レーザー励起EUV光源におけるターゲット アブレーションからの粒子放出のモデリング

佐々木明、砂原淳、西原功修、西川亘 量研機構、レーザー総研、阪大レーザー研、岡山大

*本研究は、科研費挑戦的萌芽研究(26610195)、NEDOの支援を受けて行われた。

EUV光源の研究

- ・次世代半導体リソグラフィための波長13.5nmのEUV光源プ ラズマの最適化の研究(流体シミュレーション)
- ・波長6nm~水の窓領域の光源の特性の研究(原子過程シミュ レーション・衝突輻射モデル)。



高z多価イオンの衝突輻射モデル

- ・アルゴリズムを用いて、多数の内殻励起状態を経由する二
 電子性再結合を取り入れた、衝突輻射モデルを構築した。
- ・コード相互比較ワークショップによる検証を行っている
 - が、核融合分野のコードとは結果に差異がある。



A. Sasaki, High Energy Density Phys. 9, 325 (2013), A. Sasaki, et al. J. Phys. B, 46, 175701 (2013), A. Sasaki, et al. AIP advances, 6, 105002 (2016)

物理モデル

- ・アルゴリズムを使って取り入れる準位の組を求める。
- ・非相対論電子配置(*nl*)で平均化したエネルギー準位のポ ピュレーションを考える。
- ・エネルギー準位、自然放出寿命、自動イオン化率について はHULLACによって計算した原子データを用いる。
- ・電子衝突電離、励起のレートはLotz、Meweの経験式によって求める。
- ・2電子性再結合は、多重励起状態を陽に考慮することによって取り入れる。
- *n*_{max}=8、*l*_{max}=3 までの準位を考慮する。

Gdの電離平衡

・Gdの価数の電子温度依存性の以前の簡単なモデル(基底状態のみ考慮、遮蔽水素近似)の結果との差異は小さいことがわかった。



4d-4f UTAでEUV発光を得るために必要な電子温度

- ・Pd様イオンを生成するために必要な温度を見積った。
- 必要な温度はSnでは12eV、Tbでは76eVだが、Biでは
 529eVまで高まり(n_e=10²¹/cm³)、低密度ではさらに高
 温が必要になる。
 10¹⁹ 10²⁰



EUV光源の研究

- ・半導体リソグラフィの微細化のため、レーザープラズマを用 いた、波長13.5nmのEUV光源の開発が進められている。
- ・高出力化のために、シミュレーションによるプラズマの高度
 な制御が重要になっている。



| スズ液滴ターゲット | 出力 ≥ 200W | 変換効率 ≥ 5% ₇

EUV光源プラズマの性質

- ・プリパルスレーザー照射によって、スズ液滴を微粒子に分散
 し、それをメインパルスレーザーで加熱することで、均一な
 低密度プラズマが生成すると考えられている。
- ・微粒子のサイズや空間分布を求めることができる流体シミュレーションの研究を行っている。



*A. Endo, proceedings of 2012 EUV source workshop

シミュレーションによるスズ液滴の膨張のイメージ

・スズ液滴を加熱すると、はじめに内部に気泡が発生、それが
 成長して粒子に分散する過程を経て気相に転移する。





レーザーアブレーションのマクロモデル



流体の各々の場所で の気液の分布は、熱 平衡状態における相 分布に従うとする。 ・相転移現象は、詳細計算(分子動力学)で調べられているが、計算量が 過大で、実験と比較するためには流 体モデルを用いる必要がある。

仮定

粒子の分布はスケールフリー性を 持ち、任意の時間・空間分解能で モデル化できる。

既存の相転移のモデルを運動する 流体に当てはめることができる。

流体シミュレーションの基本方程式

 $\rho \frac{d\mathbf{u}}{dt} = -\nabla P$ 運動方程式 $dU_m = dQ_m - PdV_m$ エネルギー方程式 $P = \frac{RT}{V_m - b} - \frac{a}{V_m^2}$ ファンデルワールス状態方程式 3 10⁵ $U_m = A_m + TS_m = \frac{3}{2}RT - \frac{a}{V_m}$ 2 10⁵ internal energy [J/mol] 0 1 10⁵ 1 10⁵ 2 10⁵ 1 10⁵ ・圧力、内部エネルギーが 解析的に与えられる。 T [K] ・気相、液相に対応する状 態を与え、その間の相転移 -3 10⁵ の条件を求めることができ -4 10⁵ 10-2 10-3 10-5 10-4 る。 V_m [m³/mol]

