



Ким Д.А., Новиков В.Г.,
Соломянная А.Д.

Моделирование перегретой
литиевой плазмы
применительно к задачам
разработки источника ЭУФ-
излучения

Рекомендуемая форма библиографической ссылки: Ким Д.А., Новиков В.Г., Соломянная А.Д. Моделирование перегретой литиевой плазмы применительно к задачам разработки источника ЭУФ-излучения // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша. 2009. № 3. 26 с. URL: <http://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2009-3>

О р д е н а Л е н и н а
ИНСТИТУТ ПРИКЛАДНОЙ МАТЕМАТИКИ
им. М.В. Келдыша
Р о с с и й с к о й а к а д е м и и н а у к

Д.А. Ким, В.Г. Новиков, А.Д. Соломянная

МОДЕЛИРОВАНИЕ
ПЕРЕГРЕТОЙ ЛИТИЕВОЙ ПЛАЗМЫ
ПРИМЕНИТЕЛЬНО К ЗАДАЧАМ РАЗРАБОТКИ
ИСТОЧНИКА ЭУФ-ИЗЛУЧЕНИЯ

Москва, 2009

Аннотация

Д.А. Ким, В.Г. Новиков, А.Д. Соломянная

Моделирование перегретой литиевой плазмы применительно к задачам разработки источника ЭУФ-излучения

Проведены оценки эффективности источника экстремального ультрафиолетового (ЭУФ) излучения на основе перегретой литиевой плазмы. Рассмотрен плоский слой лития толщины 0.01 см. На основании элементарных процессов, протекающих в плазме, написаны и численно решены уравнения поуровневой кинетики. Для учёта полей излучения применялся как метод escape-фактора, так и более точный метод (программа BELINE), в котором поле излучения и поуровневая кинетика учитываются самосогласованным образом. Расчёты проведены для температур $T = 5 \div 50$ эВ и плотностей свободных электронов $N_e = 10^{10} \div 10^{19}$ 1/см³.

Dmitry A. Kim, Vladimir G. Novikov, Anna D. Solomyannaya

Modeling of overheated lithium plasma for EUV-source developing

The efficiency of extreme ultra-violet (EUV) source based on overheated lithium plasma was estimated. Plane layer with optical depth 0.01 cm was considered. Level kinetic equations were described and solved using elementary processes in plasma. Escape-factor method was applied for accounting of radiation field. Similar calculations were carried out using BELINE code with self-consistent accounting of level kinetics and radiation field. Calculations were carried out for temperatures $T = 5 \div 50$ eV and electron densities $N_e = 10^{10} \div 10^{19}$ 1/cm³.

Содержание

Введение	4
1. Модель квазистационарной неравновесной излучающей плазмы	5
1.1 Постановка задачи	5
1.2 Уравнения поуровневой кинетики	8
2. Результаты расчётов	14
2.1 Ионизационное равновесие	14
2.2 Излучение плоского слоя в квазистационарном приближении	20
2.3 Излучение литиевого шара	22
Список литературы	25

Введение

Для научно-технического прогресса очень важной задачей является постоянное совершенствование интегральных схем. Добиваются этого увеличением числа транзисторов на единицу объёма, уменьшая их в размерах. В связи с этим возникает необходимость создавать новые технологии для их изготовления. В настоящее время интегральные схемы разрабатываются на основе проекционной оптической литографии, использующей длины волн видимой и мягкой ультрафиолетовой части спектра. Сегодня ей на смену приходит ЭУФ-литография [1], новая технология, использующая экстремальное ультрафиолетовое излучение (или мягкий рентген) с длиной волны 13.5 нм, что соответствует, например, линии Ly_{α} водородоподобного иона лития. Для такого коротковолнового излучения вместо проекционной оптики необходимо использовать специальные зеркала, и процесс экспозиции должен проходить в вакуумной камере, так как коротковолновое излучение поглощается большинством сред.

Из-за существенно меньшей длины волны ЭУФ-литография достигает характерных размеров печати микросхем порядка 30 нм, а впоследствии может достигнуть и 15 нм [2]. Однако на пути совершенствования и развития этой технологии существует ряд серьёзных проблем. Одна из них связана с источником излучения. В частности, требуется достаточно мощный источник излучения в диапазоне $13.5 \text{ нм} \pm 1\%$ с высокой эффективностью конверсии. Также критичны для литографии размеры источника, степень загрязнения и повреждения оптики.

Данная работа — попытка построить простую модель плазменного источника ЭУФ-излучения на основе лития и с её помощью исследовать поведение плазмы в заданных условиях. В модели рассматриваются основные

элементарные процессы, протекающие в горячей плазме, такие как ионизация и рекомбинация, возбуждение и гашение электронами, излучение и поглощение [3]. На основании этих процессов пишутся уравнения поуровневой кинетики, а затем, после определения концентраций различных состояний ионов, рассчитывается эмиссионная способность плазмы для фотонов с энергией 91.8 эВ, соответствующей длине волны 13.5 нм. В результате расчётов получена оценка отношения излученной в этой линии энергии к внутренней энергии плазмы, характеризующая эффективность конверсии такого литиевого источника. Особая роль уделяется эффекту перепоглощения фотонов в спектральных линиях при переходе к непрозрачности в зависимости от параметров плазмы.

1. Модель квазистационарной неравновесной излучающей плазмы

1.1 Постановка задачи

Пусть плоский однородный слой разреженного литиевого пара нагревается с помощью лазера до состояния плазмы, состоящей из ионов различной кратности в основном и возбуждённом состояниях и свободных электронов. В течении некоторого времени плазму можно считать однородной [4] с фиксированными параметрами, такими как: температура T (эВ), плотность электронов N_e (1/см³) и толщина слоя L (см). Необходимо оценить эффективность излучения в линии Ly_α . Для решения поставленной задачи возникает необходимость совместного рассмотрения процессов переноса фотонов и поуровневой кинетики электронов [5]. В квазистационарном приближении и без учёта

процессов рассеяния уравнение переноса фотонов имеет вид

$$(\vec{\Omega} \nabla) I_\omega = \zeta(\omega, I_\omega) - \kappa(\omega, I_\omega) I_\omega, \quad (1)$$

где I_ω — интенсивность излучения фотонов с энергией $\hbar\omega$, $\kappa = \kappa(\omega, I_\omega)$ — коэффициент поглощения в 1/см, $\zeta = \zeta(\omega, I_\omega)$ — объёмная излучательная способность в ГВт/(см³·эВ·стерадиан), $\vec{\Omega}$ — единичный вектор в направлении распространения излучения.

Коэффициенты поглощения и излучательная способность плазмы определяются населённостями основных и возбуждённых состояний ионов, то есть количеством ионов j -ой кратности в см³, находящихся в некотором состоянии s . Обозначим эти концентрации через $n_{js} = n_{js}(\vec{r})$. При записи уравнений наряду с n_{js} будем использовать относительные концентрации $x_{js} = n_{js}/n_i$, где $n_i = \rho N_A/A$ — плотность ионов, A — атомный вес, $N_A = 6.02 \cdot 10^{23}$ 1/моль — постоянная Авогадро, ρ — плотность вещества в г/см³.

Для концентраций частиц n_{js} , находящихся в малом элементе объёма с координатой \vec{r} в состоянии js , выполняется условие баланса (уравнение статистического равновесия) [6]:

$$\frac{\partial n_{js}}{\partial t} = -\nabla \cdot (n_{js} \vec{v}) + \sum_{j's'} (n_{j's'} w_{j's' \rightarrow js} - n_{js} w_{js \rightarrow j's'}),$$

то есть изменение её со временем будет определяться потоком частиц через ограничивающую этот объём поверхность и темпом поступления из других состояний $j's'$ за счёт радиационных и столкновительных процессов. Здесь \vec{v} — макроскопическая скорость, $w_{js \rightarrow j's'}$ — полная вероятность перехода иона из состояния js в состояние $j's'$.

