

Численное моделирование распространения фемтосекундных лазерных импульсов в нелинейных средах*

Н. М. Булгакова¹, В. П. Жуков², М. П. Федорук^{2,3}

¹Институт теплофизики СО РАН, Новосибирск, Россия

²Институт вычислительных технологий СО РАН, Новосибирск, Россия

³Новосибирский государственный университет, Россия

e-mail: nbul@itp.nsc.ru, zukov@ict.nsc.ru, mife@ict.nsc.ru

Предложены модель и конечно-разностная схема численной реализации этой модели для исследования распространения сверхмощного ультракороткого лазерного импульса в нелинейных средах. Модель основана на нелинейных уравнениях Максвелла с учётом частотной дисперсии и эффекта Керра, дополненных уравнениями гидродинамического типа для описания динамики генерируемых лазерным импульсом свободных электронов. Учтены процессы многофотонной ионизации, ионизации электронным ударом и рекомбинации электронов. Приведены данные методических расчётов и некоторые физические результаты.

Ключевые слова: фемтосекундный лазерный импульс, многофотонная ионизация, эффект Керра, нелинейное уравнение Шрёдингера, уравнения Максвелла.

Введение

Задача математического моделирования физических явлений, возникающих при фокусировке лазерных импульсов фемтосекундной длительности в объём оптических кристаллов и стекол и приводящих к модификации свойств облучаемого материала, в настоящее время чрезвычайно актуальна. Лазерно-индуцированная трёхмерная модификация прозрачных оптических материалов является на сегодня одним из основных методов создания интегральных оптических схем и биосенсоров, однако обычно режимы лазерной записи разнообразных структур подбираются экспериментально методом проб и ошибок. Это связано с чрезвычайной сложностью взаимосвязанных физических явлений, вызываемых потоком лазерного излучения в объёме прозрачного материала, когда небольшие отклонения в параметрах облучения приводят к существенному изменению картины модификации. В связи со сложностью физической картины динамики модификации оптических материалов имеется лишь незначительное количество попыток математического описания этого явления, тогда как создание адекватного математического аппарата для моделирования лазерно-индуцированных процессов в объёме прозрачных материалов является чрезвычайно востребованным для дальнейшего развития фотоники, оптоэлектроники и микрофлюидики.

Для моделирования распространения ультракоротких лазерных импульсов в нелинейных диспергирующих средах (газах и в ряде случаев в прозрачных твёрдых матери-

*Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант № 12-01-00510-а), Министерства образования и науки РФ (гос. контракт № 11.519.11.4018) и Междисциплинарного интеграционного проекта СО РАН № 68.

алах) обычно используется приближение нелинейного уравнения Шрёдингера (НУШ). Это приближение хорошо зарекомендовало себя в применении к моделированию распространения лазерного излучения в волоконной оптике и в газах, где либо плазма отсутствует (в линиях связи это вредный эффект), либо ее концентрация мала. Для условий модификации оптических материалов фемтосекундными импульсами лазерного излучения длительностью 100 фемтосекунд и менее и энергией выше 0.1 мкДж используется НУШ, дополненное уравнением для плотности свободных электронов [1–7]. Однако исследования в данном направлении далеко не полны. Кроме того, применимость НУШ сильно ограничена, поскольку при выводе этого уравнения используются следующие предположения [8]:

- 1) малость длины несущей волны по сравнению с характерным пространственным масштабом изменения функции огибающей волнового пакета;
- 2) отсутствие рассеяния волн на большие углы;
- 3) малость дивергенции электрического поля.

При лазерно-индуцированном формировании достаточно плотной плазмы с характерным пространственным масштабом порядка 1 мкм эти предположения нарушаются. Кроме того, генерация плазмы свободных электронов происходит за счет процесса многофотонной ионизации, который в значительной степени зависит от напряженности электрического поля и может привести к резкому изменению электрического поля во времени и к необходимости более точно учитывать частотную дисперсию диэлектрической проницаемости, которая в НУШ учитывается не достаточно полно.

В настоящей работе для описания взаимодействия мощного фемтосекундного лазерного импульса с оптическими кристаллами и стеклами предложена модель на основе нелинейных уравнений Максвелла в комбинации с уравнениями гидродинамического типа для генерируемой излучением плазмы, свободная от присущих НУШ недостатков. Модель учитывает дисперсию диэлектрической проницаемости, нелинейную диэлектрическую проницаемость, генерацию плазмы за счет многофотонной ионизации и ионизации электронным ударом, рекомбинацию плазмы, поглощение и рассеяние излучения свободными электронами и их движение. Приведена конечно-разностная схема, разработанная для решения этих уравнений, и указаны возникающие при моделировании специфические сложности и пути их преодоления. Представлены данные методических расчётов и некоторые физические результаты.

Для решения уравнений Максвелла в различных физических условиях разработано множество различных методов (конечных разностей, объёмов, элементов, разложение в ряды Фурье и пр.). Заметим, что в работах других авторов, использующих уравнения Максвелла (см., например, [9–14]), моделируются главным образом явления в волноводах. В этих работах не принимаются во внимание ряд явлений, важных для рассматриваемого здесь случая. Так, не учитывается или учитывается не в полной мере дисперсия показателя преломления, отсутствуют нелинейные эффекты, не рассматриваются процессы ионизации материала. Недавно появилась первая значительная работа с попыткой комбинирования уравнений Максвелла и динамики плазмы в приложении к задачам модификации материалов [15]. Однако предложенная в ней модель не учитывает процессов столкновительной ионизации, которые играют важнейшую роль в формировании плазмы при ультракоротких лазерных импульсах вследствие сильного нагрева газа свободными электронами (до нескольких десятков электронвольт). Учет данного эффекта значительно меняет морфологию лазерно-индуцированной плазмы. В настоящей работе предпринята попытка учёта всего разнообразия процессов, возникающих в про-

зрачных материалах при воздействии сфокусированного в объём лазерного излучения и приводящих к локальной структурной модификации облучаемого образца.

1. Исходные уравнения

Будем описывать распространение лазерного импульса уравнениями Максвелла с учётом частотной дисперсии линейной части вектора поляризации и нелинейной составляющей \mathbf{P}_{nl} (эффект Керра). Дополним их уравнениями гидродинамического типа для электронов. Следуя [1, 2, 4, 8], представим электрическое поле в комплексном виде $\mathbf{E} = \mathbf{E}_C e^{-i\omega t} + \mathbf{E}_C^* e^{i\omega t}$. Здесь ω — несущая частота волны, $\mathbf{E}_C = \mathbf{E}_C(\mathbf{r}, t)$ — медленная огибающая. Звёздочкой обозначено комплексное сопряжение. Аналогичные выражения примем для магнитного поля \mathbf{H} , тока \mathbf{j} , скорости электронов \mathbf{v} , электрической индукции \mathbf{D} и умноженной на 4π поляризации среды, связанной с m -м осциллятором \mathbf{P}_m . Тогда усреднённый по периоду квадрат электрического поля $\langle \mathbf{E}^2 \rangle = |\mathbf{E}_C|^2/2$. Модуль вектора Пойнтинга, усреднённый по периоду, имеет вид

$$I = \frac{c}{4\pi} \langle \mathbf{E} \times \mathbf{H} \rangle = \frac{c}{8\pi} \frac{\mathbf{E}_C \times \mathbf{H}_C^* + \mathbf{E}_C^* \times \mathbf{H}_C}{2}.$$

В среде с показателем преломления n в случае плоской волны в линейном приближении ($|\mathbf{H}_C| = n|\mathbf{E}_C|$) это даёт $I = cn|\mathbf{E}_C|^2/8\pi$. Здесь n — показатель преломления при частоте ω .

