

ЗОНАЛЬНЫЙ ПОДХОД К МНОГОМЕРНОМУ МОДЕЛИРОВАНИЮ ЛАЗЕР-КЛАСТЕРНОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ В БОЛЬШИХ ПРОСТРАНСТВЕННЫХ ОБЪЕМАХ

Д. А. Гожев

В работе представлен метод, который позволяет свести полноценное ресурсозатратное 3D PIC моделирование взаимодействия лазерного излучения с большим объемом кластерной/капельной среды к серии более простых расчетов путем разбиения области взаимодействия на небольшие зоны. Показано, как с помощью нормирования получившихся спектров ускоренных ионов возможно существенно снизить количество необходимых расчетов путем интерполяции полученных данных.

Ключевые слова: лазерное ускорение дейтронов в плазме, релятивистски интенсивный лазерный импульс, микроструктурированные мишени, микрокапельная среда.

Введение. Взаимодействие мощного релятивистского лазерного излучения с разнообразными микроструктурированными мишенями [1–8] представляет интерес для множества фундаментальных и прикладных задач из-за более эффективного поглощения лазерного излучения, увеличенного выхода и энергии как заряженных частиц, так и вторичного электромагнитного излучения по сравнению с традиционными сплошными твердотельными мишенями. К структурированным мишеням можно отнести кластерные/капельные среды. Кластерная плазма выделяется благодаря сочетанию двух её особенностей. С одной стороны, низкая средняя атомная плотность среды (порядка 10^{18} см $^{-3}$), а с другой – высокая плотность самих кластеров, сравнимая с твердотельной плотностью. Использование субмикронной кластерной плазмы позволяет ускорить электроны до энергий, превышающих пондеромоторную, за счет объемного стохастического нагрева в сложных лазерно-кластерных полях [9]. Капельные/кластерные мишени также хорошо подходят для экспериментов с лазерными системами, которые работают с высокой частотой следования импульсов [10].

Средняя электронная плотность кластерной среды значительно ниже критической плотности $n_c = m_e \omega^2 / (4\pi e^2)$, где m_e, e – масса и заряд электрона, ω – частота лазера. Благодаря этому среда прозрачна для лазерного излучения, и лазерный импульс может распространяться на десятки и сотни микрон. С другой стороны, из-за твердотельной плотности кластеров требуется высокое пространственное разрешение, по крайней мере $\lambda/100$. Из-за этого моделирование взаимодействия лазерного излучения с большим объемом кластерной среды с помощью метода “частица-в-ячейке” (3D PIC) требует значительных вычислительных мощностей, которыми не располагают обычные академические вычислительные центры. Как правило, при моделировании рассматривают взаимодействие лазерного излучения только с отдельными кластерами, например, для изучения процесса ускорения электронов [11] или генерации магнитных диполей [12]. Однако такой подход не позволяет адекватно определить, какая часть энергии лазера преобразуется в энергию заряженных частиц или вторичного излучения во всём объёме взаимодействия. Это связано с тем, что лишь небольшая часть энергии лазера переходит в энергию электронов одного отдельного кластера, что приводит к значительным погрешностям при оценке общего объёма взаимодействия.

Целью данной работы является развитие метода, описанного в работах [9, 13–15]. Этот метод позволяет заменить сложное полноценное моделирование большого объема кластерной среды на серию более простых расчетов.

Постановка задачи и параметры PIC моделирования. На рис. 1 представлена схема области взаимодействия лазерного излучения с кластерной средой. Весь объём кластерного газа можно разделить на области, где интенсивность излучения уменьшается не более чем в e раз. В этих областях лазерно-плазменное взаимодействие можно моделировать отдельно. Разбиение на прямоугольные ячейки показано на рис. 1. Выбор размера области моделирования должен отвечать нескольким требованиям. Во-первых, поперечный размер области $Y = Z$ должен быть мал по сравнению с размером лазерного пятна $Y \ll D_0$, что позволит использовать при моделировании плоскую волну с огибающей. С другой стороны, поперечный размер области моделирования должен быть кратен среднему расстоянию между кластерами s , чтобы можно было использовать периодические граничные условия по полям и частицам в поперечном направлении. Это позволяет исследовать сложное стохастическое движение электронов между кластерами [9] на масштабах больших, чем поперечный размер расчетной области, а также предотвращает поглощение большого числа заряженных частиц на боковых стенках области моделирования, в отличие от случая поглощающих граничных условий. Про-

