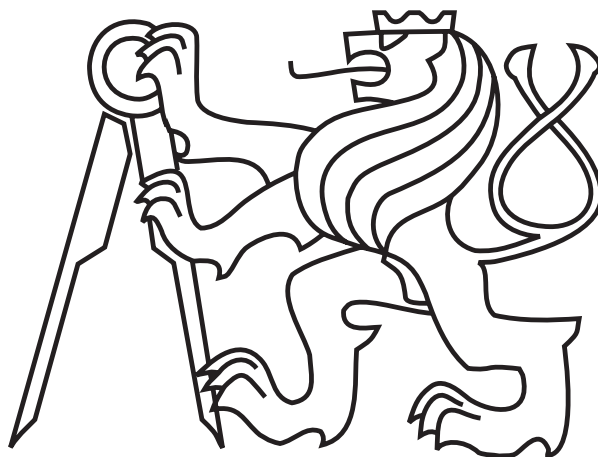


ČESKÉ VYSOKÉ UČENÍ TECHNICKÉ V PRAZE

Fakulta jaderná a fyzikálně inženýrská

Katedra fyzikální elektroniky



DIPLOMOVÁ PRÁCE

**Recirkulace rychlých elektronů při interakci
krátkých intenzivních laserových pulsů
s terčí a její vliv na K- α záření**

**Hot electron recirculation in the short
intense pulse interactions with solid targets
and its influence on K- α radiation**

Autor práce: Bc. Vojtěch Horný

Vedoucí práce: Ing. Ondřej Klimo, Ph.D.

Akademický rok: 2013/2014

Na toto místo přijde svázat **zadání diplomové práce!**

V jednom z výtisků musí být **originál** zadání, v ostatních kopie.

Čestné prohlášení

Prohlašuji na tomto místě, že jsem předloženou práci vypracoval samostatně a že jsem uvedl veškerou použitou literaturu.

V Praze dne 6. ledna 2014

.....

Bc. Vojtěch Horný

Poděkování

Děkuji zejména vedoucímu své diplomové práce, ing. Ondřeji Klimovi, PhD., za trpělivé vedení této práce, velmi užitečné konzultace k tématu, předání množství znalostí a zkušeností a naučení a vysvětlení mnoha praktických dovedností, které jsou pro mne velkým přínosem a příslibem do budoucna.

Název práce: Recirkulace rychlých elektronů při interakci krátkých intenzivních laserových pulsů s terčí a její vliv na K- α záření

Autor: Bc. Vojtěch Horný

Obor: Inženýrská informatika

Zaměření: Informatická fyzika

Druh práce: Diplomová práce

Vedoucí práce: Ing. Ondřej Klimo, Ph.D., KFE FJFI ČVUT

Konzultant: Prof. Dr. Markus Roth, TU Darmstadt

Abstrakt: Po interakci intenzivního laserového záření s pevnou látkou vznikají rychlé elektrony, které postupují do terče, kde inicializují procesy vedoucí ke generaci charakteristického rentgenového záření K- α . Po průchodu rychlých elektronů relativně tenkým terčem vzniká na jeho zadní straně silné elektrické pole, které vtahuje rychlé elektrony zpět do terče. Tyto recirkulující elektrony zvyšují výtěžek záření K- α , prodlužují délku impulsu a zvětšují oblast vyzařování. Numerickou simulací metodou particle-in-cell byl ověřen model elektronové recirkulace pro nerelativistické energie elektronů. Využitím tohoto modelu v simulacích metodou Monte Carlo bylo prokázáno, že elektronová recirkulace má výrazný vliv na generované rentgenové záření zejména pro tenké terče z materiálů s nízkým atomovým číslem a pro vysoké teploty spektra rychlých elektronů.

Klíčová slova: recirkulace elektronů, záření K- α , metoda particle-in-cell, metoda Monte Carlo

***Title:* Hot electron recirculation in the short intense pulse interactions with solid targets and its influence on K- α radiation**

Author: Vojtěch Horný

Abstract: Fast electrons created as a result of laser beam interaction with a solid target penetrate into the target material and initialize processes, leading to characteristic X-ray K- α radiation generation. Due to the strong electric field induced at the rear side of a thin target, the transmitted electrons are returned back into the target. These recirculating electrons increase the K- α radiation yield, as well as the duration of the pulse and the size of the radiation emitting area. A model describing electron recirculation was verified via computer particle-in-cell simulations for the non-relativistic electron energies. Using this model it was confirmed that the electron recirculation has a distinct influence on the generated X-ray radiation, especially for thin targets made from low-Z materials, and for higher hot electron temperatures.

Key words: electron recirculation, K- α radiation, particle-in-cell method, Monte Carlo method

Obsah

1	Úvod	9
2	Procesy vedoucí ke vzniku krátkých rentgenových impulsů v laserovém plazmatu	12
2.1	Studium a aplikace laserem generovaných krátkých rentgenových impulsů	13
2.2	Interakce krátkých laserových impulsů s pevnou látkou	14
2.3	Vznik rychlých elektronů	15
2.4	Transport rychlých elektronů pevným terčem	17
2.5	Srážková ionizace vnitřních slupek atomů	18
2.5.1	Augerovské elektrony	18
2.5.2	Charakteristické záření	19
3	Recirkulace elektronů	22
3.1	Model elektrického pole na povrchu terče	23
3.2	Model izotermické expanze	26
3.3	Model izotermické expanze: příklad pro automodelový potenciál	27
3.4	Model expanze elektronového oblaku	30
4	Použité numerické metody a kódy	33
4.1	Metoda particle-in-cell	33
4.1.1	Fyzikální podstata metody PIC	34
4.1.2	Matematické odvození metody PIC	35
4.1.3	Výpočetní kód LPIC++	38
4.2	Metoda Monte Carlo	38
4.2.1	Základy metody Monte Carlo	38
4.2.2	Metoda Monte Carlo pro transport částic a záření v terči	40
4.2.3	Shrnutí užití metody Monte Carlo pro transport částic	41
4.2.4	Výpočetní kód PENELOPE	42
5	Výsledky provedených simulací	44
5.1	Ověření modelu recirkulace elektronů	45

5.1.1	Zpracování výsledků	47
5.1.2	Zhodnocení výsledků	50
5.2	Efekt recirkulace na výtěžek záření $K\text{-}\alpha$	51
5.2.1	Průběh typické simulace	53
5.2.2	Počet vyzářených fotonů $K\text{-}\alpha$	55
5.2.3	Velikost oblasti vyzařování	60
6	Návrh experimentu k demonstraci efektu recirkulace elektronů	64
7	Závěr	66

Kapitola 1

Úvod

Tato diplomová práce si klade za cíl zkoumat, popsat a demonstrovat fenomén recirkulace elektronů a jeho vliv na generaci charakteristického rentgenového záření. Toto záření může vznikat po interakci krátkého intenzivního laserového impulsu s pevným terčem.

Při dopadu intenzivního laserového impulsu na povrch terče elektrické pole vlny výrazně převyšuje elektrické pole vazby držící některé elektrony v poli jádra. Důsledkem je blesková ionizace povrchové vrstvy a vznik horkého hustého plazmatu. Většina elektronů v plazmatu získá energii v řádech desítek či stovek elektronvoltů a jejich rozdělení bývá maxwellovské. Těmto elektronům se říká tepelné elektrony. Oproti tomu jsou v laserovém plazmatu přítomny také další elektrony s energiemi řádově vyššími. Těmto elektronům se říká rychlé elektrony, které při průniku do chladnější části terče mohou vyvolávat druhotné interakce.

V této práci je kladen největší důraz na šíření těchto rychlých elektronů terčem a v oblasti za terčem. Poté, co intenzivní svazek rychlých elektronů opustí terč, za zadní stranou terče se vytvoří silné elektrické pole. Příčinou vzniku tohoto pole je expanze ionizované povrchové vrstvy do vakua. Elektrické pole může za příhodných podmínek přitáhnout rychlé elektrony zpět do terče a tyto se poté šíří opět terčem na opačnou stranu. Tento fenomén se nazývá elektronovou recirkulací a je hlavním předmětem výzkumu v rámci této diplomové práce.

Rychlé elektrony při průchodu terčem podstupují pružné i nepružné srážky, které mohou vést k ionizaci atomů materiálu terče. Pokud jsou ionizovány vnitřní slupky atomů, dochází k velmi rychlé relaxaci. Elektrony ze slupky z vyšším hlavním kvantovým číslem přecházejí do neobsazené vnitřní slupky. Tento přechod je spojen s vyzářením energie ve formě charakteristického fotonu. Pro náš účel jsou nejpodstatnější přechody $K-\alpha$. Energie takových vyzářených charakteristických fotonů se pro uvažované materiály nachází v rentgenové části spektra. Vliv recirkulace rychlých elektronů je v této práci demonstrován právě na zvýšení výtěžku záření $K-\alpha$.

Myšlenka použít interakci laserového záření s pevným terčem jako zdroj rentgenového

záření přináší zajímavé možnosti z hlediska aplikací. Uvažované rentgenové impulsy jsou totiž synchronizovány s generujícím laserovým impulsem. Rentgenový zdroj je prostorově malý a délky impulsů jsou velmi krátké při zachování opakovací frekvence laseru.

Pro generaci záření K- α jsou obvykle používány tenké terče (desítky μm). Výhodnější je používat záření ze zadní strany terče, neboť záření z přední strany je znehodnoceno šumem z plazmatu, které se tam vytvoří. Samotné záření K- α se používá například k měření teploty rychlých elektronů u sendvičových terčů. V těchto terčích je obsažena vrstva materiálu, která vyzařuje záření K- α a která je umístěna v různé vzdálenosti od povrchu terče. Studium hloubky, z jaké je vyzařováno, je možno stanovit teplotu elektronového spektra.

V tomto případě a ani u jiných aplikací nebývá počítáno s elektronovou recirkulací, která má na vyzařování vliv hlavně v případech, kdy se vytvoří intenzivní elektrické pole, tedy v případech s velkým množstvím rychlých elektronů, při vysokých teplotách elektronového spektra a v případech tenkých terčů. Tato práce má ukázat přibližné hraniční hodnoty teploty elektronového spektra a tloušťky terče, kdy začíná být podstatný vliv elektronové recirkulace na výtěžek charakteristického záření K- α ze zadní strany terče.

Samotná práce je rozčleněna do čtyř hlavních kapitol. Druhá kapitola následující po úvodu se zabývá teoretickým studiu procesů vedoucím ke vzniku krátkých rentgenových impulsů v laserovém plazmatu. Postupně jsou diskutovány vlastnosti a aplikace krátkých rentgenových impulsů obecně, vznik rychlých elektronů po interakci laserového záření s pevným terčem a transport těchto rychlých elektronů pevným terčem s důrazem na ionizaci vnitřních slupek atomů v materiálu terče a vznik charakteristického záření.

Třetí kapitola se zabývá některými relevantními modely recirkulace elektronů. Je představen model elektrického pole za terčem a modely izotermické expanze a expanze elektronového oblaku do vakua. Je zde uveden vztah pro přepočítání energie, s jakou se recirkulující elektron vrací zpět do terče. V této kapitole je také diskutován vliv elektronové recirkulace na prodloužení délky rentgenových impulsů.

Čtvrtá kapitola se zabývá představením numerických metod a výpočetních simulačních kódů, se kterými se pracovalo v této práci. Nejprve je diskutována metoda particle-in-cell. Využitím kódu LPIC++ byl ověřen model recirkulace elektronů na zadní straně terče. Další část kapitoly je pak věnována metodě Monte Carlo a kódu Penelope. Touto metodou byl simulován transport rychlých elektronů materiálem terče a vznik charakteristického rentgenového záření.

Ve páté kapitole jsou přestaveny a diskutovány výsledky provedených simulací. Podařilo se prokázat, že s elektronovou recirkulací je třeba počítat zejména pro tenké terče pod $50 \mu\text{m}$ a teploty elektronového spektra nad 100 keV . Hranice pro konkrétní případy však silně závisí na materiálu terče. Zároveň byl prokázán nárůst velikosti oblasti vyzařování při započtení elektronové recirkulace.

Poslední velmi stručná kapitola před závěrem podává návrh na experimentální uspořádání, při kterém by bylo možné demonstrovat vliv elektronové recirkulace na výtěžek charakteristického záření $K-\alpha$.

Kapitola 2

Procesy vedoucí ke vzniku krátkých rentgenových impulsů v laserovém plazmatu

První kapitola této diplomové práce má za cíl věnovat se teoretickému studiu procesů vedoucích ke vzniku charakteristického rentgenového záření ve formě ultrakrátkých impulsů (stovky femtosekund až desítky pikosekund) v laserovém plazmatu. Zvláštní pozornost je věnována seznámení se s fenoménem recirkulace elektronů a modely tento jev popisujícími.

Nejprve seznámíme se s rentgenovým zářením obecně, s tím, jak vzniká a jaké jsou jeho charakteristické vlastnosti, vysvětlíme si, k čemu mohou být užitečné velmi krátké rentgenové impulsy a popíšeme si mechanismus, jak tyto velmi krátké rentgenové impulsy vytvořit zdánlivě vzdáleným přístupem, interakcí intenzivního laseru s pevným terčem.

Při této interakci dochází k posloupnosti událostí, jež mohou vést ke generaci tzv. *horkých elektronů*. Horké elektrony se šíří pevným terčem a inicializují různé procesy, mezi nimi i ionizaci atomů v terči. Následně při relaxaci ionizovaného atomu může dojít k vyzáření charakteristického fotonu. Vyjmenované procesy jsou dále v této kapitole diskutovány.

Velmi často se počítá s tím, že jakmile již elektrony opustí terč, tak se už neuvažuje možnost, že by se mohly zpět do terče navrátit. Toto zjednodušení není v některých případech fyzikálně odůvodněné. Pokud je svazek horkých elektronů intenzivní, vytvoří se na povrchu terče kvazistatické elektrické pole, které elektrony vyletující z terče táhne zpět. Uniknuvší elektrony jsou přitahovány zpět do terče a postupně se do něj navracejí. Mohou dále ionizovat terč a způsobovat tak nepřímo vznik dalších fotonů záření $K-\alpha$. Návrat elektronů a jejich následovné šíření terčem zpět na opačnou stranu nazýváme *elektronovou recirkulací*.

Teoretickému studiu elektronové recirkulace a rešerší dostupné literatury k tomuto tématu se zabývá závěrečná část první kapitoly. Zkoumání a demonstrace vlivu recirkulace

elektronů na výtěžek záření K- α je hlavní náplní této práce obecně.

2.1 Studium a aplikace laserem generovaných krátkých rentgenových impulsů

Rentgenové záření je forma elektromagnetického záření o vlnových délkách 1 pikometr až 10 nanometrů. Bylo objeveno německým fyzikem Wilhelmem Conradem Röntgenem. 8. listopadu 1895 začal provádět a zaznamenávat experimenty s novým druhem záření ve vakuové trubici. 28. prosince 1895 napsal předběžnou zprávu *O novém druhu paprsků* [54], přičemž o záření psal jako o paprscích X. Röntgen za své objevy obdržel vůbec první Nobelovu cenu za fyziku.

Rentgenové záření se stalo významným prostředkem studia vnitřní struktury hmoty. Vedle velmi známého užití v medicínské diagnostice našlo i významné uplatnění ve fyzice a chemii. Studium difrakčních struktur rentgenového záření totiž umožňuje zkoumání prostorových struktur v krystalických látkách na atomární úrovni. Typická vlnová délka je totiž srovnatelná s typickou mřížkovou konstantou krystalických látek. Röntgenův objev tak položil základ krystalografii, velmi hojně užívané metodě ve fyzice pevných látek.

V této práci je studováno charakteristické rentgenové záření K- α doprovázející interakci krátkých intenzivních laserových impulsů s pevnými terči. Zabýváme se zejména recirkulací elektronů a jejím vlivem na výtěžek charakteristického záření K- α . Uvažované laserové impulsy jsou velmi krátké, jejich délky jsou v řádech desítek až stovek femtosekund. Podívejme se na vlastnosti rentgenových impulsů, které vznikají jako důsledek interakce laserového záření s pevným terčem a které jsou tedy jsou s laserovými impulsy synchronizovány.

Významné vlastnosti jsou zejména délka impulsu a velikost zdroje rentgenového záření. Délky rentgenových a laserových impulsů jsou srovnatelné [45]. Oblast, ze které je rentgenové záření generované tímto způsobem vyzařováno, je velmi malá, srovnatelná s rozměry interakční oblasti [53, 23]. Řádově jde o μm^2 . Malé rozměry umožňují vyšší rozlišení ve srovnání s alternativními zdroji. Výhodou charakteristického rentgenového záření například oproti synchrotronovému je kvazimonochromaticnost. Tyto specifické vlastnosti popisovaného rentgenového zdroje nacházejí celou škálu možného praktického uplatnění. Zmiňme si nyní některé příklady.

Procesy, jako chemické reakce nebo fázové přechody se odehrávají v časovém intervalu srovnatelném s periodou kmitů atomů v mřížce. Typicky jde o stovky femtosekund. Použití rentgenových impulsů s kratší periodou se jeví být ideálním prostředkem pro experimentální výzkum těchto jevů [37]. Jiné využití pro ultrakrátké rentgenové impulsy se nabízí v medicíně [19, 38] a biologii [51]. Bylo by tak možno sledovat procesy na atomární úrovni s pikosekundovým rozlišením a tím výrazně přispět k lepšímu porozumění těchto procesů.

Dalším krokem by se poté mohlo stát využití velmi krátkých rentgenových impulsů jako buzení některých jaderných reakcí [24] za účelem získání velmi krátkých impulsů záření γ .

Pro porozumění mechanismu vzniku ultrakrátkých rentgenových impulsů je třeba se seznámit s celou posloupností procesů. Postupně budou představeny:

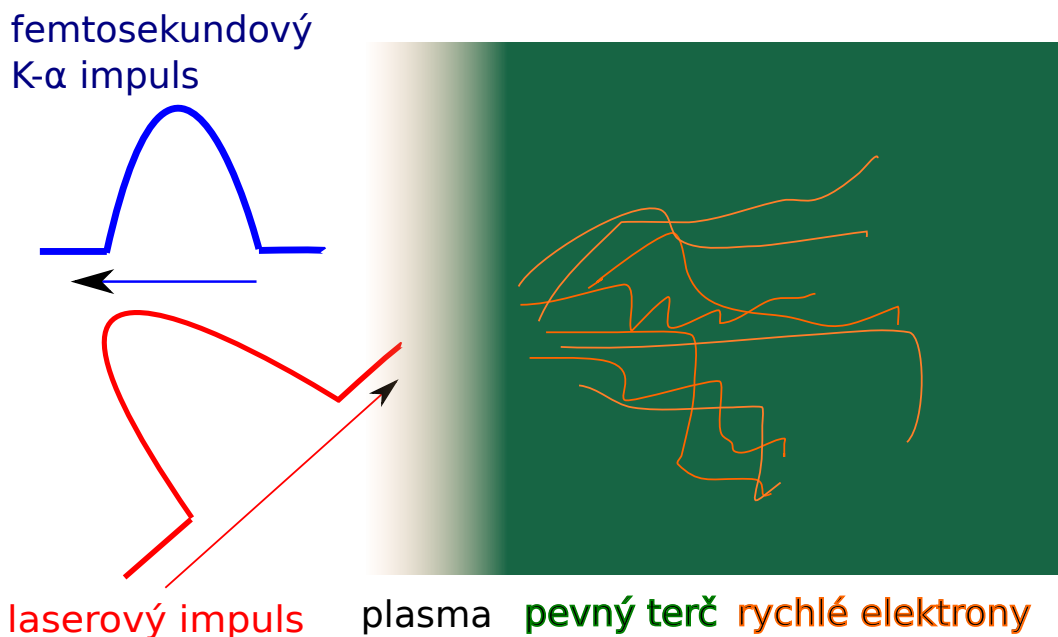
1. interakce záření laseru s pevnými terči
2. vznik rychlých elektronů,
3. jejich transport materiálem,
4. ionizace vnitřních slupek atomů
5. deexcitace a vznik charakteristického záření.

Vysvětleme si nyní uspořádání fyzikálního systému, který je uvažován pro generaci krátkých rentgenových impulsů. Tento systém je znázorněn na obrázku 2.1. Laserová vlna dopadá na terč. Celková délka laserového impulsu je řádově desítky až stovky femtosekund. V povrchové vrstvě terče dojde k rychlé ionizaci a výsledkem procesů popsaných dále v této kapitole vzniknou rychlé elektrony. Rychlé elektrony vnikají do chladné části terče a interagují tam s atomy. Souhrnně lze o vzájemném působení těchto elektronů s prostředím ve chladné části terče hovořit jako o jejich transportu. Pro naši situaci je podstatné, že dochází také k ionizaci ve vnitřních slupkách atomů. Jedním z procesů, jak obsadit díru ve vnitřní slupce, je přechod elektronu z vnější slupky doprovázený vyzářením charakteristického fotonu.

Toto záření se poté šíří terčem. Může být utlumeno interakcí s dalšími atomy. Pokud se jednotlivý foton dostane až ke hranici terče, je vyzářen do prostoru. Studium těchto vyzářených charakteristických fotonů, hlavně tedy fotonů $K\text{-}\alpha$ vylétnuvších ze zadní strany terče, je hlavním motivem této práce. Transport rychlých elektronů materiálem a procesy vedoucí na vznik charakteristických fotonů budou simulovány pomocí metody Monte Carlo představené v kapitole 4.2.

2.2 Interakce krátkých laserových impulsů s pevnou látkou

Rychlý vývoj laserové techniky umožňuje generovat ultrakrátké impulsy záření o velmi vysokých intenzitách, což přináší širokou možnost současných i potencionálních budoucích aplikací. Práce [11] nabízí přehled aplikací pro interakci laseru s pevným terčem do intenzit 10^{19} W/cm². Mezi ně patří např. litografie metodou EUV [33], vzorkování v medicíně [30] či výroba radioizotopů pro medicínské diagnostické účely [25]. Díky objevu techniky



Obrázek 2.1: Uvažovaný fyzikální systém pro popisovaný způsob generace krátkých rentgenových impulsů. Dopadající femtosekundová laserová vlna vyvolá rentgenový impuls trvající srovnatelnou dobu.

označované jako Chirped Pulse Amplification (CPA) [22] v 60. letech 20. století je dnes možno vytvářet femtosekundové laserové impulsy (< 100 fs) s terawattovým výkonem.

Zajímavé aplikace nabízí interakce těchto ultrakrátkých laserových impulsů s pevnou látkou. V dnešní době se již jedná o nesmírně širokou oblast výzkumu. Velmi dobrý souhrn této problematiky je k dispozici v knize [27]. Z této knihy bylo v této práci často čerpáno.

Pro naši práci je nejvýznamnější aplikací interakce laseru s pevnou látkou generace rentgenových impulsů srovnatelné délky s laserovým impulsem. Elektrické pole intenzivních laserových impulsů je řádově vyšší než síla coulombické interakce držící některé elektrony v elektronovém obalu atomu při jeho jádru. Po dopadu impulsu tedy dochází k bleskové ionizaci povrchové vrstvy terče a tato povrchová vrstva se velmi rychle promění ve velmi husté plazma, které poté expanduje do okolí. Plazma postupně absorbuje další energii laserového impulsu, hranice mezi pevnou částí terče a plazmatem se stává neurčitou [49]. Pro maximalizaci výtěžku záření K- α je vhodné, aby se co možná nejvíce energie dopadajícího laserového impulsu deponovalo v terči.

2.3 Vznik rychlých elektronů

Během doby, kdy dopadající laserový impuls interaguje s pevným terčem, může docházet k množství fyzikálních dějů. Příkladem budiž vznik silných magnetických polí [31] či generace vysokoenergetických částicových svazků [6, 39]. Mechanismy jako rezonanční absorpce [47], vakuový ohřev [28] a $\mathbf{j} \times \mathbf{B}$ ohřev [40] vedou ke vzniku tzv. rychlých elek-

tronů. Rychlémi elektrony jsou označovány takové elektrony, jejichž energie je významně vyšší než by odpovídalo teplotě plazmatu. Tato energie může dosahovat hodnot v řádech desítek keV až MeV [26]. Abychom mohli zkoumat generaci záření K- α interakcí laserového záření s pevnou látkou, je třeba porozumět generaci a transportu těchto rychlých elektronů materiálem.