Ниже индекс C для краткости будем опускать. Тогда имеем

$$\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t} - i \frac{\omega}{c} \mathbf{D} = -\frac{4\pi}{c} \mathbf{j} + \text{rot } \mathbf{H} - \frac{8\pi}{c} W_{PI} E_g \frac{\mathbf{E}}{|\mathbf{E}^2|}, \quad (1)$$

$$\mathbf{D} = \mathbf{E} + \sum_m \mathbf{P}_m + \mathbf{P}_{nl}, \quad (2)$$

$$\frac{\partial \mathbf{P}_m}{\partial t} - i\omega \mathbf{P}_m = \mathbf{V}_m, \quad (3)$$

$$\frac{\partial \mathbf{V}_m}{\partial t} - i\omega \mathbf{V}_m = -\omega_m^2 (\mathbf{P}_m - B_m \mathbf{E}), \quad (4)$$

$$\mathbf{P}_{nl} = \frac{c}{4\pi} n^2 n_2 ((1 - f_r) |\mathbf{E}|^2 + f_r R_0 q) \mathbf{E}, \quad (5)$$

$$R_0 = \left(\frac{1}{\tau_s^2} + \frac{1}{\tau_d^2} \right) \tau_s, \quad (6)$$

$$\dot{q} = -\frac{q}{\tau_d} + \frac{p}{\tau_s}, \quad (7)$$

$$\dot{p} = |\mathbf{E}|^2 - \frac{p}{\tau_d} - \frac{q}{\tau_s}, \quad (8)$$

$$\frac{\partial(\rho \mathbf{v})}{\partial t} - i\omega \rho \mathbf{v} = -\frac{e}{m_e} \rho \mathbf{E} - \frac{\rho \mathbf{v}}{\tau_c}, \quad (9)$$

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = W_{PI} + W_\sigma - \frac{\rho}{\tau_{tr}}, \quad (10)$$

$$\mathbf{j} = -\rho e \mathbf{v}, \quad e > 0, \quad (11)$$

$$\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{H}}{\partial t} - i \frac{\omega}{c} \mathbf{H} = -\text{rot } \mathbf{E}. \quad (12)$$

Здесь ρ — плотность свободных электронов (см^{-3}); W_{PI} и W_σ — скорости многофотонной и столкновительной ионизации; τ_c и τ_{tr} — характерные времена рассеяния электронов и их рекомбинации; n и n_2 — линейный и нелинейный показатели преломления; f_r — коэффициент задержки оптического отклика; τ_s и τ_d — характерные времена задержки оптического отклика; E_g — эффективный потенциал ионизации; E_{g0} — ширина запрещённой зоны. Последнее слагаемое в (1) описывает потери энергии излучения на многофотонную ионизацию.

Для монохроматической волны в линейном приближении уравнения (1)–(5) дают показатель преломления, выражение для которого имеет вид

$$n^2 = 1 + \sum_m \frac{B_m \omega_m^2}{\omega_m^2 - \omega^2} \equiv 1 + \sum_m \frac{B_m \lambda^2}{\lambda^2 - \lambda_m^2},$$

где $\lambda = 2\pi c/\omega$ — длина волны в вакууме.

Уравнения (5)–(8) при $p(t=0) = q(t=0) = 0$ дают для нелинейной поляризации формулу

$$\mathbf{P}_{nl} = \frac{c}{4\pi} n^2 n_2 \left((1 - f_r) |\mathbf{E}|^2 + f_r R_0 \int_0^t |\mathbf{E}|^2 e^{-\tau/\tau_d} \sin(\tau/\tau_s) d\tau \right) \mathbf{E}.$$

Уравнения (3)–(8) позволяют обойти необходимость использования спектральных методов решения исследуемой задачи.

Формулы для W_{PI} , W_σ , E_g имеют следующий вид:

$$W_{PI} = W_{PI0} \frac{\rho_0 - \rho}{\rho_0} (|\mathbf{E}|^2 / E_*^2)^\alpha, \quad (13)$$

$$W_\sigma = \frac{e^2 \tau_c \rho (\rho_0 - \rho) |\mathbf{E}|^2}{2m_e E_{g0} (1 + m/m_e) (1 + \omega^2 \tau_c^2) \rho_0 (1 + |\mathbf{E}|^2 / (4E_*^2))}, \quad (14)$$

$$E_g = E_{g0} (1 + |\mathbf{E}|^2 / (4E_*^2)), \quad (15)$$

$$E_*^2 = \frac{E_{g0} m \omega^2}{e^2}, \quad (16)$$

где m — эффективная масса электрона в твердом теле.

Подчеркнем, что значения всех коэффициентов таковы [1, 2, 4], что под $|\mathbf{E}|^2$ понимается именно квадрат модуля комплексной амплитуды, а не усреднённый по периоду волны квадрат электрического поля.

Из (1)–(8), (11), (12) можно получить уравнение для плотности энергии поля ε и потерь энергии поля D_{LV} :

$$\frac{\partial \varepsilon}{\partial t} - \text{div } \mathbf{I} = -\frac{\partial D_{LV}}{\partial t}.$$

Здесь \mathbf{I} — средний по периоду волны вектор Пойнтинга,

$$16\pi\varepsilon = |\mathbf{E}|^2 + |\mathbf{H}|^2 + \sum_m \frac{|\mathbf{V}_m^2| + \omega_m^2 |\mathbf{P}_m^2|}{B_m \omega_m^2} + \frac{c}{8\pi} n^2 n_2 \left(3(1 - f_r) |\mathbf{E}|^2 + \frac{f_r R_0}{\tau_s} (q^2 + p^2 + 2\tau_s q |\mathbf{E}|^2) \right),$$

$$\frac{\partial D_{LV}}{\partial t} = \langle \mathbf{E} \mathbf{j} \rangle + W_{PI} E_g + \frac{cn^2 n_2 f_r R_0}{64\pi^2 \tau_d \tau_s} (p^2 + q^2 - \tau_s q |\mathbf{E}^2|).$$

Потери энергии D_{LV} в итоге выделяются в виде тепла в среде и приводят к изменению физических свойств среды.

