

# 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 подтверждена 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 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:

$$b(1-\eta)\lambda \leq d_{\text{irreg}} \leq b(1+\eta)\lambda \quad (1)$$

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

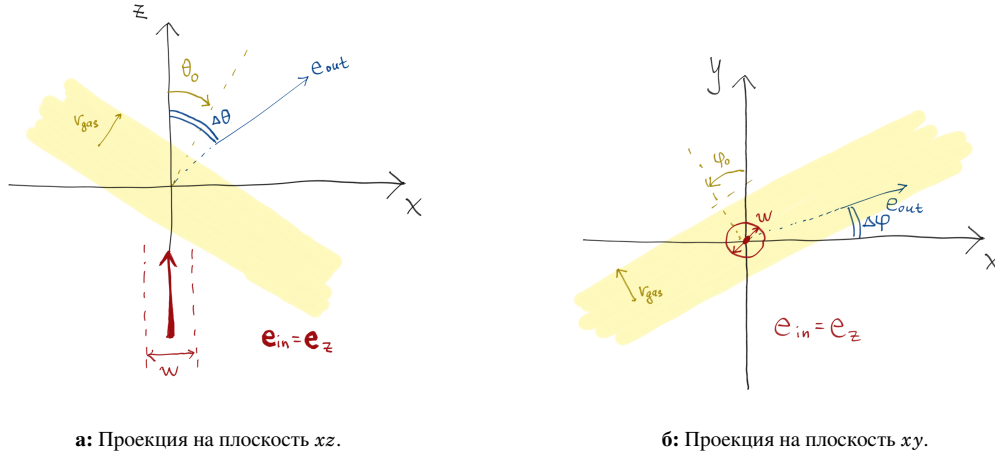
Условие дифракции в случае трехмерной регулярной решетки при упругом рассеянии принимает вид [2]:

$$\begin{cases} (\mathbf{D}_x, \mathbf{e}_{\text{out}} - \mathbf{e}_{\text{in}}) = h\lambda \\ (\mathbf{D}_y, \mathbf{e}_{\text{out}} - \mathbf{e}_{\text{in}}) = k\lambda \\ (\mathbf{D}_z, \mathbf{e}_{\text{out}} - \mathbf{e}_{\text{in}}) = l\lambda \end{cases} \quad (2)$$

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:

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

где  $\Delta\theta, \Delta\varphi$  — углы, характеризующие отклонение направления дифрагировавшего излучения относительно падающего,  $\theta_0, \varphi_0$  — углы, характеризующие поворот мишени (решетки) в пространстве,  $h', k', l'$  — 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 поворота мишени в пространстве,  $\Delta\theta, \Delta\varphi$  — углы отклонения направления дифрагировавшего излучения относительно падающего,  $r_{\text{gas}}$  — 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)  $r_{\text{gas}} = a + 12d \approx 2$   $\mu\text{m}$ , 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  $w/r_{\text{gas}}$  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.

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:

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

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.

