





# Absorption von VUV-Photonen in Warm Dense Matter



Dissertation von Annika Tronnier

## Max-Planck-Institut für Quantenoptik

# Absorption von VUV-Photonen in Warm Dense Matter

### Annika Tronnier

Vollständiger Abdruck der von der Fakultät für Physik der Technischen

Universität München zur Erlangung des akademischen Grades eines

Doktors der Naturwissenschaften

genehmigten Dissertation.

Vorsitzender: Prüfer der Dissertation: Univ.-Prof. Dr. Dr.h.c A. Laubereau

1. apl. Prof. Dr. J. Meyer-ter-Vehn 2. Univ.-Prof. Dr. M. Kleber

Die Dissertation wurde am 19.02.2007 bei der Technischen Universität München eingereicht und durch die Fakultät für Physik am 22.03.2007 angenommen.

### Probleme kann man niemals mit derselben Denkweise lösen, durch die sie entstanden sind

-Albert Einstein

# Inhaltsverzeichnis

### 1 Überblick

2	Abs	orption	n durch inverse Bremsstrahlung		7
	2.1	Mikro	skopische Beziehung zwischen Emission und Absorption	n.	7
		2.1.1	Einheiten		7
		2.1.2	Bremsstrahlung		8
		2.1.3	Phasenraum für freie Elektronen und Photonen $\ldots$	•••	10
			2.1.3.1 Dichte von Quantenzuständen	•••	10
			2.1.3.2 Photon-Energiedichte		10
			2.1.3.3 Dichte der Elektronenzustände	•••	11
		2.1.4	Rate für die Emission und Absorption	•••	11
		2.1.5	Quantenmechanischer differentieller Querschnitt der B strahlung	rems-	- 12
		2.1.6	Totale Absorptionsrate		13
	2.2	Näher	rungslösungen des Wirkungsquerschnitts der Bremsstrah	lung	14
		2.2.1	Charakteristische Parameter		14
			2.2.1.1 Coulomb-Parameter $\eta$		14
			2.2.1.2 Energie-Parameter $\vartheta$	•••	14

1

			2.2.1.3	Übergar	ngs-Parameter $\psi$	16
		2.2.2	Bestimm FLASH	ung der	charakteristischen Parameter im Fall	16
		2.2.3	Relevant	e Fälle fi	ir die VUV-Photo-Absorption	17
3	Gen	nittelte	Raten $\langle v$	$v_t \rangle$		21
	3.1	Vieltei	lchensyst	em		21
		3.1.1	Verteilur	ngsfunkti	on	22
		3.1.2	Mittelun	g über d	e Elektronen-Impulse	23
			3.1.2.1	Langsan	ne Elektronen	23
			3.	1.2.1.1	$T{=}0 \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots$	23
			3.	1.2.1.2	$T \neq 0$	24
			3.1.2.2	Schnelle	Elektronen	25
		3.1.3	Gemittel	lte totale	Absorptionsrate	27
			3.1.3.1	Langsan	ne Elektronen	27
			3.1.3.2	Schnelle	Elektronen	28
			3.1.3.3	Interpol men Ele	ation zwischen schnellen und langsa- ktronen	28
		3.1.4	Effektive	e Stoßfrec	uenz	29
			3.1.4.1	Effektive	e AC-Stoßfrequenz	29
			3.	1.4.1.1	Temperaturabhängigkeit der effektiven Stoßfrequenz	30
			3.	1.4.1.2	Frequenzabhängigkeit der effektiven Stoff frequenz	3- 31
			3.1.4.2	Effektive	e DC-Stoßfrequenz	33

4	Mak	kroskop	ischer Absorptionskoeffizient	37
	4.1	Optisc	che Konstanten	37
		4.1.1	Grundgleichungen der Elektrodynamik	38
		4.1.2	Zusammenhang zwischen der totalen Absorptionsrate und den optischen Konstanten	39
	4.2	Drude	-Sommerfeld-Modell	41
		4.2.1	Bewegungsgleichung eines quasifreien Elektrons	41
		4.2.2	Zusammenhang zwischen Stoßfrequenz und dielektrischer Funktion	41
			4.2.2.1 Relaxationsbereich $\nu_{Stob} \ll \omega \ldots \ldots \ldots$	42
			4.2.2.2 Hagen-Rubens-Bereich $\nu_{Stob} >> \omega$	42
		4.2.3	Allgemeiner Zusammenhang zwischen Absorptionskoef- fizient und Stoßfrequenz	43
	4.3	Optisc	che Eigenschaften von Metallen	44
		4.3.1	Absorptionskoeffizient	44
		4.3.2	Multiple Transmission und Reflexion	45
			4.3.2.1 Temperaturabhängigkeit der Transmission	46
		4.3.3	Abhängigkeit der Transmission vom Ionisierungsgrad	48
	4.4	Photoi	ionisation	49
		4.4.1	Starke elektromagnetische Felder	50
5	Dvn	amik d	iinner Folien	51
•	- <b>j</b>	Fypor	imente mit ELASH	51
	5.1	Experi		51
	5.2	Comp	utercode	52
		5.2.1	MULTI	53

	5.2.2	MULTIf	, S	54
	5.2.3	MULTIf	ŝ-A	54
5.3	Simula	ationen		55
	5.3.1	Heizproz	zess	55
		5.3.1.1	Temperaturbereiche	55
		5.3.1.2	Heizung bei $I=1\cdot 10^{15}W/cm^2$	56
		5.3.1.3	Heizung bei $I=1\cdot 10^{16}W/cm^2$	57
		5.3.1.4	Einfluss von Strahlungskühlung	58
		5.3.1.5	Ionisierung geheizter Folien	59
	5.3.2	Hydrody	ynamische Expansion	61
		5.3.2.1	Expansion einer 50 nm Al-Schicht bei $I = 1 \cdot 10^{15} W/cm^2 \dots \dots \dots \dots \dots \dots \dots \dots \dots \dots$	62
		5.3.2.2	Heizung und Expansion einer 50 nm Si-Schicht	65
5.4	Vergle messu	ich zwisc ngen	hen Simulationsrechnungen und Transmissions-	67
	5.4.1	Geheizte	es Material	68
		5.4.1.1	Transmission bei verschiedenen Strahlintensitäten	68
		5.4.1.2	Resümee: Transmission im geheizten Material .	70
	5.4.2	Kaltes N		71
		5.4.2.1	Kaltes Aluminium	71
		5.4.2.2	Silizium	73
		5.4.2.3	Silber	73
		5.4.2.4	Oxidschichten	75
		5.4.2.5	Resümee kaltes Material	75

	5.5	Dünne	Folien als schnelle Schalter	76
		5.5.1	Schalteffekt für 30 eV-Photonen	76
		5.5.2	Experimenteller Nutzen des Schalteffektes	79
6	Zusa	ammen	fassung	81
	6.1	Ausbli	ck	82
Da	anksa	gung		89

### Abbildungsverzeichnis

- 1.1 Vergleich der Wechselwirkung von optischen Photonen  $\omega \ll \omega_p$ und VUV-Photonen  $\omega > \omega_p$ . Optische Photonen können nur bis zu einer kritischen Dichte  $n_c$  in ein festes Medium eindringen und beschleunigen in einer dünnen Oberflächenschicht freie Elektronen. VUV-Photonen können dagegen durch Materie penetrieren und deponieren so ihre Energie gleichmäßig im gesamten Volumen. .....
- 1.2 Das linke Bild zeigt die Absorption von sichtbarem Laserlicht (100 fs Puls) an festem Aluminium bei senkrechtem Einfall in Abhängigkeit der Strahlintensität. An diesen Experimenten orientiert sich die modellierte Stoßfrequenz im rechten Bild. Die Stoßfrequenz von kaltem Aluminium ist hier als Funktion der Temperatur  $T = T_i$  dargestellt. Die durchgezogene Kurve ist das Resultat der Interpolation unter Berücksichtigung des Mott-Ioffe-Regel Limes. Die Kurven im linken Bild stammen aus Rechnungen mit MULTIfs, siehe Eidmann et al. (2000).
- 2.1 Stoß eines Elektrons mit dem Impuls  $\vec{p}$  an einem Z-fach geladenen Ion bei gleichzeitiger spontaner Emission eines Photons. Nach dem Stoß hat das Elektron den Impuls  $\vec{p'}$ . Für das emittierte Photon gilt  $p^2/2m - p'^2/2m = \hbar\omega$ . Dieser Prozess ist als spontane Bremsstrahlung bekannt.
- 2.2 Stoß eines Elektrons mit dem Impuls  $\vec{p'}$  an einem Z-fach geladenen Ion bei gleichzeitiger Absorption eines Photons aus dem äußeren elektromagnetischen Feld. Nach dem Stoß hat das Elektron den Impuls  $\vec{p}$ . Dieser Prozess nennt sich inverse Bremsstrahlung und ergibt sich aufgrund der Zeitumkehrinvarianz aus dem gespiegelten Diagramm in Abbildung 2.1. . . . . . . . . . . . .

vii

9

2

3

9

2.3	Mögliche Näherungslösungen von Gleichung 2.13. Es gibt zwei charakteristische Parameter. Der Coulomb-Parameter $\eta = Ze^2/\hbar v$ unterscheidet zwischen schnellen und langsamen Elektronen, währe der Energie-Parameter $\vartheta = \hbar \omega / mv^2$ zwischen hohen und niedri- gen Photonenfrequenzen unterscheidet. Auf diese Weise können vier Hauptbereiche unterschieden werden. Das inverse Produkt beider Parameter differenziert diese Bereiche zusätzlich. Der re- sultierende Übergangsbereich ist für diese Arbeit von beson- derer Bedeutung. Die Lösungen von Gleichung 2.13 in diesen Übergangsbereich wurden von Krainov (2000, 2001) herausge- arbeitet	end 15
3.1	Elektronen aus der Fermikugel mit einer Energie $\epsilon$ können nur ein Photon absorbieren, wenn nach der Absorption $\epsilon + \hbar \omega > \epsilon_F$ erfüllt ist, da alle Zustände in der Fermikugel besetzt sind	24
3.2	Impulsverteilung der Elektronen aufgetragen gegen die Photo- nenenergie bei T=0. Für Photonenenergien die kleiner als die Fermi-Energie sind, spielt das Pauli-Blocking der Elektronen in der Fermikugel eine entscheidende Rolle. Je kleiner die Photon- energie, desto weniger Elektronen haben die Möglichkeit, durch die Photo-Absorption einen höheren freien Energiezustand zu erreichen.	25
3.3	Ist $T \neq 0$ dann existieren Elektronen mit einer Anfangsenergie, für die gilt $\epsilon > \epsilon_F$ . Diese Elektronen können auch beliebig kleine Photonenenergien absorbieren.	25
3.4	Abhängigkeit des Mittelwerts $\langle p_F/p \rangle$ von der normierten Elektrone Temperatur $T/T_F$ für verschiedene Photonenenergien $\hbar\omega=1$ eV, $\hbar\omega=10$ eV und $\hbar\omega=38$ eV. Für $\hbar\omega << k_BT_F$ steigt $\langle p_F/p \rangle$ mit wachsender Temperatur bis $T \approx T_F$ an und geht dann in eine von der Photonenfrequenz unabhängige Kurve über	en- 26
3.5	Interpolierte Stoßfrequenz 3.25 (rote gestrichelte Kurve) für lang- same und schnelle Elektronen in Abhängigkeit von der Tempe- ratur der Elektronen. Die Photonenenergie beträgt 38 eV. Zu- dem sind die Grenzfälle sehr schneller (blaue Kurve) und sehr langsamer (grüne Kurve) Elektronen eingezeichnet. Die Interpo- lation stimmt in ihrem asymptotischen Verhalten gut mit diesen Grenzfällen überein	20
		30

- 3.9 DC-Stoßfrequenz von Silber in Abhängigkeit von der Temperatur in Kelvin. Die schwarze Kurve zeigt die DC-Stoßfrequenz die sich aus Gleichung 3.27 ergibt. Die rote Kurve zeigt dagegen die DC-Stoßfrequenz, die sich aus experimentellen Daten für den spezifischen Widerstand bestimmt (Ashcroft und Mermin, 2001). Bei Raumtemperatur ergibt sich aus dem Modell eine DC-Stoßfrequenz von  $\nu_{eff}^{DC}(293K, Ag) = 2.67 \cdot 10^{13}/s$ . Es zeigt sich eine gute Übereinstimmung zwischen Modell und Experiment. 33

4.1	Absorptionskoeffizient in Abhängigkeit von der Temperatur und
	der Photonen energie in Aluminium. Bei Photonen energien $\hbar\omega\leq$
	$\hbar\omega_p$ wird das Medium überdicht, und die elektromagnetische
	Welle fällt im Medium exponentiell ab. In diesem Fall ist die
	Absorption sehr groß, deshalb wurde bei $\alpha = 1 \cdot 10^5/cm$ der
	Plot abgeschnitten, wodurch das Plateau hervorgerufen wird.
	Für VUV-Photonen wird die maximale Absorption bei $T = 0$
	erreicht. Für 38 eV Photonen ergibt sich bei $T = 0$ in Alumini-
	um für den Absorptionkoeffizienten ein Wert von $\alpha \approx 4.2 \cdot 10^4 / cm$ . 45

4.2 Schematische Darstellung der Mehrfach-Reflexion in einem Medium. R stellt den reflektierten Anteil und  $T_d$  den transmittierten Anteil der Strahlintensität durch eine Schicht der Dicke ddar. Die an der Rückseite des Mediums bestimmbaren Transmission setzt sich aus den einzelnen Teiltransmissionen zusammen. 46

4.3	Transmission $TRA$ nach Gleichung 4.44 von 38 eV Photonen	
	durch eine 50 nm dicke Aluminiumfolie in Abhängigkeit von	
	der Temperatur. Die Transmissionsänderung in einem Tempe-	
	raturbereich zwischen $0 < T < 100 eV$ beträgt in diesem Fall	
	nur ca. 15%	47

- 4.4 Transmission TRA durch eine 50 nm dicke Aluminiumfolie in Abhängigkeit von der Temperatur für Photonen mit einer Energie von 20 eV. Die Transmissionsänderung beträgt in diesem Fall ca. 75%.
  47
- 4.5 Transmission TRA von 38 eV-Photonen durch eine 50 nm dicke Aluminiumfolie in Abhängigkeit vom Ionisierungsgrad. Es zeigt sich ein fast vollständiger Rückgang der Transmission bei einer Ionisierung zwischen der Anfangsionisierung  $Z_{eff} = 3$  und einer maximal möglichen Ionisierung von  $Z_{eff} = 13. \ldots 348$

5.2	Die Fokussierung des VUV-FEL-Strahls ruft auf den Targeto- berflächen unterschiedliche Intensitäten hervor. Die Strahlinten- sitäten beziehen sich dabei auf die FLASH-Parameter. Die bei den ersten Experimenten im Nov'05 maximal erreichte Inten- sität ergab sich bei einem Fokusdurchmesser von 25 $\mu$ m zu $I = 1 \cdot 10^{14} W/cm^2$ . Bei zukünftigen Experimenten sind Fo- kusdurchmesser bis zu 1 $\mu$ m und damit Intensitäten bis zu $1 \cdot 10^{17} W/cm^2$ geplant	53
5.3	Verschiedene Strahlintensitäten erzeugen im Material unterschied- liche Temperaturen. Zu sehen ist die intensitätsabhängige Tem- peratur in einer 50 nm dicken Aluminiumfolie direkt nach Pul- sende.	56
5.4	Temperaturverteilung der Elektronen in einer 50 nm dicken Al- Folie während des Heizprozesses mit einem 38 eV-Photonen Puls bei einer Intensität von $I = 1 \cdot 10^{15} W/cm^2$ . Die Mitte des Targets liegt bei der Position 0. Es wurde eine Euler'sche Darstellung gewählt. Die maximale Temperatur wird bei Pulsende (200 fs) erreicht und beträgt etwa 35 eV. Aufgrund der gleichmäßig im Target deponierten Laserenergie gibt es keine starken Tempera- turgradienten.	57
5.5	Temperaturverteilung der Elektronen in einer 50 nm Al-Folie bei einer Intensität von $I = 1 \cdot 10^{16} W/cm^2$ . Die Photonenener- gie beträgt 38 eV. Aufgrund der Expansion der Folie wird die maximale Temperatur vor dem Pulsende (150 fs) erreicht und beträgt etwa 550 eV	58
5.6	Ionisierungsgrad in einer 50 nm dicken Al-Folie bei einer Pulsin- tensität von $I = 1 \cdot 10^{15} W/cm^2$ . Die maximale Ionisierung wird bei Pulsende (200 fs) erreicht und beträgt $Z_{eff} \approx 4.5.$	60
5.7	Ionisierungsgrad in einer 50 nm dicken Al-Folie bei einer Pul- sintensität von $I = 1 \cdot 10^{16} W/cm^2$ . Das Aluminium ist bei dieser Intensität bereits nach 150 fs vollständig ionisiert.	60
5.8	Zeitliche Dichte-Entwicklung für verschiedene Strahlintensitäten in der Folienmitte. Für kleine Intensitäten ändert sich die Dichte im Zentrum auch nach einer Pikosekunde kaum. Für eine Intensität von $I = 1 \cdot 10^{16} W/cm^2$ erreicht die Verdünnungswelle erst nach 300 fs die Folienmitte, folglich findet die Wechselwirkung auch in diesem Fall in der Targetmitte bei Festkörperdichte statt.	61

5.9	Räumliche Dichte-Entwickung in einer 50 nm dicken Alumini- umfolie bei einer Bestrahlung mit einem VUV-Puls der Inten- sität $I = 1 \cdot 10^{15} W/cm^2$ . Das Target ist in 120 gleiche Lagrange- Zellen unterteilt. Nach etwa einer Pikosekunde hat die Verdünnungswelle das Zentrum erreicht und nach 100 ps ist die Folie nahezu vollständig auseinander gelaufen
5.10	Dargestellt ist die Expansion der Folie mit der Zeit bei einer Intensität von $I = 1 \cdot 10^{15} W/cm^2$ . Die obere Kurve beschreibt die Ausdehnung einer Zelle an der Targetrückseite, die untere Kurve an der Vorgerseite und die mittlere Kurve stellt das Zentrum der Folie dar. Da es sich um eine sehr dünne Folie handelt, ist die Ausdehnung von Vorder- und Rückseite fast gleich schnell. Nach einer Pikosekunde hat sich die anfänglich 50 nm dicke Folie auf 160 nm ausgedehnt
5.11	Temperaturverteilung der Elektronen in einer 50 nm dicken Alu- miniumfolie bei einer Strahlintensität von $I = 1 \cdot 10^{15} W/cm^2$ . Die maximale Elektronen-Temperatur von 35 eV wird bei Pul- sende erreicht. Nach etwa 1 ps wird ein Gleichgewicht mit den Ionen erreicht und die Temperatur beträgt in beiden Fällen etwa 24 eV. Nach 100 ps hat sich das Target, aufgrund der Expan- sion, auf etwa 5 eV abgekühlt. Wegen der guten Wärmeleitung der Elektronen liegt zu allen Zeiten eine nahezu gleichmäßige Verteilung der Elektronen-Temperatur im Target vor 64
5.12	Temperaturverteilung der Ionen in einer 50 nm dicken Alumi- niumfolie bei einer Strahlintensität von $I = 1 \cdot 10^{15} W/cm^2$ . Die maximale Temperatur der Ionen beträgt etwa 24 eV und wird nach 1 ps erreicht. Die Ionen-Temperatur ist an den Oberflächen aufgrund der Expansion der Folie niedriger als im Zentrum 65
5.13	Temperaturverteilung der Elektronen in einer 50 nm dicken Si- liziumfolie bei einer Strahlintensität von $1 \cdot 10^{15} W/cm^2$ . Die ma- ximale Elektronen-Temperatur von 37 eV wird bei Pulsende er- reicht
5.14	Räumliche Dichte-Entwicklung in einer 50 nm dicken Silizium- folie bei einer Bestrahlung mit einem VUV-Puls mit $I = 1 \cdot 10^{15} W/cm^2$ . Das Target ist in 120 gleiche Lagrange-Zellen un- terteilt

5.15	Räumliche Ausdehnung der Vorder- und Rückseite einer 50 nm
	dicken Siliziumfolie (obere/rote Kurve) und einer 50 nm dicken
	Aluminiumfolie (untere/schwarze Kurve) bei einer Bestrahlung
	mit einem VUV-Puls der Intensität $I = 1 \cdot 10^{15} W/cm^2$ . Die
	Ausdehnung in der Si-Folie ist geringfügig schneller als in der
	Al-Folie, da die Temperatur, aufgrund der höheren Anfangsio-
	nisierung, größer und die Festkörperdichte von Si niedriger ist. 68

5.16 Zeitliche Änderung der Transmission durch eine 50 nm Al-Schicht während der Bestrahlungszeit für unterschiedliche Intensitäten. Für  $I < 1 \cdot 10^{15} W/cm^2$  ändert sich die Transmission kaum, während sich für größere Intensitäten, aufgrund der Ionisierung, die Transmission stark ändert. Die Zeit, nach welcher sich die Transmission ändert, ist umso kürzer je größer die Strahlintensität ist.

69

72

- 5.18 Transmission in Abhängigkeit der Photonenenergie in einer kalten 50 nm dicken Al-Folie. Die gepunktete Kurve stellt Daten aus der Berkeley-Datenbank (Ber) und die gestrichelte Kurve stellt die Messungen mit Synchrotron-Strahlung bei DESY dar (Hagemann et al., 1974). Die durchgezogene Kurve ergibt sich aus der Simulation. Zudem sind die Messungen mit FLASH (Sokolowski-Tinten, 2006) und mit PALS (Rus, 2006) eingezeichnet.
  5.19 Nach dem beschriebenen Modell und aus den Berkeley Daten (Ber) gewonnene Transmission in Abhängigkeit von der Pho-
- (Ber) gewonnene Transmission in Abhängigkeit von der Photonenenergie für eine 50 nm dicke Siliziumfolie. Der Punkt repräsentiert die Messung bei FLASH (Sokolowski-Tinten, 2006). . 74

5.20	Berechnete und aus den Berkeley Daten (Ber) gewonnene Trans-	
	mission in Abhängigkeit von der Photonenenergie im Fall von	
	50 nm Silber. $\ldots$	74

5.21	Zeitliche Entwicklung der Plasmafrequenz für einen Puls von 30 eV-Photonen und einer Intensität von $I = 1 \cdot 10^{16} W/cm^2$ und $I = 1 \cdot 10^{18} W/cm^2$ . Nach etwa 100 fs erreicht die Plasmafre- quenz die Photonenfrequenz bei der niedrigeren Intensität. Bei höheren Intensität wird $\omega_p = \omega$ viel früher, nach bereits etwa 20 fs, erreicht	77
5.22	Transmission, Absorption und Reflexion bei einer Strahlinten- sität von $I = 1 \cdot 10^{18} W/cm^2$ und einer Photonenenergie von 30 eV. Nach bereits etwa 20 fs erreicht die Transmission ein Mi- nimum. Zu diesem Zeitpunkt erreicht die Plasmafrequenz die Photonenfrequenz, vergleiche mit Abbildung 5.21. Die Reflexi- on beginnt, stark an zu steigen. Die Schaltzeit beträgt hier 7	70
5.23	IS	78

## Tabellenverzeichnis

1.1	Puls-Parameter des VUV-FEL FLASH in Hamburg und des von	
	PALS getriebenen Zn-Plasma-Röntgenlasers in Prag.	1

5.1 Bei verschiedenen Experimenten gemessene Absorptionskoeffizienten  $\alpha$  von Aluminium bei 38 eV-Photonen. Das in dieser Arbeit beschriebene Modell für die VUV-Photo-Absorption in WDM liefert einen Wert von  $\alpha = 4.2 \cdot 10^4 cm^{-1}$ . Es zeigt sich folglich für kaltes Material bei 38 eV-Photonen eine qualitativ gute Übereinstimmung zwischen Modell und experimentellen Daten. 73

# 1 Überblick

Ziel dieser Arbeit ist es, ein Modell für die Wechselwirkung von VUV-Photonen mit heißen Festkörpern zu finden. Neue Quellen für hochintensive VUV-Strahlung sind unter anderem der VUV-FEL (Vacuum UltraViolet - Free Electron Laser) 'FLASH' (Free electron LASer in Hamburg) bei DESY, der Zn-Plasma-Röntgenlaser bei PALS (Prague Asterix Laser System) in Prag sowie durch optische Laser erzeugte hohe Harmonische. In Tabelle 1.1 sind die Laser-Parameter für FLASH und PALS aufgelistet, für weitere Informationen siehe Internetseiten von FLASH und PALS (FLA; PAL) sowie Materlik und Tschentscher (2001) und Ayvazyan et al. (2006).

Parameter	Photonen / Puls	Energie / Puls	Pulslänge	Photonenengie
FLASH	$1 \cdot 10^{12}$	$10\mu J$	50 - 100 fs	40 - 200 eV
PALS	$1 \cdot 10^{15}$	4mJ	100 ps	58.4 eV

Tabelle 1.1: Puls-Parameter des VUV-FEL FLASH in Hamburg und des von PALS getriebenen Zn-Plasma-Röntgenlasers in Prag.

Der Hauptunterschied in der Wechselwirkung von optischem Licht und weichem Röntgenlaserlicht ist in Abbildung 1.1 illustriert. Optisches Licht kann nicht in dichter Materie propagieren und wird an der Oberfläche von freien Elektronen reflektiert und absorbiert. Die Frequenz von VUV-Photonen ist dagegen größer als die Plasmafrequenz, sie können deshalb durch ein Medium propagieren. Die Energie der intensiven VUV-Strahlung wird dabei im gesamten Volumen deponiert, siehe auch Meyer-ter-Vehn und Krenz (2004). Diese Arbeit orientiert sich an ersten Experimenten mit FLASH, bei denen

Diese Arbeit orientiert sich an ersten Experimenten mit FLASH, bei denen die Photonenenergie 38 eV betrug. Es konnten bisher Strahlintensitäten bis zu  $I = 1 \cdot 10^{14} W/cm^2$  erreicht werden. Diese Intensitäten führen zu Materialtemperaturen von einigen Elektronenvolt (siehe Kapitel 5). Durch eine weitere Fokussierung des Strahls können in zukünftigen Experimenten jedoch voraussichtlich Intensitäten von bis zu  $I = 1 \cdot 10^{17} W/cm^2$  auf der Targetoberfläche erreicht werden, die Temperaturen bis zu keV im Medium erzeugen können. Aufgrund der ultrakurzen Pulse wird das bestrahlte Medium isochor geheizt,

#### 1 Überblick



Abbildung 1.1: Vergleich der Wechselwirkung von optischen Photonen  $\omega \ll \omega_p$ und VUV-Photonen  $\omega > \omega_p$ . Optische Photonen können nur bis zu einer kritischen Dichte  $n_c$  in ein festes Medium eindringen und beschleunigen in einer dünnen Oberflächenschicht freie Elektronen. VUV-Photonen können dagegen durch Materie penetrieren und deponieren so ihre Energie gleichmäßig im gesamten Volumen.

d.h. die Heizung erfolgt bei konstanter Dichte des Materials. Die hydrodynamische Expansion setzt erst nach einigen Pikosekunden ein. Dies hat einen entscheidenden Vorteil, denn es führt zu homogen geheizter Materie mit Festkörperdichte (heißer Festkörper), die sich für genaue Messungen eignet.

