

- Тема работы.

*Взаимодействие фемтосекундных лазерных импульсов с прозрачными материалами*

- Состав коллектива (на момент выполнения работы): ФИО без сокращений, места работы/учёбы, должности, учёные степени и звания. Опционально контактный адрес электронной почты. Работающим в НГУ по совместительству указывать и основное место работы и совместительство в НГУ. Учащимся указывать все места работы и учебы.

*Жуков Владимир Петрович, с.н.с. лаб вычислительных технологий (зав. лаб. М.П. Федорук) ФИЦ ИВТ, д.ф.-м.н., zikov@ict.nsc.ru*

- Информация о гранте, гос.задании, программе исследований, ФЦП и т.п. (если есть): номер, название, руководитель, срок выполнения, ...

*Работа выполняется в рамках традиционной Базовой темы ФИЦ ИВТ (гос. задание) «Разработка и исследование вычислительных технологий решения фундаментальных и прикладных задач аэро-, гидро- и волновой динамики» под руководством академика М.П. Федорука.*

- Научное содержание работы:

1. Постановка задачи. Решаются уравнения Максвелла в цилиндрической системе координат, дополненные уравнениями гидродинамического типа для плазмы электронов зоны проводимости. Лазерный импульс инициируется граничным условием в некотором сечении по оси. Рассчитывается плотность поглощенной энергии, которая определяет модификацию материала. В работе рассматривалось 2 типа импульсов – линейно поляризованный гауссов и радиально поляризованный тороидальный (doughnut shape) импульсы.
2. Современное состояние проблемы (на момент начала работы). Модификация прозрачных материалов фемтосекундными лазерными импульсами имеет большое прикладное значение и широко используется в различных технологиях: микрообработка материалов (резка, сверление, создание микроволноводов и микроканалов, 3-мерная память, оптические решетки, офтальмология и т.п.). При этом диагностика реального физического эксперимента крайне скудная, т.к. необходимо проводить измерения в областях микронных размеров и фемтосекундной длительности. Несмотря на использование различных технологий, представления о физических процессах при этом протекающих далеко не полные. Поэтому роль численного эксперимента особенно велика. Результаты численного исследования могут быть использованы для оптимизации технологий и создания новых технологий. Ранее авторами были разработанные уникальные модели и программы для решения задач взаимодействия лазерных импульсов с прозрачными материалами. Аналогичные программы в мире существуют в небольшом количестве, но размеры расчетной области составляют несколько микрон (см., например, A. Rudenko, · Hongfeng Ma, · V.P. Veiko, · J.-P. Colombier, · T.E. Itina *On the role of nanopore formation and evolution in multi-pulse laser nanostructuring of glasses. Applied Physics A (2018) 124:63* <https://doi.org/10.1007/s00339-017-1492-2>), что явно недостаточно. Авторами настоящей работы созданы программы позволяющие решать задачи в реальной постановке. Однако эти алгоритмы также нуждаются в совершенствовании.

*Также ранее было выяснено, что инициирование лазерного импульса в расчетах формулами параксиального приближения зачастую не применимы в интересующем диапазоне параметров (сильная фокусировка и малая длительность импульса). Что требовало использования более реалистичных формул, например, опирающихся на*

интеграл Стрэттона-Чу. Этот интеграл является интегралом от быстро осциллирующей функции и его взятие весьма сложно.

Ранее в работах авторов было показано, что тороидальный импульс может обеспечить в разы большую пиковую плотность поглощенной энергии лазерного излучения по сравнению с аналогичным гауссовым импульсом. Однако этот вопрос требовал более детального изучения. В частности, использования импульсов большей энергии.

3. Подробное описание работы, включая используемые алгоритмы. На ИВЦ НГУ в основном решались задачи в следующей постановке. Лазерный импульс описывается нелинейными уравнениями Максвелла, дополненными уравнениями гидродинамического типа для плазмы свободных электронов. Типичный вариант уравнений выглядит следующим образом:

$$\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t} - \frac{i\omega}{c} \mathbf{D} = -\frac{4\pi}{c} \mathbf{j} + \text{rot } \mathbf{B} - \frac{8\pi}{c} \alpha \hbar \omega W_{PI} \frac{\mathbf{E}}{|E|^2}$$

$$\mathbf{j} = -\rho e \mathbf{v}, \quad e > 0, \quad \omega \mathbf{v} = (e/m_e) \mathbf{E} + \mathbf{v} / \tau_c, \quad \mathbf{D} = n^2 \left( 1 + \frac{c}{4\pi} n_2 |E|^2 \right) \mathbf{E}$$

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = W_{PI} + W_\sigma - \rho / \tau_r, \quad W_{PI} = W_{PI0} (1 - \rho / \rho_0) (|E|^2 / E_*^2)^\alpha,$$

