بیست و یکمین کنفرانس اپتیک و فوتونیک ایران
و هفتمین کنفرانس مهندسی و فناوری فوتونیک ایران
۲۳ تا ۲۵ دی ماه ۱۳۹۳، دانشگاه شهید بهشتی

مدل‌سازی عددی یونیزاسیون گاز توسط پالس لیزر با استفاده از روش شبیه‌سازی ذره در جعبه (PIC)

الناز خلیل زاده[۱و۳]، جمال الدین یزدان‌پناه[۲و۳] و امیر چخماچی[۳]

[۱] دانشکده فیزیک، دانشگاه خوارزمی
[۲] دانشکده فیزیک، دانشگاه صنعتی شریف
[۳] پژوهشکده فیزیک پلاسما و گداخت هسته ای

در این مقاله، نحوه مدل سازی یونیزاسیون گاز هیدروژن توسط پالس لیزر با استفاده از روش شبیه سازی ذره در جعبه آمده است. نرخ-های مختلف یونیزاسیون به ازای مقادیر مختلف شدت میدان الکتریکی بررسی شده است. الگوریتم کد شبیه سازی ذره در جعبه برخوردی با استفاده از روش آماری مونت کارلو توصیف شده و با استفاده از آن، کد نگارش شده است. نتایج حاصل از این کد شبیه سازی، نشاندهنده آن است که می‌توان از این کد برای بررسی دقیق مسائلی در برهمکنش لیزر- پلاسما، که یونیزاسیون در آنها نقش مهمی را بازی می‌کنند استفاده کرد.

کلید واژه- برهمکنش لیزر با ماده، شبیه سازی ذره در جعبه، مونت کارلو، یونیزاسیون

Numerical Modeling of Gas Ionization by Laser Field with Particle in Cell Simulation

Elnaz Khalilzadeh [1, 3], Jamal Yazdanpanah[2, 3], Amir Chakhmachi[3]

[1] Department of Physics, Kharazmi University
[2] Department of Physics, Sharif University of Technology
[3] Plasma Physics & Fusion Research School

In this paper, a numerical model based on particle in cell simulation (PIC) is introduced to investigate the field ionization by a nonrelativistic laser field when it propagates through the Hydrogen atoms. For this purpose, different ionization rate and its probability have been investigated. The ionization phenomena were studied by Monte Carlo calculation. Results indicate that this code can be used for detailed study of phenomena associated with laser interaction with plasma.

Keywords: laser-matter interaction, particle in cell simulation, Monte Carlo, ionization

[Downloaded from opsi.ir on 2024-10-12]

این مقاله در صورتی دارای اعتبار است که در سایت www.opsi.ir قابل دسترسی باشد.

۱- مقدمه

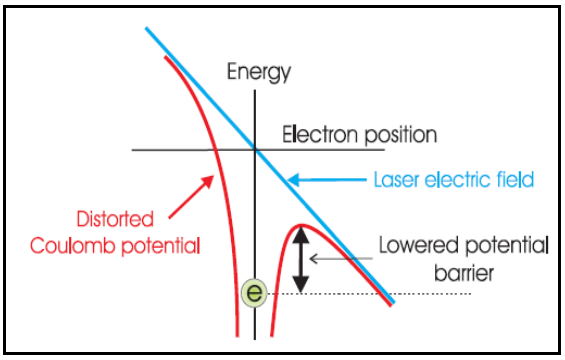
امروزه از روش شبیه‌سازی ذره در جعبه (particle in cell) به دلیل قابلیتهای خاص و نتایج دقیق آن در بسیاری از حوزه‌های فیزیک پلاسما از جمله برهمکنش پالس لیزر با پلاسما استفاده می‌شود. در اکثر کدهای تهیه شده، پلاسما به صورت پیش‌فرض بوده و مرحله یونیزاسیون و چگونگی تشکیل پلاسما در نظر گرفته نمی شود. در حالت کلی باید حالت اولیه‌ی ماده را خنثی در نظر بگیریم و اجازه دهیم که پلاسما به صورت خودسازگار با ورود پالس لیزر ایجاد شود. بنابراین کدهای شبیه‌سازی ذره‌ای غیر برخوردی باید به گونه‌ای گسترش یابند تا مرحله یونیزاسیون را در بربگیرند که این کار مستلزم اضافه کردن حلقه مونت کارلو به الگوریتم کد شبیه‌سازی ذره‌ای غیربرخوردی [۱] است. این موضوع از جمله مطالعات به روز در این زمینه بوده [۲] و جهت دستیابی به نتایج دقیق و فهم درست از تمامی مکانیسم‌ها و پدیده های همراه با برهمکنش لیزر- پلاسما ضروریست. در این مقاله، یک حلقه آماری مونت کارلو به الگوریتم کد شبیه سازی ذره‌ای غیربرخوردی موجود[۶]، برای بررسی مرحله یونیزاسیون و تشکیل پلاسما اضافه شده است. مکانیسم های مختلف یونیزاسیون و احتمالات مختلف در نظر گرفته‌شده‌است و در نهایت یک کد ذره‌ای برخوردی که می‌توان از آن برای مطالعه دقیق پدیده‌های همراه با برهمکنش لیزر-پلاسما استفاده کرد بدست آمده است.

