

Wechselwirkung intensiver Laserpulse mit dichten Plasmen – Ultrakurzzeitkinetik und Diagnostik

Dissertation
zur
Erlangung des akademischen Grades
doctor rerum naturalium (Dr. rer. nat.)
der Mathematisch-Naturwissenschaftlichen Fakultät
der Universität Rostock

vorgelegt von
Philipp Sperling
Rostock, den 13. Juni 2013

Datum der Verteidigung: 29. April 2013

Gutachter: Prof. Dr. R. Redmer, Universität Rostock
Dr. T. Tschentscher, European XFEL GmbH

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	5
1.1	Grundlagen der Plasmaphysik	6
1.1.1	Warme und heie, dichte Materie und Plasmaparameter	6
1.1.2	Abschirmung	7
1.1.3	Ionisation	8
1.2	Thomsonstreuung	10
1.2.1	Grundlagen	11
1.2.2	Experimente	16
1.3	berblick zu laser-induzierten Plasmen	18
1.4	Ziel der Arbeit	22
2	Laser-Materie-Wechselwirkung	24
2.1	Dielektrische Funktion	24
2.1.1	Transversale dielektrische Funktion	27
2.1.2	Longitudinale dielektrische Funktion	30
2.1.3	Longitudinale dielektrische Funktion mit Wechselwirkungen	35
2.1.4	Wechselwirkungsanteil in der longitudinalen dielektrischen Funktion: Stofrequenz	36
2.2	Thomsonstreuung	39
2.2.1	Strukturfaktor der freien Elektronen	41
2.2.2	Strukturfaktor der gebundenen Elektronen	41
2.2.3	Strukturfaktor der ionisierenden Elektronen	43
2.2.4	Diagnostik mittels Thomsonstreuung	44
3	Beschreibung laser-induzierter Plasmen	48
3.1	Das mikroskopische Bild	48
3.1.1	Mikroskopisches Bild und Verteilungsfunktionen	48
3.1.2	Kinetische Boltzmann-Gleichung	51
3.1.3	Mikroskopische Beschreibung eines laser-induzierten Plasmas	54
3.1.4	Mikroskopische Beschreibung von Ionisationsprozessen	57
3.2	Vom mikroskopischen Bild zum hydrodynamischen Bild	60
3.2.1	Hydrodynamische Gleichungen	60
3.2.2	Vom mikroskopischen Bild zum makroskopischen Strahlungstransport	67
3.2.3	Hydrodynamik eines Plasmas	70
3.2.4	Ionisationsprozesse in der Hydrodynamik	72
3.2.5	Absorptionseffekt in der Hydrodynamik	74
3.2.6	Zustandsgleichung	76
4	Plasmadiagnostik von dichten Wasserstofftropfen	77
4.1	Ultrakurzzeitkinetik von laser-induzierten Wasserstofftropfen	77
4.2	Kurzzeitkinetik von laser-induzierten Wasserstofftropfen	82
4.3	Thomsonstreuung an laser-induzierten Wasserstofftropfen	85
4.4	Bestimmung der Relaxationszeit	87

5	Plasmadiagnostik von dichten Heliumtropfen	89
5.1	Ultrakurzzeitkinetik von laser-induzierten Heliumtropfen	89
5.2	Thomsonstreuung an laser-induzierten Heliumtropfen	92
6	Plasmadiagnostik von dichten Kohlenstofffolien	96
6.1	Ultrakurzzeitkinetik von laser-induzierten Kohlenstofffolien	96
6.2	Thomsonstreuung an laser-induzierten Kohlenstofffolien	101
7	Zusammenfassung und Ausblick	104
7.1	Zusammenfassung	104
7.2	Ausblick	105
	Literatur	106

1 Einleitung

Im Bereich der dichten Plasmen wird in dieser Arbeit speziell die warme und heie, dichte Materie untersucht, die durch Elektronendichten im Bereich von Festkrperdichten und Temperaturen von einigen Elektronenvolt (im Bereich der Fermitemperatur) im Fall von warmer Materie und einigen 100 Elektronenvolt (oberhalb der Fermitemperatur) im Fall von heier Materie [1, 2] gekennzeichnet ist. Diese Materie ist von fundamentalem Interesse fr eine Vielzahl physikalischer Anwendungen, unter anderem zum Verstndnis von Planeten- und Sternenninneren in der Astrophysik [3–6] und fr die Trgheitsfusion [7, 8]. Durch die diagnostischen Methoden der Spektrallinien- oder der Bremsstrahlungsuntersuchung, aber auch durch die Methode der Thomsonstreuung von Rntgenstrahlen kann solche Materie untersucht werden. In der Methode der Thomsonstreuung liegt speziell in der Durchdringung und der daraus resultierenden Auflsung des Inneren der Materie ein Vorteil gegenber den anderen Methoden. Diese Methode wurde anfangs aufgrund des Fehlens von intensiver Rntgenstrahlung nur auf dnne Materie [9, 10], spter auch auf Halbleiter und Metalle [11–13] angewendet. Heute wird die Methode der Thomsonstreuung von Rntgenstrahlen in zahlreichen Experimenten an warmer und dichter Materie genutzt [14–25], wobei bisher vorwiegend homogene Plasmen betrachtet wurden, da die verwendeten Rntgenquellen Pulsdauern im Nanosekundenbereich aufweisen, in denen das erzeugte Plasma durch Transporteffekte homogen wird.

Die Entwicklung und Inbetriebnahme von Freie Elektronen Lasern (FEL), wie die Linac Coherent Light Source (LCLS), Stanford [26], der Free-electron-LASer Hamburg (FLASH) [27] oder in Zukunft der European X-ray Free-Electron-Laser (XFEL), Hamburg [28], erlaubt aufgrund ihrer kurzen Pulsdauern seit einigen Jahren die Anwendung der Thomsonstreuung auch auf Beprobung von Prozessen auf ultrakurzen Zeitskalen im Bereich von einigen 10 Femtosekunden [29, 30] und wurde in verschiedenen theoretischen Arbeiten untersucht [31, 32]. Daher ist seither die Untersuchung der Licht-Materie-Wechselwirkung mit Hilfe von Pump-Probe-Experimenten, mit einem optischen Laser zur Plasmaerzeugung und einem FEL zur Plasmadiagnostik, von Interesse. In diesen Experimenten kann der Prozess der Wechselwirkung von Laserpulsen mit Plasmen durch die Methode der Thomsonstreuung dynamisch diagnostiziert werden [29], wodurch die Ultrakurzzeitkinetik dieses Prozesses aufgelst wird. Fr die Simulation solcher Pump-Probe-Experimente mssen Methoden zur Beschreibung der Laser-Materie-Wechselwirkung [33–35] mit der Berechnung von Thomsonstreuenspektren [15, 36, 37] kombiniert werden, was bereits in [38] begonnen und im Rahmen dieser Arbeit auf die Wechselwirkung intensiver optischer Laserpulse mit dichten Plasmen ausgeweitet wurde. Aufbauend auf Simulationen der Licht-Materie-Wechselwirkung, wie particle-in-cell [39, 40] und strahlungs-hydrodynamischen Simulationen [41, 42], wird die Thomsonstreuung ber die Born-Mermin-Approximation (BMA) [43, 44] aus den simulierten, inhomogenen Dichte- und Temperaturprofilen berechnet und untersucht. In dieser Arbeit werden dazu Pump-Probe-Experimente an Wasserstoff- und Heliumtropfen sowie Kohlenstofffolien simuliert und die resultierenden Thomsonstreuenspektren berechnet. Damit kann die Licht-Materie-Wechselwirkung und ihre Diagnostik auf ultrakurzen Zeitskalen mit den in dieser Arbeit entwickelten Methoden simuliert und beschrieben werden.

In diesem Kapitel werden die Grundlagen fr das Verstndnis der Licht-Materie-Wechselwirkung und der Thomsonstreuung gelegt. Dazu wird im ersten Abschnitt die warme und heie, dichte Materie und ihre Eigenschaften eingefhrt, um anschlieend die

Thomsonstreuung an solcher Materie zu beschreiben. Danach wird die Licht-Materie-Wechselwirkung zur Erzeugung warmer, dichter Materie erläutert. Abschließend werden die Ziele dieser Arbeit aufgeführt.

1.1 Grundlagen der Plasmaphysik

Als Plasma wird Materie bezeichnet, die aus freien Ladungsträgern, die ein kollektives Verhalten aufweisen, zusammengesetzt ist. Hier werden nur Plasmen betrachtet, die aus Atomen, Ionen und Elektronen bestehen. Zwischen allen geladenen Teilchen wirken Coulombkräfte $F_C \propto r^{-2}$, aufgrund deren Langreichweitigkeit jedes Teilchen mit allen anderen Teilchen im Plasma wechselwirkt. Das macht die Berechnung eines Plasmas, das aus etwa 10^{23} cm^{-3} Teilchen besteht, sehr schwierig.

Zuerst werden die Grundlagen der Plasmaphysik und die Klassifizierung von Plasmen vorgestellt. Anschließend wird auf den wichtigen Aspekt der Abschirmung von Ladungsträgern eingegangen, mit dem das Problem der langreichweitigen Coulombkräfte vereinfacht wird. Abschließend werden die Prozesse der Ionisation und Rekombination von Plasmen erläutert.

1.1.1 Warme und heiße, dichte Materie und Plasmamparameter

In dieser Arbeit wird die Thomsonstreuung an warmer und heißer, dichter Materie untersucht [2, 4, 15]. Diese Materie ist gekennzeichnet durch Dichten von verdünnter bis hin zu komprimierter Materie von $\approx 10^{20} - 10^{28} \text{ cm}^{-3}$ und Temperaturen von $\approx 0.1 - 100 \text{ eV}$ im Fall von warmer und über 100 eV im Fall von heißer Materie. Sie spielt eine wichtige Rolle im Inneren von Planeten und Sternen [3, 45, 46] als auch in der Trägheitsfusion (Inertial Confinement Fusion (ICF)) [8, 47] und ist daher von großem wissenschaftlichem Interesse.

Ein Plasma kann entsprechend seiner Dichte und Temperatur beim Auftreten entarteter Zustände Quanteneigenschaften aufweisen. Das ist bei hohen Dichten und kleinen Temperaturen der Fall. Dann gehen die Fermionen in den Grundzustand des Systems über, in dem Energiezustände zweifach besetzt und somit entartet sind. Mit dieser Entartung überwiegt der Einfluss der quantenstatistischen Effekte gegenüber dem Einfluss der thermischen Bewegung und kann dadurch durch $n_c \lambda_c^3 \gg 1$, mit der thermischen Wellenlänge $\lambda_c = \sqrt{(2\pi\hbar^2)/(m_c k_B T_c)}$ und c als Sortenindex für Elektronen und Ionen, als entartet betrachtet werden. Im Allgemeinen werden Plasmen nach ihren Quanteneffekten über den Entartungsparameter θ klassifiziert. Dieser Parameter wird als das Verhältnis zwischen Temperatur und Fermienergie E_F eingeführt [15, 48],

$$\theta_c = \frac{k_B T_c}{E_F}, \quad \text{mit } E_F = (2s_c + 1) \frac{\hbar^2}{2m_c} (3\pi^2 n_c)^{2/3} \quad (1.1)$$

und der Spinquantenzahl s . Demnach wird für $\theta \gg 1$ ein klassisches Plasma erwartet, da aufgrund der hohen Elektronentemperatur der Grundzustand genügend entvölkert ist, um keine Entartung zu beobachten. Im Gegensatz dazu ist für $\theta \ll 1$ aufgrund des stark besetzten Fermionengrundzustandes ein entartetes Plasma zu beobachten, wodurch Quanteneigenschaften berücksichtigt werden müssen.

Zusätzlich zur Klassifizierung nach ihren Quanteneigenschaften können Plasmen nach der Stärke der mikroskopischen Wechselwirkungen zwischen den Plasmabestandteilen

charakterisiert werden. Dazu wird der Kopplungsparameter Γ eingeführt, der als Verhältnis zwischen der Coulombenergie E_C zwischen zwei Teilchen mit dem mittleren Abstand d und der kinetischen Energie E_{kin} definiert ist. Dieser Parameter hat die Form [15]

$$\Gamma = \frac{E_C}{E_{\text{kin}}}, \text{ mit } E_C = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 d}, \quad E_{\text{kin}} = (2s_c + 1) \int \frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3} f_{c,p} \frac{p^2}{2m_c}, \quad (1.2)$$

dem Wigner-Seitz-Radius $d = 1/\sqrt[3]{4\pi n_c/3}$, der dielektrischen Feldkonstante ϵ_0 , der Fermiverteilungsfunktion $f_{c,p}$ des Teilchenimpulses p und des Teilchensortenindex c , wobei sich die kinetische Energie in einem nicht entarteten System zur thermischen Energie $E_{\text{kin}} = k_B T$ vereinfacht. Wenn $\Gamma \ll 1$ gilt, ist das Plasma schwach gekoppelt. Das heißt, dass die Wechselwirkungen zwischen den Teilchen schwach sind, da die Elektronen aufgrund ihrer thermischen Energie zu schnell sind, um mit anderen Teilchen wechselwirken zu können. Auf einem hinreichend langen Zeitraum "spürt" das Elektron aufgrund seiner Relativgeschwindigkeit zum benachbarten Teilchen dessen Potential nicht. Demnach wird für $\Gamma \gg 1$ ein stark gekoppeltes System beobachtet, da hier die Coulombkraft aufgrund der geringen thermischen Energie länger auf die langsamen Teilchen wirken kann.

Die zuvor eingeführten Plasmaparameter θ und Γ sind mit einigen wichtigen Plasmen in Abbildung 1.1 dargestellt. Demnach können die zu untersuchenden Plasmen der warmen und heißen, dichten Materie sowohl stark und schwach gekoppelt als auch entartet und nicht-entartet sein. Daher ist es wichtig eine umfassende Beschreibung dieser Plasmen für die Berechnung der Thomsonstreuung zu besitzen, da störungstheoretische Entwicklungen, wie die Virial- oder die Sommerfeldentwicklung, in stark gekoppelten Systemen nicht ausreichen und nur das qualitative Verhalten liefern [49].

1.1.2 Abschirmung

Wie bereits erwähnt wurde, kann aufgrund der Langreichweitigkeit der Coulombkraft jedes Teilchen mit jedem anderen Teilchen in einem Plasma wechselwirken. Damit kann durch die Berechnung dieser Kräfte, die auf alle der etwa 10^{23} cm^{-3} Teilchen wirken, das vollständige Plasma charakterisiert werden. Da das allerdings mit heutigen Computersystemen im klassischen Fall nur auf maximal einige 10^9 Teilchen [52, 53] anwendbar ist, bedient man sich zur Vereinfachung statistischen Methoden.

Aufgrund der gegenseitigen Anziehung entgegengesetzter Ladungen schirmen sich entgegengesetzt geladene Teilchen ab, wodurch die effektive Ladung eines betrachteten Teilchens für weiter entfernte Teilchen stark herabgesetzt ist. Dieser Aspekt der Abschirmung wird in der Plasmaphysik genutzt, um die Berechnungen der wirkenden Kräfte drastisch zu vereinfachen. Es werden anstatt der Coulombpotentiale $V(r) = e^2/(4\pi\epsilon_0 r)$ abgeschirmte Potentiale, wie das Debye-Potential

$$V^S(r) = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} e^{-\kappa_S r}, \quad (1.3)$$

mit dem inversen Abschirmradius für verschiedene Teilchensorten c

$$\kappa_S = \frac{1}{\lambda_S} = \left(\frac{e_c^2 m_c^{3/2}}{\sqrt{2\pi^2 \epsilon_0 \hbar^3}} \int_0^\infty dE_p E_p^{-1/2} f_{c,p} \right)^{\frac{1}{2}}, \quad (1.4)$$

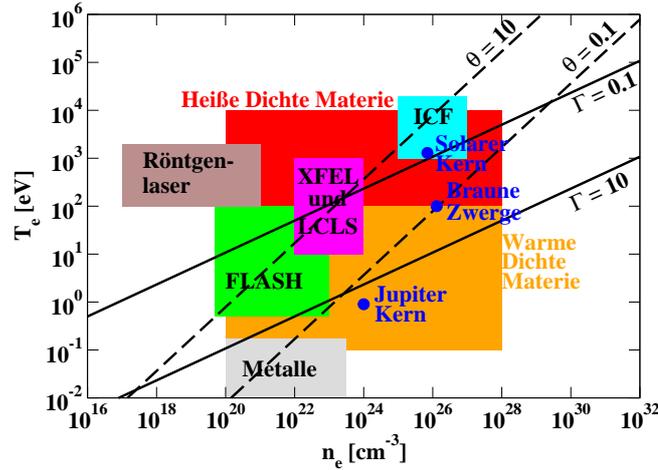


Abbildung 1.1: Darstellung verschiedener Plasmen in der Dichte-Temperatur-Ebene. Neben der warmen und heißen, dichten Materie sind Plasmen für die Trägheitsfusion (ICF) [8, 50] und Plasmen, die durch den LCLS [50], Röntgenlaser [51], den FLASH [30] und den XFEL [36] erzeugt werden können, dargestellt. Zusätzlich sind auch Plasmen, die im Universum, wie Braune Zwerge und die Kerne von Sonne und Jupiter, vorhanden sind, aufgeführt [36, 51]. Für die Klassifizierung der Plasmen sind die Plasmamparameter der Entartung θ und der Kopplung Γ mit angegeben. Demnach ist das Plasma im linken oberen (hohe Temperatur, geringe Dichten) Gebiet nicht-entartet und schwach gekoppelt (ideal), wohingegen die rechte untere Ebene (geringe Temperaturen, hohe Dichten) ein entartetes und stark gekoppeltes Plasma beinhaltet.

der Abschirmlänge λ_S , dem Teilchenabstand r , der Teilchenenergie E_p und der Fermi-Verteilungsfunktion $f_{c,p}$ des Teilchenimpulses p , benutzt. Dieser Abschirmradius kann für klassische Punktteilchen in einem System im thermischen Gleichgewicht zu $\kappa_D^2 = \sum_c (e_c^2 n_c) / (\epsilon_0 k_B T)$ vereinfacht werden. Das erleichtert die Simulation von Plasmen, da damit nicht mehr ein Potential mit unendlicher Reichweite betrachtet werden muss.

1.1.3 Ionisation

In dieser Arbeit werden laser-induzierte Plasmen betrachtet. Das heißt, dass auch die Entstehung eines Plasmas eine wichtige Rolle spielt. Die Plasmaerzeugung in einem neutralen System erfolgt durch Ionisationsprozesse, die verstanden werden können, wenn das Atom, wie in Abbildung 1.2 gezeigt, im Schalenmodell betrachtet wird. In diesem Modell können die gebundenen Elektronen durch äußere Energiezufuhr in angeregte Zustände oder ins Kontinuum übergehen. Man spricht beim letzteren Übergang von der Ionisation, da das Elektron als nicht beziehungsweise schwach gebunden betrachtet werden kann. Durch Energieverlust können Elektronen dementsprechend auch spontan oder durch äußere Einflüsse aus dem Kontinuum in gebundene, diskrete Zustände übergehen. Dieser Prozess nennt sich Rekombination, bei dem die Zahl der freien Ladungsträger verringert wird. Ferner können auch Übergänge von Elektronen aus gebundenen Zuständen höherer

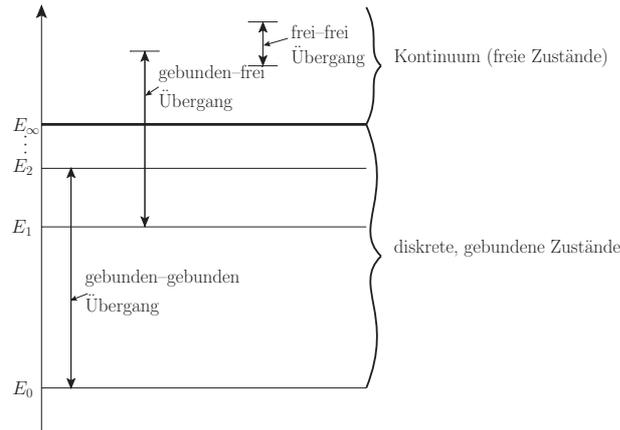


Abbildung 1.2: Illustration des Schalenmodells eines Atoms für die Darstellung von Ionisations-, Rekombinations- und Absorptionsprozessen. Dargestellt sind die diskreten, gebundenen als auch die freien Zustände des Kontinuums eines Atoms. Das Kontinuum kann sich abhängig von der Plasmadichte absenken.

Energie in Zustände niedrigerer Energie geschehen.

Nach den obigen Überlegungen muss für die Erzeugung eines Plasmas Energie aufgewendet werden, um die Elektronen ins Kontinuum anzuheben und somit zu ionisieren. Diese Energie kann dem Material zum Beispiel durch Photonenenergie eines Laser zugeführt werden. Somit muss für die Betrachtung eines äußeren Laserfeldes der Prozess der Feldionisation untersucht werden, bei dem das Laserfeld das Ionenpotential derart modifiziert, dass die Kontinuumschance herabgesenkt wird. Dadurch kann die Elektronenenergie oberhalb der Kontinuumschance liegen, womit die Elektronen aus dem Ionenpotential "herausfallen" oder die Elektronen durch das abgesenkte Ionenpotential hindurchtunneln können. Dieser Prozess ist in Abbildung 1.3 dargestellt.

Wenn genügend freie Elektronen vorhanden sind, die durch den Laser beschleunigt wurden, können diese durch Stöße Energie an gebundene Elektronen abgeben, die wiederum in den freien Zustand übergehen können. Dieser Prozess wird als Stoßionisation bezeichnet. Weiterhin steigt durch den Gewinn an freien Elektronen der Elektronendruck, was dazu führt, dass durch Wechselwirkungen zwischen den Ionen die Kontinuumschance herabgesenkt wird und somit eine geringere Energie für Ionisationen aufgewendet werden muss. Dieser Abschirmungsprozess charakterisiert den Motteffekt, der speziell in dichten Plasmen von Bedeutung ist.

Da sich auf lange Zeiten im Piko-Nanosekundenbereich das Plasma abkühlt, kann es in dieser Zeit aufgrund von Elektroneneinfang durch die Ionen zu Rekombinationsprozessen kommen. In Hinsicht auf in dieser Arbeit betrachtete Probleme geschieht dieser Prozess auf relativ langen Zeitskalen, so dass Rekombination innerhalb dieser Arbeit weniger interessant ist.

Die Ionisations- und Rekombinationsprozesse können mittels Massenwirkungsgesetzen [54] oder im Gleichgewicht durch die aus Massenwirkungsgesetzen abgeleitete Saha-Gleichung [55] beschrieben werden. In dieser Arbeit wird der Ionisations- und Rekombinationsprozess mit Hilfe der Ratengleichung [56, 57] als auch in einem mikroskopischen

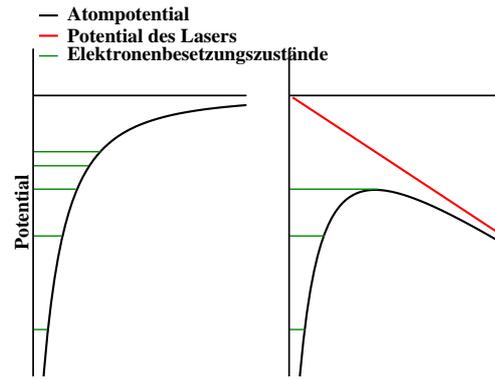


Abbildung 1.3: Darstellung eines Atompotentials (links) und eines Atompotentials im Einfluss eines Laserfeldes (rechts). Eine Modifikation des Atompotentials durch das Laserfeld bewirkt eine Reduzierung der Anzahl der Besetzungszustände. Hierbei kann dieser Prozess das Atompotentialmaximum unterhalb des Grundzustandes verschieben, wodurch die Atome sofort vollständig ionisieren können. Durch das Absenken des Atompotentials entsteht ein Potentialwall, durch den die gebundenen Elektronen hindurchtunneln können.

Bild [58, 59] beschrieben. Im Kapitel 3 werden diese Methoden vorgestellt.

Da die Erzeugung eines Plasmas aus einem elektrisch neutralen Material erfolgt, muss für das gesamte Plasma die Ladungsneutralität

$$n_e = \sum_c^Z Z_c n_{i,c} \quad (1.5)$$

gelten, mit der freien Elektronendichte n_e und den Dichten $n_{i,c}$ der Z_c -fach geladenen Ionen der Kernladungszahl Z . Außerdem kann einem Plasma ein mittlerer Ionisationsgrad

$$Z_f = \frac{\sum_c Z_c n_{i,c}}{\sum_c n_{i,c}} = \frac{n_e}{n_i} \quad (1.6)$$

zugeordnet werden, wobei n_i die Dichte der schweren Teilchen darstellt, also alle Atome und alle verschiedenen geladenen Ionen.

1.2 Thomsonstreuung

Die Diagnostik von laser-induzierten Plasmen wird in dieser Arbeit mittels Thomsonstreuung realisiert [37]. Hier wird speziell die Streuung von Röntgen-Strahlung in einem Wellenlängenbereich von einem Pikometer bis zu 10 Nanometer (Frequenzspektrum: $\omega \approx 10^{17} - 10^{21}$ Hz) genutzt, da diese in der Lage ist, die betrachtete warme und heiße, dichte Materie zu durchdringen und somit Streuungen im Inneren der Materie möglich werden. In Abbildung 1.4 ist der Absorptionskoeffizient für die Absorption der inversen Bremsstrahlung in Abhängigkeit von der Elektronendichte und der Laserkreisfrequenz zu sehen. Unterhalb der von der Laserwellenlänge abhängigen kritischen Dichte n_{cr} , die in Abschnitt 1.3 näher erläutert wird, ist kaum eine Absorption zu beobachten. Das heißt

auch, dass oberhalb einer bestimmten kritischen Laserfrequenz, die durch die Elektronendichte des Plasmas gegeben ist, keine Absorption zu sehen ist. Daher kann Röntgenstrahlung dichte Materie durchdringen. Wie im Folgenden vorgestellt, werden für die hier zu beschreibende Plasmadiagnostik aufgrund der Ineffizienz der Thomsonstreuung hohe Photonendichten benötigt, die Strahlungsquellen, wie Freie Elektronen Laser, zur Verfügung stellen können. In diesem Abschnitt wird kurz auf den allgemeinen Prozess der betrachteten Diagnostikmethode und seine Anwendung in vergangenen Experimenten eingegangen.

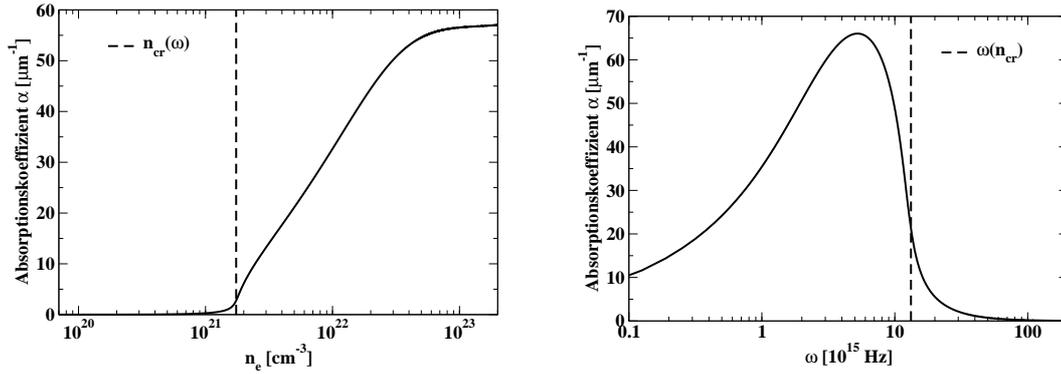


Abbildung 1.4: Darstellung der Absorption durch die inverse Bremsstrahlung in Abhängigkeit von der Elektronendichte (links) und der Laserkreisfrequenz (rechts). Die Absorption wurde hier mit Hilfe des Drude-Modells mit dem Spitzer-Formalismus für die Stoßfrequenz berechnet und wird im Abschnitt 2.1.1 eingeführt. Es wird ein einfach ionisiertes Plasma mit der Temperatur $T = 10$ eV und der Dichte $n = 5 \cdot 10^{22} \text{ cm}^{-3}$ (rechts), das mit einem Laser der Wellenlänge $\lambda = 800 \text{ nm}$ (links) bestrahlt wird, betrachtet. In den Abbildungen ist die Frequenz der kritischen Dichte $\omega(n_{\text{cr}})$ beziehungsweise die kritische Dichte n_{cr} eingetragen. Im linken Bild kann beobachtet werden, dass oberhalb der kritischen Dichte die Absorption der inversen Bremsstrahlung dominant wird, wohingegen auf der rechten Seite das für Frequenzen unterhalb der kritischen Frequenz der Fall ist.

1.2.1 Grundlagen

Die Thomsonstreuung in Dipolnäherung beschreibt die Streuung von Photonen an Elektronen in Form von Dipolstrahlung und ist in Abbildung 1.5 dargestellt.

Zum Verständnis der Thomsonstreuung als Dipolstrahlung kann ein einfaches Oszillatormodell eines einzelnen Elektrons der Masse m_e mit dem Ortsvektor \mathbf{r} als angeregte, gedämpfte, harmonische Schwingung im elektromagnetischen Feld betrachtet werden [60],

$$m_e \ddot{\mathbf{r}} + m_e \nu \dot{\mathbf{r}} + m_e \omega_0^2 \mathbf{r} = -e \mathbf{E}(t). \quad (1.7)$$

Dabei wird die Dämpfung der Elektronenbewegung durch den Dämpfungskoeffizienten ν , die Eigenschwingung der Elektronen mit ω_0 und das externe, elektromagnetische Feld als \mathbf{E} bezeichnet. Hierbei kann das entstehende Dipolmoment, unter dessen Wirkung

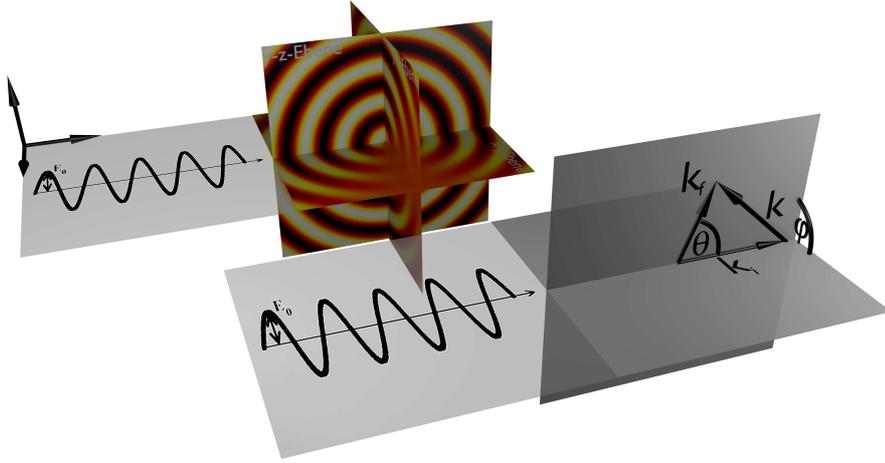


Abbildung 1.5: Darstellung des elektrischen Feldes der Dipolstrahlung eines Elektrons in der oberen Illustration und des entsprechenden, schematischen Streuprozesses in der unteren Illustration. Das Elektron wird von einer ebenen Welle in der x-y-Ebene als Laserpolarisationsebene angeregt, wobei die Dipolstrahlung im oberen Bild farblich dargestellt ist (Maximum $\hat{=}$ gelb, Minimum $\hat{=}$ schwarz, 0 $\hat{=}$ rot). Daraus ist ersichtlich, dass in Richtung des elektrischen Feldes der einlaufenden Welle \mathbf{E}_0 keine Dipolstrahlung zu beobachten ist, wohingegen für $\varphi = 90^\circ$ bei konstantem Abstand zum Elektron ein konstantes Feld der Dipolstrahlung zu beobachten ist. In der unteren Ebene ist der Wellenzahlvektor $\mathbf{k} = \mathbf{k}_i - \mathbf{k}_f$ mit den Streuwinkeln φ und θ zu sehen.

die Photonen anschließend mit einer Leistung von $P \sim d^2$ (wird weiter unten gezeigt) emittieren, als

$$\mathbf{d} = -e\mathbf{r} = \frac{e^2}{m_e \omega_0^2 - \omega^2 - i\nu\omega} \mathbf{E} \quad (1.8)$$

geschrieben werden, wodurch man zwei Arten der Dipolstrahlung unterscheiden kann. Eine Art der Dipolstrahlung, in der die Eigenschwingung der Elektronen ω_0 wesentlich kleiner als die Frequenz des eingestrahnten Feldes $\omega \gg \omega_0$ ist, bezeichnet die klassische Thomsonstreuung, die die elastische Streuung von elektromagnetischen Wellen an freien Elektronen mit der Eigenschwingung der Plasmafrequenz

$$\omega_{\text{pl},e} = \sqrt{\frac{n_e e^2}{\varepsilon_0 m_e}} \quad (1.9)$$

beschreibt. Wenn hingegen $\omega \ll \omega_0$ gilt, erhält man die zweite Art der Dipolstrahlung, die Rayleighstreuung, die die elastische Streuung von Photonen an gebundenen Elektronen mit der Eigenschwingung auf der gebundenen Elektronenbahn charakterisiert. Weiterhin tritt diese Streuung nur an Teilchen auf, die klein im Vergleich zur Wellenlänge der Strahlung ist. Ansonsten würden keine harmonischen Schwingungen der Elektronen zu beobachten sein.

Wenn im Gegensatz zur bisherigen klassischen Beschreibung der Welle-Teilchen-Dualismus und speziell die endlichen Impulse $\mathbf{p}_p = \hbar\mathbf{k}_p$ der Photonen berücksichtigt wird, kann auch Energie zwischen den wechselwirkenden Photonen und Teilchen ausgetauscht werden. Das charakterisiert den Comptoneffekt, der hier nur auf die Streuung an Elektronen angewendet wird, obwohl dieser Effekt bei allen Photonen-Teilchen-Wechselwirkungen auftritt, und den Rückstoß der Elektronen aufgrund der Wechselwirkung mit den Photonen beschreibt. Dieser Energieübertrag hat eine Energieverschiebung $\Delta E = E_i - E_f$ des gestreuten Photons der Energie E_f im Vergleich zum eingestrahlt Photon der Energie E_i zur Folge. Unter diesem quantenmechanischen Ansatz kann eine inelastische Streuung an Elektronen definiert werden, bei der die Energieverschiebung winkelabhängig und durch

$$\Delta E = \frac{\hbar\omega(1 - \cos\theta)}{m_e c^2 / (\hbar\omega) + 1 - \cos\theta} \quad (1.10)$$

gegeben ist. Zusätzlich kann zwischen dem einfallenden \mathbf{k}_i und auslaufenden \mathbf{k}_f Photon eine Wellenzahlvektoränderung $\mathbf{k} = \mathbf{k}_f - \mathbf{k}_i$ beobachtet werden.

Bei den im Folgenden betrachteten Plasmen ist anzumerken, dass an einer Vielzahl von freien Elektronen gestreut wird. Diese Elektronen werden keineswegs alle dieselbe Geschwindigkeit aufweisen, sondern unterliegen einer statistischen Geschwindigkeitsverteilung. Deshalb wird sich das Streusignal von einem scharfen Peak zu solch einer Verteilung verbreitern, die die Geschwindigkeitsverteilung der Elektronen im Plasma charakterisiert. Also entspricht diese Verteilung im klassischen Fall der Maxwell-Boltzmannverteilung und im entarteten Fall der Fermiverteilung.

Wie zuvor beschrieben, hat der quantenmechanische Rückstoß der Elektronen beim Comptoneffekt somit einen großen Einfluss auf die Streuung an freien Elektronen. Dieser Einfluss ist auch bei gebundenen Elektronen zu beobachten. Allerdings besitzen die gebundenen Elektronen die Gesamtmasse des Elektron-Ion-Systems, wodurch in Gleichung (1.10) die Gesamtmasse bei der Berechnung der Energieverschiebung herangezogen werden muss. Im Gegensatz zu der Streuung an freien Elektronen fällt die Energieverschiebung der gestreuten Photonen beim Comptoneffekt sehr gering aus. Dennoch existiert aufgrund der diskreten Energiezustände im Ion ein weiterer inelastischer Streuprozess. Es handelt sich um die Ramanstreuung, bei der das einfallende Photon das gestoßene Elektron in einen energetisch höheren Zustand anregen kann und die Photonenenergieverschiebung bei der Elektronen-Photonen-Wechselwirkung durch die diskrete Linienstrahlung (zu schmal um im Experiment aufgelöst zu werden) oder durch die kontinuierliche Ionisationsstrahlung gegeben ist, die somit materialspezifisch ist.

Wenn noch einmal die Streuung an freien Elektronen genauer betrachtet wird, kann ein weiterer Streueffekt identifiziert werden. Aus durch äußere elektromagnetische, innere induzierte oder Mikrofelder verursachte Elektronendichtefluktuation können freie Elektronen Oszillationen um die Ionen ausführen. Diese Bewegung nennt sich Plasmon und ist ein Quasiteilchen aus dem Elektronenverband vor dem Hintergrund der Ionen. An den Plasmonen kann ebenfalls gestreut werden, wenn sich innerhalb der Wellenlänge der eingestrahlt elektromagnetischen Welle ein Verband an Elektronen befindet. Zur Klassifizierung der Streuung an den verschiedenen Strukturen wird der Streuparameter

$$\alpha = \frac{k}{\kappa_S} \sim \frac{\lambda_S}{\lambda}, \quad (1.11)$$

dem Vergleich zwischen Laserwellenlänge λ und dem Abschirmradius λ_S , eingeführt [61], der zum Verständnis in Abbildung 1.6 illustriert ist. Hier charakterisiert k die Wellenzahl und $\kappa_S = 1/\lambda_S$ den inversen Abschirmradius. Durch den Streuparameter kann somit zwischen dem Auftreten der inelastischen Thomsonstreuung an einzelnen Elektronen $\alpha < 1$ (nicht-kollektive Streuung) und an Plasmonen $\alpha > 1$ (kollektive Streuung) unterschieden werden. Aufgrund der resonanten Streuung an den Plasmonen bei $\alpha > 1$ wird im Gegensatz zur Streuung an einzelnen Elektronen in der Photonenenergieverschiebung die Dispersion der Plasmonen

$$\Delta E \approx \sqrt{\hbar^2 \omega_{\text{pl},e}^2 + \frac{3\hbar^2 k_B T_e}{m_e} k^2} \quad (1.12)$$

beobachtet [62]. Hierbei wurde die Plasmafrequenz des Elektronensystems (1.9) und die thermische Energie der Elektronen $k_B T_e$ benutzt. Analog kann diese inelastische Streuung an einem Verband von Teilchen auch bei der Rayleighstreuung beobachtet werden [63]. Es handelt sich um die Streuung an Ionen-akustischen Wellen. Allerdings ist die Ionenmasse wesentlich größer als die Elektronenmasse, wodurch die Streuung an Ionen-akustischen Moden aufgrund des fehlenden Auflösungsvermögens der Detektoren in Experimenten, die in dieser Arbeit betrachtet werden, nicht untersucht werden kann. Als Beispiel kann aus Gleichung (1.12) bei vernachlässigbar kleiner Wellenzahl und $n_i = n_e$ das Verhältnis der Resonanzfrequenz der Plasmonen zu Ionen-akustischen Wellen als $\Delta E/\Delta E_{\text{iaw}} \approx \sqrt{m_i/m_e} \approx 43$ angegeben werden, was bei einem Experiment an Wasserstoff mit der Elektronendichte $n_e = 5 \cdot 10^{22} \text{ cm}^{-3}$ und $\Delta E = 8.3 \text{ eV}$ einer Energieverschiebung von $\Delta E_{\text{iaw}} = 0.2 \text{ eV}$ entspricht. In der Festkörperphysik kann die inelastische Rayleighstreuung durch die Streuung an Ionengitterschwingungen, sogenannten Phononen, beobachtet werden. Mit Hilfe von im Vergleich zu Photonen energetisch höheren Teilchen kann die inelastische Rayleighstreuung auch in der Festkörperphysik nachgewiesen werden [64].

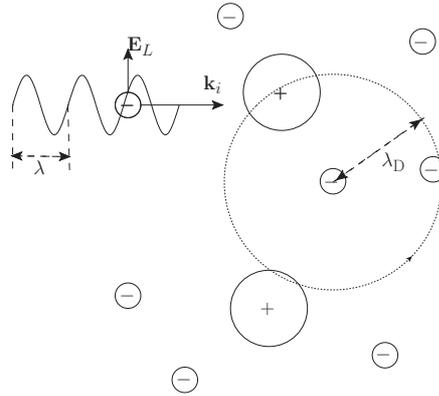


Abbildung 1.6: Illustration des Streuparameters $\alpha \sim \lambda_D/\lambda$. Wenn der Proportionalitätsfaktor in Gleichung (1.11) eins wäre, also $\alpha = \lambda_D/\lambda$, würde in diesem Beispiel nicht-kollektive Streuung $\alpha < 1$ beobachtet werden, da die Wellenlänge des Laser λ kleiner als die Debye-Abschirmlänge λ_D ist. Es ist zu sehen, dass dann nur an einzelnen Teilchen in der Debye-Kugel gestreut wird. Daher werden nur einzelne Elektronen anstatt Plasmonen angeregt.

Als Beispiel für die verschiedenen Streuarten sind in Abbildung 1.7 die entsprechenden Streuspektren eines Kohlenstoffplasmas der Ionendichte $n_i = 1.13 \cdot 10^{23} \text{ cm}^{-3}$, der Elektronentemperatur $T_e = 17.5 \text{ eV}$ und des Ionisationsgrads $Z_f = 2$, das mit einem Laser der Wellenlänge von $\lambda = 0.5 \text{ nm}$ bestrahlt wird, für einen Streuwinkel von $\theta_S = 20^\circ$ und $\theta_S = 160^\circ$ dargestellt. Zu sehen sind die Ramanstreuung, die elastische Rayleighstreuung, die hier durch das fehlende Auflösungsvermögen der Instrumente und der Bandbreite des Streulasers durch ein Gaußprofil mit der "Full Width at Half Maximum" (FWHM) von 5 eV verbreitert ist, und die elastische, kollektive und nicht-kollektive Thomsonstreuung. Es ist gut zu erkennen, dass die Ramanstreuung eine scharfe Kante bei der Ionisationsenergie des zweifach ionisierten Kohlenstoffs besitzt, da erst dann die für diese Streuung benötigten Ionisationen auftreten können. Diese Kante kann in dichten Plasmen durch den Motteffekt zu kleineren Energien hin verschoben werden [65].

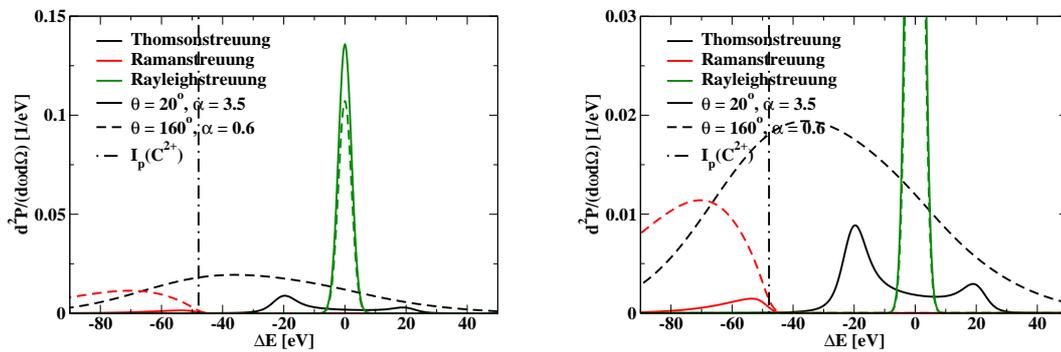


Abbildung 1.7: Darstellung der gestreuten Leistung je Raumwinkel- $d\Omega$ und Frequenzelement $d\omega$ in Abhängigkeit der Photonenenergieverschiebung ΔE an einem homogenen Kohlenstoffplasma der Dichte $n_i = 1.13 \cdot 10^{23} \text{ cm}^{-3}$, der Temperatur $T_e = 17.5 \text{ eV}$ und des Ionisationsgrads $Z_f = 2$ mit einer Wellenlänge von $\lambda = 0.5 \text{ nm}$ unter einem Streuwinkel $\theta_S = 20^\circ$ und $\theta_S = 160^\circ$. Es sind die elastische Ramanstreuung, die elastische Rayleighstreuung als auch die inelastische, kollektive Thomsonstreuung (links) und die inelastische, nicht-kollektive Thomsonstreuung vergrößert (rechts) zu beobachten. Das Maximum der nicht-kollektiven Streuung ist durch die Comptonverschiebung (1.10) versetzt. Zur Verdeutlichung der Ramanstreuung ist die Ionisationsenergie von zweifach ionisiertem Kohlenstoff $I_p(\text{C}^{2+})$ eingezeichnet, unterhalb der keine Ramanstreuung zu beobachten ist.

Die Thomsonstreuung kann damit als diagnostisches Werkzeug genutzt werden. Der entscheidende Nachteil der betrachteten Diagnostikmethode ist der geringe Streuquerschnitt der Thomsonstreuung. Da der Thomsonstreuungsprozess die Dipolstrahlung der Elektronen im transversalen Feld des zu streuenden Lasers darstellt, kann die eingestrahlte Leistung pro Fläche als $S = \varepsilon_0 c E^2$ eingeführt werden [60, 66]. Das Feld der Dipolstrahlung einer beschleunigten Punktladung der Geschwindigkeit $u \ll c$ wird aus den Liénard-Wiechert Potentialen als $|\mathbf{E}| = (e\dot{u} \sin \theta)/(4\pi\varepsilon_0 R c^2)$ abgeleitet [60]. Dabei ist R der Abstand zwischen Dipolstrahler und Beobachter. Diese Näherung kann in den betrachteten Plasmen aufgrund der Geschwindigkeit der oszillierenden Elektronen von etwa $u \approx 10^6 \text{ m/s} \ll c$ benutzt werden. Für die Berechnung der gestreuten Leistung

$$P = \frac{dW}{dt} = \int dA S = \frac{\varepsilon_0 e^2 \dot{u}^2}{16\pi^2 \varepsilon_0^2 c^3} \int d\Omega \sin^2 \theta = \frac{e^2 \dot{u}^2}{6\pi \varepsilon_0 c^3} = \frac{\ddot{d}^2}{6\pi \varepsilon_0 c^3} \quad (1.13)$$

kann das Dipolmoment d aus der elektrischen Kraft $m_e \ddot{\mathbf{d}} = m_e e \ddot{\mathbf{r}} = e \mathbf{F} = e^2 E_0 \hat{\mathbf{E}} \sin(\omega_0 t)$, mit dem Einheitsvektor des elektrischen Feldes $\hat{\mathbf{E}}$, gewonnen werden. Das führt zum mittleren Streuquerschnitt (mit $\langle \sin^2 \omega_0 t \rangle = 0.5$)

$$\sigma_T = P / \langle S_{\text{Feld}} \rangle = \frac{e^4 E_0^2}{6\pi \varepsilon_0 m_e^2 c^3} \frac{1}{\varepsilon_0 c E_0^2} = \frac{e^4}{6\pi \varepsilon_0^2 m_e^2 c^4} = \frac{8\pi}{3} r_0^2 = 0.665 \times 10^{-24} \text{ cm}^2. \quad (1.14)$$

Dabei wurde der klassische Elektronenradius $r_0 = e^2 / (4\pi \varepsilon_0 m_e c^2)$ genutzt. Durch diesen Streuquerschnitt ist die kleine Ausbeute an gestreuten Photonen ersichtlich. Daher ist es wichtig Strahlungsquellen mit hohen Photonendichten zu nutzen.

1.2.2 Experimente

In diesem Abschnitt wird kurz auf die wichtigsten Experimente zur Diagnostik mittels Thomsonstreuung an warmer, dichter Materie eingegangen. Die Thomsonstreuung wurde aufgrund des kleinen Thomsonstreuquerschnittes (1.14) erst mit Aufkommen von Lasern als Diagnostikmethode für Plasmen interessant [15]. Zu dieser Zeit konnten nur verdünnte Plasmen bis zu $n_e = 10^{21} \text{ cm}^{-3}$ untersucht werden, da bis dahin die Laser nur bis ins nahe ultraviolette Frequenzspektrum ($\omega \approx 10^{15} - 10^{16} \text{ Hz}$) reichten [9, 10, 67], die dichte Plasmen oberhalb von $n_e = 10^{21} \text{ cm}^{-3}$ aufgrund ihrer hohen Plasmafrequenz $\omega_{\text{pl},e} = 5 \cdot 10^{14} \text{ Hz}$ nur schwer durchdringen können (siehe Abbildung 1.4) und stattdessen durch den in Abschnitt 1.3 erläuterten Prozess der inversen Bremsstrahlung absorbiert werden. Mit der Nutzung von Synchrotronstrahlung als Röntgenquelle für die Diagnostik wurden mit Hilfe der Thomsonstreuung auch Metalle und Halbleiter untersucht [11–13]. Um speziell warme und heiße, dichte Materie zu untersuchen, sind Röntgenstrahlungsquellen im Frequenzbereich von $\omega = 10^{17} - 10^{21} \text{ Hz}$ erforderlich, da diese auch Materie mit Festkörperdichte und darüber hinaus durchdringen können und somit die Anwendung von Streumethoden in diesem Regime erst möglich werden. Wie bereits erwähnt, müssen diese Quellen zusätzlich eine hohe Photonendichte aufweisen. Heute werden für die Erzeugung hoher Photonendichten sogenannte Rückstrahler realisiert, bei denen die charakteristischen Emissionslinien von laser-induzierten Plasmen genutzt werden [19–25]. Als Kriterium dieser Rückstrahler muss mindestens eine Emissionslinie eine gute Umsetzungseffizienz der optischer Laserenergie in emittierende Photonenenergie im Röntgenbereich besitzen. Daher werden für solche Experimente optische Laser, die den Rückstrahler nicht durchdringen können, mit hohen Laserenergien von einigen Kilojoule, wie der Vulcan Laser in Oxford [68] oder der Omega Laser in Rochester [69], verwendet, um eine hohe Photonausbeute im Röntgenbereich zu erzielen. Aufgrund der langen festgelegten Pulsdauer des Rückstrahlers von einigen Nanosekunden, kann mit dieser Methode das Zeitverhalten eines Plasmas ausschließlich im Nanosekundenbereich untersucht werden kann.

Mit Hilfe der Rückstrahlermethode wurden bereits eine Reihe von Experimenten durchgeführt. Insbesondere Beryllium ist aufgrund der Nutzung als Hitzeschild und für die Kompression des Fusionswasserstoffs bei der ICF von großem Interesse. Dazu wird ein

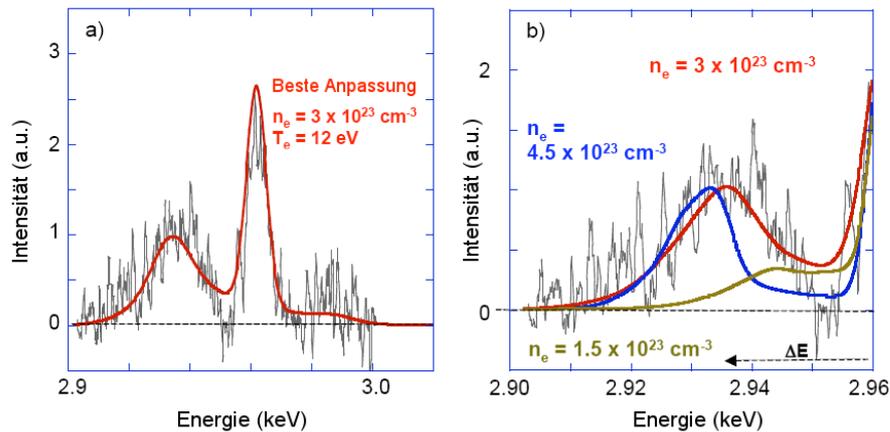


Abbildung 1.8: Gemessene und berechnete Thomsonstreuenspektren eines homogenen Berylliumplasmas [14], das von allen Seiten von 20 Pump-Lasern der Wellenlänge von $\lambda = 351$ nm und der Gesamtenergie von $E = 10$ kJ innerhalb einer Nanosekunde erzeugt wird. Nach einer halben Nanosekunde wird mit sieben Lasern der Energie $E = 3.5$ kJ in einer Zeit von einer Nanosekunde ein am Beryllium anliegendes Material ($C_2H_2Cl_2$) angeregt, welches Röntgenstrahlung der Photonenenergie $E_p = 2.96$ keV der Chlor K_α Linie emittiert. Diese emittierte Röntgenstrahlung streut am Berylliumplasma und wird unter einem Streuwinkel von $\theta = 40^\circ$ gemessen. Das entsprechende Signal mit der optimalen Anpassung der Plasmaparameter ist in Abbildung a) zu sehen. In Abbildung b) sind zum Vergleich Berechnungen für verschiedene Plasmaparameter dargestellt.

laser-induziertes Berylliumplasma mit Hilfe von Rückstrahlern, zum Beispiel der L_α Linie von Zink [16, 18, 70, 71] oder der K_α Linie von Chlor [14, 17, 20, 22, 72–74], untersucht, dessen Thomsonstreuenspektrum und dessen zugehörige Plasmaparameter in Abbildung 1.8 zu sehen sind [14].

Mit der Entwicklung von Strahlungsquellen mit Wellenlängen im Röntgenbereich und mit hohen Photonendichten, den Freien Elektronen Lasern (FEL), sind weitere Strahlungsquellen für die Thomsonstreuung als Diagnostikmethode verfügbar. Diese Quellen besitzen variierbare Wellenlängen mit kurzen Bandbreiten. Der Vergleich der Photonendichten verschiedener Röntgenquellen ist in Abbildung 1.9 dargestellt. Zudem besitzen FELs kurze Pulsdauern von einigen 10 Femtosekunden mit hohen Photonendichten, wodurch die Untersuchung des zeitlichen Verhaltens von laser-induzierten Plasmen während und nach der Laser-Plasma-Wechselwirkung ermöglicht wird [30], wie erstmalig in einem Experiment am FLASH [29] gezeigt wurde. In Abbildung 1.10 ist ein Ergebnis dieses Experiments dargestellt. Daher steht zur Zeit die Untersuchung der Licht-Materie-Wechselwirkung durch Pump-Probe-Experimente unter Nutzung von FELs im Vordergrund.

Zur theoretischen Beschreibung solcher Experimente werden Methoden zur Berechnung der Laser-Materie-Wechselwirkung notwendig, die diesen Zeitbereich speziell für hohe Laserintensitäten simulieren können. Dazu können Particle-In-Cell (PIC) Simula-

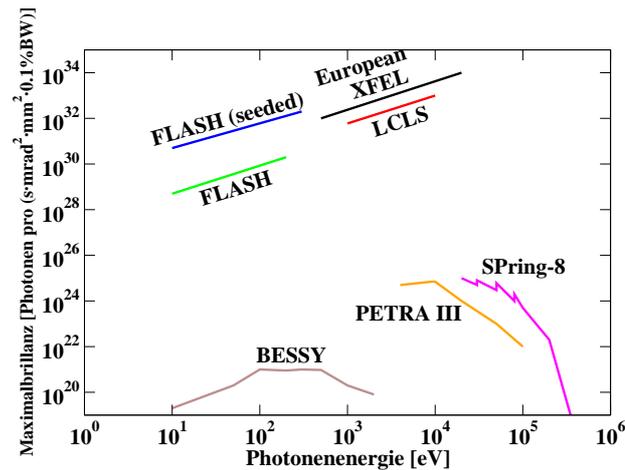


Abbildung 1.9: Dargestellt ist die Photonenzahl in Abhängigkeit der Photonenergie. Eingetragen sind FELs, wie der FLASH und der mit kohärentem Licht induzierte FLASH (seeded FLASH), der XFEL und die LCLS, und verschiedene Beschleunigerringe zur Erzeugung von Synchrotronstrahlung, wie die Berliner Elektronen-Speicherring Gesellschaft für Synchrotronstrahlung (BESSY), die Positron-Elektron-Tandem-Ring-Anlage III (PETRA III) und der Super Photon RING-8 GeV (SPRING-8). Daraus ist zu erkennen, dass die Photonendichte der FELs einige Größenordnungen oberhalb der Photonendichte von Synchrotronquellen liegt. Darstellung nach [27].

tionen [39, 40, 75–78] verwendet werden, die diesen Zeitbereich von einigen 100 Femtosekunden nach der Laser-Plasma-Wechselwirkung genauer simulieren als Strahlungshydrodynamik Simulationen [41, 42, 79–83], die für Experimente mit Rückstrahlern Verwendung finden. Für die Berechnung der Thomsonstreuenspektren solcher Pump-Probe Experimente werden in dieser Arbeit die aus PIC-Simulationen gewonnen Plasmamparameter verwendet.

1.3 Überblick zu laser-induzierten Plasmen

Wie bereits erwähnt wurde, werden in den in dieser Arbeit betrachteten Experimenten für die Plasmaerzeugung und -diagnostik Laser genutzt, welche mit dem zu betrachtenden Material wechselwirken. Über diese Laser-Materie-Wechselwirkung wird hier ein grober Überblick gegeben und die wichtigsten Prozesse vorgestellt.

Heutige Laser sind vielfältig einsetzbare Strahlungsquellen, deren Intensitäten durch die Erhöhung der Leistung, die Verkleinerung des Strahlradius und der Pulsdauer in den letzten Dekaden vergrößert wurden. Damit werden Laserintensitäten von bis zu einigen 10²¹ W/cm², wie beim Vulcan Laser in Oxford [68], und in naher Zukunft in der Extreme Light Infrastructure (ELI) [84] Intensitäten von bis zu 10²⁴ W/cm² erreicht.

Mit der Entwicklung der Laserintensitäten muss auch die theoretische Beschreibung der Wechselwirkung solch intensiver Laser mit Materie verbessert werden. Bei Laserintensitäten von 10¹⁵ W/cm² sind strahlungshydrodynamische Beschreibungen ausreichend, um die Laser-Materie-Wechselwirkung zu beschreiben. Diese wurden in der Vergangen-

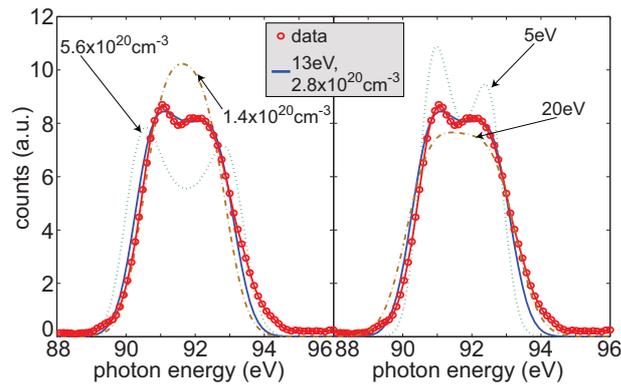


Abbildung 1.10: Gemessene und berechnete Thomsonstreuungsspektren eines Wasserstoffplasmas, das vom FLASH der Photonenergie $E_p = 91.8$ eV, der Energie $E = 15 \mu\text{J}$ während einer Zeitdauer von 40 fs bestrahlt wird. Hierbei heizt der FLASH-Puls den Wasserstofftropfen mit dem Durchmesser $d = 20 \mu\text{m}$. Der selbe Puls der zur Erzeugung des Plasmas verwendet wurde, wird auch zur Messung des Streuspektrums unter einem Winkel von $\theta = 90^\circ$ genutzt. Diese sogenannte Selbstthomsonstreuung ermöglicht die Messung der Thomsonstreuungsspektren an warmen, freien Elektronen ohne gleichzeitiger Messung des Rayleighsignals, da innerhalb des FLASH-Pulses die Ionen noch kalt sind. Die Berechnung der Thomsonstreuungssignale sind für verschiedene Elektronendichten (links) und verschiedene Elektronentemperaturen (rechts) angegeben.

heit intensiv genutzt [85, 86]. Für die Beschreibung der Laser-Materie-Wechselwirkung mit höheren Intensitäten wurden neue Methoden, wie die PIC-Simulationen, verwendet, die neben strahlungs-hydrodynamischen Simulationen in dieser Arbeit Anwendung finden. Mit diesen PIC-Simulationen wurden in naher Vergangenheit neue Phänomene der Laser-Materie-Wechselwirkung, wie Selbstfokussierung und Hole-Boring [87] oder Effekte der Mietheorie in sphärischen Plasmotropfen [88], beobachtet. Für die Nutzung von Lasern ist somit das Verständnis der Laser-Materie-Wechselwirkung unerlässlich, welche in diesem Abschnitt behandelt werden soll.

