

УДК 535.33

Е.О. КОТЯШЕВ

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ КОГЕРЕНТНОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ УЛЬТРАКОРОТКОГО ЛАЗЕРНОГО ИМПУЛЬСА С АКТИВНОЙ СРЕДОЙ

Рассмотрено применение метода конечных разностей во временной области (FDTD) для моделирования сверхбыстрой динамики излучения в двухуровневой активной среде. В основе метода лежат уравнения Максвелла и уравнение Блоха для диагонального элемента матрицы плотности. Проведено моделирование процесса образования π -импульсов в инвертированной усиливающей среде, которое иллюстрирует перспективность данного подхода для применения в физике лазеров ультракоротких импульсов.

Введение

Исследование динамики импульсов в активных лазерных средах чаще всего выполнялось с помощью метода медленных огибающих, который предполагает возможность представления поля излучения в виде произведения быстро меняющейся и медленной компонент. В случае сверхбыстрого когерентного взаимодействия излучения с активной средой, которое имеет место при распространении ультракоротких лазерных импульсов длительностью в несколько фемтосекунд, этот метод становится непригодным.

В последнее время приобрела актуальность проблема численного моделирования взаимодействия электромагнитного излучения с различного рода лазерными активными средами. В связи с увеличением мощности компьютеров и их повсеместной доступностью широкое распространение получил численный метод решения уравнений Максвелла – метод конечных разностей во временной области (finite difference time domain, FDTD) [1]. Спектр его применения охватывает широкий круг проблем, начиная от расчета структуры рассеянного микроволнового излучения радаров и кончая изучением распределения электромагнитного поля в микроструктурных волокнах и резонаторах.

Этот метод позволяет получить значения векторов электрического и магнитного поля в дискретных точках изучаемого объема в произвольный момент времени. Он базируется на пространственно-временной дискретизации уравнений Максвелла по специфической схеме, так называемой схеме Йи. В данной работе рассмотрена адаптация метода FDTD для совместного решения уравнений Максвелла и уравнений Блоха в действительной форме для среды из двухуровневых атомов. Решение уравнений Максвелла с уравнениями Блоха в комплексной форме рассмотрено в работе [2].

Преимущества использования данного метода состоят в возможности исследовать пространственно-временную динамику в отсутствие приближения медленно меняющихся амплитуд в пространстве действительных переменных и позволяют моделировать распространение ультракоротких лазерных импульсов, длительность которых составляет всего несколько периодов колебаний поля. Создание теории лазеров ультракоротких импульсов, основанной на компьютерных моделях, учитывающих когерентное взаимодействие генерируемого излучения со средой, – одно из актуальных направлений лазерной физики.

FDTD-моделирование распространения плоской волны TE-поляризации

Уравнения Максвелла в системе единиц Хевисайда-Лоренца имеют следующий вид:

$$\begin{aligned} \operatorname{div} \vec{D} &= \rho & \frac{1}{c} \frac{\partial \vec{D}}{\partial t} + \vec{J} &= \operatorname{rot} \vec{H} \\ \frac{1}{c} \frac{\partial \vec{B}}{\partial t} &= -\operatorname{rot} \vec{E} & \operatorname{div} \vec{B} &= 0 \end{aligned} \quad (1)$$

Поля связаны со свойствами среды через материальные уравнения

$$\vec{D} = f(\vec{E}, P) \quad \vec{B} = f(\vec{H}, M), \quad (2)$$

где векторы P и M обозначают макроскопическую поляризацию и намагнитченность среды соответственно.

Для плоской волны, распространяющейся вдоль оси Ox и имеющей компоненты D_z и H_y , при отсутствии свободных зарядов и токов проводимости роторные уравнения из (1) принимают следующий вид:

$$\frac{\partial H_y}{\partial x} = \frac{1}{c} \frac{\partial D_z}{\partial t}, \quad \frac{\partial E_z}{\partial x} = \frac{1}{c} \frac{\partial B_y}{\partial t}. \quad (3)$$

Частные производные заменим разностными соотношениями вида

$$\left. \frac{\partial F(s)}{\partial s} \right|_{s=p} \approx \frac{F(p + \delta s/2) - F(p - \delta s/2)}{\delta s}, \quad (4)$$

где s – время или одна из декартовых координат. Для вычисления значения функции в точке p по известным значениям функции в точках $p + \delta s/2$ и $p - \delta s/2$ используется усреднение

$$F(p) = \frac{F(p + \delta s/2) + F(p - \delta s/2)}{2}. \quad (5)$$

Введем равномерную сетку с шагом δt по времени и δx по координате. Численная схема Йи предполагает вычисление электрического поля в узлах сетки с целым индексом, координатная сетка для магнитного поля сдвинута на полшага относительно электрического поля. При этом временная сетка также сдвинута на половину временного шага (рис. 1).