۲- تئوری مساله:

یونیزاسیون فرایند اصلی برهمکنش پالس لیزر با ماده می‌باشد. هنگامیکه اتمی تحت تاثیر تابش قوی قرار می-گیرد الکترون‌های آن اتم از طریق مکانیسم‌های مختلف می‌توانند آزاد شوند. Keldysh [۳] نشان داد که مرز بین یونیزاسیون از طریق تونلزنی (Tunneling ionization) و یونیزاسیون چند فوتونی (Multi photon ionization) توسط پارامتر γ بیان می شود:

$$\gamma = \sqrt{\frac{I_p}{2U_p}} \qquad (۱)$$

که γ پارامتر Keldysh، I_p انرژی یونیزاسیون و $U_p = eE_{laser} / 4m_e\omega_{laser}^2$ میانگین زمانی انرژی جنبشی است که الکترون در میدان لیزر بدست می‌آورد. برای حالت $\gamma^2 >> 1$ یونیزاسیون از طریق جذب فوتون بوده و برای $\gamma^2 << 1$ یونیزاسیون از طریق تونلزنی می‌باشد.



شکل ۱: یونیزاسیون از طریق تونلزنی

در این کد، مشخصات پالس لیزر به‌گونه‌ای است که یونیزاسیون TI را در برمی‌گیرد. مطابق شکل ۱، الکترونی که در چاه پتانسیل غیر مختل یک اتم به اندازه I_p قرار دارد تحت تاثیر میدانهای الکتریکی و مغناطیسی پالس لیزر با فرکانس نوسانی ω قرار می‌گیرد. زمانیکه $E \le 0.084$ میدان الکتریکی لیزر، چاه پتانسیل اتمی را مختل کرده و ارتفاع سدی را که برای خروج الکترون وجود داشت پایین می‌آورد و باعث می‌شود الکترون از روی سد تونل زنی کرده و از حالت مقید به هسته خارج شود. با تکیه بر تئوری کوانتومی و پس از حل معادله شرودینگر که با تقریبهایی همراه بوده، بهترین رابطه برای نرخ تونلزنی اتم هیدروژن، توسط Landau به صورت زیر ارائه شده است [۴]:

$$w(t) = \frac{4}{E_{laser}} \exp(-\frac{2}{3E_{laser}}). \qquad (۲)$$

با بالا رفتن شدت میدان الکتریکی، زمانیکه مقدار میدان الکتریکی لیزر از یک مقدار بحرانی $E_{critical}$ بیشتر باشد سد تا اندازه‌ای فشرده می‌شود که الکترون بدون تونلزنی می‌تواند بگریزد. به این حالت، یونیزاسیون با خذف سد پتانسیل کولومبی گفته می‌شود. Bauer این مقدار بحرانی برای اتم هیدروژن را به صورت زیر بدست آورد [۴]:

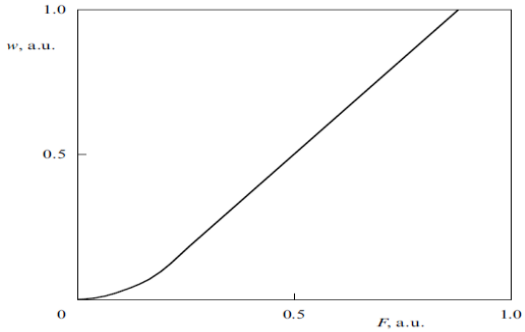
$$E_{critical} = (\sqrt{2}-1)\left|I_p\right|^{3/2} = 0.146 \ \ a.u \qquad (۳)$$

