Общая физика

УДК 530.145

Радиационная рекомбинация при облучении атомарных кластеров интенсивными фемтосекундными лазерными импульсами

В. П. Крайнов, А. В. Софронов
Московский физико-технический институт, г. Долгопрудный Московской обл., Россия

Предложен новый механизм генерации жесткого рентгеновского излучения (ЖРИ) при взаимодействии атомарных кластеров с интенсивными фемтосекундными лазерными импульсами. Электроны, вылетевшие из кластера в результате внешней ионизации, могут вновь попасть внутрь другого кластера, взаимодействуя с кулоновским полем положительно заряженного кластера, созданным внешней ионизацией. При переходе из непрерывного спектра в основное состояние в этом поле электроны испускают спонтанно фотоны с энергией в несколько килоэлектронвольт.

PACS: 03.75.-b

Введение

При взаимодействии атомарных кластеров, состоящих из нескольких тысяч атомов инертных газов (аргон, криптон, ксенон) с фемтосекундными лазерными импульсами интенсивностью порядка 10^{16} Вт/см^2, на переднем фронте лазерного импульса происходит многократная внутренняя ионизация атомов (как лазерным полем, так и образованными горячими электронами). Электроны быстро нагреваются с помощью механизма Брюнеля, при котором электрон вылетает из кластера под действием лазерного поля и примерно через половину лазерного периода возвращается обратно в кластер, но уже с энергией порядка пондеромоторной энергии F^2/ω^2, где F — амплитуда напряженности электрического поля лазерной волны; ω — ее частота.

Конкурирующим механизмом является также вынужденное обратное тормозное поглощение, при котором электрон приобретает энергию $F_{in}^2/2\omega^2$. Здесь F_{in} — напряженность электрического поля внутри кластера (ввиду малых размеров кластера по сравнению с длиной лазерной волны электрическое поле внутри кластера является однородным). Бóльшая часть лазерного импульса мала по сравнению с напряженностью F внешнего электрического поля лазерной волны из-за большой диэлектрической проницаемости (по модулю) кластера. Это наблюдается вследствие того, что плазменная частота на переднем фронте лазерного импульса значительно превышает частоту лазерного излучения. Однако в процесс расширения кластера (как правило, на задней части лазерного импульса длительностью 100—300 фс) лазерная частота становится близкой к частоте *Ми* (которая меньше плазменной частоты для сферического тела в $\sqrt{3}$ раз). В этом случае электрическое поле вследствие резонанса *Ми* во много раз превышает внешнее электрическое поле, приводя к интенсивному нагреву электронов в процессе вынужденного тормозного поглощения (при каждом столкновении с атомарным ионом во внешнем поле электрон может как поглотить фотон, так и излучить его, но вероятность поглощения несколько больше вероятности излучения, так что в среднем имеет место нагрев, а не охлаждение электрона). Горячий электрон, сталкиваясь с атомарными ионами, производит дальнейшую ионизацию их внешних оболочек, вырывая, в том числе, электроны и из внутренних оболочек. При последующем переходе электронов внешних оболочек на внутренние орбиты спонтанно испускаются фотоны большой энергии.

В данной работе предлагается другой механизм генерации ЖРИ, заключающийся в том, что горячие электроны, вылетев из кластера, могут захватиться кулоновским полем соседнего кластера, имеющего вследствие внешней ионизации большой положительный заряд. Величина последнего зависит от размеров кластера. Например, небольшие дейтериевые кластеры с радиусом порядка 2 нм в лазерном поле с интенсивностью порядка 10^{16} Вт/см^2 полностью превращаются в сферический шар, состоящий только из положительно заряженных дейтронов [1—2]. Радиус этого шара удваивается только через 30 фс. При переходе из непрерывного спектра в основное состояние в этой потенциальной кулоновской яме электрон испускает фотон высокой энергии, так как глубина потенциальной ямы составляет несколько килоэлектронвольт (в зависимости от параметров кластера и лазерного излучения). Цель работы — вычисление сечения такого процесса.

Сечение фоторекомбинации на кулоновском поле атомарного кластера

При внешней ионизации есть два варианта распределения свободных электронов, оставшихся в ионизованном кластере. В первом варианте они распределяются равномерно по всему кластеру, в то время как во втором подтягиваются к центру кластера, делая центральную область нейтральной, а на поверхности кластера остаются только положительно заряженные атомарные ионы. Обратимся к первому варианту, считая электроны достаточно горячими, вследствие чего они могут быстро перемещаться по всему объему ионизованного кластера.

