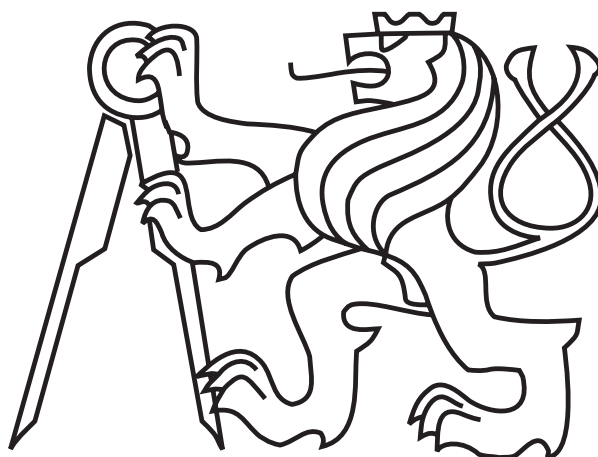


ČESKÉ VYSOKÉ UČENÍ TECHNICKÉ V PRAZE

Fakulta jaderná a fyzikálně inženýrská

Katedra fyzikální elektroniky



VÝZKUMNÝ ÚKOL

**K- α záření při interakci krátkých
intenzivních laserových pulsů s terčí**

**K- α radiation from targets irradiated by
intense short pulse lasers**

Posluchač: Bc. Vojtěch Horný

Školitel: Ing. Ondřej Klimo, Ph.D.

Akademický rok: 2011/2012

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 12. září 2012

.....

Bc. Vojtěch Horný

Poděkování

Děkuji zejména vedoucímu svého výzkumného úkolu, 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: K- α záření při interakci krátkých intenzivních laserových pulsů s terčí

Autor: Bc. Vojtěch Horný

Obor: Inženýrská informatika

Zaměření: Informatická fyzika

Druh práce: Výzkumný úkol

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

Konzultant: prof. Ing. Jiří Limpouch, CSc., KFE FJFI ČVUT

Abstrakt: Při interakci krátkých intenzivních laserových impulsů s pevným terčem dochází ke vzniku vrstvy plazmatu na jeho povrchu. V tomto plazmatu vznikají i rychlé elektrony, které dále pronikají do chladné části terče a inicializují další interakce. Při těchto interakcích dochází i k ionizaci vnitřních slupek atomů v materiálu a následnému vyzáření charakteristických fotonů K- α . V této práci byl numericky simulován vznik tohoto K- α záření metodami particle-in-cell a Monte Carlo. Byla určeno nejlepší uspořádání laserového systému z hlediska maximalizace absorpce energie a následně pro hliník, měď, stříbro, zlato a uran vyšetřována závislost počtu vyzářených fotonů K- α na šířce terče. Byl prokázán signifikantní vliv druhotné fotoionizace pro materiály s vysokým protonovým číslem.

Klíčová slova: K- α záření, transport elektronů, particle-in-cell, Monte Carlo, krátké laserové impulsy

Title: **K- α radiation from targets irradiated by intense short pulse lasers**

Author: Vojtěch Horný

Abstract: Thin plasma layer is created after an interaction of short intense laser pulses with solid target. Hot electrons are created in this plasma and penetrate into the cooler part of the target, where cause secondary interactions. The inner shells of the atoms in material are ionized and immediately reoccupied. The consequence is a radiation of characteristic K- α photons. In this thesis it was numerically simulated generation of this K- α radiation using methods particle-in-cell and Monte Carlo. The best configuration of laser system was designed with respect to maximalization of laser energy absorption. The dependence of the total number of radiated photons on the width of the target was investigated for aluminium, copper, silver, gold and uranium. A significant influence of secondary photoionization was proved for the materials with high atomic number.

Key words: K- α radiation, electron transport, particle-in-cell, Monte Carlo, short laser pulses

Obsah

1	Interakce laserového záření s plasmatem a vznik rentgenového záření	11
1.1	Interakce krátkých laserových impulsů s pevnou látkou	13
1.2	Vznik rychlých elektronů	14
1.2.1	Rezonanční absorpce	14
1.2.2	Vakuový ohřev	14
1.3	Transport rychlých elektronů pevným terčem	15
1.4	Ionizace atomů	15
1.4.1	Augerovské elektrony	16
1.4.2	Charakteristické záření	16
2	Použité numerické metody a kódy	19
2.1	Metoda particle-in-cell	19
2.1.1	Fyzikální podstata metody PIC	19
2.1.2	Nástin matematického odvození metody PIC	20
2.1.3	Rekapitulace	23
2.1.4	Výpočetní kód LPIC++	24
2.2	Metoda Monte Carlo	24
2.2.1	Aplikace metody Monte Carlo v této práci	25
2.2.2	Základy metody Monte Carlo	26
2.2.3	Shrnutí užití metody Monte Carlo pro transport částic	27
2.2.4	Výpočetní kód PENELOPE	29
3	Představení a porovnání výsledků provedených simulací	30
3.1	Simulace interakce laserového impulsu s pevným terčem pomocí kódu LPIC++	30
3.1.1	Zprovoznění kódu	32
3.1.2	Zpracování dat	32
3.1.3	Hledání nejlepšího spektra	33
3.1.4	Shrnutí simulací metodou particle-in-cell	38
3.2	Simulace transportu elektronů v chladné části terče pomocí kódu Monte Carlo PENELOPE	41
3.2.1	Zprovoznění kódu	42

3.2.2	Zpracování dat	46
3.2.3	Představení výsledků	46
3.2.4	Shrnutí výsledků simulací radiačního transportu	53
3.3	Shrnutí výsledků	54

Úvod

V současné době se zlepšily charakteristiky laserových systémů natolik, že je možno produkovat laserové impulsy trvající velmi krátkou dobu. Kvantitativně jde už o stovky femtosekund. Tyto laserové impulsy mohou být velmi intenzivní, v této práci jsou uvažovány intenzity až o řádu 10^{18} W/cm².

Po interakci takovéto laserové vlny s pevným terčem dochází k celé řadě zajímavých fyzikálních jevů, z nichž některé mohou v dohledné době přinést průlomové aplikace do nejrůznějších oblastí lidského života.

Tato práce si dává za cíl zkoumat interakci velmi krátkých laserových impulsů s terčí z materiálu s vysokým protonovým číslem a následnou generaci charakteristického rentgenového záření.

Při dopadu laserového impulsu na povrch terče elektrické pole vlny výrazně převyšuje elektrické pole vazby držící elektrony v poli jádra. Důsledkem je blesková ionizace povrchové vrstvy a vznik horkého hustého plazmatu. Většinu 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 interakci těchto rychlých elektronů s elektrony z K-slupek atomů, uvolnění těchto vnitřních K-slupek a jejich následné znovuobsazení elektrony z vyšších slupek spojené s vyzářením charakteristického fotonu.

Zvláštní důraz bude kladen na zkoumání vlivu druhotné fotoionizace atomů v těžkých materiálech. Očekává se, že tyto materiály s vysokým protonovým číslem mohou výrazně zlepšit efektivitu transformace laserového záření do charakteristického záření, z něhož je pro nás nejpodstatnější záření K- α , které se pro uvažované materiály nachází v rentgenovské části spektra.

V této práci jsou tyto procesy numericky simulovány. Metodou particle-in-cell je vyšetřována interakce laserového impulsu s pevným terčem při různých počátečních konfiguracích. Je hledáno nejlepší uspořádání z hlediska nejefektivnější absorpce energie laseru do materiálu. Jako výstup je použito spektrum rychlých elektronů.

V druhé části práce je toto nejlepší spektrum použito jako vstup pro simulace Monte Carlo jejich transportu chladnější částí terče. Je vyšetřováno hlavně množství vyzáře-

ných charakteristických fotonů pro různé materiály a tloušťky terče a vyhodnocován vliv druhotné fotoionizace pro těžší materiály.

Práce jako taková je rozčleněna do tří kapitol. V první kapitole je představena základní teorie interakce laserového záření s pevnou látkou, transportu elektronů pevnou látkou a ionizace atomů a následného vzniku charakteristického záření. Druhá kapitola představuje numerické metody použité pro zkoumání této interakce a představuje také oba použité výpočetní kódy LPIC++ a PENELOPE.

Jádro celé práce leží ve třetí kapitole, kde jsou představeny a diskutovány výsledky provedených simulací.

Kapitola 1

Interakce laserového záření s plasmatem a vznik rentgenového záření

První kapitola tohoto výzkumného úkolu má za cíl věnovat se teoretickému studiu interakce laserového záření s plasmatem a studiem procesů vedoucím se vzniku rentgenového záření ve formě femtosekundových impulsů v laserovém plasmatu. Představme si nyní rentgenové záření jako takové.

Rentgenové záření je forma elektromagnetického záření o vlnových délkách 10 nanometrů až 1 pikometr. 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* [25], 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 i 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.

Motivace studia vzniku krátkých rentgenových impulsů Procesy, jako chemické reakce nebo fázové přechody se odehrávají v časovém intervalu srovnatelné s periodou kmitů atomů v mřížce. Typicky jde o stovky femtosekund. Použití rentgenových impulsů s kratší periodou se jeví býti ideálním prostředkem pro experimentální výzkum těchto jevů [17].

Další využití se nabízí v medicíně [11, 18] a biologii [22]. 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 [13], za účelem získání velmi krátkých impulsů záření γ .

Proto, abychom vůbec mohli zkoumat generaci $K\text{-}\alpha$ záření, je třeba porozumět transportu rychlých elektronů materiálem. A tyto znalosti jsou zase důležité pro jeden z konceptů zapálení reakce inerciální jaderné fúze, konkrétně jde o metodu rychlého zážehu (Fast Ignition) [4]. Při rychlém zážehu se uvažuje nejprve o prudké kompresi materiálu laserovým zářením a následném zahřátí centrální části proudem rychlých částic, nejspíše by se mělo jednat o elektrony.

Jiné aplikace nacházejí rychlé elektrony v dozimetrii pro studium vlastností a následnou kalibraci některých detektorů.

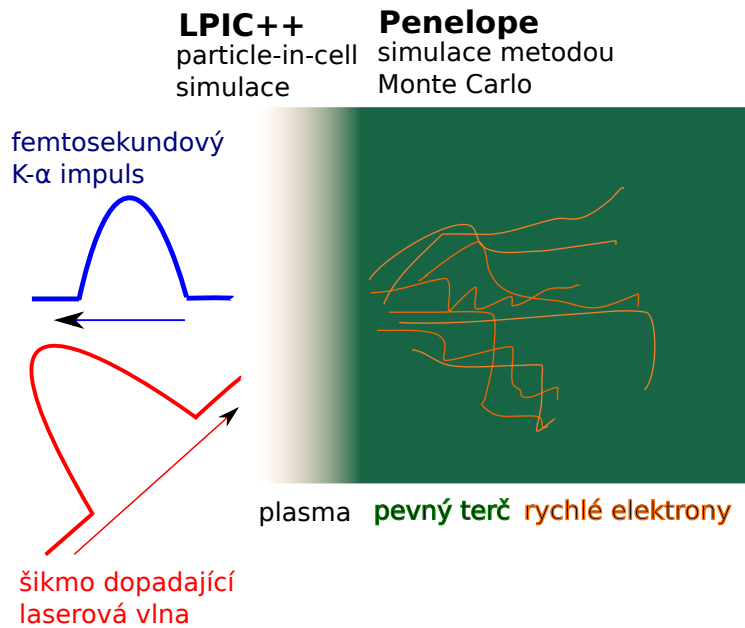
Procesy vedoucí ke generaci rentgenového záření ve formě femtosekundových impulsů Podívejme se nyní na posloupnost procesů vedoucí ke vzniku femtosekundových rentgenových impulsů. Je třeba seznámit se s

1. interakcí záření laseru s pevnými terči vedoucí ke
2. vzniku rychlých elektronů,
3. jejich transportem materiálem a
4. ionizací vnitřních slupek atomů znamenající jejich následnou
5. deexcitaci a vznik charakteristického záření.

Vysvětleme si nyní uspořádání fyzikálního systému, který je v této práci uvažován. Tento systém je znázorněn na obrázku 1.1. Laserová vlna dopadá šikmo na terč, celková délka tohoto impulsu je řádově stovky femtosekund. V povrchové vrstvě terče dojde k rychlé ionizaci a výsledkem procesů popsaných dále v této kapitole vzniknou rychlé elektrony. Spektrum elektronů vystupujících z této přední strany terče do jeho chladné části bude simulováno metodou particle-in-cell, která bude popsána v následující kapitole.

Rychlé elektrony tedy 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 k ionizaci je vnitřních slupkách atomů. Jedním z procesů, jak obsadit díru ve vnitřní slupce, je vyzáření charakteristického fotonu.

Toto záření je poté vyzářeno ven z terče. Studium těchto charakteristických fotonů, hlavně tedy fotonů $K\text{-}\alpha$ vylétnuvších ze přední strany terče, je hlavním motivem této práce.



Obrázek 1.1: Uvažovaný fyzikální systém pro tento výzkumný úkol. Dopadající femtosekundová laserová vlna vyvolá rentgenový impuls trvající srovnatelné dobu.

Transport rychlých elektronů materiálem a procesy vedoucí na vznik charakteristických fotonů budou simulovány pomocí metody Monte Carlo představené v následující kapitole.

1.1 Interakce krátkých laserových impulsů s pevnou látkou

Rychlý vývoj laserové techniky umožňuje generovat světlo o velmi vysokých intenzitách, což přináší širokou možnost potencionálních budoucích aplikací. Díky objevu techniky CPA v 60. letech 20. století je dnes možno vytvářet femtosekundové laserové pulsy (< 100 fs) s terawattovým výkonem. Tento výkon umožňuje generaci rentgenových pulsů srovnatelné délky při interakci laserového pulsu s pevným terčem.

Elektrické pole těchto laserových pulsů je řádově vyšší než síla coulombické interakce držící některé elektrony v elektronovém obalu atomu při jeho jádru. Po dopadu pulsu tedy dochází k bleskové ionizaci povrchové vrstvy terče a tato povrchová vrstva se velmi rychle promění ve velmi husté plasma, které poté expanduje do okolí. Plasma postupně absorbuje další energii laserového pulsu, hranice mezi pevnou částí terče a plazmatem se stává neurčitelnou.

Je velmi podstatné dbát na to, aby se co možná nejvíce energie laseru deponovalo v terči. Práce [3] nabízí analytický model tohoto procesu. Práce [6] nabízí přehled aplikací pro interakci laseru s pevným terčem do intenzit 10^{19} W/cm².

1.2 Vznik rychlých elektronů

Během této doby může docházet k množství fyzikálních dějů, jako např. vznik silných magnetických polí [14] či generace vysokoenergetických částicových svazků [5, 19]. Mechanismy jako rezonanční absorpce či vakuový ohřev vedou k pozoruhodnému fenoménu vzniku tzv. rychlých elektronů. Rychlými elektrony jsou označovány takové elektrony, jejichž energie je významně vyšší než by odpovídala teplotě plazmatu. Tato energie může dosahovat hodnot v řádech stovek keV či až megaelektronvoltů.

Po proniknutí do chladné části terče produkují tyto horké elektrony jak charakteristické, tak brzdné rentgenové záření. Vzhledem k povaze dopadajících laserových pulsů jsou i délky vystupujících rentgenových pulsů časově omezeny. Podívejme se nyní podrobněji na jevy rezonanční absorpce a vakuový ohřev.