Kromě generace rentgenového záření mají rychlé elektrony i jiné aplikace. Počítá se s nimi například v jednom z konceptů inerciální jaderné fúze. Konkrétně jde o metodu rychlého zážehu (fast ignition) [5]. Při rychlém zážehu se uvažuje nejprve o kompresi materiálu laserovým zářením a následném zahřátí centrální části svazkem rychlých částic. Nejčastěji se v tomto případě hovoří právě o laserem urychlených elektronech. Jiné aplikace nacházejí rychlé elektrony v dozimetrii pro studium vlastností a následnou kalibraci některých detektorů [9].

Pro účely naší práce budou tepelné elektrony zanedbány. Z celkového spektra elektronů bude tedy brána v potaz pouze jedna část příslušející rychlým elektronům a popsána maxwellovskou distribuční funkcí.

Po proniknutí do chladné části terče produkují tyto horké elektrony jak charakteristické, tak brzdné rentgenové záření. Vzhledem k povaze dopadajících laserových impulsů jsou i délky vystupujících rentgenových impulsů časově omezeny. Podívejme se nyní podrobněji na jevy rezonanční absorpce, vakuový ohřev a mechanismus $\mathbf{j} \times \mathbf{B}$.

Rezonanční absorpce K jevu rezonanční absorpce [47] dochází v nadkritickém plazmatu s vysokým hustotním gradientem při šikmém dopadu p-polarizované elektromagnetické vlny laserového impulsu. Charakteristická délka hustotního profilu je přibližně v řádu jednotek vlnových délek dopadajícího laserového záření. V závislosti na úhlu dopadu laserové vlny ale může být i kratší nebo delší. V místě, kde hustota plazmatu nabývá kritické hustoty, tedy $n_c = \varepsilon_0 m_e \omega_0^2 / e^2$, kde m_e je hmotnost elektronu a ω_0 je frekvence dopadající laserové vlny, dojde ke vzniku rezonanční plazmové vlny. Plazmová vlna se poté šíří do části plazmatu s podkritickou hustotou a postupně se absorbuje srážkami elektronů s ionty a Landauovým útlumem [20]. Uplatňuje se také nelineární proces lámání vln. Při těchto procesech pak vznikají rychlé elektrony. Rezonanční absorpce obvykle urychluje relativně malý počet rychlých elektronů a spektrum rychlých elektronů se dá přibližně popsat maxwellovským rozdělením.

Při optimálních podmínkách je mechanismem rezonanční absorpce v terči deponováno až 50% energie laserové vlny. Ideálními podmínkami se rozumí (např. dle [27]) taková konfigurace, kdy

$$(kL)^{1/3} \sin \theta \simeq 0.8, \quad (2.1)$$

kde k je vlnové číslo dopadající vlny, L je charakteristická délka náběhové hrany hustotního profilu a θ je úhel dopadu laserového impulsu.

Vakuový ohřev Vakuový (Brunelův) ohřev [28] se uplatňuje za podobných podmínek jako rezonanční absorpce, ale při kratších charakteristických délkách hustotního profilu. Opět je potřeba lineární p-polarizovaná vlna dopadající na plazmovou vrstvu s velkým hustotním gradientem. Elektron je vytažen z plazmatu ven do vakua a v okamžiku, kdy se změni orientace elektrického pole dopadající vlny, je tento elektron urychlen zpět do plazmatu. Dostane-li se do oblasti s nadkritickou hustotou, nemůže již znovu být tento elektron vlnou ovlivněn a pokračuje dále směrem do chladné části terče.

Účinnost vakuového ohřevu je vyšší u vyšších intenzit dopadajícího laserového impulsu a také pro vyšší úhly dopadu [29]. Pro vyšší intenzity dopadajícího laserového impulsu vakuový ohřev dominuje nad rezonanční absorpcí [29].

Ohřev $\mathbf{j} \times \mathbf{B}$ Mechanismus ohřevu $\mathbf{j} \times \mathbf{B}$ je představen například v článku [40]. Urychlení magnetickou složkou Lorentzovy síly se projevuje u lineárně polarizované dopadající vlny, pro vlny s kruhovou polarizací není ohřev $\mathbf{j} \times \mathbf{B}$ není pozorován. Pro lineárně polarizovanou vlnu s amplitudou elektrického intenzity

$$\mathbf{E} = E_L(x) \times (\sin \omega_0 t) \mathbf{y} \quad (2.2)$$

je ponderomotorická síla působící na elektron

$$\mathbf{f}_p = -\frac{m_e}{4} \frac{\partial}{\partial x} v_L^2(x) (1 - \cos 2\omega_0 t) \mathbf{x}, \quad (2.3)$$

kde

$$v_L = \frac{eE_L}{m_e \omega_0} \quad (2.4)$$

je rychlost oscilací elektronů. Vektory \mathbf{x} a \mathbf{y} jsou směrovými vektory.

Po vystředování ponderomotorické síly za periodu vznikne kvazistacionární složka této síly, která může způsobit změny v hustotním profilu. Oscilující složka ponderomotorické síly pak vede k samotnému ohřevu elektronů. Efekt tohoto ohřevu lze vyčíslit. Je takový, jako kdyby se plazma nacházelo v elektrickém poli

$$E_d = \frac{1}{4} \frac{m_e}{e} \frac{\partial}{\partial x} v_L^2(x) (\cos 2\omega_0 t). \quad (2.5)$$

Efekt urychlení elektronů se projevuje nejvýrazněji, je-li směr dopadajícího laserového paprsku rovnoběžný s gradientem hustoty.

2.4 Transport rychlých elektronů pevným terčem

Pro rychlé elektrony na povrchu terče předpokládáme, že jejich střední volná dráha mnohonásobně přesahuje rozměry plazmatu. Tyto rychlé elektrony tedy relativně snadno proletí ionizovanou povrchovou částí terče, kterou lze nyní považovat za plazma, a svou energii deponují až v chladnější části terče.

Tato výše zmíněná vlastnost ospravedlňuje přístup, který byl v praktické části této práce použit. Samotná interakce laserového impulsu s terčem simulována nebyla. Namísto toho byla přímo zvolena teplota spektra rychlých elektronů. Takové spektrum bylo vygenerováno a použito jako vstup pro simulace transportu rychlých elektronů terčem. Rychlé elektrony se na počátku simulace šíří kolmo k povrchu terče směrem dovnitř.

V zásadě lze rozlišovat dva základní způsoby depozice energie elektronů v chladné části terče. Jednak dochází k nepružným srážkám s atomy. Při nich dochází k excitacím či dokonce ionizacím těchto atomů. Jednak rychlé elektrony vytváří proud, který indukuje makroskopické elektrické pole, které také tyto elektrony zpomaluje [21]. Tok tepelných elektronů z povrchové části do terče je pak kompenzován průnikem volných elektronů z chladné části terče do povrchové vrstvy. Tomuto jevu se říká zpětný proud.

Při průniku elektronů do terče dochází i k dalším zajímavým fyzikálním fenoménům, které však v této práci podrobněji rozvedeny nebudou. Pro simulaci transportu elektronů terčem je použit kód PENELOPE, který provádí výpočty metodou Monte Carlo.

2.5 Srážková ionizace vnitřních slupek atomů

V chladné části terče dochází k nepružným srážkám rychlých elektronů s atomy, při kterých se výrazně mění energie elektronu a také stav atomu. Účinné průřezy těchto interakcí jsou známy jako experimentálně naměřené hodnoty, případně pro některé prvky existují více či méně spolehlivá analytická vyjádření [18].

K ionizacím dochází hlavně ve vnějších elektronových slupkách atomů, nebo ve vodivostních elektronových pásech u kovů, kde jsou elektrony vázány nejslaběji. Podstatným efektem, jenž jsou schopny vyvolat rychlé elektrony, je ionizace vnitřních slupek.

Relaxační doby ionizovaných atomů s chybějícím elektronem ve vnitřní slupce jsou velmi krátké, výrazně kratší než u ionizovaných atomů, kde elektrony nejsou přítomny ve vnějších slupkách [12]. Při relaxaci pak atom přejde do nějakého energeticky výhodnějšího stavu. Existují dvě možnosti, jak se rychle zaplní díra ve vnitřní slupce, tyto jsou znázorněny na obrázcích 2.2 a 2.3.

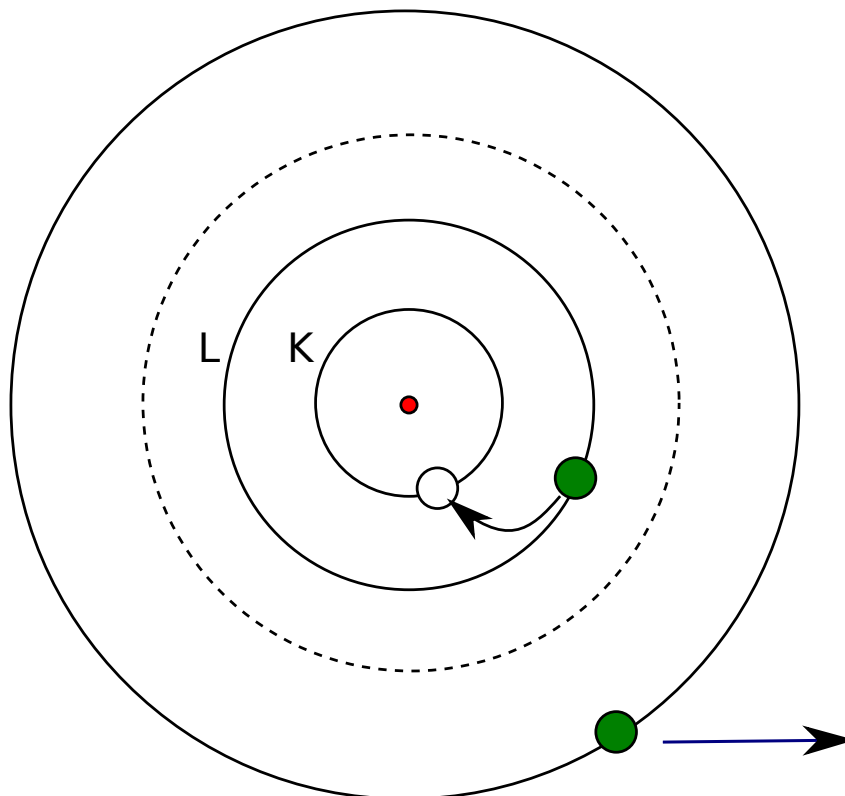
2.5.1 Augerovské elektrony

Pro atomy s nižším atomovým číslem ($Z < 25$) je tzv. vyzáření augerovských elektronů dominantním způsobem znovunastolení výhodnějšího energetického stavu. Díra ve vnitřní slupce se zaplní elektronem z některé vnější slupky a zároveň dojde k odvedení přebývající energie uvolněním jiného elektronu z vnější slupky. Část přebývající energie si elektron odnese s sebou jakou svou kinetickou energii. Celá situace je schématicky znázorněna na obrázku 2.2.

Tento tzv. Augerův jev je základem Augerovy elektronové spektroskopie [15], tedy

metody určení zastoupení atomů na povrchu a jejich valenčního stavu, zvláště u lehkých prvků jako je uhlík, dusík nebo bor.

Jinou zajímavostí je skutečnost, že ačkoli je Augerův jev pojmenován po Pierru V. Augerovi, skutečnou objevitelkou byla Lisa Meitnerová. Její objev byl datován do roku 1922 [48].



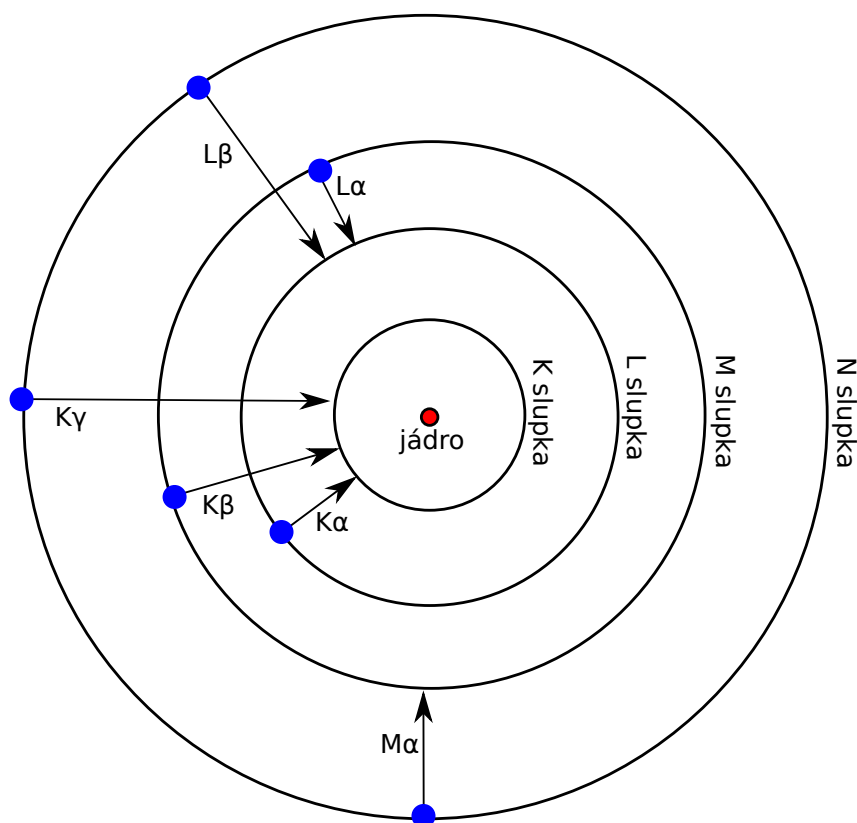
Obrázek 2.2: Vyzáření augerovského elektronu.

2.5.2 Charakteristické záření

Charakteristické záření je hlavním výzkumným cílem této práce. Pro atomy s vyšším atomovým číslem ($Z > 30$) je dominantním způsobem snížení jejich energetického stavu [7, 55].

Energetické hladiny, na kterých se mohou nacházet elektrony v atomu, jsou klasicky označovány velkými latinskými písmeny. Nejnižší hladina je označována jako slupka K, další postupně jako L, M, N atd. Tvrdit, že elektron se nachází ve slupce K je ekvivalentní tvrzení, že jeho hlavní kvantové číslo n je rovno jedné. Rozdělení do slupek je ilustrováno na obrázku 2.3.

Charakteristické záření vzniká tehdy, je-li díra v některé z vnitřních slupek zaplněna elektronem z vyšší slupky. Jde tedy o přechod z vázaného do vázaného stavu. Definované množství energie je poté vyzářeno charakteristickým fotonem. Pro jednotlivé přechody



Obrázek 2.3: Vznik charakteristického záření

musí platit

$$\Delta n \neq 0, \Delta l = \pm 1, \Delta j = 0, \pm 1 \quad (2.6)$$

a pokud $j_1 = 0$, pak nesmí platit $j_2 = 0$. Jednotlivé povolené přechody mají i svá označení. Jde vždy o kombinaci latinského a řeckého písmena. Latinské písmeno označuje cílovou slupku, řecké písmeno pak stanovuje počet slupek, které elektron přeskočil. Přejde-li elektron právě o jednu energetickou hladinu níže, jedná se o tzv. α -přechod, přejde-li o dvě úrovně, jde o β -přechod atd. Např. v práci zkoumané fotony K- α jsou takové fotony, které se vyzáří při přechodu elektronu ze slupky L do slupky K.

Přechody přímo do slupky K jsou velmi energetické, pro námi uvažované prvky jde o jednotky až desítky kiloelektronvoltů. Toto záření je tedy už v rentgenovské části spektra. Pravděpodobnosti přechodů K- β a vyšších jsou velmi malé (dle databáze EADL [1]), proto jim není věnována taková pozornost, jako přechodům K- α . Fotony K- β nebyly obvykle v simulacích detekovatelné, neboť tyto spektrální čáry se ztratily v šumu a ve spojitě části spektra. Jednou z výjimek je případ graficky znázorněný na obrázku 5.8. V tomto spektru jsou určeny i další spektrální čáry stříbra.

Spektrální čáry mohou být ještě degenerované ve formě tzv. multipletu. Jednotlivé energetické hladiny jsou určeny hlavním kvantovým číslem, nicméně i vedlejší kvantové číslo ovlivňuje energii přechodu. Pro rozlišení těchto hladin se proto za symbol přechodu dopisuje ještě číselný index. I ve výsledku simulací zejména u těžších jader bylo možno

tyto čáry rozlišit. Tabulka 2.1 poskytuje přehled o K- α čarách pro zkoumané prvky na základě experimentálních dat z databáze [2].

Tabulka 2.1: Energie a vlnové délky charakteristického K- α záření pro uvažované materiály dle databáze [2].

materiál	K- α_1		K- α_2	
	eV	Å	eV	Å
hliník	1486,295	8,342	1486,708	8,340
měď	8027,84169	1,544	8047,8227	1,541
stříbro	21990,30	0,564	22162,917	0,559

Kapitola 3

Recirkulace elektronů

Jak bylo diskutováno v části 2.3, interakce laserového impulsu s povrchovou vrstvou terče vede ke vzniku rychlých elektronů. Materiál povrchové vrstvy je mírně odlišný od materiálu vnitřku terče. Na povrchu se totiž usazují částice plynů z okolí. Jde zejména o vodní páru či další molekuly obsahující ve velké míře vodík. Vzniklé rychlé elektrony potom pronikají do chladné části terče. Jejich transport materiálem byl popsán v části 2.4. Část těchto původních elektronů může být absorbována v terči, část může být odražena zpět před terč a další část může proniknout až na opačnou stranu. K těmto primárním elektronům mohou přibýt ještě sekundární elektrony vzniklé např. vyražením z vnějších slupek atomů.

V simulacích elektronového transportu materiálem se běžně s elektrony, které už jednou opustí terč, dále nepočítá. V některých případech je toto zjednodušení opodstatněné. Nicméně zejména v případech, kdy se za terčem vytvoří elektrické pole o vysoké intenzitě, není přesné tyto elektrony zanedbávat. Příčinou vzniku tohoto elektrického pole je expanze ionizované povrchové vrstvy terče do vakua. Vzhledem k rozdílu v hybnostech elektronů a iontů vznikne za terčem plazma, které není neutrální. V tomto plazmatu se vytvoří nelineární hustotní profil, který je spojen s elektrickým polem a jeho časový vývoj je komplexní a obtížně popsatelný analytickou teorií bez dalších zjednodušujících předpokladů.

Pole o velkých intenzitách se tvoří v případech, kdy z terče uniká velké množství elektronů, případně při vysokých teplotách elektronového spektra a spíše pro tenčí terče než pro širší. Toto elektrické pole může vyvolat recirkulaci elektronů a jejich návrat zpět do terče, kde mohou inicializovat další srážkové události.

Z hlediska elektronové recirkulace si můžeme představit dva základní přístupy. Prvním z nich je celkové zanedbání elektronové recirkulace obecně. Alternativou je opačný případ, kde všechny elektrony jsou navraceny zpět do terče s nezměněnou energií a opačným směrovým vektorem. Tato práce má navrhnout přístup, který je realističtější než obě výše zmíněné možnosti. Cílem studia děje elektronové recirkulace je určení vztahu pro

změnu energie, s jakou se recirkulující elektron vrací zpět do terče.

Byla provedena základní rešerše v odborné literatuře. Problematika recirkulace rychlých elektronů je většinou studována v souvislost s urychlováním iontů z terče do vakua [46]. Jedná se o problém velmi komplexní, kde obecně hrají důležitou roli i tvar distribuční funkce elektronů přesné složení a stupeň ionizace terče aj. V této práci je kladen důraz na jednoduchost modelu recirkulace, neboť tento model slouží jako mezistupeň výpočtů transportu elektronů uvnitř terče.

Jako nejvhodnější jednoduchý model recirkulace elektronů byl použit model izotermické expanze dle práce [32]. Tento model byl kriticky konfrontován s vlastními simulacemi expanze plazmatu v povrchové vrstvě terče do vakua metodou particle-in-cell představenými v kapitole 5.1. Nejprve se však podíváme na jeden z modelů elektrického pole na povrchu terče.

3.1 Model elektrického pole na povrchu terče

Práce [56] shrnuje odvození prostorové závislosti elektrické intenzity za zadní stranou terče. Výchozím bodem je Poissonova rovnice

$$\varepsilon_0 \frac{\partial^2 \Phi}{\partial x^2} = en_e. \quad (3.1)$$

a předpokládaný tvar rovnice pro hustotu elektronů je dán Boltzmannovým vztahem

$$n_e = n_{e,0} \exp\left(\frac{e\Phi}{k_B T_e}\right). \quad (3.2)$$

Pro řešení se předpokládají oprávněné vlastnosti potenciálu, a to sice

1. pro $x \leq 0$ je elektrický potenciál nulový,
2. pro $x \rightarrow \infty$ roste potenciál nade všechny meze
3. derivace potenciálu pro x rostoucí nade všechny meze je nulová, tj. $\partial_x \Phi \rightarrow 0$ pro $x \rightarrow \infty$.

Počáteční hustota rychlých elektronů na povrchu terče se určí např. z poloempirického vztahu závislého na parametrech laserového systému a tloušťce terče (vztah (2.34) v původní práci [56]). Řešením Poissonovy rovnice (3.1) je potom

$$\Phi(x) = -\frac{2k_B T_e}{e} \ln\left(1 + \frac{x}{\sqrt{2}\lambda_D}\right) \quad (3.3)$$

s odpovídající intenzitou elektrického pole

$$E(x) = -\frac{2k_B T_e}{e} \frac{1}{x + \sqrt{2}\lambda_D}, \quad (3.4)$$

kde λ_D je Debyeova vlnová délka

$$\lambda_D = \sqrt{\frac{\varepsilon_0 k_B T_e}{e^2 n_{e,0}}}. \quad (3.5)$$

Abychom si udělali představu o době, kterou elektron stráví při recirkulaci za terčem, předpokládejme, že se toto pole mění jen pomalu ve srovnání s dobou, kterou elektron v tomto poli stráví. Můžeme tedy potom řešit soustavu pohybových rovnic pro elektron ve statickém poli daném vztahem (3.3). Tato soustava

$$\frac{dp}{dt} = -\frac{2k_B T_e}{x + \sqrt{2}\lambda_D} \quad (3.6)$$

$$\frac{dx}{dt} = \frac{cp}{\sqrt{m_e^2 c^2 + p^2}} \quad (3.7)$$

nemá analytické řešení a k jejímu vyčíslení je zapotřebí numerický výpočet. Počáteční podmínky jsou

$$x = 0$$

a

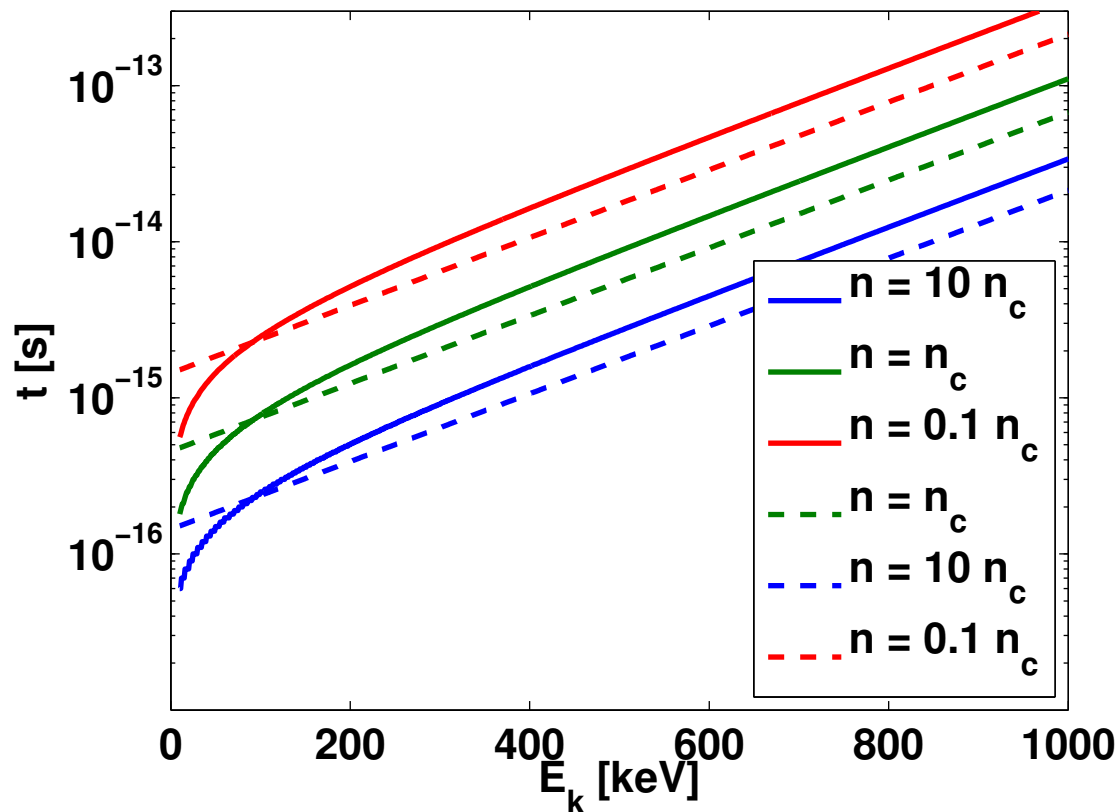
$$p = m_e c \sqrt{\left(\frac{E_k}{m_e c^2} + 1\right)^2 - 1},$$

kde E_k je počáteční kinetická energie elektronu. Řešení této soustavy rovnic, resp. čas kdy $p = 0$, tedy kdy se elektron v elektrickém poli obrátí, je znázorněn na obrázku 3.1 pro teplotu elektronů $k_B T_e = 100$ keV. Čas je znázorněn v logaritmickém měřítku a je patrné, že pro energie $E_k > k_B T_e$ je závislost času na energii přibližně exponenciální. Je také možné vytvořit jednoduchý model, který tuto závislost aproximuje

$$t = 2\sqrt{\frac{\varepsilon_0 m_e}{2e^2 n_e}} \exp\left(\frac{E_k}{2k_B T_e} - \frac{1}{2}\right). \quad (3.8)$$

Člen před exponenciálou odpovídá přesně času vypočítanému pro energii $E_k = k_B T_e$. Tento čas můžeme získat z podílu λ_D/v_{th} , kde v_{th} je tepelná rychlost, tedy $v_{th} = \sqrt{2k_B T_e/m_e}$. Aproximace je rovněž znázorněna v obrázku 3.1 přerušovanou čarou a je vidět, že pro vysoké energie vystihuje dobře charakter závislosti času na E_k . Kvantitativně jsou však hodnoty času pro vysoké energie vyšší přibližně $\sqrt{3}$ krát. Platnost aproximace (3.8) byla ověřena i pro jiné teploty v rozmezí 50 - 200 keV.