Потенциальная энергия электрона в поле равномерно заряженного по объему кластера радиуса R имеет вид

$$U(r) = \begin{cases} -Z/r; & r > R; \\ \dfrac{Z}{R}\left(-\dfrac{3}{2} + \dfrac{r^2}{2R^2}\right); & r < R, \end{cases}$$

где Z — заряд кластера, вызванный внешней ионизацией кластера.

Используется атомная система единиц $e = \hbar = m_e = 1$, в этих единицах вычисляется и скорость света c = 137.

В нереалистическом пределе очень малого кластера $R << a_B / Z$ имеем $E = -Z^2/2$ как для чисто кулоновской задачи ($a_B = \hbar^2 / me^2$ — боровский радиус для атома водорода).

В реалистическом обратном пределе $R >> a_B / Z$ имеем потенциал сферически симметричного гармонического осциллятора с частотой $\omega_0 = \sqrt{Z / R^3}$, так что энергия основного состояния, отсчитанная от дна потенциальной ямы, равна

$$3\omega_0 / 2 = 1{,}5\sqrt{Z / R^3}.$$

Энергия, отсчитанная от нуля потенциала, приближенно равна

$$E \approx -3Z / 2R >> \sqrt{Z / R^3}.$$

Рассмотрим типичный пример большого атомарного кластера с радиусом R = 30 нм и концентрацией свободных электронов в нем $n = 2 \cdot 10^{22}$ см$^{-3}$. В таком кластере имеется всего $2{,}25 \cdot 10^6$ электронов. В лазерном поле будем считать, что приблизительно 5 % этих электронов вылетело наружу, следовательно, заряд кластера $Z = 10^5$. Частота осциллятора $\omega_0 = \sqrt{Z / R^3} =$ 0,64 эВ. Энергия основного состояния, отсчитанная от нуля потенциала, равна $|E| \approx 3Z/2R = 7{,}2$ кэВ.

Нормированная волновая функция основного состояния трехмерного гармонического осциллятора в этом случае равна

$$\psi(r) = \left(\frac{Z}{\pi^2 R^3}\right)^{3/8} \exp\left(-\sqrt{Z / R^3}\, r^2 / 2\right). \qquad (1)$$

Характерный радиус этого состояния равен

$$r_0 = \left(4R^3 / Z\right)^{1/4}.$$

Для рассмотренного выше примера он равен 0,50 нм. Длина волны фотона, испускаемого при фоторекомбинации, по порядку величины равна $4\pi c R / 3Z = 0{,}17$ нм, что меньше характерного радиуса основного состояния (и, тем более, меньше радиуса кластера), так что дипольное приближение для процессов ионизации и рекомбинации неприменимо.

Проще всего сначала вычислить сечение обратного процесса — фотоионизации, а затем применить принцип детального равновесия для нахождения сечения обратного процесса. Дифференциальное сечение фотоионизации запишем в виде

$$d\sigma_{ion} = \frac{v}{2\pi\omega c} |M_{fi}|^2 \, d\Omega, \qquad (2)$$

где v — скорость нерелятивистского электрона в непрерывном спектре;

$\omega = -E + v^2/2$ — частота фотона;

$v^2/2$ — кинетическая энергия электрона (она гораздо меньше потенциала ионизации E, хотя электроны могут вылетать из кластера с кинетическими энергиями порядка несколько килоэлектронвольт, но для таких электронов вероятность процессов рекомбинации экспоненциально мала).

Величина

$$M_{fi} = (\mathbf{ev}) \int \exp(-i\mathbf{vr} + i\mathbf{kr}) \psi d\mathbf{r} \text{ —} \qquad (3)$$

матричный элемент перехода, в котором конечное состояние электрона описывается плоской волной, т. е. волновой функцией $C\exp(i\mathbf{vr})$. Это применимо, так как в окрестности волновой функции основного состояния, откуда начинается перекрытие волновой функции состояния непрерывного спектра, электрический потенциал кластера представляет собой практически горизонтальную прямую. Дипольное приближение неприменимо в данном случае ввиду большой величины заряда кластера Z, поэтому нельзя разлагать exp(*i***kr**) в ряд Тейлора; **e** — вектор поляризации фотона; **k** — волновой вектор фотона, перпендикулярный вектору поляризации **e**, и $k = \omega / c$. Электроны, для которых импульсы фотона k и электрона в непрерывном спектре v имеют одинаковый порядок величины (в рассмотренном примере это соответствует энергиям электрона порядка 50 эВ), играют основную роль в процессах связанно-свободных переходов. Действительно, при больших энергиях электрона интеграл (3) экспоненциально мал из-за сильно осциллирующей подынтегральной функции.

