НАНОФИЗИКА
И НАНОЭЛЕКТРОНИКА

Труды XVII Международного симпозиума

11–15 марта 2013 г., Нижний Новгород

Том 1: секции 1, 2, 4, 5

Нижний Новгород
2013

Влияние нестационарного тепловыделения в кристаллах на спектральные характеристики импульсов при дифракции излучения рентгеновского лазера на свободных электронах

В.А. Бушуев

Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, Москва

e-mail: vabushuev@yandex.ru

Высокая яркость излучения рентгеновских лазеров на свободных электронах (РЛСЭ), которая на 8-10 порядков превышает яркость источников синхротронного излучения 3-го поколения [1], приводит к существенному возрастанию тепловой нагрузки на различные элементы рентгеновской оптики, в том числе и на совершенные кристаллы в системах монохроматизации и в линиях задержки. Неоднородное в пространстве и нестационарное во времени тепловыделение в кристаллах негативным образом влияет на интенсивность дифракции мощных импульсов РЛСЭ [2].

В настоящем докладе более детально, чем в [2], проведен учет граничных условий при решении уравнения теплопроводности, а также проведен расчет неоднородного и нестационарного температурного поля и поля деформаций в кристалле. Основное внимание уделено анализу спектрально-временных характеристик и когерентных свойств отраженных и прошедших импульсов.

Излучение Европейского РЛСЭ представляет собой серии импульсов с длиной волны $\lambda \sim 0.05$-0.16 нм, расходимостью $\Delta\vartheta_p \sim 1$-3 мкрад, длительностью отдельных импульсов $\tau_p \sim 10$-100 фс и энергией $Q_p = \hbar\omega N$, где $N \sim (0.1 \div 20)\cdot 10^{11}$– число фотонов в импульсе [1]. Импульсы сгруппированы в пачки с длительностью $\tau_b \approx 0.6$ мс и частотой повторения 10 Гц, число импульсов в пачке $n_b \approx 2700$. Излучение РЛСЭ характеризуются практически полной пространственной когерентностью и крайне низкой временно́й когерентностью с временем $\tau_c \sim 0.1$-0.3 фс $<< \tau_p$, что приводит к достаточно большой спектральной ширине $\Delta E/E \sim 10^{-3}$.

Пространственно-временно́е распределение температуры $T(\mathbf{r}, t)$ определяется из параболического уравнения теплопроводности

$$c_p\rho(\partial T/\partial t) = \mathrm{div}(\kappa\cdot\mathrm{grad}T) - s(T - T_s) + F, \qquad (1)$$

где c_p – удельная теплоемкость, ρ - плотность, κ - теплопроводность, s – коэффициент теплообмена с окружающей средой с температурой T_s, $F(\mathbf{r}, t)$ – плотность тепловых источников, $\mathbf{r} = (x, y)$ – координата на поверхности кристалла. Температура в (1) и ниже отсчитывается от начальной температуры $T_0(x, y, 0) = \mathrm{const}$. Рассмотрим кристалл в виде пластинки с размерами $L\times L\times l$, где l – толщина кристалла. Доля поглощенной в кристалле энергии $f_{\mathrm{abs}} = 1 - \exp(-\mu l/\gamma_0)$, где μ – коэффициент поглощения, $\gamma_0 = \cos\theta$, θ - угол падения импульсов. Для импульсов с гауссовой формой плотность тепловых источников

$F(\mathbf{r}, t) = f_{\mathrm{abs}}(\gamma_0 Q_p/\pi l r_1^2)g_x g_y f(t)$, где

$$g_x = \exp(-x^2/r_x^2),\quad g_y = \exp(-y^2/r_y^2), \qquad (2)$$

$$f(t) = (1/\pi^{1/2}\tau_0)\sum_{j=1}^{p}\exp[-(t-t_j)^2/\tau_0^2]. \qquad (3)$$

Здесь $r_x = r_1/\gamma_0$, $r_y = r_1$, t_j - моменты времени падения импульсов на кристалл. Число импульсов p определяется условием $t < t_p$. Поперечный радиус импульса r_1 и его длительность τ_0 связаны с полным размером r_p и длительностью τ_p на полувысоте (FWHM) соотношениями $r_1 \approx 0.6r_p$, $\tau_0 \approx 0.6\tau_p$. На расстоянии z от РЛСЭ $r_p = r_s M$, где r_s – полный размер импульса на выходе из РЛСЭ, $M = [(1 + \alpha_s D)^2 + D^2]^{1/2}$, $D = \lambda z/(2.26 r_s^2)$, α_s – параметр, характеризующий искривление волнового фронта импульса в плоскости $z = 0$ [3, 4].

