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

Л.А. Литвинов<sup>1</sup>, А.А. Андреев<sup>1, 2</sup>

<sup>1</sup>Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург <sup>2</sup>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
- 3 Стационарные вычисления

## 3.1 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  $0 \le |\Delta d| \le \eta d$ , где  $0 \le \eta < 0.5$  — степень нерегулярности. Тогда при кратном  $d = b\lambda, b \in \mathbb{N}$  расстояние между соседними узлами после внесения сдвигов:

$$b(1-\eta)\lambda \le d_{\text{irreg}} \le b(1+\eta)\lambda \tag{1}$$

В квазирегулярном случае моделирование было проведено несколько раз с целью усреднения и получения обобщенной картины рассеянного поля. Для вычислений был использован программный код CELES [1].

### 3.1.1 Условие дифракции для решетки в пространстве

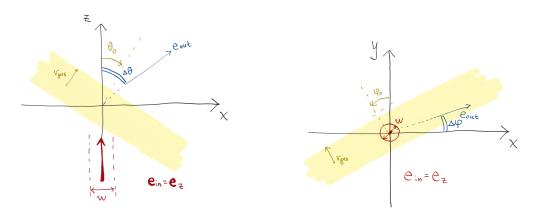
Условие дифракции в случае трехмерной регулярной решетки при упругом рассеянии принимает вид [2]:

$$\begin{cases}
(\mathbf{D}_{x}, \mathbf{e}_{\text{out}} - \mathbf{e}_{\text{in}}) = h\lambda \\
(\mathbf{D}_{y}, \mathbf{e}_{\text{out}} - \mathbf{e}_{\text{in}}) = k\lambda \\
(\mathbf{D}_{z}, \mathbf{e}_{\text{out}} - \mathbf{e}_{\text{in}}) = l\lambda
\end{cases}$$
(2)

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. 2 можно преобразовать следующим образом, учитывая, что  $|\mathbf{D}_x| = |\mathbf{D}_y| = |\mathbf{D}_z| = d$  для рассматриваемой кубической решетки:

$$\begin{cases}
\cos\theta_0 \sin\Delta\theta \cos(\Delta\varphi - \varphi_0) - \sin\theta_0 (\cos\Delta\theta - 1) = \frac{h'\lambda}{d} \\
\sin\Delta\theta \sin(\Delta\varphi - \varphi_0) = \frac{k'\lambda}{d} \\
\sin\theta_0 \sin\Delta\theta \cos(\Delta\varphi - \varphi_0) + \cos\theta_0 (\cos\Delta\theta - 1) = \frac{l'\lambda}{d}
\end{cases}$$
(3)

где  $\Delta\theta$ ,  $\Delta\varphi$  — углы, характеризующие отклонение направления дифрагировавшего излучения относительно падающего,  $\theta_0$ ,  $\varphi_0$  — углы, характеризующие поворот мишени (решётки) в пространстве, h', h', l' — новые индексы Миллера (рис. 1). Используя выр. 3, можем получить угловое распределение дифрагировавшего излучения при заданных начальных параметрах d,  $\lambda$ ,  $\theta_0$ ,  $\varphi_0$ .



а: Проекция на плоскость xz.

**б:** Проекция на плоскость xy.

**Рис. 1:** Общая схема взаимодействия падающего излучения с решеткой.  $\theta_0$ ,  $\varphi_0$  — характеризуют углы покорота мишени в пространстве,  $\Delta\theta$ ,  $\Delta\varphi$  — углы отклонения направления дифрагировавшего излучения относительно падающего,  $r_{\rm gas}$  — радиус газовой струи, представляющей мишень, w — диаметр гауссова пучка падающего излучения.  $\Delta\theta$  отсчитывается вокруг y против часовой стрелки,  $\Delta\varphi$  — вокруг z против часовой стрелки.

### 3.1.2 Рассеяние монохроматического излучения

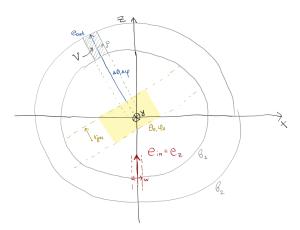
Для того, чтобы проверить достоверность полученной теории, смоделируем стационарное взаимодействие в регулярном случае при различных параметрах решётки и ширине гауссова пучка w=800 nm, радиусе цилиндра, ограничивающего решетку (радиус газовой струи)  $r_{\rm gas}=a+12d\approx 2$  µm, где множитель при 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  $w/r_{\rm gas}$  может быть корректно масштабировано при  $w\ll 2r_{\rm gas}$ . Использованное малое значение w в таком случае ускоряет вычисления, но принципиально не изменяет их результат.

Различие рассеяния в резонансном и нерезонансном случае показано на рис. 3: квадрат амплитуды рассеянного поля превышает таковой в отсутствии резонанса более, чем в 10 раз, а также в этом случае нет порядков дифракции, кроме нулевого, что напрямую следует из  $\lambda/d = \lambda_L/2\lambda_{10} = 5$  в выр. 3.