Константа C в квазиклассическом приближении может быть записана в виде, учитывающем, что перекрытие начальной и конечной волновых функций электрона имеет место вблизи центра кластера, т. е.

$$C = \sqrt{\frac{p}{(2E)^{1/2}}}.$$

Угол между векторами **r** и (**k** – **v**) обозначим θ, а cosθ = x. Заменяя $d\mathbf{r} = 2\pi r^2 dr dx$, из (3) после интегрирования по углу θ получим

$$M_{fi} = \frac{4\pi C(\mathbf{ev})}{|\mathbf{k} - \mathbf{v}|} \int_0^\infty \left[\sin(|\mathbf{k} - \mathbf{v}| r)\right] \psi(r) r dr.$$

Вводя угол ϑ между векторами **k** и **v**, перепишем это выражение в виде

$$M_{fi} = \frac{4\pi C v \sin\vartheta \cos\varphi}{\sqrt{k^2 + v^2 - 2kv\cos\vartheta}} \times \int_0^\infty \left[\sin\left(\sqrt{k^2 + v^2 - 2kv\cos\vartheta} \cdot r\right)\right] \psi(r) r dr. \quad (4)$$

Подставив (1) в (4), вычислим этот радиальный интеграл

$$M_{fi} = \frac{4\pi^{1/4} v C \sin\vartheta \cos\varphi}{\sqrt{k^2 + v^2 - 2kv\cos\vartheta}} \left(\frac{Z}{R^3}\right)^{3/8} \times \int_0^\infty \left[\sin\left(\sqrt{k^2 + v^2 - 2kv\cos\vartheta} \cdot r\right)\right] \times \exp\left(-\sqrt{Z/R^3} r^2 / 2\right) r dr.$$

Ввиду четности подынтегральной функции перепишем интеграл в виде

$$M_{fi} = \frac{2\pi^{1/4} v C \sin\vartheta \cos\varphi}{\sqrt{k^2 + v^2 - 2kv\cos\vartheta}} \left(\frac{Z}{R^3}\right)^{3/8} \times \int_{-\infty}^\infty \left[\sin\left(\sqrt{k^2 + v^2 - 2kv\cos\vartheta} \cdot r\right)\right] \times \exp\left(-\sqrt{Z/R^3} r^2 / 2\right) r dr.$$

Обозначая для краткости $\sqrt{k^2 + v^2 - 2kv\cos\vartheta} = \beta$, перепишем интеграл в виде

$$M_{fi} = \frac{\pi^{1/4} v C \sin\vartheta \cos\varphi}{i\beta} \left(\frac{Z}{R^3}\right)^{3/8} \times \int_{-\infty}^\infty \exp\left(i\beta r - \sqrt{Z/R^3} r^2 / 2\right) r dr + c.c.$$

Преобразуем интеграл

$$I = \int_{-\infty}^\infty \exp\left(i\beta r - \sqrt{Z/R^3} r^2 / 2\right) r dr = \int_{-\infty}^\infty \exp\left[-\left(\left(Z/4R^3\right)^{1/4} r - i\beta\left(R^3/4Z\right)^{1/4}\right)^2\right] r dr \times \exp\left[-\beta^2 \left(R^3/4Z\right)^{1/2}\right].$$

Замена переменной интегрирования

$$\left(Z/4R^3\right)^{1/4} r - i\beta\left(R^3/4Z\right)^{1/4} = w$$

приводит указанный интеграл к виду

$$I = i\beta\sqrt{2\pi}\left(R^3/Z\right)^{3/4} \exp\left[-\beta^2\left(R^3/4Z\right)^{1/2}\right].$$

Таким образом, матричный элемент перехода имеет вид

$$M_{fi} = 2^{3/2}\pi^{3/4} C v \sin\vartheta \cos\varphi \left(R^3/Z\right)^{3/8} \times \exp\left[-\beta^2\left(R^3/4Z\right)^{1/2}\right].$$

Затем вычисляем дифференциальное сечение (2), интегрируя его по углам вылета фотоэлектрона, и полное сечение фотоионизации σ_{ion}. Интеграл по φ вычисляется элементарно.