Предполагается, что скорости газодинамических процессов существенно меньше скоростей элементарных процессов, поэтому влиянием макроперено-

са можно пренебречь. Тогда уравнение примет вид

$$\frac{dn_{js}}{dt} = \sum_{j's'} (n_{j's'} w_{j's' \rightarrow js} - n_{js} w_{js \rightarrow j's'}). \quad (2)$$

Вероятности столкновительных процессов определяются плотностью свободных электронов и их распределением по энергиям. Вероятности радиационных процессов зависят от функции распределения фотонов, точнее от того, какая часть излучения остаётся в веществе (реабсорбируется). Если заметная часть излучения реабсорбируется, то уравнения (1) и (2) необходимо решать совместно. В этом случае концентрации различных ионов сильно зависят от интенсивности излучения, а она, в свою очередь, зависит от концентраций ионов через коэффициент поглощения и излучательную способность плазмы [5].

В рассматриваемом случае наиболее важным является излучение линии Ly_{α} на длине волны 13.5 нм (91.8 эВ), что соответствует переходу между $1s$ и $2p$ состояниями для иона Li^{2+} . Эта линия является самой яркой почти во всём рассматриваемом диапазоне плотностей и температур (см. спектры на рис. 7), поэтому для излучения на других длинах волн будем считать плазму прозрачной.

В формулы для вероятностей элементарных процессов входит спектральная плотность излучения $W(\omega/T)$, которая определяется решением уравнения переноса в заданной геометрии. Чтобы найти концентрации ионов, не решая уравнения переноса, воспользуемся широко известным приближённым способом, основанном на применении escape-фактора, полученного с учётом плоской геометрии [7]. Этот escape-фактор определяет собой вероятность вылета фотонов, имеющих доплеровский профиль линии с центром $\omega_0=91.8$ эВ, за пределы рассматриваемого слоя в зависимости от глубины, на которой находится источник, а также температуры и плотности вещества.

Итак, для описания линии Ly_α используем ескаре-фактор в уравнениях кинетики вместо спектральной плотности излучения $W(\omega/T)$, а для остальных переходов полагаем $W(\omega/T) = 0$.

1.2 Уравнения поуровневой кинетики

Обозначим через w_{if} вероятность перехода электрона из состояния i в состояние f . В случае реакций с фотонами это число спонтанных радиационных переходов в единицу времени, приходящихся на один атом. В случае столкновительных процессов это число актов возбуждения в единицу времени на один атом, которое пропорционально концентрации электронов N_e [3]:

$$w_{if} = N_e \langle v\sigma_{if} \rangle,$$

где σ_{if} — эффективное сечение процесса возбуждения в см^2 , v — скорость налетающих электронов.

Зная функцию распределения электронов по энергиям $F(\varepsilon)$, можем написать

$$\langle v\sigma_{if} \rangle = \int_{\Delta\varepsilon}^{\infty} v\sigma_{if}(\varepsilon)F(\varepsilon)d\varepsilon,$$

где $\Delta\varepsilon$ — энергия возбуждения.

Заметим, что в случае термодинамического равновесия распределение свободных электронов по энергиям $F(\varepsilon)$ является максвелловским:

$$F(\varepsilon) = \frac{2}{\sqrt{\pi T^3}} \sqrt{\varepsilon} \exp(-\varepsilon/T).$$

Вероятность процесса фотоионизации равна:

$$w_{i\nu} = \int_{E_i}^{\infty} N_\omega c \sigma_{i\nu} d\omega,$$

где E_i — энергия ионизации, σ_{iv} — сечение фотоионизации, N_ω — плотность квантов с энергией ω .

Если в начальном состоянии имеются три частицы, то выражения для вероятностей выглядят иначе. Например, для Z^x -частичной рекомбинации имеем

$$w^{ir} = N_e^2 \int \int v_1 v_2 \sigma_r F(\varepsilon_1) F(\varepsilon_2) d\varepsilon_1 d\varepsilon_2.$$

Здесь σ_r имеет размерность $\text{см}^4 \cdot \text{с}$, но также называется сечением.

Таким образом, получаем зависимости вероятностей рассматриваемых процессов от концентраций частиц (фотонов или электронов):

ионизация:	$w^{ii} \sim N_e;$
Z^x -частичная рекомбинация:	$w^{ir} \sim N_e^2;$
фотоионизация:	$w^{phi} \sim W(\omega/T);$
фоторекомбинация:	$w^{phr} \sim N_e(1 + W(\omega/T));$
поглощение:	$w^{abs} \sim W(\omega/T);$
излучение:	$w^{em} \sim (1 + W(\omega/T));$
возбуждение:	$w^{ex} \sim N_e;$
гашение:	$w^{dex} \sim N_e.$

Так как ранее мы сделали утверждение, что поле излучения $W(\omega/T)$ мало за исключением интервала вблизи $\omega \simeq 91.8$ эВ, то вероятности процессов фотоионизации и поглощения в спектральных линиях полагаются равными нулю, за исключением процесса поглощения при переходе $1s \rightarrow 2p$ в Li^{2+} .

Для вероятностей основных элементарных процессов используются известные приближённые формулы, в частности, приближение Лотца [9, 10] и Крамерса [8, 11]. Энергии и силы осцилляторов, используемые для расчётов этих скоростей, получены с помощью программы FAC (Flexible Atomic Code, [12]).

Запишем систему уравнений для концентраций ионов лития. Для упрощения выкладок будем рассматривать не весь спектр лития и его ионов, а лишь ту часть, для которой главное квантовое число $n < 3$. Необходимо найти всего девять относительных концентраций, а именно: $x_{1s^2 2s}$, $x_{1s^2 2p}$, x_{1s^2} , $x_{1s 2s}$, $x_{1s 2p}$, x_{1s} , x_{2s} , x_{2p} , $x_{j=3}$. Как показывают сравнения расчётных спектров для различных n , этого достаточно, чтобы адекватно учитывать излучение в линии Ly_α .

Получаем девять уравнений баланса. В качестве примера приведём уравнения для состояний нейтрального Li, основного $1s^2 2s$ и возбуждённого $1s^2 2p$:

$$\begin{aligned} \frac{dn_{1s^2 2s}}{dt} = & n_{1s^2 2p} w_{1s^2 2p \rightarrow 1s^2 2s}^{dex} - n_{1s^2 2s} w_{1s^2 2s \rightarrow 1s^2 2p}^{ex} + n_{1s^2 2p} w_{1s^2 2p \rightarrow 1s^2 2s}^{em} - \\ & - n_{1s^2 2s} w_{1s^2 2s \rightarrow 1s^2 2p}^{abs} + n_{1s^2} w_{1s^2 \rightarrow 1s^2 2s}^{ir} - n_{1s^2 2s} w_{1s^2 2s \rightarrow 1s^2}^{ii} + n_{1s^2} w_{1s^2 \rightarrow 1s^2 2s}^{phr} + \\ & + n_{1s 2s} w_{1s 2s \rightarrow 1s^2 2s}^{ir} - n_{1s^2 2s} w_{1s^2 2s \rightarrow 1s 2s}^{ii} + n_{1s 2s} w_{1s 2s \rightarrow 1s^2 2s}^{phr}; \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{dn_{1s^2 2p}}{dt} = & n_{1s^2 2s} w_{1s^2 2s \rightarrow 1s^2 2p}^{ex} - n_{1s^2 2p} w_{1s^2 2p \rightarrow 1s^2 2s}^{dex} + n_{1s^2 2s} w_{1s^2 2s \rightarrow 1s^2 2p}^{abs} - \\ & - n_{1s^2 2p} w_{1s^2 2p \rightarrow 1s^2 2s}^{em} + n_{1s^2} w_{1s^2 \rightarrow 1s^2 2p}^{ir} - n_{1s^2 2p} w_{1s^2 2p \rightarrow 1s^2}^{ii} + n_{1s^2} w_{1s^2 \rightarrow 1s^2 2p}^{phr} + \\ & + n_{1s 2p} w_{1s 2p \rightarrow 1s^2 2p}^{ir} - n_{1s^2 2p} w_{1s^2 2p \rightarrow 1s 2p}^{ii} + n_{1s 2p} w_{1s 2p \rightarrow 1s^2 2p}^{phr}. \end{aligned}$$

Будем рассматривать квазистационарный случай, который имеет место, если скорости изменения температуры T и плотности электронов N_e много меньше скоростей изменения концентраций $\frac{dn_{js}}{dt}$. Тогда в уравнениях баланса можно положить $\frac{dn_{js}}{dt} = 0$, при этом зафиксировав T и N_e .