1.2.1 Rezananční absorpce

K jevu rezonanční absorpce dochází v nadkritickém plazmatu s vysokým hustotním gradientem při šikmém dopadu p-polarizované elektromagnetické vlny laserového pulsu. V místě, kde hustota plazmatu nabývá kritické hustoty, tedy $n_c = \epsilon_0 m \omega^2 / e^2$, 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 [12]. Uplatňuje se také nelineární proces lámání vln. Při těchto procesech pak vznikají rychlé elektrony.

Rezananční absorpce obvykle urychluje relativně malý počet rychlých elektronů. Spektrum elektronů se dá přibližně popsat dvojmaxwellovským rozdělením, jeden maxwellián zastupuje tepelné elektrony, druhý pak elektrony rychlé.

1.2.2 Vakuový ohřev

Vakuový (Brunelův) ohřev se uplatňuje za podobných podmínek jako rezonanční absorpce, opět je potřeba lineární p-polarizovaná vlna dopadající na plazmovou vrstvu s velkým hustotním gradientem. Vlna vymrští elektron z plazmatu ven do vakua a v okamžiku, kdy se změní orientace elektrického pole dopadající vlny, je tento elektron urychlen zpět do plazmatu. Dostane-li se do oblasti s podkritickou hustotou, nemůže již znova být tento elektron vlnou ovlivněn a pokračuje dále směrem do chladné části terče. Tam se jejich energie disipuje v energii tepelnou.

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

1.3 Transport rychlých elektronů pevným terčem

Pro rychlé elektrony v našem případě platí, že jejich střední volná dráha mnohonásobně přesahuje rozměry plazmatu. Proto lze ospravedlnit přístup, který byl v této práci použit. Lze totiž očekávat, že tyto rychlé elektrony relativně snadno proletí ionizovanou povrchovou částí terče, kterou lze nyní považovat za plazma a že svou energii deponují až v chladnější části terče.

V zásadě lze rozlišovat dva základní způsoby depozice energie v chladné části terče. Jednak dochází k nepružným srážkám s atomy, při nich dochází k excitacím či dokonce ionizacím těchto atomů, jednak je si třeba uvědomit, že i tyto rychlé elektrony vytváří proud, který indukuje makroskopické elektrické pole, které také tyto elektrony zpomaluje. Při tomto brzdění pak je generované spojitě brzděné záření.

Při průniku elektronů do terče dochází i k dalším zajímavým fyzikálním fenoménům, které však v této práci podrobněji rozvedeny nebudou. Tok tepelných elektronů z povrchové části do terče je totiž kompenzován průnikem volných elektronů z chladné části terče do povrchové vrstvy. Vzniklé makroskopické elektrické pole má zajímavé důsledky. Indukuje totiž tzv. ponderomotorickou sílu, která je zodpovědná za urychlení volných elektronů zpět do prostoru před terč. Více informací o urychlování částic v laserovém plazmatu autor zpracoval v práci [15].

Pro simulaci všech těchto dějů ve chladné části terče je použit kód PENELOPE, který provádí výpočty statisticky metodou Monte Carlo.

1.4 Ionizace atomů

Ve 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 [10].

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

Relaxační doby ionizovaných atomů s chybějícím elektronem ve vnitřní slupce jsou takřka okamžité, výrazně kratší než u ionizovaných atomů, kde elektrony nejsou přítomny ve vnějších slupkách. Atom přejde buď přímo do základního stavu, nebo alespoň do nějakého energeticky výhodnějšího stavu.

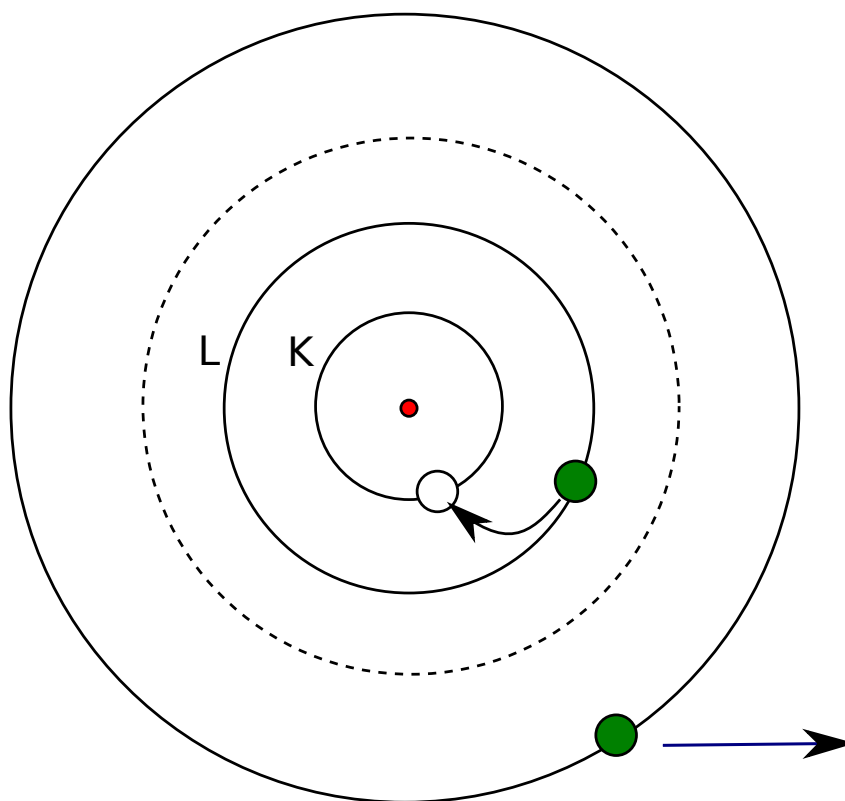
Existují dvě možnosti, jak se rychle zaplní díra ve vnitřní slupce, tyto jsou znázorněny na obrázcích 1.2 a 1.3.

1.4.1 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 uvolnění přebývající energie ve formě uvolnění jiného elektronu ze vnější slupky. Část přebývající energie si elektron odnese s sebou jakou svou kinetickou energii. Celá situace je schématicky znázorněna na obrázku 1.2.

Je určitou zajímavostí, že Augerův jev je základem Augerovy elektronové spektroskopie, metody charakterizování atomů na povrchu a jejich valenčního stavu, zvláště u lehkých prvků jako je uhlík, dusík nebo bor.

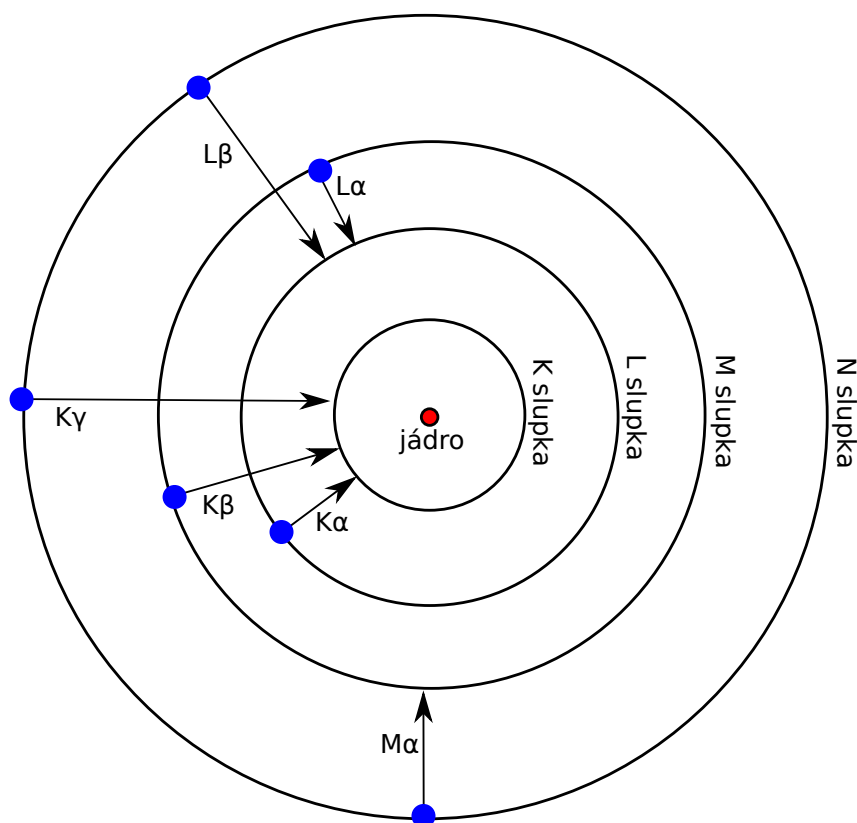
Jinou zajímavostí je skutečnost, že ačkoli je Augerův jev pojmenován po Pierru V. Augerovi, skutečnou objevitelkou byla Lisa Meitnerová. Její objev byl datován do roku 1922.



Obrázek 1.2: Vyzáření augerovského elektronu.

1.4.2 Charakteristické záření

Charakteristické záření je hlavním výzkumným cílem této práce. Pro atomy s vyšším atomovým číslem ($Z > 35$) je dokonce dominantním způsobem snížení jejich energetického stavu.



Obrázek 1.3: Vznik charakteristického záření

Seznamme se proto s ním podrobněji. Vysvětleme si nejprve základní názvosloví. Energetické hladiny, na kterých se mohou nacházet elektrony v atomu, jsou klasicky označovány písmeny. Nejnižší hladina je označována jako K-slupka, 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. Celá situace je ilustrována na obrázku 1.3.

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 musí platit

$$\Delta n \neq 0, \Delta l = \pm 1, \Delta j = 0, \pm 1 \quad (1.1)$$

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 cílový 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 $K\text{-}\alpha$ jsou takové fotony, které se vyzáří při přechodu elektronu ze slupky L do slupky K. Celá problematika je graficky shrnuta na obrázku 1.3.

Přechody přímo do základního stavu jsou velmi energetické, pro námi uvažované prvky jde o jednotky až desítky kiloelektronvoltů. Toto záření je tedy už v rentgenovské části

spektra. Nicméně pravděpodobnosti přechodů $K\text{-}\beta$ a vyšších jsou velmi malé (dle databáze EADL [1]), proto jim není věnována taková pozornost, jako přechodům $K\text{-}\alpha$. Je možno už nyní prozradit, že fotony $K\text{-}\beta$ nebyly v simulacích detekovatelné, neboť tyto spektrální čáry se ztratily v šumu a ve spojitém spektru.

Jednotlivé spektrální čáry mohou být ještě rozštěpené do 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 1.1 poskytuje přehled o $K\text{-}\alpha$ čarách pro zkoumané prvky na základě experimentálních dat z databáze [2].

Tabulka 1.1: Energie a vlnové délky charakteristického $K\text{-}\alpha$ záření pro uvažované materiály dle databáze [2].

materiál	$K\text{-}\alpha_1$		$K\text{-}\alpha_2$	
	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
zlato	66990,73	0,185	68804,50	0,180
uran	94650,84	0,131	98431,58	0,126

Kapitola 2

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. Celková situace je znázorněna na obrázku 1.1.

1. Nejprve se simulovala interakce laserového impulsu s pevným terčem pomocí metody particle-in-cell. Jako výstup se použilo spektrum rychlých elektronů letící směrem do chladnější části terče.
2. Toto spektrum se použilo jako vstup pro simulaci Monte Carlo. Zkoumal se transport rychlých elektronů v terči procesy vedoucí na generaci záření K- α .

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

2.1 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 [20].

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

2.1.1 Fyzikální podstata metody PIC

Plasma 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

$$\mathbf{F}_p = q_p[\mathbf{E}(\mathbf{x}_p) + \mathbf{v}_p \times \mathbf{B}_p(\mathbf{x}_p)]. \quad (2.1)$$

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

$$\nabla \cdot \mathbf{E} = \frac{\rho}{\varepsilon_0} \quad (2.2)$$

$$\nabla \times \mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} \quad (2.3)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0 \quad (2.4)$$

$$\nabla \times \mathbf{B} = \mu_0 \mathbf{j} + \mu_0 \varepsilon_0 \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} \quad (2.5)$$

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 neudržitelné. Kdybychom chtěli simulovat chování souboru N částic, bylo by třeba uvažovat N^2 jejich interakcí.

Jednou z vlastností plazmatu je fakt, že je možno účinně zanedbat působení částic, které jsou dále, než je známá Debyeova délka

$$\lambda_D = \sqrt{\frac{\varepsilon_0 k_B T_e}{n_e q_e^2}} \quad (2.6)$$

Jelikož i v této Debyeově kouli je stále velké množství částic

$$N_D = n \frac{4}{3} \pi \lambda_D^3, \quad (2.7)$$

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 systém rozumíme jako skupinu malého množství částic konečné velikosti, které všechny interagují jako fyzické částice na velké vzdálenosti, ale na malé vzdálenosti se používá redukovaný potenciál, neboť v těchto malých vzdálenostech se jednotlivé makročástice již překrývají.

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

2.1.2 Nástin matematického odvození metody PIC

Pro vývoj rozdělovacích funkcí jednotlivých částic (přesněji vyjádřeno jejich hustot pravděpodobnosti) $f_s(x, v, t)$ v plazmatu je klíčová Vlasovova rovnice

$$\frac{\partial f_s}{\partial t} + v \frac{\partial f_s}{\partial x} + \frac{q_s E}{m_s} \frac{\partial f_s}{\partial v} = 0. \quad (2.8)$$

Elektrické pole můžeme vyjádřit z Poissonovy rovnice pro skalární potenciál

$$\varepsilon_0 \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} = -\rho, \quad (2.9)$$

přičemž hustota náboje je svázaná s hustotami pravděpodobnosti jako

$$\rho(x, t) = \sum_s q_s \int f_s(x, v, t) dv. \quad (2.10)$$

Podívejme se nyní na numerický přístup k metodě PIC. Metoda PIC je velmi blízká metodě konečných prvků, přičemž ale tentokrát se tyto konečné prvky mohou pohybovat a také překrývat. Předpokládejme, že celková hustota pravděpodobnosti pro jednotlivý druh částic je rozdělena na konečnou sumu hustot pravděpodobnosti těchto částic v jednotlivých makročásticích:

$$f_s(x, v, t) = \sum_p f_p(x, v, t). \quad (2.11)$$

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

$$f_p(x, v, t) = N_p S_x(x - x_p(t)) S_v(v - v_p(t)), \quad (2.12)$$

kde S_x a S_v jsou tvarové funkce pro makročástice a N_p je fyzický počet částic přítomný 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

$$\int_{-\infty}^{+\infty} S_\chi(\chi - \chi_p) d\chi = 1. \quad (2.13)$$

3. Je vhodné brát funkce se symetrickým tvarem, tedy

$$S_\chi(\chi - \chi_p) = S_\chi(\chi_p - \chi). \quad (2.14)$$

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 tvar tvarové funkce S_v ve tvaru Diracovy delta funkce

$$S_v(v - v_p) = \delta(v - v_p). \quad (2.15)$$

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

$$b_0(\chi) = \begin{cases} 1, & \text{když } |\chi| < 1/2 \\ 0, & \text{jinak} \end{cases} \quad (2.16)$$

$$b_l = \int_{-\infty}^{\infty} d\chi' b_0(\chi - \chi') b_{l-1}(\chi'). \quad (2.17)$$

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

$$S_x(x - x_p) = b_l \left(\frac{x - x_p}{\Delta_p} \right), \quad (2.18)$$

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 2.8 pro všechny druhy částic. Dosadíme nyní do této rovnice rozklad funkce hustoty pravděpodobnosti f_s pro jednotlivé druhy částic na makročástice 2.11. Vlasovova rovnice je vzhledem k tomuto rozkladu lineární. Tedy lze prohlásit, že vyřešíme-li soustavu

$$\frac{\partial f_p}{\partial t} + v \frac{\partial f_p}{\partial x} + \frac{q_s E}{m_s} \frac{\partial f_p}{\partial v} = 0. \quad (2.19)$$

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:

$$\frac{dN_p}{dt} = 0, \quad (2.20)$$

$$\frac{dx_p}{dt} = v_p, \quad (2.21)$$

$$\frac{dv_p}{dt} = \frac{q_s}{m_s} E_p. \quad (2.22)$$

První z rovnic vyjadřuje zákon zachování počtu částic v jednotlivé makročástici, druhá má tvar Newtonova zákona a třetí určuje zrychlení částice vlivem středního elektrického pole E_p působícího na částici.

