

国防科技大学建校 70 周年专题

局域热平衡 Sn 等离子体极紫外辐射
不透明度和发射谱的理论研究*高城^{1)†} 刘彦鹏²⁾ 严冠鹏¹⁾ 闫杰¹⁾ 陈小棋¹⁾ 侯永¹⁾
靳奉涛¹⁾ 吴建华^{1)‡} 曾交龙¹⁾³⁾ 袁建民¹⁾⁴⁾

1) (国防科技大学理学院, 长沙 410073)

2) (西北核技术研究所, 激光与物质相互作用国家重点实验室, 西安 710000)

3) (浙江工业大学理学院, 杭州 310023)

4) (中国工程物理研究院研究生院, 北京 100193)

(2023 年 3 月 26 日收到; 2023 年 5 月 4 日收到修改稿)

锡 (Sn) 是 13.5 nm 光刻光源的材料, Sn 等离子体辐射性质对光源设计意义重大. 基于细致能级模型, 在局域热平衡假设条件下计算得到了 Sn 等离子体辐射不透明度和发射谱. 使用多组态 Dirac-Fock 方法获得了 Sn^{6+} - Sn^{14+} 离子的能级和辐射跃迁振子强度等基本原子参数. 针对波长在 13.5 nm 附近的 4d-4f 和 4p-4d 跃迁系, 重点考虑了 $4d^m-4f^m$ ($m = 1, 2, 3, 4$) 和 $4p^n-4d^n$ ($n = 1, 2, 3$) 的电子关联效应. 在大规模组态相互作用计算中, 每种电荷态离子的精细能级数目约为 20 万. 对较强的吸收谱线 (振子强度大于 0.01), 其长度和速度表示的相对差异为 20%—30%. 基于精密原子参数, 计算了 Sn 等离子体在 30 eV, 0.01 g/cm³ 条件下的透射谱, 与实验结果基本符合. 系统计算了温度 16—30 eV, 密度 0.0001—0.1 g/cm³ 条件下的 Sn 等离子体辐射不透明度和发射光谱, 分析了极紫外 (extreme ultraviolet, EUV) 光谱随温度和密度的变化规律. 研究表明温度一定时, 密度增大会使得 13.5 nm 附近的辐射不透明度和发射谱包络增宽. 而密度一定时, 随着温度的增加, 辐射不透明度和发射谱在 13.5 nm 附近存在明显的窄化效应. 本文工作有助于 EUV 光刻光源的设计和研究.

关键词: 极紫外光源, 细致能级模型, 组态相互作用**PACS:** 31.15.am, 32.30.-r, 31.15.A-**DOI:** 10.7498/aps.72.20230455

1 引言

摩尔定律要求集成电路上的晶体管数目越来越多, 尺寸越来越小^[1,2]. 光刻技术是半导体行业的核心技术之一, 其刻蚀集成电路节点的最小尺寸可以由瑞利公式确定^[3]: $R = k\lambda/NA$, 其中 k 表示工艺因子常数, NA 表示光学孔径, λ 为曝光光源波

长. 为了提高分辨率, 减小工艺因子常数和增大光学孔径数值已经几乎被研究者们做到了极限, 目前聚焦的方向是减小光源波长^[4]. 光刻光源波长从光学波段, 进入深紫外波段, 现在商用光刻光源的最短波长为 13.5 nm, 位于极紫外 (extreme ultraviolet, EUV) 波段^[5].

目前商用的 EUV 光刻光源采用高功率 CO₂ 激光作用在锡 (Sn) 的液滴靶上, 使之处于温度 20—

* 国家自然科学基金 (批准号: 12074430, 11974423) 和激光与物质相互作用国家重点实验室开放基础研究 (批准号: SKLIM2008) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: gaocheng@nudt.edu.cn

‡ 通信作者. E-mail: wujh@nudt.edu.cn

40 eV, 电子密度 10^{18} – 10^{19} cm $^{-3}$ 的等离子体状态^[5]. 在此温度和密度条件下, Sn 等离子体中的主要离子类型是高离化态的 Sn $^{8+}$ –Sn $^{14+}$ 离子, 这些离子的 4d-4f 和 4p-4d 等跃迁线集中在 13.5 nm 附近^[6,7]. 工艺上要求光源中心波长 13.5 nm, 带宽 2%^[4]. 因此, 研究在此波长范围内的 Sn 等离子体辐射性质对 EUV 光源的数值模拟和工业设计非常重要. 实验上, 基于激光等离子体相互作用和电子束离子阱等平台, 人们获得了不同电荷态 Sn 离子的谱线, 并认证了部分谱线, 但是与实用需求还有很大距离^[8–15]. 同时, 基于不同的理论方法, 人们计算获得了 EUV 到可见光波段的不同电荷态 Sn 离子的辐射原子参数^[13–18]. 如基于 FSCC (Fock space coupled cluster) 方法^[19], Windberger 等^[13] 计算了 Sn $^{11+}$ –Sn $^{14+}$ 的价电子跃迁谱线, 波长范围覆盖 260–780 nm. 基于 CI+MBPT (configuration interaction many body perturbation theory) 方法^[20]; Torretti 等^[14] 计算了 Sn $^{7+}$ –Sn $^{10+}$ 在光学和 EUV 波段的谱线.

除了对 Sn 高电荷态离子能级和辐射跃迁参数的测量, 人们也开展了 Sn 等离子体辐射不透明度和发射谱的实验研究^[21–26]. 例如, Fujioka 等^[22] 测量了温度约为 30 eV, 密度约为 0.01 g/cm 3 的 Sn 等离子体透射谱. 陈鸿等^[24] 使用激光辐照 Sn 的液滴靶, 对产生的极紫外辐射的谱线结构和时空分布特性进行了研究. Su 等^[25] 测量了激光产生的 Sn 等离子体的 EUV 辐射特性的演化, 并研究了自吸收的规律. 理论方面, 为了获得 Sn 等离子体准确的 EUV 辐射性质, 基于细致原子模型的计算是必要的. 但是对于 Sn 这种含有多个电子的复杂原子体系, 其辐射不透明度的精密计算是困难的. 因为 Sn $^{10+}$ 及其邻近电荷态离子具有未填满的 4d 轨道, 轨道塌缩效应主要导致两个方面的计算挑战: 一是组态相互作用很强, 计算中需要考虑复杂的电子关联效应, 以获得精确的原子参数; 二是能级简并效应显著, 多电子激发组态仍然是束缚态, 对辐射不透明度的贡献不可忽略, 因此增加了辐射不透明度精细计算的困难. 近年来, 基于细致物理模型对 Sn 等离子体辐射不透明度的理论研究不多^[27–30]. 且这些研究在计算原子参数时, 最多考虑到双电子激发组态, 一般至多考虑了 4d 2 -4f 2 和 4p 2 -4d 2 的电子关联效应. 最近, 基于 COWAN 程序^[31], Torretti 等^[29] 和 Sheil 等^[30] 开展了大规模组态相互作用计

算, 将组态规模扩展到三电子激发态, 电子关联效应至多考虑到 4d 3 -4f 3 和 4p 3 -d 3 , 发现多电子激发组态对辐射不透明度的贡献不可忽略.

上述的实验和理论工作加深了人们对 Sn 等离子体 EUV 辐射性质的理解, 展示了包含电子关联效应的大规模组态相互作用计算对获得精密原子参数和等离子体辐射性质的重要性. 但是电子关联效应究竟是怎样影响原子参数的, 还需要更多精密计算的验证. 同时, 对 Sn 等离子体宏观辐射性质, 基于细致物理模型的理论研究还很少, 更缺乏对 EUV 辐射性质的系统性研究, 对获得满足工艺要求的 EUV 光源的最优等离子体条件也缺乏研究. 因此, 采取细致物理模型, 系统研究 Sn 等离子体在宽广温度和密度条件下的辐射特性, 为 EUV 光源设计提供理论支持是重要的.

本文基于细致能级模型 (detailed-level-accounting, DLA)^[27,28], 在局域热平衡近似下, 研究 Sn 等离子体在温度 16–30 eV, 密度 0.0001–0.1 g/cm 3 条件下的辐射不透明度和发射性质. 首先基于原子结构计算程序 GRASP2K^[32], 针对典型的高电荷态 Sn 离子 (Sn $^{6+}$ –Sn $^{14+}$), 开展大规模的组态相互作用计算. 对跃迁波长在 13.5 nm 附近的 4d-4f 和 4p-4d 跃迁系, 电子关联效应包括了 4d m -4f m ($m = 1, 2, 3, 4$) 和 4p n -4d n ($n = 1, 2, 3$), 以获得精确的原子参数. 然后分析了单、双和三电子等激发组态对辐射不透明度的贡献, 展示了多电子激发组态对总辐射不透明度的重要性. 最后讨论了在宽广的温度和密度条件下, Sn 等离子体 EUV 辐射的光谱特点和变化规律.