Ein Medium mit Festkörperdichte und Temperaturen von 1 - 100 eV soll im Folgenden als warme dichte Materie (Warm Dense Matter, WDM) bezeichnet werden. Dieser Materiezustand ist von großer Relevanz für die Astrophysik, die Untersuchung von Zustandsgleichungen und die Inertialfusion, siehe auch Krenz und Meyer-ter-Vehn (2004); Lee et al. (2002, 2003). Die charakteristischen Parameter, die WDM beschreiben, sind neben der Temperatur T auch die Fermi-Temperatur  $T_F$  und die Plasmafrequenz  $\omega_p$ . In festem Aluminium beträgt die Fermi-Temperatur  $T_F = 11.7$  eV und die Plasmonenergie  $\hbar \omega_p = 15.81$  eV.

In dieser Arbeit wird WDM im Rahmen des Drude-Sommerfeld-Modells beschrieben, für nähere Erläuterungen zu diesem Modell siehe auch Ashcroft und Mermin (2001); Sommerfeld und Bethe (1967). Dieses Modell wurde ursprünglich für Metalle entwickelt. Es behandelt die freien Elektronen als ein entartetes Fermigas. Heiße Festkörper sowie auch Halbleiter und Dielektrika im WDM-Bereich ähneln in der Tat Metallen, da in einem Temperaturbereich zwischen 10 - 100 eV das Medium ionisiert ist und es folglich freie Elektronen enthält. Die Energien der VUV-Photonen befinden sich ebenfalls in dem Energiebereich von 10 - 100 eV und sind damit im allgemeinen größer als die Plasmonenergie. Dies hat zur Folge, dass sie im Medium propagieren können. Die VUV-Photonen werden in WDM vor allem durch inverse Bremsstrahlung absorbiert. Die Absorption durch Ionisation von gebundenen Elektronen aus tieferen Schalen setzt dagegen erst bei größeren Temperaturen und Photonen-



Abbildung 1.2: Das linke Bild zeigt die Absorption von sichtbarem Laserlicht (100 fs Puls) an festem Aluminium bei senkrechtem Einfall in Abhängigkeit der Strahlintensität. An diesen Experimenten orientiert sich die modellierte Stoßfrequenz im rechten Bild. Die Stoßfrequenz von kaltem Aluminium ist hier als Funktion der Temperatur  $T = T_i$  dargestellt. Die durchgezogene Kurve ist das Resultat der Interpolation unter Berücksichtigung des Mott-Ioffe-Regel Limes. Die Kurven im linken Bild stammen aus Rechnungen mit MULTIfs, siehe Eidmann et al. (2000).

energien ein. Sie wird in dieser Arbeit in Kapitel 4 kurz angesprochen.

Das zentrale Thema dieser Arbeit ist jedoch die Absorption durch inverse Bremsstrahlung. Der grundlegende Prozess ist der Coulombstoß zwischen Elektron und Ion, durch den die Photo-Absorption am freien Elektron möglich wird. Die entsprechende Stoßfrequenz wurde für heiße Plasmen von Spitzer (1962) hergeleitet. Die Schwierigkeit für WDM besteht darin, dass die Spitzer-Stoßrate für niedrige Temperaturen nicht mehr gültig ist. In Abbildung 1.2 ist dieses Problem illustriert. Im linken Bild sind die gemessenen Absorptionsdaten von optischem Licht an einer Aluminiumoberfläche nach Price et al. (1995) gezeigt. Das rechte Bild zeigt die Modellierung der Stoßfrequenz, die sich aus der Interpretation der experimentellen Daten nach Eidmann et al. (2000) ergibt. Für große Temperaturen (T > 100 eV) wird die Energie mittels Elektron-Ion-Stößen absorbiert, und die Stoßfrequenz  $\nu$  folgt der Spitzer-Formel entsprechend  $\nu \propto T^{-3/2}$ , was den Abfall der Absorption für große Intensitäten richtig beschreibt. Für niedrige Temperaturen (T < 10 eV) nimmt Eidmann an, dass Elektron-Phonon-Stöße die Stoßrate bestimmen, anstatt der Elektron-Ion-Stöße. Für diese ergibt sich eine lineare Abhängigkeit der Stoßfrequenz von der Ionen-Temperatur  $T_i$ , siehe auch Ashcroft und Mermin (2001) oder Ziman

#### 1 Überblick

(1960). In der Tat führt dies zu einem Anstieg der Absorption bei niedrigen Intensitäten ( $I < 1 \cdot 10^{15} W/cm^2$ ) in Übereinstimmung mit dem Experiment; allerdings nur nach Anpassung der Elektron-Phonon-Stoßrate an gemessene Reflexionsdaten von Aluminium. Diese angepasste Elektron-Phonon-Stoßrate ist um einiges größer als aus der Festkörpertheorie zu erwarten wäre, siehe hierzu auch Rethfeld (2000). Der Übergang von  $\nu \propto T_i$  zu  $\nu \propto T^{-3/2}$  wird in Abbildung 1.2 durch Interpolation gelöst. Dabei wird im interpolierten Zwischenbereich der Mott-Ioffe-Regel Limes berücksichtigt (Hussey et al., 2004). Dieser Limes ergibt sich, da die mittlere freie Weglänge der Elektronen im Festkörper nicht kleiner als der mittlere Ionenabstand im Gitter sein kann. Auf diese Weise werden die Messdaten von Price et al. (1995) zwar qualitativ richtig beschrieben, aber um den Preis erheblicher Willkür bei der Wahl der effektiven Stoßrate.

In der vorliegenden Arbeit wird ein Ausdruck für die effektive Stoßrate  $\nu_{eff}(T, \omega)$ entwickelt, der den gesamten Temperaturbereich vom kalten Metall bis zum heißen Plasma und den kompletten Bereich von sichtbarem Licht, bis zu keV Photonen abdeckt. Das Modell enthält dabei keine freien Parameter.

Der neue Ansatz, der in dieser Arbeit verfolgt wird, basiert auf Arbeiten von Krainov (2000, 2001) und geht von der Plasmaphysik aus. Hier wird die Rate für inverse Bremsstrahlung aus dem vollen quantenmechanischen nichtrelativistischen Wirkungsquerschnitt der spontanen Bremsstrahlung (Sommerfeld, 1931) entwickelt. Unter Berücksichtigung der stimulierten Emission wird so die totale Absorptionsrate bestimmt. Der entscheidende Punkt ist, dass zwischen langsamen und schnellen Elektronen unterschieden wird. Ein Elektron wird hierbei als langsam bezeichnet, wenn seine Geschwindigkeit kleiner als die atomare Geschwindigkeit ist  $(v < Z\alpha_f c, \text{ mit der Ladungszahl } Z, \text{ der Sommer-}$ feld'sche Feinstruktur Konstante  $\alpha_f$  und der Lichtgeschwindigkeit c). Im Fall schneller Elektronen ist die resultierende totale Absorptionsrate  $w_t \propto p^{-3}$ . Eine Mittelung über ein Vielteilchensystem führt dann auf den bekannten Coulomblogarithmus. Die Photo-Absorption mittels langsamer Elektronen führt dagegen nach Krainov (2000) auf  $w_t \propto p^{-1}$ . Diese Absorptionsrate kann analytisch über eine Fermi-Dirac-Verteilung gemittelt werden, und es wird hieraus in Kapitel 3 ein geschlossener Ausdruck für die effektive Stoßfrequenz  $\nu_{eff}(T,\omega)$  (siehe Gleichung 3.25) gefolgert. Dies ist eine dynamische Stoßfrequenz, die im Gegensatz zur Spitzer-Stoßfrequenz explizit von der Photonenfrequenz abhängt;  $\nu_{eff}(T,\omega)$  ist als Funktion von  $\omega$  und T auf dem Deckblatt dieser Arbeit dargestellt. Die Stoßfrequenz steigt für  $\hbar\omega < T_F$  aufgrund des Pauli-Blockings linear bis zur Fermi-Energie an, erreicht bei  $\nu_{eff} \approx 1 \cdot 10^{16}/s$  ein Maximum und geht dann in den Spitzer-Bereich über. Im Fall von VUV-Photonen mit  $\hbar\omega > T_F$  tragen dagegen alle Elektronen im Fermi-See zur Stoßrate bei und das Maximum von  $\nu_{eff}(T,\omega)$  liegt bei T=0. Das Modell wurde in erster Linie für WDM entwickelt, es liefert jedoch an seinen Grenzen auch Aussagen für kaltes Material. So beschreibt es zum Beispiel im Limes  $\omega \to 0$  die Temperaturabhängigkeit der DC-Stoßfrequenzen von Silber und Gold bei niedrigen Temperaturen, die aus thermischer und elektrischer Leitfähigkeit folgen, siehe Kapitel 3.

Nach dem Absorptionsprozess thermalisieren die angeregten Elektronen durch Elektron-Ion-Stöße, und zwar auf der Zeitskala der inversen Stoßfrequenz. In Übereinstimmung mit dem neuen Modell betragen diese Stoßzeiten im WDM-Bereich weniger als 1 fs. Aufgrund dieser kurzen Stoßzeiten kann im Rahmen dieser Arbeit ein lokales thermisches Gleichgewicht (LTE) der Elektronen angenommen und folglich den Elektronen bereits während der Bestrahlungsperiode von 100 fs eine Temperatur zugeordnet werden, siehe auch Zel'dovich und Raizer (1966). Für die Beschreibung von Nichtgleichgewichts-Zuständen, die hier nicht behandelt werden, wird auf die Arbeiten von Rethfeld et al. (2002); Anisimov und Rethfeld (1996) und Bejan und Rassev (1997) verwiesen.

Der Energietransfer zwischen Elektronen und Ionen ist wegen ihres Masseunterschiedes langsamer ( $m_i/2m_e \approx 1000$ , wobei  $m_i$  die Ionenmasse und  $m_e$  die Elektronenmasse darstellt). Dies hat zur Folge, dass die absorbierte Energie zunächst ganz in Elektronen deponiert wird und die Ionen erst nach einigen Pikosekunden aufgeheizt werden ( $\tau_{ion} \propto (m_i/2m_e) \cdot \tau_{Stoß}$ ), siehe auch Anisimov und Khokhlov (1995); Anisimov et al. (2006). Die Aufheizung der Ionen führt dann zu hydrodynamischer Expansion des Mediums entlang einer Isotropen. Auf diese Weise können Informationen über Zustandsgleichungen und kritische Punkte, auch unterhalb der Festkörperdichte, gefunden werden.

Das neue Absorptionsmodell wurde in den hydrodynamischen Code für kurze Pulse (fs-Pulse) MULTIfs von Eidmann et al. (2000) integriert. Da das Modell keine freien Parameter beinhaltet und neben dem Absorptionskoeffizienten auch die Transport-Koeffizienten bestimmt, kann es in einer geschlossenen Subroutine im Code verwendet werden. Die Ergebnisse der Simulationen, die sich an den FLASH-Parametern orientieren, sind in Kapitel 5 dargestellt.

Bei den ersten FLASH-Experimenten handelte es sich um Transmissionsmessungen an dünnen Aluminium- und Silizium-Folien bei Strahlintensitäten  $I = 1 \cdot 10^{11} W/cm^2$  und  $I = 1 \cdot 10^{14} W/cm^2$ , siehe auch Abbildung 5.1 in Kapitel 5. Es zeigten sich bei den Messungen keine intensitätsbedingten Transmissionsänderungen. Die hier durchgeführten Simulationen stimmen mit diesem Verhalten überein. Bei einer Intensität von  $I = 1 \cdot 10^{14} W/cm^2$  zeigen sie, dass die maximale Temperatur der Elektronen  $T_{max} = 7$  eV beträgt und sich wie im Experiment nur sehr geringe Transmissionsänderungen ergeben, vergleiche auch mit Abbildung 5.17 in Kapitel 5. Dagegen zeigt diese Arbeit, dass die Transmission für  $I > 1 \cdot 10^{15} W/cm^2$  sehr stark abnimmt, was in den für 2007 erwarteten Experimenten klar zu sehen sein sollte. Des Weiteren sind in diesem Kapitel hydrodynamische Simulationen der Temperaturentwicklung der Elektronen und Ionen, sowie Rechnungen zur Dichte-Expansion der dünnen

### 1 Überblick

Folien zu finden. Mit diesen Simulationen soll eine Vorhersage für zukünftige Experimente gemacht werden.

## 2 Absorption durch inverse Bremsstrahlung

In diesem Kapitel wird die Photo-Absorption in warmer dichter Materie und in Plasmen auf mikroskopischer Basis untersucht. Es werden hier die Elektron-Ion-Stöße als dominierenden Streuprozesse betrachtet. Der strahlende Elektron-Ion-Stoßprozess wird allgemein als Bremsstrahlung bezeichnet. Diese Arbeit baut auf diesen Bremsstrahlungsprozess auf und geht dabei im Wesentlichen auf Arbeiten von Krainov (2000, 2001) zurück.

Aus dem vollen quantenmechanischen Querschnitt der spontanen Bremsstrahlung nach Sommerfeld (1931) wird der Querschnitt des inversen Bremsstrahlungsprozess, die Photo-Absorption, abgeleitet. Es zeigt sich, dass zwei charakteristische Parameter für die Herleitung einer totalen Absorptionsrate von Bedeutung sind. Der Coulomb-Parameter unterscheidet schnelle und langsame Elektronen während der Energie-Parameter zwischen hohen und niedrigen Photonenfrequenzen differenziert. Die Ausdrücke der Rate für langsame und schnelle Elektronen unterscheiden sich grundlegend voneinander. Dies hat für diese Arbeit entscheidende Konsequenzen.

### 2.1 Mikroskopische Beziehung zwischen Emission und Absorption

#### 2.1.1 Einheiten

In dieser Arbeit werden cgs-Einheiten verwendet, in denen sich atomare Prozesse einfach darstellen lassen. Diese Einheiten werden auch in dem größten Teil der für diese Arbeit relevanten Literatur benutzt. Besonders in den russischen Arbeiten von Krainov wurden weitgehend atomare Einheiten benutzt,

#### 2 Absorption durch inverse Bremsstrahlung

in denen sich die Gleichungen dimensionslos schreiben lassen. In atomaren Einheiten ist die Längeneinheit der Bohrsche Radius

$$a_B = \frac{\hbar^2}{me^2} = 0.52918 \cdot 10^{-8} cm,$$

wobei e die Ladung eines Elektrons, m die Masse eines Elektrons und  $\hbar$  das Planck'sche Wirkungsquantum ist.

Die atomare Energieeinheit ist die Hartree-Energie

$$E_H = \frac{e^2}{a_B} = \frac{me^4}{\hbar^2} = 27.2eV$$

Die atomare Zeiteinheit  $t_0$  ist durch die Umlaufzeit eines Elektrons mit der Geschwindigkeit  $v_0$  im Atom bestimmt, es gilt

$$t_0 = \frac{\hbar}{E_H} = \frac{\hbar^3}{me^4} = 2.419 \cdot 10^{-17} s$$

und

$$v_0 = \frac{e^2}{\hbar} = \alpha_f c = 2.1876 \cdot 10^8 \frac{cm}{s};$$

hierbei ist  $\alpha_f = e^2/\hbar c = 1/137$  die Sommerfeld'sche Feinstrukturkonstante. Für die atomare Leistung ergibt sich

$$P_0 = \frac{E_H}{t_0} = 1.8016 \cdot 10^6 \frac{erg}{s}$$

und für das elektrische Feld im Atom folgt

$$\epsilon_0 = \frac{e}{a_B^2} = 5.140 \cdot 10^9 \frac{V}{cm}.$$

#### 2.1.2 Bremsstrahlung

Die Absorptionsrate soll anhand der Bremsstrahlungsrate hergeleitet werden, siehe auch Landau und Lifschitz (1986); Heitler (1954); Koch und Motz (1959). Stößt ein freies Elektron an dem Coulombfeld eines Z-fach geladenen Kerns (Z-Ion), so wird Strahlung emittiert, siehe Abbildung 2.1. Diese Strahlung wird als Bremsstrahlung bezeichnet. Erfolgt diese Strahlungsemission ohne die Einwirkung eines äußeren Photonenfeldes, so wird sie als spontane Bremsstrahlung bezeichnet. Die Frequenz  $\omega$  der emittierten Strahlung ergibt sich aus der Energieänderung des Elektrons

$$\frac{p^2}{2m} - \frac{p^2}{2m} = \hbar\omega, \qquad (2.1)$$



Abbildung 2.1: Stoß eines Elektrons mit dem Impuls  $\vec{p}$  an einem Z-fach geladenen Ion bei gleichzeitiger spontaner Emission eines Photons. Nach dem Stoß hat das Elektron den Impuls  $\vec{p'}$ . Für das emittierte Photon gilt  $p^2/2m - p'^2/2m = \hbar\omega$ . Dieser Prozess ist als spontane Bremsstrahlung bekannt.

wobei  $\vec{p}$  der Eingangsimpuls und  $\vec{p'}$  der Ausgangsimpuls des Elektrons ist. Der Umkehrprozess zur Bremsstrahlung beschreibt die Absorption eines Photons aus einem äußeren elektromagnetischen Feld während eines Stoßes am Z-Ion. Dieser Prozess wird als inverse Bremsstrahlung bezeichnet (siehe Abbildung 2.2). Dieser inverse Prozess lässt sich aufgrund der Zeitumkehrinvarianz (siehe Reif (1975)) darstellen, indem das Diagramm in Abbildung 2.1 horizontal gespiegelt wird. Um einen Ausdruck für die Rate der Absorption zu



Abbildung 2.2: Stoß eines Elektrons mit dem Impuls  $\vec{p'}$  an einem Z-fach geladenen Ion bei gleichzeitiger Absorption eines Photons aus dem äußeren elektromagnetischen Feld. Nach dem Stoß hat das Elektron den Impuls  $\vec{p}$ . Dieser Prozess nennt sich inverse Bremsstrahlung und ergibt sich aufgrund der Zeitumkehrinvarianz aus dem gespiegelten Diagramm in Abbildung 2.1.

erhalten, wird die bekannte Rate der spontanen Bremsstrahlung nach Sommerfeld (1931) benutzt und dann der inverse Prozess gefolgert.

Im Folgenden wird sich die Notation auf die Beträge der Impulse beschränken, da für diese Arbeit nur Raten relevant sind, die über alle Winkel und Polarisationen gemittelt sind.

#### 2.1.3 Phasenraum für freie Elektronen und Photonen

Für die weitere Diskussion werden die Quantenzustandsdichten von freien Photonen und Elektronen benötigt, die hier vorweg zusammengestellt werden sollen. Für weitere Details wird auf das Lehrbuch "Quantenmechanik" von Landau und Lifschitz (1988) verwiesen.

#### 2.1.3.1 Dichte von Quantenzuständen

Für die Zahl der Quantenzustände der Photonen  $Z_{ph}$  mit zwei Polarisationsrichtungen pro Photon-Volumen  $V_{ph}$  gilt im Impulsraum

$$d(Z_{ph}/V_{ph}) = \frac{2}{(2\pi)^3\hbar^3} 4\pi p_{ph}^2 dp_{ph}, \qquad (2.2)$$

wobei hier  $p_{ph} = \hbar \omega / c$  der Photonimpuls ist. Die Zahl der Quantenzustände im Volumen  $V_{ph}$  und im Frequenbereich  $d\omega$  ergibt sich somit zu

$$\frac{d(Z_{ph}/V_{ph})}{d\omega} = \frac{\omega^2}{\pi^2 c^3}.$$
(2.3)

#### 2.1.3.2 Photon-Energiedichte

Die Photon-Energiedichte  $u_{\omega}$  im Frequenzintervall  $\Delta \omega$  ergibt sich aus dem Produkt der Zahl der Quantenzustände pro Volumen  $V_{ph}$  im Frequenzintervall  $\Delta \omega$ , der Photonenzahl pro Quantenzustand  $n_{ph}$  und der Photonenenergie  $\hbar \omega$ 

$$u_{\omega}\Delta\omega = \frac{d(Z_{ph}/V_{ph})}{d\omega}\Delta\omega \cdot n_{ph} \cdot \hbar\omega = \frac{\omega^2}{\pi^2 c^3} \cdot \Delta\omega \cdot n_{ph} \cdot \hbar\omega.$$
(2.4)

Die klassische Energiedichte einer Lichtwelle mit  $\vec{E}_{\omega} = \vec{E}_0 cos(\omega t)$  in einem Frequenzintervall  $\Delta \omega$  lässt sich durch  $u_{\omega} \Delta \omega = E_0^2/8\pi$  ausdrücken. Das Frequenzintervall  $\Delta \omega$  ist dabei die Linienbreite der Strahlung. Mit Gleichung 2.4 folgt daraus für die Photonenzahl je Quantenzustand

$$n_{ph} = \frac{\pi c^3 E_0^2}{8\hbar\omega^3 \Delta\omega}.$$
(2.5)

#### 2.1 Mikroskopische Beziehung zwischen Emission und Absorption

#### 2.1.3.3 Dichte der Elektronenzustände

Für die Zustandsdichte der Elektronen der Energie  $E = p^2/2m$  im Volumen  $V_e$  gilt analog

$$\frac{dZ(E)}{dE} = \frac{2V_e}{(2\pi)^3\hbar^3} \cdot \frac{4\pi p^2 dp}{dE} = \frac{V_e m}{\pi^2\hbar^3} p,$$
(2.6)

wobei berücksichtigt wurde, dass die Elektronen zwei mögliche Spinrichtungen haben.

#### 2.1.4 Rate für die Emission und Absorption

Die Rate für die spontane Emission  $R_{emission}^{spontan}(p \to p', \omega)$  im Frequenzintervall  $\Delta \omega$  ergibt sich aus dem Produkt der Elektronengeschwindigkeit v = p/m, der Ionendichte  $n_i$  und des Querschnitts für die spontane Bremsstrahlung in diesem Frequenzintervall

$$R_{emission}^{spontan}(p \to p', \omega) = \frac{p}{m} \cdot n_i \frac{d\sigma(p \to p', \omega)}{d\omega} \Delta \omega.$$
 (2.7)

Die totale Emission der Frequenz  $\omega$  im Frequenzintervall  $\Delta \omega$  ergibt sich aus der spontanen Bremsstrahlung und der stimulierten Bremsstrahlung (siehe auch Landau und Lifschitz (1988))

$$R_{emission}^{total}(p \to p', \omega) = R_{emission}^{spontan} \cdot (1 + n_{ph}).$$
(2.8)

Hier steht

$$R_{emission}^{stimuliert} = n_{ph} R_{emission}^{spontan} =: w_e \tag{2.9}$$

für den stimulierten Anteil.

Aufgrund der Zeitumkehrinvarianz (Reif, 1975) sind der Hin- und der Rück-Prozess miteinander verkoppelt. Für den strahlenden Stoßprozess bedeutet dies, dass die Rate der spontanen Bremsstrahlung  $R_{emission}^{spontan}(p \to p', \omega)$  mit der Rate der inversen Bremsstrahlung  $R_{absorption}(p', \omega \to p)$  in einem festen Verhältnis zueinander stehen.

Die Raten des Hin- und Rückprozesses verhalten sich direkt wie die Zustandsdichten der Endzustände, siehe auch Atzeni und Meyer-ter-Vehn (2002). Dieser Zusammenhang wird als detailliertes Gleichgewicht bezeichnet. Es folgt

$$\frac{R_{absorption}(p',\omega\to p)}{R_{emission}^{spontan}(p\to p',\omega)} = \frac{dZ(E)/dE}{(dZ(E')/dE')\cdot n_{ph}^{-1}}.$$
(2.10)

Die Zahl der Quantenzustände je Photon ist offenbar gerade das Inverse der Photonen je Quantenzustand, nämlich  $n_{ph}^{-1}$ .

#### 2 Absorption durch inverse Bremsstrahlung

Mit Gleichung 2.6 ergibt sich damit für das Verhältnis der Raten zwischen spontaner Emission und Absorption

$$\frac{R_{absorption}(p', \omega \to p)}{R_{emission}^{spontan}(p \to p', \omega)} = \frac{p}{p'} \cdot n_{ph}.$$
(2.11)

Für die Rate der Absorption folgt daraus

$$R_{absorption}(p', \omega \to p) = n_{ph} \cdot \frac{p}{p'} R_{emission}^{spontan}(p \to p', \omega) =: w_a.$$
(2.12)

### 2.1.5 Quantenmechanischer differentieller Querschnitt der Bremsstrahlung

Für den quantenmechanischen Ausdruck des differentiellen Wirkungsquerschnitts der spontanen Bremsstrahlung  $d\sigma(p \rightarrow p', \omega)/d\omega$  in Gleichung 2.7 gilt nach Sommerfeld (1931)

$$\frac{d\sigma}{d\omega}(p \to p', \omega) = \frac{64\pi^2}{3} Z^2 \cdot \alpha_f^5 \cdot a_B^2 \frac{m^2 c^2}{(p - p')^2} \frac{p'}{p} \frac{-d \left|F(\xi)\right|^2 / d\xi}{(1 - e^{-2\pi\eta'})(e^{2\pi\eta} - 1)} \frac{1}{\omega} \quad (2.13)$$

 $\operatorname{mit}$ 

$$\eta = Z\alpha_f c \cdot m/p = Ze^2/\hbar v$$

$$\eta' = Z\alpha_f c \cdot m/p' = Ze^2/\hbar v'$$

$$p' = \sqrt{p^2 - 2m\hbar\omega}$$

$$p'/p = \sqrt{1 - 2\hbar\omega/mv^2}$$

$$F(\xi) = F(i\eta', i\eta, 1, \xi)$$
(2.15)

 $\Rightarrow$ 

$$F(\xi)$$
 ist hier die hypergeometrische Funktion. Der Querschnitt 2.13 wurde  
von Sommerfeld hergeleitet unter Benutzung der vollen quantenmechanischen  
Wellenfunktion des Elektrons. Die Wellenfunktion eines Elektrons in einem  
Coulombfeld hat sowohl einen ebenen als auch einen sphärischen Anteil. Glei-  
chung 2.13 ist gemittelt über Emissionswinkel und Polarisation des spontan  
emittierten Photons und ist gültig für alle nicht-relativistischen Elektronen-  
Geschwindigkeiten.