برای نرخ یونیزاسیون برای میدان‌های الکتریکی حوالی میدان بحرانی، $0.084 < E < 0.2$، یکی از بهترین روابط بدست آمده، رابطه تجربی Mulsner می‌باشد [۴]:

$$w(t) = 2.4 \ \ E_{laser}(t)^2 \qquad (۴)$$

دربدست‌آوردن روابط (۲) و (۴) با توجه به کم بودن شدت میدان الکتریکی اثر اشتارک در نظر گرفته نشده است. در میدان‌های قوی‌تر این اثر باعث جابجایی ترازهای انرژی در اتم هیدروژن می‌شود. در شکل ۲ نرخ یونیزاسیون

[Downloaded from opsi.ir on 2024-10-12]



شکل ۲: نرخ یونیزاسیون برای اتم H با در نظر گرفتن اثر اشتارک

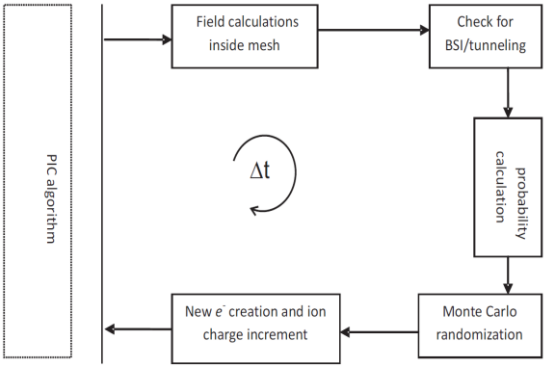
با در نظر گرفتن اثر اشتارک به صورت عددی بدست آمده است [۵] که در میدانهای ضعیف با روابط (۲) و (۴) همخوانی دارد. در روابط مربوط به نرخ یونیزاسیون بدست آمده و استفاده شده در بسیاری از کدهای موجود، سرعت اولیه الکترونهای خروجی صفر در نظر گرفته شده، در این کد ما از مقادیر غیر صفر برای سرعت الکترونها مطابق رابطه زیر استفاده کرده‌ایم [۵] :

$$w = w(0)\exp\left[-\frac{p_{\parallel}^{2}\omega^{2}(2I_p)^{3/2}}{3F^3}-\frac{p_{\perp}^{2}(2I_p)^{1/2}}{F}\right] \qquad (۵)$$

که $p_{\perp}, p_{\parallel}$ تکانه الکترون خروجی در جهت موازی و عمود بر جهت قطبش میدان لیزر است. و $w(0)$ همان روابط (۲) و (۴) و نتایج شکل ۲ می‌باشند.

۳- روش شبیه‌سازی و الگوریتم مساله:

به صورت خلاصه، در کدهای شبیه‌سازی ذره در جعبه (PIC) فرایندی که به نحو مناسبی ارتباط بین ذرات و میدان ها را با نقاط شبکه بر قرار می‌کند درون‌یابی میدان ها در موقعیت ذرات و تخصیص بار بر روی شبکه است. به این ترتیب در ابتدا میدان‌های بدست آمده از معادلات ماکسول که بر روی نقاط شبکه تعریف شده‌اند با استفاده از روش‌های درون‌یابی در موقعیت ذرات محاسبه می‌شوند [۶]. نیروهای اعمال شده بر ذرات در معادله نیوتن-لورنتز باعث تحول در موقعیت و سرعت ذرات می‌شوند، به این ترتیب با استفاده از موقعیت و سرعت جدید و بکارگیری روش‌های وزن‌دهی بار به نقاط شبکه، چگالی بار و چگالی جریان بر روی نقاط شبکه محاسبه می‌شوند. در این کد برای در نظرگرفتن برخورد پالس لیزر با ماده گازی، روش آماری مونت کارلو را به الگوریتم مشخص PIC غیر برخوردی اضافه می‌کنیم. این حلقه، پس از محاسبه بار و جریان در هرگام زمانی و قبل از انتگرال‌گیری معادلات



