

# 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

Мишени конечного размера, взаимодействующие с высокоинтенсивным когерентным, излучением представляют собой хорошо изученное явление линейно возбужденных поверхностных плазменных колебаний. Поглощение и рассеяние падающего света в таком случае с хорошей точностью могут быть описаны при помощи теории Ми, которая предсказывает существование резонанса, соответствующего мультипольным колебаниям части свободных электронов мишени относительно положительно заряженных ионов. В режиме резонанса эффективное возбуждение поверхностных плазмонов может привести к значительному усилению внутреннего и внешнего поля на собственной частоте кластера. Что может привести к усилению поля, рассеянного на большие углы относительно исходного направления падающей волны.

В пределах длин волн порядка микрометра могут быть использованы фотонные кристаллы и решетки для направления или дифракции электромагнитных волн [1], в то время как для подобных манипуляций с рентгеновским излучением могут быть использованы кристаллы с атомами, регулярно расположенными на расстоянии нескольких нанометров, в качестве рассеивающих центров [2]. При этом большой промежуток между этими диапазонами длин волн, называемый XUV (extreme-ultraviolet) или жесткий ультрафиолет, оказывается трудно манипулируемым.

В данной работе предлагается использование массивов сферических нанокластеров для направленного рассеяния жесткого ультрафиолетового излучения. Аналогичная задача в случае цилиндрической симметрии — массивов наноцилиндров в качестве рассеивателей — была исследована ранее [3]. Полученные результаты показали эффектив-

ность подхода, что делает рассмотрение сферической конфигурации многообещающим. Конечно, использование цилиндров более удобно с точки зрения контроля радиусов одиночных рассеивателей и дистанций между ними, но массивы сферических кластеров могут позволить оперировать направлением излучения в трехмерном пространстве, а также могут быть собраны в более оптимальную пространственную конфигурацию, нежели цилиндры.

## 2 Аналитическая модель

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

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

где  $\omega$  — рассматриваемая гармоническая частота,  $\omega_{pe}$  — 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  $n_i = 6 \cdot 10^{22} \text{ cm}^{-3}$ , 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  $\lambda_{10} = 83 \text{ nm}$  мы получаем условие  $n_e > n_c = 1.3 \cdot 10^{23} \text{ cm}^{-3}$ , 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 [3, 4].

Пользуясь разложением плоской волны по сферическим гармоникам, в случае  $x$ -поляризованной падающей волны, распространяющейся вдоль оси  $z$ , получаем:

$$\mathbf{E}_i = E_0 e^{i\omega t - ikz} \mathbf{e}_x = \sum_{n=1}^{\infty} E_n \left[ \mathbf{M}_{o1n}^{(1)} - i\mathbf{N}_{e1n}^{(1)} \right], \quad (2)$$

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

Обобщенное разложение Фурье в случае изотропной среды даёт вид коэффициентов рассеянного поля [4]:

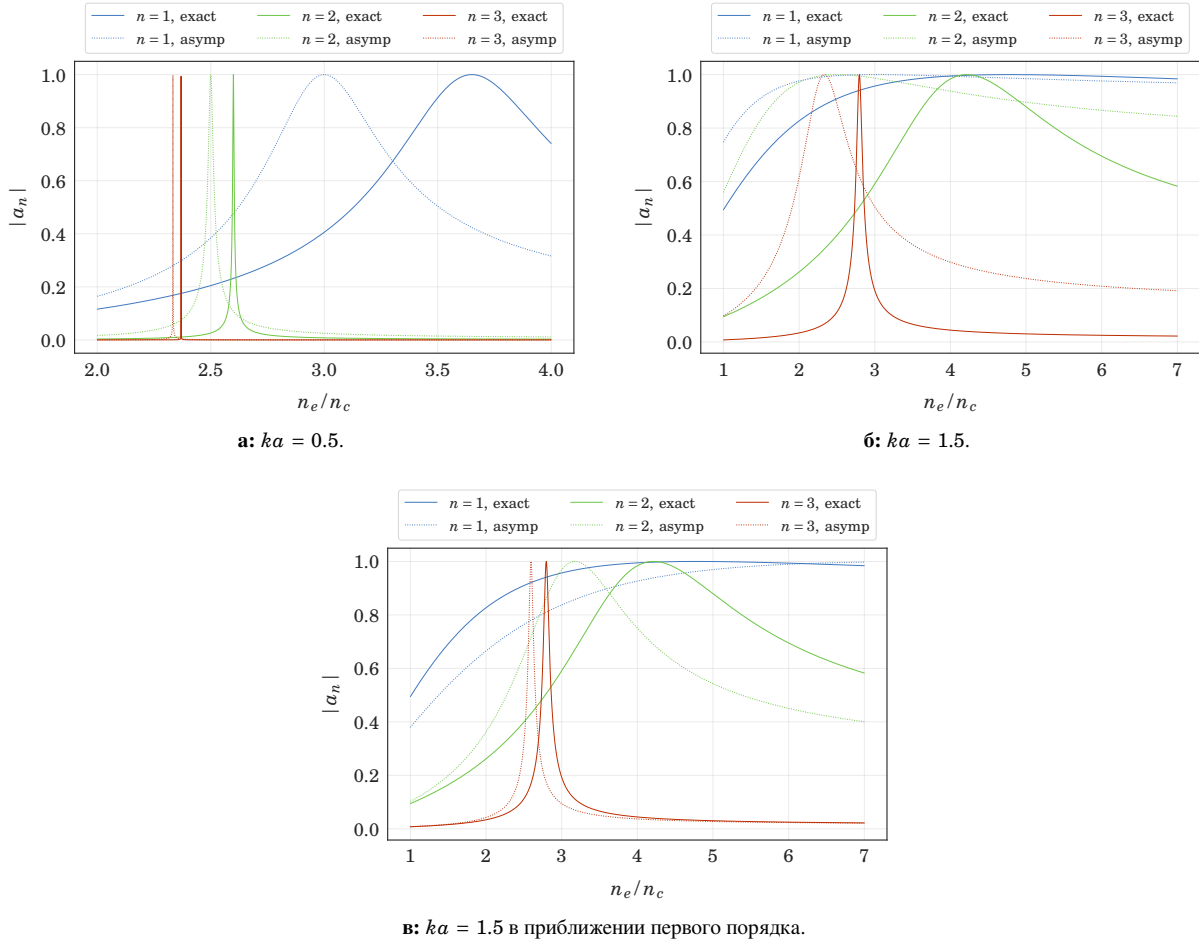
$$a_n(x, m) = \frac{m\psi'_n(x)\psi_n(mx) - \psi'_n(mx)\psi_n(x)}{m\xi'_n(x)\psi_n(mx) - \psi'_n(mx)\xi_n(x)}, \quad (4)$$

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

где  $\psi_n(\rho) = zj_n(\rho)$ ,  $\xi_n(\rho) = zh_n(\rho)$  — 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).