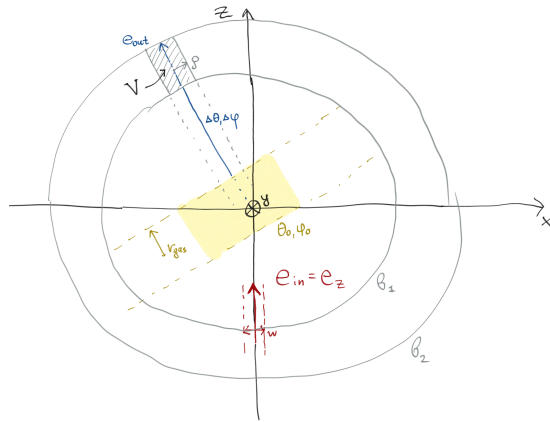


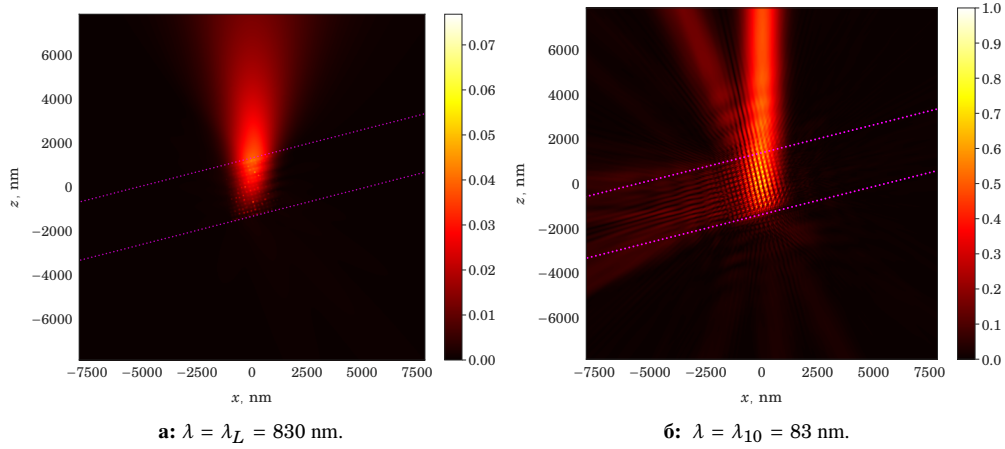
Рис. 2: Схематическое изображение области  $V$  (выр. 6).

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

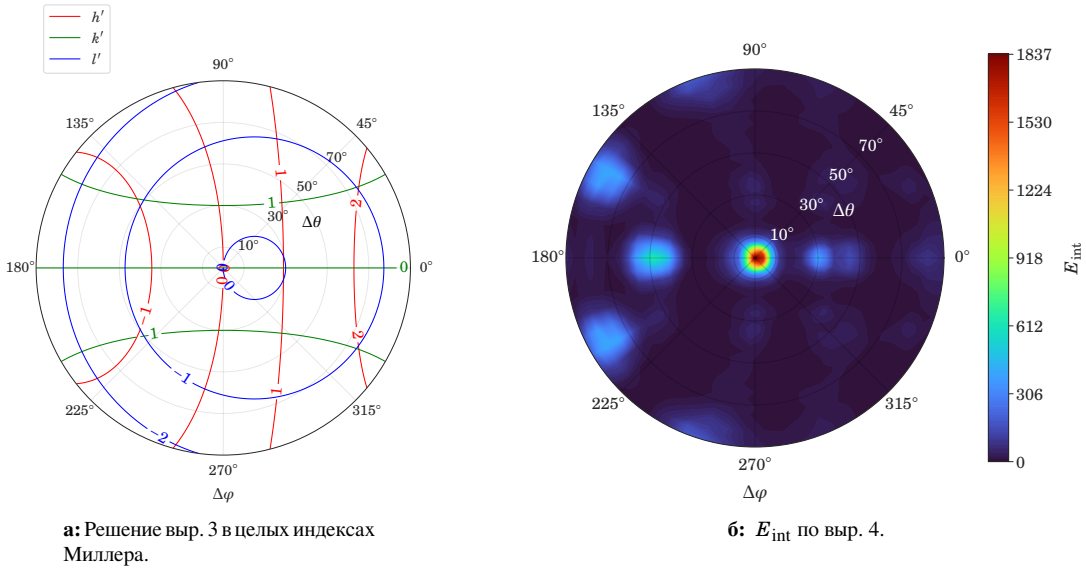
$$\mathbf{c} = \mathbf{c}(x, y, z, \Delta\theta, \Delta\varphi) = \begin{pmatrix} c_x \\ c_y \\ c_z \end{pmatrix} = M_y(\Delta\theta)M_z(\Delta\varphi) \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}, \quad (5)$$

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

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,  $r_{\text{gas}}$  — радиус газовой струи, формирующей мишень.



