнюю оценку радиуса линзы.

Взаимодействие (1) в центре линзы, образованной полем конфигурации вида (5), равно

$$V_0 = \frac{1}{2} \alpha E_e^2 \kappa (2 - \kappa). \quad (6)$$

На рис. 2 показано пространственное распределение относительной величины смещенного потенциала взаимодействия (1) V/V_0 при $\kappa = 0.2$. Распределение взаимодействия вдоль оси линзы в случае $0 < \kappa < 2$ имеет вид барьера, высота которого на оси есть V_0 . При $z = 0$ радиальное распределение высоты барьера имеет вид

$$V(r, 0) = \frac{1}{2} \alpha E_e^2 \kappa' (2 - \kappa'), \quad \kappa' = \kappa \left(1 + \frac{3}{4} \left(\frac{r}{R} \right)^2 \right),$$

так что отношение высот на краю и в центре равно

$$\frac{V(R, 0)}{V_0} = \frac{7}{4} \frac{(2 - 7\kappa/4)}{(2 - \kappa)}.$$

Таким образом, электростатическая линза в случае $0 < \kappa < 2$ является фильтром атомов по энергиям, задерживающим атомы с энергией меньше, чем высота барьера. Для силы, действующей на атом получим

$$\mathbf{F} = -\frac{\partial V}{\partial \mathbf{r}} = \frac{1}{2} \alpha E_e^2 \frac{\partial g}{\partial \mathbf{r}}.$$

В покомпонентной записи имеем

$$\begin{bmatrix} F_r \\ F_z \end{bmatrix} = \frac{1}{2} \alpha E_e^2 \begin{bmatrix} \frac{r}{2} (f'^2 - 2f \cdot f'') + \frac{r^3}{4} f''^2 \\ 2f \cdot f' - \frac{r^2}{2} f \cdot f''' + \frac{r^4}{8} f'' \cdot f''' \end{bmatrix}.$$

Отсюда видно, что, для того чтобы поле притягивало атомы к оси, необходимо, чтобы коэффициент $D(z) = f'^2 - 2f \cdot f''$ был отрицательным.

При выбранной аппроксимации в центре линзы $D(0) = 2\kappa(\kappa - 1)$. Следовательно, притяжение вблизи от центра имеет место в случае $0 < \kappa < 1$, т.е. в случае минимума в осевом распределении напряженности поля. На рис. 3 приведено семейство распределений коэффициента D , определяющего радиальную составляющую силы, вдоль оси линзы при различных значениях параметра в интервале $-0.3 < \kappa < 0.3$. Как видно, области притяжения чередуются с областями отталкивания. Это приводит к немонотонности в радиальном движении атома при прохождении через линзу, что видно на рис. 4, где приведены траектории движения атомов.

При $0 < \kappa < 0.1$ фокусировка (в параосиальном приближении) происходит при всех энергиях $E > V_0$. При $\kappa > 0.1$ существует критическая энергия, ниже которой имеет место фокусировка, а выше — дефокусировка.

На основе траекторных расчетов получены относительные фокусные расстояния и величины сферической и хроматической aberrаций фокусирующей электростатической линзы для атомного пучка. Соответствующие параметры представлены в табл. 1–3.

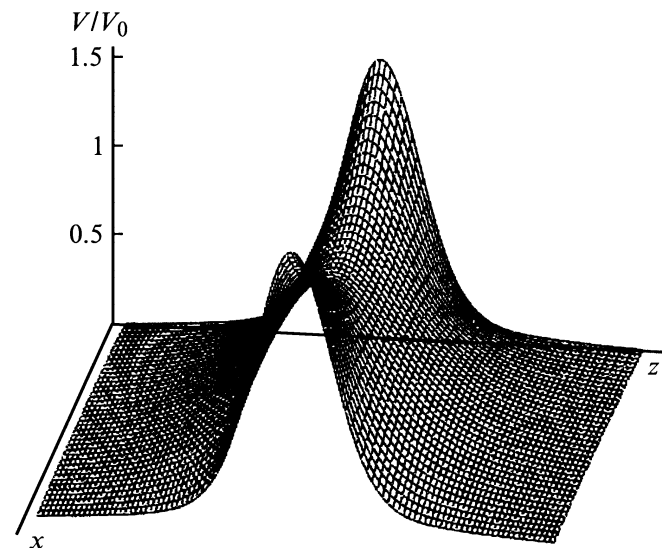


Рис. 2. Пространственное распределение относительной величины квадратичного потенциала взаимодействия (1) $V(x, y, z)/V_0$ в плоскости $y = 0$ при $\kappa = 0.2$ ($r = |x|$).