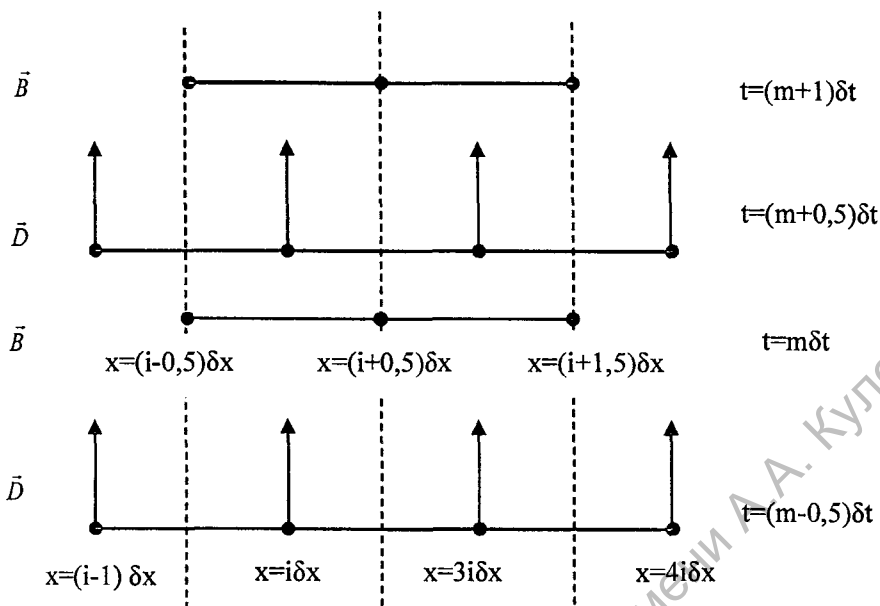


Рис. 1. Схема пространственно-временной дискретной сетки для вычисления векторов магнитной и электрической индукции

Учитывая численные выражения для производных и правила усреднения, получаем следующие дискретные соотношения:

$$B_y|_{i+1/2}^{m+1} = B_y|_{i+1/2}^m + \frac{c\delta t}{\delta x} (E_z|_{i+1}^{m+1/2} - E_z|_i^{m+1/2}), \quad (6a)$$

$$D_z|_{i+1/2}^{m+1/2} = D_z|_{i+1/2}^{m-1/2} + \frac{c\delta t}{\delta x} (H_y|_{i+1/2}^m - H_y|_{i-1/2}^m). \quad (6b)$$

Порядок вычисления наглядно иллюстрирован на рис. 1. Расчет начинается с некоторого распределения индукции электрического поля в момент времени $m-0,5$, и вычисляются значения индукции магнитного поля во всех точках сетки в момент времени m согласно соотношению (6a). Затем вычисляются значения индукции электрического поля в момент времени $m+0,5$ согласно соотношению (6b). Описанный процесс вычислений повторяется для каждого момента времени.

Уравнения Блоха для двухуровневой среды и их связь с осцилляторным уравнением Лоренца для макроскопической поляризации

Рассмотрим квантовую систему, которая может находиться только в двух состояниях с энергиями E_a и E_b , такими, что $E_b - E_a = \hbar\Omega$. Временная динамика взаимодействия такой системы с электрическим полем описывается уравнениями Блоха для матрицы плотности, которые в приближении вращающейся волны имеют вид

$$\dot{\rho}_{ba} = -i\Omega\rho_{ba} + \frac{i}{\hbar}\vec{d}_{ab} \cdot \vec{E}(t)N, \quad (7a)$$

$$\dot{N} = -2\frac{i}{\hbar}\vec{d}_{ab} \cdot \vec{E}(t)(\rho_{ba}^* - \rho_{ba}), \quad (76)$$

причем $N = 2\rho_{aa} - 1 = 1 - 2\rho_{bb}$, $\rho_{aa} + \rho_{bb} = 1$. Здесь ρ_{ij} – компоненты матрицы плотности двухуровневой системы, * обозначает комплексное сопряжение, N – плотность инверсии, изменяется в пределах от -1 , что соответствует полностью инвертированной системе, до 1 – полностью неинвертированное состояние. Вектор \vec{d}_{ab} – дипольный момент перехода между энергетическими уровнями.