Hier werden die grundlegenden Prozesse der Laser-Materie-Wechselwirkung qualitativ eingeführt, um die wichtigsten davon im Kapitel 2 quantitativ zu beschreiben. Um diese Wechselwirkungen in einem makroskopischen System zu verstehen, muss zuerst die Wechselwirkung mit einem einzelnen Atom verstanden werden. Der Prozess der Ionisation wurde bereits in Abschnitt 1.1.3 beschrieben. Zusätzlich wurde bereits der Streuprozess in 1.2.1 betrachtet. Demnach kann die Laser-Materie-Wechselwirkung quantenmechanisch durch Teilchen-Photonen-Stöße verstanden werden. Da allerdings die leichtesten Atombestandteile, die Elektronen, eine Masse von ≈ 0.5 MeV besitzen und die Photonenergie von üblichen Anregungslasern im optischen Bereich ≈ 1 eV beträgt, werden die Elektronen durch direkte Stöße kaum beeinflusst. Vielmehr müssen diese Stöße als Stöße im Potential der Ionen betrachtet werden, in dem die Elektronen Photonenergie durch Zustandsänderungen im Potential der Ionen aufnehmen. Elektronen können daher nur im Potential der Ionen Energie stoßender Photonen aufnehmen. Dementsprechend

nehmen die Ionen keine Energie aus dem Laserfeld auf, da die Protonen und Neutronen aufgrund der starken Wechselwirkung wesentlich größere Energieabstände zwischen den Besetzungszuständen besitzen. Die Laser-Materie-Wechselwirkung wird deshalb stets als Wechselwirkung zwischen dem Laser und den Elektronen verstanden, wobei die Elektronen wiederum mit den Ionen wechselwirken können.

Daher können die wichtigsten Laser-Materie-Wechselwirkungen auf die Wechselwirkung zwischen Laser und Elektronen in den beiden Zuständen gebunden und frei zurückgeführt werden. Dazu kann erneut das Schalenmodell, welches in Abbildung 1.2 dargestellt ist, angewendet werden. Analog zur Streuung im Abschnitt 1.2.1 kann Licht somit durch den Übergang von Elektronen von einem gebundenen Zustand in einen energetisch höheren, gebundenen Zustand (charakteristische Übergangsstrahlung), von einem gebundenen Zustand in einen freien Zustand (charakteristische Ionisationsstrahlung) und von einem freien Zustand in einen energetisch höheren freien Zustand (kontinuierliche inverse Bremsstrahlung) absorbiert werden. Für die Absorption von Licht ist hierbei die inverse Bremsstrahlung der wichtigste Prozess. Die charakteristische Strahlung wird hier nicht weiter untersucht, was bereits in [89] durchgeführt wurde. Hier sei erwähnt, dass die Absorptionsstrahlung neben Photonenstreuung für diagnostische Zwecke genutzt wird [90–92].

Der Prozess der inversen Bremsstrahlung kann wie folgt verstanden werden. Die freien Elektronen oszillieren mit einer festen Frequenz, der Plasmafrequenz (1.9), im Feld der Ionen und bilden Plasmonen. Im Plasma ist diese Frequenz abhängig von der freien Elektronendichte n_e . In Abbildung 1.4 ist die Absorption durch den Prozess der inversen Bremsstrahlung in Abhängigkeit der Elektronendichte und der eingestrahlten Laserfrequenz dargestellt. Wenn die freien Elektronen im Potential der Ionen betrachtet werden, werden die Elektronen bei resonanter Anregung, also wenn die Plasmafrequenz der Elektronen $\omega_{\text{pl},e}$ gleich der Laserfrequenz ω ist, optimal beschleunigt. In diesem Fall der resonanten Anregung verschwindet die Gruppengeschwindigkeit der Laserstrahlung,

$$v_g = c \sqrt{1 - \frac{\omega_{\text{pl},e}^2}{\omega^2}} = 0, \text{ mit der kritischen Dichte } n_{\text{cr}} = \frac{m_e \omega^2 \epsilon_0}{e^2}. \quad (1.15)$$

Demnach wird das Plasma als überkritisch $n_e > n_{\text{cr}}$ bezeichnet, wenn der Prozess der inversen Bremsstrahlung dominiert und als unterkritisch $n_e < n_{\text{cr}}$ bezeichnet, wenn dieser Prozess weniger stark dominant ist. Physikalisch bedeutet das, dass das System im Fall von Anregungsfrequenzen oberhalb der Resonanzfrequenz analog zu einer erzwungenen Schwingung Energie aufnehmen kann. Für Anregungsfrequenzen unterhalb der Resonanzfrequenz ist keine Energieaufnahme zu beobachten, da hier während der Elektronenschwingung auf die Elektronen kein kontinuierliches Feld wirkt, wodurch es zu einer Dämpfung der Schwingung kommt. Im Fall eines überkritischen Systems wird die Strahlung vollständig an der Oberfläche absorbiert beziehungsweise reflektiert. Das geschieht innerhalb der Skintiefe $l = c/\omega_{\text{pl},e}$ [35], die von der freien Elektronendichte und über die kritische Dichte n_{cr} von der Laserfrequenz abhängig ist. Diese Tiefe kann größer ausfallen, wenn die mittlere freie Weglänge der oszillierenden Elektronen größer als die Skintiefe ist. Man spricht bei diesem Effekt vom anomalen Skineffekt.

Weiterhin kann Energie durch die Lorentzkraft

$$\mathbf{F}_L = -m(\mathbf{u} \cdot \nabla)\mathbf{u} - e \left(\mathbf{E} + \frac{1}{c} \mathbf{u} \times \mathbf{B} \right) \quad (1.16)$$

in das System einkoppeln. Hier bezeichnet \mathbf{E} das elektrische Feld, \mathbf{B} das magnetische Feld und \mathbf{u} die Elektronengeschwindigkeit. Wenn der letzte Term der rechten Seite mit den Maxwellgleichungen modifiziert wird, kann ein nicht-linearer Term der Lorentzkraft erhalten werden [89], die ponderomotische Kraft

$$\mathbf{f}_P = n_e \mathbf{F}_P = \frac{n_e e^2}{2m\omega^2} \nabla \langle I_0 \cos^2(\omega t) \rangle \quad (1.17)$$

in einem homogenen System. Diese Kraft ist in Abbildung 1.11 dargestellt und hat zur Folge, dass Elektronen eine Kraft in Richtung von Regionen geringerer Intensität erfahren, wodurch der Laser auf seiner Strahlachse das Plasma verdünnen kann. Das kann dazu führen, dass ein überkritisches Plasma unterkritisch wird. Es wird dann von einer selbst-induzierten Transparenz gesprochen. Dieser Effekt kann eine sogenannte Selbstfokussierung verursachen, bei der der Laserstrahl an der Grenzschicht zwischen Plasma und selbst-verdünntem Plasma in das verdünnte Plasma hinein gebrochen wird. Außerdem können durch diese ponderomotische Kraft neben den bereits genannten Elektronenoszillationen auch nicht-lineare Oszillationen auftreten. Das ist analog der Bug- und Heckwelle eines Schiffes zu verstehen, welches die tragende Flüssigkeit verdrängt. Dadurch können Elektronenoszillationen angeregt werden, die sogenannten Kielwasserwellen [34].

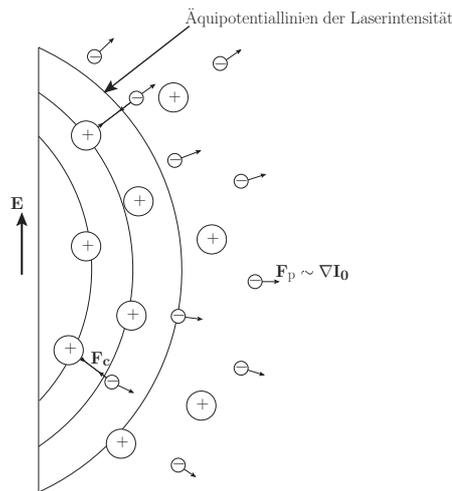


Abbildung 1.11: Illustration der Prozesse der ponderomotischen Kraft eines von links kommenden Laserfeldes. Die Elektronen werden entlang des Gradienten der Laserintensität aus dem Laserfeld heraus beschleunigt und können durch Coulombkräfte \mathbf{F}_c die Ionen mit beschleunigen. Wenn die Intensität hoch genug ist, kommt es zur selbst-induzierten Transparenz, wenn ausschließlich die Elektronen aus dem Laserfeld entweichen, oder bei zusätzlichem Entweichen der Ionen kommt es zum sogenannten Hole-Boring. Ansonsten werden die Elektronen wieder durch die Coulombkräfte zu den Ionen hin beschleunigt und es bildet sich eine nicht-lineare Oszillation, das Fahrwasserfeld, aus.

Damit wurde erläutert, wie Elektronen Energie durch Energiezustandsänderungen oder durch die Lorentzkraft beziehungsweise die ponderomotische Kraft absorbieren können.

Diese aus dem Laserfeld gewonnene Elektronenenergie kann wiederum durch Elektronen-Ionen-Stöße auf die Ionen übertragen werden. Somit wirkt der Laser indirekt auch auf die Ionen. Das hat zum Beispiel im Fall der ponderomotischen Kraft zur Folge, dass die Ionen beim Prozess der selbst-induzierten Transparenz aufgrund von Coulombkräften den Elektronen aus dem Laserfokus heraus folgen. Daher entsteht ein Bereich mit niedriger Gesamtdichte. Diesen Prozess bezeichnet man als Hole-Boring [34, 35] und ist aus Abbildung 1.11 ersichtlich.

Weiterhin können sich die Plasmaoszillationen über die Grenzen des eigentlichen Materials hinaus ausdehnen, wobei die Ionen den Elektronen aus dem Material heraus folgen können. Dadurch entsteht ein dünnes Plasma vor dem eigentlichen Plasma. Dieser Effekt ist der Brunel-Effekt [33, 34]. Wenn dieser Prozess von einer nicht-linearen Oszillation angetrieben wird, spricht man stattdessen von der $\mathbf{j} \times \mathbf{B}$ Aufheizung [34].

Ein weiterer wichtiger Prozess ist der Wärmetransport, bei dem die warmen und heißen Elektronen und die warmen Ionen ins Innere des Materials transportiert werden, wodurch ein Plasma im Inneren des Materials entstehen kann. Dadurch beeinflusst der Laser auch Materialregionen, in die dieser nicht direkt eindringen kann.

Damit wurden die wichtigsten Prozesse, die während der Laser-Materie-Wechselwirkung auftreten können, qualitativ beschrieben. Speziell die Prozesse der inversen Bremsstrahlung und der Streuung werden im Kapitel 2 quantitativ beschrieben.

1.4 Ziel der Arbeit

In dieser Arbeit wird ein vollständiges Pump-Probe-Experiment simuliert und das resultierende Thomsonstreuungsspektrum berechnet. Diese Rechnungen werden auf Wasserstoff- und Heliumtropfen als auch auf Kohlenstofffolien angewendet.

Aufbauend auf früheren Arbeiten, in denen es aufgrund der in Abschnitt 1.2.2 beschriebenen Rückstrahlermethode ausreichte, die Thomsonstreuung für homogenen Plasmen im thermischen Gleichgewicht einige Nanosekunden nach Erzeugung dieses Plasmas theoretisch zu beschreiben [14, 36, 93], wird hier weiterführend die Thomsonstreuung von inhomogenen Plasmen direkt nach ihrer Erzeugung untersucht. Das wird aufgrund der in 1.2.2 erläuterten Anwendung von FELs als Röntgenquellen mit kurzen Pulsdauern, mit denen die Ultrakurzzeitphysik während und nach der Laser-Materie-Wechselwirkung experimentell messbar wurde, notwendig. Die Methode zur Berechnung der Thomsonstreuung von inhomogenen Plasmen wurde bereits für schwache Laserintensitäten und Plasmen mit kleinen Dichte- und Temperaturgradienten für ein Probe-Experiment in der Arbeit [94] vorgestellt und wird in dieser Arbeit durch die Beschreibung eines vollständigen Pump-Probe-Experiments mit einem intensiven optischen Laser für die Plasmaerzeugung erweitert.

Als Teil der Kollaboration für die Durchführung der ersten Pump-Probe-Experimente zur Thomsonstreuung an FELs (FLASH und LCLS) besteht das Ziel dieser Arbeit in der vollständigen Charakterisierung solch eines Pump-Probe-Experiments. Dazu gehört die Simulation der Wechselwirkung intensiver Laserpulse mit Plasmen sowohl auf ultrakurzen Zeitskalen im Femtosekundenbereich für die Beschreibung des Wechselwirkungsprozesses als auch auf kurzen Zeitskalen im Pikosekundenbereich zur Beschreibung von Elektronen-Ionen-Relaxationsprozessen. Mit den durch die Simulationen gewonnenen zeitlich aufgelösten Dichte- und Temperaturprofilen ist es möglich die Spektren der Thomsonstreuung von Röntgenstrahlung während des gesamten Pump-Probe-Vorgangs des Experiments zu bestimmen. Mit den berechneten Thomsonstreuungsspektren können ver-

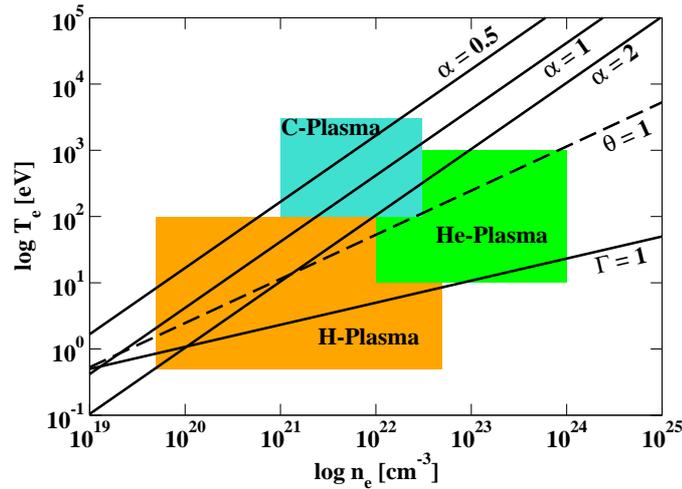


Abbildung 1.12: Darstellung der in dieser Arbeit mittels Thomsonstreuung untersuchten Plasmen in der Dichte-Temperatur-Ebene. Es werden laser-induzierte Wasserstoff-, Helium- und Kohlenstoffplasmen untersucht. Zur Übersicht ist der Kopplungsparameter Γ und der Entartungsparameter θ dargestellt. Demnach werden entartete und nicht-entartete und vorwiegend schwach gekoppelte Plasmen untersucht. Der Streuparameter α ist hier für die Thomsonstreuung der FLASH-Photonen mit einer Wellenlänge von $\lambda = 13.5$ nm unter einem Streuwinkel von $\theta_S = 90^\circ$ dargestellt, der sowohl kollektive als auch nicht-kollektive Thomsonstreuung vorhersagt.

gleiche mit experimentell ermittelten Spektren gemacht werden, wodurch Rückschlüsse auf das Verhalten während und nach der Licht-Materie-Wechselwirkung gemacht werden können. Hier liegen speziell die Elemente Wasserstoff, das am FLASH untersucht wurden, und Kohlenstoff, das am LCLS untersucht wurde, im Vordergrund. Darüber hinaus wurde auch eine Simulation für Helium durchgeführt. Die in dieser Arbeit betrachteten Plasmen sind zur Übersicht in der Abbildung 1.12 dargestellt.

Mit den im Rahmen dieser Arbeit entwickelten Methoden ist es möglich Thomsonstreuungsspektren von Pump-Probe-Experimenten mit Verzögerungszeiten ab einigen 100 Femtosekunden zu berechnen. Damit können im Gegensatz zu früheren Arbeiten [14, 16, 85] erstmals auch inhomogene Plasmen und die zeitliche Entwicklung dieser Plasmen auf kurzen Zeitskalen untersucht werden.

Die Arbeit baut sich wie folgt auf. Im ersten Kapitel wurden bereits die benötigten Grundlagen für die Plasmaphysik und die Thomsonstreuung gelegt. Zudem wurde hier der Aufbau und frühere Ergebnisse von Pump-Probe-Experimenten, die mittels Thomsonstreuung untersucht wurden, vorgestellt. In den beiden folgenden Kapiteln werden die theoretischen Grundlagen der Thomsonstreuung, der Laser-Plasma-Wechselwirkung und der zeitlichen Entwicklung von laser-induzierten Plasmen beschrieben. Danach werden in den Kapiteln 4-6 die Ergebnisse der Arbeit präsentiert, um im letztem Kapitel die Ergebnisse zusammenzufassen und Ausblicke für weitere Arbeiten auf diesem Gebiet zu geben.

2 Laser-Materie-Wechselwirkung

Für die Beschreibung der Thomsonstreuung eines laser-induzierten Plasmas muss zuerst die Laser-Materie-Wechselwirkung untersucht werden. Aufbauend auf einem quantenstatistischen Ansatz wird die Licht-Materie-Wechselwirkung in dieser Arbeit mit Hilfe der dielektrischen Funktion beschrieben, die das Verhalten von Materie unter dem Einfluss von durch Laser oder Plasmen erzeugten, elektrischen Feldern charakterisiert. In Verbindung mit der Struktur der Materie kann daraus das Thomsonstreusignal berechnet werden. Damit ist es möglich experimentelle Thomsonstrespektren theoretisch zu rekonstruieren und daraus Plasmadichten und -temperaturen zu extrahieren.

2.1 Dielektrische Funktion

In diesem Abschnitt wird ein Zugang zur Beschreibung der Licht-Materie Wechselwirkung aufgezeigt. Dazu werden für die Beschreibung des Verhaltens der Felder in Materie die makroskopischen Maxwellgleichungen in Medien [60]

$$\nabla \cdot \mathbf{D} = \rho, \quad (2.1)$$

$$\nabla \times \mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t}, \quad (2.2)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0, \quad (2.3)$$

$$\nabla \times \mathbf{H} = \mathbf{j} + \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t} \quad (2.4)$$

eingeführt [60]. Hier wurde die makroskopische Ladungsdichte ρ , die makroskopische Stromdichte \mathbf{j} , die elektrische Feldstärke $\mathbf{E}(\mathbf{r}, t)$ und die magnetische Flussdichte $\mathbf{B}(\mathbf{r}, t)$ eingeführt. Diese sind über die Materialgleichungen

$$\begin{aligned} \mathbf{D}(\mathbf{r}, t) &= \varepsilon_0 \varepsilon(\mathbf{r}, t) \mathbf{E}(\mathbf{r}, t), \\ \mathbf{B}(\mathbf{r}, t) &= \mu_0 \mu(\mathbf{r}, t) \mathbf{H}(\mathbf{r}, t) \end{aligned} \quad (2.5)$$

durch den dielektrischen Tensor $\varepsilon(\mathbf{r}, t)$, die magnetische Permeabilität $\mu(\mathbf{r}, t)$, die magnetische Feldkonstante μ_0 und die elektrische Feldkonstante ε_0 mit der magnetischen Feldstärke $\mathbf{H}(\mathbf{r}, t)$ und der elektrischen Flussdichte $\mathbf{D}(\mathbf{r}, t)$ verknüpft.

Um die Materialgleichungen zu verstehen, muss etwas genauer auf die oben eingeführte makroskopische Ladungsdichte ρ und makroskopische Stromdichte \mathbf{j} eingegangen werden. Diese Größen setzen sich aus den „freien“, externen und den durch das Plasma induzierten Quellen zusammen. Hierbei werden die „freien“ und externen Quellen durch äußere Einflüsse, wie Laserfelder oder magnetische Felder, erzeugt, während die induzierten Felder aufgrund von elektrischen oder magnetischen Dipol-, Quadrupolmomenten und höheren Momenten erzeugt werden. Die elektrischen und magnetischen Momente können speziell bei starken Feldern sehr kompliziert werden. Um diese durch Quellen induzierten Felder zu berücksichtigen, wird das magnetische Feld mit der Feldstärke \mathbf{H} und die elektrische Induktion mit der Flussdichte \mathbf{D} eingeführt [60] (hier in der Komponente α),

$$D_\alpha = \varepsilon_0 E_\alpha + (P_\alpha - \dots), \quad (2.6)$$

$$H_\alpha = \frac{1}{\mu_0} B_\alpha - (M_\alpha + \dots). \quad (2.7)$$

Hierbei ist \mathbf{P} der Polarisationsvektor, das elektrische Dipolmoment bezogen auf ein Volumenelement, und \mathbf{M} der Magnetisierungsvektor, das magnetische Dipolmoment bezogen auf ein Volumenelement. Der erste Term der rechten Seite dieser Gleichungen stellt dabei das Feld im Vakuum dar, wobei die höheren Momente wie Quadrupol- und Oktupolmomente nicht mit aufgeführt wurden.

Diese Gleichungen werden zusammengefasst zu

$$D_\alpha(\mathbf{r}, t) = \varepsilon_0 \sum_{\beta} \varepsilon_{\alpha\beta}(\mathbf{r}, t) E_\beta(\mathbf{r}, t), \quad (2.8)$$

$$H_\alpha(\mathbf{r}, t) = \mu_0^{-1} \sum_{\beta} \mu_{\alpha\beta}^{-1}(\mathbf{r}, t) B_\beta(\mathbf{r}, t), \quad (2.9)$$

mit dem dielektrischen Tensor ε , auch dielektrische Funktion genannt, und dem Tensor der magnetischen Permeabilität μ . Damit wurden alle im Plasma durch mikroskopische Quellen induzierten Felder in den Feldern der Flussdichte \mathbf{D} und Feldstärke \mathbf{H} berücksichtigt, wobei die volle Information des Plasmas in den jeweiligen Tensoren ε und μ enthalten ist. Diese Tensoren hängen ebenfalls von Raum und Zeit ab. Aufgrund der enthaltenen Materialinformation in den Tensoren, und damit in den induzierten Feldern, werden diese Gleichungen auch Materialgleichungen genannt.

Bei der Betrachtung der induzierten Felder \mathbf{D} und \mathbf{H} in einem gegebenen Volumenelement und zu einem gegebenen Zeitpunkt stellt sich folgendes Problem: Aufgrund der geladenen Teilchen eines Plasmas werden Felder induziert, die nicht nur lokal in einem Raumgebiet herrschen, sondern auch darüber hinaus das gesamte Plasma beeinflussen können. Ebenso kann das betrachtete Feld auch die Trajektorien von geladenen Teilchen beeinflussen, die wiederum ein Feld induzieren. Das heißt, dass die elektrischen und magnetischen Felder eines Volumenelements durch induzierte Felder beeinflusst werden, die ihre Ursache in ganz anderen Raumgebieten haben. Man spricht von einer räumlichen Nichtlokalität. Darüber hinaus können zeitlich vergangene Felder das Plasma beeinflussen, wodurch die induzierten Felder ihre Ursache in vergangenen Zeitpunkten haben und somit Felder zu späteren Zeiten beeinflussen können. Damit hängen die induzierten Felder nicht nur von den momentanen Feldern, sondern auch von den Feldern aller vorangegangenen Zeiten ab [95]. Unter Berücksichtigung der vorherigen Überlegungen ist die einfachste Form die Gleichungen (2.8) darzustellen, durch

$$D_\alpha(\mathbf{r}, t) = \varepsilon_0 \sum_{\beta} \int d\mathbf{r}' \int dt' K_{\alpha\beta}(\mathbf{r}', t') E_\beta(\mathbf{r} - \mathbf{r}', t - t'), \quad (2.10)$$

mit dem Kern $K_{\alpha\beta}$, gegeben. Im Folgenden werden nur die elektrischen Eigenschaften eines Plasmas untersucht, wodurch das induzierte Feld \mathbf{H} hier nicht weiter betrachtet wird.

Wenn man die induzierten Felder \mathbf{E} und \mathbf{D} als Superposition ebener Wellen, also proportional zu $\exp\{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)\}$, auffasst, erhält man den linearen Zusammenhang

$$D_\alpha(\mathbf{k}, \omega) = \varepsilon_0 \sum_{\beta} \varepsilon_{\alpha\beta}(\mathbf{k}, \omega) E_\beta(\mathbf{k}, \omega), \quad (2.11)$$

mit dem Wellenzahlvektor \mathbf{k} des betrachteten Feldes, der Kreisfrequenz ω und der dielektrischen Funktion im Fourierraum

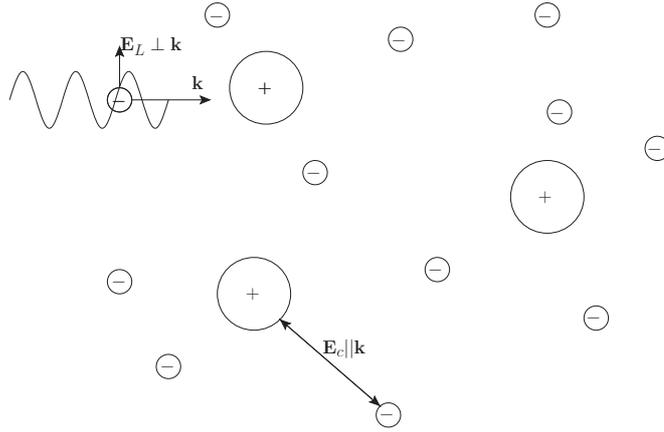


Abbildung 2.1: Darstellung der Felder und der entsprechenden Wellenzahlvektoren in einem Plasma. Es sind die elektrischen Felder der Coulombkraft \mathbf{E}_c und eines Lasers \mathbf{E}_L und die Wellenzahlvektoren \mathbf{k} bei der Wechselwirkung dargestellt. Zudem ist hier der Unterschied zwischen dem transversalen Anteil, der das Verhalten von Materie unter dem Einfluss von optischen elektrischen Feldern (\mathbf{E}_L) und somit die optischen Eigenschaften des Plasmas beschreibt, und dem longitudinalen Anteil, der das Verhalten von Materie aufgrund der Wechselwirkung der Teilchen untereinander (\mathbf{E}_c) und somit die Plasmaeigenschaften beschreibt, nicht maßstabsgetreu für ein isotropes Medium zu sehen.

$$\varepsilon_{\alpha\beta}(\mathbf{k}, \omega) = \int d\mathbf{r}' \int dt' K_{\alpha\beta}(\mathbf{r}', t') e^{i(\omega t' - \mathbf{k} \cdot \mathbf{r}')}. \quad (2.12)$$

Aus dieser Darstellung folgt die Eigenschaft

$$\varepsilon_{\alpha\beta}(-\mathbf{k}, -\omega) = \varepsilon_{\alpha\beta}^*(\mathbf{k}, \omega). \quad (2.13)$$

Durch die Transformation der Materialgleichungen erhalten die Tensoren eine ausgezeichnete \mathbf{k} -Richtung, aufgrund derer die dielektrischen Tensoren in zwei Anteile aufspalten: Einen Anteil der longitudinal ε_l und einen der transversal ε_{tr} zum Wellenzahlvektor ist,

$$\varepsilon_{\alpha\beta}(\mathbf{k}, \omega) = \varepsilon_{tr}(k, \omega) \left(\delta_{\alpha\beta} - \frac{k_\alpha k_\beta}{k^2} \right) + \varepsilon_l(k, \omega) \frac{k_\alpha k_\beta}{k^2}. \quad (2.14)$$

Diese beiden Anteile und ihre Bedeutung in einem Plasma sind in Abbildung 2.1 dargestellt. Aufgrund der ausgezeichneten Richtung vereinfacht sich die Gleichung (2.11) auch im isotropen Fall nicht. Allerdings verliert der dielektrische Tensor dann seine Abhängigkeit des Wellenzahlvektors \mathbf{k} und ist nur von der Wellenzahl k abhängig. Weiterhin kann das elektrische Feld dann als senkrecht zur Polarisationsrichtung angenommen werden, was in den folgenden Abschnitten nützlich sein wird. Nur für $|\mathbf{k}| \rightarrow 0$ verschwindet die zuvor erläuterte ausgezeichnete Richtung und der Tensor kann durch $\varepsilon_{\alpha\beta}(0, \omega) = \varepsilon(0, \omega) \delta_{\alpha\beta}$ ausgedrückt werden. Damit muss auch $\varepsilon(0, \omega) = \varepsilon_{tr}(0, \omega) = \varepsilon_l(0, \omega)$ gelten.

In der dielektrischen Funktion ε beschreibt der transversale Teil die optischen Eigenschaften des Mediums, wobei das transversale Feld auf eine gewöhnliche elektromagnetische Welle reduziert werden kann. Dieser Anteil folgt damit der einfachen Dispersion für transversale Wellen $\omega/|\mathbf{k}| = c/\sqrt{\varepsilon_{\text{tr}}}$ (magnetische Permeabilität für unmagnetisierte Materialien $\mu = 1$), mit der sich Brechung und Absorption des Feldes im Plasma beschreiben lässt. Der longitudinale Anteil beschreibt dagegen die Eigenschaften des Plasmas, welcher somit für die Diagnostik von Materialien interessant ist, da die Messung dieses Anteils auch Aufschluss über die Materie gibt.

2.1.1 Transversale dielektrische Funktion

In diesem Unterabschnitt wird die Dispersion der transversalen elektromagnetischen Welle in isotroper Materie beschrieben. Dazu wird in der Coulomb-Eichung

$$\nabla \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = \nabla \mathbf{A}(\mathbf{r}, \omega) = 0 \quad (2.15)$$

das Vektorpotential $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$ durch

$$\mathbf{B}(\mathbf{r}, t) = \nabla \times \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) \quad (2.16)$$

und das skalare Potential $\Phi(\mathbf{r}, t)$ durch

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = -\nabla \Phi(\mathbf{r}, t) - \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) \quad (2.17)$$

eingeführt. Damit lässt sich nach Einsetzen dieser Gleichungen in die Maxwellgleichungen (2.1) und (2.4) die Poissongleichung zur Beschreibung des Potentials der Ladungsträger

$$\Delta \Phi(\mathbf{r}, t) = -\frac{\rho(\mathbf{r}, t)}{\varepsilon_0 \varepsilon(\mathbf{r}, t)} \quad (2.18)$$

aufstellen. Nach Fouriertransformation der Zeit kann unter Nutzung der Coulombgleichung (2.15) die Helmholtzgleichung zur Beschreibung der Ausbreitung elektromagnetischer Wellen

$$-\omega^2 \frac{1}{c^2} \varepsilon(\mathbf{r}, \omega) \mathbf{A}(\mathbf{r}, \omega) - \Delta \mathbf{A}(\mathbf{r}, \omega) = \underbrace{\mu_0 \mathbf{j}(\mathbf{r}, \omega) + i\omega \frac{1}{c^2} \varepsilon(\mathbf{r}, \omega) \nabla \Phi(\mathbf{r}, \omega)}_{\mu_0 \mathbf{j}_{\text{tr}}} \quad (2.19)$$

gewonnen werden [60]. Hier wurde für ein unmagnetisiertes Material die magnetische Permeabilität $\mu = 1$ gesetzt. Es muss erwähnt werden, dass dieses Ergebnis nur dann gilt, wenn die dielektrische Funktion nicht zeitabhängig ist. Unter der Tatsache, dass sich das Vektorfeld \mathbf{A} wesentlich schneller als die Eigenschaften des Plasmas ändert, kann angenommen werden, dass sich innerhalb der betrachteten Zeitintervalle die dielektrische Funktion nicht ändert.

Die rechte Seite der Helmholtzgleichung (2.19) kann als transversaler Strom \mathbf{j}_{tr} identifiziert werden, was aus dem Gradienten des Potentials im letzten Term der Gleichung (2.19) ersichtlich ist, da, wie in Abbildung 2.1 gezeigt, dessen Richtung longitudinal beziehungsweise parallel zum Coulombfeld verläuft. Aufgrund der angenommenen Isotropie muss der dielektrische Tensor somit ebenfalls longitudinal sein, wodurch ein longitudinaler Strom vom Gesamtstrom abgezogen [60, 96] und damit ein transversaler Gesamtstrom \mathbf{j}_{tr} erhalten wird. Damit entkoppeln die Potentialgleichungen (2.18) und (2.19) und

die Helmholtzgleichung (2.19) ist durch den transversalen Strom eine Gleichung für das transversale Vektorfeld \mathbf{A} , weshalb nur der transversale Anteil $\varepsilon_{\text{tr}}(\mathbf{r}, \omega)$ der dielektrischen Funktion $\varepsilon(\mathbf{r}, \omega)$ in diese Gleichung eingeht. Durch das Einführen der Wellenzahl $k(\omega)$ in der Helmholtzgleichung (2.19), dessen Betrag durch die Dispersionsrelation

$$k(\omega) = \frac{\omega}{c} \sqrt{\varepsilon_{\text{tr}}(k, \omega)} \quad (2.20)$$

mit der Frequenz des elektromagnetischen Feldes ω und dem dielektrischen Tensor ε verknüpft ist, kann eine Beziehung zwischen Ausbreitung der elektromagnetischen Welle und den Materialeigenschaften hergestellt werden. Hier sei noch einmal erwähnt, dass aufgrund der Annahme der Isotropie diese Gleichung nicht von der Richtung des Wellenzahlvektors \mathbf{k} abhängt.

Die Dispersionsrelation (2.20) beschreibt die Ausbreitung elektromagnetischer Wellen im Material und muss aufgrund des Wellencharakters der Differentialgleichung (2.19) komplex sein [60],

$$k(\omega) = \frac{\omega}{c} b(k, \omega) + i \frac{\alpha(k, \omega)}{2}, \quad (2.21)$$

mit dem Brechungsindex $b(k, \omega)$ und dem Absorptionskoeffizienten $\alpha(k, \omega)$. Diese Aufspaltung kann verstanden werden, wenn die Lösung der Gleichung (2.19) im homogenen, eindimensionalen Fall betrachtet wird,

$$A = A_0 e^{-ikx}. \quad (2.22)$$

Demnach kann die Dämpfung des Feldes durch den Imaginärteil der Wellenzahl, den Absorptionskoeffizienten, beschrieben werden, während die Ausbreitung des Feldes durch den Realteil der Wellenzahl, den Brechungsindex, charakterisiert werden kann.

Durch Quadrieren der Gleichung (2.21) und der Separation des Real- und Imaginärteils von ε_{tr} mit Hilfe der Dispersionsrelation (2.20) ergibt sich für den Brechungskoeffizienten b und den Absorptionskoeffizienten α [60]

$$\begin{aligned} b(k, \omega) &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\text{Re}(\varepsilon_{\text{tr}}(k, \omega)) + \sqrt{[\text{Re}(\varepsilon_{\text{tr}}(k, \omega))]^2 + [\text{Im}(\varepsilon_{\text{tr}}(k, \omega))]^2} \right)^{1/2}, \\ \alpha(k, \omega) &= \frac{\omega}{c b(k, \omega)} \text{Im}(\varepsilon_{\text{tr}}(k, \omega)). \end{aligned} \quad (2.23)$$

Somit kann sowohl die Absorption als auch die Brechung transversaler elektromagnetischer Wellen durch die transversale dielektrische Funktion $\varepsilon_{\text{tr}}(k, \omega)$ berechnet werden, womit die Wechselwirkung zwischen Licht und Materie durch diese Funktion beschrieben werden kann.

Um die Absorption der elektromagnetischen Welle in einem Medium durch Gleichung (2.23) zu beschreiben, muss die transversale dielektrische Funktion bekannt sein. Das kann analog wie in Abschnitt 1.2 in einem schwach korrelierten System, in dem die induzierten elektrischen Felder schwach sind, durch ein einfaches Oszillatormodell einer gedämpften, erzwungenen Schwingung der Elektronen durch Gleichung (1.7) beschrieben werden. Dieses einfache Modell kann in Anwesenheit eines Laserfeldes angenommen werden, da sich die induzierten Felder diesem Feld anpassen, womit die hier angenommenen Dipole überwiegen, und Multipole vernachlässigt werden können. Bei Annahme eines harmonischen Laserfeldes $\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{E}(\mathbf{r}) e^{-i\omega t}$ kann die Lösung (1.8) mit dem Dipolmoment \mathbf{d} in Verbindung gebracht werden. Unter Nutzung der Gleichung für die

Polarisation $\mathbf{P} = n_i \sum_j f_j \mathbf{d}_j = \varepsilon_0(\varepsilon_{\text{tr}} - 1)\mathbf{E}$, mit der Dipoldichte n_i der Ionensorte i und der Oszillatorstärke f_j eines Oszillators j , kann die Drude-Formel aus (1.8) hergeleitet werden,

$$\varepsilon_{\text{tr}}(\omega) = 1 + \frac{e^2 n_i}{m \varepsilon_0} \sum_j \frac{f_j}{\omega_{0,j}^2 - \omega^2 - i\omega\nu_j}. \quad (2.24)$$

Hier hängt der Polarisationsvektor \mathbf{P} von der transversalen dielektrischen Funktion ab, da aufgrund der Annahme der Isotropie die Polarisation parallel zum transversalen elektrischen Feld der Feldstärke \mathbf{E} sein muss.

Für die zu betrachtende Laser-Materie-Wechselwirkung werden nur die Elektronen berücksichtigt, da diese, wie in Abschnitt 1.3 beschrieben, im Gegensatz zu den Ionen Energie aus dem Laserfeld aufnehmen können. Daher sind für die Absorption von Licht durch Materie allein die Elektronen verantwortlich. In dieser Arbeit wird ausschließlich der in Abschnitt 1.3 eingeführte Prozess der inversen Bremsstrahlung berücksichtigt, da dieser Prozess in überkritischen Materialien den größten Einfluss hat. Aufgrund der kleinen Rückstellkräfte $e^2 \omega_0^2 \mathbf{E}/m$ ist die Teilcheneigenschwingung $\omega_0 = \omega_{\text{pl},e} \ll \omega$. Zudem ist in einem homogenen System die Dämpfung ν für jedes freie Elektron identisch. Dabei darf das betrachtete Volumen nicht zu groß sein, um Inhomogenitäten zu vermeiden. Die Dämpfung ist in diesem Fall die Stoßfrequenz, die die Elektron-Elektron und Elektron-Ion-Stöße beschreibt und kann für klassische, schwach gekoppelte Systeme durch den Formalismus nach Spitzer und Härn

$$\nu_{\text{St}} = \frac{4\sqrt{2\pi} Z^2 e^4 n_i}{3(4\pi\varepsilon_0)^2 \sqrt{m_e}} \frac{\ln \Lambda}{(k_B T)^{3/2}} \quad (2.25)$$

berechnet werden [97, 98]. Hier wurde der Coulomblogarithmus

$$\ln \Lambda = 0.25 \ln \left[1 + \left(\frac{2\lambda_D}{g_0} \right)^4 \right], \quad (2.26)$$

bei dem die Debyelänge λ_D (1.4), die Größe $g_0 = \hbar/\sqrt{2m_r k_B T}$ und die reduzierte Masse m_r der wechselwirkenden Teilchen verwendet wurde, benutzt [99]. Dabei charakterisiert Λ das Verhältnis des maximalen zum minimalen Abstand zwischen den Schwerpunkten der Stoßpartner und kann somit sehr willkürlich sein. Vereinfachend kann die transversale dielektrische Funktion (2.24) als

$$\varepsilon_{\text{tr}}(\omega) = 1 - \frac{\omega_{\text{pl},e}^2}{\omega^2 + i\omega\nu} \quad (2.27)$$

geschrieben werden, wobei die Summe $n_i \sum_j f_j = Z_f n_i = n_e$ durch die f-Summenregel [60] gegeben ist. Das entspricht einer Wichtung nach der Anzahl der Dipole pro Ion Z_f , also hier der freien Elektronen pro Ion. Zur Vereinfachung der Formel (2.27) wurde die Plasmafrequenz der Elektronen (1.9) benutzt, die der kollektiven Schwingung der freien Elektronen um die Ionen entspricht. Somit kann die Absorption der transversalen elektromagnetischen Welle im Plasma durch den Absorptionskoeffizienten

$$\alpha(k, \omega) = \frac{\omega}{c b(k, \omega)} \text{Im} \left(1 - \frac{\omega_{\text{pl},e}}{\omega^2 + i\omega\nu} \right) \quad (2.28)$$

gegeben werden. Dieser Absorptionskoeffizient wurde bereits in Abbildung 1.4 in Abhängigkeit von der Elektronendichte und der Laserfrequenz dargestellt. Anhand dieser Abbildung ist zu erkennen, dass bei Frequenzen oberhalb der Plasmalfrequenz der Absorptionskoeffizient stark abfällt, wohingegen für Frequenzen unterhalb der Plasmalfrequenz der Absorptionskoeffizient stark ansteigt. Das heißt, dass im Gegensatz zu kleinen Laserfrequenzen bei großen Laserfrequenzen die Laserenergie weniger stark auf das Plasma übertragen wird. Das kann mit Gleichung (1.7) begründet werden, die die Form einer gedämpften, erzwungenen Schwingung besitzt. Demnach ist die Energieübertragung der äußeren Kraft bei der Resonanzfrequenz, hier der Plasmalfrequenz, am größten. Weiterhin kann für kleinere Frequenzen ein größerer Energieübertrag als bei großen Frequenzen beobachtet wird.

Damit ist die transversale dielektrische Funktion und somit die Kopplung zwischen transversalem Laserfeld und dem Plasma bekannt. Im nächsten Unterabschnitt wird die longitudinale dielektrische Funktion betrachtet und mit ihr die Streuung von elektromagnetischen Wellen an Plasmen.

2.1.2 Longitudinale dielektrische Funktion

In diesem Unterabschnitt wird die longitudinale dielektrische Funktion betrachtet, die für die Diagnostik von Materialien eine zentrale Rolle spielt, da sie mit der Struktur der Elektronen und Ionen untereinander verknüpft ist und somit Informationen über das Plasma enthält. Mit dieser longitudinalen dielektrischen Funktion können neben der Dispersion auch Streueffekte, unter anderem auch Thomsonstreuung, beschrieben werden. Hierzu wird ein kleiner Ausblick in die Technik der Greenfunktionen und der Theorie der linearen Response aufgezeigt, die in [100, 101] im Detail nachgelesen werden können.

Für die Beschreibung der longitudinalen dielektrischen Funktion werden zuerst Responsefunktionen eingeführt. Die Responsefunktion der Polarisation Π , auch Polarisationsfunktion genannt, beschreibt das Verhalten des Materials aufgrund eines Feldes, das sich sowohl aus externen als auch internen induzierten Feldern zusammensetzt, und charakterisiert die im Material auftretenden Polarisierungen (Einfluss von Multipolen) aufgrund von vorhandenen Feldern. Die Responsefunktion der Dichte-Fluktuationen L beschreibt das Verhalten des Materials aufgrund von externen Feldern und kann als Wechselwirkung zwischen Dichte-Fluktuationen im System, die direkt mit longitudinalen Feldfluktuation in Verbindung stehen, aufgefasst werden.

Um diese Responsefunktionen mit der longitudinalen dielektrischen Funktion zu verknüpfen, werden die im Plasma auftretenden Wechselwirkungen betrachtet. In einem Plasma wirken die langreichweitigen Coulombkräfte zwischen allen Teilchen. Diese Kräfte beschreiben die gesamten Korrelationen in einem System. Da nicht jedes einzelne Teilchen der in etwa 10^{23} cm^{-3} Teilchen und seine Wechselwirkungen in einem Plasma berechnet werden können, bedient man sich statistischen Effekten: Nach Abschnitt 1.1 kann aufgrund der Abschirmung der Ladung durch entgegengesetzt geladene Teilchen die Langreichweitigkeit der Coulombkräfte verkürzt werden. Damit kann zwischen Teilchen der Komponente a und der Komponente b anstatt des unendlich weit wirkenden Coulombpotentials $V_{ab}(r_{1,2}) \sim |\mathbf{r}_{1,a} - \mathbf{r}_{2,b}|^{-1}$ das abgeschirmte Potential

$$V_{ab}^s(\mathbf{k}, \omega) = \frac{V_{ab}(k)}{\varepsilon_1(\mathbf{k}, \omega)} \quad (2.29)$$

verwendet werden [101]. Diese Gleichung beschreibt die Abschirmung des Coulombpotentials aufgrund von induzierten Multipolen in longitudinale Richtung.

Die Responsefunktionen der Polarisation Π und der Dichte-Fluktuation L können ebenfalls mit dem abgeschirmten Potential in Verbindung gebracht werden [101],

$$V_{ab}^s(\mathbf{k}, \omega) = V_{ab}(k) + \sum_{cd} V_{ac}(k) \Pi_{cd}(\mathbf{k}, \omega) V_{db}^s(\mathbf{k}, \omega), \quad (2.30)$$

$$V_{ab}^s(\mathbf{k}, \omega) = V_{ab}(k) + \sum_{cd} V_{ac}(k) L_{cd}(\mathbf{k}, \omega) V_{db}(k). \quad (2.31)$$

Hierbei beschreiben diese Funktionen das abgeschirmte Potential V^s durch das ungestörte feldfreie Coulombpotential, das durch einen Anteil der Responsefunktionen aufgrund von vorhandenen Feldern modifiziert ist. Die Polarisations- und Dichte-Fluktuationseffekte zwischen allen Teilchensorten werden hier summiert, da diese zur Abschirmung des Potentials zwischen den Teilchensorten a und b führen können. Dabei kann Gleichung (2.30) durch das Auftreten des abgeschirmten Potentials auf der rechten Seite unendlich weiter fortgesetzt werden und beschreibt die Existenz von unendlich vielen Polarisations- und Dichte-Fluktuationseffekten zwischen den wechselwirkenden Teilchen. Die zweite Gleichung (2.31) beschreibt die Modifikation des Coulombfeldes aufgrund von vorhandenen Dichte-Fluktuationen. Unter Annahme eines isotropen Mediums können diese Effekte als longitudinal angesehen werden, da dann, wie in Abbildung 2.1 gezeigt, die Polarisation parallel zum elektrischen Feld sein muss, welches in diesem Fall das longitudinale Coulombfeld ist. Daher werden zur Vereinfachung im Folgenden nur isotrope Medien betrachtet.

Durch einfache Umformungen der Gleichungen (2.30) und (2.31), dem Coulombpotential $V_{ab}(k) = Z_a e_a Z_b e_b / (\epsilon_0 k^2)$ und der Gleichung (2.29) können die Verknüpfungen der dielektrischen Funktion mit den Responsefunktionen gefunden werden,

$$\epsilon_1(k, \omega) = 1 - \sum_{ab} \Pi_{ab}(k, \omega) V_{ba}(k), \quad (2.32)$$

$$\epsilon_1^{-1}(k, \omega) = 1 + \sum_{ab} L_{ab}(k, \omega) V_{ba}(k). \quad (2.33)$$

Durch diese Gleichungen ist es möglich, den longitudinalen Anteil der dielektrischen Funktion und dadurch die Eigenschaften des Materials mit Dichte-Fluktuationen beziehungsweise Polarisations- und Dichte-Fluktuationen in Verbindung zu bringen.

Für eine weitere Untersuchung des Problems wird Gleichung (2.33) in der komplexen Ebene fortgeführt und eine spektrale Beschreibung der Responsefunktion der Dichte-Fluktuationen eingeführt. Die spektrale Beschreibung erlaubt eine Aussage über die erlaubten Zustände, hier der Dichte-Fluktuationen, und stellt somit eine verallgemeinerte Zustandsdichte dar. Damit kann diese Funktion und somit auch die longitudinale dielektrische Funktion in einen Realteil und einen Imaginärteil aufgespalten werden. Dazu wird die Responsefunktion L betrachtet, die mit den zeitgeordneten Responsefunktionen $L^>$ und $L^<$, die die zwei Fälle $t > t'$ und $t < t'$ beschreiben, im Orts- und Zeit-Raum in

$$L(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; t - t') = \Theta(t - t') [L^>(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; t - t') - L^<(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; t - t')] \quad (2.34)$$

zerlegt werden kann. Dabei ist die Heavisidefunktion Θ für die Steuerung der Kausalität verantwortlich. Wenn diese Funktion unter Verwendung der Integraldarstellung der Heavisidefunktion

$$\Theta(t - t') = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{i}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-ix(t-t')}}{x + i\epsilon} dx, \quad \epsilon > 0, \quad (2.35)$$

fouriertransformiert wird, erhält man nach Substitution

$$L(\mathbf{k}, \omega) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\hat{L}(\mathbf{k}, \omega')}{\omega - \omega' + i\epsilon} d\omega', \quad (2.36)$$

wobei die Spektralfunktion

$$\hat{L}(\mathbf{k}, \omega) = i(L^>(\mathbf{k}, \omega) - L^<(\mathbf{k}, \omega)) \quad (2.37)$$

der Responsefunktion L benutzt wurde.

Daraus gewinnt man für die longitudinale dielektrische Funktion die spektrale Darstellung

$$\varepsilon_1^{-1}(k, \omega) = 1 + \sum_{ab} V_{ba}(k) \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\hat{L}_{ab}(k, \omega')}{\omega - \omega' + i\epsilon} d\omega'. \quad (2.38)$$

Wenn diese Funktion mit der Dirac-Identität $(\omega \pm i\epsilon)^{-1} = \mp i\pi\delta(\omega) + \mathcal{P}/\omega$, mit der Diracschen Deltafunktion δ und dem Hauptwert \mathcal{P} , weiter ausgewertet wird, erhält man die Aufspaltung der longitudinalen dielektrischen Funktion in Real- und Imaginärteil

$$\varepsilon_1^{-1}(k, \omega) = 1 + \sum_{ab} \left(V_{ba}(k) \frac{\mathcal{P}}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\hat{L}_{ab}(k, \omega')}{\omega - \omega'} d\omega' - \frac{1}{2} i \hat{L}_{ab}(k, \omega) V_{ba}(k) \right) \quad (2.39)$$

und damit den Imaginärteil der longitudinalen dielektrischen Funktion

$$\text{Im} \varepsilon_1^{-1}(k, \omega) = -\frac{1}{2} \sum_{ab} \hat{L}_{ab}(k, \omega) V_{ba}(k), \quad (2.40)$$

der die Dissipation im System beschreibt (siehe Landaudämpfung [95]). Diese Gleichung ist das Fluktuations-Dissipations-Theorem, das die Dissipation im System, beschrieben durch den Imaginärteil der dielektrischen Funktion, mit einer Fluktuation, hier der Responsefunktion der Dichte-Fluktuationen L , verknüpft.

Um diese Responsefunktionen mit messbaren Größen in Verbindung zu setzen, kann die Dichte-Fluktuation im Fourierraum mit dem Strukturfaktor

$$S(\mathbf{k}, \omega) = \frac{i}{2\pi} L^>(\mathbf{k}, \omega) \quad (2.41)$$

verbunden werden [101]. Für die Zusammenfügung dieser Gleichung mit Gleichung (2.40) wird das thermische Gleichgewicht betrachtet. Darin kann für die Responsefunktion L die Kubo-Martin-Schwinger-Beziehung [100, 101] genutzt werden, womit die zeitgeordneten Responsefunktionen von L durch die detaillierte Balance miteinander verknüpft sind,

$$L^>(\mathbf{k}, \omega) = \pm e^{\beta\hbar\omega} L^<(\mathbf{k}, \omega), \quad (2.42)$$

mit deren Hilfe die Spektralfunktion (2.37) durch

$$\hat{L} = i \left(e^{-\beta\hbar\omega} \mp 1 \right) L^> \quad (2.43)$$

ausgedrückt werden kann. Hier stellen die oberen Vorzeichen die Bosonen und die unteren Vorzeichen die Fermionen dar. Da die Responsefunktion der Dichte-Fluktuationen L das abgeschirmte Potential (2.31) mit zusammensetzt, muss diese Funktion bosonischen Charakter tragen, um nach Gleichung (2.31) den bosonischen Charakter des virtuellen Kraftteilchens des abgeschirmten Potentials aufrecht zu erhalten. Daher wird im Folgenden für diese Funktion das Vorzeichen für Bosonen gewählt. Der Strukturfaktor kann damit für die hier betrachteten Fermionen mit Hilfe der Bose-Verteilungsfunktion $n_B(\omega)$ durch

$$S(\mathbf{k}, \omega) = -\frac{1}{2\pi} \frac{1}{e^{-\beta\hbar\omega} - 1} \hat{L}(\mathbf{k}, \omega) = -\frac{1}{2\pi} (1 + n_B(\omega)) \hat{L}(\mathbf{k}, \omega) \quad (2.44)$$

beschrieben werden, womit dieser durch die Gleichung (2.40) für die Betrachtung von nur einer Teilchensorte direkt mit der longitudinalen dielektrischen Funktion in Verbindung steht,

$$S(k, \omega) = \frac{1}{V(k)\pi} \frac{1}{e^{-\beta\hbar\omega} - 1} \text{Im} \varepsilon_1^{-1}(k, \omega). \quad (2.45)$$

Mit dieser Gleichung ist es möglich, aus der longitudinalen dielektrischen Funktion Strukturfaktoren für Materialien im thermischen Gleichgewicht zu berechnen und diese mit in Streuexperimenten gemessenen Strukturfaktoren zu vergleichen. Für die Betrachtung des Strukturfaktors im Nicht-Gleichgewicht muss stattdessen die Gleichung (2.41) ausgewertet werden, was zum Beispiel in der Arbeit [102] durchgeführt wurde.

Um den Strukturfaktor des Systems aus der longitudinalen dielektrischen Funktion mit Hilfe von Gleichung (2.45) zu berechnen, muss diese Funktion bekannt sein. Dazu wird über die Technik der Greenfunktionen [100, 101] der Effekt der Polarisation ausgewertet, wobei sich die Polarisationsfunktion aus dem Teilchen-Antiteilchen-Paar zweier Fermionen zusammensetzt und somit einen bosonischen Charakter trägt. Das lässt sich durch zwei Ein-Teilchen-Greenfunktionen $g(\mathbf{r}_1, t_1; \mathbf{r}_2, t_2)$ beschreiben, die jeweils die ungestörte Bewegung eines einzelnen Teilchens vom Ort \mathbf{r}_1 zum Ort \mathbf{r}_2 innerhalb der Zeit $(t_2 - t_1)$ beschreiben. Die Polarisationsfunktion kann durch diese Greenfunktionen

$$\begin{aligned} \Pi_{ab}^{\gtrless}(\mathbf{r}_1, t_1; \mathbf{r}_2, t_2) = & \mp i \int \dots \int d\mathbf{r}_3 d\mathbf{r}'_3 dt_3 dt'_3 g_a^{\gtrless}(\mathbf{r}_1, t_1; \mathbf{r}_3, t_3) \\ & \times \Gamma_{ab}(\mathbf{r}_3, t_3; \mathbf{r}_2, t_2; \mathbf{r}'_3, t'_3; \mathbf{r}_2, t_2) g_b^{\lessgtr}(\mathbf{r}'_3, t'_3; \mathbf{r}_1, t_1) \end{aligned} \quad (2.46)$$

ausgedrückt werden [101], wobei die Funktion Γ die Wechselwirkung zwischen den an der Polarisation beteiligten Teilchen beschreibt und das Vorzeichen durch die Teilchenart ($-$ Bosonen; $+$ Fermionen) festgelegt wird. Die unterschiedliche Zeitrichtung der Teilchen des Fermion-Antifermionen-Paares wird durch die unterschiedlichen Zeitrichtungsindizes $>$ und $<$ der Ein-Teilchen-Greenfunktionen charakterisiert. Im Folgenden erfolgt die Auswertung der Polarisationsfunktion Π in der Random-Phase-Approximation (RPA) [103]. Das heißt, dass nur Polarisationseffekte in nullter Ordnung des Wechselwirkungspotentials V berücksichtigt werden, indem die Wechselwirkung des erzeugten Polarisations-Teilchen-Antiteilchen-Paares vernachlässigt wird, wodurch

$$\Pi_{ab}^{\geq, \text{RPA}}(\mathbf{r}_1, t_1; \mathbf{r}_2, t_2) = -i\delta_{ab}g_a^>(\mathbf{r}_1, t_1; \mathbf{r}_2, t_2)g_b^<(\mathbf{r}_2, t_2; \mathbf{r}_1, t_1) \quad (2.47)$$

gilt. Hier wurde der bosonische Charakter der Polarisation benutzt, da sich diese aus zwei Fermionen gleicher Teilchensorte zusammensetzt, wobei die Fouriertransformation dann durch

$$\Pi_{aa}^{\geq, \text{RPA}}(\mathbf{k}, \omega) = -i \int \int \frac{d\mathbf{p}'}{(2\pi\hbar)^3} \frac{d\omega'}{2\pi} g_a^>(\mathbf{p}' + \mathbf{k}/2, \omega' + \omega) g_a^<(\mathbf{p}' - \mathbf{k}/2, \omega') \quad (2.48)$$

gegeben ist. Hier wird der Fourierraum durch den Impuls und die Frequenz gegeben, da die Greenfunktionen Teilchen beschreiben. Außerdem kann durch die Eigenschaften der Greenfunktionen der Ausdruck $\exp(-i\mathbf{p}' \cdot \mathbf{r} + i\omega\tau)$ in diese Funktion gezogen werden [101].

Erneut wird das thermische Gleichgewicht betrachtet, in dem die Greenfunktion mit Hilfe der Kubo-Martin-Schwinger Bedingung durch die Spektralfunktion \hat{g}

$$\pm ig^<(\mathbf{p}, \omega) = \hat{g}(\mathbf{p}, \omega)f(\mathbf{p}), \quad ig^>(\mathbf{p}, \omega) = \hat{g}(\mathbf{p}, \omega)(1 \pm f(\mathbf{p})), \quad (2.49)$$

mit der Bose- beziehungsweise Fermifunktion $f(\mathbf{p}) = [e^{\beta(E(\mathbf{p})-\mu)} \mp 1]^{-1}$ und dem chemischen Potential μ , ausgedrückt werden kann. Die Greenfunktionen g charakterisieren hier Fermionen. Da in der RPA die betrachteten Teilchen nicht miteinander wechselwirken, kann für die Spektralfunktion

$$\hat{g}(\mathbf{p}, \omega) = 2\pi\delta(\hbar\omega - E(\mathbf{p})) \quad (2.50)$$

benutzt werden [101]. Das bedeutet, dass kein Energieverlust während des Polarisationsvorgangs vorhanden ist. Die Energie stellt dabei die kinetische Energie $E = p^2/(2m)$ dar, da in der RPA die Wechselwirkungsenergie nicht betrachtet wird. Wenn das in die Spektralfunktion $\hat{\Pi} = i(\Pi^> - \Pi^<)$ eingesetzt wird, erhält man

$$\begin{aligned} \hat{\Pi}_{aa}^{\text{RPA}}(\mathbf{k}, \omega) &= \int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3} \int \frac{d\omega'}{2\pi} 4\pi^2 \delta(\hbar(\omega' - \omega) - E_a(\mathbf{p} + \mathbf{k}/2)) \delta(\hbar\omega' - E_a(\mathbf{p} - \mathbf{k}/2)) \\ &\quad \times ([1 - f_a(\mathbf{p} + \mathbf{k}/2)]f_a(\mathbf{p} - \mathbf{k}/2) - f_a(\mathbf{p} + \mathbf{k}/2)[1 - f_a(\mathbf{p} - \mathbf{k}/2)]). \end{aligned} \quad (2.51)$$

Nach Einsetzen dieses Ausdrucks in die Spektraldarstellung der Polarisationsfunktion (analog zu Gleichung (2.36)) wird der Lindhard-Ausdruck

$$\Pi_{aa}^{\text{RPA}}(\mathbf{k}, \omega) = \int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3} \frac{f_a(\mathbf{p} + \mathbf{k}/2) - f_a(\mathbf{p} - \mathbf{k}/2)}{E_a(\mathbf{p} + \mathbf{k}/2) - E_a(\mathbf{p} - \mathbf{k}/2) - \hbar\omega + i\epsilon} \quad (2.52)$$

gewonnen [103]. Damit ist es möglich, die longitudinale dielektrische Funktion in RPA

$$\varepsilon_1^{\text{RPA}}(k, \omega) = 1 - \Pi^{\text{RPA}}(k, \omega)V(k) \quad (2.53)$$

zu berechnen und den Strukturfaktor zu bestimmen, womit direkte Aussagen über die Struktur der Materie getroffen werden können.