2 DLA 模型

使用 DLA 模型计算辐射不透明度的方法可参见文献^[33–35]. 对温度为 T , 密度为 ρ 的等离子体, 在光子能量 $h\nu$ 处, 其辐射不透明度 κ' 为

$$\rho\kappa'(h\nu) = (\mu_{bb}(h\nu) + \mu_{bf}(h\nu) + \mu_{ff}(h\nu)) \times (1 - e^{-h\nu/k_B T}) + \mu_{scatt}(h\nu), \quad (1)$$

其中 μ_{bb} , μ_{bf} 和 μ_{ff} 分别是束缚-束缚、束缚-自由和自由-自由吸收系数, μ_{scatt} 为散射系数, h 为 Planck 常数, ν 为光子频率, k_B 为 Boltzmann 常数. 束缚-束缚吸收系数可以写为

$$\mu_{bb}(h\nu) = \sum_i \left(\sum_{l'l'} N_{il} \sigma'_{ill}(h\nu) \right), \quad (2)$$

其中, N_{il} 是电离度为 i 的离子的第 l 个能级上的粒子占据数. σ'_{ill} 是 i 离子的束缚-束缚跃迁 $l-l'$ 的吸收截面, 它与吸收振子强度 f'_{ill} 的关系是

$$\sigma'_{ill}(h\nu) = \frac{\pi h e^2}{m_e c} f'_{ill} S(h\nu), \quad (3)$$

其中 m_e 为电子质量, e 为电子电荷, c 为光速, $S(h\nu)$ 是谱线的线型函数. 本文采用 Voigt 线型函数^[33],

$$S(h\nu) = \frac{\sqrt{\ln 2}}{\sqrt{\pi} \Gamma_d} \frac{a}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^{-x^2}}{a^2 + (y - x)^2} dx, \quad (4)$$

其中, $a = \sqrt{\ln 2} \Gamma_l / \Gamma_d$, $y = \sqrt{\ln 2} (h\nu - h\nu_0) / \Gamma_d$, ν_0 表示跃迁谱线的中心频率. $\Gamma_d = \sqrt{\frac{2k_B T \ln 2}{M c^2}}$ 表示 Gauss 线型函数的半宽度, 来自离子热运动的 Doppler 效应 (M 表示原子质量). Γ_l 表示 Lorentz 线型函数的半宽度, 主要由电子碰撞展宽和自然线宽贡献, 其中电子碰撞展宽由经验公式得到

$$\Gamma_e = N_e \frac{4\pi^2 \hbar^3}{3\sqrt{3} m_e^2} \sqrt{\frac{2m_e}{\pi k_B T}} (0.9 - 1.1/z) \times \sum_{j=i,f} \left(\frac{3n_j}{2z} \right)^2 (n_j^2 - l_j^2 - l_j - 1), \quad (5)$$

其中 N_e 和 T 分别为等离子体中的自由电子密度和温度; z 表示离子电荷数; i, f 分别表示跃迁的初态和末态; n 和 l 表示对应的主量子数和轨道量子数.

透射率与辐射不透明度的关系是

$$F(h\nu) = e^{-\kappa'(h\nu) \rho L}, \quad (6)$$

其中 L 为等离子体长度. 将此透射率与高斯型函数做卷积, 宽度对应光谱仪器的分辨本领, 就可以获得与实验直接对比的透射率.

对局域热动平衡的稀薄等离子体, 粒子占据数可由 Saha-Boltzmann 方程得到

$$\frac{N_{i+1} N_e}{N_i} = 2 \left(\frac{2\pi m_e k_B T}{h^2} \right)^{3/2} \frac{Z_{i+1}}{Z_i} e^{-\frac{\phi_i - \Delta\phi_i}{k_B T}}, \quad (7)$$

其中, N_i 表示电离度为 i 的离子的丰度, N_e 为自由电子密度, Z_i 是 i 离子的配分函数, ϕ_i 是 i 离子的电离能, $\Delta\phi_i$ 是 i 离子的电离能下降值, 本文采用 SP 模型得到^[36].

热平衡条件下, 发射系数 $j(\nu)$ 与吸收系数 $\mu(\nu)$ 满足 Kirchhoff 定律^[37]:

$$\frac{j(\nu)}{\mu(\nu)} = \frac{2h\nu^3}{c^2} \frac{1}{e^{h\nu/k_B T} - 1}. \quad (8)$$

在得到总的吸收系数后, 发射系数就容易得到了.

3 原子模型

本文主要研究 Sn 等离子体 EUV 辐射特性, 此波段的辐射不透明度和发射谱主要由束缚-束缚跃迁贡献. 计算用到的主要原子参数有能级和辐射跃迁振子强度, 采用原子结构计算程序 GRASP2K 得到^[32]. GRASP2K 基于多组态 Dirac-Fock (multi-configuration Dirac-Fock, MCDF) 方法, 原子态波函数被展开为具有相同宇称和角动量的组态波函数的线性组合:

$$|\Phi_\alpha(J\pi)\rangle = \sum_i a_i(\alpha) |\phi(\gamma_i J\pi)\rangle, \quad (9)$$

其中, $|\Phi_\alpha(J\pi)\rangle$ 表示总角动量为 J 、宇称为 π 的原子态 α 的波函数, $|\phi(\gamma_i J\pi)\rangle$ 表示具有相同总角动量和宇称的组态波函数, γ_i 代表轨道占据数等表明该组态的信息, $a_i(\alpha)$ 表示在这组组态波函数为基下的展开系数. 组态波函数 $|\phi(\gamma_i J\pi)\rangle$ 表达为单电子轨道波函数的 Slater 行列式, 而单电子轨道波函数由求解 Dirac-Fock 方程得到^[32].

在获得原子波函数后, 对电偶极跃迁 $\Phi_\alpha \rightarrow \Phi_{\alpha'}$, 振子强度的长度表示 f_l 和速度表示 f_v 可以分别写为

$$f_l = \frac{\Delta E}{g_\alpha} |\langle \Phi_{\alpha'} | \sum_i r_i | \Phi_\alpha \rangle|^2 \quad (10)$$

和

$$f_v = \frac{4}{\Delta E g_\alpha} |\langle \Phi_{\alpha'} | \sum_i \nabla_i | \Phi_\alpha \rangle|^2, \quad (11)$$

其中, g_α 为简并度, ΔE 为跃迁能量, r_i 为 i 电子的电偶极矩算符.

图 1 给出了不同电荷态 Sn 离子的 4s, 4p, 4d 和 4f 轨道波函数. 从图 1 可见 4d 轨道的塌缩性质, 且随着电荷态的增加, 原子核对 4f 轨道的吸引越来越强. 13.5 nm 附近辐射的主要贡献是 Sn^{10+} 及其近邻离子, 这些高电荷态离子的 4f 轨道塌缩效应非常明显. 4d 和 4f 的塌缩效应使得轨道能量简并, 组态相互作用强, 能级结构复杂. 作为示例, Sn^{10+} 离子能级结构示意图见图 2. 可以看出, 从基组态 $[\text{Ni}]4s^2 4p^6 4d^4$ (为描述简便, 此处 $[\text{Ni}]$ 表示类 Ni 的电子结构), 激发一个电子形成的 $4s^2 4p^6 4d^3 4f$, $4s^2 4p^6 4d^3 5s$, $4s^2 4p^5 4d^5$ 和 $4s 4p^6 4d^5$ 的组态能

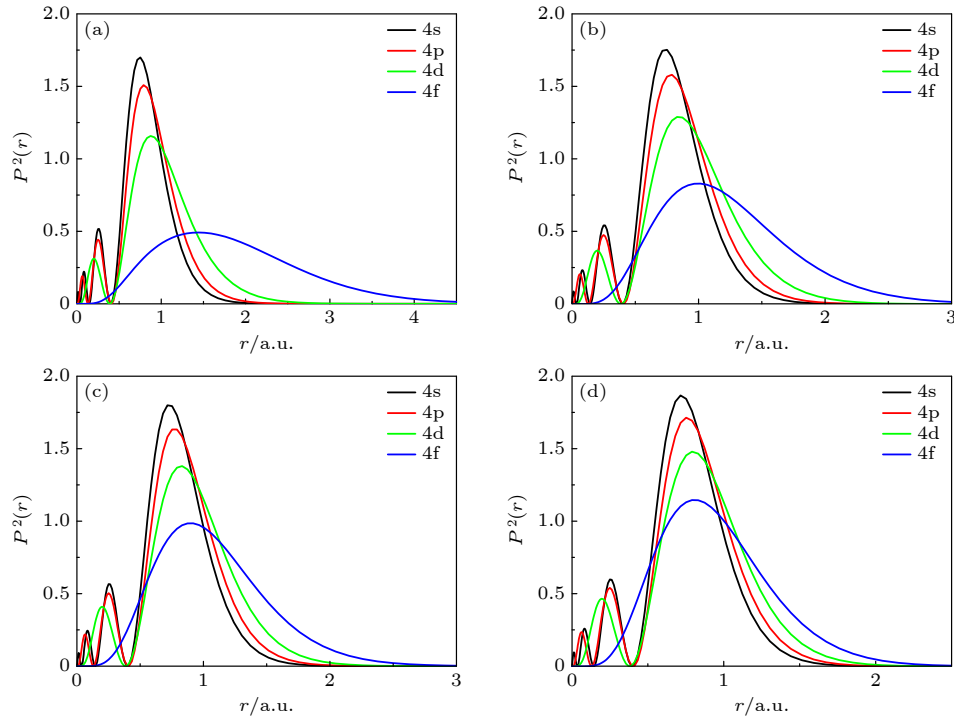

 图 1 (a) Sn^{5+} , (b) Sn^{8+} , (c) Sn^{10+} 和 (d) Sn^{13+} 离子的 4s, 4p, 4d 和 4f 轨道波函数

 Fig. 1. Radial wavefunctions of 4s, 4p, 4d and 4f belonging to (a) Sn^{5+} , (b) Sn^{8+} , (c) Sn^{10+} and (d) Sn^{13+} .

