

Научная статья

УДК 544.032.65

DOI 10.25205/2541-9447-2022-17-4-5-17

О возможном механизме усиления поглощения мощного лазерного излучения в металле

Владимир Петрович Жуков

Федеральный исследовательский центр информационных и вычислительных технологий
Новосибирск, Россия

Новосибирский государственный технический университет
Новосибирск, Россия

zukov@ict.nsc.ru

Аннотация

В работе показано, что зависимость массы электронов проводимости металла от их энергии может служить причиной увеличения поглощения лазерного излучения большой мощности, падающего на этот металл. Для этого решена задача об отклике (токе) электрона, находящегося в одномерном периодическом потенциале (решетке) на периодическое во времени электрическое поле (электромагнитную волну). Показано, что при достаточно большой амплитуде поля зависимость тока от неё становится нелинейной. Причем в определенном диапазоне параметров эта зависимость может быть описана простой формулой, которая соответствует зависимости массы электрона от его энергии. Формула использована для решения задачи о проникновении электромагнитной волны в металл в рамках модифицированной соответствующим образом модели Друде. Показано, что нелинейная зависимость тока от амплитуды поля приводит к увеличению поглощения волны и образованию шлейфа волн с околосветовыми частотами, проникающих в глубь металла. Обсуждаемые эффекты проявляются при напряженностях электрического поля порядка 1 В/Ангстрем . Полученные результаты могут быть использованы при интерпретации экспериментальных данных и создании математических моделей взаимодействия мощного лазерного излучения с металлом.

Ключевые слова

взаимодействие лазерного излучения с металлами, мощный лазерный импульс, нелинейные оптические эффекты, модель Друде

Для цитирования

Жуков В. П. О возможном механизме усиления поглощения мощного лазерного излучения в металле // Сибирский физический журнал. 2022. Т. 17, № 4. С. 5–17. DOI 10.25205/2541-9447-2022-17-4-5-17

On Possible Mechanism of Enhancement of Absorption of Powerful Laser Radiation by Metals

Vladimir P. Zhukov

Federal Research Center for Information and Computational Technologies
Novosibirsk, Russian Federation

Novosibirsk State Technical University
Novosibirsk, Russian Federation

zukov@ict.nsc.ru

Abstract

In this work, it is shown that the dependence of the mass of conductive band electrons in a metal on their energy can be a reason of enhancement of the absorption of powerful laser radiation by the metal. To do this, a problem of response (current) of the electron placed in one-dimension periodic potential (lattice) to an electric field periodic in time (electromagnetic wave) is solved. The solution shows that for sufficiently large amplitude of the wave the dependence of the electron current on the wave amplitude becomes non-linear. Within a certain range of parameters, this dependence can be described by a simple formula that corresponds to the dependence of the electron mass on its energy. The formula was used for solving the problem of penetration of electromagnetic wave into a metal with the approach of modified Drude model. The non-linearity results in the enhancement of the wave absorption and generation of wave with frequencies close to those of plasma penetrating deep into the metal. The discussed effects manifest themselves in electric fields about. 1 V/Angstrom. The obtained results can be used in the interpretation of experiments data and in the creation of mathematical modeling of the interaction of powerful laser radiation with metal.

Keywords

laser-metal interaction, high-power laser pulse, nonlinear optic effects, Drude model

For citation

Zhukov V. P. On Possible Mechanism of Enhancement of Absorption of Powerful Laser Radiation by Metals. *Siberian Journal of Physics*, 2022, vol. 17, no. 4, pp. 5–17. (in Russ.) DOI 10.25205/2541-9447-2022-17-4-5-17

Введение

Исследование взаимодействия мощного лазерного излучения с материалом, в том числе металлами, представляет большой интерес в связи с многочисленными технологическими приложениями. Лазеры широко используются для микрообработки материалов: резки, сверления, структурирования поверхности, создание наночастиц и т. п. [1–4]. При этом мощность лазеров постоянно растет. Известно, что ультракороткие лазерные импульсы большой мощности позволяют получать более качественные структуры [1; 2; 6]. Исследование взаимодействия мощного лазерного излучения с материалом представляет также самостоятельный научный интерес, так как оно сопровождается возникновением сильно неравновесных термодинамических состояний вещества и сильно нелинейных эффектов [4; 5; 7]. Экспериментальное исследование этих эффектов не дает подробной картины происходящих при этом процессов [8]. Поэтому возникает потребность в адекватном теоретическом описании этих процессов и, в частности, в создании относительно простых математических моделей.

Моделирование воздействия лазерного импульса на металл часто выполняется в рамках так называемых «двухтемпературных моделей» [1; 9], в которых вводятся температуры свободных электронов и решетки металла. Лазерный импульс описывается с помощью источника тепла в уравнении для температуры электронов. При этом полагается, что интенсивность излучения затухает в глубь металла как $(1-R)I_0e^{-\alpha x}$. Здесь I_0 – интенсивность падающего на металл излучения, R – коэффициент отражения, x – расстояние, пройденное излучением в среде, α – коэффициент поглощения излучения в среде. Зависимость R и α от температуры позволяет лучше описать увеличение поглощения (уменьшение отражения) при увеличении энергии лазерного импульса. Росту поглощения и лучшему соответствию с экспериментальными данными

ми способствует также учет баллистического переноса и шероховатости облучаемой поверхности металла [10; 11].

В настоящей работе на простых одномерных задачах показано, что при больших интенсивностях излучения эффект нелинейного отклика металла на электрическое поле (по сути, эффект зависимости массы электрона зоны проводимости от его энергии) также может существенно влиять на поглощение падающего на металл лазерного излучения.