Решение неоднородного уравнение (1) будем искать в приближении постоянных коэффициентов с начальным условием $T(x, y, 0) = 0$ и граничными условиями $T(\pm L/2, \pm L/2, 0) = 0$; $s = 0$. В итоге с учетом (2) и (3) получим следующее выражение для температуры кристалла:

$$T(x,y,t) = \Delta T_1 \sum_{j=1}^{p}\sum_{m=1}^{\infty}\sum_{n=1}^{\infty} Q_{mn}(t-t_j)S_{mn}(x,y), \qquad (4)$$

где

$$Q_{mn}(t-t_j) = \exp[-a^2(q_m^2 + q_n^2)(t-t_j)], \qquad (5)$$

$$S_{mn}(x,y) = g_{xm}g_{yn}\cos(q_m x)\cos(q_n y), \qquad (6)$$

$$g_{im} = (2/L)\int_{-L/2}^{L/2} g_i(\xi)\cos(q_m\xi)d\xi,\quad i = x, y. \qquad (7)$$

Здесь $\Delta T_1 = f_{\mathrm{abs}}\gamma_0 Q_p/(\pi c_p\rho l r_1^2)$ - температура нагрева в точке $x, y = 0$ под действием одного импульса, $a^2 = \kappa/c_p\rho$ - коэффициент температуропроводности, $q_k = \pi(2k - 1)/L$, $k = m, n$. При выводе (4) использовано условие $\tau_0 << \tau_T$, где $\tau_T = r_1^2 c_p\rho/4\kappa$ - характерное время расплывания температуры из-за теплообмена (приближение δ-импульсов).

Интенсивности R- и T-импульсов [2]

$$I_C(\mathbf{r},t) = I_0(\mathbf{r},t)\int_{-\infty}^{\infty} G(\Omega)\left|C(\alpha)\right|^2 d\Omega, \qquad (10)$$

где $C(\alpha) = R, T$ – амплитудные коэффициенты дифракционного отражения и прохождения, $\alpha = [k^2 - (\mathbf{k} + \mathbf{h})^2]/k^2$, $I_0(\mathbf{r}, t)$ - интенсивность падающего излучения, $G(\Omega)$ - спектральная плотность импульсов.

Область “сильного” дифракционного отражения определяется условием $|\alpha| \le 2|\chi_h|$, где χ_h – фурье-компонента поляризуемости кристалла. Так как из-за линейного расширения межплоскостные расстояния зависят от температуры $T(\mathbf{r}, t)$, то α является функцией координат и времени, а также зависит от угловой отстройки $\Delta\theta = \theta - \theta_B$, от частоты $\Omega = \omega - \omega_0$ в энергетическом спектре импульса и от его угловой расходимости q/k_0:

$$\alpha(\mathbf{r}, t) = 2\sin 2\theta_B[\Delta\theta + (\Omega/\omega_0 + \alpha_T T)\mathrm{tg}\theta_B - q/k_0\gamma_0]. \quad (8)$$

Так как $\Delta\theta_p << q/k_0$, то для центральной частоты ω_0 условие эффективной дифракции имеет вид $\Delta T \le \Delta T_c$, где $\Delta T = T(0, 0, t) - T(0.5r_p/\gamma_0, 0.5r_p, t)$, $\Delta T_c = \Delta\theta_B \mathrm{ctg}\theta_B/2\alpha_T$ – критическая температура, $\Delta\theta_B$ – ширина брэгговского отражения, α_T – коэффициент линейного расширения.

Расчеты проводились для симметричного брэгговского отражение (400) от кристалла алмаза типа IIa ($\lambda_0 = 0.15$ нм, $\theta_B = 57.451^0$, $\Delta\theta_B = 11.89$ мкрад, $\mu = 18.57$ см$^{-1}$, $l = 100$ мкм, $L = 5$ мм). Резкая зависимость α_T, c_p и κ от температуры, а также зависимость размера импульса r_p от расстояния z приводит к чрезвычайно большому разбросу величин ΔT_c, ΔT_1 и τ_T (см. таблицы 1 и 2).

Таблица 1

Температурный коэффициент линейного расширения $\alpha_T \cdot 10^6$, удельная теплоемкость c_p (Дж·кг$^{-1}$·К$^{-1}$), теплопроводность алмаза типа IIa κ (Вт·м$^{-1}$·К$^{-1}$) [5] и критическая температура ΔT_c в зависимости от температуры.

T, К	50	100	150	200	300
α_T, К$^{-1}$	00.4	0.05	0.25	0.45	1.02
c_p	5.0	29	91	205	580
κ	9000	10000	6060	4000	2000
ΔT_c	948	75.9	15.2	8.4	3.8

Таблица 2

Температура нагрева ΔT_1 под влиянием одного импульса и характерное время остывания τ_T при $z_1 = 100$ м ($r_p = 300$ мкм) и $z_2 = 500$ м ($r_p = 1400$ мкм). Энергия импульса $Q_p = 80$ мкДж ($N = 0.6 \cdot 10^{11}$).