量较低. 激发两个电子形成的 $4s^2 4p^6 4d^2 4f^2$ 能量范围扩展很宽, 部分精细能级的能量处于连续态之上, 而 $4s^2 4p^4 4d^6$ 的精细能级完全处于电离阈之下, 这些低能束缚态对辐射特性的贡献很大, 原子参数的精度直接影响辐射不透明度和发射谱的精度. 此外, 由这些能量较低的组态激发形成的里德伯态如 $4s^2 4p^6 4d^3 nl$ ($n > 6$) 简并度大, 能级数目很多, 给精确原子参数计算带来挑战.

13.5 nm 附近的强辐射谱线主要来自 4d-4f 和 4p-4d 跃迁系, 电子关联效应对原子参数精度影响很大 [38–40]. 在本文的大规模 CI 计算中, 包括了 $4d^m 4f^m$ ($m = 1, 2, 3, 4$) 和 $4p^n 4d^n$ ($n = 1, 2, 3$) 的电子关联效应, 这是目前为止考虑电子关联效应最为完整的计算. 组态选取原则是: 从 4s, 4p 和 4d 轨道激发一个、两个和三个电子形成的组态, 以及从 4d 轨道激发四个电子的组态. 以 Sn^{10+} 为例, CI 计算包含的组态如下:

基态和单激发态: $4s^2 4p^6 4d^4$, $4s^2 4p^6 4d^3 4f$, $4s^2 4p^6 4d^3 5l$, $4s^2 4p^5 4d^5$, $4s^2 4p^5 4d^4 4f$, $4s^2 4p^5 4d^4 5l$, $4s^2 4p^6 4d^5$, $4s^2 4p^6 4d^4 4f$, $4s^2 4p^6 4d^4 5l$, 其中 $l = s, p, d, f, g$;

双激发态: $4s^2 4p^6 4d^2 4f^2$, $4s^2 4p^6 4d^2 4f 5l$, $4s^2 4p^6 4d^2 5p 5l$, $4s^2 4p^6 4d^2 5p 5l$, $4s^2 4p^4 4d^6$, $4s^2 4p^4 4d^5 4f$, $4s^2 4p^4 4d^5 5l$, $4s^2 4p^5 4d^3 4f^2$, $4s^2 4p^5 4d^3 4f 5l$, $4s^2 4p^5 4d^3 5p 5l$, $4s^2 4p^5 4d^3 5p 5l$, $4s^2 4p^5 4d^5 4f$, $4s^2 4p^5 4d^5 5l$, 其中 $l = s, p, d, f, g$;

三激发态: $4s^2 4p^6 4d^4 f^3$, $4s^2 4p^6 4d^4 f^2 5l$, $4s^2 4p^3 4d^6 4f$, $4s^2 4p^3 4d^6 5l$, $4s^2 4p^5 4d^2 4f^3$, $4s^2 4p^5 4d^2 4f^2 5l$, 其中 $l = s, p, d, f$;

四激发态: $4s^2 4p^6 4f^4$.

由这些组态分裂而成的精细结构能级数目约为 20 万, 其中奇宇称和偶宇称原子态的数目大致

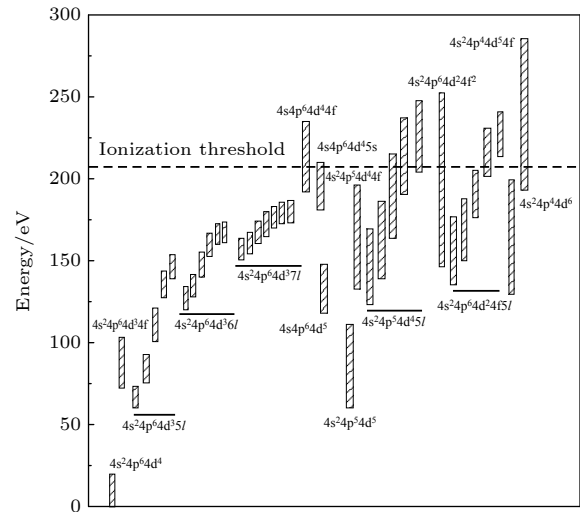

 图 2 Sn^{10+} 束缚组态, 其中长条表示相应组态分裂而成的精细能级的能量范围, 虚线表示电离阈值

 Fig. 2. Bound configurations of Sn^{10+} . Each bar represents the energy range of fine-structure levels belonging to the corresponding configuration. The dashed line represents ionization threshold.

相当. 与本文相比, Torretti 等^[29] 的 CI 计算包括了单、双和三电子激发组态, 虽然精细能级数目达到了 30 万, 但是在计算中引入了标度参数, 使用半经验方法调整了径向积分的数值. 除了在上述 CI 计算中包含的组态外, 一些能量较高的里德伯态, 如 $4s^24p^64d^3nl$ ($n > 5$) 和 $4s^24p^54d^4nl$ ($n > 5$) 对辐射不透明度亦有贡献. 在典型的实验条件下 (30 eV, 0.01 g/cm³), 相比于基态和低激发态, 这

些里德伯态对辐射不透明度的贡献相对较小. 因此, 这些里德伯态没有包含在大规模组态相互作用的计算中, 相关的辐射跃迁参数采用单组态的方法获得, 即在计算中只包括偶极允许跃迁的初组态和末组态, 单个组态分裂形成的精细能级之间的组态相互作用考虑在内.

作为示例, 表 1 列出了属于 Sn^{10+} 基组态 $4s^24p^64d^4$ 的 34 个精细能级, 能级符号取为 (9) 式中展开

表 1 Sn^{10+} 基组态 $4s^24p^64d^4$ 的精细能级 (单位: eV), 能级符号中省略了满壳层的 4s 和 4p 轨道.

Table 1. Fine-structure levels belonging to the ground configuration $4s^24p^64d^4$ of Sn^{10+} (Unit: eV), where the fully occupied 4s and 4p orbitals are omitted.

	能级	J	本文(MCDF)	实验 ^[14]	CI+MBPT ^[14]
1	$4d_{3/2}^4$	0	0.00	0.00	0.00
2	$(4d_{3/2}^3)_{3/2}4d_{5/2}$	1	0.36	0.38	0.39
3	$(4d_{3/2}^2)_2(4d_{5/2}^2)_4$	2	0.79	0.82	0.83
4	$(4d_{3/2}^2)_2(4d_{5/2}^2)_4$	3	1.22	1.25	1.27
5	$4d_{3/2}(4d_{5/2}^3)_{9/2}$	4	1.64	1.65	1.68
6	$(4d_{3/2}^2)_2(4d_{5/2}^2)_2$	0	3.48	3.32	3.28
7	$(4d_{3/2}^3)_{3/2}4d_{5/2}$	4	3.98	3.67	3.60
8	$(4d_{3/2}^2)_2(4d_{5/2}^2)_2$	3	4.58	4.33	4.29
9	$4d_{3/2}(4d_{5/2}^3)_{9/2}$	5	4.61	4.36	4.30
10	$(4d_{3/2}^2)_2(4d_{5/2}^2)_2$	1	4.68	4.39	4.39
11	$(4d_{3/2}^3)_{3/2}4d_{5/2}$	2	4.80	4.55	4.54
12	$(4d_{3/2}^2)_2(4d_{5/2}^2)_4$	6	5.09	4.74	4.67
13	$4d_{3/2}(4d_{5/2}^3)_{9/2}$	4	5.29	5.02	4.99
14	$(4d_{3/2}^2)_2(4d_{5/2}^2)_2$	2	5.61	5.38	5.40
15	$(4d_{3/2}^2)_2(4d_{5/2}^2)_2$	4	5.72	5.43	5.40
16	$4d_{3/2}(4d_{5/2}^3)_{3/2}$	3	5.87	5.60	5.60
17	$(4d_{3/2}^2)_2(4d_{5/2}^2)_2$	3	6.27	5.99	5.99
18	$(4d_{3/2}^2)_2(4d_{5/2}^2)_4$	5	6.36	6.06	6.03
19	$4d_{3/2}(4d_{5/2}^3)_{3/2}$	2	6.69	6.42	6.43
20	$4d_{3/2}(4d_{5/2}^3)_{3/2}$	1	6.81	6.55	6.56
21	$4d_{3/2}(4d_{5/2}^3)_{9/2}$	6	7.15	6.68	6.60
22	$4d_{5/2}^4$	4	7.72	7.40	7.38
23	$4d_{3/2}(4d_{5/2}^3)_{3/2}$	0	7.77	7.55	7.57
24	$4d_{5/2}^4$	2	8.41	8.01	8.00
25	$4d_{3/2}(4d_{5/2}^3)_{3/2}$	3	8.89	8.43	8.42
26	$(4d_{3/2}^2)_0(4d_{5/2}^2)_2$	2	9.86	—	9.40
27	$(4d_{3/2}^2)_0(4d_{5/2}^2)_4$	4	10.27	9.77	9.78
28	$(4d_{3/2}^2)_2(4d_{5/2}^2)_0$	2	10.48	9.97	9.98
29	$4d_{3/2}(4d_{5/2}^3)_{5/2}$	3	10.66	10.15	10.16
30	$4d_{3/2}(4d_{5/2}^3)_{5/2}$	1	10.77	—	10.30
31	$4d_{5/2}^4$	0	11.23	—	10.77
32	$4d_{3/2}(4d_{5/2}^3)_{5/2}$	4	11.79	—	11.11
33	$4d_{3/2}(4d_{5/2}^3)_{5/2}$	2	14.70	—	13.95
34	$(4d_{3/2}^2)_0(4d_{5/2}^2)_0$	0	18.87	—	17.98

系数最大的电子组态. 作为比较, 基于 EBIT 实验数据和其他理论结果一并列出^[14]. 可以看出, 本文计算结果与实验符合较好. 除了第 7 条能级本文结果比实验值大了约 8.5% 外, 其余能级相对实验结果的误差均不超过 8%. 在复杂元素辐射不透明度的计算中, 上述能级的误差对粒子数分布和辐射跃迁能量的影响是很小的. 注意到 CI+MBPT 方法与实验值更为接近^[14], 这主要是因为该计算是仅针对基组态 $4s^2 4p^6 4d^4$ 而进行的优化计算.