В классической оптике известно дифференциальное уравнение второго порядка, описывающее временную динамику поляризации диэлектрической среды под воздействием внешнего электрического поля, так называемое уравнение Лоренца

$$\frac{d^2 P(t)}{dt^2} + 2\gamma \frac{dP}{dt} + \omega_0^2 P(t) = F(t). \quad (8)$$

В этом уравнении все члены, резонансная частота ω_0 , коэффициент затухания γ , поляризация P и возмущающая сила осциллятора F являются действительными числами и могут быть измерены экспериментально. Из математического анализа известно, что дифференциальное уравнение второго порядка с постоянными коэффициентами эквивалентно системе из двух дифференциальных уравнений первого порядка. Комплексное дифференциальное уравнение для микроскопической поляризации можно преобразовать к виду, аналогичному уравнению Лоренца [3]. Преобразуем (8) к системе двух дифференциальных уравнений

$$\dot{P} = Q, \quad \dot{Q} = -\omega_0^2 P - 2\gamma Q + F \quad (9)$$

или в матричной нотации

$$\dot{x} = A \cdot x + b, \quad \text{где } x = \begin{bmatrix} P \\ Q \end{bmatrix}, \quad A = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ -\omega_0^2 & -2\gamma \end{bmatrix}, \quad b = \begin{bmatrix} 0 \\ F \end{bmatrix}.$$

Собственные значения и собственные векторы матрицы A равны

$$\lambda_{1,2} = -\gamma \pm \sqrt{\gamma^2 - \omega_0^2}, \quad v_{1,2} = \begin{bmatrix} -\gamma \pm \sqrt{\gamma^2 - \omega_0^2} \\ \omega_0 \\ 1 \end{bmatrix}. \quad \text{Предполагая, что } \gamma < \omega_0, \text{ что}$$

справедливо для большинства реальных физических систем, можно ввести действительный параметр $\Omega = \sqrt{\omega_0^2 - \gamma^2}$. Для расщепления этой линейной системы необходимо произвести операцию диагонализации матрицы A . $U^{-1}\dot{x} = U^{-1} \cdot A \cdot U \cdot U^{-1} \cdot x + U^{-1} \cdot b$ или

$$\dot{y} = D \cdot y + e, \quad (10)$$

где $y = U^{-1}x$, $D = U^{-1} \cdot A \cdot U$, при этом учтен тот факт, что U не зависит от времени. Матрица U состоит из собственных векторов матрицы A

$$U = \eta \begin{bmatrix} \frac{-\gamma + i\Omega}{\omega_0^2} & \frac{-\gamma - i\Omega}{\omega_0^2} \\ 1 & 1 \end{bmatrix}, \quad U^{-1} = \frac{1}{2\Omega\eta} \begin{bmatrix} -i\omega_0^2 & -i\gamma + \Omega \\ i\omega_0^2 & i\gamma + \Omega \end{bmatrix},$$

здесь η – произвольный нормировочный множитель, значение которого будет определено далее.

Таким образом,

$$y = -\frac{i}{2\eta\Omega} \left\{ \begin{bmatrix} \omega_0^2 \\ -\omega_0^2 \end{bmatrix} P + \begin{bmatrix} \gamma + i\Omega \\ -\gamma + i\Omega \end{bmatrix} Q \right\}, \quad D = \begin{bmatrix} -\gamma - i\Omega & 0 \\ 0 & -\gamma + i\Omega \end{bmatrix}, \quad e = \frac{1}{2\eta} \begin{bmatrix} 1 - \frac{i\gamma}{\Omega} \\ \frac{\Omega}{1 + \frac{i\gamma}{\Omega}} \end{bmatrix} F. \quad (11)$$

Подставляя (11) в (10), получим

$$-\frac{i}{2\eta} \left\{ \omega_0^2 \dot{P} + (\gamma + i\Omega) \ddot{P} \right\} = \frac{i}{2\eta\Omega} (\gamma + i\Omega) \left\{ \omega_0^2 P + (\gamma + i\Omega) \dot{P} \right\} + \frac{F}{2\eta} \left(1 - i \frac{\gamma}{\Omega} \right). \quad (12)$$

Сравнивая (12) с (76), получаем связь величины поляризации и диагонального элемента матрицы плотности двухуровневой системы

$$\rho_{ba} = \left(1 + \frac{\gamma^2}{\Omega^2} \right)^{-1} P + i \left\{ \left(\frac{\Omega}{\gamma} + \frac{\gamma}{\Omega} \right)^{-1} P + \frac{\Omega}{\omega_0^2} \dot{P} \right\}. \quad (13)$$