 $\xi = -4pp'/(p-p')^2,$ 

#### 2.1 Mikroskopische Beziehung zwischen Emission und Absorption

#### 2.1.6 Totale Absorptionsrate

Die stimulierte Emission bewirkt eine Reduktion der Absorption. Deshalb ergibt sich die totale Absorptionsrate  $R_{absorption}^{total}(p, \omega \rightarrow p')$  aus der Differenz der Raten für die Absorption und die stimulierte Emission eines Photons mit der Frequenz  $\omega$ . Das Elektron hat den Anfangsimpuls p. Aufgrund der Energieerhaltung gilt bei Absorption für den Endzustand p' des Elektrons,  $p' = \sqrt{p^2 + 2m\hbar\omega}$  und bei Emission  $\tilde{p}' = \sqrt{p^2 - 2m\hbar\omega}$ . Es folgt

$$R_{absorption}^{total}(p,\omega\to p') = R_{absorption}(p,\omega\to p') - R_{emission}^{stimuliert}(p\to \tilde{p}',\omega) = w_a - w_e.$$
(2.16)

Mit Gleichung 2.9 und 2.12 ergibt sich

$$R_{absorption}^{total}(p,\omega\to p') = \frac{p'}{p} n_{ph} R_{emission}^{spontan}(p'\to p,\omega) - n_{ph} R_{emission}^{spontan}(p\to \tilde{p}',\omega).$$
(2.17)

Mit dem Ausdruck der spontanen Emission nach Gleichung 2.7 und Gleichung 2.5 für  $n_{ph}$  folgt für die totale Absorptionsrate

$$R_{absorption}^{total}(p,\omega\to p') = \frac{\pi c^3 E_0^2}{8\hbar\omega^3 m} n_i \left[ p' \frac{d\sigma(p'\to p,\omega)}{d\omega} - p \frac{d\sigma(p\to \tilde{p}',\omega)}{d\omega} \right] =: w_t,$$
(2.18)

wobei für den differentiellen Wirkungsquerschnitt der Ausdruck 2.13 der spontanen Bremsstrahlung einzusetzen ist. Im Folgenden soll für eine bessere Übersichtlichkeit die Notation von Krainov  $R_{absorption}^{total}(p, \omega \rightarrow p') = w_t$  verwendet werden. Es soll weiter die Konvention gelten, dass für  $w_t > 0$  Photonen von den Elektronen absorbiert werden und für  $w_t < 0$  das äußere Feld durch Photo-Emission verstärkt wird.

Aus der in Gleichung 2.18 beschriebenen totalen Absorptionsrate erhält man die gesamte absorbierte Energie pro Teilchen, indem man die totale Absorptionsrate mit der Photonenenergie multipliziert.

$$\frac{dE}{dt} = w_t \cdot \hbar\omega \tag{2.19}$$

Aus der totalen Absorptionsrate folgt, wie in Kapitel 3 und 4 zu sehen sein wird, der Zusammenhang zwischen dem mikroskopischen Streuprozess mit dem makroskopischen Absorptionsprozess.

Die totale Absorptionsrate lässt sich im Prinzip nach Gleichung 2.13 und 2.18 für jedes Streuproblem bestimmen. Die Auswertung des Sommerfeld'schen Ausdrucks 2.13 ist jedoch komplex, insbesondere die der hypergeometrischen Funktion  $F(\xi)$ . Deshalb werden Näherungslösungen von Gleichung 2.13 in verschiedenen Grenzbereichen benutzt.

### 2.2 Näherungslösungen des Wirkungsquerschnitts der Bremsstrahlung

Ziel ist es, einen Ausdruck für die totale Absorptionsrate der Bremsstrahlung für die VUV-Photo-Absorption in WDM und heißen Plasmen zu finden. Ausgangspunkt hierzu ist der differentielle Wirkungsquerschnitt der spontanen Bremsstrahlung nach Gleichung 2.13.

#### 2.2.1 Charakteristische Parameter

Eine Analyse von Gleichung 2.13 zeigt, dass sie zwei charakteristische dimensionslose Parameter enthält, die verschiedene Näherungsbereiche unterscheiden. Wie im Weiteren zu sehen sein wird, ist auch das inverse Produkt dieser beiden Parameter entscheidend, da es den Übergangsbereich zwischen den Näherungsbereichen kennzeichnet.

Abbildung 2.3 zeigt die Parameter-Ebene, die durch die beiden charakteristischen Parameter  $\eta, \vartheta$  aufgespannt wird. Das Inverse Produkt dieser Parameter differenziert die vier Bereiche zusätzlich. Die hierdurch entstehenden Übergangsbereiche sind für diese Arbeit von besonderer Bedeutung. Die Lösungen von Gleichung 2.13 in diesen Übergangsbereichen werden von Krainov (2000, 2001) hergeleitet.

#### **2.2.1.1** Coulomb-Parameter $\eta$

Ein charakteristischer Parameter ist der Coulomb-Parameter  $\eta$ . Er setzt die Geschwindigkeit v = p/m des freien Elektrons ins Verhältnis zur Geschwindigkeit  $v_0 = Ze^2/\hbar$  eines gebundenen Elektrons im Z-Ion

$$\eta = \frac{Ze^2}{\hbar v}.\tag{2.20}$$

Dieser Parameter unterscheidet zwischen schnellen  $(\eta < 1)$  und langsamen  $(\eta > 1)$  Elektronen und ist in Gleichung 2.14 enthalten.

#### 2.2.1.2 Energie-Parameter $\vartheta$

Der andere charakteristischer Parameter ist der Energie-Parameter  $\vartheta$ .

$$\vartheta = \frac{h\omega}{mv^2}.\tag{2.21}$$


Abbildung 2.3: Mögliche Näherungslösungen von Gleichung 2.13. Es gibt zwei charakteristische Parameter. Der Coulomb-Parameter  $\eta = Ze^2/\hbar v$  unterscheidet zwischen schnellen und langsamen Elektronen, während der Energie-Parameter  $\vartheta = \hbar \omega / mv^2$  zwischen hohen und niedrigen Photonenfrequenzen unterscheidet. Auf diese Weise können vier Hauptbereiche unterschieden werden. Das inverse Produkt beider Parameter differenziert diese Bereiche zusätzlich. Der resultierende Übergangsbereich ist für diese Arbeit von besonderer Bedeutung. Die Lösungen von Gleichung 2.13 in diesen Übergangsbereich wurden von Krainov (2000, 2001) herausgearbeitet.

Er beschreibt das Verhältnis zwischen der Energie des Photons und der kinetischen Energie des Elektrons und ist in Gleichung 2.15 im Verhältnis der Elektronen-Impulse vor und nach der Streuung enthalten. Dieser Parameter unterscheidet zwischen großen ( $\vartheta > 1$ ) und niedrigen ( $\vartheta < 1$ ) Photonenfrequenzen.

#### 2 Absorption durch inverse Bremsstrahlung

#### 2.2.1.3 Übergangs-Parameter $\psi$

Der Coulomb-Parameter und der Energie-Parameter unterteilen die Parameterebene in vier Hauptbereiche. Als weitere Parameter wird das inverse Produkt aus Coulomb-Parameter und Energie-Parameter eingeführt:

$$\psi = \frac{1}{\eta \cdot \vartheta} = \frac{mv^3}{Ze^2\omega}.$$
(2.22)

Dieser Übergangs-Paramter  $\psi$  unterteilt die Hauptbereiche diagonal, siehe auch Abbildung 2.3 und trifft so eine differenziertere Unterscheidung in Übergangsbereiche. Auf die Bedeutung dieser Größe wird in Kapitel 3 zurückgekommen.

# 2.2.2 Bestimmung der charakteristischen Parameter im Fall FLASH

Im Rahmen dieser Arbeit sollen die Absorptionsprozesse von VUV-Photonen im WDM-Bereich untersucht werden. Für eine Abschätzung der charakteristischen Parameter in Aluminium bei einer Temperatur von 10 eV, dies entspricht einer mittleren Geschwindigkeit der Elektronen von  $v = 2.3 \cdot 10^8 cm/s$ , und einer Photonenenergie von 40 eV, ergibt sich für den Coulomb-Parameter

$$\eta = \frac{3e^2}{\hbar \cdot 2.3 \cdot 10^8 cm/s} \approx 2.8;$$

für den Energie-Parameter folgt

$$\vartheta = \frac{40eV}{m \cdot (2.3 \cdot 10^8 cm/s)^2} \approx 1.3$$

und für das inverse Produkt beider Parameter ergibt sich

$$\psi \approx 0.3.$$

Es zeigt sich, dass die Parameter bei der VUV-Photo-Absorption in WDM in dem Übergangsbereich  $mv^3/Ze^2\omega \leq 1$  liegen.

Bei der Wechselwirkung von VUV-Photonen mit einem kalten Festkörper entspricht die mittlere Geschwindigkeit der Elektronen der Fermigeschwindigkeit  $(v_{Al}(T = 0) = v_F = 2.03 \cdot 10^8 cm/s)$ . Da die mittlere Geschwindigkeit der Elektronen bei einer Temperatur von 10 eV nur geringfügig größer ist als die Fermigeschwindigkeit, unterscheiden sich die Parameter in einem kalten Festkörper kaum von der Parameter-Größenordnung im WDM. Die VUV-Photo-Absorption in WDM und kaltem Material wird in den folgenden Fällen

#### 2.2 Näherungslösungen des Wirkungsquerschnitts der Bremsstrahlung

#### 2+3 beschrieben.

Durch die Fokussierung des FLASH-Strahls wird die Intensität der Strahlung auf den Targets so weit erhöht, dass die Materialien auf mehrere hundert Elektronenvolt aufgeheizt werden, vergleiche mit Kapitel 5. In diesem Fall handelt es sich um eine Wechselwirkung des VUV-FEL-Pulses mit einem heißen Plasma. Bei einer Materialtemperatur von 500 eV ( $\Rightarrow v = 16.2 \cdot 10^8 cm/s$ ) ergibt sich für den Coulomb-Parameter

$$\eta = \frac{3e^2}{\hbar \cdot 16.2 \cdot 10^8 cm/s} \approx 0.4$$

für den Energie-Parameter folgt

$$\vartheta = \frac{40eV}{m \cdot (16.2 \cdot 10^8 cm/s)^2} = 0.03.$$

Diese Abschätzung zeigt, dass in diesem Fall mit  $\psi = 1/(0.4 \cdot 0.03) >> 1$  die Näherung schneller Elektronen und niedriger Photonenfrequenzen gut angewendet werden kann. Diese Situation wird in *Fall 1* betrachtet.

Um den gesamten Zustands-Bereich, der mit FLASH erreicht werden kann, abzudecken, werden die Näherungslösungen in den Übergangsbereichen, sowie im Fall schneller Elektronen und niedriger Photonenfrequenzen im Folgenden näher betrachtet.

### 2.2.3 Relevante Fälle für die VUV-Photo-Absorption

#### Fall 1

Schnelle Elektronen und niedrige Photonenfrequenzen,  $\eta = \frac{Ze^2}{\hbar v} << 1$  und  $\vartheta = \frac{\hbar \omega}{mv^2} << 1$ 

Zunächst wird ein Ausdruck für die spontane Bremsstrahlung nach Gleichung 2.13 bestimmt. Da in diesem Fall nur sehr schnelle Elektronen betrachtet werden, kann die Wellenfunktion der Elektronen als eben angenommen werden. Die hypergeometrische Funktion und deren Ableitung vereinfachen sich in diesem Fall zu

$$F(\xi) \approx F(0,0,1,\xi) = 1$$

und

$$F'(\xi) \approx i\eta \cdot i\eta' F(1, 1, 2, \xi) = (\eta \eta' / \xi) \ln(1 - \xi)$$

Für den Wirkungsquerschnitt der spontanen Bremsstrahlung ergibt sich daraus

$$\frac{d\sigma(p \to p', \omega)}{d\omega} = \frac{16}{3}Z^2 \cdot \alpha_f^5 \cdot a_B^2 \frac{c^2 m^2}{p^2} ln \left[\frac{p+p'}{p-p'}\right] \frac{1}{\omega}$$
(2.23)

17

#### 2 Absorption durch inverse Bremsstrahlung

mit

$$\hbar\omega = \frac{1}{2m}(p^2 - p'^2).$$

Für näherer Erläuterungen zu dieser Ableitung siehe Landau und Lifschitz (1987). Der Wirkungsquerschnitt der Absorption und der Emission folgt aus Gleichung 2.8 und 2.12. Für die Rate der Absorption und der Emission ergibt sich

$$w_{e,a} = \frac{a_B^2 \alpha_f^2 e^6}{\hbar^4} \cdot \frac{2\pi Z^2 n_i E_0^2}{3\omega^4 p} ln \left[ \frac{p + p'_{\pm}}{p - p'_{\pm}} \right].$$
(2.24)

Berücksichtigt man weiter, dass sich bei der Photo-Absorption die Elektronenenergie um die Photonenenergie erhöht und im Fall der Emission um die Photonenenergie erniedrigt, d.h.  $p'_{\pm} = \sqrt{p^2 \pm 2m\hbar\omega}$ , so ergibt sich für die totale Absorptionsrate nach Gleichung 2.18 für  $\psi >> 1$ 

$$w_t = w_a - w_e = \frac{e^6}{\hbar} \cdot \frac{2\pi n_i E_0^2 Z^2}{3p^3 \omega^3}.$$
 (2.25)

# *Fall 2* Übergangsbereich $\eta = \frac{Ze^2}{\hbar v} \leq 1, \ \vartheta = \frac{\hbar \omega}{mv^2} << 1 \text{ und } \psi = \frac{mv^3}{Ze^2\omega} \geq 1$

Die spontane Bremsstrahlung ergibt sich wieder nach Gleichung 2.13, für  $\eta, \eta' >>$ 1. Die Elektronen dürfen aufgrund ihrer kleinen Geschwindigkeit nicht als ebene Wellen approximiert werden, da aber  $\eta, \eta' >>$  1 und  $mv^3/Ze^2\omega > 1$ , vereinfacht sich die hypergeometrische Funktion zu

$$F(i\eta, i\eta 1, 1; -\xi) \approx \frac{i}{\pi} \xi^{i\bar{\eta}} exp\left[\pi\bar{\eta}\right] \ln \frac{\sqrt{\xi}}{\bar{\eta}}$$
(2.26)

mit  $\bar{\eta} = (\eta + \eta')/2$ . Für Details siehe die Arbeit von Krainov (2001). Für die totale Rate ergibt sich in diesem Fall

$$w_t = \frac{e^6}{\hbar} \cdot \frac{2\pi n_i E_0^2 Z^2}{p^3 \omega^3}.$$
 (2.27)

# *Fall 3* Übergangsbereich $\eta = \frac{Ze^2}{\hbar v} \leq 1, \ \vartheta = \frac{\hbar \omega}{mv^2} \geq 1 \text{ und } \psi = \frac{mv^3}{Ze^2\omega} \leq 1$

In diesem Fall darf weder die 1. Born'sche Näherung für die Elektronen angewendet werden, noch darf die hypergeometrische Funktion nach Gleichung 2.26 vereinfacht werden, da  $mv^3/Ze^2\omega \leq 1$ . Es muss stattdessen die Sattelpunktmethode zur Berechnung der hypergeometrischen Funktion angewendet

#### 2.2 Näherungslösungen des Wirkungsquerschnitts der Bremsstrahlung

werden. Dabei muss beachtet werden, dass der Sattelpunkt sehr nahe an einem singulären Punkt liegt. Diese mathematische Aufgabe wurde von Krainov (2000) gelöst. Für die totale Rate ergibt sich in diesem Fall

$$w_t = \frac{e^4}{m^2\hbar} (me)^{2/3} \cdot \frac{2\pi^2 Z^2 n_i E_0^2}{15 \cdot 3^{5/6} \omega^3 p} \left(\frac{2}{Z\omega}\right)^{2/3} \frac{\Gamma\left(\frac{1}{3}\right)}{\Gamma\left(\frac{2}{3}\right)}.$$
 (2.28)

Im Gegensatz zu Gleichung 2.25 und 2.27 hängt die totale Rate hier nicht von  $(p\omega)^{-3}$  ab, sondern zeigt eine  $p\omega^{-11/3}$  Abhängigkeit. Hieraus ergeben sich entscheidende Konsequenzen, die im Verlauf dieser Arbeit herausgearbeitet werden.

2 Absorption durch inverse Bremsstrahlung

Um die Absorption durch inverse Bremsstrahlung der Frequenz  $\omega$  im Plasma der Temperatur T zu bestimmen, muss die totale Absorptionsrate  $w_t$  über die Verteilungsfunktion f(p) der freien Elektronen gemittelt werden. Für hohe Temperaturen  $(T \gg T_F)$  kann die totale Absorptionsrate  $(w_t \propto p^{-3})$ über eine Maxwellverteilung gemittelt werden, was zu dem bekannten Spitzer-Ergebnis im Plasma führt.

Ein wesentliches neues Ergebnis folgt für ein warmes, dichtes Plasma mit Temperaturen im Bereich der Fermi-Temperatur und darunter  $(T < T_F)$ . In diesem Fall muss die totale Absorptionsrate  $(w_t \propto p^{-1})$  über eine Fermi-Dirac-Verteilung gemittelt werden. Diese Mittelung kann analytisch durchgeführt werden. Mittels einer Interpolation wird dann ein geschlossener Ausdruck für die gemittelte totale Absorptionsrate, der für alle Temperaturen und Photonenenergien gültig ist, hergeleitet.

Des Weiteren wird ein Zusammenhang zwischen der gemittelten totalen Absorptionsrate und einer effektiven Stoßfrequenz  $\nu_{eff}(T, \omega)$  hergestellt. Es zeigt sich hierbei, dass sogar der statischen Limes ( $\omega \to 0$ ) dieser Formel gut mit den bei niedrigen Temperaturen gemessenen Stoßfrequenzen übereinstimmt. Dieses überraschende Resultat lässt sich im Rahmen dieser Arbeit nicht wirklich verstehen, macht die Formel aber auch für Transport-Koeffizienten, die in hydrodynamischen Rechnungen gebraucht werden (siehe Kapitel 5), anwendbar.

# 3.1 Vielteilchensystem

In Kapitel 2 wurde die totale Absorptionsrate für ein Elektron hergeleitet. Nun soll ein Ausdruck für die totale Absorptionsrate für ein Ensemble von Elektronen bestimmt werden. Dazu wird für langsame Elektronen von einer Fermi-Dirac-Verteilung ausgegangen und hieraus die gemittelte Impulsverteilung der Elektronen bestimmt. Im Fall schneller Elektronen kann dagegen eine Maxwell-Boltzmann-Verteilung der Elektronen angenommen werden.

### 3.1.1 Verteilungsfunktion

Die freien Elektronen in WDM und im kalten Festkörper sind entartet und folgen der Fermi-Dirac-Verteilung

$$f(p)|_{Fermi-Dirac} = \frac{1}{1 + exp[(\epsilon(p) - \mu)/k_BT]}.$$
 (3.1)

Hier ist  $\epsilon(p) = p^2/2m$  die kinetische Energie der Elektronen,  $k_B$  ist die Boltzmann-Konstante, und  $\mu$  ist das chemische Potential. Das chemische Potential bestimmt sich aus der Elektronendichte gemäß

$$n_e = \frac{2}{h^3} \int_0^\infty d^3 p \cdot f(p) = \frac{8\pi}{h^3} \int_0^\infty \frac{p^2 dp}{1 + exp\left[(\epsilon(p) - \mu)/k_B T\right]}.$$
 (3.2)

Mit der Substitution  $x = p^2/(2mk_BT)$  und  $y = \mu/k_BT$  folgt

$$n_e = \frac{(mk_BT)^{3/2}}{\pi^2\hbar^3} \cdot \sqrt{2} \cdot \frac{\sqrt{\pi}}{2} \cdot \underbrace{\left(\frac{2}{\sqrt{\pi}}\int_0^\infty \frac{x^{1/2}dx}{e^{x-y}+1}\right)}_{I_{1/2}(y)}.$$
(3.3)

 ${\cal I}_{1/2}(y)$ ist ein Fermi-Integral. Nach einigen Umformungen und der Definition für den Fermi-Impuls

$$p_F = \left(3\pi^2\hbar^3 n_e\right)^{1/3} = (2mk_B T_F)^{1/2} \tag{3.4}$$

und den thermischen Impuls

$$p_{th} = (mk_B T)^{1/2} aga{3.5}$$

ergibt sich als implizite Gleichung für y

$$I_{1/2}(y) = \frac{4}{3\sqrt{\pi}} \left(\frac{T_F}{T}\right)^{3/2}.$$
 (3.6)

oder mit  $T/T_F = \Theta$ 

$$\Theta(y) = \left[\frac{3}{2} \int_0^\infty \frac{x^{1/2} dx}{e^{x-y} + 1}\right]^{-2/3}.$$
(3.7)

Um den Entartungsparameter  $y = \mu/k_BT$  zu erhalten, muss diese Beziehung invertiert werden. Dies lässt sich in guter Näherung mittels einer Interpolationsformel von Ichimaru (1994) durchführen, die sich wie folgt schreibt

$$y = -\frac{3}{2}ln\Theta + ln\frac{4}{3\sqrt{\pi}} + \frac{A\Theta^{-(b+1)} + B\Theta^{-(b+1)/2}}{1 + A\Theta^{-b}}$$
(3.8)

mit A=0.25054, B=0.072 und b=0.858.

Im Folgenden werden nur isotrope Verteilungen der Impulse betrachtet, deshalb wird die Verteilungsfunktion über die Energien  $f(\epsilon)$  der Elektronen benutzt.

# 3.1.2 Mittelung über die Elektronen-Impulse

In Kapitel 2 wurde die totale Rate der Bremsstrahlung für langsame und schnelle Elektronen bestimmt. Es zeigten sich unterschiedliche Abhängigkeiten der totalen Absorptionsrate vom Elektronen-Impuls. Über diese Raten für langsame und schnelle Elektronen soll nun gemittelt werden.

#### 3.1.2.1 Langsame Elektronen

Im Fall langsamer Elektronen ergab sich für die totale Rate  $w_t \propto p^{-1}$ . Für die Impulsmittelung, normiert auf den Fermi-Impuls  $p_F$ , folgt damit

$$\left\langle \frac{p_F}{p} \right\rangle = \frac{2}{n_e h^3} \int_0^\infty d^3 p \cdot \frac{p_F}{p} \cdot f(\epsilon) \left(1 - f(\epsilon + h\nu)\right). \tag{3.9}$$

Bei der Mittelung muss berücksichtigt werden, dass bei der Photo-Absorption die Anfangszustände besetzt sind und ein Elektron mit der Energie  $\epsilon$  vorhanden ist. Dies ist der Fall, wenn  $f(\epsilon) \neq 0$ . Zudem muss beachtet werden, dass die Endzustände frei sind. Dies ist der Fall, wenn  $1-f(\epsilon+h\nu) \neq 0$ . Ein im Rahmen dieser Arbeit sehr wichtiges Resultat ist, dass sich das Integral 3.9 analytisch lösen lässt. Mit  $d^3p/p = 4\pi d(p^2/2) = 4\pi m k_B T dx$  erhält man

$$\left\langle \frac{p_F}{p} \right\rangle = \frac{mp_F}{n_e \pi^2 \hbar^3} \int_0^\infty d\epsilon \cdot f(\epsilon) \left(1 - f(\epsilon + h\nu)\right).$$

Mit Gleichung 3.1,  $x = \epsilon/k_BT$ ,  $y = \mu/k_BT$  und  $z = \hbar\omega/k_BT$  folgt

$$\left\langle \frac{p_F}{p} \right\rangle = \frac{mk_B T p_F}{n_e \pi^2 \hbar^3} \int_0^\infty dx \frac{1}{(e^{x-y}+1)} \cdot \left(1 - \frac{1}{e^{x+z-y}+1}\right)$$

Mit Gleichung 3.4 ergibt sich daraus die analytische Lösung

$$\left\langle \frac{p_F}{p} \right\rangle = \frac{3}{2} \cdot \frac{T}{T_F} \ln \left( \frac{1+e^y}{1+e^{y-z}} \right) / \left( 1-e^{-z} \right). \tag{3.10}$$

Dieses wichtige Resultat 3.10 soll im Folgenden für den Grenzfall T = 0 und den Fall  $T \neq 0$  diskutiert werden.

#### 3.1.2.1.1 T=0

Im Grenzfall T = 0 ist die Fermikugel voll besetzt, vergleiche mit Abbildung 3.1. Für die Absorption eines Photons muss deshalb gelten

$$\frac{p^2}{2m} + \hbar\omega = \frac{p^2}{2m} > \epsilon_F, \qquad (3.11)$$



Abbildung 3.1: Elektronen aus der Fermikugel mit einer Energie  $\epsilon$  können nur ein Photon absorbieren, wenn nach der Absorption  $\epsilon + \hbar \omega > \epsilon_F$  erfüllt ist, da alle Zustände in der Fermikugel besetzt sind.

wobei  $\omega$  die Photonenfrequenz,  $p < p_F$  der Anfangsimpuls und  $p' > p_F$  der Endimpuls des Elektrons ist. Das Integral 3.9 kann in diesem Fall einfach gelöst werden, da  $f(\epsilon) = \Theta(\epsilon_F - \epsilon)$ , wobei  $\Theta$  die Stufenfunktion ist. Man erhält folglich

$$\left\langle \frac{p_F}{p} \right\rangle = \frac{mp_F}{n_e \pi^2 \hbar^3} \int_0^\infty d\left(\frac{p^2}{2m}\right) \Theta(\epsilon_F - \epsilon) \left[1 - \Theta(\epsilon_F - \epsilon - \hbar\omega)\right]$$
$$= \frac{3mp_F}{p_F^3} \int_{max(\epsilon_F - \hbar\omega, 0)}^{\epsilon_F} d\epsilon = \begin{cases} \frac{3}{2} \frac{\hbar\omega}{\epsilon_F} & : & \left(\frac{\hbar\omega}{\epsilon_F} \le 1\right)\\ \frac{3}{2} & : & \left(\frac{\hbar\omega}{\epsilon_F} > 1\right) \end{cases} .$$
(3.12)

Für  $\hbar\omega < \epsilon_F$  folgt aus Gleichung 3.12, dass je kleiner die Photonenenergie ist, desto weniger Elektronen können ein Photon absorbieren. Der Mittelwert  $\langle p_F/p \rangle$  nimmt linear mit der Photonenenergie zu, vergleiche mit Abbildung 3.2. Sobald die Photonenenergie größer als die Fermi-Energie  $\epsilon_F$  ist, kann jedoch jedes Elektron ein Photon absorbieren.  $\langle p_F/p \rangle$  hängt dann nicht mehr von der Photonenenergie ab und erreicht den maximalen Wert  $\langle p_F/p \rangle = 3/2$ .

#### **3.1.2.1.2** $T \neq 0$

Wenn  $T \neq 0$ , dann ist die Fermikante aufgeweicht, vergleiche mit Abbildung 3.3. Hierdurch sind Zustände innerhalb einer Energieschale der Dicke  $k_BT$  in der Fermikugel nur zum Teil besetzt. Elektronen aus tieferen Schalen können durch Photo-Absorption diese Zustände in der Fermikugel einnehmen. Je größer die Temperatur ist, umso dicker wird die Energieschale, in der es freie Zustände gibt. Auf diese Weise können immer mehr Elektronen auch niedrige Photonenenergien absorbieren. Trägt man  $\langle p_F/p \rangle$  für verschiedene Photonenfrequenzen gegen die Temperatur auf, so zeigt sich der Effekt des Pauli-Blockings im Bereich  $\hbar \omega < \epsilon_F$  und  $T < T_F$ , siehe Abbildung 3.4. Je kleiner die Temperatur  $(T < T_F)$ , desto weniger Absorptionprozesse können stattfinden. Im Fall  $\hbar \omega > \epsilon_F$  haben dagegen alle Elektronen in der Fermikugel

#### 3.1 Vielteilchensystem



Abbildung 3.2: Impulsverteilung der Elektronen aufgetragen gegen die Photonenenergie bei T=0. Für Photonenenergien die kleiner als die Fermi-Energie sind, spielt das Pauli-Blocking der Elektronen in der Fermikugel eine entscheidende Rolle. Je kleiner die Photonenergie, desto weniger Elektronen haben die Möglichkeit, durch die Photo-Absorption einen höheren freien Energiezustand zu erreichen.



