

# Atomare Cluster - Nanolabore für ultraschnelle Licht-Materie Physik

## Simulation korrelierter Elektronen- und Ionendynamik atomarer Cluster in intensiven Femtosekunden XUV-Laserfeldern

C. Peltz, T. Fennel, Institut für Physik, Universität Rostock

### Kurzgefasst

- Atomare Cluster in intensivem Laserlicht wandeln sich blitzschnell in ein heißes Nanoplasma aus hochgeladenen Ionen und delokalisierten Elektronen
- Ein grundlegendes Verständnis der ultraschnellen Elektronen- und Ionendynamik in Nanoplasmen unter Einwirkung intensiver XUV Pulse ist von großer Bedeutung für die Entwicklung neuer optischer Kontroll- und Diagnoseverfahren für ultraschnelle elektronische Prozesse
- Das Projekt zielt auf die Erfassung der korrelierten Plasmadynamik mittels einer atomistischen Beschreibung der Femtosekunden-Dynamik im Nanoplasma mit Hilfe semiklassischer molekular-dynamischer Simulationen

Femtosekunden-Röntgenlichtpulse von Freielektronen-Lasern eröffnen vielfältige neue Möglichkeiten zur Untersuchung struktureller und dynamischer Eigenschaften von Materie. Diese Methoden beinhalten insbesondere die ultraschnelle Einzelschussbeugung an Objekten mit einer räumlichen Auflösung bis in den Bereich der atomaren Struktur, z.B. von Nanoteilchen oder Biomolekülen. Neben diesen praktischen Aspekten ist die Licht-Materie-Wechselwirkung in intensivem extrem ultraviolettem (XUV) und Röntgenlicht vor allem auch aus fundamentaler Sicht interessant. Bei Anregung mit XUV-Laserpulsen zeigen sich fundamentale Unterschiede in der Ionisations- und Heizungsdynamik gegenüber dem infraroten/optischen Regime, bei dem Feldionisationsprozesse die Entstehung eines Nanoplasmas auslösen und inverse Bremsstrahlung sowie resonante Anregung des Elektronenplasmas maßgeblich zum Energieeintrag in das System beitragen. Demgegenüber wird im XUV-Regime die Nanoplasma-Entstehung durch Photonenabsorption initiiert und kollisionsgetriebene Heizungseffekte können aufgrund des geringen ponderomotiven Potentials oft vernachlässigt werden. Zur Untersuchung der im dichten Medium wirksamen kollektiven Prozesse und Korrelationseffekte stellen atomare Cluster ideale Nanolabore dar, da prinzipiell alle Emissionskanäle, wie Ionen, Elektronen und Strahlung im Experiment messbar sind (Abb. 1). Im Gegenzug