辐射跃迁振子强度是计算辐射不透明度和发射谱的基本参数, 文献中可用于比较的数据很少. 理论上, 用长度和速度两种规范得到的振子强度是相等的, 而实际计算中组态展开只能取有限项, 因此两者是有差异的, 通常用长度和速度表示的差异来检验计算精度. 图 3 以 Sn^{10+} 为例, 分析辐射跃迁振子强度的计算结果. 图 3(a) 给出了振子强度大于 0.01 的长度和速度表示的比较. 对小于 0.1 的振子强度, 两种表示虽然有部分振子强度差异较大, 但是整体上比较接近. 对大于 0.1 的振子强度, 两种表示符合很好. 整体上, 两种表示符合得较好, 表明了本文大规模组态相互作用计算的可信度. 图 3(b) 给出了振子强度大于 0.01, 且跃迁波长在 11—20 nm 范围内的振子强度两种表示方法的比

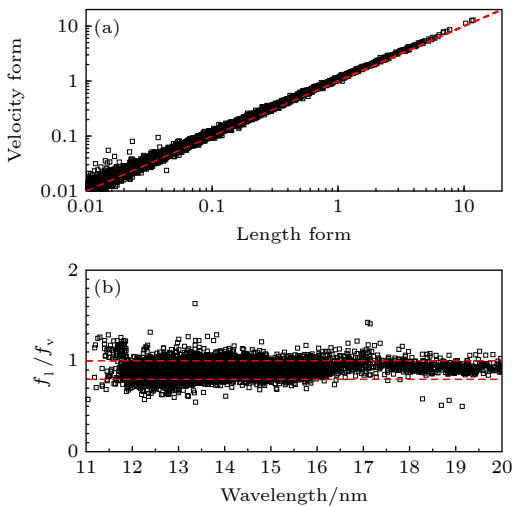


图 3 Sn^{10+} 振子强度 (a) 振子强度的长度和速度表示, 红色虚线斜率为 1; (b) 波长 11—20 nm 的振子强度长度和速度表示的比值, 上下两条红色虚线分别表示比值为 1 和 0.8

Fig. 3. Oscillator strengths of Sn^{10+} : (a) Length and velocity forms of oscillator strengths; the slope of the red dashed line is 1; (b) ratio of length form to velocity form. The upper and lower red dashed lines represent 1 and 0.8, respectively.

值, 这些跃迁线是 13.5 nm 附近辐射不透明度和发射谱的主要贡献. 上下两条红虚线分别表示比值为 1 和 0.8. 可以看出, 两种表示的相对误差基本在 20%—30% 以内, 这表明了本文计算的基本原子参数是基本可靠的.

4 结果和讨论

获得能级和振子强度等原子参数后, 使用 DLA 模型计算可得到典型条件下 Sn 等离子体 EUV 辐射不透明度, 如图 4 所示. 等离子体温度为 30 eV, 密度为 0.01 g/cm^3 , 相应的电子密度约 $5.5 \times 10^{20} \text{ cm}^{-3}$, 主要的离子类型是 Sn^{9+} , Sn^{10+} , Sn^{11+} 和 Sn^{12+} , 丰度分别为 5.4%, 26.0%, 41.6% 和 22.4%. 在图示的波长范围内 (11.5—15 nm), 束缚-束缚跃迁是辐射不透明度的主要贡献, 束缚-自由和自由-自由跃迁的贡献可以忽略不计, 这些强吸收线主要来自 4d-4f 和 4p-4d 跃迁. Sn^{9+} - Sn^{12+} 都显示了非常复杂的谱线结构. Sn^{9+} 的波长范围最宽 (12—14 nm), 谱线结构非常丰富, 形成了准连续的吸收包络. 在吸收包络上叠加了复杂的线谱, 位于约 13.8 nm 附近的最强吸收峰主要来自 4d-4f 的跃迁. 随着电荷态的增大, 谱线覆盖的波长范围越来越窄. 对于 Sn^{12+} 离子, 谱线集中在 12.6—13.4 nm. 相比于 Sn^{9+} , 高电荷态离子的吸收包络更窄, 而线谱特点更为明显. 图 4(e) 给出了总的辐射不透明度 (黑线), 可见吸收结构集中在 13 nm 附近, 形成了一个大的吸收包络, 而包络上叠加了丰富的线状谱.

高电荷态 Sn 离子的轨道塌缩效应使得多电子激发组态依然是束缚态 (如图 2 所示), 它们对总辐射不透明度的贡献是值得研究的, 这对理解吸收结构的特征是有意义的. 注意到在本文的大规模组态相互作用计算中, 能级混合非常严重, 很难分辨某一精细能级是来自哪个组态. 为此, 我们另外设置了两组不同组态规模的计算: 一是每种电荷态离子只包含基组态和单电子激发组态 (记为 A); 二是在 A 的基础上加上双电子激发组态 (记为 B). 分别基于 A 和 B 两种组态规模产生的辐射跃迁参数, 计算得到了辐射不透明度, 分别如图 4(e) 的红线和绿线所示. 因为计算规模不同, 所以振子强度大小和分布亦有不同. 为了便于和最大计算规模的结果 (黑线) 相比, A 和 B 的计算结果向长波范围移动了 0.1 nm. 容易看出, 当只包括基组态和单电子

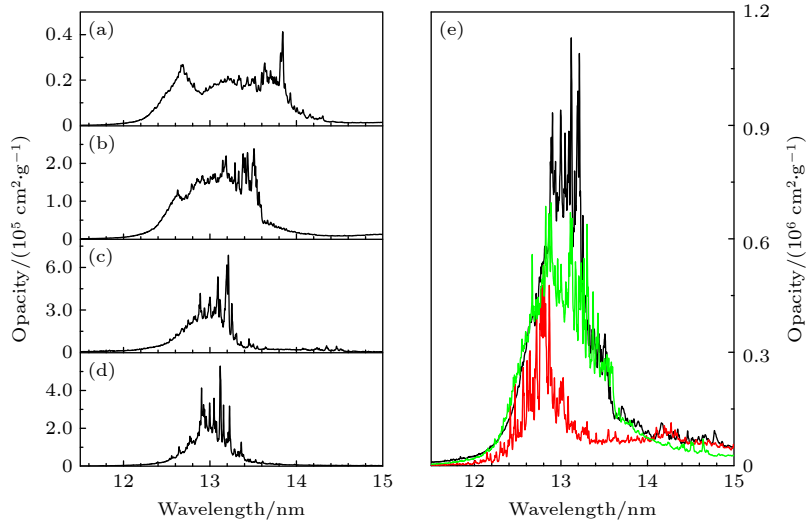


图 4 温度 30 eV, 密度 0.01 g/cm³ 条件下 Sn 等离子体中不同电荷态对辐射不透明度的贡献 (a) Sn⁹⁺; (b) Sn¹⁰⁺; (c) Sn¹¹⁺; (d) Sn¹²⁺; (e) 总不透明度, 红线为只包含基组态和单电子激发组态的结果, 绿线为包括了基组态、单电子和双电子激发组态的结果
Fig. 4. Radiative opacity of Sn at a temperature of 30 eV and a density of 0.01 g/cm³ contributed by different ionization stages: (a) Sn⁹⁺; (b) Sn¹⁰⁺; (c) Sn¹¹⁺; (d) Sn¹²⁺; (e) total opacity. The red line represents the result including only ground and singly excited configurations. The green line represents the result including ground, singly and doubly excited configurations.

激发组态时 (红线), 最强的吸收位于约 12.8 nm 处, 主要来自各电荷态离子基组态 4d-4f 和 4p-4d 的吸收. 在增加了双电子激发组态后 (绿线), 12.8 nm 处的强吸收峰增加了约 50%. 同时, 13—13.5 nm 范围的吸收明显增强, 这些吸收线来自单电子激发组态的 4d-4f 和 4p-4d 的跃迁. 在热平衡条件下, 单电子激发态能量比基组态高, 因此其占据数比基态小. 但是它们的电子结构复杂, 电子耦合出的精细能级数目多, 因此所占据的配分函数比例大, 从而对辐射不透明度的贡献也很大. 以 Sn¹⁰⁺ 为例, 基组态贡献的配分函数约占总配分函数的 17.4%, 单电子激发组态占 73.1%, 双电子激发组态占 9.5%, 可见单电子激发组态对总吸收的重要贡献. 进一步包含三电子及更高激发组态后 (黑线), 谱线峰值强度增大, 线谱分布更加集中, 表明双电子激发组态对辐射不透明度亦有较大贡献.

