Усиление угловой дисперсии лазерных гармоник высокого порядка при взаимодействии с плотными плазменными кластерами

Л.А. Литвинов[1], А.А. Андреев[1, 2]

[1] *Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург*
[2] *Физико-технический институт имени А.Ф.Иоффе, Санкт-Петербург*

Аннотация

Периодические поверхностные решетки и фотонные кристаллы являются отличными инструментами для дифракции и направления света. Однако этот метод менее эффективен в случае экстремального ультрафиолетового света из-за высокого поглощения любого материала в этом диапазоне частот. В работе исследуется возможность усиления угловой дисперсии излучения XUV-диапазона за счет рассеяния на подходящих сферических кластерах. В рамках работы была разработана аналитическая модель с использованием диэлектрической функции Друде плазмы и теории рассеяния Ми. Модель построена в квазистатическом приближении, так как время ионизации меньше длительности импульса, что значительно меньше времени разлета плазмы. В рамках модели мы используем предельные формы функций Бесселя, поскольку нас интересуют только частицы, размеры которых меньше длины волны падающего излучения. Оценены резонансные параметры мишени для десятой гармоники Ti:Sa лазер, найдено усиление рассеянного поля в резонансном случае по сравнению с лазерной гармоникой. Используя те же условия резонанса для одного кластера, мы моделируем дифракцию на массиве таких кластеров с помощью кода CELES. Полученные результаты показывают значительное усиление рассеянного поля в резонансном случае для больших углов и соответствуют теории дифракции Брэгга-Вульфа. При помощи particle-in-cell моделирования была подтвеждена квазистационарность плотности плазменных кластеров, что дает возможность значительно упростить расчет структур, подходящих для управления высокими гармониками лазерного излучения в XUV-диапазоне с помощью ионизированного кластерного газа.

1 Введение

2 Аналитическая модель

Рассмотрим одиночный сферический кластер радиуса a, облученный коротким фемтосекундным импульсом длительностью τ и интенсивностью порядка $I_h \approx 10^{14}$ W/cm^2, полученной в результате преобразования лазерной гармоники с коэффициентом преобразования 10^{-4}. Модель Друде даёт представление диэлектрической функции плазмы:

$$\varepsilon(\omega) = 1 - \left(\frac{\omega_{pe}}{\omega}\right)^2 \frac{1}{1 + i\beta_e}, \qquad \omega_{pe} = \sqrt{\frac{4\pi e^2 n_e}{m_e}}, \tag{1}$$

где ω — рассмариваемая гармоническая частота, ω_{pe} — электронная плазменная частота, e и m_e — заряд и масса электрона, $n_e = Zn_i$ — электронная плотность, где Z — средняя степень ионизации, n_i — ионная плотность. $\beta_e = v_e/\omega$ и v_e коэффициент электрон-ионных столкновений в приближении Спитцера. В условиях твердотельной плазмы ионная плотность кластера порядка $n_i = 6 \cdot 10^{22}$ cm^{-3}, при этом электронная плотность кластера должна быть выше критической для заданной частоты $n_c = \omega^2 m_e / 4\pi e^2$. Для 10-ой гармоники лазерного излучения $\lambda_{10} = 83$ nm мы получаем условие $n_e > n_c = 1.3 \cdot 10^{23}$ cm^{-3}, что согласуется с условием на ионную плотность при средней степени ионизации $Z > 2$.

Теория Ми может быть использована для описания упругого рассеяния электромагнитных волн частицами произвольного размера в случае линейных взаимодействий, а также позволяет получить описание рассеянного поля и поля внутри рассеивающего объекта. Основной шаг — решение скалярного уравнения Гельмгольца в правильной системе координат (в данном случае сферической) и получение векторных решений. Для сферического кластера можем записать решение соответствующего уравнения, используя сферические функции Бесселя и Ханкеля n-ого порядка, включая присоединенные полиномы Лежандра [1].

Возьмем плоскую волну, распространяющуюся вдоль оси z декартовой системы координат, поляризованную вдоль оси x, что может быть записано как:

$$\mathbf{E}_i = E_0 \, e^{i\omega t - ikz} \, \mathbf{e}_x, \tag{2}$$

где $k = \omega/c$ — волновое число, $\mathbf{e}_x$ — единичный вектор оси x, также являющийся вектором поляризации (рис. 1).