Abbildung 3.3: Ist  $T \neq 0$  dann existieren Elektronen mit einer Anfangsenergie, für die gilt  $\epsilon > \epsilon_F$ . Diese Elektronen können auch beliebig kleine Photonenenergien absorbieren.

die Möglichkeit, ein Elektron zu absorbieren. Bei T=0 erreicht die Impulsverteilung dann das Maximum von  $\langle p_F/p \rangle = 3/2$ . Für  $T > T_F$  fällt die Impulsverteilung für alle Photonenenergien, aufgrund der steigenden Geschwindigkeit der Elektronen, ab.

#### 3.1.2.2 Schnelle Elektronen

In Kapitel 2 wurde gezeigt, dass im Fall  $mv^3/Ze^2\omega >> 1$  für die totale Absorptionsrate eines Elektrons  $w_t \propto p^{-3}$  gilt. Die Elektronen-Impulse liegen



Abbildung 3.4: Abhängigkeit des Mittelwerts  $\langle p_F/p \rangle$  von der normierten Elektronen-Temperatur  $T/T_F$  für verschiedene Photonenenergien  $\hbar \omega = 1 \ eV$ ,  $\hbar \omega = 10 \ eV$  und  $\hbar \omega = 38 \ eV$ . Für  $\hbar \omega << k_B T_F$  steigt  $\langle p_F/p \rangle$  mit wachsender Temperatur bis  $T \approx T_F$  an und geht dann in eine von der Photonenfrequenz unabhängige Kurve über.

dann über dem Fermi-Impuls  $(p >> p_F)$  und folgen einer Maxwell-Boltzmann-Verteilung. Mittelt man über alle Elektronen-Impulse, so findet man

$$\left\langle \frac{p_{th}^3}{p^3} \right\rangle = (2\pi)^{-3/2} \int_0^\infty d^3 p \cdot \frac{1}{p^3} \cdot e^{-p^2/2p_{th}^2} = \frac{4\pi}{(2\pi)^{3/2}} \int_0^\infty \frac{dp}{p} e^{-p^2/2p_{th}^2} \quad (3.13)$$

mit  $p_{th} = \sqrt{mk_BT}$ . Für kleine Impulse divergiert das Integral. Im *Fall 2* aus Kapitel 2 (Krainov, 2001) liegt das daran, dass für kleine Impulse der Gültigkeitsbereich  $mv^3/Ze^2\omega \ge 1$  überschritten wird und es als eine untere Grenze zum Abschneiden der Integration benutzt werden kann

$$p_{min} = (Ze^2\omega m^2)^{1/3}.$$
(3.14)

Die obere Grenze ergibt sich aus dem maximal möglichen Impulsübertrag, wenn  $p_{max} = p_{th}$ . Für den *Fall 2* aus Kapitel 2 führt dies zu

$$\left\langle \frac{p_{th}^3}{p^3} \right\rangle = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \ln\left(\frac{p_{max}}{p_{min}}\right)$$
$$\left\langle \frac{p_{th}^3}{p^3} \right\rangle \cong \sqrt{\frac{2}{\pi}} \ln\left(\frac{p_{th}^3}{Ze^2\omega m^2}\right)^{1/3} = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \cdot \frac{1}{3} \ln\left(\frac{p_{th}^3}{Ze^2\omega m^2}\right). \tag{3.15}$$

Im Plasma gilt dies für  $\omega >> \omega_p$ . Für Frequenzen, die kleiner als die Plasmafrequenz sind ( $\omega < \omega_p$ ), greift ein anderer Limes, der aus der Hochtemperatur-Plasmaphysik bekannt ist (*Fall 1* aus Kapitel 2), siehe auch Artsimowitsch

 $\Rightarrow$ 

#### 3.1 Vielteilchensystem

und Sagdejew (1983) und Lee und More (1984). In diesem Fall entspricht  $p_{min}$  aus Gleichung 3.14 einem Stoßparameter  $b_{max}$ , der größer als die Debye'sche Abschirmlänge  $\lambda_d$  ist, d.h.

$$b_{max} = \frac{p_{th}}{m\omega} > \lambda_d = \frac{p_{th}}{m\omega_p}$$

Dies ist physikalisch nicht sinnvoll. In diesem Fall wird deshalb der Coulomblogarithmus bestimmt, wie es in der Plasmaphysik üblich ist, zu

$$\ln\left(\frac{p_{max}}{p_{min}}\right) = \ln\left(\frac{b_{max}}{b_{min}}\right) = \ln\left(\frac{\lambda_d}{r_0}\right) = \ln\left(\frac{p_{th}^3}{Ze^2\omega_p m^2}\right),\tag{3.16}$$

wobei der maximale Stoßparameter durch  $b_{max} = \lambda_d = (p_{th}/m)/\omega_p$  und der minimale durch die Landaulänge  $b_{min} = r_0 = Ze^2m/p_{th}^2$ gegeben ist. Dies führt auf

$$\left\langle \frac{p_{th}^3}{p^3} \right\rangle \cong \sqrt{\frac{2}{\pi}} \ln \left( \frac{p_{th}^3}{Ze^2 \omega_p m^2} \right)$$
 (3.17)

### 3.1.3 Gemittelte totale Absorptionsrate

Die gemittelte totale Absorptionsrate wird nun mit Hilfe der Ausdrücke für  $\langle p_F/p \rangle$  bzw.  $\langle p_F^3/p^3 \rangle$  aus Abschnitt 3.1.2 bestimmt.

#### 3.1.3.1 Langsame Elektronen

Für langsame Elektronen  $(mv^3/Ze^2\omega < 1)$  folgt

$$\langle w_t \rangle^{langsam} = \underbrace{\frac{2\pi^2}{15\sqrt{3}} \left(\frac{4}{3}\right)^{1/3} \frac{\Gamma\left(\frac{1}{3}\right)}{\Gamma\left(\frac{2}{3}\right)} \sqrt{\frac{2}{\pi}} \cdot \underbrace{\frac{e^4}{m^2 \hbar} (me)^{2/3} \cdot \frac{Zn_e E_0^2}{\omega^3 p_{th}^3} \cdot \left(\frac{p_{th}^3}{Z\omega}\right)^{2/3}}_{\text{1.320}} \cdot \underbrace{\frac{\sqrt{\pi}}{2} \left\langle \frac{p_{th}}{p} \right\rangle}_{FF(T,\hbar\omega)}}_{(3.18)}$$

 $FF(T, \hbar\omega)$  ist der Fermi-Korrektur-Faktor, für den gilt

$$FF(T, \hbar\omega) = \sqrt{\frac{\pi}{2}} \frac{p_{th}}{p_F} \left\langle \frac{p_F}{p} \right\rangle$$
$$= \frac{3\sqrt{\pi}}{4} \left(\frac{T}{T_F}\right)^{3/2} ln \left(\frac{1+e^y}{1+e^{y-z}}\right) / \left(1-e^{-z}\right)$$
(3.19)

mit  $y = \mu/(k_B T)$  und  $z = \hbar \omega/(k_B T)$ . Er ist so definiert, dass für  $T \to \infty$  und festes  $\hbar \omega$  gilt

$$FF(T, \hbar\omega) \to 1.$$

Im Fall  $T \to 0$  folgt

$$FF(T,\hbar\omega) \to \frac{3\sqrt{\pi}}{4} \left(\frac{T}{T_F}\right)^{1/2} \cdot \underbrace{\frac{\hbar\omega}{\epsilon_F}}_{\min(\frac{\hbar\omega}{\epsilon_F},1)}$$

Für weitere Anwendungen wird

$$\langle w_t \rangle^{langsam} = 1.32 \cdot \frac{e^4}{m^2 \hbar} (me)^{2/3} \cdot \frac{Zn_e E_0^2}{\omega^3 p_{th}^3} \cdot \left(\frac{p_{th}^3}{Z\omega}\right)^{2/3} \cdot FF(T, \hbar\omega) \qquad (3.20)$$

benutzt.

#### 3.1.3.2 Schnelle Elektronen

Für schnelle Elektronen  $(mv^3/Ze^2\omega > 1)$  führen die Maxwell-gemittelten Impulsverteilungen der Elektronen für den *Fall 1* und den *Fall 2* aus Kapitel 2 beide auf

$$\langle w_t \rangle^{schnell} = \frac{2\sqrt{2\pi}}{3} \frac{e^6}{\hbar} \frac{n_i E_0^2 Z^2}{\omega^3 p_{th}^3} \ln\left(\frac{p_{th}^3}{Z e^2 m^2 \tilde{\omega}}\right)$$
(3.21)

allerdings mit  $\tilde{\omega} = \omega_p$  für  $\omega \ll \omega_p$  (Fall 1) und  $\tilde{\omega} = \omega$  für  $\omega \gg \omega_p$  (Fall 2), zusammengefasst  $\tilde{\omega} = max(\omega, \omega_p)$ .

$$\langle w_t \rangle^{schnell} = \sqrt{2\pi} \cdot \frac{e^6}{\hbar} \frac{Z n_e E_0^2}{\omega^3 p_{th}^3} \ln\left(\frac{p_{th}^3}{Z e^2 m^2 \tilde{\omega}}\right)^{2/3}$$
(3.22)

mit  $\tilde{\omega} = max(\omega, \omega_p).$ 

### 3.1.3.3 Interpolation zwischen schnellen und langsamen Elektronen

Es soll neben den asymptotischen Grenzfällen langsamer und schneller Elektronen auch ein Ausdruck für die totale Absorptionsrate bei mittleren Elektronen-Geschwindigkeiten  $(mv^3/Ze^2\omega \approx 1)$  gefunden werden. In beiden Grenzfällen zeigt sich eine Abhängigkeit der Absorptionsrate von dem charakteristischen Übergangs-Parameter  $\psi = mv^3/Ze^2\omega$ . Analytische Überlegungen zeigen, dass sich mittels dieses Parameters beide Gleichungen zusammenfassen lassen, was zu einer Interpolation beider Grenzfälle führt.

$$\langle w_t \rangle^{interpol} \cong \frac{e^6}{\hbar} \sqrt{2\pi} \cdot \frac{Z n_e E_0^2}{\omega^3 p_{th}^3} \ln \left[ 1 + \frac{1.32}{\sqrt{2\pi}} \left( \frac{p_{th}^3}{Z e^2 m^2 \tilde{\omega}} \right)^{2/3} \right] \cdot FF(T, \hbar \omega) \quad (3.23)$$

#### 3.1 Vielteilchensystem

mit  $\tilde{\omega} = max(\omega, \omega_p)$ . Diese Interpolationsformel geht für  $\psi = p_{th}^3/(Ze^2m^2\tilde{\omega}) >> 1$  näherungsweise in Gleichung 3.22 über und damit in die bekannte Absorptionsrate für die inverse Bremsstrahlung im Plasma, basierend auf der Stoßfrequenz von Spitzer. Für  $\psi \ll 1$  und  $\omega > \omega_p$  geht sie hingegen exakt in die Absorptionsrate nach Gleichung 3.20 für langsame Elektronen über.

Es bleibt an dieser Stelle festzustellen, dass Gleichung 3.23 nicht für  $\psi << 1$ und Frequenzen  $\omega < \omega_p$  abgeleitet wurde. Die Ersetzung von  $\psi = p_{th}^3/(Ze^2m^2\omega)$ durch  $\psi = p_{th}^3/(Ze^2m^2\omega_p)$  in Gleichung 3.20 für  $\psi << 1$  und  $\omega < \omega_p$  ist willkürlich, führt aber zu Werten der effektiven Stoßfrequenz, die sich zum Teil sehr gut mit gemessenen Werten für  $\hbar\omega \rightarrow 0$  bei niedrigen Temperaturen vergleichen. Der Grund hierfür ist nicht verstanden, erlaubt es aber empirisch Gleichung 3.23 auch für  $\omega < \omega_p$  zu benutzen.

### 3.1.4 Effektive Stoßfrequenz

Die über ein Ensemble von Elektronen gemittelte totale Absorptionsrate  $\langle w_t \rangle$ soll an dieser Stelle mit einer effektiven Stoßrate  $\nu_{eff}(T,\omega)$  in Verbindung gebracht werden. Es wird hier Krainov (2000) gefolgt und für die effektive Stoßfrequenz

$$\nu_{eff}(T,\omega) = \frac{m\hbar}{e^2} \cdot 2 \langle w_t \rangle \cdot \frac{\omega^3}{E_0^2}, \qquad (3.24)$$

benutzt. Diese Beziehung wird in Abschnitt 4.2.2.1 hergeleitet.

#### 3.1.4.1 Effektive AC-Stoßfrequenz

Die effektive Stoßfrequenz ist sowohl von der Temperatur als auch von der Photonenfrequenz abhängig. Aufgrund dieser Frequenzabhängigkeit soll die effektive Stoßfrequenz auch als effektive AC(Alternating Current)-Stoßfrequenz bezeichnet werden. Die effektive Stoßfrequenz bestimmt sich aus der interpolierten totalen Absorptionsrate. Sie besitzt damit Gültigkeit für kalte sowie für heiße Materialien. Es gilt

$$\nu_{eff}(T,\omega) = 2\sqrt{2\pi} \cdot me^4 \cdot \frac{Zn_e}{p_{th}^3} \ln\left[1 + \frac{1.32}{\sqrt{2\pi}} \left(\frac{p_{th}^3}{Ze^2m^2\tilde{\omega}}\right)^{2/3}\right] \cdot FF(T,\hbar\omega) \quad (3.25)$$

mit  $\tilde{\omega} = max(\omega, \omega_p).$ 

In Abbildung 3.5 ist die interpolierte Stoßfrequenz 3.25 sowie die Grenzfälle für langsame und schnelle Elektronen entsprechend Gleichung 3.20 und 3.22 bei einer Photonenenergie von 38 eV in Abhängigkeit von der Temperatur dargestellt. Dies gibt einen Eindruck davon, wie die interpolierte Stoßfrequenz (rote



Abbildung 3.5: Interpolierte Stoßfrequenz 3.25 (rote gestrichelte Kurve) für langsame und schnelle Elektronen in Abhängigkeit von der Temperatur der Elektronen. Die Photonenenergie beträgt 38 eV. Zudem sind die Grenzfälle sehr schneller (blaue Kurve) und sehr langsamer (grüne Kurve) Elektronen eingezeichnet. Die Interpolation stimmt in ihrem asymptotischen Verhalten gut mit diesen Grenzfällen überein.

gestrichelte Kurve) die Ergebnisse für langsame (blaue Kurve) und schnelle (grüne Kurve) Elektronen miteinander verbindet.

In dem dreidimensionalen Graphen 3.6 ist die effektive Stoßfrequenz 3.25 gegen die Temperatur und gegen die Photonenfrequenz aufgetragen. Es zeigt sich, dass für Temperaturen, die kleiner als die Fermi-Temperatur sind  $(T < T_F)$ und für Photonenenergien, die kleiner als die Fermi-Energie sind  $(\hbar\omega < \epsilon_F)$ , die Stoßfrequenz linear für  $T \to 0$  und  $\hbar\omega \to 0$  abfällt. Dieses Absinken der Stoßfrequenz wird durch die Entartung des Elektronengases hervorgerufen. Für  $\hbar\omega = \epsilon_F$  und T = 0 erreicht die Stoßfrequenz ein Maximum. Für eine detailliertere Betrachtung von Abbildung 3.6 sollen zwei Schnitte durch den Graphen diskutiert werden.

#### 3.1.4.1.1 Temperaturabhängigkeit der effektiven Stoßfrequenz

In Abbildung 3.7 ist Temperaturabhängigkeit der effektiven Stoßfrequenz für drei verschiedene Photonenenergien (1 eV, 10 eV, 38 eV) gezeigt. Für optische Photonen ( $\hbar\omega \approx 1 eV$ ) steigt die Stoßfrequenz aufgrund des Pauli-Blockings linear mit der Temperatur an, bis die Fermi-Temperatur erreicht ist. Für  $T > T_F$ sind alle Elektronenzustände, auch die innerhalb der Fermikugel, nur partiell besetzt und können zur Stoßrate beitragen. Für  $T >> T_F$  fällt diese mit steigender Elektronengeschwindigkeit, entsprechend dem Spitzer-Ergebnis, mit

#### 3.1 Vielteilchensystem



Abbildung 3.6: Effektive Stoßfrequenz 3.25 aufgetragen gegen Photonenenergie und Elektronen-Temperatur. Für  $T < T_F$  und  $\hbar \omega < \epsilon_F$  ruft das Pauli-Blocking im Fermigas ein lineares Absinken der Stoßfrequenz für  $T \to 0$  und  $\hbar \omega \to 0$ hervor. Das Maximum der Stoßfrequenz wird bei  $\hbar \omega = \epsilon_F$  und T = 0 erreicht.

 $\nu_{eff}(T,\omega) \propto T^{-3/2}$  ab.

Die Situation für Photonenenergien, die größer als die Fermi-Energie sind, ist anders. In diesem Fall können bereits bei T = 0 alle Elektronen ein Photon absorbieren. In diesem Fall ist die Stoßfrequenz für  $T < T_F$  nahezu konstant und fällt erst für  $T > T_F$  deutlich ab.

Der Hochtemperatur-Limes zeigt die Stoßfrequenz das charakteristische  $T^{-3/2}$ -Verhalten für alle Photonenenergien.

#### 3.1.4.1.2 Frequenzabhängigkeit der effektiven Stoßfrequenz

In Abbildung 3.8 ist die effektive Stoßfrequenz gegen die Photonenenergie bei Raumtemperatur dargestellt. Es zeigt sich, dass für  $\omega > \omega_p$  die Stoßfrequenz mit  $\omega^{-2/3}$  abfällt. für Photonenenergien  $\epsilon_F < \hbar\omega < \hbar\omega_P$  bleibt sie konstant, während sie für  $\hbar\omega < \epsilon_F$  aufgrund des Pauli-Blockings linear abfällt.

Bei  $\hbar\omega = 0$  erreicht die effektive Stoßfrequenz einen endlichen temperaturabhängigen Wert  $\nu_{eff}(T, \hbar\omega = 0)$ . Bei Raumtemperatur beträgt diese statische effektive Stoßfrequenz in Aluminium  $\nu_{eff}^{DC}(293K) = 2.65 \cdot 10^{13}/s$ . Dieser statischen effektiven Stoßfrequenz  $\nu_{eff}^{DC}(T)$  lassen sich wichtige Materialeigenschaften zuordnen, die im Folgenden diskutiert werden sollen.



Abbildung 3.7: Temperaturabhängigkeit der Stoßfrequenz für 1 eV-Photonen, 10 eV-Photonen und VUV-Photonen (38 eV). Während für  $T < T_F$  die Stoßfrequenz für optische Photonen aufgrund des Pauli-Blockings für  $T \rightarrow 0$  abfällt, bleibt sie für VUV-Photonen unterhalb der Fermi-Temperatur nahezu konstant. Dabei erreicht die Stoßfrequenz bei Photonen mit Energien nahe der Fermi-Energie bei T=0 ein Maximum. Für Temperaturen  $T > T_F$  fällt die Stoßfrequenz für alle Photonenergien ab. Im Fall hoher Temperaturen  $(T >> T_F)$  nähern sich die Kurven für die verschiedenen Photonenergien immer mehr an.



Abbildung 3.8: Stoßfrequenz in Abhängigkeit von der Photonenenergie bei Raumtemperatur (293 K). Für  $\omega > \omega_p$  fällt die Stoßfrequenz mit  $\omega^{-2/3}$  ab, für Photonenenergien  $\epsilon_F < \hbar\omega < \hbar\omega_p$  bleibt sie konstant und für  $\hbar\omega < \epsilon_F$  fällt sie aufgrund des Pauli-Blockings ab.

#### 3.1 Vielteilchensystem

#### 3.1.4.2 Effektive DC-Stoßfrequenz

Die effektive Stoßfrequenz hat bei  $\hbar\omega = 0$  die physikalische Bedeutung eines Reibungsterms in einem Transportprozess im Festkörper. Die Reibung ist im Festkörper für die Wärmeleitfähigkeit und die Gleichstromleitfähigkeit verantwortlich. Sie ist unabhängig von einem äußeren elektromagnetischen Feld und wird daher als DC(Direkt Current)-Stoßfrequenz bezeichnet. In Gleichung 3.25 muss im Grenzfall  $\hbar\omega \to 0$  im Logarithmus die Photonenfrequenz durch die Plasmafrequenz ersetzt werden. Im Grenzfall  $z = \hbar\omega/k_BT \to 0$  erhält man für den Fermi-Korrektur-Faktor.

$$FF(T, \hbar\omega \to 0) \approx \frac{3\sqrt{\pi}}{4} \cdot \left(\frac{T}{T_F}\right)^{3/2} \cdot \ln\left(\frac{1+e^y}{1+e^y(1-z)}\right) / (1-(1-z))$$
 (3.26)

 $\Rightarrow$ 

$$FF(T, \hbar\omega \to 0) \approx \frac{3\sqrt{\pi}}{4} \cdot \left(\frac{T}{T_F}\right)^{3/2} \cdot \ln\left(1 + \frac{ze^y}{1 + e^y}\right)/z$$



Abbildung 3.9: DC-Stoßfrequenz von Silber in Abhängigkeit von der Temperatur in Kelvin. Die schwarze Kurve zeigt die DC-Stoßfrequenz die sich aus Gleichung 3.27 ergibt. Die rote Kurve zeigt dagegen die DC-Stoßfrequenz, die sich aus experimentellen Daten für den spezifischen Widerstand bestimmt (Ashcroft und Mermin, 2001). Bei Raumtemperatur ergibt sich aus dem Modell eine DC-Stoßfrequenz von  $\nu_{eff}^{DC}(293K, Ag) = 2.67 \cdot 10^{13}/s$ . Es zeigt sich eine gute Übereinstimmung zwischen Modell und Experiment.



Abbildung 3.10: DC-Stoßfrequenz von Gold aufgetragen gegen die Temperatur in Kelvin. Die schwarze Kurve zeigt die DC-Stoßfrequenz, die sich aus dem Modell ergibt und die rote Kurve zeigt die DC-Stoßfrequenz, die sich aus experimentellen Daten ermitteln lässt (Ashcroft und Mermin, 2001). Bei Raumtemperatur ergibt sich aus dem Modell eine DC-Stoßfrequenz von  $\nu_{eff}^{DC}(293K, Au) = 2.70 \cdot 10^{13}/s$ . Es zeigt sich eine gute Übereinstimmung zwischen Modell und Experiment.

was für sehr kleine  $z (y \to +\infty)$  auf

$$FF(T, \hbar\omega \to 0) \approx \frac{3\sqrt{\pi}}{4} \cdot \left(\frac{T}{T_F}\right)^{3/2}$$

führt. Für die DC-Stoßfrequenz folgt damit für kleine Temperaturen

$$\nu_{eff}^{DC}(T) = 1.44 \cdot \frac{me^2}{\hbar^3} \cdot \frac{k_B T}{n_i^{1/3}}.$$
(3.27)

Diese DC-Stoßfrequenz kann für verschiedene Materialien und Temperaturen mit experimentellen Werten, die sich aus der Gleichstromleitfähigkeit und der Wärmeleitfähigkeit ergeben, verglichen werden. Dieser Vergleich ist für den Fall von Silber in Abbildung 3.9 und für Gold in Abbildung 3.10 in Abhängigkeit von der Temperatur dargestellt. Die experimentellen Daten sind aus Ashcroft und Mermin (2001) entnommen. Die Ionendichte  $n_i$  beträgt in Silber  $n_i(Ag) = 5.86 \cdot 10^{22}/cm^3$  und in Gold  $n_i(Au) = 5.90 \cdot 10^{22}/cm^3$ .

Die schwarze Kurve ist jeweils die aus dem Modell ermittelte DC-Stoßfrequenz entsprechend Gleichung 3.27. Die rote Kurve ergibt sich aus der Gleichstromleitfähigkeit mit einem gemessenen spezifischen Widerstand (Ashcroft und Mermin, 2001). Bei Raumtemperatur ergibt sich die berechnete DC-Stoßfrequenz

#### 3.1 Vielteilchensystem

in Silber zu  $\nu_{eff}^{DC}(293K, Ag) = 2.67 \cdot 10^{13}/s$  und in Gold zu  $\nu_{eff}^{DC}(293K, Au) = 2.70 \cdot 10^{13}/s$ . In beiden Fällen zeigt sich eine überraschend gute Übereinstimmung der DC-Stoßfrequenzen mit den entsprechenden experimentellen Werten. Dies ist ein unerwartetes Ergebnis, da keine Festkörpereigenschaften, die auf die Periodizität des Gitters zurückzuführen sind, im Modell berücksichtigt sind. Es scheint, dass das hier entwickelte Modell nicht nur für Absorptionsprozesse anwendbar ist, sondern auch für Transportprozesse im Festkörper ( $\hbar\omega \rightarrow 0$ ) qualitativ angewendet werden kann. Der Grund für dieses überraschende Ergebnis könnte darin liegen, dass in Transport- und in Absorptionsprozessen vermutlich der dominierende Stoßprozess sowohl in kalten als auch in heißen Materialien zwischen Elektronen und Ionen stattfindet und somit die theoretische Basis der Bremsstrahlung (mit  $\hbar\omega \neq 0$  und  $\hbar\omega \rightarrow 0$ ) angewendet werden kann.

# 4 Makroskopischer Absorptionskoeffizient

In diesem Kapitel sollen makroskopische Größen betrachtet und mit den mikroskopischen Ausdrücken aus Kapitel 2 und 3 in Beziehung gesetzt werden. Dazu werden zunächst die optischen Konstanten im Medium diskutiert und ein Ausdruck für den makroskopischen Absorptionskoeffizienten abgeleitet. Als weiterer Schritt wird mittels des Drude-Sommerfeld-Modells die Grundgröße Stoßfrequenz eingeführt. Es zeigt sich, dass im Relaxationsbereich  $\nu_{Stoß} << \omega$ die effektiven Stoßfrequenz aus Kapitel 3 der Stoßfrequenz aus dem Drude-Sommerfeld-Modell entspricht. Im Fall kleiner Photonenfrequenzen kann die Situation  $\nu_{Stoß} >> \omega$  eintreten. Hier führen die Kramers-Kronig-Relationen auf natürliche Weise zu einer obere Grenze des Absorptionskoeffizienten. Die allgemeine Formel für den Absorptionskoeffizienten ergibt sich schließlich aus der Drude-Sommerfeld-Beschreibung unter Benutzung der mikroskopischen effektiven Stoßfrequenz  $\nu_{eff}(T, \omega)$ . Des Weiteren werden neben der Absorption auch die Transmission durch ein Medium und die Reflexion an der Oberfläche diskutiert.

Das Hauptaugenmerk dieser Arbeit gilt der Absorption durch inverse Bremsstrahlung. Die Absorption durch Ionisation gebundener Elektronen wurde bisher völlig außer Acht gelassen, obwohl diese in Hoch-Z-Materialien bei Photonenenergien jenseits der Ionisierungsschwellen den Hauptbeitrag zur Absorption liefern können. Deshalb wird kurz diskutiert, wie die Photoionisation in das Absorptionsmodell integriert werden kann.

# 4.1 Optische Konstanten

Ziel ist es, das neue Absorptionsmodell in einen hydrodynamischen Code zu integrieren. In dem Code werden die Maxwell'schen Gleichungen explizit gelöst. Deshalb soll die gemittelte totale Absorptionsrate mit den makroskopischen optischen Konstanten in Beziehung gesetzt werden.