Находим ($s = \cos\vartheta$):

$$\sigma_{ion} = \frac{8\pi^{3/2} R^{13/4} C}{3Z^{7/4} c} v^3 \times \exp\left[-2\left(k^2 + v^2\right)\left(R^3/4Z\right)^{1/2}\right] \times \int_{-1}^{1} \left(1 - s^2\right) \exp\left[4kvs\left(R^3/4Z\right)^{1/2}\right] ds. \quad (5)$$

Вычисляем оставшийся интеграл в (5) с учетом, что $k = \omega / c = 3Z / 2Rc$, так как вкладом энергии электрона можно пренебречь по сравнению с потенциалом ионизации:

$$J=\int_{-1}^{1}\left(1-s^2\right)\exp\left[3(ZR)^{1/2}vs/c\right]ds=$$

$$=\int_{-1}^{1}\exp\left[3(ZR)^{1/2}vs/c\right]\frac{2scds}{3(ZR)^{1/2}v}=$$

$$=\int_{-1}^{1}d\exp\left[3(ZR)^{1/2}vs/c\right]\frac{2sc^2}{9ZRv^2}=$$

$$=\frac{4c^2}{9ZRv^2}\cos h\left(3(ZR)^{1/2}v/c\right)-\frac{2c^2}{9ZRv^2}\times$$

$$\times\int_{-1}^{1}\exp\left[3(ZR)^{1/2}vs/c\right]ds=$$

$$=\frac{4c^2}{9ZRv^2}\cos h\left(3(ZR)^{1/2}v/c\right)-$$

$$-\frac{4c^3}{27(ZR)^{3/2}v^3}\sin h\left(3(ZR)^{1/2}v/c\right).$$

Итак,

$$\sigma_{ion}=\frac{32\pi^{3/2}R^{9/4}v^2c}{27Z^{11/4}E}\exp\left[-2\left(k^2+v^2\right)\sqrt{R^3/4Z}\right]\times$$

$$\times\left[\cos h\left(3\sqrt{ZR}v/c\right)-\frac{c}{3(ZR)^{1/2}v}\sin h\left(3\sqrt{ZR}v/c\right)\right].$$

Сечение фоторекомбинации как процесса, обратного фотоионизации, дается соотношением (56.15) из работы [3], т. е.

$$\sigma_{rec}=\frac{2\omega^2}{c^2v^2}\sigma_{ion},$$

или

$$\sigma_{rec}=16\left(\frac{\pi}{3}\right)^{3/2}\frac{(R)^{3/4}}{cZ^{5/4}}\exp\left(-\frac{9}{4c^2}\sqrt{\frac{Z^3}{R}}\right)\times$$

$$\times\exp\left[-v^2\sqrt{R^3/Z}\right]\times \qquad (6)$$

$$\times\left[\cos h\left(3\sqrt{ZR}v/c\right)-\frac{c}{3\sqrt{ZR}v}\sin h\left(3\sqrt{ZR}v/c\right)\right].$$

Оно обращается в нуль как при нулевой энергии начального электрона в непрерывном спектре ($v=0$), так и при бесконечной энергии.

Из (6) следует, что сечение имеет резкий максимум при импульсе фотона, равном начальному импульсу электрона. Величина этого максимума дается соотношением

$$\sigma_{rec}=8\left(\frac{\pi}{3}\right)^{3/2}\frac{(R)^{3/4}}{cZ^{5/4}}.$$

В приведенном выше примере при начальной энергии электрона 50 эВ максимальное значение сечения равно 10^{-21} см^2.

Заключение

Скорость фоторекомбинации для приведенного выше механизма может быть получена из сечения процесса путем умножения на скорость электрона и деленная на объем атомарного кластера. В приведенном выше примере скорость оказывается равной $5\cdot10^3$ с$^{-1}$. В то же время скорость фоторекомбинации таких электронов на атомарных ионах внутри кластера гораздо больше — для указанных выше параметров кластера и лазерного импульса она равна $3\cdot10^{11}$ с$^{-1}$. Отметим, что для фоторекомбинации на атомарных ионах дипольное приближение применимо с высокой точностью.

Хотя скорость для рассматриваемого в данной работе механизма весьма мала, но тем не менее эффект может наблюдаться, так как энергии фотонов сильно различаются. Именно механизм коллективной фоторекомбинации на ионизованном кластере, рассматриваемый в данной работе, приводит к гораздо более жестким фотонам (в рассматриваемом выше типичном примере она равна 7,2 кэВ), чем обычный механизм фоторекомбинации на атомарных ионах.