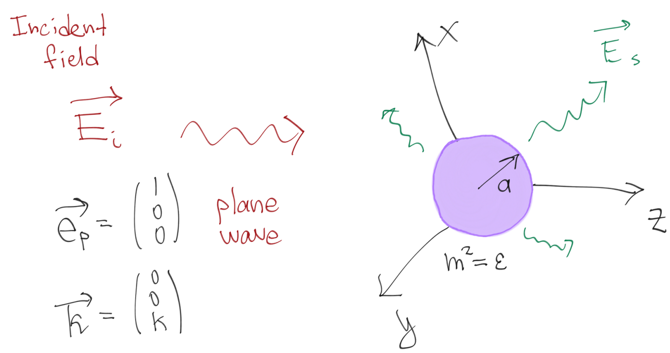


Рис. 1: Схема базовой модели.

$$\mathbf{E}_s = \sum_{n=1}^{\infty} E_n \left[i a_n(ka,m) \mathbf{N}^{(3)}_{e1n} - b_n(ka,m) \mathbf{M}^{(3)}_{o1n} \right], \qquad E_n = i^n E_0 \frac{2n+1}{n(n+1)} \tag{3}$$

Далее эту плоскую можно разложить в ряд, используя обобщённое разложение Фурье. В случае изотропной среды имеем следующий вид коэффициентов рассеянного поля [1]:

$$a_n(x,m) = \frac{m\psi'_n(x)\psi_n(mx) - \psi'_n(mx)\psi_n(x)}{m\xi'_n(x)\psi_n(mx) - \psi'_n(mx)\xi_n(x)}, \tag{4}$$

$$b_n(x,m) = \frac{\psi'_n(x)\psi_n(mx) - m\psi'_n(mx)\psi_n(x)}{\xi'_n(x)\psi_n(mx) - m\psi'_n(mx)\xi_n(x)}, \tag{5}$$

где $\psi_n(\rho) = z j_n(\rho)$, $\xi_n(\rho) = z h_n(\rho)$ — функции Риккати-Бесселя, $h_n = j_n + i\gamma_n$ — сферические функции Ханкеля первого рода, $x = ka$ — безразмерный радиус кластера, $m = \sqrt{\varepsilon}$ — комплексный коэффициент преломления (выр. 1).

2.1 Асимптотическое приближение коэффициентов рассеянного поля

В случае сферической симметрии амплитуда рассеянного поля максимальна для $m^2 = -(n+1)/n$ при $ka \ll 1$, что даёт соответствующий набор резонансных плотностей в бесстолкновительном случае $n_e = n_c(2n+1)/n$.

Это можно получить, используя нулевое асимптотическое приближение функций Бесселя [1], в результате чего коэффициенты (выр. 4 и 5) значительно упрощаются:

$$a_n(x \to 0, m) = \left(1 + i\frac{m^2 n + n + 1}{n\left(m^2 - 1\right)}\frac{C_n}{x^{2n+1}}\right)^{-1}, \qquad b_n(x \to 0, m) = 0 \tag{6}$$

$$C_n = \frac{2^{2n+1}\Gamma(2n)\Gamma(2n+2)}{\Gamma(n+1)\Gamma(n+2)}$$

Такое приближение можно использовать вместо выр. 4 и 5 для объектов достаточно маленького радиуса, но уже при $ka \sim 1$ оно перестаёт быть разумным, особенно для больших n. Вместо него в таком случае лучше подходит аппроксимация первого порядка, полученная с помощью первого приближения функций Бесселя [1]:

$$a_n(x, m) = \left(1 + i\frac{2(m^2 n + n + 1)(4n(1+n) - 3) - (m^2 - 1)(3 + n(5 + 2n + m^2(2n-1)))x^2}{(m^2-1)(2n+3)(n+1)(4n + 6 - (m^2+1)x^2)}\frac{C_n}{x^{2n+1}}\right)^{-1} \tag{7}$$

$$C_n = \frac{2^{2n+1}}{\pi}\Gamma\left(n - \frac{1}{2}\right)\Gamma\left(n + \frac{5}{2}\right)$$

На рис. 2 показана зависимость коэффициента рассеяния от электронной плотности для двух различных значений радиуса в рамках нулевого асимптотического приближения и сравнение первого и нулевого приближений. Видно, что с ростом n ширина резонансного пика быстро уменьшается, а также бóльшим радиусам (безразмерным) ka соответствует бóльшая их ширина. Помимо этого, с ростом радиуса растет и значение резонансной плотности, что видно на рис. 3.

Такие аппроксимации позволяют оценить резонансные параметры кластера, в частности электронную плотность и радиус. Устремив выр. 7 к единице, можем определить выражение для квадрата резонансного коэффициента преломления, что в свою очередь дает выражение на резонансную электронную плотность в критических единицах при помощи выр. 1:

$$m^2(x, n) = \frac{8n^2(n+1) - (6n+3)x^2 - 6n}{2nx^2(2n-1)}\left[1 + \sqrt{1 - \frac{4n(n - 3 + 4n^2(n+2))(x^2 + 4n - 2)x^2}{\left(8n^2(n+1) - (6n+3)x^2 - 6n\right)^2}}\right] \tag{8}$$

$$\frac{n_e}{n_c} = (1 - m^2)(1 + i\beta_e) \tag{9}$$

В соответствии с выр. 8 и 9 резонанс рассеянного поля при $\lambda_{10} = \lambda_L/10 = 83$ нм отвечает резонансной электронной плотности $n_{el} \approx 5.7 \cdot 10^{23}$ cm^{-3} для $ka = 0.7$ и $n_{el} \approx 3.9 \cdot 10^{23}$ cm^{-3} для $ka = 0.3$, со средними степенями ионизации $Z|_{ka=0.7} \approx 9$ и $Z|_{ka=0.3} \approx 6$.