2.1.3 Longitudinale dielektrische Funktion mit Wechselwirkungen

Im vorherigen Unterabschnitt wurde die Berechnung der dielektrischen Funktion über die RPA vorgestellt. In der RPA wurden keine Wechselwirkungen zwischen den erzeugten Polarisations-Teilchen-Antiteilchen-Paaren angenommen. Um dennoch Wechselwirkungen in Form von Stößen zu berücksichtigen, wird der Ansatz von Mermin [104] genutzt. Darin wird der statistische Operator für das wechselwirkungsfreie Polarisations-Fermion-Antifermion-Paar für das lokale Gleichgewicht $\bar{\rho} = [\exp\{\beta(E(p) - \mu - \delta\mu)\} + 1]^{-1}$ mit $\beta = 1/k_B T$ und der kinetischen Energie $E(p) = \mathbf{p}^2/(2m)$ betrachtet. Hier beschreibt die kleine Störung des chemischen Potentials $\delta\mu$ ein lokales Gleichgewicht, in dem ein zusätzlicher Teilchenaustausch aufgrund von Inhomogenitäten vorhanden ist. Damit ist nach Entwicklung des statistischen Operators $\bar{\rho}$ nach $\delta\mu$ das Übergangsmatrixelement durch

$$\langle \mathbf{k}_f | \bar{\rho} | \mathbf{k}_i \rangle = f(\mathbf{k}_f) \delta_{\mathbf{k}_f \mathbf{k}_i} - \frac{f(\mathbf{k}_f) - f(\mathbf{k}_i)}{E(\mathbf{k}_f) - E(\mathbf{k}_i)} \delta\mu (\mathbf{k}_f - \mathbf{k}_i) + o(\delta\mu^2) \quad (2.54)$$

gegeben. Hier wurden \mathbf{k}_i und \mathbf{k}_f als die Wellenzahlvektoren der eingehenden beziehungsweise auslaufenden Teilchen genutzt. Dieses Matrixelement beschreibt die Wellenzahlvektoränderung der Fermionen im betrachteten lokalen Gleichgewicht durch die Teilchendiffusion. Um auch Stöße in diesem Matrixelement zu berücksichtigen, wird eine Relaxationszeitnäherung benutzt. In dieser wird die von-Neumann-Gleichung $\partial\rho/\partial t + (i/\hbar)[H, \rho] = 0$, mit dem Kommutator $[\cdot, \cdot]$, auf den statistischen Operator mit Wechselwirkungen erster Ordnung $\rho^{(1)}$ angewendet. Das entsprechende Energieübergangsmatrixelement hat dann die Form

$$\begin{aligned} \omega \langle \mathbf{k}_f | \rho^{(1)} | \mathbf{k}_i \rangle &= (E(\mathbf{k}_f) - E(\mathbf{k}_i)) \langle \mathbf{k}_f | \rho^{(1)} | \mathbf{k}_i \rangle + (f(\mathbf{k}_f) - f(\mathbf{k}_i)) V(|\mathbf{k}_f - \mathbf{k}_i|) \\ &\quad - i\nu \left(\langle \mathbf{k}_f | \rho^{(1)} | \mathbf{k}_i \rangle + \frac{f(\mathbf{k}_f) - f(\mathbf{k}_i)}{E(\mathbf{k}_f) - E(\mathbf{k}_i)} \delta\mu (\mathbf{k}_f - \mathbf{k}_i) \right), \end{aligned} \quad (2.55)$$

wobei die letzten beiden Terme auf der rechten Seite dazu addiert wurden, um die Relaxation der Teilchen mit der Relaxationsfrequenz ν in das Gleichgewicht zu beschreiben. Die ersten beiden Terme der rechten Seite charakterisieren die Bewegung der Teilchen in Gegenwart des Potentials V .

Um in Gleichung (2.55) die Teilchenerhaltung zu gewährleisten, muss die Kontinuitätsgleichung

$$\omega \delta n(\mathbf{k}, \omega) = \mathbf{k} \cdot \delta \mathbf{j}(\mathbf{k}, \omega), \quad (2.56)$$

mit dem Impulsübertrag $\mathbf{k} = \mathbf{k}_f - \mathbf{k}_i$, der Dichte δn und der Stromdichte $\delta \mathbf{j}$ der impulsändernden Teilchen, die durch

$$\delta n(\mathbf{k}, \omega) = \int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3} \langle \mathbf{p} + \mathbf{k}/2 | \rho^{(1)} | \mathbf{p} - \mathbf{k}/2 \rangle, \quad (2.57)$$

$$\delta \mathbf{j}(\mathbf{k}, \omega) = \int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3} \frac{\mathbf{p}}{m} \langle \mathbf{p} + \mathbf{k}/2 | \rho^{(1)} | \mathbf{p} - \mathbf{k}/2 \rangle \quad (2.58)$$

definiert sind, gelten. Wenn man die Gleichung (2.55) über \mathbf{p} integriert und mit Gleichung (2.56) vergleicht, muss für den Erhalt der Teilchenzahldichte

$$i\nu \int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3} \left(\langle \mathbf{p} + \mathbf{k}/2 | \rho^{(1)} | \mathbf{p} - \mathbf{k}/2 \rangle + \frac{f(\mathbf{p} + \mathbf{k}/2) - f(\mathbf{p} - \mathbf{k}/2)}{E(\mathbf{p} + \mathbf{k}/2) - E(\mathbf{p} - \mathbf{k}/2)} \delta\mu(\mathbf{k}) \right) = 0 \quad (2.59)$$

erfüllt sein, was zu der Bedingung $\delta\mu(\mathbf{k}) = \delta n(\mathbf{k}, \omega) / \Pi^{\text{RPA}}(\mathbf{k}, 0)$ führt. Hier wurde zur Abkürzung der Ausdruck (2.52) verwendet. Das ist eine Bedingung, die während der Stoßrelaxation des Systems ins Gleichgewicht die Teilchenzahlerhaltung gewährleistet, da hier während des Relaxationsprozesses ein Teilchenaustausch mit der Umgebung zugelassen wird.

Um auf eine geschlossene Form für die dielektrische Funktion unter Berücksichtigung von Stößen zu kommen, wird die Gleichung (2.55) nach $\langle \mathbf{k} | \rho^{(1)} | \mathbf{k}' \rangle$ umgestellt und in Gleichung (2.57) eingesetzt. Damit erhält man für die Dichte

$$\delta n(\mathbf{k}, \omega) = \frac{\Pi^{\text{RPA}}(\mathbf{k}, \omega + i\nu) V(q)}{1 - \left[\frac{1}{1 - i\omega/\nu} \right] [1 - \Pi^{\text{RPA}}(\mathbf{k}, \omega + i\nu) / \Pi^{\text{RPA}}(\mathbf{k}, 0)]}. \quad (2.60)$$

Wenn in diese Gleichung die dielektrische Funktion (2.32) für die Beschreibung eines Zwei-Teilchensystems und die allgemeine Form der Polarisationsfunktion $\Pi(\mathbf{k}) = \delta n(\mathbf{k}, \omega) / V(k)$ [101] eingesetzt wird, gewinnt man die longitudinale dielektrische Funktion unter Berücksichtigung von Stößen [104]

$$\varepsilon_l(k, \omega) = 1 + \frac{(1 + i\nu/\omega)(\varepsilon_1^{\text{RPA}}(k, \omega + i\nu) - 1)}{1 + (i\nu/\omega)(\varepsilon_1^{\text{RPA}}(k, \omega + i\nu) - 1) / (\varepsilon_1^{\text{RPA}}(k, 0) - 1)}. \quad (2.61)$$

Basierend auf der Näherung der RPA und den Eigenschaften der dielektrischen Funktion, erfüllt der in diesem Abschnitt gemachte Ansatz die Bedingungen $\lim_{\nu \rightarrow 0} \varepsilon_l(k, \omega) = \varepsilon_l^{\text{RPA}}(k, \omega)$ und $\varepsilon_l(k, 0) = \varepsilon_{\text{tr}}(k, 0)$ (vergleiche Gleichung (2.27)). Dieser Ansatz von Mermin wurde hier ausschließlich für eine konstante Stoßfrequenz ν hergeleitet, gilt allerdings auch für dynamische Stoßfrequenzen, wie in den Arbeiten [105, 106] gezeigt wurde.

Damit ist es gelungen, aus der Beschreibung der Polarisation ohne Wechselwirkungen (RPA) eine longitudinale dielektrische Funktion, die auch eine einfache Wechselwirkung des Polarisations-Teilchen-Antiteilchen-Paares beinhaltet, zu gewinnen. Dissipative Prozesse können somit aufgrund der Beschreibung von Stößen behandelt werden. Für die Anwendung des gemachten Ansatzes muss ein geeigneter Ausdruck für die Stoßfrequenz ν gefunden werden, der im nächsten Unterabschnitt eingeführt wird.

2.1.4 Wechselwirkungsanteil in der longitudinalen dielektrischen Funktion: Stoßfrequenz

In diesem Abschnitt wird die dynamische Stoßfrequenz der Elektronen-Ionen-Stöße vorgestellt, welche im Abschnitt 2.1.3 für die Beschreibung der longitudinalen dielektrischen Funktion mit Wechselwirkungen als Dämpfung ν benutzt werden kann. Dabei werden die Ausdrücke für die Stoßfrequenz und der Ansatz zu ihrer Herleitung nur angegeben. Für eine detaillierte Herleitung der dynamischen Stoßfrequenz der Elektronen-Ionen-Stöße über die lineare Resonsetheorie und Technik der Greenfunktionen sei auf die Arbeiten [107–111] verwiesen.

Stöße zwischen zwei geladenen Teilchen lassen sich durch die Coulomb-Wechselwirkung beschreiben. Dabei können zwischen dem End- und Anfangszustand dieser beiden Teil-

chen weitere Wechselwirkungen auftreten, wobei der Gesamtimpuls und die Gesamtenergie erhalten bleiben muss. Im Folgenden wird der Impulsübertrag zwischen den Stoßpartnern als klein angenommen ($\mathbf{k} \rightarrow 0$). Damit ist die dielektrische Funktion gleich dem longitudinalen und dem transversalen Anteil, wodurch die Drude-Formel (2.27) für die transversale dielektrische Funktion mit der Formel für die longitudinale dielektrische Funktion (2.32) gleichgesetzt werden kann,

$$\varepsilon_{\text{tr}}(\omega) = 1 - \frac{\omega_{\text{pl},e}^2}{\omega^2 + i\omega\nu} = 1 - \lim_{\mathbf{k} \rightarrow 0} \sum_{ab} \Pi_{ab}(k, \omega) V_{ba}(k) = \varepsilon_1(\omega). \quad (2.62)$$

Aus dieser Gleichung lässt sich die dynamische Stoßfrequenz herleiten, die durch Molekulardynamik Simulationen bestätigt wurde [112]. Hierfür muss allerdings noch die Polarisationsfunktion Π für das volle wechselwirkende System bekannt sein. Dafür führt man die dynamische Lokalfeldkorrektur $G(\mathbf{k}, \omega)$ [107, 113] ein, die die Polarisationsfunktion mit der Polarisationsfunktion der RPA verknüpft,

$$\Pi(\mathbf{k}, \omega) = \frac{\Pi^{\text{RPA}}(\mathbf{k}, \omega)}{1 + G(\mathbf{k}, \omega) \Pi^{\text{RPA}}(\mathbf{k}, \omega) / (\varepsilon_0 k^2)}. \quad (2.63)$$

Diese Lokalfeldkorrektur hat die Form einer inversen Polarisationsfunktion, von der die inverse Polarisationsfunktion in RPA abgezogen wird, und stellt somit eine Abweichung der Polarisationsfunktion vom wechselwirkenden System zu der Polarisationsfunktion eines idealen Systems dar. Das ist bei Umstellung der Gleichung (2.63) nach der Lokalfeldkorrektur ersichtlich.

Wenn man die Gleichung (2.63) in Gleichung (2.62) einsetzt und den Grenzwert $\lim_{\mathbf{k} \rightarrow 0} \Pi^{\text{RPA}}(\mathbf{k}, \omega) = \varepsilon(0, \omega) - 1 = \omega_{\text{pl}}^2 \varepsilon_0 k^2 / \omega^2$ benutzt, erhält man für die Stoßfrequenz

$$\nu(\omega) = -i \frac{\omega_{\text{pl}}^2}{\omega} G(0, \omega). \quad (2.64)$$

Damit muss für die Berechnung der Stoßfrequenz die Lokalfeldkorrektur für $k = 0$ im isotropen Medium bekannt sein. Das erfolgt mittels linearer Resonsetheorie und Technik der Greenfunktionen. Hier muss erwähnt werden, dass für die Nutzung des Ansatzes (2.62) die Drude-Formel anwendbar sein muss. Daher ist dieser Ansatz nur für schwach korrelierte Systeme mit schwachen induzierten Feldern und Stößen ohne Impulsübertrag $k = 0$ nutzbar.

Der Ansatz der Lokalfeldkorrektur (2.63) kann auch direkt genutzt werden, um in Gleichung (2.32) die Polarisationsfunktion mit Wechselwirkungen zu bestimmen. Für die Vermeidung der Beschreibung eines doppelten Einflusses der Stöße darf dann nicht zusätzlich der Ansatz von Mermin (2.61) angewendet werden. Um diesen Ansatz zu wählen, sind geeignete Ausdrücke für die Lokalfeldkorrektur notwendig [114–117].

Im Folgenden wird die Stoßfrequenz in Bornscher Näherung für den Fall eines homogenen, isotropen Mediums dargestellt. Für weitere Näherungen sei auf [36, 107, 109] verwiesen. In der Bornschen Näherungen werden nur die Wechselwirkungen in erster Ordnung betrachtet, das heißt, dass zwischen dem End- und Anfangszustand keine weiteren Wechselwirkungen betrachtet werden und somit nur eine Wechselwirkung zwischen diesen End- und Anfangszuständen existieren. Damit besitzt die Bornsche Näherung ein quadratisches Potential,

$$\begin{aligned} \nu^{\text{Born}}(\omega) = & \frac{4i\hbar e^2}{\Omega_0 \varepsilon_0 \omega_{\text{pl}}^2 \mu_r^2} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{p}, \mathbf{p}'} \frac{\exp\{\beta(\Delta E_i(\mathbf{p}', \mathbf{k}) - \Delta E_e(\mathbf{p}, \mathbf{k}))\} - 1}{\Delta E_i(\mathbf{p}', \mathbf{k}) - \Delta E_e(\mathbf{p}, \mathbf{k})} \\ & \times k_z^2 V_{ei}^2(k) \frac{f_i(\mathbf{p}' + \mathbf{k}/2)[1 - f_i(\mathbf{p}' - \mathbf{k}/2)] f_e(\mathbf{p} - \mathbf{k}/2)[1 - f_e(\mathbf{p}' + \mathbf{k}/2)]}{\hbar(\omega + i\epsilon) + \Delta E_i(\mathbf{p}', \mathbf{k}) - \Delta E_e(\mathbf{p}, \mathbf{k})}. \end{aligned} \quad (2.65)$$

Dieses Ergebnis, mit der reduzierten Masse $\mu_r = (m_e^{-1} + m_i^{-1})^{-1}$, dem bereits aufsummierten Spin $s_e = s_i = 1/2$ und dem Normierungsvolumen Ω_0 , wurde unter Annahme eines vollständig ionisierten Wasserstoffplasmas gewonnen. Die Komponente k_z charakterisiert den Impulsübertrag in z -Richtung und $\Delta E(\mathbf{p}, \mathbf{k}) = E(\mathbf{p} + \mathbf{k}/2) - E(\mathbf{p} - \mathbf{k}/2) = \hbar^2 \mathbf{p} \cdot \mathbf{k}/m$ die Energieerhaltung.

Im Folgenden wird der adiabatische Limes betrachtet, in dem die Ionen als wesentlich schwerer als die Elektronen angenommen werden, $m_e \ll m_i$, und die Ionen damit als homogener Hintergrund zu den Elektronen betrachtet werden. Die Ionenverteilung kann dann durch den Strukturfaktor der Ionen

$$S_{ii}(\mathbf{k}) = \sum_{jk} \exp\{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_k)\} / n_i \Omega_0 \quad (2.66)$$

ersetzt werden. Dadurch separiert der Beitrag der Elektronen und Ionen und die Summation über \mathbf{p}' kann ausgeführt werden,

$$\nu^{\text{Born}}(\omega) = \frac{2i\hbar n_i}{n_e m_e} \sum_{\mathbf{p}, \mathbf{k}} V_{ei}^2(k) S_{ii}(\mathbf{k}) k_z^2 \frac{f_e(\mathbf{p} + \mathbf{k}/2) - f_e(\mathbf{p} - \mathbf{k}/2)}{\Delta E_e(\mathbf{p}, \mathbf{k}) - \hbar(\omega + i\epsilon)} \frac{1}{\Delta E_e(\mathbf{p}, \mathbf{k})}. \quad (2.67)$$

Nach Umformung der Summation in die Integralform und Partialbruchzerlegung erhält man den Ausdruck für isotrope Medien

$$\nu^{\text{Born}}(\omega) = -i \frac{\varepsilon_0 n_i \Omega_0^2}{6\pi^2 e^2 n_e m_e} \int_0^\infty dk k^6 V_{ei}^2(k) S_{ii}(k) \frac{\varepsilon^{\text{RPA}}(k, \omega) - \varepsilon^{\text{RPA}}(k, 0)}{\omega}, \quad (2.68)$$

der aus der bereits bekannten dielektrischen Funktion in RPA (2.53) berechnet werden kann. Bei der Annahme eines idealen Plasmas kann $S_{ii}(k) = 1$ gesetzt werden, was der Annahme eines isotropen Mediums entspricht. Für das Elektron-Ion-Wechselwirkungspotential wird ein abgeschirmtes Potential $V_{ei}(k) = -e_e e_i / (\varepsilon_0 \Omega_0 (k^2 + \kappa_D^2))$ mit der inversen Debye-Abschirmlänge κ_D (1.4) verwendet.

Um einen abgeschlossenen Ausdruck für die Stoßfrequenz zu erhalten, wird für die dielektrische Funktion in RPA (2.53) die Fermiverteilung entwickelt [118],

$$\text{Re } \varepsilon^{\text{RPA}}(k, \omega) = 1 + \sum_c \frac{m_c \omega_{\text{pl},c}^2}{\hbar k^3} \sqrt{\frac{m_c \beta}{2}} [\mathcal{D}_+ - \mathcal{D}_-], \quad (2.69)$$

$$\text{Im } \varepsilon^{\text{RPA}}(k, \omega) = \sum_c \frac{m_c \omega_{\text{pl},c}^2}{\hbar k^3} \sqrt{2\pi m_c \beta} \sinh\left(\frac{\beta \hbar \omega}{2}\right) \exp\left\{-\frac{m_c \beta}{2} \left(\frac{\omega^2}{k^2} + \frac{\hbar^2 k^2}{4m_c^2}\right)\right\}, \quad (2.70)$$

mit der Abkürzung

$$\mathcal{D}_{\pm} = \operatorname{Re} \mathcal{D} \left(\sqrt{\frac{m_e \beta}{2}} \left(\frac{\omega}{k} \pm \frac{\hbar k}{2m_e} \right) \right) \quad (2.71)$$

und dem Dawson-Integral

$$\mathcal{D}(x) = -2e^{-x^2} \int_0^x e^{t^2} dt + i\sqrt{\pi}e^{-x^2}. \quad (2.72)$$

Diese Entwicklung ist nur für nicht-entartete Systeme möglich, vermindert allerdings den Rechenaufwand im Gegensatz zur Berechnung der dielektrischen Funktion in RPA (2.53). Im Folgenden wird die dynamische Stoßfrequenz in Bornscher Näherung stets mit dieser Entwicklung durchgeführt, was zu den Gleichungen

$$\begin{aligned} \operatorname{Re} \nu^{\text{Born}}(\omega) &= \frac{1}{6\pi^2 \varepsilon_0} \sqrt{\frac{2\pi m_e}{k_B T}} \frac{\omega_{\text{pl},e}^2}{\hbar \omega} \sinh \left(\frac{\hbar \omega}{2k_B T} \right) \\ &\times \int_0^{\infty} dk \frac{k^3}{[k^2 + \kappa^2]^2} \exp \left\{ -\frac{m_e}{2k_B T} \left(\frac{\omega^2}{k^2} + \frac{\hbar^2 k^2}{4m_e^2} \right) \right\} \end{aligned} \quad (2.73)$$

und

$$\begin{aligned} \operatorname{Im} \nu^{\text{Born}}(\omega) &= \frac{1}{6\pi^2 \varepsilon_0} \sqrt{\frac{m_e}{2k_B T}} \frac{\omega_{\text{pl},e}^2}{\hbar \omega} \\ &\times \int_0^{\infty} dk \frac{k^3}{[k^2 + \kappa^2]^2} \left[\mathcal{D}_+ - \mathcal{D}_- - 2\mathcal{D} \left(\frac{\hbar k}{2} \sqrt{\frac{1}{2m_e k_B T}} \right) \right] \end{aligned} \quad (2.74)$$

für die Stoßfrequenz führt. Damit erhält man einen geschlossenen auswertbaren Term für die dynamische Stoßfrequenz, wodurch Thomsonstreuenspektren eines nicht stoßfreien Plasmas berechnet werden können.

2.2 Thomsonstreuung

In dieser Arbeit wird die Diagnostik von inhomogenen Plasmen mittels Thomsonstreuung untersucht. Die experimentell gestreute Leistung P pro Frequenzintervall $d\omega$ und Raumwinkelintervall $d\Omega$ kann durch

$$\begin{aligned} \frac{dP}{d\Omega d\omega} &= \frac{\sigma_T}{A_{\text{rad}}} \frac{k_f}{k_i} \left| \hat{k}_f \times (\hat{k}_f \times \hat{E}_0) \right|^2 \\ &\times \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega'}{2\pi} G_{\omega_{\text{FWHM}}}(\omega - \omega') \int d\mathbf{r} l(\mathbf{r}) n_e(\mathbf{r}) S_{ee}(k, \omega'; T(\mathbf{r}), n(\mathbf{r})) \end{aligned} \quad (2.75)$$

beschrieben werden [119]. Dabei ist $\sigma_T = 0.665 \cdot 10^{-24} \text{ cm}^2$ der Thomsonstreuquerschnitt, k_i und k_f die Anfangs- und Endwellenzahl und A_{rad} die bestrahlte Fläche. Der dynamische Strukturfaktor $S_{ee}(k, \omega; T(\mathbf{r}), n(\mathbf{r}))$ beschreibt in dieser Gleichung die statistische

Verteilung der Elektronen im betrachteten Plasma. Diese Verteilung ist nicht nur vom Wellenzahlvektor und der Frequenz des gestreuten Lasers abhängig, sondern auch von den Plasmaparametern, die in inhomogenen Plasmen stark variieren können. Die Leistungsdichte des Lasers $l(\mathbf{r})$ ist aufgrund von Absorptionseffekten ebenfalls ortsabhängig. Daher wird auch über die Dichte der streubaren Photonen l und die Dichte der Elektronen n_e , an denen gestreut werden kann, integriert. Dabei bezieht sich n_e auf die gesamte Elektronendichte des Systems, also der freien und gebundenen Elektronen. Weiterhin wird das Signal in Gleichung (2.75) mit der Instrumentenfunktion $G_{\omega_{\text{FWHM}}}$ gefaltet, da das gestreute Signal innerhalb eines Experiments sowohl durch die Instrumentenfunktion der Messinstrumente als auch durch die Frequenzunschärfe des Lasers verbreitert wird. Die Instrumentenfunktion $G_{\omega_{\text{FWHM}}}$ wird in dieser Arbeit stets durch eine normalverteilte Funktion mit der "Full Width at Half Maximum" (FWHM) ω_{FWHM} charakterisiert.

Für die Beschreibung der Polarisation des eingestrahnten Lasers mit der Richtung des elektrischen Feldes \hat{E}_0 wird der Ausdruck $\left| \hat{k}_f \times (\hat{k}_f \times \hat{E}_0) \right|^2$ in Gleichung (2.75) benutzt. Dabei beschreibt \hat{x} den Einheitsvektor der Größe x . Dieser Ausdruck kann mit Hilfe der Polar- und Azimutalwinkel

$$\left| \hat{k}_f \times (\hat{k}_f \times \hat{E}_0) \right|^2 = \begin{cases} (1 - \sin^2 \theta \cos^2 \varphi), & \text{für linear polarisiertes Licht} \\ (1 - \frac{1}{2} \sin^2 \theta), & \text{für unpolarisiertes Licht} \end{cases}, \quad (2.76)$$

ausgedrückt werden [32, 36]. Damit wurde der Charakter der Dipolstrahlung der Thomsonstreuung, der in Abbildung 1.5 illustriert ist, berücksichtigt, bei dem die Dipolstrahlung im einfachen Fall des linear polarisierten Lichts nur über einen Polarwinkel von $\varphi = 90^\circ$ konstant ist und für $\varphi = 0^\circ$ und $\theta = 90^\circ$ verschwindet.

Daraus ist ersichtlich, dass für die theoretische Bestimmung der Streuleistung der Thomsonstreuung sowohl die Plasmaparameter, wie Dichte und Temperatur, als auch die Struktur des Plasmas bekannt sein müssen. Unter der Annahme eines bekannten homogenen Plasmas kann der Strukturfaktor analytisch berechnet werden. Dazu muss vorher das Streuverhalten der Photonen an den Elektronen betrachtet werden. Da Thomsonstreuung die Streuung von Photonen an Elektronen beschreibt, kann, wie bereits in Abschnitt 1.2 erläutert, der eingestrahlte Laser an freien Elektronen, gebundenen Elektronen als auch an Elektronen mit einem Übergang vom gebundenen Zustand ins Kontinuum (ionisierende Elektronen) streuen. Diese Beiträge können separat betrachtet werden.

Um die Zusammensetzung des Strukturfaktors aus den zuvor erläuterten Streuprozessen zu erklären, wird die Gleichung (2.44) betrachtet. Hier hängt der Strukturfaktor von der Responsefunktion der Dichte-Fluktuationen mit $L \propto \langle |\delta\rho(\mathbf{k}, t)|^2 \rangle$ ab. Diese Dichtefunktion $\delta\rho(\mathbf{k}, t)$ besteht aus einer Summation der freien und der gebundenen Elektronen $\delta\rho(\mathbf{k}, t) = \delta\rho_{\text{frei}}(\mathbf{k}, t) + \delta\rho_{\text{geb}}(\mathbf{k}, t)$, wobei die Korrelation aus beiden Anteilen den dritten oben erwähnten Streuprozess beschreibt. Dadurch können auch die einzelnen Strukturfaktoren separat betrachtet werden,

$$S_{ee}(k, \omega) = \underbrace{Z_f S_{ee}^0(k, \omega)}_{\text{freie Elektronen}} + \underbrace{|f_i(k) + q(k)|^2 S_{ii}(k, \omega)}_{\text{gebundene Elektronen}} + \underbrace{Z_i \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' S_c(k, \omega) S_s(k, \omega - \omega')}_{\text{ionisierende Elektronen}}, \quad (2.77)$$

was durch Chihara [120, 121] gezeigt wurde. Hierbei stellt der erste Term der rechten Seite den Strukturfaktor der freien Elektronen S_{ee}^0 dar, der mit der mittleren Anzahl der freien Elektronen je schwerem Teilchen Z_f gewichtet wird. Der zweite Term beschreibt den Anteil des Strukturfaktors durch die gebundenen Elektronen, mit dem Strukturfaktor der Ionen S_{ii} . Dieser Strukturfaktor wird mit dem mittleren Formfaktor f_i der Ionen, der die Struktur eines schweren Teilchens berücksichtigt, und dem Beitrag der Abschirmungsfunktion q der Ladungswolke, der die Struktur zwischen dem schweren Teilchen und den nicht an dieses Teilchen gebundenen Elektronen berücksichtigt, gewichtet. Der letzte Term charakterisiert die Struktur aufgrund von ionisierenden Elektronen, die durch die Lasereinstrahlung erzeugt werden. Dabei wird der Strukturfaktor S_c mittels Faltung durch die Eigenbewegung und Eigenstruktur des schweren Teilchens S_s , in dessen Feld dieser Prozess stattfindet, moduliert. Dieser Anteil ist mit der mittleren Anzahl der gebundenen Elektronen je schwerem Teilchen Z_i gewichtet. Im Folgenden werden die einzelnen Beiträge der Gleichung (2.77) diskutiert.

2.2.1 Strukturfaktor der freien Elektronen

Für die Berechnung des Strukturfaktors der freien Elektronen S_{ee}^0 aus Gleichung (2.77) wird das Fluktuations-Dissipations-Theorem (2.45) herangezogen. In dieses Theorem kann die longitudinale dielektrische Funktion in RPA (2.53) oder auch in der verbesserten Mermin-Darstellung (2.61) mit der Stoßfrequenz in erster Bornschen Näherung, der sogenannten Born-Mermin-Approximation (BMA), eingesetzt werden. Damit kann der Strukturfaktor aus der dielektrischen longitudinalen Funktion berechnet werden. Dieser Strukturfaktor der freien Elektronen wurde für homogene Plasmen bereits in zahlreichen Arbeiten untersucht [32, 36, 37, 122–124].

2.2.2 Strukturfaktor der gebundenen Elektronen

Analog zur Berechnung des Strukturfaktors der freien Elektronen kann auch der Strukturfaktor der Ionen S_{ii} über das Fluktuations-Dissipations-Theorem berechnet werden [36]. Ein weiterer Ansatz ist die Berechnung des Strukturfaktors der Ionen über Finite-Temperatur Dichte-Funktional-Theorie Molekular-Dynamik (FT-DFT-MD) Simulationen [125] oder HyperNetted-Chain (HNC) Rechnungen [93, 126–130]. Diese Methoden sind sehr rechenintensiv. Für eine einfache, analytische Berechnung des Strukturfaktors der gebundenen Elektronen kann auch die klassische Debye-Hückel Theorie [131] angewendet werden. Demnach kann der Strukturfaktor der Ionen durch

$$S_{ii}(k) = \frac{k^2 + \kappa_{D,e}^2}{k^2 + \kappa_{D,e}^2 + \kappa_{D,i}^2} \quad (2.78)$$

angegeben werden. Hierbei ist κ_c der inverse Debye-Abschirmradius (1.4) der Komponente c . Dieses Resultat kann für ein zwei-komponentiges System aus Elektronen und Ionen für ein klassisches System im Gleichgewicht aus $S(k) = -k_B T (\text{Re}(L_{ab}))/n$ gewonnen werden [48]. Die Responsefunktion L erhält man aus dem Gleichsetzen der Gleichungen (2.32) und (2.33), in die die allgemeine Form der Responsefunktion $L_{ab} = \Pi_{ab} + \sum_{cd} \Pi_{ac} V_{cd} L_{db}$ eingesetzt wird. Dabei wird in dieser Näherung die Polarisation nur zwischen gleichen Komponenten $\Pi_{ab} = \Pi_{aa} \delta_{ab}$ angenommen, wobei die Polarisationsfunktion für klassische Systeme im Gleichgewicht durch $\Pi_{aa} = -n_a/(k_B T)$ ausgedrückt werden kann [101]. Außerdem gilt diese Gleichung dann nur für Punktteilchen.

Um auch den Wichtungsfaktor des Strukturfaktors der Ionen in der Gleichung (2.77) zu erhalten, kann der Formfaktor f für ein Wasserstoffatom oder näherungsweise für Elemente mit kleiner Kernladungszahl durch die Wasserstoffwellenfunktion

$$f_{n\ell}(q) = \frac{1}{2\ell} \sum_{m=-\ell}^{\ell} \int d\mathbf{r} |\psi_{n\ell m}(\mathbf{r})|^2 \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}), \quad (2.79)$$

mit den drei Quantenzahlen n, ℓ, m , berechnet werden. Um den Formfaktor f zu erhalten, müssen die Formfaktoren der entsprechenden Elektronen im Atom aufsummiert werden $f = \sum_{n\ell} f_{n\ell}$. Dabei wird ein reeller Ionisationsgrad

$$f(q) = |(Z_f - Z_0)|f_{Z_1}(q) + |(Z_1 - Z_f)|f_{Z_0}(q), \quad Z_{0,1} \in \mathbb{N}, \quad (2.80)$$

verwendet. Die Parameter Z_0 und Z_1 sind die Ionenladungszahlen der Ionensorten, die den reellen mittleren Ionisationsgrad Z_f begrenzen.

Für die Berechnung der Wasserstoffwellenfunktionen wird der aus der Quantenmechanik des Wasserstoffatoms bekannte Ansatz

$$\psi_{n\ell m}(\mathbf{r}) = \psi_{n\ell m}(r, \theta, \phi) = Y_{\ell}^m(\theta, \phi) R_{n\ell}(r) \quad (2.81)$$

genutzt, in dem der Radialanteil $R_{n\ell}$ und die Kugelflächenfunktionen Y_{ℓ}^m separieren. Der Radialanteil kann durch

$$R_{n\ell} = \frac{1}{a_B^{3/2}} \frac{1}{(2\ell + 1)!} \sqrt{\frac{(n + \ell)!}{(n - \ell - 1)(2n)}} \left(\frac{2Z_{n\ell}^* r}{na_B} \right)^{3/2} \left(\frac{Z_{n\ell}^* r}{na_B} \right)^{\ell} \times {}_1F_1(-n + \ell + 1, 2\ell + 2, 2Z_{n\ell}^* r/(na)) \quad (2.82)$$

berechnet werden. Dabei ist a_B der Bohrsche Radius, ${}_1F_1$ die konfluente hypergeometrische Funktion [132] und $Z_{n\ell}^* = Z - Z_S(Z_i, n, \ell)$ die effektive Kernladungszahl, bei der von der Kernladungszahl Z eine Korrektur durch die Abschirmung $Z_S(Z_i, n, \ell)$ abgezogen wird, mit der mittleren Ladungszahl der Ionen $Z_i = Z - Z_f$. Diese Abschirmungskorrektur hängt zum einen von der Lage des betrachteten Elektrons, zum anderen von der Anzahl der gebundenen Elektronen im schweren Teilchen ab und ist in der Arbeit [133] tabellarisiert.

Der zweite Wichtungsfaktor des Strukturfaktors der gebundenen Elektronen, die Abschirmungsfunktion q , kann durch das Verhältnis der Strukturfaktoren zwischen Elektronen und Ionen und den Ionen selbst abgeschätzt werden [17],

$$q(k) = \sqrt{Z_f} \frac{S_{ei}(k)}{S_{ii}(k)} = Z_f \frac{\kappa_{D,e}^2}{k^2 + \kappa_{D,e}^2}. \quad (2.83)$$

Das ist das Ergebnis der Debye-Hückel Theorie, wobei der Strukturfaktor S_{ei} analog zu dem oben erläuterte Strukturfaktor S_{ii} hergeleitet werden kann. Ein verbesserter Ausdruck für die Abschirmungsfunktion q kann in [134] gefunden werden.

Als Test für die Gültigkeit der Berechnung des Vorfaktors $|f(k) + q(k)|$ muss der Wichtungsfaktor für kleine Impulsüberträge $k \rightarrow 0$ der Kernladungszahl entsprechen: $\lim_{k \rightarrow 0} |f(k) + q(k)| = Z_i + Z_f = Z$, da die Anzahl der gebundenen Elektronen durch diesen Beitrag aufgelöst und damit durch diesen gewichtet wird [17].

2.2.3 Strukturfaktor der ionisierenden Elektronen

Für die Berechnung des Strukturfaktors der ionisierenden Elektronen, die sogenannte gebunden-frei Übergänge vollziehen, ist sowohl der Strukturfaktor der ionisierenden Elektronen S_c , als auch die Struktur des schweren Teilchens S_s notwendig. Für hohe Streulaserfrequenzen, wie sie in dieser Arbeit verwendet werden, kann der Strukturfaktor der schweren Teilchen durch $S_s(k, \omega) \propto \delta(\omega)$ genähert werden [135]. Für den Strukturfaktor der ionisierenden Elektronen wird in dieser Arbeit die Näherung von Gregori et al. [17] gewählt,

$$S_c(k, \omega) = \frac{r(k)}{Z_i B^3} \sum_{(nl)} J_{nl}(k, \omega), \quad (2.84)$$

mit dem Renormalisierungsfaktor für die Berücksichtigung von kohärenter Streuung

$$r(k) = 1 - \frac{\sum_{(nl)} Z_{(nl)} |f_{nl}(k)|^2}{Z_i}, \quad \text{mit } \sum_{(nl)} Z_{(nl)} = Z_i, \quad (2.85)$$

dem Breit-Dirac-Faktor

$$B = 1 + \frac{1}{\omega_0} \frac{\hbar k^2}{2m_e} \quad (2.86)$$

für die Berücksichtigung der Wechselwirkung des Spins s mit dem magnetischen Moment m der Elektronen unter elektromagnetischer Welleneinstrahlung der Frequenz ω_0 und der Summation der Übergangsmatrixelemente

$$J_{nl}(k, \omega) = \frac{\hbar p \sqrt{p^2 + m^2 c^2}}{2m} \frac{1}{(2\pi)^3} \frac{2}{2\ell + 2} \sum_{m=-\ell}^{\ell} \int d\Omega |M_{(nlm),p}(k)|^2. \quad (2.87)$$

Aufgrund von Energie- und Impulserhaltung muss der Wellenzahlübertrag k und der relativistische Elektronenimpuls im Endzustand \mathbf{p} die spezielle Form

$$p = \frac{1}{c} \sqrt{[\hbar c(\mathbf{k}_i - \mathbf{k}_f) + mc^2 - E_{(nl)}]^2 - m^2 c^4}, \quad (2.88)$$

$$k = \sqrt{k_i^2 + k_f^2 - 2k_i k_f \cos \theta} \quad (2.89)$$

besitzen. Hier ist $E_{(nl)}$ die Bindungsenergie des Elektrons, an dem gestreut wurde. Die Übergangsmatrixelemente haben die Form

$$M_{(nlm),p}(k) = \langle n\ell m | e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} | \mathbf{p} \rangle = \int d\mathbf{r} \psi_{n\ell m}^*(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \phi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}), \quad (2.90)$$

mit der Wellenfunktion des gebundenen Elektrons $\psi_{n\ell m}^*$, die für leichte Elemente mit den Wasserstoffwellenfunktionen (2.81) genähert werden können, und der Wellenfunktion des freien Elektrons $\phi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r})$. Die Wellenfunktion der freien Elektronen wird in dieser Arbeit näherungsweise durch ebene Wellen $\phi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}) = \exp(i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r})$ ausgedrückt, wodurch sich die Summation der Matrixübergangselemente nach der Fouriertransformation vereinfacht [136],

$$\frac{2}{2\ell + 1} \sum_{m=-\ell}^{\ell} \int d\Omega |M_{(n\ell m),p}(k)|^2 = \frac{8\pi^2}{kp} \int_{|p-k|}^{p+k} |F_{n\ell}(q)|^2 q dq, \quad (2.91)$$

mit der radialen Wellenfunktion im Impulsraum

$$F_{n\ell}(q) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} (-i)^\ell \int_0^\infty r^2 R_{n\ell}(r) j_\ell(qr) dr. \quad (2.92)$$

Dabei ist $R_{n\ell}(r)$ bereits in Gleichung (2.82) gegeben und j_ℓ ist die reguläre sphärische Besselfunktion

$$\begin{aligned} j_0(x) &= \frac{\sin x}{x}, \\ j_1(x) &= \frac{\sin x}{x^2} - \frac{\cos x}{x}, \\ j_2(x) &= \left(\frac{3}{x^2} - 1\right) \frac{\sin x}{x} - \frac{3 \cos x}{x^2}, \\ j_3(x) &= \left(\frac{15}{x^3} - \frac{6}{x}\right) \frac{\sin x}{x} - \left(\frac{15}{x^2} - 1\right) \frac{\cos x}{x}, \\ &\vdots \end{aligned} \quad (2.93)$$

Es muss erwähnt werden, dass die Näherung, die Wellenfunktion der freien Elektronen mit der ebenen Wellenfunktion darzustellen, aufgrund der Vernachlässigung der Coulombenergie im Ausgangszustand das Signal überschätzt. Eine mögliche Verbesserung ist die Wahl der Coulombwellenfunktionen als Näherung für die Wellenfunktion der freien Teilchen [137].

Damit kann der Strukturfaktor der ionisierenden Elektronen in einer Näherung berechnet werden. Für weitere Betrachtungen in dichten Plasmen muss die Bindungsenergie $E_{(n\ell)}$ aufgrund des Motteffekts modifiziert werden. Diese Modifikation kann durch die Stuart-Pyatt-Verschiebungsenergie [65]

$$\Delta E_{B,Z_f} = - \frac{\left[3(Z^* + 1) \frac{Z_f \kappa_{SP} e^2}{k_B T} + 1\right]^{2/3} - 1}{2(Z^* + 1)} k_B T \quad (2.94)$$

berücksichtigt werden, die zu der Bindungsenergie $E_B = E_{(n\ell)} + \Delta E_B$ hinzuaddiert wird. Dabei ist κ_{SP} eine effektive inverse Abschirmlänge $\kappa_{SP}^2 = (4\pi e^2 (Z^* + 1) n_e) / (k_B T)$ und

$$Z^* = \frac{\langle Z^2 \rangle}{\langle Z \rangle} \quad \text{mit} \quad \langle Z^k \rangle = \frac{\sum_{j=0}^Z j^k n_j}{\sum_{j=0}^Z n_j} \quad (2.95)$$

die effektive Ladungszahl.

2.2.4 Diagnostik mittels Thomsonstreuung

Mit den Informationen über die Berechnung des Strukturfaktors der Thomsonstreuung der vorherigen Abschnitte ist man in der Lage, Spektren der Thomsonstreuung zu berechnen und mit experimentellen Ergebnissen zu vergleichen. In diesem Abschnitt wird

erläutert, wie man aus diesen Spektren die Plasmaparameter extrahieren und somit Plasmapradiagnostik betreiben kann. In dieser Arbeit werden vorwiegend die Plasmaparameter für die freien Elektronen untersucht, daher wird sich hier nur auf den Beitrag der freien Elektronen beschränkt. Um Plasmaparameter aus den Streuspektren zu gewinnen, wird zuerst auf die Struktur dieser Spektren eingegangen.

Für die Berechnung der Streuspektren für die freien Elektronen wird das Dissipations-Fluktuations-Theorem (2.45) herangezogen. Demnach gilt $S_{ee}^0 \sim \text{Im } \varepsilon_1^{-1}$. Dabei kann man die inverse dielektrische Funktion als

$$\varepsilon_1^{-1}(k, \omega) = \frac{\text{Re}(\varepsilon_1(k, \omega)) - i \text{Im}(\varepsilon_1(k, \omega))}{[\text{Re}(\varepsilon_1(k, \omega))]^2 + [\text{Im}(\varepsilon_1(k, \omega))]^2} \quad (2.96)$$

schreiben, wobei nur der letzte Term im Zähler für die Beschreibung der gesuchten Spektren interessant ist. Dieser Term ist der auf $|\varepsilon_1|^2$ normierte Imaginärteil und charakterisiert somit die normierte Absorption des Laserfeldes durch das Plasma (siehe Landau-dämpfung [95]). Dabei beschreibt ein positiver Imaginärteil der longitudinalen dielektrischen Funktion die Abgabe von Energie des Laserfeldes an die Elektronen, wohingegen ein negativer Imaginärteil der dielektrischen Funktion die Aufnahme von Energie des Laserfeldes aus dem Elektronensystem beschreibt. Das ist aus Abbildung 2.2 ersichtlich. In dieser Abbildung sind der Realteil und der Imaginärteil der longitudinalen dielektrischen Funktion, der Normierungsfaktor $|\varepsilon_1|^2$ und der Imaginärteil der inversen longitudinalen dielektrischen Funktionen für drei unterschiedliche laser-induzierte, homogene Plasmen dargestellt. Aus dieser Abbildung ist die Beschreibung der Absorption durch den Imaginärteil der dielektrischen Funktion ersichtlich, da für einen Frequenzverlust und damit Energieverlust des einkommenden Lasers $\Delta\omega < 0$ ein positiver Imaginärteil und für Energiegewinn des einkommenden Lasers $\Delta\omega > 0$ ein negativer Imaginärteil der longitudinalen dielektrischen Funktion zu beobachten ist.

Außerdem beobachtet man in Abbildung 2.2 starke Unterschiede im Imaginärteil der inversen longitudinalen dielektrischen Funktionen, die sich von der Struktur mit zwei ausgeprägten Maxima (Abbildung 2.2 b)) in eine Struktur mit einem Maxima (Abbildung 2.2 a)) ändert. Aus dem Vergleich der Abbildungen a) und b) sowie der Abbildungen a) und c) ist zu erkennen, dass dieser Maximawechsel durch Änderung sowohl der Laserparameter als auch der Plasmaparameter vollzogen werden kann. Weiterhin ist der Realteil der longitudinalen dielektrischen Funktion für das laser-bestrahlte Plasma der Abbildung 2.2 a) stets positiv, wohingegen für die laser-bestrahlten Plasmen der Abbildungen 2.2 b) und c) je vier Nullstellen zu erkennen sind. Diese Struktur ist auf die Gleichung (2.96) zurückzuführen, in der im Bereich der Nullstellen des Realteils der dielektrischen Funktion Maxima in der inversen dielektrischen Funktion auftreten können. Bei stets positivem Realteil wird stattdessen eine Dämpfung des Strukturfaktors für alle Frequenzen beobachtet. Damit sind zwei unterschiedliche Strukturfaktoren der Thomsonstreuung an freien Elektronen zu beobachten, die die kollektive und nicht-kollektive Thomsonstreuung aus Abschnitt 1.2 charakterisieren und durch Gleichung (1.11) unterscheidbar sind. Das hat seine Ursache in der Minimierung des Normierungsfaktors $|\varepsilon_1|^2$ und im gleichzeitigen Bestehenbleiben des Imaginärteils der longitudinalen dielektrischen Funktion.

Um die bereits in Abschnitt 1.2 eingeführte Messung der Dichte und Temperatur aus dem kollektiven Thomsonstreusignal zu verdeutlichen, wird diese hier noch einmal kurz betrachtet. Es ist bereits bekannt, dass die Laser-Plasmonen-Kopplung analog zu einer gedämpften, erzwungenen Schwingung sein Maximum in der Resonanzfrequenz der

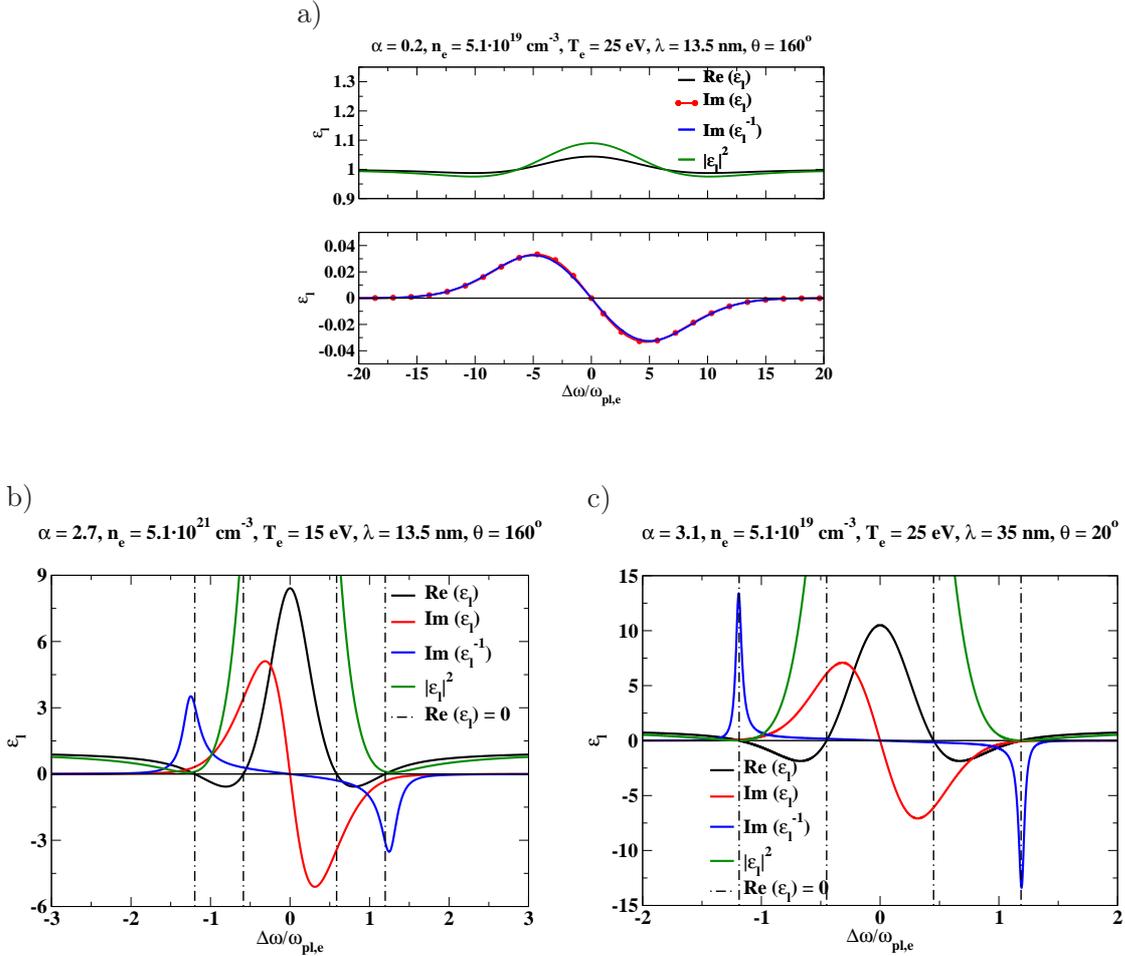


Abbildung 2.2: Darstellung des Imaginärteils und Realteils der longitudinalen dielektrischen Funktion, des Imaginärteils der inversen longitudinalen dielektrischen Funktion und des Normierungsfaktors $|\epsilon_l|^2$ der Gleichung (2.96) in Abhängigkeit von der Laserfrequenzverschiebung in Einheiten der Plasmafrequenz der Elektronen für drei verschiedene Streuexperimente: a) nicht-kollektive Streuung, b)+c) kollektive Streuung mit unterschiedlichen Laser- und Plasmaparametern. Es ist zu beobachten, dass Änderung sowohl der Plasmaparameter als auch der Laserparameter zur Änderung des Streuverhaltens führt.

Plasmonen hat, wodurch zwei Maxima im Bereich der positiven und negativen Resonanzfrequenz im Spektrum der Thomsonstreuung der freien Elektronen zu beobachten sein müssen (siehe Abbildungen 2.2 und 2.3). Die Resonanzfrequenz ω_{res} muss im Bereich der Eigenschwingung des System, also der Plasmafrequenz der Elektronen, liegen. Dabei kann die Resonanzfrequenz ω_{res} durch den eingestrahlt Laser, der als äußeres elektromagnetisches Feld die Elektronendichtefluktuation modifizieren kann, durch Gleichung (1.12) verschoben werden. Diese Dispersionsrelation ist die Bohm-Gross-Relation für klassische Systeme [62]. Aufgrund der Abhängigkeit der Plasmonen von der Bose-Statistik über $(1 + n_B)$, kann die Temperatur aus dem Verhältnis der beiden Plasmonenmaxima für

Plasmonenanregung und -abregung mit den Eigenschaften der dielektrischen Funktion (2.13) bestimmt werden,

$$\frac{S(k, \omega)}{S(-k, -\omega)} = \exp \left\{ \frac{\hbar\omega}{k_B T_e} \right\}. \quad (2.97)$$

Da die Plasmonenresonanzfrequenz im Experiment mit guter Genauigkeit gemessen werden kann, werden die Größen S und ω_{res} für gewöhnlich auf dieser Resonanzfrequenz benutzt. Zur Verdeutlichung ist in Abbildung 2.3 die Diagnostik des freien Elektronensystems aus dem Strukturfaktor mit den Parametern der Abbildung 2.2 b) dargestellt. Hier ist der Einfluss der Temperatur auf den Strukturfaktor mit Hilfe der Funktion $(1+n_B)$ hervorgehoben. Zudem wird in dieser Abbildung der Strukturfaktor mit der longitudinalen dielektrischen Funktion in RPA und BMA berechnet. Woraus zu erkennen ist, dass der Einfluss von Stößen den Strukturfaktor analog zu der Verbreiterung des Resonanzmaximums einer gedämpften Schwingung verbreitert. Damit kann allerdings nicht auf eine Verkürzung der Lebensdauer geschlossen werden, da die Plasmonen auch ohne Anwesenheit des zu streuenden Lasers vorhanden sind.

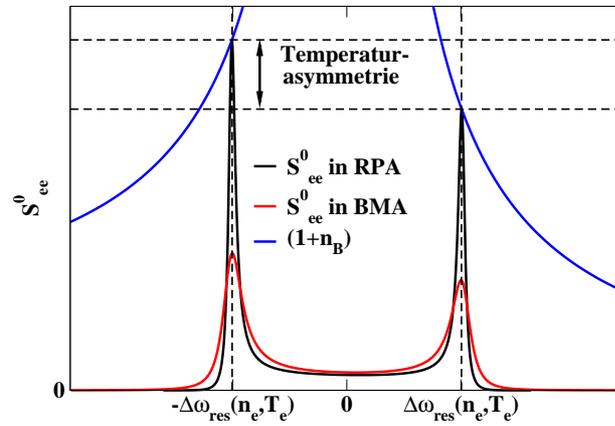


Abbildung 2.3: Schematische Darstellung des Strukturfaktors der freien Elektronen S^0_{ee} und der entsprechenden Bose-Funktion $(1+n_B)$ in Abhängigkeit von der Laserfrequenzverschiebung $\Delta\omega$. Die longitudinale dielektrische Funktion zur Bestimmung des Strukturfaktors wurde in RPA und BMA berechnet. Es wird eine Verbreiterung des Strukturfaktors in BMA gegenüber der RPA beobachtet. Zur Verdeutlichung der Plasmadiagnostik anhand der Thomsonstreuenspektren ist die Frequenzverschiebung der Plasmonenresonanz $\Delta\omega_{\text{res}}$ und die Asymmetrie der Temperatur an diesen Resonanzen mit gestrichelten Linien hervorgehoben.

Mit diesem theoretischen Hintergrund ist man in der Lage aus den gemessenen Streuspektren der Thomsonstreuung an freien Elektronen die Plasmaparameter des freien Elektronensystems zu bestimmen. Hier soll noch einmal erwähnt werden, dass die Gleichung (1.12) aus der dielektrischen Funktion in RPA für klassische Systeme hergeleitet wurde. Daher ist das eine grobe Abschätzung für klassische Systeme. Verbesserungen der Plasmonenresonanz wurde in [138] untersucht. Daraus geht hervor, dass für die in dieser Arbeit betrachteten Systeme die obige Plasmonenresonanz (1.12) im Vergleich zum experimentellen Rauschen ausreichend ist.

3 Beschreibung laser-induzierter Plasmen

Mit dem vorherigen Kapitel 2 wurde die Wechselwirkung zwischen Licht und Materie und die daraus folgende Thomsonstreuung als Plasmadiagnostikwerkzeug eingeführt. Laser-erzeugte Plasmen unterliegen dynamischen Prozessen, die auf der in dieser Arbeit betrachteten Femtosekunden- bis Pikosekundenzeitskala einen großen Einfluss auf die Dichte und Temperatur des Plasmas haben. Das dynamische Verhalten von Plasmen soll mit Hilfe der Thomsonstreuung innerhalb dieser Arbeit diagnostiziert und mit experimentellen Daten verglichen werden, wodurch die zeitliche Entwicklung des zu untersuchenden Plasmas beschrieben werden muss. Dazu werden zwei Ansätze genutzt. Für das Zeitverhalten innerhalb einiger 100 Femtosekunden nach der Lasereinstrahlung werden aufgrund der Auflösung von Effekten des Nicht-Gleichgewichts und der Nicht-Linearität mikroskopische Ansätze verwendet, wohingegen für das Zeitverhalten bis zu einigen Pikosekunden makroskopische Ansätze verwendet werden sollen, da in diesem Zeitbereich die Anwendung von mikroskopischen Simulationen auf heutigen Rechnersystemen schwer zu realisieren sind.

In diesem Kapitel werden zuerst im Abschnitt 3.1 die Grundlagen für die Beschreibung der zeitlichen Entwicklung eines Plasmas eingeführt. Anschließend wird im Abschnitt 3.2 der Übergang zum makroskopische Bild für die Beschreibung laser-induzierter Plasmen vorgestellt.

3.1 Das mikroskopische Bild

Um eine vollständige Teilchendynamik in einem Plasma unter der Einwirkung eines Laserfeldes zu beschreiben, wird im vorliegenden Abschnitt das mikroskopische Bild betrachtet. Darin wird die Dynamik und Wechselwirkung der einzelnen Teilchen, deren Beschreibung auf der Grundlage von Verteilungsfunktionen im ersten Unterabschnitt eingeführt wird, mit Hilfe der Boltzmann-Gleichung, die im zweiten Unterabschnitt vorgestellt wird, untersucht. Aufbauend auf der Boltzmann-Gleichung wird im dritten Unterabschnitt die Dynamik eines Plasmas und ihre mikroskopische Simulation beschrieben. Abschließend werden im letzten Unterabschnitt die für die Simulationen von dynamischen Plasmen notwendigen Ionisationsprozesse eingeführt.