Fujioka 等 [22] 通过激光产生的 X 射线加热 Sn 靶, 测量了 Sn 等离子体辐射不透明度. 辐射流体模拟预测了在 X 射线峰值过后的 1 ns, Sn 等离子体的平均温度 30 eV, 平均密度 0.01 g/cm³, 面密度 2.04×10^{-5} g/cm². 理论和实验的透射谱比较如图 5 所示, 其中 ATOMIC 程序采用混合模型计算辐射不透明度, 即对重要的跃迁线采取细致能级的描述, 对次要的跃迁采取统计方法 [28,41]. 从图 5(a) 可见, 理论与实验结果虽然整体上基本符合, 但也存在明显差异. 在 11—13.5 nm 波长范围, 实验结

果显示了一个较为缓慢的下降趋势, 而两种理论计算都预测了非常陡峭的下降沿. 与 ATOMIC 相比, 本文预测的下降沿位于更短的波长, 且吸收峰的宽度更宽. 此外, 理论和实验的差异还表现在吸收峰的位置和细致结构上: 一是实验测量的最强吸收峰位于 13.5 nm 左右, 而理论预测的位置均偏低; 二是在上升沿, 实验在 16 和 18 nm 处分别给出了两个吸收峰, 虽然本文预测了 16 nm 处的吸收峰, 但是两种理论均没有预测 18 nm 处的宽吸收峰. 可以看到, 在 13 nm 附近的最强吸收峰, 理论预测吸收是饱和的, 这也是与实验不符的. 为了探究理论与实验差异的可能原因, 本文计算了温度分别为 25, 27 和 32 eV 的透射谱, 如图 5(b) 所示. 容易看出, 温度越高, 吸收峰的宽度越窄. 最强吸收峰的下降沿对温度不敏感, 而上升沿对温度比较敏感. 温度越低, 14—20 nm 波长范围的透射率越小. 这是因为电离度随温度降低而变小, 电荷态分布向低电离度离子偏移, 相应的吸收峰向长波范围移动. 对于透射谱上升沿可见的两个吸收结构 (约 16 和 18 nm), 前者来自 Sn¹⁰⁺ 的 4d-5p 跃迁, 后者来自 Sn⁹⁺ 的 4d-5p 跃迁 (理论计算的位置约为 17.6 nm). 在温度下降到 25 eV 时 (黑虚线), 理论预测的这两个吸收峰结构清晰可见, 但是此时理论预测的透射率比实验结果已经明显偏低. 对于理论和实验之间的差异, 可能的物理原因有: 一是原子参数的精度. 振子强度的大小和分布是光谱的决定性因素. 从

图5可知, 理论计算的最强吸收峰的位置和强度均与实验不符, 提高原子参数精度可以改善理论和实验符合度. 二是理论计算是基于局域热平衡假设得到的, 真实实验条件下, 可能会存在一些非平衡因素, 导致理论预测和实验测量的差异.

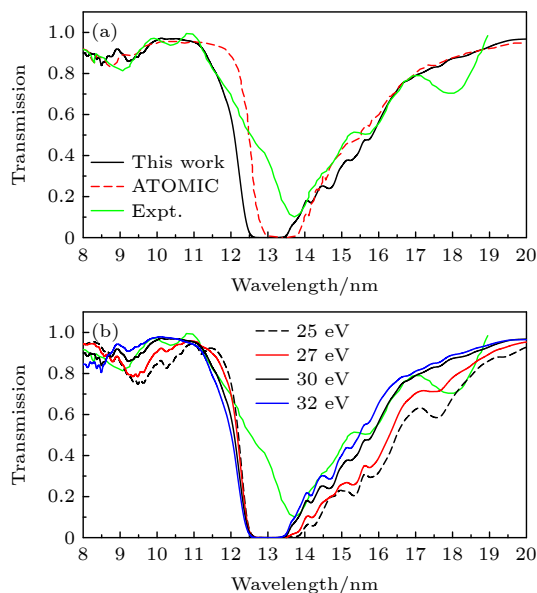


图5 Sn等离子体透射谱 (a) 温度30 eV, 密度0.01 g/cm³时本文计算、ATOMIC^[28]与实验^[22]结果; (b) 本文计算的密度0.01 g/cm³, 温度为25, 27, 30和32 eV的Sn等离子体透射谱. 本文计算取仪器展宽为0.5 eV

Fig. 5. Transmission spectra of Sn plasmas: (a) Present calculation, ATOMIC^[28] and experimental results^[22] of Sn at a temperature of 30 eV and a density of 0.01 g/cm³; (b) present calculated transmission spectra of Sn at a density of 0.01 g/cm³ and temperatures of 25, 27, 30 and 32 eV. The instrumental broadening in the present calculation is set to be 0.5 eV.

图6为温度20 eV, 密度0.0001—0.1 g/cm³的Sn等离子体辐射不透明度和对应条件下的发射谱, 其中红色虚线框标出了中心波长13.5 nm, 带宽2%的波长范围. 在图示的等离子体条件下, Sn等离子体中主要存在的离子类型为Sn⁶⁺—Sn¹²⁺. 在最低的密度0.0001 g/cm³, 等离子体中Sn¹¹⁺离子的丰度最大(约50%). 由它贡献的辐射不透明度主要位于13 nm附近, 而13.5 nm附近的辐射不透明度相对较小. 密度增加至0.001 g/cm³时, Sn¹⁰⁺离子丰度最大(约44%). 此时在13.5 nm附近的辐射不透明度最大. 密度继续增加时, 谱线结构改变明显: 由非常集中的单峰形状变成了多吸收峰的结构. 在最大的密度0.1 g/cm³, 谱线的三吸收峰结

构清晰可见. 密度较低时, 谱线非常集中, 随着密度的增加, 强吸收峰覆盖的波长范围越来越宽, 且形成了准连续的吸收包络. 例如, 在0.001 g/cm³时, 吸收谱集中在13.5 nm附近. 在0.01 g/cm³时, 主要的吸收峰覆盖了12—16 nm, 而在0.1 g/cm³时, 强吸收峰则覆盖了12—17 nm. 这是因为: 密度较低时, 对辐射不透明度起主要贡献的是基态和低激发态, 能量较高的激发态占据数小, 对不透明度的贡献小, 因此谱线较为集中. 随着密度的增加, 电子-电子和电子-离子碰撞速率增大, 激发态占据数增大, 对辐射不透明度的贡献随之增大. 而激发态的能量分布范围很宽, 所以吸收谱的分布范围也变宽了. 同时, 随着密度的增加, 电子复合速率增大, 电离度变低, 电荷态分布向低电离度离子偏移, 而低电荷态离子的吸收谱线分布的波长范围更广. 此外, 密度的增加使得电子碰撞展宽增加, 谱线宽度增大, 因此光谱逐渐形成了准连续的吸收包络.

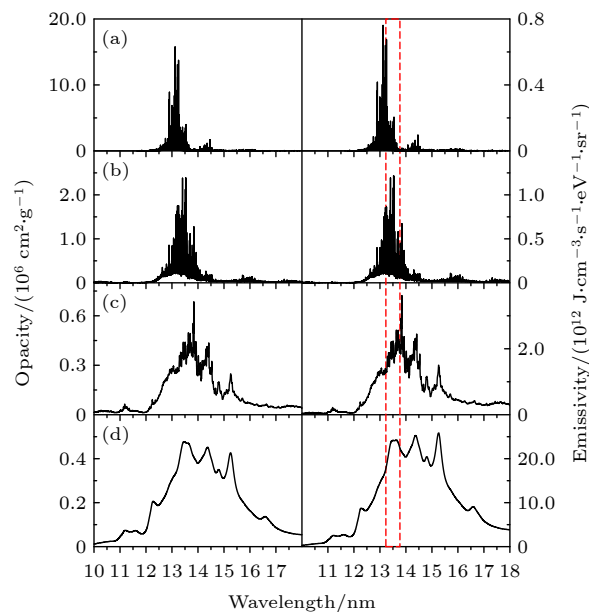


图6 温度为20 eV, 密度为(a) 0.0001, (b) 0.001, (c) 0.01和(d) 0.1 g/cm³的Sn等离子体EUV辐射不透明度(左图)和发射系数(右图). 平均电离度分别为10.96, 9.63, 8.36和7.16, 自由电子密度分别为 5.56×10^{18} , 4.89×10^{19} , 4.24×10^{20} 和 3.63×10^{21} cm⁻³. 红色虚线表示中心波长13.5 nm, 带宽2%的波长范围

Fig. 6. EUV Radiative opacity (left) and emissivity (right) of Sn plasmas at a temperature of 20 eV and densities of (a) 0.0001, (b) 0.001, (c) 0.01 and (d) 0.1 g/cm³. The average ionization is 10.96, 9.63, 8.36 and 7.16, respectively. The free electron density is 5.56×10^{18} , 4.89×10^{19} , 4.24×10^{20} and 3.63×10^{21} cm⁻³, respectively. The red-dashed lines represent the 2% wavelength region centered at 13.5 nm.

发射谱随密度的变化规律和辐射不透明度是类似的, 两者谱线结构相似, 而相对强度不同. 例如, 密度为 0.1 g/cm^3 时, $13\text{--}16 \text{ nm}$ 范围内的强吸收和强发射均有 3 个大的峰. 吸收峰约在 13.5 nm 处最强, 而发射谱在此处是弱的, 最强的发射峰位于约 15.2 nm . 随着密度的增加, 等离子体的发射系数随之增大, 但是光谱范围也越来越宽. 在 EUV 光源设计中, 2% 带宽以外的发射光谱通常是不利于光刻的 [42]. 以 13.5 nm 为中心, 2% 带宽以内的发射率积分得到总的发射功率, 如表 2 所列. 容易看到, 随着物质密度的增加, 总的发射功率是增加的. 这主要是粒子数密度增加造成的, 因为发射系数正比于上能级的粒子数. 同时, 密度的增加使得光谱分布越来越宽, 且发射系数的峰值逐渐偏离 13.5 nm . 所以在 EUV 光源的设计中, 需要综合考虑谱线结构和发射功率. 图 7、图 8 和图 6 类似, 但是温度分别为 23 和 27 eV. 对于相同的温度, 随着密度的增加, 辐射不透明度和发射谱的变化规律与图 6 所示类似. 表现为: 强谱线覆盖范围的越来越宽, 同时强线谱的位置向长波长移动. 这是因为密度增加, 电子复合速率随之增加, 电荷态分布向低电离度偏移导致的.