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 [4], в результате чего коэффициенты в выр. 4 и 5 значительно упрощаются. Такое нулевое 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 [4]. На рис. 1 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 большим радиусам (безразмерным)  $ka$  соответствует большая их ширина. Помимо этого, с ростом радиуса растет и значение резонансной плотности.



**Рис. 1:** Коэффициенты сферических гармоник в приближении нулевого и первого порядка,  $\beta_e = 0$ . Кривые “exact” построены с использованием полных разложений функций Бесселя и Ханкеля в ряд.

Такие аппроксимации позволяют оценить резонансные параметры кластера, в частности электронную плотность и радиус. Устремив  $a_n$  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:

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

$$\frac{n_e}{n_c} = (1 - m^2)(1 + i\beta_e) \quad (7)$$

В соответствии с выр. 6 и 7 резонанс рассеянного поля при  $\lambda_{10} = 83$  нм отвечает резонансной электронной плотности  $n_{el} \approx 5.7 \cdot 10^{23} \text{ см}^{-3}$  для  $ka = 0.7$  и  $n_{el} \approx 3.9 \cdot 10^{23} \text{ см}^{-3}$  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

В рамках теории рассеяния Ми известно, что амплитуду поля вблизи поверхности мишени можно значительно усилить. Для проверки этого были вычислены значения комплексного коэффициента преломления  $m$ , отвечающие ранее полученным условиям на резонансную электронную плотность  $n_{el}$  при  $\lambda_{10} = 83$  nm,  $ka = 0.7$ , выр. 6 дает  $m = 1.851i$ . Комплексный коэффициент преломления чисто мнимый, так как столкновительный коэффициент  $\nu_e$  в рассматриваемом случае несколько ниже частоты гармоник, поэтому взаимодействие бесстолкновительное [3].

Для этого случая было посчитано рассеянное электрическое поле (выр. 3) при  $\lambda = \lambda_L$  и  $\lambda = \lambda_{10}$  с целью сравнения между собой резонансного и нерезонансного случая. Видно, что в резонансном случае (рис. 2б) рассеянное поле представляет собой расходящуюся сферическую волну, амплитуда поля в окрестности кластера значительно выше, чем в отсутствии резонанса (рис. 2а), где рассеянных волн как таковых практически не наблюдается, что говорит о том, что падающая волна в нерезонансном случае практически не взаимодействует с кластером.

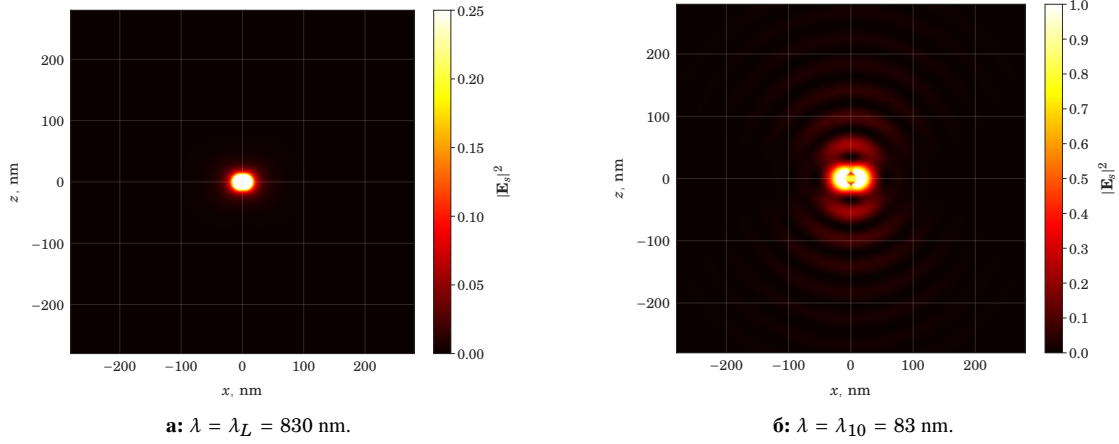


Рис. 2:  $ka = 0.7$  ( $a \approx 8.9$  nm);  $|E_s|^2$  в плоскости поляризации падающей волны.