Введём обозначение $x_j = \sum_s x_{js}$ и заметим, что $\sum_j x_j = 1$, где кратность ионизации пробегает для Li значения $j = 0, 1, 2, 3$.

Для иона j -ой кратности просуммируем уравнения баланса различных состояний этого иона и получим четыре уравнения вида:

$$I_{j-1 \rightarrow j} x_{j-1} + R_{j+1 \rightarrow j} x_{j+1} - I_{j \rightarrow j+1} x_j - R_{j \rightarrow j-1} x_j = 0,$$

где I отвечает за ионизацию (содержит вероятности процессов ионизации и фотоионизации), а R отвечает за рекомбинацию (содержит вероятности процессов Z^x -частичной рекомбинации и фоторекомбинации). В общем случае эти коэффициенты зависят от концентраций возбужденных состояний ионов. Заметим, что уравнения баланса устроены так, что после проведённого суммирования слагаемые, содержащие вероятности процессов возбуждения/гашения и излучения/поглощения сокращаются. Эти процессы внутренние, то есть они идут без изменения кратности ионизации. Таким образом, получаем первую систему уравнений

$$\left\{ \begin{array}{l} -I_{0 \rightarrow 1}x_0 + R_{1 \rightarrow 0}x_1 = 0 \\ I_{0 \rightarrow 1}x_0 - (I_{1 \rightarrow 2} + R_{1 \rightarrow 0})x_1 + R_{2 \rightarrow 1}x_2 = 0 \\ I_{1 \rightarrow 2}x_1 - (I_{2 \rightarrow 3} + R_{2 \rightarrow 1})x_2 + R_{3 \rightarrow 2}x_3 = 0 \\ I_{2 \rightarrow 3}x_2 - R_{3 \rightarrow 2}x_3 = 0 \\ \sum_{j=0}^3 x_j = 1 \end{array} \right. \quad \text{или} \quad \left\{ \begin{array}{l} \frac{x_1}{x_0} = \frac{I_{0 \rightarrow 1}}{R_{1 \rightarrow 0}} \\ \frac{x_2}{x_1} = \frac{I_{1 \rightarrow 2}}{R_{2 \rightarrow 1}} \\ \frac{x_3}{x_2} = \frac{I_{2 \rightarrow 3}}{R_{3 \rightarrow 2}} \\ \sum_{j=0}^3 x_j = 1 \end{array} \right. , \quad (3)$$

где в общем виде

$$I_{j \rightarrow j+1} = \sum_{s,s'} \left(w_{js \rightarrow j+1,s'}^{ii} \frac{x_{js}}{x_j} + w_{js \rightarrow j+1,s'}^{phi} \frac{x_{js}}{x_j} \right),$$

$$R_{j+1 \rightarrow j} = \sum_{s,s'} \left(w_{j+1,s \rightarrow js'}^{ir} \frac{x_{j+1,s}}{x_{j+1}} + w_{j+1,s \rightarrow js'}^{phr} \frac{x_{j+1,s}}{x_{j+1}} \right).$$

Напишем теперь систему уравнений для внутренних процессов, то есть уравнения равновесия между уровнями для каждого иона, а именно для иона кратности $j = 0$ (переходы $1s^22s \leftrightarrow 1s^22p$), для иона кратности $j = 1$

(переходы $1s2s \leftrightarrow 1s2p$ и $1s^2 \leftrightarrow 1s2p$), для иона кратности $j = 2$ (переходы $1s \leftrightarrow 2p$ и $2s \leftrightarrow 2p$):

$$\left\{ \begin{array}{l} x_{1s^2 2s} (w_{1s^2 2s \rightarrow 1s^2 2p}^{ex} + w_{1s^2 2s \rightarrow 1s^2 2p}^{abs}) = x_{1s^2 2p} (w_{1s^2 2p \rightarrow 1s^2 2s}^{dex} + w_{1s^2 2p \rightarrow 1s^2 2s}^{em}) \\ x_{1s^2} (w_{1s^2 \rightarrow 1s 2p}^{ex} + w_{1s^2 \rightarrow 1s 2p}^{abs}) = x_{1s 2p} (w_{1s 2p \rightarrow 1s^2}^{dex} + w_{1s 2p \rightarrow 1s^2}^{em}) \\ x_{1s 2s} (w_{1s 2s \rightarrow 1s 2p}^{ex} + w_{1s 2s \rightarrow 1s 2p}^{abs}) = x_{1s 2p} (w_{1s 2p \rightarrow 1s 2s}^{dex} + w_{1s 2p \rightarrow 1s 2s}^{em}) \\ x_{1s} (w_{1s \rightarrow 2p}^{ex} + w_{1s \rightarrow 2p}^{abs}) = x_{2p} (w_{2p \rightarrow 1s}^{dex} + w_{2p \rightarrow 1s}^{em}) \\ x_{2s} (w_{2s \rightarrow 2p}^{ex} + w_{2s \rightarrow 2p}^{abs}) = x_{2p} (w_{2p \rightarrow 2s}^{dex} + w_{2p \rightarrow 2s}^{em}) \end{array} \right. \quad . \quad (4)$$

Переходы $1s^2 \leftrightarrow 1s2s$ и $1s \leftrightarrow 2s$ не учитываются (они запрещены правилами отбора в дипольном приближении). Очевидно, что для иона кратности $j = 3$ (голое ядро) подобных уравнений не существует.

В дополнение к нашим двум системам уравнений (3) и (4) имеет место условие нормировки:

$$\left\{ \begin{array}{l} x_{1s^2 2s} + x_{1s^2 2p} = x_0 \\ x_{1s^2} + x_{1s 2s} + x_{1s 2p} = x_1 \\ x_{1s} + x_{2s} + x_{2p} = x_2 \\ x_{j=3} = x_3. \end{array} \right. \quad (5)$$

Таким образом, с помощью систем уравнений (3)-(5), можно рассчитать состав плазмы.

Поговорим теперь о радиационной части задачи. Итак, мы решили рассматривать излучение только на определённой частоте 91.8 эВ. Выясним, как будут вести себя фотоны с такой частотой в исследуемом веществе.