В настоящей работе использованы следующие параметры для плавленого кварца [1, 4]: $m = 0.64 m_e$, $E_{g0} = 9$ эВ, $B_1 = 0.6962$, $B_2 = 0.4079$, $B_3 = 0.8975$, $\lambda_1 = 0.0684$, $\lambda_2 = 0.1162$, $\lambda_3 = 9.8962$ мкм. Это даёт $\omega_1 = 27.539$, $\omega_2 = 16.21$, $\omega_3 = 0.19034$ фс⁻¹. При $\lambda = 800$ нм ($\omega = 2.35$ фс⁻¹) имеем $n = 1.45$. Остальные параметры таковы: $n_2 = 2.48 \cdot 10^{-16}$ см²/Вт, $\alpha = 6$, $W_{PI0} = 3.7 \cdot 10^{34}$ см⁻³с⁻¹, $\rho_0 = 6.6 \cdot 10^{22}$ см⁻³, $\tau_d = 32$ фс, $\tau_s = 12$ фс, $\tau_{tr} = 150$ фс, $\omega\tau_c = 3$.

Для плавленого кварца $f_r = 0.18$, однако в работе для сокращения трудоёмкости расчётов полагается $f_r = 0$. По этой же причине в (9) пренебрегалось производной по времени $\partial(\rho\mathbf{v})/\partial t$. Тогда для потерь энергии имеем

$$\frac{\partial D_{LV}}{\partial t} = \frac{\tau_c \rho e^2 |\mathbf{E}^2|}{2m_e (1 + \omega^2 \tau_c^2)} + W_{PI} E_{g0} (1 + |\mathbf{E}^2| / (4E_*^2)). \quad (17)$$

Как показано в [1], учёт этих эффектов даёт осязаемое, но не принципиальное изменение результатов моделирования. Кроме того, очевидно, что обсуждаемые эффекты не создают дополнительных трудностей с точки зрения численного метода решения задачи, а настоящая работа носит прежде всего методический характер.

2. Нормировка

В исходных уравнениях перейдем к безразмерным переменным. Будем измерять время в $t_* = 1$ фс, расстояние в $x_* = 1$ мкм, частоты в фс⁻¹, волновой вектор в мкм⁻¹, скорость света c в мкм/фс, плотность в единицах начальной плотности атомов ρ_0 , величины E , D , P , H в E_* , определяемой формулой (16), скорость электронов \mathbf{v} в выражениях (9), (11) в единицах $v_* = cE_*/(4\pi e x_* \rho_0)$. Тогда (1) примет вид

$$\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t} - i \frac{\omega}{c} \mathbf{D} = \rho \mathbf{v} + \text{rot } \mathbf{H} - C_1 (1 - \rho) |\mathbf{E}^2|^{\alpha-1} (1 + |\mathbf{E}^2|/4) \mathbf{E}. \quad (18)$$

Уравнения (2)–(4), (6)–(8) и (12) в безразмерном виде выглядят так же, как и в размерном, а уравнения (5), (9) и (10) записываются как

$$\mathbf{P}_{nl} = C_2 ((1 - f_r) |\mathbf{E}|^2 + f_r R_0 q) \mathbf{E}, \quad (19)$$

$$\frac{\partial(\rho\mathbf{v})}{\partial t} - i\omega\rho\mathbf{v} = -C_3 \rho \mathbf{E} - \frac{\rho\mathbf{v}}{\tau_c}, \quad (20)$$

$$\frac{\partial\rho}{\partial t} = C_4 (|\mathbf{E}|^2)^\alpha (1 - \rho) + C_5 \frac{(1 - \rho)\rho |\mathbf{E}|^2}{1 + |\mathbf{E}|^2/4} - \frac{\rho}{\tau_{tr}}. \quad (21)$$

При $f_r = 0$ и $\partial(\rho\mathbf{v})/\partial t = 0$ уравнения (2), (20) и (17) выглядят следующим образом:

$$\mathbf{D} = \mathbf{E} + \sum_m \mathbf{P}_m + C_2 |\mathbf{E}|^2 \mathbf{E}, \quad (22)$$

$$\mathbf{v} = \frac{C_3 \tau_c \mathbf{E}}{i\omega\tau_c - 1}, \quad (23)$$

$$\frac{\partial D_{LV}}{\partial t} = \frac{c}{8\pi} \left(\frac{C_3 \tau_c \rho |\mathbf{E}^2|}{1 + \omega^2 \tau_c^2} + C_1 (1 - \rho) |\mathbf{E}^2|^\alpha (1 + |\mathbf{E}^2|/4) \right). \quad (24)$$

Здесь $C_{1,\dots,5}$ — соответствующие безразмерные постоянные.

3. Цилиндрически симметричный случай

Будем рассматривать задачи, в которых в цилиндрической системе координат зависимость от азимутального угла имеет вид

$$(E_r, E_z, H_\varphi) = (\hat{E}_r, \hat{E}_z, \hat{H}_\varphi) \cos \varphi, \quad (E_\varphi, H_r, H_z) = (\hat{E}_\varphi, \hat{H}_r, \hat{H}_z) \sin \varphi.$$

Чтобы такая зависимость имела место, необходимо выполнение неочевидного равенства $|\hat{E}_r|^2 + |\hat{E}_z|^2 = |\hat{E}_\varphi|^2$, которое предполагается в приближении уравнения Шрёдингера. В этом приближении $E_z = 0$, а уравнения для E_r и E_φ совпадают. Поэтому можно ожидать (и проверить в расчётах), что в случае уравнений Максвелла зависимость $|\mathbf{E}^2|$ от угла будет слабой. Тогда для $|\mathbf{E}^2|$ можно использовать выражение

$$|\mathbf{E}^2| = \frac{|\hat{E}_r|^2 + |\hat{E}_\varphi|^2 + |\hat{E}_z|^2}{2}.$$

Использованное приближение будет верным, если $|\hat{E}_r|^2 + |\hat{E}_z|^2 - |\hat{E}_\varphi|^2 \ll |\mathbf{E}^2|$.

В случае обсуждаемой зависимости от угла величины с “шапочкой” описываются уравнениями (18)–(22), в которых операторы ротора и дивергенции в цилиндрической системе координат имеют вид

$$\begin{aligned} \operatorname{rot} \mathbf{E} &= \left(-\frac{\hat{E}_z}{r} - \frac{\partial \hat{E}_\varphi}{\partial z}, \frac{\partial \hat{E}_r}{\partial z} - \frac{\partial \hat{E}_z}{\partial r}, \frac{1}{r} \frac{\partial (r \hat{E}_\varphi)}{\partial r} + \frac{\hat{E}_r}{r} \right), \\ \operatorname{rot} \mathbf{H} &= \left(\frac{\hat{H}_z}{r} - \frac{\partial \hat{H}_\varphi}{\partial z}, \frac{\partial \hat{H}_r}{\partial z} - \frac{\partial \hat{H}_z}{\partial r}, \frac{1}{r} \frac{\partial (r \hat{H}_\varphi)}{\partial r} - \frac{\hat{H}_r}{r} \right), \\ \operatorname{div} \mathbf{E} &= \frac{1}{r} \frac{\partial (r \hat{E}_r)}{\partial r} + \frac{\hat{E}_\varphi}{r} + \frac{\partial \hat{E}_z}{\partial z}, \\ \operatorname{div} \mathbf{H} &= \frac{1}{r} \frac{\partial (r \hat{H}_r)}{\partial r} - \frac{\hat{H}_\varphi}{r} + \frac{\partial \hat{H}_z}{\partial z}. \end{aligned}$$

4. Начальные и граничные условия

В начальный момент времени $t = -t_0 \ll -\tau_L$ полагается, что в расчётной области отсутствуют электромагнитное поле ($\mathbf{E} = \mathbf{H} = \mathbf{P}_m = \mathbf{V}_m = 0$) и ионизация ($\rho = 0$).