Для возмущающей силы F , сравнивая (12) и (9), имеем $F = \frac{\omega_0^2}{\hbar\Omega} \vec{d}_{ab} \cdot \vec{E}N$,

тогда (8) принимает окончательный вид

$$\ddot{P} + 2\gamma\dot{P} + \omega_0^2 P = \frac{\omega_0^2}{\hbar\Omega} \vec{d}_{ab} \cdot \vec{E}N. \quad (14)$$

Очевидно, что в случае $\gamma \ll \omega_0$ действительная часть (13) совпадает с поляризацией в уравнении Лоренца (9). Из (76) и (13) имеем соотношение для плотности инверсии $\dot{N} = -4 \frac{\Omega}{\hbar\omega_0^2} \dot{P} \vec{d}_{ab} \cdot \vec{E}$. Для учета релаксации инверсии к равновесному значению N_0 вводится феноменологический член γ_{nr} [4], с учетом которого получаем

$$\dot{N} = -4 \frac{\Omega}{\hbar\omega_0^2} \dot{P} \vec{d}_{ab} \cdot \vec{E} - \gamma_{nr} (N_0 - N). \quad (15)$$

Связь уравнений Максвелла с соотношениями (9-10) для двухуровневой среды осуществляется через материальное уравнение для вектора электрического смещения

$$\vec{D} = \varepsilon_0 \varepsilon_r \vec{E} + 2n_a \vec{d}_{ab} P. \quad (16)$$

Таким образом, дополняя систему уравнений Максвелла (1) уравнениями (14-16), мы получаем соотношения, описывающие динамику электромагнитного излучения в двухуровневой активной среде.

Численное моделирование распространения ультракороткого импульса в среде из двухуровневых атомов

Для численных расчетов классические численные соотношения (6) дополнялись дискретной формой уравнений для двухуровневой среды. Используя правила замены производных и усреднения из соотношений (14-16), получим

$$P_{i,j,k}^{m+1/2} = \frac{2 - \omega_0^2 \delta t^2}{1 + \gamma \delta t} P_{i,j,k}^{m-1/2} - \frac{1 - \gamma \delta t}{1 + \lambda \delta t} P_{i,j,k}^{m-3/2} + \frac{\omega_0^2 \delta t^2}{\hbar \Omega} (1 + \gamma \delta t)^{-1} (d_{ab} E)_{i,j,k}^{m-1/2} N_{i,j,k}^{m-1/2}, \quad (17)$$

$$N_{i,j,k}^{m+1/2} = \frac{2 - \gamma_{nr} \delta t}{2 + \gamma_{nr}} N_{i,j,k}^{m-1/2} + \frac{2 \delta t N_0}{2 + \gamma_{nr} \delta t} (-2\Lambda + \gamma_{nr} N_0) - \frac{4\Omega}{\hbar \omega_0} (2 + \gamma_{nr} \delta t)^{-1} (d_{ab} \cdot (E^{m+1/2} + E^{m-1/2}))_{i,j,k}^m (P_i^{m+1/2} - P_i^{m-1/2}). \quad (18)$$

При расчетах использовались следующие параметры: $\delta t = 3 \cdot 10^{-17}$ с, $\delta x = 2 \cdot 10^{-8}$ м, $\omega_0 = 3 \cdot 10^{15}$ с⁻¹, $\Lambda = 0$, $d_{ab} = -2 \cdot 10^{-29}$ А·с·м, $\gamma = 1014$ с⁻¹, $\gamma_{nr} = 5 \cdot 10^7$ с⁻¹, $N_0 = 0$, $n_a = 10^{23} \sim 10^{25}$ м⁻³, амплитуда напряженности поля импульса $E_0 = 10^5 \sim 10^8$ В·м⁻¹, начальная инверсия равна -1, что соответствует полностью инвертированной среде. Изучался процесс распространения одиночного ультракороткого импульса гауссовой формы огибающей. Результаты расчета напряженности электрического поля в различные моменты времени показаны на рисунке 2. Видно, что процессы существенного искажения формы импульса происходят на временных интервалах, соизмеримых с длительностью импульса.

Моделировался также и процесс распада одиночного импульса на так называемые π -импульсы, каждый из которых полностью сбрасывает инверсию активной среды (рис. 3). На вставке изображено распределение напряженности электрического поля импульса на входе в среду. По горизонтальной оси отложен номер шага по координате. В процессе когерентного усиления исходный импульс разбивается на последовательность π -импульсов. В результате релаксационного процесса амплитуда

следующих друг за другом импульсов уменьшается, а их длительность увеличивается. Динамика π -импульсов хорошо исследована теоретически [4, 5] и согласуется с результатами вычислений, показанных на рисунках 2 и 3.