Вероятность того, что фотон с частотой ω проникнет на оптическую глубину τ_ω до того, как будет поглощён, имеет вид

$$P_\omega = \exp(-\tau_\omega);$$

$$\tau_\omega(z^*) = \int_0^{z^*} dz \kappa_\omega(z),$$

где $\kappa_\omega(z)$ — коэффициент поглощения фотонов с частотой ω на глубине слоя z с размерностью 1/см. Так как фотоны спектральной линии распределены вблизи $\omega_{1s \leftrightarrow 2p}$, то для получения вероятности для всех фотонов необходимо усреднить её по частотам с некоторым профилем:

$$P_e = \int_0^\infty J(\omega) \exp(-\tau_\omega) d\omega.$$

В частном случае для доплеровского профиля имеем

$$J(\omega) = \frac{1}{\sqrt{\pi}D} \exp\left[-\frac{(\omega - \omega_{1s \leftrightarrow 2p})^2}{D^2}\right],$$

где D — доплеровская ширина линии. Профиль нормирован условием

$$\int_0^\infty J(\omega) d\omega = 1.$$

Нас интересует вероятность выхода фотонов (escape-фактор) в зависимости от оптической глубины центра линии для связанно-связанных переходов, то есть

$$P_e(\tau_c) = \int_0^\infty J(\omega) \exp\left[-\frac{\tau_c J(\omega)}{J(\omega_{1s \leftrightarrow 2p})}\right] d\omega,$$

где $\tau_c(z^*) = \int_0^{z^*} \kappa_{\omega_{1s \leftrightarrow 2p}}(z) dz$ — оптическая глубина в центре линии Ly_α . Коэффициент поглощения в этом случае имеет вид

$$\kappa_{\omega_{1s \leftrightarrow 2p}}(z) = 2\pi^2 \alpha a_0^2 f_{1s \leftrightarrow 2p} J(\omega_{1s \leftrightarrow 2p}) n_{1s}(z),$$

где a_0 — боровский радиус, α — постоянная тонкой структуры.

В работе воспользуемся представленной в [7] аппроксимацией для $P_e(\tau_c)$, в которой уже учитывается плоская геометрия:

$$P_e(\tau_c) = \begin{cases} \frac{1}{1 + 0.65\tau_c + 0.29\tau_c^2}, & \tau_c \leq 5.18 \\ \frac{0.5456}{\tau_c \sqrt{\ln(\tau_c)}}, & \tau_c \geq 5.18 \end{cases}.$$

Величина $P_e(\tau_c)$ представляет собой вероятность вылета квантов из слоя плазмы толщины L в одну сторону. Зная её, мы можем определить и вероятность вылета квантов из всего слоя в обоих направлениях:

$$P(z) = \frac{1}{2}P_e[\tau_c(z)] + \frac{1}{2}P_e[\tau_c(L - z)].$$

Запишем выражения для скоростей процессов спонтанного излучения и поглощения фотонов в линии Ly_α с помощью этого эскапе-фактора:

$$w_{2p \rightarrow 1s}^{em} = A_{1s,2p}P(z),$$

$$w_{1s \rightarrow 2p}^{abs} = 0.$$

Заметим, что хотя мы и положили $w_{1s \rightarrow 2p}^{abs} = 0$, поглощение в линии всё-таки учитывается, но косвенным образом, через эскапе-фактор в выражении для $w_{2p \rightarrow 1s}^{em}$.

2. Результаты расчётов

2.1 Ионизационное равновесие

Для численного решения стационарной задачи задаются три параметра, определяющие состояние плазмы: температура T , плотность свободных

электронов N_e и толщина слоя L . Для них был выбран следующий диапазон:

$$\begin{aligned} T &= 5 \div 50 \text{ эВ}, \\ N_e &= 10^{10} \div 10^{19} \text{ 1/см}^3, \\ L &= 0.01 \text{ см}. \end{aligned}$$

Следует заметить, что вместо плотности электронов N_e можно использовать плотность вещества ρ или средний заряд, приходящийся на одно ядро

$Z_0 = \sum_j jx_j$. Они связаны между собой следующими соотношениями:

$$N_e = Z_0 n_i, \quad \rho = \frac{An_i}{N_A}.$$

Задав одну из этих величин и получив концентрации ионов при фиксированной температуре, можно определить две остальные. В данном случае удобнее всего задать концентрацию электронов N_e , так как она в явном виде входит в выражения для вероятностей элементарных процессов.

На рис. 1 сплошными линиями обозначены изотермы ионизации лития в приближении столкновительно-излучательного равновесия, полученные при использовании escape-фактора; пунктирными линиями обозначены изотермы ионизации, полученные при учёте поля излучения с помощью программы BELINE, речь о которой пойдёт ниже. Для решения задачи использовался метод итераций. Нулевое приближение вычислялось либо по модели коронального равновесия (в общем случае в приближении прозрачной плазмы, см. рис. 2), либо в приближении Саха [6, 13, 14] (см. рис. 3). Важно отметить, что в обоих случаях результат (рис. 1) получается одинаковым.

Как видно из рис. 1, при переходе от малых плотностей к большим кривые изотерм имеют ярко выраженные изгибы, что является прямым следствием учёта перепоглощения фотонов в исследуемой линии, причём метод escape-фактора несколько преувеличивает этот эффект.

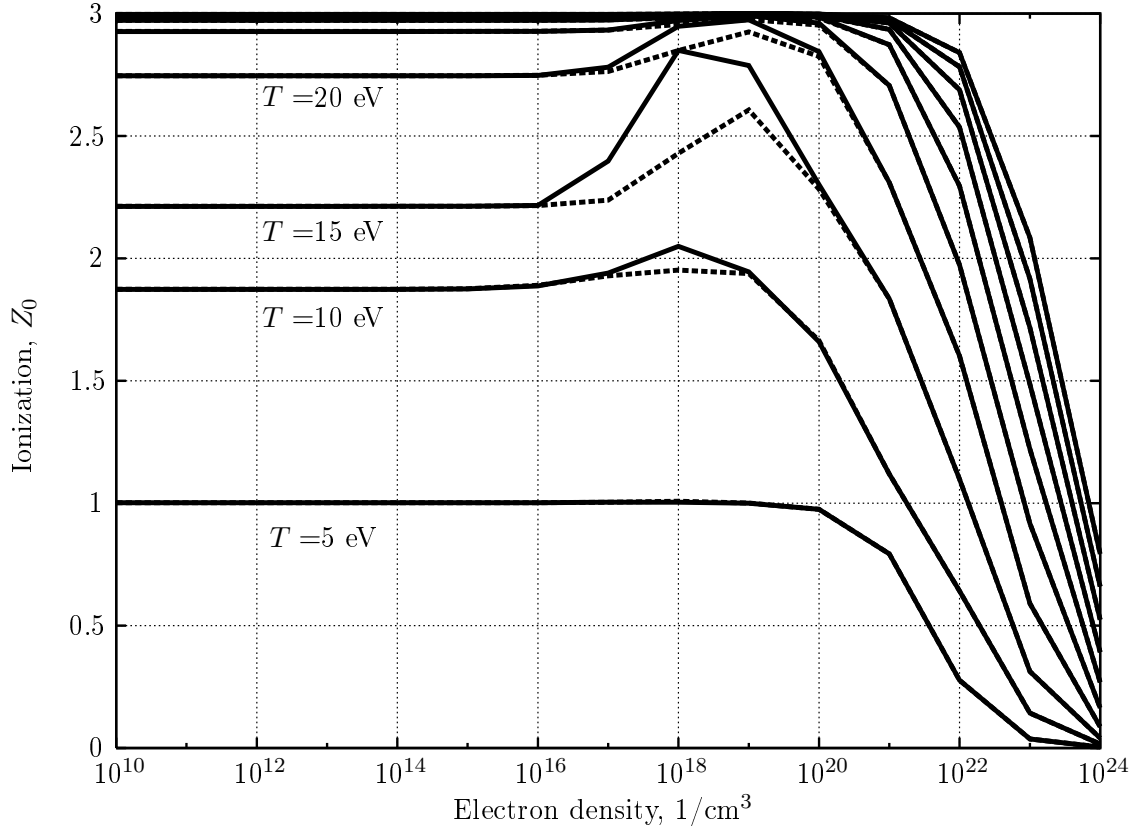


Рис. 1. Изотермы ионизации лития в зависимости от температуры T и плотности электронов N_e в приближении столкновительно-излучательного равновесия с учётом эффекта перепоглощения фотонов. Сплошные линии — расчёт для плоского слоя толщины $L = 0.01$ см (в точке $z = L/2$) с использованием escape-фактора. Пунктирные линии — расчёт по программе BELINE для шара радиуса $R = 0.01$ см (в точке $r = 0$) при учёте поля излучения.