表 2 不同温度和密度条件下, Sn 等离子体在 $(13.5 \pm 2\%) \text{ nm}$ 波长范围的总发射功率. $a(b)$ 表示 $a \times 10^b$

Table 2. Total emissivity of Sn plasmas in $(13.5 \pm 2\%) \text{ nm}$ wavelength region at a variety of temperature and density. $a(b)$ represents $a \times 10^b$.

T_e / eV	$\rho / (\text{g} \cdot \text{cm}^{-3})$	$j_{\text{tot}} / (\text{W} \cdot \text{cm}^{-3})$
20	0.0001	4.52(10)
	0.001	7.86(11)
	0.01	6.68(12)
	0.1	8.36(13)
23	0.0001	5.50(10)
	0.001	1.01(12)
	0.01	1.42(13)
	0.1	1.69(14)
27	0.001	1.13(12)
	0.005	9.07(12)
	0.01	2.24(13)
	0.1	3.11(14)

图 9 给出了密度为 0.0001 g/cm^3 , 不同温度的辐射不透明度. 因为密度很低, 所以主要是基态和低激发态对辐射不透明度有贡献. 此时谱线的电子

碰撞展宽很小 (约 0.5 meV), 表现出明显的分立谱结构, 谱线结构非常复杂. 在 16 eV 时, 等离子体中 Sn^{9+} 和 Sn^{10+} 占据了约 85% 的丰度. 两者在 13.5 nm 附近贡献了丰富的谱线结构. 虽然发射谱集中在 13.5 nm , 但是因为密度低, 所以谱线的强度不大. 随着温度的增加, 电离度增加, 电荷态分布向高电

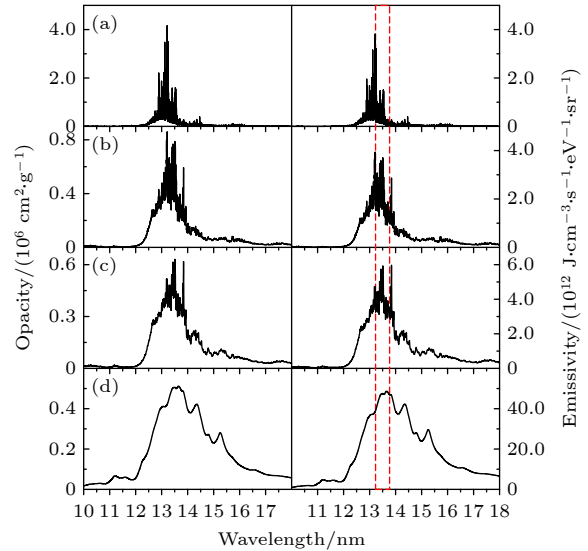


图 7 温度为 23 eV, 密度为 (a) 0.001, (b) 0.005, (c) 0.01 和 (d) 0.1 g/cm^3 的 Sn 等离子体 EUV 辐射不透明度 (左图) 和发射系数 (右图)

Fig. 7. EUV Radiative opacity (left panel) and emissivity (right panel) of Sn plasmas at a temperature of 23 eV and densities of (a) 0.001, (b) 0.005, (c) 0.01 and (d) 0.1 g/cm^3 .

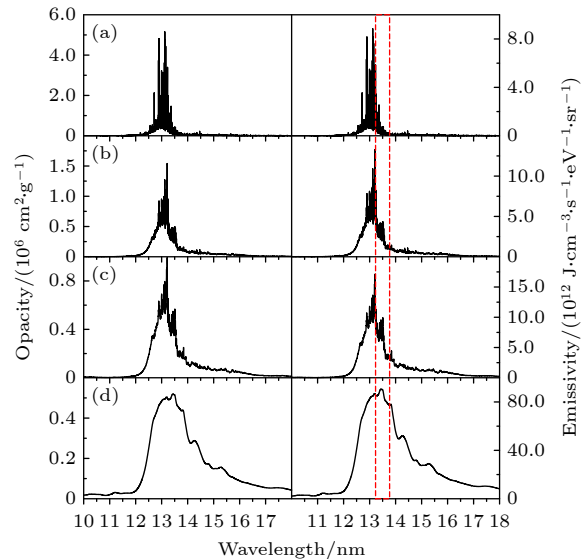


图 8 温度为 27 eV, 密度为 (a) 0.001, (b) 0.005, (c) 0.01 和 (d) 0.1 g/cm^3 的 Sn 等离子体 EUV 辐射不透明度 (左图) 和发射系数 (右图)

Fig. 8. EUV Radiative opacity (left panel) and emissivity (right panel) of Sn plasmas at a temperature of 27 eV and densities of (a) 0.001, (b) 0.005, (c) 0.01 and (d) 0.1 g/cm^3 .

荷态偏移, 强谱线随之向短波长范围偏移. 在温度为 23 eV 时, 主要的离子类型是 Sn^{12+} , 最强的谱线在 13 nm 附近, 此时 13.5 nm 处的吸收峰就相对很弱了. 图 10—12 与图 9 类似, 但密度分别为 0.001, 0.01 和 0.1 g/cm^3 . 对于固定的密度, 随着温

度的增加, 谱线结构表现出明显的窄化现象. 如图 11 (密度 0.01 g/cm^3) 所示, 20 eV 时, 吸收和发射最强的谱线覆盖的波长范围是 12.5—15.5 nm. 当温度增加到 30 eV 时, 则几乎集中在 12.5—13.5 nm 很窄的范围内. 这是因为, 温度较低时, 电离度较

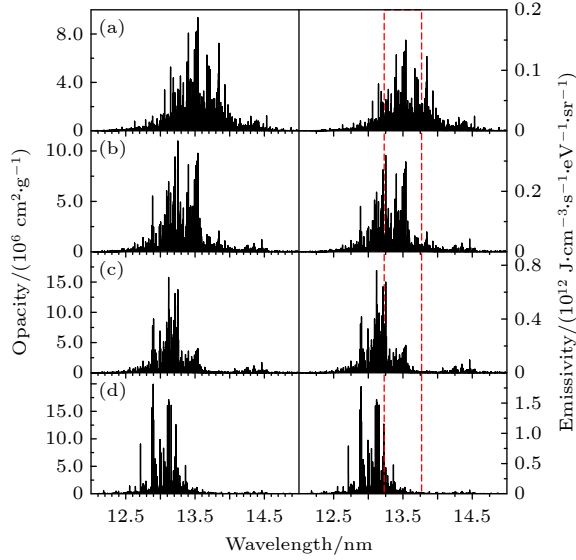


图 9 密度为 0.0001 g/cm^3 , 温度为 (a) 16, (b) 18, (c) 20 和 (d) 23 eV 的 Sn 等离子体 EUV 辐射不透明度 (左图) 和发射系数 (右图)

Fig. 9. EUV radiative opacity (left panel) and emissivity (right panel) of Sn plasmas at a density of 0.0001 g/cm^3 and temperatures of (a) 16, (b) 18, (c) 20 and (d) 23 eV.

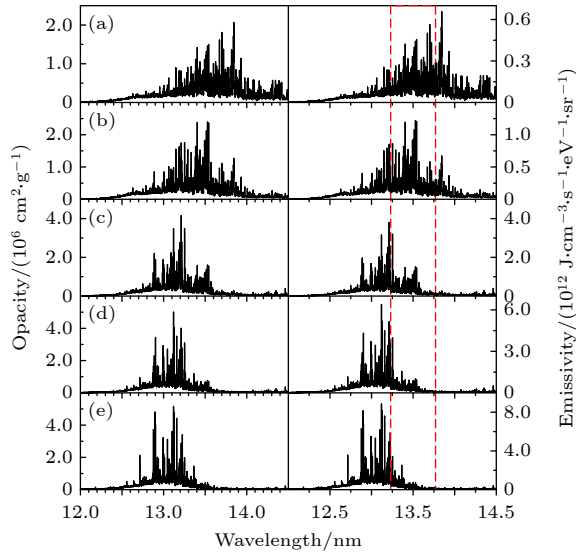


图 10 密度为 0.001 g/cm^3 , 温度为 (a) 18, (b) 20, (c) 23, (d) 25 和 (e) 27 eV 的 Sn 等离子体 EUV 辐射不透明度 (左图) 和发射系数 (右图)

Fig. 10. EUV radiative opacity (left panel) and emissivity (right panel) of Sn plasmas at a density of 0.001 g/cm^3 and temperatures of (a) 18, (b) 20, (c) 23, (d) 25 and (e) 27 eV.