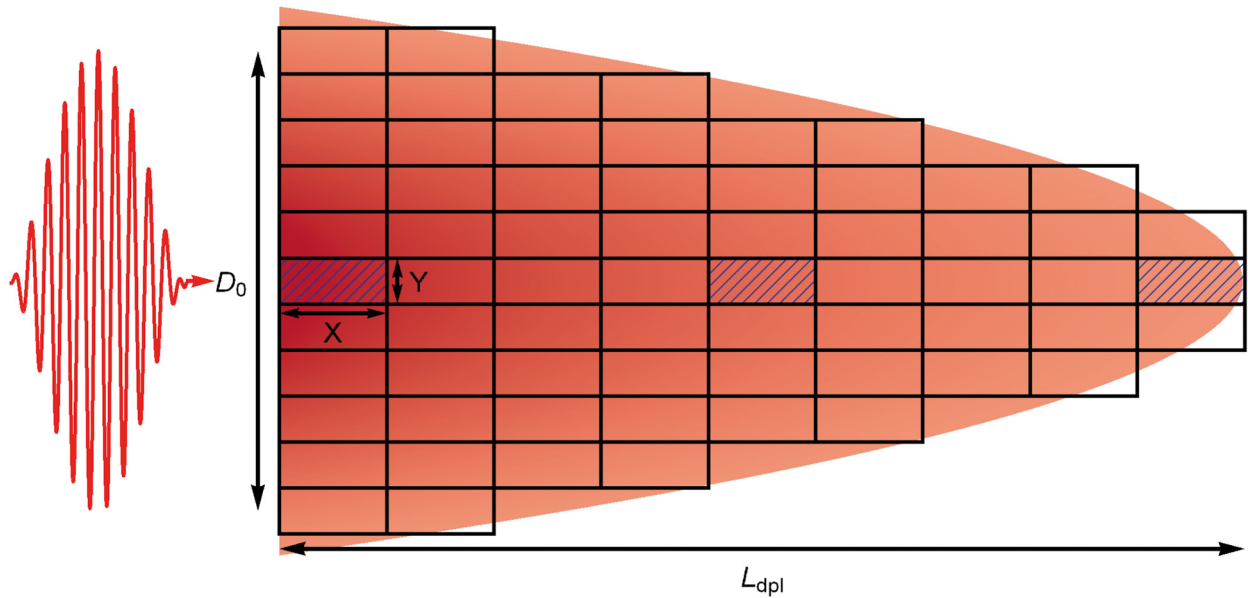


Рис. 1: Схема области взаимодействия лазерного излучения с кластерной плазмой. Показано разделение всей области взаимодействия, в которой интенсивность излучения уменьшается не более чем в e раз относительно начального значения, на прямоугольные ячейки (зоны).

дольный размер расчетной области X должен быть больше, чем характерная длина лазерного импульса, $X > c\tau_L$, где c – скорость света в вакууме, а τ_L – длительность лазерного импульса по полувысоте (FWHM). В этом случае лазерный импульс целиком поместится в расчетную область. Для более точного определения длины истощения лазерного импульса желательно, чтобы размер области моделирования был таким, чтобы энергия, поглощенная внутри области моделирования, составляла не менее 5% от энергии прошедшего лазерного излучения. В противном случае следует увеличить продольный размер расчетной области, чтобы она включала большее количество кластеров. По мере распространения лазерного излучения в продольном направлении интенсивность лазерного импульса будет постепенно уменьшаться. Соответственно, интенсивность на входе в следующую область моделирования должна быть меньше, чем интенсивность на входе в предыдущую область. Будем называть области моделирования зонами.

Чтобы лучше понять суть описываемого метода, рассмотрим его на конкретном примере. С помощью PIC кода “Mandor” [16] было проведено моделирование взаимодействия лазерного излучения с D_2O кластерной средой. Линейно-поляризованный (вдоль оси y) лазерный импульс распространялся в положительном направлении оси x .

Он задавался в приближении плоской волны с временной гауссовой огибающей $I_L \propto \exp(-(2(t - t_{0f})^2/\tau_*^2))$, где $\tau_{\text{off}} = 3\tau_L$ – время, через которое пик лазерного импульса входит в расчетную область после начала моделирования, $\tau_* = \tau_L/\sqrt{2\ln 2}$, а длительность лазерного импульса (FWHM) была равна $\tau_L = 30$ фс. В расчетах длина волны излучения $\lambda = 1$ мкм, а интенсивность варьировалась от 2×10^{18} до 3.4×10^{19} Вт/см², что соответствует изменению безразмерной амплитуды лазерного поля a от 1.2 до 5, где $a = 0.85 \times 10^{-9} \sqrt{I_L \lambda^2}$. Продольный размер расчетной области равен $X = 13\lambda > c\tau_L$, а поперечный размер $Y = Z = 9.6\lambda$. Представленный метод позволяет проводить моделирование для широкого диапазона энергий лазерного импульса при соблюдении условия $Y \ll D_0$. В поперечном направлении по полям и частицам использовались периодические граничные условия, а в продольном – для электромагнитных полей использовались условия впуска–выпуска, а частицы, достигшие границы, выводились из расчета.