### 4.1.1 Grundgleichungen der Elektrodynamik

Für das elektrische Feld  $\vec{E}(x,t)$  einer ebenen Welle im Medium gilt

$$\vec{E}(x,t) = \vec{E}_0 \exp\{i(kx - \omega t)\},$$
(4.1)

wobei k die Wellenzahl im Medium,  $\omega$  die Frequenz eines äußeren elektromagnetischen Feldes und  $E_0$  die Amplitude des elektrischen Feldes ist. Für die Maxwellgleichungen im Metall gilt

$$\vec{\nabla} \times \vec{E} + \frac{1}{c} \frac{\partial \vec{B}}{\partial t} = 0, \qquad (4.2)$$

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{B} = 0, \tag{4.3}$$

$$\vec{\nabla} \times \vec{B} - \frac{1}{c} \frac{\partial \vec{E}}{\partial t} = \frac{4\pi}{c} \vec{j},$$
(4.4)

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{E} = 4\pi \rho_{ext},\tag{4.5}$$

wobei im Metall die Polarisierbarkeit und die Magnetisierung vernachlässigt wird, so dass gilt  $\vec{D} = \vec{E}$  und  $\vec{H} = \vec{B}$ ; außerdem wird die Ladungsdichte im Medium  $\rho_{ext} \equiv 0$  gesetzt. Für die ebene Welle 4.1 ergibt sich hieraus die Wellengleichung

$$k^{2}\vec{E} = \frac{\omega^{2}}{c^{2}}\vec{E} + \frac{4\pi i\omega}{c^{2}}\vec{j}.$$
 (4.6)

Die Energie, die pro Zeiteinheit durch ein bestimmtes Volumen transportiert wird, ist durch den Poynting-Vektor gegeben

$$\vec{S} = \frac{c}{4\pi} \left( \vec{E} \times \vec{B} \right). \tag{4.7}$$

Als weitere makroskopische Gleichung wird das Ohmsche Gesetz benutzt. Es postuliert einen linearen Zusammenhang zwischen Strom und elektrischem Feld

$$\vec{j} = \hat{\sigma}\vec{E} \tag{4.8}$$

mit der komplexen Leitfähigkeit  $\hat{\sigma} = \sigma_1 + i\sigma_2$ .

Setzt man Gleichung 4.8 in die Wellengleichung 4.6 ein, so ergibt sich die Dispersionsrelation zwischen Wellenzahl k und Frequenz  $\omega$  zu

$$\left(\frac{kc}{\omega}\right)^2 = 1 + \frac{4\pi i}{\omega}\hat{\sigma}(\omega) = \varepsilon(\omega) = \varepsilon_1 + i\varepsilon_2, \qquad (4.9)$$

wobei  $\varepsilon(\omega)$  die komplexe dielektrische Funktion ist. Setzt man die Dispersionsrelation in Gleichung 4.1 für eine ebene Welle ein, so erhält man den komplexen Brechungsindex  $\hat{N}$ .

$$\hat{N} = \sqrt{\varepsilon(\omega)} = n + i\kappa, \qquad (4.10)$$

mit dem reelle Brechungsindex n und dem Abschwächungskoeffizienten  $\kappa$ . Für den Realteil der dielektrischen Funktion ergibt sich damit

$$\varepsilon_1 = n^2 - \kappa^2 \tag{4.11}$$

und für den Imaginärteil der dielektrischen Funktion folgt

$$\varepsilon_2 = 2n\kappa = \frac{4\pi}{\omega}\sigma_1. \tag{4.12}$$

Für das elektrische Feld einer ebenen Welle 4.1 folgt damit

$$\vec{E}(x,t) = \vec{E}_0 \exp\left\{\frac{i\omega n}{c}x - i\omega t\right\} \cdot \exp\left\{-\frac{\omega\kappa}{c}x\right\}.$$
(4.13)

Der zweite Exponent beschreibt hier die Dämpfung der Welle im Medium. Die Intensität der elektromagnetische Welle bestimmt sich aus dem Poyntingvektor, es gilt

$$I(x,t) = \left\langle \left| \vec{S} \right| \right\rangle \tag{4.14}$$

 $\Rightarrow$ 

$$I(x,t) = \frac{c}{8\pi} |E_0|^2$$
(4.15)

Mit Gleichung 4.13 folgt

$$I(x,t) = I_0 \cdot \exp\{-\alpha x\}$$
(4.16)

mit dem Absorptionskoeffizienten

$$\alpha = 2\frac{\kappa\omega}{c}.\tag{4.17}$$

Für den Imaginärteil der dielektrischen Funktion 4.12 folgt damit der Zusammenhang mit dem Absorptionskoeffizienten

$$\varepsilon_2 = 2n\kappa = \frac{c}{\omega} \cdot \alpha \cdot n. \tag{4.18}$$

# 4.1.2 Zusammenhang zwischen der totalen Absorptionsrate und den optischen Konstanten

Für die Energie-Erhaltung gilt

$$\frac{1}{4\pi} \left( \vec{E} \cdot \frac{\partial \vec{E}}{\partial t} + \vec{B} \cdot \frac{\partial \vec{B}}{\partial t} \right) + \frac{c}{4\pi} \vec{\nabla} \cdot \left( \vec{E} \times \vec{B} \right) + \vec{j} \cdot \vec{E} = 0.$$
(4.19)

#### 4 Makroskopischer Absorptionskoeffizient

Für die mittlere Energiedichte im Feld gilt

$$u = u_e + u_m = \frac{1}{8\pi} (\vec{E} \cdot \vec{E}) + \frac{1}{8\pi} (\vec{B} \cdot \vec{B}), \qquad (4.20)$$

wobe<br/>i $u_e$ die mittlere elektrische Energiedichte und<br/>  $u_m$ die mittlere magnetische Energiedichte im Feld ist. Der Ausdruck 4.19 der Energie<br/>-Erhaltung ergibt sich mit Gleichung 4.7 damit zu

$$\frac{du}{dt} + \nabla \cdot \vec{S} + \vec{j} \cdot \vec{E} = 0.$$
(4.21)

Wird die Energie des elektromagnetischen Feldes in Wärme umgewandelt, so folgt mit dem ohmschen Gesetz 4.8

$$\vec{j} \cdot \vec{E} = \hat{\sigma} \vec{E} \cdot \vec{E}. \tag{4.22}$$

Betrachtet man nur den Realteil des elektrischen Feldes  $\vec{E} = \vec{E}_0 cos(\omega t)$  so folgt für die zeitgemittelte Joule'sche Wärme

$$\left\langle \vec{j} \cdot \vec{E} \right\rangle = \sigma_1 \left\langle E^2 \right\rangle = \sigma_1 \frac{E_0^2}{2}.$$
 (4.23)

Dieser Ausdruck beschreibt den ohm'schen Energieverlust pro Einheitszeit und Einheitsvolumen und entspricht damit der absorbierten Leistungsdichte. Mit Gleichung 4.12 und 4.18 ergibt sich hieraus für den Zusammenhang mit dem Absorptionskoeffizienten

$$\left\langle \vec{j} \cdot \vec{E} \right\rangle = \left(\frac{cE_0^2}{8\pi}\right) \cdot n\alpha.$$
 (4.24)

Auf der anderen Seite entspricht die absorbierte Leistungsdichte der gemittelten Absorptionsrate für Photonen der Energie  $\hbar\omega$ 

$$\left\langle \vec{j} \cdot \vec{E} \right\rangle = \hbar \omega \cdot n_e \left\langle w_t \right\rangle.$$
 (4.25)

Für den Zusammenhang zwischen dem makroskopischen Absorptionskoeffizienten  $\alpha$  und der mikroskopischen totalen Rate  $\langle w_t \rangle$  folgt demnach

$$\alpha = \hbar \omega \cdot n_e \cdot \frac{\langle w_t \rangle}{c E_0^2 / 8\pi} \cdot \frac{1}{n}.$$
(4.26)

Hier steht n für den Realteil des Brechungsindex. Es zeigt sich, dass der Absorptionskoeffizient von der Dichte, der Temperatur und dem Ionisierungsgrad sowie von der äußeren Photonenenergie abhängt.

# 4.2 Drude-Sommerfeld-Modell

Die inverse Bremsstrahlung kann mittels einer effektiven Stoßfrequenz  $\nu_{eff}(T, \omega)$  beschrieben werden. Im Drude-Sommerfeld-Modell ist die für diese Arbeit besonders relevante Grundgröße ebenfalls eine Stoßfrequenz. In diesem Abschnitt soll gezeigt werden, wie diese beiden Stoßfrequenzen zusammenhängen.

# 4.2.1 Bewegungsgleichung eines quasifreien Elektrons

Transport und Absorption von Licht in Metallen lassen sich mit dem Drude-Sommerfeld-Modell beschreiben, siehe auch Ashcroft und Mermin (2001). In diesem Modell werden alle freien Elektronen im Metall als ein fermientartetes Gas behandelt. Liegt an diesem Gas ein Feld der Stärke  $\vec{E}(t) = \vec{E}_0 \exp\{-i\omega t\}$ an, so gilt für jedes einzelne Elektron die Bewegungsgleichung

$$-i\omega m\vec{v} + \nu_{StoB}m\vec{v} = -e\vec{E},\tag{4.27}$$

wobei  $\vec{v}$  die Geschwindigkeit des Elektrons ist und  $\nu_{Stoß}$  die so genannte Stoßfrequenz ist. Für die Stromdichte ergibt sich

$$\vec{j} = -en_e \vec{v} = \frac{ie^2 n_e}{m\left(\omega + i\nu_{Stob}\right)} \vec{E} = \frac{i\omega_p^2}{4\pi\left(\omega + i\nu_{Stob}\right)},\tag{4.28}$$

wobei  $\omega_p = \sqrt{4\pi e^2 n_e/m}$  die Plasmafrequenz ist. Die Stromdichte wird durch die Lichtwelle im Medium in Form transversaler Oszillationen der freien Elektronen erzeugt.

# 4.2.2 Zusammenhang zwischen Stoßfrequenz und dielektrischer Funktion

Mit Ausdruck 4.28 für den Strom folgt aus Gleichung 4.6 - 4.9

$$\varepsilon(\omega) = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2} \frac{1}{1 + i\nu_{Stob}/\omega}.$$
(4.29)

Der Realteil der dielektrischen Funktion bestimmt die Reflektivität eines Metalls, es gilt

$$\varepsilon_1(\omega) = n^2 = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2 + \nu_{StoB}^2}.$$
(4.30)

41

#### 4 Makroskopischer Absorptionskoeffizient

Der Imaginärteil der dielektrischen Funktion hingegen ist für die Absorption im Medium verantwortlich

$$\varepsilon_2(\omega) = \frac{\nu_{StoB}}{\omega} \frac{\omega_p^2}{\omega^2 + \nu_{StoB}^2}.$$
(4.31)

Mit Gleichung 4.18 folgt hieraus für den Absorptionskoeffizienten

$$\alpha = \frac{\nu_{StoB}}{c} \frac{\omega_p^2}{\omega^2 + \nu_{StoB}^2} \frac{1}{n}.$$
(4.32)

Dieser Ausdruck soll als volle Drude-Sommerfeld-Formel für den Absorptionskoeffizienten bezeichnet werden. n ist hierbei der Realteil des Brechungsindex und folgt aus Gleichung 4.30.

#### 4.2.2.1 Relaxationsbereich $\nu_{Stob} \ll \omega$

Im Fall  $\nu_{Stob} \ll \omega$  (Relaxationsbereich) vereinfacht sich Gleichung 4.32 auf

$$\alpha = \frac{\nu_{StoB}}{c} \frac{\omega_p^2}{\omega^2} \cdot \frac{1}{n} \tag{4.33}$$

Für den Realteil des Brechungsindex gilt in diesem Fall

$$n = \sqrt{1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2}} \tag{4.34}$$

Dies entspricht der Situation der mikroskopischen Theorie der Photo-Absorption durch inverse Bremsstrahlung die in den Kapiteln 2 und 3 entwickelt wurde. Im Relaxationsbereich können deshalb die Ausdrücke für den Absorptionskoeffizienten 4.26 und 4.33 gleichgesetzt werden, und man erhält

$$\frac{\nu_{Stoß}}{c} \frac{\omega_p^2}{\omega^2} \cdot \frac{1}{n} = \frac{\hbar\omega n_e}{cE_0^2/8\pi} \langle w_t \rangle \cdot \frac{1}{n}.$$
(4.35)

Dies zeigt, dass die Stoßfrequenz des Drude-Sommerfeld-Modells mit der effektiven Stoßfrequenz 3.24 identisch ist

$$\nu_{StoB} = \frac{m\hbar}{e^2} \frac{\omega^3}{\omega_p^2} \langle w_t \rangle \, n_e \frac{8\pi}{E_0^2} = \frac{m\hbar}{e^2} \frac{2\omega^3}{E_0^2} \cdot \langle w_t \rangle = \nu_{eff}(T,\omega). \tag{4.36}$$

#### 4.2.2.2 Hagen-Rubens-Bereich $\nu_{Stob} >> \omega$

Der Bereich  $\nu_{Stoß} > \omega$  muss gesondert betrachtet werden, denn gemäß Gleichung 4.33 würde  $\alpha$  mit steigendem  $\nu_{Stoß}$  unbegrenzt wachsen. Grundlegende Uberlegungen zeigen, dass es eine obere Grenze für den Absorptionskoeffizienten gibt. Die globale Bedingung, die erfüllt sein muss, ist die Kramers-Kronig-Relation. Die Kramers-Kronig-Relation beschreibt den Zusammenhang zwischen dem Real- und dem Imaginärteil der analytischen dielektrischen Funktion, siehe auch Jackson (1982). Für den Realteil der dielektrischen Funktion gilt

$$\Re\varepsilon(\omega) = 1 + \frac{2}{\pi} P \int_0^\infty d\omega' \frac{\omega' \Im\varepsilon(\omega')}{\omega'^2 - \omega^2}.$$
(4.37)

Der Imaginärteil der dielektrischen Funktion bestimmt sich nach

$$\Im\epsilon(\omega) = -\frac{2\omega}{\pi} P \int_0^\infty d\omega' \frac{\Re\epsilon(\omega') - 1}{\omega'^2 - \omega^2}.$$
(4.38)

Hierbei bezeichnet P das Hauptwertintegral.

Aus der Kramer-Kronig-Relation lassen sich Summenregeln ableiten. Eine Summenregel beschreibt die Abhängigkeit der Plasmafrequenz vom Imaginärteil der dielektrischen Funktion

$$\omega_p^2 = \int_0^\infty \omega \cdot \Im \epsilon(\omega) d\omega. \tag{4.39}$$

Diese Bedingung ist erfüllt, wenn man den vollen Ausdruck der dielektrische Funktion

$$\varepsilon(\omega) = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2} \frac{1}{(1 + i\nu_{StoB}/\omega)}$$

entsprechend

$$\varepsilon_2(\omega) = \Im \varepsilon(\omega) = \frac{\nu_{Stob}}{\omega} \frac{\omega_p^2}{\omega^2 + \nu_{Stob}^2}$$

in Gleichung 4.39 einsetzt.

# 4.2.3 Allgemeiner Zusammenhang zwischen Absorptionskoeffizient und Stoßfrequenz

Der Absorptionskoeffizient berechnet sich folglich für alle Photonenfrequenzen nach Gleichung 4.32

$$\alpha = \frac{\nu_{eff}(T,\omega)}{c} \frac{\omega_p^2}{\omega^2 + (\nu_{eff}(T,\omega))^2} \frac{1}{\sqrt{1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2 + (\nu_{eff}(T,\omega))^2}}},$$
(4.40)

wobei  $\nu_{eff}(T, \omega)$  entsprechend nach Gleichung 4.36 bestimmt wird. Auf diese Weise liegt im Relaxationsbereich ( $\nu_{Stob} \ll \omega$ ) eine Übereinstimmung mit der Ableitung des Absorptionskoeffizienten  $\alpha$  aus der mikroskopischen Theorie

#### 4 Makroskopischer Absorptionskoeffizient

vor. Im Hagens-Rubens-Bereich ( $\nu_{Stoß} > \omega$ ) ist dagegen die Sättigung von  $\alpha$  erfüllt, die aufgrund der Kramers-Kronig-Relation gefordert ist. Der maximale Wert des Absorptionskoeffizienten bestimmt sich zu

$$\alpha_{max} = \frac{\omega_p^2}{2c\omega} \cdot \frac{1}{n}.$$

# 4.3 Optische Eigenschaften von Metallen

Ein Ziel dieser Arbeit ist es, die ersten Transmissions-Experimente mit FLASH zu interpretieren, und eine Aussage für zukünftige Experimente zu geben. Im Vordergrund steht hierbei die Temperaturabhängigkeit der Transmission. Wie sich herausstellt, geht die Temperatur nicht nur explizit über  $\nu_{eff}(T, \omega)$  in die Ergebnisse ein, sondern ganz wesentlich auch über die Temperaturabhängigkeit der Ionisation  $Z_{eff}(T)$  des geheizten Materials. Deshalb soll hier auch die Abhängigkeit der Transmission vom Ionisierungsgrad näher untersucht werden. Die Transmission ist eng mit der Absorption verknüpft. Deshalb wird zunächst der Absorptionskoeffizient näher betrachtet.

### 4.3.1 Absorptionskoeffizient

Abbildung 4.1 zeigt den Absorptionskoeffizienten  $\alpha$  in Abhängigkeit von der Temperatur und der Photonenenergie im Fall von Aluminium. Für VUV-Photonen wird die maximale Absorption bei T = 0 erreicht. Für 38 eV-Photonen beträgt der maximale Absorptionskoeffizient  $\alpha(T = 0) \approx 4.2 \cdot 10^4/cm$ . Betrachtet man die Abhängigkeit von der Photonenfrequenz, so zeigt sich, dass der Absorptionskoeffizient in der Nähe der Plasmafrequenz stark ansteigt. Der Grund liegt in der Abhängigkeit des Absorptionskoeffizienten von dem Realteil des komplexen Brechungsindex n, für den gilt

$$n = \sqrt{1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2 + (\nu_{eff}(T,\omega))^2}}$$

Für  $\omega_p > \sqrt{\omega^2 + (\nu_{eff}(T, \omega))^2}$  wird der Brechungsindex imaginär, und es tritt starke Reflexion ein.

4.3 Optische Eigenschaften von Metallen



Abbildung 4.1: Absorptionskoeffizient in Abhängigkeit von der Temperatur und der Photonenenergie in Aluminium. Bei Photonenenergien  $\hbar\omega \leq \hbar\omega_p$  wird das Medium überdicht, und die elektromagnetische Welle fällt im Medium exponentiell ab. In diesem Fall ist die Absorption sehr groß, deshalb wurde bei  $\alpha = 1 \cdot 10^5/\text{cm}$  der Plot abgeschnitten, wodurch das Plateau hervorgerufen wird. Für VUV-Photonen wird die maximale Absorption bei T = 0 erreicht. Für 38 eV Photonen ergibt sich bei T = 0 in Aluminium für den Absorptionkoeffizienten ein Wert von  $\alpha \approx 4.2 \cdot 10^4/\text{cm}$ .

### 4.3.2 Multiple Transmission und Reflexion

Die Transmission TRA und die Reflexion R an der Oberfläche eines Mediums bestimmt sich aus den Fresnel'schen Formeln, siehe Born und Wolf (1980). Die Reflexion an einem Medium im Vakuum ergibt sich dabei aus dem Verhältnis zwischen dem zeitgemittelten Energiefluß  $S_r$ , der an der Oberfläche reflektiert wird und dem einfallenden Energiefluß  $S_e$ 

$$R = \frac{S_r}{S_e} = \left| \frac{1 - \hat{N}}{1 + \hat{N}} \right|^2 = \frac{(1 - n)^2 + \kappa^2}{(1 + n)^2 + \kappa^2}$$
(4.41)

Die Transmission  $T_d$  durch eine Schicht der Dicke d bestimmt sich aus der Absorption  $A_d$  in dieser Schicht. Es gilt

$$A_d = 1 - \exp\{-\alpha d\}.$$
 (4.42)

Daraus folgt

$$T_d = 1 - A_d = \exp\{-\alpha d\}$$
 (4.43)

45

#### 4 Makroskopischer Absorptionskoeffizient

Fällt eine Lichtwelle aus dem Vakuum mit  $n_1 = 1$  senkrecht auf ein Medium (einfallende Intensität der Welle = 1), so wird ein Teil an der Oberfläche des Mediums mit  $n_2 = n$  reflektiert (reflektierter Intensität der Welle = R) während der restliche Teil der Welle durch das Medium transmittieren  $(1 - R)T_d$  kann. An der inneren Rückseite kann ein Teil der Welle aus dem Medium austreten  $((1 - R)^2T_d)$  und ein anderer Teil wird an dieser Fläche ins Medium zurück reflektiert  $((1 - R)RT_d)$ , wobei die Stärke der Reflexion Rgleich der an der Vorderseite ist. Auf diese Weise kommt es zu einer Mehrfach-Reflexion im Material, siehe auch Abbildung 4.2. Die an der Materialrückseite

$$n_{1} = 1 \qquad n_{2} = n \qquad n_{3} = 1$$

$$(1-R)^{2} R T_{d}^{2} (1-R) R T_{d}^{2} (1-R) R T_{d} \qquad (1-R)^{2} T_{d}$$

$$(1-R)^{2} R T_{d}^{2} (1-R) R T_{d}^{2} (1-R) R T_{d} \qquad (1-R)^{2} T_{d} (R T_{d})^{2}$$

$$T = (1-R)^{2} T_{d} (1+(R T_{d})^{2} + ... + 1/(1-R T_{d})^{2})$$

Abbildung 4.2: Schematische Darstellung der Mehrfach-Reflexion in einem Medium. R stellt den reflektierten Anteil und  $T_d$  den transmittierten Anteil der Strahlintensität durch eine Schicht der Dicke d dar. Die an der Rückseite des Mediums bestimmbaren Transmission setzt sich aus den einzelnen Teiltransmissionen zusammen.

messbare Transmission TRA setzt sich folglich aus allen Teiltransmissionen zusammen

$$TRA = (1-R)^2 T_d \left( 1 + (RT_d)^2 + \dots \right) = (1-R)^2 T_d / \left( 1 - (T_d R)^2 \right). \quad (4.44)$$

Insgesamt muss die Summe aus absorbierten, reflektierten und transmittierten Anteilen der elektromagnetischen Welle Eins ergeben.

#### 4.3.2.1 Temperaturabhängigkeit der Transmission

Die Absorption ist temperaturabhängig, folglich ergibt sich auch für die Transmission eine Abhängigkeit von der Temperatur. In Abbildung 4.3 ist die Transmission TRA entsprechend Gleichung 4.44 durch eine 50 nm dicke Aluminiumfolie gegen die Temperatur für 38 eV-Photonen aufgetragen, wobei die Mehrfachreflexionen im Target berücksichtigt werden. Für diese Photonenfrequenz ändert sich die Transmission in einen Temperaturbereich zwischen 0



Abbildung 4.3: Transmission TRA nach Gleichung 4.44 von 38 eV Photonen durch eine 50 nm dicke Aluminiumfolie in Abhängigkeit von der Temperatur. Die Transmissionsänderung in einem Temperaturbereich zwischen 0 < T < 100 eVbeträgt in diesem Fall nur ca. 15%.

eV und 100 eV nur um etwa 15%. Für Photonenfrequenzen, die näher bei der Plasmafrequenz liegen, zeigen sich jedoch wesentlich größere Transmissionsänderungen, wie in Abbildung 4.4 für den Fall von 20 eV-Photonen zu sehen ist. Die Transmissionsänderung in diesem Fall beträgt ca. 75% und ist damit



Abbildung 4.4: Transmission TRA durch eine 50 nm dicke Aluminiumfolie in Abhängigkeit von der Temperatur für Photonen mit einer Energie von 20 eV. Die Transmissionsänderung beträgt in diesem Fall ca. 75%.

#### 4 Makroskopischer Absorptionskoeffizient

wesentlich größer als im Fall von 38 eV-Photonen. Es muss jedoch beachtet werden, dass sich mit der Temperatur nicht nur die Transmission, sondern vor allem der Ionisierungsgrad im Medium ändert. Der Anstieg der Elektronendichte mit steigender Temperatur ist in Abbildung 4.3 und 4.4 nicht berücksichtigt. Die Abhängigkeit der Transmission vom Ionisierungsgrad wird in Abbildung 4.5 gesondert betrachtet.

In Kapitel 5 wird die Transmission mittels eines Computercodes bestimmt, der neben dem hier beschriebenen Absorptionsmodell auch die Ionisation und die hydrodynamische Entwicklung berücksichtigt. In diesem Code sind Temperatur und Ionisierungsgrad über Zustandsgleichungen verknüpft und die Transmission wird dort in Abhängigkeit von T und  $n_e(T)$  bestimmt.

# 4.3.3 Abhängigkeit der Transmission vom Ionisierungsgrad

In Abbildung 4.5 ist die Transmission TRA in Abhängigkeit vom Ionisierungsgrad in einer 50 nm Aluminiumfolie bei Raumtemperatur und 38 eV-Photonen dargestellt. Es zeigt sich die starke Abhängigkeit der Transmission von dem



Abbildung 4.5: Transmission TRA von 38 eV-Photonen durch eine 50 nm dicke Aluminiumfolie in Abhängigkeit vom Ionisierungsgrad. Es zeigt sich ein fast vollständiger Rückgang der Transmission bei einer Ionisierung zwischen der Anfangsionisierung  $Z_{eff} = 3$  und einer maximal möglichen Ionisierung von  $Z_{eff} = 13$ .

Ionisierungsgrad und die Transmission verschwindet bei Erreichen der maximal möglichen Ionisierung (Z = 13) fast vollständig. Die Abhängigkeit der Transmission von dem Ionisierungsgrad und der Temperatur wird in Kapitel 5 noch einmal aufgegriffen.

# 4.4 Photoionisation

Hier diskutieren wir kurz, wie auch Photoionisation mit in die Beschreibung der Photo-Absorption einbezogen werden kann. Bisher wurde nur die Kopplung einer elektromagnetischen Welle an freie Elektronen betrachtet. Sind die Photonenenergien so groß, dass ebenfalls gebundene Elektronen angeregt werden, so wird das Atom ionisiert. Der Photoionisationsprozess ist dann im allgemeinen der dominierenden Absorptionsprozess. In der dielektrischen Funktion muss neben dem Beitrag der freie Elektronen auch ein Beitrag der gebundenen Elektronen berücksichtigt werden. Eine einfache Darstellung der Photoionisation ist in einer Veröffentlichung von Krenz und Meyer-ter-Vehn (2005a) diskutiert. Es wird die Annahme gemacht, dass die Photoionisation einen fiktiven Photoionisationsstrom  $\vec{j_i}$  hervorruft. Dieser Strom wird zum Strom der freien Elektronen in Gleichung 4.21 addiert.

$$\left\langle \vec{j}_i \cdot \vec{E} \right\rangle = \hbar \omega \cdot n_{ion} \cdot \nu_{gf},$$
(4.45)

wobei  $n_{ion}$  die Ionendichte und  $\nu_{gf}$  die Rate der Photoionisation ist (gebundenfrei-Übergang). Die Rate der Photoionisation ergibt sich aus dem Produkt der Photonendichte  $N_{photon}$ , dem Wirkungsquerschnitt  $\sigma_{gf}$  eines gebundenfrei-Übergangs und der Lichtgeschwindigkeit c zu

$$\nu_{gf} = N_{photon} \cdot c \cdot \sigma_{gf}. \tag{4.46}$$

Die Photonendichte berechnet sich wie folgt aus der Intensität I des äußeren Feldes

$$N_{photon} = \frac{I}{c\hbar\omega}.$$
(4.47)

Der Wirkungsquerschnitt  $\sigma_{gf}$  für einen Übergang von einem gebundenen Zustand in einen freien Zustand ist bei Atzeni und Meyer-ter-Vehn (2002) zu finden. Es zeigt sich, dass  $\sigma_{gf} \propto (\hbar \omega)^{-3}$  ist.