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

$$\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} - \frac{i\omega}{c} \mathbf{B} = -\text{rot } \mathbf{E}$$

Основной вычисляемой величиной была плотность поглощенной энергии лазерного излучения

$$\frac{\partial E_{ab}}{\partial t} = -\frac{\rho e (\mathbf{E} \mathbf{v}^* + \mathbf{E}^* \mathbf{v})}{4} + \alpha \hbar \omega W_{PI} = \frac{\tau_c \rho e^2 |E^C|^2}{2m_e (1 + \omega^2 \tau_c^2)} + \alpha \hbar \omega W_{PI}.$$

В уравнениях использованы комплексные амплитуды. Например, физическое электрическое поле имеет вид  $(\mathbf{E} e^{-i\omega t} + \mathbf{E}^* e^{i\omega t}) / 2$ . Лазерный импульс инициируется граничным условием в некотором сечении по оси  $z$  на поперечное электрическое поле. Поэтому использовались формулы, базирующиеся на интегралах Стрэттона-Чу (ИСЧ), соответствующие фокусировке импульса параболическим зеркалом. Вычисление ИСЧ, являющимся двумерным интегралом от быстро осциллирующей функции является очень сложной задачей. Был предложен эффективный метод для ее решения.

Для решения приведенных выше уравнений Максвелла использовалась конечно-разностная схема, базирующаяся на схеме Ии. При этом определенные члены брались неявно, что необходимо для приемлемой точности расчетов. Аппроксимация по времени выглядела следующим образом:

$$\frac{1}{c} \frac{\mathbf{D}^{n+1} - \mathbf{D}^n}{\tau} - \frac{i\omega}{c} \frac{\mathbf{D}^{n+1} + \mathbf{D}^n}{2} = \frac{4\pi e \rho^n}{c} \frac{\mathbf{v}^{n+1} + \mathbf{v}^n}{2} + \text{rot } \mathbf{B}^{n+1/2} - \frac{8\pi}{c} \alpha \hbar \omega W_{PI} \frac{\mathbf{E}^n}{|E^n|^2},$$

$$\mathbf{D}^n = n^2 \left( 1 + \frac{c}{4\pi} n_2 |E^{n-1}|^2 \right) \mathbf{E}^n, \quad \omega \mathbf{v}^n = (e/m_e) \mathbf{E}^n + \mathbf{v}^n / \tau_c$$

4. Полученные результаты. Была усовершенствована основные программы: детали конечно-разностной схемы, выдаваемых данных. При расчете задач в многоимпульсном режиме на многопроцессорной машине очень удобным оказалась запись различных величин, в которой, в случае если эти величины пренебрежимо малы, то

записываемый массив содержит одно целое число – 0. Если эти величины существенные, то массив начинается с целого числа – единицы, а далее записываются массивы обсуждаемых величин. Это позволило экономить место памяти и удобно при работе программы.

Также был предложен эффективный алгоритм взятия интеграла Стрэттона-Чу, что является очень непростой задачей.

Из физических результатов отметим то, что было показано, что обнаруженный ранее эффект многократного усиления пиковой плотности поглощённой энергии в случае тороидального импульса по сравнению с гауссовым импульсом имеет место только при энергии лазерного импульса порядка одного микроджоуля. При энергии импульса около 10 микроджоулей и выше имеется обратная ситуация: пик поглощённой энергии больше в гауссовом импульсе. Соответственно, начиная с некоторого значения пика поглощённой энергии в тороидальном случае уменьшается с ростом энергии лазерного импульса.

5. Иллюстрации, визуализация результатов (опционально).

6.

