# Сильная ионизация в углеродных нанопроволоках\*

В.Каймак, А.Пухов, В.Н.Шляпцев, Дж.Дж.Рокка

Показано, что поверхности, покрытые наноструктурами, такими как массивы нанопроволок, намного сильнее поглощают лазерное излучение, чем гладкие поверхности. В результате эффективного поглощения лазерной энергии создаются электроны с высокой энергией, которые, в свою очередь, способны испускать интенсивные ультракороткие рентгеновские импульсы. С помощью полного трехмерного PIC-моделирования проанализировано поведение массивов углеродных нанопроволок диаметром 400 нм при облучении лазерным импульсом с длиной волны  $\lambda_0 = 400$  нм, длительностью 60 фс на уровне половины амплитуды и векторным потенциалом  $a_0 = 18$ . Изучена динамика ионизации нанопроволок. Исследованы различия по силе и структуре ионизации между лазерными пучками, поляризованными линейно и по кругу. Обнаружено, что нанопроволоки полностью ионизируются примерно после 30 периодов лазерного излучения. Свет с круговой поляризацией оказывает несколько более сильное ионизирующее воздействие.

**Ключевые слова:** углеродные нанопроволоки, электроны высокой энергии, ионизация, ультракороткие рентгеновские импульсы.

## 1. Введение

Лазеры высокой интенсивности способны разогревать твердотельную плазму до высоких температур. Однако формирование плазменной поверхности с высокой проводимостью ограничивает глубину проникновения тонким приповерхностным слоем, поэтому бо́льшая часть лазерного излучения отражается. Для преодоления этого препятствия существует два различных подхода: генерация предплазмы (с использованием предымпульса) или структурирование облучаемой поверхности [1].

Установлено, что структуры из наночастиц, такие как массивы нанопроволок, стимулируют сильное поглощение лазерного излучения. В типичном случае они имеют высокую среднюю и высокую (присущую твердому телу) локальную плотности. Эффективное связывание лазерной энергии материалом можно отнести на счет локального усиления электрических полей вблизи наночастиц. Два механизма вызывают усиление: так называемый эффект «молниеотвода», который является чисто геометрическим и зависит от формы частицы, и поверхностные плазмонные резонансы [2].

Благодаря сильному поглощению лазерной энергии образуются электроны высоких энергий, которые способны испускать рентгеновские импульсы [3] с субпикосекундной длительностью [4] и энергией до нескольких сотен кэВ [5]. Сконструированные на этой основе настольные источники импульсного рентгеновского излучения позволяют отслеживать процессы атомного и молекулярного временного масштаба [6]. Другими областями применения лазерно-продуцируемой плазмы являются ускорение ионов до энергий порядка МэВ [7] и генерация нейтронов при ядерном синтезе [8].

## 2. Модель установки

В настоящей работе мы использовали полное трехмерное PIC-моделирование в программной среде Virtual Laser Plasma Lab (VLPL) [9]. Модельная установка содержит углеродные нанопроволоки диаметром 400 нм и длиной 5 мкм. Период их расположения (1 мкм) соответствует средней плотности, равной 13% от плотности материала проволок. Лазерный импульс длительностью 60 фс на уровне половины амплитуды с векторным потенциалом  $a_0 = 18$  подается в моделируемый объем и освещает нанопроволоку.

Лазерный пучок моделируется плоской волной с гауссовым временным профилем, падающей нормально, как показано на рис.1. Моделируемый объем содержит единственный стержень, а массив нанопроволок имитируется периодическими граничными условиями в поперечном направлении. В направлении распространения (как слева, так и справа) границы являются поглощающими, что



Рис.1. Схема исследуемой модели.

<sup>\*</sup>Перевод с англ. В.Л.Дербова.