Podívejme se nyní na diskretizaci pohybových rovnic. Nejčastěji se používá schéma leap-frog v následujícím tvaru

$$\frac{\mathbf{x}_{k+1} - \mathbf{x}_k}{\Delta t} = \mathbf{v}_{k+1/2}, \quad (2.23)$$

$$\frac{\mathbf{v}_{k+1/2} - \mathbf{v}_{k-1/2}}{\Delta t} = \frac{q}{m} \left(\mathbf{E}_k + \frac{\mathbf{v}_{k+1/2} - \mathbf{v}_{k-1/2}}{2} \times \mathbf{B}_k \right). \quad (2.24)$$

Alternativou je tzv. Borisovo schéma [8].

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

Jméno particle-in-cell (částice v buňce) je inspirováno skutečností, že makroskopické veličiny (např. proudová či nábojová hustota) jsou přiřazeny jednotlivým makročásticím. 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

$$W(x_i - x_p) = \int dx S_x(x - x_p) b_0 \left(\frac{x - x_i}{\Delta x} \right). \quad (2.25)$$

Ukažme si na příkladu nábojové hustoty toto přiřazení. Pro střední nábojovou hustotu v buňce platí

$$\rho_i = \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} \frac{\rho(x) dx}{\Delta x}. \quad (2.26)$$

Bez nutnosti provést integraci je nyní možno vyjádřit

$$\rho_i = \sum_p \frac{q_p}{\Delta x} W(x_i - x_p), \quad (2.27)$$

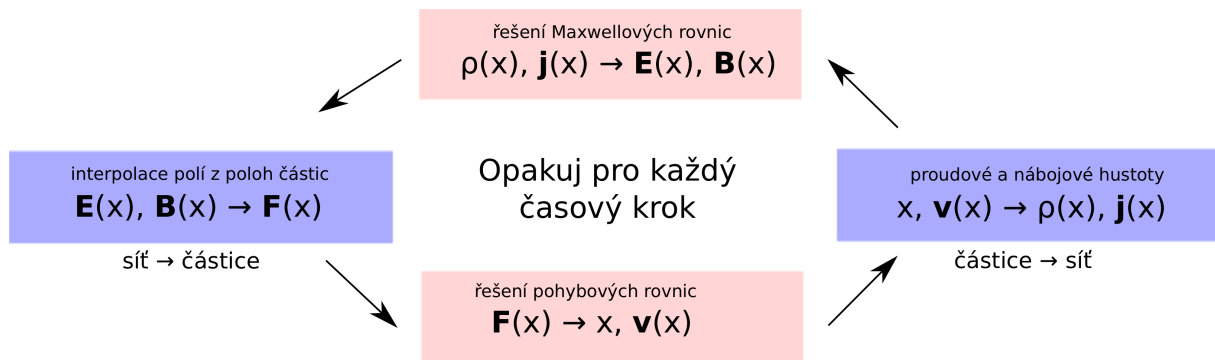
kde $q_p = q_s N_p$.

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

2.1.3 Rekapitulace

Popišme si nyní průběh jednoho výpočetního cyklu metodou PIC. Pro názornost je i shrnut v diagramu na obrázku 2.1.

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, jejich výsledkem jsou hodnoty elektrického a magnetického pole. Rovnice se nejčastěji řeší metodou konečných diferencí.
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.



Obrázek 2.1: 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.

2.1.4 Výpočetní kód LPIC++

Pro simulace interakce krátkého laserového impulsu s povrchovou vrstvou terčíku - plazmatem - byl použit výpočetní kód LPIC++.

Výpočetní kód LPIC++ [21] je jednodimenzionální (1D3V) elektromagnetický particle-in-cell kód vyvinutý v Institutu Maxe Plancka pro kvantovou optiku v Garchingu.

Šikmý dopad laserového svazku je vyřešen transformací soustavy terče do soustavy pohybující se podél rozhraní takovou rychlostí, že v ní laserový svazek dopadá kolmo.

Pro integraci pohybových rovnic a pro výpočet příčných složek elektromagnetického pole využívá algoritmu Birdsalla a Langdona [7]. Pro výpočet podélné složky elektrického pole pak metodu Villasenora a Bunemanna [27]. 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 [9]. Samotné práci s tímto programem je věnována kapitola 3.1.

2.2 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 široce užívána k řešení širokého spektra úloh v matematice i ve fyzice, v jiných vědeckých disciplínách, v průmyslu, bankovníctví a pojišťovnictví, v informačních technologiích a v umělé inteligenci a v neposlední řadě ve

vojenství.

Hlavní výhodou této metody je jednoduchá implementace, nevýhodou naopak malá přesnost. Chyba výpočtu je úměrná $N^{-1/2}$, pro zvýšení přesnosti o jeden řád je potřeba zvýšit počet simulací o dva řády.

2.2.1 Aplikace metody Monte Carlo v této práci

Metoda Monte Carlo byla použita k simulaci transportu rychlých elektronů coby výstupu ze simulací PIC a k simulaci ionizace v K-slupkách atomů v chladnější části terče. Hlavním zdrojem informací mi byla dokumentace k výpočetnímu kódu PENELOPE [26].

Principem této metody v naší aplikaci je počítat 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 souslednost změn jejího směru, ztrát energie, příležitostné generace sekundárních částic a konečně zániku 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 si třeba uvědomit, že rychlý elektron, tedy částice s nábojem 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. 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.

2.2.2 Základy metody Monte Carlo

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 z této hodnoty vypočítává posloupnost náhodných čísel dle nějakého předpisu. Jako jednoduchý příklad lze uvést generátor Presse a Teukolského [23], jehož předpis je

$$R_n = 7^5 R_{n-1} \pmod{2^{31} - 1}, \quad (2.28)$$

$$\xi_n = R_n / (2^{31} - 1), \quad (2.29)$$

kteřá generuje posloupnost náhodných čísel 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 být 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 být schopen transformovat toto rozdělení na libovolné rozdělení. Tato rozdělení jsou u simulací radiačního transportu popsána diferenciálními účinnými průřezy. Tato 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, definujeme nyní distribuční funkci této náhodné veličiny jako

$$P(x) = \int_{-\infty}^x p(x') dx'. \quad (2.30)$$

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

$$\frac{dP}{dx} = p(x). \quad (2.31)$$

Jelikož $P(x)$ je monotónní funkce x , existuje jistě také její inverzní funkce $P^{-1}(\xi)$. Transformace $\xi = P(x)$ definuje novou náhodnou veličinu 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

$$p_\xi(\xi) = p(x) \left(\frac{d\xi}{dx} \right)^{-1} = p(x) \left(\frac{dP(x)}{dx} \right)^{-1} = 1 \quad (2.32)$$

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

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

$$x = P^{-1}(\xi) \quad (2.33)$$

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

Nyní již je způsob generování náhodných čísel x s danou hustotou pravděpodobnosti. 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 náhodné číslo náhodné veličiny s distribuční funkcí $P(x)$, přičemž pro její hustotu pravděpodobnosti platí 2.31.

Metoda zamítání Metoda zamítání je sice méně efektivním, o to však univerzálnějším 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 třetím kroku nehledá náhodné číslo ξ_2 z intervalu $(0,1)$, nýbrž z intervalu $(0, P(\xi_1))$,

2.2.3 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

$$\frac{1}{\lambda_T} = \sum_i \frac{1}{\lambda_i}. \quad (2.34)$$

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

$$p(s) = \frac{1}{\lambda_T} e^{-s/\lambda_T}. \quad (2.35)$$

3. Vypočítá se poloha následující integrace. Je totiž znám směr pohybu a vzdálenost do další interakce.
4. Na základě známých účinných průřezů jednotlivých interakcí se náhodně zvolí druh další interakce.

Pokud dochází ke ztrátě energie, z diferenciálního účinného průřezu se rozhodně o množství ztracené energie, pokud vznikají druhotné částice, dopočítají se charakteristiky této částice, jako druh, energie a směr šíření a tato druhotná částice se uloží do paměti a je zařazena do pořadí, neboť i tato druhotná částice může inicializovat další interakce.

Pokud dochází ke změnu 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)

$$\frac{dE}{ds} = \int_0^E W \frac{d\sigma}{dW} dW, \quad (2.36)$$

kde E je energie částice a W je ztráta energie. Brzdná síla znamená nahrazení některých interakcí, u kterých se příliš nemění směr, ale výrazně klesá energie. V tomto případě se částici ze znalosti počáteční energie a délky trajektorie do další interakce ubere energie dle tohoto vzorce.

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, nicméně v praxi se ukazuje býti uspokojivé aproximovat Beerovým-Lambertovým zákonem

$$I(x) = I_0 e^{-\mu \rho x}, \quad (2.37)$$

kde ρ je hustota materiálu a μ je koeficient útlumu závisující na energii fotonů a druhu materiálu. Pro tento koeficient existuje řada různě přesných analogických vztahů a také tabelovaných experimentálních hodnot, například v databázi [16].

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

2.2.4 Výpočetní kód PENELOPE

Pro simulace transportu elektronů materiálem a následného vyzáření záření K- α byl použit numerický systém PENELOPE (PENetration and Energy Loss of Positrons and Electrons) [26] vyvinutém na barcelonské universitě. Tento kód byl původně určen pouze pro simulace elektronů a pozitronů, vyzařování z plazmatu bylo dodáno později.

Kód je napsán v jazyce Fortran77, který je ideální pro numerické výpočty z hlediska procesorového času.

Nejvýznamnější součástí tohoto výpočetního systému je podprogram `penelope`, kde jsou naprogramovány rutiny představující veškeré uvažované interakce.

Součástí 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.

Ke kódu existuje velmi kvalitní a přehledná dokumentace [26], která v této práci sloužila i jako jeden ze zdrojů pro popis metody Monte Carlo.

Kapitola 3

Představení a porovnání výsledků provedených simulací

V poslední a patrně i nejdůležitější kapitole tohoto výzkumného úkolu se podíváme na výsledky provedených simulací. Zopakujme nyní metodiku, která byla při práci použita.

Simulace byly prováděny ve dvou krocích. Nejprve bylo vybráno nejlepší spektrum elektronů ze simulací PIC interakce laserového impulsu s pevným terčem. Toto elektronové spektrum bylo následně použito jako vstup pro Monte Carlo simulaci radiačního transportu. Byla zkoumána spektra fotonů na zadní i přední straně terče a provedena porovnání v následujících kategoriích:

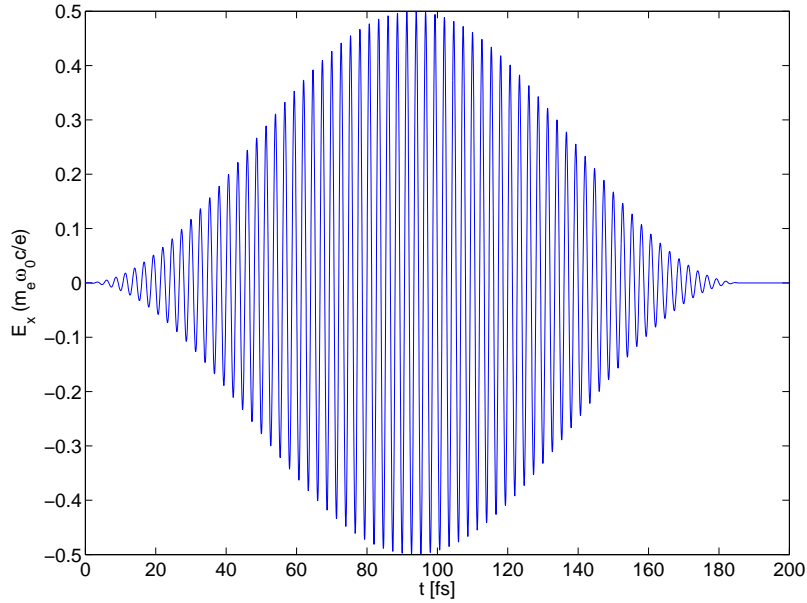
1. počet vyzářených K- α fotonů pro různé prvky
2. závislost tvaru spektra na šířce terče
3. vliv fotoionizace, která není ve většině modelů emise K- α záření zahrnuta [24].

Podívejme se nyní na oba kroky podrobněji v následujících podkapitolách.

3.1 Simulace interakce laserového impulsu s pevným terčem pomocí kódu LPIC++

Simulace interakce laserového impulsu s pevným terčem byla provedena pomocí kódu LPIC++ představeného v kapitole 2.1.4. Výpočty proběhly pouze pro hliníkový terč, předpokládáme totiž podobné tvary elektronových spekter i u ostatních materiálů.

Uvedme nyní základní charakteristiky uvažovaného laserového impulsu. Jde o p-polarizovaný laserový impuls s obálkou ve tvaru funkce \sin^2 . Impuls trval přibližně 187 fs, což odpovídá 70 periodám elektromagnetické vlny laseru. Maximální hodnota intenzity je uvažována $3,4 \times 10^{18}$ W/cm², elegantněji vyjádřeno jako 0,5 v jednotkách bezrozměrné amplitudy. Časový průběh tohoto impulsu je znázorněn na obrázku 3.1.



Obrázek 3.1: Tvar dopadajícího laserového impulsu. Pro všechny simulace metodou PIC byl použit tento impuls.

Při jednotlivých simulacích byly měněny dva vstupní parametry, a to

- charakteristická délka náběhové hrany L a
- úhel dopadu laserové vlny vzhledem k rovině okraje terčíku α .

Veličina charakteristická délka náběhové hrany L si zaslouží podrobnější vysvětlení. Vnáší do systému prostorovou závislost hustoty terčíku, respektive plazmatu na jeho okraji.

Typický experiment probíhá následujícím způsobem. Před dopadem samotného hlavního laserového impulsu bývá terč zasažen tzv. předimpulsem o řádově nižší intenzitě. Tím je právě vytvořeno plazma v povrchové vrstvě. Důvodem pro vytváření této povrchové vrstvy je zvýšení absorpce energie do terčíku. Hlavní impuls dopadá po předimpulsu s různým časovým zpožděním, kterým je možno řídit právě charakteristickou délku hustotního profilu, což je veličina definovaná jako

$$L = \left| \frac{d \ln n_e}{dx} \right| \quad (3.1)$$

Ve výpočtech v tomto výzkumném úkolu je tato veličina brána jako parametr. Obvykle se udává v násobcích vlnové délky dopadající vlny. Takto bude udávána i v tomto textu. Vyjadřuje rychlost exponenciálního nárůstu hustoty elektronů.