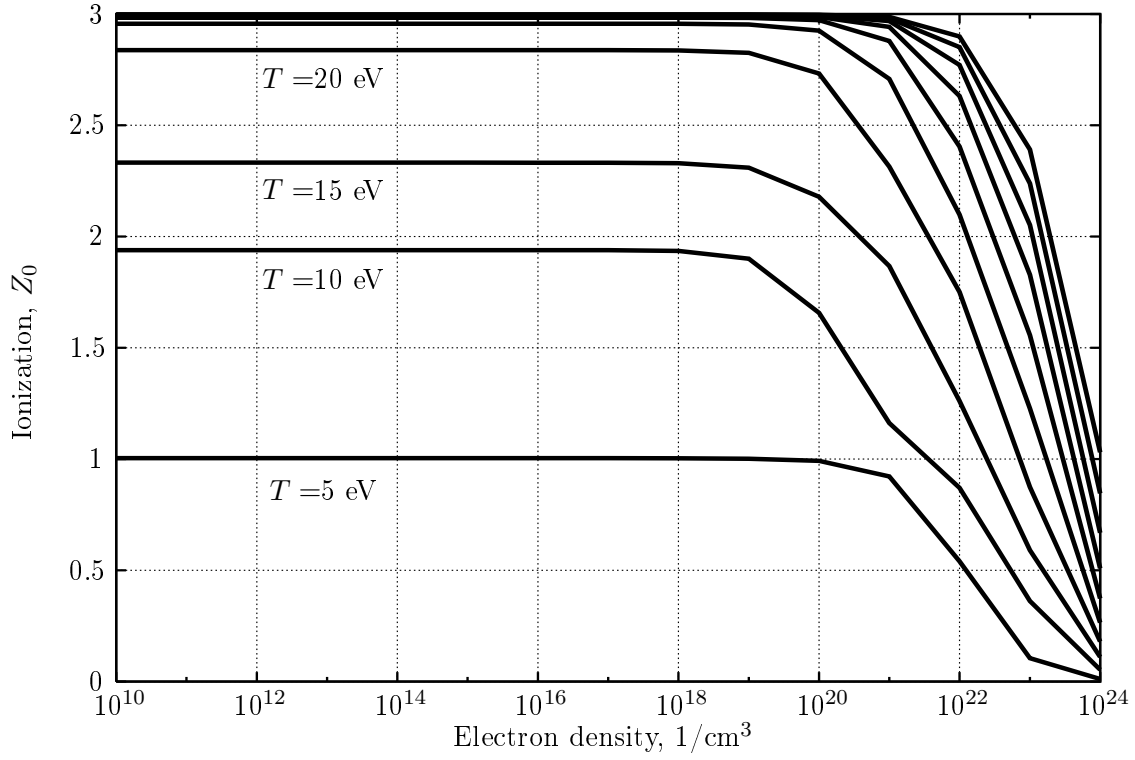


Рис. 2. Изотермы ионизации лития в зависимости от температуры T и плотности электронов N_e в приближении прозрачной плазмы.

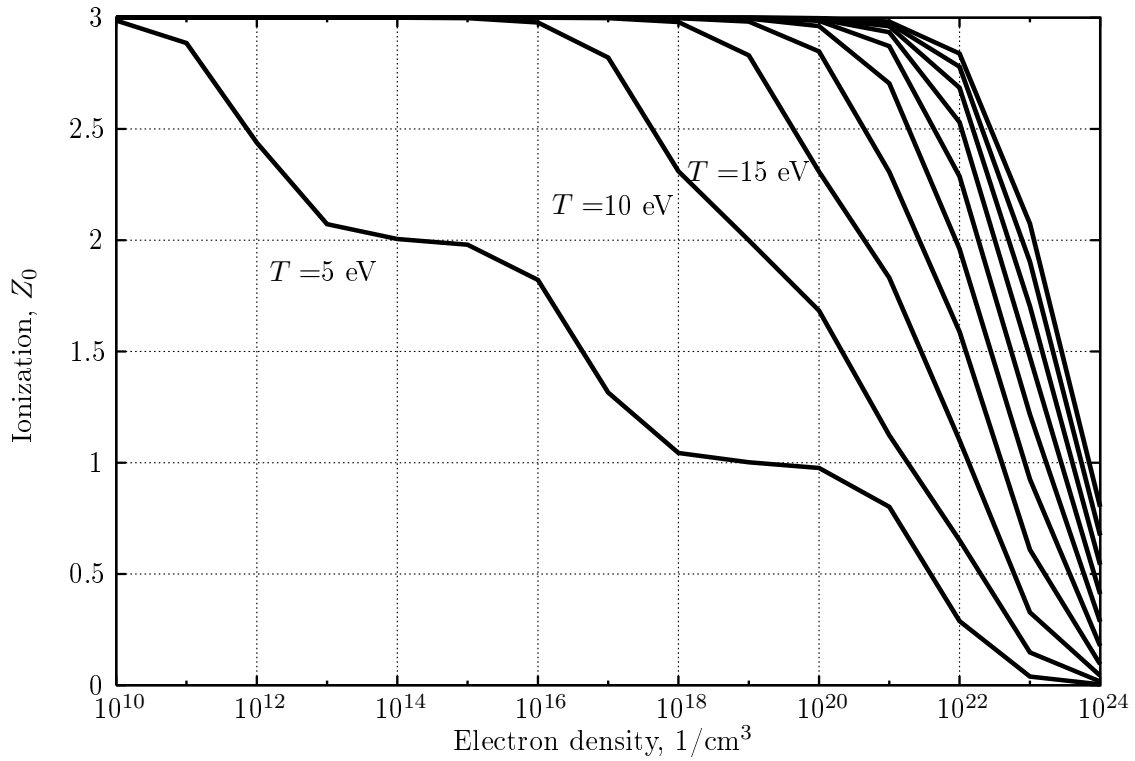


Рис. 3. Изотермы ионизации лития в зависимости от температуры T и плотности электронов N_e в случае термодинамического равновесия по модели Саха.

Результат, приведенный на рис. 1, отображает влияние конечного размера плазмы на её ионизационное состояние. Изотермы ионизации, полученные для плазмы с конечными размерами в приближении столкновительно-излучательного равновесия, существенно отличаются от изотерм в приближениях оптически тонкой плазмы (рис. 2) и оптически плотной плазмы (рис. 3).

На рис. 4 приведены зависимости относительных концентраций ионов лития от температуры при плотности $N_e = 10^{18}$ 1/см³, на рис. 5 — зависимости escape-фактора от глубины слоя для различных плотностей. Из рис. 5 видно, что при малых плотностях плазма почти прозрачна, и все фотоны покидают слой. С ростом плотности плазма становится непрозрачной, фотоны начинают поглощаться, и вероятность их вылета из центра слоя существенно уменьшается. При больших плотностях излучение линии Ly_α становится близким к равновесному. Фотоны покидают плазму только из узкого приповерхностного слоя.

Наиболее интересными для изучения являются плотности свободных электронов от 10^{16} 1/см³ до 10^{19} 1/см³ и температуры от 10 эВ до 30 эВ. Из рисунков 1 - 5 понятно, что именно в этом диапазоне параметров плазма сильно отличается от обоих известных приближений — оптически тонкой и оптически плотной плазмы.