Кластеры в моделировании представляли собой сферические капли тяжелой воды D₂O. Их диаметр составлял $d = 0.4\lambda$, а электронная плотность была равна $n_e = 200n_c$. Внутри расчетной области кластеры располагались случайным образом, но среднее расстояние между их центрами было равно $s = 4.8\lambda$. В пространстве между кластерами был вакуум, а средняя электронная плотность $n_{e,av} = \pi d^3 n_e / (6s^3) \approx 0.06n_c$. Стоит отметить, что периодические граничные условия не вносят регулярности, которая может изменить предполагаемый стохастический характер движения электронов из-за наличия нескольких кластеров в поперечных направлениях со случайным положением их центров. Проведенные расчеты с другим положением кластеров не выявили существенного изменения в спектрах электронов или ионов. В процессе расчетов дейтроны (полностью ионизованные) и кислород (с зарядом 6) были подвижны.

Результаты моделирования и метод зон. Как уже упоминалось ранее, низкая плотность среды позволяет излучению распространяться на значительные расстояния, порой достигающие сотни микрон. Соответственно, продольная длина, на которой интенсивность излучения уменьшится в e раз, удовлетворяет условию: $L_{\text{dpl}} \gg X$. Моделирование показало, что коэффициент поглощения лазерной энергии в расчетной области A практически не зависит от входной амплитуды лазерного излучения. В результате изменение интенсивности на оси лазерного пучка хорошо описывается формулой:

$$I(x) = I_L \exp\left(-\frac{x}{L_{\text{dpl}}}\right), \quad L_{\text{dpl}} = -X/\ln(1 - A). \quad (1)$$

Для описываемых параметров лазерно-плазменного взаимодействия $L_{\text{dpl}} \approx 220\lambda$. Даже если рассматривать только последовательные зоны вдоль оси лазерного пучка

ка, не принимая во внимание зоны в поперечном направлении, и задавать интенсивность в каждой зоне согласно формуле (1), то для моделирования потребуется $n \approx L_{\text{dpl}}/X > 15$ зон. Чтобы учесть все зоны, где начальная интенсивность излучения уменьшается не более чем в e раз, потребуется значительно больше моделирований. Подобную серию PIC расчетов возможно провести с использованием доступных академических компьютерных ресурсов, в отличие от полноразмерного моделирования во всей области взаимодействия. Однако даже в таком случае потребуется значительное время. Например, при энергии лазерного импульса $W = 3$ Дж и $a = 1.2$ диаметр фокального пятна будет равен $D_0 \approx 80\lambda$. Тогда грубо можно оценить необходимое количество зон как $L_{\text{dpl}}/X \times (D_0/Y)^2 \approx 1100$. При этом моделирование одной зоны занимает примерно 24 часа при использовании ≈ 400 ядер.