3.1.1 Mikroskopisches Bild und Verteilungsfunktionen

In diesem Abschnitt werden die Grundlagen zur klassischen mikroskopischen Beschreibung eines Gases beziehungsweise einer Flüssigkeit gegeben. Um ein solches klassisches System mikroskopisch zu charakterisieren, müssen die Orte \mathbf{r} und Impulse \mathbf{p} sämtlicher Teilchen N_s bekannt sein. In der Regel bestehen die zu betrachtenden Systeme aus $N_s = 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ Teilchen im Falle von verdünnten Gasen und bis zu $N_s = 10^{23} \text{ cm}^{-3}$ Teilchen im Falle von Festkörpern [139]. Damit benötigt man für ihre vollständige Charakterisierung die Orts- und Impulskoordinaten aller $10^{16} - 10^{23} \text{ cm}^{-3}$ Teilchen. Bei der Betrachtung von Molekülen sind auch Informationen über Vibrations- und Schwingungseigenschaften nötig [95], die hier allerdings nicht weiter ausgeführt werden. Weiterhin müssen für die zeitliche Entwicklung dieser Systeme die kanonischen Gleichungen der Hamiltonischen Mechanik

$$\frac{d\mathbf{r}_i}{dt} = \frac{\partial H}{\partial \mathbf{p}_i}, \quad \frac{d\mathbf{p}_i}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial \mathbf{r}_i}, \quad \text{mit } i = 1, 2, \dots, N_s \quad (3.1)$$

und $H = H(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_1, \dots, \mathbf{r}_{N_s}, \mathbf{p}_{N_s}, t)$, für alle $10^{16} - 10^{23}$ Teilchen gelöst werden. Die Hamiltonfunktion

$$H = \sum_i^{N_s} \frac{\mathbf{p}_i^2}{2m_i} + \frac{1}{2} \sum_i^{N_s} V(|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|) + \sum_i^{N_s} V^{\text{ext}}(\mathbf{r}_i, \mathbf{p}_i) \quad (3.2)$$

gibt die kinetische $E_k = p^2/(2m)$ und potentielle V beziehungsweise externe potentielle V^{ext} Energie des Systems an und beschreibt somit die internen und externen Kräfte. Dabei sind in dieser Hamiltonfunktion auch Wechselwirkungen berücksichtigt, bei denen mehr als zwei Teilchen beteiligt sind. Die Berechnung dieses Problems ist auf heutigen Rechnersystemen zu aufwendig, um die Lösung in einer endlichen Zeitdauer zu erhalten. Um dennoch solche Systeme zu beschreiben, wählt man einen statistischen Zugang. Dazu werden N im Phasenraum benachbarte Teilchen zusammengefasst, wobei dieser Phasenraum das gesamte Material umfassen kann, wobei dann $N = N_s$ gilt.

Um die Teilchen in einem Phasenraum zu charakterisieren, wird eine kontinuierliche Funktion eingeführt, die vom Phasenraum der betrachteten Teilchen, also den Orten \mathbf{r}_i und den Impulsen \mathbf{p}_i , sowie von der Zeit t abhängt: die N -Teilchenverteilungsfunktion

$$f_N(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{p}_2, \dots, \mathbf{r}_N, \mathbf{p}_N, t). \quad (3.3)$$

Eine Problematik, die aus diesem Ansatz resultiert, ist die Wahl des Phasenraums dieser Verteilungsfunktion und die daraus folgende Anzahl an Teilchen, die dieser Funktion zu Grunde liegt. Zum einen muss das Ortsvolumen ausreichend klein sein, um nicht den mikroskopischen Charakter des Problems zu verlieren, zum anderen muss das Ortsvolumen ausreichend groß sein, damit genügend Teilchen in diesem Volumen enthalten sind, um eine kontinuierliche N -Teilchenverteilungsfunktion annehmen zu können. Prinzipiell muss die Anzahl der Teilchen, die durch die Verteilungsfunktion beschrieben werden, gegen Unendlich gehen und das dazugehörige Ortsvolumen muss unendlich klein sein [140]. Das würde auf Systeme mit unendlich großen Dichten zutreffen, die allerdings mit der weiter unten betrachteten Methodik der zeitlichen Evolution der Verteilungsfunktionen und den dazugehörigen Bedingungen im Konflikt stehen. Daher muss ein Kompromiss gefunden werden. Um eine sinnvolle Bedingung für das Ortsvolumen zu wählen, wird die Abmessung dieses Volumens als groß gegenüber der Teilchengröße festgesetzt. Aufgrund des resultierenden Verlusts der Bestimmtheit der genauen Positionen der Teilchen verlieren die Stöße in einem solchen System ihre klassische Determiniertheit und es kann nur noch von Wahrscheinlichkeiten gesprochen werden [95].

Somit kann die Beobachtung, dass das makroskopische System den Mikrozustand im Phasenraumvolumen $d\Gamma$ um den Phasenraumpunkt $\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{p}_N$ einnimmt, nur als Wahrscheinlichkeit

$$f_N(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{p}_N, t) d\Gamma, \quad \text{mit } d\Gamma = \frac{d\mathbf{r}_1 \dots d\mathbf{p}_N}{N! h^{3N}}, \quad (3.4)$$

angegeben werden. Hier stellt $h^{3N} N!$, mit dem Planckschen Wirkungsquantum h , für die Definition der Größe des Phasenraums h^{3N} , und der Anzahl der Teilchen im Phasenraumvolumen N , die die Ununterscheidbarkeit und damit die Möglichkeit der Vertauschung von Teilchen durch $N!$ beschreibt, einen Normierungsfaktor dar. Aus der Bedingung, dass sich das makroskopische System zu jedem Zeitpunkt in einem Mikrozustand befinden muss, leitet sich die Normierung der N -Teilchenverteilungsfunktion ab,

$$\int \dots \int d\Gamma f_N(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{p}_N, t) = 1. \quad (3.5)$$

Mit der Information der N -Teilchenverteilungsfunktion ist das System zu einem gegebenen Zeitpunkt t vollständig bestimmt. Da sich die Bestimmung dieser Funktion als schwierig erweist, reduziert man das Problem der gleichzeitigen Beschreibung aller Teilchen auf die Beschreibung einzelner Teilchen in einem Phasenraumvolumen. Zudem ist für die Beschreibung dynamischer, makroskopischer Größen die N -Teilchenverteilungsfunktion ungeeignet, da nicht die volle Information der N -Teilchenverteilungsfunktion benötigt wird, um die makroskopischen Größen zu berechnen [141, 142]. Dazu werden s -Teilchenverteilungsfunktionen (reduzierte Verteilungsfunktionen)

$$f_s(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_1, \dots, \mathbf{r}_s, \mathbf{p}_s, t) = \int \dots \int \frac{d\mathbf{r}_{s+1} \dots d\mathbf{p}_N}{(N-s)! h^{3(N-s)}} f_N(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{p}_N, t) \quad (3.6)$$

eingeführt. Diese Gleichung beschreibt die Bekanntheit der Orte \mathbf{r}_i und Impulse \mathbf{p}_i der s -Teilchen, wobei die restlichen $N-s$ Teilchen jeden beliebigen Ort und Impuls im betrachteten Phasenraum einnehmen können. Die Normierung der s -Teilchenverteilungsfunktion findet man aus der Tatsache, dass die s -Teilchenverteilungsfunktion s Teilchen des aus N Teilchen bestehenden Mikrozustands beschreibt und somit $\binom{N}{s}$ Möglichkeiten existieren, diese s aus N Teilchen anzuordnen,

$$\int \dots \int \frac{d\mathbf{r}_1 \dots d\mathbf{p}_s}{s! h^{3s}} f_s(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{p}_s, t) \stackrel{(3.4), (3.6)}{=} \frac{N!}{(N-s)! s!} = \binom{N}{s}. \quad (3.7)$$

Diese reduzierten Verteilungsfunktionen werden im Folgenden dazu verwendet, um makroskopische Eigenschaften zu bestimmen, die sich aus den mikroskopischen Bedingungen herleiten lassen. Das erfolgt durch das Bilden von Erwartungswerten unter Nutzung der reduzierten Verteilungsfunktionen. Da diese Erwartungswerte nicht die volle Information der N -Teilchenverteilungsfunktion benötigen, können die reduzierten Verteilungsfunktionen dazu genutzt werden, um einfach auswertbare Ausdrücke für diese Erwartungswerte zu erhalten [141, 142].

Die in dieser Arbeit benötigten ortsabhängigen makroskopischen Eigenschaften $A(\mathbf{r}, t)$ des Systems werden aus den mikroskopischen Eigenschaften $a(\mathbf{r}, \mathbf{p})$ durch Mittelung über den Impuls mit Hilfe der Ein-Teilchenverteilungsfunktion f_1 gewonnen,

$$\langle A(\mathbf{r}, t) \rangle = C \int \frac{d\mathbf{p}}{h^3} a(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) f_1(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t), \quad (3.8)$$

mit dem Normierungsfaktor C . Hierbei kann die Teilchenverteilungsfunktion über die Gleichung (3.4) als Wahrscheinlichkeitsdichte w mit

$f_N(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{p}_N, t) = N! h^{3N} w(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{p}_N, t)$ interpretiert werden. Der Normierungsfaktor C resultiert aus der Normierung der Wahrscheinlichkeitsdichte. Damit ist der Normierungsfaktor C durch die Impulsintegration über die Ein-Teilchenverteilungsfunktion

$$\frac{1}{C} = \int \frac{d\mathbf{p}}{h^3} f_1(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) = n(\mathbf{r}, t) \quad (3.9)$$

gegeben und wird als ortsabhängige Dichte des makroskopischen Systems interpretiert. Als Beispiel wird dies für den einfachen Fall eines homogenen Systems gezeigt,

$$\frac{1}{C} = n = \left(\frac{1}{\int d\mathbf{r}} \right) \int d\mathbf{r} \int \frac{d\mathbf{p}}{h^3} f_1(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) \stackrel{(3.7)}{=} \frac{N}{V}, \quad (3.10)$$

mit dem Systemvolumen $\int d\mathbf{r} = V$. Hier muss wieder die Frage nach der Größe des Phasenraumvolumens gestellt werden, da für die Ermittlung der makroskopischen Eigenschaften die Fluktuation der mikroskopischen Eigenschaften nicht zu groß werden darf. Das ist der Fall, wenn genügend Teilchen in einem Phasenraumvolumen enthalten sind. Das heißt, dass der mittlere Abstand der Teilchen klein gegenüber den Abmessungen des Phasenraumvolumens sein muss [95].

Damit ist man in der Lage, makroskopische Eigenschaften aus mikroskopischen Eigenschaften herzuleiten. Um eine zeitliche Entwicklung dieser Eigenschaften zu erhalten, wird im nächsten Abschnitt die zeitliche Entwicklung der Verteilungsfunktionen diskutiert.

3.1.2 Kinetische Boltzmann-Gleichung

Die Grundgleichung der kinetischen Gastheorie ist die Boltzmann-Gleichung und beschreibt die zeitliche Entwicklung der Verteilungsfunktionen. Wie in diesem Abschnitt gezeigt wird, ist diese Gleichung auch auf verdünnte (leicht nicht-ideale), quasi-neutrale (dieser Begriff wird später eingeführt) Plasmen anwendbar. Mit leicht nicht-ideale Plasmen sind hierbei Plasmen gemeint, die sich durch kleine Störungen aus dem idealen Zustand im nicht-idealen Zustand befinden. Im Folgenden werden nur einatomige Gase betrachtet, so dass das Phasenraumvolumen Γ auf den Ort und Impuls der Teilchen reduziert werden kann und Rotations- und Vibrationsparameter nicht notwendig sind. Die Argumente der Verteilungsfunktion werden in diesem und den nächsten Abschnitten der Einfachheit halber weggelassen. Es wird jetzt die zeitliche Entwicklung der Verteilungsfunktion $f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)$ entlang der Phasenraumtrajektorie betrachtet [95]

$$\begin{aligned} \frac{df_1}{dt} &= \frac{\partial}{\partial t} f_1 + \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial t} \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} f_1 + \frac{\partial \mathbf{p}}{\partial t} \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}} f_1 \\ &= \frac{\partial}{\partial t} f_1 + \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} (\dot{\mathbf{r}} f_1) - \left(\frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \dot{\mathbf{r}} \right) f_1 + \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}} (\dot{\mathbf{p}} f_1) - \left(\frac{\partial}{\partial \mathbf{p}} \dot{\mathbf{p}} \right) f_1, \end{aligned} \quad (3.11)$$

die mit den kanonischen Gleichungen der Hamiltonischen Mechanik und dem Liouville-Theorem verschwindet,

$$\frac{df_1}{dt} \stackrel{(3.1)}{=} \underbrace{\frac{\partial}{\partial t} f_1 + \left[\frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} (\dot{\mathbf{r}} f_1) + \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}} (\dot{\mathbf{p}} f_1) \right]}_{=0, \text{ Kontinuität des Phasenraums}} - \underbrace{\left[\frac{\partial^2 H}{\partial \mathbf{r} \partial \mathbf{p}} f_1 - \frac{\partial^2 H}{\partial \mathbf{p} \partial \mathbf{r}} f_1 \right]}_{=0, \text{ Satz von Schwarz}} = 0. \quad (3.12)$$

Dabei muss berücksichtigt werden, dass im Liouville-Theorem die Zeitintervalle nur als sehr klein gewählt werden können, damit jedes Untersystem des statistischen Ensembles, welches durch einen Phasenraumpunkt beschrieben wird, als quasi abgeschlossen betrachtet werden kann. Das ist notwendig, um die Phasenraumpunkte als statistisch unabhängig zu betrachten, womit diese nur schwach miteinander wechselwirken. Wenn man die Untersysteme als groß genug betrachtet, dass genügend Teilchen darin enthalten sind, wechselwirken die Teilchen benachbarter Phasenraumpunkte nur am Rand miteinander. Dadurch ist die Zahl der Teilchen am Rand eines Phasenraumvolumens, die mit

Teilchen benachbarter Phasenraumvolumina wechselwirken können, klein gegenüber der Gesamtzahl der Teilchen in einem Untersystem.

Damit wurde unter Benutzung des Satzes von Schwarz (Gleichgültigkeit der Reihenfolge der Differentiation), der Tatsache eines kontinuierlichen Phasenraums und den Relationen $\dot{\mathbf{r}} = \mathbf{v}$ und $\dot{\mathbf{p}} = \mathbf{F}$ eine Gleichung für die zeitliche Entwicklung der Ein-Teilchenverteilungsfunktion

$$\frac{\partial}{\partial t} f_1 + \mathbf{v} \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} f_1 + \mathbf{F} \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}} f_1 = 0 \quad (3.13)$$

gefunden, wobei \mathbf{v} die Geschwindigkeiten der Teilchen und \mathbf{F} die auf die Teilchen wirkenden externen und internen Kräfte darstellen. Diese Gleichung (3.13) wird unter Berücksichtigung der elektromagnetischen Kräfte \mathbf{F} mit Hilfe der Maxwellgleichungen und der Lorentzkraft als Vlasovgleichung bezeichnet. Kontinuierlicher Phasenraum meint hier, dass keine Phasenraumpunkte vernichtet oder erzeugt werden können und somit die Kontinuitätsgleichung ohne Quellen anwendbar ist [141, 142].

Im Allgemeinen werden jedoch Systeme betrachtet, in denen der Phasenraum mit der Änderung der Zeit nicht konstant ist. Dies ist der Fall, wenn ein nicht stoßfreies System betrachtet wird, bei dem sich durch Stöße der Impuls der Teilchen ändern kann, was eine Änderung des Phasenraums zur Folge hat. Dann muss die Gleichung (3.13) durch einen Stoßterm $St f$ ergänzt werden,

$$\frac{\partial}{\partial t} f_1 + \mathbf{v} \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} f_1 + \mathbf{F} \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}} f_1 = St f. \quad (3.14)$$

Der Stoßterm beschreibt die Stoßprozesse der Teilchen untereinander, wobei nicht nur zwei einzelne Teilchen untereinander wechselwirken können, sondern auch Mehrteilchenstöße stattfinden können. Unter der Annahme eines verdünnten Systems (leicht nicht-ideales System) wird die Wahrscheinlichkeit für Teilchenstöße, an denen mehr als zwei Teilchen teilnehmen, sehr klein und der Stoßterm

$$St f = \frac{\partial}{\partial t} \int \frac{d\mathbf{r}' d\mathbf{p}'}{h^3} f_2(\mathbf{r}, \mathbf{p}, \mathbf{r}', \mathbf{p}', t) = \int \frac{d\mathbf{r}' d\mathbf{p}'}{h^3} \frac{\partial V(\mathbf{r}, \mathbf{r}')}{\partial \mathbf{r}} \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}} f_2(\mathbf{r}, \mathbf{p}, \mathbf{r}', \mathbf{p}', t) \quad (3.15)$$

kann auf die Zwei-Teilchenverteilungsfunktion beschränkt werden. Dieser Term beschreibt die Stöße zwischen zwei Teilchen mit den Phasenraumpunkten \mathbf{p}, \mathbf{r} und \mathbf{p}', \mathbf{r}' . $V(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ ist das Wechselwirkungspotential zwischen den beiden wechselwirkenden Teilchen und ist von den Ortskoordinaten der beteiligten Teilchen abhängig. Speziell im Fall eines Plasmas, in dem das Coulombpotential gilt, ist das Potential V nicht nur auf die Umgebung der stoßenden Teilchen beschränkt, wodurch ein großes Gebiet im Plasma am Stoß beteiligt sein kann. Auf solch eine Beschreibung der Stöße in Plasmen wird im Abschnitt 3.1.3 eingegangen. Um eine exakte Beschreibung des Problems der Teilchenstöße zu erhalten, muss eine weitere kinetische Gleichung für die Zwei-Teilchenverteilungsfunktion aufgestellt werden, die wiederum durch Stöße zwischen drei stoßenden Teilchen von der Drei-Teilchenverteilungsfunktion abhängt usw. Dies führt auf die BBGKY Hierarchie (Bogoljubov, Born, Green, Kirkwood, Yvon) [95, 141], welche eine Schar gekoppelter, kinetischer Gleichungen ist, die bis zur N-Teilchenverteilungsfunktion fortgeführt werden müsste. Im Allgemeinen wird unter der Annahme eines verdünnten Plasmas bereits nach der kinetischen Gleichung für die Ein-Teilchenverteilungsfunktion abgebrochen.

Damit wurde eine Bewegungsgleichung für die Ein-Teilchenverteilungsfunktion gefunden, die aufgrund ihrer zusätzlichen Abhängigkeit von der Zwei-Teilchenverteilungsfunktion nicht allein mit Gleichung (3.14) lösbar ist. Um eine geschlossene Gleichung für die Ein-Teilchenverteilungsfunktion zu erhalten, wird der Stoßterm durch Ein-Teilchenverteilungsfunktionen angenähert. Dabei wird, wie schon von dem oben verwendeten Liouville-Theorem gefordert, für kleine Zeitintervalle die statistische Unabhängigkeit der Verteilungsfunktionen genutzt, um vor und nach dem Stoß $f_2(\mathbf{r}, \mathbf{p}, \mathbf{r}', \mathbf{p}', t) = f_1(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)f_1(\mathbf{r}', \mathbf{p}', t)$ anzunehmen. Damit erhält man die Boltzmann-Gleichung, die die zeitliche Entwicklung eines Systems durch Ein-Teilchenverteilungsfunktionen beschreibt.

Um einen Ausdruck für den Stoßterm und damit eine geschlossene Form der Boltzmann-Gleichung in der Ein-Teilchenverteilungsfunktion zu erhalten, wird jetzt der Stoßterm etwas genauer untersucht. Dazu werden die betrachteten Zwei-Teilchen-Stoßprozesse als elastisch angenommen, das heißt, dass sich die inneren Zustände der Teilchen während des Stoßes nicht ändern. Des Weiteren gilt Impulserhaltung $\mathbf{p} + \mathbf{p}' = \tilde{\mathbf{p}} + \tilde{\mathbf{p}}'$, wobei $\tilde{\mathbf{p}}$ und $\tilde{\mathbf{p}}'$ die Impulse der beiden Teilchen nach dem Stoß sind.

Der Stoßterm selbst beschreibt die Änderung des Phasenraums \mathbf{p} des betrachteten Teilchens aufgrund von Stößen mit Teilchen des Phasenraums \mathbf{p}' . Dabei ändert sich der Phasenraum beider Stoßpartner $\mathbf{p}, \mathbf{p}' \rightarrow \tilde{\mathbf{p}}, \tilde{\mathbf{p}}'$. Der Ort unmittelbar vor und nach dem Stoß ändert sich hierbei nicht. Um den Stoßterm quantitativ zu beschreiben, kann dieser durch

$$\text{St } f = G - L = \int d\mathbf{p}' d\tilde{\mathbf{p}} d\tilde{\mathbf{p}}' (w' \tilde{f} \tilde{f}' - w f f') \quad (3.16)$$

ausgedrückt werden [95, 141–143]. Damit kann der Stoßterm als Gewinn G beziehungsweise Verlust L an Teilchen im Phasenraumintervall $d\mathbf{p}$ in der Ein-Teilchenverteilungsfunktion im Volumenintervall dV beschrieben werden. In dieses Phasenraumintervall können alle Stöße übergehen, die alle möglichen Phasenraumintervalle $d\mathbf{p}'$, $d\tilde{\mathbf{p}}$, $d\tilde{\mathbf{p}}'$ annehmen können. Hierbei beschreibt der erste Term den Gewinn und der zweite Term den Verlust an Teilchen im Phasenraumintervall $d\mathbf{p}$. Weiterhin charakterisieren f, f' die Ein-Teilchenverteilungsfunktion der Teilchen vor dem Stoß und \tilde{f}, \tilde{f}' die Ein-Teilchenverteilungsfunktion nach dem Stoß. w und w' sind die Stoßwahrscheinlichkeiten für positive und negative Zeitrichtung, in die das gesamte Problem des Stoßes übertragen wurde.

Die Eigenschaft dieser Wahrscheinlichkeit, dass aufgrund der Symmetrie der Grundgleichungen der Mechanik bezüglich der Zeitumkehr [95] $w' = w$ gilt, wird dazu verwendet, um Gleichung (3.16) zu vereinfachen. Zudem kann man die Stoßwahrscheinlichkeit mit dem effektiven Wirkungsquerschnitt

$$d\sigma = \frac{w}{|\mathbf{p} - \mathbf{p}'|} d\tilde{\mathbf{p}} d\tilde{\mathbf{p}}' \quad (3.17)$$

verknüpfen [95]. Damit kann eine Bewegungsgleichung für die Ein-Teilchenverteilungsfunktion, die kinetische Boltzmann-Gleichung,

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v} \frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} + \mathbf{F} \frac{\partial f}{\partial \mathbf{p}} = \int \int d\sigma d\mathbf{p}' \{ \tilde{f} \tilde{f}' - f f' \} |\mathbf{p} - \mathbf{p}'|, \quad (3.18)$$

gefunden werden, die nur von der Ein-Teilchenverteilungsfunktion abhängt. Hier wurden die Abkürzungen $f = f_1(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)$, $f' = f_1(\mathbf{r}, \mathbf{p}', t)$, $\tilde{f} = f_1(\mathbf{r}, \tilde{\mathbf{p}}, t)$ und $\tilde{f}' = f_1(\mathbf{r}, \tilde{\mathbf{p}}', t)$ genutzt.

3.1.3 Mikroskopische Beschreibung eines laser-induzierten Plasmas

Um die Laser-Materie-Wechselwirkung exakt zu beschreiben, muss diese Wechselwirkung mikroskopisch untersucht werden. Speziell für hohe Laserintensitäten ab $I = 10^{17}$ W/cm² können nicht-lineare und relativistische Effekte beobachtet werden, die nur im mikroskopischen Bild zu beschreiben sind. Daher ist es im Zeitbereich während und einige 100 Femtosekunden nach der Einstrahlung intensiver Laser notwendig eine mikroskopische Beschreibung zu wählen, die hier vorgestellt wird.

Im Abschnitt 3.1.2 wurde die Boltzmann-Gleichung (3.18) eingeführt, mit der in diesem Abschnitt Plasmen beschrieben werden sollen, die aus geladenen Teilchen bestehen, zwischen denen langreichweitige Coulombkräfte herrschen. Ein Problem aufgrund dieser langreichweitigen Kräfte ist die Behandlung der Stöße und der daraus resultierenden Korrelationen im System, da für die Gültigkeit der Boltzmann-Gleichung das zu betrachtende System nur leicht nicht-ideal sein darf. Um diese Bedingung zu gewährleisten, muss die mittlere Wechselwirkungsenergie zweier geladener Teilchen klein im Vergleich zu ihrer mittleren kinetischen Energie sein. Hier wurde jedoch der in Plasmen auftretende statistische Effekt der Abschirmung nicht berücksichtigt. Durch diesen können sich die verschiedenen geladenen Ladungsträger der Ionen und Elektronen gegenseitig abschirmen, womit die Langreichweitigkeit der Coulomb-Kräfte verkürzt wird. Daraus kann die oben genannte Bedingung für die schwache Idealität des Plasmas umformuliert werden: In einem Plasmasystem, das nur leicht nicht-ideal ist, muss der mittlere Teilchenabstand klein gegenüber der Debye-Abschirmlänge sein. Das heißt, es müssen sich stets genug Teilchen innerhalb der Debye-Kugel mit dem Radius der Debye-Länge (1.4) befinden.

Aufgrund der Langreichweitigkeit der Coulombkräfte beziehungsweise der abgeschirmten Coulombkräfte müssen die Stöße neu betrachtet werden, da jetzt sämtliche geladenen Teilchen in einem Plasma untereinander wechselwirken können. Dadurch könnte jede Wechselwirkung als Stoß aufgefasst werden. Da allerdings Stöße dissipative, entropieverändernde Prozesse sind und nicht jede Wechselwirkung diese Eigenschaft besitzt, müssen die Coulomb-Wechselwirkungsprozesse zwischen den geladenen Teilchen klassifiziert werden. Zum einen gibt es Wechselwirkungen innerhalb der Debye-Kugel, die auf chaotischen, mikroskopischen Stößen zwischen den Teilchen beruhen. Dieser Prozess ist vergleichbar mit Stößen zwischen harten Kugeln und trägt zur Relaxation ins Gleichgewicht und somit zur Entropieveränderung des Systems bei. Zum anderen existieren zusätzliche Stöße zwischen Teilchen mit Abständen größer als die Abschirmlänge. Da bei diesen Wechselwirkungen nicht nur eine Schar von mikroskopischen Teilchen innerhalb der Abschirmlänge, sondern ein ganzes Kollektiv an Teilchen teilnimmt, kann dieser Prozess als makroskopischer Effekt angesehen werden. Somit kann dieser Effekt nicht zum Anwachsen der Entropie oder zur Relaxation des Systems beitragen. Im Gegensatz zu dissipativen, entropieverändernden Stoßprozessen wirkt diese makroskopische Kraft kontinuierlich in der Zeit zwischen den Stößen und die Teilchenbewegung kann dadurch nicht mehr als frei angesehen werden, womit dieser Prozess als externe Kraft in der Boltzmann-Gleichung berücksichtigt werden muss [95]. Diese Kraft kann als die Lorentzkraft $F_{\text{el}} = e(\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B}/c)$ identifiziert werden. Damit kommt es zu einer Trennung der Kräfte in der Boltzmann-Gleichung, wobei die kollektiven Wechselwirkungen in den externen Kräften und die Wechselwirkungen innerhalb der Abschirmlänge im Stoßterm berücksichtigt werden.

Damit erhält man aus Gleichung (3.18) die kinetischen Gleichungen für Elektronen und Ionen

$$\frac{\partial}{\partial t} f_e + \mathbf{v} \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} f_e - e \left(\mathbf{E} + \frac{1}{c} \mathbf{v} \times \mathbf{B} \right) \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}} f_e = \text{St } f_e, \quad (3.19)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} f_i + \mathbf{v} \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} f_i + e \left(\mathbf{E} + \frac{1}{c} \mathbf{v} \times \mathbf{B} \right) \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}} f_i = \text{St } f_i. \quad (3.20)$$

Um dieses Gleichungssystem lösen zu können, müssen die Felder bekannt sein, die mittels der mikroskopischen Maxwellgleichungen

$$\text{rot } \mathbf{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t}, \quad (3.21)$$

$$\text{rot } \mathbf{B} = \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} + \mu_0 \mathbf{j}_m, \quad (3.22)$$

$$\text{div } \mathbf{B} = 0, \quad (3.23)$$

$$\text{div } \mathbf{E} = \frac{1}{\varepsilon_0} \rho_m, \quad (3.24)$$

mit der dielektrischen Permeabilität ε_0 , der magnetischen Feldkonstante μ_0 und den unbekanntenen mikroskopischen Quellen Ladungsdichte ρ_m und Stromdichte \mathbf{j}_m , gelöst werden können. Diese Quellen können mit Hilfe der Verteilungsfunktionen

$$\rho_m = e \int (Z_i f_i - f_e) d\mathbf{p}, \quad \mathbf{j}_m = e \int (Z_i f_i - f_e) \mathbf{v} d\mathbf{p}, \quad (3.25)$$

mit der Ladung des betrachteten Ions Z_i , ausgedrückt werden. Hierbei stellt Gleichung eine Aufsummation der vorhandenen Ladungen im betrachteten Raumvolumen dar, wobei Gleichung die Bewegung dieser Ladungen beschreibt. Somit existiert ein gekoppeltes Gleichungssystem, welches sowohl die Verteilungsfunktionen als auch die Felder im Plasma löst. Bei Vernachlässigung der Stöße bezeichnet man dieses Gleichungssystem als Vlasovgleichungen. Hier wurde durch die Annahme eines verdünnten Plasmas, welches durch die Boltzmann-Gleichung gegeben ist, die elektrischen und magnetischen Felder als die gemittelten makroskopischen Felder mit der elektrischen Feldstärke \mathbf{E} und der magnetischen Flussdichte \mathbf{B} angenommen, da die Korrelationen zwischen den Teilchen [95] und somit auftretende Mikrofelder vernachlässigt werden können. Dieses System ist mit heutigen Computerkapazitäten nur dann in endlicher Zeit lösbar, wenn es eine begrenzte Anzahl an Quellen \mathbf{j}_m und ρ_m gibt.

Für die Vernachlässigung der Stöße im obigen Gleichungssystem muss die Stoßfrequenz klein gegenüber der Frequenz der Änderung der makroskopischen Felder \mathbf{E} und \mathbf{B} sein. Das ist damit begründet, dass dann das Stoßintegral in Gleichung (3.19) und (3.20) klein im Vergleich zur zeitlichen Entwicklung der Verteilungsfunktion $\partial f / \partial t$ ist. Diese Vernachlässigung gilt auch, wenn die mittlere freie Weglänge der Teilchen groß gegenüber den Abständen ist, auf denen sich das Feld ändert, wodurch der Stoßterm gegenüber dem räumlichen Gradienten der Verteilungsfunktion $\mathbf{v} \partial f / \partial \mathbf{r}$ vernachlässigt werden kann [95]. Damit führt man das Problem auf ein ideales System ohne dissipative Prozesse zurück (kein Quellterm in der kinetischen Gleichung), wodurch keine Relaxation zum Gleichgewicht und ein Anwachsen der Entropie beobachtet werden kann.

Um eine Lösung des Problems zu erreichen, müssen die Vlasovgleichungen gelöst werden. Eine Möglichkeit ist die Finite-Differenzen-Methode in der auch die Maxwellgleichungen leicht gelöst werden können. Das heißt, man muss für ein dreidimensionales

Problem die Vlasovgleichungen auf einem sechsdimensionalen Gitter für Ort und Impuls lösen. Aufgrund von numerischen Bedingungen auf solch einem Gitter müssen zudem auch Gitterzellen berechnet werden, in denen keine Teilchen vorhanden sind. Das erweist sich als ausgesprochen ineffizient. Man bedient sich daher einer anderen Methode: der Finiten-Elemente-Methode. Anstatt ein Gitter für die Lösung der kinetischen Gleichungen (3.19) und (3.20) zu verwenden, werden die Verteilungsfunktionen näherungsweise durch einen Satz von finiten Phasenraumelementen

$$f(\mathbf{r}, \mathbf{p}) = \sum_n W_n S(\mathbf{r} - \mathbf{r}_n, \mathbf{p} - \mathbf{p}_n) \quad (3.26)$$

beschrieben [144]. Hier stellen W_n die Gewichte und $S(\mathbf{r}, \mathbf{p})$ die Phasenraumformfunktion, mit dem Mittelpunkt bei \mathbf{r}_n und \mathbf{p}_n , dar. Wie in Abbildung 3.1 gezeigt, kann im

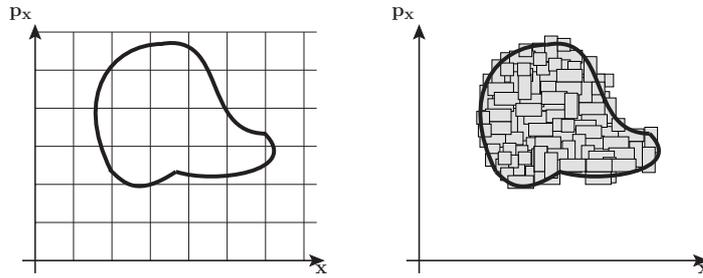


Abbildung 3.1: Darstellung der Methode der Aufteilung der Phasenraumvolumina in ein äquidistantes Gitter bei der Lösung der Vlasovgleichungen mit der Finiten-Differenzen-Methode (links) und den freibeweglichen Phasenraumvolumina der Finiten-Elemente-Methode (rechts).

einfachsten Fall die Phasenraumformfunktion S als sechsdimensionaler Quader mit der Kantenlänge Δx , Δy , Δz , Δp_x , Δp_y , Δp_z gewählt werden, wobei der Satz aller Quader den betrachteten Ortsraum des Plasmas ausfüllt. Diese Phasenraumelemente bewegen sich bei Stoßfreiheit aufgrund $df/dt = 0$ entlang der Trajektorien der Newtonschen Gleichungen [139]

$$\frac{d\mathbf{r}_n}{dt} = \frac{\mathbf{p}_n}{m}, \quad \frac{d\mathbf{p}_n}{dt} = e \left(\mathbf{E} + \frac{1}{c} \mathbf{v}_n \times \mathbf{B} \right) + \mathbf{F}_{\text{st}}. \quad (3.27)$$

Hier können zusätzlich die Stoßkräfte \mathbf{F}_{st} , die aus dem Stoßterm resultieren, berücksichtigt werden [144]. Durch diesen Ansatz wird einem Satz von Teilchen ein identischer Ort und Impuls zugeordnet und somit als ein Teilchen betrachtet. Dadurch betrachtet man keine Teilchen in einem Phasenraumvolumen, sondern sogenannte Superteilchen, die stellvertretend für einen Satz von Teilchen stehen. Jedem dieser Superteilchen wird ein verschiebbarer Phasenraumpunkt zugeordnet, womit die Beschreibung eines verformbaren Phasenraumvolumens aufgegeben wird. Damit dieser Ansatz gemacht werden kann, müssen die äußeren Kräfte innerhalb der Superteilchen konstant in Ort und Impuls sein. Das ist gewährleistet, wenn die Superteilchen ausreichend klein im Gegensatz zu den Gradienten der Felder sind. Damit werden auftretende mikroskopische Effekte, die unterhalb der Auflösung der Superteilchen liegen vernachlässigt. Um diese Vernachlässigung

zu umgehen, werden zur Zeit microscopic particle-in-cell (MicPIC) Simulationen entwickelt [145].

Durch diese Reduzierung der kinetischen Gleichung auf die Newtonschen Gleichungen wurde das sechsdimensionale Problem des gesamten Phasenraums auf ein dreidimensionales des Ortsraums beschränkt. Das Problem besteht nicht mehr in der Lösung der kinetischen Gleichungen, sondern in der Lösung der Newtonschen Gleichungen für einen Satz von Superteilchen, die stellvertretend für eine große Anzahl von Teilchen ($10^3 - 10^6$) mit gleichem Phasenraum stehen. Wenn man die Auflösung dieser Superteilchen ausreichend erhöht, um einzelne Teilchen zu beschreiben, hätte man wieder das volle Problem: die Lösung der Trajektorien der gesamten 10^{23} cm^{-3} Teilchen. Aufgrund der Behandlung solcher Superteilchen gibt es in dieser Methode einen Nachteil. Da die Superteilchen ein definiertes, ausgedehntes Phasenraumvolumen besitzen, müssen die wirkenden Kräfte innerhalb dieses Volumens konstant sein, um das durch die Methode der Newtongleichungen (3.27) nicht beschreibbare Verformen der Phasenräume zu verhindern. Insbesondere bei der Aufheizung des Plasmas mit Feldern mit hohen Gradienten (hohe Intensitäten, hohe Frequenzen) kann es deshalb zu einem Verlust an Energie kommen. Diese numerische Diffusion führt zu einer nicht exakten Energieerhaltung, ist allerdings für die zu betrachtenden Probleme ausreichend.

Damit können die Teilchen in dieser Näherung als frei bewegliche Superteilchen aufgefasst werden, wodurch die Gleichungen (3.27) gitterfrei gelöst werden können. Da es allerdings nicht möglich ist, die Maxwellgleichungen ohne Gitter zu lösen, werden diese Superteilchen für die Berechnung der Felder auf ein Gitter aufgeteilt. Auf den Gitterpunkten, denen die Masse und Ladung der Superteilchen zugeordnet wird, werden die Maxwellgleichungen gelöst. Hier werden nur die Maxwellgleichungen (3.21) und (3.22), die die zeitliche Entwicklung der Felder beschreiben, und die Kontinuitätsgleichung $\partial\rho/\partial t + \nabla \cdot \mathbf{j} = 0$, welche aus den Gleichungen (3.22) und (3.24) folgt, gelöst. Die Gleichung (3.24) wird über die Kontinuitätsgleichung mit gelöst. Die Gleichung (3.23) muss bereits mit den Anfangsbedingungen des Systems und bei nicht existierenden magnetischen Ladungen damit auch für spätere Zeiten erfüllt sein. Anschließend können die auf den Gitterknoten berechneten Felder wiederum auf die Teilchenpositionen interpoliert werden. Somit kann das Problem der Vlasovgleichungen numerisch gelöst werden. Diese Art von numerischen Lösungsverfahren nennt sich P³M: particle-particle particle-mesh Code [146], dessen Flussdiagramm in Abbildung 3.2 zu sehen ist. Man spricht hier auch von einem **Particle-In-Cell (PIC) Code** [39, 75, 144, 146, 147], der breite Anwendung in der Physik findet [40, 43, 44, 77, 87, 145, 148–153].

3.1.4 Mikroskopische Beschreibung von Ionisationsprozessen

Für die Beobachtung der Entstehung eines Plasma während der Lasereinstrahlung muss das Material zuerst ionisiert werden, wodurch Ionisationsprozesse in den Simulationen berücksichtigt werden müssen. Dazu wird die Beschreibung der Laser-Materie-Wechselwirkung anhand der Vlasovgleichungen (3.19) durch die Beschreibung von Ionisationsprozessen erweitert. Da die Lösung der Vlasovgleichungen numerisch sehr aufwendig ist, werden die Berechnungen dieser Arbeit mit Hilfe der PIC-Methode nur für einige 100 Femtosekunden nach der Lasereinstrahlung durchgeführt. Dabei wird diese Zeit gewählt, um ein lokales Gleichgewicht innerhalb der einzelnen Simulationszellen zu gewährleisten und ist erfüllt, wenn die Energieverteilung der Elektronen in der Simulationsbox der Maxwell-Boltzmann-Verteilung genügt. Aufgrund ihrer höheren Masse resultiert daraus auch das

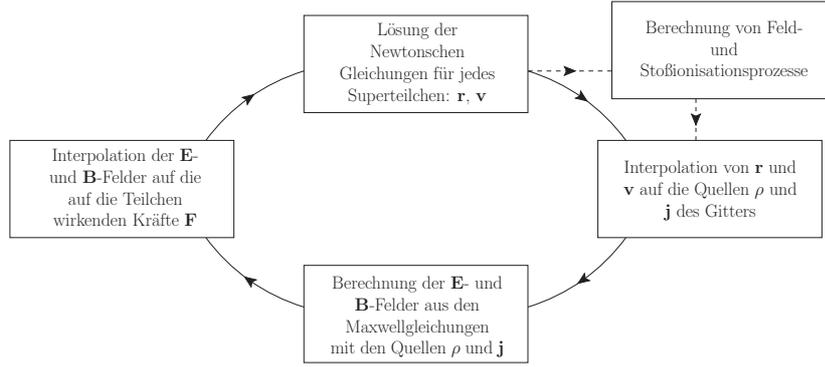


Abbildung 3.2: Darstellung des Flussdiagramms von PIC-Programmen.

Gleichgewicht der Ionen. Für die PIC-Simulationen sind damit nur Ionisationseffekte wichtig, die während und kurz nach der Lasereinstrahlung auftreten, welche durch die Feld- und Stoßionisation beschrieben werden. Rekombinationen sind in diesem kurzen Zeitraum nicht zu erwarten.

Feldionisation

Während der Lasereinstrahlung dominiert die Feldionisation, daher wird dieser Prozess in den PIC-Simulationen berücksichtigt und hier vorgestellt. Der Laser dringt aufgrund des Fehlens von freien Elektronen in das Material ein und erzeugt freie Elektronen durch Feldionisation. Das kann einerseits aufgrund von Multi-Photonen Wechselwirkungen geschehen, indem mehrere Photonen geringerer Energie als die Ionisationsenergie des gebundenen Elektrons mit dem Atom wechselwirken und dadurch dieses Elektron herausschlagen. Andererseits kann auch Tunnelionisation auftreten, indem aufgrund des elektrischen Feldes das Atompotential derart modifiziert wird, dass die Potentialbarriere absinkt. Dieses Absinken führt dazu, dass keine Potentialbarriere für die gebundenen Elektronen vorhanden ist oder diese ausreichend klein ist, um hindurchzutunneln.

Wenn ausreichend Ionisationsprozesse vollzogen wurden, kann das erzeugte Plasma überkritisch werden. In solch einem Plasma kann der Laser nur bis zur in Abschnitt 1.3 eingeführten Skintiefe [34] eindringen und wird dann reflektiert. Bei sehr hohen Intensitäten $> 10^{19}$ W/cm² können nicht-lineare Effekte, wie Hole-Boring und Selbstfokussierung, auftreten, die es dem Laser erlauben, weiter in das Plasma einzudringen [34, 89]. Ansonsten können nur Materieströme die Energie des Lasers ins Innere des Plasmas transportieren.

In dieser Arbeit wird die Keldyshtheorie [154] für die Beschreibung der Feldionisation genutzt. Diese Theorie behandelt die Feldionisation durch das Bändermodell. Demnach kann man den Feldionisationsprozess durch den Keldyshparameter [155]

$$\gamma = \frac{\omega}{\omega_t} = \frac{\omega \sqrt{2m_e I_p}}{e E_0} = \frac{\omega}{e} \sqrt{\frac{\varepsilon_0 c m_e I_p}{I}} \quad (3.28)$$

klassifizieren, mit der Tunnelfrequenz ω_t , mit der die Elektronen durch eine Barriere tunneln, der elektrischen Feldamplitude E_0 und dem Ionisationspotential I_p . Es tritt für den Fall $\gamma \gg 1$ Multiphotonenionisation und für den Fall $\gamma \ll 1$ Tunnelionisation

ein. In dieser Arbeit werden die Vlasovgleichungen stets für Laser mit Wellenlängen von $\lambda \approx 800$ Nanometer und Intensitäten von $I > 10^{15}$ W/cm² gelöst. Unter diesen Bedingungen gilt für Wasserstoff, Helium und den ersten vier Ionisationsstufen von Kohlenstoff $\gamma \ll 1$. Daher wird im Folgenden die Feldionisation ausschließlich als Tunnelionisation betrachtet.

Aus dieser Theorie leitet sich die Ionisationsrate für linear polarisiertes Licht für den Fall der Tunnelionisation nach Ammosov, Delone, Krainov (ADK) ab [56, 76, 155–157],

$$\alpha_{n\ell m}^{\text{ADK}} = \frac{\omega_s}{2} \frac{2^{2n^*}}{n^* \Gamma(n^* + \ell^* + 1) \Gamma(n^* - \ell^*)} \frac{(2\ell + 1)(\ell + |m|)!}{2^{|m|} |m|! (\ell - |m|)!} \times \exp \left\{ -\frac{4\omega_s}{3\omega_t} \right\} \left(\frac{4\omega_s}{\omega_t} \right)^{2n^* - |m| - 1}, \quad (3.29)$$

mit der Nebenquantenzahl ℓ und der magnetischen Quantenzahl m , den Verhältnissen $\omega_s = I_p^{\text{eV}}/\hbar$, $\omega_t = eE_0/\sqrt{2m_e I_p^{\text{eV}}}$ und $n^* = \sqrt{I_{\text{H}}^{\text{eV}}/I_p}$, der Wasserstoffionisationsenergie des Grundzustandes I_{H}^{eV} in Elektronenvolt, dem Ionisationspotential I_p^{eV} in Elektronenvolt und der effektiven Quantenzahl ℓ^* , mit $\ell^* = 0$ wenn $\ell = 0$ und $\ell^* = n^* - 1$ sonst. Eine allgemeingültigere Form, von der die Gleichung (3.29) abgeleitet wurde, kann in [155] nachgelesen werden. Damit kann die Wahrscheinlichkeit für den Ionisationsprozess innerhalb eines Zeitschrittes Δt mit $w = \alpha \Delta t$ angegeben werden. Das kann mittels eines Monte Carlo Verfahrens mit gleichverteilter Zufallswahrscheinlichkeit zwischen 0 und 1 für die Tunnelionisation in PIC-Simulationen implementiert werden. In diesem Verfahren werden die Ionisationsraten (3.29) mit den Zufallswahrscheinlichkeiten verglichen, wobei bei kleinerer Zufallszahl der Ionisationsprozess eintritt.

Um die Energieerhaltung zu gewährleisten, muss die Ionisierungsenergie von der Feldenergie abgezogen werden. Dazu wird ein Hilfsstrom \mathbf{j}_H in den Maxwellgleichungen eingeführt, der diese Energieerhaltung berücksichtigt [76],

$$\mathbf{E}_0 \cdot \mathbf{j}_H = \alpha_{n\ell m}^{\text{ADK}} I_p N. \quad (3.30)$$

Dabei stellt N die Anzahl der Superteilchen der PIC Simulation dar, die durch Feldionisation im Zeitschritt Δt ionisieren.

Stoßionisation

Einen weiteren wichtigen Prozess stellt die Stoßionisation dar, der die Ionisation durch Stöße der aufgeheizten freien Elektronen mit den Ionen berücksichtigt. Dieser Effekt wurde innerhalb dieser Arbeit in den vorhandenen PIC-Code Virtual Laser Plasma Lab 3-Dimensional (VLPL3D) [39] implementiert.

Stoßionisationen werden interessant, wenn das Material bereits ionisiert wurde und die kinetische Energie der Elektronen oberhalb der Ionisationsenergie liegt. Deshalb können Stoßionisationen auch nach Abschalten des Lasers auftreten. Dabei dringen beschleunigte Elektronen in das Innere des Materials ein und können dort gebundene Elektronen durch Elektron-Ion-Stöße aus den Ionen herauslösen. Nach diesem Prozess existieren zwei Elektronen die wiederum Stoßionisationen vollführen können.

Um diesen Prozess zu beschreiben muss die Elektronen-Ionen-Stoßfrequenz

$$\nu_{ei} = n_e |\mathbf{v}_e - \mathbf{v}_i| \sigma \quad (3.31)$$

bekannt sein [75,147], mit der Relativgeschwindigkeit der Stoßpartner $|\mathbf{v}_e - \mathbf{v}_i|$, der Dichte der Elektronen n_e und dem Stoßquerschnitt der Stoßpartner [58,59]

$$\sigma_j = a\xi_j \frac{\ln \frac{E_{\text{kin},e}}{I_{p,j}}}{E_{\text{kin},e} I_{p,j}}, \quad \text{mit } E_{\text{kin},e} \geq I_{p,j}. \quad (3.32)$$

Dabei ist ξ_j die Anzahl der Elektronen der betrachteten j -ten Unterschale des gestoßenen Ions, a eine experimentell zu ermittelnde Konstante von $a = 2.6 - 4.5 \times 10^{-14} \text{ cm}^2 \text{ eV}^2$ und $E_{\text{kin},e} = p_e^2/(2m_e)$ die kinetische Energie des stoßenden Elektrons. Diese Formel des Streuquerschnittes besitzt ein Maximum bei $\exp\{1 + \ln I_{p,j}\}$. Das heißt, dass für zu langsame und zu schnelle Elektronen weniger Stoßionisationen zu beobachten sind. Ein anderer Zugang zu Berechnung der Stoßionisationen ist die Berechnung der goldenen Regel von Fermi, der in der Halbleiterphysik angewendet und für verschiedene Materialien untersucht wurde [158–162].

Der Ionisationsprozess kann wie schon bei der Feldionisation durch ein Monte Carlo Verfahren beschrieben werden. Demnach tritt eine Stoßionisation ein, wenn die Wahrscheinlichkeit $w = 1 - \exp\{-\Delta t \nu_{ei}\}$ größer als eine gleichverteilte Zufallszahl zwischen 0 und 1 ist.

Damit ist der Ionisationsprozess durch Stöße bekannt. Um die Energien und Impulse der beteiligten Stoßpartner nach dem Stoß mit Hilfe der Impuls- und Energieerhaltung zu ermitteln, müssen analytische Ausdrücke [163,164] gelöst oder rechenaufwendige Simulation [165] durchgeführt werden. Da das innerhalb von PIC Simulationen zu zeitaufwendig wäre, wird der Energie- und Impulsübertrag auf die Ionen vernachlässigt, die ionisierten Elektronen werden als freie Elektronen ohne Impuls angenommen, und die einfallenden Elektronen ändern ihre Richtung durch den Stoß nicht, wobei sie nach dem Stoß den Impulsbetrag

$$p'_e = \sqrt{\frac{(1 + \sqrt{1 + p_e^2})(E_e - I_p)}{m_e}} \quad (3.33)$$

besitzen. Damit ist man in der Lage, Stoßionisationen in PIC-Simulationen mit Hilfe eines einfachen Modells zu berücksichtigen.

3.2 Vom mikroskopischen Bild zum hydrodynamischen Bild

Da die Simulation eines laser-induzierten Plasmas im mikroskopischen Bild, das im Abschnitt 3.1.3 vorgestellt wurde, für heutige Rechenkapazitäten sehr wendig ist, ist es vorteilhaft, laser-induzierte Plasmen für größere Zeiten von bis zu einigen 10 Nanosekunden mit weniger aufwendigen Methoden zu beschreiben. Das kann durch die Methode der Hydrodynamik geschehen, die eine makroskopische Beschreibung eines laser-induzierten Plasmas zulässt. Allerdings werden in dieser Beschreibung wichtige Prozesse der Licht-Materie-Wechselwirkung bei $I > 10^{17} \text{ W/cm}^2$, wie nicht-lineare und relativistische Effekte, nicht berücksichtigt. Diese makroskopische Beschreibung soll hier vorgestellt werden.

3.2.1 Hydrodynamische Gleichungen

In diesem Unterabschnitt werden die hydrodynamischen Gleichungen für die Beschreibung der Evolution makroskopischer Systeme aus der Boltzmann-Gleichung hergeleitet. Wie nachfolgend gezeigt wird, beschreiben diese Gleichungen die zeitliche Entwicklung

der Materialdichte ρ , der hydrodynamischen Geschwindigkeit \mathbf{u} und der Energie je Einheitsmasse E . Die Wahl dieser Größen als hydrodynamische Größen wird sich in den folgenden Überlegungen erschließen.

Um den Übergang von der Boltzmann-Gleichung für die mikroskopische Beschreibung (3.14) zu der makroskopischen Beschreibung des Systems zu vollziehen, muss angenommen werden, dass sich die makroskopischen Eigenschaften, wie Dichte und Temperatur, hinreichend langsam mit dem Ort ändern. Zudem müssen die Abstände, innerhalb derer sich diese Eigenschaften ändern, groß im Vergleich zu der freien Weglänge der Moleküle sein. Das ist erforderlich, um im Folgenden die makroskopischen Eigenschaften innerhalb eines Volumenelements durch die Momente der Ein-Teilchenverteilungsfunktion (3.8) einzuführen. Dafür müssen zum einen im betrachteten Volumenelement genügend viele Teilchen vorhanden sein. Zum anderen kann man aus den obigen Annahmen der kleinen Dichte- und Temperaturänderungen mit dem Ort und der geringen freien Teilchenweglänge schließen, dass sich innerhalb der Volumenelemente ein thermisches Gleichgewicht einstellt, wobei sich das gesamte System im Nicht-Gleichgewicht befinden kann. Man spricht von einem lokalen Gleichgewicht, wodurch Verteilungsfunktionen genutzt werden können, die das Gleichgewicht beschreiben. Das hat zur Folge, dass dissipative Prozesse im System, wie innere Reibung und Wärmetransport, vernachlässigt werden, wodurch die Entropie im gesamten System erhalten bleibt. Um dennoch solche dissipativen Prozesse mikroskopisch erklären zu können, genügt es, das Problem für Systeme mit kleinen Inhomogenitäten zu lösen. Für ein solches System muss eine Verteilungsfunktion für das Nicht-Gleichgewicht herangezogen werden, wobei es ausreicht, eine Addition aus der Verteilungsfunktion im Gleichgewicht und einer Verteilungsfunktion mit kleiner Abweichung vom Gleichgewicht zu nutzen. Dann wird der Stoßterm einen dissipativen Beitrag zu den makroskopischen Bewegungsgleichungen liefern. Hierbei sei auf [95, 166] verwiesen.

Die oben genannten makroskopischen, hydrodynamischen Größen sind aus der Ein-Teilchenverteilungsfunktion nach Gleichung (3.8) berechenbar, mit der Dichte als nulles Moment

$$n(\mathbf{r}, t) = \int \frac{d\mathbf{p}}{h^3} f_1(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t), \quad (3.34)$$

der hydrodynamischen Geschwindigkeit als erstes Moment

$$\mathbf{u}(\mathbf{r}, t) = \langle \mathbf{v} \rangle = \frac{1}{n(\mathbf{r}, t)} \int \frac{d\mathbf{p}}{h^3} \frac{\mathbf{p}}{m} f_1(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) \quad (3.35)$$

und der Energie je Einheitsmasse als zweites Moment

$$E(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{2} \langle v^2 \rangle = \frac{1}{2} \frac{1}{n(\mathbf{r}, t)} \int \frac{d\mathbf{p}}{h^3} \frac{p^2}{m^2} f_1(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t), \quad (3.36)$$

mit der orts-, impuls- und zeitunabhängigen Masse m der Teilchen.

An dieser Stelle sollen die mikroskopischen Impulse, die Gewichte des ersten Moments (3.35), genauer betrachtet werden. Diese Impulse setzen sich aus der mikroskopischen, konvektiven Geschwindigkeit \mathbf{v} (3.35) und einer relativ zur konvektiven Geschwindigkeit stochastischen Geschwindigkeit \mathbf{U} zusammen, welche die thermischen Bewegungen der Teilchen darstellt. Damit kann der mikroskopische Impuls wie folgt geschrieben werden

$$\mathbf{p} = m(\mathbf{v} + \mathbf{U}), \quad (3.37)$$

wobei $\langle \mathbf{U} \rangle = 0$ gilt, da nach (3.35) $\langle \mathbf{p} \rangle = m \langle \mathbf{v} \rangle$ gelten muss.

Um die eingeführten makroskopischen Größen in die Boltzmann-Gleichung (3.14) einzubinden, werden die Gewichte jeweils von links an die Boltzmann-Gleichung (3.14) multipliziert und über alle Impulse \mathbf{p} integriert

$$\int d\mathbf{p} G_i(\mathbf{p}) \left(\frac{\partial}{\partial t} f_1 + \mathbf{v} \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} f_1 + \mathbf{F}^{\text{ext}} \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}} f_1 \right) = \int d\mathbf{p} G_i(\mathbf{p}) \text{St} f. \quad (3.38)$$

Dabei wurden die Gewichte der benötigten Momente zur Vereinfachung in die folgende Form gebracht

$$G_i(\mathbf{p}) = \begin{cases} 1 & , \text{für } i = 0 \\ \mathbf{p}/m & , \text{für } i = 1 \\ p^2/m^2 & , \text{für } i = 2 \end{cases}. \quad (3.39)$$

Die rechte Seite der Gleichung (3.38), der Stoßterm, verschwindet unter diesen Operationen, wie im Folgenden gezeigt wird.

Betrachtet man die rechte Seite der Gleichung (3.38) und setzt Gleichung (3.16) ein, erhält man mit der in Gleichung (3.17) ausgenutzten Symmetrie der Stoßwahrscheinlichkeit gegenüber Zeitspiegelung ($w = w'$)

$$\int d\mathbf{p} d\mathbf{p}' d\tilde{\mathbf{p}} d\tilde{\mathbf{p}}' (G_i(\mathbf{p}) - G_i(\tilde{\mathbf{p}})) w' \tilde{f} \tilde{f}'. \quad (3.40)$$

Da hier über alle Phasenräume integriert wird, ändert sich dieser Ausdruck unter Vertauschung dieser Variablen nicht und man kann $f = \tilde{f}$ und $f' = \tilde{f}'$ verwenden. Das wird weiter ausgenutzt, um den Ausdruck in je einen Beitrag vor und nach dem Stoß aufzuspalten. Aufgrund der gleichen Stoßwahrscheinlichkeit für die beiden Stoßpartner kann das Integral (3.40) modifiziert werden,

$$\frac{1}{2} \int d\mathbf{p} d\mathbf{p}' d\tilde{\mathbf{p}} d\tilde{\mathbf{p}}' (G_i(\mathbf{p}) + G_i(\mathbf{p}') - G_i(\tilde{\mathbf{p}}) - G_i(\tilde{\mathbf{p}}')) w' \tilde{f} \tilde{f}'. \quad (3.41)$$

Nach Einsetzen der Gewichte G_0 , G_1 und G_2 verschwindet aufgrund der Erhaltungssätze für Masse (beziehungsweise Dichte), Impuls und Energie der Stoßterm in Gleichung (3.38). Zudem kann dieser Term auf das makroskopische System keinen Einfluss haben, da die Stöße keinen Einfluss auf die Gesamtteilchenzahl, -impuls oder -energie haben. Damit beschränkt sich die Beschreibung der Evolution makroskopischer Systeme auf die Evolution stoßfreier Plasmen. Das wird im Folgenden auf die Beschreibung von Plasmen mit Stößen erweitert.

Die Dichte-Transportgleichung

Um die Dichte-Transportgleichung zu erhalten, wird das nullte Gewicht G_0 in Gleichung (3.38) eingesetzt

$$\int d\mathbf{p} \left(\frac{\partial}{\partial t} f_1 + \mathbf{v} \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} f_1 + \mathbf{F}^{\text{ext}} \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}} f_1 \right) = 0, \quad (3.42)$$

aus welcher durch Umschreiben der Differentiationen die Gleichung

$$\int d\mathbf{p} \frac{\partial}{\partial t} f_1 + \int d\mathbf{p} \left[\frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} (\mathbf{v} f_1) - \left(\frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \mathbf{v} \right) f_1 \right] + \int d\mathbf{p} \left[- \left(\frac{\partial}{\partial \mathbf{p}} \mathbf{F}^{\text{ext}} \right) f_1 + \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}} (\mathbf{F}^{\text{ext}} f_1) \right] = 0 \quad (3.43)$$

erhalten wird. Man betrachte die j -te Differentiation des letzten Terms dieser Gleichung. Durch Abintegrieren erhält man hier als Beispiel für die erste Komponente

$$\frac{\partial}{\partial p_i} \int d\mathbf{p} F_i^{\text{ext}} f_1 = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} dp_j dp_k (F_i^{\text{ext}} f_1) \Big|_{-\infty}^{\infty} = 0, \quad (3.44)$$

was aufgrund der Normierung der Ein-Teilchenverteilungsfunktion ($f_1(p_j \rightarrow \pm\infty) \rightarrow 0$) verschwindet. Das gilt ebenfalls für die restlichen Komponenten. Unter der Annahme von ortsunabhängigen Impulsen $\partial \mathbf{v} / \partial \mathbf{r} = 0$ und geschwindigkeitsunabhängigen Kräften $\partial \mathbf{F}^{\text{ext}} / \partial \mathbf{p} = 0$, der Vertauschung von Integration und Differentiation und nach Einsetzen des nullten Moments (3.34) vereinfacht sich Gleichung (3.43) zu

$$\frac{\partial}{\partial t} n(\mathbf{r}, t) + \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \mathbf{u}(\mathbf{r}, t) n(\mathbf{r}, t) = 0. \quad (3.45)$$

Diese Annahmen sind gerechtfertigt durch die vorher gesetzte Bedingung, dass sich im betrachteten Volumenelement die makroskopischen Eigenschaften nur langsam ändern und somit ein lokales Gleichgewicht herrscht. Durch Einführen der Massendichte $\rho(\mathbf{r}, t) = mn(\mathbf{r}, t)$ und der Teilchenmasse m des betrachteten Elements erhält man die Dichte-Transportgleichung

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0, \quad (3.46)$$

wobei zur Verdeutlichung die Argumente weggelassen wurden. Diese Gleichung stellt eine Kontinuitätsgleichung ohne Quellen für die Massendichte dar.