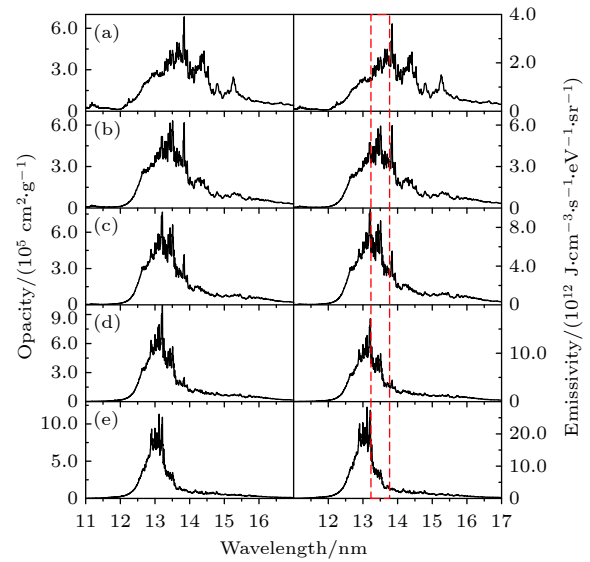


图 11 密度为 0.01 g/cm^3 , 温度为 (a) 20, (b) 23, (c) 25, (d) 27 和 (e) 30 eV 的 Sn 等离子体 EUV 辐射不透明度 (左图) 和发射系数 (右图)

Fig. 11. EUV radiative opacity (left panel) and emissivity (right panel) of Sn plasmas at a density of 0.01 g/cm^3 and temperatures of (a) 20, (b) 23, (c) 25, (d) 27 and (e) 30 eV.

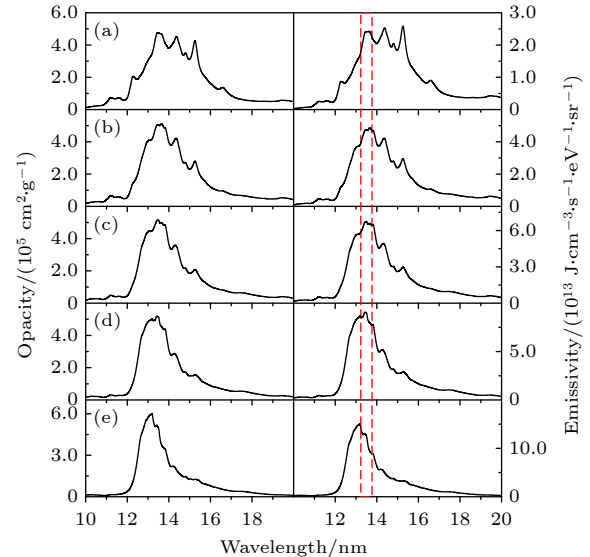


图 12 密度为 0.1 g/cm^3 , 温度为 (a) 20, (b) 23, (c) 25, (d) 27 和 (e) 30 eV 的 Sn 等离子体 EUV 辐射不透明度 (左图) 和发射系数 (右图)

Fig. 12. EUV radiative opacity (left panel) and emissivity (right panel) of Sn plasmas at a density of 0.1 g/cm^3 and temperatures of (a) 20, (b) 23, (c) 25, (d) 27 and (e) 30 eV.

低, 低电荷态离子的结构更为复杂, 谱线覆盖的波长范围更宽. 随着温度增加, 电离度增加, 高电荷态离子丰度增加, 其束缚态电子数目变少, 跃迁线能量更为集中, 因此谱线整体结构变窄. 分析 $(13.5 \pm 2\%)$ nm 波长范围的总发射功率可看出, 密度一定时, 随着温度的升高, 总发射功率也随之增加. 例如, 密度为 0.001 g/cm^3 时, 温度为 20, 23 和 27 eV 时的总发射功率分别为 7.86×10^{11} , 1.01×10^{12} 和 $1.13 \times 10^{12} \text{ W/cm}^3$. 温度增加时, 虽然强发射线位置逐渐偏移出了 $(13.5 \pm 2\%)$ nm 的范围, 但是高激发态上的粒子占据数增加了, 使得总发射功率增强.

5 结 论

使用 DLA 模型系统研究了作为 EUV 光源典型条件下的 Sn 等离子体辐射不透明度和发射谱 (温度 16—30 eV, 密度 $0.0001\text{--}0.1 \text{ g/cm}^3$). 在此条件下, Sn 等离子体中主要的离子类型是 Sn^{6+} - Sn^{14+} . 基于 MCDF 方法, 采用大规模组态相互作用的计算, 获得了 Sn^{6+} - Sn^{14+} 的能级和辐射跃迁振子强度等基本原子参数, 计算中包括了至多 $4d^4\text{--}4f^4$ 和 $4p^3\text{--}4d^3$ 的电子关联效应. 对较强的振子强度, 其长度和速度表示差异在 20%—30%. 计算了 30 eV, 0.01 g/cm^3 条件下 Sn 等离子体透射谱, 与实验和其他大规模计算的结果基本符合. 系统研究了 Sn 等离子体辐射不透明度和发射谱随温度和密度的变化规律, 展示了 13.5 nm 附近的辐射特性的特点. 温度固定时, 随着密度增加, 吸收谱变宽; 而密度固定时, 随着温度升高, 吸收谱变窄. 研究了中心波长 13.5 nm, 带宽 2% 范围的总发射功率随温度和密度的变化. 需要注意的是, 本文研究的典型条件下 (约 30 eV, 0.01 g/cm^3), Sn 等离子体通常没有严格处于局域热平衡状态, 而是处于非平衡状态^[29]. 非平衡效应会改变粒子数分布, 从而影响辐射不透明度和发射谱的结构和强度^[43,44], 这是 EUV 光源设计需要考虑的物理因素, 也是未来工作中需要细致研究的内容.

参考文献

- [1] Pirati A, Van Shoot J, Troost K, van Ballegoij R, Krabbendam P, Stoeldraijer J, Loopstra E, Benschop J, Finders J, Meiling H, van Setten E, Mika N, Driedonkx J, Stamm U 2017 *Proc. SPIE* **10143** 101430G
- [2] Hutcheson G D 2018 *Proc. SPIE* **10583** 1058303
- [3] David A 2007 *Soft x-rays and Extreme Ultraviolet Radiation: Principles and Applications* (Cambridge: Cambridge University Press) pp17—20
- [4] Zong N, Hu W M, Wang Z M, Wang X J, Zhang S J, Bo Y, Peng Q J, Xu Z Y 2020 *Chin. Opt.* **13** 28 (in Chinese) [宗楠, 胡蔚敏, 王志敏, 王小军, 张申金, 薄勇, 彭钦军, 许祖彦 2020 *中国光学* **13** 28]
- [5] Versolato O O 2019 *Plasma Sources Sci. Technol.* **28** 083001
- [6] Kieft E R, Garloff K, van der Mullen J J A M, Banine V 2005 *Phys. Rev. E* **71** 036402
- [7] Ueno Y, Soumagne G, Sumitani A, Endo A, Higashiguchi T 2007 *Appl. Phys. Lett.* **91** 231501
- [8] Svendsen W, O'Sullivan G 1994 *Phys. Rev. A* **50** 3710
- [9] Churilov S S, Ryabtsev A N 2006 *Opt. Spectrosc.* **101** 169
- [10] D'Arcy R, Ohashi H, Suda S, Tanuma H, Fujioka S, Nishimura H, Nishihara K, Suzuki C, Kato T, Koike F, White J, O'Sullivan G 2009 *Phys. Rev. A* **79** 042509
- [11] Ohashi H, Suda S, Tanuma H, Fujioka S, Nishimura H, Sasaki A, Nishihara K 2010 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **43** 065204
- [12] O'Sullivan G, Li B, D'Arcy R, Dunne P, Hayden P, Kilbane D, McCormack T, Ohashi H, O'Reilly F, Sheridan P, Sokell E, Suzuki C, Higashiguchi T 2015 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **48** 144025
- [13] Windberger A, Torretti F, Borschevsky A, Ryabtsev A, Dobrodey S, Bekker H, Eliav E, Kaldor U, Ubachs W, Hoekstra R, Crespo López-Urrutia J R, Versolato O O 2016 *Phys. Rev. A* **94** 012506
- [14] Torretti F, Windberger A, Ryabtsev A, Dobrodey S, Bekker H, Ubachs W, Hoekstra R, Kahl E V, Berengut J C, Crespo López-Urrutia J R, Versolato O O 2017 *Phys. Rev. A* **95** 042503
- [15] Torretti F, Schupp R, Kurilovich D, Bayerle A, Scheers J, Ubachs W, Hoekstra R, Versolato O O 2018 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **51** 045005
- [16] de Gaudry de Dortan F 2007 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **40** 599
- [17] Koike F, Fritzsche S 2007 *Radiat. Phys. Chem.* **76** 404
- [18] Kagawa T, Tanuma H, Ohashi H, Nishihara K 2007 *J. Phys.: Conf. Ser.* **58** 149
- [19] Eliav E, Kaldor U, Ishikawa Y 1994 *Phys. Rev. A* **49** 1724
- [20] Berengut J C, Flambaum V V, Kozlov M G 2006 *Phys. Rev. A* **73** 012504
- [21] Lysaght M, Kilbane D, Murphy N, Cummings A, Dunne P, O'Sullivan G 2005 *Phys. Rev. A* **72** 014502
- [22] Fujioka S, Nishimura H, Nishihara K, Sasaki A, Sunahara A, Okuno T, Ueda N, Ando T, Tao Y, Shimada Y, Hashimoto K, Yamaura M, Shigemori K, Nakai M, Nagai K, Norimatsu T, Nishikawa T, Miyana N, Izawa Y, Mima K 2005 *Phys. Rev. Lett.* **95** 235004
- [23] Cai Y, Wang W T, Yang M, Liu J S, Lu P X, Li R X, Xu Z Z 2008 *Acta Phys. Sin.* **57** 5100 (in Chinese) [蔡懿, 王文涛, 杨明, 刘建胜, 陆培祥, 李儒新, 徐至展 2008 *物理学报* **57** 5100]
- [24] Chen H, Lan H, Chen Z Q, Liu L N, Wu T, Zuo D L, Lu P X, Wang X B 2015 *Acta Phys. Sin.* **64** 075202 (in Chinese) [陈鸿, 兰慧, 陈子琪, 刘璐宁, 吴涛, 左都罗, 陆培祥, 王新兵 2015 *物理学报* **64** 075202]
- [25] Su M G, Min Q, Cao S Q, Sun D X, Hayden P, O'Sullivan G, Dong C Z 2017 *Sci. Rep.* **7** 45212
- [26] Schupp R, Torretti F, Meijer R A, Bayraktar M, Sheil J, Scheers J, Kurilovich D, Bayerle A, Schafigans A A, Purvis