Předpoklad exponenciálního nárůstu je určitým zjednodušením, neboť znamená, že počítáme s izotermickou expanzí plazmatu do vakua.

3.1.1 Zprovoznění kódu

Během seznámení se s kódem jsem se nesetkal se výraznějšími žádnými obtížemi. Určitou drobností byla nutnost přizpůsobení odkazů na staré knihovny nové verzi překladače, ale poté, co byl tento problém odstraněn, již nic nebránilo kompilaci a samotnému spuštění programu.

Vstupní parametry jsou zadávány pomocí vstupního souboru s poměrně jednoduchou strukturou. Bylo třeba nastavit tvar, amplitudu, polarizaci a délku impulsu, dobu, po kterou intenzita impulsu narůstá (což byla v tomto případě polovina celkového trvání impulsu), úhel dopadu, navrhnout geometrii terče a zadat charakteristickou délku náběhové hrany. Zde je třeba podotknout, že zde existuje i speciální volba; když je zadána 0, rozumí se tím lineární nárůst hustoty.

Umístění toho souboru bylo použito jako argument spouštění programu. Samotný program se připravil ze zdrojového kódu využitím připraveného skriptovacího souboru *makefile*, který byl k dispozici. Tento soubor nabízel i možnost generace verze programu, která by umožňovala paralelní výpočty, nicméně této možnosti nebylo využito.

Výpočty probíhaly na počítačích v unixové učebně na Katedře fyzikální elektroniky FJFI ČVUT, obvykle v nočních hodinách, aby nebyl zbytečně narušován chod vyučování. Vzdálený přístup k těmto počítačům je možný díky protokolu *ssh*. Typická doba výpočtu byla 8 až 10 hodin.

3.1.2 Zpracování dat

Zmiňme se ještě na tomto místě o postupu pro vykreslování energetických elektronových spekter. Kód LPIC++ nabízí jako jeden z výstupů i soubor *maxw-bc*, který ukládá čas a tři rychlostní souřadnice každého elektronu, který vyletí zadní stěnou předplasmatu do chladné části terče. Typicky bylo v pro každou jednotlivou simulaci vygenerováno 120 000 až 140 000 elektronů.

Jelikož požadujeme energetické spektrum, je třeba rychlosti přepočítat na energie. Část skriptu pro Matlab vypadá následovně:

```
l=load('data80/maxw-bc');
t=l(:,1);
vx=l(:,2);
vy=l(:,3);
vz=l(:,4);
g=1./sqrt(1-vx.*vx-vy.*vy-vz.*vz);
ene=511*(g-1);
max(ene)
i=0:1:1000;
```



```
h=histc(ene,i);
figure;semilogy(i,h);
```

3.1.3 Hledání nejlepšího spektra

Kritériem pro výběr nejlepšího spektra byla maximalizace absorbované energie. Pomocí prostého vzorce

$$\eta = 1 - \frac{E_i - E_r}{E_i}, \quad (3.2)$$

kde E_i značí celkovou dopadnuvší energii a E_r celkovou odraženou energii se určila účinnost absorpce.

Prakticky to bylo uděláno tak, že se ze souboru *flux-1*, který se byl vytvořen jako jeden z výsledku simulace, sečetly veškeré toky energie směrem dovnitř a směrem ven na předním okraji terče. Ve druhém sloupci tohoto souboru byly vypisovány energie fotonů ve směru do terče pro jednotlivé časové kroky, ve třetím analogické veličiny ve směru od terče. Prostý skript pro Matlab vypadá následovně:

```
l=load('data0/flux-1');
tam=sum(l(:,2));
zpet=sum(l(:,3));
absor=1-zpet/tam
```

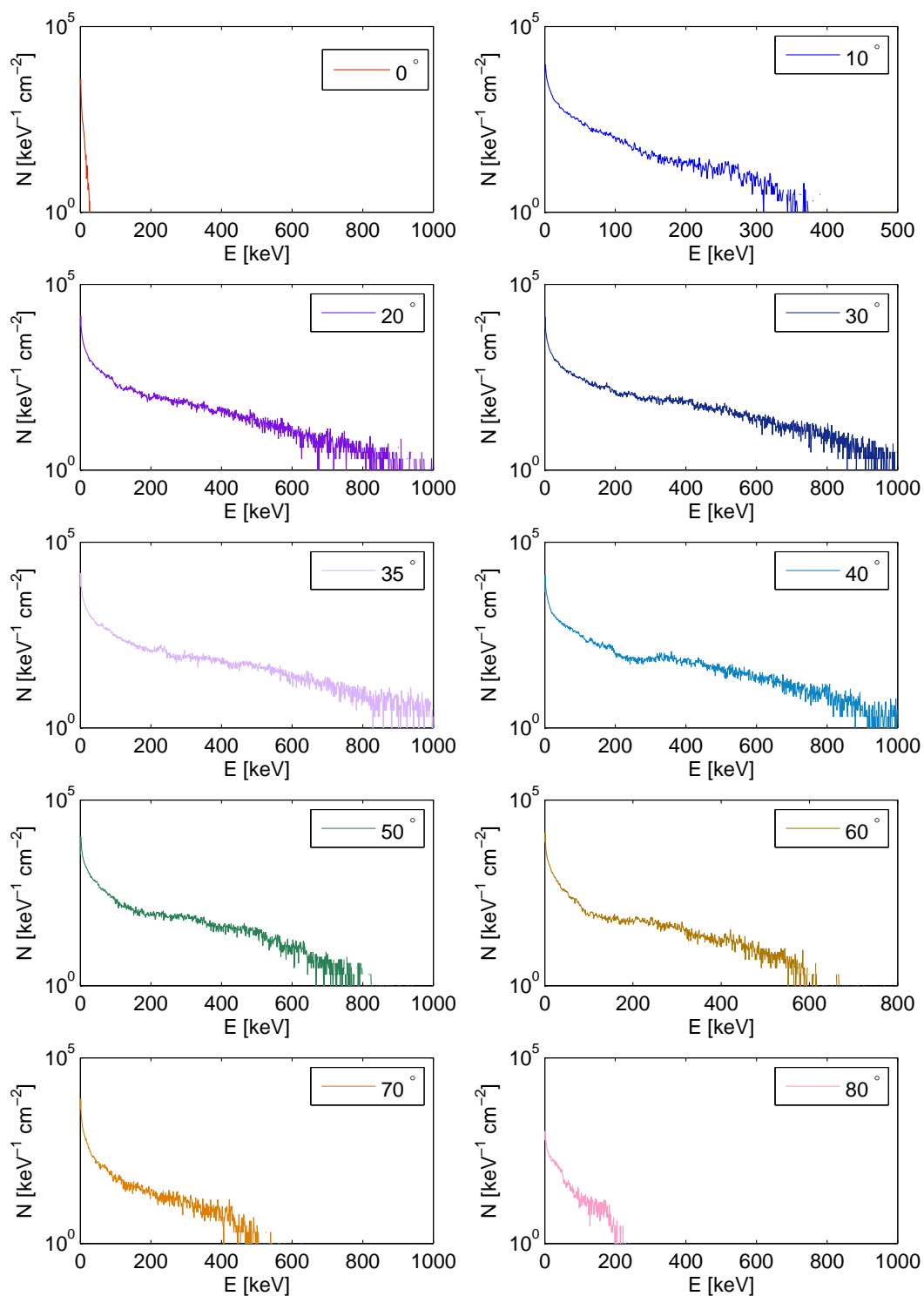
Úlohou tedy je hledání maxima absorpce v dvourozměrném prostoru, závisí totiž jak na charakteristické délce náběhové hrany L , tak na úhlu dopadu α .

Byl zvolen následující postup. Několika kratšími simulacemi pro úhel dopadu $\alpha = 45^\circ$ se odhadlo, že maximum absorpce pro tento úhel je přibližně pro $L \approx 0,2$. Úhel 45° byl zvolen náhodou, na základě úvahy, že pro kolmý dopad svazku na rovinu terče lze očekávat vysokou reflexi, při paralelním dopadu se energie vlny do terče ani nedostane. Maximum tedy bylo očekáváno někde mezi těmito extrémy.

Úhlová závislost

Byla tedy zvolen charakteristická délka náběhové hrany $L = 0,2$ a prováděny jednotlivé simulace pro různé úhly dopadu. Výsledná spektra jsou k dispozici v sadě grafů na obrázku 3.2. Lze dobře pozorovat nemonotónní charakter vývoje tvaru spektra pro zvyšující se úhel dopadu. Dalším zajímavým efektem je zvyšující se poměrné zastoupení rychlejších elektronů pro vyšší úhly. Podívejme se nyní na to, jak úspěšni jsme v deponování energie laserového impulsu do terče.

Tabulka 3.1 poskytuje přehled účinnosti absorpce energie v závislosti na úhlu dopadu pro tuto situaci. Účinnosti byly vypočítány dle rovnice 3.2. Zároveň i dodatečně informuje



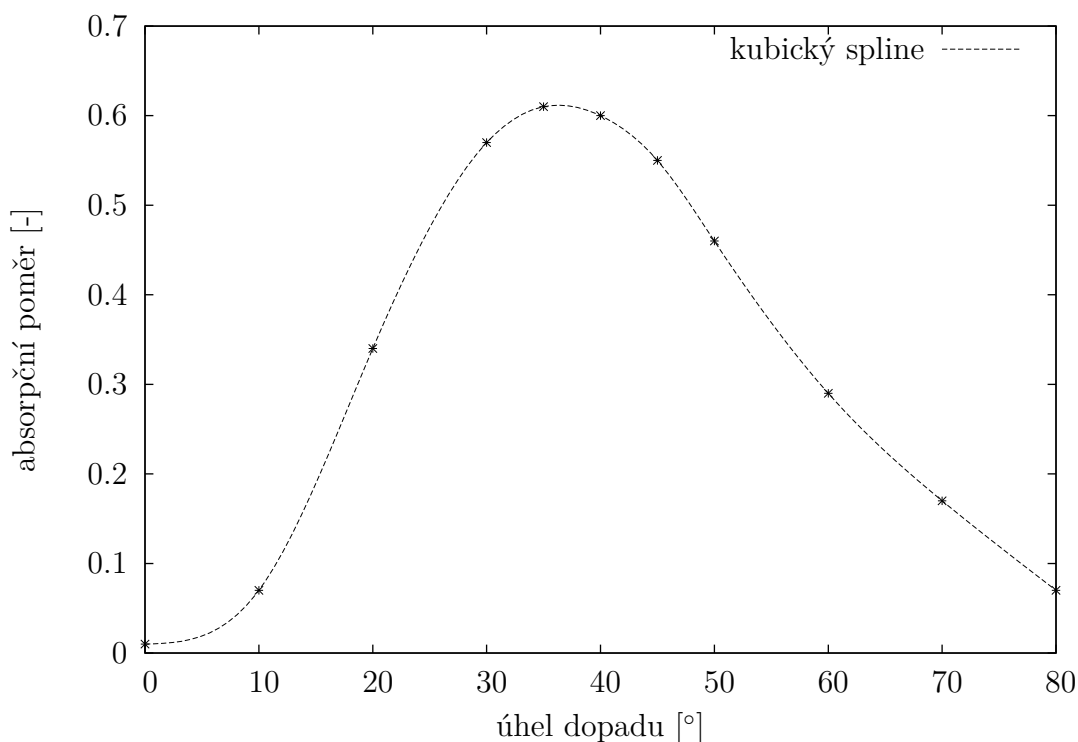
Obrázek 3.2: Elektronová spektra vypočítaná metodou PIC v závislosti na úhlu dopadu. Parametry: p-polarizovaná 186 fs laserová vlna s obálkou ve tvaru funkce \sin^2 s maximální intenzitou $3,4 \times 10^{18}$ W/cm² s charakteristickou délkou náběhové hrany 0,2.

o nejvyšší zaznamenané energii elektronu pro jednotlivé případy. Nejenergetičtější elektron byl detekován pro úhel 60° , jeho energie byla 1,67 MeV.

Závislost účinnosti absorpce na úhlu dopadu pro fixní charakteristickou délku náběhové hrany $L = 0,2$ je graficky znázorněna na obrázku 3.3. Z rozboru výsledků je možno učinit závěr, že nejlepší úhel dopadu pro $L = 0,2$ je $(39 \pm 2)^\circ$.

Tabulka 3.1: Závislost účinnosti absorpce η na úhlu dopadu α pro fixní charakteristickou délku náběhové hrany $L = 0,2$. Uvedeny jsou i maximální hodnoty elektronů E_{max} pro jednotlivé případy.

α [$^\circ$]	η [-]	E_{max} [keV]
0	0,01	27
10	0,07	497
20	0,34	1089
30	0,57	1254
35	0,61	1282
40	0,60	1354
45	0,55	1398
50	0,46	1597
60	0,29	1666
70	0,17	626
80	0,07	240



Obrázek 3.3: Závislost účinnosti absorpce na úhlu dopadu pro fixní charakteristickou délku náběhové hrany $L = 0, 2$.

Závislost na charakteristické délce náběhové hrany

Na radu vedoucího práce jsem ale vyšetřoval závislost na charakteristické délce náběhové hrany pro mírně větší úhel. Důvod pro toto rozhodnutí osvětlí poznoteček, že pro vyšší úhly bylo pozorováno i hojnější zastoupení elektronů z pravého konce spektra.