شکل ۴: الگوریتم کلی PIC برخوردی

ماکسول، اضافه می‌شود. مطابق شکل ۴، در هر گام زمانی مقدار میدان الکتریکی اعمالی به هر ذره در اثر میدان‌های خارجی و میدان‌های داخلی ناشی از ذرات باردار محاسبه می‌شود. با توجه به اندازه میدان الکتریکی، یکی از روابط یونیزاسیون بر اساس روابط (۲) و (۴) و نتایج شکل ۲ انتخاب می‌شود. در ادامه با استفاده از رابطه (۵)، یک سرعت اولیه به ذره خنثی نسبت داده شده و نرخ یونیزاسیون محاسبه می‌شود. سپس با استفاده از رابطه $p_i = w(t)\delta t$ (دلیل استفاده از این رابطه مقدار کوچک δt می‌باشد.) احتمال یونیزاسیون بدست می‌آید. با استفاده از مولد اعداد تصادفی یکنواخت، کد یک عدد P_0 را انتخاب می‌کند اگر $P_0 < P_i$ ذره یونیزه شده و یک الکترون و یون هیدروژن در مکان ذره تولید می‌شود. در غیر اینصورت ذره یونیزه نشده و در گام‌های زمانی بعدی همین فرایند تکرار می‌شود. یکی از مسائل مهم که باید به آن توجه کرد حفظ پایستگی انرژی در کد می‌باشد. در واقع باید انرژی که صرف یونیزه‌کردن اتم‌ها شده از پالس لیزر کم شود. این کار از طریق اضافه کردن یک جریان مجازی به جریان الکتریکی در هر سلول و در هر گام زمانی انجام می‌شود. این جریان هم جهت با میدان الکتریکی بوده و به صورت زیر است [۷]:

$$\vec{j}_{ion} = \frac{\vec{E}\ n\ (I_p + u_k)}{\delta t\left|\vec{E}\right|^2} \qquad (۶)$$

که n چگالی تعداد الکترون های یونیزه شده در هر گام زمانی و u_k انرژی جنبشی اولیه آن‌ها می‌باشد.

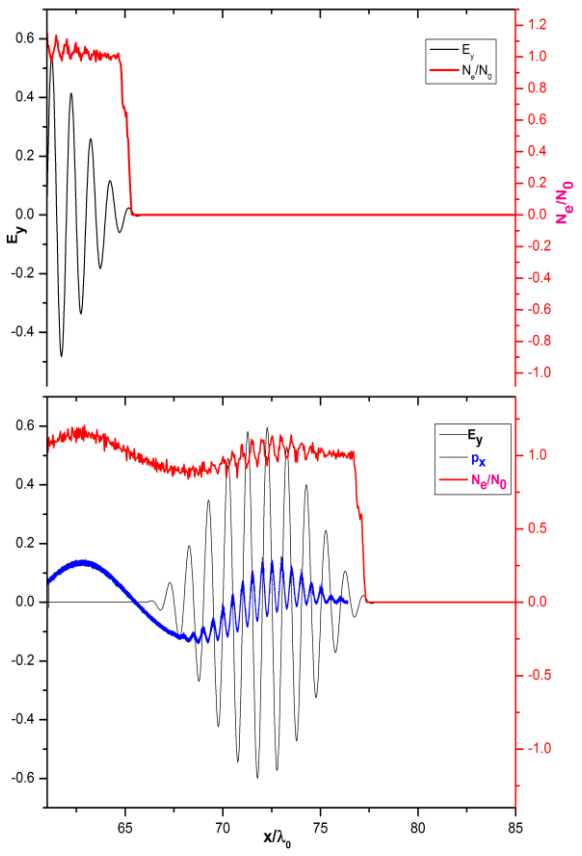
۴- نتایج شبیه سازی:

مشخصات کد تک بعدی در مکان و دوبعدی در سرعت موجود به این صورت است که فضای شبیه‌سازی تک بعدی X دارای ابعاد 160 μm برابر با 32000 خانهٔ شبکه

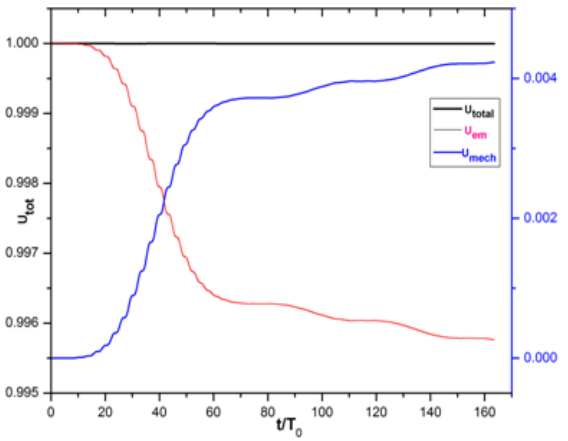
[Downloaded from opsi.ir on 2024-10-12]