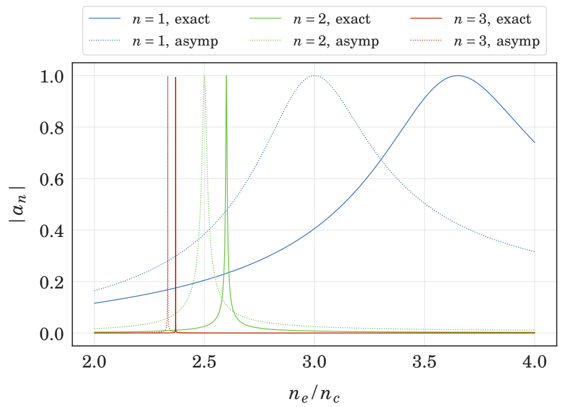
3 Стационарные вычисления

3.1 Одиночный кластер

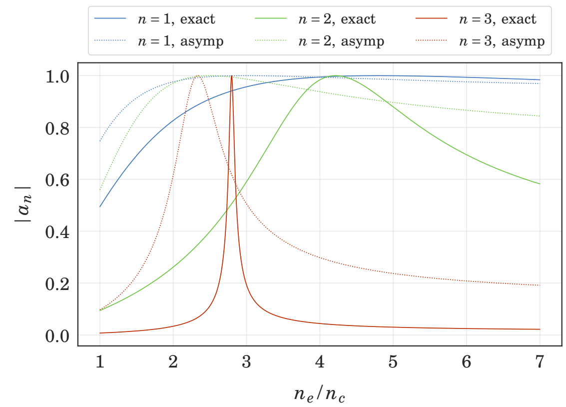
3.2 Оправдание стационарной модели

В общем случае расчет взаимодействия высокоинтенсивного импульса лазерного излучения с группой плотных сферических кластеров, расположенных в трехмерном пространстве, требует длительных и сложных нестационарных вычислений ввиду того, что распределение электронной плотности кластеров в результате взаимодействия с лазерным импульсом изменяется с течением времени.

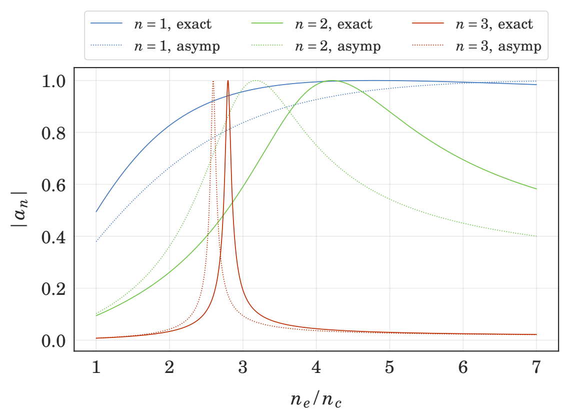
Для проверки масштабов изменения электронной плотности в рассматриваемом случае было проведено моделирование эволюции распределения электронной плотности в одномерном пространстве отдельного кластера. Для моделирования был взят код LPIC++ [2].



а: $ka = 0.5$.



б: $ka = 1.5$.



в: $ka = 1.5$ в приближении первого порядка.

Рис. 2: Коэффициенты сферических гармоник в приближении нулевого и первого порядка, $\beta_e = 0$. Кривые “exact” построены с использованием полных разложений.

В качестве источника был задан фронтальный линейно поляризованный лазерный импульс с длиной волны $\lambda_{10} = 83$ nm, длительностью τ и интенсивностью $I_{10} = 10^{14}$W/cm^2. Период лазерного излучения, соответствующий лазерной гармонике, равен $T = \lambda_L/c \approx 2.8$ fs, поэтому длина импульса в моделировании была взята $\tau = 10T = 28$ fs, время моделирования $t = 20T = 56$ fs. Плазма представлена 2000 частицами в каждой ячейке, занятой мишенью, расположенной в центре бокса шириной $w_{box} \approx 3\lambda_{10}$; электронная плотность мишени в критических единицах равна $n_{el} = 4.4n_c$. Относительная амплитуда импульса α_h равна:

$$I_{10}\lambda_{10}^2 = \alpha_h^2 \times 1.37 \cdot 10^{18}\,\mathrm{W} \cdot \mu\mathrm{m}^2/\mathrm{cm}^2 \tag{10}$$

$$\alpha_h = \frac{\lambda_{10}}{\sqrt{1.37} \cdot 1\,\mu\mathrm{m}} \approx 7.1 \cdot 10^{-4}$$