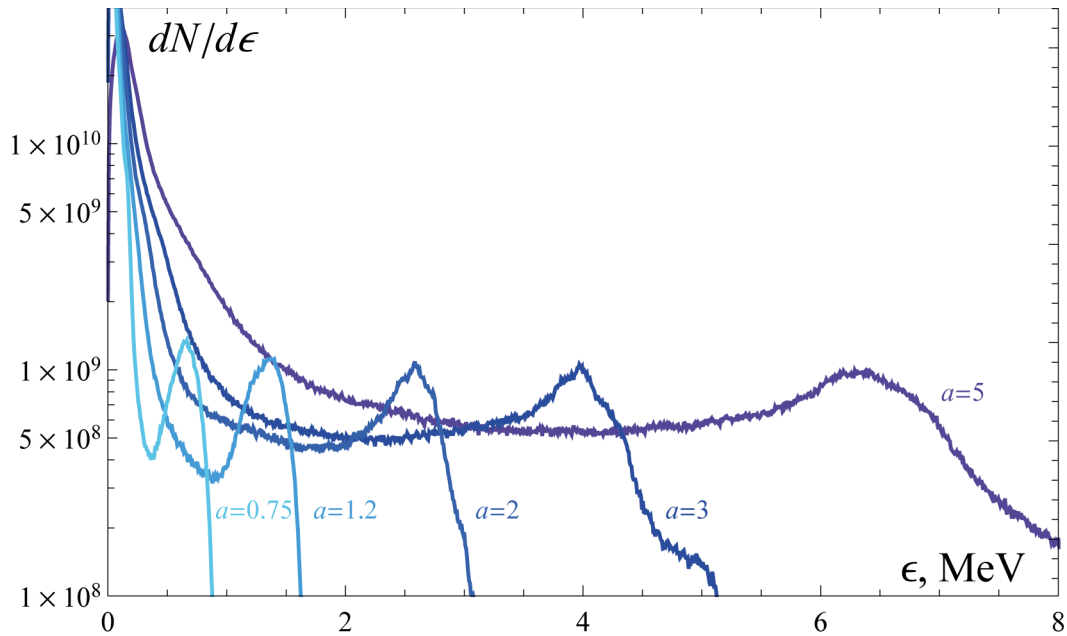


Рис. 2: Спектры дейтронов внутри одной зоны на момент времени $\tau = 265$ фс при $a = 0.75, 1.2, 2, 3, 5$.

Давайте рассмотрим, как можно значительно уменьшить количество необходимых расчетов. На рис. 2 продемонстрированы спектры дейтронов, полученные в расчетной области (зоне) при различных начальных $a = 0.75, 1.2, 2, 3, 5$. В этих спектрах можно выделить две группы дейтронов: холодные и горячие. Спектр холодных дейтронов хорошо описывается экспоненциальным распределением. В описываемом случае больших кластеров горячие дейтроны ускоряются за счет поля разделения зарядов [15], а

их спектр характеризуется широкой областью плато в области высоких энергий. Хотя характерная энергия дейтронов в спектрах отличается, форма спектров для всех показанных a похожа. Чтобы проиллюстрировать это, введем спектральные вспомогательные функции (СВФ) f :

$$\frac{dN}{d\xi} = N_0 f(\xi, \alpha), \quad \int_0^1 d\xi f(\xi, a) = 1, \quad (2)$$

где $\xi = \epsilon/\epsilon_{\max}$ – обезразмеренная энергия дейтрона, и N_0 – полное число дейтронов в зоне, ϵ_{\max} – энергия отсечки спектра дейтронов в зоне по половинному уровню от уровня плато спектра. Для примера, положение ϵ_{\max} для $a = 3$ показано на рис. 2

На рис. 3(а) сплошными кривыми показаны $f(\xi)$ для тех же значений a , что и на рис. 2. С увеличением интенсивности доля более быстрых частиц возрастает, но форма $f(\xi)$ остается практически неизменной. На рис. 3(б) продемонстрирована зависимость ϵ_{\max} от a , которая может быть аппроксимирована линейной функцией. Это позволяет получить приблизительный спектр дейтронов в зоне с заданной входной интенсивностью, не прибегая к моделированию. Для этого необходимо определить коэффициенты прямой $\epsilon_{\max}(a)$, а также получить $f(\xi, a_1)$ и $f(\xi, a_2)$, т.е. выполнить расчеты для двух зон с входными амплитудами лазерного поля a_1 и a_2 , соответственно. Если a_1 и a_2 отличаются незначительно (желательно не более чем в 2 раза), то для определения $f(\xi, a_x)$ при условии, что $a_1 < a_x < a_2$, можно использовать простую линейную интерполяцию:

$$F(\xi, a_x) = f(\xi, a_1) + (f(\xi, a_2) - f(\xi, a_1)) \frac{a_x - a_1}{a_2 - a_1}. \quad (3)$$

В качестве примера на рис. 3(а) пунктирной линией показана функция f , полученная с помощью формулы (3) для случаев $a = 1.2, 2, 3$. Для этого были использованы значения функций f при соседних значениях a . Результаты моделирования хорошо согласуются с результатами интерполяции, что свидетельствует о высокой надежности формулы (3). Зная объем зоны и среднюю плотности среды, можно найти N_0 . Затем, используя линейную зависимость $\epsilon_{\max}(a)$ от a , можно найти нужное значение ϵ_{\max} . Зная функцию f , N_0 и ϵ_{\max} для данной зоны, можно легко получить спектр дейтронов в этой зоне, используя формулу (2).