Определим наиболее интенсивные направления рассеяния при помощи следующей интегральной характеристики:

$$E_{\rm int}(\eta, \lambda, V, E_0) = \int_V |\mathbf{E}_s(\eta, \lambda, E_0)|^2 dV. \tag{4}$$

В данном случае выр. 4 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  $\eta$ , то есть является энергией, рассеянной решёткой в область V,  $\lambda$  представляет собой длину волны падающего поля,  $E_0$  — амплитуду. Область V 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.



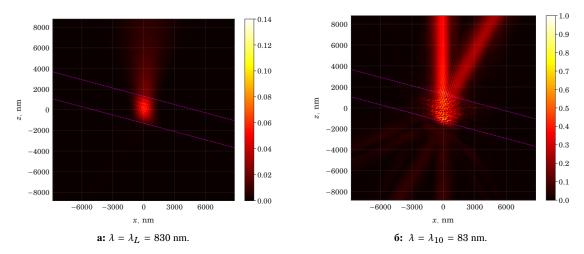
**Рис. 2:** Схематическое изображение области V (выр. 6).

Пересечение конической области и сферического слоя вдали от мишени можно приблизить цилиндром, считая  $\rho \approx 0.5 b_2 \cdot \delta \Omega$ , где  $\rho$  — радиус цилиндра. В таком случае, при помощи вспомогательного вектора  $\mathbf{c}$  (выр. 5) получаем область V (рис. 2).

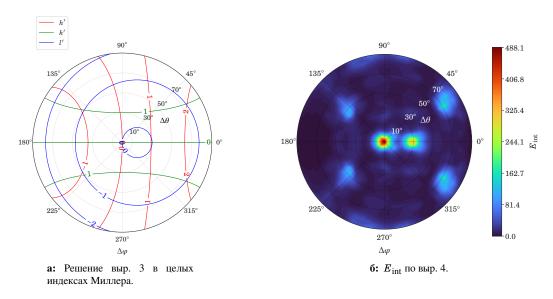
$$\mathbf{c} = \mathbf{c}(x, y, z, \Delta\theta, \Delta\varphi) = \begin{pmatrix} c_x \\ c_y \\ c_z \end{pmatrix} = M_y(\Delta\theta)M_z(\Delta\varphi) \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}, \tag{5}$$

$$V(\rho, b_1, b_2, \mathbf{c}) = \left\{ x, y, z : c_x^2 + c_y^2 \le \rho^2, b_1^2 \le x^2 + y^2 + z^2 \le b_2^2 \right\}, \tag{6}$$

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



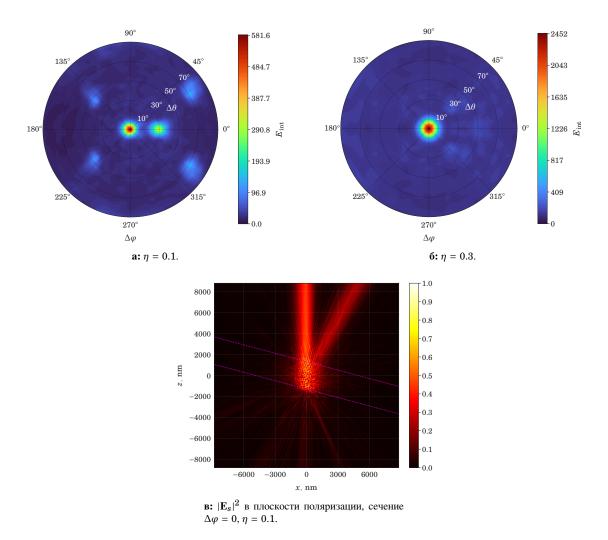
**Рис. 3:**  $|\mathbf{E}_s|^2$  в плоскости поляризации, сечение  $\Delta \varphi = 0$  — рассеяние гауссового пучка на слое квазирегулярно расположенных кластеров радиуса a=20 nm,  $\theta_0=15^\circ$ ,  $\varphi_0=0^\circ$ . Границы газового слоя обозначены пурпурным цветом. Амплитуда рассеянного поля нормирована на максимальное значение в случае 10 гармоники.



**Рис. 4:** Рассеяние 10-ой гармоники при параметрах решетки a=20 nm и  $d=2\lambda_{10}$ ,  $\varphi_0=0^\circ$ ,  $\theta_0=15^\circ$ ,  $\lambda=\lambda_{10}=83$  nm, диапазон построения  $\Delta\theta\in[0,\pi/2]$ .

Также построим целочисленные решения для h', k', l' с заданными  $\theta_0$ ,  $\phi_0$  в осях  $\Delta \phi$ ,  $\Delta \theta$  при помощи выр. 3 (рис. 4а). Графики на рис. 4 представляют собой диаграммы в полярных координатах ( $\Delta \theta, \Delta \phi$ ), то есть проекции поверхности сферы, ограниченной некоторым диапазоном угла  $\Delta \theta$ , на плоскость. Такой метод построения более удобный для изображения пространственного распределения рассеянного излучения, а также более естественный для отображения целочисленных решений на индексы Миллера (выр. 3), так как они в таком случае представляют собой наборы колец на сфере. По полученным результатам можно заметить, что наиболее интенсивные направления дифракции по  $E_{\rm int}$  отвечают наиболее близкому раположению кривых, соответствующих целочисленным значениям индексов Миллера.