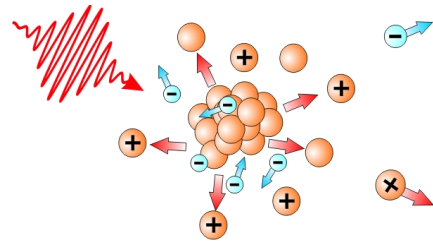


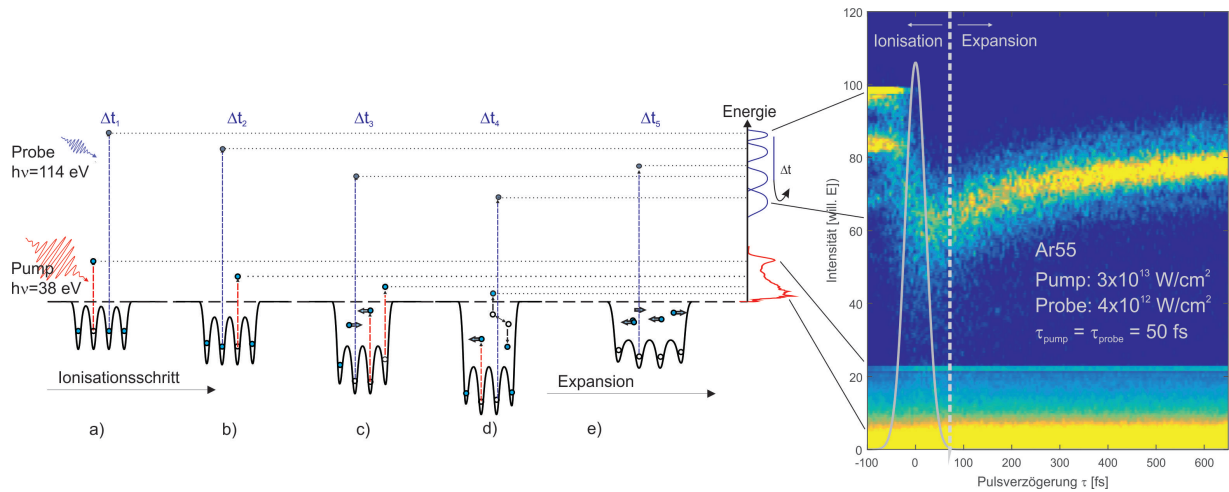
Abbildung 1: Cluster in intensivem Laserlicht.

ist die theoretische Beschreibung aufgrund der endlichen Teilchenzahl oft wesentlich einfacher als für den Festkörper oder eine Oberfläche.

Im vorliegenden Projekt steht die mikroskopische Beschreibung von Edelgasclustern in intensiven ultrakurzen XUV-Laserpulsen mit Hilfe molekular-dynamischer Simulationen im Fokus. Kernziele sind die zeitabhängige Beschreibung der Ionisations-, Relaxations- und Expansionsdynamik des Vielteilchensystems unter Einbeziehung von Rekombinationsprozessen [1] und die Vorhersage von Emissionsspektren [2] zum direkten Vergleich mit aktuellen Experimenten.

Durch die derzeit rasante Weiterentwicklung der technischen Möglichkeiten in Laser-Cluster-Experimenten sind mittlerweile Observablen experimentell zugänglich, die noch vor kurzem nur der Theorie vorbehalten waren. Zentrale Punkte sind hierbei Einzelschussstudien, die die Charakterisierung einzelner Cluster unter paralleler Aufnahme von Fragmenten und Streubildern ermöglichen. Damit wird ein neues Tor zur Analyse der Femtosekunden-Plasmadynamik in starken Laserfeldern geöffnet, das eine bislang unerreichte Qualität der Analyse und den detaillierten Vergleich mit theoretischen Arbeiten ermöglicht. So konnte beispielsweise gezeigt werden, dass die Elektron-Ion-Rekombination als eine bislang nicht beachtete Quelle latenter Wärme fungiert, die die Explosion der Clusterschale extrem beschleunigen kann, wobei die Interpretation der experimentellen Daten maßgeblich auf unseren HLRN Resultaten beruht [3].

In einer aktuellen experimentellen Studie an mittelgroßen Edelgasclustern unter XUV-IR Anregung konnte die Möglichkeit der extrem genauen Kontrolle der IR-getriebenen Ionisationslawine demonstriert werden. Dabei photoionisiert ein erster XUV-Laserpuls nur wenige Atome im Cluster und zündet ein sehr dünnes Nanoplasma mit wenigen freibeweglichen Elektronen. Diese können durch einen zweiten überlagerten IR-Laserpuls kontinuierlich geheizt



**Abbildung 2:** Links: Schematische Darstellung des Nanoplasma-Oszilloskops. Die roten vertikalen Pfeile entsprechen Elektronenemissionsprozessen durch den Pump-Puls, infolgedessen sich die Potentiallandschaft des Clusters stark ändert, siehe Prozesse (a-e). Der Probepuls mit höherer Photonenenergie führt ebenso zur Emission einzelner Elektronen, deren Energie stark vom Pulsabstand, respektive vom Clusterpotential zum diesem Zeitpunkt abhängen. Rechts: Bei Variation des Pulsabstandes bildet der Verlauf des Elektronenspektrums folglich direkt die zeitliche Entwicklung des Clusterpotentials ab.

