

High-Resolution X-ray Scattering in Strongly Compressed Metals

Doctoral thesis abstract / Kurzfassung

Dmitrii Bepalov

European XFEL GmbH, Schenefeld
Institute of Physics, University of Rostock

Abstract

High-resolution X-ray scattering was used to probe collective electronic and lattice excitations in laser-shock-compressed metals at the European XFEL (EuXFEL). In both experiments, a frequency-doubled DiPOLE optical laser drove a nanosecond shock through the target. VISAR, hydrodynamic modelling, and simultaneous X-ray diagnostics constrained the thermodynamic state at the XFEL probe time. The two microscopic observables are the plasmon response of warm dense aluminium and the low-energy ionic response of compressed crystalline copper.

Angle-resolved X-ray Thomson scattering was measured from shock-compressed aluminium. Simultaneous X-ray diffraction, hydrodynamic modelling, and VISAR timing constrain the probe-time state near pressures of about 50 GPa, densities of $3.75\text{--}4.5\text{ g cm}^{-3}$, and electron temperatures near 0.6 eV. Over a broad momentum-transfer range, the spectra follow the plasmon from a well-defined collective excitation to a broader and less distinct feature. Within this state window, and after explicit convolution with the measured source and spectrometer response, finite-temperature time-dependent density-functional theory (TDDFT) reproduces the spectral position, damping, and line shape, whereas the mean-field and static local-field-corrected models tested here remain too dispersive and too narrow. The measured plasmon response requires time-dependent electronic screening together with broadening from the disordered compressed state, beyond the static electron-gas descriptions used as reference models.

meV-resolution inelastic X-ray scattering was measured from laser-compressed crystalline copper. For the detector-selected Cu spectra interpreted within the compressed-crystalline structural window at probe time, hydrodynamic modelling, simultaneous X-ray diffraction, VISAR, and detector metadata place the analysed ensemble near $\rho \approx 10.7 \pm 0.7\text{ g cm}^{-3}$, $P \approx 50\text{--}90\text{ GPa}$, and $T \approx 0.07\text{--}0.11\text{ eV}$. The low-energy spectra contain a central quasi-elastic peak together with Stokes and anti-Stokes sidebands. Fits constrained by the thermal detailed-balance ratio give temperatures around $830_{-78}^{+101}\text{ K}$. This establishes direct meV thermometry for the analysed Cu ensemble in the compressed-crystalline structural window, while the probed volume remains polycrystalline and textured, with orientation weighting retained.

Together, the experiments use high-resolution X-ray scattering in two bounded ways. In aluminium, the independently constrained state bracket makes the plasmon spectra a stringent test of electronic-response models. In copper, simultaneous XRD and analyser-resolved meV spectra define when quantitative low-energy thermometry survives detector reduction and fitting.

Kurzfassung

Hochauflösende Röntgenstreuung wurde eingesetzt, um kollektive elektronische und gitterdynamische Anregungen in laserschockkomprimierten Metallen am European XFEL (EuXFEL) zu untersuchen. In beiden Experimenten erzeugte ein frequenzverdoppelter DiPOLE-Laser eine nanosekundige Stoßwelle im Target, während VISAR, hydrodynamische Modellierung und simultane Röntgendiagnostik den thermodynamischen Zustand zum XFEL-Probezeitpunkt eingrenzten. Die Messungen adressieren zwei mikroskopische Observablen: die Plasmonantwort von warmdichtem Aluminium und die niederenergetische ionische Antwort von komprimiertem kristallinem Kupfer.

Winkelaufgelöste Röntgen-Thomson-Streuung wurde an schockkomprimiertem Aluminium gemessen. Simultane Röntgenbeugung, hydrodynamische Modellierung und VISAR-Zeitmarken grenzen den Zustand zum Probezeitpunkt auf Drücke von etwa 50 GPa, Dichten von $3.75\text{--}4.5\text{ g cm}^{-3}$ und Elektronentemperaturen nahe 0.6 eV ein. Über einen breiten Bereich des Impulsübertrags verfolgen die Spektren das Plasmon von einer kollektiven Anregung zu einem breiteren und weniger ausgeprägten Signal. Innerhalb dieses Zustandsfensters und nach expliziter Faltung mit der gemessenen Quellen- und Spektrometerantwort reproduziert die zeitabhängige Dichtefunktionaltheorie bei finiten Temperaturen (TDDFT) die spektrale Lage, Dämpfung und Linienform, während die hier getesteten Mean-Field- und statischen Local-Field-Correction-Modelle zu dispersiv und zu schmal bleiben. Die gemessene Plasmonantwort erfordert zeitabhängige elektronische Abschirmung zusammen mit Verbreiterung durch den ungeordneten komprimierten Zustand und geht damit über die statischen Elektronengas-Beschreibungen hinaus, die hier als Referenzmodelle dienen.

meV-aufgelöste inelastische Röntgenstreuung wurde an laserkomprimiertem kristallinem Kupfer gemessen. Für die detektorselektierten Cu-Spektren, die im komprimiert-kristallinen Strukturfenster interpretiert werden, platzieren hydrodynamische Modellierung, simultane Röntgenbeugung, VISAR und Detektormetadaten das analysierte Ensemble bei etwa $\rho \approx 10.7 \pm 0.7\text{ g cm}^{-3}$, $P \approx 50\text{--}90\text{ GPa}$ und $T \approx 0.07\text{--}0.11\text{ eV}$. Die niederenergetischen Spektren enthalten einen zentralen quasi-elastischen Beitrag zusammen mit Stokes- und Anti-Stokes-Seitenbändern. Fits mit der thermischen Detailed-Balance-Bedingung ergeben Temperaturen von etwa $830_{-78}^{+101}\text{ K}$. Damit wird direkte meV-Thermometrie für das analysierte Cu-Ensemble im komprimiert-kristallinen Strukturfenster möglich, obwohl das sondierte Volumen polykristallin und texturiert statt orientierungszufällig bleibt.

Zusammen etablieren die Experimente zwei begrenzte Anwendungen hochauflösender Röntgenstreuung in komprimierten Metallen: Modelldiskriminierung über Plasmon-Linienformen in warmdichtem Al und Detailed-Balance-Thermometrie an einem analysierten Cu-Ensemble im komprimiert-kristallinen Strukturfenster. In Aluminium macht die unabhängig eingegrenzte Zustandsklammer die Plasmonspektren zu einem strengen Test elektronischer Antwortmodelle. In Kupfer definieren simultane Röntgenbeugung und analysatoraufgelöste meV-Spektren die Bedingungen, unter denen quantitative niederenergetische Thermometrie die Reduktion übersteht.