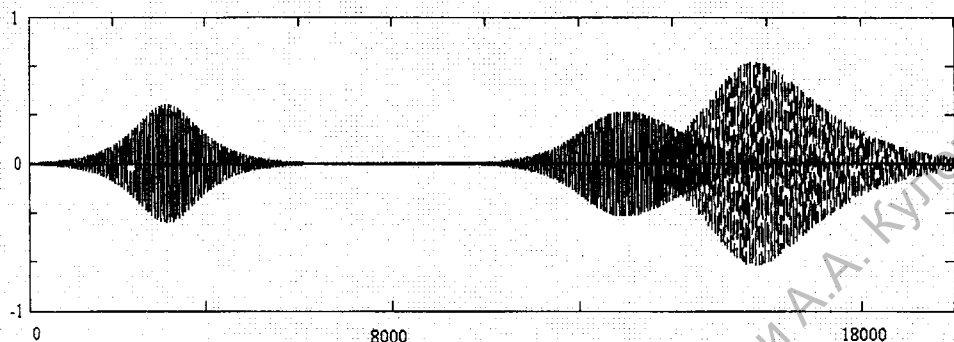


Рис. 2. Распределение нормированной напряженности электрического поля в различные моменты времени. По горизонтальной оси отложен номер временного шага

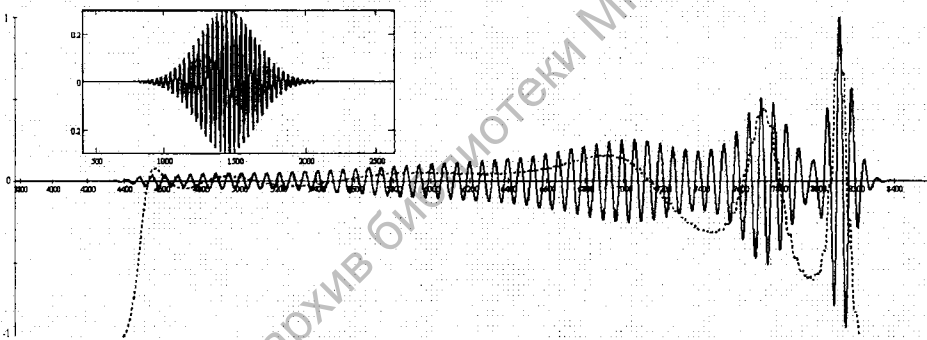


Рис. 3. Одномерное пространственное распределение нормированной напряженности электрического поля (сплошная линия) и плотности инверсии (штриховая линия)

Заклучение

Рассмотренный в работе численный метод позволяет моделировать пространственно-временную динамику ультракоротких импульсов в двухуровневой активной среде с разрешением несущей частоты излучения. Результаты пробного моделирования позволили наглядно изучить динамику поля излучения, поляризации и плотности инверсии населенностей при образовании π -импульсов. Данный метод оперирует параметрами среды, которые могут быть измерены экспериментально, что делает его удобным для количественных расчетов. Ограничением метода является значительное время вычисления для моделей больших размеров. Отчасти это может быть компенсировано оптимизацией кода и увеличением вычислительной мощности за счет использования распределенных вычислений. Распространение метода на три пространственных измере-

ния не представляет принципиальных трудностей и позволит моделировать динамику ультракоротких импульсов в световых пучках и резонаторах.

ЛИТЕРАТУРА

1. **Taflove, A.** The Finite-Difference Time-Domain Method / Allen Taflove, Susan C. Hagness – 2nd ed. – Boston: Artech House, 2000. – 850 p.
2. Ultrafast pulse interactions with two-level atoms / R.W. Ziolkowski [et al.] // Phys. Rev. A. – 1995 – Vol 52. – № 4. – P. 3082-3094.
3. FDTD Analysis of Wave Propagation in Nonlinear Absorbing and Gain Media / S. Nagra [et al.] // IEEE Trans. Antennas Propag. – 1998 – Vol 46. – № 3. – P. 334-340.
4. **Siegman, E.** Lasers / E. Siegman. – Oxford: University Press, 1986. – 1200 p.
5. **Ален, Л.** Оптический резонанс и двухуровневые атомы / Л. Аллен, Дж. Эберли. – Москва: Мир, 1978. – 223 с.

Поступила в редакцию 09.02.2009 г.