Für die gesamte dielektrische Funktion mit dem Betrag von freien und gebundenen Elektronen ergibt sich damit

$$\hat{\varepsilon} = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2} \frac{1}{(1 + i\nu_{eff}(T, \omega)/\omega)} + i\frac{c}{\omega} n_{ion} \sigma_{gf} \Theta \left(\hbar\omega - E_{ion}\right), \qquad (4.48)$$

wobei  $\Theta$  die Stufenfunktion und  $E_{ion}$  die gebunden-frei Ionisationsenergie ist.

#### 4 Makroskopischer Absorptionskoeffizient

### 4.4.1 Starke elektromagnetische Felder

Ein elektromagnetisches Feld mit  $\vec{E}_{\omega} = \vec{E}_0 \cdot \exp\{i\omega t\}$  regt die freien Elektronen zu Schwingungen an. Die Anregungsenergie  $U_p$  der freien Elektronen beträgt

$$U_p = \frac{e^2 E_0^2}{4m\omega^2} = \frac{2\pi e^2}{mc} \cdot \frac{I}{\omega^2},$$
(4.49)

wobei  $I = c |E_0|^2 / 8\pi$  die Laserintensität ist. Im Fall  $U_p \ll \hbar\omega$  darf das äußere elektromagnetische Feld als kleine Störung behandelt werden, während bei  $U_p \gg \hbar\omega$  sich das elektrische Feld quasistatisch verhält, siehe Chin et al. (2000). Ist die Ionisierungsenergie eines gebundenen Elektrons  $E_{ion}$  größer als die Photonenenergie und größer als die Anregungsenergie ( $U_p \ll \hbar\omega \ll E_{ion}$ ), so kann ein gebundenes Elektron nur durch eine Multi-Photon-Absorption in einen freien Zustand übergehen. Der Zusammenhang zwischen Ionisierungsenergie und Anregungsenergie wird durch den Keldysh-Parameter  $\gamma$  beschrieben, siehe auch Keldysh (1965)

$$\gamma = \sqrt{\frac{E_{ion}}{2U_p}} \tag{4.50}$$

Ist  $\gamma > 1$ , so wird die Photoionisation vor allem durch Multi-Photon-Prozesse hervorgerufen. Im Fall  $\gamma < 1$  ist dagegen die Tunnelionisation für die Photoionisation verantwortlich. In schwachen elektromagnetischen Feldern können die Multi-Photon-Prozesse vernachlässigt werden. Dies gilt im Fall einer Wellenlänge von  $\lambda \approx 30nm$  und  $E_{ion} \approx E_H \approx 27eV$  für Intensitäten  $I < \hbar \omega / (r_e \lambda t_0) \approx$  $1 \cdot 10^{17} W/cm^2$ , wobei hier  $r_e = e^2/mc^2 \approx 3 \cdot 10^{-13} cm$  der klassische Elektronenradius und  $t_0$  die atomare Zeiteinheit ist.

Die Multi-Photon-Prozesse in starken elektromagnetischen Feldern brauchen folglich im Rahmen dieser Arbeit nicht behandelt werden. Für die Beschreibung von Multi-Photon-Prozessen wird an dieser Stelle auf die Literatur von Fedorov (1997) und Reiss (1980) verwiesen.
In diesem Kapitel werden die ersten Transmissions-Experimente an dünnen Folien mit FLASH mittels eines Computercodes simuliert. Im Vordergrund steht die Überprüfung der Übereinstimmung zwischen Code und Experiment. Zudem sollen Aussagen für zukünftige Experimente getroffen werden. Die Simulationen werden mit dem eindimensionalen Computercode MULTIfs-A durchgeführt. MULTIfs-A basiert auf dem hydrodynamischen Zwei-Temperaturen-Code MULTIfs von Eidmann et al. (2000), der sich besonders für kurze Pulse eignet, und auf dem in den Kapiteln 2 - 4 entwickelten Absorptionsmodell. Im Hinblick auf zukünftige Experimente werden die Heizprozesse sowie die hydrodynamische Expansion der Folien diskutiert. Experimentelle Daten mit VUV-Photonen existieren bisher nur für kalte Targets. Diese werden mit dem hier vorgestellten Modell verglichen. Des Weiteren wird die Nutzung der dünnen Folien als schnelle Schalter für VUV-Photonen vorgestellt.

# 5.1 Experimente mit FLASH

Diese Arbeit bezieht sich auf Experimente an dünnen Folien mit FLASH, für Details siehe Internetseite von FLASH (FLA) sowie Tagungsbeiträge von Sokolowski-Tinten (2006) und Sobierajski (2006). Bei ersten Messungen wurde die Transmission der FEL-Strahlung durch verschiedene Festkörper gemessen. Die Ergebnisse sollen zunächst kurz vorgestellt werden.

Die ersten Ergebnisse der Transmissionsmessung mit FLASH sind in Abbildung 5.1 dargestellt (Sokolowski-Tinten, 2006). Es wurde die Transmission durch eine 300 nm dicke Aluminiumfolie und durch eine 50 nm dicke Siliziumfolie bei den Strahlintensitäten  $I = 4 \cdot 10^{11} W/cm^2$  und  $I = 1 \cdot 10^{14} W/cm^2$ gemessen. Es zeigte sich, dass bei diesen Intensitäten die Transmission nahezu konstant bleibt, d.h. es ist noch keine Temperaturabhängigkeit der Transmission zu beobachten.

Hier entspricht  $I = 1 \cdot 10^{14} W/cm^2$  einem Fokusdurchmesser von 25  $\mu m$ . Die



Abbildung 5.1: Gemessene Transmission von 38 eV Photonen durch eine 300 nm dicke Aluminiumfolie und durch ein 50 nm dickes Siliziumtarget bei den Strahlintensitäten  $I = 5 \cdot 10^{11} W/cm^2$  und  $I = 1 \cdot 10^{14} W/cm^2$ . Es zeigt sich deutlich die Unabhängigkeit der Transmission bei diesen Strahlintensitäten.

niedrigere Intensität wurde durch Einsatz eines Filters erreicht. An einer zusätzlichen Fokussierung bis auf 1  $\mu m$  wird zur Zeit gearbeitet. Damit sollte eine Intensität von  $I = 1 \cdot 10^{17} W/cm^2$  erreichbar sein. Der Zusammenhang zwischen Intensität und Fokusdurchmesser ist in Abbildung 5.2 dargestellt. Die blaue Markierung bezieht sich auf den größte Laserintensität, die bei ersten Experimenten mit FLASH erreicht werden konnte.

# 5.2 Computercode

Der in dieser Arbeit verwendete Computercode MULTIfs-A ist eine Weiterentwicklung des eindimensionalen, hydrodynamischen Strahlungstransport Codes MULTIfs von Eidmann et al. (2000). MULTIfs baut auf den ursprünglichen Code MULTI von Ramis et al. (1988) auf und ist speziell für kurze Pulse entwickelt worden. Die neueste Version MULTIfs-A wurde im Rahmen dieser Arbeit entwickelt und enthält eine neue Photo-Absorptionsroutine, die auf dem Absorptionsmodell dieser Arbeit basiert. Die einzelnen Bausteine von MULTIfs-A sollen im Folgenden kurz erläutert werden.

### 5.2 Computercode



Abbildung 5.2: Die Fokussierung des VUV-FEL-Strahls ruft auf den Targetoberflächen unterschiedliche Intensitäten hervor. Die Strahlintensitäten beziehen sich dabei auf die FLASH-Parameter. Die bei den ersten Experimenten im Nov'05 maximal erreichte Intensität ergab sich bei einem Fokusdurchmesser von 25 µm zu I =  $1 \cdot 10^{14} W/cm^2$ . Bei zukünftigen Experimenten sind Fokusdurchmesser bis zu 1 µm und damit Intensitäten bis zu  $1 \cdot 10^{17} W/cm^2$  geplant.

### 5.2.1 MULTI

MULTI (**MULTI**group Radiation) basiert auf einem ein-Fluid und zwei-Temperaturen Modell und berücksichtigt sowohl elektronische Wärmeleitung als auch Multigroup Strahlungstransport. In dem Programm wird angenommen, dass sich das Medium in einem lokalen thermischen Gleichgewicht (LTE) befindet, es können jedoch auch Nicht-LTE-Eigenschaften der Materie behandelt werden. Für die Zustandsgleichungen und die Strahlungsopazitäten wurden ursprünglich tabellierte Daten aus der SESAME Datenbank (T-4 group, Los Alamos National Laboratory, 2000) verwendet. In der neuesten MULTI-Version besteht nun ebenfalls die Möglichkeit, die Zustandsgleichungen mit MPQeos von Kemp (1998) zu generieren, vergleiche mit Abschnitt 5.2.3. Der Code wurde für Laserpulse im Nanosekunden-Bereich entwickelt. Er ist in FORTRAN-77 programmiert und ist charakterisiert durch ebene Geometrie mit einer geschichteten Zellstruktur.

Es existiert eine gute Dokumentation von MULTI. Zudem ist das Programm in eine benutzerfreundliche graphische Oberfläche integriert. Diese graphische Version von MULTI ist frei im Web erhältlich (MUL).

### 5.2.2 MULTIfs

MULTIfs (**MULTI**group Radiation for femtosecond laserpulses) ist speziell für die Wechselwirkung von Materie mit ultrakurzen (fs) Pulsen entwickelt und unterscheidet sich von MULTI im Wesentlichen dadurch, dass die Maxwell-Gleichungen in einem steilen Gradientenplasma explizit gelöst werden, siehe Eidmann et al. (2000). Das Nichtgleichgewicht zwischen Elektronen und Ionen aufgrund der unterschiedlichen Relaxationszeiten ist bei diesen kurzen Pulsen von großer Bedeutung. Dies wird berücksichtigt, indem unterschiedliche Temperaturen und Zustandsgleichungen für Elektronen und Ionen benutzt werden. MULTIfs enthält das Eidmann'sche Absorptionsmodell, das in Kapitel 1 kurz angesprochen worden ist.

MULTIfs wurde im Rahmen dieser Arbeit von Prof. Ramis ebenfalls in die graphische Oberfläche von MULTI integriert. Die Strahlungsopazitäten werden in dem zusätzlichen Code SNOP von Eidmann (1994) berechnet und in MULTIfs genutzt, siehe hierzu auch Tsakiris und Eidmann (1987). Die Zustandsgleichungen für Elektronen und Ionen werden den SESAME-Tabelle entnommen. Mit MULTIfs lassen sich auch die optischen Eigenschaften wie Reflexion und Transmission an der Targetvorder- und Rückseite bestimmen. Die Propagation der elektromagnetischen Welle in einem absorbierenden, leitenden Medium ist auf der Basis nach Born und Wolf (1980) in MULTIfs integriert. Das absorbierende Medium wird dabei als eine  $2 \times 2$ -Matrix mit komplexen Einträgen beschrieben, siehe auch Krenz (2003). Diese komplexen Einträge sind zum Einen die komplexe Wellenzahl und zum Anderen die komplexe dielektrische Konstante.

### 5.2.3 MULTIfs-A

MULTIfs-A (**MULTI**group Radiation for **f**emto**s**econd laserpulses + **A**bsorption) enthält zusätzlich das in Kapitel 2 - 4 beschriebene Photo-Absorptionsmodell. Die für die Wärmeleitung benötigten Transport-Koeffizienten werden ebenfalls mit Hilfe des neuen Modells berechnet. Da das Modell keine freien Parameter beinhaltet, ist es als geschlossene Subroutine in MULTIfs implementiert. MULTIfs-A ist zusammen mit dem Opazitätencode SNOP in die graphische Oberfläche von MULTI integriert. Die Zustandsgleichungen werden mit Hilfe des Codes MPQeos von Kemp (1998) innerhalb der graphischen Oberfläche berechnet. Auf diese Weise kann MULTIfs-A direkt auf diese Daten zugreifen, und es ist folglich nicht mehr nötig, die SESAME-Tabellen zu verwenden. Mit MULTIfs-A lässt sich die Wechselwirkung zwischen einem kurzen Laserpuls mit beliebiger Photonenenergie und einem Plasma simulieren. Das bestrahlte Medium kann dabei mit jeder Anfangstemperatur vorliegen, so dass MULTIfs-A ebenfalls für die Berechnung von Pump-Probe-Experimenten herangezogen werden kann. Bei Pump-Probe-Experimenten kann der VUV-Strahl als Heizpuls benutzt werden (Pump-Pulse). Das geheizte Material kann dann entweder mit einem weiteren VUV-Puls oder mit einem optischen Puls untersucht werden (Probe-Pulse).

MULTIfs-A behandelt die Wechselwirkung zwischen Materie und Laser, indem die elektromagnetische Welle an die freien Elektronen ankoppelt. Deshalb eignet sich MULTIfs-A insbesondere für Plasmen und Metalle (dichte Plasmen). Im Fall von VUV-Photonen können jedoch auch Halbleiter und in bestimmten Fällen auch Dielektrika in guter Näherung mit MULTIfs-A behandelt werden. Voraussetzung hierbei ist, dass die Energielücke ( $\varepsilon_{Gap}$ ) zwischen Valenz- und Leitungsband viel kleiner als die Photonenenergie ist. In diesem Fall kann angenommen werden, dass die ersten Photonen die Elektronen aus dem Valenzband ins Leitungsband anheben und diese dann als freie Ladungsträger angesehen werden können. Ein in dieser Weise hier behandeltes Beispiel ist Silizium. Die Energielücke von Silizium beträgt 1.14 eV (Kittel, 1968), die hier betrachtete Photonenenergie beträgt 38 eV und ist damit viel größer als die Energielücke. Im Valenzband von Silizium befinden sich vier Elektronen. Somit kann für die folgenden Simulationen angenommen werden, dass Silizium bereits zu Beginn der Bestrahlungszeit einen effektiven Ionisierungsgrad  $Z_{eff} = 4$  besitzt.

# 5.3 Simulationen

Die Simulationen sollen mit den Ergebnissen der Messungen verglichen werden. Zudem soll mit den Simulationen die zeitliche Temperatur- und Dichte-Entwicklung in den Targets beschrieben werden, um so für zukünftige Experimente eine Vorhersage machen zu können. Falls nicht anders angegeben, werden die FLASH-Parameter, mit 38 eV Photonen, einer Pulsenergie von 10  $\mu J$  und einer Pulslänge von 100 fs angenommen. Der Simulationspuls ist ein  $sin^2$ -Puls, welcher sein Maximum nach 100 fs erreicht.

### 5.3.1 Heizprozess

### 5.3.1.1 Temperaturbereiche

Die verschiedenen Strahlintensitäten heizen das Medium unterschiedlich stark auf. Abbildung 5.3 zeigt das Ergebnis einer Simulation für die Temperatur der Elektronen in einer 50 nm dicken Aluminiumfolie in Abhängigkeit von der Pulsintensität direkt nach Pulsende (200 fs). Für Intensitäten, die kleiner als



Abbildung 5.3: Verschiedene Strahlintensitäten erzeugen im Material unterschiedliche Temperaturen. Zu sehen ist die intensitätsabhängige Temperatur in einer 50 nm dicken Aluminiumfolie direkt nach Pulsende.

 $I = 10^{14} W/cm^2$  sind (Fokusdurchmesser > 25  $\mu m$ ), bleiben die Temperaturen unterhalb der Fermi-Temperatur von  $T_F(Al) = 11.7eV$ . Bei einer Fokussierung des Strahls auf 12  $\mu$ m bis 7  $\mu$ m kann dagegen mit dem VUV-Strahl warme dichte Materie (WDM) erzeugt werden und bei noch kleinerem Fokusdurchmessern wandeln die VUV-Photonen das kalte Medium in ein heißes Plasma um. Die Vorhersage dieser Arbeit ist, dass für eine Intensität von  $I = 1 \cdot 10^{16} W/cm^2$ Temperaturen von 500 eV bei Festkörperdichte erreicht werden. Diese neuen und interessanten Materiezustände, zwischen kaltem Festkörper und heißem dichtem Plasma, gilt es zu untersuchen.

### **5.3.1.2** Heizung bei $I = 1 \cdot 10^{15} W/cm^2$

Abbildung 5.4 zeigt die Temperatur der Elektronen in einer 50 nm dicken Aluminiumfolie während des Heizprozesses bei einer Intensität von  $I = 1 \cdot 10^{15} W/cm^2$ . Die Mitte der Folie befindet sich in dieser raumfesten Euler-Darstellung bei der Position 0. Der Laser trifft die Folie bei der Position -25 nm. Es zeigt sich, dass während des Heizprozesses die Folie kaum expandiert. Die Ausdehnung bei Pulsende beträgt bei einer Intensität von  $I = 1 \cdot 10^{15} W/cm^2$ lediglich 3 nm auf beiden Seiten. Die maximale Temperatur wird bei Pulsende erreicht und beträgt etwa 35 eV. Die Temperatur auf der Laser zugewand-



Abbildung 5.4: Temperaturverteilung der Elektronen in einer 50 nm dicken Al-Folie während des Heizprozesses mit einem 38 eV-Photonen Puls bei einer Intensität von  $I = 1 \cdot 10^{15} W/cm^2$ . Die Mitte des Targets liegt bei der Position 0. Es wurde eine Euler'sche Darstellung gewählt. Die maximale Temperatur wird bei Pulsende (200 fs) erreicht und beträgt etwa 35 eV. Aufgrund der gleichmäßig im Target deponierten Laserenergie gibt es keine starken Temperaturgradienten.

ten Seite ist geringfügig höher, dennoch gibt es aufgrund der gleichmäßigen Deposition keine starken Temperaturgradienten.

### **5.3.1.3** Heizung bei $I = 1 \cdot 10^{16} W/cm^2$

Abbildung 5.5 zeigt die Heizung der Elektronen für den Fall einer höheren Intensität  $(I = 1 \cdot 10^{16} W/cm^2)$ . Bei dieser Intensität beträgt die maximal erreichte Temperatur der Elektronen etwa 550 eV. Der Maximalwert wird früher (150 fs) als im Fall niedriger Intensität erreicht, da die Expansion der Folie bereits viel weiter fortgeschritten ist. Die Ausdehnung von 40 nm auf beiden Seiten nach 200 fs bewirkt eine Abkühlung der Elektronen.

Die Deposition der Laserenergie ist in diesem Fall nicht homogen. In kaltem Aluminium beträgt die Absorptionslänge etwa 250 nm, und die 50 nm dicke Schicht wird nahezu gleichmäßig geheizt, wie man am Temperaturprofil nach 50 fs sieht. Dann jedoch nimmt die Absorptionslänge wegen starker Ionisierung zu, und die Photonen werden vor allem auf der bestrahlten Seite absorbiert, was zu Temperaturgradienten nach 100 fs führt. Bei noch höheren Temperaturen (nach 150 fs und 200 fs) nimmt die Absorptionslänge wieder



Abbildung 5.5: Temperaturverteilung der Elektronen in einer 50 nm Al-Folie bei einer Intensität von  $I = 1 \cdot 10^{16} W/cm^2$ . Die Photonenenergie beträgt 38 eV. Aufgrund der Expansion der Folie wird die maximale Temperatur vor dem Pulsende (150 fs) erreicht und beträgt etwa 550 eV.

zu, und die ungleichmäßige Temperaturverteilung wird zusätzlich durch starke Wärmeleitung ausgeglichen.

### 5.3.1.4 Einfluss von Strahlungskühlung

Bei hohen Temperaturen kühlt thermische Eigenstrahlung das Material schon während der Bestrahlung. Dieser Strahlungsverlust P spielt eine dominierende Rolle, sobald die abgegebene Leistung der Eigenstrahlung in die Größenordnung der eingestrahlten Leistung kommt. Für eine Abschätzung, ab welcher Strahlintensität die Eigenstrahlung berücksichtigt werden muss, kann in einem optisch dichten Material von dem Stefan-Boltzmann-Gesetz ausgegangen werden, für Details siehe auch Atzeni und Meyer-ter-Vehn (2002),

$$P = \sigma_{SB} \cdot T^4,$$

wobei  $\sigma_{SB} = 1.03 \cdot 10^{12} erg \ s^{-1} cm^{-2} eV^{-4}$  die Stefan-Boltzmann-Konstante ist. Bei einer Intensität von  $I = 1 \cdot 10^{15} W/cm^2$  zeigt Abbildung 5.4 eine maximal erreichte Temperatur von 35 eV. Der Strahlungsverlust ergibt sich in diesem Fall zu  $P = 1.5 \cdot 10^{11} W/cm^2$ . Dieser Wert ist viel keiner als die einfallende Strahlintensität. Folglich kann der Strahlungsverlust vernachlässigt werden. Ab einer Intensität  $I = 1 \cdot 10^{16} W/cm^2$  kommen die Strahlungsverluste in die Größenordnung der einfallenden Laserintensität und müssen berücksichtigt werden. Für eine Intensität von  $I = 1 \cdot 10^{16} W/cm^2$  ergibt sich eine maximale Temperatur von ca. 500 eV, der Strahlungsverlust beträgt dann  $P = 6.3 \cdot 10^{15} W/cm^2$ . Eigenstrahlung und Strahlungstransport werden in MULTIfs-A berechnet.

### 5.3.1.5 Ionisierung geheizter Folien

Beim Heizprozess ändert sich mit der Temperatur auch der Ionisierungsgrad im Medium. Der Ionisierungsgrad lässt sich im thermischen Gleichgewicht mit der Saha-Gleichung beschreiben, siehe auch Atzeni und Meyer-ter-Vehn (2002). Bei höheren Dichten müssen zusätzlich nicht-ideale Plasmaeffekte (z.B. Druckionisation) berücksichtigt werden. Für die Saha-Gleichung gilt

$$\frac{n_{i+1}}{n_i} = \frac{2}{n_e \lambda_{th}^3} \frac{G_{i+1}}{G_i} exp\left(-\frac{I_i}{k_B T}\right),\tag{5.1}$$

wobei  $n_i$  die Ionendichte des i-fach und  $n_{i+1}$  des (i+1)-fach geladenen Ions ist.  $n_e$  ist die Elektronendichte und  $\lambda_{th}^2 = 2\pi\hbar^2/(mk_BT)$  ist die thermische Wellenlänge der Elektronen.  $I_i$  steht für die Ionisationsenergie eines Ions mit dem Ladungszustand i.  $G_i$  beschreibt die anfängliche Zustandssumme und  $G_{i+1}$ steht für die Zustandssumme nach der Ionisation. Aus der Saha-Gleichung folgt, dass der Ionisierungsgrad bei einer festgehaltenen Temperatur mit steigender Dichte abfällt, bis in etwa die Festkörperdichte erreicht ist. Bei größeren Dichten nimmt dagegen die Ionisation aufgrund der Druckionisation wieder zu. Diese Prozesse sind in den MULTI-Simulationen enthalten.

In Abbildung 5.6 ist der Ionisierungsgrad von Aluminium während der Heizung für eine Intensität von  $I = 1 \cdot 10^{15} W/cm^2$  und in Abbildung 5.7 für eine Intensität von  $I = 1 \cdot 10^{16} W/cm^2$  gezeigt. In der Darstellung werden Euler-Koordinaten benutzt und das Zentrum der Folie liegt bei Position 0. Der anfängliche Ionisierungsgrad in Aluminium beträgt  $Z_{eff} = 3$ . Bei einer Intensität von  $I = 1 \cdot 10^{15} W/cm^2$  wird der maximale Ionisierungsgrad  $Z_{eff} \approx 4.5$ nach 200 fs erreicht. Der Anstieg der Ionisierung an den Rändern nach 150 fs wird aufgrund der niedrigen Dichte an den expandierenden Oberflächen hervorgerufen. Bei der höheren Intensität von  $I = 1 \cdot 10^{16} W/cm^2$  ist die maximale Ionisierung wesentlich höher. Nach 150 fs ist das Aluminium bereits vollständig ionisiert.



Abbildung 5.6: Ionisierungsgrad in einer 50 nm dicken Al-Folie bei einer Pulsintensität von  $I = 1 \cdot 10^{15} W/cm^2$ . Die maximale Ionisierung wird bei Pulsende (200 fs) erreicht und beträgt  $Z_{eff} \approx 4.5$ .



Abbildung 5.7: Ionisierungsgrad in einer 50 nm dicken Al-Folie bei einer Pulsintensität von  $I = 1 \cdot 10^{16} W/cm^2$ . Das Aluminium ist bei dieser Intensität bereits nach 150 fs vollständig ionisiert.

### 5.3.2 Hydrodynamische Expansion

Für die genaue Messung des Absorptionsverhaltens in einem bestimmten Material, sollte die Wechselwirkung des Pulses mit einem homogenen Material möglichst ohne Dichtegradienten stattfinden, also bevor die Expansion stärker einsetzt. Dieses geschieht von beiden Oberflächen her in Form von Verdünnungswellen. Die Fronten der Verdünnungszonen laufen mit Ionenschall-Geschwindigkeit  $c_s \propto \sqrt{T/\rho_i}$ , wobei T die Elektronen-Temperatur und  $\rho_i$  die Ionenmassedichte ist. Im Zentrum bleibt die Festkörperdichte zunächst unverändert. Das Zeitintervall, in dem die Targetmitte bei Festkörperdichte bestehen bleibt, ist um so kürzer je höher die Temperatur, d.h. je höher die Heizintensität ist. Bei den betrachteten Intensitäten und Schichtdicken beträgt diese Zeit 100 fs bis 1 ps.

In Abbildung 5.8 ist die Dichte in der Mitte der Folie in Abhängigkeit von der Zeit für verschiedene Intensitäten dargestellt. Es zeigt sich, dass für Intensitäten, die kleiner als  $I = 1 \cdot 10^{15} W/cm^2$  sind, die Dichte in der Mitte der Folie nahezu konstant die Festkörperdichte ist. Im Fall einer Intensität von  $I = 1 \cdot 10^{16} W/cm^2$  ist die Expansion der Folie schneller, jedoch bleibt



Abbildung 5.8: Zeitliche Dichte-Entwicklung für verschiedene Strahlintensitäten in der Folienmitte. Für kleine Intensitäten ändert sich die Dichte im Zentrum auch nach einer Pikosekunde kaum. Für eine Intensität von  $I = 1 \cdot 10^{16} W/cm^2$ erreicht die Verdünnungswelle erst nach 300 fs die Folienmitte, folglich findet die Wechselwirkung auch in diesem Fall in der Targetmitte bei Festkörperdichte statt.

die Folienmitte bei Festkörperdichte bis nach 300 fs bestehen. Das bedeutet, dass die Wechselwirkung auch bei hohen Intensitäten  $(I = 10^{16} W/cm^2)$  in der Targetmitte bei Festkörperdichte stattfindet.