Die Impuls-Transportgleichung

Den Darstellungen der vorherigen Herleitung der Dichte-Transportgleichung folgend, wird das erste Gewicht $G_1 = \mathbf{p}/m$ in Gleichung (3.38) eingesetzt

$$\int d\mathbf{p} \frac{\mathbf{p}}{m} \left(\frac{\partial}{\partial t} f_1 + \mathbf{v} \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} f_1 + \mathbf{F}^{\text{ext}} \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}} f_1 \right) = 0. \quad (3.47)$$

Es werden erneut die Terme in Komponentenschreibweise behandelt. Der erste Term der Gleichung (3.47) ergibt

$$\int d\mathbf{p} \frac{p_i}{m} \frac{\partial}{\partial t} f_1 = \frac{\partial}{\partial t} \int d\mathbf{p} \frac{p_i}{m} f_1 - \int d\mathbf{p} \left(\frac{\partial}{\partial t} \frac{p_i}{m} \right) f_1 = \frac{\partial}{\partial t} \int d\mathbf{p} \frac{p_i}{m} f_1. \quad (3.48)$$

Hierbei wurde angenommen, dass das betrachtete Zeitintervall der Hydrodynamik klein gegenüber den Stößen im Plasma ist. Diese können in dem hier konstruierten Modell der Boltzmann-Gleichung eine Impulsänderung der mikroskopischen Teilchen bewirken. Da allerdings im folgenden Übergang auf die makroskopische Beschreibung von Gasen und Flüssigkeiten der Stoßterm keinen Einfluss hat, können sich die mikroskopischen Impulse nicht mit der Zeit ändern ($\partial p_i / \partial t = 0$).

Der zweite Term der Gleichung (3.47) kann umformuliert werden in

$$\int d\mathbf{p} \frac{p_i}{m} v_j \frac{\partial}{\partial r_j} f_1 = \frac{\partial}{\partial r_j} \int d\mathbf{p} \frac{p_i}{m} v_j f_1 - \int d\mathbf{p} \left(\frac{\partial}{\partial r_j} \frac{p_i}{m} v_j \right) f_1 = \frac{\partial}{\partial r_j} \int d\mathbf{p} \frac{p_i}{m} v_j f_1, \quad (3.49)$$

da die Impulse p_i beziehungsweise Geschwindigkeiten v_j nach obiger Annahme unabhängig vom Ort sind. Das folgt aus dem lokalen thermischen Gleichgewicht, bei dem nur

kleine Änderungen der makroskopischen Eigenschaften über den Abstand zu beobachten sind.

Der übriggebliebene Term der Gleichung (3.47) kann unter Benutzung der zu Gleichung (3.44) analogen Betrachtungen umgeschrieben werden in

$$\begin{aligned} \int d\mathbf{p} \frac{p_i}{m} F_j^{\text{ext}} \frac{\partial}{\partial p_j} f_1 &= \frac{\partial}{\partial p_j} \int d\mathbf{p} \frac{p_i}{m} F_j^{\text{ext}} f_1 - \int d\mathbf{p} \left(\frac{\partial}{\partial p_j} \frac{p_i}{m} F_j^{\text{ext}} \right) f_1 \\ &= - \int d\mathbf{p} \left(\frac{\partial}{\partial p_j} \frac{p_i}{m} F_j^{\text{ext}} \right) f_1. \end{aligned} \quad (3.50)$$

Nach Einsetzen der Gleichungen (3.35), (3.37), (3.48), (3.49) und (3.50) in Gleichung (3.47) wird

$$\begin{aligned} 0 &= \frac{\partial}{\partial t} n (u_i + \langle U_i \rangle) + \frac{\partial}{\partial r_j} n (u_i u_j + u_i \langle U_j \rangle + u_j \langle U_i \rangle + \langle U_i U_j \rangle) \\ &\quad - n \frac{F_j^{\text{ext}}}{m} \left(\left\langle \frac{\partial (m u_i)}{\partial p_j} \right\rangle + \left\langle \frac{\partial (m U_i)}{\partial p_j} \right\rangle \right) \\ &= \frac{\partial n u_i}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial r_j} n (u_i u_j + \langle U_i U_j \rangle) - n \frac{F_j^{\text{ext}}}{m} \delta_{ij} \end{aligned} \quad (3.51)$$

erhalten, das nach Multiplikation mit der Masse m umgeschrieben werden kann in

$$0 = \frac{\partial m n u_i}{\partial t} + (\nabla \cdot \mathbf{u}) m n u_i + \frac{\partial}{\partial r_j} m n \langle U_i U_j \rangle - n F_i^{\text{ext}}. \quad (3.52)$$

Das Moment der stochastischen Geschwindigkeit $\langle U_i U_j \rangle$ ist als Spannungstensor P_{ij} zu interpretieren [139, 143, 167], der den Systemdruck p charakterisiert

$$n m \langle U_i U_j \rangle = P_{ij} = p \delta_{ij} - \sigma_{ij} (1 - \delta_{ij}). \quad (3.53)$$

Hier ist diesem Spannungstensor auch ein viskoser Druck durch den viskosen Spannungstensor σ zugeordnet worden. Dieser ist in dem betrachteten System nicht gegeben, da durch die obige Annahme ein lokales Gleichgewicht und damit eine ideale Flüssigkeit gegeben ist, in der dissipative Prozesse nicht auftreten können. Empirisch wird dieser viskose Spannungstensor hinzugefügt, um eine reale Flüssigkeit zu beschreiben. Dieser Term beschreibt zusätzlich zu dem reversiblen Impulsübertrag des Massentransports im System eine irreversible Impulsübertragung bei einem Geschwindigkeitsgefälle.

Da der viskose Spannungstensor den Impulsübertrag bei einem Geschwindigkeitsgefälle beschreibt, muss dieser Tensor von mindestens der ersten Ableitung der Geschwindigkeit abhängen, damit für $\mathbf{u} = \text{konst.}$ der viskose Spannungstensor verschwindet. Weiterhin muss der viskose Spannungstensor bei einer gleichförmigen Rotation des Systems ebenfalls verschwinden, da dann erneut keine innere Reibung auftritt. Um das zu erreichen muss die Ableitung der Geschwindigkeit nach der Zeit verschwinden. Dabei ist die Geschwindigkeit bei solch einer Rotation das Vektorprodukt $\mathbf{\Omega} \times \mathbf{r}$ mit der Winkelgeschwindigkeit $\mathbf{\Omega}$. Das kann man durch die Linearkombination $(\partial v_i / \partial x_k + \partial v_k / \partial x_i)$ erreichen. Unter diesen Bedingungen kann in allgemeiner Form der Tensor zweiter Stufe [139, 167]

$$\sigma_{ij} = \eta \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) + \lambda \delta_{ij} \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \quad (3.54)$$

aufgestellt werden, wobei der letzte Term der rechten Seite die Viskosität aufgrund von Kompressibilitäten darstellt. Dabei ist der zugehörige Koeffizient λ der Kompressibilitätskoeffizient der Viskosität und η der Koeffizient der Scherviskosität. Hier wurde angenommen, dass diese Koeffizienten geschwindigkeitsunabhängig (isotropes System) sind. Um die Navier-Stokes-Gleichung zu erhalten, wird der Koeffizient der Volumenviskosität, der über die Relation $\zeta = \lambda + 2/3 \eta$ definiert ist, eingeführt

$$\sigma_{ij} = \eta \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \delta_{ij} \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \right) + \zeta \delta_{ij} \frac{\partial u_k}{\partial x_k}. \quad (3.55)$$

Die Koeffizienten sind hier auf diese Weise angeordnet, damit bei Spurbildung der in Klammern stehende Term verschwindet. Diese Eigenschaft beschreibt, dass bei Verschwinden der Volumenviskosität $\zeta = 0$ und gleichmäßiger Ausdehnung des Systems die Viskosität verschwindet. Diese Gleichung gilt nur für Newtonsche Flüssigkeiten, die durch kleine Geschwindigkeitsgradienten ausgezeichnet sind [167].

Damit erhält man aus Gleichung (3.52) unter erneuter Vereinfachung durch Einführung der Massendichte $\rho = nm$ die Navier-Stokes-Gleichung in Komponentenschreibweise

$$\frac{\partial \rho u_i}{\partial t} + (\nabla \cdot \mathbf{u}) \rho u_i + \frac{\partial}{\partial r_j} p \delta_{ij} - \eta \frac{\partial^2 u_i}{\partial x_j^2} - \left(\frac{\eta}{3} + \zeta \right) \frac{\partial^2 u_k}{\partial x_i \partial x_k} - n F_i^{\text{ext}} = 0. \quad (3.56)$$

Durch Zurückführen der Gleichung (3.56) auf Vektorschreibweise erhält man die Navier-Stokes-Gleichung für ein mehrdimensionales Problem,

$$\frac{\partial \rho \mathbf{u}}{\partial t} + (\nabla \cdot \mathbf{u}) \rho \mathbf{u} = -\nabla p + \eta \nabla^2 \mathbf{u} + \left(\frac{\eta}{3} + \zeta \right) \nabla (\nabla \cdot \mathbf{u}) + n \mathbf{F}^{\text{ext}}. \quad (3.57)$$

Diese Gleichung hat die Form einer Kontinuitätsgleichung mit Quellen für die Impulsdichte.

In späteren Betrachtungen dieser Arbeit wird die Viskosität von Plasmen vernachlässigt.

Die Energie-Transportgleichung

Um die Transportgleichung für die Energie herzuleiten, wird die mikroskopische Energie $p^2/(2m^2)$ in Gleichung (3.38) für das Gewicht G_i eingesetzt

$$\int d\mathbf{p} \frac{p^2}{2m^2} \left(\frac{\partial}{\partial t} f_1 + \mathbf{v} \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} f_1 + \mathbf{F}^{\text{ext}} \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}} f_1 \right) = 0. \quad (3.58)$$

Hier hängen die Impulse wiederum nicht von Zeit oder Ort ab und es wird erneut eine geschwindigkeitsunabhängige, externe Kraft angenommen. Somit vereinfacht sich Gleichung (3.58) mit analogen Betrachtungen wie bei der Herleitung der Impuls-Transportgleichung und Einsetzen der Gleichung (3.37) zu

$$\frac{\partial}{\partial t} \frac{n}{2} \langle v^2 \rangle + \frac{\partial}{\partial x_j} \frac{n}{2} \langle v_j v^2 \rangle = \frac{n}{m} \langle \mathbf{v} \cdot \mathbf{F}^{\text{ext}} \rangle. \quad (3.59)$$

Die Erwartungswerte ergeben

$$\langle v^2 \rangle \stackrel{(3.36)}{=} 2E = u^2 + \langle U^2 \rangle + 2u \underbrace{\langle U \rangle}_0 = u^2 + \frac{2e}{nm} \quad (3.60)$$

und

$$\begin{aligned} \langle v_j v^2 \rangle &= u_j \langle U^2 \rangle + u_j u^2 + 2u_j u_i \langle U_i \rangle + \langle U_j U^2 \rangle + 2\langle U_j U_i \rangle u_i + \langle U_j \rangle u^2 \\ &\stackrel{(3.36),(3.53)}{=} u_j 2E + 0 + \langle U_j U^2 \rangle + 2u_i \frac{P_{ij}}{nm} + 0, \end{aligned} \quad (3.61)$$

mit der spezifischen inneren Teilchenenergiedichte $e = nm\langle U^2 \rangle/2$, die durch die stochastische Geschwindigkeit \mathbf{U} mit der Temperatur T verknüpft ist, dem durch Gleichung (3.53) gegebenen Druck P_{ij} , der hydrodynamischen Energiedichte E und der inneren Energieflussdichte (auch Wärmeflussdichte genannt) q_j . Diese Wärmeflussdichte

$$q_j = \frac{mn}{2} \langle U_j U^2 \rangle \quad (3.62)$$

beschreibt die spezifische innere Energiedichte e , die mit dem Fluss U_j transportiert wird. Dabei wurde die Konvention $U^2 = U^i U_i$ verwendet. Aus Gleichung (3.60) ist ersichtlich, dass sich die hydrodynamische Energiedichte pro Einheitsmasse E aus der kinetischen Energiedichte und der spezifischen inneren Teilchenenergiedichte zusammensetzt.

Hier soll noch einmal erwähnt werden, dass durch die Näherung des lokalen Gleichgewichts eine ideale Flüssigkeit ohne dissipative Prozesse beschrieben wird. Das heißt, dass die irreversiblen Prozesse der Viskosität, enthalten im Druck P_{ij} und im Wärmetransport q_j , in dieser mikroskopischen Beschreibung nicht vorhanden sind und nur empirisch in die makroskopischen Gleichungen mit aufgenommen wurden. Um auch eine mikroskopische Beschreibung zu erhalten, muss ein leichtes Nicht-Gleichgewicht angenommen werden.

Der irreversible Prozess des Wärmetransports beschreibt den Energiefluss aufgrund von Gradienten in der Temperatur, die innerhalb des Flüssigkeitssystems existieren können. Dieser Transport tritt in nicht-idealen Systemen zusätzlich zu den reversiblen Energieflüssen auf, die durch den Massentransport erzeugt werden. In einem System mit kleinen Gradienten in der Temperatur kann der Wärmetransport durch

$$\mathbf{q} = -\kappa \nabla T \quad (3.63)$$

beschrieben werden [167], mit der Wärmeleitfähigkeit nach Spitzer [83, 97]

$$\kappa_e = 0.95 \frac{Z_f + 0.24}{1 + 0.24 Z_f} \frac{10.16 \cdot 8\pi^2 \varepsilon_0^2 k_B^{7/2} T_e^{5/2}}{\sqrt{m_e} e^4 Z_f \ln \Lambda}, \quad \kappa_i = \frac{10.16 \cdot 8\pi^2 \varepsilon_0^2 k_B^{7/2} T_i^{5/2}}{\sqrt{m_e} e^4 Z_f \ln \Lambda} \quad (3.64)$$

und dem Coulomblogarithmus (2.26).

Da dieser Effekt durch Temperaturgradienten erzeugt wird, kann ein konstanter Temperaturterm nicht auftreten. Außerdem müssen bei stärkeren Temperaturgradienten höhere Ordnungen der Temperatur ($\partial^2 T / \partial \mathbf{r}^2 \dots$) mitgenommen werden.

Durch diese Überlegungen kann Gleichung (3.59) mit der Einführung der Massendichte $\rho = mn$ vereinfacht werden zu

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho E + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho E u_j + q_j + P_{ij} u_i) = n u_i F_i^{\text{ext}}. \quad (3.65)$$

Unter Nutzung der Relation (3.53) findet man die Energie-Transportgleichung

$$\frac{\partial \rho E}{\partial t} + \nabla (\mathbf{u} (\rho E + p)) = \mathbf{u} \left[\eta \nabla^2 \mathbf{u} + \left(\frac{\eta}{3} + \zeta \right) \nabla (\nabla \cdot \mathbf{u}) \right] + n \mathbf{u} \cdot \mathbf{F}^{\text{ext}} + \nabla \kappa \nabla T, \quad (3.66)$$

welche eine Kontinuitätsgleichung mit Quellen für die Systemenergie ist.

Damit wurden fünf hydrodynamische Gleichungen für die fünf Erhaltungsgrößen Dichte, die drei Geschwindigkeitskoordinaten und die Energie je Einheitsmasse und den Druck als sechste Größe gefunden, die hier noch einmal zusammengefasst werden

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) &= 0, \\ \frac{\partial \rho \mathbf{u}}{\partial t} + (\nabla \cdot \mathbf{u}) \rho \mathbf{u} + \nabla p &= \eta \nabla^2 \mathbf{u} + \left(\frac{\eta}{3} + \zeta \right) \nabla (\nabla \cdot \mathbf{u}) + n \mathbf{F}^{\text{ext}}, \\ \frac{\partial \rho E}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u}(\rho E + p)) &= \mathbf{u} \left[\eta \nabla^2 \mathbf{u} + \left(\frac{\eta}{3} + \zeta \right) \nabla (\nabla \cdot \mathbf{u}) \right] + n \mathbf{u} \mathbf{F}^{\text{ext}} + \nabla \kappa \nabla T. \end{aligned} \quad (3.67)$$

Dieses hyperbolische, partielle Differentialgleichungssystem soll im Folgenden für ein mehrkomponentiges Plasma numerisch gelöst werden. Dabei werden die Viskositäten unter der Annahme einer nur schwach nicht-idealen Flüssigkeit vernachlässigt. Bei dieser Vernachlässigung der Viskosität werden die Gleichungen (3.67) Eulergleichungen genannt. Für die Anwendung eines allgemeingültigeren Modells müssen die Kadanoff-Baym-Gleichungen [101, 168] angewendet sind, deren numerische Lösung allerdings wesentlich zeitaufwendiger ist. Dieser Ansatz wurde im Bereich der Clusterphysik bereits erfolgreich angewendet [169–173].

3.2.2 Vom mikroskopischen Bild zum makroskopischen Strahlungstransport

Im vorherigen Abschnitt wurden aus der mikroskopischen Boltzmann-Gleichung die makroskopischen, hydrodynamischen Gleichungen (3.67) hergeleitet. Damit kann die Dynamik der Materie beschrieben werden. Um außerdem auch den Einfluss der Strahlung auf diese Materie zu beschreiben, ist es nicht sinnvoll, auf diese makroskopische Beschreibung durch die Gleichungen (3.67) die mikroskopischen Maxwell-Gleichungen (3.21)–(3.24) für das elektromagnetische Feld anzuwenden. Daher wird in diesem Abschnitt aus der Boltzmann-Gleichung (3.18) eine makroskopische Beschreibung der Strahlung hergeleitet.

Dazu wird das System nicht aus N Teilchen zusammengesetzt, sondern es werden zusätzlich die N_P Photonen betrachtet. Damit erhält man für das gesamte System $N + N_P$ Boltzmann-Gleichungen, von denen der Anteil zur Beschreibung der Materie bereits in Gleichung (3.14) dargestellt ist. In diesem Abschnitt werden die Boltzmann-Gleichungen für die N_P Photonen aufgestellt

$$\frac{\partial f_{P,1}}{\partial t} + \frac{\partial f_{P,1}}{\partial \mathbf{r}} \cdot \dot{\mathbf{r}} + \frac{\partial f_{P,1}}{\partial \mu} \dot{\mu} + \frac{\partial f_{P,1}}{\partial \varphi} \dot{\varphi} + \frac{\partial f_{P,1}}{\partial \nu} \dot{\nu} = \text{St } f. \quad (3.68)$$

Für die Beschreibung der Ein-Photonenverteilungsfunktion $f_{P,1}$ kann aufgrund der geradlinigen Bewegung der Photonen die Variable des Impulses \mathbf{p} zu den Variablen der Frequenz ν und der Ausbreitungsrichtung $\boldsymbol{\Omega}$, welche durch den Polarwinkel φ und den Azimutalwinkel θ durch $\boldsymbol{\Omega} = \varphi \cos \theta$ gegeben ist, transformiert werden. Damit ist in der obigen Gleichung $f_{P,1} = f_{P,1}(\mathbf{r}, \nu, \boldsymbol{\Omega}, t)$, womit sich die Ableitungsvariablen in Gleichung (3.68) erklären. Dabei wurde zur Vereinfachung $\mu = \cos \theta$ genutzt.

Hier muss erwähnt werden, dass für die Photonverteilungsfunktion die selben Bedingungen wie aus Abschnitt 3.1 gelten müssen. Dennoch bestehen für die Photonen aufgrund ihrer geradlinigen Bewegung mit konstanter Lichtgeschwindigkeit zusätzliche Bedingungen für die Boltzmann-Gleichung (3.18). Die zeitliche Ableitung lässt sich somit

durch die Lichtgeschwindigkeit $\dot{\mathbf{r}} = c\boldsymbol{\Omega}$ ausdrücken. Aufgrund der geradlinigen Bewegung der Photonen bei der Konvektion verschwinden die zeitlichen Ableitungen der Winkel $\dot{\mu} = \dot{\varphi} = 0$. Ebenso verschwindet die zeitliche Ableitung der Frequenz $\dot{\nu} = 0$, da bei der Konvektion durch die geradlinige Bewegung der Photonen mit der Lichtgeschwindigkeit kein Photonaustausch zwischen den verschiedenen Raumgebieten zu erwarten ist.

Da bisher noch keine Photon-Photon-Stöße beobachtet wurden, werden diese Stöße im Stoßterm nicht berücksichtigt. Dennoch können die Photonen mit der vorhandenen Materie wechselwirken. Da ein System aus Teilchen und Photonen betrachtet wird, muss im Stoßterm auch die Photon-Materie-Wechselwirkung mit eingehen. Das müsste auch in der Betrachtung des Stoßtermes des Abschnittes 3.1.2 geschehen. Allerdings wurden dort für die Weiterverwendung im Abschnitt 3.2.1 konservative Variablen genutzt, wodurch dieser Stoßterm aufgrund von Erhaltungssätzen verschwand. Um eine Photonen-Materie-Wechselwirkung zu berücksichtigen, wird das Verschwinden des Stoßterms in diesem Abschnitt nicht genutzt. Daher ist eine weiterführende Betrachtung des Stoßterms notwendig.

Um den Stoßterm zu erläutern, müssen die physikalischen Prozesse betrachtet werden, die während der Photon-Materie-Wechselwirkung eintreten können:

- Streuung: Photonen wechseln durch den Stoß Richtung und/oder Frequenz,
- Absorption: Photonen werden nach einem Stoß von der Materie absorbiert,
- Emission: die Materie kann Energie in Form von Photonen emittieren.

Damit kann man den Prozess der Photon-Materie-Wechselwirkung innerhalb des Stoßterms analog zu Gleichung (3.16) des Abschnittes 3.1.2 durch einen Gewinn G und einen Verlust L verstehen. Deshalb sind zwei Photonenverluste durch Absorption der Photonen und Streuung der Photonen in andere Richtungen ($d\mu d\varphi \rightarrow d\mu' d\varphi'$) und andere Frequenzen ($d\nu \rightarrow d\nu'$) vorhanden. Dieser Verlust kann mit dem differentiellen Streukoeffizienten σ und dem Absorptionskoeffizienten α beschrieben werden

$$L = c \left[\alpha(\mathbf{r}, \nu, t) f_{P,1}(\mathbf{r}, \nu, \boldsymbol{\Omega}, t) + \int_0^\infty d\nu' \int_{4\pi} d\Omega' \sigma(\mathbf{r}, \nu \rightarrow \nu', \boldsymbol{\Omega} \rightarrow \boldsymbol{\Omega}', t) f_{P,1}(\mathbf{r}, \nu, \boldsymbol{\Omega}', t) \right]. \quad (3.69)$$

Der Gewinn an Photonen im betrachteten Phasenraumvolumen kann ebenso durch Streuung der Photonen in diese Richtung ($d\mu' d\varphi' \rightarrow d\mu d\varphi$) und diese Frequenz ($d\nu' \rightarrow d\nu$) beschrieben werden. Darüber hinaus können von der Materie Photonen emittiert werden. Dieser Effekt hängt nicht direkt vom einkommenden Photonenstrom ab. Analog wie oben kann der Gewinn G mit dem differentiellen Streukoeffizienten σ und dem Emissionskoeffizienten je erzeugter Photonenenergie $\varepsilon/h\nu$ beschrieben werden

$$G = \frac{\varepsilon(\mathbf{r}, \nu, t)}{h\nu} + c \int_0^\infty d\nu' \int_{4\pi} d\Omega' \sigma(\mathbf{r}, \nu' \rightarrow \nu, \boldsymbol{\Omega}' \rightarrow \boldsymbol{\Omega}, t) f_{P,1}(\mathbf{r}, \nu, \boldsymbol{\Omega}', t). \quad (3.70)$$

Dabei sind die Integrale der Streuung durch die Tatsache zu verstehen, dass Photonen in und aus allen Richtungen und Energien gestreut werden können. Weiterhin kommt hier die Lichtgeschwindigkeit c in die Gleichungen, da das ein Maß für die Zeit ist, in

der die Photonen mit der Materie wechselwirken können [174] (Rate der Weglängenerzeugung). Im Folgenden wird Isotropie und Homogenität des Mediums angenommen, womit die obigen Koeffizienten der Absorption und Emission nicht von der Richtung des Photonenflusses abhängen. Damit wurde das Problem der Photonen-Materie-Stöße in die entsprechenden Koeffizienten verschoben, wodurch geeignete Ausdrücke für diese Koeffizienten notwendig werden.

In dieser Arbeit werden die Effekte der Streuung vernachlässigt, was aufgrund der Betrachtung von überkritischen Systemen bei der Anwendung von optischen Lasern gerechtfertigt ist, da die Photonen innerhalb eines kleinen Raumbereichs, im Bereich der Skintiefe, absorbiert beziehungsweise reflektiert werden und somit nicht mehr zur Photon-Materie-Wechselwirkung beitragen können.

Um aus der Photonen-Verteilungsfunktion eine physikalische Interpretation zu ermöglichen, wird die Strahlungsenergieverteilung

$$dE = I_s(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}, \nu, t) \cos \theta d\nu d\Omega dA dt, \quad \text{mit } I_s(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}, \nu, t) = ch\nu f_{P,1}(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}, \nu, t), \quad (3.71)$$

der spezifischen Intensität I_s und dem Strahlungsenergieelement dE der Frequenz ν im Frequenzelement $d\nu$, eingeführt. Dabei besitzt die Strahlung die Richtung $\boldsymbol{\Omega}$ im Winkелеlement $d\Omega$ und durchstrahlt im Zeitelement dt ein Flächenelement dA , mit der Flächennormalen \mathbf{n} , unter dem Winkel $\theta = \cos^{-1} \boldsymbol{\Omega} \cdot \mathbf{n}$.

Damit vereinfacht sich die Gleichung (3.68) zu

$$\frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} I_s(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}, \nu, t) + \boldsymbol{\Omega} \nabla I_s(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}, \nu, t) = \epsilon(\mathbf{r}, \nu, t) - \alpha(\mathbf{r}, \nu, t) I_s(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}, \nu, t). \quad (3.72)$$

Diese Gleichung ist die Strahlungstransportgleichung und erweitert das System der Gleichungen (3.67) mit der Strahlungsenergiegedichte

$$I(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}, t) = \int_0^\infty I_s(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}, \nu, t) d\nu \quad \text{und} \quad \mathbf{I} = \boldsymbol{\Omega} I(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}, t) \quad (3.73)$$

und dem Strahlungsdruck

$$I_p(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{c} \int_0^\infty d\boldsymbol{\Omega} I_s(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}, \nu, t) \boldsymbol{\Omega} \nu \quad (3.74)$$

zu dem Gleichungssystem der Strahlungs-Hydrodynamik,

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla(\rho \mathbf{u}) &= 0, \\ \frac{\partial \rho \mathbf{u}}{\partial t} + (\nabla \cdot \mathbf{u}) \rho \mathbf{u} + \nabla(p - I_p) &= \eta \nabla^2 \mathbf{u} + \left(\frac{\eta}{3} + \zeta \right) \nabla(\nabla \cdot \mathbf{u}) + n \mathbf{F}^{\text{ext}}, \\ \frac{\partial \rho E}{\partial t} + \nabla(\mathbf{u}(\rho E + p) - \mathbf{I} - \mathbf{q}) &= \mathbf{u} \left[\eta \nabla^2 \mathbf{u} + \left(\frac{\eta}{3} + \zeta \right) \nabla(\nabla \cdot \mathbf{u}) \right] + n \mathbf{u} \mathbf{F}^{\text{ext}}. \end{aligned} \quad (3.75)$$

Dabei ist in der Energieerhaltungsgleichung dieses Gleichungssystems der Gradient der Laserintensität mit eingegangen, der die Wechselwirkung der Materie mit den Photonen beschreibt. Das resultiert aus den nun zusätzlich berücksichtigten Photonen in der Boltzmann-Gleichung, wodurch dieser Term analog zu den obigen Überlegungen des vorliegenden Abschnitts aus den Teilchen-Photon-Stößen im Stoßterm resultiert. Zusätzlich

ist in der Gleichung der Impulserhaltung ebenfalls ein Term für die Teilchen-Photonen Wechselwirkung aufgetaucht, der den Strahlungsdruck und das Abbremsen und Ablenken der Teilchen durch Photonen beschreibt. Dieser Druck hat allerdings in den in dieser Arbeit betrachteten System nur einen kleinen Einfluss.

Im Allgemeinen wird für den Strahlungstransport unter Berücksichtigung der Dynamik der Materie durch die Gleichungen (3.75) der erste Term der linken Seite der Gleichung (3.72) vernachlässigt. Diese stationäre Annahme des Photonenflusses kann mit dem Vergleich der beiden Zeitskalen von Photonen und Materie begründet werden. Im optisch dünnen Medium, in dem wenige Photon-Materie-Wechselwirkungen erfolgen, ist die Zeitskala des Photonenflusses $t_L = l/c$ auf der charakteristischen Weglänge l wesentlich kleiner als die des Materieflusses $t_M = l/u \gg t_L$. Daher kann sich der Photonenfluss dem Materiefluss instantan anpassen. In überkritischen Medien ist aufgrund der hohen Anzahl von Photon-Materie-Wechselwirkungen die Zeitskala des Photonenflusses vergrößert $t'_L = l^2/(c\lambda_f)$. Hier muss die charakteristische Weglänge l aufgrund der Wechselwirkung mit der mittleren freien Weglänge der Photonen skaliert werden. Damit kann $t'_L \approx t_M$ gelten, womit der erste Term der linken Seite der Gleichung (3.72) nicht vernachlässigt werden kann. Da allerdings in überkritischen Systemen im Gleichgewicht ein Gleichgewicht zwischen absorbiertem und emittierter Strahlung vorliegt, verschwindet die Annahme der vergrößerten Zeitskala aufgrund von Wechselwirkungen, da sich die Wechselwirkungsprozesse aufheben. Für diese Annahme dürfen sich Dichte und Temperatur nicht zu stark mit der Zeit ändern, damit sich bei Dichte- und Temperaturänderung ein Strahlungsgleichgewicht einstellen kann [139].

Mit den Gleichungen (3.72) und (3.75) ist man in der Lage die Dynamik laser-induzierter Plasmen zu beschreiben. Dazu müssen allerdings die in diesem Abschnitt eingeführten Koeffizienten für Absorption und Emission bekannt sein. Diese werden im Abschnitt 3.2.5 beschrieben.

3.2.3 Hydrodynamik eines Plasmas

Ein Plasma besteht aus frei beweglichen mikroskopischen Bestandteilen. Durch diese freie Beweglichkeit ist die Beschreibung der Hydrodynamik eines Plasmas durch die Gleichungen (3.67) möglich. Weiterhin betrachtet man damit ein elektromagnetisches mehrkomponentiges System, welches aus freien Elektronen, Atomen und unterschiedlich geladenen Ionen besteht. Deshalb muss zur exakten Beschreibung dieses Systems für jede Komponente α das Gleichungssystem (3.75) aufgestellt und gelöst werden. Darüber hinaus müssen die Felder zwischen den geladenen Teilchen berücksichtigt werden. Das heißt, es müssen die Lorentzkraft und die Stöße zwischen den Teilchen mit aufgenommen werden. Damit erhält man das Gleichungssystem

$$\begin{aligned}
& \frac{\partial \rho_\alpha}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_\alpha \mathbf{u}_\alpha) = 0, \\
& \frac{\partial}{\partial t} (\rho_\alpha \mathbf{u}_\alpha) + (\nabla \cdot \mathbf{u}_\alpha) \rho_\alpha \mathbf{u}_\alpha + \nabla (p_\alpha - I_p) - e_\alpha n_\alpha^2 \left(\mathbf{E} + \frac{1}{c} \mathbf{u}_\alpha \times \mathbf{B} \right) - \mathbf{C}_\alpha = \mathbf{0}, \\
& \frac{\partial}{\partial t} (\rho_\alpha E_\alpha) + \nabla \cdot (\rho_\alpha E_\alpha \mathbf{u}_\alpha) + \nabla \cdot (p_\alpha \mathbf{u}_\alpha - \mathbf{I}_\alpha - \mathbf{q}_\alpha) \\
& \quad - e_\alpha n_\alpha^2 \mathbf{u}_\alpha \cdot \left(\mathbf{E} + \frac{1}{c} \mathbf{u}_\alpha \times \mathbf{B} \right) - Q_\alpha = 0,
\end{aligned} \tag{3.76}$$

mit der Teilchendichte n_α der Sorte α , der elektrischen Feldstärke \mathbf{E} , der magnetischen Flussdichte \mathbf{B} , der viskosen Reibung \mathbf{C}_α und dem Energieübertrag durch Stöße Q_α . Um das Gleichungssystem zu komplettieren, wird für jede Komponente eine Zustandsgleichung aus $E = E(p, u)$, $p = p(E, u)$ oder $u = u(E, p)$, die acht Maxwellgleichungen für das elektromagnetische Feld (3.21)-(3.24) und die Gleichungen für Ladung $\rho = e(\sum_\alpha Z_\alpha n_\alpha - n_e)$ und Strom $\mathbf{j} = e_\alpha \bar{\mathbf{u}}(\sum_\alpha Z_\alpha n_\alpha - n_e)$ mit der mittleren Geschwindigkeit $\bar{\mathbf{u}}$ aufgestellt. Somit muss für ein System aus einem Element mit der Ordnungszahl Z ein System aus $6 \cdot (Z + 2) + 12$ Gleichungen gelöst werden.

Dieser Ansatz ist mit heutigen Rechnerkapazitäten nicht in einem realistischen Zeitrahmen lösbar. Daher bedient man sich einer geeigneten Näherung: Im Folgenden wird die Hydrodynamik quasi-neutraler Plasmen betrachtet. Das heißt, dass das Plasma nach außen hin elektrisch neutral ist und sich die Ladungen der negativ geladenen Elektronen mit den positiv geladenen Ionen kompensieren. Das ist der Fall, wenn eine homogene Abschirmung der Elektronen beziehungsweise Ionen angenommen wird, wodurch die charakteristische Länge von Plasmainhomogenitäten als klein im Vergleich zum elektronischen Debye-Abschirmradius (1.4) betrachtet wird. Für diese Annahme muss sich die Elektronenverteilung der Ionenverteilung adiabatisch anpassen, was aufgrund der kleinen Masse der Elektronen im Vergleich zu den Ionen gerechtfertigt ist, da die Elektronen sich dadurch dem Potential der Ionen innerhalb eines Zeitintervalls anpassen können. Daher muss eine Bedingung an die betrachteten Zeitintervalle gegeben sein. Mit diesen Annahmen kann ein Plasma als quasi-neutral angesehen werden, wodurch sich die Ladungen nach außen hin kompensieren, da sich die Elektronenverteilung dem Feld der Ionen instantan anpasst. Also ist für die Hydrodynamik nur die Beschreibung der Ionengeschwindigkeit von Interesse. Somit können auch elektrische Ströme und interne Magnetfelder vernachlässigt werden. Um diese Vereinfachung einzuführen, müssen Effekte wie schnelle Elektronen und ponderomotive Kräfte vernachlässigt werden, da diese dazu führen, dass sich im Plasma starke Felder und Ströme ausbilden können. Diese vernachlässigten nichtlinearen Effekte treten nur innerhalb intensiver Laserfelder mit Intensitäten oberhalb von $I = 10^{17}$ W/cm² auf. Daher ist diese Vereinfachung für solche Lasereinstrahlung nicht geeignet und es sollten dann die Vlasogleichungen (3.1.3) gelöst werden.

Eine weitere Vereinfachung ist das Zusammenfassen der schweren Teilchen des gleichen Elements. Aufgrund der nahezu identischen Massen der Ionen beziehungsweise Atome des selben Elements ist die hydrodynamische Beschreibung der schweren Teilchen im quasi-neutralen Plasma identisch. Der einzige Unterschied drückt sich im Stoßterm aus, bei dem Atome einen geringeren Einfluss auf die Elektronen haben als die verschiedenen geladenen Ionen. Das soll im Folgenden vernachlässigt werden, womit sich das Gleichungssystem für die Beschreibung eines Elements auf 12 Gleichungen reduziert. Eine weitere Reduktion auf 8 Gleichungen kann durch die Quasi-Neutralität des Plasmas erreicht werden, da dann die Bewegung der Elektronen mit der Bewegung der schweren Teilchen zusammenfällt. Somit muss für das Elektronensystem nur die Kontinuitätsgleichung für die Energie und die Zustandsgleichung berücksichtigt werden.

Durch diese Vereinfachungen wird das zu lösende Gleichungssystem gewonnen

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0, \quad (3.77)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \mathbf{u}) + (\nabla \cdot \mathbf{u})\rho \mathbf{u} + \nabla(p_e + p_i) = \mathbf{0}, \quad (3.78)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho E_i) + \nabla \cdot (\rho E_i \mathbf{u}) + \nabla \cdot (p_i \mathbf{u} - \mathbf{q}_i) - Q = 0, \quad (3.79)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho E_e) + \nabla \cdot (\rho E_e \mathbf{u}) + \nabla \cdot (p_e \mathbf{u} - \mathbf{I} - \mathbf{q}_e) - Q = 0, \quad (3.80)$$

mit der Zustandsgleichung für Ionen $E_i = E_i(p_i, u)$, $p_i = p_i(E_i, u)$ oder $u = u(E_i, p_i)$ und Elektronen $E_e = E_e(p_e, u)$, $p_e = p_e(E_e, u)$ oder $u = u(E_e, p_e)$. Hier sei erwähnt, dass die Elektronen-Ionen-Stöße zwar einen Einfluss auf den Energieaustausch, aber aufgrund der großen Massendifferenz keinen Einfluss auf die Bewegungsrichtung der Ionen haben, daher wird die Reibung \mathbf{C} vernachlässigt. Für den Ion-Elektron-Energieaustausch wird der Formalismus von Spitzer [97]

$$Q = \frac{1}{\rho} \omega_Q n_e k_B (T_i - T_e), \quad \text{mit} \quad \omega_Q = \frac{\sqrt{m_e} Z_f^2 e^4 n_i \ln \Lambda}{32 \sqrt{2} \pi \varepsilon_0^2 m_i (k_B T_e)^{-3/2}} \quad (3.81)$$

und dem Coulomblogarithmus (2.26), verwendet. Verbesserte, allgemeinere Ausdrücke für den Ion-Elektron-Energieaustausch, die allerdings in der Auswertung zeitaufwendiger sind, und ihre Anwendung sind in den Arbeiten [175–178] zu finden.

3.2.4 Ionisationsprozesse in der Hydrodynamik

Zur Beschreibung der Dynamik eines laser-induzierten Plasmas sind neben der Hydrodynamik auch die Beschreibung der Plasmaerzeugung durch Ionisation erforderlich. Da Elektronen ionisieren und rekombinieren können, ist die Dynamik der freie Elektronendichte und damit der Elektronendruck und die Elektronentemperatur nicht nur durch Transportphänomene zu beschreiben. Daher muss neben hydrodynamischen Berechnungen auch ein Modell für die dynamischen Ionisationsprozesse angewendet werden. Das kann für ein System im lokalen Gleichgewicht durch die Saha-Gleichung [66, 174] realisiert werden. Für die Behandlung eines laser-induzierten Plasmas während der Lasereinstrahlphase ist dieses Modell allerdings ungeeignet, da durch die Lasereinstrahlung das System nicht im Gleichgewicht sein muss. Für diesen Fall werden die Ratengleichungen [56, 57, 139] verwendet.

Die Ratengleichungen sind ein Satz von $Z+1$ Gleichungen für die Ionendichten $n_{j,k}$ der Ionen der Ionenladung j im angeregten Zustand k des Elements mit der Kernladungszahl Z und k_{\max} angeregten Zuständen

$$\begin{aligned} \frac{dn_{j,k}}{dt} = & - (n_e n_{j,k} \alpha_{j,k} + n_e^2 n_{j,k} \beta_{j,k} \delta_{k0}) + \sum_{k'} (n_e^2 n_{j+1,k'} \beta_{j+1,k'} \delta_{k'0} \\ & + n_e n_{j-1,k'} \alpha_{j-1,k'} + n_e n_{j,k'} K_{k,k'} - n_e n_{j,k} K_{k',k}), \end{aligned} \quad (3.82)$$

mit den Randbedingungen

$$\frac{dn_{0,k}}{t} = - n_e n_{0,k} \alpha_{0,k} + \sum_{k'} (n_e^2 n_{1,k'} \beta_{1,k'} \delta_{k'0} + n_e n_{0,k'} K_{k,k'} - n_e n_{0,k} K_{k',k}), \quad (3.83)$$

$$\frac{dn_{Z,k}}{dt} = - n_e^2 n_{Z,k} \beta_{Z,k} \delta_{k0} + \sum_{k'} (n_e n_{Z-1,k'} \alpha_{Z-1,k'} + n_e n_{Z,k'} K_{k,k'} - n_e n_{Z,k} K_{k',k}), \quad (3.84)$$

$$n_e = \sum_{j=0}^Z j n_j. \quad (3.85)$$

Dabei ist n_e die Elektronendichte, α der Ionisationskoeffizient, β der Rekombinationskoeffizient und $K_{k,k'}$ der Übergangskoeffizient vom angeregten Zustand k' in den angeregten Zustand k . Der erste Term der rechten Seite der Ratengleichungen (3.82) beschreibt den Verlust an Ionen der Ladung j im Anregungszustand k durch Ionisationsprozesse, wohingegen der zweite Beitrag den Verlust dieser Ionen durch Rekombinationsprozesse beschreibt. Durch das Kronecker-Symbol δ sind nur Rekombinationen aus dem Grundzustand zugelassen. Die nächsten beiden Beiträge beschreiben den Gewinn an Ionen durch Ionisationsprozesse aus allen Anregungszuständen k' des $j-1$ -ten Ladungszustandes und Rekombinationsprozesse aus dem Grundzustand des $j+1$ -ten Ladungszustandes. Hier sind wieder nur Rekombinationen aus dem Grundzustand zugelassen, wohingegen der Ionisationsprozess aus jedem Zustand der Ionen des $j-1$ -ten Ladungszustandes erlaubt ist. Das ist eine Näherung, bei der die Annahme getroffen wird, dass bevor Rekombinationsenergie verloren wird, sämtliche Anregungsenergie verloren sein muss. Die letzten beiden Terme beschreiben den Gewinn beziehungsweise den Verlust an Ionen des Zustandes k durch Anregung beziehungsweise Zerfall. Dieser k -te Zustand kann in jeden anderen Zustand zerfallen beziehungsweise angeregt werden und jeder Zustand kann in den k -ten Zustand übergehen. Die Randbedingungen (3.83) und (3.84) schließen das System der Ratengleichungen (3.82) ab. Die Gleichung (3.85) beschreibt in diesem System die Ladungsneutralität im System, über die die Elektronendichte gegeben ist.

Somit beschreiben die Ratengleichungen die zeitliche Entwicklung der Plasmazusammensetzung, wobei die entsprechenden Ionisations- und Rekombinationsprozesse durch die jeweiligen Koeffizienten charakterisiert werden. Daher ist es notwendig geeignete Ausdrücke für diese Koeffizienten zu finden. Dabei können die einzelnen Koeffizienten mehrere physikalische Prozesse beschreiben. Der Ionisationskoeffizient kann neben Stoßionisation auch Feld- und Tunnelionisation beinhalten. Diese einzelnen Prozesse setzen sich additiv zum Gesamtkoeffizienten zusammen. Im Folgenden werden die in dieser Arbeit verwendeten Koeffizienten aufgeführt.

Für den Ionisationsprozess wird in dieser Arbeit der Stoßionisationsprozess durch thermische Elektronen durch die empirischen Querschnitte von Lotz genutzt [58], die mit einer Maxwell-Boltzmann-Geschwindigkeitsverteilung gemittelt werden [56, 57],

$$\begin{aligned} \alpha_j^L &= 3 \cdot 10^{-6} \xi_j e k_B T_{eV}^{-3/2} \frac{F(u)}{\exp(u)u}, \\ F(u) &= \exp(u)(-\ln u - 0.5772 + u), \quad \text{für } u \leq 10^{-4}, \\ F(u) &= \exp(u)(-\ln u - 0.5772 + 1.0000u - 0.2499u^2 + 0.0552u^3 \\ &\quad - 0.0098u^4 + 0.001u^5), \quad \text{für } 10^{-4} < u \leq 1, \\ F(u) &= \frac{u + 2.3347 + 0.2506/u}{u^2 + 3.3307u + 1.6815}, \quad \text{für } u > 1, \end{aligned} \quad (3.86)$$

mit dem Verhältnis $u = I_p^j / (T_{eV})$, der Elektronentemperatur in der Einheit Volt T_{eV} , der Ionisationsenergie des j -ten Ladungszustandes I_p^j und der Anzahl an

Valenzelektronen ξ_j des j -ten Ladungszustandes. Neben dem Elektronenstoßionisationsprozess wird ein weiterer Stoßionisationsprozess berücksichtigt, welcher durch einen eingestrahnten Laser getrieben wird, in dessen Feld die freien Elektronen aufgrund ihrer erhöhten Bewegung eine erhöhte Stoßrate aufweisen. Diese stimulierte Stoßionisation wird durch [179]

$$\alpha_j^D = \frac{3.015 \cdot 10^{-6} \xi_j}{2\pi I_p U_p^{1/2}} \left\{ \left[3 + \frac{I_p}{U_p} + \frac{3}{32} \left(\frac{I_p}{U_p} \right)^2 \right] \times \ln \left[\frac{1 + \sqrt{1 - I_p/(2U_p)}}{1 - \sqrt{1 - I_p/(2U_p)}} \right] - \left(\frac{7}{2} + \frac{3I_p}{8U_p} \right) \sqrt{1 - I_p/(2U_p)} \right\}, \quad (3.87)$$

mit dem ponderomotischen Potential $U_p = m_e v_0^2/4$ und der Zittergeschwindigkeit der Elektronen im elektromagnetischen Feld $v_0 = eE_0/(m_e\omega)$, beschrieben.

Einen weiteren Ionisationsprozess stellt die Feldionisation dar, wobei in dieser Arbeit nur die Tunnelionisation berücksichtigt wird, die bereits in Abschnitt 3.1.4 vorgestellt wurde. Der gemittelte Ionisationskoeffizient ist über die ADK-Rate (3.29) gegeben [156].

Der Rekombinationsprozess durch Stöße wird in dieser Arbeit durch das Modell von Salzmann und Krumbein [57, 180] beschrieben

$$\beta_{j+1}^{\text{SK}} = \frac{\alpha_j}{3 \cdot 10^{21} (2g_{j+1}/g_j) T_{eV}^{3/2} \exp(-u)}, \quad (3.88)$$

welches im lokalen thermischen Gleichgewicht in das Saha-Modell übergeht.

Die Übergangskoeffizienten werden durch

$$K_{kk'} = \frac{16\pi a_B^2 \text{Ry}^2}{\sqrt{2\pi m_e}} \frac{f_{kk'}}{\Delta E_{kk'}^{3/2}} h \left(\frac{\Delta E_{kk'}}{k_B T_e} \right), \quad (3.89)$$

$$K_{k'k} = \frac{g_k}{g_{k'}} K_{kk'} \exp \left(\frac{\Delta E_{kk'}}{k_B T_e} \right),$$

mit der Energiedifferenz zwischen den angeregten Zuständen k und k' $\Delta E_{kk'} = |E_k - E_{k'}|$, der Oszillatorstärke des Übergangs $f_{kk'}$ und dem Integral $h(x) = \sqrt{x} \int_x^\infty dt e^{-t}/t$, charakterisiert [181].

Damit kann die Zusammensetzung des Plasmas aus den Temperaturen und Dichten in jedem Zeitschritt durch die Ratengleichungen mit den entsprechenden Koeffizienten bestimmt werden.

3.2.5 Absorptionseffekt in der Hydrodynamik

In diesem Unterabschnitt wird die transversale dielektrische Funktion aus Abschnitt 2.1.1 für die Wechselwirkung der Materie mit transversaler elektromagnetischer Strahlung dazu verwendet, einen Ausdruck für den Absorptionskoeffizienten, der im Abschnitt 3.2.2 für die Licht-Materie-Wechselwirkung eingeführt wurde, zu gewinnen. Die Wechselwirkung mit freien Elektronen (Absorption der inversen Bremsstrahlung), die Wechselwirkung mit gebundenen Elektronen (Absorption der Übergangsstrahlung) und die Wechselwirkung durch Ionisation von Elektronen (Absorption der Ionisationsstrahlung) wurden bereits in Abschnitt 1.3 eingeführt und in [89] untersucht.

Hier wird sich innerhalb von strahlungs-hydrodynamischen Berechnungen ausschließlich auf die Absorption der inversen Bremsstrahlung beschränkt, da diese in den in dieser Arbeit betrachteten überkritischen Plasmen der dominierende Effekt ist. Zudem ist die verwendete Frequenz des eingestrahlten optischen Lasers mit einer Wellenlänge von $\lambda = 800$ Nanometer nicht in der Lage Übergangsstrahlung und Ionisationsstrahlung bereit zu stellen. Weiterhin wird die Emission des Plasmas vernachlässigt, wodurch nur die Frequenz des Lasers betrachtet wird, und somit tatsächlich nur die Absorption der inversen Bremsstrahlung von Interesse ist.

Zusätzlich zu den hier erläuterten Photon-Materie-Wechselwirkungen existieren auch Absorptionen durch den Wellencharakter des Laserfeldes. Das sind die Feldionisationen, die im vorherigen Abschnitt erläutert wurden und zusätzlich zu einem Energieverlust des Laserfeldes führen.

Absorption der inversen Bremsstrahlung

Um die Absorption der inversen Bremsstrahlung zu beschreiben, kann die Gleichung (2.28) genutzt werden. Wie bereits erwähnt, beschreibt die inverse Bremsstrahlung die Absorption aufgrund der Anregung der Elektronen, die bei der Oszillation um die Ionen durch das Laserfeld beschleunigt werden. Dieser Effekt ist die Absorption der inversen Bremsstrahlung und wird in der Gleichung (3.72) als Absorptionskoeffizient beschrieben.

Für die Gewährleistung einer schnellen Berechnung des Absorptionskoeffizienten wird für die Beschreibung der Elektronen-Ionen Stöße der einfache analytische frequenzunabhängige Ausdruck von Spitzer und Härn

$$\nu_{\text{St}} = \frac{4\sqrt{2\pi}Z^2e^4n_i}{3(4\pi\epsilon_0)^2\sqrt{m_e}} \frac{\ln \Lambda}{(k_{\text{B}}T)^{3/2}} \quad (3.90)$$

in Gleichung (2.28) genutzt [97], der in einer Relaxationszeitnäherung für ein klassisches System gewonnen werden kann. Dabei ist $\ln \Lambda$ der Coulomblogarithmus (2.26). Damit ist man bei Vernachlässigung der Emission in der Lage die Strahlungstransportgleichung (3.72) zu lösen.

Absorption durch Tunnelionisation

Im Abschnitt 3.2.2 wurde die Strahlungstransportgleichung (3.72) mit Hilfe der Boltzmann-Gleichung (3.18) für Verteilungsfunktionen hergeleitet, die den Strahlungstransport durch die Materie mit Emission als Quellterm und Absorption als Verlustterm beschreibt. Diese Gleichung wurde unter Vernachlässigung von Streuung für die Betrachtung von Photonen, die in ausreichend kleinen Ortsvolumen beschrieben wurden, hergeleitet. Der Charakter des Feldes wird durch diese kinetische Beschreibung des Strahlungstransportes vernachlässigt. Um dennoch Wechselwirkungseffekte aufgrund von Feldern, wie die Tunnelionisation und die resultierende Strahlungsabsorption, zu beschreiben, wird neben der oben beschriebenen Absorption eine weitere, durch den Wellencharakter der Strahlung verursachte Absorption eingeführt [182]

$$\frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{I}(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}, \nu, t) + \boldsymbol{\Omega} \nabla \mathbf{I}(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}, \nu, t) = \epsilon(\mathbf{r}, \nu, t) - \alpha(\mathbf{r}, \nu, t) \mathbf{I}(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}, \nu, t) - \alpha_{\text{Feld}}(E). \quad (3.91)$$

Dabei beschreibt der eingeführte Absorptionskoeffizient α_{Feld} die Absorption aufgrund des elektromagnetischen Feldes \mathbf{E} und ist nicht direkt abhängig vom Photonenstrom I .

Dieser Absorptionskoeffizient wird in dieser Arbeit dazu genutzt, die Absorption von Strahlung aufgrund von Tunnelionisation zu beschreiben. Der Prozess der Tunnelionisation wurde bereits als Rate α_j^{ADK} für die Ratengleichung zur Darstellung von Ionisationsprozessen in Gleichung (3.29) im Abschnitt 3.2.4 eingeführt. Dabei kann die Stärke des Feldes durch die Intensität

$$E_0 = \sqrt{\frac{2I}{\varepsilon_0 c}}, \quad (3.92)$$

die durch Gleichung (3.91) gewonnen werden kann, ausgedrückt werden [183]. Aus den Ratengleichungen (3.82) kann der Absorptionskoeffizient für die Tunnelionisation berechnet werden

$$\alpha_{\text{Feld}}(E) = \sum_j I_p^j \sum_k \frac{dn'_{j,k}}{dt} = \sum_j I_p^j \sum_k \left(-n_{j,k} \alpha_{j,k}^{\text{ADK}}(E) + \sum_{k'} n_{j+1,k'} \alpha_{j+1,k'}^{\text{ADK}}(E) \right). \quad (3.93)$$

Damit ist es möglich in der Strahlungstransportgleichung (3.91) auch Absorptionen aufgrund von Tunnelionisationen zu berücksichtigen, die insbesondere in der Erzeugung von Plasmen eine wichtige Rolle spielen.

3.2.6 Zustandsgleichung

Für den Abschluss der oben erläuterten hydrodynamischen Gleichungen (3.77)-(3.79) und dem Erhalt eines lösaren Gleichungssystems wurden Zustandsgleichungen $E = E(p, u)$, $p = p(E, u)$ oder $u = u(E, p)$ erwähnt. Darauf wird in diesem Abschnitt kurz eingegangen. Der einfachste Fall für die Wahl der Zustandsgleichungen ist die Zustandsgleichung des idealen Gases $p = nk_B T$. Um die Zustandsgleichung des idealen Gases in Verbindung mit den hydrodynamischen Variablen zu bringen, wird diese Gleichung auf die spezifische innere Energie $e = p/(\gamma - 1)$ bezogen [89,184], mit dem Verhältnis der Wärmekapazitäten $\gamma = (2 + \mathcal{F})/\mathcal{F}$ und der Anzahl der Freiheitsgrade \mathcal{F} , welche die drei Translationsrichtungen eines einatomigen Gases sind. Damit erhält man mit Gleichung (3.60) die Zustandsgleichung für das ideale Gas $\rho E = \rho u^2/2 + p/(\gamma - 1)$, welche die hydrodynamische Variable der Energie je Einheitsmasse E mit dem Druck und der Temperatur verbindet. Mit dieser zusätzlichen Gleichung ist es möglich, das Gleichungssystem (3.77)-(3.79) zu lösen.

Neben der Zustandsgleichung für ein ideales Gas ist es auch möglich, tabellarisierte Zustandsgleichungen zu nutzen. Diese tabellarisierten Zustandsgleichungen sind berechnete Dichte-, Druck-, Energie- und Temperaturzusammenhänge von realen Gasen, die über verschiedene aufwendige Theorien, wie Fluid Variational Theorie [185,186], Massenwirkungsgesetze mit geeigneten Quantenpotentialen [187,188] oder Finite Temperatur-DichteFunktionaltheorie-MolekularDynamik (FT-DFT-MD) [189–193], berechnet wurden und teilweise experimentell verifiziert sind. In dieser Arbeit wird die in hydrodynamischen Berechnungen weit verbreitete SESAME-Tabelle [194] genutzt, da sie einen großen Dichte- und Temperaturbereich abdeckt.

4 Plasmadiagnostik von dichten Wasserstofftropfen

Im Rahmen von mehreren Messkampagnen am FLASH wurden in den letzten Jahren Pump-Probe-Thomsonstreuexperimente an Wasserstofftropfen durchgeführt. Eine schematische Darstellung des Tropfens im Laserpuls ist in Abbildung 4.1 zu sehen. Die theoretische Auswertung dieser Experimente wurde im Rahmen dieser Arbeit durchgeführt. Dazu werden in diesem Kapitel aus den Ergebnissen von PIC- und strahlungshydrodynamischen Simulationen der Laser-Wasserstofftropfen-Wechselwirkung die zugehörigen Thomsonstreuenspektren berechnet und untersucht. Zusätzlich wird dabei mit dem PIC-Code VLPL3D [39] der Einfluss von Stoßionisationen auf die Temperatur- und Dichteprofile betrachtet. Auf längeren Zeitskalen ab einer Pikosekunde wird ein in dieser Arbeit angefertigter Strahlungs-Hydrodynamik-Code [195] angewendet. Die zu erwartenden Plasmaparameter können aus der Grafik 1.12 entnommen werden.

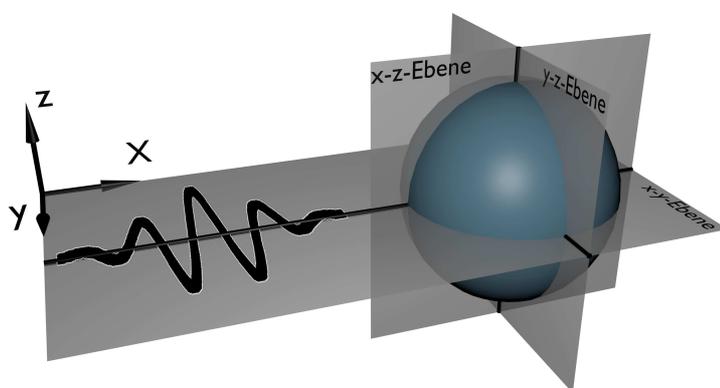


Abbildung 4.1: Darstellung des laser-induzierten Plasmas, hier eines Tropfens, und der drei Raumebenen, in denen in den nächsten Kapiteln die Ergebnisse präsentiert werden.

In den Pump-Probe-Experimenten am FLASH wurden flüssige Wasserstofftropfen mit Durchmessern von $d = 8 - 30 \mu\text{m}$ und Dichten von $\rho = 0.086 \text{ g/cm}^3$ bei Anfangstemperaturen von $T \approx 20 \text{ K}$ als Ziel benutzt. Hier wird sich aufgrund des Rechenaufwandes auf die Beschreibung von Wasserstofftropfen mit einem Durchmesser von $d = 8 - 10 \mu\text{m}$ beschränkt. Rechnungen für Tropfen mit einem Durchmesser von $d = 30 \mu\text{m}$ können in [44] gefunden werden. Diese Tropfen wurden mit einem linear polarisierten optischen Laser der Wellenlänge $\lambda_L = 800 \text{ nm}$, der Energie $E = 20 \text{ mJ}$, der Pulsdauer $t_{\text{FWHM}} = 90 \text{ fs}$ und dem Pulsfokus $d_{\text{FWHM}} = 100 \mu\text{m}$ bestrahlt und mit einem Laser der Wellenlänge $\lambda = 13.5 \text{ nm}$ untersucht.