На оси $r = 0$ имеем обычные для рассматриваемой моды граничные условия

$$\hat{E}_r = -\hat{E}_\varphi, \quad \hat{H}_r = \hat{H}_\varphi, \quad \hat{E}_z = \hat{H}_z = 0. \quad (25)$$

На бесконечности наиболее адекватным является граничное условие $\mathbf{E} = 0$, $\mathbf{H} = 0$. В расчётах авторы вынуждены использовать ограниченную область. Условие $\mathbf{E} = 0$,

$\mathbf{H} = 0$ на границах $z = z_0$, $r = r_0$ приводит к наличию отраженной волны и к необходимости использовать большую расчётную область. Поэтому были применены выпускающие граничные условия, т. е. равенство нулю инварианта Римана, соответствующего характеристике, входящей в расчётную область. При этом полагается, что поле и степень ионизации около этих границ малы и можно использовать уравнения Максвелла с показателем преломления, соответствующим несущей частоте ω :

$$\begin{aligned} n\hat{E}_r - \hat{H}_\varphi &= 0, & n\hat{E}_\varphi + \hat{H}_r &= 0 & \text{при } z = z_0, \\ n\hat{E}_\varphi - \hat{H}_z &= 0, & n\hat{E}_z + \hat{H}_\varphi &= 0 & \text{при } r = r_0. \end{aligned}$$

Тестовые расчёты показали, что такие граничные условия устраняют проблему отражённой волны, при этом их реализация значительно проще, чем, например, использование так называемых поглощающих граничных условий [9].

При $z = 0$ задается условие на инварианты Римана на входящей характеристике, соответствующее фокусируемому линзой пучку с линейной поляризацией

$$nE_r + H_\varphi = 2nE_0, \quad nE_\varphi - H_r = -2nE_0, \quad (26)$$

$$\begin{aligned} E_0 &= E_{ini} \exp(-r^2/w^2 - t^2/\tau_L^2 - ik_0r^2/(2f)), \\ w &= w_f(1 + d^2/z_f^2)^{1/2}, \quad f = d + z_f^2/d, \quad z_f = k_0w_f^2/2. \end{aligned} \quad (27)$$

Здесь $k_0 = n\omega/c$ — волновой вектор в среде, τ_L — длительность импульса, z_f — длина Рэлея, f — кривизна луча на расстоянии d от линейного фокуса, $w_f = 1$ мкм.

В пределе $k_0w \gg 1$ (волна распространяется почти параллельно оси z) и при отсутствии волн, приходящих к границе $z = 0$ из расчётной области (т. е. при равенстве нулю инвариантов Римана на выходящей характеристике: $nE_r - H_\varphi = 0$, $nE_\varphi + H_r = 0$), амплитуда волны E_{ini} связана с полной энергией импульса \mathcal{E}_{IN} выражением (в размерных величинах)

$$E_{ini} = \left(\frac{16\mathcal{E}_{IN}}{ncw^2\tau_L(\pi/2)^{1/2}} \right)^{1/2},$$

а условие (26) эквивалентно условию $E_r = E_0$, $E_\varphi = -E_0$. При достаточно большом значении d этот предел действительно выполняется: в расчётах заведомо $k_0w > 100$, а волны, отражённые от фокальных областей (расположенных на расстояниях $z \sim d$) вследствие нелинейности, приходят к границе $z = 0$ в моменты времени, когда величина E_0 на границе уже мала. Заметим, что условие $E_r = E_0$, $E_\varphi = -E_0$ даёт практически те же результаты, что и (26), так как при достаточно большом d волне, отражённой от границы $z = 0$, требуется значительное время для возвращения в физически значимую фокальную область и амплитуда ее мала.

5. Конечно-разностная схема

Для численного решения поставленной задачи используем конечно-разностную схему типа схемы с перешагиванием [16]. Введем пространственную сетку, равномерную по z с шагом h_z (индекс k) и сгущающуюся к оси по r (индекс i). Расчётная область в процессе моделирования движется за импульсом. Для этого по мере продвижения импульса в среде при больших значениях z добавляются новые узлы, узлы же, расположенные достаточно далеко слева от заднего фронта импульса, не рассматриваются.

Узлы сетки, совпадающие с границами расчётной области, назовем целыми, а сдвинутые относительно них на полшага — полуцелыми. Будем вычислять ρ в полуцелых узлах, а компоненты полей E и H в узлах $E_{r_{i+1/2},k}$, $E_{\varphi i,k}$, $E_{z i,k+1/2}$, $H_{r i,k+1/2}$, $H_{\varphi i+1/2,k+1/2}$, $H_{z i+1/2,k}$. На такой сетке пространственные производные аппроксимируются центральными разностями со вторым порядком точности естественным образом. Например, z -компонента ротора от \mathbf{H} , необходимая при вычислении z -компоненты электрического поля, имеет вид

$$(\text{rot } \mathbf{H})_{i,k+1/2} = \frac{1}{r_i} \frac{r_{i+1/2} H_{\varphi i+1/2,k+1/2} - r_{i-1/2} H_{\varphi i-1/2,k+1/2}}{r_{i+1/2} - r_{i-1/2}} - \frac{H_{r i,k+1/2}}{r_i}.$$

Поскольку в направлении z волна достаточно близка к монохроматической с волновым вектором k , то при вычислении производных в качестве шага по z использовалась величина $\tilde{h}_z = (2/k) \sin(kh_z/2) \approx h_z(1 + (kh_z)^2/48)$. Такой выбор шага обеспечивает точное вычисление производных по z для параметров строго монохроматической волны, сохраняет второй порядок аппроксимации для остальных гармоник и даёт существенный эффект для точности получаемого решения.

Рассмотрим реализацию условий на оси в конечно-разностном случае. Будем вычислять E_φ и H_r при $i = 0$ сквозным расчётом, т.е. так же, как при $i \neq 0$. Для этого доопределим H_z в фиктивных точках $H_{z i=-1/2} = -H_{z i=1/2}$. Для вычисления H_r на оси используем то обстоятельство, что z -компонента $\text{rot } \mathbf{H}$ на оси равна нулю (что требует симметрия задачи и, в частности, уравнение для E_z на оси). Это даёт

$$\frac{1}{r} \frac{\partial(rH_\varphi)}{\partial r} - \frac{H_r}{r} = 0.$$

Интегрируя данное выражение с весом r от 0 до $r_{i=1/2}$, в соответствии с (25) получим граничное условие $H_{r i=0,k+1/2} = H_{\varphi i=1,k+1/2}$.