### 5.3.2.1 Expansion einer 50 nm Al-Schicht bei $I = 1 \cdot 10^{15} W/cm^2$

Es soll nun die hydrodynamische Entwicklung eines 50 nm dicken Aluminiumtargets bei einer Intensität von  $I = 1 \cdot 10^{15} W/cm^2$  im Detail betrachtet werden. Das Al-Target ist in 120 gleiche Lagrange-Zellen unterteilt. Jede Zelle hat dieselbe Massenbelegung. Lagrange-Koordinaten bezeichnen die Schichtmasse  $m = \int_0^x \rho(x') dx'$  in der Schichttiefe x und werden oft benutzt, um ebene, ein-dimensionale Expansion darzustellen. Im Gegensatz zu den Euler-Koordinaten beschreiben die Lagrange-Koordinaten keinen bestimmten Punkt im Raum, sondern ein bestimmtes Fluid-Teilchen, für weitere Erläuterungen siehe Zel'dovich und Raizer (1966).

Abbildung 5.9 zeigt die Änderung der Dichte in dieser Folie zu verschiedenen Zeiten nach Pulsbeginn. Vor der Bestrahlung liegt kaltes Aluminium mit konstanter Dichte ( $\rho_i = 2.7g/cm^3$ ) vor. Nach dem Pulsende (200 fs) beginnen die



Abbildung 5.9: Räumliche Dichte-Entwickung in einer 50 nm dicken Aluminiumfolie bei einer Bestrahlung mit einem VUV-Puls der Intensität  $I = 1 \cdot 10^{15} W/cm^2$ . Das Target ist in 120 gleiche Lagrange-Zellen unterteilt. Nach etwa einer Pikosekunde hat die Verdünnungswelle das Zentrum erreicht und nach 100 ps ist die Folie nahezu vollständig auseinander gelaufen.



Abbildung 5.10: Dargestellt ist die Expansion der Folie mit der Zeit bei einer Intensität von  $I = 1 \cdot 10^{15} W/cm^2$ . Die obere Kurve beschreibt die Ausdehnung einer Zelle an der Targetrückseite, die untere Kurve an der Vorgerseite und die mittlere Kurve stellt das Zentrum der Folie dar. Da es sich um eine sehr dünne Folie handelt, ist die Ausdehnung von Vorder- und Rückseite fast gleich schnell. Nach einer Pikosekunde hat sich die anfänglich 50 nm dicke Folie auf 160 nm ausgedehnt.

Oberflächen der Folie zu expandieren. Nach 500 fs liegt das Target immer noch zum größten Teil mit der Anfangsdichte vor, jedoch ist die Verdünnungswelle in der Folie nun bis zu Zelle 95 bzw. 25 vorgedrungen. Nach einer Pikosekunde hat die Verdünnungswelle dann das Zentrum der Folie erreicht. Zu späteren Zeiten expandiert die Folie weiter, bis sie nach etwa 100 ps fast völlig vaporisiert ist.

Dieses Zerfließen der Folien ist auch in Abbildung 5.10 dargestellt. Hier ist die zeitliche Entwicklung einer Zelle an der Laser zugewandten Vorderseite (untere Kurve), einer Zelle an der Folienrückseite (obere Kurve) und einer Zelle im Zentrum gezeigt. Da die Dicke der bestrahlten Folie nur 50 nm beträgt, beginnt die Expansion an Vorder- und Rückseite der Folie fast gleichzeitig nach 200 fs (Pulsende). Die Ausdehnung ist an der Vorderseite etwas schneller als an der Rückseite, wie man an der leichten Asymmetrie des Dichteprofils nach 500 fs erkennt. Der Grund liegt darin, dass die Folienseite, auf die der Laser trifft, stärker geheizt wird als die Rückseite. Da die Folie sehr dünn ist, ist der Unterschied jedoch gering. Das Zentrum der Folie ändert dagegen wie erwartet seine Position nicht. Nach einer Pikosekunde hat sich die Folie von ihrer anfänglichen Dicke von 50 nm auf 160 nm ausgedehnt. Nach der direkten Heizung der Elektronen durch den VUV-FEL-Strahl, wird die Energie



Abbildung 5.11: Temperaturverteilung der Elektronen in einer 50 nm dicken Aluminiumfolie bei einer Strahlintensität von  $I = 1 \cdot 10^{15} W/cm^2$ . Die maximale Elektronen-Temperatur von 35 eV wird bei Pulsende erreicht. Nach etwa 1 ps wird ein Gleichgewicht mit den Ionen erreicht und die Temperatur beträgt in beiden Fällen etwa 24 eV. Nach 100 ps hat sich das Target, aufgrund der Expansion, auf etwa 5 eV abgekühlt. Wegen der guten Wärmeleitung der Elektronen liegt zu allen Zeiten eine nahezu gleichmäßige Verteilung der Elektronen-Temperatur im Target vor.

durch Stöße auf die Ionen transferiert. Die Temperatur der Elektronen nimmt dabei ab, während die der Ionen zunimmt. Aufgrund der Expansion der Folie kühlt sich das Material an den Oberflächen zusätzlich ab. Die Temperatur-Entwicklung der Elektronen in einer 50 nm Al-Folie ist in Abbildung 5.11, die der Ionen in Abbildung 5.12 dargestellt. Die Strahlintensität beträgt in beiden Abbildungen  $I = 1 \cdot 10^{15} W/cm^2$ . Wie man sieht, ist die zeitliche Entwicklung der Elektronen- und Ionen-Temperatur einen maximalen Wert von etwa 35 eV, vergleiche mit Abbildung 5.4. Die Ionen-Temperatur ist dann noch wesentlich kleiner (4 eV). Die Expansionskühlung der Ionen an den Oberflächen ist bereits eingetreten, während die Temperatur der Elektronen in den Zellen nahezu gleichmäßig verteilt ist. Der Grund ist die gute Wärmeleitung der Elektronen im Gegensatz zu den viel schwereren Ionen.

Nach 500 fs ist die Temperatur der Elektronen auf ca. 30 eV abgesunken. Die Temperatur der Ionen hat sich dagegen auf 15 eV erhöht. An den Rändern zeigt die Abkühlung der Ionen deutlich das Vordringen der Verdünnungswelle ins Materialinnere.



Abbildung 5.12: Temperaturverteilung der Ionen in einer 50 nm dicken Aluminiumfolie bei einer Strahlintensität von  $I = 1 \cdot 10^{15} W/cm^2$ . Die maximale Temperatur der Ionen beträgt etwa 24 eV und wird nach 1 ps erreicht. Die Ionen-Temperatur ist an den Oberflächen aufgrund der Expansion der Folie niedriger als im Zentrum.

Nach einer Pikosekunde hat der Energietransfer zwischen Elektronen und Ionen zu einem Gleichgewichtszustand geführt, so dass nun die Ionen-Temperatur gleich der Elektronentemperatur ist  $(T_e = T_i)$  und die Ionen-Temperatur den maximalen Wert von etwa 24 eV erreicht. Zu späteren Zeitpunkten fällt die Temperatur der Ionen und der Elektronen aufgrund einer weiteren Ausdehnung der Folie ab, bis die Folie nach etwa 100 ps fast vollständig vaporisiert ist.

### 5.3.2.2 Heizung und Expansion einer 50 nm Si-Schicht

Bei den ersten FLASH-Experimenten wurden neben den Messungen an Aluminium auch Messungen an Silizium durchgeführt. Aus diesem Grund soll hier auch kurz auf die hydrodynamische Entwicklung von Silizium eingegangen werden.

In der Simulation von Silizium wird angenommen, dass sofort alle vier Valenzelektronen durch Photo-Absorption ins Leitungsband angehoben werden. Silizium kann so wie ein Metall mit vier freien Elektronen betrachtet werden. Damit ist der anfängliche Ionsierungsgrad  $Z_{eff} = 4$ . Die Festkörperdichte von Silizium beträgt  $\rho_i(Si) = 2.3g/cm^3$ .



Abbildung 5.13: Temperaturverteilung der Elektronen in einer 50 nm dicken Siliziumfolie bei einer Strahlintensität von  $1 \cdot 10^{15} W/cm^2$ . Die maximale Elektronen-Temperatur von 37 eV wird bei Pulsende erreicht.

Abbildung 5.13 zeigt die Temperaturverteilung der Elektronen zu verschiedenen Zeiten und Abbildung 5.14 die Dichteverteilung in einer 50 nm Si-Folie bei einer Strahlintensität von  $I = 1 \cdot 10^{15} W/cm^2$  und ebenfalls 38 eV-Photonen. Die maximale Temperatur der Elektronen wird bei Pulsende erreicht und beträgt etwa 37 eV. Die Temperatur ist damit geringfügig größer als in Aluminium (T(Al) = 35eV). Die maximal erreichte Temperatur im Target hängt von der Absorption ab. Die Absorption ist dabei umso größer, je höher der Ionisierungsgrad ist (vergleiche mit Kapitel 4). Die maximale Temperatur ist folglich aufgrund der höheren Anfangsionisierung in Silizium etwas größer. Die Dichteverteilung zeigt, dass die Verdünnungswelle nach einer Pikosekunde die Foliemitte noch nicht erreicht hat. In Abbildung 5.15 sind die Ausdehnungen von Si-Folie und Al-Folie miteinander verglichen. Die Foliendicke beträgt auch hier jeweils 50 nm und die Pulsintensität ist  $I = 1 \cdot 10^{15} W/cm^2$ . Es zeigt sich, dass die Geschwindigkeit der Expansion in Silizium etwas größer als im Fall von Aluminium ist. Der Grund liegt darin, dass die Schallgeschwindigkeit aufgrund der höheren Temperatur und des niedrigeren Atomgewichts in Silizium größer als in Aluminium ist. Wie aber deutlich wird, unterscheiden sich Silizium und Aluminium kaum. Der kleine Unterschied in der Temperatur wird dabei im Wesentlichen von den unterschiedlichen Ionisierungsgraden hervorgerufen.

#### 5.4 Vergleich zwischen Simulationsrechnungen und Transmissionsmessungen



Abbildung 5.14: Räumliche Dichte-Entwicklung in einer 50 nm dicken Siliziumfolie bei einer Bestrahlung mit einem VUV-Puls mit  $I = 1 \cdot 10^{15} W/cm^2$ . Das Target ist in 120 gleiche Lagrange-Zellen unterteilt.

# 5.4 Vergleich zwischen Simulationsrechnungen und Transmissionsmessungen

In diesem Abschnitt sollen Simulationen mit Transmissionsmessungen verglichen werden. Bisher gibt es dabei kaum Daten für geheiztes Material, dafür jedoch umso mehr Daten für kalte Festkörper, siehe hierzu die Berkeley Datenbank (Ber) sowie Palik (1985); Henke et al. (1982); Gullikson et al. (1994) und Hagemann et al. (1974).

In dieser Arbeit steht die Wechselwirkung von VUV-Photonen mit WDM im Vordergrund, deshalb soll zunächst die Wechselwirkung von VUV-Photonen mit geheiztem Material untersucht werden. Leider lagen während der Entstehung dieser Dissertation noch keine experimentellen Daten für den WDM-Bereich bei FLASH vor.

Das in Kapitel 2, 3 und 4 vorgestellte Modell ist primär für Temperaturen oberhalb der Fermi-Temperatur entwickelt worden. Es liefert aber auch Aussagen für kaltes Material, ohne dabei jedoch spezifische Festkörpereffeke zu berücksichtigen. Deshalb sollen Simulationsrechnungen trotzdem mit Transmissionsmessungen in verschiedenen kalten Materialien verglichen werden, um so den Gültigkeitsbereich des neuen Modells abzuschätzen.



Abbildung 5.15: Räumliche Ausdehnung der Vorder- und Rückseite einer 50 nm dicken Siliziumfolie (obere/rote Kurve) und einer 50 nm dicken Aluminiumfolie (untere/schwarze Kurve) bei einer Bestrahlung mit einem VUV-Puls der Intensität  $I = 1 \cdot 10^{15} W/cm^2$ . Die Ausdehnung in der Si-Folie ist geringfügig schneller als in der Al-Folie, da die Temperatur, aufgrund der höheren Anfangsionisierung, größer und die Festkörperdichte von Si niedriger ist.

### 5.4.1 Geheiztes Material

Während des Heizprozesses ändert sich die Ionisierung und die Temperatur des Mediums. In Kapitel 4 wurde gezeigt, dass die Absorption und damit auch die Transmission von beiden Größen abhängt. Für den Absorptionskoeffizienten  $\alpha$  gilt bei hohen Temperaturen  $\alpha \propto Z_{eff}^3 \cdot T^{-3/2}$ . Folglich ändert sich die Transmission durch eine Schicht während des Heizens. Bei der nachfolgenden hydrodynamischen Expansion spielt auch die Dichteänderung des Mediums  $(\alpha \propto n_i^2)$  eine Rolle.

### 5.4.1.1 Transmission bei verschiedenen Strahlintensitäten

In Abbildung 5.16 ist die zeitliche Entwicklung der Transmission durch eine 50 nm dicke Al-Folie während des Heizprozesses für verschiedene Intensitäten gezeigt. Für Intensitäten, die kleiner als  $I = 1 \cdot 10^{15} W/cm^2$  sind, bleibt die Transmission während des Heizprozesses nahezu konstant. Es ist lediglich ein leichter Anstieg bis zum Erreichen des Pulsmaximums (100 fs) zu erkennen. Dieser Anstieg wird durch die leichte Temperaturerhöhung der Elektronen her-



Abbildung 5.16: Zeitliche Änderung der Transmission durch eine 50 nm Al-Schicht während der Bestrahlungszeit für unterschiedliche Intensitäten. Für  $I < 1 \cdot 10^{15} W/cm^2$  ändert sich die Transmission kaum, während sich für größere Intensitäten, aufgrund der Ionisierung, die Transmission stark ändert. Die Zeit, nach welcher sich die Transmission ändert, ist umso kürzer je größer die Strahlintensität ist.

vorgerufen. Bei höheren Intensitäten nimmt die Transmission vor allem aufgrund der Ionisierung während der Heizung stark ab. Die Transmission erreicht bei einer Intensität von  $I = 1 \cdot 10^{16} W/cm^2$  ein Minimum nach etwa 125 fs. Zu diesem Zeitpunkt ist die Ionisierung nahezu maximal, vergleiche mit Abbildung 5.7. Die Temperatur steigt jedoch noch weiter an (siehe auch Abbildung 5.4), so dass die Transmission aufgrund der Temperaturerhöhung wieder leicht zunimmt.

In Abbildung 5.17 ist die Transmission durch eine 50 nm Al-Schicht für Intensitäten zwischen  $I = 10^{12} W/cm^2$  und  $10^{16} W/cm^2$  bei Pulsende dargestellt. Zusätzlich ist in dieser Abbildung die auf die maximale Temperatur  $(T_{max} = 550 eV)$ , die bei einer Intensität von  $I = 1 \cdot 10^{16} W/cm^2$  erreicht wird, normierte Temperatur und der auf die Ladungszahl (Z = 13) normierte Ionisierungsgrad  $Z_{eff}$  eingetragen. Für Intensitäten, die kleiner als  $I = 1 \cdot 10^{14} W/cm^2$ sind, ändert sich die Temperatur und die Ionisation und damit die Transmission durch die Schicht kaum. Dies ist in der Tat das Ergebnis der ersten Experimente mit FLASH, vergleiche mit Abbildung 5.1. Bei einer Intensität bis zu  $I = 1 \cdot 10^{14} W/cm^2$  konnte experimentell keine Transmissionsänderung aufgrund einer Heizung der Folie beobachtet werden.



Abbildung 5.17: Gezeigt ist die Transmission durch eine 50 nm dicke Aluminium-Folie, die auf die maximale Temperatur  $T_{max} = 550 eV$  normierte Temperatur und die auf die Ladungszahl (Z=13) normierte effektive Ionisierung  $Z_{eff}$  für Strahlintensitäten zwischen  $I = 1 \cdot 10^{12} W/cm^2$  und  $I = 1 \cdot 10^{16} W/cm^2$ nach Pulsende. Für Intensitäten  $I < 1 \cdot 10^{14} W/cm^2$  bleibt die Temperatur, die Ionisierung und damit die Transmission nahezu konstant bei dem Anfangswert. Für höhere Intensitäten steigt dagegen die Temperatur und somit die effektive Ionisierung stark an. Dies hat ein Absinken der Transmission zur Folge.

Im Fall einer Intensität von  $I = 1 \cdot 10^{15} W/cm^2$  wird nach 100 fs eine Temperatur von etwa 20 eV erreicht, vergleiche mit Abbildung 5.4. Der Ionisierungsgrad bleibt während dieser Zeit konstant und steigt erst nach dem Erreichen des Pulsmaximums (t > 100 fs) bis auf  $Z_{eff} \approx 4.5$  nach 200 fs an, vergleiche mit Abbildung 5.6. Aufgrund des leichten Anstiegs der Ionisation nimmt die Transmission durch das Medium geringfügig ab. Der Effekt der Ionisierung und der damit verbundene Abfall der Transmission nimmt bei Intensitäten  $I > 1 \cdot 10^{15} W/cm^2$  jedoch stark zu, wie in Abbildung 5.17 klar zu sehen ist.

### 5.4.1.2 Resümee: Transmission im geheizten Material

Für heiße Materialien  $(T >> T_F)$  hängt der Absorptionskoeffizient wie folgt von der Ionisierung  $Z_{eff}$  und der Temperatur T ab

$$\alpha \propto \frac{Z_{eff}^3}{T^{3/2}}.$$

#### 5.4 Vergleich zwischen Simulationsrechnungen und Transmissionsmessungen

Die Transmission hängt folglich viel stärker von dem Ionisierungsgrad als von der Temperatur ab. Ein wichtiger Punkt ist, dass der Ionisierungsgrad wiederum von der Temperatur abhängt. Dies ist im Code durch die Zustandsgleichungen berücksichtigt. Die Transmission fällt demnach beim Heizprozess solange ab, bis der maximale Ionisierungsgrad erreicht ist. Nimmt die Temperatur im heißen Material dann weiter zu, so steigt die Transmission wieder an. Aus den Simulationen kann des Weiteren gefolgert werden, dass ein signifikanter Abfall der Transmissionsänderung zu erwarten ist, sobald die Strahlintensität größer als  $I = 5 \cdot 10^{15} W/cm^2$  wird. Dieser Intensität entspricht bei einer Pulslänge von 100 fs eine absorbierte Laserenergiedichte von  $500J/cm^2$ .

### 5.4.2 Kaltes Material

Das in Kapitel 2, 3 und 4 vorgestellte Photo-Absorptions-Modell ist für die VUV-Photo-Absorption in WDM entwickelt worden. In diesem Materialzustand ist es gerechtfertigt, Festkörpereffekte zu vernachlässigen. Das Modell liefert jedoch an seinen Grenzen auch Resultate für kaltes Material. Diese Grenzbereiche des Modells sollen an dieser Stelle betrachtet werden und mit experimentellen Daten verglichen werden, um so eine Aussage über das qualitative Verhalten des Modells jenseits seines originären Gültigkeitsbereich zu erhalten.

### 5.4.2.1 Kaltes Aluminium

Abbildung 5.18 zeigt die Transmission in Abhängigkeit von der Photonenenergie bei Raumtemperatur durch eine 50 nm Al-Folie. Die Daten der gepunkteten Kurve stammen aus der Berkeley Datenbank (Ber), die gestrichelte Kurve gehört zu den am Synchrotron bei DESY gemessenen Daten (Hagemann et al., 1974), während die durchgezogene Kurve das neue Modell repräsentiert. Zusätzlich sind die Messungen der Transmission mit FLASH '05 und mit PALS von (Rus, 2006) im Jahr 2006 eingezeichnet. In einem Photonenenergiebereich von 40 eV - 70 eV zeigt sich eine qualitativ gute Übereinstimmung zwischen Modell und experimentelle Daten. Dies entspricht dem VUV-Photonenbereich. Für niedrigere Photonenfrequenzen, die sich in der Nähe der Plasmafrequenz befinden, sieht man jedoch stärkere Diskrepanzen. Die gemessene Transmission ist hier wesentlich höher und der Abfall nahe  $\omega_p$  entsprechend steiler als im Modell. Dieser steile Abfall lässt sich möglicherweise durch den niederfrequenten Cut-off, der durch Interband-Ubergänge der gebundenen Elektronen hervorgerufen wird, erklären. Diese Interband-Übergänge sind in dem Modell nicht enthalten, für weitere Erläuterungen zu Interband-Ubergängen siehe Patterson



Abbildung 5.18: Transmission in Abhängigkeit der Photonenenergie in einer kalten 50 nm dicken Al-Folie. Die gepunktete Kurve stellt Daten aus der Berkeley-Datenbank (Ber) und die gestrichelte Kurve stellt die Messungen mit Synchrotron-Strahlung bei DESY dar (Hagemann et al., 1974). Die durchgezogene Kurve ergibt sich aus der Simulation. Zudem sind die Messungen mit FLASH (Sokolowski-Tinten, 2006) und mit PALS (Rus, 2006) eingezeichnet.

und Bailey (2007); Ziman (1960) und Fisher et al. (2001). Bei einer Photonenenergie von etwa 25 eV lässt sich in den gemessenen Daten, im Gegensatz zu der berechneten Kurve, zudem eine Schulter in der Transmission erkennen. Als ein möglicher Grund für dieses Verhalten sind in einem Festkörper die effektive Masse sowie die Ladungsabschirmung denkbar. Beide Effekte sind im Modell nicht enthalten, eine weiterführende Literatur zu diesen Effekten ist bei Abrikosov (1976); Sokolov (1967) und Tanner (1995) zu finden.

Die Messdaten von FLASH und PALS liegen jeweils unterhalb den Transmissionsdaten aus Berkeley, den Messungen mit Synchrotronstrahlung bei DESY und den berechneten Werten. Dies lässt sich vermutlich auf den Einfluss von Oxidschichten auf den Targetoberflächen zurückführen, die den Absorptionskoeffizienten für das gesamte Target erhöhen.

In Tabelle 5.1 sind die Absorptionskoeffizienten  $\alpha$  aus verschiedenen Messungen für kaltes Aluminium bei 38 eV-Photonen zusammengetragen. Es wird deutlich, dass sich die experimentellen Daten um einen Faktor 3-4 für diesen Fall unterscheiden. Es zeigt sich, dass der mit dem Modell berechnete Wert für die VUV-Photonen zumindest qualitativ mit den Messwerten übereinstimmt.

Messung	$\alpha \ [cm^{-1}]$
Berkeley (Ber)	$2.4\cdot 10^4$
DESY Synchrotron (Hagemann et al., 1974)	$3.5 \cdot 10^4$
Palik (Palik, 1985)	$3.5 \cdot 10^4$
DESY FLASH (FLA)	$7.7\cdot 10^4$
Modell	$4.2 \cdot 10^{4}$

5.4 Vergleich zwischen Simulationsrechnungen und Transmissionsmessungen

Tabelle 5.1: Bei verschiedenen Experimenten gemessene Absorptionskoeffizienten  $\alpha$  von Aluminium bei 38 eV-Photonen. Das in dieser Arbeit beschriebene Modell für die VUV-Photo-Absorption in WDM liefert einen Wert von  $\alpha = 4.2 \cdot 10^4 \text{cm}^{-1}$ . Es zeigt sich folglich für kaltes Material bei 38 eV-Photonen eine qualitativ gute Übereinstimmung zwischen Modell und experimentellen Daten.

### 5.4.2.2 Silizium

In Abschnitt 5.3.2.2 wurde gezeigt, dass die hydrodynamischen Eigenschaften von Silizium und Aluminium sehr ähnlich sind, deshalb ist auch ein sehr ähnliches Transmissionsverhalten zu erwarten. Abbildung 5.19 zeigt die Transmission in Abhängigkeit von der Photonenfrequenz für eine kalte 50 nm Si-Schicht. Die etwas geringere Transmission in Silizium gegenüber der von Aluminium wird im Wesentlichen durch die höhere Anfangsionisierung hervorgerufen. Dieses Verhalten lässt sich auch bei den experimentellen Daten beobachten. Wie im Fall von Aluminium zeigt sich für eine Photonenenergie zwischen 40 eV - 70 eV (VUV-Photonen) eine qualitativ gute Übereinstimmung zwischen Experiment und Modell, während für Photonenfrequenzen in der Nähe der Plasmafrequenz diverse Festkörpereffekte eine Abweichung der Messung vom Modell bewirken.

### 5.4.2.3 Silber

Aluminium und Silizium haben fast gleiche Ladungszahl, deshalb soll nun ein Material mit wesentlich größeren Ladungszahl betrachtet werden. Simulationen für Silber mit einer Ladungszahl Z = 47 sind in Abbildung 5.20 dargestellt. In diesem Fall wurde bei der Simulation angenommen, dass bei VUV-Photonen nur die Elektronen aus K, L und M-Schale fest an den Atomkern gebunden sind. Die restliche 29 Elektronen werden im Fall von VUV-Photonen wie freie Elektronen behandelt. Die Dicke der Folie beträgt wiederum 50 nm. Es zeigt sich ein ähnliches Verhalten wie im Fall von Aluminium und Silizium.



Abbildung 5.19: Nach dem beschriebenen Modell und aus den Berkeley Daten (Ber) gewonnene Transmission in Abhängigkeit von der Photonenenergie für eine 50 nm dicke Siliziumfolie. Der Punkt repräsentiert die Messung bei FLASH (Sokolowski-Tinten, 2006).



Abbildung 5.20: Berechnete und aus den Berkeley Daten (Ber) gewonnene Transmission in Abhängigkeit von der Photonenenergie im Fall von 50 nm Silber.

### 5.4.2.4 Oxidschichten

Bei den FLASH Experimenten war die Absorption in Aluminium wesentlich größer als bei anderen Meßreihen. Der Grund hierfür könnte in den Oxidschichten auf der Al-Oberfläche liegen. Da die Absorption in dem VUV-Bereich sehr groß ist, sind die Absorptionslängen entsprechend kurz. Deshalb müssen die zu untersuchenden Targets sehr dünn (10nm < d < 100nm) gewählt werden, um eine nennenswerte Absorption messen zu können, und den Fehler in der Messung gering zu halten. Sind die Oberflächen dieser ultradünnen Folien mit einer Oxidschicht belegt, so ist das Verhältnis zwischen der Targetdicke und der Oxiddicke jedoch ungünstig, so dass die Messwerte durch die Oxidschichten verfälscht werden können. Die Oxidschicht auf der Al-Oberfläche absorbiert stärker als das metallisches Aluminium, deshalb wird eine zu große Absorption für das gesamte Target gemessen.

Der große experimentelle Vorteil von Silizium gegenüber Aluminium ergibt sich deshalb aufgrund seiner Halbleitereigenschaften und der damit verbundene wesentlich geringeren Oxidationsreaktivität. Die Transmission von VUV-Photonen durch Aluminium und Silizium sind fast gleich. Bei einer Transmissionsmessung an Silizium kann folglich auf ein ganz ähnliches Transmissionsverhalten von Aluminium geschlossen werden. Aus einer Vergleichsmessung an Aluminium, mit einer definierten Oxiddicke, könnte dann zudem der Absorptionskoeffizient für das Aluminiumoxid abgeschätzt werden.

### 5.4.2.5 Resümee kaltes Material

Die Absorption im kalten Festkörper war nicht das eigentliche Ziel dieser Arbeit. Kaltes Material kann jedoch an den Grenzen des neuen Modells trotzdem qualitativ richtig beschrieben werden. Dieses Ergebnis war nicht zu erwarten, da im kalten Material Festkörpereigenschaften eine große Rolle spielen sollten, die in diesem Modell nicht berücksichtigt werden. Insbesondere für VUV-Photonen liefert das Modell eine relativ gute Aussage für den Absorptionskoeffizienten. Nur für Photonen, deren Frequenz sich in der Nähe der Plasmafrequenz befindet, weicht es von den experimentellen Daten deutlich ab.