Z grafu na obrázku 3.1 je vidět, že doba, kterou recirkulující elektron stráví v oblasti za terčem, je v nejvýše v řádu desítek a či stovek femtosekund. Typická doba, za kterou typický elektron (100 keV) proletí terčem o šířce 100 μm , je přibližně 1 ps. Z tohoto porovnání je patrné, že z hlediska vlivu na délku generovaných rentgenových impulsů je rozhodující doba elektronu strávená v terči a hlavně počet iterací, tedy kolikrát se recirkulující elektron navrátí zpět do terče. Těchto iterací je obvykle několik, nicméně v některých případech jich může být i více než deset. Výsledné rentgenové impulsy jsou



Obrázek 3.1: Doba, po kterou elektron v potenciálu za terčem ztrácí energii v závislosti na jeho počáteční kinetické energii pro různé hustoty rychlých elektronů. Plnou čarou jsou vyznačena numerická řešení soustavy rovnic (3.6) a (3.7), přerušovanou čarou zjednodušené řešení aproximací (3.8)

pak delší, charakteristická doba je řádově v jednotkách pikosekund, nicméně je nutno poznamenat, že jejich intenzita postupně klesá, tak jak klesá i počet recirkulujících elektronů v jednotlivých iteracích.

3.2 Model izotermické expanze

Práce [32] se zabývá kinetickými efekty při pohybu elektronu při expanzi plazmatu a dále urychlováním iontů. Představme si nyní ve stručnosti model z této práce.

Vycházejme z jednoho z nejzákladnějších vztahů ve fyzice plazmatu, totiž z Vlasovovy rovnice. V našem případě si ji napíšeme pro jednorozměrný nerelativistický případ. Pro rozdělovací funkci elektronů $f_e(x, v, t)$ potom platí

$$\frac{\partial f_e}{\partial t} + v \frac{\partial f_e}{\partial x} + \frac{e}{m_e} \frac{\partial \Phi}{\partial x} \frac{\partial f_e}{\partial v} = 0. \quad (3.9)$$

Pro začátek je vhodné si připomenout jednu z vlastností řešení Vlasovovy rovnice. Z kinetické teorie je známo, že pokud existuje nějaký pohybový invariant, pak jakákoli funkce toho pohybového invariantu je řešením Vlasovovy rovnice.

Model v práci [32] uvažuje jednorozměrnou vrstvu plazmatu o konečné šířce. Bezesrážkový elektronový plyn se nachází v self-konzistentním elektrostatickém potenciálu iontů o hmotnosti m_i a náboji Ze . Je předpokládána symetrická expanze částic vzhledem k poloze $x = 0$ ve středu vrstvy. Uvedená konfigurace předpokládá následující tři intuitivní podmínky odpovídající předpokladům předchozího modelu, tedy:

$$\Phi(x = 0, t) = 0 \quad (3.10)$$

$$\Phi(x \rightarrow \pm\infty, t) = \infty, \quad (3.11)$$

$$\frac{\partial \Phi}{\partial x}(x \rightarrow \pm\infty, t) = 0. \quad (3.12)$$

Druhá podmínka zaručuje, že se žádné částice nedostanou do nekonečna. Kladné znaménko potenciálu je kvůli zápornému náboji elektronu. Mimo to se stanovuje další omezení na potenciál, totiž že pro $|x| > 0$ je potenciál monotonní funkcí a že se jenom pomalu mění s časem. Časovou podmínku můžeme vyjádřit jako

$$\frac{\mathcal{T}}{t_\Phi} = \mathcal{T} \left| \frac{1}{\Phi} \frac{\partial \Phi}{\partial t} \right| \ll 1, \quad (3.13)$$

přičemž

$$\mathcal{T} = \sqrt{\frac{m_e}{2}} \oint \frac{dx}{\sqrt{\mathcal{E} + e\Phi}} \quad (3.14)$$

je doba, jíž elektron stráví v potenciálové jámě, t_Φ je charakteristická doba fluktuací elektrického potenciálu a \mathcal{E} je celková energie elektronu.

Pohybový invariant je známý [57, 41]

$$I = \oint p dx, \quad (3.15)$$

kde p je hybnost elektronu a integrál se počítá podle trajektorie elektronu s tím, že \mathcal{E} a \mathcal{T} jsou nezávislé na čase. Pohybový invariant tedy může být považován za funkci energie a času, časová závislost se objevuje díky časové závislosti elektrického potenciálu.

V nejjednodušším případě je rozdělovací funkce elektronů pouze funkcí pohybového invariantu, tedy platí $f_e = f_e(I(\mathcal{E}, t))$. V tom případě je možno přepsat Vlasovovu rovnici do tvaru

$$\frac{\partial f_e}{\partial t} - e \frac{\partial \Phi}{\partial t} \frac{\partial f_e}{\partial \mathcal{E}} = 0. \quad (3.16)$$

Středováním úbytku energie za periodu elektronu získáváme vztah

$$\left\langle \frac{d\mathcal{E}}{dt} \right\rangle = -e \left\langle \frac{\partial \Phi}{\partial t} \right\rangle = -e \frac{\oint \frac{\partial \Phi}{\partial t} \frac{dx}{\sqrt{\mathcal{E} + e\Phi}}}{\oint \frac{dx}{\sqrt{\mathcal{E} + e\Phi}}} \quad (3.17)$$

3.3 Model izotermické expanze: příklad pro automodelový potenciál

Ilustrujme si odvození úbytku energie elektronu při kvazineutrální izotermické expanzi polonekonečného plazmatu do vakua. Pro potenciál v tomto případě platí vztah

$$e\Phi_{ss} = -k_B T_e \left(1 + \frac{x}{c_s t}\right), \quad (3.18)$$

přičemž v této konvenci platí, že polonekonečné plazma se nachází v oblasti, kde $x < 0$ a hranice plazmatu je v bodě $x = 0$, T_e je teplota elektronů a

$$c_s = \sqrt{\frac{Z k_B T_e}{m_i}} \quad (3.19)$$

je rychlost zvuku v iontovém plynu. O iontech se předpokládá, že jsou chladné. Podle rovnice (3.17) pak určíme úbytek energie elektronu za dobu pobytu v potenciálové jámě jako

$$\Delta \mathcal{E} = -e \sqrt{\frac{m_e}{2}} \int_{-c_s t}^{x_r} \frac{\partial \Phi_{ss}}{\partial t} \frac{dx}{\sqrt{\mathcal{E} + e\Phi_{ss}}}. \quad (3.20)$$

Do této rovnice dosadíme automodelový potenciál podle vztahu (3.18). Vzhledem k tomu, že v originální práci [32] je průběh výpočtu zcela vynechán a nejde jenom o několik prostých dosazení, provedeme celý výpočet na tomto místě.

Do vztahu (3.20) potřebujeme dosadit parciální derivaci potenciálu podle času, zderivujeme tedy vztah (3.18).

$$\frac{\partial \Phi}{\partial t} = \frac{k_B T_e}{e} \frac{x}{c_s t^2}. \quad (3.21)$$

Dosadíme a vytkneme konstantu vzhledem k integrační proměnné před integrál

$$\Delta \mathcal{E} = -e \sqrt{\frac{m_e}{2}} \int_{-c_s t}^{x_r} \frac{k_B T_e}{e} \frac{x}{c_s t^2} \frac{dx}{\sqrt{\mathcal{E} - k_B T_e \left(1 + \frac{x}{c_s t}\right)}} \quad (3.22)$$

$$= \sqrt{\frac{m_e k_B T_e}{2}} \frac{1}{c_s t^2} \int_{-c_s t}^{x_r} \frac{x dx}{\sqrt{\mathcal{E} - k_B T_e \left(1 + \frac{x}{c_s t}\right)}}. \quad (3.23)$$

Nyní si pomůžeme transformací

$$y = \mathcal{E} - k_B T_e \left(1 + \frac{x}{c_s t}\right), \quad (3.24)$$

$$dy = -\frac{k_B T_e}{c_s t} dx. \quad (3.25)$$

Pro snadnější zápis si ještě označme integrační meze jako

$$y_1 = \mathcal{E}, \quad (3.26)$$

$$y_2 = \mathcal{E} - k_B T_e \left(1 + \frac{x_r}{c_s t}\right). \quad (3.27)$$

Po této transformaci se výpočet velmi ulehčí. Získáváme tedy

$$\Delta \mathcal{E} = -\sqrt{\frac{m_e}{2}} \frac{k_B T_e}{c_s t^2} \left(-\frac{c_s t}{k_B T_e}\right) \int_{y_1}^{y_2} c_s t \left(\frac{\mathcal{E} - y}{k_B T_e} - 1\right) \frac{dy}{\sqrt{y}} \quad (3.28)$$

$$= \sqrt{\frac{m_e}{2}} c_s \int_{y_1}^{y_2} \left(\frac{\mathcal{E}}{k_B T_e} - 1\right) \frac{dy}{\sqrt{y}} - \sqrt{\frac{m_e}{2}} c_s \int_{y_1}^{y_2} \frac{\sqrt{y}}{k_B T_e} dy. \quad (3.29)$$

Po samotném provedení integrace máme

$$\Delta \mathcal{E} = 2\sqrt{\frac{m_e}{2}} \frac{c_s t}{k_B T_e} \left[(\mathcal{E} - k_B T_e)(\sqrt{y_2} - \sqrt{y_1}) - \frac{1}{3} \left(\sqrt{y_2^3} - \sqrt{y_1^3} \right) \right]. \quad (3.30)$$

Po dosazení za rychlost zvuku dle vztahu (3.19) a hranic dle vztahů (3.26) a (3.27) a při naší zvolené konfiguraci, uvědomíme-li si, že elektron dosáhl maxima vzdálenosti od počátku, když jeho energie je nulová tj. $y_2 = 0$, tedy dle označení (3.27)

$$x_r = \left(\frac{\mathcal{E}}{k_B T_e} - 1\right) c_s t, \quad (3.31)$$

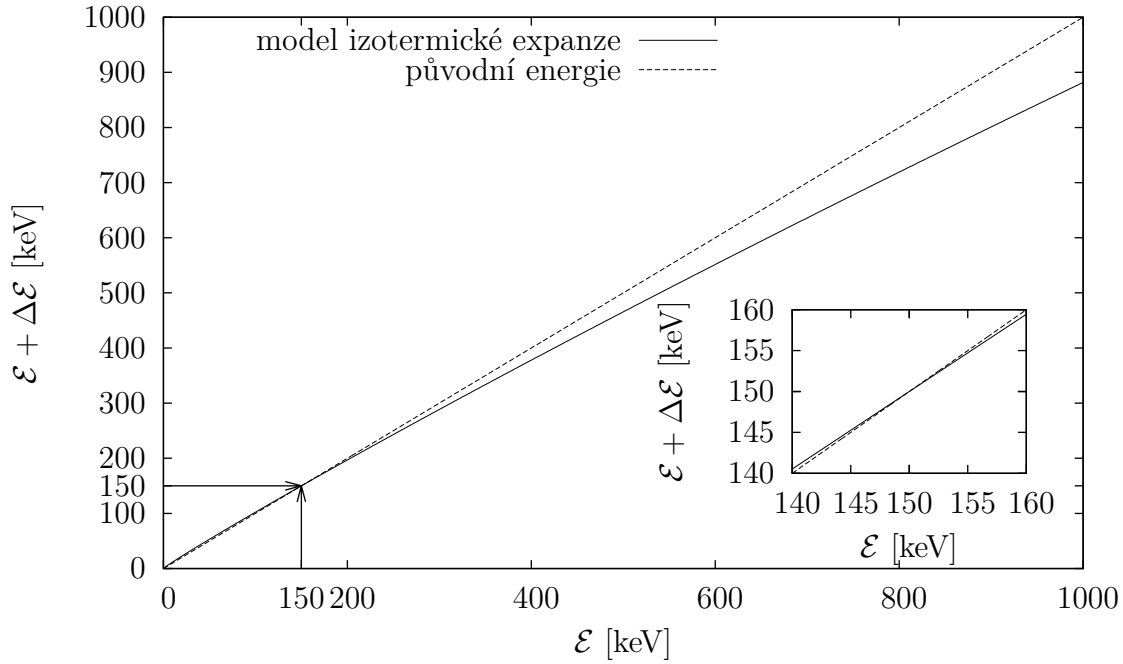
a několika dalších úpravách, které jsou již čistě algebraické zjišťujeme, že za dobu pobytu v potenciálu za terčem ztratí elektron energii

$$\Delta \mathcal{E} = \frac{2\sqrt{2}}{3} \sqrt{\frac{Z m_e}{m_i}} \sqrt{\frac{\mathcal{E}}{k_B T_e}} \left(\frac{3k_B T_e}{2} - \mathcal{E}\right) \quad (3.32)$$

Tento model bude v této práci dále nazýván model izotermické expanze a vztah (3.32) bude používán pro výpočet změny energie recirkulujících elektronů mezi opuštěním terče a jejich následným návratem.

Diskutujme nyní některé vlastnosti vztahu (3.32) pro úbytek energie recirkulujících elektronů. Autoři článku [32] sami uvádějí zajímavé ilustrace, na nichž je ukázáno, že pro nižší energie elektronu dochází k nárůstu této energie, pro vyšší energie k úbytku energie. Hraniční hodnotou je energie $\mathcal{E} = \frac{3}{2} k_B T_e$, při které se elektron navrátí zpět se stejnou kinetickou energií.

Podívejme se nyní na typový příklad, který bude charakteristický pro tuto práci. Elektron s kinetickou energií \mathcal{E} je součástí elektronového spektra o teplotě 100 keV. Graf na obrázku 3.3 ukazuje výslednou energii elektronů $\mathcal{E} + \Delta \mathcal{E}$ v závislosti na původní energii



Obrázek 3.2: Výsledná energie recirkulujícího elektronu $\mathcal{E} + \Delta\mathcal{E}$ pro typový příklad. Elektronové spektrum o teplotě 100 keV opouští vodíkový terč. Graf ukazuje energii, se kterou se recirkulující elektron navrátí zpět do terče. V detailu je vidět situace kolem hraniční energie $\mathcal{E} = \frac{3}{2}k_B T_e$, v tomto případě 150 keV. Elektrony s nižší energií se urychlí, elektrony s vyšší energií se zpomalí.

\mathcal{E} . Závislost je vykreslena pro vodíkový terč. Vliv materiálu terče ovšem není významný, pokud předpokládáme úplnou ionizaci.

Mohlo by se z obrázku jevit, že množství energie, které získávají pomalejší elektrony je zanedbatelné. Nicméně je nutno si uvědomit tvar typického maxwellovského spektra, kdy máme velké množství pomalejších elektronů a malé množství elektronů z rychlejšího konce spektra. Kvůli tomu, že pomalých elektronů je tolik, nelze malý přírůstek jejich energie zanedbat. Pro lepší představu si ukažme vysvětlující případ.

Předpokládejme, že za vodíkovým terčem expanduje do vakua svazek elektronů s teplotou spektra 200 keV. Užitím vztahu (3.32) pro všechny jednotlivé elektrony ve svazku lze vypočítat, že celková energie elektronů při pobytu za terčem klesne o 3.5% vzhledem k jejich původní energii. Pokud bychom neuvážili urychlování pomalejších elektronů a spočítali bychom pouze úbytek energie pro elektrony s původní energií $\mathcal{E} > \frac{3}{2}k_B T_e$, tedy v tomto případě $\mathcal{E} > 300$ keV, zjistili bychom, že celková energie rychlejších elektronů klesne o 5.3%. Takový rozdíl je již patrný. Příklady pro terče z jiných materiálů by byly velmi podobné.

Stejně tak nelze zanedbat rychlé elektrony z důvodu, že jich je málo. Je třeba sledovat úbytky jejich energií, neboť s každou touto ztrátou klesá počet událostí, jež je schopen

navrátivší se recirkulující elektron inicializovat. Oba tyto zmíněné jevy mají dopad na generaci charakteristického záření, což je hlavním předmětem této práce.

Zajímavým důsledkem modelu izotermické expanze je také vyčíslení doby, kterou elektron stráví v automodelovém potenciálu. Pokud dosadíme tvar potenciálu (3.18) do vztahu pro dobu v něm strávenou (3.14), analogickým postupem dopočítáme, že elektron stráví v automodelovém potenciálu dobu

$$\mathcal{T}_{ss} = 2\sqrt{\frac{m_e}{2}} \int_{-c_s t}^{x_r} \frac{dx}{\sqrt{\mathcal{E} + e\Phi_{ss}}} = \frac{4}{\sqrt{2}} \sqrt{\frac{Zm_e}{m_i}} \sqrt{\frac{\mathcal{E}}{k_B T_e}} t. \quad (3.33)$$

Tato doba je samozřejmě závislá na době od počátku expanze polonekonečné vrstvy plazmatu do vakua. Tento zajímavý závěr tedy bohužel nelze do této práce použít.

3.4 Model expanze elektronového oblaku

Tento model byl představen v práci [16]. Tato práce se zabývá převážně laserovým urychlováním iontů až po energii přes 10 MeV. Hlavní myšlenkou této práce je provázanost urychlování iontů s expanzí elektronového oblaku do vakua. Po absorpci laserového impulsu (1.2×10^{19} W/cm², 350 TW) vodíkovou fólií získávají některé elektrony až relativistické energie. V citované práci je přesvědčivě prokázáno, že některé ionty na obou stranách terče jsou těmito elektrony urychleny až na srovnatelné energie.

Model expanze elektronového oblaku je v této diplomové práci zmíněn zejména proto, že poskytuje představu o počtu elektronů, které vytvářejí silné elektrické pole na povrchu terče a které se do terče již zpět nevrátí. Pro popis expanze elektronového oblaku do vakua jsou použity rovnice hydrodynamiky, čili postupně rovnice kontinuity, pohybová rovnice a Poissonova rovnice v jednorozměrné podobě:

$$\frac{\partial n_e}{\partial t} + \frac{\partial(n_e v_e)}{\partial x} = 0, \quad (3.34)$$

$$\frac{\partial p_e}{\partial t} + v_e \frac{\partial(p_e)}{\partial x} = -eE, \quad (3.35)$$

$$\frac{\partial E}{\partial x} = 4\pi e(Z_i n_i(x) - n_e)0, \quad (3.36)$$

kde n_e a n_i jsou hustoty elektronů a iontů a rychlost elektronů v_e je s jejich hybností p_e provázaná relativistickým vztahem

$$v_e = \frac{cp_e}{\sqrt{m_e^2 c^2 + p_e^2}}. \quad (3.37)$$

Počáteční hustota iontů je konstantní uvnitř terče, v této geometrii na intervalu $-l/2 < x < l/2$, jinde nulová.

Pro řešení soustavy rovnic (3.34) - (3.36) je použit přechod od eulerovských k langrangeovským souřadnicím

$$x = x_0 + \xi_e(x_0, t). \quad (3.38)$$

Lagrangeovská souřadnice ξ_e vlastně znamená, o kolik se elektron za dobu t vzdálil od své původní polohy x_0 .

Po transformaci do lagrangeovských souřadnic a dosazení rovnice (3.36) do rovnice (3.35) získáváme sadu rovnic

$$\frac{\partial p_e}{\partial t} = -4\pi Z_i e^2 \int_0^{\xi_e(x_0, t)} n_i(x_0 + s) ds \quad (= eE), \quad (3.39)$$

$$\frac{\xi_e}{\partial t} = \frac{cp_e}{\sqrt{m_e^2 c^2 + p_e^2}}. \quad (3.40)$$

Integrál v rovnici (3.39) vyčíslíme dosazením počátečního stavu iontové hustoty, tedy $n_i(x) = n_0 \theta(l/2 - x)$, kde θ je Heavisideova funkce. Pravá stran tedy nabývá tvaru

$$eE(x_0, t) = -4\pi Z_i n_0 e^2 \begin{cases} l/2 - x_0, & \text{pro } l/2 < x_0 + \xi_e(x_0, t) \\ \xi_e(x_0, t), & \text{pro } -l/2 < x_0 + \xi_e(x_0, t) < l/2 \\ -l/2 - x_0, & \text{pro } x_0 + \xi_e(x_0, t) < -l/2. \end{cases} \quad (3.41)$$

V soustavě pohybující se s elektronovým oblakem má tedy tvar

$$E(x_0, t) = -4\pi n_0 Z_i e(l/2 - x_0). \quad (3.42)$$

Abychom získali i časový vývoj elektrického pole v laboratorní soustavě, provedeme integraci rovnic (3.39) a (3.40). Integrace je poměrně přímočará, získáváme

$$p_e(x_0, t) = p_e(x_0) - 2\pi Z_i n_0 e^2 (l - 2x_0)t, \quad (3.43)$$

$$\xi_e(x_0, t) = \frac{c}{\kappa(x_0)} \{ [m_e^2 c^2 + p_{e,0}(x_0)]^{1/2} - [m_e^2 c^2 + (p_{e,0}(x_0) - \kappa(x_0)t)^2]^{1/2} \}, \quad (3.44)$$

kde $p_{e,0}(x_0)$ je počáteční hybnost elektronů v elektronovém oblaku a pomocná funkce $\kappa(x_0)$ je jenom označení

$$\kappa(x_0) = 4\pi n_0 Z_i e^2 (l/2 - x_0). \quad (3.45)$$

Zaměříme se nyní podrobněji na vztah (3.44) pro závislost vzdálenosti elektronu od své počáteční pozice na čase a právě této pozici. Je možno si všimnout některých zajímavých a logických zákonitostí:

1. Vzdálenost elektronu od počáteční polohy je v čase $t = 0$ skutečně nulová.
2. Rozvineme-li vztah taylorovsky podle času kolem počátku, vidíme, že se elektron zpočátku pohybuje svou tepelnou rychlostí, tj. $\xi_e(x_0, 0) \approx v_{e,0}t$.
3. Zderivujeme-li vztah podle času a položíme-li tuto derivaci rovnu nule, zjistíme, že vzdálenost částice od počáteční polohy nabývá extrémální hodnoty. Jde o maximum, je jej dosaženo v čase

$$t_m = \frac{p_{e,0}(x_0)}{\pi n_0 Z_i e^2 (l - 2x_0)}, \quad (3.46)$$

přičemž jeho hodnota je

$$\xi_{e,m}(x_0) = \frac{c}{\kappa(x_0)} [\sqrt{m_e^2 c^2 + p_{e,0}^2(x_0)} - m_e c]. \quad (3.47)$$

4. Po dosažení extrémální hodnoty se elektron již monotónně vrací zpět k terči.
5. Snažíme-li se vyčíslit hodnotu maximální vzdálenosti elektronu od počáteční polohy, všimneme si, že pro $x_0 \rightarrow l/2$ roste toto maximum nade všechny meze. Elektrony na vrcholu expandujícího elektronového oblaku se již tedy zpět nevrátí. Tyto elektrony se někdy v literatuře nazývají *run-away electrons*. Stejně i extrémální doba roste nade všechny meze.