Описанная пространственная аппроксимация обеспечивает точное выполнение конечно-разностного аналога равенства $\text{rot } \nabla \mathbf{F} = 0$. Можно показать, что достигается второй порядок аппроксимации по пространству с учётом условий на оси.

Для аппроксимации (27) используем выражение

$$n \frac{E_{r k=1,i+1/2} + E_{r k=2,i+1/2}}{2} + H_{\varphi k=1/2,i+1/2} = 2nE_0(t, r_{i+1/2}).$$

Условия на характеристиках на остальных границах будем аппроксимировать аналогично. Производные по времени $\partial f / \partial t$ аппроксимируем выражением $(f^{n+1} - f^n) / \tau$ (τ — шаг по времени), а члены уравнений вида $i\omega f - i\omega(f^{n+1} + f^n)/2$.

Поскольку нас интересует процесс распространения волны, то ограничение на шаг по времени типа условия Куранта $c\tau < h$ не является обременительным и позволяет использовать явную схему. Однако возможны такие параметры сетки, при которых ограничение вида $\omega_m \tau < 1$ окажется более жёстким, чем условие Куранта. Поэтому уравнения (18), (22), (3), (4) аппроксимируются по времени следующим образом (F — несущественная в данном случае правая часть (18)):

$$\frac{\mathbf{D}^{n+1} - \mathbf{D}^n}{\tau} - i\omega \frac{\mathbf{D}^{n+1} + \mathbf{D}^n}{2} = cF^n, \quad (28)$$

$$\mathbf{D}^{n+1} = \mathbf{E}^{n+1} + \sum_m \mathbf{P}_m^{n+1} + C_2 |\mathbf{E}^n|^2 \mathbf{E}^{n+1}, \quad (29)$$

$$\frac{\mathbf{P}_m^{n+1} - \mathbf{P}_m^n}{\tau} - i\omega \frac{\mathbf{P}_m^{n+1} + \mathbf{P}_m^n}{2} = \frac{\mathbf{V}_m^{n+1} + \mathbf{V}_m^n}{2}, \quad (30)$$

$$\frac{\mathbf{V}_m^{n+1} - \mathbf{V}_m^n}{\tau} - i\omega \frac{\mathbf{V}_m^{n+1} + \mathbf{V}_m^n}{2} = -\omega_m^2 \left(\frac{\mathbf{P}_m^{n+1} + \mathbf{P}_m^n}{2} - B_m \frac{\mathbf{E}^{n+1} + \mathbf{E}^n}{2} \right). \quad (31)$$

Для решения системы (28)–(31) положим

$$\mathbf{P}_m^{n+1} = \xi_{Pm} + \zeta_{Pm} \mathbf{E}^{n+1}, \quad \mathbf{V}_m^{n+1} = \xi_{Vm} + \zeta_{Vm} \mathbf{E}^{n+1}. \quad (32)$$

Коэффициенты ξ_{Pm} , ζ_{Pm} , ξ_{Vm} , ζ_{Vm} находятся подстановкой (32) в (30) и (31). Затем, зная \mathbf{D}^{n+1} из (28) и подставляя (32) в (29), вычисляем \mathbf{E}^{n+1} . После этого по формулам (30), (31) находим \mathbf{P}_m^{n+1} , \mathbf{V}_m^{n+1} .

Таким образом, схема содержит следующие этапы реализации:

- 1) вычисляются значения $|\mathbf{E}^n|^2$ в полупечельных точках. В дальнейшем эти величины используются при вычислении нелинейных членов;
- 2) вычисляется значение ρ^{n+1} ;
- 3) вычисляются значения поля \mathbf{D}^{n+1} , при этом величины $|\mathbf{E}^n|^2$ и ρ^{n+1} интерполируются линейным образом из полупечельных узлов в узлы вычисления компонент \mathbf{D} ;
- 4) рассчитываются \mathbf{P}_m^{n+1} , \mathbf{V}_m^{n+1} , \mathbf{E}^{n+1} во внутренних точках;
- 5) задаются значения \mathbf{E}^{n+1} на границах;
- 6) по значениям \mathbf{E}^{n+1} вычисляется \mathbf{H}^{n+1} .

Представленная схема имеет второй порядок аппроксимации по пространственным переменным и первый — по времени. В линейном приближении при надлежащем задании начальных условий данная схема имела бы второй порядок аппроксимации по времени [16].

Приведенная конечно-разностная схема легко модифицируется при $f_r \neq 0$, $\partial(\rho\mathbf{v})/\partial t \neq 0$.

6. Методические расчёты

Рассмотрим влияние различных параметров поставленной выше задачи на точность численного решения. Сравним результаты исследования для двух импульсов. В первом длительность импульса $\tau_L = 80$ фс, энергия $\mathcal{E}_{IN} = 2.5$ мкДж, во втором $\tau_L = 150$ фс, $\mathcal{E}_{IN} = 1$ мкДж. Отметим, что такие условия типичны для экспериментов по лазерной модификации плавленого кварца [1–4, 6].

Приведем результаты методических расчётов для импульса $\tau_L = 80$ фс.

1. *Размер расчётной области по z .* В исходной физической постановке задачи представляющие интерес эффекты, связанные с фокусировкой и ионизацией среды, происходят в глубине материала. Поэтому необходимо решать задачу в практически безграничной области. Расчётная же область при численном решении задачи ограничена. Расчёты показывают, что увеличение размера расчётной области по z до значений более 150 мкм практически не изменяет решение.

2. *Размер расчётной области по радиусу зависит от параметра d (27) (расстояние от границы до геометрического фокуса).* Первоначальный радиальный размер лазерного импульса w пропорционален d . Расчёты показывают, что при $d = 120$ достаточно ограничиться размером области по радиусу $r_0 = 60$ мкм.

При фокусировке пучка электромагнитное поле существенно отлично от нуля на расстояниях от оси менее 10 мкм, а плотность плазмы — на расстояниях нескольких микрометров. Поэтому для временного интервала, когда лазерный импульс находится в зоне фокуса, была предпринята попытка существенно уменьшить размер расчётной области по r , сократив таким образом время решения задачи. Однако, как показывают расчёты, этого делать нельзя, поскольку при таком уменьшении r_0 с течением времени решение грубо искажается, что, по-видимому, связано с наличием волн, сходящихся к оси с увеличивающейся амплитудой. Сильное уменьшение расчётной области исключает эти волны из рассмотрения. Незначительное же уменьшение расчётной области не имеет смысла, так как не приводит к существенному сокращению времени расчёта. По этой же причине увеличение шага сетки по r на периферии также оказывается не рациональным. На рис. 1 приведена зависимость $\rho_{\max} = \max_{r,z} \rho$ от времени при разных шагах равномерной сетки и в случае использования неравномерной по r сетки с шагом $h_r = 0.0707$ мкм при $r < 10$ мкм, плавно увеличивающемся до 0.1 мкм к периферии. Видно, что кривая в случае неравномерной сетки достаточно далеко отклоняется от варианта с постоянным шагом $h_r = 0.0707$ мкм в сторону варианта с $h_r = 0.1$ мкм.