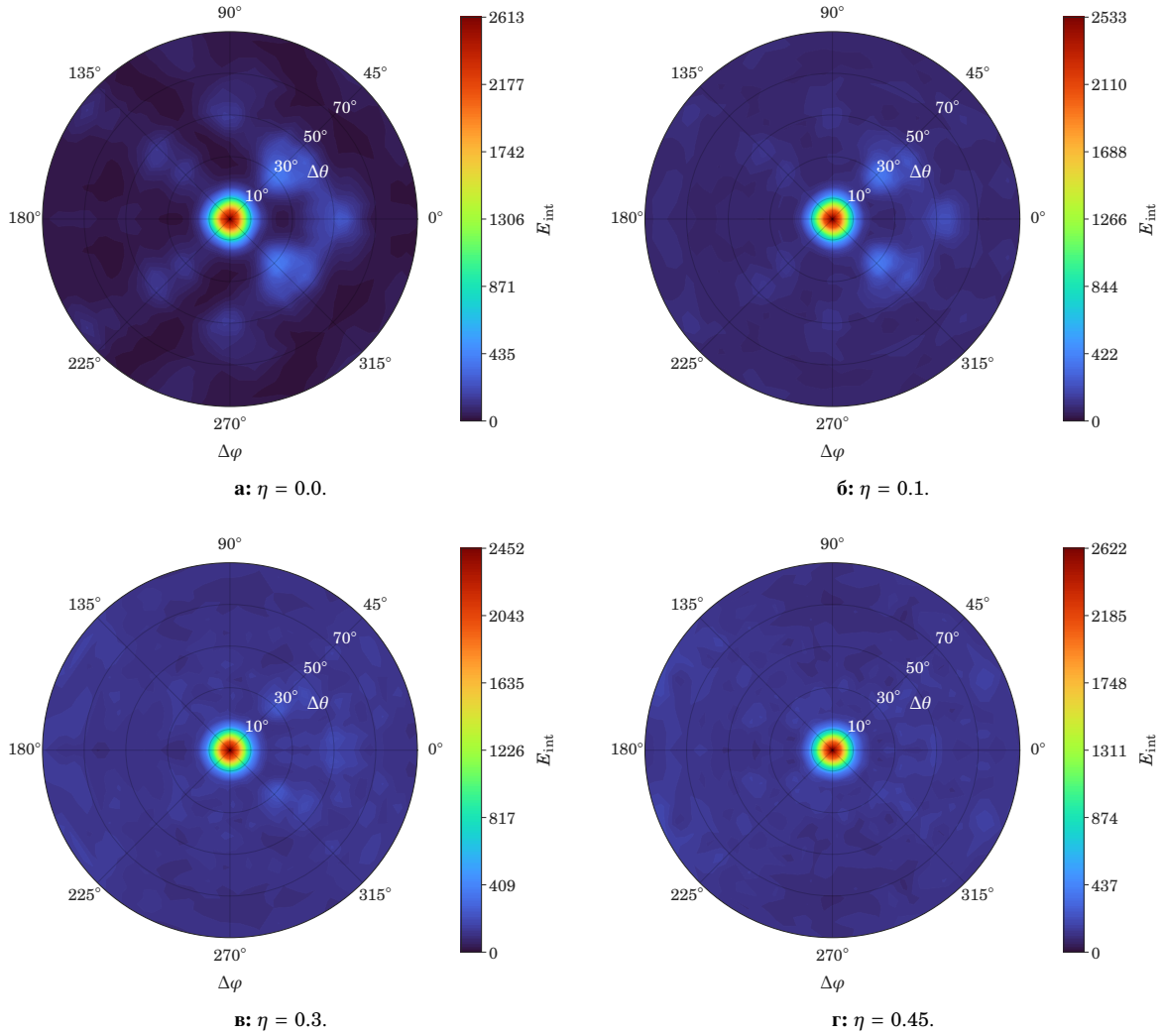
**Рис. 3:**  $|\mathbf{E}_s|^2$  в плоскости поляризации, сечение  $\Delta\varphi = 0$  — рассеяние гауссового пучка на слое квазирегулярно расположенных кластеров радиуса  $a = 20 \text{ nm}$ ,  $\theta_0 = 15^\circ$ ,  $\varphi_0 = 0^\circ$ . Границы газового слоя обозначены пурпурным цветом. Амплитуда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



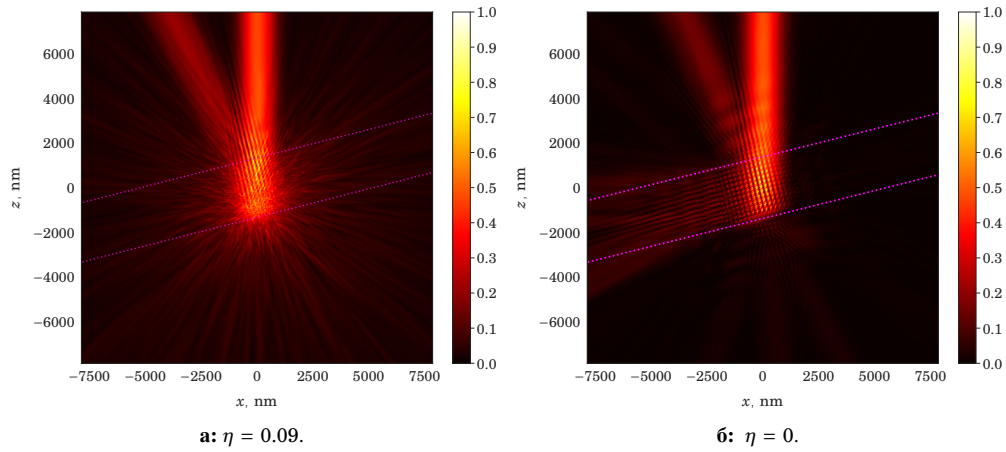
**Рис. 4:** Рассеяние 10-ой гармоники при параметрах решетки  $a = 20 \text{ nm}$  и  $d = 2\lambda_{10}$ ,  $\varphi_0 = 0^\circ$ ,  $\theta_0 = 15^\circ$ ,  $\lambda = \lambda_{10} = 83 \text{ nm}$ , диапазон построения  $\Delta\theta \in [0, \pi/2]$ .