11

相転移モデル

- ・状態方程式が与えられると、マクスウエルの規則により、*圧縮、膨張した時に相転移が起こることが示され、圧 力の辿る軌跡が求まる(*各時刻で熱平衡状態を仮定)。
- ・転移の過程で、媒質は一 様な状態にはならず、一定 の割合を持つ気相と液相の 部分に分離する。
- ・ラグランジ流体シミュレ
 ーションのセルの分割によって、正しい気液の比を実
 現する。



流体シミュレーションの数値計算手法

2次元ラグランジ流体シミュレーション

- ・流体とともに動く三角形格子、有限体積法
- ・保存形、一次精度
- ・クランクニコルソン陰解法

タイムスプリッティング

・ひとつのタイムステップの中で、流体運動の計算と、求められた温度、密度に対する相転移の計算を交互に行う。

セルの動的再配置

・セルの分割、融合処理で格子の破綻を回避するとともに 相転移を扱う。

セルの動的再配置

セルの歪みの大きさを数値的に評価し、質量とエネルギーを 保存するように、セルを分割、融合する。











切断と融合 細長いセルを中間で分割した のち接近した格子点を融合

A 相転移 ひとつのセルを液相のセルと気 相のセルに分割し、全体で正し い気液の比になるようにする₉₄

相転移の計算方法



15

テスト計算

スズ円柱を均一、一定に加熱する条件でテストを行った。 初期直径 20µm、密度 5.5 x 10³ kg/m³、温度 2,000 K 加熱の強さ 1.5 x 10¹² W/mol(1,000K/10ns)





気泡が成長し、気相が支配 的になると急激な膨張が始 まる臨界的な特性を示す。

結果

- ・スズ円柱は気液相転移を経て膨張する。
 (気体が支配的になることで急激な流体運動が始まる)
- ・核生成に時間がかかり非平衡な過熱状態ができる。
- ・エネルギーの保存は満たされている。



まとめと今後の課題

- ・メッシュの動的な再配置を行う2次元ラグランジ流体シミュレーションコードの開発を行った。
- ・スズ液滴を加熱すると、最初に気泡が生成し、粒子へと分 解し、最後は蒸発する結果が得らえた。
- ・レーザーアブレーション実験と比較しモデルを検証する。
- ・表面張力、レーザープラズマの物理(特にレーザーの吸 収)を取り入れ、EUV光源の解析に応用する。
- ・計算の精度、安定性の向上の検討を行う。

加熱されたスズ液滴の膨張



初期の状態



表面張力の導入についての考察(1)

- ・セルの境界が気液の界面に対応するので、流体運動に対する表面張力の効果を直接考慮できると考えられる。
- ・気泡や粒子が生成する時の表面エネルギーを評価でき、核
 生成条件、超過圧を評価できる。



- 気泡、粒子の大きさは、物理
 的な核生成条件よりも、数値的
 に許される最小のセルサイズで
 制限されている。
- ・計算を打ち切ることの影響を 検討する必要がある。

表面張力の導入についての考察(2)



- ・各格子点の間には r の表面張力が作
 用する。
- ・気泡、粒子の内部に発生する超過圧
 を含めて平衡状態になるようにセルの形状を決定する。
- ・再配分の処理と分割/相転移の処理とを組み合わせることで、アルゴリズム上の最小の気泡、粒子の体積をもとのセルの体積の0.04から0.04/nまで低減し、物理的な核生成条件に近づける。

まとめ

- レーザーアブレーション解析のためのラグランジ流体シミュレーションの計算手法の検討を行った。
 - 保存形
 - 一次精度
- ・メッシュの再構築を用いて気液相転移を導入した。
 - セルの集合に熱平衡状態が成立することを仮定し、質量、内部エネルギー、運動エネルギーが保存するようにセルの分割や融合を行う
 - 保存関係は計算が成立するために重要
 - 拡散、粘性に代わる作用をする

質量とエネルギーの再配分(追加の相転移の処理)

- 気泡や粒子は連続的に成長すると考えられるが、セルの分割
 を繰り返すとセルの数が急激に増加して計算困難となる。
- 格子点を共有するセルの集合について、気液の割合が正しくなるように質量、内部エネルギーを再配分する(個々の気泡や粒子の形状は変化しても良い)。



セルの分割方法

・ルールベースで、
 気液の比が4-96%
 の範囲で分割する。
 (セルの歪みの低
 減を重視)





 「分割後の格子点の位置、セルに 分配される質量、エネルギーを最 適化する」ことで、表面張力を考 慮し、エネルギーの保存を改善で きると考えられる。