Также было рассмотрено взаимодействие с первой гармоникой, для которой $\lambda_L = 830$ nm, $I_L = 10^{18}$W/cm^2, что дает относительную амплитуду импульса $\alpha_L \approx 0.71$. В качестве мишеней были взяты одиночные кластеры радиуса a от 9 до 60 nm.

По полученным результатам моделирования была расчитана средняя суммарная толщина переходного слоя в процессе взаимодействия со внешним импульсом h_{tr} в зависимости от радиуса мишени a (рис. 5). Условие квазистационарности в таком случае принимает вид $h_{tr} \ll 2a$, что соблюдается при $a \geq 20$ nm. Для ближайших по порядку гармоник величины h_{tr} при аналогичных радиусах слабо отличаются.

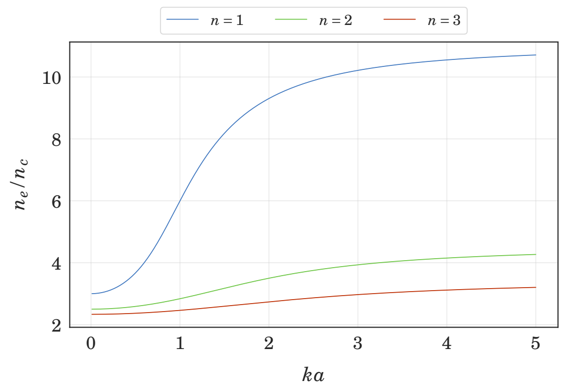
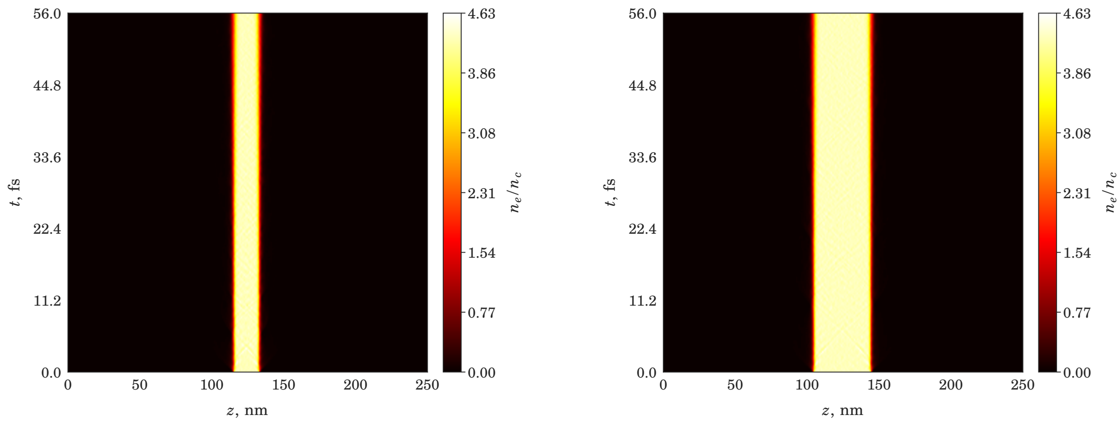


Рис. 3: Резонансная электронная плотность в зависимости от радиуса. Кривые посчитаны при помощи выр. 8; $\beta_e = 0$.



а: $a = 9$ nm, $\lambda = \lambda_{10}$.

б: $a = 20$ nm, $\lambda = \lambda_{10}$.

Рис. 4: Взаимодействие одномерной мишени с 10-ой гармоникой, $\lambda_{10} = 83$ nm.

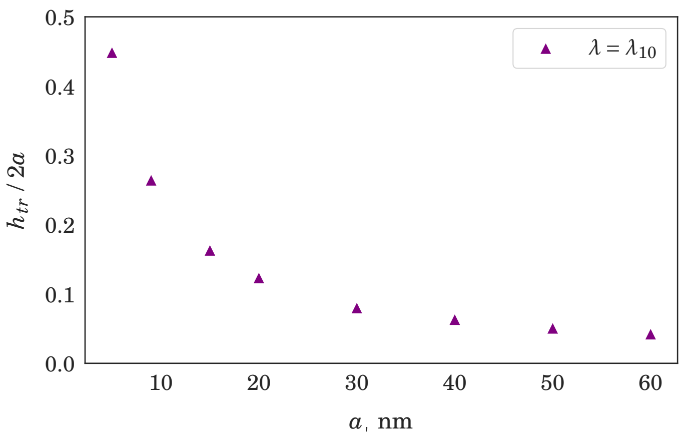


Рис. 5: Асимптотика средней суммарной толщины переходного слоя при $0 \le t \le 10T$ относительно радиуса мишени.