می‌باشد. پالس لیزری، یک پالس گوسی با طول موج $\lambda = 1\,\mu m$ و پلاریزهٔ خطی در جهت y است که از دیوارهٔ سمت چپ فضای شبیه‌سازی به داخل شبکه تزریق شده و در راستای x منتشر می‌شود. شدت پالس لیزری در شبیه‌سازی‌های انجام شده $I = 36\times10^{16} W/cm^2$ است. اندازه هر سلول شبیه سازی $\Delta x = 0.005\,\mu m$ می باشد. اتم‌های خنثی گاز هیدروژن در محدوده $60\,\mu m$- $120\mu m$ به صورت یکنواخت توزیع شده اند و چگالی گاز هیدروژن برابر با $n_H = 1.22\times10^{25} cm^{-3} \equiv 0.01 n_{cr}$ می باشد.

در واقع هدف در این مقاله، نشان دادن نحوه مدل‌سازی مرحله یونیزاسیون در برهمکنش پالس لیزری با ماده، با استفاده از روش شبیه‌سازی ذره در جعبه بود. برای تست کد بدست آمده، نمودار میدان الکتریکی پالس لیزر و چگالی الکترون‌های تشکیل شده و فضای فاز آن‌ها را در شکل ۵، و در بازه‌های زمانی مختلف که پالس لیزر وارد جعبه شبیه‌سازی می‌شود مشاهده می‌کنید.



شکل ۵ : نمودار میدان الکتریکی پالس لیزر و چگالی الکترون‌های تشکیل شده و فضای فاز آن‌ها



شکل ۶: نمودار انرژی کل و انرژی مکانیکی و انرژی الکترومغناطیسی

در شکل ۵، موج پلاسمایی تشکیل شده کاملا مشخص بوده و نشان از کارکرد صحیح کد موجود دارد. نمودار مربوط به پایستگی انرژی کل که مجوع انرژی مکانیکی ذرات و انرژی الکترومغناطیسی می‌باشد را در شکل ۶ می بینید. در انتها با توجه به نتایج بدست آمده می‌توان گفت کد شبیه‌سازی ذره‌ای برخوردی موجود، قادر است مرحله یونیزاسیون را بدرستی مدلسازی کرده و برای بررسی کامل و جامع مسائلی در پلاسما که در آنها برخورد و چگونگی انتشارپالس لیزر در محیط اهمیت دارند بکار رود.

مراجع

[1] A. J. Kemp, R. E. W. Pfund and M. T. Vehn, "*Modeling ultrafast laser driven dynamics with Monte Carlo collisional particle in cell simulations*", **Phys. Plasmas** 11, No.12 (2004) 5648-5657.

[2] M. Chen, E. Cormier-Michel and et al, "*Numerical modeling of laser tunneling ionization in explicit particle-in-cell codes*", **J. of Computational Physics** 236, No.10 (2013) 220–228.

[3] L. V. Keldysh, *"Ionization in the Field of a Strong Electromagnetic Wave"*, **Zh. Eksp. Teor. Fiz.** 47, No.5 (1964) 1945-1951.

[4] D. Bauer and P. Mulser, "*Exact field ionization rates in the barrier-suppression regime from numerical time-dependent Schrodinger-equation calculations* "**Phys. Rev. A** 59, No 1 (1999) 569-578.

[5] N.B. Delone, V.P. Krainov, "*Tunneling and Barrier Suppression Ionization of Atoms and Ions in a Laser Radiation Field*", **Physics-Uspekhi** 41, No. 5 (1998) 469- 485.

[6] J. Yazdanpanah and A. Anvari ;" *Time and space extended-particle in cell model for electromagnetic particle algorithms*"; **Phys. Plasmas** 19, No.3 (2012) 033110-033117.

[7] P. Mulser, F. Cornolti, and D. Bauer, "*Ejection energy of photoelectrons in strong-field ionization* "**Phys. Plasmas** 5, No 3 (1998) 4466-4474.

[Downloaded from opsi.ir on 2024-10-12]