В работе [4] лазерными импульсами с интенсивностью выше 10^{17} Вт/см^2 и длительностью 40 фс облучались аргоновые кластеры. Спектрометр регистрировал жесткое рентгеновское излучение с энергиями фотонов от 2,9 до 4,3 кэВ. Наблюдаемые характеристические линии демонстрировали переходы в многократно ионизованных атомах аргона с зарядами до 16^+. Можно надеяться, что в будущих экспериментах будут наблюдаться также фотоны с более высокими энергиями несмотря на относительно небольшое число, механизм генерации которых описывается предлагаемым нами подходом.

Литература

1. *Krainov V. P., Smirnov M. B.*//Phys. Rep. 2002. V. 370. P. 237.

2. *Saalmann U., Siedschlag Ch., Rost J.-M.*//J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 2006. V. 39. P. R39.

3. *Берестецкий В. Б., Лифшиц Е. М., Питаевский Л. П.* Квантовая электродинамика. — М.: Наука, 1980.

4. *Dorchies F., Cailland T., Blasco F., Bonte C., Jouin H., Micheau S., Pons B., Stevefelt J.*//Phys. Rev. 2005. V. E 71. P. 066410.

Статья поступила в редакцию 11 июня 2008 г.

Radiation recombination at the irradiation of atomic clusters by intense femtosecond laser pulses

V. P. Krainov, A. V. Sofronov
Moscow Institute of Physics and Technology, Dolgoprudny, Moscow Region, Russia

New mechanism is suggested for generation of hard x-ray radiation at the interaction of atomic clusters with intense femtosecond laser pulses. Electrons which are ejected from the cluster due to outer ionization, can get again inside the neighboring cluster interacting with the Coulomb field of positively charged cluster produced by outer ionization. During the transition from continuum to the ground state in this Coulomb field, electrons emit spontaneously photons with the energy of several keV.

PACS: 03.75.-b

УДК 536.5

Расчет температурного поля трехслойного термоэлектрического преобразователя, проницаемого газом

Г. С. Хагба
Абхазский государственный университет, г. Сухум, Абхазия

Проведено исследование трехслойного термоэлектрического преобразователя (ТЭП) из сплавов SiGe. Рассмотрена математическая модель ТЭП, которая дает возможность учитывать влияние теплообмена на тепловыделяющие и теплопоглощающие спаи ветви термоэлемента. Получено распределение температуры в поперечном сечении ТЭП. Определены распределения температур для термоэлектрического материала $T_3(y)$ и коммутационных пластин $T_1(y)$, $T_2(y)$.

PACS: 02.90.+p

Введение

В математической теории ТЭП в общем случае должны быть учтены условия тепло- и массообмена в источнике и стоке теплоты, теплоперенос в термобатарее, представляющей собой многослойную стенку, электроперенос в цепи термобатарея—нагрузка—внешний источник, а также условия сопряжения всех элементов устройства. В таком виде математическая модель ТЭП достаточно громоздка и весьма специфична, т. е. удовлетворяет лишь конкретному сочетанию узлов ТЭП.

Для получения более универсальных методов расчета функции источника и стока теплоты выражают через соответствующие граничные условия, которые играют роль условий однозначности для уравнения теплопроводности термобатарей. Исходя из общих представлений о процессах, происходящих в ТЭП, возможные варианты сочетаний режимных и геометрических параметров термоэлектрических устройств можно разделить на две группы, каждая из которых соответствует различным теплофизическим моделям изучаемого объекта. В одной из групп термоэлемент играет роль термического сопротивления, включенного между источником и стоком теплоты (т.н. классическая схема), в другой — роль интенсификатора теплообмена (схема с боковым теплообменом — термоэлемент типа "ребро", проницаемые и рекуперативные слои). Соответственно, взаимосвязь выходных и конструктивных параметров термоэлемента будет существенно различна.

Таким образом, задача разделяется на внешнюю (расчет внешних теплообменных устройств) и внутреннюю (расчет собственной термобатареи). Для получения такого решения рассматриваемой задачи необходимо применять численные методы решения систем обыкновенных дифференциальных уравнений [1, 2].

Использование одномерных моделей проницаемого термоэлемента позволяет проводить расчет лишь в тех случаях, когда его термическое со-