Pro praktické výpočty by bylo možné stanovit hraniční vzdálenost, kterou když by již elektron překročil, tak by už nebyl zpět do terče navrácen. Tuto hraniční vzdálenost si označme x_{max} . Dále si označme plošnou hustotu elektronů vystupující ve vztahu (3.45) jako

$$n_S = n_0 \left(\frac{l}{2} - x_0 \right). \quad (3.48)$$

Když tuto plošnou hustotu vyjádříme ze vztahu (3.47) a vynásobíme charakteristickou plochou S , kterou zaujímá elektronový svazek, je možné vypočítat počet elektronů

$$N = n_S S = \frac{c(\sqrt{m_e^2 c^2 + p_{e,0}^2} - m_e c)}{4\pi Z e^2 x_{max}} S, \quad (3.49)$$

které by opustily interakční oblast, aniž by se znovu navrátily do terče. Tyto elektrony by již tedy nepřispívaly k další generaci charakteristického záření K- α . Pro dosažení by bylo třeba znát mimo odhadu vzdálenosti x_{max} i původní hybnosti elektronů $p_{e,0}$ a plochu S , kterou zaujímá svazek. Hybnosti by se odhadly z teploty spektra elektronů, velikost plochy v prvním odhadu jako velikost plochy, na kterou je zaostřen dopadající laserový svazek. Otázka volby vzdálenosti x_{max} je však složitější a nebude v této práci diskutována. V závěru ještě podotkněme, že v této práci předpokládáme, že elektrony, které mohou z terče uniknout tvoří zanedbatelnou část všech rychlých elektronů a možnost úniku rychlých elektronů z terče tedy není brána v potaz.

Kapitola 4

Použité numerické metody a kódy

Pro stanovení vlastností výstupního spektra fotonů je nejvhodnější užít numerických simulací. V této práci byly výpočty rozděleny do dvou fází.

1. Nejprve se simulovala recirkulace elektronů pomocí metody particle-in-cell. Tím se ověřil předpis, s jakou energií má být elektron navrácen zpět do interakční oblasti.
2. Poté se provedly simulace metodou Monte Carlo. Jako vstup se použilo maxwellovské spektrum rychlých elektronů. Zkoumal se transport rychlých elektronů v terči a procesy vedoucí ke generaci záření $K\text{-}\alpha$. Provedlo se jedna až dvanáct iterací. Iterací je rozuměn průchod elektronů terčem, jejich detekce na okraji terče a přepočet jejich energie dle vztahu (3.32) ověřeného simulacemi metodou particle-in-cell. Počet iterací se pro různé případy lišil, počítalo se tak dlouho, dokud neklesl počet prošlých elektronů pod 5% původního počtu. V případě bez započtení recirkulace se počítalo pouze s první iterací.

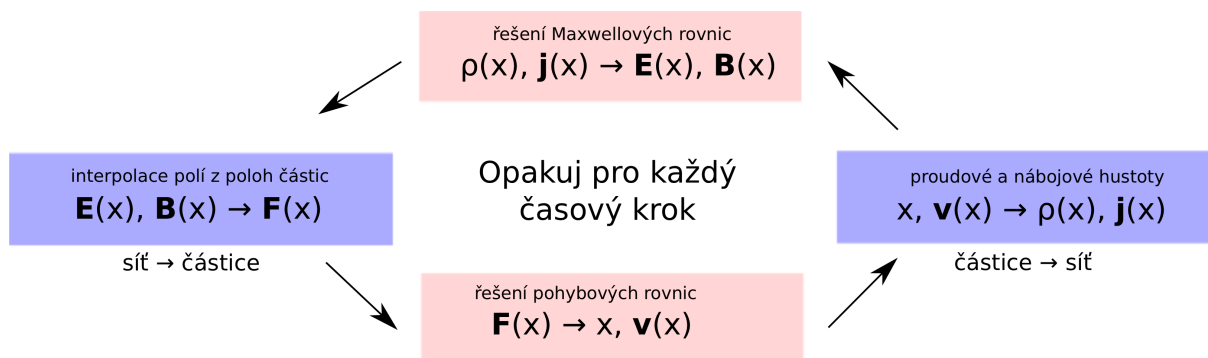
Pro simulace byly použity komplexní simulační kódy LPIC++ a Penelope. Jednotlivé metody a kódy budou představeny v následujících podkapitolách.

4.1 Metoda particle-in-cell

Metoda particle-in-cell (PIC) je technika řešení určité třídy parciálních diferenciálních rovnic. Byla navržena v padesátých letech 20. století a velké popularity dosáhla v oblasti fyziky plazmatu [43].

Popíšme si nyní průběh jednoho výpočetního cyklu metodou PIC. Pro názornost je shrnut v diagramu na obrázku 4.1.

1. Na začátku jsou známy polohy a rychlosti jednotlivých makročástic. Je tedy možno interpolovat hodnoty makroskopických veličin na síť.
2. Na síti jsou řešeny Maxwellovy rovnice a jejich výsledkem jsou hodnoty elektrického a magnetického pole. Rovnice se nejčastěji řeší metodou konečných diferencí.



Obrázek 4.1: Jeden cyklus výpočtu metodou particle-in-cell. Nábojová a proudová hustota a hodnoty polí jsou síťové veličiny, rychlosti a polohy jsou v simulační oblasti definovány spojitě.

3. Ze znalosti polí na mřížce je vypočítána velikost Lorentzovy síly působící na jednotlivé makročástice.
4. Lorentzova síla je pravou stranou pohybových rovnic, které se řeší nejčastěji schématem leap-frog.

V particle-in-cell kódech zabývajících se fyzikou plazmatu je třeba řešit pohybové rovnice částic s Lorentzovou silou a zároveň Maxwellovy rovnice pro elektrická a magnetická pole. Podívejme se proto nejprve na stručné odvození metody PIC.

4.1.1 Fyzikální podstata metody PIC

Plazma je kvazineutrální plyn skládající se z nabitých a neutrálních částic. Tyto částice mezi sebou interagují, hlavní silou popisující interakci mezi nabitými částicemi je Lorentzova síla. Pro každou částici platí

$$\mathbf{F}_p = q_p[\mathbf{E}(\mathbf{x}_p) + \mathbf{v}_p \times \mathbf{B}_p(\mathbf{x}_p)]. \quad (4.1)$$

Lorentzova síla se tedy vypočítá ze znalosti polí v místě, kde se každá částice vyskytuje.

Elektrické i magnetické pole jsou vytvářeny samotnými částicemi v systému a také možnými externími zdroji. Pro tato pole platí Maxwellovy rovnice

$$\nabla \cdot \mathbf{E} = \frac{\rho}{\varepsilon_0} \quad (4.2)$$

$$\nabla \times \mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} \quad (4.3)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0 \quad (4.4)$$

$$\nabla \times \mathbf{B} = \mu_0 \mathbf{j} + \mu_0 \varepsilon_0 \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} \quad (4.5)$$

Pro odvození metody PIC je klíčové si uvědomit, jak by měla být pole pro každou částici počítána. Pro každou částici by bylo třeba započítat vliv všech ostatních částic,

což by bylo výpočetně náročné. Kdybychom chtěli simulovat chování souboru N částic, bylo by třeba uvažovat přibližně N^2 jejich interakcí.

Jednou z vlastností plazmatu je fakt, že je možno účinně zanedbat působení jednotlivých částic, které jsou dále, než je známá Debyeova délka (3.5). Jelikož i v Debyeově kouli je v ideálním plazmatu stále velké množství částic

$$N_D = n \frac{4}{3} \pi \lambda_D^3, \quad (4.6)$$

zavádí se pro výrazné urychlení výpočtu tzv. makročástice. Makročástice je myšlená částice, ve skutečnosti se jedná o velké množství (až miliony) skutečných jednotlivých částic. Makročásticí můžeme rozumět část stavového prostoru.

Metoda PIC tedy spočívá v tom, že systémem rozumíme skupinu malého množství částic konečné velikosti, které spolu interagují pomocí elektrických a magnetických polí na síti. Na malé vzdálenosti se používá redukovaný potenciál, neboť v těchto malých vzdálenostech se jednotlivé makročástice již překrývají. Charakteristickým znakem metody je skutečnost, že potenciál je v každém kroku vyčíslován na výpočetní síti. Částice pak mezi sebou interagují skrze tento potenciál.

Výhodným přínosem zavedení makročástic je skutečnost, že se fluktuační elektrického pole účinně redukuje. Jelikož Lorenzova síla závisí pouze na poměru náboje ku hmotnosti jednotlivé částice, chová se makročástice tak, jako by se chovaly jednotlivé částice.

4.1.2 Matematické odvození metody PIC

Odvození bude provedeno pouze pro jednorozměrný elektrostatický případ. S komplexnějšími případy je možno se seznámit například v literatuře [13]. Pro vývoj rozdělovacích funkcí jednotlivých částic (přesněji vyjádřeno jejich hustot pravděpodobnosti) $f_s(x, v, t)$ v plazmatu je klíčová Vlasovova rovnice. V elektrostatickém případě má tvar

$$\frac{\partial f_s}{\partial t} + v \frac{\partial f_s}{\partial x} + \frac{q_s E}{m_s} \frac{\partial f_s}{\partial v} = 0. \quad (4.7)$$

Elektrické pole můžeme vyjádřit z Poissonovy rovnice pro skalární potenciál

$$\varepsilon_0 \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} = -\rho, \quad (4.8)$$

přičemž hustota náboje je svázaná s hustotami pravděpodobnosti jako

$$\rho(x, t) = \sum_s q_s \int f_s(x, v, t) dv. \quad (4.9)$$

Podívejme se nyní na numerický přístup k metodě PIC. Metoda PIC je velmi blízká metodě konečných prvků. Tentokrát se ale tyto konečné prvky mohou pohybovat a také překrývat a označujeme je jako *makročástice*. Plazma je tedy reprezentováno makročásticemi. Pro každou makročástici zavedeme hustotu pravděpodobnosti $f_p(x, v, t)$. Celková

hustota pravděpodobnosti pro jednotlivý druh částic $f_s(x, v, t)$ je rozdělena na konečný součet hustot pravděpodobnosti těchto částic v jednotlivých makročástečích:

$$f_s(x, v, t) = \sum_p f_p(x, v, t). \quad (4.10)$$

Základní myšlenkou je přiřadit každé jednotlivé hustotě pravděpodobnosti $f_p(x, v, t)$ funkci určitého tvaru s několika volnými parametry, jejichž časový vývoj bude vyjadřovat numerické řešení Vlasovovy rovnice. Obvykle se volí dva volné parametry, jeden pro prostorovou část funkce hustoty pravděpodobnosti a jeden pro rychlostní část. Matematicky tuto skutečnost můžeme vyjádřit takto:

$$f_p(x, v, t) = N_p S_x(x - x_p(t)) S_v(v - v_p(t)), \quad (4.11)$$

kde S_x a S_v jsou tvarové funkce pro makročástice a N_p je fyzický počet částic přítomných v makročástici.

Na tyto tvarové funkce je třeba klást několik požadavků.

1. Tvarové funkce musí mít kompaktní nosič.
2. Jejich integrál přes celý fázový prostor musí být jednotkový, tedy

$$\int_{-\infty}^{+\infty} S_x(x - x_p) dx = 1. \quad (4.12)$$

3. Je vhodné brát funkce se symetrickým tvarem, tedy

$$S_x(x - x_p) = S_x(x_p - x). \quad (4.13)$$

Tyto omezení nejsou příliš přísná, stále jim vyhovuje velké množství funkcí. V praxi se ale používají hlavně velmi jednoduché třídy tvarových funkcí.

Pro rychlostní část fázového prostoru se tradičně volí tvarové funkce S_v ve tvaru Diracovy delta funkce

$$S_v(v - v_p) = \delta(v - v_p). \quad (4.14)$$

Pro prostorovou část se historicky používaly také δ funkce, ale v současné době jsou takřka vždy využívány b-spliny, které jsou definovány iterativně jako

$$b_0(x) = \begin{cases} 1, & \text{když } |x| < 1/2 \\ 0, & \text{jinak} \end{cases} \quad (4.15)$$

$$b_l = \int_{-\infty}^{\infty} dx' b_0(x - x') b_{l-1}(x'). \quad (4.16)$$

Jako tvarové funkce v prostorové části fázového prostoru se poté využívají funkce

$$S_x(x - x_p) = b_l \left(\frac{x - x_p}{\Delta_p} \right), \quad (4.17)$$

kde Δ_p je velikost nosiče makročástice.

Zbývá jen dodat, že většina PIC kódů využívá jako tvarové funkce b-splinu třídy 0, některé využívají třídy 1, což jsou lineární funkce. Vyšší řády jsou spíše výjimečné.

Řešit pohybové rovnice tedy znamená v každém kroku vyjádřit volné parametry x_p a v_p . Učiňme nyní několik poznámek o tom, jak toho dosáhneme.

1. Popisovat časový vývoj v plazmatu znamená řešit Vlasovovu rovnici (4.7) pro všechny druhy částic. Dosadíme nyní do této rovnice rozklad funkce hustoty pravděpodobnosti f_s pro jednotlivé druhy částic na makročástice (4.10). Vlasovova rovnice je vzhledem k tomuto rozkladu lineární. Tedy lze prohlásit, že vyřešíme-li soustavu

$$\frac{\partial f_p}{\partial t} + v \frac{\partial f_p}{\partial x} + \frac{q_s E}{m_s} \frac{\partial f_p}{\partial v} = 0. \quad (4.18)$$

pro všechna p , získáme takto i řešení Vlasovovy rovnice pro f_s .

2. Je obvyklým požadavkem, aby řešení vyhovovalo nejen Vlasovově rovnici, ale i několika jejím momentům. Výsledky po středování nultého momentu a prvních momentů v rychlostní a prostorové části fázového prostoru vypadají následovně:

$$\frac{dN_p}{dt} = 0, \quad (4.19)$$

$$\frac{dx_p}{dt} = v_p, \quad (4.20)$$

$$\frac{dv_p}{dt} = \frac{q_s}{m_s} E_p. \quad (4.21)$$

První z rovnic vyjadřuje zákon zachování počtu částic v jednotlivé makročástici, druhá a třetí vyjadřují pohybové rovnice. K diskretizaci se obvykle používá schéma leap-frog nebo Borisovo schéma [14].

Po vyřešení pohybových rovnic jsou známy polohy a rychlosti x_p a v_p jednotlivých makročástic a tak je možno vyčíslit proudové a nábojové hustoty $\rho(x)$ a $j(x)$ na síti. Tyto hustoty pak tvoří pravou stranu Maxwellových rovnic, které se poté řeší na síti. Před jejich řešením je třeba na síti znát hodnoty veličin na jejich pravé straně.

Makročástice mohou být umístěny kdekoli ve fázovém prostoru, ale makroskopické veličiny jsou vyjádřeny pouze na bodech mřížky, stejně jako polní veličiny. Je tedy potřeba navrhnout způsob, jak co nejlépe přiřadit hodnoty těchto makroskopických veličin každé jednotlivé makročástici. Užívá se tzv. interpolačních funkcí. Standardní možností je volit funkci

$$W(x_i - x_p) = \int dx S_x(x - x_p) b_0 \left(\frac{x - x_i}{\Delta x} \right). \quad (4.22)$$

Polní Maxwellovy rovnice poté mohou být řešeny např. metodou konečných diferencí. Elektrická a magnetická pole jsou spočítána na diskrétní síti, derivace jsou nahrazeny diferencemi. Jinými prostředky, jak vyřešit polní rovnice, jsou metoda konečných prvků nebo spektrální metody.

4.1.3 Výpočetní kód LPIC++

Pro zkoumání recirkulace elektronů byl použit výpočetní kód LPIC++. Výpočetní kód LPIC++ [44] je jednodimenzionální (1D3V) elektromagnetický particle-in-cell kód vyvinutý v Institutu Maxe Plancka pro kvantovou optiku v Garchingu. Symbol 1D3V znamená, že každé částici je přiřazena jedna souřadnice polohy a tři souřadnice rychlosti. Jsou rovněž uvažovány všechny tři složky polí.

Šikmý dopad laserového svazku je vyřešen transformací soustavy terče do soustavy pohybující se podél rozhraní takovou rychlostí, že v ní laserový svazek dopadá kolmo [44]. Pro integraci pohybových rovnic a pro výpočet příčných složek elektromagnetického pole se využívá algoritmu Birdsalla a Langdona [13]. Pro výpočet podélné složky elektrického pole pak metoda Villasenora a Bunemanna [58]. Podélná složka magnetického pole není podstatná, neboť jde od 1D kód. LPIC++ byl napsán objektově v C++. Jednotlivé algoritmy tohoto PIC kódu jsou dobře vysvětleny v diplomové práci [17]. Samotné práci s tímto programem je věnována kapitola 5.1.

4.2 Metoda Monte Carlo

Jméno Monte Carlo bylo poprvé použito ve 40. letech 20. století fyziky z Los Alamos pracujícími na vývoji jaderné zbraně jako pojmenování široké třídy numerických metod založených na využití náhodných čísel. Inspirací pro pojmenování metody je zřejmá analogie mezi způsobem výpočtu a hazardními hrami provozovanými v kasínech. Mezi největší jména spojovaná s formulací metody Monte Carlo patří Stanislaw Marcin Ulam, Nicholas Metropolis a John von Neumann (maďarsky Neumann János).

V dnešní době je metoda Monte Carlo užívána k řešení širokého spektra úloh v matematice i ve fyzice, v jiných vědeckých disciplínách, v průmyslu, bankovníctví a pojišťovnictví, informačních technologiích, umělé inteligenci a v neposlední řadě ve vojenství. Hlavní výhodou této metody je jednoduchá implementace, nevýhodou naopak malá přesnost. Počítáme-li s N realizacemi náhodné veličiny, chyba výpočtu je úměrná $N^{-1/2}$. Pro zvýšení přesnosti o jeden řád je potřeba zvýšit počet náhodných realizací o dva řády.

4.2.1 Základy metody Monte Carlo

Základem metody Monte Carlo je generování náhodných čísel podle daného pravděpodobnostního rozdělení. Obecně je možno prohlásit, že algoritmy poskytující náhodná čísla s určitým rozdělením jsou založena na znalosti náhodných čísel rovnoměrně rozdělených na intervalu (0,1).

V praxi to vypadá následovně. Generátor náhodných čísel je nejdříve nějakým způsobem inicializován, nejčastěji např. využitím systémového času počítače. Poté se z této

hodnoty vypočítává posloupnost náhodných čísel dle nějakého předpisu. Jako jednoduchý příklad lze uvést generátor Presse a Teukolského [52]. Je generována posloupnost čísel R_n , předpis pro vypočtení jejího n -tého členu je

$$R_n = 7^5 R_{n-1} \pmod{2^{31} - 1}. \quad (4.23)$$

V každém kroku se vypočítá i číslo

$$\xi_n = R_n / (2^{31} - 1) \quad (4.24)$$

Samotnou akceptovanou realizací náhodného čísla je hodnota ξ_n . Vzhledem k prvotní inicializaci je přesnější tvrdit, že jde o pseudonáhodnou posloupnost čísel spíše než o náhodnou. U tohoto generátoru však existuje perioda opakování, přibližně po miliardě krocích. Taková perioda se zdá býti obrovská, nicméně pro dnešní výpočty již není uspokojivá.

Funkce RAND implementovaná ve Fortranu77 je poněkud pokročilejší. Využívá zajímavého prvku rotace bitů o určitý počet pozic a generuje náhodná čísla rovnoměrně rozdělená na otevřeném intervalu $(0,1)$ s periodou opakování řádově 10^{18} , což pro praktické výpočty znamená nekonečno.

Nyní tedy víme, jak generovat rovnoměrné rozdělení. Pro naše výpočty je však třeba transformovat toto rozdělení na libovolné rozdělení. Tato rozdělení jsou u simulací transportu záření popsána diferenciálními účinnými průřezy. Transformace se obvykle provádí metodou založenou na vlastnostech inverze distribuční funkce nebo metodou zamítání.

Inverze distribuční funkce Vysvětleme si nejprve v krátkosti, co to distribuční funkce je. Mějme danou hustotu pravděpodobnosti $p(x)$ nějaké náhodné veličiny. Definujme nyní distribuční funkci této náhodné veličiny jako

$$P(x) = \int_{-\infty}^x p(x') dx'. \quad (4.25)$$

Je to neklesající funkce s hodnotami od 0 do 1. Dále pro ni platí

$$\frac{dP}{dx} = p(x). \quad (4.26)$$

Jelikož $P(x)$ je monotónní funkce x , existuje jistě také její inverzní funkce $P^{-1}(\xi)$. Transformace $\xi = P(x)$ definuje novou náhodnou veličinu ξ z intervalu $(0,1)$. Pro hustoty pravděpodobností $p(x)$ a $p_\xi(\xi)$ pak platí $p(x) dx = p_\xi(\xi) d\xi$ a navíc

$$p_\xi(\xi) = p(x) \left(\frac{d\xi}{dx} \right)^{-1} = p(x) \left(\frac{dP(x)}{dx} \right)^{-1} = 1 \quad (4.27)$$

a ξ je rovnoměrně rozdělena v intervalu $(0,1)$.

Platí tak skutečnost, že je-li ξ náhodné číslo, pak funkce definovaná jako

$$x = P^{-1}(\xi) \quad (4.28)$$

definuje náhodnou veličinu s hustotou pravděpodobnosti $p(x)$.

Nyní již je způsob generování náhodných čísel x s danou hustotou pravděpodobnosti zřejmý. Zopakujme si nyní tento postup:

1. Nejprve generujeme náhodné číslo ξ s rovnoměrným rozdělením na intervalu $(0,1)$.
2. Poté najdeme kořen x rovnice $P(x) = \xi$.
3. Číslo x je realizace náhodné veličiny s distribuční funkcí $P(x)$, přičemž pro její hustotu pravděpodobnosti platí (4.26).

Metoda zamítání Metoda zamítání je sice méně efektivní, o to však univerzálnější způsobem generace náhodných čísel s danou hustotou pravděpodobnosti. Vysvětleme si nyní tuto metodu opět na jednorozměrném případě.

Pro generaci náhodného čísla podle distribuční funkce $P(x)$ na intervalu (a, b) je používán následující postup:

1. Generujeme náhodné číslo ξ_1 s rovnoměrným rozdělením na intervalu (a, b) . Transformace z intervalu $(0,1)$ na interval (a, b) je zřejmá.
2. Generujeme náhodné číslo ξ_2 s rovnoměrným rozdělením na intervalu $(0,1)$.
3. Pokud nastane $\xi_2 > P(\xi_1)$, vracíme se na krok (1).
4. Jinak vracíme číslo ξ_2 .