После рассмотрения сути метода зон и аппроксимаций с помощью СВФ вернемся к схеме, представленной на рис. 1, и найдем общий спектр дейтронов во всей области взаимодействия. Чтобы определить характерную продольную длину, на которой интенсивность лазерного излучения уменьшается в e раз, необходимо провести моделирование в

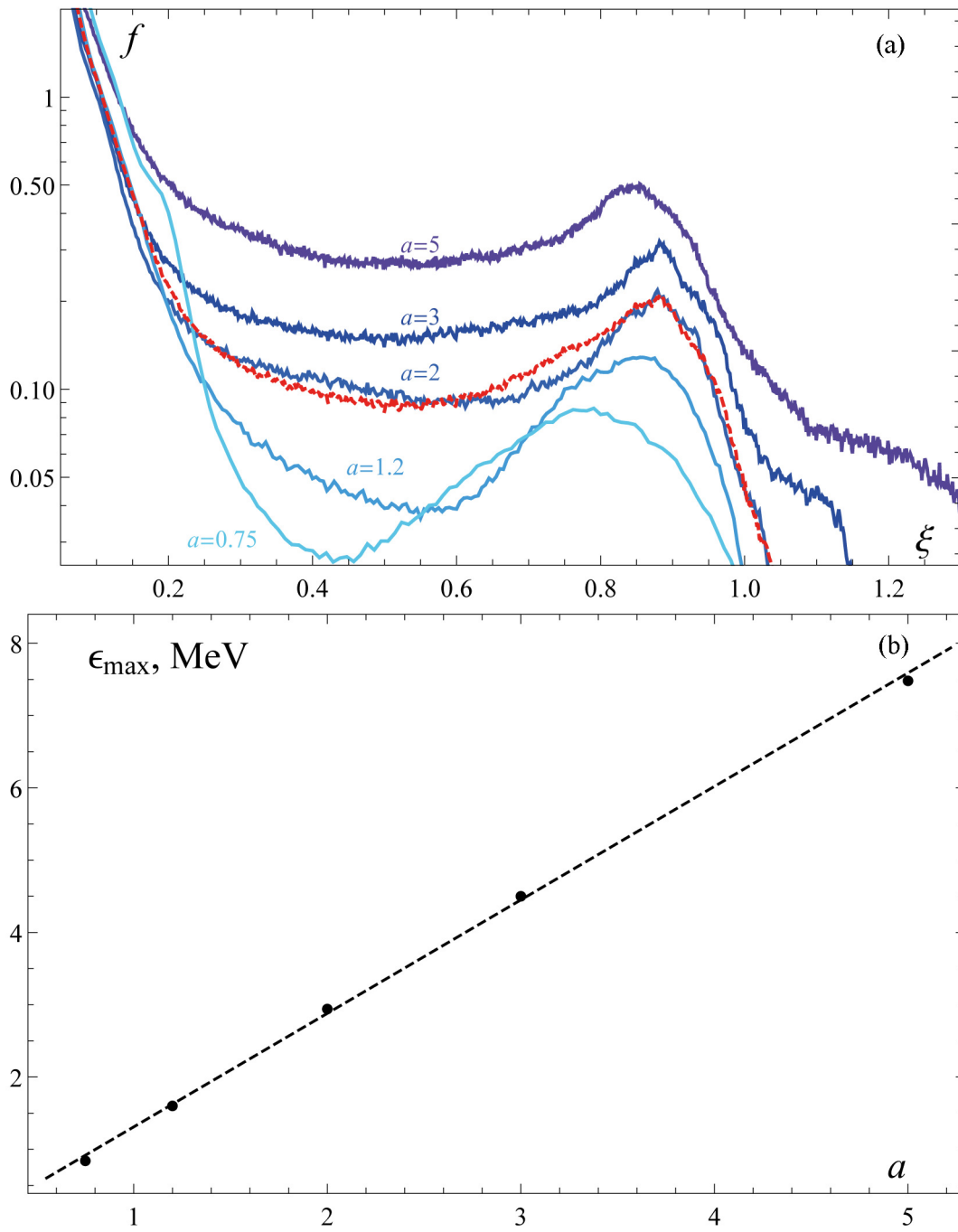


Рис. 3: (а) спектральные вспомогательные функции для тех же значений a , что и на рис. 2, внутри одной зоны (сплошные линии) и восстановленное значение СВФ для $a = 1.2, 2, 3$ (красные пунктирные линии); (б) зависимость ϵ_{\max} от a (черные точки) и линейная аппроксимация этой зависимости (пунктирная прямая).