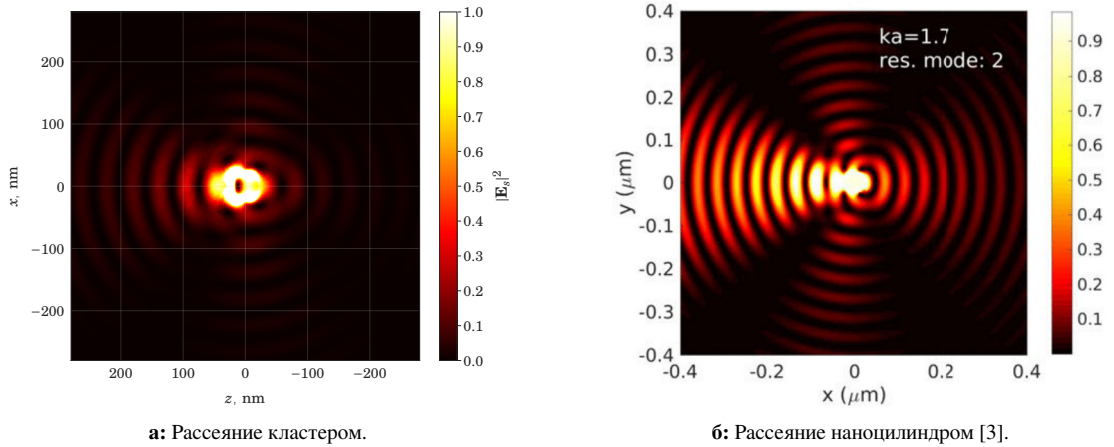


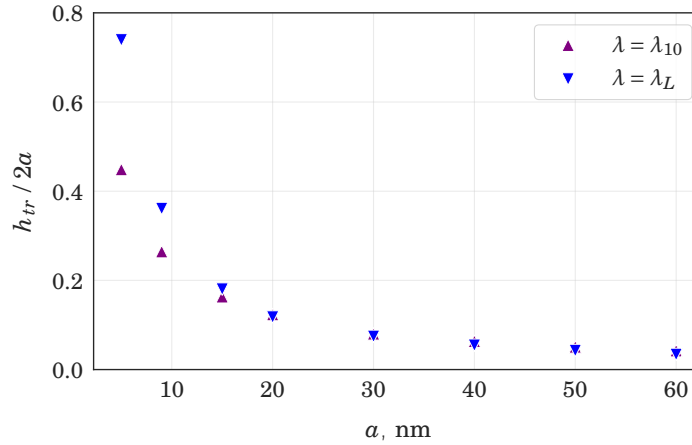
Рис. 3:  $ka = 1.7$  ( $a \approx 22.5$  nm),  $\lambda = \lambda_{10} = 83$  nm;  $|E_s|^2$  построено в плоскости поляризации падающей волны. Качественное сравнение для такого же значения  $ka$  в случае цилиндров (б) — падающая волна распространяется справа налево (противоположно направлению оси  $x$ ),  $y$ -поляризована.

Дополнительно был смоделирован случай  $ka = 1.7$  (рис. 3а) и сравнен с аналогичной ситуацией для одиночного наноцилиндра [3] (рис. 3б). Видно, что общие направления рассеянного поля сохраняются, видны слабые боковые порядки с углами отклонения, близкими к  $90^\circ$  относительно направления падающей волны, что сходно с случаем цилиндрической симметрии. Различия в амплитуде рассеянных волн связаны с принципиальными отличиями в геометрии цилиндра и кластера. Наиболее интенсивное рассеяние наблюдается для направления, соответствующего направлению падающей волны в силу конструктивной интерференции, эффективность рассеяния в этом направлении порядка 5%.

### 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++ [5]. В качестве источника был задан фронтальный линейно поляризованный лазерный импульс с длиной волны  $\lambda_{10} = 83$  nm, длительностью  $\tau$ , формой огибающей амплитуды импульса во времени  $\sin^2(t)$  и интенсивностью  $I_h = 10^{14}$  W/cm<sup>2</sup>. 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  $n_{el} = 4.2n_c$ . Также было рассмотрено взаимодействие с первой гармоникой, для которой  $\lambda_L = 830$  nm,  $I_L = 10^{18}$  W/cm<sup>2</sup>. В качестве мишеней были взяты одиночные кластеры радиуса  $a$  от 9 до 60 nm.



**Рис. 4:** Асимптотика средней суммарной толщины переходного слоя при  $0 \leq t \leq 10T$  относительно радиуса мишени.  $n_c$ , использованное при построении, соответствует критической плотности для длины волны  $\lambda = \lambda_{10}$ .

По полученным результатам моделирования была рассчитана средняя суммарная толщина переходного слоя в процессе взаимодействия со внешним импульсом  $h_{tr}$  в зависимости от радиуса мишени  $a$  (рис. 4). Условие квазистационарности в таком случае принимает вид  $h_{tr} \ll 2a$ , что соблюдается при  $a \geq 20$  nm. Таким образом, при использовании стационарных вычислений для оценки углового рассеяния допустимо использовать только кластеры с радиусом 20 nm и больше.

### 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.

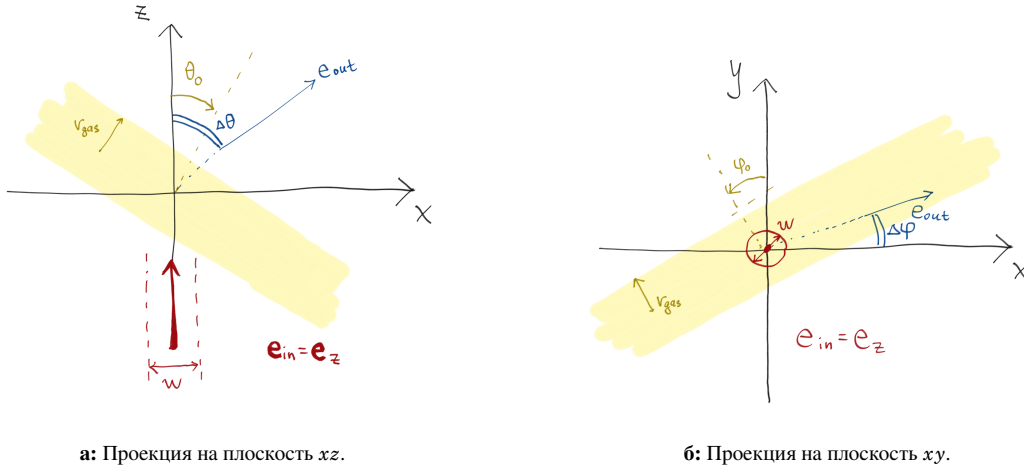
В качестве регулярного распределения была выбрана примитивная кубическая решетка с расстоянием между соседними узлами  $d$ . Квазирегулярное распределение было построено при помощи внесения случайных сдвигов координат узлов с произвольной нормой сдвига в диапазоне  $0 \leq |\Delta d| \leq \eta d$ , где  $0 \leq \eta < 0.5$  — степень нерегулярности. В квазирегулярном случае моделирование было проведено несколько раз с целью усреднения и получения обобщенной картины рассеянного поля. Для вычислений был использован программный код CELES [6].