Рассмотрим влияние нерегулярности решетки на наиболее интенсивные направления рассеянного поля, то есть зависимость выр. 4 от нерегулярности решётки  $\eta$ . Для этого смоделировано рассеяние в случае квазирегулярной решётки при различных параметрах и нерегулярностью  $\eta$  от 0 до 0.5 (рис. 5).



**Рис. 5:** Рассеяние гауссового пучка на слое квазирегулярно расположенных кластеров радиуса  $\alpha=20$  nm,  $\theta_0=15^\circ$ ,  $\varphi_0=0^\circ$ .

При помощи нормированного варианта  $E_{\text{int}}$  (выр. 7) была построена зависимость изменения рассеяния от нерегулярности решетки (рис. 6).

$$E_{\text{int}}^{\text{norm}}(\eta, \lambda, V, E_0) = \frac{E_{\text{int}}(\eta, \lambda, V, E_0)}{E_{\text{int}}(0, \lambda, V, E_0)}$$
(7)

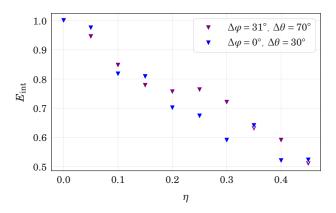
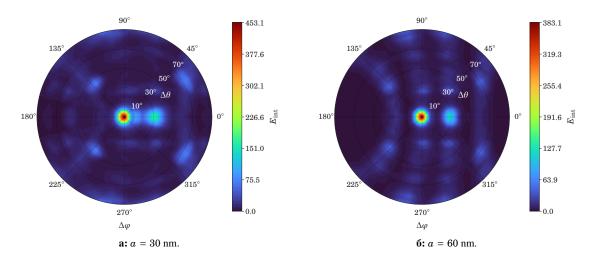
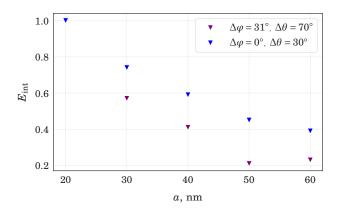


Рис. 6: Ослабление рассеяния в зависимости от нерегулярности решётки.

Также выявлено ослабление интенсивных направлений рассеяния в зависимости от радиуса кластеров в решётке (рис. 7 и 8). При увеличении радиуса кластеров происходит распредление энергии между большим числом направлений (рис. 7) в соответствии с расположением пересечений кривых, соответствующих целочисленным индексам Миллера (рис. 4a), то есть перераспределение в более высокие порядки дифракции по h', k', l'. Это связано с уменьшением свободного пространства между узлами решётки при неизменном периоде d — количество прошедшего излучения уменьшается, расходимость прошедшего через решётку излучения увеличивается, ввиду чего дифракционная картина расплывается, а дифракционные максимумы ослабляются [3].

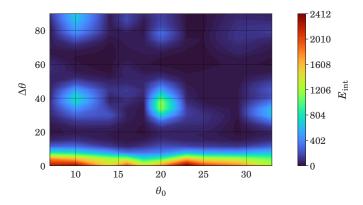


**Рис. 7:** Характеристика выр. 4 при радиусе кластеров a=30 и 60 nm,  $d=2\lambda_{10}$ ,  $\varphi_0=0^\circ, \theta_0=15^\circ, \lambda=\lambda_{10}=83$  nm, диапазон построения  $\Delta\theta\in[0,\pi/2]$ .



**Рис. 8:** Ослабление рассеяния в зависимости от радиуса кластеров, значения нормированы на  $E_{
m int}$  при a=20 nm.

Была рассмотрена завивимость интенсивных направлений рассеяния по  $\Delta\theta$  в зависимости от  $\theta_0$  в сечении  $\Delta\varphi=0$ . При этом было взято значение  $\varphi_0=0$ , так как любое ненулевое значение этого угла в сути поворачивает угловое распределение на тот же угол, что следует из выр. 3.



**Рис. 9:** Характеристика выр. 4 при различном угле  $\theta_0, \varphi_0 = 0, \Delta \varphi = 0, a = 20$  nm,  $d = 2\lambda_{10}.$ 

Полученные результаты показывает, что с ростом нерегулярности решётки наиболее интенсивные направления, кроме нулевого, ослабляются, при этом общая картина рассеяния в различных направлениях выравнивается вплоть до практически однородной при  $\eta \to 0.5$  (рис. 5).

# Список литературы

- [1] 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.
- [2] C. Kittel, Introduction to Solid State Physics. Wiley, New York, 1986.
- [3] M. Born and E. Wolf, *Principles of optics*. Cambridge University Press, 1999.