Tento algoritmus je možné ještě zefektivnit tím, že se ve druhém, kroku nehledá náhodné číslo ξ_2 z intervalu $(0,1)$, nýbrž z intervalu $(0, P(\xi_1))$,

4.2.2 Metoda Monte Carlo pro transport částic a záření v terči

Metoda Monte Carlo byla použita k simulaci transportu rychlých elektronů materiálem a k simulaci ionizace v K-slupkách atomů v terči. Hlavním zdrojem informací pro tuto práci byla dokumentace k výpočetnímu kódu PENELOPE [55].

Jsou počítány trajektorie jednotlivých elektronů na základě analyticky vyjádřených diferenciálních účinných průřezů jednotlivých možných interakcí. Účinný průřez můžeme zjednodušeně rozumět jako pravděpodobnost uskutečnění této interakce. Trajektorie částice je nahlížena jako spojnice událostí, jejímiž důsledky mohou být změna jejího směru, ztráta její energie, příležitostné generace sekundárních částic a konečně zánik částice či opuštění interakční oblasti.

Diferenciální účinné průřezy určují hustoty pravděpodobnosti náhodných veličin, které charakterizují trajektorie částic. Těmito veličinami jsou

1. volná dráha mezi jednotlivými srážkami,

2. druh interakce, ke které dojde,
3. množství ztracené energie a změna směru šíření částice a případný počáteční stav sekundární částice, vznikne-li nějaká.

Jsou-li tyto hustoty pravděpodobnosti známy, mohou být generovány náhodné trajektorie. Těchto náhodných trajektorií je třeba velké množství, abychom mohli na základě průměrování relevantně vyhodnotit požadované informace.

Srážky elektronů rozdělujeme na pružné a nepružné. Při pružných srážkách se energie elektronů takřka nemění, nicméně mění se jejich směr. Při nepružných srážkách se naopak takřka nemění směr, ale dochází k výrazným úbytkům energie.

Dále je třeba si uvědomit, že rychlý elektron pohybující se v elektrickém poli neustále ztrácí svoji energii ve formě spojitého brzdného záření. Míra významu brzdného záření jako formy ztráty energie roste s atomovým číslem okolních atomů a s celkovou energií rychlých elektronů. Pro tuto práci je nejpodstatnější interakce rychlých elektronů s elektrony v K-slupkách atomů vedoucí na jejich vyražení do vyšších slupek či úplně mimo atom.

Pravděpodobnost vyzáření fotonu K- α ionizovaným atomem je určena fluorescenčním poměrem [8]. Vyzářený K- α foton je pak třeba dále sledovat během transportu materiálem, neboť dochází k úbytku intenzity K- α záření. Tento pokles intenzity je počítán tzv. Beerovým-Lambertovým zákonem [10, 42].

4.2.3 Shrnutí užití metody Monte Carlo pro transport částic

V této části je vysvětlena praktická aplikace metody Monte Carlo pro transport elektronů v pevném materiálu. Mějme tedy letící elektron se známým směrem a kinetickou energií.

1. Ze znalosti této kinetické energie jsou vypočítány veškeré účinné průřezy σ_i uvažovaných interakcí, dále se vypočítají k nim příslušející volné dráhy λ_i .
2. Vypočítá se celková střední volná dráha λ_T jako

$$\frac{1}{\lambda_T} = \sum_i \frac{1}{\lambda_i}. \quad (4.29)$$

Ze znalosti této střední volné dráhy se vypočte skutečná uražená dráha do další interakce. Tato náhodná veličina má exponenciální rozdělení. Pravděpodobnost, že částice do další interakce urazí dráhu s je

$$p(s) = \frac{1}{\lambda_T} e^{-s/\lambda_T}. \quad (4.30)$$

3. Vypočítá se poloha následující integrace. Je totiž znám směr pohybu a vzdálenost do další interakce.

4. Na základě známých účinných průřezů, resp. pravděpodobností jednotlivých interakcí se náhodně zvolí druh další interakce.

Pokud dochází ke ztrátě energie, z diferenciálního účinného průřezu se rozhodne o množství ztracené energie. Pokud vznikají druhotné částice, dopočítají se charakteristiky těchto částic, jako druh, energie a směr šíření. Tyto druhotné částice se uloží do paměti a jsou zařazeny do pořadí, neboť mohou inicializovat další interakce. Pokud dochází ke změně směru šíření (pružná srážka), ze znalosti diferenciálního účinného průřezu dané interakce se dopočítají nové směrové kosiny.

5. Někdy je v modelu uvažována brzdná síla (stopping power, CDSA neboli Continuous Slowing Down Approximation)

$$\frac{dE}{ds} = \int_0^E W \frac{d\sigma}{dW} dW, \quad (4.31)$$

kde E je energie částice a W je ztráta energie. Aproximace brzdou silou znamená nahrazení některých interakcí, u kterých se příliš nemění směr, ale výrazně klesá energie. V tomto případě se částice ze znalosti počáteční energie a délky trajektorie do další interakce ubere energie dle vzorce (4.31).

6. Ověří se, zda částice nevyletěla z interakčního objemu a zda její energie neklesla natolik, aby se částice stala pro další výpočty nepodstatnou. Pokud je částice stále přítomna, celý algoritmus se opakuje.

Pro náš případ je dále důležitý transport vzniklého záření (hlavně charakteristických fotonů) materiálem. Tento děj je možno opět simulovat metodou Monte Carlo, zvláště pro materiály s vysokým atomovým číslem. V tomto případě mohou fotony brzdného záření významně přispět k ionizaci K-slupek a vzniku K- α záření [34]. Pro lehčí materiály se ukazuje býti uspokojivé aproximovat absorpci záření v materiálu Beerovým-Lambertovým zákonem

$$I(x) = I_0 e^{-\mu \rho x}, \quad (4.32)$$

kde ρ je hustota materiálu a μ je koeficient útlumu závisící na energii fotonů a druhu materiálu. Pro tento koeficient existuje řada různě přesných analytických vztahů a také tabelovaných experimentálních hodnot, například v databázi [36].

Nejvýznamnějšími interakcemi, kterých se vyzářený foton může účastnit a při kterých se může měnit jeho energie nebo může foton dokonce zaniknout jsou Comptonův rozptyl, fotoelektrický jev, Rayleighův rozptyl a vznik páru elektron-positron.

4.2.4 Výpočetní kód PENELOPE

Pro simulace transportu elektronů materiálem a následného vzniku záření K- α byl použit numerický systém PENELOPE (PENetration and Energy Loss of Positrons and

Electrons) [55] vyvinutý na barcelonské universitě. Tento kód byl původně určen pouze pro simulace transportu elektronů a pozitronů, vyzařování z terče bylo dodáno později. Třídídimenzionální kód je napsán v jazyce Fortran77, který je ideální pro numerické výpočty z hlediska procesorového času. Penelope umožňuje simulovat transport elektronů, pozitronů i fotonů materiálem pro energie od 50 eV až po 1 GeV.

Nejvýznamnější součástí tohoto výpočetního systému je podprogram `penelope`, kde jsou naprogramovány rutiny představující veškeré uvažované interakce. Jsou zahrnuty interakce fotonů jako jsou Rayleighův rozptyl, fotoelektrický jev, Comptonův rozptyl a generace elektronových-pozitronových párů. Pro elektrony a pozitrony jsou implementovány pružné i nepružné srážky, úbytek energie ve formě brzděného záření a anihilace pozitronu a elektronu. Součástí systému Penelope jsou i data obsahující fyzikální vlastnosti jednotlivých prvků a vybraných sloučenin.

Jiné významné součásti kódu jsou i dva hlavní programy, `pencyl` a `penmain`. První slouží pro transport částic v tělesech s válcovou symetrií, druhý pro transport v tělesech, které lze popsat v kvadrikách. Uživatel kódu si může napsat i vlastní hlavní program, nicméně pro náš účel plně postačuje velmi jednoduché užití programu `penmain`.

Ke kódu existuje velmi kvalitní a přehledná dokumentace [55], která v této práci sloužila i jako jeden ze zdrojů pro popis metody Monte Carlo.

Kapitola 5

Výsledky provedených simulací

V této kapitole se podíváme na výsledky provedených simulací. Zopakujeme nyní metodiku, která byla při práci použita.

Jak jsme si vysvětlili v kapitole 2.1, generace záření K- α může být důsledkem interakce laserových impulsů s pevným terčem. Rychle si připomeňme tento mechanismus. Při této interakci se na povrchu terče vytvoří expandující oblast plazmatu, ve které jsou přítomny dva druhy elektronů, tj. elektrony tepelné a rychlé.

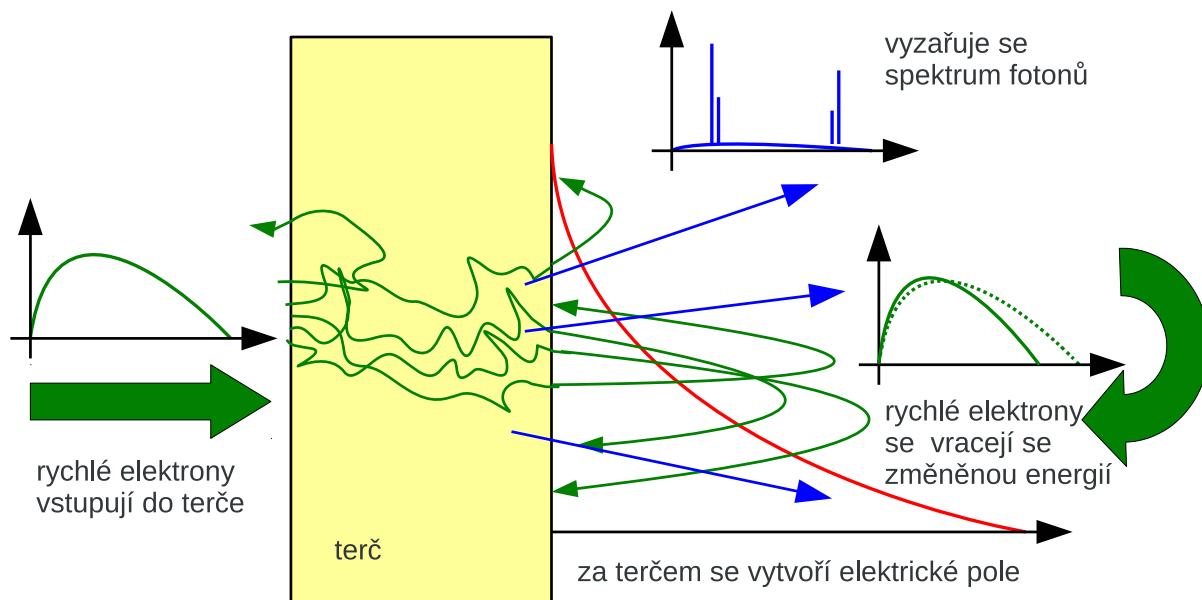
Rychlé elektrony postupují do chladné části terče, kde inicializují další procesy vedoucí ke generaci záření K- α popsané v kapitole 2.1. Pro účely této práce byl tento mechanismus zjednodušen. Samotná interakce laseru s terčem byla nahrazena přímým vstupem spektra rychlých elektronů do chladné části terče. Tepelné elektrony byly zanedbány, neboť mají na výsledný výtěžek charakteristického záření marginální vliv.

Schéma situace použité pro simulace je zakresleno na obrázku 5.1. Jde vlastně o zjednodušení schématu celkové situace, tedy obrázku 2.1.

Průchod všech částic, které se dostanou na zadní stranu terče, je detekován a spolu s jejich energiemi, polohami a směrovými vektory zapsán do souboru. Takto je zjišťováno energetické a úhlové spektrum prošlých a druhotně generovaných elektronů a generovaných fotonů.

Samotné elektrony jsou posléze zpracovávány a navraceny zpět do terče. Předpokládáme, že se jejich energie změní dle zvoleného modelu. Elektrony se vracejí se zrcadlově souměrným směrovým vektorem. Celý postup je opakován i několikrát. Výpočet je tedy prováděn iterativně. Jednotlivou iterací se rozumí jedna simulace průchodu spektra rychlých elektronů terčem a následný výpočet změny energie elektronů za terčem. Iterace pokračují tak dlouho, dokud počet prošlých recirkulujících elektronů neklesne pod stanovenou mez. Tato mez byla zvolena jako 5% původního počtu vstupních elektronů pro první iteraci.

Otázkou, s jakou energií recirkulující elektrony navrátit zpět do terče, se zabývaly simulace metodou particle-in-cell. Byly zkoumány energie navrativších se elektronů pro



Obrázek 5.1: Zjednodušené schéma pro účely simulací. Maxwellovské spektrum rychlých elektronů vstupuje do terče z přední strany. Rychlé elektrony pronikají pevným terčem a inicializují procesy vedoucí ke generaci záření $K\text{-}\alpha$. Část elektronů proniká až za terč, za kterým se indukují elektrické pole, které tyto elektrony navrací zpět do terče. Ze přední i ze zadní části terče je vyzařováno také spektrum fotonů.

různé případy a porovnávají se vzorci představenými v sekci 3. Na základě těchto simulací byl vybrán model, se kterým se potom přepočítávaly energie elektronů po jednotlivých iteracích. Ověřování modelu recirkulace je věnována celá následující podkapitola.

Vliv recirkulace elektronů byl vzhledem k zadání této diplomové práce nejvíce studována z hlediska zvýšení výtěžku charakteristických fotonů $K\text{-}\alpha$. Zejména byly zkoumány následující charakteristiky:

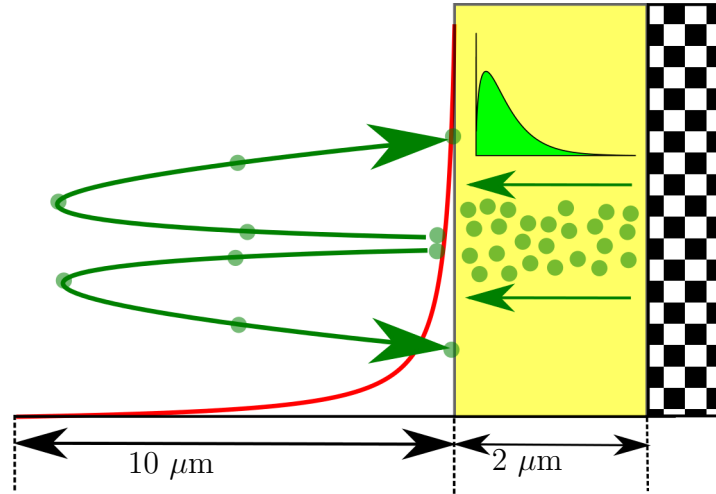
1. počet vyzářených fotonů $K\text{-}\alpha$ na zadní straně terče pro různé případy bez vlivu recirkulace elektronů i s jejím započítáním a stanovení parametrů, kdy je třeba recirkulaci elektronů brát v potaz,
2. velikost oblasti vyzařování a nárůst této velikosti vlivem elektronové recirkulace.

Nejprve se však podívejme na výsledky simulací metodou particle-in-cell a ověřování modelu recirkulace elektronů.

5.1 Ověření modelu recirkulace elektronů

Pro určení energie, s jakou se recirkulující elektron navrátí zpět do terče, byly provedeny simulace metodou particle-in-cell. Byl využit jednodimenzionální (přesněji 1D3V) kód LPIC++ představený v kapitole 4.1.3.

Interakční oblast je graficky představena na obrázku 5.2. Všechny simulace byly prováděny na výpočetní síťce o velikosti 6 000 buněk, tomu odpovídá $12\ \mu\text{m}$. V zadní šestině interakční oblasti se v čase $t = 0$ nacházely ionty v klidovém stavu. Jejich poloha však nebyla fixována, v průběhu simulace tedy tyto ionty získávaly energii od elektronů.



Obrázek 5.2: Nákres k vyšetřování recirkulace elektronů

Ve většině případů se jednalo o ionty vodíku, nicméně byly provedeny i vybrané simulace pro jiné prvky za účelem ověření platnosti vybraného vztahu pro energie navracejících se recirkulujících elektronů.

Hustota rychlých elektronů byla měněna v jednotlivých simulacích. Pohybovala se od $5.6 \times 10^{27}\ \text{m}^{-3}$ do $2.34 \times 10^{28}\ \text{m}^{-3}$. Vysvětleme si nyní důvod této volby. Charakteristickou hodnotou hustoty elektronů v laserovém plazmatu bývá tzv. *kritická hustota* n_c definovaná jako

$$n_c = \frac{\varepsilon_0 m \omega^2}{e^2}. \quad (5.1)$$

Hodnota této veličiny je $1.12 \times 10^{27}\ \text{m}^{-3}$ pro $\lambda = 10^{-6}\ \text{m}$. Tato hodnota byla v této práci použita jako etalon a veškeré ostatní hustoty částic jsou uváděny v násobcích této kritické hustoty n_c . Typické hustoty v provedených simulacích byly $5\ n_c - 20\ n_c$. Tyto relativně vysoké hustoty byly zvoleny z důvodu úspory výpočetního času (vyšší hustota znamená silnější indukované pole a kratší trajektorii rychlých elektronů v tomto poli). Jak bude dále ukázáno, výsledná energie recirkulujících elektronů na hustotě v podstatě nezávisí. Dále se zkoumala závislost na proměnné teplotě rychlých iontů, jejichž teplota se pohybovala od 50 keV do 1 MeV.

Rychlé elektrony se generovaly v zadní šestině terče následujícím způsobem. Dvě z jejich složek hybnosti byly položeny rovny nule, zbývající se přiřadila hybnost ve směru ven z terče tak, aby jejich celkové rozdělení bylo maxwellovské. V případě, že elektron během svého pohybu narazil na zadní stranu terče, byl zapomenut a znovu vygenerován

v poslední buňce, nicméně se směrovým vektorem mířícím od zadní strany terče.

Tímto byl zaručen požadavek izotermické expanze, tedy že teplota rychlých elektronů zůstává zachována. Celková energie systému roste, neboť část energie je absorbována ionty.

Zajímavější informaci je možno získat na přední straně terče. Tam byly zapisovány do souboru veškeré průchody všech částic, ať už ve směru z terče, či ve směru zpět do terče. Ukládaly se vždy čas, číslo částice a hybnost v normálovém směru vzhledem k povrchu terče.

Z těchto údajů potom bylo možno extrahovat informace o tom, za jak dlouho se jednotlivé elektrony navrátily zpět do terče a o kolik energie přitom přišly či kolik energie přitom získaly. Byly provedeny desítky těchto simulací pro různé parametry. Zpracované výsledky byly kriticky srovnány s modelem představeným v kapitole 3.

5.1.1 Zpracování výsledků

Nejzásadnější výsledky simulací pohybu rychlých elektronů v oblasti za terčem jsou vykresleny v obrázcích 5.3 a 5.4.

Graf na obrázku 5.3 ukazuje závislosti střední hodnoty energie recirkulujících elektronů vracejících se do terče na jejich počáteční energii pro různé hustoty materiálu a srovnává tyto hodnoty s modelem izotermické expanze vyjádřeným vztahem (3.32). Závislosti byly vykresleny pro stejnou teplotu spektra rychlých elektronů 100 keV pro všechny případy.

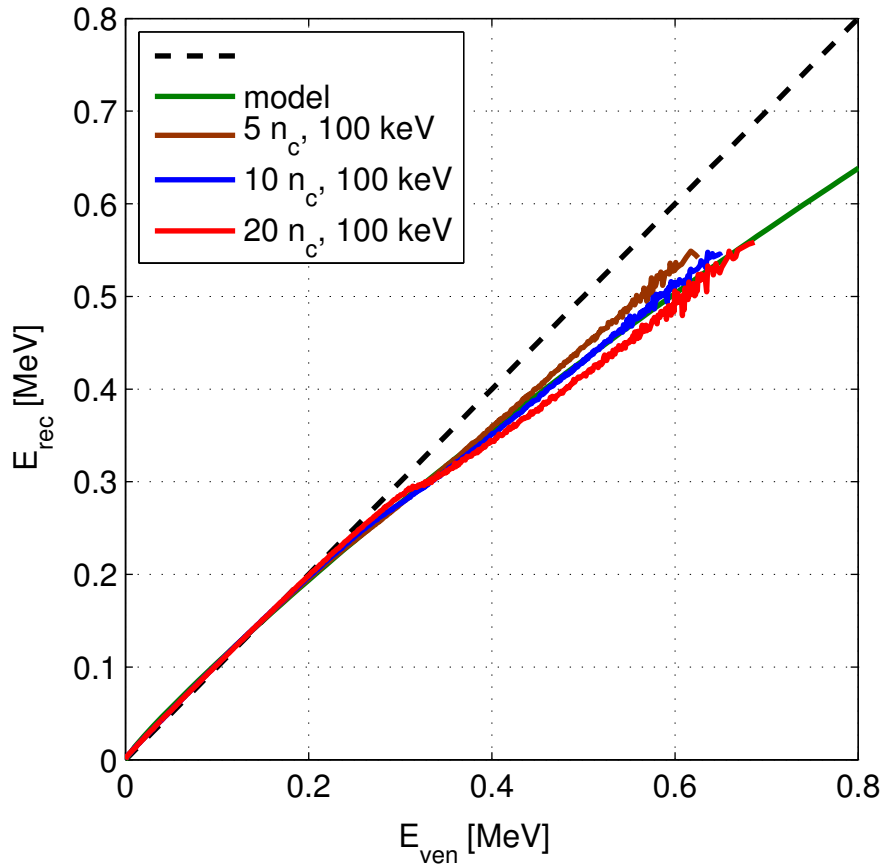
Je vidět, že tento teoretický vztah uspokojivě vystihuje všechny rozdílné hustoty. Energie, jakou se recirkulující elektron do terče navrátí, příliš nezávisí na hustotě rychlých elektronů v materiálu, odkud vyletěl.

Je pozorován i další souhlas s teorií vyjádřený v obrázku 3.3, totiž že pro nižší výstupní energie se elektron vrací s mírně vyšší energií, pro vyšší výstupní energie elektron o část své energie přichází. Hranice, kdy se elektron navrátí se stejnou energií, přibližně souhlasí s očekáváním $\mathcal{E} = \frac{3}{2}k_B T_e$.

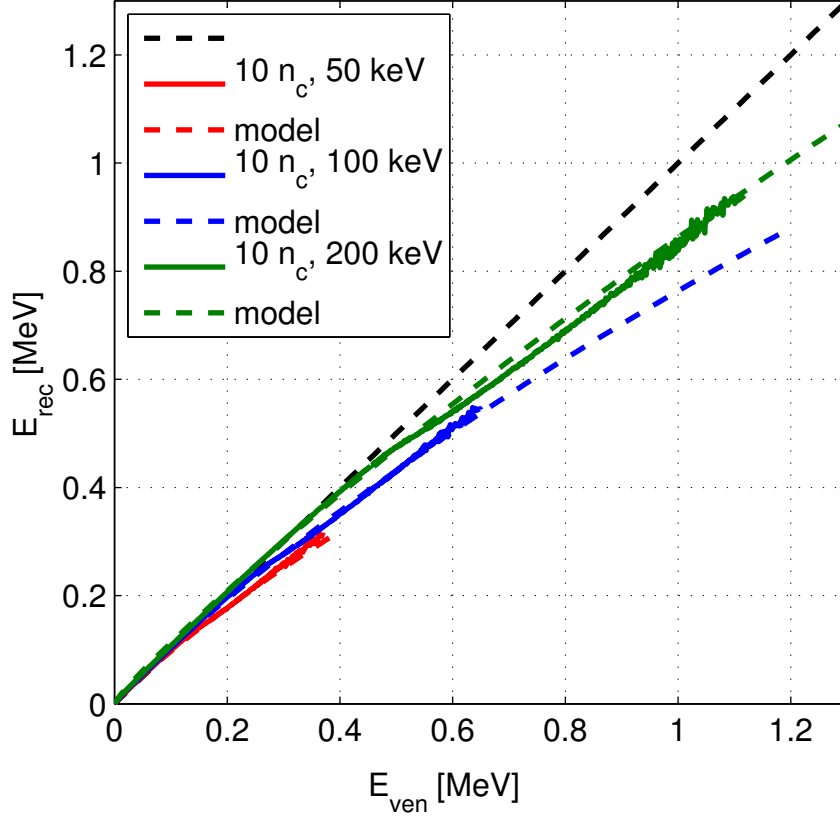
Porovnání různých hustot pro simulace s jinými teplotami dopadly obdobně. Model izotermické expanze uspokojivě vystihoval simulované případy a změna energie na hustotě rychlých elektronů příliš nezávisela.