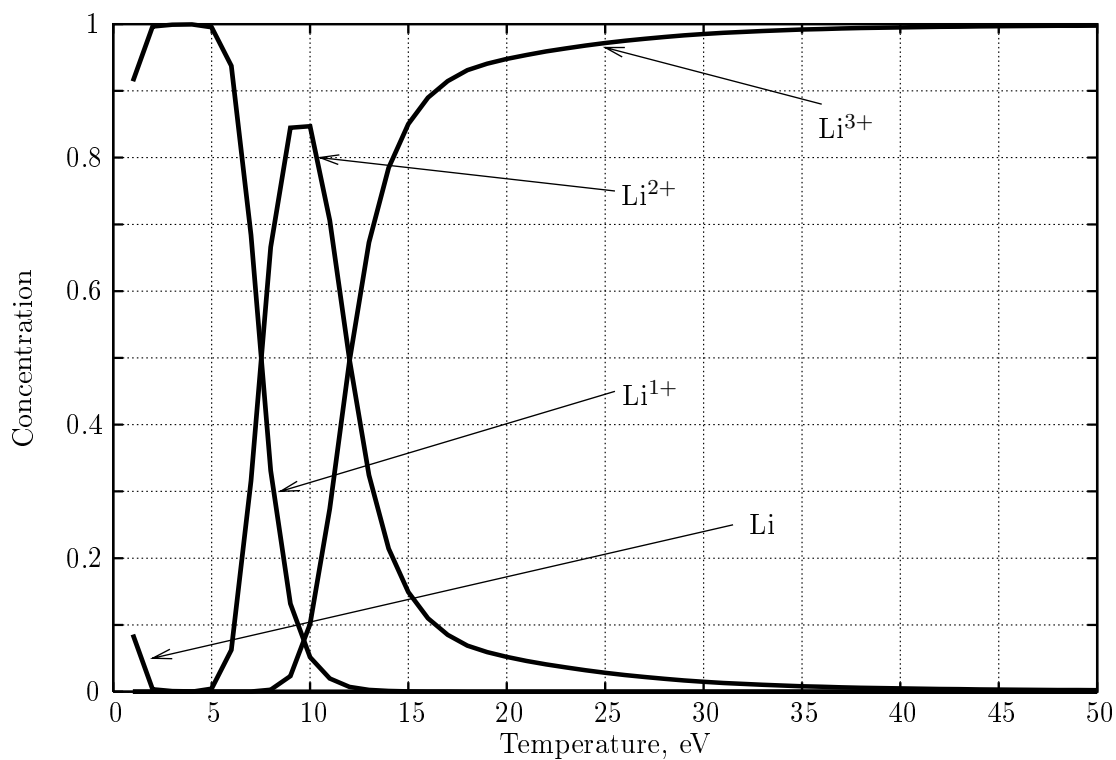


Рис. 4. Зависимость относительных концентраций различных ионов лития от температуры T при плотности свободных электронов $N_e = 10^{18}$ $1/\text{см}^3$.

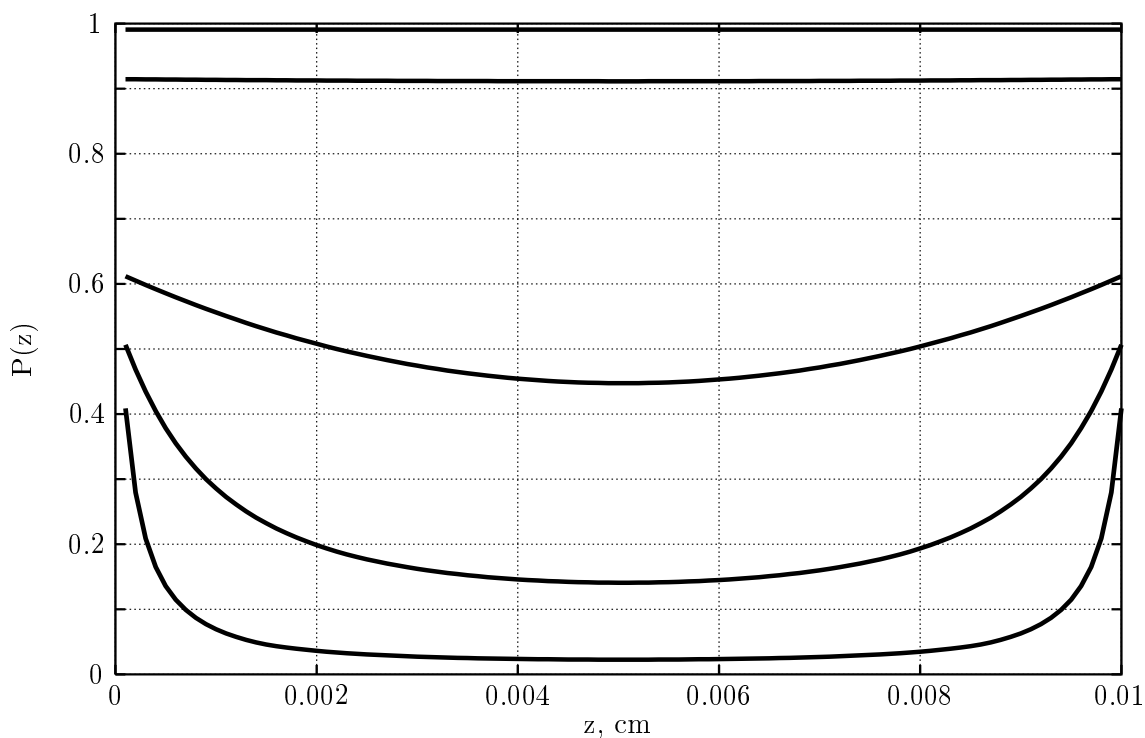


Рис. 5. Зависимость эскаре-фактора от координаты z при температуре $T = 20$ эВ для плотностей от 10^{15} $1/\text{см}^3$ (верхняя линия) до 10^{19} $1/\text{см}^3$ (нижняя линия).

2.2 Излучение плоского слоя в квазистационарном приближении

Получив информацию о распределении концентраций ионов по слою и вероятность вылета фотонов за пределы слоя, можно вычислить количество квантов, испускаемых в одном из двух возможных направлений с поверхности площадью 1 см^2 за одну секунду, а зная энергию квантов $\omega_{2p \rightarrow 1s}$, вычислить поток излучения при фиксированной температуре и плотности:

$$q = \omega_{2p \rightarrow 1s} A_{2p \rightarrow 1s} \int_0^L n_{2p}(z) P_e(z) dz. \quad (6)$$

Как правило, интерес представляет отношение излученной в диапазоне $13.5 \text{ нм} \pm 1\%$ энергии¹ E_r в угол 2π к удвоенной полной внутренней энергии E_{int} , которое характеризует эффективность конверсии:

$$C = \frac{1}{4} \frac{E_r}{E_{int}}. \quad (7)$$

Излученная энергия на единицу площади даётся выражением

$$E_r = 2q\tau,$$

где τ – некоторое характерное время высвечивания. Для его оценки воспользуемся простым приближением:

$$\tau \sim \frac{L}{v},$$

где L — толщина слоя, v — скорость разлёта плазмы в см/сек. В соответствии с [15] положим

$$v = 2.2 \cdot 10^8 \sqrt{\frac{3\theta Z_0}{1836A}}.$$

¹Мы считаем, что при рассматриваемых плотностях вся энергия линии Ly_α излучается в необходимом диапазоне.

Полная внутренняя энергия на единицу площади плоского слоя толщины L имеет вид

$$E_{int} = \frac{3}{2}T \int_0^L [n_i(z) + N_e(z)] dz + \int_0^L \sum_{js} n_{js}(z) E_{js} dz, \quad (8)$$

где E_{js} — энергия иона кратности j в состоянии s , отсчитанная от основного состояния нейтрального лития.