3. Шаги конечно-разностной сетки. Из рис. 1 наблюдается сходимость численного решения с уменьшением шага сетки. Для демонстрации сходимости выбрана плотность свободных электронов ρ , поскольку она наиболее чувствительна к шагу сетки. Это связано с тем, что скорость генерации свободных электронов пропорциональна $|\mathbf{E}|^{12}$, а следовательно, небольшие изменения в величине электрического поля при изменении шага сетки приводят к значительным изменениям в распределении ρ . Из рис. 1, а также анализа других результатов расчётов можно сделать заключение, что точность, получаемая при $h_r = h_z = 0.0707$ мкм, вполне удовлетворительна.

Заметим, что на временах, предшествующих фокусировке, градиенты поля по радиусу на масштабах порядка длины волны малы, и поэтому шаг сетки по радиусу h_r может существенно превышать h_z . Однако для правильного моделирования интересующих нас процессов необходимо, чтобы $h_r \sim h_z \ll \lambda$.

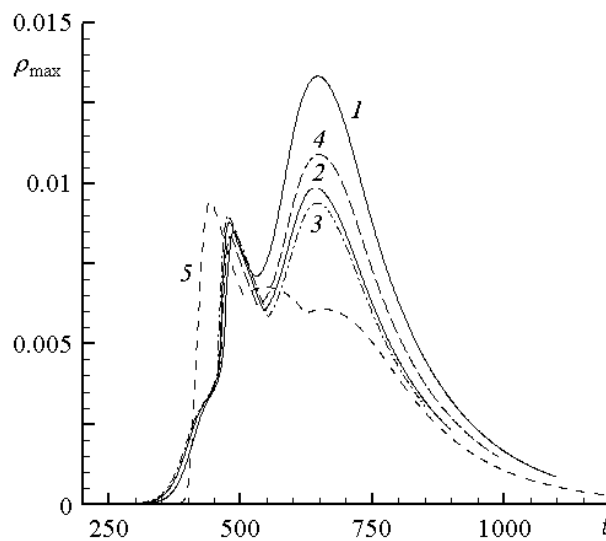


Рис. 1. Зависимость ρ_{\max} от времени в случаях равномерной по r сетки ($h_r = 0.1$ мкм (1), 0.0707 мкм (2), 0.05 мкм (3)) и неравномерной по r сетки (4) при $\tau_L = 80$ фс, $\varepsilon_{IN} = 2.5$ мкДж; 5 — $\tau_L = 150$ фс, $\varepsilon_{IN} = 1$ мкДж

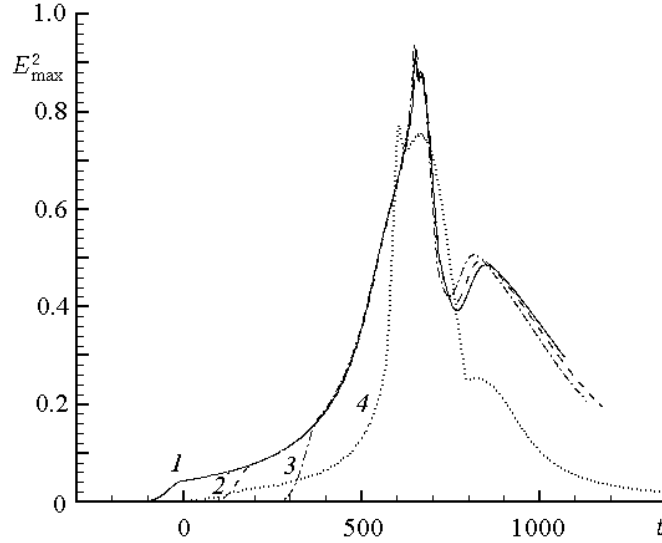


Рис. 2. Зависимость E_{\max}^2 от времени: 1, 2, 3 — $\tau_L = 80$ фс, $\mathcal{E}_{IN} = 2.5$ мкДж, $d = 160, 120, 80$ мкм соответственно; 4 — $\tau_L = 150$ фс, $\mathcal{E}_{IN} = 1$ мкДж, $d = 120$ мкм

4. *Расчёты показали*, что схема устойчива при $\tau < \text{const}/(h_r^{-1} + h_z^{-1})$, где $\text{const} \approx 0.5$. Погрешности, связанные с конечным значением τ , намного меньше погрешностей, связанных с конечным шагом сетки по пространству.

5. *Зависимость от параметра d* . На рис. 2 представлена зависимость $E_{\max}^2 = \max_{r,z} |\mathbf{E}^2|$ от времени при разных значениях параметра d — расстояния от границы расчётной области до геометрического фокуса. На рисунке для наглядности сделан сдвиг на соответствующую разность по времени при разных d , необходимую пучку для достижения фокуса. Видно, что при $d > 120$ мкм различия в поведении E_{\max}^2 невелики. Исключение составляет E_{\max}^2 в начальные моменты своего роста. В отсутствие упомянутого сдвига для разных d эти моменты соответствуют временам $t < 0$, когда максимум $|\mathbf{E}^2|$ достигается на границе $z = 0$. Для наших исследований подобные детали интереса не представляют. Заметим также, что при меньших d можно брать меньший размер области по радиусу, поскольку необходимо, чтобы величина r_0 была существенно больше w пропорционально d .

6. *Расчеты показали*, что отклонения от цилиндрической симметрии действительно малы. Величина $|\hat{E}_r|^2 + |\hat{E}_z|^2 - |\hat{E}_\varphi|^2$ не превышает 2–3% от $|\mathbf{E}^2|$.

При лазерном импульсе с $\mathcal{E}_{IN} = 1$ мкДж и $\tau_L = 150$ фс результаты методических расчётов отличаются от рассмотренного случая $\mathcal{E}_{IN} = 2.5$ мкДж, $\tau_L = 80$ фс только тем, что для достижения достаточной точности расчётов необходимо брать больший размер области по z (300 мкм) и можно ограничиться меньшими значениями d (80 мкм).

7. Физические результаты

Распределения $|\mathbf{E}^2|$ и плотности для пучка с параметрами $\tau_L = 80$ фс и $\mathcal{E}_{IN} = 2.5$ мкДж в различные моменты времени представлены на рис. 3 и 4. Согласно расчётам, картина распространения импульса в этом случае следующая.