Podotkněme ještě, že izotermická expanze je ospravedlnitelná, neboť ve většině případů je doba návratu elektronu krátká ve srovnání s charakteristickou dobou pro urychlování iontů, tedy pro dobu poklesu teploty elektronů.

Závislost energie navrátivších se elektronů na teplotě rychlých elektronů Graf na obrázku 5.4 ukazuje pro změnu závislosti energie recirkulujících elektronů na jejich výstupní energii pro různé teploty elektronového spektra a opět srovnává tyto hodnoty s modelem izotermické expanze vyjádřeným vztahem (3.32). Závislosti byly vykresleny



Obrázek 5.3: Střední hodnota energie navrátilých se recirkulujících elektronů E_{rec} v závislosti na energii E_{ven} , se kterou terč opustily. Závislosti jsou vykresleny pro maxwellovské spektrum rychlých elektronů o teplotě 100 keV pro různé hustoty materiálu vodíkového terče (viz vztah (5.1)). Je vidět, že úbytek energie příliš na hustotě nezáleží a že simulace uspokojivě souhlasí s modelem izotermické expanze.



Obrázek 5.4: Střední hodnoty energie navrátilých se recirkulujících elektronů E_{rec} v závislosti na energii E_{ven} , se kterou terč opustily. Závislosti jsou vykresleny pro maxwellovské spektrum rychlých elektronů o různých teplotách a pro hustotu rychlých elektronů ve vodíkovém terči $n = 10n_c$ (viz vztah (5.1)). Je vidět, že úbytek energie na teplotě závisí a že simulace uspokojivě souhlasí s modelem izotermické expanze.

pro stejnou hustotu materiálu $n = 10n_c$ pro všechny případy.

Vidíme, že změna energie na teplotě závisí. Při nižší teplotě elektronového spektra stejně energetické elektrony ztrácejí teplotu rychleji.

Do grafu byly také vyneseny čárkovanými čarami očekávané změny energie dle vztahu (3.32). Je dobře vidět, že model uspokojivě vystihuje povahu simulovaných dat.

Největší rozdíl mezi očekávanými a simulovanými výsledky lze v grafu pozorovat pro teplotu spektra 200 keV pro energie od 600 do 900 keV. V této oblasti model předpovídá mírně menší ztráty energie, než je pozorováno v provedených simulacích.

Opět se potvrzuje i další vlastnost vztahu (3.32), totiž že pro energie $\mathcal{E} < \frac{3}{2}k_B T_e$ elektron energii získává, pro vyšší energie energii ztrácí. Podívejme se nyní na toto pozorněji v tabulce 5.1. Hraniční energií je myšlena taková hodnota energie elektronu, se kterou když elektron opustí terč, tak se s ní navrátí i zpět.

Směrodatné odchylky byly odhadnuty, počet provedených simulací nedovolil provést fundovanější statistické zpracování. Je vidět, že až na teplotu 200 keV hranice $\frac{3}{2}k_B T_e$

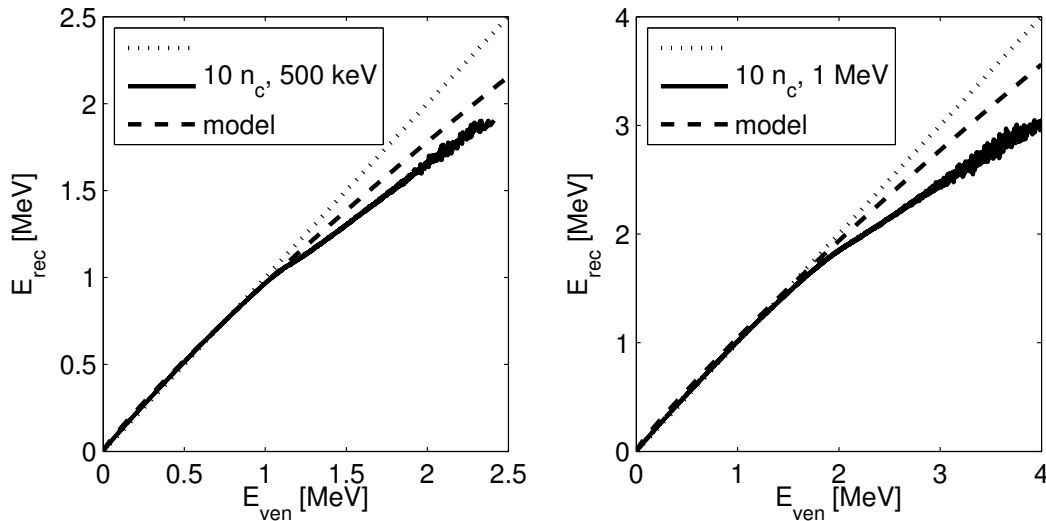
Tabulka 5.1: Opustí-li elektron terč s hraniční energií, vrátí se se stejnou energií. Pomalejší elektrony jsou urychleny, rychlejší zpomaleny. Údaje pro různé teploty spektra.

Teplota rychlých elektronů hraniční energie

50 keV	(72 ± 4) keV
100 keV	(144 ± 7) keV
200 keV	(285 ± 10) keV

souhlasí s pozorováním ze simulací.

K jinému závěru bychom však došli pro vyšší teploty elektronového spektra, jak ukazují grafy na obrázku 5.5. Pro energie nad 1,5 MeV je již v simulacích pozorován výrazný nesouhlas s předpovězenými očekáváními. Elektrony se vracejí do terče s energií výrazně nižší, než by jim příslušelo dle vztahu (3.32).



Obrázek 5.5: Střední hodnoty energie recirkulujících elektronů pro vyšší teploty spektra rychlých elektronů. V tom případě se model izotermické expanze liší od simulací.

Příčinou tohoto nesouladu jsou nejspíše relativistické efekty, které je již nutno pro tyto energie brát v potaz.

5.1.2 Zhodnocení výsledků

Hlavním účelem, proč byly prováděny časově velmi náročné simulace metodou particle-in-cell expanze plazmatu za terčem, bylo zjistit energii, s jakou se recirkulující elektron navrátí zpět do terče, víme-li, s jakou energií terč opustil a na jakých parametrech tato změna energie závisí.

Dá se shrnout, že základní očekávání se potvrdila. Pomalejší elektrony se mohou vrátit mírně urychleny, rychlé elektrony se vrací se sníženou energií. Úbytek energie za terčem se pohybuje většinou v řádu jednotek procent, nicméně pro vyšší energie to může být i více než 20%.

Je potěšitelné, že změna energie recirkulujícího elektronu jenom mírně závisí na hustotě materiálu terče. Pro účel této práce je možno tuto závislost zanedbat. Ještě potěšitelnější je však pozorování, že pro nerelativistické energie elektronů je nalezena dobrá shoda se vztahem (3.32) publikovaným v literatuře [56]. Pro relativistické energie tento vztah neplatí, úbytek energie je výrazně rychlejší.

Většina simulací transportu elektronů materiálem a vzniku charakteristického záření byla prováděna pro energie v rozmezí 50 – 200 keV. V tomto rozmezí je možno vyjádřit jev recirkulace elektronů vztahem (3.32).

5.2 Efekt recirkulace na výtěžek záření $K\text{-}\alpha$

V předchozí části byl simulacemi metodou particle-in-cell ověřen model recirkulace elektronů. Cílem této diplomové práce je demonstrovat, že v některých případech započtení recirkulace elektronů zvyšuje výtěžek charakteristického rentgenového záření vznikajícího po interakci laserového záření s pevným terčem. Nicméně je vhodné zmínit i jiný efekt způsobený elektronovou recirkulací v laserovém plazmatu. Při výzkumu laserového urychlování iontů může hrát elektronová recirkulace nezanedbatelnou roli. Dobrý úvod do této problematiky nabízejí např. články [50, 35].

Pro studium transportu rychlých elektronů pevným terčem a generace rentgenového záření byla využita metoda Monte Carlo představená v kapitole 4.2. Uspořádání simulované oblasti je znázorněno na obrázku 5.1. K výpočtům se používal program Penelope, který byl představen v kapitole 4.2.4. V každém z vyšetřovaných případů se zkoumal zejména počet vyzářených charakteristických fotonů $K\text{-}\alpha$ ze zadní strany terče. Dále byla věnována pozornost také velikosti oblasti vyzařování. Výpočty byly provedeny pro:

1. tři různé materiály terče (hliník, měď, stříbro),
2. tři různé teploty elektronového spektra (50 keV, 100 keV a 200 keV),
3. několik různých šířek terče (5 μm –500 μm).

Výsledky byly jednak porovnávány mezi sebou, jednak byl zkoumán vliv elektronové recirkulace pro jednotlivé případy.

Ve všech případech bylo na vstupu první iterace jeden milion elektronů s Maxwellovským rozdělením. Všechny tyto elektrony byly na počátku umístěny do středu přední strany terče a byl jim přiřazen pro začátek směrový vektor kolmý k povrchu terče s orientací do terče. Na opačné straně byl umístěn myšlený detektor. Když nějaká částice prošla

zadním okrajem terče, byla zapsána se svými charakteristikami do souboru. Z tohoto souboru se pak získávaly informace o počtu prošlých elektronů a fotonů a také o jejich směrových vektorech a polohách.

Jeden milion elektronů se ukázal být uspokojivý z hlediska přesnosti metody Monte Carlo. Bylo provedeno i několik srovnávacích simulací s větším počtem částic (10^7). Na příkladu hliníkového terče o tloušťce $100 \mu\text{m}$ a teplotě elektronového spektra 100 keV bude ospravedlněn zvolený počet elektronů na vstupu. Některé údaje z obou simulací jsou uvedeny v tabulce 5.2. Je vidět, že výsledky se liší pouze nepatrně a doba simulace je úměrně delší.

Tabulka 5.2: Porovnání výsledků simulací s různým počtem elektronů na vstupu. Parametry obou simulací: hliníkový terč o šířce $100 \mu\text{m}$, teplota elektronů 100 keV .

	vyšší přesnost	používaná přesnost
# vstupních elektronů	10 000 000	1 000 000
# prošlých elektronů	2 278 436	227 231
# zpětně rozptýlených elektronů	1 304 213	130 778
# fotonů na zadní straně terče	33 790	3 389
# fotonů na přední straně terče	48 015	4 795
# fotonů K- α na zadní straně terče	6 271	624
doba simulace	10 hod. 50 min.	57 min

Pro odhad, pro jaké elektrony je očekáváno, že by měly projít až na druhou stranu terče, poslouží data z databáze [3]. Pro vybrané hodnoty energií elektronu jsou v tabulce 5.3 zapsány očekávané délky dráhy v námi zkoumaných materiálech. Na tomto místě je potřeba upozornit, aby nebyly zaměňovány pojmy *energie jednotlivého elektronu* a *teplota elektronového spektra*.

Tabulka 5.3: Očekávaná délka dráhy elektronu v materiálu při normálních podmínkách v závislosti na jeho počáteční energii dle databáze ESTAR [3]

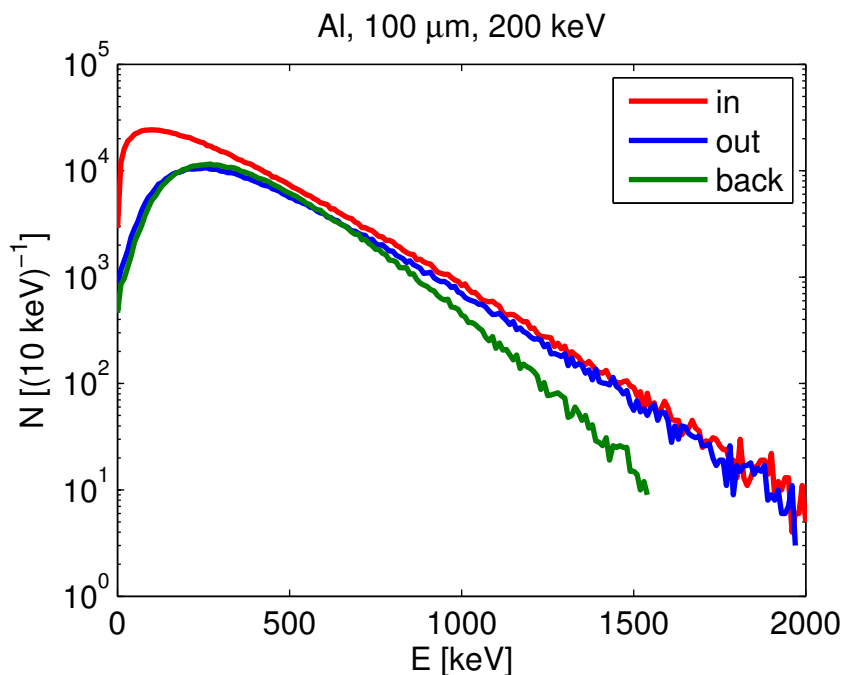
	$d_{\text{Al}} [\mu\text{m}]$	$d_{\text{Cu}} [\mu\text{m}]$	$d_{\text{Ag}} [\mu\text{m}]$
50 keV	21.25	7.77	7.57
100 keV	69.3	24.9	23.9
200 keV	214.9	76.34	72.35

Prošlé elektrony byly spočítány a pokud jich bylo více než 5% původního počtu, tedy 50 000, byla energie každého z nich přepočítána dle vztahu (3.32) a spolu s údaji o poloze a směru zapsána do nového souboru, který posloužil jako vstup pro opakovanou simulaci. Tak byla zohledněna recirkulace elektronů.

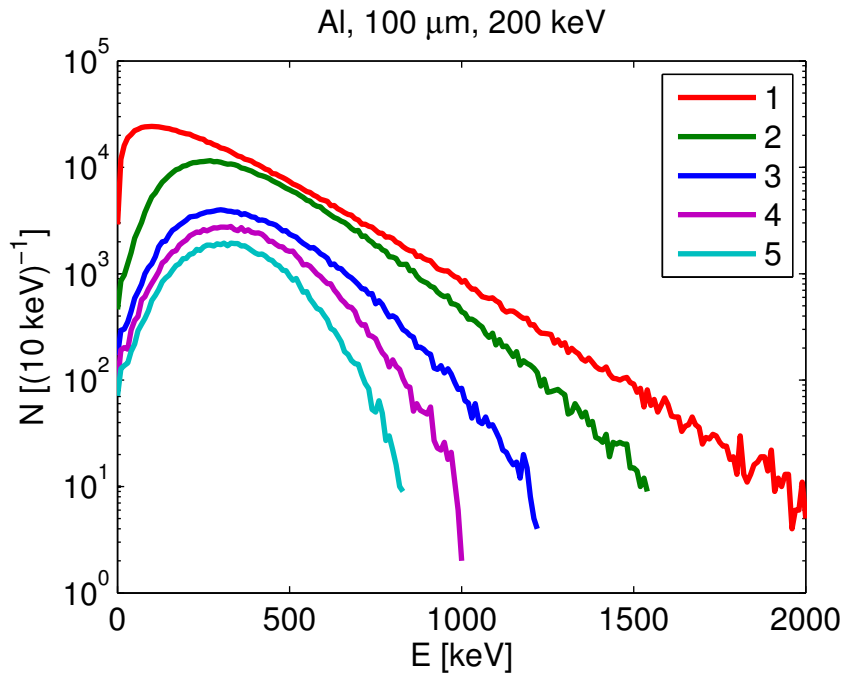
Prošlé fotony byly zpracovávány zejména tak, že se podle energie rozpoznaly charakteristické fotony $K\text{-}\alpha_1$ a $K\text{-}\alpha_2$ a tyto se potom spočítaly. Dále se zkoumaly i polohy, kde ony charakteristické fotony opustily terč. Demonstrujme si nyní na typovém případě postup, jak simulace probíhaly. Seznámíme se přitom lépe s vyšetřovaným problémem.

5.2.1 Průběh typické simulace

Na příkladu simulace průchodu jednoho milionu rychlých elektronů o teplotě spektra 200 keV hliníkovým terčem o tloušťce $100\ \mu\text{m}$ se seznámíme s charakteristikami zkoumané problematiky. Červená křivka na grafu na obrázku 5.6 ukazuje počáteční maxwellovské spektrum elektronů na přední straně terče. Modrá křivka ukazuje spektrum elektronů, které byly detekovány na zadní straně terče. Je třeba si uvědomit, že osa y na obrázku 5.6 má logaritmické měřítko. Velká část vstupních elektronů neprošla až na zadní stranu. Buď byla v terči absorbována, nebo se elektrony odrazily zpět na přední stranu. Mezi prošlými elektrony jsou ale na druhou stranu započítány i sekundární elektrony. To jsou ty z nich, které vznikly při nějakých srážkách uvnitř terče, např. elektrony vyražené z elektronového obalu atomů v terči. Celkově však prošlo na zadní stranu přibližně 52% původního počtu elektronů. To znamená, že se bude ve výpočtech pokračovat další iterací.



Obrázek 5.6: Energetické spektrum tvořené jedním milionem elektronů o teplotě spektra 200 keV (červená čára) vstupuje do hliníkového terče o tloušťce $100\ \mu\text{m}$. Na opačnou stranu pronikne přibližně 52% jejich původního počtu. Jsou mezi nimi i sekundární elektrony (modrá čára). Energie prošlých a nově vzniklých elektronů jsou přepočítány dle vztahu (3.32) a použity jako vstup pro další iteraci (zelená čára).



Obrázek 5.7: Vstupní spektra elektronů pro jednotlivé iterace. Příklad pro milion elektronů o teplotě spektra 200 keV a hliníkový terč o tloušťce 100 μm . Čísla v legendě znamenají pořadí iterace.

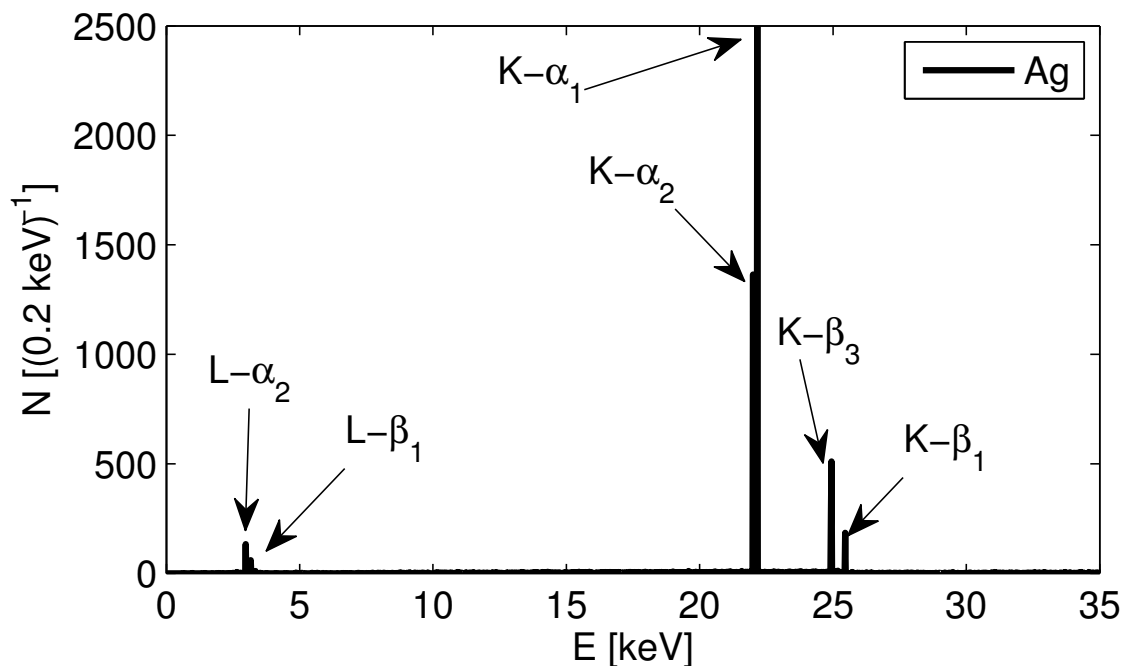
Na obrázku je vidět změna ve tvaru spektra elektronů. Ubylo velké množství elektronů z chladnější části spektra, které byly převážně absorbovány v terči. Naopak elektronů z horké části spektra příliš neubylo. I když to není fyzikálně přesné, je možné se pokusit více energetické části spektra elektronů přiřadit teplotu ve smyslu Maxwellova-Boltzmannova rozdělení, tedy aproximovat tuto část spektra funkcí $f(E) = \sqrt{E} \exp(-E/k_B T_h)$, kde $k_B T_h$ je zmiňovaná teplota. Tato teplota je pro další zpracování důležitá, neboť jak jsme viděli v kapitole 5.1.1, rozhoduje o hraniční energii při recirkulaci. Předpokládáme rovněž, že elektrický potenciál je určen převážně rychlejšími elektrony ze spektra.

Na obrázku 5.6 je ze směrnice tečen červené a modré čáry vidět, že se teplota rychlejších elektronů od originální teploty příliš neliší. V dalších iteracích se už ale teploty liší výrazně. Stanovená teplota byla ve všech případech použita jako parametr ve vztahu (3.32), kterým se stanovil úbytek energie recirkulujícím elektronům.

Spektrum recirkulujících elektronů je v grafu na obrázku 5.6 zakresleno zelenou barvou. Toto spektrum bylo použito jako vstup pro další iteraci výpočtu. Je vidět, že se oproti modré čáře výrazně liší hlavně ve své energetičtější části. Nejrychlejší elektrony byly výrazně zpomaleny. Nicméně je vidět, že velká část chladnějších elektronů byla mírně urychlena. Poloha maxima tohoto rozdělení se posunula směrem k vyšším energiím a také hodnota maxima stoupla.

Graf na obrázku 5.7 ukazuje vývoj spektra rychlých elektronů pro jednotlivé iterace opět pro stejný případ jako v předchozím případě. Je vidět jak postupný úbytek počtu

elektronů po každém průchodu, tak i jejich postupné chladnutí. Po pátém průchodu už klesl počet prošlých elektronů pod 5%, simulace tedy byla ukončena.



Obrázek 5.8: Typické spektrum fotonů ze zadní stěny stříbrného terče. Parametry: teplota rychlých elektronů: 200 keV, tloušťka terče: 50 μm , milion elektronů na vstupu.

Z myšleného detektoru na zadní straně terče bylo možno získat také informaci o emitovaném záření. Jako příklad je na obrázku 5.8 vykresleno typické spektrum záření ze stříbrného terče. Stříbro bylo zvoleno jako příklad proto, že jeho spektrum je mnohem zajímavější než spektrum hliníku z předchozího textu. V obrázku jsou i popisky představující rozpoznatelné čary charakteristického záření. Po každé iteraci byl spočítán celkový počet fotonů z čar K- α . V obrázku jsou zakresleny pouze fotony vyzářené v první iteraci. V tomto případě bylo na zadní straně detekováno dohromady 16 208 fotonů. Čarám K- α_1 a K- α_2 příslušelo dohromady 3 862 fotonů. Zbytek příslušel ostatním spektrálním čarám a spojitému brzděnému záření (tzv. bremsstrahlung [27]).

5.2.2 Počet vyzářených fotonů K- α

Tato sekce nabízí porovnání výtěžku charakteristického rentgenového záření K- α pro různé případy. Zejména byl kladen důraz na výzkum zvýšení výtěžku charakteristického rentgenového záření vlivem započtení elektronové recirkulace. Hlavním cílem bylo stanovení případů, kdy už je třeba s recirkulací počítat a zjistit, jak se tato hranice liší pro různé materiály. Materiály byly vybrány tak, aby mezi nimi byl zastoupen jeden s malým atomovým číslem (hliník, $Z = 13$), jeden se středně velkým atomovým číslem (měď, $Z = 29$) a jeden s vyšším atomovým číslem (stříbro, $Z = 47$).