4.1 Ultrakurzzeitkinetik von laser-induzierten Wasserstofftropfen

Für die dreidimensionale PIC-Simulation der Laser-Materie-Wechselwirkung wird ein Wasserstofftropfen mit dem Durchmesser von $10 \mu\text{m}$ in einer Box der Größe $12 \times 12 \times 12 \mu\text{m}^3$ betrachtet, die auf $700 \times 140 \times 140$ Gitterzellen mit je 32 schweren Teilchen und bis zu 32 Elektronen aufgeteilt ist und kann somit etwa 200 Millionen Teilchen enthalten. Diese Simulation wird bis zu 600 fs nach Durchgang des Laserpulsmaximums durchge-

führt, um ein lokales thermisches Gleichgewicht zur Berechnung der Temperaturen zu gewährleisten. Diese Simulation wurde auf dem JUROPA Supercomputer in Jülich auf 512 Kernen realisiert.

In den Abbildungen 4.2 sind die Profile des Verhältnisses zwischen Elektronen- und Ionendichte im Schnitt entlang der Laserpolarisationsebene für verschiedene Zeiten von $\Delta t = 0$ fs, $\Delta t = 125$ fs und $\Delta t = 600$ fs zwischen Aufnahme der Plasmaparameter und Durchgang des Laserpulsmaximums dargestellt. Darin sind die Simulationen mit und ohne Berücksichtigung von Stoßionisationen gegenübergestellt. Für eine Verzögerungszeit von $\Delta t = 0$ fs ist für beide Fälle ein nicht ionisiertes Tropfeninneres mit einer vollständig ionisierten Tropfenfront von einigen 100 nm Dicke, die größer als die Skintiefe $l \approx c/\omega_{\text{pl},e} \approx 25$ nm ist, zu beobachten. Damit entsteht an der Tropfenfront ein Plasma mit der Elektronendichte $n_e \approx 5 \cdot 10^{22} \text{ cm}^{-3}$, welche oberhalb der kritischen Dichte des Lasers $n_{\text{cr}} = 1.8 \cdot 10^{21} \text{ cm}^{-3}$ liegt, womit das Plasma optisch dicht ist und der Laser innerhalb dieser Plasmaschicht komplett absorbiert beziehungsweise reflektiert wird. Bei der Betrachtung des mittleren Ionisationsgrades des gesamten Tropfens Z_m ist zu erkennen, dass Z_m bei der Berücksichtigung von Stoßionisationen unterhalb des Wertes ohne Berücksichtigungen der Stoßionisationen liegt, obwohl ein zusätzlicher Ionisationsprozess beschrieben wird. Das kann auf numerische Probleme zurückgeführt werden, die in der Abbildung 4.2 bei einer Zeit von $\Delta t = 0$ fs ohne Berücksichtigung der Stoßionisationen an einem Eindringen des Lasers in das Plasma zu beobachten sind. Dieses Eindringen hat keine physikalische Begründung. Um dieses numerische Problem zu bestätigen wurde eine Simulation mit erhöhter Auflösung von $700 \times 700 \times 700$ Gitterzellen durchgeführt und ist in den Abbildungen 4.3 zu sehen. Dort sind die Profile des Verhältnisses zwischen Elektronen- und Ionendichte im Schnitt entlang der Polarisationsebene für die zwei Auflösungen mit und ohne Berücksichtigung der Stoßionisation gezeigt. Hier ist zu sehen, dass die Ionisierung des Tropfeninneren ohne Berücksichtigung von Stoßionisationen bei höherer Auflösung verschwindet. Zudem ist bei höherer Auflösung die mittlere Ionisation Z_m mit Berücksichtigung der Stoßionisationen höher als ohne Berücksichtigung dieser Ionisationen. Das sollte auch bei der Betrachtung eines zusätzlichen Ionisationsprozesses der Fall sein. Darüber hinaus ist bei erhöhter Auflösung eine höhere Anzahl von kleinen Bereichen hoher Elektronendichten zu beobachten, die unphysikalisch sind. Es ist zu bemerken, dass diese Bereiche mit diesem PIC-Code in verschiedenen Simulationen von Tropfen beobachtet wurden, wohingegen das bei der Betrachtung von Folien nicht der Fall war. Daher ist darauf hinzuweisen, dass das vorliegende PIC-Programmpaket diese Tropfengeometrie eventuell nicht unterstützt. Diese Bereiche sind auf künstlich erzeugte Felder an den Gittergrenzen zurückzuführen, die daher auch bei erhöhter Auflösung vermehrt auftreten und das Material ionisieren können.

Bei der Betrachtung der Dynamik der Profile des Verhältnisses zwischen Elektronen- und Ionendichte des Wasserstofftropfens in den Abbildungen 4.2 ist nach der anfänglichen dünnen Ionisationsfront eine Ausdehnung dieser Front ins Innere des Plasmas zu beobachten. Demnach besitzt die Front hoher Elektronendichte einige Zeit nach Abschalten des Lasers $\Delta t = 125$ fs eine Dicke von etwa $2 \mu\text{m}$ und bei einer Verzögerungszeit von 600 fs eine Dicke von etwa $5 \mu\text{m}$. Diese Front kann aufgrund des Auftretens in Simulationen unter Berücksichtigung von Stoßionisationen und der überschrittenen Skintiefe nicht aus Lasereinstrahlung oder Stoßionisationen resultieren, sondern folgt aus den schnellen Elektronen der Geschwindigkeit von etwa $0.03 c$, die aus der zeitlichen Entwicklung der Plasmafront berechnet wurde, und somit eine kinetische Energie von 230 eV besitzen. Da-

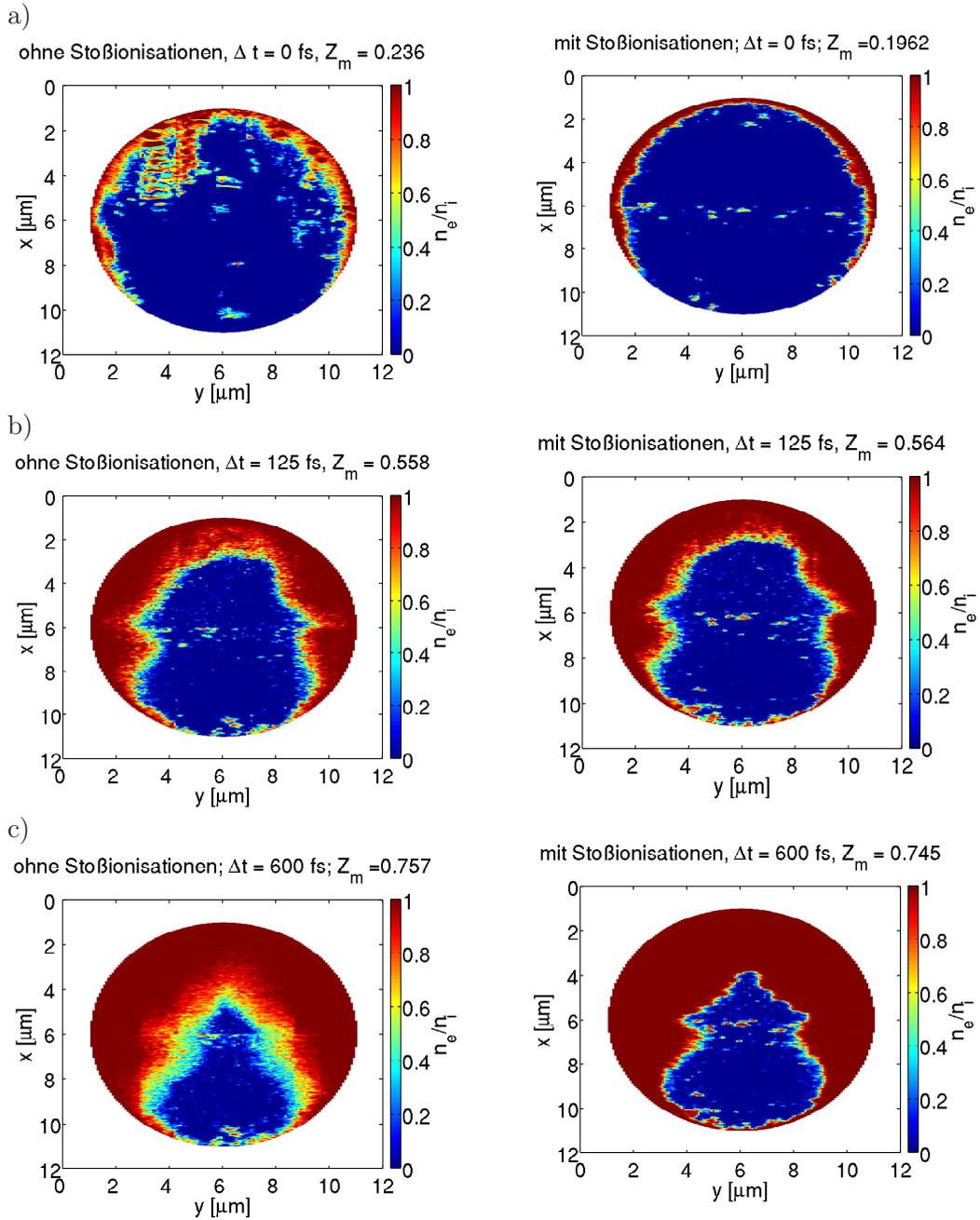


Abbildung 4.2: Profile des Verhältnisses zwischen Elektronen- und Ionendichte eines Wasserstofftropfens im Schnitt entlang der Laserpolarisationsebene für die Verzögerungszeiten von (a) $\Delta t = 0$ fs, (b) $\Delta t = 125$ fs und (c) $\Delta t = 600$ fs zwischen Aufnahme der Profile und Durchgang des Laserpulsmaximums. Der Laser bestrahlt den Tropfen von oben. Verglichen sind PIC-Simulationen ohne (links) und mit Berücksichtigung (rechts) von Stoßionisationen für eine Auflösung mit $700 \times 140 \times 140$ Simulationzellen. Z_m stellt den mittleren Ionisationsgrad des gesamten Tropfens dar.

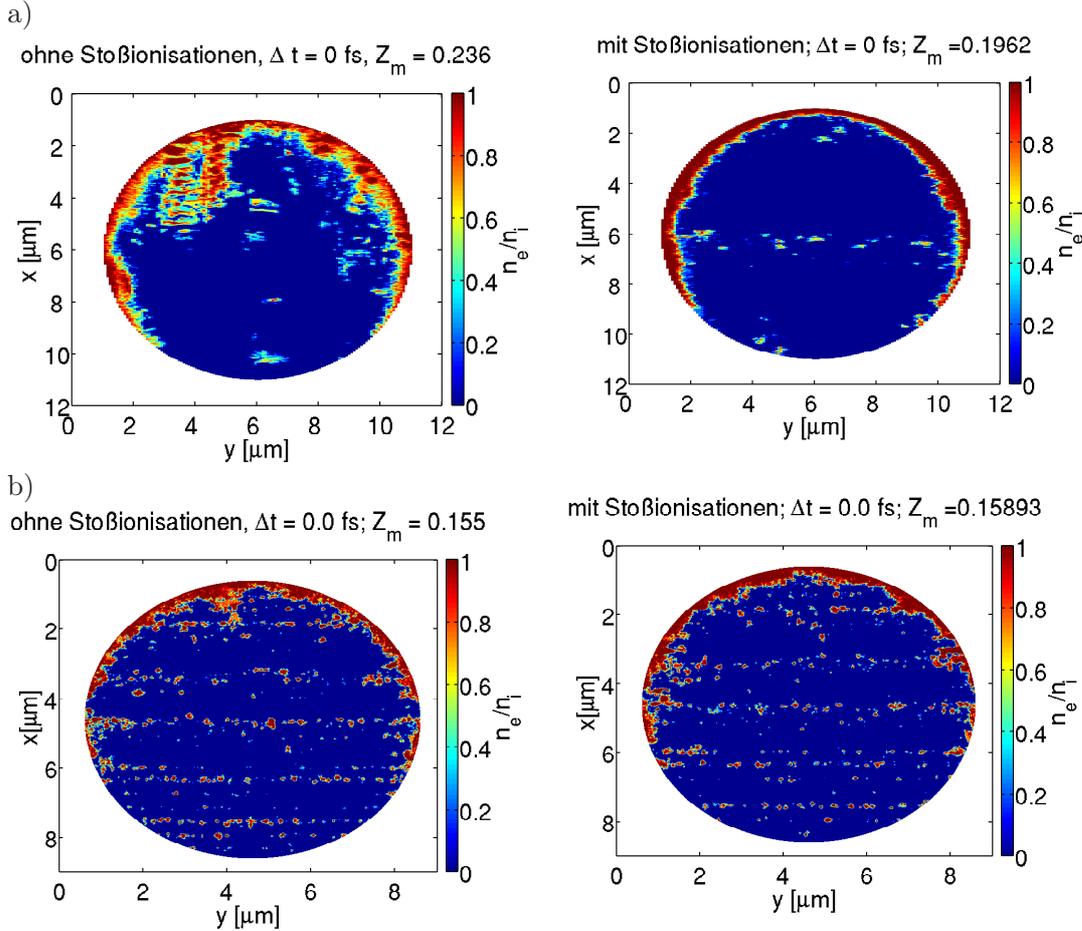


Abbildung 4.3: Profile des Verhältnisses zwischen Elektronen- und Ionendichte eines Wasserstofftropfens im Schnitt entlang der Polarisationssebene zum Zeitpunkt des Durchgangs des Laserpulsmaximums. Der Laser bestrahlt den Tropfen von oben. Verglichen sind PIC-Simulationen ohne (links) und mit Berücksichtigung (rechts) von Stoßionisationen für eine Auflösung von (a) $700 \times 140 \times 140$ und (b) $700 \times 700 \times 700$ Simulationszellen. Z_m stellt den mittleren Ionisationsgrad des gesamten Tropfens dar.

mit können diese beschleunigten Elektronen Wasserstoffatome mit der Ionisationsenergie von 13.6 eV durch Stoßionisationen ionisieren, was in den Simulationen unter Berücksichtigung von Stoßionisationen an der gleichmäßig einfach ionisierten Tropfenfront zu erkennen ist. Daraus resultieren im Vergleich zu den Ergebnissen ohne Berücksichtigung von Stoßionisationen stärkere Gradienten des Verhältnisses zwischen Elektronen- und Ionendichte im Übergang zwischen ionisierter Tropfenfront und nicht-ionisiertem Tropfeninneren. Diese zusätzliche Ionisation ist auch anhand des mittleren Ionisationsgrades des Tropfens Z_m zu erkennen. Weiterhin muss gesagt werden, dass die Expansion der Tropfenfront ins Innere ohne Berücksichtigung von Stoßionisationen nur durch Feldionisation verursacht werden kann, da die Anzahl an ionisierten, beschleunigten Elektronen an der Tropfenfront dieses Volumen mit solch einer Elektronendichte nicht erklären kann.

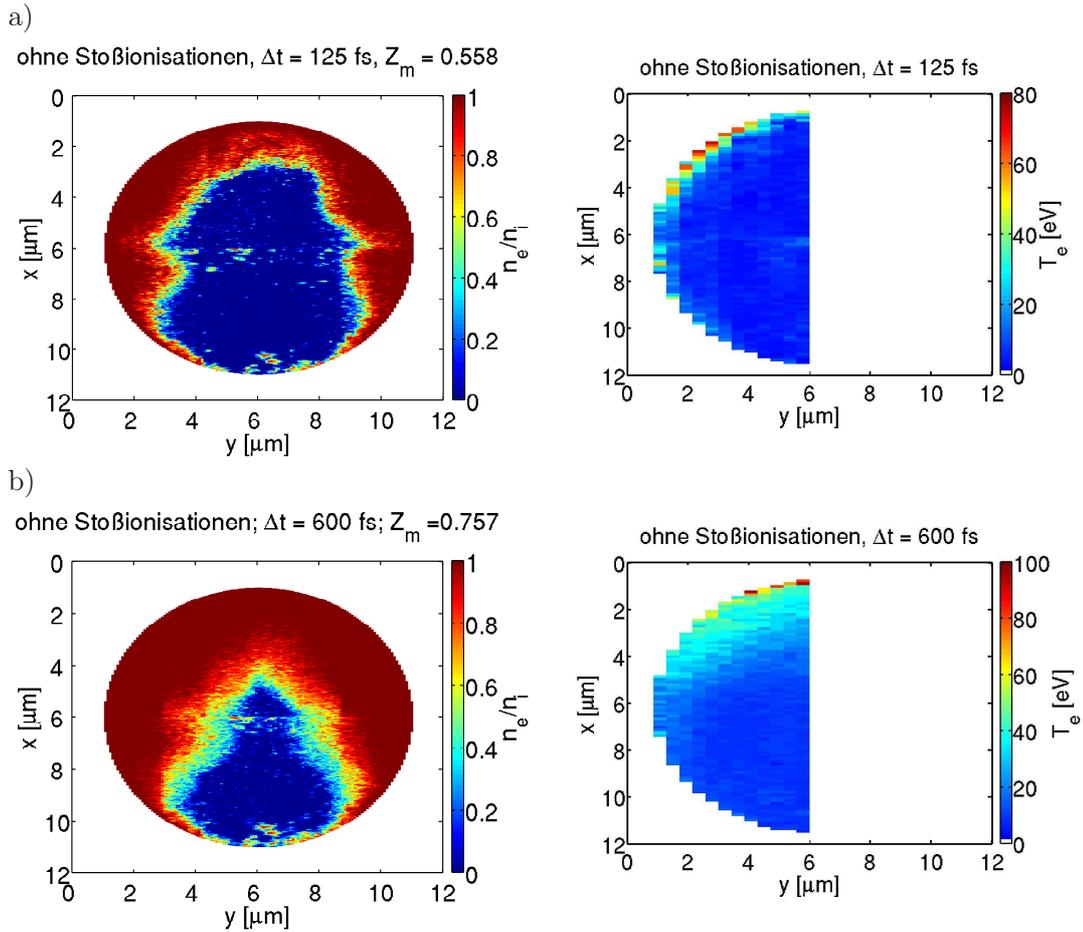


Abbildung 4.4: Profile des Verhältnisses zwischen Elektronen- und Ionendichte (links) und der Elektronentemperatur (rechts) eines laser-bestrahlten Wasserstofftropfens im Schnitt entlang der Laserpolarisationsebene für die Verzögerungszeiten von (a) $\Delta t = 125$ fs und (b) $\Delta t = 600$ fs zwischen Aufnahme der Profile und Durchgang des Laserpulsmaximums. Der Laser bestrahlt den Tropfen von oben. Z_m stellt den mittleren Ionisationsgrad des gesamten Tropfens dar.

Die benötigten Felder müssen durch die ins Innere beschleunigten Elektronen verursacht werden, die allerdings nicht in der Lage sind, solch hohe Felder zu erzeugen. Diese unphysikalische Ionisation kann entweder auf die bereits angesprochenen, an den Zellrändern künstlich erzeugten Felder aufgrund der Tropfengeometrie oder auf eine nicht ausreichende Auflösung des Problems zurückgeführt werden.

Aus den kinetischen Energien der Elektronen der PIC-Simulationen wurden die Elektronentemperaturen für die Annahme eines lokalen thermischen Gleichgewichts für Zeiten nach Abschalten des Lasers berechnet und sind in den Abbildungen 4.4 dargestellt. Um eine ausreichende Statistik für die Anpassung einer Maxwell-Boltzmannverteilung an die Geschwindigkeitsverteilung der PIC-Daten zu erreichen, sind die Elektronentemperaturen für den halben Tropfen auf einem reduzierten Gitter der Größe $50 \times 15 \times 1$ ermittelt

worden. Anhand der Temperaturen ist zu erkennen, dass sich kurz nach Abschalten des Lasers ein warmes Plasma mit einer Elektronentemperatur zwischen 30 eV und 80 eV an der Front ausbildet. Dieses Aufheizen erfolgt durch den Prozess der inversen Bremsstrahlung. Die dadurch aufgeheizten und damit beschleunigten Elektronen können ins Innere des Tropfens vordringen und verlieren durch elektromagnetische Wechselwirkungen mit anderen Elektronen und Ionen ihre Energie. Das ist in der Darstellung der Elektronentemperaturen bei einer Verzögerungszeit von 600 fs zu beobachten, in der eine ausgedehntere Front mit gleichmäßiger Elektronentemperatur um die 40 eV zu sehen ist. Damit konnten die Elektronendichte- und -temperaturprofile aus den PIC-Simulationen gewonnen werden und werden nachfolgend für die Berechnung der zugehörigen Thomsonstreuenspektren genutzt.

4.2 Kurzzeitkinetik von laser-induzierten Wasserstofftropfen

Aufgrund der Intensität des optischen Lasers mit $I \approx 10^{15}$ W/cm² ist nach Kapitel 3 die Untersuchung der Laser-Materie-Wechselwirkung mit Hilfe von Strahlungs-Hydrodynamik-Simulationen möglich. Dadurch können die Ergebnisse der obigen PIC-Simulationen mit Ergebnissen von Strahlungs-Hydrodynamik-Simulationen verglichen werden. Hier müssen für die Anpassung der Daten an das am FLASH durchgeführte Experiment die Tropfengröße auf $d = 8 \mu\text{m}$, die Laserenergie auf $E = 2$ mJ, der Pulsfokus auf $d_{\text{FWHM}} = 40 \mu\text{m}$ und die Pulsdauer auf $t_{\text{FWHM}} = 60$ fs geändert werden. Für diese Parameter sind in den Abbildungen 4.5 die Ergebnisse des eindimensionalen, kommerziellen Strahlungs-Hydrodynamik-Codes HELIOS [41] auf 200 Simulationszellen und eines im Rahmen dieser Arbeit [195] nach [196–198] angefertigten, zweidimensionalen Strahlungs-Hydrodynamik-Codes auf 100×100 Simulationszellen für Elektronendichte und -temperatur dargestellt. Dieser Strahlungs-Hydrodynamik-Code wurde für die Darstellung der Winkelabhängigkeit eines zwei-Temperaturensystems von Elektronen und Ionen angefertigt, da diese Eigenschaften durch zugängliche Strahlungs-Hydrodynamik-Codes wie HELIOS (eindimensional) oder MULTI2D [42] (Ein-Temperaturensystem) nicht gegeben, allerdings für die Auswertung von Experimenten am FLASH erforderlich sind. Um die Ergebnisse der beiden Codes für die Laser-Materie-Wechselwirkung für verschiedene Verzögerungszeiten zwischen Pumpen und Aufnahme des Profils zu vergleichen, ist in den Abbildungen 4.5 nur das eindimensionale Profil der Elektronendichten und -temperaturen entlang der Laserachse dargestellt.

In den Ergebnissen der Strahlungs-Hydrodynamik-Codes ist analog zu den Ergebnissen der PIC-Simulationen ein Aufheizen und Ionisieren der Front des Tropfens zu erkennen. Anschließend ist eine Ausdehnung der ionisierten und aufgeheizten Front ins Innere des Systems zu beobachten. Diese wird auch in den PIC-Simulationen beobachtet, dabei entspricht die Ausdehnung dieser Front in etwa der Ausdehnung des aufgeheizten Bereichs der PIC-Simulationen von etwa $1 \mu\text{m}$ bei einer Verzögerungszeit von etwa $\Delta t = 1$ ps. Der ionisierte Bereich ist allerdings bei den verschiedenen Simulationen nicht vergleichbar, da dieser aus den schon angesprochenen Gründen bei den PIC-Simulationen überschätzt wird.

Beim Vergleich der beiden Strahlungs-Hydrodynamik-Codes untereinander ist eine etwa gleich schnelle Expansion der Tropfenfront ins Innere des Plasmas zu erkennen. Dennoch gibt es für kurze Verzögerungszeiten unterhalb von 5 ps Unterschiede in der Elektronentemperatur. Die Elektronentemperatur wird für kleine Verzögerungszeiten vom HELIOS-Code als wesentlich höher als vom zweidimensionalen Code vorhergesagt, wes-

halb die nachfolgende Relaxation zwischen Elektronen- und Ionentemperatur zu einem wesentlich schnelleren Abfall der Elektronentemperaturen in der Front führt. Zu späteren Zeiten sind beim HELIOS-Code höhere Elektronentemperaturen zu beobachten. Speziell für Zeiten von $\Delta t = 1$ ps kann beim zweidimensionalen Strahlungs-Hydrodynamik-Code ein zu den PIC Simulationen ähnliches Ergebnis in der Elektronentemperatur beobachtet werden. Im Vergleich der Strahlungs-Hydrodynamik-Codes untereinander ist die Expansion des Plasmas ins Vakuum stark unterschiedlich. Zwar ist eine solch starke Expansion wie beim HELIOS-Code bei den PIC-Simulationen nicht zu sehen, dennoch ist bei dem zweidimensionalen Code kaum eine Expansion zu erkennen, was auf eine unterschiedliche Handhabung der Kontaktfront in den Randbedingungen aufgrund der Lagrangen Koordinaten zurückgeführt werden kann [89]. Hier muss für spätere Arbeiten die Randbedingung dieses Codes überarbeitet werden.

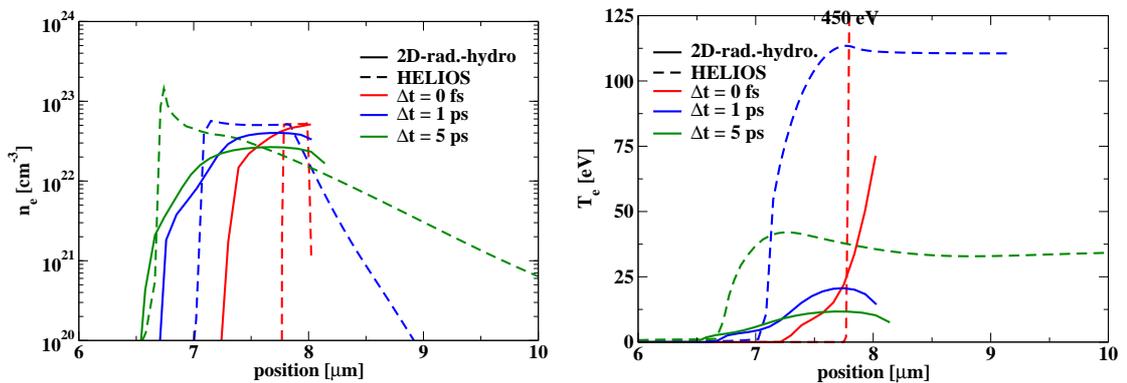


Abbildung 4.5: Darstellung der Elektronendichte und -temperatur in Abhängigkeit vom Ort einer eindimensionalen Schicht eines Wasserstofftropfens mit einem Durchmesser von $8 \mu\text{m}$ entlang der Laserachse im Zentrum des Laserfokuses. Die initiale Grenzsicht zwischen Tropfen und Vakuum befindet sich beim Ort $0 \mu\text{m}$ und $8 \mu\text{m}$. Der Tropfen wird von rechts bestrahlt, wobei hier nur die Front des Tropfens dargestellt ist. Illustriert sind die Ergebnisse des kommerziellen, eindimensionalen Strahlungs-Hydrodynamik-Codes HELIOS [41] und der entsprechenden Schicht aus einem im Rahmen dieser Arbeit entwickelten, zweidimensionalen Strahlungs-Hydrodynamik-Codes [195] (hier 2D-rad.-hydro.) für drei Verzögerungszeiten $\Delta t = 0$ fs, $\Delta t = 1$ ps und $\Delta t = 5$ ps.

In den Abbildungen 4.6 sind die zweidimensionalen Profile der Ionendichte, des Ionisationsgrades und der Elektronen- und Ionentemperatur des zweidimensionalen Strahlungs-Hydrodynamik-Codes für eine Verzögerungszeit von 1 ps und 10 ps dargestellt. Es ist zu erkennen, dass für kurze Verzögerungszeiten von $\Delta t = 1$ ps eine große Temperaturdifferenz zwischen Elektronen- und Ionensystem besteht. Diese verringert sich zu langen Verzögerungszeiten hin, sodass zu einer Verzögerungszeit von $\Delta t = 10$ ps ein nahezu relaxiertes System vorhanden ist. Zudem ist eine Expansion der Tropfenfront sowohl nach außen als auch nach innen zu beobachten. Diese Expansion führt zur Abkühlung der Tropfenfront, da kalte Bereiche im Inneren des Tropfens thermische Energie aus der Tropfenfront aufnimmt.

Damit ist es möglich, eine zweidimensionale, strahlungs-hydrodynamische Simulati-

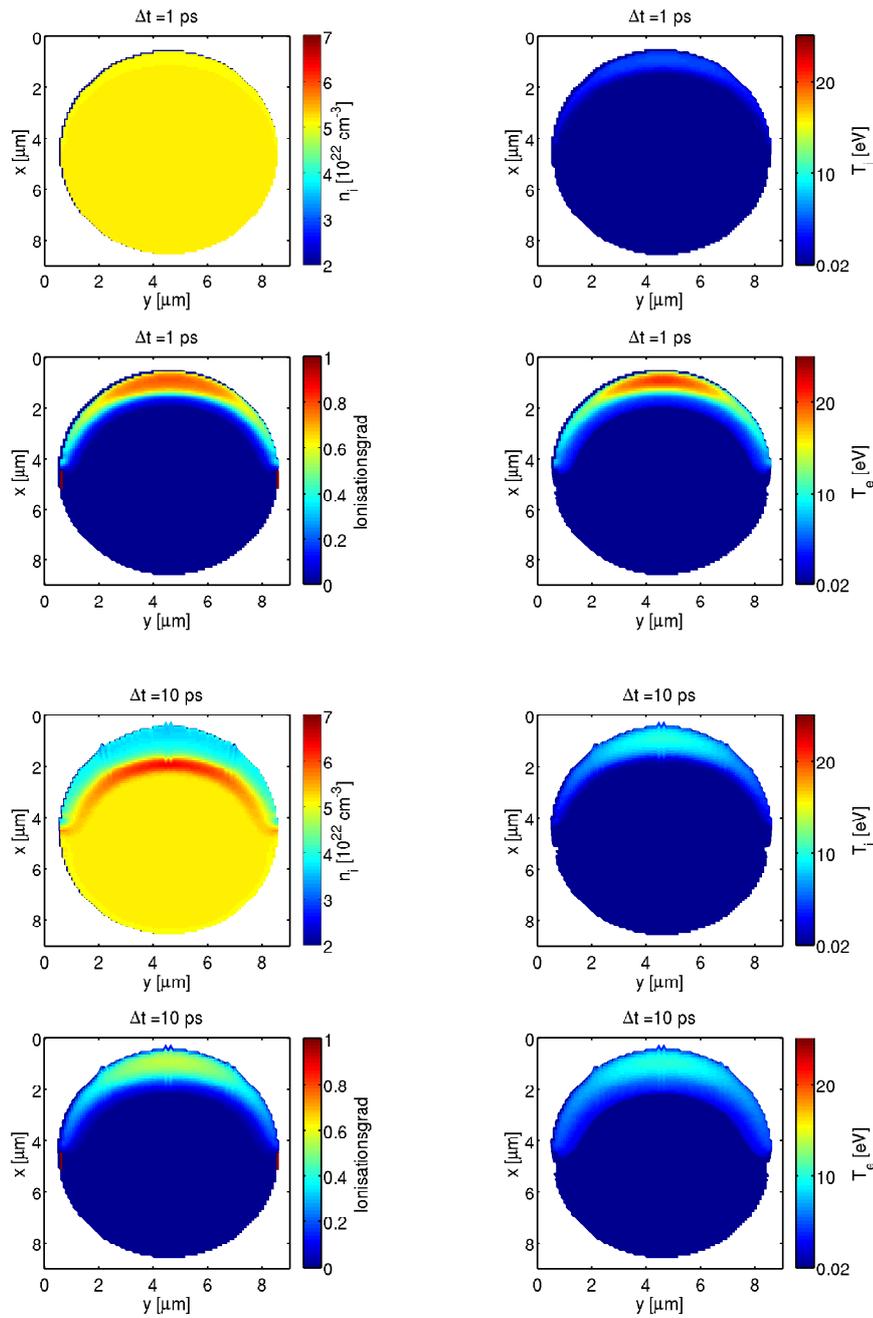


Abbildung 4.6: Illustration der Profile der Ionendichte n_i , des Ionisationsgrades, der Elektronen- T_e und Ionentemperatur T_i eines Wasserstofftropfens mit einem Durchmesser von $8 \mu\text{m}$ zu einer Verzögerungszeit von $\Delta t = 1 \text{ ps}$ und $\Delta t = 10 \text{ ps}$. Die Berechnungen wurden mit dem im Rahmen dieser Arbeit entwickelten, zweidimensionalen Strahlungs-Hydrodynamik-Code [195] berechnet. Der Tropfen wird von oben mit einem Laser bestrahlt.

on für ein Zwei-Temperatursystem auf der Pikosekunderskala durchzuführen. Diese Simulationen werden im übernächsten Abschnitt dazu benutzt, um auf der Pikosekundenzeitskala die Entwicklung des Thomsonstreusignals zu berechnen.

4.3 Thomsonstreuung an laser-induzierten Wasserstofftropfen

An dieser Stelle werden die Dichte- und Temperaturprofile der PIC-Simulationen des Abschnittes 4.1 dazu verwendet, um die Thomsonstreuspektren des betrachteten Wasserstofftropfens zu berechnen. Dazu wurde die Gleichung (2.75) aus Abschnitt 2 mit einer Instrumentenfunktion $G_{\omega_{\text{FWHM}}} = 1 \text{ eV}$ genutzt.

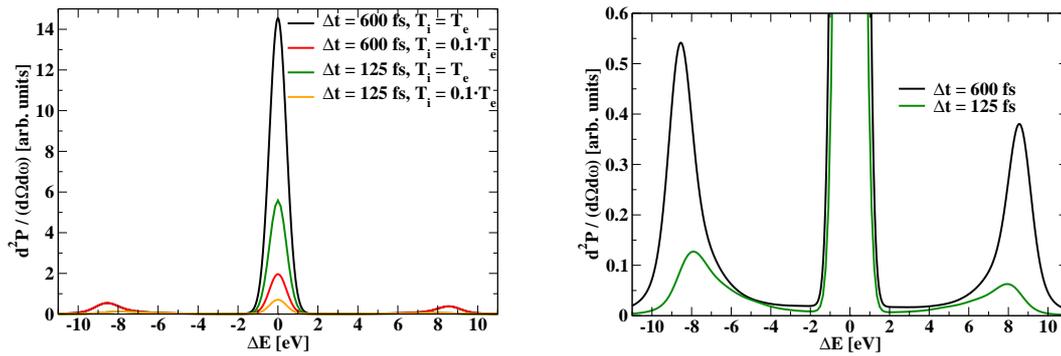


Abbildung 4.7: Illustration des Thomsonstreuspektrums in Abhängigkeit der Photonenenergieverschiebung ΔE für einen inhomogenen Wasserstofftropfen, der in den Abbildungen 4.2 und 4.4 dargestellt ist. Gezeigt sind die Thomsonstreuspektren für verschiedene Iontemperaturen und Verzögerungszeiten. Dabei ist links das gesamte Streuspektrum dargestellt, wohingegen auf der rechten Seite das Thomsonstreusignal der freien Elektronen für eine Iontemperatur $T_i = T_e$ vergrößert gezeigt ist.

In den Abbildungen 4.7 sind die gemittelten Thomsonstreuspektren des reduzierten Gitters von $50 \times 15 \times 1$ Zellen der Abbildung 4.4 unter der Annahme der Iontemperatur $T_i = T_e$ und $T_i = 0.1 \cdot T_e$ dargestellt. Dabei wurde eine Wellenlänge des Probe-Lasers von 13.5 nm verwendet, die durch den FLASH zur Verfügung gestellt werden kann. Die Daten wurden für einen Streuwinkel von $\theta = 90^\circ$ berechnet. Das Rayleighsignal wurde hier mittels der Debye-Hückel-Näherung (2.78) berechnet und zeigt, dass das Rayleighsignal stark von der Temperaturdifferenz zwischen Elektronen- und Ionensystem abhängt. Demnach steigt für sinkende Ionen-Elektronen-Temperaturdifferenzen das Rayleighsignal stark an. Dieser Effekt ist auch in der Darstellung des Strukturfaktors S_{ii} mit Hilfe der Debye-Hückel-Theorie und mit Hilfe von Zwei-Temperaturen-HyperNetted-Chain (2TH-NC) Rechnungen in Abbildung 4.8 zu sehen. Weiterhin beobachtet man einen Anstieg des Rayleighsignals mit der Zeit, da das Volumen der ionisierten und warmen Front und damit auch das Streuvolumen ansteigt.

Daneben ist in Abbildung 4.7 auch das Thomsonstreuspektrum der freien Elektronen vergrößert dargestellt. Da die Iontemperaturen auf dieses Spektrum keinen Einfluss haben, wurde in dieser Grafik die Iontemperaturabhängigkeit nicht mit dargestellt. Es ist zu beobachten, dass das Thomsonstreuspektrum der freien Elektronen für die betrachteten Verzögerungszeiten jeweils nur aus einem Plasmonenpaar besteht. Die Plasmapa-

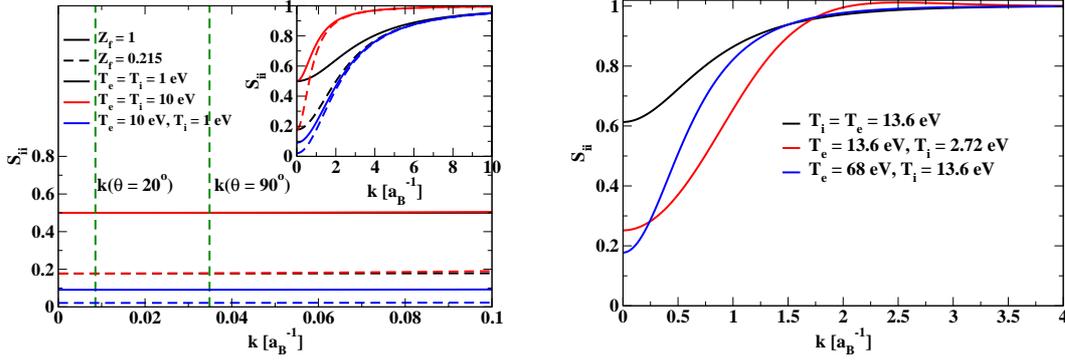


Abbildung 4.8: Darstellung des Strukturfaktors der Ionen S_{ii} in Abhängigkeit von der Wellenzahl k für verschiedene Temperaturen und Elektronendichten und der Ionendichte von $n_i = 5.1 \cdot 10^{22} \text{ cm}^{-3}$ in Debye-Hückel-Näherung (links). Rechts ist der Strukturfaktor S_{ii} in Abhängigkeit von der Wellenzahl k für die Ionendichte $n_i = 10^{23} \text{ cm}^{-3}$ und den Ionisationsgrad von $Z_f = 1$ mit dem 2THNC-Programm mit Deutsch-Potential von R. Bredow [127, 199] berechnet worden. Im Einsatz der Grafik (links) ist der Strukturfaktor für einen großen Wellenzahlbereich dargestellt, wohingegen die Grafik (links) den für diesen Versuchsaufbau relevanten Wellenzahlbereich auflöst.

parameter können aus diesen Plasmonen nach der Methode, die in Abschnitt 2.2.4 mit den Gleichungen (1.12) und (2.97) beschrieben wurde, extrahiert werden:

$$\begin{array}{l}
 t = 125 \text{ fs: } \left. \begin{array}{l} |\Delta E| = 7.9 \text{ eV} \\ n_e = 4.9 \cdot 10^{21} \text{ cm}^{-3} \\ T_e = 11.2 \text{ eV} \end{array} \right| \quad
 t = 600 \text{ fs: } \left. \begin{array}{l} |\Delta E| = 8.5 \text{ eV} \\ n_e = 5.1 \cdot 10^{22} \text{ cm}^{-3} \\ T_e = 24.2 \text{ eV} \end{array} \right.
 \end{array}$$

Demnach ist das am häufigsten vorkommende Plasma für beide Zeiten jeweils ein fast vollständig ionisiertes Plasma, dessen Elektronentemperatur mit der Zeit zunimmt. Die Elektronendichte nimmt aufgrund der Vergrößerung der vollständig ionisierten Front mit der Zeit zu. Das kann in Abbildung 4.4 beobachtet werden und trägt somit zu späteren Zeiten stärker als zu kleineren Zeiten zum Streuspektrum bei. Weiterhin ist zu berücksichtigen, dass in Abbildung 4.7 die Intensität des Streusignals der freien Elektronen zu späteren Zeiten stärker ist, da wie schon bei der Betrachtung des Rayleighsignals ein größeres Streuvolumen zu späteren Zeiten zur Verfügung steht. Das ist auch aus dem Anstieg des mittleren Ionisationsgrades des Tropfens Z_m ersichtlich. Damit konnte anhand eines Thomsonstreuungsspektrums die Dynamik eines laser-induzierten Wasserstofftropfens untersucht werden.

Die hier theoretisch ermittelten Plasmonenresonanzen im Thomsonstreuungsspektrum wurden im Pump-Probe-Experiment am FLASH nicht diagnostiziert, wodurch die hier gewonnenen Ergebnisse nicht verifiziert werden können. Der Grund für das Fehlen von Plasmonenresonanzen im gemessenen Thomsonstreuungsspektrum ist bisher nicht geklärt. Eine Hypothese besteht im starken Verlust von freien Elektronen während der Laser-Materie-Wechselwirkung, wodurch ein Plasma mit einer kleinen Elektronendichte Plasmonenresonanzen mit kleinen Energieverschiebungen liefern, die unter dem Rayleighsi-

gnal liegen. Allerdings könnte das Verhältnis zwischen Rayleigh- und Plasmonensignal im Thomsonstreuungsspektrum zu gering sein, um das Plasmonensignal durch die Detektoren im Experiment auflösen zu können.

4.4 Bestimmung der Relaxationszeit

In vergangenen Experimenten am FLASH wurde die Dynamik des Streusignals eines Wasserstofftropfens beobachtet. Hierbei wurden frequenzintegrierte Streusignale für verschiedene Verzögerungszeiten aufgenommen. Da in diesen Experimenten keine inelastischen Streusignale beobachtet wurden, wird sich hier ausschließlich auf die Betrachtung des Rayleighsignals beschränkt. Dieses Signal wurde hier mit Hilfe des 2THNC-Codes mit Deutsch-Potential von R. Bredow [127, 199] erzeugt. Dazu wurden die Profile der Abbildung 4.6 des oben vorgestellten Strahlungs-Hydrodynamik-Codes verwendet, um aus allen Simulationszellen den Strukturfaktor der Ionen durch die 2THNC Rechnungen zu ermitteln und aufzusummieren. Hierbei reicht es aus, den Strukturfaktor S_{ii} zu berechnen, da für die kleinen Wellenzahlen $k \approx 0.008 a_B^{-1}$ und $k \approx 0.034 a_B^{-1}$ für den Vorfaktor in der Chihara-Formel (2.77) $\lim_{k \rightarrow 0} |f + q| = Z = 1$ gilt (siehe Abschnitt 2.2.2). Dabei wurde die volle Gleichung (2.75) genutzt, womit auch die Absorption des eingestrahlenen Probe-Lasers und der gestreuten Strahlung berücksichtigt wurde. Die Ergebnisse sind in Abbildung 4.9 zu sehen.

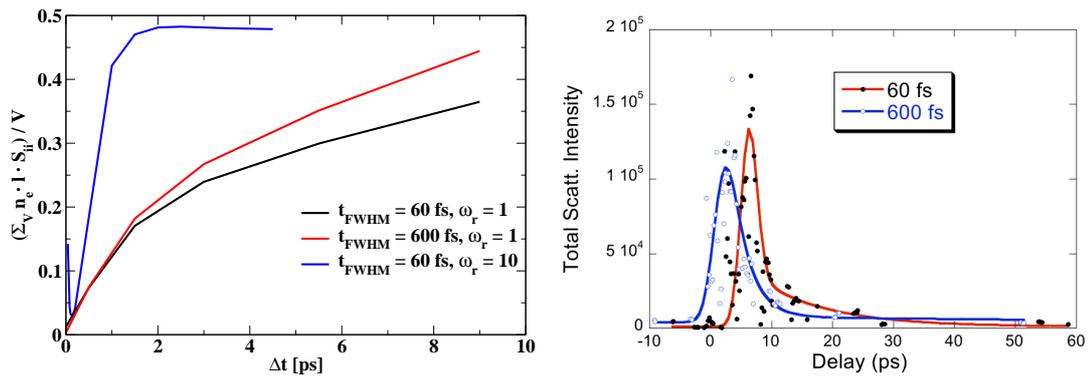


Abbildung 4.9: Darstellung des berechneten, gemittelten Strukturfaktors der Ionen des gesamten Tropfenvolumens (2.75) $V (\sum_V n_e \cdot l \cdot S_{ii}) / V$ (links) und der zugehörigen Messung [200] (rechts) in Abhängigkeit der Verzögerungszeit Δt zwischen Pump- und Probe-Laser für einen Streuwinkel $\theta = 90^\circ$. Hier sind Daten für zwei verschiedene Pulsdauern des optischen Lasers $t_{\text{FWHM}} = 60, 600 \text{ fs}$ gezeigt. Um die Abhängigkeit der Dynamik des Strukturfaktors vom Koeffizienten für Wärmetransport und Elektronen-Ionen-Energieaustausch zu zeigen, wurde der Coulomblogarithmus im Wärmetransportkoeffizient (3.64) und im Ion-Elektron-Energieaustausch (3.81) mit $\omega_r = 1, 10$ multipliziert.

Die Abbildung 4.9 zeigt sowohl das berechnete, als auch das experimentelle [200] zeitliche Verhalten des Rayleighsignals eines laser-induzierten Wasserstofftropfens. Im aus den Daten des Abschnittes 4.2 berechneten Verhalten des Rayleighsignals ist das Aufheizen des Tropfens im Anstieg des Signals zu beobachten, da der kalte Tropfen nur einen geringen, nahezu konstanten Streubeitrag liefert. Das Aufheizen des Elektronensystems

durch den Laser führt zu einer großen Differenz zwischen Elektronen- und Ionentemperatur (siehe Abbildung 4.6), wodurch nur ein kleiner Strukturfaktor S_{ii} , wie in Abschnitt 4.3 bereits gezeigt, während der Laserheizung beobachtet wird. Der in Abbildung 4.6 gezeigte Relaxationsprozess zwischen Ionen- und Elektronentemperatur verringert diese Differenz, womit das Rayleighsignal ansteigt und sein Maximum beim Angleich der Elektronen- und Ionentemperatur erreicht. Dieser Effekt des Anstiegs des Rayleighsignals für verschiedene Elektronen- und Ionentemperaturen kann in der Abbildung 4.8 überprüft werden. In Abbildung 4.8 ist das Rayleighsignal für verschiedene Elektronen- und Ionentemperaturen in Abhängigkeit von der Wellenzahl k dargestellt. Demnach ist für $k \rightarrow 0$ tatsächlich ein Maximum im Strukturfaktor der Ionen beim Angleich der Elektronen- und Ionentemperatur zu sehen. Anhand der Berechnung der Dynamik des Rayleighsignals für verschiedene Multiplikatoren ω_r in den Transportkoeffizienten für Wärmetransport und Elektronen-Ionen-Energieaustausch kann eine verschiedene Relaxationszeit zwischen Elektronen- und Ionensystem beobachtet werden. Demnach haben diese Koeffizienten direkte Auswirkungen auf das Streusignal, wobei hier Relaxationszeiten zwischen 1 ps und ≈ 10 ps zu beobachten sind. Für spätere Verzögerungszeiten Δt wird in Abbildung 4.9 in der Rechnung mit um $\omega_r = 10$ modifizierten Transporteigenschaften ein konstantes Streusignal beobachtet, da sich der Effekt des Abkühlens, der eine Verringerung des Rayleighsignals bewirkt, und der Vergrößerung des warmen Streuvolumens ausgleichen. Dieses Verhalten ist auch bei der Rechnung mit $\omega_r = 1$ zu erwarten, bei der zu $\Delta t = 10$ ps gerade der Angleich der Temperaturen von Elektronen- und Ionensystem vollzogen wurde. Rechnungen für größere Verzögerungszeiten müssen in weiterführenden Arbeiten erfolgen. Damit ist zu erkennen, dass der Anstieg des Streusignals stark von den Transportkoeffizienten abhängt.

Allerdings kann mit den in Abbildung 4.9 gezeigten Rechnungen weder das Abfallen des Rayleighsignals noch das unterschiedliche Verhalten des Rayleighsignals für unterschiedliche Pulsdauern erklärt werden. Weitere hier nicht gezeigte experimentelle Daten, in denen sich bei größeren Wasserstofftropfen von $d = 18 \mu\text{m}$ der Anstieg des Signals innerhalb von 1 ps vollzieht, kann nicht mit der Temperaturrelaxation zwischen Elektronen- und Ionensystem erklärt werden, da diese nicht von der Tropfengröße abhängen sollte. Die Messung von heißen, austretenden Ionen mit Energien von einigen keV während der Laser-Materie-Wechselwirkung und das Fehlen von Plasmonenresonanzen im gemessenen Thomsonstreupektrum erhärten die Vermutung, dass der Tropfen, anders als im Abschnitt 4.1 durch PIC-Simulationen berechnet, Ionen verliert. Unter dieser Vermutung werden die Elektronen so stark beschleunigt, dass diese den Tropfen verlassen können und dadurch nur ein stark verdünntes Plasma bilden, womit nur Plasmonenresonanzen mit kleinen Energieverschiebungen beobachtet werden können, die durch das Rayleighsignal überdeckt werden. Weiterhin werden die stark beschleunigten Elektronen durch Coulombanziehung Ionen aus dem Plasma beschleunigen, die im Experiment gemessen werden können. Damit würde der Anstieg ein Austreten der Elektronen aus dem Tropfen beschreiben, wobei der Abfall den Wiedereinfang und die Rekombination der Elektronen durch den Tropfen beschreibt. Diese Hypothese muss in weiterführenden Arbeiten untersucht werden.

5 Plasmadiagnostik von dichten Heliumtropfen

Als Vorschlag für ein mögliches Pump-Probe-Experiment am FLASH wurden Rechnungen zu flüssigen Heliumtropfen durchgeführt [43]. Für die Realisierung solch eines Pump-Probe-Experiments an Helium wird der PIC Code von T. Liseykina [40] verwendet, mit dessen Ergebnissen im Abschnitt 5.2 die Thomsonstreuenspektren berechnet werden. Um mindestens eine einfache Ionisation des Heliums, welches im Vergleich zu Wasserstoff eine höhere Ionisationsenergie besitzt, zu erreichen, wird zum Pumpen im Gegensatz zum vorherigen Kapitel 4 eine um drei Größenordnungen stärkere Laserintensität genutzt. Da Helium ebenfalls wie Wasserstoff ein sehr leichtes Element ist und Stoßionisationen nur einen sehr geringen Einfluss auf Wasserstoff hatten, werden hier Stoßionisationen vernachlässigt. Durchgeführte Rechnungen zu Pump-Probe-Experimenten an Helium, die hier nicht gezeigt werden, unterstützen diese Vernachlässigung.

Es werden im Folgenden Heliumtropfen mit einem Durchmesser von $d = 6.4 \mu\text{m}$ und einer Anfangsdichte $\rho = 0.145 \text{ g/cm}^3$ und -temperatur $T = 4 \text{ K}$ mit einem linear polarisierten optischen Laser der Wellenlänge $\lambda = 800 \text{ nm}$, der Energie $E = 3.2 \text{ mJ}$, der Pulsdauer $t_{\text{FWHM}} = 30 \text{ fs}$ und dem Pulsfokus $d_{\text{FWHM}} = 3 \mu\text{m}$ bestrahlt. Es ist zu beachten, dass die Laserintensität von $I \approx 10^{18} \text{ W/cm}^2$ drei Größenordnungen oberhalb der Laserintensität der Berechnungen des Pump-Probe-Experiments an Wassertropfen in Kapitel 4 liegt. Damit ist der Einfluss nicht-linearer Effekte der Laser-Plasma-Wechselwirkung größer.

5.1 Ultrakurzzeitkinetik von laser-induzierten Heliumtropfen

Für die Darstellung der Pump-Phase des Pump-Probe-Experiments an Helium wird die Laser-Materie-Wechselwirkung mittels PIC-Simulationen untersucht. Dazu wird eine Simulationsbox mit den Abmessungen $8 \times 8 \times 8 \mu\text{m}^3$ betrachtet und in $500 \times 500 \times 500$ Zellen aufgeteilt, die je 64 schwere Teilchen und bis zu 128 Elektronen enthalten. Es müssen also etwa 5 Milliarden Teilchen simuliert werden. Diese Simulation wurde auf dem JUROPA Supercomputer in Jülich auf 512 Kernen realisiert. Mit dem PIC Code [40] können Zeiten von bis zu $\Delta t = 440 \text{ fs}$ nach Eintreffen des Laserpulsmaximums durchgeführt werden, womit dann ein lokales thermisches Gleichgewicht gewährleistet und damit die entsprechende Temperatur berechnet werden kann.

In den Abbildungen 5.1 sind die Profile des Ionisationsgrades des Tropfens im Schnitt in der mittleren Ebene für die Zeiten $\Delta t = 10 \text{ fs}$, $\Delta t = 80 \text{ fs}$ und $\Delta t = 440 \text{ fs}$ nach Durchgang des Laserpulsmaximums dargestellt. Auf der linken Seite sind die Profile des Ionisationsgrades im Schnitt entlang der Polarisations Ebene des Pump-Lasers und auf der rechten Seite die Profile des Ionisationsgrades im Schnitt entlang der Ebene senkrecht zur Polarisations Ebene aufgetragen. Zur Verdeutlichung dieser Ebenen sei auf die Abbildung 4.1, deren Achsen sich mit den Achsen der Abbildungen 5.1 und 5.2 decken, verwiesen. Die Darstellungen zeigen das zeitliche Verhalten der Laser-Helium-Wechselwirkung bei einem von oben eintreffenden Laser. Zur Zeit $\Delta t = 10 \text{ fs}$ ist eine ionisierte Tropfenfront mit einer Elektronendichte $n_e = 2.2 \cdot 10^{22} \text{ cm}^{-3}$ zu beobachten, die oberhalb der kritischen Dichte des Lasers $n_{\text{cr}} \approx 1.8 \cdot 10^{22} \text{ cm}^{-3}$ liegt und somit undurchlässig für den Laser wird. Innerhalb dieser Front, die durch die Skintiefe des Lasers $l \approx c/\omega_{\text{pl},e} \approx 36 \text{ nm}$ gegeben ist, wird die gesamte Laserenergie absorbiert beziehungsweise reflektiert. Innerhalb dieser Schicht resultiert die Absorption und damit die Aufheizung der Elektronen aus dem Prozess der inversen Bremsstrahlung. Dennoch wird in der Laserpolarisationsebene ein fokussiertes Eindringen in den Tropfen beobachtet. Das geschieht unter einem Winkelbereich, un-

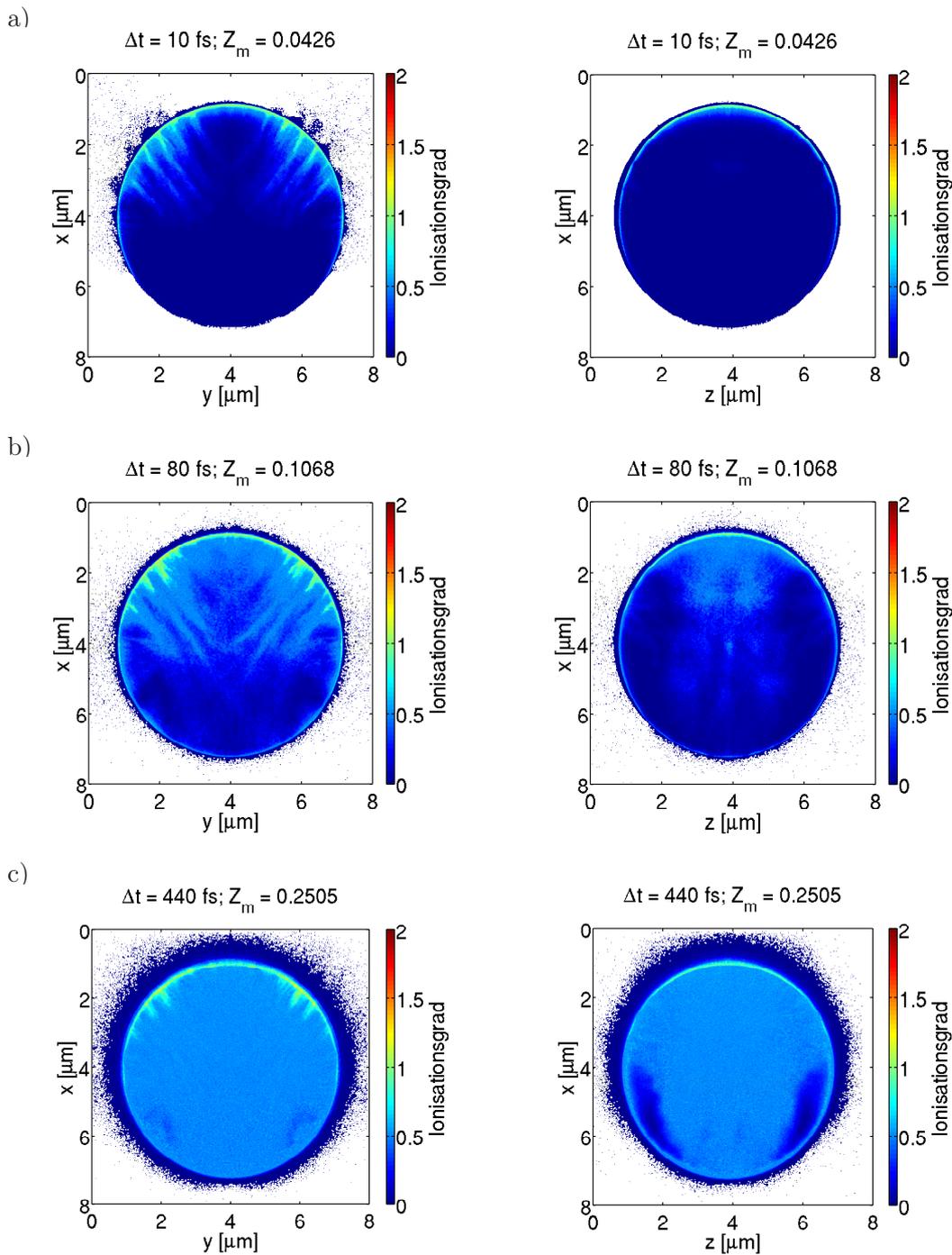


Abbildung 5.1: Profile des Ionisationsgrades im Schnitt entlang der Laserpolarisationsebene (links) und im Schnitt der Ebene senkrecht zur Laserpolarisationsebene (rechts) im Zentrum des Laserfokuses zu den Zeiten a) $\Delta t = 10 \text{ fs}$, b) $\Delta t = 80 \text{ fs}$ und c) $\Delta t = 440 \text{ fs}$ nachdem das Laserpulsmaximum den betrachteten Heliumtropfen bestrahlt. Der Laser bestrahlt den Tropfen von oben. Z_m stellt den mittleren Ionisationsgrad des gesamten Ziels dar.

ter dem radiale elektrische Felder an der Oberfläche in der Polarisationssebene durch die Mietheorie [201, 202] vorhergesagt werden. Dieser Prozess einer getriebenen Plasmawelle ins Tropfeninnere wurde in [88] untersucht, wobei hier vielmehr die Auswirkungen dieses Prozesses in den Thomsonstreuenspektren betrachtet werden. Damit ermöglicht dieser Effekt weitere Ionisationen im Inneren des Tropfens, was ansonsten nicht möglich wäre. Darüber hinaus ist in Abbildung 5.1 festzustellen, dass im Bereich der eindringenden Plasmawelle Ionen aus dem Tropfen herausgeschlagen werden. Der Grund dafür liegt in der starken Aufheizung des Plasmas und der damit resultierenden Oszillationen der Elektronen um die Ionen. An der Oberfläche können diese Elektronen aus dem Tropfen heraustreten und durch Coulombkräfte die Ionen mitreißen, was den Bruneffekt oder im Falle von nicht-linearen Oszillationen die $\mathbf{j} \times \mathbf{B}$ Heizung auszeichnet.