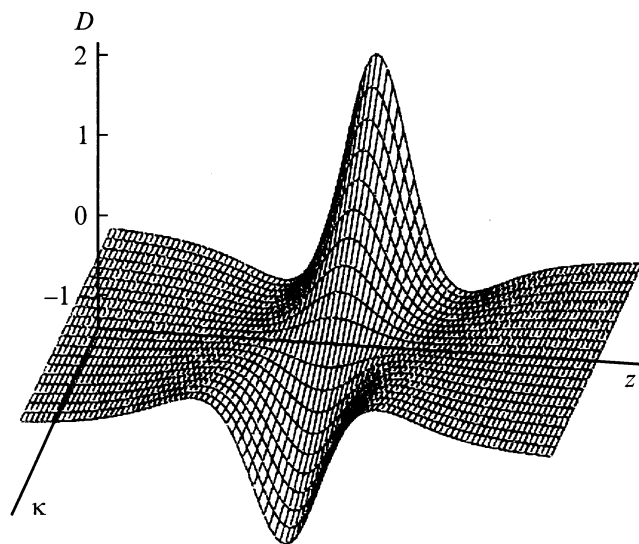


Рис. 3. Семейство распределений коэффициента $D(z)$ вдоль оси линзы при различных значениях параметра в интервале $-0.3 < \kappa < 0.3$.

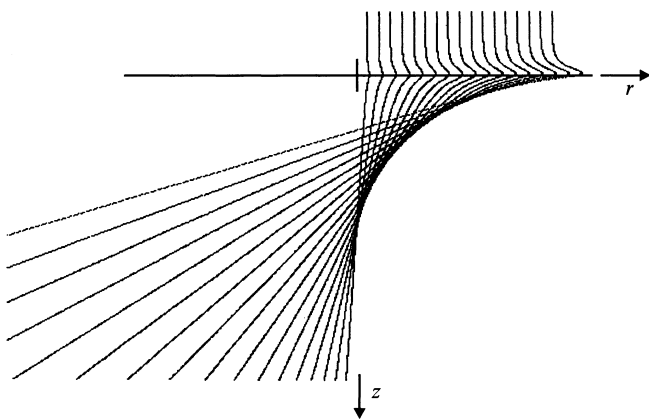


Рис. 4. Траектории движения атомов с относительной энергией $E/V_0 = 2$ в квадратичном потенциале (1) при $\kappa = 0.2$. Вертикальный и горизонтальный масштабные отрезки в центре имеют размер $2R$.

Зависимость фокусного расстояния F от энергии атома E (в области фокусировки) для различных $0 < \kappa < 0.3$ можно аппроксимировать соотношением

$$\frac{F}{R} \cong \alpha \left(\frac{E}{V_0} \right) \left(\frac{E}{V_0} - 1 \right)^b b^{1+b}, \quad (7)$$

где параметры имеют следующие значения: $a = 3.11$, $b = 1 + 4.02\kappa$, а V_0 определено формулой (6).

Формула получена из анализа структуры теоретического выражения для фокусного расстояния. Параметры аппроксимации найдены интерполяцией по полученным данным. Выражение (7) описывает хроматическую aberrацию линзы.

Линейное по полю взаимодействие

Поляризуемость полярных молекул обусловлена действием в основном двух механизмов: электронной и ориентационной поляризацией [7]. При небольших полях оба механизма приводят к взаимодействию вида (1). Однако при достаточно больших полях (но малых в сравнении с атомными) происходит насыщение ориентационной поляризуемости. Во многих случаях для молекул с большим дипольным моментом электронная поляризуемость мала и ею можно пренебречь.