### 3.3.1 Условие дифракции для решетки в пространстве

Условие дифракции в случае трехмерной регулярной решетки при упругом рассеянии в системе координат, связанной с направлением падающего излучения, принимает вид [7]:

$$\begin{cases} \cos\theta_0 \sin\Delta\theta \cos(\Delta\varphi - \varphi_0) - \sin\theta_0 (\cos\Delta\theta - 1) = \frac{h'\lambda}{d} \\ \sin\Delta\theta \sin(\Delta\varphi - \varphi_0) = \frac{k'\lambda}{d} \\ \sin\theta_0 \sin\Delta\theta \cos(\Delta\varphi - \varphi_0) + \cos\theta_0 (\cos\Delta\theta - 1) = \frac{l'\lambda}{d} \end{cases} \quad (8)$$

где  $\Delta\theta, \Delta\varphi$  — углы, характеризующие отклонение направления дифрагировавшего излучения относительно падающего,  $\theta_0, \varphi_0$  — углы, характеризующие поворот мишени (решётки) в пространстве,  $h', k', l'$  — индексы Миллера (рис. 5). Используя выр. 8, можем получить угловое распределение дифрагировавшего излучения при заданных начальных параметрах  $d, \lambda, \theta_0, \varphi_0$ .



**Рис. 5:** 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.

### 3.3.2 Рассеяние монохроматического излучения

Для того, чтобы проверить достоверность полученной теории, смоделируем стационарное взаимодействие в регулярном случае при различных параметрах решётки и ширине гауссова пучка  $w = 800 \text{ nm}$ , радиусе цилиндра, ограничивающего решетку (радиус газовой струи)  $r_{\text{gas}} = a + 12d \approx 2 \text{ }\mu\text{m}$ , 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. 7 — 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. 8.

Определим наиболее интенсивные направления рассеяния при помощи следующей интегральной характеристики:

$$E_{\text{int}}(\eta, \lambda, V(\Delta\theta, \Delta\varphi), E_0, \varphi_0, \theta_0) = \int_{V(\Delta\theta, \Delta\varphi)} |\mathbf{E}_s(\eta, \lambda, E_0, \varphi_0, \theta_0)|^2 dV. \quad (9)$$

В данном случае выр. 9 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, углы  $\varphi_0, \theta_0$  — задают положение мишени в пространстве в соответствии с рис. 5. 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.

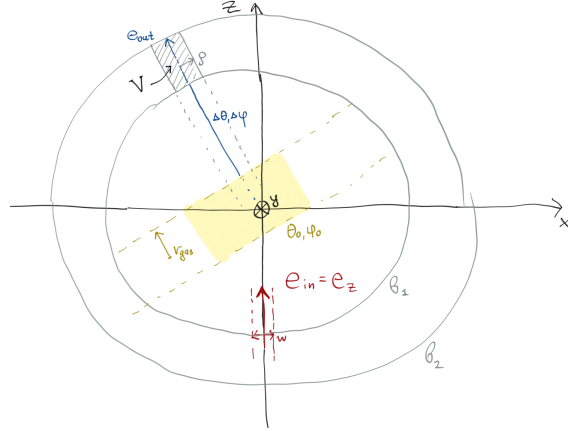


Рис. 6: Схематическое изображение области  $V$  (выр. 11).

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. 10) получаем область  $V$  (рис. 6).

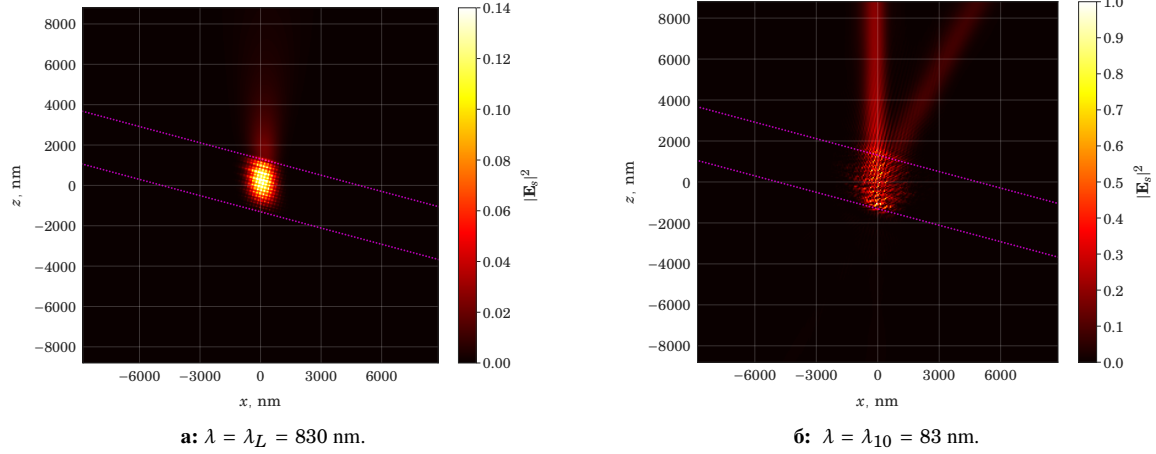
$$\mathbf{c} = \mathbf{c}(\mathbf{x}, \Delta\theta, \Delta\varphi) = \begin{pmatrix} c_x \\ c_y \\ c_z \end{pmatrix} = M_y(\Delta\theta)M_z(\Delta\varphi)\mathbf{x}, \quad \mathbf{x} = \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}, \quad (10)$$

$$V(\Delta\theta, \Delta\varphi) = \{\mathbf{x} : c_x^2 + c_y^2 \leq \rho^2, b_1^2 \leq |\mathbf{x}|^2 \leq b_2^2\}, \quad (11)$$