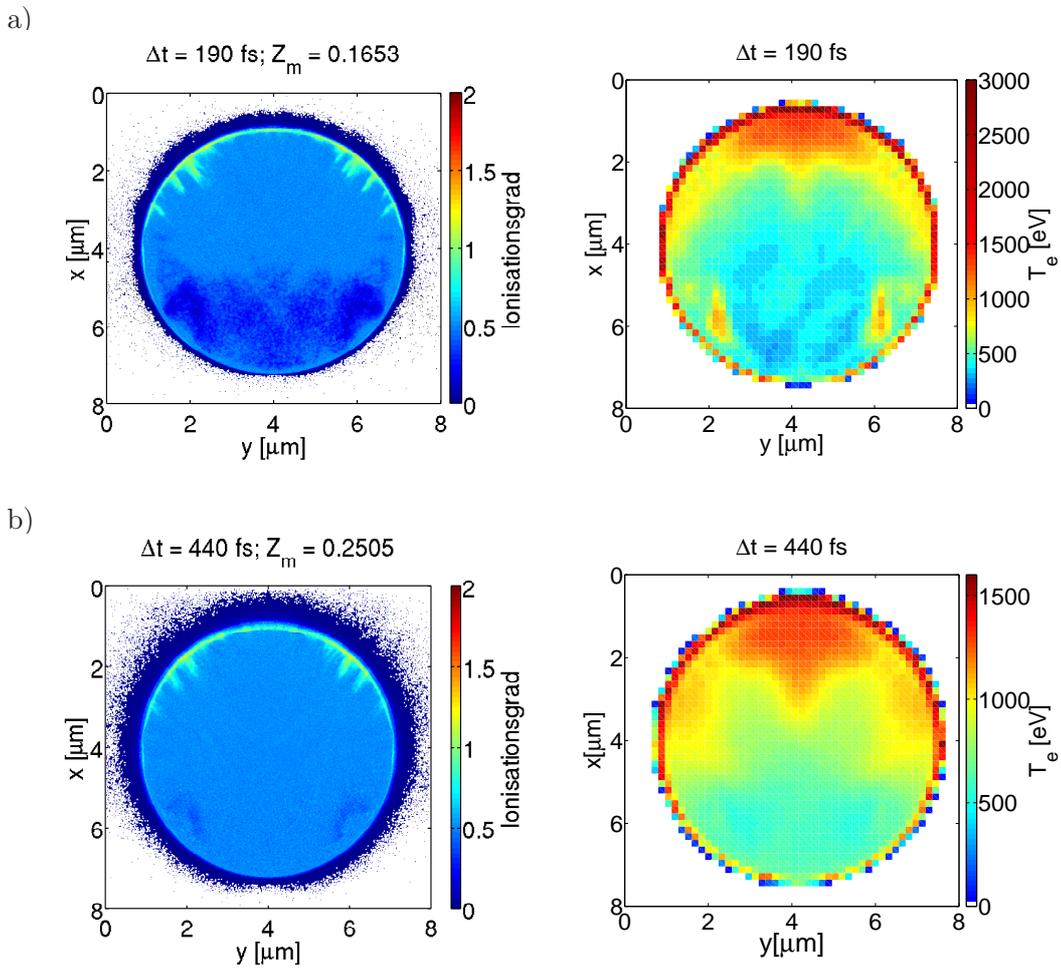


Abbildung 5.2: Profile des Ionisationsgrades (links) und der Elektronentemperaturen (rechts) im Schnitt entlang der Laserpolarisationsebene im Zentrum des Laserfokuses zu den Zeiten a) $\Delta t = 190 \text{ fs}$ und b) $\Delta t = 440 \text{ fs}$ nachdem das Laserpulsmaximum den betrachteten Heliumtropfen von oben bestrahlt. Z_m stellt den mittleren Ionisationsgrad des gesamten Tropfens dar.

Bei der dynamischen Betrachtung des Eindringens der Plasmawelle wird zur Zeit $\Delta t = 80$ fs ein voranschreitendes Eindringen dieser Plasmawelle beobachtet. Da die eindringende Plasmawelle durch den gesamten Tropfen propagiert und Feldionisationen durchführen kann, hinterlässt diese Welle bei einer Zeit von $\Delta t = 440$ fs im Inneren ein gleichmäßig ionisiertes Plasma. Dabei ist das durch die Plasmawelle ionisierte Innere weniger stark als die durch das Laserfeld ionisierte Front ionisiert. Das Voranschreiten der Ionisation kann aus dem mittleren Ionisationsgrad Z_m abgelesen werden, der stetig von 4% bis auf 25% ansteigt. Weiterhin ist anhand eines verdünnten Plasmas an der Plasmaoberfläche eine Expansion des Tropfens zu beobachten, welche durch aus dem Material entweichende Elektronen resultiert. Dieser Effekt ist das Resultat des Brunel-effekts oder im Falle von nicht-linearen Oszillationen der $\mathbf{j} \times \mathbf{B}$ Aufheizung. Damit wird nach der Laser-Plasma-Wechselwirkung vom Laser ein 0.6-fach ionisiertes Heliumplasma mit einer 1.3-fach ionisierten dünnen Tropfenfront hinterlassen.

In den Abbildungen 5.2 sind die Profile des Ionisationsgrades auf der linken Seite und die Profile der Elektronentemperaturen auf der rechten Seite für die Zeiten $\Delta t = 190$ fs und $\Delta t = 440$ fs gegenübergestellt. Hierbei wurden ausschließlich Zeiten von einigen 100 fs ausgewertet, um für die Extraktion der Elektronentemperaturen aus den kinetischen Energien der Elektronen ein lokales thermisches Gleichgewicht zu gewährleisten. Demnach ist bei einer Zeit von $\Delta t = 190$ fs eine heiße Tropfenfront von bis zu 3000 eV zu beobachten, deren Wärme in das Innere des Tropfens transportiert wird. Das kann durch warme Elektronen und Ionen realisiert werden, wobei das Innere des Plasmas dahingegen mit maximal 500 eV kühl ist. Bei der Betrachtung einer späteren Zeit von 440 fs ist eine Ausdehnung der heißen Tropfenfront ins Innere des Plasmas zu beobachten. Durch diesen Wärmetransport kühlt die Oberfläche auf maximal 1500 eV ab. Anhand der Ausdehnung der aufgeheizten Front ist zu erkennen, dass dieser Wärmetransport in einer Zeit von 250 fs eine Strecke von etwa $1 \mu\text{m}$ zurücklegt und damit eine Geschwindigkeit von $0.013 c$ besitzt. Da in dieser Simulation ausschließlich Feldionisationen berücksichtigt wurden, kann keine weitere Ionisation im Bereich des Wärmetransports beobachtet werden. Auch der in dieser Arbeit implementierte Prozess der Stoßionisation zeigte hier keine Auswirkungen, da zum einen die Elektronendichte sehr gering ist und zum anderen die oben abgeschätzte Elektronengeschwindigkeit mit $0.013 c$ nur knapp oberhalb der Geschwindigkeit von $0.01 c$ liegt, um die Ionisationsenergie von 24.6 eV aufzubringen. Damit besitzt der Prozess der Stoßionisation in diesem Beispiel nur eine geringe Bedeutung und wurde daher in diesem Abschnitt nicht aufgeführt. Nach der Laser-Materie-Wechselwirkung kann somit ein ionisiertes, warmes Tropfeninnere und eine ionisierte, heiße Tropfenfront beobachtet werden.

5.2 Thomsonstreuung an laser-induzierten Heliumtropfen

Im Abschnitt 5.1 wurde die Laser-Materie-Wechselwirkung zwischen einem intensiven Laserfeld und einem Heliumtropfen untersucht. Da die betrachtete Laserintensität von $I \approx 10^{18} \text{ W/cm}^2$ vorliegt, ist es nicht sinnvoll dieses Experiment mit einem Strahlungs-Hydrodynamik-Code zu simulieren. Daher werden die Ergebnisse der Abschnitte 5.1, die mittels PIC-Simulationen gewonnen wurden, in diesem Abschnitt für die Berechnung der entsprechenden Thomsonstreusignale benutzt. Um den Rechenaufwand zu begrenzen, wird das Simulationsgitter auf $50 \times 50 \times 50$ Simulationszellen, wie es bei der Berechnung der Elektronentemperaturen genutzt wurde, begrenzt. Innerhalb dieser Simulationszellen wird das Plasma als homogen betrachtet, woraus damit aus jeder Zelle das Thomson-

streusignal berechnet werden kann. Dazu wird die Thomsonstreuung eines Probe-Laser mit einer Wellenlänge von 13.5 nm, wie es der FLASH zur Verfügung stellen kann, unter einem Winkel von $\theta = 20^\circ$ und $\theta = 90^\circ$ untersucht.

In den Abbildungen 5.3 sind die Thomsonstreuenspektren des Heliumtropfens gegen die Laserenergieverschiebung ΔE aufgetragen. Diese Thomsonstreusignale charakterisieren das gewichtete Mittel der Thomsonstreusignale aller Simulationszellen über die Gleichung (2.75) mit einer Instrumentenfunktion $G_{\omega_{\text{FWHM}}} = 1$ eV. Dabei sind die Ergebnisse für einen Heliumtropfen nach einer Verzögerungszeit zwischen Pump- und Probe-Laserpulsmaximum von 190 fs und 440 fs für die Streuung unter einem Winkel von 20° und 90° dargestellt. Die verschiedenen Darstellungen lösen jeweils das Rayleighsignal, die nicht-kollektive, inelastische Thomsonstreuung an freien Elektronen und das kollektive, inelastische Streusignal an freien Elektronen auf.

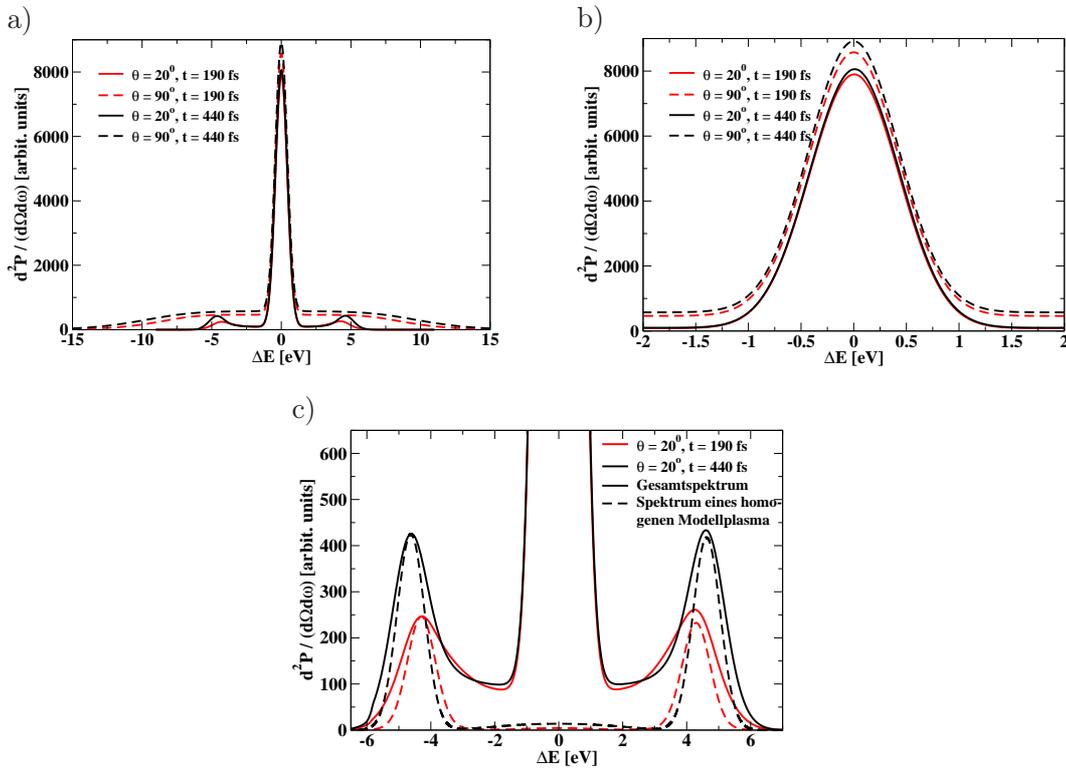


Abbildung 5.3: Darstellung der Thomsonstreuenspektren des inhomogenen Heliumtropfens in Abhängigkeit von der Laserenergieverschiebung ΔE für verschiedene Verzögerungszeiten und verschiedene Winkel für eine Laserwellenlänge von 13.5 nm. Die Ergebnisse sind hier in drei verschiedenen Auflösungen zur Darstellung (a) des gesamten Thomsonstreuenspektrums, (b) der Rayleighsignale und (c) der kollektiven Thomsonstreuung an freien Elektronen illustriert. In der Abbildung (c) ist zu Vergleichszwecken das Thomsonstreuenspektrum eines homogenen Plasmas mit den extrahierten Plasmamparametern aus der Thomsonstreuung am gesamten Tropfen dargestellt.

Bei der Darstellung des Thomsonstreuenspektrums der Abbildungen 5.3 a) ist zu erken-

nen, dass das Rayleighsignal um etwa einen Faktor 30 größer als das Thomsonstreusignal an freien Elektronen ist. Es wurde in diesen Rechnungen $T_e = T_i$ angenommen, wobei diese Annahme, wie aus Abschnitt 4.3 abgeleitet werden kann, bei den Verzögerungszeiten von maximal $\Delta t = 0.5$ ps nicht realistisch ist. Daher ist bei einem Nicht-Gleichgewicht zwischen Elektronen- und Iontemperatur ein weniger stark ausgeprägtes Rayleighsignal zu erwarten, wie es in der Abbildung 5.4 gezeigt ist. Hier wurde der Strukturfaktor der Ionen S_{ii} mit der Debye-Hückel-Näherung (2.78) berechnet, wobei bei den gegebenen Parametern die Wellenzahlen $k(\theta = 20^\circ) \approx 0.0086 \text{ a}_B^{-1}$ und $k(\theta = 90^\circ) \approx 0.035 \text{ a}_B^{-1}$ gegen 0 gehen und damit $|q(k) + f(k)|^2 \rightarrow Z^2$ gilt [17] (siehe Abschnitt 2.2.2). Diese Näherung ist für spezielle Beispiele in der Abbildung 5.4 gezeigt. Dort ist auch zu sehen, dass für kleine k der Strukturfaktor S_{ii} nahezu konstant ist und nur einen geringen Einfluss auf das Rayleighsignal unter den verschiedenen Streuwinkeln besitzt. Außerdem ist auch ein Unterschied der Rayleighsignale in den verschiedenen Verzögerungszeiten zu erkennen, auf den der mittlere Ionisationsgrad Z_m zurückgeführt werden kann, der von 16% bei einer Verzögerungszeit von 190 fs auf 25% bei einer Verzögerungszeit von 440 fs steigt. Dieser Anstieg resultiert aus dem Voranschreiten der Ionisationen im Tropfeninneren, wodurch ein größeres Streuvolumen entsteht, das einen Anstieg des Strukturfaktors S_{ii} zur Folge hat.

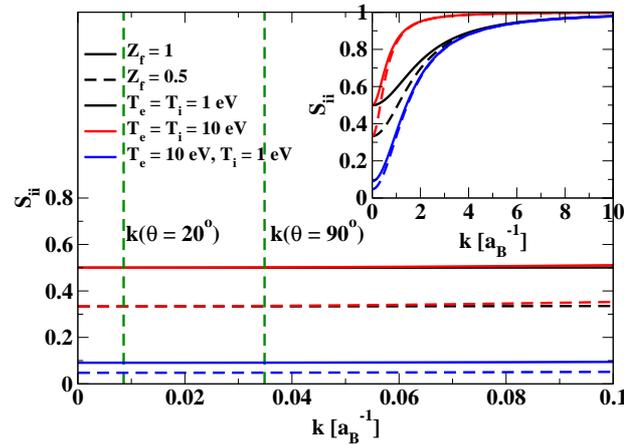


Abbildung 5.4: Illustration des Strukturfaktors der Ionen S_{ii} berechnet in der Debye-Hückel-Theorie in Abhängigkeit der Wellenzahl $k = k_i - k_f$ für verschiedene Plasmamparameter. Die grünen gestrichelten Linien markieren die Wellenzahlen des Experimentieraufbaus.

Weiterhin sind in der Abbildung 5.3 a) die Thomsonstreuspektren der freien Elektronen zu sehen. Bei der Thomsonstreuung unter 90° ist ausschließlich nicht-kollektive, inelastische Streuung zu beobachten, die keine Verschiebung in der Energie aufgrund der kleinen Comptonverschiebung (1.10) von maximal 0.03 eV aufweist. In der Abbildung 5.3 c) sind die kollektiven Thomsonstreusignale der freien Elektronen vergrößert dargestellt. Es ist zu bemerken, dass für die Streuung unter 90° keine kollektive Thomsonstreuung zu erkennen ist, wohingegen für 20° Plasmonen aufgelöst werden können und somit kollektive Thomsonstreuung beobachtet werden kann. Hier ist für jeweils eine Verzögerungszeit nur ein Plasmonenpaar zu erkennen, aus welchem folgende Plasmamparameter extrahiert werden können:

$$\begin{array}{l|l}
t = 190 \text{ fs: } & \begin{array}{l} |\Delta E| = 4.25 \text{ eV} \\ n_e = 1.3 \cdot 10^{22} \text{ cm}^{-3} \\ T_e = 75 \text{ eV} \end{array} & t = 440 \text{ fs: } & \begin{array}{l} |\Delta E| = 4.6 \text{ eV} \\ n_e = 1.4 \cdot 10^{22} \text{ cm}^{-3} \\ T_e = 260 \text{ eV.} \end{array}
\end{array}$$

Aus dem Auftreten nur eines Plasmonenpaares je Verzögerungszeit ist auf ein Plasma zu schließen, welches vorwiegend aus diesen Plasmaparametern zusammengesetzt ist und somit stark homogen ist. Zur Verdeutlichung der Inhomogenität des betrachteten Plasmas sind in der Abbildung 5.3 c) die Thomsonstreusignale eines homogenen Plasmas mit den obigen Plasmaparametern dargestellt, wobei diese auf die zugehörigen inhomogenen Streusignale normiert wurden. Anhand dieser Modellplasmen ist zu erkennen, dass das Thomsonstreusignal des Heliumtropfens im Vergleich zu den Modellplasmen verbreitert ist und speziell für kleine Energieverschiebungen wesentlich größere Beiträge zum Thomsonstreusignal liefert. Damit sind insbesondere Plasmen mit kleinerer Dichte und somit kleinen Energieverschiebungen in dem inhomogenen Thomsonstreusignal enthalten, werden allerdings vom Rayleighsignal überlagert.

Bei der Betrachtung der Plasmonenpaare und der zugehörigen Plasmaparameter ist zu erkennen, dass bei einer Verzögerungszeit von 190 fs das am häufigsten im Tropfen anzutreffende Plasma die Elektronendichte $n_e = 1.3 \cdot 10^{22} \text{ cm}^{-3}$ und die -temperatur $T_e = 75 \text{ eV}$ besitzt. Dieses Plasma verschiebt sich mit der Zeit zu einem Plasma höherer Elektronendichte von $n_e = 1.4 \cdot 10^{22} \text{ cm}^{-3}$, da sich das ionisierte Innere des Heliumtropfens nach den Abbildungen 5.2 mit der Zeit ausdehnt. Anhand dieser Abbildung ist auch zu sehen, dass die Elektronentemperatur in einem großen Teil des Tropfens zunimmt, wodurch auch die Elektronentemperatur des häufigste Plasmas auf $T_e = 260 \text{ eV}$ steigt. Damit kann das zeitliche Verhalten eines laser-induzierten Heliumtropfens anhand des Thomsonstreuspektrums beobachtet und untersucht werden.

Für eine weitere Auswertung des Streusignals in Abhängigkeit der Temperatur, wie sie in Kapitel 4 im Abschnitt 4.4 gemacht wurde, wurde für Helium nicht durchgeführt, da das experimentelle Zeitverhalten des Rayleighsignals für Wasserstoff noch nicht geklärt wurde. Wenn dieses experimentelle Zeitverhalten verstanden ist, können analoge Rechnungen auch für Helium durchgeführt werden, wobei aufgrund der hier verwendeten hohen Laserintensität für die Beschreibung der Laser-Plasma-Wechselwirkung nicht ausschließlich auf strahlungs-hydrodynamische Simulationen zurückgegriffen werden kann.

6 Plasmadiagnostik von dichten Kohlenstofffolien

In der Vergangenheit wurden Pump-Probe-Thomsonstreuexperimente am LCLS an Kohlenstofffolien durchgeführt, die ähnlich dazu auch für Experimente am FLASH vorgeschlagen wurden. Diese Experimente betrachten somit Pump-Probe-Experimente an einem Element, das schwerer als die zuvor betrachteten Elemente Wasserstoff und Helium ist. Daher könnten Stoßionisationseffekte interessant werden. Dazu werden im Abschnitt 6.1 Vergleiche zwischen PIC Simulationen mit und ohne Berücksichtigung von Stoßionisationen mit Hilfe des PIC-Codes VLPL3D [39] durchgeführt. Im Abschnitt 6.2 werden die dazugehörigen Thomsonstreuenspektren berechnet.

Im Folgenden wird ein Pump-Probe-Experiment betrachtet, in dem die Kohlenstoffolie der Dicke $d = 0.25 \mu\text{m}$ mit der Anfangsdichte $\rho = 2.26 \text{ g/cm}^3$ und -temperatur $T = 300 \text{ K}$ mit einem linear polarisierten, optischen Laser der Wellenlänge $\lambda = 800 \text{ nm}$, der Energie $E = 20 \text{ mJ}$, der Pulsdauer $t_{\text{FWHM}} = 100 \text{ fs}$ und mit dem Strahldurchmesser $d_{\text{FWHM}} = 16 \mu\text{m}$ bestrahlt wird. Anschließend wird das entstandene Kohlenstoffplasma mit Hilfe eines Lasers der Wellenlänge von 4.1 nm , die der FLASH zur Verfügung stellen kann, untersucht.

6.1 Ultrakurzzeitkinetik von laser-induzierten Kohlenstofffolien

In diesem Abschnitt wird mit Hilfe von PIC-Simulationen die Laser-Materie-Wechselwirkung der Kohlenstoffolie mit dem Pump-Laser untersucht. Deshalb wird diese Wechselwirkung nur bis zu 400 fs nach dem Laserpulsmaximum betrachtet. Innerhalb dieser Zeit ist die Wechselwirkung zwischen dem Laser und der Kohlenstoffolie abgeschlossen und es kommt nur noch zur hydrodynamischen Expansion und Rekombination auf Zeitskalen ab einigen Pikosekunden. Für die zu betrachtende Simulation wird eine Simulationsbox der Größe $2.4 \times 32 \times 32 \mu\text{m}^3$ betrachtet, die in $120 \times 1120 \times 1120$ Gitterzellen mit je 16 schweren Teilchen und bis zu 96 Elektronen unterteilt ist und insgesamt etwa 250 Millionen Teilchen beschreibt. Diese Simulation wurde auf dem JUROPA Supercomputer in Jülich auf 512 Kernen realisiert.

In den Abbildungen 6.1 wird das zweidimensionale Profil des Verhältnisses zwischen Elektronen- und Ionendichte der Folie im Schnitt entlang der Laserpolarisationsebene für die Verzögerungszeiten $\Delta t = -50 \text{ fs}$, $\Delta t = 100 \text{ fs}$, $\Delta t = 250 \text{ fs}$ und $\Delta t = 370 \text{ fs}$ zwischen Aufnahme der Profile und dem Laserpulsmaximum dargestellt. Diese drei Zeiten sind ausgewählt worden, da sie die Phase vor der Heizung durch das Laserpulsmaximum mit $\Delta t = -50 \text{ fs}$, die Phase am Ende der Lasereinstrahlung bei $\Delta t = 100 \text{ fs}$ und die Phase etwa 100 fs nach Ende des Laserpulses bei $\Delta t = 250 \text{ fs}$ darstellen. Auf der linken Seite der Abbildungen 6.1 sind die Ergebnisse für das Profil des Verhältnisses zwischen Elektronen- und Ionendichte ohne Berücksichtigung der Stoßionisationen und auf der rechten Seite mit Berücksichtigung der Stoßionisationen aufgeführt. Bei einer Zeit von $\Delta t = 350 \text{ fs}$ wurde ausschließlich die Simulation ohne Berücksichtigung von Stoßionisationen simuliert, um für diese Zeit zu zeigen, dass sich für mehrere 100 fs nach Durchgang des Laserpulses das Verhältnis zwischen Elektronen- und Ionendichte nicht gravierend ändert. Daher ist der Aufwand aufgrund der höheren Rechendauer für die Simulation dieses Szenarios unter Berücksichtigung von Stoßionisationen nicht gerechtfertigt.

Bei der Betrachtung der Simulationen ohne Berücksichtigung der Stoßionisationen in der Abbildungen 6.1 kann das dynamische Verhalten der Kohlenstoffolie unter dem Einfluss eines intensiven Lasers der Intensität $\approx 10^{17} \text{ W/cm}^2$ beobachtet werden. Demnach

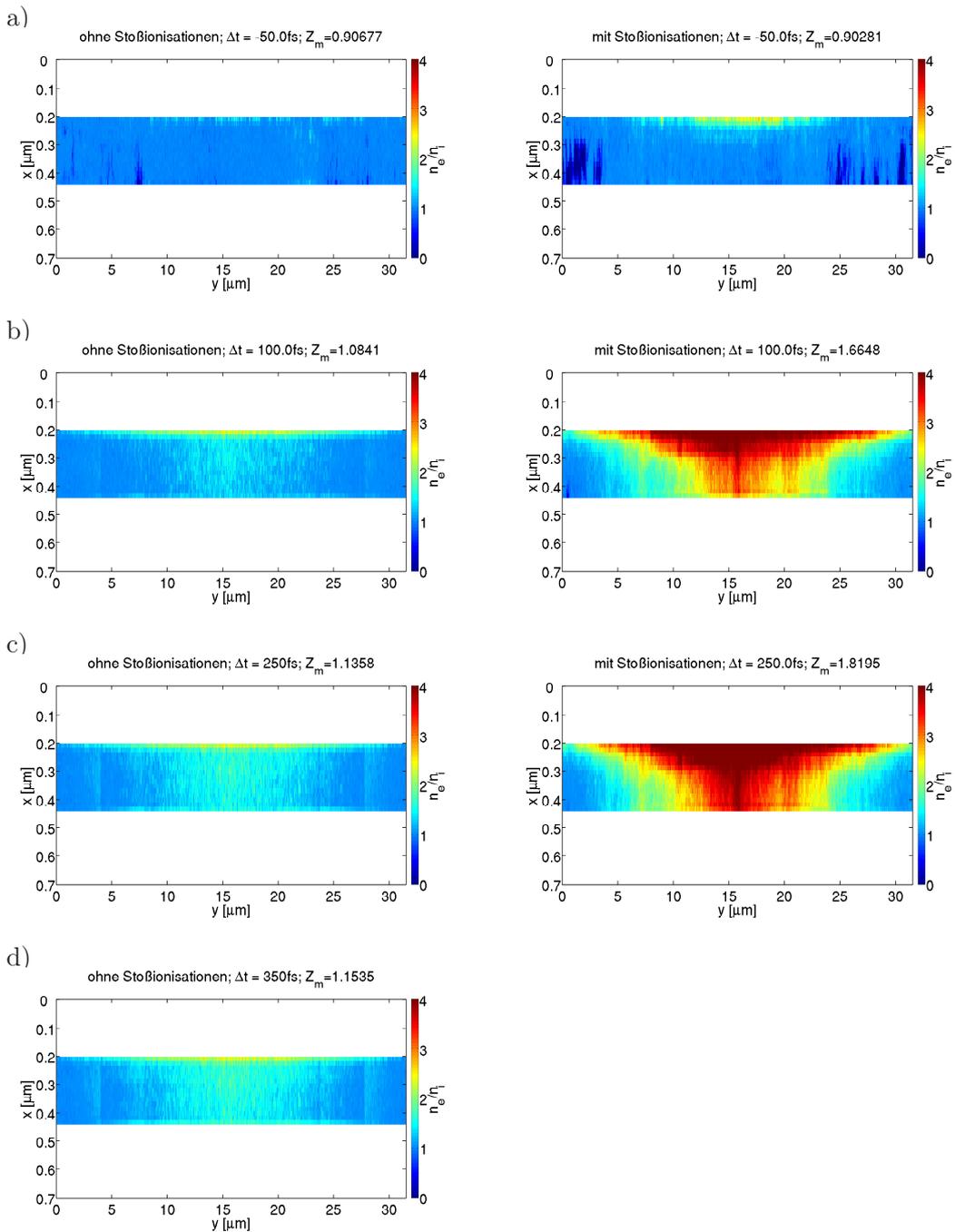


Abbildung 6.1: Profile des Verhältnisses zwischen Elektronen- und Ionendichte einer Kohlenstofffolie im Schnitt entlang der Laserpolarisationsebene zu einer Verzögerungszeit von a) $\Delta t = -50$ fs, b) $\Delta t = 100$ fs, c) $\Delta t = 250$ fs und d) $\Delta t = 350$ fs. Der Laser bestrahlt die Folie von oben. Verglichen sind PIC-Simulationen ohne Berücksichtigung (links) und mit Berücksichtigung (rechts) von Stoßionisationen. Z_m stellt den mittleren Ionisationsgrad des gesamten Ziels dar.

beeinflusst der Laserpuls bereits mit der ansteigenden Intensitätsflanke die Folie und ionisiert das Material einfach. Aufgrund des Fehlens der Laserabsorption durch Feldionisationen im VLPL3D Code ist eine gleichmäßige einfache Ionisation des Plasmas zu beobachten, hat aber keinen größeren Einfluss auf die restlichen Resultate. Damit steigt die freie Elektronendichte der Kohlenstoffolie von 0 cm^{-3} auf etwa 10^{23} cm^{-3} an und wird damit optisch dicht, da die kritische Dichte $n_{cr} \approx 1.74 \cdot 10^{21} \text{ cm}^{-3}$ des verwendeten Lasers wesentlich kleiner als die Elektronendichte der Kohlenstoffolie ist. Dadurch wird der größte Teil der Strahlung des einkommenden Lasers innerhalb der Skintiefe $l_s \approx c/\omega_{pl,e} \approx 20 \text{ nm}$ durch den Prozess der inversen Bremsstrahlung absorbiert, wodurch die Elektronen an Temperatur gewinnen. Der restliche Teil der Strahlung wird reflektiert oder gestreut. Damit ist die Laser-Materie-Wechselwirkung auf den Bereich der Skintiefe beschränkt. Diese Vorhersage ist in den Abbildung 6.1 der linken Seite ohne Berücksichtigung von Stoßionisation zu beobachten. Dort ist zu erkennen, dass das Material ausschließlich an der Oberfläche der Folie stärker als einfach ionisiert wird. Die freigesetzten Elektronen werden durch den Effekt der inversen Bremsstrahlung beschleunigt und können in das Innere der Materie vordringen. Das ist an dem erhöhten Verhältnis zwischen Elektronen- und Ionendichte im Inneren der Folie zu erkennen, welches sich erst nach einer Zeit von etwa 100 fs nach Durchgang des Laserpulsmaximums ausbildet. Diese kennzeichnet nicht eine erhöhte Ionisation im Bereich von zwei, sondern charakterisiert eine erhöhte Zahl von beschleunigten Elektronen, die aus der aufgeheizten Front ins Innere der Materie vordringen können. Aufgrund des Fehlens der Stoßionisation können diese beschleunigten Elektronen ihre Energie nicht durch Ionisationsprozesse abgeben und können somit kein ausgedehntes Plasma erzeugen. Das kann auch am nur langsam ansteigenden mittleren Ionisationsgrad der gesamten Folie Z_m beobachtet werden. Deshalb ist nach dem Durchgang des Laserpulses bei $\Delta t = 100 \text{ fs}$ keine Steigerung dieses Parameters zu erkennen, da die Oberfläche nicht weiter durch den Laser ionisiert wird und das Innere der Folie nicht durch Stoßionisationen beeinflusst werden kann.

Wenn im Gegensatz dazu die rechte Seite der Abbildungen 6.1 betrachtet wird, ist ein starker Unterschied im Profil des Verhältnisses zwischen Elektronen- und Ionendichte und somit auch im mittleren Ionisationsgrad Z_m zwischen den PIC-Simulationen mit und ohne Berücksichtigung der Stoßionisationen zu beobachten. Bei Zeiten von $\Delta t = -50 \text{ fs}$ vor Eintreffen des Laserpulsmaximums ist im Vergleich zu Simulationen ohne Berücksichtigung der Stoßionisationen bereits eine deutlich ausgedehntere Oberfläche mit höherer Ionisation zu beobachten. Dieser Effekt wird deutlicher, wenn der Laser bei Zeiten von $\Delta t = 100 \text{ fs}$ bereits eine große Anzahl von Elektronen beschleunigt hat, die bereits ins Innere des Plasmas vorgedrungen sind. Dann können auch im Inneren der Kohlenstoffolie Ionisationen auftreten, was durch das wesentlich größere Verhältnis zwischen Ionen- und Elektronendichte zu beobachten ist. Dieser Prozess setzt sich zu späteren Zeiten fort, wobei die Elektronen durch die Stoßionisationsprozesse ihre kinetische Energie verlieren und dann keine weiteren Ionisationsprozesse ausführen können. Deshalb kommen diese Ionisationsprozesse bei späteren Zeiten zum Erliegen und die Dynamik beschränkt sich dann wie bei den Simulationen ohne Berücksichtigung von Stoßionisationen auf die hydrodynamische Expansion und Rekombination, wodurch in den Zeitskalen von einigen 100 fs kaum eine Änderung der Plasmaparameter zu beobachten ist. Wenn man den mittleren Ionisationsgrad der Folie Z_m betrachtet, ist sofort zu erkennen, dass im Gegensatz zu den Simulationen ohne Berücksichtigung von Stoßionisationen unter Berücksichtigung von Stoßionisationen eine wesentlich größere Ionisation des Plasmas zu

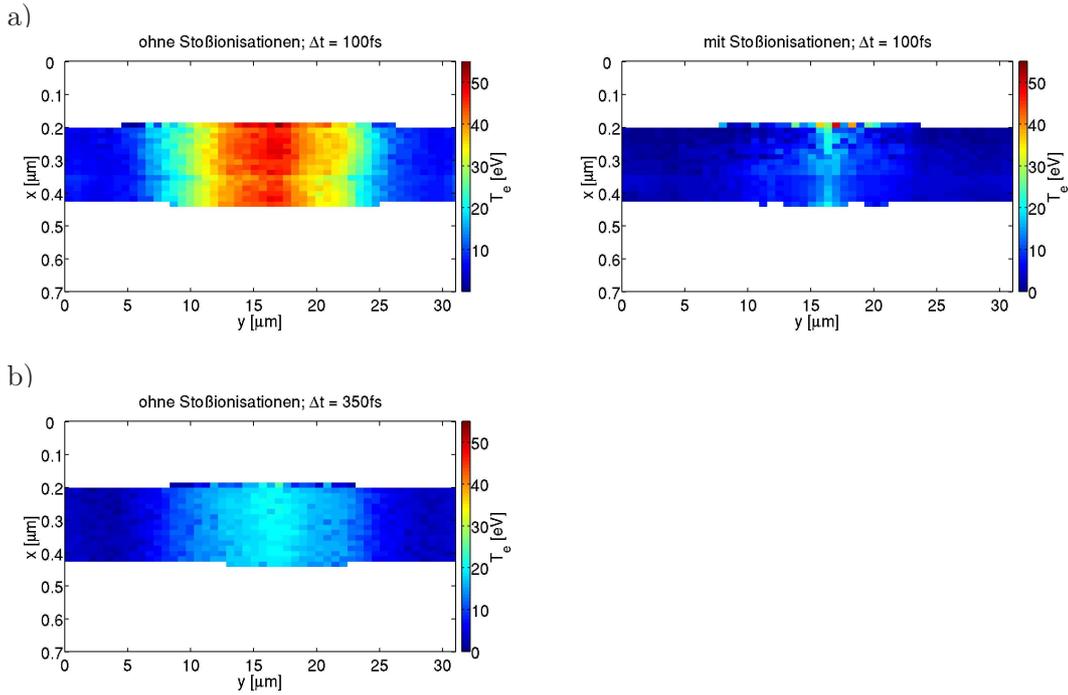


Abbildung 6.2: Profile der Elektronentemperatur im Schnitt entlang der Laserpolarisationsebene zu einer Verzögerungszeit von a) $\Delta t = 100$ fs und b) $\Delta t = 350$ fs. Der Laser bestrahlt die Folie von oben. Verglichen sind PIC-Simulationen ohne Berücksichtigung (links) und mit Berücksichtigung (rechts) von Stoßionisationen.

erwarten ist. Dabei setzt der Einfluss der Stoßionisationen erst zwischen -50 fs und 100 fs in der Verzögerungszeit ein, da erst danach der mittlere Ionisationsgrad der Folie Z_m stark ansteigt. Dann kann ein bis zu 65% größerer mittlerer Ionisationsgrad bei den Simulationen unter Berücksichtigung der Stoßionisationen beobachtet werden.

Für die Betrachtung der kinetischen Energien der Elektronen sind in den Abbildungen 6.2 die zweidimensionalen Profile der Elektronentemperaturen der Kohlenstofffolie im Schnitt entlang der Polarisationssebene für die Verzögerungszeit von $\Delta t = 100$ fs zwischen Aufnahme der Profile und Laserpulsmaximum aufgetragen. Diese wurden auf einem reduzierten Gitter mit $16 \times 50 \times 50$ Zellen berechnet. Aufgrund der enormen Datenmenge der kinetischen Energien aller $16 \times 800 \times 800 \times 64$ Elektronen, ist die Speicherung dieser Daten sehr aufwendig. Deshalb ist ausschließlich für eine Zeit der Vergleich zwischen den Simulationen unter Berücksichtigung und ohne Berücksichtigung der Stoßionisationen dargestellt. Für spätere Zeiten ist, wie oben bereits erwähnt, der Rechenaufwand unter Berücksichtigung der Stoßionisationen nicht gerechtfertigt.

Auf der linken Seite der Abbildungen 6.2 ist die Elektronentemperatur ohne Berücksichtigung der Stoßionisationen für zwei Zeiten aufgetragen. Für kurze Zeiten ist ein gaußförmiges Profil mit einer “Full Width at Half Maximum” (FWHM) von etwa $\approx 6 \mu\text{m}$ zu beobachten, was das Gaußprofil des eingestrahelten Lasers widerspiegelt. Weiterhin ist zu sehen, dass die Elektronentemperatur auf der Laserachse auf der gesamten Dicke der Folie konstant ist. Dieser Effekt ist daraus begründet, dass die Elektronen an der Ober-

fläche der Folie durch den Prozess der inversen Bremsstrahlung kinetische Energie aus dem Laserfeld aufnehmen und aufgeheizt werden. Diese beschleunigten Elektronen bewegen sich ins Innere der Materie, wodurch auch im Inneren hohe Elektronentemperaturen von bis zu 55 eV entstehen können. Wenn die Dynamik der Elektronentemperaturen in der Abbildung 6.2 betrachtet wird, wird ein starker Abfall von maximal 55 eV bei $\Delta t = 100$ fs auf maximal 25 eV bei $\Delta t = 350$ fs beobachtet. Der Grund dafür ist die elektromagnetische Wechselwirkung mit den Ionen, wodurch die Elektronen Energie an diese abgeben.

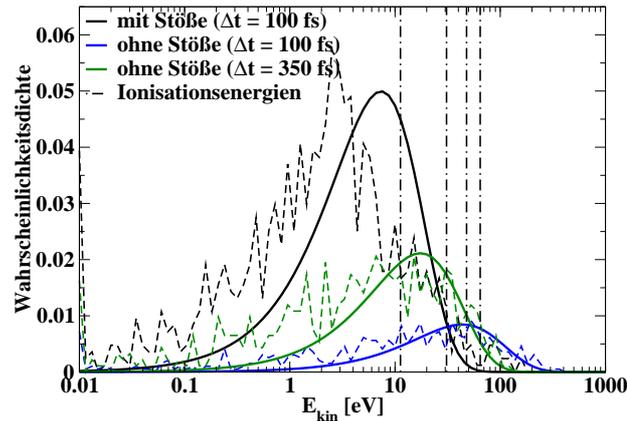


Abbildung 6.3: Darstellung der Wahrscheinlichkeitsdichte in Abhängigkeit der kinetischen Energie der Elektronen für die Verzögerungszeiten $\Delta t = 100$ fs und $\Delta t = 350$ fs zwischen Aufnahme der Energien und Laserpulsmaximum in der Simulationszelle bei $x = 22 \mu\text{m}$ und $y = 0.36 \mu\text{m}$ in den Abbildungen 6.2. Dabei ist die Wahrscheinlichkeitsdichte der Simulationen (gestrichelte Kurve) und die entsprechende Anpassung durch eine Maxwell-Boltzmannverteilung (durchgezogene Kurve) dargestellt, anhand derer die Elektronentemperatur berechnet werden. Zur Übersicht sind die Ionisationsenergie der ersten vier Ionisationsstufen von Kohlenstoff eingezeichnet (punkt-gestrichelte Linie).

Im Vergleich zu den Simulationen unter Berücksichtigung der Stoßionisationen ist bei den Simulationen ohne Berücksichtigung der Stoßionisationen eine wesentlich größere Elektronentemperatur zu beobachten. Das ist zu verstehen, wenn man den Stoßionisationsprozess betrachtet. Aufgrund der Ionisation von gebundenen Elektronen müssen die freien Elektronen die Bindungsenergie dieser gebundenen Elektronen aufbringen. Das erfolgt durch den Verlust von kinetischer Energie der freien Elektronen. Daher werden die Elektronen zum einen entschleunigt und zum anderen können sie dadurch auch ihre Temperatur verlieren, was in Abbildung 6.3 zu sehen ist und im nächsten Absatz erläutert wird. Aus diesem Grund ist auch die Temperatur an der Oberfläche lokalisiert, da hier die aufgeheizten Elektronen aufgrund ihrer kinetischen Energie unterhalb der Ionisationsenergie der s-Schalen Elektronen des Kohlenstoffs ihre Energie nicht durch Stöße abgeben können. Dahingegen konnten die aufgeheizten Elektronen das Innere weiter ionisieren, wodurch diese ihre kinetische Energie und somit auch ihre Temperatur abgeben konnten.

In Abbildung 6.3 sind für die drei Temperaturprofile der Abbildung 6.2 in einer charakteristischen Simulationszelle mit den Koordinaten $x = 0.36 \mu\text{m}$ und $y = 22 \mu\text{m}$ die Energieverteilung der Elektronen, die sich aus der Simulation ergeben, und die Anpassung der Maxwell-Boltzmannverteilung dargestellt. Dabei ist die Breite und das Maximum der Maxwell-Boltzmannverteilung von der Elektronentemperatur abhängig und kann daher daraus extrahiert werden. In den Abbildung 6.3 ist zu beobachten, dass die Elektronentemperaturen bei der Simulation unter Berücksichtigung der Stoßionisationen am geringsten ist. Zudem ist eine Elektronentemperaturabnahme mit zunehmender Verzögerungszeit Δt zu sehen. Das deckt sich mit den Beobachtungen der Abbildung 6.2. Die Gründe dieses Verhaltens wurden bereits in den vorherigen Absätzen erläutert.

Weiterhin ist in der Abbildung 6.2 zu sehen, dass die Abweichung zwischen Maxwell-Boltzmannverteilung und Energieverteilungen unter Berücksichtigung der Stoßionisationen eine große Abweichung vorhanden ist. Diese Abweichung ist bei den Simulationen ohne Berücksichtigung der Stoßionisationen eher gering. Daher kann in diesem Fall von einem Plasma im Gleichgewicht gesprochen werden. Die Abweichung für den Fall mit Berücksichtigung der Stoßionisationen kann durch den Prozess der Stoßionisationen selbst verstanden werden. Aufgrund von Stoßionisationen verlieren die Elektronen ihre kinetische Energie durch Ionisationsenergie. Dieser Effekt ist nach Kapitel 3 ein statistischer Effekt, so dass nicht alle Elektronen mit Sicherheit ihre Energie verlieren können. Damit können nur Elektronen mit einer kinetischen Energie oberhalb der minimalen Ionisationsenergie von Kohlenstoff 11.26 eV ihre Energie verlieren. Deshalb ist eine Verschiebung des Maximums der Energieverteilung der Elektronen zu Energien unterhalb der Ionisationsenergie von 11.26 eV zu beobachten. Dadurch wird das System zum einen kälter, zum anderen entsteht durch den nicht vollständigen Verlust von kinetischer Energie ein Nicht-Gleichgewicht, da das Energiespektrum der Elektronen nicht durch eine Maxwell-Boltzmannverteilung gegeben ist.

Damit konnte das Verhalten von Kohlenstoff unter Einstrahlung eines starken Laserfeldes untersucht und darüber hinaus der Einfluss von Stoßionisationen verstanden werden.

6.2 Thomsonstreuung an laser-induzierten Kohlenstofffolien

In diesem Abschnitt wird aus den Dichte- und Temperaturprofilen des reduzierten Gitters von $16 \times 50 \times 50$, die im vorherigen Abschnitt aus PIC-Simulationen simuliert wurden, die nach der Gleichung (2.75) gewichteten Thomsonstreuenspektren der gesamten Kohlenstofffolie berechnet. Dazu wird für den Probe-Laser eine am FLASH mögliche Wellenlänge von 4.1 nm angenommen. Um für den Dichtebereich von Kohlenstoff $n_e > 10^{23} \text{ W/cm}^2$ eine nach Gleichung (1.11) kollektive Streuung zu beobachten, wird das Streuspektrum unter einem Winkel von $\theta = 160^\circ$ betrachtet.

In Abbildung 6.4 sind die berechneten Spektren der gesamten Folie für die Verzögerungszeiten zwischen Durchgang des Laserpulsmaximums und Aufnahme der Spektren von $\Delta t = 100 \text{ fs}$ und $\Delta t = 350 \text{ fs}$ dargestellt. Diese Spektren wurden ohne Berücksichtigung von Stoßionisationen und für $\Delta t = 100 \text{ fs}$ mit Berücksichtigung der Stoßionisationen berechnet. Es ist hier sowohl die Rayleighstreuung als auch die Thomsonstreuung zu beobachten. Darüber hinaus ist im Gegensatz zu den Spektren von Wasserstoff und Helium auch Ramanstreuung zu sehen, da bei Kohlenstoff geringere Ionisationsenergien und höhere Elektronendichten vorhanden sind. Im Gegensatz zu dem Spektrum ohne Berücksichtigung von Stoßionisationen bei $\Delta t = 100 \text{ fs}$ sollte aufgrund des höher ionisierten Plasmas bei Berücksichtigung von Stoßionisationen eine Anregung höherer Ionisati-

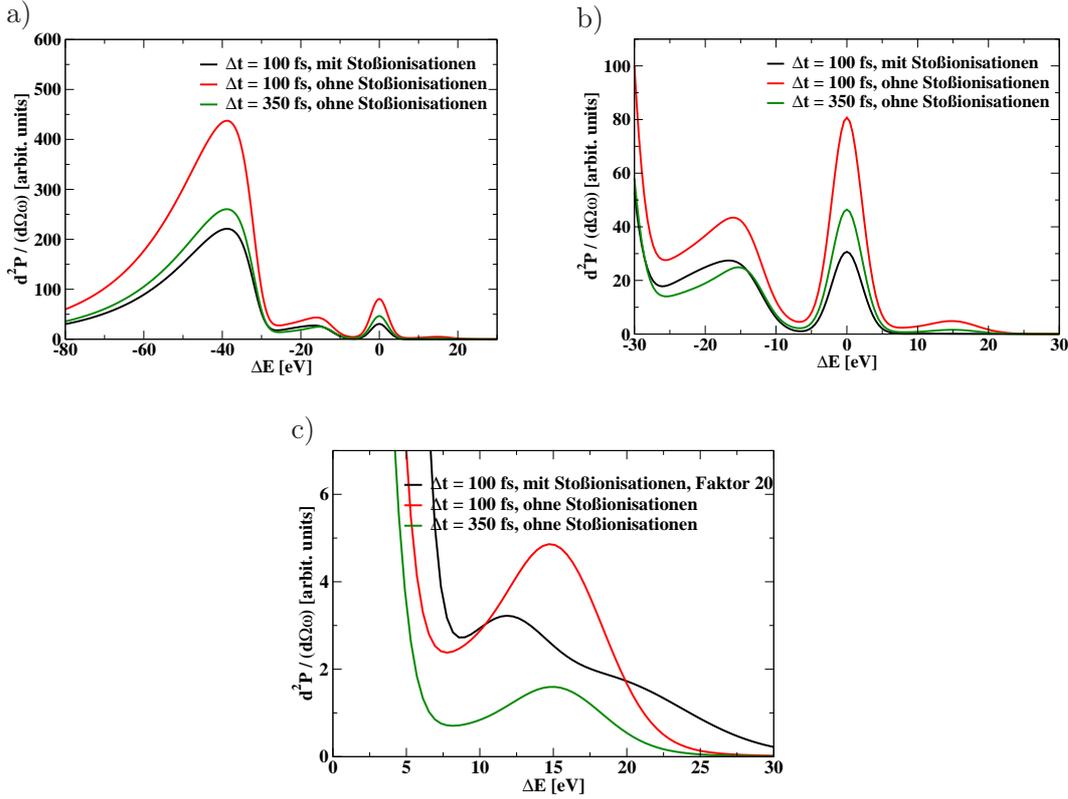


Abbildung 6.4: Darstellung der Thomsonstreuungsspektren einer Kohlenstofffolie bei Verzögerungszeiten von $\Delta t = 100$ fs und $\Delta t = 350$ fs mit und ohne Berücksichtigung von Stoßionisationen. Es sind in a) die drei Streuprozesse der kollektiven Thomsonstreuung, der Rayleighstreuung und der Ramanstreuung zu beobachten. In b) ist der Anteil der kollektiven Thomsonstreuung und in c) ist der nicht von der Ramanstreuung überlagerte Teil der kollektiven Thomsonstreuung vergrößert dargestellt. Zum besseren Vergleich wurde in c) das Signal unter Berücksichtigung von Stoßionisationen auf der rechten Seite mit dem Faktor 20 multipliziert, da dieser aufgrund der geringen Temperaturen schwächer als ohne Berücksichtigung der Stoßionisationen ausfällt.

onsstufen zu erkennen sein. Allerdings ist aufgrund der Dominanz der Ramanstreuung des einfach ionisierten Kohlenstoffs ($I_p(C^+) = 30.88$) die Ramanstreuung an zweifach ($I_p(C^{2+}) = 47.89$) und dreifach ionisiertem Kohlenstoff $I_p(C^{3+}) = 67.49$ eV im Gesamtspektrum nicht zu sehen. Für die Beobachtung der Ramanstreuung von vierfach geladenen Kohlenstoffionen mit der Ionisationsenergie $I_p(C^{4+}) = 392.09$ eV ist der gewählte Laser aufgrund der Photonenenergie von 300.5 eV, die unterhalb der Ionisationsenergie $I_p(C^{4+})$ liegt, nicht geeignet und kann in den Abbildungen 6.4 nicht beobachtet werden.

Es sollte zu erkennen sein, dass ohne Berücksichtigung der Stoßionisationen nur ein ausgeprägtes Plasmonenpaar ansonsten ein Plasmonenpaar mit einer Schulter bei größeren Energieverschiebungen zu beobachten ist. Das ist zurückzuführen auf die erhöhte Ionisation im Laserortsfokus bei der Simulation unter Berücksichtigung der Stoßionisationen.

In der Grafik 6.4 b) ist allerdings nur eine verbreiterte Flanke des kollektiven Thomsonstreusignals, welches von der Ramanstreuung an den Atomen mit einer Ionisationsenergie von 11.26 eV überlagert ist, unter Berücksichtigung von Stoßionisationen zu beobachten. Insbesondere ist das im Vergleich zu den Thomsonstreusignalen ohne Berücksichtigung der Stoßionisationen erkennbar. Aufbauend auf diesem Resultat ist in Abbildung 6.4 c) die kollektive Thomsonstreuung für positive Energieverschiebungen dargestellt. Hier ist das kollektive Thomsonstreusignal nicht von der Ramanstreuung überlagert und es kann im Gegensatz zu den Spektren ohne Berücksichtigung der Stoßionisationen im Spektrum unter Berücksichtigung der Stoßionisationen eine Schulter des Plasmonensignals zu größeren Energieverschiebungen hin beobachtet werden, die durch weitere Plasmonenpaare verursacht werden. Aus zwei von diesen Plasmonenpaaren werden die Plasmaparameter

ohne Stoßionisationen		
$t = 100 \text{ fs:}$	$ \Delta E = 14.7 \text{ eV}$	$t = 350 \text{ fs:}$
	$n_e = 1.36 \cdot 10^{23} \text{ cm}^{-3}$	$ \Delta E = 15.0 \text{ eV}$
	$T_e = 13.3 \text{ eV}$	$n_e = 1.49 \cdot 10^{23} \text{ cm}^{-3}$
		$T_e = 9.25 \text{ eV}$
mit Stoßionisationen		
$t = 100 \text{ fs:}$	$ \Delta E = 13.47 \text{ eV}$	$ \Delta E = 19.6 \text{ eV}$
	$n_e = 1.22 \cdot 10^{23} \text{ cm}^{-3}$	$n_e = 2.67 \cdot 10^{23} \text{ cm}^{-3}$
	$T_e = 6.8 \text{ eV}$	$T_e = 8.0 \text{ eV}$

des Elektronensystems extrahiert. Aus diesen Parametern ist eindeutig abzulesen, dass im Vergleich zu Berechnungen ohne Berücksichtigung von Stoßionisationen eine höhere Elektronendichte und eine geringere Elektronentemperatur zu beobachten ist. Weiterhin ist bei der zeitlichen Entwicklung der Spektren ohne Berücksichtigung von Stoßionisationen ein Abfall in der Elektronentemperatur und ein Anstieg in der Elektronendichte zu beobachten. Das ist auf ein Abkühlen des Plasmas und eine Ausbreitung des ionisierten Bereichs zurückzuführen, womit ein größeres Streuvolumen zur Verfügung steht. Es muss hier erwähnt werden, dass speziell die kollektiven Thomsonstreusignale bei positiven Energieverschiebungen im Experiment nicht aufgelöst werden können, da diese Signale durch experimentelles Rauschen (siehe Abbildung 1.8) überlagert werden.

Damit konnte der starke Einfluss der Stoßionisationen auf die Streuspektren im Fall von Kohlenstoff gezeigt werden. Somit müssen für Simulationen schwererer Teilchen Stoßionisationsprozesse in PIC-Simulationen berücksichtigt werden, um die Laser-Materie-Wechselwirkung qualitativ und quantitativ richtig darzustellen. Diese und ähnliche hier nicht aufgeführte Rechnungen zu Kohlenstoff halfen bei der Auswertung eines Pump-Probe-Experiments am LCLS [203] und bei einem Vorschlag für ein Experiment am FLASH von U. Zastra. Da man im Experiment am LCLS auf das Verhalten des Rayleighsignals zur Beobachtung von Phasenübergängen interessiert war, sind für die Beschreibung dieses Experiments FT-DFT-MD Simulationen zur Beschreibung der Struktur von festem und flüssigem Kohlenstoff notwendig, die nicht mit ausreichender Genauigkeit mit HNC-Simulationen oder der Theorie von Debye-Hückel zu beschreiben wären. Die beobachteten inelastischen Streuprozesse beschränkten sich dabei auf die Ramanstreuung und die nicht-kollektive Thomsonstreuung ab einigen 10 Pikosekunden nach der Licht-Materie-Wechselwirkung und konnten unter der Annahme eines homogenen Kohlenstoffplasmas theoretisch modelliert werden, sind für das Thema dieser Arbeit aber weniger von Interesse und sind deshalb hier nicht aufgeführt.

7 Zusammenfassung und Ausblick

Das Ziel dieser Arbeit war die Simulation eines vollständigen Pump-Probe-Experiments und die Berechnung der zugehörigen zeit- und orts aufgelösten Thomsonstreuungsspektren für Wasserstoff, Helium und Kohlenstoff. Speziell die Diagnostik der Licht-Materie-Wechselwirkung auf ultrakurzen Zeitskalen war von großem Interesse.

7.1 Zusammenfassung

Aufbauend auf den Erfahrungen der AG Statistische Physik in der Berechnung von Thomsonstreuungsspektren von homogenen Plasmen ist es gelungen, im Rahmen dieser Arbeit ein Modell zur Beschreibung von Pump-Probe-Experimenten für die Diagnostik der Wechselwirkung intensiver Laserpulse mit dichten Plasmen auf ultrakurzen Zeitskalen zu erarbeiten. Dazu wurden Simulationen zur Licht-Materie-Wechselwirkung mit Hilfe von PIC-Codes und Strahlungs-Hydrodynamik-Codes durchgeführt. Aus den simulierten inhomogenen Dichte- und Temperaturprofilen konnten dynamische Thomsonstreuungsspektren berechnet und damit die zeitliche Entwicklung von Plasmen anhand dieser Streuspektren interpretiert werden.

Im Verlauf dieser Arbeit wurde der PIC-Code VLPL3D mit dem Prozess der Stoßionisationen erweitert, was nur wenig Auswirkungen auf die Simulation von leichten Elementen, wie Wasserstoff und Helium, hat. Bei der Anwendung der Stoßionisationen bei der Simulation der Wechselwirkung von intensiven Laserfeldern mit dem schwereren Element Kohlenstoff wurde gezeigt, dass die Stoßionisationen einen quantitativen als auch qualitativen Einfluss auf die Ergebnisse dieser Simulationen haben. Dadurch entsteht statt einer 2-fach eine 4-fach ionisierte Kohlenstofffolie, deren ionisierte Front bereits bei kurzen Zeiten tiefer in das Material eindringt. Zusätzlich wurde aufgrund der aufzubringenden Ionisationsenergie durch die beschleunigten Elektronen eine stark verringerte Elektronentemperatur berechnet.

Anhand der Plasmonenresonanz der berechneten Thomsonstreuungsspektren der laserinduzierten Wasserstoff-, Helium- und Kohlenstoffplasmen konnten die Elektronendichte und -temperatur berechnet werden, wodurch das zeitliche Verhalten der Plasmen durch das Thomsonstreuungsspektrum beobachtet werden konnte. So konnte im Fall von Wasserstoff und Helium anhand des zeitlichen Anstiegs der Elektronendichte eine Ausbreitung des ionisierten Materials identifiziert werden. Hier erweist es sich allerdings als schwierig, zwischen der Ausbreitung der Front im Beispiel von Wasserstoff oder der Ausbreitung des Tropfeninneren im Beispiel von Helium zu unterscheiden. Daher müssen die Vergleiche der Thomsonstreuungsspektren stets in Verbindung mit der Simulation der dynamischen Licht-Materie-Wechselwirkung betrachtet werden.