Таблица 1. Зависимость фокусного расстояния F от радиального положения траектории r на подходе к линзе (прицельного параметра)

r/R	F/R		
	$\kappa = 0.03$	$\kappa = 0.1$	$\kappa = 0.3$
0.05	9.95	12.93	25.03
0.10	9.87	12.87	24.78
0.15	9.71	12.60	24.38
0.20	9.47	12.32	23.79
0.25	9.18	11.95	23.05
0.30	8.85	11.48	22.21
0.35	8.46	11.01	21.27
0.40	8.03	10.46	20.18
0.45	7.58	9.87	19.09
0.50	7.10	9.25	17.90
0.55	6.59	8.58	16.70
0.60	6.08	7.95	15.46
0.65	5.55	7.27	14.21
0.70	5.00	6.59	12.90
0.75	4.43	5.89	11.68
0.80	3.85	5.18	10.41
0.85	3.24	4.44	9.17
0.90	2.60	3.67	7.91
0.95	1.84	2.88	6.68

Примечание. Относительная энергия атомов $E/V_0 = 2$. Результаты для параметра поля $\kappa = 0.1$ соответствуют рис. 3 для траекторий.

Таблица 2. Зависимость фокусного расстояния F от относительной энергии атома при различных параметрах κ .

E/V_0	F/R			
	$\kappa = 0.03$	$\kappa = 0.1$	$\kappa = 0.2$	$\kappa = 0.3$
1.4				6.1
1.5	3.8	4.4	5.9	9.8
1.6				16.0
1.7			10.8	27.3
1.8			14.4	53.9
2.0	10.0	12.9	25.0	
2.5	19.2	28.6		
3.0	31.9	55.8		

Таблица 3. Зависимость коэффициентов сферической аберрации третьего S_3 и пятого S_5 порядка от относительной энергии атома при различных параметрах

E/V_0	S_3R^2				S_5R^4			
	$\varkappa = 0.03$	$\varkappa = 0.1$	$\varkappa = 0.2$	$\varkappa = 0.3$	$\varkappa = 0.03$	$\varkappa = 0.1$	$\varkappa = 0.2$	$\varkappa = 0.3$
1.4				1.09				19.5
1.5	0.94	1.17	1.33	1.40	13.6	11.6	9.56	8.09
1.6				1.16				5.74
1.7			0.70	0.93			7.05	5.17
1.8			0.91	1.07			4.25	2.97
2.0	0.89	0.93	1.02		2.74	2.40	1.97	
2.5	0.85	0.87			1.10	1.05		
3.0	0.80	0.78			0.76	0.76		

Взаимодействие молекулярного диполя μ с электростатическим полем E имеет вид

$$V = -\mu \cdot E. \quad (8)$$

Рассмотрение движения молекулы через линзу можно проводить с разной степенью приближения. Можно рассмотреть совместное вращательное и поступательное движение диполя с последующим усреднением по начальным условиям для вращательной степени свободы. Для упрощения задачи можно рассмотреть только поступательное движение в усредненном по вращениям потенциале (8). В данной работе мы используем второй вариант.

Усреднение взаимодействия (8) проведем для болцмановского распределения по вращательной координате [7]

$$\bar{V} = \frac{-\int \mu E \cos \Theta \exp\left(\frac{\mu E \cos \Theta}{kT}\right) d \cos \Theta}{\int \exp\left(\frac{\mu E \cos \Theta}{kT}\right) d \cos \Theta} = -\bar{\mu} E. \quad (9)$$

Отсюда среднее значение проекции дипольного момента на направление поля равно

$$\bar{\mu} = \mu \left(\frac{\text{ch } \eta}{\text{sh } \eta} - \frac{1}{\eta} \right), \quad \eta = \frac{\mu E}{kT}.$$

Для малых $\eta \ll 1$ получается $\bar{\mu} = \mu^2 E / 2kT$, и мы имеем квадратичное по полю усредненное взаимодействие вида (1) с ориентационной поляризуемостью $\alpha = \mu^2 / kT$. Отметим, что часто делается замена экспоненты ее разложением при малых $\eta \ll 1$ непосредственно в подынтегральных выражениях в (9) [7]. Это приводит к несколько отличному результату для среднего значения дипольного момента $\bar{\mu} = \mu^2 E / 3kT$. Такая оценка представляется менее последовательной.

Для больших $\eta \gg 1$ имеем

$$\bar{\mu} = \mu \left(1 - \frac{1}{\eta} \right),$$

т.е. средний момент стремится к максимальному значению μ . При этом усредненное взаимодействие является

линейным по полю

$$\bar{V} = -\mu E + kT. \quad (10)$$

С учетом электронной поляризуемости молекулы α_e усредненное взаимодействие имеет вид

$$\bar{V} = -\frac{1}{2} \alpha_e E^2 - \mu E + kT.$$

Постоянное слагаемое kT не влияет на движение и его можно не учитывать.