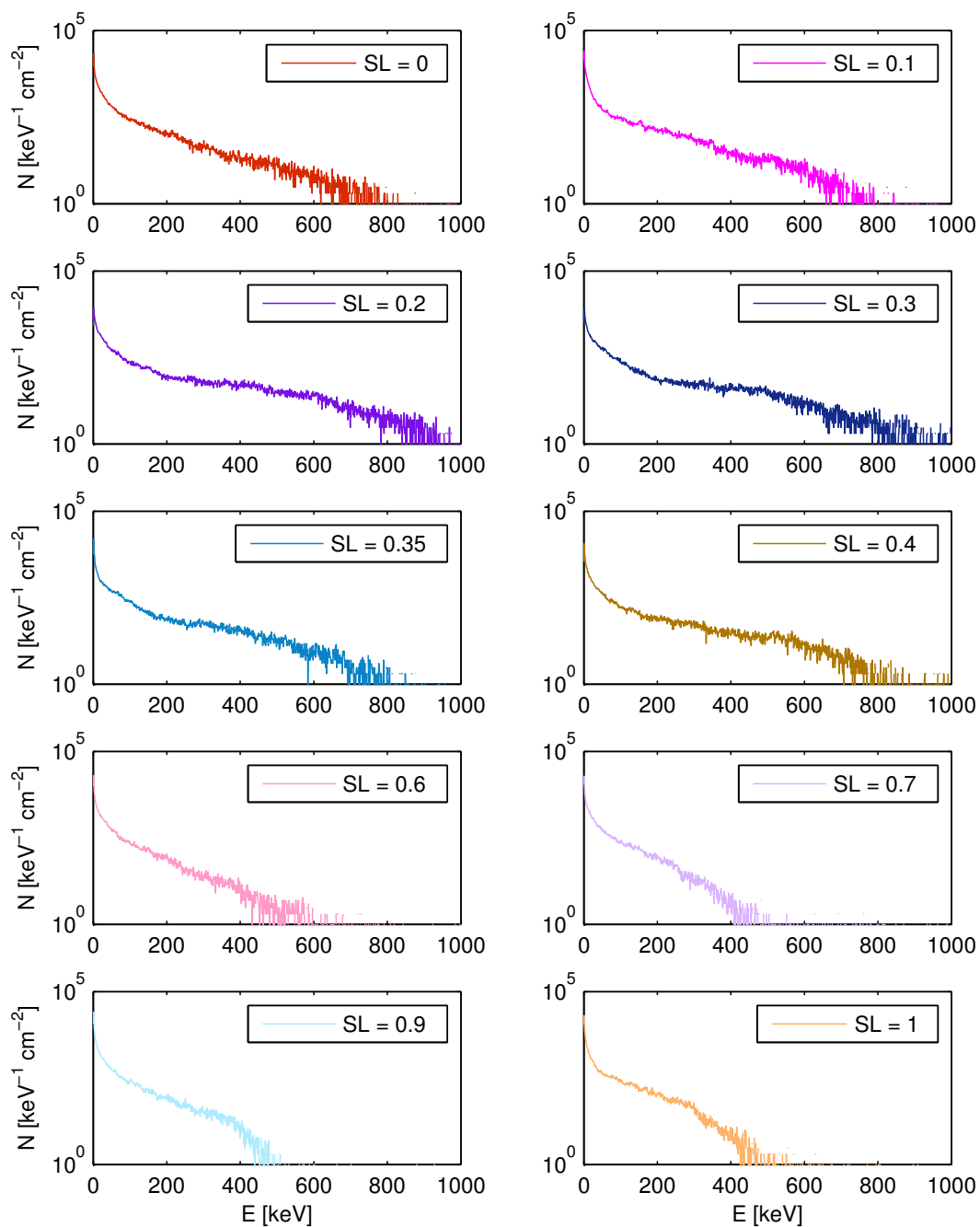
Z hlediska radiačního transportu jsou pro nás energetičtější elektrony zajímavé, neboť lze předpokládat, že proniknou hlouběji do materiálu a inicializují více událostí vedoucích ke generaci $K\text{-}\alpha$ fotonu.

Pod vlivem těchto empirických domněnek byly tedy provedeny simulace pro úhel dopadu 45° . Měnila se pouze charakteristická délka náběhové hrany, ostatní parametry zůstaly stejné, jako u předchozích simulací.

Výsledná spektra jsou k dispozici na sadě grafů na obrázku 3.4.

Opět se dle vzorce 3.2 vypočítala účinnost absorpce. Potvrdilo se, že maximum absorpce pro tento konkrétní laserový impuls je pro charakteristickou délku náběhové hrany $(0,21 \pm 0,01)$. Výsledky pro jednotlivé simulace jsou shrnuty v tabulce 3.2. Opět jsou uvedeny i maximální energie výstupních elektronů pro jednotlivé případy.

Je pozoruhodné, že byly predikovány i jednotlivé elektrony s energií vyšší než 2 MeV. Vůbec nejenergetičtější simulovaný elektron měl energii 2,2 MeV, vyskytl se pro charakteristickou délku náběhové hrany 0,6.



Obrázek 3.4: Elektronová spektra vypočítaná metodou PIC v závislosti charakteristické délce náběhové hrany. Parametry: p-polarizovaná 186 fs laserová vlna s obálkou ve tvaru funkce \sin^2 s maximální intenzitou $3,4 \times 10^{18} \text{ W/cm}^2$ dopadající na terč pod úhlem 45° .

Závislost efektivitivy absorpce energie do terčíku na charakteristické délce náběhové hrany má zajímavý tvar. Je vykreslena v grafu na obrázku 3.5. Závislost pro úhel dopadu $\alpha = 45^\circ$ má jedno jasné maximum v oblasti $L = 0,2$, pro vyšší hodnoty účinnost absorpce fluktuuje mírně nad 20%. Nicméně není již monotónní.

Pro zajímavost je v grafu vykreslena i stejná závislost pro přímý dopad. Tyto simulace byly prováděny v době, kdy jsem se učil kód LPIC++ ovládat. Jak bylo možno očekávat, efektivita přenosu energie je velmi nízká. Nicméně charakter průběhu této závislosti je odlišný, pro vyšší hodnoty charakteristické délky náběhové hrany účinnost deponování energie roste.

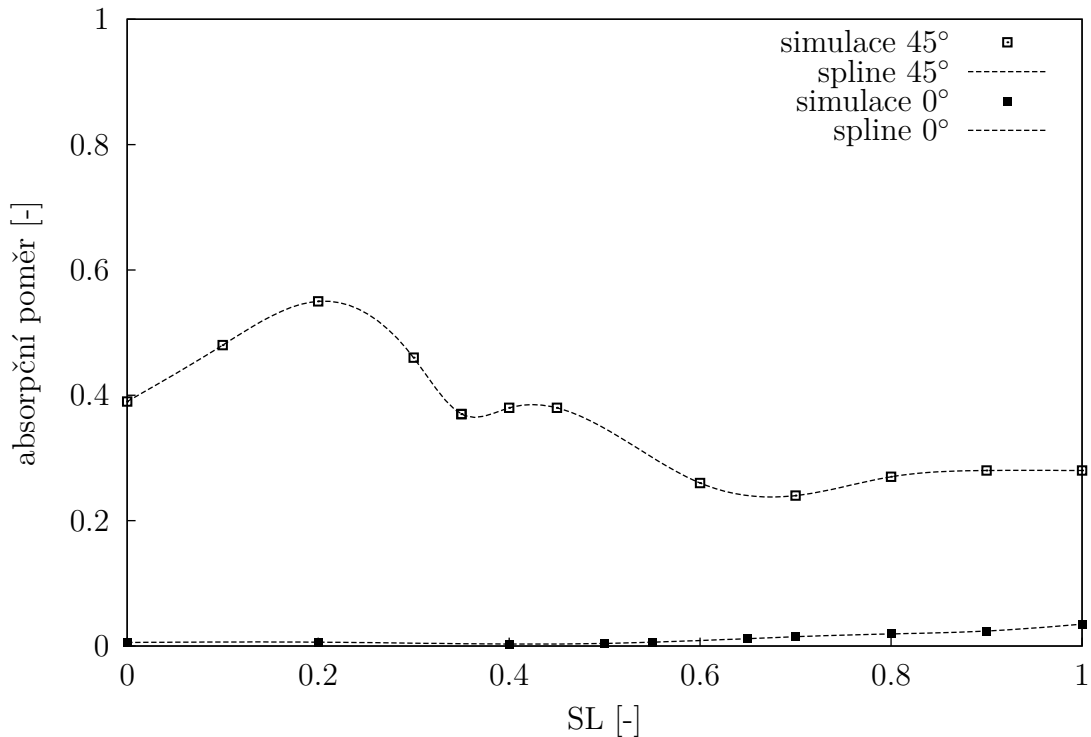
Tabulka 3.2: Závislost účinnosti absorpce η charakteristické délce náběhové hrany pro fixní úhel dopadu laserového impulsu $\alpha = 0,2$. Uvedeny jsou i maximální hodnoty elektronů E_{max} pro jednotlivé případy.

L [-]	η [-]	E_{max} [keV]
0	0,39	1218
0,1	0,48	1783
0,2	0,55	1398
0,3	0,46	1434
0,35	0,37	1030
0,4	0,38	1003
0,45	0,38	1305
0,6	0,26	2214
0,7	0,24	1246
0,8	0,27	1254
0,9	0,28	929
1	0,28	1768

3.1.4 Shrnutí simulací metodou particle-in-cell

Simulace metodou particle-in-cell byly prováděny za účelem určit ideální parametry laserového impulsu takové, abychom získali co možná nejkvalitnější spektrum elektronů postupující do chladnější části terče. Veškeré simulace byly provedeny pro hliník, domníváme se, že závěry pro hliník lze zobecnit i pro ostatní zkoumané materiály.

Kritériem pro stanovení, jaké ze spektrum je nejkvalitnější, byla účinnost převodu energie dopadající laserové vlny na energii deponovanou do terče. Všechny simulace proběhly pro p-polarizovanou 186 fs laserovou vlnu s obálkou ve tvaru funkce \sin^2 s maximální



Obrázek 3.5: Závislost účinnosti absorpce na úhlu dopadu pro fixní úhel dopadu $\alpha = 45^\circ$. Pro zajímavost je přidána i stejná závislost pro úhel dopadu 0° .

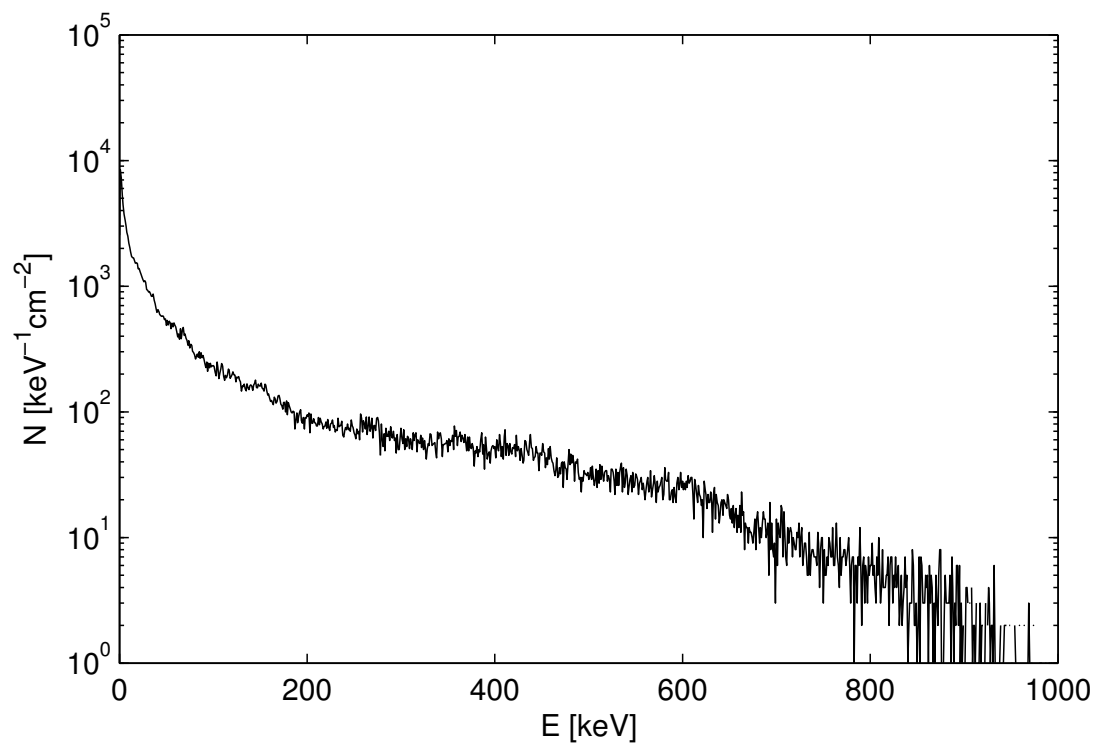
intenzitou $3,4 \times 10^{18} \text{ W/cm}^2$. Pro tuto vlnu se jeví jako ideální úhel dopadu laserové vlny vůči přední straně terčíku $(39 \pm 2)^\circ$ a charakteristická délka náběhové hrany $(0,21 \pm 0,01)$.

Nicméně otázka, zda toto kritérium je nejsprávnější, je velmi opodstatněná. Vzhledem k cíli této práce, tedy najít co možná nejkvalitnější zdroj fotonů $K\text{-}\alpha$, je třeba uvažovat i o mechanismu jejich generace. Je třeba uvážit, že elektrony z pravého okraje spektra prostoupí hlouběji do chladné oblasti terče a tak inicializují větší množství interakčních událostí, mezi nimi i fotoionizací.

K této okolnosti je třeba přihlížet. Bylo proto rozhodnuto, že jako vstup pro simulace Monte Carlo bude použito spektrum ze simulace s parametry

- úhel dopadu $\alpha = 45^\circ$
- charakteristická délka náběhové hrany $L = 0,2$.

Tvar tohoto spektra je znázorněn v grafu na obrázku 3.6.



Obrázek 3.6: Elektronové spektrum použité jako vstup k simulacím Monte Carlo. Parametry: p-polarizovaná 186 fs laserová vlna s obálkou ve tvaru funkce $\sin^2 s$ maximální intenzitou $3,4 \times 10^{18} \text{ W/cm}^2$ dopadající na terč pod úhlem 45° , charakteristická délka náběhové hrany je 0,2.

3.2 Simulace transportu elektronů v chladné části terče pomocí kódu Monte Carlo PENELOPE

Simulace elektronového transportu laserového impulsu s pevným terčem byly realizovány pomocí kódu PENELOPE představeného v kapitole 2.2.4. Výpočty byly provedeny pro rozličné druhy terčů, důraz byl v souladu se zadáním práce kladen na materiály s vyšším atomovým číslem.

Jednalo se tedy o terče z hliníku, mědi, stříbra, zlata a uranu. Hlavní zkoumanou závislostí byla závislost počtu vyzářených fotonů $K-\alpha$ z přední strany terčíku do vakua na tloušťce terče. Pro všechny materiály bylo použito na vstupu stejné spektrum elektronů ze simulací particle-in-cell, znázorněno je na grafu na obrázku 3.6.

Výpočetní kód poskytoval i jiné výstupy. V omezené míře byla věnována pozornost také fotonům vyzářených ze zadní strany terče. Pro každý materiál byla provedena celá sada simulací. Nejzásadnější byla závislost počtu vyzářených fotonů $K-\alpha$ na tloušťce terče, jednotlivé simulace tedy byly provedeny pro terče o šířce 1 μm , 5 μm , 10 μm , 50 μm , 100 μm a 500 μm .

Pro všechny tyto případy byly provedeny tři různé druhy simulací a to konkrétně

1. standardní simulace se započtením všech uvažovaných srážek,
2. simulace bez započtení $K-\alpha$ fotonů, které vznikly vyzářením z fotoionizovaných atomů a
3. simulace bez započtení fotoelektrického jevu.

Pro každý materiál tak bylo provedeno celkem osmnáct simulací. Vysvětleme si nyní jednotlivé možnosti podrobněji a podívejme se i na důvody, které vedly ke zkoumání těchto situací.

Ve většině modelů popisujících radiační transport není vliv fotoionizace zohledněn [24]. Obvykle se v totiž předpokládá, že tento vliv je zanedbatelný. Toto je prokázáno pro lehčí ionty. Jelikož ale cíl této práce klade důraz hlavně na těžší ionty, je zajímavé zkoumat, jak se budou počty fotonů $K-\alpha$ lišit, pokud je vliv fotoionizace potlačen.

Byly uvažovány dva způsoby, jak tohoto dosáhnout. Jeden je poměrně rázný, a to naprosto zakázat fotoelektrický jev. Prakticky se toho docílí tak, že se v souboru, kde jsou uloženy fyzikální vlastnosti uvažovaného materiálu vynulují účinné průřezy pro fotoefekt.

Nabízí se však přirozená otázka, neovlivníme-li tímto náš systém příliš. Při fotoelektrickém jevu foton interaguje s atomem či iontem a přitom je vyzářen elektron. Pro náš případ je podstatné, že takto uvolněný elektron může inicializovat další ionizační událost. A tento fotoionizovaný atom může vyzářit jiný, tentokrát již charakteristický foton. Lze tedy očekávat, počet vyzářených fotonů $K-\alpha$ při započtení fotoionizace bude vyšší.