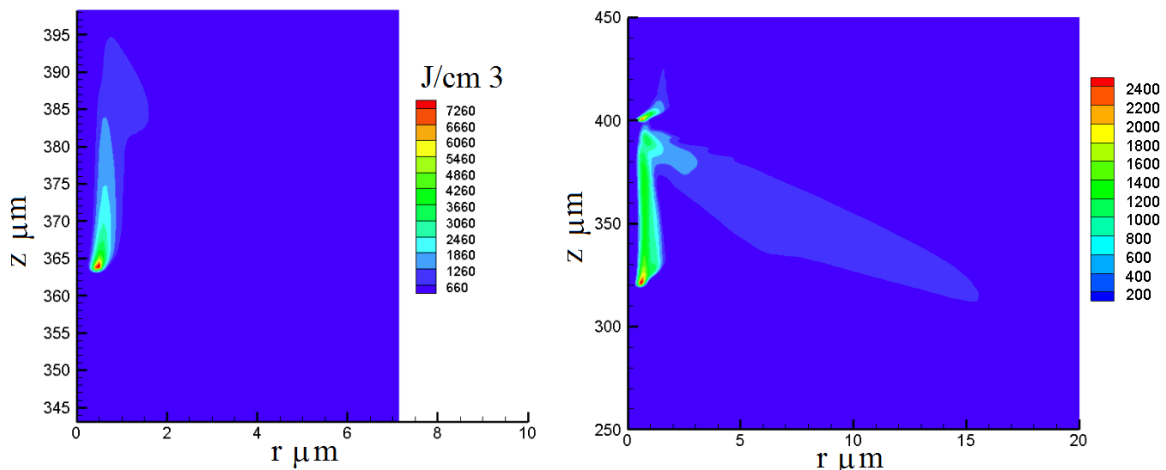


Рис. Распределение плотности поглощённой в случае тороидального импульса при умеренной энергии импульса (2 микроджоуля, слева) и большой энергии импульса (15 микроджоулей, справа).

- Эффект от использования кластера в достижении целей работы. Работа требует большие вычислительные ресурсы. Без использования кластера она была бы невозможной.
- Перечень публикаций, содержащих результаты работы (если есть). Если имеется, указать DOI, импакт-фактор журнала (Thomson Reuters, РИНЦ,...).
  1. Жуков В.П., Федорук М.П. Численная реализация модели воздействия фемтосекундного лазерного импульса на стекло в приближении нелинейных уравнений Максвелла//Математическое моделирование, 2019, т. 31, № 6, с. 107–128, (Mi mm4083) DOI: <https://doi.org/10.1134/S0234087919060078>. //V. P. Zhukov, M. P. Fedoruk Numerically Implemented Impact of a Femtosecond Laser Pulse on Glass in the Approximation of Nonlinear Maxwell Equations//Mathematical Models and Computer Simulations, 2020, Vol. 12, No. 1, pp. 77–89. DOI 10.1134/S207004822001010X . IF SJR=0.378, РИНЦ=0.613.
  2. V.P. Zhukov, S. Akturk, N.M. Bulgakova Asymmetric interactions induced by spatio-temporal couplings of femtosecond laser pulses in transparent media// Journal of the

*Optical Society of America B*, 2019, Vol. 36, Issue 6, pp. 1556-1564.

<https://doi.org/10.1364/JOSAB.36.001556> . IF=2.058.

3. Жуков В.П., Федорук М.П. Высокоэффективный метод вычисления интеграла Стрэттона – Чу в задачах взаимодействия лазерного излучения с веществом // *Вычислительные технологии*, 2021, том 26, N 3, с. 42–60 (*Computational Technologies*, 2021, vol. 26, no. 3, pp. 42–60), ISSN 1560-7534. DOI: 10.25743/ICT.2021.26.3.004. SJR=0.116, РИНЦ =0.546.
  4. В.П. Жуков, М.П. Федорук Реализация граничных условий при моделировании модификации материалов лазерными импульсами// *Математическое Моделирование* 2023, т. 35, N 4, с. 65-87. NGTU, FRC ICT. Math-Net.Ru 0.385, Scopus SJR 0.407// Zhukov, V.P., Fedoruk, M.P. Boundary Conditions in Modeling the Modification of Materials by Laser Pulses. *Math Models Comput Simul* 15, 905–919 (2023). <https://doi.org/10.1134/S2070048223050149> . IF SJR=0.378, РИНЦ=0.613.
  5. Zakerstein, M.; Zhukov, V.P.; Meshcheryakov, Y.P.; Bulgakova, N.M. From Localized Laser Energy Absorption to Absorption Delocalization at Volumetric Glass Modification with Gaussian and Doughnut-Shaped Pulses// *Photonics* 2023, 10, 882. <https://doi.org/10.3390/photonics10080882> . Qwartil=2, SJR=0.479, IF=2.536.
- Опционально: ваши впечатления от работы вычислительной системы и деятельности ИВЦ НГУ, а также предложения по их совершенствованию.

*Работа ИВЦ вполне устраивает, хотя пожелания увеличение производительности (памяти, количества процессоров, быстродействия) будут всегда. Существенный недостаток кластера – проблемы работы летом – перегрев.*

#### **Аннотация**

*На ИВЦ НГУ решались задачи взаимодействия фемтосекундного лазерного импульса со стеклами. Получены интересные и важные для практики результаты по зависимости пика поглощенной энергии тороидального (doughnut) импульса от его энергии. Оказалось, что аномально большие значения этого пика наблюдаются только при умеренных энергиях лазерного импульса. При больших энергиях величина пика уменьшается. В процессе работы также были усовершенствованы программы. Был разработан метод взятия интеграла Стрэттона-Чу, который необходим для постановки граничных условий для уравнений, описывающих распространение нелинейного лазерного импульса в стеклах.*