V.Kaymak, A.Pukhov. Institut für Theoretische Physik, Heinrich-Heine-Universität Düsseldorf, 40225 Düsseldorf, Germany;

e-mail: vural.kaymak@tp1.uni-duesseldorf.de

V.N.Shlyaptsev. Department of Electrical Computer Engineering, Colorado State University, Fort Collins, Colorado 80523, USA J.J.Rocca. Department of Electrical Computer Engineering, Colorado State University, Fort Collins, Colorado 80523, USA; Department of Physics, Colorado State University, Fort Collins, Colorado 80513, USA

Поступила в редакцию 5 февраля 2016 г.

гарантирует отсутствие отраженного импульса, повторно взаимодействующего с нанопроволокой. Программа учитывает полевую и столкновительную ионизации, а также парные столкновения.

## 3. Процесс ионизации

Вначале выясним, как лазерный импульс проникает в нанопроволоку и производит ионизацию вдоль ее оси. Чтобы указать, насколько различно влияние на процесс линейной и круговой поляризации импульса, мы рассмотрим ионизацию в плоскости, перпендикулярной к оси проволоки. Электроны, удаляемые из атомов углерода таким образом, вытягиваются из нанопроволоки под действием электрического поля.

#### 3.1. Структура ионизации вдоль оси проволоки

На рис.2 показана временная эволюция продольного сечения (в плоскости xy) распределения плотности электронного заряда  $\rho_0$ .



Рис.2. Продольные сечения (вдоль z = 0) относительной плотности электронного заряда  $\rho = \rho_0/(en_{\rm cr})$  при  $t = -51T_0(a)$ ,  $-46T_0(b)$ ,  $-41T_0(b)$  и  $-36T_0(z)$  до того момента, когда пик линейно поляризованного вдоль оси *у* лазерного импульса достигнет поверхности;  $T_0$  – период волны лазерного излучения.

Лазерный импульс, входящий в моделируемый объем слева через границу при x = 0, заметно проникает в нанопроволоку. Ионы углерода вначале имеют ионизационное состояние с зарядовым числом Z = 1, что приводит к плотности заряда  $\rho_0 \approx 16 en_{\rm cr}$  (светло-серая область на рис.2) (здесь е – заряд электрона, n<sub>cr</sub> – критическая плотность плазмы). Конец проволоки начинает ионизироваться (рис.2,*a*), и плотность заряда возрастает до  $\rho_0 \approx$ 60 епст. Видно, что внешний слой проволоки ионизируется первым (см., напр., правый конец области ионизации на рис.2, a-e). Только после этого, поскольку есть еще столкновительная ионизация, ионизированная область достигает внутренней сердцевины на оси проволоки. Еще до того, как вся проволока приобрела минимальную плотность заряда  $\rho_0 \approx 60 en_{\rm cr}$ , левая половина проволоки уже ионизирована до плотностей около 90en<sub>cr</sub> (рис.2, в и г). Во всех случаях рис.2 использовался линейно поляризованный свет. В принципе, показанные сечения не меняются и при круговой поляризации. Однако это не отменяет возможности того, что структура ионизации может быть другой. Более прямой путь для наблюдения степени ионизации это рассмотрение среднего ионизационного состояния (зарядового числа Z) атомов углерода вдоль всей нанопроволоки (рис.3). Оно дает возможность прямого сравнения ионизации, вызванной лазерным пучком с линейной (рис.3,а) и круговой (рис.3,б) поляризациями, в четыре различных момента времени.

На первом временном шаге ( $t = -48.5T_0$ ) кривые для линейной и круговой поляризации в основном совпадают. Углеродная проволока четырехкратно (Z = 4) ионизируется с облучаемого конца на глубину до  $3.5\lambda_0$ , затем на протяжении длины  $2\lambda_0$  степень ионизации атомов снижается и возвращается к Z = 1. Спустя 7.5 периодов лазерного излучения ( $t = -41T_0$ ) состояние Z = 4 достигается на глубине до  $10\lambda_0$  для линейной и  $10.7\lambda_0$  для круговой поляризации. При этом, если для линейной поляризации на интервале  $2.5\lambda_0 < x < 9\lambda_0$  заряд ионов в среднем достигает Z = 4.6, то для круговой поляризации он выше и доходит до Z = 5.5. К моменту  $t = -33.5T_0$  проволока оказывается полностью ионизированной на протяжении пер-



Рис.3. Усредненное зарядовое число Z ионов углерода как функция аксиальной координаты x для линейной (a) и круговой ( $\delta$ ) поляризации лазерного импульса в моменты времени  $t = -48.5T_0$  (I),  $-41T_0$  (2),  $-33.5T_0$  (3) и  $-26T_0$  (4).