одной зоне и определить L_{dpl} по формуле (1). Благодаря СВФ для нахождения спектров дейтронов во всех зонах не обязательно в каждой проводить моделирование. Как было показано выше, достаточно выполнить моделирование в зонах с безразмерными амплитудами лазерного поля a_1 и a_2 , чтобы восстановить спектр дейтронов в любой зоне с $a_1 < a_x < a_2$. Поэтому, для того чтобы найти спектр дейтронов во всей области взаимодействия, необходимо всего лишь 2-3 моделирования. Например, схематично на рис. 1 зоны, в которых следует провести моделирование, выделены красной штриховкой. Безразмерные амплитуды лазерного поля на входе в любую зону можно найти, считая, что в поперечном направлении лазерный импульс имеет гауссову форму, а также учитывая (1): $a_x(x, y, z) = a \exp(-0.5x/L_{\text{dpl}}) \exp(-2\ln 2(y^2 + z^2)/D_0^2)$. Используя описанный выше алгоритм, можно восстановить спектры дейтронов во всех интересующих зонах. Затем, суммируя полученные спектры из каждой зоны, мы получаем итоговый спектр дейтронов из всей области взаимодействия. На рис. 4 представлены итоговые интегральные спектры, полученные в результате лазерно-кластерного взаимодействия для лазерного импульса с начальной безразмерной амплитудой $a = 1.2, 2, 3, 4, 5$ и заданной энергией $W = 3$ Дж. Интенсивность излучения менялась за счет изменения фокального пятна. Чтобы найти эти спектры, достаточно провести всего 6 небольших PIC расчетов в зонах со значением $a = 0.6, 1.2, 2, 3.4, 5$ и восстановить спектры дейтронов в остальных зонах. В дальнейшем полученные спектры могут быть использованы, например, для нахождения выхода нейтронов, как это было сделано в работах [13–15].

Обсуждение и заключение. Необходимо отметить, что данный метод работает только в достаточно разреженной плазме из-за возможного возникновения самофокусировки лазерного импульса. Под воздействием лазерного импульса электроны вырываются из верхнего слоя кластеров, образуя разреженную электронную плазму между ними. Плотность этой плазмы зависит от множества факторов, включая среднюю плотность среды, диаметр кластеров, интенсивность лазерного излучения и ионный состав кластера. Оценить характерное расстояние, на котором самофокусировка будет приводить к схлопыванию лазерного импульса, можно по формуле [17]: $X_c \approx X_R/\sqrt{P/P_c - 1}$, где P – мощность лазерного импульса, $X_R = \pi D_0^2/(2\lambda)$, $P_c \approx 17n_c/\bar{n}_e$ ГВт, \bar{n}_e – электронная плотность между кластерами. Если применить эту формулу, используя указанные в работе параметры кластеров и лазерного излучения при $W = 3$ Дж (что соответствует рис. 4), $a_0 \approx 1$, $\bar{n}_e = n_{e,av}$, то получим $X_c \approx 800\lambda$, что значительно превышает L_{dpl} . Увеличение амплитуды лазерного поля приведет к заметному снижению X_R . Однако важно учесть, что межкластерная плотность $\bar{n}_e \ll n_{e,av}$, так как всего несколько про-