Problém s naprostým opomenutím fotoefektu tkví v následující skutečnosti. Při fotoelektrickém jevu totiž interagující foton zcela zanikne. Toto ale není fyzikálně relevantní, bez náhrady by ze systému mizela energie.

Byl tedy navržen jiný mechanismus, jak vliv fotoionizace potlačit. Účinné průřezy fotoionizace se nijak neměnily, změnil se ovšem simulační algoritmus. Pro atomy, které byly fotoionizovány, byla zakázána deexcitace. Dotyčný atom tedy zůstal v excitovaném stavu, charakteristický foton nemohl nijak vzniknout.

Před spuštěním simulací tedy bylo očekáváno následující. Největší počet vyzářených fotonů je očekáván pro simulace se započtením fotoionizace. Dále bylo předpokládáno, že rozdíl mezi dalšími dvěma možnostmi se ukáže být nepatrný. Při povolení fotoefektu mohou některé charakteristické fotony nepružně interagovat a tím snížit svou energii a přestat tedy býti charakteristickými fotony. Při celkovém zakázání fotoefektu toto nebezpečí nehrozí. Z tohoto důvodu bylo očekáváno, více charakteristických fotonů vznikne pro třetí možnost než pro druhou.

Výsledky simulací poskytne jedna z následujících podkapitol. Podívejme se ale nejprve na to, jak byl kód zprovozněn.

3.2.1 Zprovoznění kódu

Kód Penelope byl poskytnut s velmi podrobnou dokumentací [26] a zhuštěným tutoriálem. Samotné ovládání nebylo nijak komplikované, byly-li dodržovány pokyny v těchto dokumentech a také rady vedoucího práce. Samotnou simulaci zajišťuje program vzniklý překladem zdrojového souboru *penmain.f*. Pro samotný program je třeba připravit několik vstupních souborů. Podívejme se na ně postupně.

Materiálový soubor

Nejprve bylo třeba vygenerovat soubor, ve kterém budou zapsány charakteristiky uvažovaného materiálu. K tomuto účelu bylo třeba přeložit *gfortranem* zdrojový soubor *material.f*. Vzniklý program umožňoval tvorbu souborů s charakteristickými vlastnostmi rozličné škály materiálů, a to jak homogenních látek, tak rozličných sloučenin. Program je třeba spouštět v adresáři nadřazeném složce *pdfiles*, kde jsou uloženy účinné průřezy pro různé interakce a jiné charakteristické vlastnosti pro jednotlivé prvky. Výstupem programu je materiálový soubor, který se poté použije na vstupu simulace.

Geometrie uspořádání

Dalším nutným vstupem pro simulaci je soubor s geometrií. Vytváření těchto souborů je velmi dobře popsáno v dokumentaci ke kódu Penelope, v našem případě je však situace velice snadná, neboť geometrie je prostá. Jedná se pouze o dvě roviny, mezi kterými je


```

uy=1(:,3);
uz=1(:,4);
ene=511000.0*(sqrt(1+ux.^2+uy.^2+uz.^2)-1);
fid = fopen('psf.dat','w');
uu=1./sqrt(ux.^2+uy.^2+uz.^2);
j=find(ene>=2000.0);
for i=1:length(j),
fprintf(fid,' 1 %6.5E 0.00000E+00 0.00000E+00 0.00000E+00 ...
%6.5E %6.5E %6.5E 1 1 0 0 0 1 \ n',...
ene(i), uz(i).*uu(i), uy(i).*uu(i), ux(i).*uu(i));
end;
fclose(fid);

```

Pro náš případ je podstatná formule

$$E[\text{eV}] \approx 511000 \left(\sqrt{1 + \sum_{i=1}^3 u_i[\text{c}]^2} - 1 \right) \quad (3.3)$$

převádějící rychlostní složky jednotlivých elektronů na jejich energie. Konstanta $m_e c^2 = 511000$ [eV] udává klidovou hmotnost elektronu v elektronvoltech. Jednotlivé složky rychlosti pod odmocninou jsou vyjádřeny v jednotkách rychlosti světla.

Energie jednotlivého elektronu je tedy uložena v proměnné **ene**. Následující tři hodnoty představují tři složky jednotkového vektoru ve směru pohybu vylétnuvšího elektronu.

Samotný vstupní soubor pro kód Penelope

Simulační program, v našem případě pojmenován jednoduše *penmain*, se spouští s jedním vstupním argumentem. Argumentem bylo jméno vstupního souboru, nechť se vstupní soubor jmenuje např. *vstup.in*. Spuštění simulace se tedy provedlo příkazem

```
./penmain < vstup.in
```

Podívejme se nyní podrobněji na strukturu používaného vstupního souboru. Typický vstupní soubor je představen níže. Boudou okomentovány pouze některé podstatné parametry.

```

>>>> Source definition.
SKPAR 1 [Primary particles: 1=electron, 2=photon, 3=positron]
SENERG 2e5 [E bin: lower-end and total probability]
SPOSIT 0 0 0 [Coordinates of the source]
SCONE 0 0 0 [Conical beam; angles in deg]
.

```

```

>>>> Input phase-space file (psf).
IPSFN psf.dat [Input psf name, up to 20 characters]
IPSPLI 50 [Splitting number]
WGTWIN 1.0e-5 1.0e5 [Weight window, RR & spl of psf particles]
EPMAX 1.3e7 [Maximum energy of particles in the psf]
.
>>>> Material data and simulation parameters.
MFNAME Au.mat [Material file, up to 20 chars]
MSIMPA 5e2 5e2 5e2 0.1 0.1 5e2 5e2 [EABS(1:3),C1,C2,WCC,WCR]
.
>>>> Geometry definition file.
GEOMFN foil.geo [Geometry file, up to 20 chars]
.
>>>> Emerging particles. Energy and angular distributions.
NBE 1e3 1e5 300 [Energy window and no. of bins]
NBANGL 45 18 [No. of bins for the angles THETA and PHI]
.
>>>> Job properties
RESUME dump.dmp [Resume from this dump file, 20 chars]
DUMPTO dump.dmp [Generate this dump file, 20 chars]
DUMPP 60 [Dumping period, in sec]
.
NSIMSH 2e10 [Desired number of simulated showers]
TIME 2e9 [Allotted simulation time, in sec]
.
END [Ends the reading of input data]

```

Parametry IPSFN a IPSPLI jsou pro náš případ obzvláště důležité, první parametr určuje adresu elektronového vstupního souboru, druhý stanoví, kolikrát se má jednotlivý elektron použít pro simulaci. Parametry MFNAME a GEOMFN se ptají na adresy materiálového vstupního souboru a souboru s geometrií uspořádání.

Parametr NBE nastavuje minimální a maximální energii fotonu, jaké se má zapsat do výstupu a také počet jednotlivých intervalů mezi těmito dvěma okrajovými hodnotami.

Na závěr je ještě možno zmínit parametr TIME, tedy přidělený čas k výpočtu. Tento čas ale měněn nebyl.

Po kratším testování se podařilo všechny parametry vhodně nastavit a bylo započato se systematickým spouštěním jednotlivých simulací.

Jednotlivé simulace trvaly přibližně deset hodin, také v závislosti na výkonu jednotlivých počítačů v UNIX Labu.

3.2.2 Zpracování dat

Po doběhnutí simulace se v pracovním adresáři vytvořilo několik výstupních souborů. V provedených simulacích jsem nechával vypisovat pouze energetická a úhlová spektra elektronů, fotonů a pozitronů na přední a zadní stěně chladnější části terče.

Ve zpracování výsledku jsme se v souladu se zadáním práce omezili na fotonová spektra, a to hlavně na přední straně terče.

Tyto výstupní soubory měli velmi jednoduchou strukturu. Ve třech sloupcích byly postupně energii, četnost výskytu fotonů oknu příslušejícímu této energii a směrodatná odchylka určení.

Vykreslování energetických spekter bylo vzhledem k jejich velkému množství zautomatizováno sestavením jednoduchého skriptu.

Pro ukázkou zde uvedme příklad, jak se vykreslí jednotlivé spektrum v Matlabu:

```
f = fopen('B02/energy-ph-trans.dat');
Q = textscan(f, '%n%n%n', 'commentStyle', '#');
Q= cell2mat(Q);
fclose(f);
x14=Q(:,1);
y14=Q(:,2);
plot(x14,y14)
```

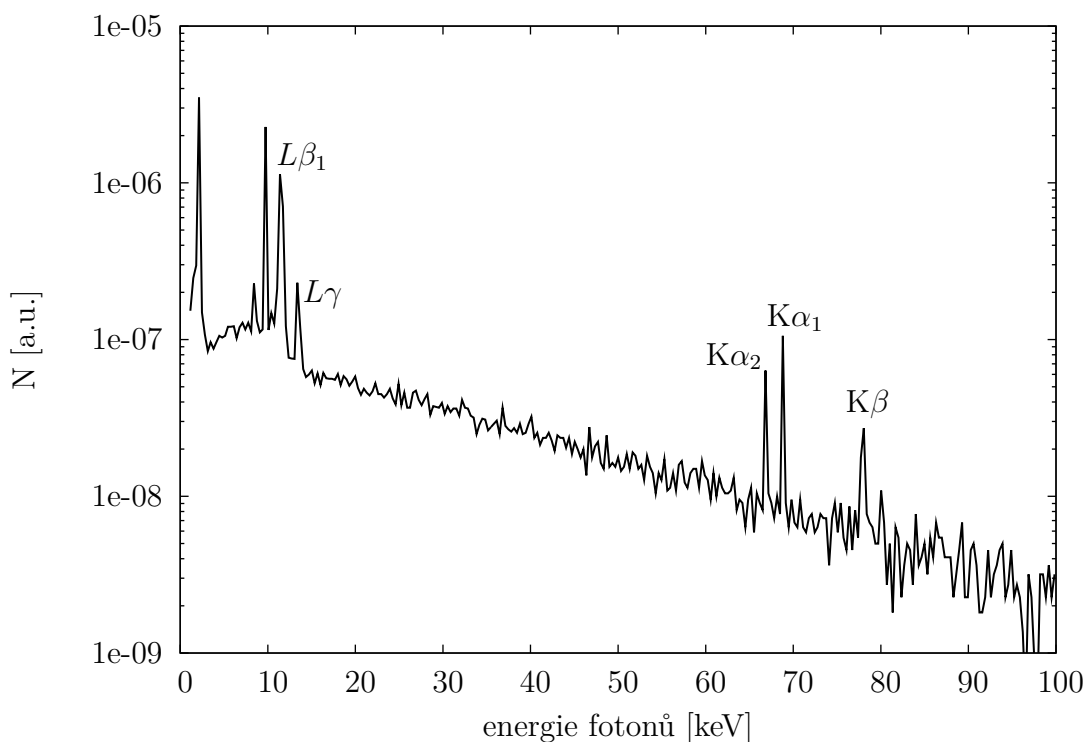
Syntaxe je velmi snadná, otevře se soubor s daty, ve druhém řádku se otevře pole, kam se uloží jednotlivé sloupce, přičemž se ignorují řádky začínající na #. Ve třetím sloupci se pole převede na matici a potom se už jenom graf vykreslí.

Pro ilustraci se nyní podívejme na typické spektrum a na něm si vysvětleme postup dalšího zpracování.

Na obrázku 3.7 je vykresleno typické spektrum ze simulací. Cílem práce bylo zkoumat hlavně charakteristické fotony z čáry K- α . Vlnové délky a energie těchto charakteristických fotonů jsou uvedeny v tabulce 1.1. Nejprve bylo tedy třeba tuto čáry či čáry identifikovat. Poté se jednoduše spočítal počet vyzářených fotonů jako plocha trojúhelníku pod grafem. Pro různé případy se poté provedlo vzájemné porovnání.

3.2.3 Představení výsledků

Vzhledem k velkému počtu spekter zde nebudou uvedeny všechny, ale pouze ilustrativní příklady. Celkem bylo provedeno devadesát simulací, přičemž u každé byla zkoumána



Obrázek 3.7: Typické spektrum ze simulací Monte Carlo. V tomto konkrétním případě se jedná o zlatou folii širokou $500 \mu\text{m}$, výstup na přední straně terče.

spektra vyzářená zpět i za terč. Podívejme se na porovnání celkového počtu vyzářených charakteristických fotonů pro jednotlivé materiály.

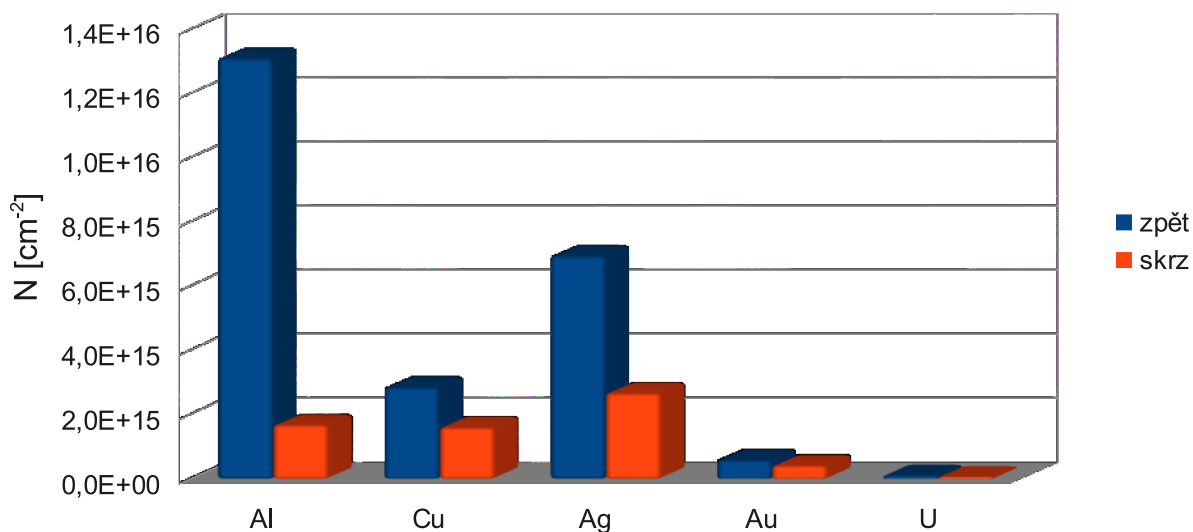
Celkový počet vyzářených charakteristických fotonů Porovnání mezi jednotlivými elementy je graficky znázorněno na obrázku 3.8 na typickém příkladu $50\mu\text{m}$ terče. Pro stříbro, zlato i uran je celkový počet fotonů K- α dán jako součet obou čar dubletu.

Prvky jsou seřazeny zleva podle svého protonového čísla, nicméně žádná závislost na tomto parametru vypořádat nelze. Nejvíce fotonů bylo pozorováno pro hliník. Pro stříbro bylo vypočteno větší množství fotonů než pro měď. Očekávaný počet fotonů pro zlato a uran je již řádově menší.

Zajímavým pozorováním je rozdíl v poměru mezi počtem charakteristických fotonů vyzářených ze přední a ze zadní strany $50\mu\text{m}$ terče pro různé prvky. Následující tabulka obsahuje poměry mezi počtem fotonů vyzářených ze zadní strany terče ku počtu fotonů vyzářených ze přední strany terče pro jednotlivé čáry různých prvků.