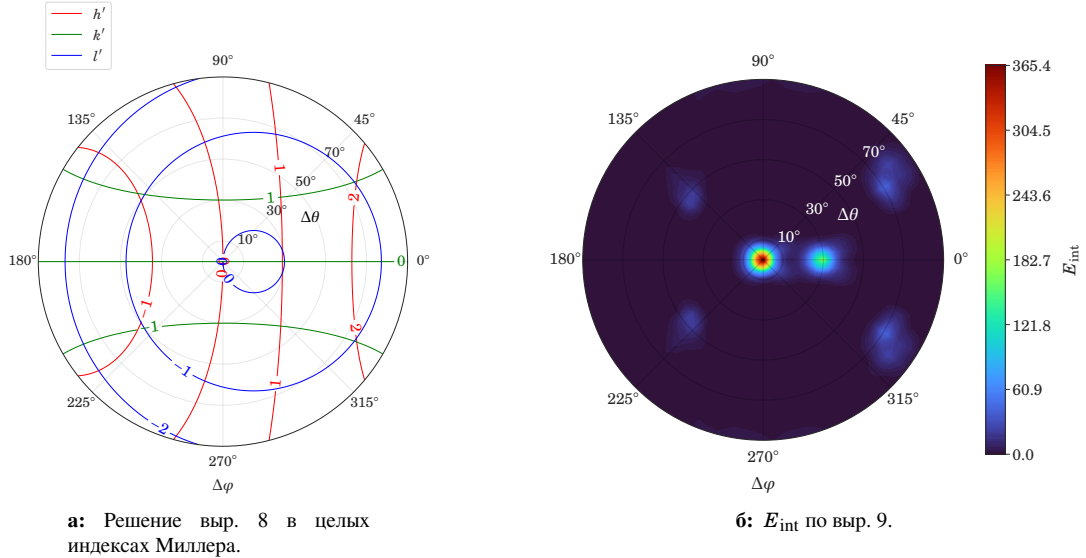
где  $M_y(\Delta\theta)$  — матрица поворота вокруг декартовой оси  $y$  на угол  $\Delta\theta$  против часовой стрелки,  $M_z(\Delta\varphi)$  — матрица поворота вокруг декартовой оси  $z$  на угол  $\Delta\varphi$  против часовой стрелки. Долю отклоненного в конкретном направлении излучения  $E_{\text{frac}}$  можно определить, используя следующее выражение:

$$E_{\text{frac}}(\eta, \lambda, V, E_0, \varphi_0, \theta_0) = \frac{E_{\text{int}}(\eta, \lambda, V, E_0, \varphi_0, \theta_0)}{\int_{V_0} |\mathbf{E}_i(\lambda, E_0, w)|^2 dV} \quad (12)$$

где  $V_0 = \{\mathbf{x} : b_1^2 \leq |\mathbf{x}|^2 \leq b_2^2\}$  — дальняя зона области моделирования.



**Рис. 7:**  $|\mathbf{E}_s|^2$  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 гармоник.



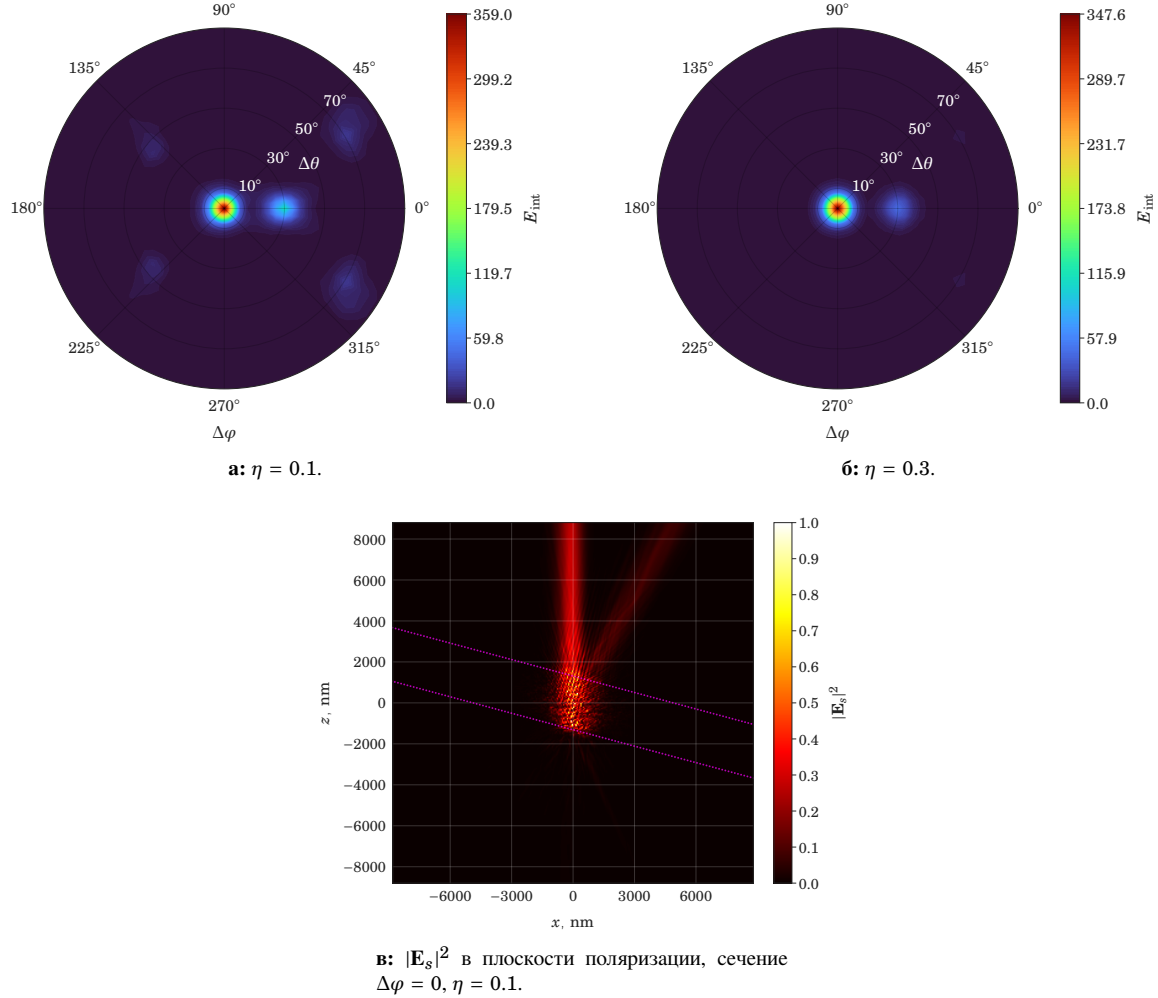
**Рис. 8:** Рассеяние 10-ой гармоники при параметрах решетки  $a = 20$  nm и  $d = 2\lambda_{10}$ ,  $\varphi_0 = 0^\circ$ ,  $\theta_0 = 15^\circ$ ,  $\lambda = \lambda_{10} = 83$  nm, диапазон построения  $\Delta\theta \in [0, \pi/2]$ .