werden und durch sekundäre Stoßionisationsprozesse eine Ionisationslawine auslösen. Unsere Simulationen konnten belegen, dass die IR-getriebene Ionisationslawine weit unterhalb der Tunnelschwelle gestartet werden kann [4]. Im Fokus der geplanten weiterführenden Studien stehen die daraus resultierenden Möglichkeiten der raumzeitlichen Kontrolle von XUV-IR Anregungen, insbesondere im Hinblick auf mögliche Anwendungen im Bereich der Laser-Materialbearbeitung.

Frühere Arbeiten haben gezeigt, dass im Raumladungspotential laserangeregter Cluster wichtige Informationen über die Anregung und Relaxation codiert sind. Bei Pump-Probe-Anregungen mit zwei XUV-Laserpulsen unterschiedlicher Photonenenergie spiegelt das Energiespektrum der im Probepuls photoemittierten Elektronen in erster Näherung direkt die aktuelle Tiefe des transienten Clusterpotentials wider, die so direkt mit dem Pulsabstand beider Laserpulse abgefragt werden kann, siehe Abb. 2 links. In der frühen Ionisationsphase ist zu erwarten, dass sich die sequentielle Aufladung des Clusters (Multistep-Ionisation) in einem raschen Absinken des Elektronenspektrums vom Probepuls widerspiegelt, siehe Abb. 2 rechts. In der später einsetzenden Expansionsphase führt die Ionenbewegung zur Zerstörung des Nanoteilchens und zur stetigen Abflachung des Clusterpotentials, was eine ansteigende mittlere kinetische Energie emittierten Elektronen bewirkt. Diese als Nanoplasma Oszilloskop bezeichnete Messmethode verspricht den ersten direkten Nachweis der Zeitentwicklung des Clusterpotentials und wurde kürzlich am FERMI Freie-Elektronen-Laser in Trieste einem ersten Test unterzogen. Die theoretische Begleitung dieser experimentellen Stu-

dien ist eine Aufgabe dieses Projektes.

### WWW

<http://www.physik.uni-rostock.de/clustertheorie/>

### Weitere Informationen

- [1] M. Arbeiter, C. Peltz, T. Fennel, *Phys. Rev. A* **89**, 043428 (2014). doi:10.1103/PhysRevA.89.043428
- [2] B. Schütte, C. Peltz, D.R. Austin, C. Strüber, P. Ye, A. Rouzée, M. J. J. Vrakking, N. Golubev, A.I. Kuleff, T. Fennel, J.P. Marangos *Phys. Rev. Lett* **121**, 063202 (2018). doi:10.1103/PhysRevLett.121.063202
- [3] D. Rupp, L. Flückiger, M. Adolph, T. Gorkhover, M. Krikunova, M. Müller, J.-P. Müller, T. Oelze, Y. Ovcharenko, M. Sauppe, B. Röben, S. Schorb, D. Wolter, R. Mitzner, M. Wöstmann, S. Roling, M. Harmand, R. Treusch, M. Arbeiter, T. Fennel, C. Bostedt, T. Möller, *Phys. Rev. Lett* **117**, 153401 (2016). doi: 10.1103/PhysRevLett.117.153401
- [4] B. Schütte, M. Arbeiter, A. Mermillod-Blondin, M. J. J. Vrakking, A. Rouzée, T. Fennel, *Phys. Rev. Lett* **116**, 033001 (2016). doi: 10.1103/PhysRevLett.116.033001

### Förderung

BMBF Projekt "Nanoteilchenstrukt", DFG Heisenbergstipendium "Attosekundenkontrolle der Elektrodynamik in finiten Systemen und ihre dynamische Charakterisierung mittels Röntgenstreuung"