3.3 Множество кластеров

В рамках в рамках стационарной теории рассеяния Ми было рассмотрено множество кластеров в виде протяженной цилиндрической газовой струи (в дальнейшем мишень) с регулярной и квазирегулярной пространственной конфигурацией для исследования возможности рассеяния такими структурами на большие углы жёсткого ультрафиолетового излучения, в частности соответствующего гармоникам высокого порядка.

В качестве регулярного распределения была выбрана примитивная кубическая решетка с расстоянием между соседними узлами d. Квазирегулярное распределение было построено при помощи внесения случайных сдвигов координат узлов с произвольной нормой сдвига в диапазоне $0 \leq |\Delta d| \leq \eta d$, где $0 \leq \eta < 0.5$ — степень нерегулярности. Тогда при кратном $d = b\lambda, b \in \mathbb{N}$ расстояние между соседними узлами после внесения сдвигов:

$$b\left(1-\eta\right)\lambda \leq d_{\text{irreg}} \leq b\left(1+\eta\right)\lambda \tag{11}$$

В квазирегулярном случае моделирование было проведено несколько раз с целью усреднения и получения обобщенной картины рассеянного поля. Для вычислений был использован программный код CELES [3].

3.3.1 Условие дифракции для решетки в пространстве

Условие дифракции в случае трехмерной регулярной решетки при упругом рассеянии принимает вид [4]:

$$\begin{cases} (\mathbf{D}_x, \mathbf{e}_{\text{out}} - \mathbf{e}_{\text{in}}) = h\lambda \\ \left(\mathbf{D}_y, \mathbf{e}_{\text{out}} - \mathbf{e}_{\text{in}}\right) = k\lambda \\ (\mathbf{D}_z, \mathbf{e}_{\text{out}} - \mathbf{e}_{\text{in}}) = l\lambda \end{cases} \tag{12}$$

где h, k, l — индексы Миллера представленные целыми числами, $\mathbf{D}_i$ — вектор, соединяющий соседние узлы решетки вдоль направления i, $\mathbf{e}_{\text{in}}$ — единичный вектор направления падающего излучения, $\mathbf{e}_{\text{out}}$ — единичный вектор направления прошедшего излучения. Переходя к сферическим координатам, связанными с $\mathbf{e}_{\text{in}}$ так, что в декартовом представлении $\mathbf{e}_{\text{in}} = \mathbf{e}_z$, выр. 12 можно преобразовать следующим образом, учитывая, что $|\mathbf{D}_x| = |\mathbf{D}_y| = |\mathbf{D}_z| = d$ для рассматриваемой кубической решетки:

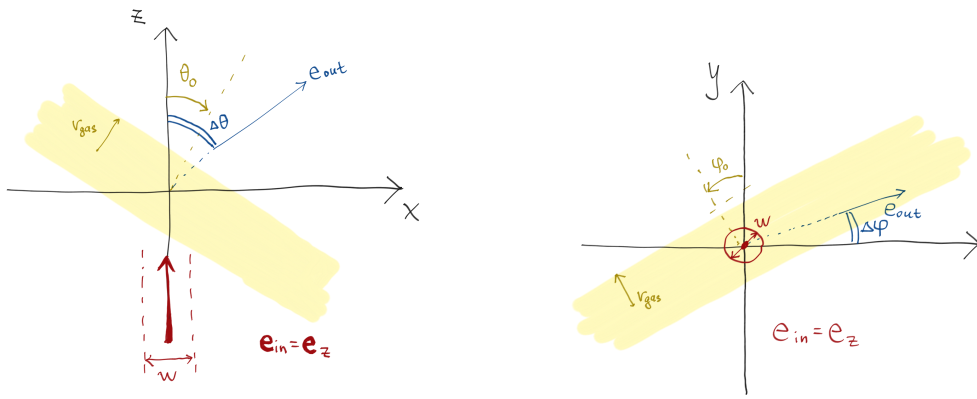
$$\begin{cases} \cos\theta_0 \sin\Delta\theta \cos\left(\Delta\varphi - \varphi_0\right) - \sin\theta_0 (\cos\Delta\theta - 1) = \dfrac{h'\lambda}{d} \\ \sin\Delta\theta \sin\left(\Delta\varphi - \varphi_0\right) = \dfrac{k'\lambda}{d} \\ \sin\theta_0 \sin\Delta\theta \cos\Delta\varphi + \cos\theta_0 (\cos\Delta\theta - 1) = \dfrac{l'\lambda}{d} \end{cases} \tag{13}$$

где $\Delta\theta, \Delta\varphi$ — углы, характеризующие отклонение направления дифрагировавшего излучения относительно падающего, θ_0, φ_0 — углы, характеризующие поворот мишени (решётки) в пространстве, h', k', l' — новые индексы Миллера (рис. 6). Используя выр. 13, можем получить угловое распределение дифрагировавшего излучения при заданных начальных параметрах d, λ, θ_0, φ_0.