Prvek	K- α_1	K- α_2
hliník	13%	
měď	56%	
stříbro	41%	36%

Počet vyzářených fotonů pro různé prvky



Obrázek 3.8: Počet vyzářených charakteristických fotonů K- α pro jednotlivé materiály. Porovnání bylo provedeno se stejným elektronovým spektrem na vstupu (viz obrázek 3.6) pro terče o šířce 50 μm .

zlato	59%	68%
uran	76%	59%

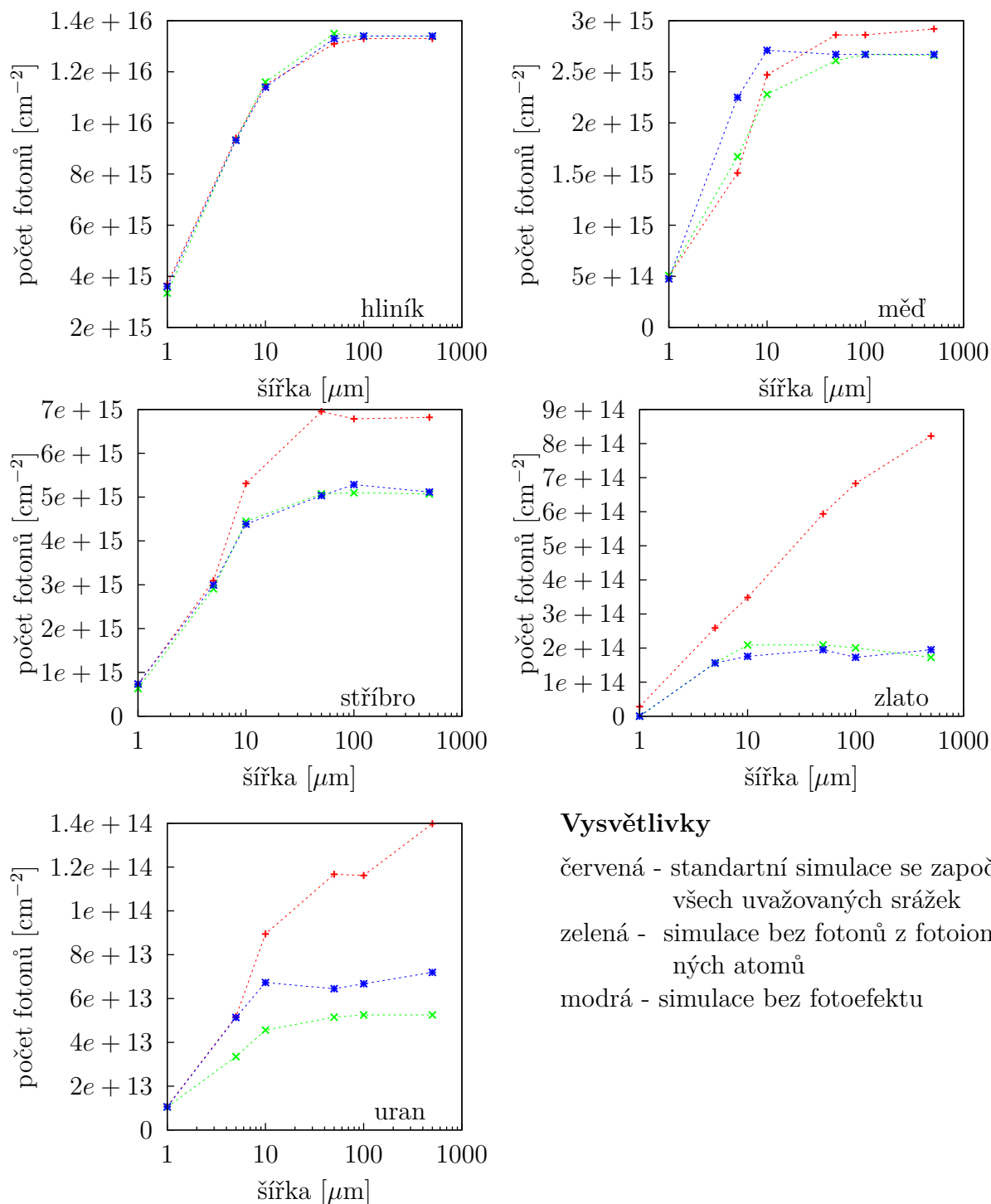
Pozoruhodný je zejména tento nízký poměr u hliníku. Pro ostatní materiály je i na zadní straně výrazně vyšší množství vyzářených fotonů. Souvisí to zejména s energiemi vyzářených fotonů, u hliníku jsou řádově nižší (viz tabulka 1.1), u stříbra počet fotonů pronikajících na druhou stranu terče pro změnu snižuje vysoká brzdná síla.

Vybraný příklad byl pouze ilustrativní, byla zvolena střední vyšetřovaná tloušťka terče. Uvedme pouze následující pozorování: pro tlustší terče proniklo u každého materiálu méně charakteristických fotonů na zadní stranu, u tenčích terčů více, u 1 μm měděného terče bylo dokonce vyzářeno ze zadní strany o 30 % více charakteristických fotonů K- α .

Závislost na tloušťce terče pro jednotlivé materiály Závislost na tloušťce terče je pro touto práci patrně nejzásadnější. Jedním z hlavních cílů práce bylo zjistit, jak široký terčik poskytne největší množství vyzářených charakteristických fotonů K- α .

Poměrně detailní odpověď na tuto otázku nabízejí grafy na obrázcích 3.9 a 3.10. Jsou v nich uvedeny závislosti počtu charakteristických fotonů K- α vyzářených ze přední, resp. ze zadní strany terče na šířce terče pro jednotlivé zkoumané materiály. Mějme v patrnosti, že hodnoty na vodorovné ose jsou vynášeny v logaritmickém měřítku. Jednotlivé body označují výsledky jednotlivých simulací, tyto jsou spojeny mezi sebou lineární funkcí, aby se tímto zvýšila přehlednost grafu.

Závislost počtu vyzářených fotonů K- α ze přední strany terče na šířce terče

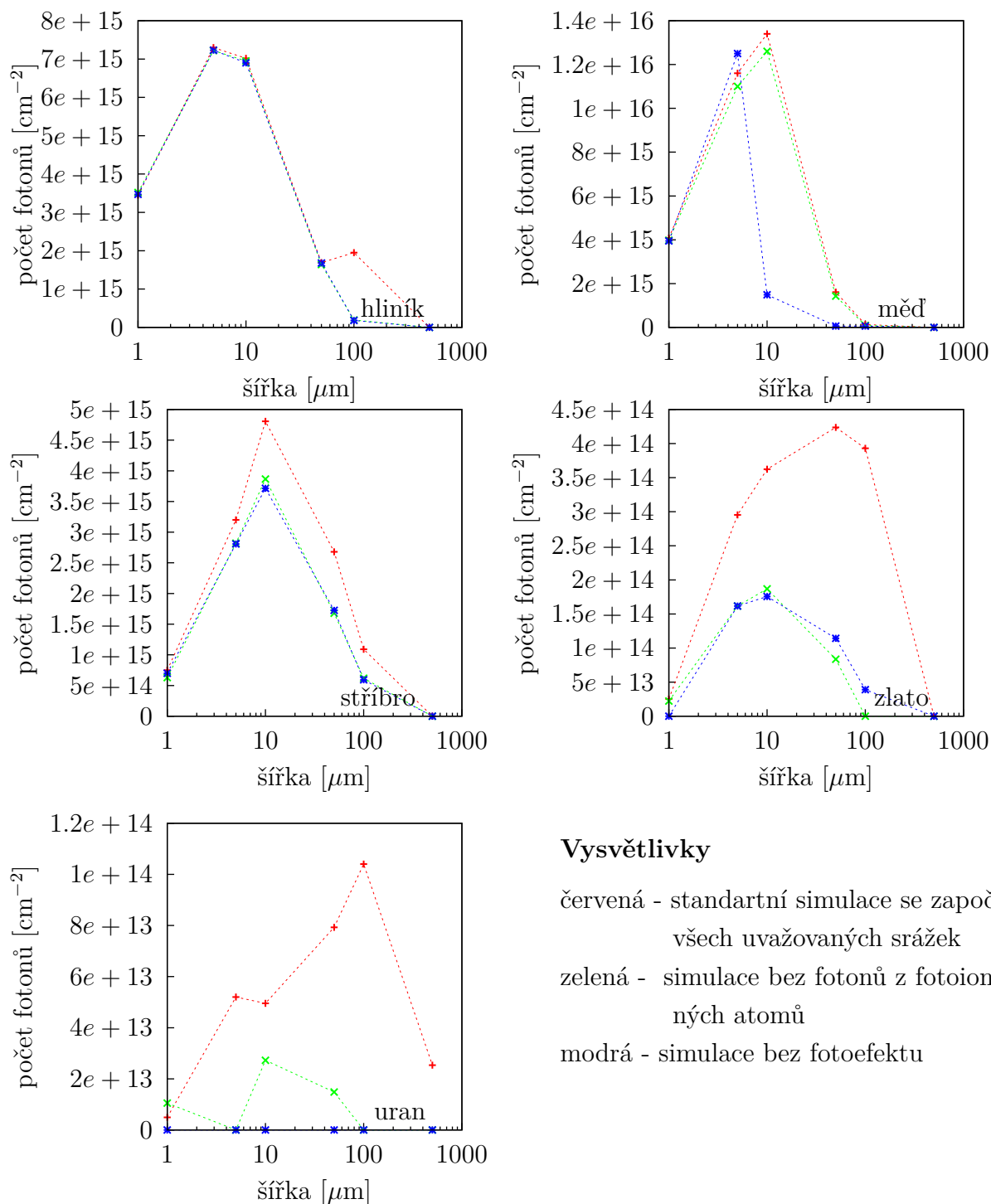


Vysvětlivky

- červená - standartní simulace se započtením všech uvažovaných srážek
- zelená - simulace bez fotonů z fotoionizovaných atomů
- modrá - simulace bez fotoefektu

Obrázek 3.9: Závislosti počtů vyzářených fotonů K- α ze přední strany terče na šířce terče pro různé materiály. Jednotlivé barvy znamenají různé výpočty vzhledem k započítání druhotné fotoionizace.

Závislost počtu vyzářených fotonů K- α ze zadní strany terče na šířce terče



Obrázek 3.10: Závislosti počtů vyzářených fotonů K- α ze zadní strany terče na šířce terče pro různé materiály. Jednotlivé barvy znamenají různé výpočty vzhledem k započítání druhotné fotoionizace.

Věnujme se nejprve pouze první skupině grafů (závislost počtu fotonů $K\text{-}\alpha$ vyzářených ze přední strany terče zpět na obrázku 3.9) a omezme se nejprve pouze na hodnoty vynešené červeně. Pro každý případ totiž byly provedeny tři různé simulace za účelem zkoumání vlivu fotoionizace. Červené body nabízejí takové simulace, kde byl vliv druhotné fotoionizace plně zohledněn a tedy poskytují nejrealističtější informaci o očekávaném počtu vyzářených fotonů.

Pozorujeme, že závislosti mívaly podobný průběh pro všechny materiály. Postupujeme-li od tenčích terčů k širším, pozorujeme setrvalý vzestup počtu vyzářených charakteristických fotonů. Od určité hranice však již vzestup ustává a nastává saturace. Zvyšující šířka terčíku pak již nemá vliv na počet vyzářených charakteristických fotonů.

Je to logické. Jednak se vstupní elektrony zastaví ještě dříve, než se tak hluboko do terče dostanou, jednak klesá pravděpodobnost, že se fotony vzniklé v zadní straně terče proniknou skutečně zpět ven z terče.

Pokusme se nyní stanovit ideální tloušťky terčů pro jednotlivé materiály. Nemá ale smysl usuzovat na přesné hodnoty, jelikož pro každý materiál je k dispozici pouze šest bodů a tyto jsou s to poskytnout pouze orientační odhad. Dále je třeba samotný termín ideální tloušťka terčíku brát s rezervou. Spíše se jedná o takovou hraniční tloušťku, od které již nemá smysl terč dále rozšiřovat. Při větších tloušťkách je možno považovat terčik za polonekonečný. Znovu je třeba poznamenat, že tyto všechny tyto hodnoty byly vyšetřovány pouze pro konkrétní vstupní spektrum elektronů, nejlepší spektrum ze simulací particle-in-cell (viz 3.6)

Pro hliník, měď a stříbro je možné stanovit tuto ideální šířku na přibližně $50\ \mu\text{m}$, pro zlato a uran je toto stanovení náročnější. Jak je patrné z grafu na obrázku 3.9, závislosti pro tyto materiály vykazují neustále rostoucí charakter. Bylo provedeno ještě několik málo kratších simulací, je tvrdit, že pro zlato a uran je tato ideální tloušťka mezi $500\ \mu\text{m}$ a $1\ \text{mm}$.

Zmiňme se nyní ještě krátce o závislosti počtu charakteristických $K\text{-}\alpha$ fotonech vyzářených ze zadní strany terče na tloušťce terče. Tyto závislosti jsou pro jednotlivé materiály graficky znázorněny na obrázku 3.10. Simulace se započtením všech uvažovaných srážek jsou opět vykresleny červenou barvou.

V těchto případech samozřejmě závislosti nemají monotónní charakter, nýbrž pro každý materiál existuje pro konkrétní vstupní spektrum určitá ideální tloušťka terče. V tomto případě je slovo *ideální* ve jméně této veličiny bezesporné a logické. Aby došlo k vyzáření fotonu ze zadní strany terče, je třeba, aby vstupní elektron excitoval atom uvnitř terče, tento atom aby přešel opět do základního stavu vyzářením charakteristického fotonu a tento vyzářený foton doputoval k opačné straně terče.

Během cesty vstupní elektron i výstupní foton mohou podstupovat různé srážky, při kterých obecně ztrácejí energii. Při velmi širokém terčíku jednoduše není šance, aby se

výstupní foton dostal až k zadní straně terče, při příliš úzkém terči zase vstupní elektron může proletět celým terčem, aniž by inicializoval jedinou ionizační událost.

Pro hliník, měď a stříbro tedy platí, že nejvíce charakteristických fotonů $K\text{-}\alpha$ se vyzáří ze zadní strany terče, je-li terč přibližně $10\ \mu\text{m}$ široký. V případech zlata a uranu je pak tato hodnota vyšší, je to více než $100\ \mu\text{m}$.

Závěry pro přední z zadní stranu jsou přehledně shrnuty v tabulce 3.3.

Tabulka 3.3: Ideální šířka terče pro vstupní spektrum elektronů 3.6 pro jednotlivé materiály

materiál	přední strana	zadní strana
hliník	$50\ \mu\text{m}$	$10\ \mu\text{m}$
měď	$50\ \mu\text{m}$	$10\ \mu\text{m}$
stříbro	$50\ \mu\text{m}$	$10\ \mu\text{m}$
zlato	$500\ \mu\text{m} - 1\ \text{mm}$	$> 100\ \mu\text{m}$
uran	$500\ \mu\text{m} - 1\ \text{mm}$	$> 100\ \mu\text{m}$

Vliv fotoionizace Jedním z cílů práce bylo zkoumat vliv druhotné fotoionizace atomů na počet vyzářených charakteristických fotonů $K\text{-}\alpha$ a na tvar spekter obecně. Bylo známo, že pro lehčí materiály je možno tento vliv zcela zanedbat a je možné vytvářet různé modely radiačního transportu, aniž by se uvažovaly druhotně vzniklé charakteristické fotony [24]. Otázkou hodnou zkoumání tak zůstalo, zda-li je možno pokračovat ve zobecňování i pro materiály s vyšším atomovým číslem, případně jak velké chyby bychom se byli dopustili, byli-li bychom si takto počínali.