Auch werden als absorbierende Prozesse in dem hier vorgestellten Modell nur die Elektron-Ion-Streuprozesse berücksichtigt. Dies ist eine gute Annahme in WDM und für VUV-Photonen. Hier können die Elektron-Phonon-Stöße vernachlässigt werden, da die Materialtemperatur in WDM meist oberhalb der Schmelztemperatur ( $T_{Schmelz}(Al) = 0.08 \text{ eV}$ ) liegt und folglich die Gitterstruktur zerstört ist und des Weiteren sind die von den VUV-Photonen übertragenen Impulse größer als die maximal möglichen Phononen-Impulse, die sich aus dem

Ionenabstand bestimmen. Bei der Photo-Absorption in kalter Materie mit kleinen Photonenfrequenzen ist jedoch zu erwarten, dass auch die Elektron-Phonon-Streuprozesse eine wichtige Rolle spielen. Beispiele hierzu finden sich in der Literatur unter anderem bei Ziman (1960); Ashcroft und Mermin (2001) und Sokolov (1967).

## 5.5 Dünne Folien als schnelle Schalter

Für Photonenfrequenzen, die sich sehr nahe bei der Plasmafrequenz befinden, ist die Absorption sehr groß. Folglich wird das Medium stark aufgeheizt und ionisiert. Ist die Photonenfrequenz zunächst größer als die Plasmafrequenz, so kann die elektromagnetische Welle durch das Medium propagieren. Aufgrund der Ionisierung ändert sich aber die Plasmafrequenz im Medium. Wird die Plasmafrequenz größer als die Photonenfrequenz, so geht das Medium von einem unterdichten zu einem überdichten Zustand über, und die Transmission fällt steil ab, während die Reflexion an der Folienoberfläche zunimmt. Das sprunghafte Absinken der Transmission und das damit verbundene Ansteigen der Reflexion kann als ein optisches Schaltelement benutzt werden. Dieses Kapitel orientiert sich an einer früheren Veröffentlichung von Krenz und Meyer-ter-Vehn (2005b).

### 5.5.1 Schalteffekt für 30 eV-Photonen

Im Prinzip lässt sich bei zukünftigen Messungen die Photonenenergie variieren. Wählt man eine Photonenfrequenz, die sehr nahe bei der kalten Plasmafrequenz liegt ( $\omega > \omega_p$ ), so kann ein Teil der elektromagnetischen Welle durch das Medium transmittieren. Der absorbierte Teil heizt das Volumen und der Ionisierungsgrad nimmt zu. Mit der Ionisierung ändert sich auch die Plasmafrequenz ( $\omega_p \propto \sqrt{Z_{eff} \cdot n_i}$ ). Sobald die Plasmafrequenz größer als die Photonenfrequenz wird, kann die elektromagnetische Welle nur noch bis zur Skintiefe in das Medium eindringen und die Transmission geht gegen Null, d.h. das Medium wird überdicht. Die Welle wird dann nahezu vollständig an der Vorderseite des Targets reflektiert. Die Änderung von einer durchlässigen zu einer reflektierenden Folie kann als Schalteffekt verstanden werden. Ein Schalter soll hier definiert sein, als ein optisches Element, welches Licht zunächst zu fast 100% transmittieren lässt und dieses dann nach einer bestimmten Schaltzeit fast völlig am Durchgang hindert und gleichzeitig die Reflexion an der Target-Vorderseite ansteigt.



Abbildung 5.21: Zeitliche Entwicklung der Plasmafrequenz für einen Puls von 30 eV-Photonen und einer Intensität von  $I = 1 \cdot 10^{16} W/cm^2$  und  $I = 1 \cdot 10^{18} W/cm^2$ . Nach etwa 100 fs erreicht die Plasmafrequenz die Photonenfrequenz bei der niedrigeren Intensität. Bei höheren Intensität wird  $\omega_p = \omega$  viel früher, nach bereits etwa 20 fs, erreicht.

Für den Fall von 30 eV-Photonen ist die zeitliche Entwicklung der Plasmafrequenz bei einer Intensität von  $I = 1 \cdot 10^{16} W/cm^2$  und  $I = 1 \cdot 10^{18} W/cm^2$ in Abbildung 5.21 dargestellt. Für eine Intensität von  $I = 1 \cdot 10^{16} W/cm^2$  erreicht die Plasmafrequenz die Photonenfrequenz nach etwa 100 fs. Im Falle der höheren Intensität  $I = 1 \cdot 10^{18} W/cm^2$ , ist die Ionisierung schneller und  $\omega_p \approx \omega$ wird bereits nach etwa 20 fs erreicht.

In Abbildung 5.22 sind Transmission, Absorption und Reflexion für den Fall von 30 eV-Photonen bei einer Intensität von  $I = 1 \cdot 10^{18} W/cm^2$  dargestellt. Es zeigt sich, dass bereits nach etwa 20 fs die Transmission ein Minimum erreicht hat und die Reflexion ansteigt. Zu diesem Zeitpunkt hat die Plasmafrequenz in etwa die Photonenfrequenz erreicht. Das Medium wechselt von einem unterdichten in einen überdichten Zustand. Die resultierende Schaltzeit beträgt in diesem Fall nur 7 fs. Die Schaltzeit hängt stark von der Intensität der Strahlung ab. Je höher die Strahlintensität, desto schneller die Ionisation, desto eher fällt die Transmission ab und die Reflexion steigt an.

Abbildung 5.23 zeigt den einfallenden  $sin^2$ -Puls mit einer Intensität von  $I = 1 \cdot 10^{16} W/cm^2$  sowie den transmittierten, den absorbierten und den reflektierten Puls. Für die niedrigere Intensität ist die Schaltzeit wesentlich größer und beträgt nur etwa 60 fs.

Es ist zu vermuten, dass dieser Schalteffekt bei Experimenten noch deutli-



Abbildung 5.22: Transmission, Absorption und Reflexion bei einer Strahlintensität von  $I = 1 \cdot 10^{18} W/cm^2$  und einer Photonenenergie von 30 eV. Nach bereits etwa 20 fs erreicht die Transmission ein Minimum. Zu diesem Zeitpunkt erreicht die Plasmafrequenz die Photonenfrequenz, vergleiche mit Abbildung 5.21. Die Reflexion beginnt, stark an zu steigen. Die Schaltzeit beträgt hier 7 fs.



Abbildung 5.23: Gezeigt ist der einfallende  $\sin^2$ -Puls mit 30 eV-Photonen und einer Intensität von  $I = 1 \cdot 10^{16} W/cm^2$ . Zudem ist der transmittierte, der absorbierte und den reflektierter Teil des Pulses dargestellt. Die Schaltzeit ergibt sich zu etwa 20 fs.

cher in Erscheinung tritt, als es in Abbildung 5.23 und 5.22 zu sehen ist. Der Grund ist, dass die Absorption in dem benutzen Modell in der Nähe der Plasmafrequenz weit überschätzt wird. Folglich sollte der reflektierte Anteil im Experiment wesentlich größer sein.

### 5.5.2 Experimenteller Nutzen des Schalteffektes

Dieser Schalteffekt kann von großem experimentellem Interesse sein, da er es ermöglicht, einen VUV-Puls zu verkürzen. Der einfallende Puls heizt und ionisiert die Folie. Sobald die Plasmafrequenz die Photonenfrequenz erreicht, wird der größte Teil des Pulses reflektiert. Dieser reflektierte Puls ist kürzer als der Eingangspuls und besitzt eine steile Flanke. Auf diese Weise kann zum Beispiel ein störender Vorpuls, wie er u.a. bei der Erzeugung mittels hoher Harmonischer entsteht, abgeschnitten werden. Hierbei heizt der Vorpuls das Medium auf und der Hauptpuls wird an der Oberfläche reflektiert. Für sehr kurze VUV-Pulse muss die Intensität jedoch sehr groß sein, damit die Ionisierung schnell genug ist, um den kurzen Eingangspuls wesentlich verkürzen zu können.

Ein großer Nachteil bei dieser Pulsverkürzung ist, dass die Intensität des reflektierten Pulses stark reduziert ist. Nahezu 80% der Energie des VUV-Pulses gehen als Wärmeenergie im Medium verloren und nur etwa 20% der Intensität des Eingangspulses ( $I = 1 \cdot 10^{16} W/cm^2$ ) sind im reflektierten Puls enthalten. Je höher jedoch die Intensität des Eingangspulses ist, umso weniger Energie geht im Verhältnis bei dem Heizprozeß verloren.

Die Nutzung eines schnellen Plasma-Schalters wurde auch für optische  $CO_2$ -Laserpulse diskutiert. Ziel war es auch hier, die Pulslängen wesentlich zu verkürzen. Literatur hierzu findet sich u.a. bei Kwok und Yablonovitch (1977); Alcock und Corkum (1980); Kwok und Yablonovitch (1975) und Alcock et al. (1975). Ein neues Experiment mit Plasmaspiegeln stammt von Dromey et al. (2006). Mittels eines doppelten Plasmaspiegels konnte das Kontrastverhältnis eines 500 fs optischen Petawattpulses auf  $10^{-11}$  mit einer sehr steilen Anstiegsflanke vergrößert werden.

# 6 Zusammenfassung

In dieser Arbeit wurde ein Modell für die VUV-Photo-Absorption in Metallen und WDM (Warm Dense Matter) entwickelt, das auf alle Materialtemperaturen und Photonenenergien anwendbar ist. Es wurde dabei Bezug auf den VUV-FEL (Vacuum Ultra Violet-Free Electron Laser) FLASH (Free electron LASer Hamburg) in Hamburg genommen.

Die theoretische Basis des neuen Modells ist die mikroskopische Theorie der inversen Bremsstrahlung. Den Ausgangspunkt bildeten die Arbeiten von Krainov (2000, 2001), in denen die Rate für die inverse Bremsstrahlung durch Elektron-Ion-Stöße aus dem quantenmechanischen Wirkungsquerschnitt für die spontane Bremsstrahlung (Sommerfeld, 1931) unter Berücksichtigung der stimulierten Emission hergeleitet wird. Als ein zentrales Ergebnis stellten sich die unterschiedlichen Absorptionsraten für schnelle und langsame Elektronen heraus. Für schnelle Elektronen ergab sich das aus der Hochtemperatur-Plasmaphysik bekannte Spitzer-Ergebnis. Um einen Ausdruck der Absorptionsraten in Metallen und WDM zu ermitteln, wurde die gemittelte mikroskopische Stoßrate im Rahmen des Drude-Sommerfeld-Modells benutzt. Es konnte so ein neues Ergebnis für kleine Elektronen-Impulse analytisch hergeleitet werden. Durch die Interpolation schneller und langsamer Elektronen resultierte ein Ausdruck für die totale Absorptionsrate, der in allen Temperatur- und Photonenenergie-Bereichen Gültigkeit besitzt. Die aus der Absorptionsrate resultierende Stoßrate zeigt eine Abhängigkeit von der Temperatur und von der Photonenfrequenz und wurde als AC-Stoßfrequenz bezeichnet. Aus dieser AC-Stoßfrequenz ließ sich auch ein Ausdruck der Stoßfrequenz ohne ein äußeres Photonenfeld ableiten. Diese DC-Stoßfrequenz beschreibt die Transport-Koeffizienten in einem Medium. Es zeigte sich eine überraschend gute Übereinstimmung zwischen modellierter DC-Stoßfrequenz und experimentellen Daten, die sich aus der Messung des spezifischen Widerstands ergaben.

Der makroskopische Ausdruck für den Absorptionskoeffizienten ergab sich aus der vollen dielektrischen Funktion des Drude-Sommerfeld-Modells mit der mikroskopischen effektiven Stoßfrequenz.

Im zweiten Teil dieser Arbeit wurden numerische Simulationen mit FLASH-Parametern durchgeführt. Ein großer Vorteil von FLASH ist, dass bei einem

### 6 Zusammenfassung

fokussierten Puls sehr hohe Strahlintensitäten erzeugt werden können. Aufgrund der Kürze der Pulse bleibt das Target während der Wechselwirkung mit dem Puls bei Festkörperdichte bestehen. Dies führt zu der Erzeugung eines heißen Festkörpers. Für die Simulationen wurde der hydrodynamische Code MULTIfs, der speziell für ultrakurze Pulse entwickelt worden ist, um das neue Absorptionsmodell erweitert. Zum Einen wurden die Transmissionsexperimente mit FLASH simuliert. Hierbei zeigte sich eine gute Übereinstimmung zwischen Simulation und Experiment. Zum Anderen wurden die hydrodynamische Expansion sowie die Temperatur- und Dichte-Entwicklung simuliert, um Anhaltspunkte für zukünftige Experimente zu erhalten.

# 6.1 Ausblick

Zukünftige Experimente mit FLASH werden zeigen, inwieweit das neue Modell mit Absorptionsmessungen an geheiztem Material übereinstimmt. Da dieses Modell auch eine gute Übereinstimmung mit gemessenen Daten für kalte Materialien zu liefern scheint, wäre es zudem interessant, das Modell als Ausgangspunkt für weitere Untersuchungen zu nutzen und typische Festkörpereigenschaften wie Elektron-Phonon-Wechselwirkung, effektive Massen und Abschirmeffekte mit einzubeziehen. Ein weiterer Punkt könnte die Erweiterung des Modells und des Codes MULTIfs-A für Materialverbindungen darstellen. Von besonderem experimentellem Interesse sind hierbei Kunststoffverbindungen und Oxide.

# Literaturverzeichnis

http://www-cxro.lbl.gov.

- http://www-hasylab.desy.de/facility/fel.
- http://server.faia.upm.es/multi/.
- http://www.pals.cas.cz/pals/.
- A. Abrikosov. Einführung in die Theorie normaler Metalle. Vieweg, 1976.
- A. Alcock und P. Corkum. Ultra-Short Pulse Generation with CO<sub>2</sub> Lasers. Phil. Trans. Roy. Soc. A, 298:365–376, 1980.
- A. Alcock, P. Corkum, und D. James. A fast scalable switching technique for high-power CO<sub>2</sub> laser radiation. Appl. Phys. Lett., 27:680–682, 1975.
- S. Anisimov und V. Khokhlov. Instabilities in Laser-Matter Interaction. CRC Press, 1995.
- S. Anisimov und B. Rethfeld. On the theory of ultrashort laser pulse interaction with a metal. *Proc. SPIE Int. Soc. Opt. Eng.*, 3093, 1996.
- S. Anisimov, V. Zhakhovskii, N. Inogamov, K. Nishihara, Y. Petrov, und V. Khokhlov. Ablated Matter Expansion and Crater Formation under the Action of Ultrashort Laser Pulse. *Journal of Experimental and Theoretical Physics*, 103, 2006.
- L. Artsimowitsch und R. Sagdejew. *Plasmaphysik für Physiker*. B.G. Teubner, Stuttgart, 1983.
- N. Ashcroft und N. Mermin. *Festkörperphysik*. Oldenbourg Wissenschaftsverlag, 2001.
- S. Atzeni und J. Meyer-ter-Vehn. *The Physics of Inertial Fusion*. Oxford, 2002.

### Literaturverzeichnis

- V. Ayvazyan et al. First operation of free-electron laser generating GW power radiation at 32 nm wavelength. *Eur. Phys. J. D*, 37:297–303, 2006.
- D. Bejan und G. Rassev. Nonequilibrium electron distribution in metals. *Physical Review B*, 55:4250–4256, 1997.
- M. Born und E. Wolf. Principles of Optics. Pergamon Press, 1980.
- A. Chin, J. Bakker, und J. Kono. Ultrafast electroabsorption at the transition between classical and quantum response. *Physical Review Letters*, 85(15): 3293–3296, 2000.
- B. Dromey, M. Zepf, et al. High harmonics generation in the relativistic limit. *Nature Physics*, 2:698, 2006.
- K. Eidmann. Radiation transport and atomic physics modeling in high-energydensity laser-produced plasmas. Laser and Particle Beams, 12:223–244, 1994.
- K. Eidmann, J. Meyer-ter-Vehn, und T. Schlegel. Hydrodynamic simulation of subpicosecond laser interaction with solid-density matter. *Phys. Rev. E*, 62:1202–1214, 2000.
- M. Fedorov. Atomic and Free Electrons in a Strong Light Field. World Scientific Publishing, 1997.
- D. Fisher, M. Fraenkel, Z. Henis, E. Moshe, und S. Eliezer. Interband and intraband (Drude) contribution to femtosecond laser absorption in aluminum. *Phys. Rev. E*, 65:016409, 2001.
- E. Gullikson, P. Denham, S. Mrowka, und J. Underwood. Absolute photoabsorption measurements of Mg, Al and Si in the soft-x-ray region below the  $L_{2,3}$  edges. *Eur. Phys. J. D*, 49:16283–16288, 1994.
- H. Hagemann, W. Gudat, und C. Kunz. Optical Constants from the Far Infrared to the X-ray Region. DESY Technical Report SR 74/7, 1974.
- W. Heitler. The Quantum Theory of Radiation. University Press, Oxford, 1954.
- B. Henke, P. Lee, T. Tanaka, R. Shimabukuro, und B. Fujikawa. Low-energy x-ray interaction coefficients: Photoabsorption, Scattering and Reflection. *Atomic Data and Nuclear Data Tables*, 27, 1982.
- N. Hussey, K. Takenaka, und H. Takagi. Universality Mott-Ioffe-Regel-Limit in metals. *Phil. Magazine*, 84:2847–2864, 2004.

- S. Ichimaru. Statistical Plasma Physics, Vol. II, Condensed Plasmas. Addison-Wesley Publishing Company, 1994.
- J. Jackson. Klassische Elektrodynamik. Walter de Gruyter, 1982.
- L. Keldysh. Ionization in the field of a strong electromagnetic wave. Sov. Phys. JETP, 10, 1965.
- A. Kemp. Das Zustandsgleichungs-Modell QEOS für heiße, dichte Materie. Max-Planck-Institut für Quantenoptik, MPQ229, 1998.
- C. Kittel. Einführung in die Festkörperphysik. R. Oldenbourg Verlag, 1968.
- H. Koch und J. Motz. Bremsstrahlung Cross-Section Formulas and Related Data. *Reviews of modern Physics*, 31:920–958, 1959.
- V. Krainov. Inverse stimulated bremsstrahlung of slow electrons under coulomb scattering. J. Phys. B: Mol. Opt. Phys., 33:1585–1595, 2000.
- V. Krainov. Absorption of electromagnetic energy by slow electrons under scattering from coulomb centers. J. Exp. Theo. Phys., 92:1109–1117, 2001.
- A. Krenz. Transport und Absorption von intensiven XUV-Strahlen in dichten Plasma-Schichten. Diplomarbeit, Technische Universität München, 2003.
- A. Krenz und J. Meyer-ter-Vehn. Absorption of VUV-FEL Radiation in Warm Dense Matter. J. Phys. IV France, 1:1097–1100, 2005a.
- A. Krenz und J. Meyer-ter-Vehn. Plasma of extreme energy density by intense XUV-beams. 31th EPS Conference on Plasmapysics, ECA, 28G:2024, 2004.
- A. Krenz und J. Meyer-ter-Vehn. Dense VUV-heating of plasma layers and their use as ultrafast switches. *Eur. Phys. J. D*, 36:199–202, 2005b.
- H. Kwok und E. Yablonovitch. 30-psec CO<sub>2</sub> laser pulses generated by optical free induction decay. Appl. Phys. Lett., 30:158–160, 1977.
- H. Kwok und E. Yablonovitch. Electrical triggering of an optical breakdown plasma with subnanosecond jitter. *Appl. Phys. Lett.*, 27:583–585, 1975.
- L. Landau und E. Lifschitz. *Classical Field Theorie*. Akademie Verlag Berlin, 1987.
- L. Landau und E. Lifschitz. Lehrbuch der theoretischen Physik Band 3 Quantenmechanik. Akademie Verlag Berlin, 1988.
- L. Landau und E. Lifschitz. Lehrbuch der theoretischen Physik Band 4 Quantenelektrodynamik. Akademie Verlag Berlin, 1986.

#### Literaturverzeichnis

- R. Lee, H. Baldis, R. Cauble, O. Landen, J. Wark, A. Ng, S. Rose, C. Lewis, D. Riley, J.-C. Gauthier, und P. Audebert. Plasma-based studies with intense X-ray and particle beam sources. *Laser and Particle Beams*, 20:527–536, 2002.
- R. Lee, S. Moon, H.-K. Chung, W. Rozmus, H. Baldis, G. Gregori, R. Cauble, O. Landen, J. Wark, A. Ng, S. Rose, C. Lewis, D. Riley, J.-C. Gauthier, und P. Audebert. Finite temperature dense matter studies on next-generation light sources. J. Opt. Soc. Am. B, 20:770–778, 2003.
- Y. Lee und R. More. An electron conductivity model for dense plasmas. *Phys. Fluids*, 27:1273–1286, 1984.
- G. Materlik und T. Tschentscher. Technical Design Report: The X- Ray Free Electron Laser, 2001.
- J. Meyer-ter-Vehn und A. Krenz. Dense plasma physics studied with XFELs. Inertial Fusion Sciences and Applications, American Nuclear Society, La Grange Park Illinois, 36:912–916, 2004.
- D. Palik. Handbook of optical constants of solids. Academic Pree, INC, 1985.
- J. Patterson und B. Bailey. Solid-State Physics Introduction to the Theory. Springer Verlag, 2007.
- D. Price, R. More, R. Walling, G. Guethlein, R. Shepherd, R. Stewart, und W. Withe. Absorption of ultrashort laser pulses by solid targets heated rapidly to tmperatures 1-1000 eV. *Phys. Rev. Lett.*, 75:252–255, 1995.
- R. Ramis, R. Schmalz, und J. Meyer-ter-Vehn. MULTI a computer code for one-dimensional multigroup radiation hydrodynamics. *Computer Physics Communications*, 49:475, 1988.
- F. Reif. Grundlagen der physikalischen Statistik und Physik der Wärme. Walter de Gruyter, 1975.
- H. Reiss. Effect of an intense electromagnetic field on a weakly bound system. *Physical Review A*, 22:1786–1813, 1980.
- B. Rethfeld. Mikroskopische Prozesse bei der Wechselwirkung von Festkörpern mit Laserpulsen im Subpikosekundenbereich. PhD thesis, Universität Braunschweig, 2000.
- B. Rethfeld, Kaiser, M. Vicanek, und G. Simon. Ultrafast dynamics of nonequilibrium electrons in metals under femtosecond laser irradiation. *Eur. Phys. J. B*, 65:214303–214311, 2002.
- B. Rus, 2006. Persönliche Mitteilung zu ersten Experimenten bei PALS.
- R. Sobierajski. High intensity VUV-FEL radiation interaction with solids transmission, reflection and absorption, 2006. Tagungsbeitrag.
- A. Sokolov. Optical Properties of Metals. Blackie and Son Limited, 1967.
- K. Sokolowski-Tinten. High Intensity VUV-FEL Interaction with solids First beamtime oct./nov. 2005 @BL2, 2006. Tagungsbeitrag.
- A. Sommerfeld. Atombau und Spektrallinien. Vieweg, Braunschweig, 1931.
- A. Sommerfeld und H. Bethe. *Elektronentheorie der Metalle*. Springer Verlag, 1967.
- J. Spitzer. *Physics of Fully Ionized Plasmas, 2nd edn.* Wiley Interscience, New York, 1962.
- T-4 group, Los Alamos National Laboratory. SESAME Report on the Los Alamos Equation-Of-State Library Analysis, 2000.
- B. Tanner. Introduction to the Physics of Electrons in Solids. Cambridge University Press, 1995.
- G. Tsakiris und K. Eidmann. An approximate method for calculating planck and rosseland mean opacities in hot, dense plasmas. *Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer*, 38:353–368, 1987.
- Y. Zel'dovich und Y. Raizer. *Physics of Shock Waves and High-Temperature Hydrodynamic Phenomena*. Academic Press New York and London, 1966.
- J. Ziman. Electrons and Phonons. Oxford University Press, 1960.

Literaturverzeichnis

## Danksagung

An dieser Stelle möchte ich mich bei allen bedanken, die mich während der letzten Jahre unterstützt haben und somit zum Gelingen dieser Arbeit beigetragen haben.

Meinen ganz besonderen Dank möchte ich meinem Doktorvater Prof. Dr. Jürgen Meyer-ter-Vehn aussprechen. Er gab mir die Möglichkeit, diese interessante Arbeit zu verfassen und stand mir immer geduldig mit Rat und Tat zur Seite. Mit unseren vielen Diskussionen trug er ganz wesentlich zum Gelingen dieser Arbeit bei.

Ich möchte mich bei ihm auch für das freundliche und verständnisvolle Arbeitsklima bedanken und dafür, dass er mir die Möglichkeit gegeben hat, meine Arbeit auf zahlreichen Konferenzen zu präsentieren.

Ich bedanke mich auch recht herzlich bei Prof. Dr. Manfred Kleber für die freundliche Übernahme des Zweitgutachtens.

Ich danke dem Max-Planck-Institut für die finanzielle Unterstützung dieser Arbeit.

Ein besonderer Dank gilt Prof. Dr. Rafael Ramis, der mich in die Programmierung von MULTI eingeführt hat und mir viele Details geduldig erklärt hat.

Dr. Klaus Eidmann danke ich für die Einführung in den Code MULTIfs.

Ich danke Dr. Thomas Tschentscher, der mich immer über neueste Experimente bei DESY auf dem Laufenden gehalten hat und mir viel über das Experimentieren mit FLASH erklärt hat.

Bei Dr. Bärbel Rethfeld bedanke ich mich für die vielen interessanten Diskussionen, die wir geführt haben. Ich danke Herrn Grote für die schnelle Behebung aller möglichen Computerprobleme.

Ich möchte mich auch bei allen Kollegen am Max-Planck-Institut, insbesondere bei Dr. Michael Geissler, Dr. Jörg Schreiber, Dr. Malte Kaluza, Dr. Matthias Dreher, Sergey Rykovanov und Dr. Stein für die netten Diskussionen über die Physik und den Rest der Welt bedanken.

Auch gilt ein besonderer Dank den Kollegen, mit denen ich ein Zimmer teilen durfte, und mit denen ich viele lehrreiche Diskussionen führen konnte. Vielen Dank an Dr. Ke Lan, Dr. Javier Honrubia, Dr. Mikail Basko und Dr. Sergey Gordienko.

Mein ganz besonderer Dank gilt auch meinen Eltern, die immer an mich geglaubt haben und mir dieses Studium ermöglichten.

Ein ganz besonderer Dank geht an meinen Mann Thorsten, der mich immer in all meinem Tun liebevoll unterstützt und mir immer ein unbeschreibliches Interesse an meiner Arbeit entgegengebracht hat. Ohne ihn und seine motivierenden Worte wäre mir diese Arbeit vielleicht nie gelungen... ...und natürlich für sein unermüdliches Korrekturlesen.

In der letzten Zeile dieser Arbeit möchte ich mich auch ganz herzlich bei meinen Freunden und meiner ganzen Familie bedanken, dass sie immer Verständnis für mich und meine Arbeit hatten.