Также построим целочисленные решения для  $h', k', l'$  с заданными  $\theta_0, \varphi_0$  в осях  $\Delta\varphi, \Delta\theta$  при помощи выр. 8 (рис. 8а). Графики на рис. 8 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. 8), 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. При этом эффективность рассеяния в наиболее интенсивных направлениях по отношению к падающему полю достигает 20% ( $\Delta\varphi = 0^\circ$ ,  $\Delta\theta = 30^\circ$ ).

Рассмотрим влияние нерегулярности на наиболее интенсивные направления рассеянного поля, то есть зависимость выр. 9 от нерегулярности решётки  $\eta$ . Для этого смоделировано рассеяние в случае квазирегулярной решётки при различных параметрах и нерегулярностью  $\eta$  от 0 до 0.5 (рис. 9).



**Рис. 9:** Рассеяние гауссового пучка на слое квазирегулярно расположенных кластеров радиуса  $a = 20$  nm,  $\theta_0 = 15^\circ$ ,  $\varphi_0 = 0^\circ$ .

При помощи нормированного варианта  $E_{\text{int}}$  (выр. 13) была построена соответствующая зависимость от нерегулярности (рис. 10). С ростом нерегулярности наиболее интенсивные направления, кроме нулевого, значительно ослабляются, вплоть до 80% по отношению к регулярному случаю, при этом общая картина рассеяния в различных направлениях выравнивается вплоть до практически однородной при  $\eta \rightarrow 0.5$  (рис. 9).

$$E_{\text{int}}^{\text{norm}}(\eta, \lambda, V, E_0) = \frac{E_{\text{int}}(\eta, \lambda, V, E_0)}{E_{\text{int}}(0, \lambda, V, E_0)} \quad (13)$$

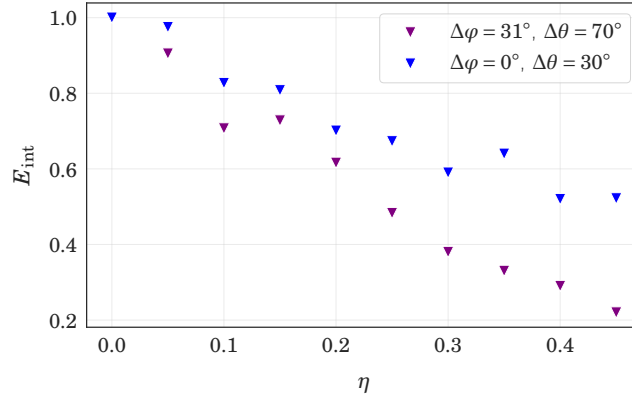
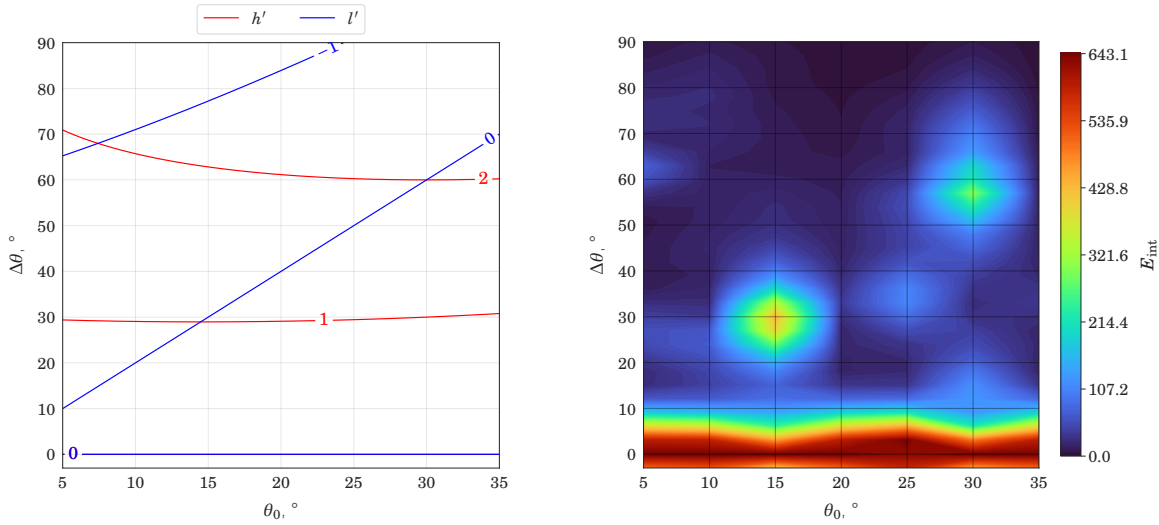


Рис. 10: Ослабление рассеяния в зависимости от нерегулярности решётки.

Была рассмотрена зависимость интенсивных направлений рассеяния по  $\Delta\theta$  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. 8. Полученный результат полностью соотносится с описанной ранее теорией дифракции (выр. 8) — положение пятен, отвечающих наиболее интенсивным направлениям рассеянного поля, отличным от нулевого, на рис. 11б соответствуют пересечениям линий целочисленных значений индексов Миллера на рис. 11а.