Также построим целочисленные решения для  $h', k', l'$  с заданными  $\theta_0, \varphi_0$  в осях  $\Delta\varphi, \Delta\theta$  при помощи выр. 3 (рис. 4а). Графики на рис. 4 представляют собой диаграммы в полярных координатах  $(\Delta\theta, \Delta\varphi)$ , 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  $E_{\text{int}}$  отвечают наиболее близкому расположению 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 и 6).



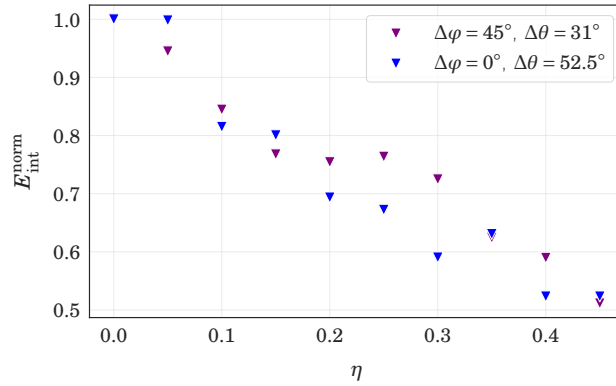
**Рис. 5:** Характеристика выр. 4 при различной нерегулярности решетки  $\eta$ ,  $a = 50$  nm,  $d = 2\lambda_{10}$ ,  $\varphi_0 = 0^\circ$ ,  $\theta_0 = 20^\circ$ ,  $\lambda = \lambda_{10} = 83$  nm, диапазон построения  $\Delta\theta \in [0, \pi/2]$ .



**Рис. 6:**  $|E_s|^2$  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  $\eta = 0$ .

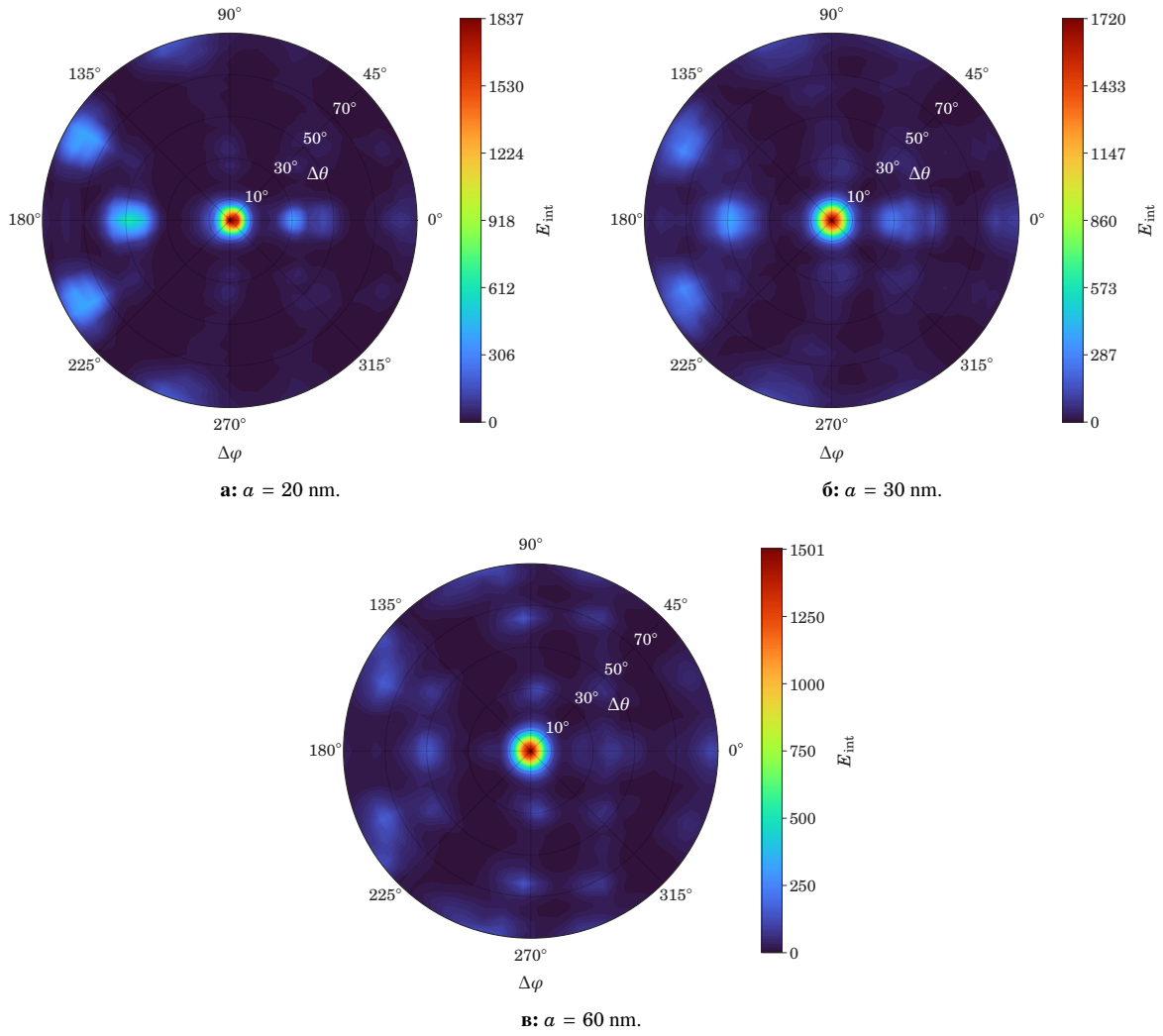
При помощи нормированного варианта  $E_{\text{int}}$  (выр. 7) была построена зависимость изменения рассеяния от нерегулярности решетки (рис. 9).