вых  $5\lambda_0$  для линейной и на протяжении первых  $7.5\lambda_0$  для круговой поляризации. На последнем шаге ( $t = -26T_0$ ) проволока практически полностью ионизирована для пучка с круговой поляризацией, в случае же линейной поляризации последний отрезок проволоки протяженностью 2.5 $\lambda_0$  имеет зарядовые числа состояний между 6 и 5.5.

### 3.2. Структура ионизации в поперечной плоскости

Чтобы лучше понять структуру ионизации, рассмотрим ее в плоскости, поперечной к оси проволоки. На рис.4 показаны усредненные по оси х значения зарядового числа Z в плоскости уг для линейной поляризации (в направлении у). Из рис.4, а видно, что поверхности проволоки, пересекающие прямую, проходящую через центр проволоки в направлении поляризации, содержат состояния с наивысшей ионизацией (около 4.4) по сравнению с остальным стержнем. Этот факт является сильным аргументом в пользу того, что поверхности, пересекающие вектор напряженности электрического поля, ионизируются в первую очередь. На следующей стадии эффект ионизации продвигается вглубь проволоки (рис.4,б). Благодаря линейной поляризации, область сильно ионизированных состояний (~5.4) проходит вдоль направления у через x = 0. Постепенно в этой области формируется полностью ионизированная плазма (рис.4, в), которая затем занимает весь стержень и начинает расширяться (рис.4,г).

Для импульса с круговой поляризацией структура ионизации немного иная (рис.5). Вначале видно отсутствие преимущественного направления в расположении областей ионизации (рис.5,*a*). Поверхность достаточно равномерно ионизируется по всей окружности сечения. На следующей стадии при  $t = -33.5T_0$  заряженные состояния равномерно распределяются вдоль сечения. Если для линейной поляризации при  $t = -26T_0$  проволока имела области с зарядом около Z = 5.8, то на рис.5,*в* мы видим, что проволока в основном полностью ионизирована. Как и раньше, в конечном итоге проволока расширяется (рис.5,*г*).

#### 3.3. Электроны в пустоте

Ранее мы показали, что нанопроволока начинает ионизироваться с поверхности. Можно предположить, что электроны, удаляемые из атомов углерода, вытягиваются из проволоки в окружающие пустоты. Структура расположения этих электронов соответствует силовым линиям электрического поля. Так, например, они упорядочены в плоскости поляризации для случая линейно поляризованного пучка, а при облучении импульсом с круговой поляризацией высвобожденные электроны расположены по спирали вокруг проволоки с осью вдоль x. Чтобы увидеть периодичность указанных электронных структур, можно использовать сечения распределений относительных значений плотности тока  $j_y$  и  $j_z$ , показанные на рис.6.



Рис.4. Изображения распределения усредненного зарядового числа Z ионов углерода при  $t = -41T_0(a)$ ,  $-33.5T_0(b)$ ,  $-26T_0(b)$  и  $-18.5T_0(c)$  до того, как пик линейно поляризованного импульса достигнет поверхности. Белая область, окружающая проволоку, – пустое пространство. Цветовая шкала адаптирована так, чтобы сделать видимой разницу в зарядовых состояниях. Цветное изображение см. на сайте «Квантовой электроники» http://www.quantum-electron.ru.

4



Рис.5. Усредненное зарядовое число Z ионов углерода при  $t = -41T_0(a), -33.5T_0(b), -26T_0(b)$  и  $-18.5T_0(c)$  до того, как пик импульса, поляризованного по кругу, достигнет поверхности. Цветное изображение см. на сайте «Квантовой электроники» http://www.quantum-electron.ru.