При той же конфигурации поля, что и для квадратичного взаимодействия (4), получим следующее выражение для линейного взаимодействия (10):

$$\bar{V} = -\mu E_e \sqrt{g}$$

(для отсчета на бесконечности энергии взаимодействия от нуля следует положить $\sqrt{g} \rightarrow \sqrt{g} - f(-\infty)$). Высота барьера в центре линзы

$$V_0 = \mu E_e \varkappa. \quad (11)$$

На рис. 5 показано пространственное распределение относительной величины смещенного линейного потенциала взаимодействия (10) V/V_0 при $\varkappa = 0.2$.

Соответственно для силы, действующей на молекулу, получим

$$\bar{F} = -\frac{\mu}{2E} \frac{\partial E^2}{\partial \mathbf{r}} = \frac{\mu E_e}{2\sqrt{g}} \frac{\partial g}{\partial \mathbf{r}}$$

(g в знаменателе без смещения).

Отсюда следует, что для линейного по полю взаимодействия с некоторыми поправками справедливы те же соображения относительно фокусировки, что и для квадратичного. В параксиальном приближении фокусировка определяется коэффициентом D/f (показан на рис. 6 в виде семейства распределений вдоль оси линзы при различных значениях параметра в интервале $-0.3 < \varkappa < 0.3$).

Фокусировка при всех энергиях $E > V_0$ имеет место в более широком диапазоне $0 > \varkappa > 0.25$, чем для квадратичного взаимодействия (1).

Сравнение рис. 3 и 6 показывает, что в случае линейного взаимодействия фокусирующие свойства электростатической линзы выше.

Относительные фокусные расстояния и величины aberrаций фокусирующей электростатической линзы для молекулярного пучка представлены в табл. 4–6.

Зависимость фокусного расстояния F от энергии атома E (в области фокусировки) для различных $0 < \kappa < 0.3$ можно аппроксимировать соотношением (7) с параметрами $a = 3.80$, $b = 1 + 1.24\kappa$ и V_0 , определенным формулой (11).

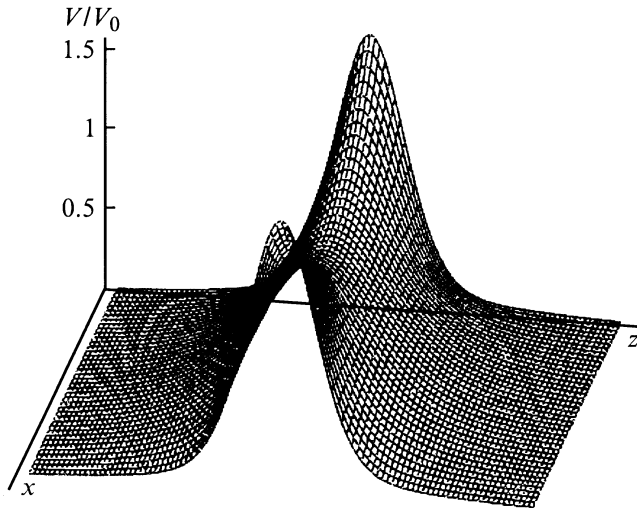


Рис. 5. Пространственное распределение относительной величины линейного потенциала взаимодействия $V(x, y, z)/V_0$ в плоскости $y = 0$ при $\kappa = 0.2$ ($r = |x|$).

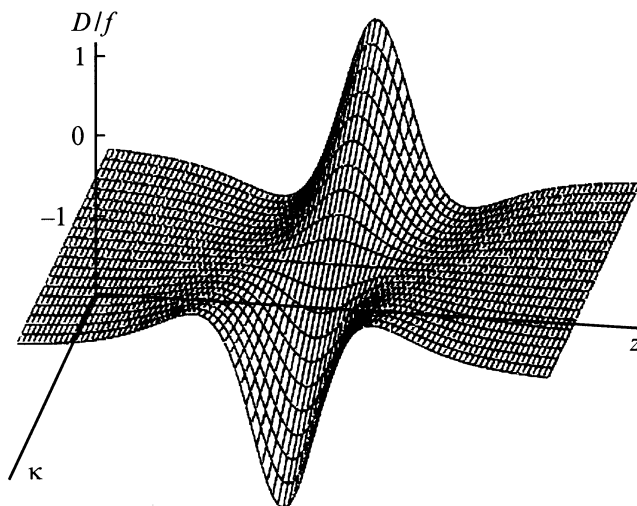


Рис. 6. Семейство распределений коэффициента $D(z)/f$, определяющего радиальную составляющую силы для линейного взаимодействия, вдоль оси линзы.