Pro každý materiál a každou tloušťku terče byly provedeny celkem tři simulace s ohledem na zkoumání vlivu fotoionizace. Zůstaňme stále u grafů na obrázcích 3.9 a 3.10 a věnujme se tentokrát všem závislostem v jednotlivých grafech.

Červené hodnoty představují úplné výsledky při započtení všech srážek, zelené hodnoty ukazují počet charakteristických fotonů při vynechání těch vzniklých vyzářením z atomů, které byly ionizovány právě fotoelektrickým jevem. Modré hodnoty představují výsledek simulace bez uvažování fotoelektrického jevu.

Dle očekávání simulace potvrdily, že pro lehčí materiály nehraje druhotná fotoionizace významnou roli. Pro hliník a záření ze zadní strany terče se výsledky liší nanejvýše o 1,5%, což můžeme pokládat za uspokojivý souhlas, uvažíme-li mnohem větší chybu určení.

U mědi je situace podobná, pro většinu hodnot se výsledky liší nanejvýše o 10%, je tam ale i výjimka, a to taková, že při zamezení fotoefektu vzroste počet vyzářených charakteristických fotonů $K\text{-}\alpha$ u $5\ \mu\text{m}$ terče o více než 40%. Takový výsledek se těžko interpretuje. Patrně došlo k nějaké chybě už při spuštění simulace.

Pro stříbro, zlato a uran se vliv druhotné fotoionizace projevuje mnohem výrazněji, nejvýrazněji pro zlaté terče. Dá se říci, že pro širší terče je fotoionizace dominantním zdrojem charakteristického $K\text{-}\alpha$ záření. Pro užší terče je naopak vliv pouze nepatrný. Toto je možno vysvětlit tak, že vyzářené fotony vyletí ihned z terče ven, aniž by stačili inicializovat byť jedinou ionizační událost.

Přehledně vliv fotoionizace zachycuje tabulka 3.4 a stejná závislost je graficky znázorněna na obrázku 3.11.

Tabulka 3.4: Zkoumání vlivu fotoionizace: poměr mezi počtem charakteristických fotonů $K\text{-}\alpha$ vyzářených ze přední strany terče bez započtení fotoionizace a při započtení všech uvažovaných srážek pro jednotlivé materiály a tloušťky terčů

	hliník	měď	stříbro	zlato	uran
1	0,97	0,95	1,02	0,00	0,98
5	0,99	1,49	0,97	0,54	0,99
10	0,99	1,09	0,82	0,70	0,75
50	1,02	0,93	0,72	0,46	0,55
100	1,01	0,94	0,78	0,20	0,57
500	1,01	0,91	0,75	0,24	0,51

3.2.4 Shrnutí výsledků simulací radiačního transportu

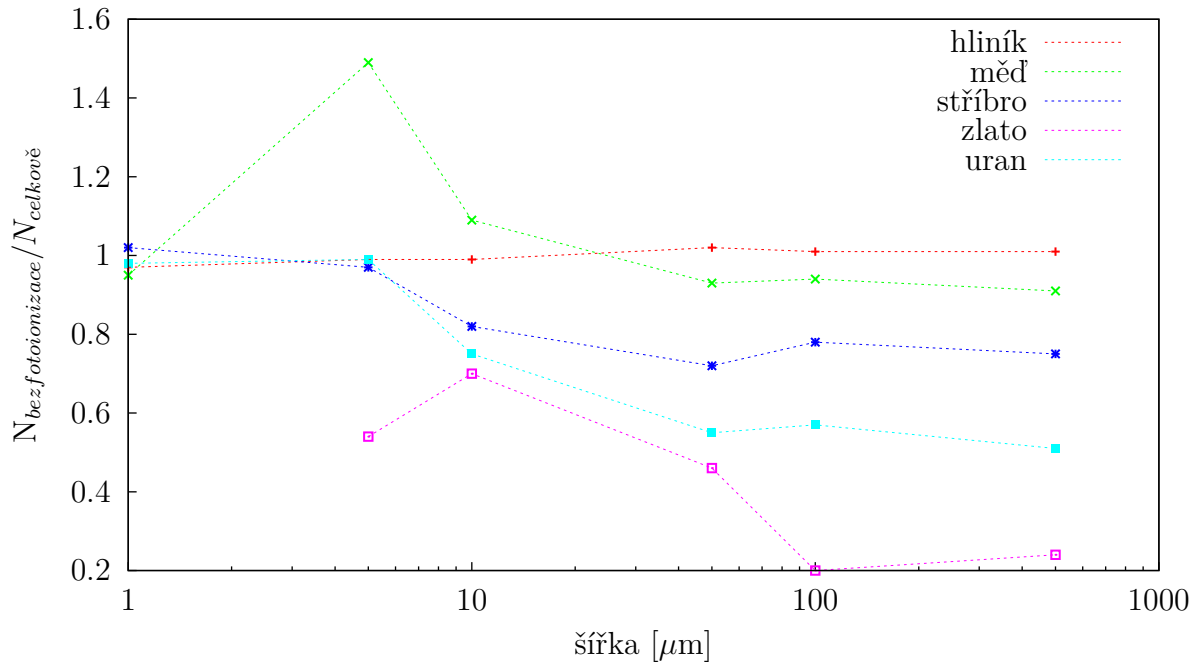
Simulace metodou Monte Carlo byly prováděny jednak za účelem zjistit počet vyzářených charakteristických fotonů $K\text{-}\alpha$ pro jednotlivé uvažované materiály a pro každý materiál pokud možno určit ideální šířku terče, jednak i zkoumat vliv druhotné fotoionizace na intenzitu generovaného rentgenového záření pro materiály s vyšším atomovým číslem.

Jako vstup do těchto simulací posloužilo spektrum elektronů vypočítané kódem particle-in-cell, které je vykresleno na obrázku 3.6.

Mezi hlavní výsledky patří závislosti počtu vyzářených charakteristických fotonů $K\text{-}\alpha$ ze přední strany terče na tloušťce terče na obrázku 3.9. Pro každý materiál bylo provedeno celkem šest simulací, pro terče o šířkách 1 μm , 5 μm , 10 μm , 50 μm , 100 μm a 500 μm . Projevil se typický charakter těchto závislostí, tedy pro nižší hodnoty setrvalý vzestup, pro vyšší hodnoty pak saturace.

Pro hliník, stříbro a měď počet vyzářených $K\text{-}\alpha$ fotonů ze přední strany začíná saturovat od přibližně 50 μm , pro zlato a uran je tato hranice až nad 500 μm .

Jiným zajímavým výsledkem je potvrzení vlivu fotoionizace na počet charakteristických $K\text{-}\alpha$ fotonů pro materiály s vyšším atomovým číslem. Pro hliník je tento vliv zcela zanedbatelný, pro měď je již patrný a pro těžší prvky je již velmi výrazný a dá se říci, že



Obrázek 3.11: Zkoumání vlivu fotoionizace: poměr mezi počtem charakteristických fotonů $K\text{-}\alpha$ vyzářených ze přední strany terče bez započtení fotoionizace a při započtení všech uvažovaných srážek pro jednotlivé materiály a tloušťky terčů.

třeba pro zlato je fotoionizace a následná deexcitace dominantním zdrojem charakteristických fotonů.

3.3 Shrnutí výsledků

Simulacemi užitím metod particle-in-cell a Monte Carlo byla zkoumána interakce krátkého laserového impulsu s pevným terčem. Jako typický laserový impuls byla zvolena p-polarizovaná vlna s maximální intenzitou $3,4 \times 10^{18} \text{ W/cm}^2$. Délka impulsu byla 187 fs. Jako materiály terče byly uvažovány hliník, měď, stříbro, zlato a uran.

Simulace metodou particle-in-cell měly za cíl určit nejvhodnější uspořádání a tak maximalizovat výtěžek rychlých elektronů vytvořených v chladné části terče. Všechny simulace byly provedeny kódem LPIC++. Byl zkoumán pouze hliník, spektra pro ostatní prvky jsou považovány za podobné, další simulace pro ně se neprováděly.

Bylo zvoleno nejvhodnější elektronové spektrum, které posloužilo jako vstup do simulací metodou Monte Carlo. Laserová vlna dopadá na terč pod úhlem 45° a charakteristická délka náběhové hrany je 0,2. Pro tyto parametry se v materiálu deponuje až 58% energie z laserového impulsu.

V simulacích Monte Carlo byly zkoumány počty vyzářených charakteristických fotonů $K\text{-}\alpha$ pro různé materiály a různé šířky terče. Pro naše parametry je možno pro naši vlnu

např. u hliníku očekávat řádově 10^{16} charakteristických fotonů na čtvereční metr na přední straně terče širokého $100\mu\text{m}$.

Byl prokázán také velký vliv druhotné fotoionizace atomů na počet vyzářených charakteristických fotonů $K\text{-}\alpha$ pro prvky s vyšším atomovým číslem. Dá se říci, že pro zlato je fotoionizace a následná deexcitace dominantním zdrojem charakteristického záření.

Závěr

Předkládaná práce se zabývá studiem vzniku záření K- α po interakci krátkých laserových pulsů s pevným terčem a následnou numerickou simulací tohoto fenoménu. Zvláštní důraz je kladen na materiály s vysokým protonovým číslem.

V první části práce byly vysvětleny procesy vedoucí ke vzniku charakteristického záření. Zkratkovitě lze shrnout, že po dopadu laserové vlny vzniká na přední straně terčů tenká vrstva horkého a hustého plazmatu, kde mimo standardních tepelných elektronů vznikají i rychlé elektrony o energiích v řádů stovek kiloelektronvoltů i vyšších. Rychlé elektrony pronikají do chladné části terče a inicializují různé interakce, mezi které patří i ionizace vnitřních slupek atomů v materiálu. Vnitřní slupky jsou velmi rychle obsazeny, jedním ze způsobů je přeskocení elektronu z vyšší vrstvy níže spojené s vyzářením charakteristického fotonu.

Simulace byla rozdělena do dvou kroků. Nejprve byly metodou particle-in-cell užitím kódu LPIC++ modelovány procesy po dopadu laserové vlny na povrchovou vrstvu terče. Byla vyzkoumána ideální konfigurace laserového systému z hlediska co možná nejvyšší deponice energie dopadnuvšího impulsu do materiálu.

Spektrum elektronů jako výstup z této nejlepší simulace bylo poté použito jako vstup do navazujícího výpočtu metodou Monte Carlo, zabývajícího se transportem rychlých elektronů chladnější části terče. Výpočet byl proveden využitím kódu PENELOPE. Jako výstup byla zkoumána fotonová spektra ze přední i zadní strany terče pro terče z hliníku, mědi, stříbra, zlata a uranu.

Podívejme se nyní na typické výsledky simulací. Při dopadu krátké intenzivní laserové vlny (maximální intenzita $3,4 \times 10^{18}$ W/cm², délka impulsu 187 fs) je ideální úhel dopadu laseru $(39 \pm 2)^\circ$ a charakteristická délka náběhové hrany $(0,21 \pm 0,01)$. Za takovýchto podmínek lze u 50μ terče z hliníku očekávat řádově 10^{16} vyzářených fotonů K- α , u mědi a stříbra je to o řád méně a u zlata a uranu dokonce o dva řády méně. Závislost počtu vyzářených fotonů ze přední strany terče má očekávaný průběh, po počátečním růstu nastává u všech materiálů saturace a pro šířky nad $500 \mu\text{m}$ již lze obvykle hovořit o nekonečně širokém terči.

Mezi hlavní výsledky patří zejména prokázání signifikantního vlivu druhotné fotoionizace na celkový počet vyzářených charakteristických fotonů K- α pro materiály s vysokým protonovým číslem. Dá se prohlásit, že pro dostatečně široké zlaté terče je tato druhotná

fotoionizace dominantním zdrojem charakteristického záření a opomenutí zohlednění této interakce by znamenalo výrazné zneřesnění výsledků.

Oproti tomu pro hliník, tedy typický prvek s nízkým protonovým číslem lze druhotnou fotoionizaci s klidem zanedbat.

Literatura

- [1] Evaluated Atomic Data Library. Červen 2012.
URL <http://www.llnl.gov/cullen1>
- [2] NIST Atomic Spectra Database Lines Form. Červen 2012.
URL http://physics.nist.gov/PhysRefData/ASD/lines_form.html
- [3] Andreev, A. A.; Platonov, K. Y.: Generation of K-alpha radiation by high-efficiency laser targets. *Quantum Electronics*, , č. 41, 2011: s. 515–519.
- [4] Atzeni, S.; Meyer-ter Vehn, J.: *The physics of inertial fusion: beam plasma interaction, hydrodynamics, hot dense matter*. Oxford University Press, 2004.
- [5] Badziak, J.; Jablonski, S.: Ultraintense ion beams driven by a short-wavelength short-pulse laser. *Physics of Plasmas*, číslo 17, 2010: str. 073106.
- [6] 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.
- [7] Birdsall, C. K.; Langdon, A. B.: *Plasma physics via computer simulation*. CRC Press, 2005.
- [8] Boris, J.: Relativistic plasma simulation–optimization of a hybrid code. In *Proc. Fourth Conf. Num. Sim. Plasmas, Naval Res. Lab, Wash. DC*, 1970, s. 3–67.
- [9] Bína, V.: PIC simulace interakce ultrakrátkých laserových pulsů s terčí. 2011, bakalářská práce.
- [10] Cengiz, A.: Approximate inelastic scattering cross sections of electrons. *Radiation Physics and Chemistry*, číslo 65, č. 1, 2002: s. 33–44.
- [11] 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.
- [12] Chen, F. F.: *Úvod do fyziky plazmatu*. Academia, Praha, 1984.

- [13] 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.
- [14] 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.
- [15] Horný, V.: Možnosti modifikace jaderných procesů ve vysokoparametrovém plazmatu. 2011, bakalářská práce.
- [16] 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.
- [17] KAWAMURA, T.; HORIOKA, K.; KOIKE, F.: Potential of K[alpha] 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.
- [18] 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.
- [19] 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.
- [20] Lapenta, G.: *Particle In Cell Methods With Application to Simulations in Space Weather*. Katholieke Universiteit Leuven, 2011.
- [21] 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.
- [22] 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.
- [23] Press, W. H.; Teukolsky, S. A.: Portable random number generators. *Computers in physics*, číslo 6, č. 5, 1992: s. 522–524.
- [24] Reich, C.: *Optimization of femtosecond laser plasma Ka sources*. Dizertační práce, Ph. D. Thesis, Friedrich-Schiller Universitaet, 2003.

- [25] Röntgen, W. C.: Über eine neue Art von Strahlen. *Annalen der Physik*, číslo 300, č. 1, 1898: s. 1–11.
- [26] 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.
- [27] Villasenor, J.; Buneman, O.: Rigorous charge conservation for local electromagnetic field solvers. *Computer Physics Communications*, číslo 69, č. 2, 1992: s. 306–316.