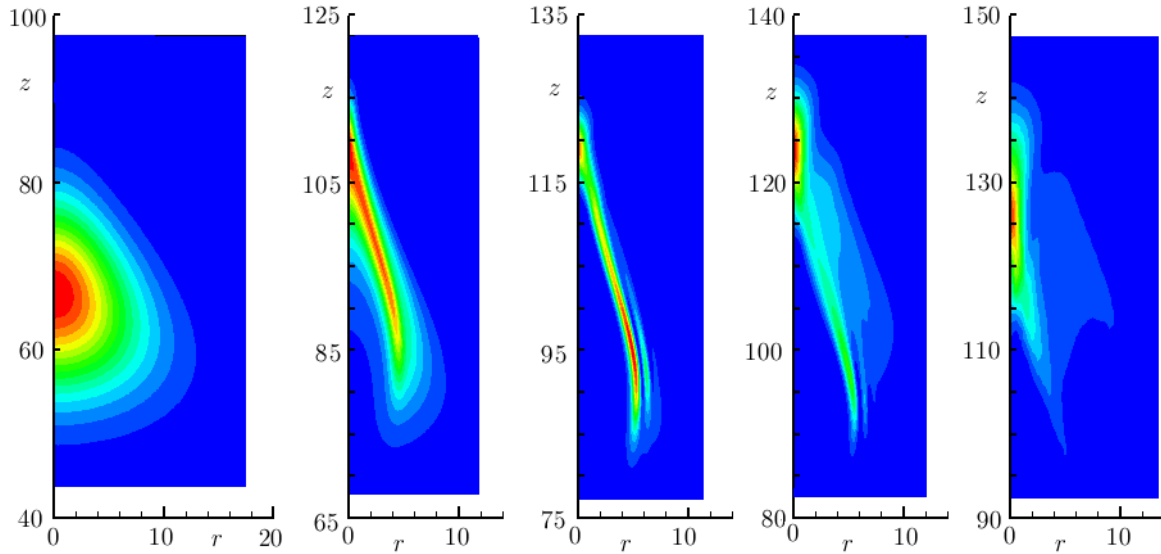


Рис. 3. Распределение $|\mathbf{E}^2|$ (слева направо) $t = 350, 450, 500, 550, 600$ фс. Максимальные значения $|\mathbf{E}^2|$ при этом составляют 0.455, 0.882, 0.683, 0.42, 0.49 соответственно. Импульс с параметрами $\tau_L = 80$ фс, $\mathcal{E}_{IN} = 2.5$ мкДж

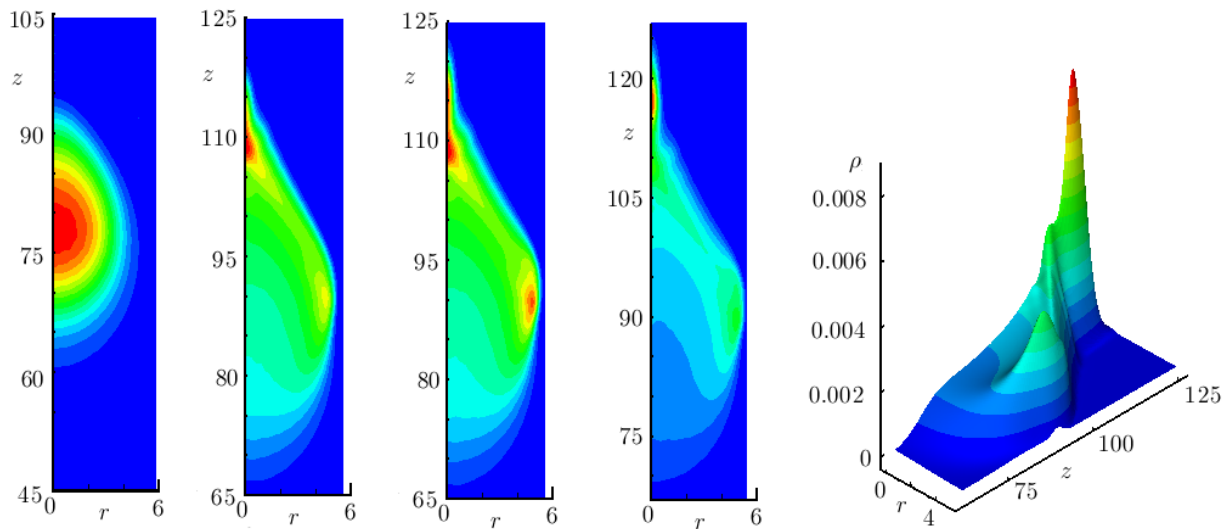


Рис. 4. Распределение плотности ρ (слева направо) в моменты времени $t = 410, 500, 550, 600$ фс ($\rho_{\max} = 0.0025, 0.0081, 0.0059, 0.008$ соответственно) и поверхность ρ при $t = 600$. Импульс с параметрами $\tau_L = 80$ фс, $\mathcal{E}_{IN} = 2.5$ мкДж

На первом этапе импульс испытывает обычную фокусировку, которая благодаря эффекту Керра происходит на расстояниях от границы $z = 0$, несколько меньших геометрического фокуса. Фокусировка импульса приводит к образованию плазмы, поглощающей энергию электромагнитной волны. Появление плазмы вызывает уменьшение напряжённости поля в области, занимаемой плазмой, и вытеснение области с максимальным значением $|\mathbf{E}^2|$ на периферию. В свою очередь это приводит к возникновению области высокой концентрации плазмы уже вне оси и способствует (наряду с силь-

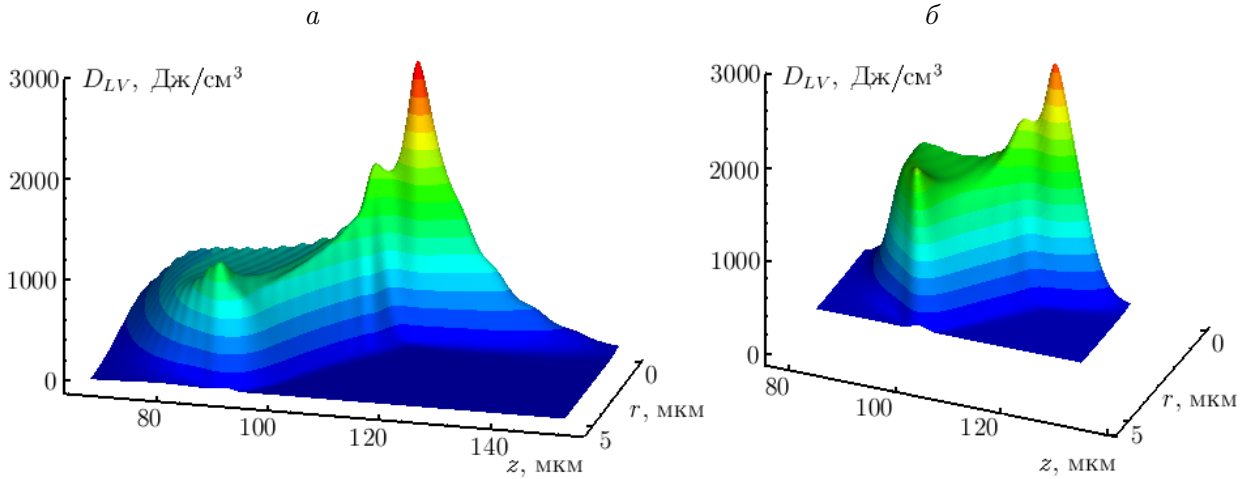


Рис. 5. Распределение энерговклада D_{LV} (Дж/см³) при $\tau_L = 80$ фс, $\varepsilon_{IN} = 2.5$ мкДж (а) и $\tau_L = 150$ фс, $\varepsilon_{IN} = 1$ мкДж (б)