Таблица 4. Зависимость фокусного расстояния F от радиального положения траектории r

r/R	F/R		
	$\kappa = 0.1$	$\kappa = 0.2$	$\kappa = 0.3$
0.05	10.03	11.34	13.43
0.10	9.93	11.22	13.25
0.15	9.74	10.98	12.93
0.20	9.49	10.66	12.48
0.25	9.18	10.27	11.95
0.30	8.80	9.81	11.33
0.35	8.38	9.29	10.67
0.40	7.93	8.75	9.95
0.45	7.45	8.16	9.23
0.50	6.94	7.56	8.48
0.55	6.42	6.94	7.72
0.60	5.88	6.33	6.98
0.65	5.33	5.69	6.24
0.70	4.76	5.06	5.51
0.75	4.20	4.44	4.80
0.80	3.60	3.80	4.06
0.85	2.99	3.12	3.32
0.90	2.33	2.41	2.52
0.95	1.55	1.57	1.63

Примечание. Относительная энергия молекулы $E/V_0 = 2$.

Таблица 5. Зависимость фокусного расстояния F от относительной энергии молекулы при различных параметрах κ .

E/V_0	F/R		
	$\kappa = 0.1$	$\kappa = 0.2$	$\kappa = 0.3$
1.5	3.76	4.01	4.36
2.0	10.03	11.34	13.43
2.5		23.50	
3.0	32.59	42.10	64.03
3.5	49.67		

Таблица 6. Зависимость коэффициентов сферической aberrации третьего S_3 и пятого S_5 порядка от относительной энергии молекулы при различных параметрах

E/V_0	$S_4 R^2$			$S_5 R^4$		
	$\kappa = 0.1$	$\kappa = 0.2$	$\kappa = 0.3$	$\kappa = 0.1$	$\kappa = 0.2$	$\kappa = 0.3$
1.5	1.14	1.17	1.08	14.40	15.50	17.48
2.0	0.83	0.92	1.10	3.98	4.52	5.19
2.5		1.23			1.42	
3.0	0.97	1.25	1.91	0.84	1.06	1.46
3.5	0.94			0.72		

Заключение

В работе исследованы свойства осесимметричной электростатической линзы для пучков атомов или молекул, образуемой провалом электрического поля в осевом направлении. Рассмотрены два варианта взаимодействия

частиц пучка с полем: квадратичное и линейное по полю. Дана аналитическая аппроксимация фокусного расстояния линзы от параметров поля и энергии пучка (7). Из нее следует, что хроматическая aberrация меньше для линейного по полю взаимодействия (меньше параметр b). Относительная сферическая aberrация линзы третьего порядка $S_3 R^2 \sim 1$ и мало зависит от параметров поля, пучка и вида взаимодействия. Относительная сферическая aberrация линзы пятого порядка $S_5 R^4$ мало зависит от параметров поля и вида взаимодействия, но растет с уменьшением энергии пучка.

Работа поддержана РФФИ (проект № 00-03-32920).

Список литературы

- [1] *Carmal O., Sigel M., Sleator T.* et al. // Phys. Rev. Lett. 1991. Vol. 67. N 23. P. 3231–3234.
- [2] *Bjorkholm J.E., Freeman R.R., Ashkin A., Pearson D.B.* // Phys. Rev. Lett. 1978. Vol. 41. N 20. P. 1361–1364.
- [3] *Kaenders W.G., Lison F., Richter A.* et al. // Nature. 1995. Vol. 375. P. 214–216.
- [4] *Воробьев О.А., Смирнов В.В.* Исследование фокусировки атомов инертных газов на атомной линзе. Тр. Междунар. конф. молодых ученых и специалистов "Оптика-99". СПб., 1999. С. 9.
- [5] *Smirnov Valery V.* // J. Phys. D. 1998. Vol. 31. N 13. P. 154.
- [6] *Радциг А.А., Смирнов Б.М.* Справочник по атомной и молекулярной физике. М.: Атомиздат, 1980. 240 с.
- [7] *Джексон Дж.* Классическая электродинамика. М.: Мир, 1963. 702 с.