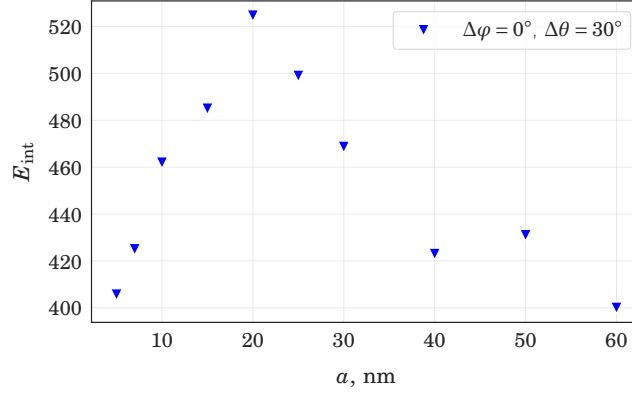


а: Решение выр. 8 в целых индексах Миллера.

б:  $E_{\text{int}}$  по выр. 9.

Рис. 11: Рассеяние 10-ой гармоники при различном угле  $\theta_0$ ,  $\varphi_0 = 0$ ,  $\Delta\varphi = 0$ ,  $a = 20$  nm,  $d = 2\lambda_{10}$ . На (а)  $k' = 0$  для любых  $\theta_0$  и  $\Delta\theta$ .

Было выбрано наиболее интенсивное направление рассеяния, отвечающее  $\theta_0 = 15^\circ$ ,  $\Delta\theta = 30^\circ$ , для него рассмотрена зависимость величины ранее построенной интегральной характеристики (выр. 9) от радиуса кластеров (рис. 12). Видно наличие глобального максимума у построенной зависимости, что позволяет говорить о существовании наиболее оптимального значения радиуса для соответствующего направления.



**Рис. 12:** Ослабление рассеяния в зависимости от радиуса кластеров, значения нормированы на  $E_{\text{int}}$  при  $\alpha = 20$  nm.

### 3.3.3 Рассеяние волнового пакета

Рассмотрим рассеяние волнового пакета, образующегося в результате порождения из лазерного импульса первой гармоники. Амплитуда волнового пакета во времени описывается гауссовой функцией (выр. 14), при этом исходный импульс первой гармоники достаточно короткий, чтобы пренебречь изменением его временной ширины (длительности) при преобразовании. В рамках периодического продолжения промежутка  $[-\tau, \tau]$  этого импульса, где  $\tau$  — полуширина импульса, можем построить ряд Фурье (выр. 15), откуда имеем коэффициенты Фурье (выр. 16), представляющие собой вклад каждой из гармоник в общий импульс.

$$E_0(t) = \exp\left(-\frac{t^2}{\tau^2}\right) \quad (14)$$

$$E_0(t) = \frac{\sqrt{\pi}}{2} + \sum_{j=1}^{\infty} E_j \cos(\omega_j t), \quad \omega_j = \frac{2\pi j}{\tau} = \frac{c}{\lambda_j}, \quad \lambda_j = \frac{\lambda_L}{j}, \quad (15)$$

$$E_j = \frac{1}{\tau} \int_{-\tau}^{\tau} \exp\left(-\frac{t^2}{\tau^2}\right) \cos(\omega_j t) dt. \quad (16)$$

Для того, чтобы построить диаграмму рассеяния волнового пакета, была использована новая интегральная характеристика, определенная с учетом коэффициентов разложения в ряд Фурье волнового пакета (выр. 17). Такая характеристика разумна для описания направлений рассеяния в силу аддитивности энергии как количественной характеристики. Область  $V$  в данном случае представляет собой аналогичную той, что была использована для предыдущей интегральной характеристики (выр. 11, рис. 6).

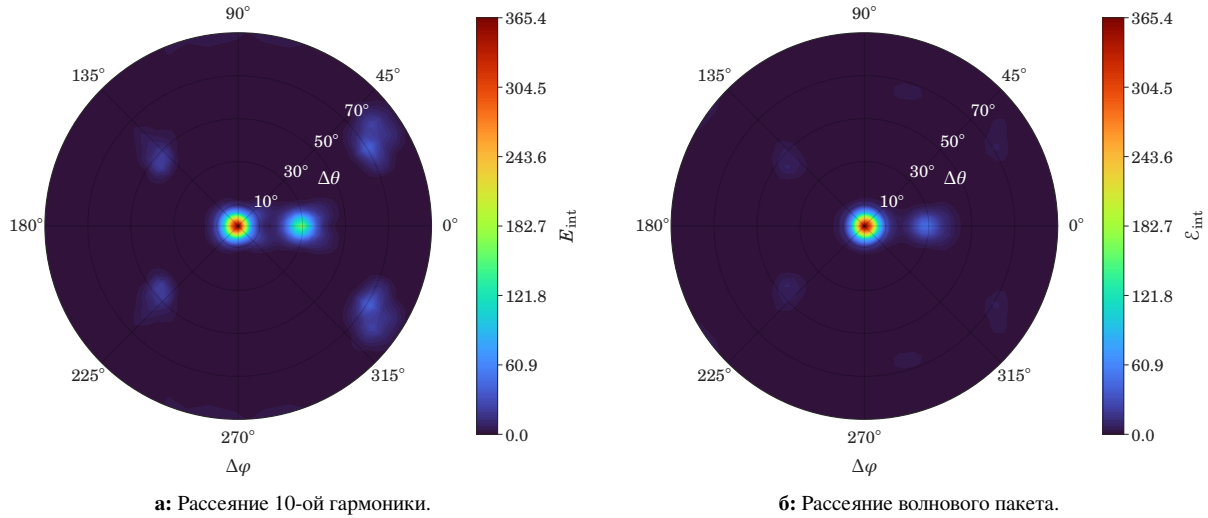
$$\mathcal{E}_{\text{int}}(V, \eta, \varphi_0, \theta_0) = \sum_{j=N_1 > 0}^{N_2} E_{\text{int}}(\eta, \lambda_j, V, E_j, \varphi_0, \theta_0). \quad (17)$$

Определим наиболее интенсивные направления рассеянного поля для решётки с  $d = 2\lambda_{10}$ , радиусом кластеров  $\alpha = 20$  nm,  $\theta_0 = 15^\circ$ ,  $\varphi_0 = 0^\circ$ , гармоники в волновом пакете с 8-ой по 12-ую, то есть  $N_1 = 8$ ,  $N_2 = 12$  в выр. 17, гауссова импульс имеет полуширину  $\tau \approx 17$  fs.