Рис.6. Продольные сечения в плоскости xy компонент относительной плотности тока  $j_y/(en_{ct}c)$  и  $j_z/(en_{ct}c)$  через  $t = 4T_0$  после достижения поверхности пиком импульса с линейной (*a*) и круговой (*б*) поляризацией. Цветное изображение см. на сайте «Квантовой электроники» http://www.quantum-electron.ru.

Компоненты плотности тока  $j_y$  и  $j_z$  характеризуют поток электронов в плоскости, перпендикулярной оси проволоки. Из рис.6,*а* видно, что в промежутках между проволоками имеются токи с периодом следования в одну лазерную длину волны, которые движутся вверх и вниз вдоль оси поляризации.

Это хорошо заметно на картине распределения компоненты  $j_y$ , однако у компоненты  $j_z$  периодичность не так видна. С другой стороны, в случае круговой поляризации имеются токи, равномерные как по направлению y, так и по направлению z (сравни соответствующие распределения  $j_y$  и  $j_z$  на рис.6, $\delta$ ). Можно заметить, что для обеих поляризаций эти токи распространяются в окрестности объема проволоки, поскольку внутри нее нет видимых периодических структур.

## 4. Заключение

Изучена ионизация в решетках из углеродных нанопроволок, облучаемых лазером. Оказывается, что сильный лазерный импульс полностью ионизирует нанопроволоку за время, равное примерно тридцати периодам лазерного излучения. Показано, как проволока ионизируется вдоль своей оси и что импульс с круговой поляризацией обеспечивает несколько бо́льший ионизирующий эффект. Внешние слои нанопроволоки ионизируются первыми, причем структура ионизации определяется поляризацией лазерного излучения. Более того, мы показали, что в окружающем пространстве имеются периодические поперечные токи, переносящие электроны в пустоты между проволоками.

Для выяснения того, как на ионизацию влияют свойства проволоки, например диаметр, длина, периодичность и материал, требуются дальнейшие исследования. Большему пониманию процесса ионизации в нанопроволоках будет также способствовать изучение влияния изменений лазерных параметров, например интенсивности.

В.К. благодарит Джона Фармера (John Farmer) за полезный совет. Работа поддержана DFG TR18, EU FP7 EUCARD-2 и AFOSR (грант FA9560-14-10232).

- Nishikawa T., Nakano H., Oguri K., Uesugi N., Nakao M., Nishio K., Masuda H. *Appl. Phys. B*, 73, 185 (2001).
- Rajeev P.P., Ayyub P., Bagchi S., Kumar G.R. Opt. Lett., 29, 2662 (2004).
- Purvis M.A., Shlyaptsev V.N., Hollinger R., Bargsten C., Pukhov A., Prieto A., Wang Y., Luther B., Yin L., Wang S., Rocca J. *Nat. Photonics*, 7, 796 (2013).
- Dorchies F., Blasco F., Bonté C., Caillaud T., Fourment C., Peyrusse O. Phys. Rev. Lett., 100, 205002 (2008).
- Mondal S., Chakraborty I., Ahmad S., Carvalho D., Singh P., Lad A.D., Narayanan V., Ayyub P., Ravindra Kumar G., Zheng J., Sheng Z.M. *Phys. Rev. B*, 83, 035408 (2011).
- Gibbon P., Förster E. Plasma Phys. Control. Fusion, 38, 769 (1996).
- Zigler A., Palchan T., Bruner N., Schleifer E., Eisenmann S., Botton M., Henis Z., Pikuz S.A., Faenov A.Y. Jr, Gordon D., Sprangle P. *Phys. Rev. Lett.*, **106**, 134801 (2011).
- Ditmire T., Zweiback J., Yanovsky V.P., Cowan T.E., Hays G., Wharton K.B. *Nature*, **398**, 489 (1999).
- 9. Pukhov A. J. Plasma Phys., 61, 425 (1999).