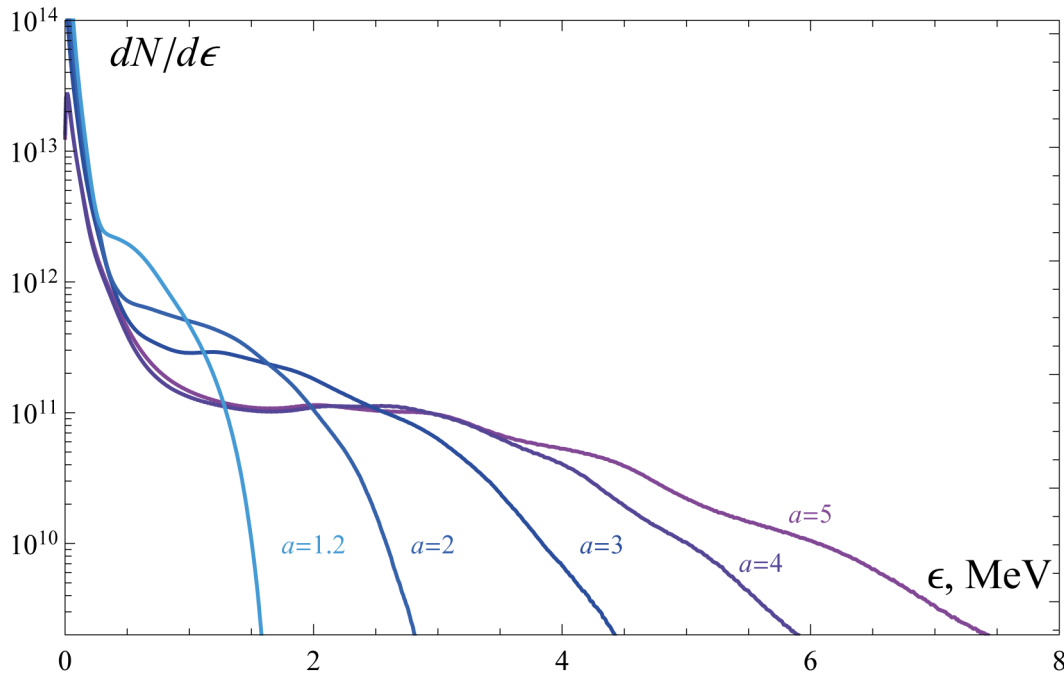


Рис. 4: Интегральные спектры дейтронов во всей области взаимодействия при начальном $a = 1.2, 2, 3, 4, 5$ и $W = 3$ Дж.

центров электронов вырываются лазерным излучением. Кроме того, в течение времени длительности лазерного импульса τ_L основная часть этих электронов будет находиться внутри дебаевского радиуса от поверхности кластера и плотность основного объема межкластерной среды будет ещё меньше. Это позволяет не учитывать влияние самофокусировки при моделировании.

При проведении подобных расчетов следует оценить длину ослабления света, возникающую из-за рассеяния Ми на микрокластерах, которую можно найти по формуле $L_{\text{Mie}} = 1/(n_{\text{cl}}\sigma_{\text{Mie}})$, где $n_{\text{cl}} = 1/s^3$ – плотность расположения кластеров, а σ_{Mie} – сечение Ми на кластерах, которое можно определить, например, с помощью калькулятора Ми [18]. Поскольку вещество кластеров ионизируется и превращается в плазму под воздействием переднего фронта лазерной волны, то при расчётах с помощью калькулятора Ми это вещество рассматривалось как металл. Для параметров кластеров, рассматриваемых в работе, $\sigma_{\text{Mie}} \approx 2.5\pi d^2/4$, а $L_{\text{Mie}} \approx 350\lambda$, что значительно больше L_{dpl} , и в расчетах можно не учитывать ослабление лазерного излучения из-за рассеяния Ми.

Если говорить об области применимости данного метода, то интерполяционное соотношение будет справедливым до тех пор, пока не будет меняться механизм ускорения дейтронов. В случае больших кластеров, рассматриваемых в данной работе, горячие

электроны формируют двойной слой вблизи поверхности кластера и создают сильное электрическое поле разделения заряда, пропорциональное корню из температуры горячих электронов [19]. Именно в этом поле и происходит ускорение дейтронов. Однако, если радиус кластеров будет меньше радиуса Дебая, то основным механизмом ускорения дейтронов станет кулоновский взрыв. Это приведет к качественному изменению спектра дейтронов и, следовательно, применять интерполяционные соотношения будет уже не очень корректно. Например, это может произойти, если диаметр кластера станет меньше $\sim 0.1a\lambda$ [15] или когда лазерное поле возрастет до значения $a > 5$. Что касается средней плотности среды $n_{e,av}$, то, как уже отмечалось выше, для распространения лазерного излучения среда должна быть достаточно прозрачна. Поэтому требуется, чтобы $n_{e,av} < 0.5n_c$.

Влияние длительности лазерного импульса на возможность применения метода зон и СВФ не было подробно изучено. Однако следует отметить, что слишком длинный лазерный импульс осложнит моделирование, так как необходимо, чтобы весь импульс поместился в расчетную область. Поэтому метод следует использовать только для лазерных импульсов фемтосекундной длительности. Также не было исследовано влияние состава кластерной мишени на применимость данного метода. Однако нет никаких оснований ожидать такой зависимости.

В заключение хотелось бы отметить, что предложенный подход может быть полезен для моделирования больших объемов лазерно-плазменного взаимодействия не только в кластерной плазме, но и в других задачах, например, при взаимодействии широкого лазерного пучка с разнообразными микроструктурированными мишенями. Например, этот метод можно использовать при планировании экспериментов для перспективного лазерного проекта XCELS [20], в котором будут задействованы 12 идентичных каналов общей мощностью 600 ПВт, что позволит нагревать огромные объемы плазмы.