V šesti grafů na obrázku 5.9 jsou vykresleny závislosti počtu vyzářených charakteristických fotonů K- α na tloušťce terče. V každém obrázku jsou vždy vykresleny tři závislosti pro různé teploty vstupního maxwellovského spektra elektronů. Barevně jsou rozlišeny případy pro 50 keV (modrá), 100 keV (zelená) a 200 keV (červená). Vždy pod sebou jsou dva grafy příslušející stejnému materiálu, postupně zleva hliníku, mědi a stříbru. V horních grafech jsou započítány pouze počty detekovaných fotonů K- α po první iteraci. Odpovídá to případu, kdy není uvažována recirkulace elektronů. Ve spodní trojici grafů recirkulace započítána je. Je dobře vidět, že zvláště pro tenčí terče a vyšší teploty elektronů má recirkulace elektronů významný vliv.

Diskutujme nyní některé závěry, které můžeme vyvodit ze sady grafů na obrázku 5.9. Všimněme si nejprve horní trojice grafů, tedy případů bez započítání recirkulace.

1. Pro většinu případů s rostoucí teplotou vstupního spektra elektronů roste i počet vyzářených charakteristických fotonů ze zadní strany. Toto je v souladu s očekávaními. Pro některé tenčí terče to neplatí. U hliníkového terče o šířce 10 μm je pozorování opačné. Nejvíce charakteristických fotonů vygeneruje nejchladnější spektrum elektronů. Souvisí to se střední volnou drahou jednotlivých elektronů, která je pro vyšší energie elektronů vyšší. V tabulce 5.3 je uvedeno, že elektron s energií 50 keV urazí v hliníku přibližně 20 μm do zastavení, 200keV elektron však urazí už více než 200 μm . Rychlé elektrony tedy tenkým terčem proletí tak rychle, že nestačí inicializovat žádnou srážku vedoucí na generaci charakteristického záření.

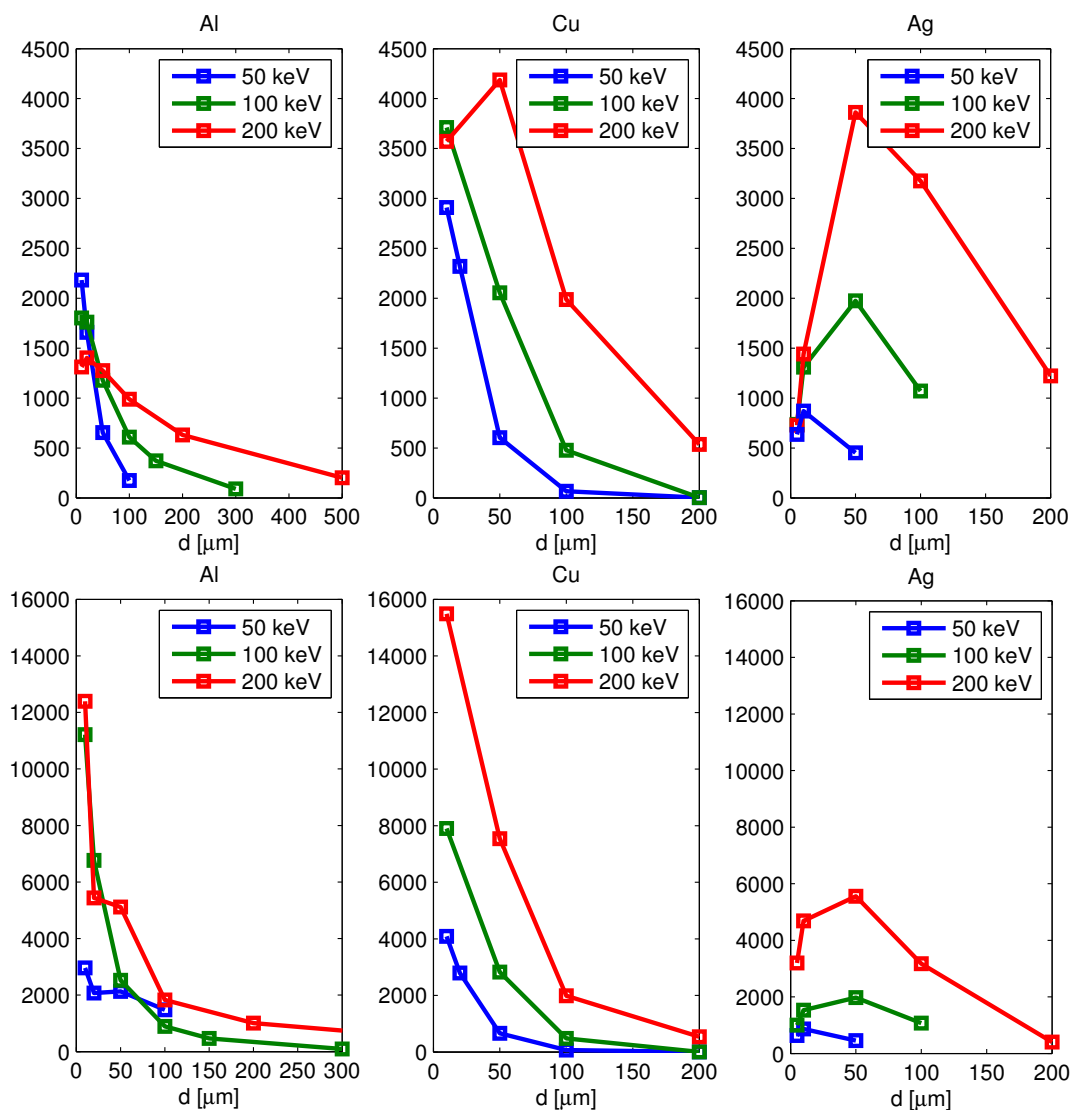
Stejný efekt je pozorován i u měděného terče o šířce 10 μm , kdy více charakteristických fotonů K- α generuje spektrum o teplotě 100 keV než o teplotě 200 keV.

2. Zvláště pro těžší prvky je pozorováno, že závislost intenzity záření K- α na zadní straně terče na šířce terče je nemonotónní a existuje u ní maximum. Na příkladu stříbra lze pozorovat, že poloha maxima se s rostoucí teplotou spektra posouvá k širším terčům.

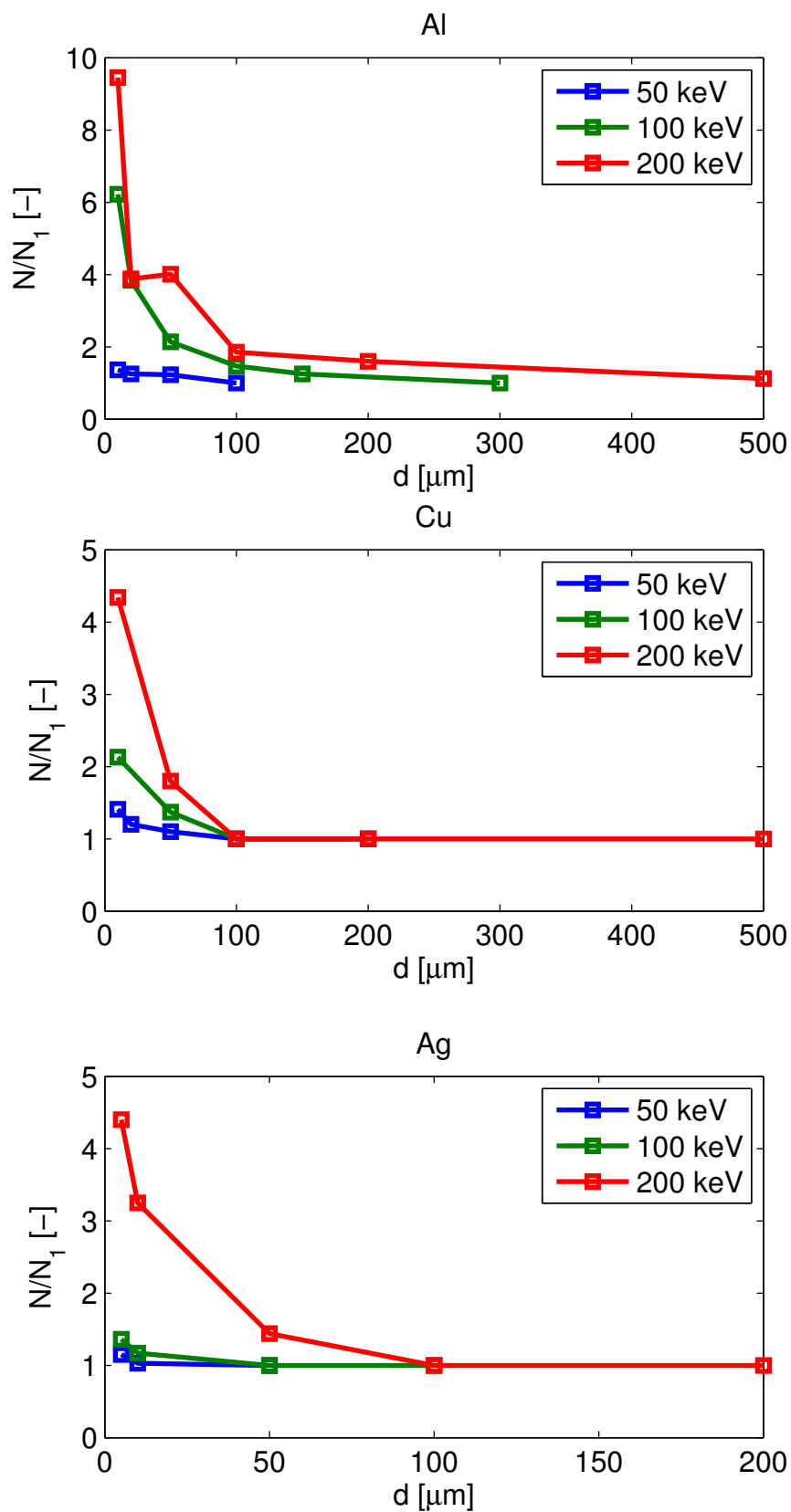
Pro ostatní prvky lze očekávat, že pokud bychom snižovali tloušťku terče, taky by se počet vyzářených fotonů ze zadní strany snižoval, a to ze stejného důvodu.

3. U velmi širokých terčů není záření K- α na zadní straně terče z lehčích materiálů skoro vůbec pozorováno. Důvod je prostý. Terč je tak široký, že jenom málo elektronů pronikne až na zadní stranu terče. Nejsou tak ionizovány atomy v zadní straně terče a charakteristické záření, které se šíří od přední strany terče je silně utlumeno.

Nyní se zaměříme na vliv samotné recirkulace. Budeme tedy porovnávat vždy jednotlivé grafy na obrázku 5.9 pod sebou. Zároveň lze sledovat i grafy na obrázku 5.10, kde jsou v každém grafu pro jednotlivé materiály vyneseny závislosti poměru vyzářených charakteristických fotonů K- α ze zadní strany terče se započtením elektronové recirkulace ku počtu



Obrázek 5.9: Počet vyzářených charakteristických fotonů $K\text{-}\alpha$ ze zadní strany terče v závislosti na tloušťce terče pro na jeden milion vstupních elektronů s maxwellovským rozdělením. Grafy jsou vykresleny vždy tři teploty elektronového spektra, teploty se liší barevně. V horních grafech není započítán vliv recirkulace, ve spodních ano. Vždy pod sebou jsou vykresleny závislosti pro hliník, měď a stříbro.



Obrázek 5.10: Relativní nárůst počtu vyzářených fotonů K- α vlivem recirkulace elektronů pro různé materiály a pro různé teploty elektronového spektra v závislosti na šířce terče. Poměrem N/N_1 se rozumí poměr detekovaných fotonů K- α se započtením recirkulace ke počtu detekovaných fotonů K- α po první iteraci. Jednotlivé barvy znamenají rozdílné teploty spektra vstupních elektronů.

těchto fotonů bez započítání elektronové recirkulace v závislosti na šířce terče. Závislosti jsou vyznačeny pro různé teploty elektronového svazku. Tyto případy jsou znázorněny rozdílnými barvami. Je možno vypořádat následující závěry:

1. Recirkulace může mít na počet vyzářených fotonů K-alfa výrazný vliv, může dojít i k násobnému nárůstu. Největší nárůst byl pozorován u hliníkového terče o šířce $10\ \mu\text{m}$ a teplotě elektronů 200 keV. Počet vyzářených fotonů K- α se zvýšil přibližně $9.8\times$.
2. Pro nižší teploty elektronového spektra je vliv recirkulace elektronů vzhledem k záření K- α ze zadní strany terče nižší než pro vyšší teploty elektronového spektra.
3. Pro námi zkoumané šířky terče a teploty elektronů je vliv recirkulace elektronů na záření K- α výraznější pro tenčí terče než pro širší. Důvodem je, že v tenčích terčích může jednotlivý elektron recirkulovat i více než desetkrát. Oproti tomu v širších terčích elektron recirkuluje pouze několikrát.
4. S vyšší teplotou dopadajícího spektra roste celkový počet vyzářených charakteristických fotonů.
5. Recirkulace posouvá maximum počtu vyzářených charakteristických fotonů K- α doleva. Je to dobře vidět na příkladu mědi v grafech na obrázku 5.9. Má to své opodstatnění - u tenčích terčů se totiž při recirkulaci generuje mnohem víc fotonů a méně se jich reabsorbuje v terči.

Jedním z hlavních cílů této diplomové práce je stanovit hraniční tloušťky pro jednotlivé terče, odkdy už je třeba s recirkulací počítat. Pro tento účel si stanovíme podmínku dvojnásobného zvýšení výtěžku charakteristického záření K- α . Na základě grafů na obrázku 5.10 je možno stanovit následující závěry:

1. s elektronovou recirkulací není třeba počítat pro nízké teploty rychlých elektronů, pro teplotu 50 keV není vliv recirkulace výrazný v žádném z případů.
2. s elektronovou recirkulací je třeba počítat zvláště u tenkých terčů.
 - (a) U hliníku je u teploty elektronů 100 keV vliv recirkulace výrazný pro terče tenčí než $50\ \mu\text{m}$, u teploty 200 keV i pro terče až po $100\ \mu\text{m}$.
 - (b) Pro měď je vliv recirkulace patrný pouze pro tenké terče kolem $10\ \mu\text{m}$ pro teplotu elektronů 100 keV, pro teplotu 200 keV hraje recirkulace výraznou roli až po šířky $50\ \mu\text{m}$.
 - (c) U těžkých prvků jako je stříbro je třeba počít s recirkulací pouze u vyšších teplot elektronů okolo 200 keV a to pouze u tenkých terčů s šířkou do $20\ \mu\text{m}$.

5.2.3 Velikost oblasti vyzařování

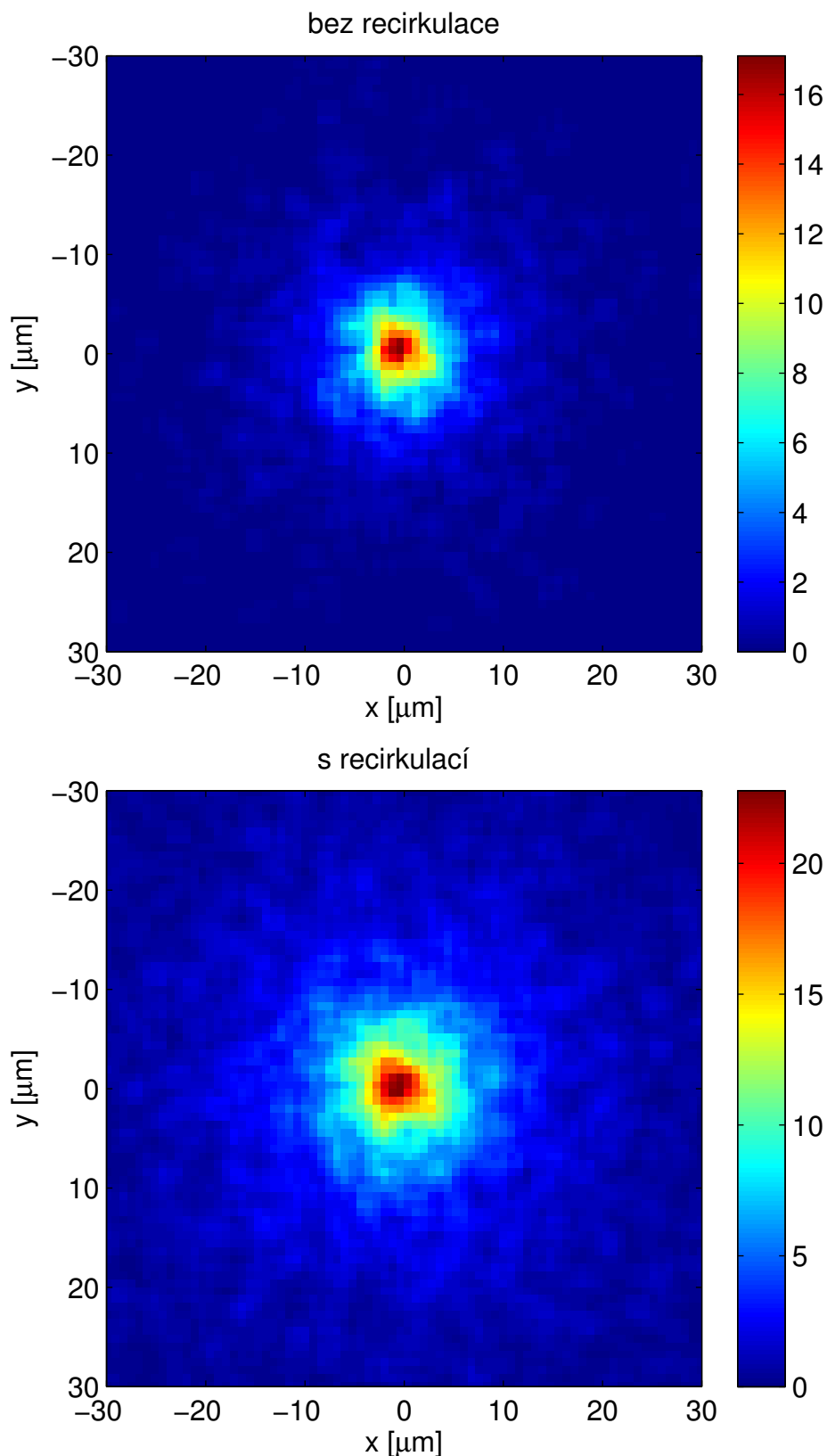
Další výsledkem této diplomové práce je pozorování nárůstu plochy, ze které je vyzařováno charakteristické rentgenové záření $K-\alpha$ ze zadní strany terče. Jako typický příklad zde bude diskutováno záření z měděného terče, přičemž teplota vstupních rychlých elektronů je $200 \mu\text{m}$. Většina grafů prezentovaných v této části bude pro šířku terče $10 \mu\text{m}$.

Podívejme nejprve na dvojici grafů na obrázku 5.11. V horním grafu je zakreslena intenzita vyzařování v závislosti na poloze bez započítání recirkulace, ve spodním grafu recirkulace započítána je. Je zde pozorovatelné zvětšení oblasti vyzařování vlivem recirkulace. Toto zvětšení je očekávané. Na počátku elektron vstupuje do terče v počátku souřadnicového systému. Na grafech je vidět, že právě ve středu terče je také pozorována největší intenzita záření $K-\alpha$. Při každé iteraci je elektron navrácen na souřadnici, odkud vyletěl. S každou iterací tak roste velikost oblasti, odkud je vyzařováno.

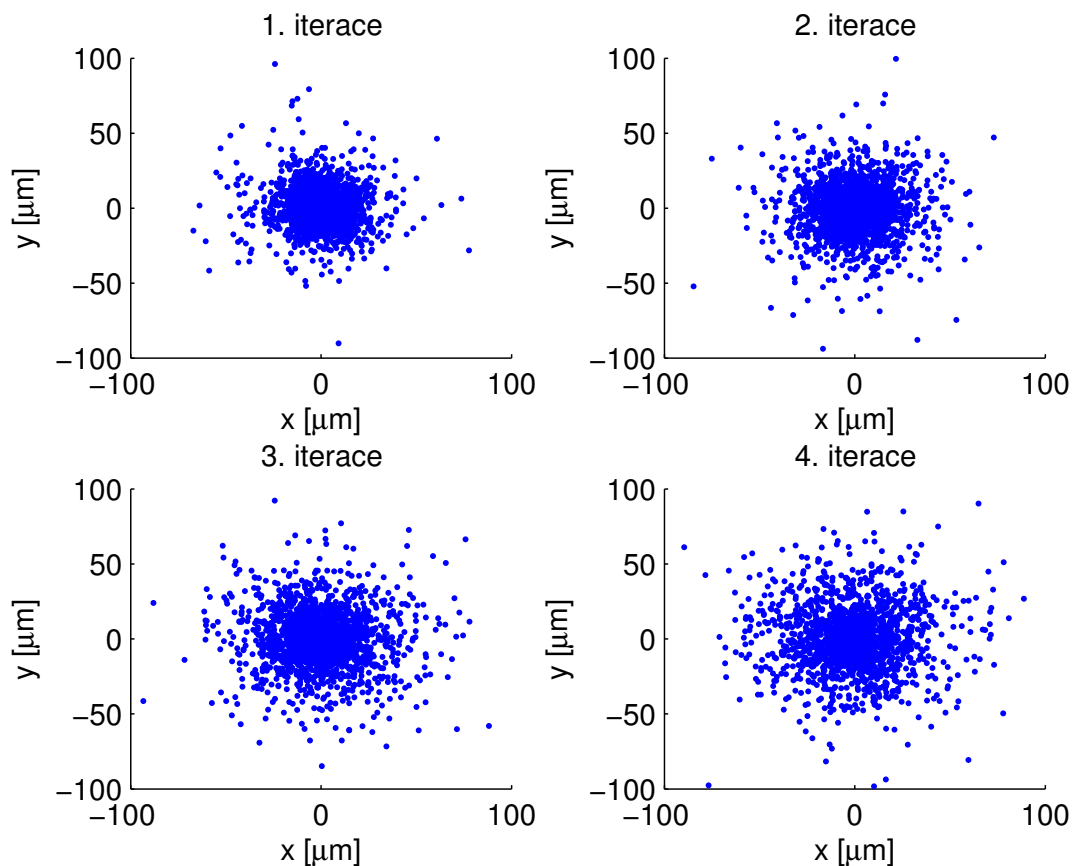
Vyzářené fotony v prvních čtyřech iteracích jsou jako ilustrativní příklad vykresleny v grafech na obrázku 5.12. Každá tečka znázorňuje jeden vyzářený foton $K-\alpha$. Je vidět, že velikost oblasti vyzařování s každou iterací roste a že je vyzařováno z větší oblasti, než by se mohlo zdát z obrázku 5.11. Nicméně intenzita záření ze vzdálenějších oblastí od počátku souřadnic je velmi nízká.

Příklad na obrázku 5.11 je ilustrací pro jeden typický příklad. Data v tabulce 5.4 a v grafu na obrázku 5.13 udávají pološířky plochy vyzařování v závislosti na tloušťce terče pro zkoumaný případ. Pološířkou se rozumí taková vzdálenost od maxima vyzařování, na které klesne intenzita záření na polovinu.