ной зависимостью скорости ионизации от $|\mathbf{E}^2|$) образованию резкой границы занятой плазмой области с формированием больших градиентов ρ по радиусу. В некоторые моменты времени глобальный максимум $|\mathbf{E}^2|$ достигается не на оси системы (см. рис. 3, $t = 500$). Распределение ρ также имеет большой локальный максимум вне оси (см. рис. 4, $t = 550$). Отметим высокую, превышающую в максимуме 10^{20} см⁻³, плотность плазмы. Характерные размеры, на которых происходят изменения различных величин, имеют порядок 1 мкм, в том числе по z , что нарушает условие применимости уравнения Шрёдингера. Отметим также наличие мощной рассеянной волны (см. рис. 3, $t = 500$ и 550), что не характерно для НУШ.

На временах, когда интенсивность лазерного импульса уже достаточно слаба, происходит отрыв волны от плазмы, плотность электронов испытывает простое экспоненциальное затухание со временем τ_{tr} , импульс приобретает обычную форму и дефокусируется.

Область большого энерговклада D_{LV} (рис. 5) примерно соответствует области повышенной плотности электронов и имеет те же рассмотренные выше характерные особенности, хотя точного совпадения этих областей нет. Максимальное значение D_{LV} достигает нескольких тысяч Дж/см⁻³.

Таким образом, полученная зависимость максимальных по времени и пространству значений энерговклада, плотности свободных электронов и напряжённости электрического поля от ε_{IN} является не очень сильной (см. рис. 1, 2, 5). Наблюдается так называемый эффект клампинга [6]. Увеличение мощности импульса приводит к тому, что образование плазмы и потери энергии волны возникают раньше. При этом увеличивается пространственный размер области, в которой ρ , D_{LV} имеют большие значения.

Заключение

В работе предложена модель, описывающая распространение мощного фемтосекундного лазерного импульса в нелинейной прозрачной среде с учётом генерации плазмы и дисперсионных свойств среды на основе уравнений Максвелла. Необходимость раз-

работки данной модели определяется ограниченностью применимости приближения Шрёдингера для описания указанных процессов. Предложен эффективный конечно-разностный алгоритм для численного решения уравнений представленной модели. Расчёты, проведённые для реальных условий лазерной модификации плавленого кварца, продемонстрировали эффективное поглощение энергии лазерного импульса в зоне фокуса с формированием плазмы высокой плотности, что определяет эффективную модификацию свойств облучаемого материала.

Список литературы

- [1] COUAIRO A., SUDRIE L., FRANCO M. ET AL. Filamentation and damage in fused silica induced by tightly focused femtosecond laser pulses // *Phys. Rev. B*. 2005. Vol. 71. Paper 125435 (11 p.).
- [2] COUAIRO A., MYSYROWICZ A. Femtosecond filamentation in transparent media // *Phys. Rep.* 2005. Vol. 441. P. 47–189.
- [3] WINKLER S.W., BURAKOV I.M., STOIAN R. ET AL. Transient response of dielectric materials exposed to ultrashort laser radiation // *Appl. Phys. A*. 2006. Vol. 84. P. 413–422.
- [4] BURAKOV I.M., BULGAKOVA N.M., STOIAN R. ET AL. Spatial distribution of refractive index variations induced in bulk fused silica by single ultrashort and short laser pulses // *J. Appl. Phys.* 2007. Vol. 101. Paper 043506 (7 p.).
- [5] MERMILLOD-BLONDIN A., BURAKOV I.M., BULGAKOVA N.M. ET AL. Flipping the sign of refractive index changes in ultrafast and temporally shaped laser-irradiated borosilicate crown optical glass at repetition rate // *Phys. Rev. B*. 2008. Vol. 77. Paper 104205 (8 p.).
- [6] БУЛГАКОВА Н.М., СТОЯН Р., РОЗЕНФЕЛЬД А. Лазерно-индуцированная модификация прозрачных кристаллов и стекол // *Квантовая электроника*. 2010. Т. 40. С. 966–985.
- [7] TURITSYN S.K., MEZENTSEV V.K., DUBOV M. ET AL. Sub-critical regime of femtosecond inscription // *Optics Express*. 2007. Vol. 15, No. 22. P. 14750–14764.
- [8] ЛАНДАУ Л.Д., ЛИФШИЦ Е.М. Электродинамика сплошных сред. М.: Наука, 1982. 444 с.
- [9] PETROPOULOS P.G. Reflectionless sponge layer for the numerical solution of Maxwell's equations in cylindrical and spherical coordinates // *Appl. Numerical Math.* 2000. Vol. 33. P. 517–524.
- [10] YUQING JIAO, YAOSHENG SHI, DAOXIN DAI, SAILING HE. Accurate and efficient simulation for silicon-nanowire-based multimode interference couplers with a 3D finite-element mode-propagation analysis // *J. Opt. Soc. Amer. B*. 2010. Vol. 27, No. 9. P. 1813–1818.
- [11] ODAJIMA W., TAWA F., SHIN-YA HASEGAWA. Optical and thermal simulator for laser-assisted magnetic recording // *Optical Rev.* 2007. Vol. 14, No. 4. P. 180–185.
- [12] MADSEN N.K., ZIOLKOWSKI R.W. Numerical solution of Maxwell's equations in the time domain using irregular nonorthogonal grids // *Wave Motion*. 1988. Vol. 10. P. 583–596.
- [13] TAFLOVE A., HAGNESS S.C. *Computational Electrodynamics: The Finite-difference Time-domain Method*. 3rd edit. Artech House, Norwood, MA, 2005. 1038 p.
- [14] ПРОКОПЬЕВА Л.Ю., ФЕДУРУК М.П., ЛЕВЕДЕВ А.С. Параллельный алгоритм метода конечных объёмов для решения трёхмерных уравнений Максвелла в нанокompозитных средах // *Вычисл. методы и программирование*. 2009. Т. 10, № 1. С. 32–37.

- [15] POPOV K.I., MCELCHERAN C., BRIGGS K. ET AL. Morfology of femtosecond laser modification of bulk dielectrics // Opt. Express. 2010. Vol. 19. P. 271–282.
- [16] ФЕДОРУК М.П., БЕРЕЗИН Ю.А. Моделирование нестационарных плазменных процессов. Новосибирск: Наука, 1993. 356 с.

Поступила в редакцию 13 февраля 2012 г.