Для того, чтобы проверить достоверность полученной теории, смоделируем стационарное взаимодействие в случае регулярной решётки с радиусом кластеров $a = 50$ nm и $d = 3\lambda_{10}$ при $\varphi_0 = 0°$, $\theta_0 = 15°$, $\lambda = \lambda_{10} =$ 83 нм, ширина гауссова пучка $w = 800$ nm, радиус цилиндра, ограничивающего решетку (радиус газовой струи) $r_{\text{gas}} = a + 12d \approx 2$ µm, где множитель при d — количество узлов решетки между центральной осью и границей цилиндра. Несмотря на то, что в реальных условиях гауссов пучок 10-ой гармоники Ti:Sa лазера с шириной 800 nm получить практически невозможно, в силу стационарности вычислений отношение w/r_{gas} может быть корректно масштабировано при $w \ll 2r_{\text{gas}}$. Использованное малое значение w в таком случае ускоряет вычисления, но принципиально не изменяет их результат.

Определим наиболее интенсивные направления рассеяния при помощи следующей интегральной характеристики:

$$E_{\text{int}}\left(V, \eta\right) = \int\limits_V \left(|\mathbf{E}_s|^2_{\eta=\eta}\right) dV, \tag{14}$$



а: Проекция на плоскость xz.

б: Проекция на плоскость xy.

Рис. 6: Общая схема взаимодействия падающего излучения с решеткой. θ_0, φ_0 — характеризуют углы покорота мишени в пространстве, $\Delta\theta$, $\Delta\varphi$ — углы отклонения направления дифрагировавшего излучения относительно падающего, r_{gas} — радиус газовой струи, представляюшей мишень, w — диаметр гауссова пучка падающего излучения. $\Delta\theta$ отсчитывается вокруг y против часовой стрелки, $\Delta\varphi$ — вокруг z против часовой стрелки.

В данном случае выр. 14 представляет собой интегрирование интенсивности рассеянного поля, вычисленного как квадрат модуля напряженности рассеянного поля (без учета нормирующего множителя) в области пространства V для решётки, обладающей нерегулярностью η, то есть является энергией, рассеянной решёткой в область V. Эта область должна быть задана так, чтобы характеризовать некоторое направление в пространстве, и, как правило, для этой цели используется область в виде конуса, образованного некоторым раствором телесного угла $\delta\Omega$ и направлением при помощи углов $\Delta\theta$, $\Delta\varphi$. Для рассматриваемой задачи необходимо исключить из вычисления ближнее поле, ввиду чего накладывается дополнительное ограничение V внутренностью сферического слоя пространства с границами b_1 и b_2, где b_2 — граница области численного моделирования, b_1 — больше радиуса сферы, описанной вокруг мишени. Хотя газовая струя является протяженным объектом, в моделировании используется только её сегмент, так как падающий пучок ограничен и рассеяное поле слабо зависит от частей струи, удаленных от области падения пучка, что позволяет описать вокруг такого сегмента соответствующую окружность.

Пересечение конической области и сферического слоя вдали от мишени можно приблизить цилиндром,

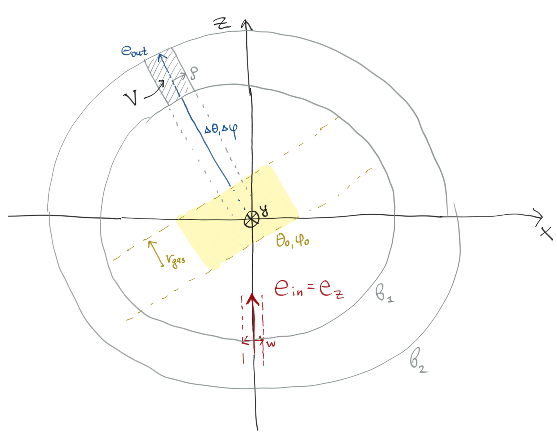


Рис. 7: Схематическое изображение области V (выр. 16).