На рис. 6 приведены графики зависимости коэффициента C от температуры для плотностей 10^{17} $1/\text{см}^3$ — 10^{19} $1/\text{см}^3$, полученные с использованием эскаре-фактора для плоского слоя плазмы лития. Максимальная эффективность конверсии наблюдается при температуре $T \sim 30$ эВ и плотности свободных электронов $N_e \sim 10^{19}$ $1/\text{см}^3$.

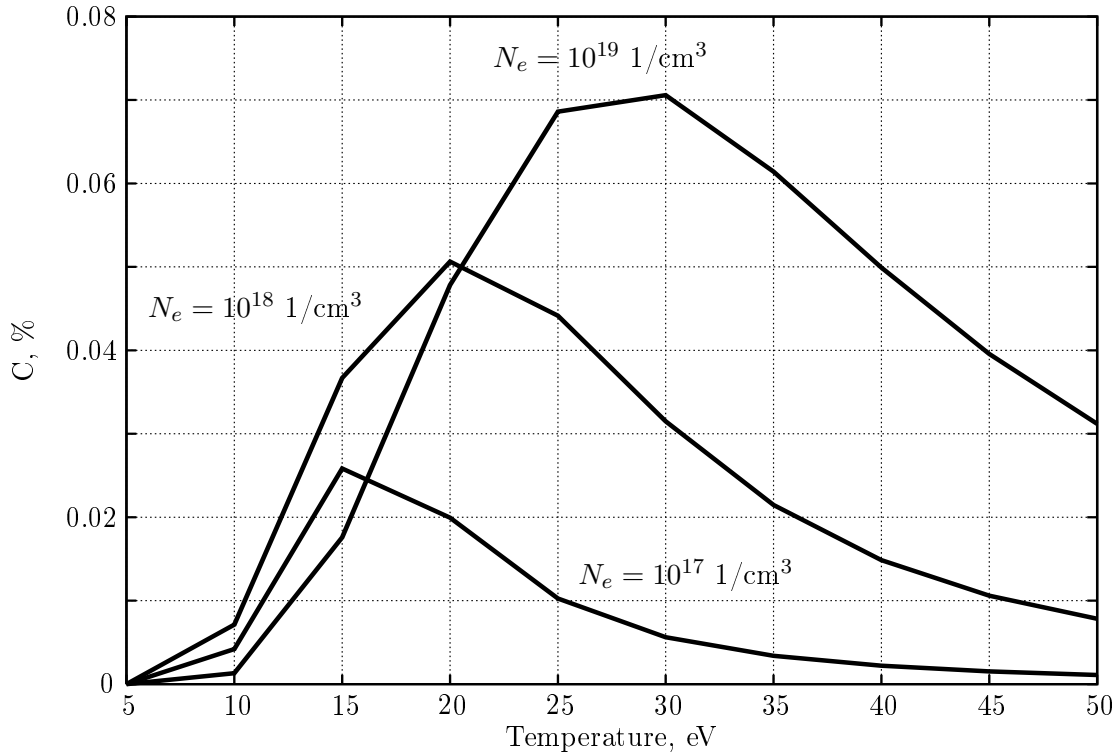


Рис. 6. Оценка эффективности конверсии излучения в диапазоне $13.5 \text{ нм} \pm 1\%$ для плоского плазменного слоя толщины $L = 0.01$ см, рассчитанная с использованием эскаре-фактора.

2.3 Излучение литиевого шара

Решение полной системы уравнений поуровневой кинетики совместно с уравнением переноса излучения проведено с помощью программы BELINE [16]. Расчёты проведены для литиевого шара при параметрах: $T = 5 \div 50$ эВ, $N_e = 10^{10} \div 10^{19}$ 1/см³, радиус шара $R = 0.01$ см.

С помощью программы BELINE были получены изотермы ионизации, которые близки к изотермам, полученным при использовании escape-фактора (рис. 1). Таким образом, решение кинетических уравнений с учётом влияния излучения с помощью escape-фактора даёт для степени ионизации хороший результат при значительном выигрыше во времени счёта.

Полученные спектры излучения приведены на рис. 7. Зная весь спектр, можно определить ещё одну важную характеристику излучения, спектральную чистоту в диапазоне 13.5 нм $\pm 1\%$, то есть отношение энергии, излученной в 2%-ом интервале, к энергии, излученной во всем диапазоне спектра. На рис. 8 приведены зависимости спектральной чистоты от температуры и плотности. Из графиков видно, что при малых и средних плотностях эта линия является самой яркой в спектре.

Оценка эффективности конверсии (см. рис. 9) по формуле (7) согласуется с результатами расчётов в приближении escape-фактора только для малых плотностей, когда плазма близка к прозрачной (сравни рис. 6 и рис. 9). При повышении плотности максимальные значения конверсии по согласованной модели несколько превышают значения, полученные по модели с использованием escape-фактора, в частности, для плотности $N_e = 10^{19}$ 1/см³ это значение равно 1.7.

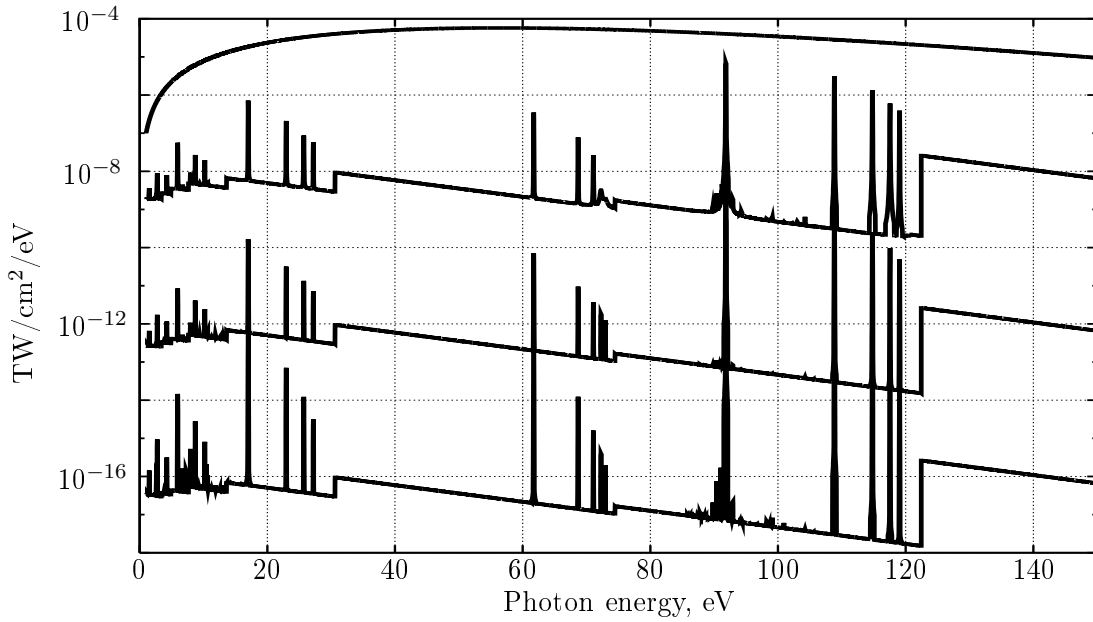


Рис. 7. Спектральный поток интенсивности излучения плазменного литиевого шара радиуса $R = 0.01$ см при температуре $T = 20$ эВ. Нижняя линия для плотности $N_e = 10^{15}1/\text{см}^3$, следующие две вышележащие линии для плотностей $N_e = 10^{17}1/\text{см}^3$ и $N_e = 10^{19}1/\text{см}^3$ соответственно. Верхняя линия обозначает планковское излучение чёрного тела при той же температуре.