T, К	50	100	150	200	300
ΔT_1 (z_1)	73.4$^{*)}$	12.7	4.0	1.8	0.7
τ_T (z_1)	0.016	0.083	0.43	1.47	7.62
ΔT_1 (z_2)	3.29	0.57	0.18	0.08	0.03
τ_T (z_2)	0.36	1.86	9.6	32.8	169.6

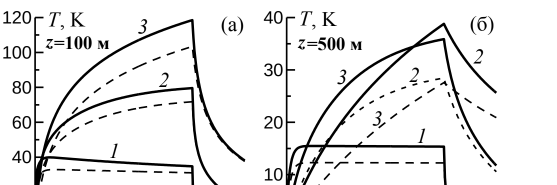

Рис. 1. Зависимость температуры кристалла в максимуме импульса ($x = y = 0$, сплошные кривые) и на его краю ($x = 0$, $y = 0.5r_p$, штриховые кривые) при z_1 (а), z_2 (б) и начальных температурах $T_0 = 100$ (*1*), 200 (*2*) и 300 К (*3*)

Из рис. 1 видно, что наименьший нагрев кристалла происходит при начальной температуре $T_0 = 100$ К. Это вызвано малостью времен теплообмена τ_T (см. табл. 2), сравнимых с интервалом $\Delta t_p = 0.22$ мкс между импульсами в пачке. Более того, только в этом случае следует ожидать высокую эффективность дифракции, так как здесь выполняется условие $\Delta T \le \Delta T_c$ и, следовательно, в спектральном интервале $\Delta E/E \approx \Delta\theta_B \mathrm{ctg}\theta_B \approx 8\times10^{-6}$ в отражении участвует практически вся освещаемая падающими импульсами поверхность кристалла.

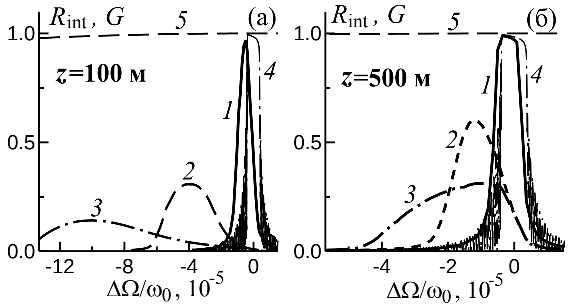

Рис. 2. Интегральный коэффициент отражения R_{int} при начальных температурах кристалла $T_0 = 100$ (*1*), 200 (*2*) и 300 К (*3*) на расстояниях $z = 100$ м (а) и $z = 500$ м (б) от РЛСЭ, *4* – коэффициент отражения от идеального кристалла, *5* – спектр падающих импульсов $G(\Omega)$ с шириной $\Delta\Omega_c = 2/\tau_c$, где $\tau_c \approx 0.2$ фс – время когерентности

Наличие неоднородного температурного поля $T(x, y, t)$ приводит к уменьшению интегрального (по x, y и $t < \tau_b$) спектрального коэффициента отражения, к его уширению, асимметрии и к смещению максимума в отрицательную область спектра (рис. 2). С уменьшением температур T_0 и ΔT_1 (например, за счет уменьшения энергии импульсов Q_p) коэффициенты отражения и прохождения приближаются к таковым для идеального кристалла. В режиме одиночных импульсов с $\tau_p \sim 10$ фс и частотой 120 Гц это позволило реализовать процедуру self-seeding для повышения в 40-50 раз степени временной когерентности импульсов на Linac Coherent Light Source (LCLS) в Стенфорде [6].

Таким образом, в настоящей работе показано, что при использовании тонких кристаллов синтетического алмаза (50-150 мкм) с низкой начальной температурой (≈100-150 К) и с достаточно малой энергией в импульсе (≤100 мкДж), т.е. зарядом банчей ≤0.02 нК, спектральная ширина дифрагированных импульсов может быть сравнима с шириной дифракционного отражения от совершенного однородного кристалла.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (гранты № 12-02-00924, № 13-02-00760) и BMBF Project 05K10CHG.

1. Tschentscher Th., XFEL, EU TN-2011-001, Hamburg, Germany (2011).
2. Бушуев В.А., Изв. РАН. Сер. физ., **77**, 19 (2013).
3. Bushuev V.A., Samoylova L., Nucl. Instrum. Methods A., **635**, S19 (2011).
4. Бушуев В.А., Самойлова Л., Кристаллография, **56**, 876 (2011).
5. Новиков Н.В., Кочержинский Ю.А., Шульман Л.А. и др. Физические свойства алмаза. Справочник, Киев: Наукова думка, 1987.
6. Amann J., Berg W., Blank V. et al., Nature Photonics, 12 August 2012, DOI:10.1038/NPHOTON.2012.180.