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

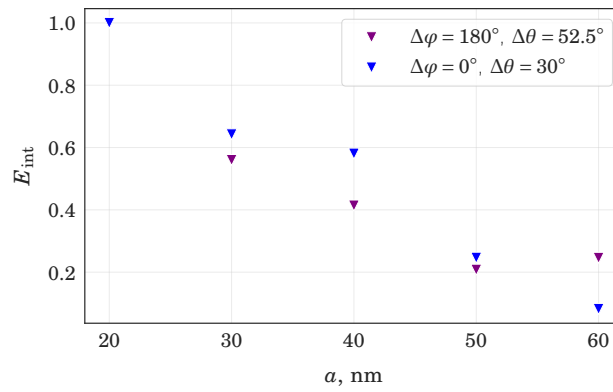


**Рис. 7:** Ослабление рассеяния в зависимости от нерегулярности решётки.

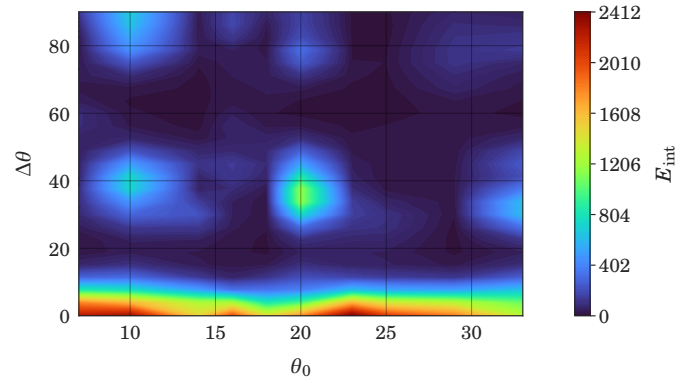
... про кластеры (рис. 8)



**Рис. 8:** Характеристика выпр. 4 при радиусе кластеров  $a = 20, 30$  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. 9:** Ослабление рассеяния в зависимости от радиуса кластеров, значения нормированы на  $E_{\text{int}}$  при  $a = 20$  nm.



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

Полученные результаты показывают, что с ростом нерегулярности решётки наиболее интенсивные направления, кроме нулевого, ослабевают, при этом общая картина рассеяния в различных направлениях выравнивается вплоть до практически однородной при  $\eta \rightarrow 0.5$  (рис. 5г). При этом при увеличении радиуса кластеров происходит распределение энергии между большим числом направлений (рис. 8) в соответствии с расположением пересечений кривых индексов Миллера (рис. 4а)



## 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.