- M, Eikema K S E, Witte S, Ubachs W, Hoekstra R, Versolato O O 2019 *Appl. Phys. Lett.* **115** 124101
- [27] Zeng J, Gao C, Yuan J 2010 *Phys. Rev. E* **82** 026409
- [28] Colgan J, Kilcrease D P, Jr. Abdallah J, Sherrill M E, Fontes C J, Hakel P, Armstrong G S J 2017 *High Energy Density Phys.* **23** 133
- [29] Torretti F, Sheil J, Schupp R, Basko M M, Bayraktar M, Meijer R A, Witte S, Ubachs W, Hoekstra R, Versolato O O, Neukirch A J, Colgan J 2020 *Nat. Commun.* **11** 2334
- [30] Sheil J, Versolato O O, Neukirch A J, Colgan J 2021 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **54** 035002
- [31] Cowan R D 1981 *The Theory of Atomic Structure and Spectra* (Berkeley: University of California Press)
- [32] Jönson P, Gaigalas G, Bieroń, Froese Fischer C, Grant I P 2013 *Comput. Phys. Commun.* **184** 2197
- [33] Zeng J L, Yuan J M 2006 *Phys. Rev. E* **74** 025401(R)
- [34] Gao C, Zeng J, Jin F, Yuan J 2013 *High Energy Density Phys.* **9** 419
- [35] Zeng J L, Gao C, Liu P F, Li Y J, Meng C S, Hou Y, Kang D D, Yuan J M 2022 *Sci. China-Phys. Mech. Astron.* **65** 233011
- [36] Stewart J C, Pyatt K D Jr. 1966 *Astrophys. J.* **144** 1203
- [37] Li S C 1992 *High Temperature Radiation Physics and Quantum Radiation Theory* (Beijing: National Defense Industry Press) p6 (in Chinese) [李世昌 1992 高温辐射物理与量子辐射理论 (北京: 国防工业出版社) 第 6 页]
- [38] Zeng J L, Zhao G, Yuan J M 2006 *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer* **102** 172
- [39] Wu Z W, Tian Z Q, An Y H, Dong C Z 2021 *Astrophys. J.* **910** 142
- [40] Kühn S, Cheung C, Oreshkina N S, Steinbrügge, Togawa M, Bernitt S, Berger L, Buck J, Hoesch M, Seltmann J, Trinter F, Keitel C H, Kozlov M G, Porsev S G, Gu M F, Porter F S, Pfeifer T, Leutenegger M A, Harman Z, Safronova M S, López-Urrutia J R C, Shah C 2022 *Phys. Rev. Lett.* **129** 245001
- [41] Colgan J, Kilcrease D P, Magee N H, Sherrill M E, Abdallah Jr. J, Hakel P, Fontes C J, Guzik J A, Mussack K A 2016 *Astrophys. J.* **817** 116
- [42] Lan H 2016 *Ph. D. Dissertation* (Wuhan: Huazhong University of Science and Technology) (in Chinese) [兰慧 2016 博士学位论文 (武汉: 华中科技大学)]
- [43] Hansen S B, Chung H K, Fontes C J, Ralchenko Yu, Scott H A, Stambulchik E 2020 *High Energy Density Phys.* **35** 100693
- [44] Gao C, Zeng J, Li Y, Jin F, Yuan J 2013 *High Energy Density Phys.* **9** 583

SPECIAL TOPIC—The 70th anniversary of National University of Defense Technology

Theoretical investigation on extreme ultraviolet radiative opacity and emissivity of Sn plasmas at local-thermodynamic equilibrium*

Gao Cheng^{1)†} Liu Yan-Peng²⁾ Yan Guan-Peng¹⁾ Yan Jie¹⁾
 Chen Xiao-Qi¹⁾ Hou Yong¹⁾ Jin Feng-Tao¹⁾ Wu Jian-Hua^{1)‡}
 Zeng Jiao-Long¹⁾³⁾ Yuan Jian-Min¹⁾⁴⁾

1) (*College of Science, National University of Defense Technology, Changsha 410073, China*)

2) (*State Key Laboratory of Laser Interaction with Matter, Northwest Institute of Nuclear Technology, Xi'an 710000, China*)

3) (*College of Science, Zhejiang University of Technology, Hangzhou 310023, China*)

4) (*Graduate School of China Academy of Engineering Physics, Beijing 100193, China*)

(Received 26 March 2023; revised manuscript received 4 May 2023)

Abstract

Sn is the material for an extreme ultraviolet (EUV) light source working at 13.5 nm, therefore the radiative properties of Sn plasma are of great importance in designing light source. The radiative opacity and emissivity of Sn plasma at local thermodynamic equilibrium are investigated by using a detailed-level-accounting model. In order to obtain precise atomic data, a multi-configuration Dirac-Fock method is used to calculate energy levels and oscillator strengths of Sn^{6+} - Sn^{14+} . The electronic correlation effects of $4d^m-4f^m$ ($m = 1, 2, 3, 4$) and $4p^n-4d^n$ ($n = 1, 2, 3$) are mainly considered, which dominate the radiation near 13.5 nm. The number of fine-structure levels reaches about 200000 for each ionization stage in the present large-scale configuration interaction calculations. For the large oscillator strengths (> 0.01), the length form is in accord with the velocity form and their relative difference is about 20%–30%. The calculated transmission spectra of Sn plasma at 30 eV and 0.01 g/cm^3 are compared with the experimental result, respectively, showing that they have both good consistency. The radiative opacity and emissivity of Sn plasma at the temperature in a range of 16–30 eV and density in a scope of $0.0001\text{--}0.1 \text{ g/cm}^3$ are investigated systematically. The effects of the plasma temperature and plasma density on radiation characteristics are studied. The results show that the radiative properties near 13.5 nm are broadened with the increase of density at a specific temperature, while it is narrowed with the increase of temperature for a specific density. The present investigation should be helpful in designing and studying EUV light source in the future.

Keywords: extreme ultraviolet light source, detailed-level-accounting model, configuration interaction

PACS: 31.15.am, 32.30.-r, 31.15.A-

DOI: [10.7498/aps.72.20230455](https://doi.org/10.7498/aps.72.20230455)

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 12074430, 11974423) and the Foundation Research of the State Key Laboratory of Laser Interaction with Matter, China (Grant No. SKLIM2008).

† Corresponding author. E-mail: gaocheng@nudt.edu.cn

‡ Corresponding author. E-mail: wujh@nudt.edu.cn

局域热平衡Sn等离子体极紫外辐射不透明度和发射谱的理论研究

高城 刘彦鹏 严冠鹏 闫杰 陈小棋 侯永 靳奉涛 吴建华 曾交龙 袁建民

Theoretical investigation on extreme ultraviolet radiative opacity and emissivity of Sn plasmas at local-thermodynamic equilibrium

Gao Cheng Liu Yan-Peng Yan Guan-Peng Yan Jie Chen Xiao-Qi Hou Yong Jin Feng-Tao Wu Jian-Hua Zeng Jiao-Long Yuan Jian-Min

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 72, 183101 (2023) DOI: 10.7498/aps.72.20230455

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.72.20230455>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

相对论多组态相互作用方法计算Mg⁺离子同位素位移

Calculation of isotope shift of Mg⁺ ion by using the relativistic multi-configuration interaction method

物理学报. 2018, 67(1): 013101 <https://doi.org/10.7498/aps.67.20171817>

双激光脉冲打靶形成Gd等离子体的极紫外光谱辐射

Characteristics of extreme ultraviolet emission from Gd plasma produced by dual pulse laser

物理学报. 2022, 71(3): 035202 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20211450>

桌面飞秒极紫外光原子超快动力学实验装置

A tabletop experimental system for investigating ultrafast atomic dynamics based on femtosecond extreme ultraviolet photons

物理学报. 2020, 69(23): 234208 <https://doi.org/10.7498/aps.69.20201035>

EAST等离子体Mo V–Mo XVIII极紫外光谱的识别

Line identification of extreme ultraviolet spectra of Mo V to Mo XVIII in EAST tokamak

物理学报. 2022, 71(11): 115203 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20212383>

氮气分子电子态的不透明度

Opacities of electronic states for nitrogen molecule

物理学报. 2022, 71(14): 143102 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20220043>

基于极紫外光的Ne, Xe原子电离

Photoionization of Ne and Xe atoms induced by extreme ultraviolet photons

物理学报. 2022, 71(14): 143201 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20220341>