считая $\rho \approx 0.5b_2 \cdot \delta\Omega$, где ρ — радиус цилиндра. В таком случае, при помощи вспомогательного вектора $\mathbf{c}$ (выр. 15) получаем область V (рис. 7):

$$\mathbf{c} = \mathbf{c}\big(x, y, z, \Delta\theta, \Delta\varphi\big) = \begin{pmatrix} c_x \\ c_y \\ c_z \end{pmatrix} = M_y(\Delta\theta) M_z(\Delta\varphi) \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}, \tag{15}$$

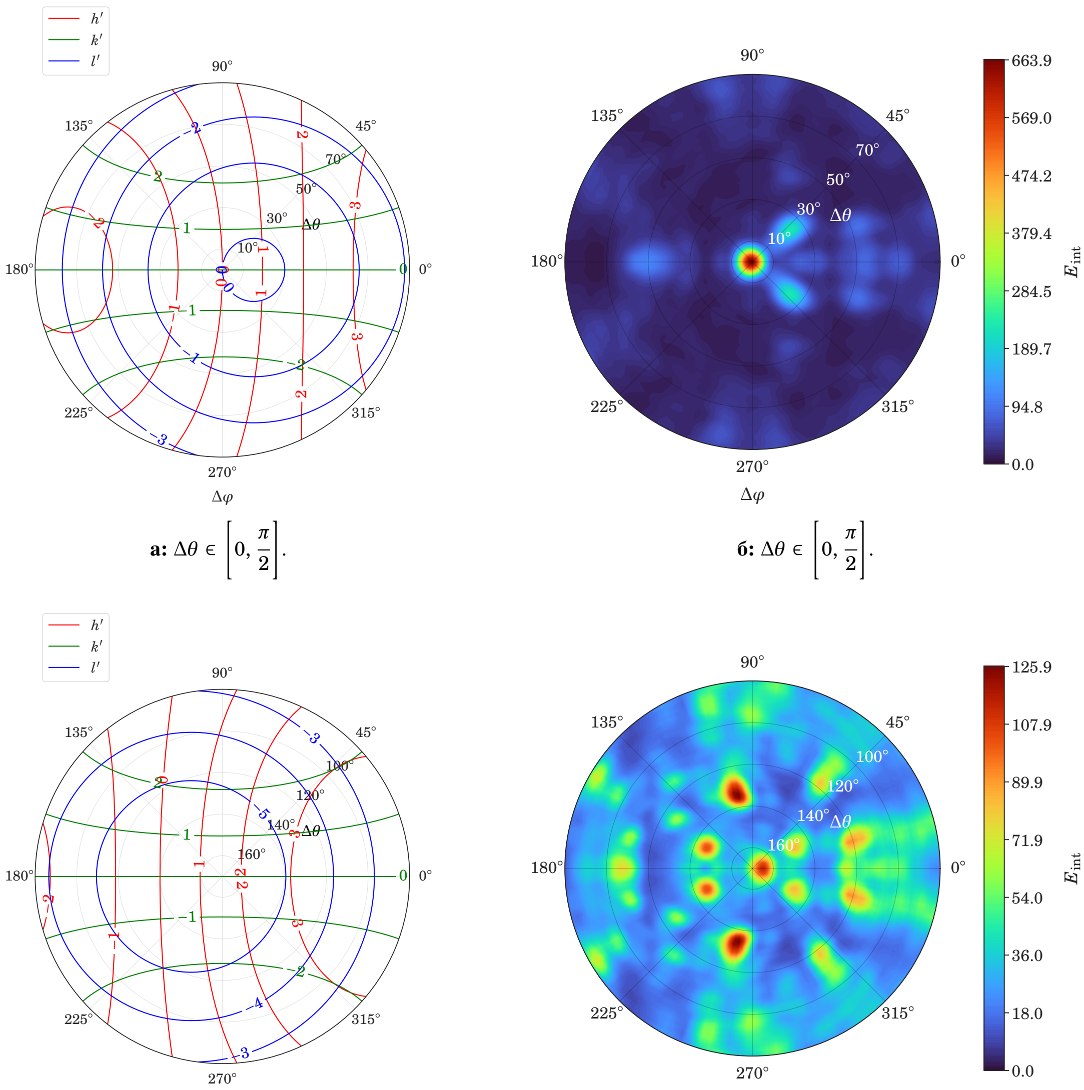
$$V\big(\rho, b_1, b_2, \mathbf{c}\big) = \Big\{x, y, z : c_x^2 + c_y^2 \le \rho^2,\ b_1^2 \le x^2 + y^2 + z^2 \le b_2^2\Big\}, \tag{16}$$

где $M_y(\Delta\theta)$ — матрица поворота вокруг декартовой оси y на угол $\Delta\theta$ против часовой стрелки, $M_z(\Delta\varphi)$ — матрица поворота вокруг декартовой оси z на угол $\Delta\varphi$ против часовой стрелки. В дальнейшем взяты значения $\rho = w/4$, $b_1 = 4r_{\text{gas}}$ где w — ширина гауссова пучка падающего поля, r_{gas} — радиус газовой струи, формирующей мишень.