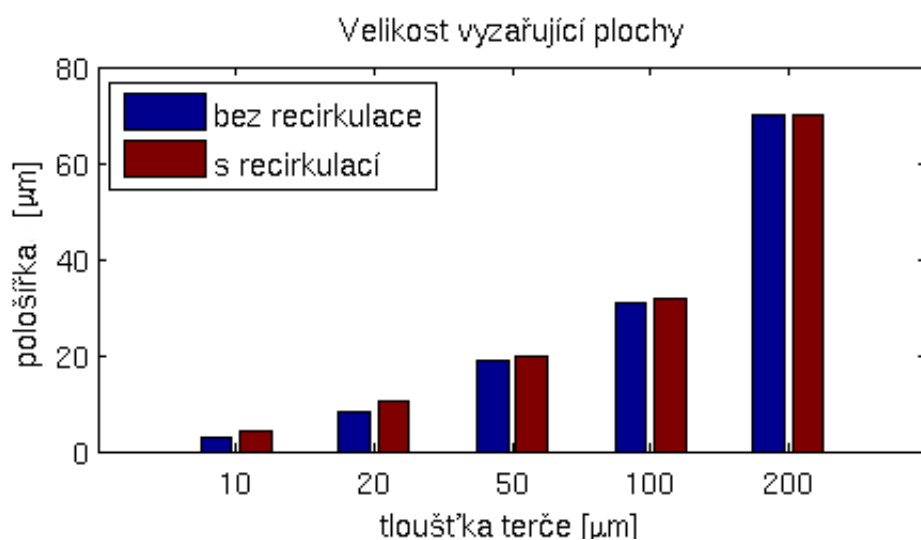
Zejména v tabulce lze vidět, že velikost oblasti vyzařování se výrazně zvyšuje s tloušťkou terče. Nicméně vliv recirkulace je nejpodstatnější pro nejtenčí terče. Důvod je opět podobný, jako u samotného zkoumání počtu vyzářených fotonů $K-\alpha$. Nejdůležitější roli v tomto případě hraje totiž vyšší počet iterací, tedy kolikrát se typický recirkulující elektron navrátí zpět do terče. Z hlediska aplikací je potěšitelné, že i přes nárůst takřka o polovinu u desetimikronového terče zůstává velikost oblasti vyzařování velmi malá, pouze několik mikronů. Takový malý zdroj je poměrně intenzivní a to je vhodné pro některé aplikace.



Obrázek 5.11: Zvětšení oblasti vyzařování vlivem elektronové recirkulace. Měděný terč, šířka $10\ \mu\text{m}$, teplota spektra elektronů $200\ \text{keV}$. Grafy ukazují závislost počtu vyzářených fotonů $K\text{-}\alpha$ na poloze. Elektronový svazek vstupuje do terče v bodě $(0,0)$ ve směru kolmém na povrch terče. V horním grafu není započítán vliv recirkulace, v dolním se s recirkulací počítá. Barvou je znázorněn počet fotonů na pixel. Velikost pixelu je $0.8\ \mu\text{m} \times 0.8\ \mu\text{m}$. Barvy byly vyhlazeny konvoluční maskou. Počet vstupních elektronů byl jeden milion.



Obrázek 5.12: Oblast vyzařování. Měděný terč, šířka 10 μm , teplota spektra elektronů 200 keV. V jednotlivých grafech postupně zakresleny polohy jednotlivých charakteristických fotonů K- α .



Obrázek 5.13: Pološírka oblasti vyzařování záření K- α a její nárůst vlivem elektronové recirkulace pro měděný terč a teplotu vstupního elektronového spektra 200 keV.

Tabulka 5.4: Pološířka plochy vyzařování záření K- α ze zadní strany měděného terče v závislosti na tloušťce terče. Na vstupu bylo použito elektronové spektrum o teplotě 200 keV. d - tloušťka terče, ρ_1 - pološířka bez započítání recirkulace, ρ_2 - pološířka se započítáním recirkulace. Relativní nárůst je vzhledem k vysoké chybě určení pološířky pouze orientační.

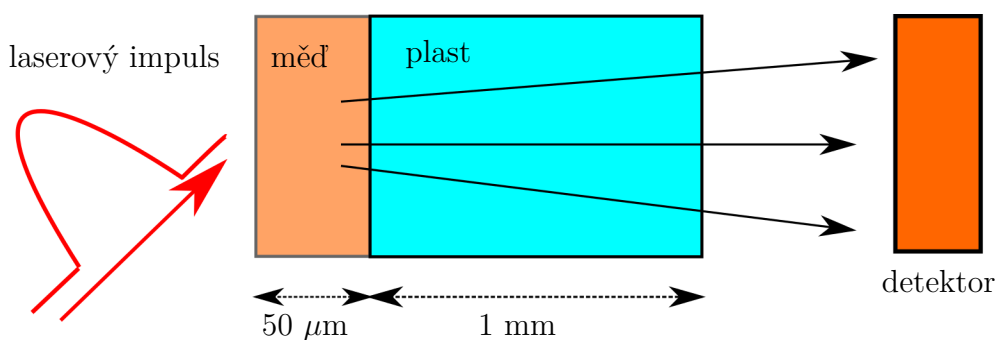
d [μm]	ρ_1 [μm]	ρ_2 [μm]	ρ_2/ρ_1
10	2.8 ± 0.4	4.1 ± 0.4	1.46
20	8.2 ± 0.4	10.3 ± 0.4	1.27
50	19 ± 1	20 ± 1	1.05
100	31 ± 4	32 ± 4	1.03
200	70 ± 15	70 ± 15	1.00

Kapitola 6

Návrh experimentu k demonstraci efektu recirkulace elektronů

Poslední velmi stručná kapitola této diplomové práce bude věnována návrhu experimentálního uspořádání, pomocí kterého by bylo možné demonstrovat vliv recirkulace elektronů na výtěžek charakteristického rentgenového záření, zejména záření $K\text{-}\alpha$.

Velmi jednoduché schéma uvažovaného terče je zakresleno na obrázku 6.1. Jedná se o $50\mu\text{m}$ měděnou fólii na podkladu z plastu, například z polyimidu (chemické složení $\text{C}_{22}\text{H}_{10}\text{N}_2\text{O}_5$). Měděná fólie o šířce menší než $50\mu\text{m}$ byla vybráno proto, neboť je velmi dobrým zdrojem záření $K\text{-}\alpha$ a zároveň je u ní patrný vliv elektronové recirkulace na výtěžek tohoto záření (očekává se nárůst výtěžku o více než 80%, viz grafy na obrázku 5.9).



Obrázek 6.1: Schéma navrhovaného experimentálního uspořádání.

Důležitou vlastností podkladové plochy by měla být schopnost absorbovat skoro všechny elektrony, které projdou skrz měděnou fólii. Tím, že se rychlé elektrony absorbují v plastu se jim zabrání v recirkulaci. Tento terč by byl z přední (měděné) strany ozářen kolmo dopadajícím krátkým laserovým impulsem s intenzitou řádu 10^{18} W/cm^2 . Pro tuto intenzitu lze očekávat rychlé elektrony s teplotou řádu několika set keV [27].

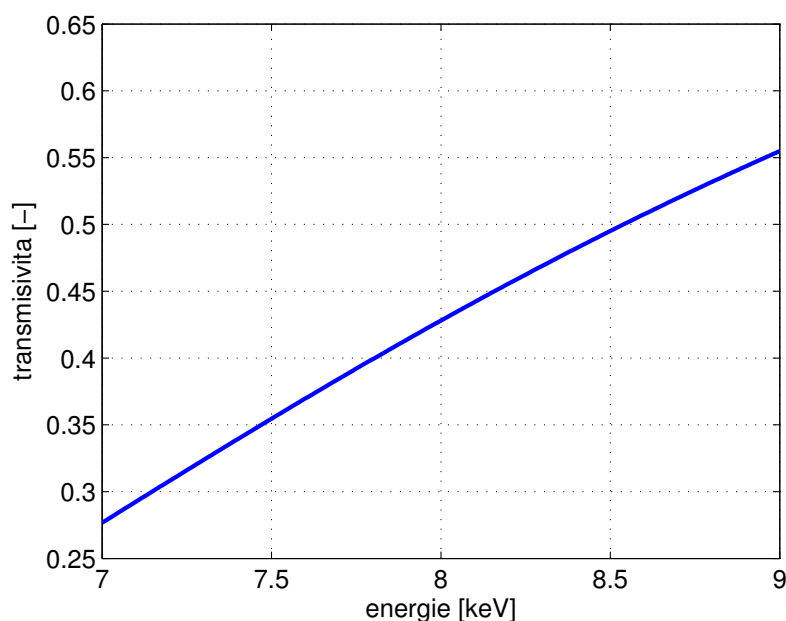
Za terčem by byl umístěn detektor, který by detekoval prošlé fotony. Díky vlastnos-

tem polyimidu nebo podobných plastů by se takto do detektoru dostala poměrně velká část generovaného rentgenového záření. Graf na obrázku 6.2 zobrazuje data transmisivity milimetrové vrstvy z polyimidu v závislosti na energii záření z webové databáze [4] v okolí energie čáry K- α mědi (~ 8 keV). Je vidět, že za plastovou vrstvou by se dostalo 43% charakteristického záření K- α .

Zároveň je však třeba brát v potaz, že naměřené spektrum by bylo součtem spekter záření z mědi i z platu. Nicméně K- α čára mědi by byla snadno identifikovatelná. Dá se tedy říci, že tímto měřením by bylo možno rekonstruovat celkový počet vyzářených fotonů K- α z měděného terče.

Stejný experiment by se provedl potom ještě jednou, tentokrát ovšem bez plastové vrstvy. Prošlé elektrony by tedy nebyly nijak absorbovány a detekované záření za terčem by tentokrát započítávalo i vliv recirkulace.

Porovnáním obou spekter by tak bylo možno demonstrovat vliv elektronové recirkulace na výtěžek záření K- α .



Obrázek 6.2: Prostupnost záření plastikovou vrstvou o tloušťce 1 mm v závislosti na energii fotonu. Data z databáze [4].

Kapitola 7

Závěr

Předkládaná diplomová práce se zabývá studiem elektronové recirkulace a jejím vlivem na zvýšení výtěžku záření $K\text{-}\alpha$ po interakci krátkých laserových impulsů s pevným terčem. Oba fenomény jsou jednak studovány teoreticky, jednak vyšetřovány užitím numerických simulací.

Ve druhé kapitole této práce byly představeny procesy vedoucí ke vzniku charakteristického záření po interakci ultrakrátkých laserových impulsů s pevnou látkou. Jedná se o mechanismy vzniku rychlých elektronů, srážkové procesy během transportu elektronů materiálem vedoucí k ionizaci vnitřních slupek atomů a následnou relaxaci atomů spojenou s vyzářením rozdílu energií slupek ve formě kvanta charakteristického záření.

Třetí kapitola představuje jev recirkulace elektronů a modely tento jev popisující. V části věnované modelu elektrického pole za terčem bylo prokázáno, že elektron stráví v potenciálu za terčem řádově kratší dobu, než kterou stráví transportem v materiálu. Toto tvrzení platí pro terče s tloušťkou v řádu několika desítek až stovek mikronů a tlustší. Z hlediska prodloužení délky rentgenových impulsů vlivem započítání elektronové recirkulace je nejdůležitější počet iterací, tedy kolikrát se recirkulující elektron vrátí zpět do terče. S postupně snižujícím se počtem elektronů a jejich energií postupně intenzita vyzařování záření $K\text{-}\alpha$ klesá. Výrazný prostor je pak věnován také modelu izotermické expanze, který navrhuje, s jakou energií se recirkulující elektron navrací zpět do terče.

Ve čtvrté kapitole byly popsány použité numerické metody, tedy metoda particle-in-cell a metoda Monte Carlo a příslušné simulační kódy LPIC++ a Penelope. Hlavní výsledky práce nabízí pátá kapitola. Nejprve byl ověřen simulacemi metodou particle-in-cell model izotermické expanze popisující energetickou ztrátu elektronů v potenciálu indukovaném na povrchu terče. Byla pozorována shoda výsledku simulací s předpovědí modelu pro různé teploty elektronového spektra. Zároveň bylo prokázáno, že energie, s jakou se recirkulující elektron navrací zpět do terče, významně nezávisí na hustotě rychlých elektronů.

Vliv recirkulace elektronů na výtěžek charakteristického záření $K\text{-}\alpha$ byl zkoumán me-

todou Monte Carlo pro tři různé materiály (hliník, měď a stříbro). Bylo demonstrováno, že vliv elektronové recirkulace je výrazný zejména pro případy tenkých terčů (řádově desítky μm a méně), vyšší teploty spektra rychlých elektronů a pro materiály s nižším atomovým číslem. Vliv recirkulace byl kvantifikován a v extrémním případě byl výtěžek záření K- α se započtením recirkulace až desetkrát vyšší než bez jejího započtení (hliníkový terč o šířce 10 μm , teplota rychlých elektronů 200 keV).

Byl také prokázán nárůst velikosti oblasti vyzařování záření K- α při započtení recirkulace elektronů. Výrazný nárůst byl pozorován zvláště pro tenké terče, v případě 10 μm měděného terče při teplotě spektra 200 keV stoupla pološířka vyzařující oblasti o více než 45%.

V závěrečné kapitole byl představen experiment, kterým by mohl být prokazatelně ověřen vliv elektronové recirkulace na výtěžek charakteristického rentgenového záření K- α . Provedení takového experimentu by mohlo být námětem pro další práci v této oblasti.

Zdroje

- [1] Databáze Evaluated Atomic Data Library. Listopad 2013.
URL <http://www.llnl.gov/cullen1>
- [2] Databáze NIST Atomic Spectra Database Lines Form. Listopad 2013.
URL http://physics.nist.gov/PhysRefData/ASD/lines_form.html
- [3] Databáze NIST ESTAR. Listopad 2013.
URL <http://physics.nist.gov/PhysRefData/Star/Text/ESTAR.html>
- [4] Databáze X-Ray Interactions With Matter. Prosinec 2013.
URL http://henke.lbl.gov/optical_constants/filter2.html
- [5] Atzeni, S.; Meyer-ter Vehn, J.: *The physics of inertial fusion: beam plasma interaction, hydrodynamics, hot dense matter*. Oxford University Press, 2004.
- [6] Badziak, J.; Jablonski, S.: Ultraintense ion beams driven by a short-wavelength short-pulse laser. *Physics of Plasmas*, číslo 17, 2010: str. 073106.
- [7] Bambynek, W.; Crasemann, B.; Fink, R.; aj.: X-ray fluorescence yields, Auger, and Coster-Kronig transition probabilities. *Reviews of Modern Physics*, číslo 44, 1972: s. 716–813.
- [8] Basko, M.: K-Fluorescence lines in spectra of X-ray binaries. *The Astrophysical Journal*, číslo 223, 1978: s. 268–281.
- [9] Baxendale, J. H.; Busi, F.: *The Study of Fast Processes and Transient Species by Electron Pulse Radiolysis: Proceedings of the NATO Advanced Study Institute Held at Capri, Italy, 7-18 September, 1981*, číslo 86. Springer, 1982.
- [10] Beer, A.: Bestimmung der Absorption des rothen Lichts in farbigen Flüssigkeiten. *Ann. Phys. Chem*, číslo 86, č. 2, 1852: s. 78–90.
- [11] Beg, F. N.; Bell, A. R.; Dangor, A. E.; aj.: A study of picosecond laser–solid interactions up to 10^{19} W cm⁻². *Physics of Plasmas*, číslo 4, č. 2, 1997: s. 447–457.
- [12] Beiser, A.: *Úvod do moderní fyziky*. Academia, Praha, 1975.

- [13] Birdsall, C. K.; Langdon, A. B.: *Plasma physics via computer simulation*. CRC Press, 2005.
- [14] Boris, J.: *Relativistic plasma simulation-optimization of a hybrid code*. 1970, 3–67 s.
- [15] Briggs, D.; Grant, J. T.: *Surface analysis by Auger and X-ray photoelectron spectroscopy*. IM Publications Chichester, UK, 2003.
- [16] Bulanov, S.; Esirkepov, T. Z.; Koga, J.; aj.: Concerning the maximum energy of ions accelerated at the front of a relativistic electron cloud expanding into vacuum. *Plasma Physics Reports*, číslo 30, č. 1, 2004: s. 18–29.
- [17] Bína, V.: *PIC simulace interakce ultrakrátkých laserových pulsů s terčí*. ČVUT, 2011, diplomová práce.
- [18] Cengiz, A.: Approximate inelastic scattering cross sections of electrons. *Radiation Physics and Chemistry*, číslo 65, č. 1, 2002: s. 33–44.
- [19] Chapman, H. N.; Barty, A.; Bogan, M. J.; aj.: Femtosecond diffractive imaging with a soft-X-ray free-electron laser. *Nature Physics*, číslo 2, č. 12, 2006: s. 839–843.
- [20] Chen, F. F.: *Úvod do fyziky plazmatu*. Academia, Praha, 1984.
- [21] Clark, E.; Krushelnick, K.; Davies, J.; aj.: Measurements of energetic proton transport through magnetized plasma from intense laser interactions with solids. *Physical Review Letters*, číslo 84, č. 4, 2000: str. 670.
- [22] Cook, C. E.: Pulse compression-key to more efficient radar transmission. *Proceedings of the IRE*, číslo 48, č. 3, 1960: s. 310–316.
- [23] Eder, D. C.; Pretzler, G.; Fill, E.; aj.: Spatial characteristics of K-alpha radiation from weakly relativistic laser plasmas. *Applied Physics B-Lasers and Optics*, číslo 70, č. 2, 2000: s. 211–217.
- [24] Ewald, F.; Schwoerer, H.; Düsterer, S.; aj.: Application of relativistic laser plasmas for the study of nuclear reactions. *Plasma physics and controlled fusion*, číslo 45, č. 12A, 2003: str. A83.
- [25] Fritzler, S.; Malka, V.; Grillon, G.; aj.: Proton beams generated with high-intensity lasers: Applications to medical isotope production. *Applied physics letters*, číslo 83, č. 15, 2003: s. 3039–3041.
- [26] Gahn, C.; Tsakiris, G.; Pukhov, A.; aj.: Multi-MeV electron beam generation by direct laser acceleration in high-density plasma channels. *Physical Review Letters*, číslo 83, č. 23, 1999: str. 4772.

- [27] Gibbon, P.: *Short pulse laser interactions with matter*. Imperial College Press London, 2005.
- [28] Gibbon, P.; Bell, A.: Collisionless absorption in sharp-edged plasmas. *Physical review letters*, číslo 68, č. 10, 1992: str. 1535.
- [29] Gibbon, P.; Förster, E.: Short-pulse laser-plasma interactions. *Plasma Physics and Controlled Fusion*, číslo 38, č. 6, 1996: str. 769.
- [30] Gordon III, C. L.; Yin, G.; Lemoff, B.; aj.: Time-gated imaging with an ultrashort-pulse, laser-produced-plasma x-ray source. *Optics letters*, číslo 20, č. 9, 1995: s. 1056–1058.
- [31] Gregori, G.; Ravasio, A.; Murphy, C.; aj.: Generation of scaled protogalactic seed magnetic fields in laser-produced shock waves. *Nature*, číslo 481, č. 7382, 2012: s. 480–483.
- [32] Grismayer, T.; Mora, P.; Adam, J.; aj.: Electron kinetic effects in plasma expansion and ion acceleration. *Physical Review E*, číslo 77, č. 6, 2008: str. 066407.
- [33] Gwyn, C.; Stulen, R.; Sweeney, D.; aj.: Extreme ultraviolet lithography. *Journal of Vacuum Science & Technology B: Microelectronics and Nanometer Structures*, číslo 16, č. 6, 1998: s. 3142–3149.
- [34] Horný, V.: *K- α záření při interakci krátkých intenzivních laserových pulsů s terčí*. ČVUT, 2012, výkumný úkol.
- [35] Huang, Y.-s.; Lan, X.-f.; Duan, X.-j.; aj.: Hot-electron recirculation in ultraintense laser pulse interactions with thin foils. *Physics of Plasmas*, číslo 14, č. 10, 2007: s. 103106–103106.
- [36] Hubbell, J. H.; Seltzer, S. M.: Tables of X-ray mass attenuation coefficients and mass energy-absorption coefficients 1 keV to 20 MeV for elements Z= 1 to 92 and 48 additional substances of dosimetric interest. Technická zpráva, National Inst. of Standards and Technology-PL, Gaithersburg, MD (United States). Ionizing Radiation Div., 1995.
- [37] Kawamura, T.; Horioka, K.; Koike, F.: Potential of K- α radiation by energetic ionic particles for high energy density plasma diagnostics. *Laser and Particle Beams*, číslo 24, 5 2006: s. 261–267, ISSN 1469-803X.
- [38] King, J.; Akli, K.; Snavely, R.; aj.: Characterization of a picosecond laser generated 4.5 keV Ti K-alpha source for pulsed radiography. *Review of scientific instruments*, číslo 76, 2005: str. 076102.

- [39] Kneip, S.; Nagel, S.; Martins, S.; aj.: Near-GeV acceleration of electrons by a nonlinear plasma wave driven by a self-guided laser pulse. *Physical review letters*, číslo 103, č. 3, 2009: str. 035002.
- [40] Kruer, W.; Estabrook, K.: $J \times B$ heating by very intense laser light. *Physics of Fluids*, číslo 28, 1985: str. 430.
- [41] Kulhánek, P.: *Úvod do teorie plazmatu*. AGA, 2011, ISBN 9788090458222.
- [42] Lambert, J.-H.: *JH Lambert, ... Photometria, sive de Mensura et gradibus luminis, colorum et umbrae*. sumptibus viduae E. Klett, 1760.
- [43] Lapenta, G.: *Particle In Cell Methods With Application to Simulations in Space Weather*. Katholieke Universiteit Leuven, 2011.
- [44] Lichters, R.; Pfund, R. E.; Meyer-ter Vehn, J.: *LPIC++: A parallel one-dimensional relativistic electromagnetic particle-in-cell code for simulating laser-plasma-interaction*. Max-Planck-Institut für Quantenoptik, 1997.
- [45] Limpouch, J.; Klimo, O.; Bina, V.; aj.: Numerical studies on the ultrashort pulse K-[alpha] emission sources based on femtosecond laser–target interactions. *Laser and Particle Beams*, číslo 22, č. 02, 2004: s. 147–156.
- [46] Mackinnon, A.; Sentoku, Y.; Patel, P.; aj.: Enhancement of proton acceleration by hot-electron recirculation in thin foils irradiated by ultraintense laser pulses. *Physical review letters*, číslo 88, č. 21, 2002: str. 215006.
- [47] McAlister, A. J.; Stern, E.: Plasma resonance absorption in thin metal films. *Physical Review*, číslo 132, č. 4, 1963: str. 1599.
- [48] Meitner, L.: Über die Entstehung der β -Strahl-Spektren radioaktiver Substanzen. *Zeitschrift für Physik A Hadrons and Nuclei*, číslo 9, č. 1, 1922: s. 131–144.
- [49] Miziolek, A. W.; Palleschi, V.; Schechter, I.: *Laser induced breakdown spectroscopy*. Cambridge University Press, 2006.
- [50] Neely, D.; Foster, P.; Robinson, A.; aj.: Enhanced proton beams from ultrathin targets driven by high contrast laser pulses. *Applied Physics Letters*, číslo 89, č. 2, 2006: s. 021502–021502.
- [51] Neutze, R.; Wouts, R.; van der Spoel, D.; aj.: Potential for biomolecular imaging with femtosecond X-ray pulses. *Nature*, číslo 406, č. 6797, 2000: s. 752–757.
- [52] Press, W. H.; Teukolsky, S. A.: Portable random number generators. *Computers in physics*, číslo 6, č. 5, 1992: s. 522–524.

- [53] Reich, C.; Uschmann, I.; Ewald, F.: SD üsterer, AL übcke, H. Schwoerer, R. Sauerbrey, EF örster, and P. Gibbon, “Spatial characteristics of K alpha x-ray emission from relativistic femtosecond laser plasmas,”. *Phys. Rev. E*, číslo 68, 2003: str. 056408.
- [54] Röntgen, W. C.: Über eine neue Art von Strahlen. *Annalen der Physik*, číslo 300, č. 1, 1898: s. 1–11.
- [55] Salvat, F.; Fernández-Varea, J. M.; Sempau, J.: PENELOPE-2008: A code system for Monte Carlo simulation of electron and photon transport. *Nuclear Energy Agency*, 2009.
- [56] Schollmeier, M. S.: *Optimization and control of laser-accelerated proton beams*. Dizertační práce, TU Darmstadt, Institut für Kernphysik, Januar 2009.
- [57] Štoll, I.; Tolar, J.: *Teoretická fyzika*. Česká technika - nakladatelství ČVUT, 2008, ISBN 9788001040058.
- [58] Villasenor, J.; Buneman, O.: Rigorous charge conservation for local electromagnetic field solvers. *Computer Physics Communications*, číslo 69, č. 2, 1992: s. 306–316.