Автор выражает огромную благодарность С. Г. Бочкареву и В. Ю. Быченкову за неоценимую помощь в работе.

Работа выполнена при поддержке Федеральной научно-технической программы развития синхротронных и нейтронных исследований и исследовательской инфраструктуры на 2019–2027 годы от 29.09.2021 № 2021-951-ФП5-3, соглашение № 075-15-2021-1361 от 07.10.2021 г. (доп. соглашение № 75-15-2021-1361/10 от 28.06.2024) с Минобрнауки России.

Л И Т Е Р А Т У Р А

- [1] T. Ditmire, J. Zweiback, V. P. Yanovsky, et al., *Nature* **398**, 489 (1999). DOI: 10.1038/19037.
- [2] Ya. Faenov, T. A. Pikuz, Y. Fukuda, et al., *Contrib. Plasma Phys.* **53**(2), 148 (2013). DOI: 10.1002/ctpp.201310027.
- [3] S. Jinno, Y. Fukuda, H. Sakaki, et al., *Appl. Phys. Lett.* **102**, 164103 (2013). DOI: 10.1063/1.4802915.
- [4] S. G. Bochkarev, A. Faenov, T. Pikuz, et al., *Scientific reports* **8**, 9404 (2018). DOI: 10.1038/s41598-018-27665-x.
- [5] A. Curtis, C. Calvi, J. Tinsley, et al., *Nature Comm.* **9**, 1077 (2018). DOI: 10.1038/s41467-018-03445-z.
- [6] J. Hah, J. A. Nees, M. D. Hammig, et al., *Plasma Phys. Control. Fusion* **60**, 054011 (2018). DOI: 10.1088/1361-6587/aab327.
- [7] К. А. Иванов, С. А. Шуляпов, И. Н. Цымбалов и др., *Квантовая электроника* **50**(2), 169 (2020). DOI: 10.1070/QEL17149.
- [8] D. A. Gozhev, S. G. Bochkarev, N. I. Busleev, et al., *High Energy Density Phys.* **37**, 100856 (2020). DOI: 10.1016/j.hedp.2020.100856.
- [9] Д. А. Гожев, С. Г. Бочкарев, В. Ю. Быченко, *Письма в ЖЭТФ* **114**(4), 233 (2021). DOI: 10.1134/S0021364021160074.
- [10] D. Papp, R. Polanek, Z. Lecz, et al., *IEEE Trans. Plasma Sci.* **44**(10), 2382 (2016). DOI: 10.1109/TPS.2016.2606761.
- [11] L. Di. Lucchio, P. Gibbon, *Phys. Rev. ST Accel. Beams* **18**(2), 023402 (2015).
- [12] Zs. Léczy, A. Andreev, *Phys. Rev. Research* **2**, 023088 (2020). DOI: 10.1103/PhysRevResearch.2.023088.
- [13] Д. А. Гожев, С. Г. Бочкарев, А. В. Брантов, В. Ю. Быченко, *Краткие сообщения по физике ФИАН* **49**(2), 20 (2022). DOI: 10.3103/S106833562202004X.
- [14] Д. А. Гожев, С. Г. Бочкарев, М. Г. Лобок и др., *Квантовая электроника* **53**(3), 217 (2023). DOI: 10.3103/S1068335623190077.
- [15] D. A. Gozhev, S. G. Bochkarev, M. G. Lobok, et al., *Physics of Plasmas* **31**(7), 073103 (2024). DOI: 10.1063/5.0206751.
- [16] D. V. Romanov, V. Yu. Bychenkov, W. Rozmus, et al., *Phys. Rev. Lett.* **93**, 215004 (2004). DOI: 10.1103/PhysRevLett.93.215004.
- [17] P. Gibbon, *Short pulse laser interactions with matter* (Imperial College Press, 2005).

- [18] W. J. Wiscombe, *Appl. Opt.* **19**, 1505 (1980). DOI: 10.1364/AO.19.001505.
- [19] V. Y. Bychenkov, V. N. Novikov, D. Batani, et al., *Physics of Plasmas* **11**, 3242 (2004). DOI: 10.1063/1.1738649.
- [20] E. Khazanov, A. Shaykin, I. Kostyukov, et al., *High Power Laser Science and Engineering* **11**, e78 (2023). DOI: 10.1017/hpl.2023.69.

Поступила в редакцию 3 мая 2024 г.

После доработки 28 октября 2024 г.

Принята к публикации 30 октября 2024 г.