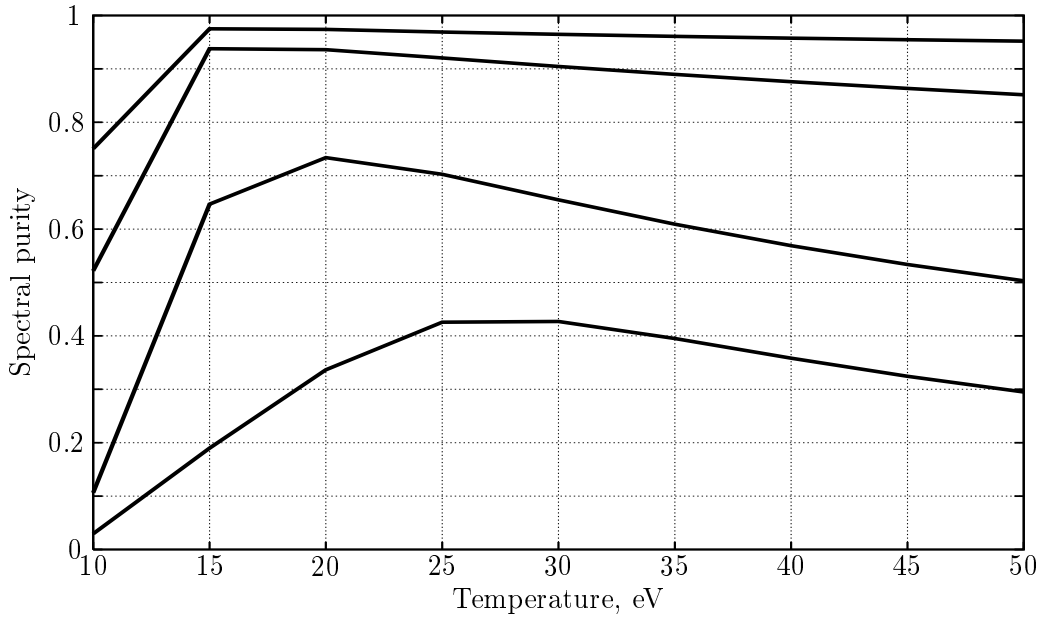


Рис. 8. Спектральная чистота излучения в диапазоне $13.5 \text{ нм} \pm 1\%$. Нижняя линия соответствует плотности $N_e = 10^{19}1/\text{см}^3$, следующая вышележащая линия для плотности $N_e = 10^{18}1/\text{см}^3$ и так далее до плотности $N_e = 10^{16}1/\text{см}^3$ (дальнейшее уменьшение плотности практически не изменяет спектральную чистоту).

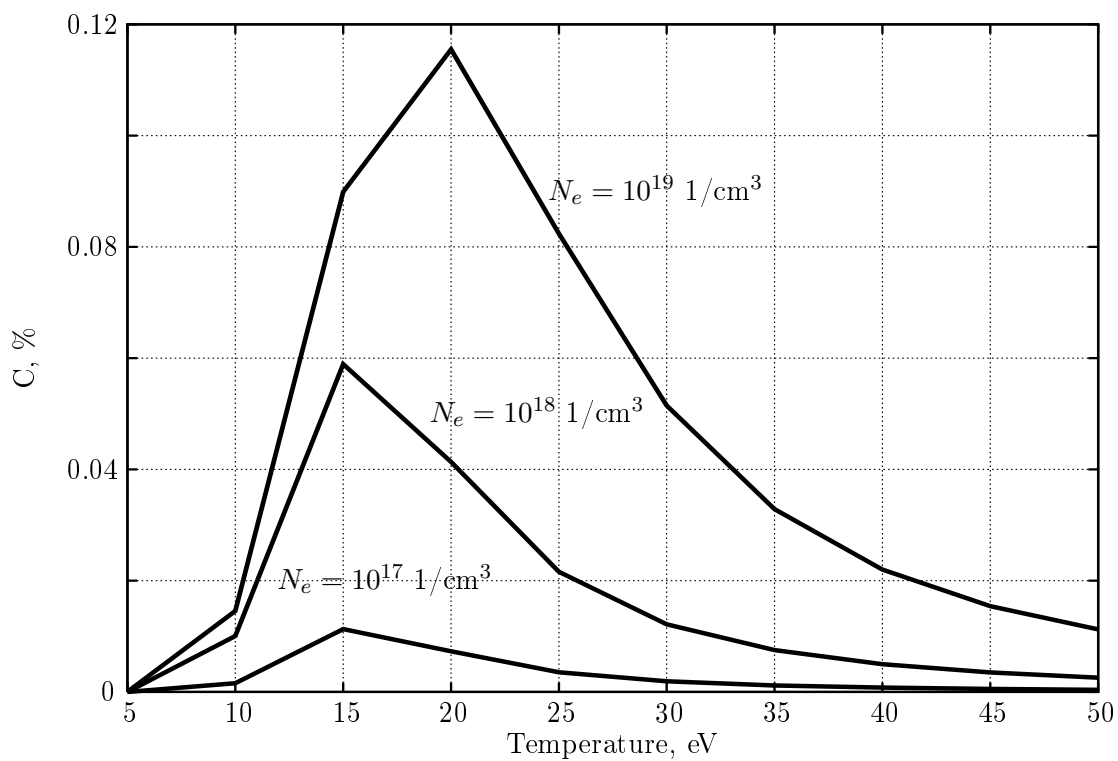


Рис. 9. Оценка конверсии излучения в диапазоне $13.5 \text{ нм} \pm 1\%$ для плазменного шара радиуса $R = 0.01 \text{ см}$, рассчитанная по программе BELINE с учётом поля излучения.

Список литературы

- [1] EUV sources for lithography. Ed. by Vivek Bakshi. SPIE 2006.
- [2] International Technology Road Map for Semiconductors (ITRS). 2003 Edition.
- [3] В.А. Вайнштейн, И.И. Собельман, Е.А. Юков. Возбуждение атомов и уширение спектральных линий. - М.: Наука, 1979.
- [4] Л.М. Биберман, В.С. Воробьёв, И.Т. Якубов. Кинетика неравновесной низкотемпературной плазмы. - М.: Наука, 1982.
- [5] А.Ф. Никифоров, В.Г. Новиков, В.Б. Уваров. Квантово-статистические модели высокотемпературной плазмы и методы расчёта росселандовых пробегов и уравнений состояния. - М.: Физматлит, 2000.
- [6] Д. Михалас. Звёздные атмосферы. Т.1,2. - М.: Мир, 1982.
- [7] J.J. MacFarlane, P. Wang, G.A. Moses. A model for computing radiation transport in non-LTE plasmas, University of Wisconsin, 1990.
- [8] И.И. Собельман. Введение в теорию атомных спектров. - М.: Наука, 1977.
- [9] Р. Каразия. Введение в теорию рентгеновских и электронных спектров свободных атомов. - В.: Мокслас, 1987.
- [10] W. Lotz. Electron-impact ionization cross-sections for atoms up to $Z=108$ // Ztschr. Phys. -1970. - V.232. - P. 101.
- [11] С.И. Брагинский. Вопросы теории плазмы. Под ред. М.А. Леонтовича. - М.: Атомиздат, 1963.
- [12] M.F. Gu FAC Stanford University, 2004.

- [13] Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. Статистическая физика. Часть 1. - М.: Физматлит, 2005.
- [14] Б.М. Смирнов. Введение в физику плазмы. - М.: Наука, 1975.
- [15] И.Ю. Вичев, В.Г. Новиков, А.Д. Соломянная. Моделирование спектров излучения плазмы вольфрама, Математическое моделирование, 2008, т.20, N 7, с.93-106.
- [16] V.G. Novikov, V.V. Ivanov, K.N. Koshelev, V.M. Krivtsov, A.D. Solomyanaya Calculation of tin emission spectra in discharge plasma: The influence of reabsorption in spectral lines // High Energy Density Physics, v.3, pp.198-203, 2007.