Также построим пересечения целочисленных решений для h', k', l' с заданными θ_0, φ_0 в осях $\Delta\varphi$, $\Delta\theta$ при помощи выр. 13 (рис. 8а и 8в). Сравнивая полученные результаты можно заметить, что наиболее интенсивные направления дифракции по E_{int} отвечают наиболее близкому раположению кривых, соответствующих целочисленным значениям индексов Миллера.

3.3.2 Рассеяние волнового пакета

$$E_0(\lambda) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{\lambda-\mu}{\sigma}\right)^2} \tag{17}$$



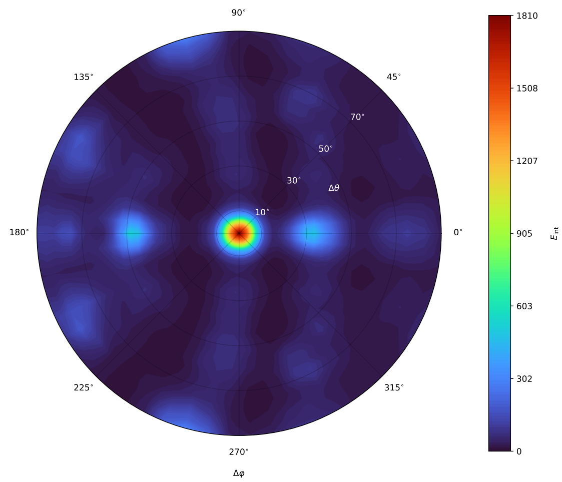
а: $\Delta\theta \in \left[0, \frac{\pi}{2}\right]$.

б: $\Delta\theta \in \left[0, \frac{\pi}{2}\right]$.

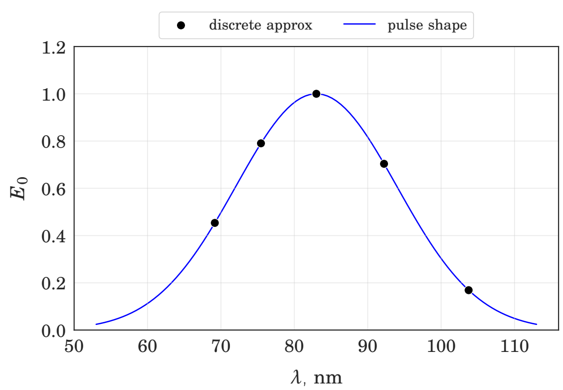
в: $\Delta\theta \in \left[\frac{\pi}{2}, \pi\right]$.

г: $\Delta\theta \in \left[\frac{\pi}{2}, \pi\right]$.

Рис. 8: Вычисление E_{int} по выр. 14 (а, в) и решение выр. 13 в целых индексах Миллера для $a = 50$ nm и $d = 3\lambda_{10}$ при $\varphi_0 = 0°$, $\theta_0 = 15°$, $\lambda = \lambda_{10} = 83$ nm, радиус цилиндрической области $\rho = 200$ nm (б, г). Для наглядности построение было поделено на две проекции полусферических областей по $\Delta\theta$ с полюсами в 0 и π соответственно.



а: $\Delta\theta \in \left[0, \dfrac{\pi}{2}\right], \theta_0 = 15°$.



б: Амплитуда элементов гауссова волнового пакета напряженности поля в зависимости от длины волны.

Рис. 9: Рассеяние гауссового волнового пакета, аппроксимированного дискретно гармониками с 8-ой по 12-ую с длинами волн $\lambda_i = \lambda_L/i$, $\lambda_L = 830$ nm. Синяя кривая на б представляет собой нормальное распределение $N(\mu,\sigma)$ с $\mu = 83$ nm, $\sigma = 10$ nm, черные точки — дискретная аппроксимация волнового пакета, гармоники с 12-ой по 8-ую слева направо

Список литературы

[1] C. Bohren and D. R. Huffman, *Absorption and scattering of light by small particles*. Wiley Science Paperback Series, 1998.

[2] R. E. W. Pfund, R. Lichters, and J. M. ter Vehn, "LPIC++ a parallel one-dimensional relativistic electromagnetic particle-in-cell code for simulating laser-plasma-interaction," in *AIP Conference Proceedings*, AIP, 1998.

[3] A. Egel, L. Pattelli, G. Mazzamuto, D. Wiersma, and U. Lemmer, "CELES: CUDA-accelerated simulation of electromagnetic scattering by large ensembles of spheres," *J Quant Spectrosc Radiat*, vol. 199C, pp. 103–110, 2017.

[4] C. Kittel, *Introduction to Solid State Physics*. Wiley, New York, 1986.