Darüber hinaus wurde eine dynamische Berechnung des Rayleighsignals der Thomsonstreuung durchgeführt, mit der es möglich ist, die Relaxationszeit zwischen Elektronen- und Ionentemperatur in einem Experiment mittels Thomsonstreuung zu messen. Hier wurde die Abhängigkeit dieser Größe von dem Elektron-Ion-Energieaustausch und dem Wärmetransport gezeigt. Demnach ist die Relaxation zwischen Elektronen- und Ionensystem in Wasserstoff, welches mit einer Intensität von $\approx 10^{15}$ W/cm² bestrahlt wird, innerhalb von einigen Pikosekunden zu erwarten.

Allerdings wurden in Pump-Probe-Experimenten an Wasserstofftropfen am FLASH keine Plasmonensignale nachgewiesen. Zudem konnten die durchgeführten Berechnungen des zeitlichen Verhaltens des Rayleighsignals nicht mit den Ergebnissen dieses Experi-

ments verifiziert werden. Das gemessene Verhalten ist somit bisher nicht verstanden und Bedarf weiteren Auswertungen durch weiterführende Arbeiten.

7.2 Ausblick

Wie bereits in der Zusammenfassung erwähnt wurde, war es nicht möglich experimentelle Ergebnisse eines Pump-Probe-Experiments an Wasserstoff am FLASH zu verifizieren. Die Ergebnisse des Experiments sind bisher nicht verstanden, wobei Hypothesen über das Entweichen von heißen Elektronen aus dem Plasma und Plasmaablation existieren, die in weiterführenden Arbeiten untersucht werden müssen.

Weiterhin wurde zur Untersuchung des Verhaltens des Rayleighsignals in Abschnitt 4.4 die Laser-Materie-Wechselwirkung und die anschließende Plasmaentwicklung vollständig durch einen strahlungs-hydrodynamischen Code simuliert. Speziell für hohe Pump-Laserintensitäten sind solche Codes nicht mehr anwendbar. Daher müssen die Dichte- und Temperaturprofile für solche Fälle mit PIC-Simulationen berechnet werden, die als Anfangsbedingungen für die strahlungs-hydrodynamischen Berechnungen dienen können. Diese Kombination dieser Methoden wurde bereits in [44] erfolgreich durchgeführt und muss in zukünftigen Arbeiten auf die in dieser Arbeit gezeigten Beispiele von Helium und Kohlenstoff angewendet werden. Damit könnten auch verbesserte Ergebnisse für das berechnete, zeitliche Verhalten des Rayleighsignals erwartet werden. Hier muss erwähnt werden, dass für die Beschreibung des Temperaturrelaxationsprozesses zwischen Elektronen- und Ionensystem die Beschreibung von Elektronen-Ionen-Stöße entscheidend für die Simulation dieses Prozesses, aber in den in dieser Arbeit verwendeten PIC-Simulationen nicht implementiert sind. Wie schon im Kapitel 4 angedeutet, werfen allerdings die gemachten PIC-Simulationen zur Licht-Materie-Wechselwirkung in Wasserstofftropfen mit dem VLPL3D Code Fragen zu der Anwendbarkeit des VLPL3D Codes auf Probleme mit Kugelgeometrie auf. Hier müssen Vergleichsrechnungen mit dem PIC-Code von T. Liseykina [40] folgen.

Für eine Beschreibung der Ultrakurzzeitkinetik mit der in dieser Arbeit entwickelten Methode von kleinen Verzögerungszeiten ist es nötig die Diagnostik von Plasmen im Nicht-Gleichgewicht zu beschreiben. Bisher wurden hier nur die Diagnostik von Plasmen im Gleichgewicht ab einigen 100 fs nach Lasereinstrahlung berechnet. Um auch zu kleineren Zeiten die Diagnostik der Laser-Materie-Wechselwirkung zu beschreiben, ist die Theorie der Thomsonstreuung auf Plasmen im Nicht-Gleichgewicht zu erweitern, was bereits in der Arbeit [102] vollzogen wurde. Damit könnte zum Beispiel der im Kapitel 5 gezeigte Effekte der Ausbildung einer Plasmawelle im Inneren eines Heliumtropfens im Feld eines intensiven Laserpulses anhand des Thomsonstreupektrums untersucht werden. Das Thomsonstreusignal konnte mit den bisherigen Methoden erst nach vollständiger Ausbreitung der Plasmawelle im Heliumtropfeninneren berechnet werden.

Diese hier entwickelte Methoden kann in zukünftigen Arbeiten auf weitere Elemente oder Gemische von Elementen angewendet werden, die in Pump-Probe-Experimenten am LCLS oder dem XFEL untersucht werden können. Ein mögliches Element ist zum Beispiel Aluminium, zu dem bereits Experimente [204–207] durchgeführt wurden.

Literatur

- [1] R.W. Lee, H.A. Baldis, R.C. Cauble, O.L. Landen, J.S. Wark, A. Ng, S.J. Rose, C. Lewis, D. Riley, J.-C. Gauthier, and P. Audebert, *Plasma-based studies with intense x-ray and particle beam sources*, Laser Part. Beams **20** (2002), 527.
- [2] R. W. Lee, S. J. Moon, H.-K. Chung, W. Rozmus, H. A. Baldis, G. Gregori, R. C. Cauble, O. L. Landen, J. S. Wark, A. Ng, S. J. Rose, C. L. Lewis, D. Riley, J.-C. Gauthier, and P. Audebert, *Finite temperature dense matter studies on next-generation light sources*, J. Opt. Soc. Am. B **20** (2003), 770.
- [3] J. J. Fortney, S. H. Glenzer, M. Koenig, B. Militzer, D. Saumon, and D. Valencia, *Frontiers of the physics of dense plasmas and planetary interiors: Experiments, theory, and applications*, Phys. Plasmas **16** (2009), 041003.
- [4] R. P. Drake, *Perspectives on high-energy-density physics*, Phys. Plasmas **16** (2009), 055501.
- [5] B. A. Remington, R. M. Cavallo, M. J. Edwards, D. D.-M. Ho, B. F. Lasinski, K. T. Lorenz, H. E. Lorenzana, J. M. McNaney, S. M. Pollaine, and R. F. Smith, *Accessing high pressure states relevant to core conditions in the giant planets*, Astrophys. Space Sci. **298** (2005), 235.
- [6] B. A. Remington, *High energy density laboratory astrophysics*, Plasma Phys. Control. Fusion **47** (2005), A191.
- [7] E. I. Moses, R. N. Boyd, B. A. Remington, C. J. Keane, and R. Al-Ayat, *The national ignition facility: Ushering in a new age for high energy density science*, Phys. Plasmas **16** (2009), 041006.
- [8] J. D. Lindl, *Inertial confinement fusion*, Springer Verlag New York, 1998.
- [9] H. J. Kunze, E. Fünfer, B. Kronast, and W. H. Kegel, *Measurement of the spectral distribution of light scattered by a θ -pinch plasma*, Phys. Lett. **11** (1964), 42.
- [10] H. J. Kunze, A. Eberhagen, and E. Fünfer, *Electron density and temperature measurements in a 26 kJ θ -pinch light scattering*, Phys. Lett. **13** (1964), 38.
- [11] B. Kramer, P. Krusius, W. Schröder, and W. Schülke, *Fourier-transformed compton profiles: A sensitive probe for the microstructure of semiconductors*, Phys. Rev. Lett. **38** (1977), 1227.
- [12] W. Schülke, H. Nagasawa, and S. Mourikis, *Dynamic structure factor of electrons in Li by inelastic synchrotron x-ray scattering*, Phys. Rev. Lett. **52** (1984), 2065.
- [13] W. Schülke, *Electronic excitations investigated by inelastic x-ray scattering spectroscopy*, J. Phys.: Condens. Matter **13** (2001), 7557.
- [14] S. H. Glenzer, O. L. Landen, P. Neumayer, R. W. Lee, K. Widmann, S. W. Pollaine, R. J. Wallace, G. Gregori, A. Höll, T. Bornath, R. Thiele, V. Schwarz, W.-D. Kraeft, and R. Redmer, *Observations of plasmons in warm dense matter*, Phys. Rev. Lett. **98** (2007), 065002.

-
- [15] S. H. Glenzer and R. Redmer, *X-ray Thomson scattering in high energy density plasmas*, Rev. Mod. Phys. **81** (2009), 1625.
- [16] A. L. Kritcher, T. Döppner, C. Fortmann, T. Ma, O. L. Landen, R. Wallace, and S. H. Glenzer, *In-flight measurements of capsule shell adiabats in laser-driven implosions*, Phys. Rev. Lett. **107** (2011), 015002.
- [17] G. Gregori, S. H. Glenzer, F. J. Rogers, S. M. Pollaine, O. L. Landen, C. Blancard, G. Faussurier, P. Renaudin, S. Kuhlbrodt, and R. Redmer, *Electronic structure measurements of dense plasmas*, Phys. Plasmas **11** (2004), 2754.
- [18] E. García Saiz, G. Gregori, D. O. Gericke, J. Vorberger, B. Barbrel, R. J. Clarke, R. R. Freeman, S. H. Glenzer, F. Y. Khattak, M. Koenig, O. L. Landen, D. Neely, P. Neumayer, M. M. Notley, A. Pelka, D. Price, M. Roth, M. Schollmeier, C. Spindloe, R. L. Weber, L. van Woerkom, K. Wünsch, and D. Riley, *Probing warm dense lithium by inelastic x-ray scattering*, Nat. Phys. **4** (2008), 940.
- [19] O. L. Landen, S. H. Glenzer, M. J. Edwards, R. W. Lee, G. W. Collins, R. C. Cauble, W. W. Hsing, and B. A. Hammel, *Dense matter characterization by x-ray thomson scattering*, J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer **71** (2001), 465.
- [20] S. H. Glenzer, G. Gregori, R. W. Lee, F. J. Rogers, S. W. Pollaine, and O. L. Landen, *Demonstration of spectrally resolved x-ray scattering in dense plasmas*, Phys. Rev. Lett. **90** (2003), 175002.
- [21] S. H. Glenzer, G. Gregori, F. J. Rogers, D. H. Froula, S. W. Pollaine, R. S. Wallace, and O. L. Landen, *X-ray scattering from solid density plasmas*, Phys. Plasmas **10** (2003), 2433.
- [22] H. J. Lee, P. Neumayer, J. Castor, T. Döppner, R. W. Falcone, C. Fortmann, B. A. Hammel, A. L. Kritcher, O. L. Landen, R. W. Lee, D. D. Meyerhofer, D. H. Munro, R. Redmer, S. P. Regan, S. Weber, and S. H. Glenzer, *X-ray Thomson-scattering measurements of density and temperature in shock-compressed beryllium*, Phys. Rev. Lett. **102** (2009), 115001.
- [23] G. Gregori, S. H. Glenzer, H.-K. Chung, D.H. Froula, R.W. Lee, N.B. Meezan, J.D. Moody, C. Niemann, O.L. Landen, B. Holst, R. Redmer, S.P. Regan, and H. Sawada, *Measurement of carbon ionization balance in high-temperature plasma mixtures by temporally resolved x-ray scattering*, J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer **99** (2006), 225.
- [24] D. Riley, N. C. Woolsey, D. McSherry, I. Weaver, A. Djaoui, and E. Nardi, *X-ray diffraction from a dense plasma*, Phys. Rev. Lett. **84** (2000), no. 8, 1704.
- [25] D. Riley, I. Weaver, D. McSherry, M. Dunne, D. Neely, M. Notley, and E. Nardi, *Direct observation of strong coupling in a dense plasma*, Phys. Rev. E **66** (2002), 046408.
- [26] Y. Ding, A. Brachmann, F.-J. Decker, D. Dowell, P. Emma, J. Frisch, S. Gilevich, G. Hays, Ph. Hering, Z. Huang, R. Iverson, H. Loos, A. Miahnahri, H.-D. Nuhn,

- D. Ratner, J. Turner, J. Welch, W. White, and J. Wu, *Measurements and simulations of ultralow emittance and ultrashort electron beams in the linac coherent light source*, Phys. Rev. Lett. **102** (2009), 254801.
- [27] W. Ackermann, G. Asova, V. Ayvazyan, A. Azima, N. Baboi, J. Bähr, V. Balandin, B. Beutner, A. Brandt, A. Bolzmann, R. Brinkmann, O. I. Brovko, M. Castellano, P. Castro, L. Catani, E. Chiadroni, S. Choroba, A. Cianchi, J. T. Costello, D. Cubaynes, J. Dardis, W. Decking, H. Delsim-Hashemi, A. Delsérieys, G. Di Pirro, M. Dohlus, S. Düsterer, A. Eckhardt, H. T. Edwards, B. Faatz, J. Feldhaus, K. Flöttmann, J. Frisch, L. Fröhlich, T. Garvey, U. Gensch, Ch. Gerth, M. Görler, N. Golubeva, H.-J. Grabosch, M. Grecki, O. Grimm, K. Hacker, U. Hahn, J. H. Han, K. Honkavaara, T. Hott, M. Hüning, Y. Ivanisenko, E. Jaeschke, W. Jalmuzna, T. Jezynski, R. Kammering, V. Katalev, K. Kavanagh, E. T. Kennedy, S. Khodyachykh, K. Klose, V. Kocharyan, M. Körfer, M. Kollwe, W. Koprek, S. Korepanov, D. Kostin, M. Krassilnikov, G. Kube, M. Kuhlmann, C. L. S. Lewis, L. Lilje, T. Limberg, D. Lipka, F. Löhler, H. Luna, M. Luong, M. Martins, M. Meyer, P. Michelato, V. Miltchev, W. D. Möller, L. Monaco, W. F. O. Müller, O. Napieralski, O. Napoly, P. Nicolosi, D. Nölle, T. Nuñez, A. Oppelt, C. Pagani, R. Paparella, N. Pchalek, J. Pedregosa-Gutierrez, B. Petersen, B. Petrosyan, G. Petrosyan, L. Petrosyan, J. Pflüger, E. Plönjes, L. Poletto, K. Pozniak, E. Prat, D. Proch, P. Pucyk, P. Radcliffe, H. Redlin, K. Rehlich, M. Richter, M. Roehrs, J. Roensch, R. Romaniuk, M. Ross, J. Rossbach, V. Rybnikov, M. Sachwitz, E. L. Saldin, W. Sandner, H. Schlarb, B. Schmidt, M. Schmitz, P. Schmüser, J. R. Schneider, E. A. Schneidmiller, S. Schnepf, S. Schreiber, M. Seidel, D. Sertore, A. V. Shabunov, C. Simon, S. Simrock, E. Sombrowski, A. A. Sorokin, P. Spanknebel, R. Spesyvtsev, L. Staykov, B. Steffen, F. Stephan, F. Stulle, H. Thom, K. Tiedtke, M. Tischer, S. Toleikis, R. Treusch, D. Trines, I. Tsakov, E. Vogel, T. Weiland, H. Weise, M. Wellhöfer, M. Wendt, I. Will, A. Winter, K. Wittenburg, W. Wurth, P. Yeates, M. V. Yurkov, I. Zagorodnov, and K. Zapfe, *Operation of a free-electron laser from the extreme ultraviolet to the water window*, Nat. Photon. **1** (2007), 336.
- [28] M. Altarelli, R. Brinkmann, M. Chergui, W. Decking, B. Dobson, S. Düsterer, G. Grübel, W. Graeff, J. Graafsma, J. Hajdu, J. Marangos, J. Pflüger, H. Redlin, D. Riley, I. Robinson, J. Rossbach, A. Schwarz, K. Tiedtke, T. Tschentscher, I. Vartanians, H. Wabnitz, H. Weise, R. Wichmann, K. Witte, A. Wolf, M. Wulff, and M. Yurkov, *The European X-Ray Free-Electron Laser - Technical design report (DESY 2006-097, Hamburg, 2007)*.
- [29] R.R. Fäustlin, Th. Bornath, T. Döppner, S. Düsterer, E. Förster, C. Fortmann, S. H. Glenzer, S. Göde, G. Gregori, R. Irsig, T. Laarmann, H.J. Lee, B. Li, K.-H. Meiwes-Broer, J. Mithen, B. Nagler, A. Przystawik, H. Redlin, R. Redmer, H. Reinholz, G. Röpke, F. Tavella, R. Thiele, J. Tiggesbäumker, S. Toleikis, I. Uschmann, S.M. Vinko, T. Whitcher, U. Zastra, B. Ziaja, and Th. Tschentscher, *Observation of ultrafast non-equilibrium collective dynamics in warm dense hydrogen*, Phys. Rev. Lett. **104** (2010), 125002.
- [30] S. Toleikis, R.R. Fäustlin, L. Cao, T. Döppner, S. Düsterer, E. Förster, C. Fortmann, S.H. Glenzer, S. Göde, G. Gregori, R. Irsig, T. Laarmann, H.J. Lee, B. Li,

- J. Mithen, K.-H. Meiwes-Broer, A. Przystawik, P. Radcliffe, R. Redmer, F. Tavela, R. Thiele, J. Tiggesbäumker, N.X. Truong, I. Uschmann, U. Zastrau, and Th. Tschentscher, *Soft x-ray scattering using fel radiation for probing near-solid density plasmas at few electron volt temperatures*, High Energy Dens. Phys. **6** (2010), 15.
- [31] C. Fortmann, R. Redmer, H. Reinholz, G. Röpke, A. Wierling, and W. Rozmus, *Bremsstrahlung vs. thomson scattering in wuv-fel plasma experiments*, High Energy Dens. Phys. **2** (2006), 57.
- [32] A. Höll, T. Bornath, L. Cao, T. Döppner, S. Düsterer, E. Förster, C. Fortmann, S. H. Glenzer, G. Gregori, T. Laarmann, K.-H. Meiwes-Broer, A. Przystawik, P. Radcliffe, R. Redmer, H. Reinholz, G. Röpke, R. Thiele, J. Tiggesbäumker, J. Toleikis, N. X. Truong, T. Tschentscher, I. Uschmann, and U. Zastrau, *Thomson scattering from near-solid density plasmas using soft x-ray free electron lasers*, High Energy Dens. Phys. **3** (2007), 120.
- [33] D. Giulietti and L. A. Gizzi, *X-ray emission from laser-produced plasmas*, La. Riv. Nuo. Cim. **21** (1998), 1–88.
- [34] P. Gibbon, *Short pulse laser interactions with matter: An introduction*, World Scientific Publishing Company, London, 2005.
- [35] P. Mulser and D. Bauer, *High power laser-matter interaction*, Springer, 2010.
- [36] R. Thiele, *Thomsonstreuung in warmer und dichter Materie*, Dissertation, Universität Rostock, 2007.
- [37] R. Redmer, H. Reinholz, G. Röpke, R. Thiele, and A. Höll, *Theory of x-ray thomson scattering in dense plasmas*, IEEE Trans. on Plasma Sci. **33** (2005), 77.
- [38] C. Fortmann, R. Thiele, R.R. Fäustlin, Th. Bornath, B. Holst, W.-D. Kraeft, V. Schwarz, S. Toleikis, Th. Tschentscher, and R. Redmer, *Thomson scattering in dense plasmas with density and temperature gradients*, High Energy Dens. Phys. **5** (2009), 208.
- [39] A. Pukhov, *Three-dimensional electromagnetic relativistic particle-in-cell code VL-PL (Virtual Laser Plasma Lab)*, J. Plasma Phys. **61** (1999), 425.
- [40] T. V. Liseykina, S. Pirner, and D. Bauer, *Relativistic attosecond electron bunches from laser-illuminated droplets*, Phys. Rev. Lett. **104** (2010), 095002.
- [41] J. J. MacFarlane, I. E. Golovkin, and P. R. Woodruff, *HELIOS-CR-A 1-D radiation-magnetohydrodynamics code with inline atomic kinetics modeling*, J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer **99** (2006), 381.
- [42] R. Ramis, J. Meyer-ter Vehn, and J. Ramirez, *MULTI2D - A computer code for two-dimensional radiation hydrodynamics*, Comp. Physics Comm. **180** (2009), 977.
- [43] P. Sperling, T. Liseykina, D. Bauer, and R. Redmer, *Time-resolved Thomson scattering on high-intensity laser produced helium plasmas*, New J. Phys., accepted (2012).

- [44] R. Thiele, P. Sperling, M. Chen, Th. Bornath, R. R. Fäustlin, C. Fortmann, S. H. Glenzer, W.-D. Kraeft, A. Pukhov, S. Toleikis, Th. Tschentscher, and R. Redmer, *Thomson scattering on inhomogeneous targets*, Phys. Rev. E **82** (2010), 056404.
- [45] M. French, A. Becker, W. Lorenzen, N. Nettelmann, M. Bethkenhagen, J. Wicht, and R. Redmer, *Ab initio simulations for material properties along the Jupiter adiabat*, Astrophys. J. Suppl. Ser. **202** (2012), 11.
- [46] S. H. Glenzer, B. J. MacGowan, P. Michel, N. B. Meezan, L. J. Suter, S. N. Dixit, J. L. Kline, G. A. Kyrala, D. K. Bradley, D. A. Callahan, E. L. Dewald, L. Divol, E. Dzenitis, M. J. Edwards, A. V. Hamza, C. A. Haynam, D. E. Hinkel, D. H. Kalantar, J. D. Kilkenny, O. L. Landen, J. D. Lindl, S. LePape, J. D. Moody, A. Nikroo, T. Parham, M. B. Schneider, R. P. J. Town, P. Wegner, K. Widmann, P. Whitman, B. K. F. Young, B. Van Wonterghem, L. J. Atherton, and E. I. Moses, *Symmetric inertial confinement fusion implosions at ultra-high laser energies*, Science **327** (2010), 1228.
- [47] J. D. Lindl, *Development of the indirect-drive approach to inertial confinement fusion and the target physics basis for ignition and gain*, Phys. Plasmas **2** (1995), 3933–4024.
- [48] S. Ichimaru, *Statistical plasma physics vol. I: Basic principles*, Addison-Wesley Publishing Co., Redwood City, 1992.
- [49] R. Redmer and G. Röpke, *Progress in the theory of dense strongly coupled plasmas*, Contrib. Plasma Phys. **50** (2010), 970.
- [50] F. R. Graziani, V. S. Batista, L. X. Benedict, J. I. Castor, H. Chen, S. N. Chen, C. A. Fichtl, J. N. Glosli, P. E. Grabowski, A. T. Graf, S. P. Hau-Riege, A. U. Hazi, S. A. Khairallah, L. Krauss, A. B. Langdon, R. A. London, A. Markmann, M. S. Murillo, D. F. Richards, H. A. Scott, R. Shepherd, L. G. Stanton, F. H. Streitz, M. P. Surh, J. C. Weisheit, and H. D. Whitley, *Large-scale molecular dynamics simulations of dense plasmas: The Cimarron Project*, High Energy Dens. Phys. **8** (2012), 105.
- [51] R. Redmer, *Physical properties of dense, low-temperature plasmas*, Phys. Reports **282** (1997), 35.
- [52] M. Winkel, R. Speck, H. Hübner, L. Arnold, R. Krause, and P. Gibbon, *A massively parallel multi-disciplinary Barnes-Hut tree code for extreme-scale N-body simulations*, Comp. Phys. Comm. **183** (2012), 880.
- [53] T. C. Germann, K. Kadau, and S. Swaminarayan, *369 Tflops/s molecular dynamics simulations on the petaflops hybrid supercomputer 'Roadrunner'*, Concurrency Computat.: Pract. Exper. **21** (2009), 2143.
- [54] S. Kuhlbrodt, B. Holst, and R. Redmer, *Comptr04 - a program package to calculate composition and transport coefficients in dense plasmas*, Contrib. Plasma Phys. **45** (2005), 73–88.
- [55] M. N. Saha, *Ionization in the solar chromosphere*, Phil. Mag. **238** (1920), 472.

- [56] T. Bornath, P. Hilse, and M. Schlanges, *Ionization dynamics in nanometer-sized clusters interacting with intense laser fields*, Laser Phys. **17** (2007), 591.
- [57] G. P. Gupta and B. K. Sinha, *Effect of ionization and recombination coefficients on the charge-state distribution of ions in laser-produced aluminum plasmas*, Phys. Rev. E **56** (1997), 2106.
- [58] W. Lotz, *An empirical formula for the electron-impact ionization cross section*, Z. Phys. **206** (1967), 205–211.
- [59] W. Lotz, *Electron-impact ionization cross-sections and ionization rate coefficients for atoms and ions from hydrogen to calcium*, Z. Phys. **216** (1968), 241.
- [60] W. D. Jackson, *Classical electrodynamics*, John Wiley and Sons, New York, 1998.
- [61] E. E. Salpeter, *Electron density fluctuations in a plasma*, Phys. Rev. **120** (1960), 1528.
- [62] D. Bohm and E. P. Gross, *Theory of plasma oscillations. A. Origin of medium-like behavior*, Phys. Rev. **75** (1949), 1851.
- [63] S. H. Glenzer, W. Rozmus, B. J. MacGowan, K. G. Estabrook, J. D. De Groot, G. B. Zimmerman, H. A. Baldis, J. A. Harte, R. W. Lee, E. A. Williams, and B. G. Wilson, *Thomson scattering from high- z laser-produced plasmas*, Phys. Rev. Lett. **82** (1999), 97.
- [64] A. Glebov, V. Senz, J. P. Toennies, Ph. Lambin, G. Gensterblum, P. Senet, and A. A. Lucas, *Low-frequency phonon dynamics of the $C_{60}(111)$ surface*, Phys. Rev. B **56** (1997), 9874.
- [65] J. C. Stewart and K. D. Pyatt, *Lowering of ionization potentials in plasmas*, Astrophys. J. **144** (1966), 1203.
- [66] G. B. Rybicki and A. P. Lightman, *Radiative processes in astrophysics*, John Wiley & Sons, New York, 1979.
- [67] D. E. Evans and J. Katzenstein, *Laser light scattering in laboratory plasmas*, Rep. Progr. Phys. **32** (1969), 207.
- [68] C. N. Danson, P. A. Brummitt, R. J. Clarke, J. L. Collier, B. Fell, A. J. Frackiewicz, S. Hancock, S. Hawkes, C. Hernandez-Gomez, P. Holligan, M. H. R. Hutchinson, A. Kidd, W. J. Lester, I. O. Musgrave, D. Neely, D. R. Neville, P. A. Norreys, D. A. Pepler, C. J. Reason, W. Shaikh, T. B. Winstone, R. W. W. Wyatt, and B. E. Wyborn, *VULCAN Petawatt – an ultra-high-intensity interaction facility*, Nucl. Fusion **44** (2004), 239.
- [69] J. M. Soures, R. L. McCrory, C. P. Verdon, A. Babushkin, R. E. Bahr, T. R. Boehly, R. Boni, D. K. Bradley, D. L. Brown, R. S. Craxton, J. A. Delettrez, W. R. Donaldson, R. Epstein, P. A. Jaanimagi, S. D. Jacobs, K. Kearney, R. L. Keck, J. H. Kelly, T. J. Kessler, R. L. Kremens, J. P. Knauer, S. A. Kumpan, S. A. Letzring, D. J. Lonobile, S. J. Loucks, L. D. Lund, F. J. Marshall, P. W. McKenty, D. D. Meyerhofer, S. F. B. Morse, A. Okishev, S. Papernov, G. Pien, W. Seka,

- R. Short, M. J. Shoup III, M. Skeldon, S. Skupsky, A. W. Schmid, D. J. Smith, S. Swales, M. Wittman, and B. Yaakobi, *Direct-drive laser-fusion experiments with the OMEGA, 60-beam, > 40 kJ, ultraviolet laser system*, Phys. Plasmas **3** (1996), 2108.
- [70] A. L. Kritcher, P. Neumayer, J. Castor, T. Doppner, R. W. Falcone, O. L. Landen, H. J. Lee, R. W. Lee, B. Holst, R. Redmer, E. C. Morse, A. Ng, S. Pollaine, D. Price, and S. H. Glenzer, *Ultrafast k alpha x-ray thomson scattering from shock compressed lithium hydride*, Physics of Plasmas **16** (2009), 056308.
- [71] A. Ravasio, G. Gregori, A. Benuzzi-Mounaix, J. Daligault, A. Delserieys, A. Ya. Faenov, B. Loupiau, N. Ozaki, M. Rabec le Gloahec, T. A. Pikuz, D. Riley, and M. Koenig, *Direct observation of strong ion coupling in laser-driven shock-compressed targets*, Phys. Rev. Lett. **99** (2007), 135006.
- [72] P. Neumayer, C. Fortmann, T. Döppner, P. Davis, R. W. Falcone, A. L. Kritcher, O. L. Landen, H. J. Lee, R. W. Lee, C. Niemann, S. Le Pape, and S. H. Glenzer, *Plasmons in strongly coupled shock-compressed matter*, Phys. Rev. Lett. **105** (2010), 075003.
- [73] S. Le Pape, P. Neumayer, C. Fortmann, T. Döppner, P. Davis, A. Kritcher, O. L. Landen, and S. H. Glenzer, *X-ray radiography and scattering diagnosis of dense shock-compressed matter*, Phys. Plasmas **17** (2010), 056309.
- [74] S. P. Regan, K. Falk, G. Gregori, P. B. Radha, S. X. Hu, T. R. Boehly, B. J. B. Crowley, S. H. Glenzer, O. L. Landen, D. O. Gericke, T. Döppner, D. D. Meyerhofer, C. D. Murphy, T. C. Sangster, and J. Vorberger, *Inelastic x-ray scattering from shocked liquid Deuterium*, Phys. Rev. Lett. **109** (2012), 265003.
- [75] Y. Sentoku and A. J. Kemp, *Numerical methods for particle simulations at extreme densities and temperatures: Weighted particles, relativistic collisions, and reduced currents*, J. Comp. Phys. **227** (2008), 6846.
- [76] S. C. Rae and K. Burnett, *Detailed simulations of plasma-induced spectral blueshifting*, Phys. Rev. A **46** (1992), 1084.
- [77] J. Qiang, R. D. Ryne, S. Habib, and V. Decyk, *An object-oriented parallel particle-in-cell code for beam dynamics simulation in linear accelerators*, J. Comp. Phys. **163** (2000), 434.
- [78] K. Noguchi, C. Tronci, G. Zuccaro, and G. Lapenta, *Formulation of the relativistic moment implicit particle-in-cell method*, Phys. Plasmas **14** (2007), 042308.
- [79] J. A. Harte, W. E. Alley, D. S. Bailey, J. L. Eddleman, and G. B. Zimmerman, *LASNEX - A 2-d physics code for modelling ICF*, ICF Annual Report (1996), 150.
- [80] J. T. Larsen and S. M. Lane, *HYADES - A plasma hydrodynamics code for dense plasma studies*, J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer **51** (1994), 179.
- [81] R. Ramis, R. Schmalz, and J. Meyer-ter Vehn, *MULTI - A computer code for one-dimensional multigroup radiation hydrodynamics*, Comp. Phys. Comm. **49** (1988), 475.

- [82] M.M. Basko, J. Maruhn, and A. Tauschwitz, *An efficient cell-centered diffusion scheme for quadrilateral grids*, J. Comp. Physics **228** (2009), 2175.
- [83] J. P. Christiansen, D. E. T. F. Ashby, and K. V. Roberts, *MEDUSA - A one-dimensional laser fusion code*, Comp. Phys. Comm. **7** (1974), 271.
- [84] Report on the ELI, *Report on the challenges meeting, 27-28 april 2009*, Paris, 2009.
- [85] G. Gregori, S. H. Glenzer, K. B. Fournier, K. M. Campbell, E. L. Dewald, O. S. Jones, J. H. Hammer, S. B. Hansen, R. J. Wallace, and O. L. Landen, *X-ray measurements of radiative heating and cooling dynamics*, Phys. Rev. Lett. **101** (2008), 045003.
- [86] N. L. Kugland, G. Gregori, S. Bandyopadhyay, C. M. Brenner, C. R. D. Brown, C. Constantin, S. H. Glenzer, F. Y. Khattak, A. L. Kritcher, C. Niemann, A. Otten, J. Pasley, A. Pelka, M. Roth, C. Spindloe, and D. Riley, *Evolution of elastic x-ray scattering in laser-shocked warm dense lithium*, Phys. Rev. E **80** (2009), 066406.
- [87] A. Pukhov and J. Meyer-ter Vehn, *Relativistic magnetic self-channeling of light in near-critical plasma: Three-dimensional particle-in-cell simulation*, Phys. Rev. Lett. **76** (1996), 3975.
- [88] T. V. Liseykina and D. Bauer, *Plasma formation in intense laser-droplet interaction*, submitted (2012).
- [89] P. Sperling, *Dynamische Transportkoeffizienten in der Hydrodynamik laser-induzierter Plasmen*, Diplomarbeit, Universität Rostock, 2009.
- [90] G. Jamelot, P. Jaegle, P. Lemaire, and A. Carillion, *Experimental study of the role of plasma polarization on line shape in dense laboratory plasmas*, J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer **44** (1990), 71.
- [91] U. Zastra, C. Fortmann, R. R. Fäustlin, L. F. Cao, T. Döppner, S. Düsterer, S. H. Glenzer, G. Gregori, T. Laarmann, H. J. Lee, A. Przystawik, P. Radcliffe, H. Reinholz, G. Röpke, R. Thiele, J. Tiggesbäumker, N. X. Truong, S. Toleikis, I. Uschmann, A. Wierling, T. Tschentscher, E. Förster, and R. Redmer, *Bremsstrahlung and line spectroscopy of warm dense aluminum plasma heated by XUV free-electron-laser radiation*, Phys. Rev E **78** (2008), 066406.
- [92] U. Zastra, A. Sengebusch, P. Audebert, E. Brambrink, R.R. Fäustlin, T. Kämpfer, E. Kroupp, R. Loetzsch, Y. Maron, H. Reinholz, G. Röpke, E. Stambulchik, I. Uschmann, and E. Förster, *High-resolution radial K- α spectra obtained from a multi-keV electron distribution in solid-density titanium foils generated by relativistic laser-matter interaction*, High Energy Dens. Phys. **7** (2011), 47.
- [93] K. Wünsch, *Theory of X-ray Thomson scattering in warm dense matter*, Ph.D. thesis, University of Warwick, 2012.
- [94] C. Fortmann, T. Bornath, R. Redmer, H. Reinholz, G. Röpke, V. Schwarz, and R. Thiele, *X-ray thomson scattering cross-section in strongly correlated plasmas*, Laser Part. Beams **27** (2009), 311.

- [95] L. D. Landau and E. M. Lifschitz, *Lehrbuch der theoretischen Physik X - Physikalische Kinetik*, Akademie-Verlag, Berlin, 1990.
- [96] S. Günter, *Optische Eigenschaften dichter Plasmen*, Habilitationsarbeit, Universität Rostock, 1995.
- [97] L. Spitzer and R. Härm, *Transport phenomena in a completely ionized gas*, Phys. Rev. **89** (1953), 977–981.
- [98] A. Vertes, P. Juhasz, M. de Wolf, and R. Gijbels, *Hydrodynamic modelling of laser plasma ionization processes*, Int. J. Mass Spectrom. Ion Processes **94** (1989), 63.
- [99] M. R. Zaghoul, M. A. Bourham, and J. M. Doster, *Energy-averaged electron-ion momentum transport cross section in the Born approximation and Debye-Hückel potential: Comparison with the cut-off theory*, Phys. Lett. A **268** (2000), 375.
- [100] W. D. Kraeft, D. Kremp, W. Ebeling, and G. Röpke, *Quantum statistics of charged particle systems*, Akademie-Verlag, Berlin, 1986.
- [101] D. Kremp, M. Schlanges, and W.-D. Kraeft, *Quantum statistics of nonideal plasmas*, Springer Verlag, Berlin, 2005.
- [102] D. A. Chapman, J. Vorberger, K. Wünsch, and D. O. Gericke, *Analysis of Thomson scattering data from strongly-driven hydrogen*, High Energy Dens. Phys. **8** (2012), 175.
- [103] J. Lindhard, *On the properties of a gas of charged particles*, Kgl. Dan. Vidensk. Selsk. Mat. Fys. Medd. **28** (1954), no. 8, 8.
- [104] N. D. Mermin, *Lindhard dielectric function in the relaxation-time approximation*, Phys. Rev. B **1** (1970), 2362.
- [105] G. Röpke, A. Selchow, A. Wierling, and H. Reinholz, *Lindhard dielectric function in the relaxation-time approximation and generalized linear response theory*, Phys. Lett. A **260** (1999), 365.
- [106] A. Selchow, G. Röpke, A. Wierling, H. Reinholz, T. Pschiwul, and G. Zwicknagel, *Dynamic structure factor for a two-component model plasma*, Phys. Rev. E **64** (2001), 056410.
- [107] H. Reinholz, R. Redmer, G. Röpke, and A. Wierling, *Long-wavelength limit of the dynamical local-field factor and dynamical conductivity of a two-component plasma*, Phys. Rev. E **62** (2000), 5648.
- [108] A. Wierling, Th. Millat, G. Röpke, R. Redmer, and H. Reinholz, *Inverse bremsstrahlung of hot, weakly coupled plasmas*, Phys. Plasmas **8** (2001), 3810.
- [109] Th. Millat, *Absorption und dynamische Stoßfrequenz in nichtidealen Plasmen*, Dissertation, Universität Rostock, 2003.
- [110] G. Röpke, R. Redmer, A. Wierling, and H. Reinholz, *Strong collisions and response function for two-component plasmas*, Phys. Plasmas **7** (2000), 39.

-
- [111] H. Reinholz, *Dielectric and optical properties of dense plasmas*, Ann. Phys. (Paris) **30** (2005), 1.
- [112] I. Morozov, H. Reinholz, G. Röpke, A. Wierling, and G. Zwicknagel, *Molecular dynamics simulations of optical conductivity of dense plasmas*, Phys. Rev. E **71** (2005), no. 6, 066408.
- [113] S. Ichimaru, *Statistical plasma physics vol. II: Condensed plasmas*, Addison-Wesley Publishing Co., Reading, 1994.
- [114] S. Ichimaru and K. Utsumi, *Analytic expression for the dielectric screening function of strongly coupled electron liquids at metallic and lower densities*, Phys. Rev. B **24** (1981), 7385.
- [115] B. Farid, V. Heine, G. E. Engel, and I. J. Robertson, *Extremal properties of the Harris-Foulkes functional and an improved screening calculation for the electron gas*, Phys. Rev. B **48** (1993), 11602.
- [116] C. Fortmann, A. Wierling, and G. Röpke, *Influence of local-field corrections on Thomson scattering in collision-dominated two-component plasmas*, Phys. Rev. E **81** (2010), 026405.
- [117] C. Fortmann, *Bremsstrahlung in Dense Plasmas: A Many-Body Theoretical Approach*, Dissertation, Universität Rostock, 2008.
- [118] N. R. Arista and W. Brandt, *Dielectric response of quantum plasmas in thermal equilibrium*, Phys. Rev. A **29** (1984), 1471.
- [119] H. A. Baldis, J. Dunn, M. E. Foord, and W. Rozmus, *Thomson scattering diagnostic of solid density plasmas using x-ray lasers*, Rev. Sci. Instrum. **73** (2002), 4223.
- [120] J. Chihara, *Difference in x-ray scattering between metallic and non-metallic liquids due to conduction electrons*, J. Phys. F **17** (1987), 295.
- [121] J. Chihara, *Interaction of photons with plasmas and liquid metals - photoabsorption and scattering*, J. Phys. Cond. Matter **12** (2000), 231.
- [122] A. Höll, R. Redmer, G. Röpke, and H. Reinholz, *X-ray Thomson scattering in warm dense matter*, Eur. Phys. J. D **29** (2004), 159.
- [123] R. Thiele, T. Bornath, C. Fortmann, A. Höll, R. Redmer, H. Reinholz, G. Röpke, A. Wierling, S. H. Glenzer, and G. Gregori, *Plasmon resonance in warm dense matter*, Phys. Rev. E **78** (2008), 026411.
- [124] K. Wünsch, J. Vorberger, G. Gregori, and D. O. Gericke, *X-ray scattering as a probe for warm dense mixtures and high-pressure miscibility*, EPL **94** (2011), 25001.
- [125] K.-U. Plagemann, P. Sperling, R. Thiele, M. P. Desjarlais, C. Fortmann, T. Döppner, H. J. Lee, S. H. Glenzer, and R. Redmer, *Dynamic structure factor in warm dense beryllium*, New J. Phys. **14** (2012), 055020.

- [126] V. Schwarz, B. Holst, Th. Bornath, C. Fortmann, W. D. Kraeft, R. Thiele, R. Redmer, G. Gregori, H. J. Lee, T. Döppner, and S. H. Glenzer, *Static ion structure factor for dense plasmas: Semi-classical and ab initio calculations*, High Energy Dens. Phys. **6** (2010), 305.
- [127] R. Bredow, *Berechnung der Struktureigenschaften dichter Plasmen mit effektiven Potentialen*, Diplomarbeit, Universität Rostock, 2011.
- [128] K. Wünsch, *Strukturelle Eigenschaften stark korrelierter Plasmen*, Diplomarbeit, Ernst-Moritz-Arndt-Universität Greifswald, 2007.
- [129] K. Wünsch, J. Vorberger, G. Gregori, and D. O. Gericke, *Ion structure in dense plasmas: MSA versus HNC*, J. Phys. A: Math. Theor. **42** (2009), 214053.
- [130] K. Wünsch, P. Hilde, M. Schlanges, and D. O. Gericke, *Structure of strongly coupled multicomponent plasmas*, Phys. Rev. E **77** (2008), 056404.
- [131] P. Sperling, R. Thiele, B. Holst, C. Fortmann, S.H. Glenzer, S. Toleikis, Th. Tschentscher, and R. Redmer, *Two-color Thomson scattering at FLASH*, High Energy Dens. Phys. **7** (2011), 145.
- [132] M. Abramowitz and I. A. Stegun, *Handbook of mathematical functions*, Dover Publications, New York, 1972.
- [133] L. Pauling, F. Smend, and Borchert, *Incoherent scattering of gamma rays by inner-shell electrons*, J. Phys. B **8** (1975), 1428.
- [134] D. O. Gericke, J. Vorberger, K. Wünsch, and G. Gregori, *Screening of ionic cores in partially ionized plasmas within linear response*, Phys. Rev. E **81** (2010), 065401.
- [135] G. Gregori, S. H. Glenzer, W. Rozmus, R. W. Lee, and O. L. Landen, *Theoretical model of x-ray scattering as a dense matter probe*, Phys. Rev. E **67** (2003), 026412.
- [136] M. Schumacher, F. Smend, and I. Borchert, *Incoherent scattering of gamma rays by inner-shell electrons*, J. Phys. B **8** (1975), 1428.
- [137] C. Fortmann, *private Kommunikation*, (2013).
- [138] R. Thiele, R. Redmer, H. Reinholz, and G. Röpke, *Using the Gould-DeWitt scheme to approximate the dynamic collision frequency in a dense electron gas*, J. Phys. A **39** (2006), 4365.
- [139] D. Mihalas and B. W. Mihalas, *Foundations of radiation hydrodynamics*, Oxford University Press, New York, 1984.
- [140] J. L. Lebowitz and E. W. Montroll, *Nonequilibrium phenomena I - The Boltzmann equation*, North Holland Publishing Company, Amsterdam, 1983.
- [141] G. Röpke, *Statistische Mechanik für das Nichtgleichgewicht*, VEB Deutscher Verlag der Wissenschaften, Berlin, 1987.
- [142] D. Zubarev, V. Morozov, and G. Röpke, *Statistical mechanics of nonequilibrium processes, Vol. 1*, Akademie-Verlag, Berlin, 1996.

- [143] A. Sitenko and V. Malnev, *Plasma physics theory*, Chapman and Hall, London, 1995.
- [144] A. Pukhov, *Strong field interaction of laser radiation*, Rep. Progr. Phys. **66** (2003), 47.
- [145] C. Peltz, C. Varin, T. Brabec, and T. Fennel, *Fully microscopic analysis of laser-driven finite plasmas using the example of clusters*, New J. Phys. **14** (2012), 065011.
- [146] R. W. Hockney and J. W. Eastwood, *Computer simulation using particles*, Taylor & Francis Group, New York, 1988.
- [147] E. d’Humieres, Y. Sentoku, and A. Kemp, *Ultra-fast ionization modeling in laser-plasma interaction*, J. Phys.: Conf. Series **112** (2008), 022108.
- [148] T. V. Liseikina, F. Califano, V. A. Vshivkov, F. Pegoraro, and S. V. Bulanov, *Small-scale electron density and magnetic-field structures in the wake of ultraintense laser pulse*, Phys. Rev. E **60** (1999), 5991.
- [149] P. Mulser, D. Bauer, and H. Ruhl, *Collisionless laser-energy conversion by anharmonic resonance*, Phys. Rev. Lett. **101** (2008), 225002–.
- [150] A. Pukhov, *Relativistic plasmas: X-rays in a flash*, Nature Physics **2** (2006), 439.
- [151] E. N. Nerush, I. Yu. Kostyukov, A. M. Fedotov, N. B. Narozhny, N. V. Elkina, and H. Ruhl, *Laser field absorption in self-generated electron-positron pair plasma*, Phys. Rev. Lett. **106** (2011), 035001.
- [152] A. J. Kemp and L. Divol, *Interaction physics of multipicosecond petawatt Laser pulses with overdense plasma*, Phys. Rev. Lett. **109** (2012), 195005.
- [153] C. Rödel, D. an der Brügge, J. Bierbach, M. Yeung, T. Hahn, B. Dromey, S. Herzer, S. Fuchs, A. Galesian Pour, E. Eckner, M. Behmke, M. Cerchez, O. Jäckel, D. Hemmers, T. Toncian, M. C. Kaluza, A. Belyanin, G. Pretzler, O. Willi, A. Pukhov, M. Zepf, and G. G. Paulus, *Harmonic generation from relativistic plasma surfaces in ultrasteep plasma density gradients*, Phys. Rev. Lett. **109** (2012), 125002.
- [154] L. V. Keldysh, *Ionization in the field of strong electromagnetic wave*, Sov. Phys. JETP **20** (1965), 1307.
- [155] V. S. Popov, *Tunnel and multiphoton ionization of atoms and ions in a strong laser field (Keldysh theory)*, Phys. Usp. **47** (2004), 855.
- [156] M. V. Ammosov, N. B. Delone, and V. P. Krainov, *Tunnel ionization of the complex atoms and of atomic ions in an alternating electromagnetic field*, Sov. Phys. JETP **64** (1986), 1191–1194.
- [157] A. Karmakar and A. Pukhov, *Collimated attosecond gev electron bunches from ionization of high-z material by radially polarized ultra-relativistic laser pulses*, Laser Part. Beams **25** (2007), 371–377.
- [158] M. Reigrotzki, M. Stobbe, R. Redmer, and W. Schattke, *Impact ionization rate in ZnS*, Phys. Rev. B **52** (1995), 1456.

- [159] M. Reigrotzki, R. Redmer, N. Fitzer, S. M. Goodnick, M. Dür, and W. Schattke, *Hole initiated impact ionization in wide band gap semiconductors*, J. Appl. Phys. **86** (1999), 4458.
- [160] R. Redmer, J. R. Madureira, N. Fitzer, S. M. Goodnick, W. Schattke, and E. Schöll, *Field effect on the impact ionization rate in semiconductors*, J. Appl. Phys. **87** (2000), 781.
- [161] J. R. Madureira, D. Semkat, M. Bonitz, and R. Redmer, *Impact ionization rates of semiconductors in an electric field: The effect of collisional broadening*, J. Appl. Phys. **90** (2001), 829.
- [162] M. Reigrotzki, J. R. Madureira, A. Kuligk, N. Fitzer, R. Redmer, S. M. Goodnick, M. Dür, and W. Schattke, *Impact ionization and high-field effects in wide-band-gap semiconductors*, Physica B **314** (2002), 52.
- [163] D. Märk and H. Dunn, *Electron impact ionization*, Springer Verlag, Wien, 1985.
- [164] H. Ehrhardt, K. Jung, G. Knoth, and P. Schlemmer, *Differential cross sections of direct single electron impact ionization*, Z. Phys. D - Atoms, Molecules and Clusters **1** (1986), 3.
- [165] M. F. Ciappina, T. Kirchner, and M. Schulz, *Monte carlo event generators in atomic collisions: A new tool to tackle the few-body dynamics*, Comp. Phys. Comm. **181** (2010), 813.
- [166] J. A. McLennan, *Introduction to non-equilibrium statistical mechanics*, Prentice Hall, Englewood Cliffs, New Jersey, 1989.
- [167] L. D. Landau and E. M. Lifschitz, *Lehrbuch der theoretischen Physik VI - Hydrodynamik*, Akademie-Verlag, Berlin, 1991.
- [168] D. Kremp, Th. Bornath, M. Bonitz, and M. Schlanges, *Quantum kinetic theory of plasmas in strong laser fields*, Phys. Rev. E **60** (1999), 4725.
- [169] Th. Bornath, M. Schlanges, P. Hilse, and D. Kremp, *Nonlinear collisional absorption in dense laser plasmas*, Phys. Rev. E **64** (2001), 026414.
- [170] P. Hilse, Th. Bornath, M. Schlanges, and D. Kremp, *Collisional absorption of dense plasmas in strong laser fields: Quantum statistical results and simulation*, Phys. Rev. E **71** (2005), 056408.
- [171] P. Hilse, M. Moll, M. Schlanges, and Th. Bornath, *Laser-cluster-interaction in a nanoplasma-model with inclusion of lowered ionization energies*, Laser Phys. **19** (2009), 428.
- [172] P. Hilse, Th. Bornath, M. Moll, M. Schlanges, N. X. Truong, S. Göde, J. Tiggesbäumker, and K.-H. Meiwes-Broer, *Control of ionization in the interaction of strong laser fields with dense nanoplasmas*, Contrib. Plasma Phys. **52** (2012), 28.
- [173] M. Schlanges, Th. Bornath, and P. Hilse, *Ionization dynamics in dense nanoplasmas irradiated by intense laser fields. Pulse shaping*, J. Phys. A: Math. Theor. **42** (2009), 214060.

- [174] G. C. Pomraning, *Radiation hydrodynamics*, Pergamon Press, Oxford, 1973.
- [175] D. O. Gericke, Th. Bornath, and M. Schlanges, *Energy transfer and potential energy contributions in dense two-temperature plasmas*, J. Phys. A: Math. Gen. **39** (2006), 4739.
- [176] D. O. Gericke, G. K. Grubert, Th. Bornath, and M. Schlanges, *Relaxation of composition and species temperatures in laser- and shock-produced plasmas*, J. Phys. A: Math. Gen. **39** (2006), 4727.
- [177] J. Vorberger, D. O. Gericke, Th. Bornath, and M. Schlanges, *Energy relaxation in dense, strongly coupled two-temperature plasmas*, Phys. Rev. E **81** (2010), 046404.
- [178] M. Schlanges, T. Bornath, J. Vorberger, and D. O. Gericke, *Energy relaxation study for warm dense matter experiments*, Contrib. Plasma Phys. **50** (2010), 64.
- [179] T. Ditmire, A. M. Donnelly, A. M. Rubenchik, R. W. Falcone, and M. D. Perry, *Interaction of intense laser pulses with atomic clusters*, Phys. Rev. A **53** (1996), 3379.
- [180] D. Salzmann and A. Krumbein, *Calculation of x-ray production rate and ionization-state density in hot aluminium plasma*, J. Appl. Phys. **49** (1978), 3229.
- [181] L. M. Biberman, V. S. Vorob'ev, and I. T. Yakubov, *Kinetika neravnovesno nizko-temperaturno plazmy (kinetics of nonequilibrium low-temperature plasma)*, Nauka, 1982.
- [182] M. V. Chegotov, *Ionization modulation of a short intensive laser pulse*, J. Phys. D: Appl. Phys. **35** (2002), 647.
- [183] J. Köhn, *Wechselwirkung von intensiven Laserfeldern mit Metallclustern – Energieabsorption durch Streuprozesse*, Dissertation, Universität Rostock, 2009.
- [184] E. F. Toro, *Riemann solvers and numerical methods for fluid dynamics*, Springer, Berlin, 1997.
- [185] H. Juranek and R. Redmer, *Fluid variational theory for pressure dissociation in dense hydrogen: Multicomponent reference system and nonadditivity effects*, J. Chem. Phys. **117** (2002), 1768.
- [186] B. Holst, N. Nettelmann, and R. Redmer, *Equation of state for dense hydrogen and plasma phase transition*, Contrib. Plasma Phys. **47** (2007), 368.
- [187] D. Saumon, G. Chabrier, and H. M. Van Horn, *An equation of state for low-mass stars and giant planets*, Astrophys. J. **99** (1995), 713.
- [188] R. M. More, K. H. Warren, D. A. Young, and G. B. Zimmerman, *A new quotidian equation of state (qeos) for hot dense matter*, Phys. Fluids **31** (1988), 3059.
- [189] B. Holst, R. Redmer, and M. P. Desjarlais, *Thermophysical properties of warm dense hydrogen using quantum molecular dynamics simulations*, Phys. Rev. B **77** (2008), 184201.

- [190] M. P. Desjarlais, *Density-functional calculations of the liquid deuterium Hugoniot, reshock, and reverberation timing*, Phys. Rev. B **68** (2003), 064204.
- [191] N. Nettelmann, B. Holst, A. Kietzmann, M. French, R. Redmer, and D. Blaschke, *Ab initio equation of state data for hydrogen, helium, and water and the internal structure of jupiter*, Astrophys. J. **683** (2008), 1217–1228.
- [192] N. Nettelmann, A. Becker, and R. Redmer, *Jupiter models with improved ab initio hydrogen equation of state (H-REOS.2)*, Astrophys. J. **750** (2012), 52.
- [193] L. Caillabet, S. Mazevet, and P. Loubeyre, *Multiphase equation of state of hydrogen from ab initio calculations in the range 0.2 to 5 g/cc up to 100 ev*, Phys. Rev. A **83** (2011), 094101.
- [194] B. I. Bennett, J. D. Johnson, G. I. Kerley, and G. T. Rood, *Recent developments in the SESAME equation-of-state library*, Los Alamos Scientific Laboratory report LA-7130 (1978).
- [195] P. Sperling and R. Redmer, *Transport- and relaxation processes in a 2d-radiation-hydrodynamics code*, in preparation.
- [196] P.-H. Maire, R. Abgrall, J. Breil, and J. Ovardia, *A cell-centered lagrangian scheme for two-dimensional compressible flow problems*, SIAM J. Sci. Comput. **29** (2007), 1781.
- [197] P.-H. Maire, *A high-order cell-centered lagrangian scheme for compressible fluid flows in two-dimensional cylindrical geometry*, J. Comput. Phys. **228** (2009), 6882.
- [198] A. Dedner and P. Vollmöller, *An adaptive higher order method for solving the radiation transport equation on unstructured grids*, J. Comput. Phys. **178** (2002), 263.
- [199] R. Bredow, T. Bornath, W. D. Kraeft, and R. Redmer, *Hypernetted chain calculations for multi-component and non-equilibrium plasmas*, Contrib. Plasma Phys. accepted (2013).
- [200] M. Harmand and et. al., *Summary of the thomson scattering experiments at flash: Ultrafast energy relaxation in Hydrogen droplets*, prepared for publication (2012).
- [201] T. Rother, *Electromagnetic wave scattering on nonspherical particles*, Springer-Verlag, 2009.
- [202] M. Born and E. Wolf, *Principles of optics*, Pergamon Press, Oxford, 1980.
- [203] C. R. D. Brown, G. Gregori, M. Cammarata, B. I. Cho, T. Döppner, K. Engelhorn, E. Förster, C. Fortmann, D. Fritz, E. Galtier, D. O. Gericke, S. H. Glenzer, M. Harmand, A. Heimann, P. Higginbotham, N. L. Kugland, H. J. Lee, R. W. Lee, H. Lemke, M. Makita, A. Moinard, C. D. Murphy, B. Nagler, P. Neumayer, R. Redmer, D. Riley, F. B. Rosmej, P. Sperling, S. Toleikis, S. Vinko, J. Wark, S. White, K. Wünsch, U. Zastra, and T. Tschentscher, *Irreversible dynamics of strongly driven carbon*, prepared for publication (2013).

- [204] O. Ciricosta, S. M. Vinko, H.-K. Chung, B.-I. Cho, C. R. D. Brown, T. Burian, J. Chalupsky, K. Engelhorn, R. W. Falcone, C. Graves, V. Hajkova, A. Higginbotham, L. Juha, J. Krzywinski, H. J. Lee, M. Messerschmidt, C. D. Murphy, Y. Ping, D. S. Rackstraw, A. Scherz, W. Schlotter, S. Toleikis, J. J. Turner, L. Vysin, T. Wang, B. Wu, U. Zastra, D. Zhu, R. W. Lee, P. Heimann, B. Nagler, and J. S. Wark, *Direct measurements of the ionization potential depression in a dense plasma*, Phys. Rev. Lett. **109** (2012), 065002.
- [205] S. M. Vinko, O. Ciricosta, B. I. Cho, K. Engelhorn, H.-K. Chung, C. R. D. Brown, T. Burian, J. Chalupsky, R. Falcone, C. Graves, V. Hajkova, A. Higginbotham, L. Juha, J. Krzywinski, H. J. Lee, M. Messerschmidt, C. D. Murphy, Y. Ping, A. Scherz, W. Schlotter, S. Toleikis, J. Turner, L. Vysin, T. Wang, B. Wu, U. Zastra, D. Zhu, R. W. Lee, P. A. Heimann, B. Nagler, and J. S. Wark, *Creation and diagnosis of a solid-density plasma with an X-ray free electron laser*, Nature **482** (2012), 59.
- [206] U. Zastra, T. Burian, J. Chalupsky, T. Döppner, T. W. J. Dzelzainis, R. R. Fäustlin, C. Fortmann, E. Galtier, S. H. Glenzer, G. Gregori, L. Juha, H. J. Lee, R. W. Lee, C. L. S. Lewis, N. Medvedev, B. Nagler, A. J. Nelson, D. Riley, F. B. Rosmej, S. Toleikis, T. Tschentscher, I. Uschmann, S. M. Vinko, J. S. Wark, T. Whitcher, and E. Förster, *Xuv spectroscopic characterization of warm dense aluminium plasmas generated by the free-electron-laser FLASH*, Laser Part. Beams **30** (2012), 45.
- [207] B. Nagler, U. Zastra, R. R. Fäustlin, S. M. Vinko, Th. Whitcher, A. J. Nelson, R. Sobierajsk, J. Krzywinski, J. Chalupsky, E. Abreu, S. Bajt, Th. Bornath, T. Burian, H. Chapman, J. Cihelka, T. Döppner, S. Düsterer, Th. Dzelzainis, M. Fajardo, E. Förster, C. Fortmann, E. Galtier, S. H. Glenzer, S. Göde, G. Gregori, V. Hajkov, P. Heimann, L. Juha, M. Jurek, F. Y. Khattak, A. R. Khorsand, D. Klinger, M. Kozlova, T. Laarmann, H. Ja Lee, R. W. Lee, K.-H. Meiwes-Broer, P. Mercere, W. J. Murphy, A. Przystawik, R. Redmer, H. Reinholz, D. Riley, G. Röpke, F. Rosmej, K. Saksl, R. Schott, R. Thiele, J. Tiggesbäumker, S. Toleikis, Th. Tschentscher, I. Uschmann, H. J. Vollmer, and J. S. Wark, *Turning solid aluminium transparent by intense soft x-ray photoionization*, Nat. Phys. **5** (2009), 693.