Сравнивая полученный результат с аналогичной диаграммой, вычисленной при помощи выр. 9 для 10-ой гармоники, можно заметить аналогичное значение для дифракционного максимума ( $h' = k' = l' = 0$ ), отвечающего за прошедшее излучение, и ослабление и расплывание остальных, что полностью соответствует выр. 8. В частности, относительная эффективность первого дифракционного максимума по отношению к прошедшему излучению ( $\Delta\varphi = 0^\circ$ ,  $\Delta\theta = 30^\circ$ ) ослабляется с 0.3 до 0.1.

Это происходит в силу того, что индексы Миллера, отвечающие дифракционным уравнениям для разных длин волн, будут связаны между собой коэффициентами пропорциональности, имеем масштабирование кривых,

отвечающих целочисленным значениям индексов Миллера, что и приводит к размытию дифракционной картины (рис. 13а и 13б).



**Рис. 13:** Угловая диаграмма рассеяния гауссова волнового пакета и 10-ой гармоники.  $\theta_0 = 15^\circ$ ,  $\varphi_0 = 0^\circ$ ,  $d = 2\lambda_{10}$ , радиус кластеров  $a = 20$  nm.

### 3.3.4 Условия оптимального рассеяния XUV излучения в заданном направлении

Как было отмечено ранее, основной задачей данной работы является направленное рассеяние излучения в XUV диапазоне. Для этой цели мы предлагаем кластерную мишень с квазирегулярной структурой в общем случае, параметры которой необходимо выбирать исходя из условий, то есть длины волны наиболее интенсивной спектральной составляющей волнового пакета или монохроматического излучения  $\lambda$ , а также нужных углов отклонения  $\Delta\varphi$ ,  $\Delta\theta$  относительно направления падающего излучения.

В первую очередь необходимо оценить радиус кластеров  $a$  при помощи аналитической модели (выр. 6). Полученное значение будет начальной оценкой резонансного значения радиуса кластера при заранее известном материале. Далее необходимо выбрать расстояние между кластерами  $d$ . Задавая большие  $d$  для решетки (кратные длине волны падающего поля в случае монохроматического излучения или длине волны наиболее интенсивной спектральной составляющей в случае волнового пакета), мы увеличиваем количество реализуемых дифракционных максимумов, снижая эффективность (отношение диаметра кластера к расстоянию между кластерами уменьшается), но при этом увеличивая диапазон углов, куда можно потенциально отклонить излучение. Малые  $d$  обеспечивают наиболее интенсивное рассеяние в ближние порядки дифракции, но имеет ограниченный набор углов, расположенный вблизи пересечений кривых целочисленных решений системы уравнений Лауэ, как это хорошо видно на рис. 11б.

Описанная теория дифракции (выр. 8) позволяет оценить положение таких пересечений и подобрать наиболее подходящее значение  $d$  в зависимости от необходимого угла отклонения  $\Delta\varphi$ ,  $\Delta\theta$ . После этого, необходимо вычислить рассеянное поле, при помощи которого посчитать интегральную характеристику  $E_{\text{int}}$  (выр. 9) для заданной геометрии и диапазона радиуса кластеров  $a \pm 20\%$  с целью уточнить первоначальную оценку, учесть эффекты дифракции в ближней и средней зоне.

Наличие нерегулярности  $\eta$  в решетке неизбежно заставляет дифракционные максимумы расплываться и ослабляться, что необходимо учесть при оценке эффективности рассеяния при помощи выр. 12.

## 4 Заключение

Мы обнаружили, что периодическая структура из плотных плазменных кластеров оказалась подходящим элементом для направленного эффективного рассеяния излучения в XUV диапазоне. Так как множество сферических рассеивателей требует вычислений в трёхмерном пространстве, была предложена стационарная модель и определен диапазон

радиусов кластеров, в пределах которого электронная плотность квазистационарна во время взаимодействия с внешним полем. Когда ионизация такова, что концентрация электронов близка к резонансной для заданных начальных параметров, эффективность рассеяния значительно увеличивается и достигает нескольких процентов в случае одиночного кластера. Для множества кластеров эффективность угловой дисперсии растёт с увеличением количества рядов кластеров и может достигать порядка нескольких десятков процентов в случае определенных направлений.

Полученные угловые распределения дифракционных максимумов для рассеяния при помощи множества регулярно расположенных кластеров хорошо описываются при помощи теории Лауэ, при этом внесение небольшой нерегулярности в распределение кластеров ослабляет наиболее интенсивные направления дифракции, отличные от направления прошедшего излучения, не более чем на 25%. В случае немонохроматического излучения эффективность усиления угловой дисперсии падает в соответствии с спектральным распределением амплитуды поля, ослабление может достигать порядка трёх раз.

## Список литературы

- [1] X. Lin, X. Zhang, K. Yao, and X. Jiang, “Wide-range and tunable diffraction management using 2d rectangular lattice photonic crystals,” *J. Opt. Soc. Am. B*, vol. 31(5), pp. 1145–1149, 2014.
- [2] B. W. Batterman and H. Cole, “Dynamical diffraction of x rays by perfect crystals,” *Rev. Mod. Phys.*, vol. 36(3), pp. 681–717, 1964.
- [3] Z. Léczy and A. A. Andreev, “Angular dispersion boost of high order laser harmonics with carbon nano-rods,” *Optics Express*, vol. 28(4), pp. 5355–5366, 2020.
- [4] C. F. Bohren and D. R. Huffman, *Absorption and scattering of light by small particles*. Wiley Science Paperback Series, 1998.
- [5] 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.
- [6] 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.
- [7] C. Kittel, *Introduction to Solid State Physics*. Wiley, New York, 1986.