Структура работы такова. Сначала приведены результаты решения одномерной задачи об отклике электрона, находящегося в периодической в пространстве системе потенциальных ям, имитирующих потенциал кристаллической решетки, на периодическое во времени электрическое поле. Особенности поведения возникающего при движении электрона тока можно передать простой формулой. Далее эта формула используется в одномерной задаче о распространении электромагнитной волны в глубь металла. Решение этой задачи демонстрирует существенное увеличение поглощения волны при увеличении амплитуды волны. Представляет также интерес возникновение волн с частотами околоплазменной частоты, проникающих на большую глубину. Описываемый подход в описании проникновения лазерного излучения в металл можно легко совместить, например, с двухтемпературной моделью. При этом возникает один полуэмпирический коэффициент, приблизительное значение которого можно оценить исходя из разввиваемых представлений.

Существуют работы, в которых для вычисления отклика материала на излучение высокой интенсивности используются намного более сложные модели, учитывающие квантовую структуру конкретного материала исходя из первых принципов. В качестве примера можно привести работу [12], где исследуется отклик графита на основе теории функционала плотности. Заметим, что графит имеет структуру зон (закон дисперсии для электронов проводимости), существенно отличающуюся от типичных металлов. Подобные, основанные на 3-мерных квантово-механических вычислениях модели требуют больших вычислительных затрат. Кроме того, учет столкновений и нагрева материала, которые, несомненно, играют важную роль, в моделях, аналогичных [12], далеко не прост.

1. Ток электрона, движущегося в периодическом в пространстве потенциале в периодическом по времени электрическом поле

В этой части изучим поведение тока, создаваемого электроном, находящемся в постоянном во времени и периодическом в пространстве потенциале U и постоянном в пространстве и колеблющемся во времени внешнем электрическом поле E . Задача одномерная. Потенциал, зависящий от координаты x , моделирует кристаллическую решетку и представляет собой набор потенциальных ям с периодом L и характерной протяженностью каждой ямы a . Предполагается, что характерное значение $L \sim 2-4 \text{ \AA}$, величина a порядка размера атома ($\sim 1 \text{ \AA}$), глубина ямы порядка 1 эВ. Поэтому характерное межатомное поле порядка $U/a \sim 1 \text{ В/\AA}$. Эти значения соответствуют параметрам типичных металлов. Электрическое поле E колеблется с частотой ω и с амплитудой, плавно меняющейся от нуля до постоянного значения E_0 за время t_L . Поле направлено вдоль оси x . Оно моделирует линейно поляризованное лазерное излучение. Предполагается, что длина волны этого излучения порядка 1 мкм, что много больше периода кристаллической решетки. Поэтому поле можно считать постоянным в пространстве. Уравнение Шредингера, описывающее движение электрона, имеет вид

$$i\hbar \psi_t = -\frac{\hbar^2}{2m_{\text{vac}}} \psi_{xx} + U(x)\psi - eE(t)x\psi. \quad (1)$$

Здесь m_{evac} – масса покоя электрона в вакууме. Введем безразмерные переменные. В качестве единицы длины используем величину a , единицы времени – $\tau = \frac{2m_{\text{evac}}a^2}{\hbar}$. Потенциал нормируем на величину $\frac{\hbar^2}{2m_{\text{evac}}a^2}$, электрическое поле E – на $\frac{\hbar^2}{2m_{\text{evac}}ea^3}$. Уравнение (1) в этих переменных примет вид

$$i\psi_t = -\psi_{xx} + U\psi - E(t)x\psi.$$

Сделав замену $\psi = \phi e^{iKx}$, где $K = \int_0^t E dt$, получим:

$$\phi_t + 2K\phi_x = i\phi_{xx} - i(U + K^2)\phi. \quad (2)$$

Если в начальный момент времени (до воздействия излучения) волновая функция электрона ϕ периодична с периодом решетки, то она останется периодичной и в другие моменты времени, так что задачу можно решать на промежутке $x \in [-L/2 : L/2]$. Волновая функция нормируется на единицу: $\int_{-L/2}^{L/2} \phi \phi^* dx = 1$. Величина K соответствует классической скорости электрона, движущегося в поле E . Уравнение (2) можно переписать в виде $i\phi_t = -(\partial_x + iK)^2 \phi + U\phi$, что соответствует описанию воздействия волны с помощью вектор-потенциала $A = \int E dt$.

При этом A пропорционален K .

Уравнение (2) решалось численно, с помощью конечно-разностной схемы второго порядка (i и m нумеруют узлы сетки по пространству и времени):

$$\frac{\phi_i^{m+1} - \phi_i^m}{\tau} + 2K(i^{m+1/2}) \frac{(\phi^{m+1} + \phi^m)_{\bar{x}}}{2} = i \frac{(\phi^{m+1} + \phi^m)_{\bar{x}\bar{x}}}{2} - i(U(x_i) + K^2(i^{m+1/2})) \frac{\phi_i^{m+1} + \phi_i^m}{2},$$

$$\phi_{\bar{x}} = \frac{\phi_{i+1} - \phi_{i-1}}{2h}, \quad \phi_{\bar{x}\bar{x}} = \frac{\phi_{i+1} - 2\phi_i + \phi_{i-1}}{h^2}.$$

Здесь τ и h – шаги конечно-разностной сетки по времени и координате x .

Энергетический спектр электрона, находящегося в поле U , определяется из решения задачи на собственные значения $\varepsilon_n(k)$:

$$\varepsilon_n(k)\phi_{n,k} = -(2ik(\phi_{n,k})_x + (\phi_{n,k})_{xx}) + (k^2 + U)\phi_{n,k}. \quad (3)$$

Здесь n – номер энергетической зоны, а k – волновой вектор $k \in [-\pi/L : \pi/L]$, $\phi_{n,k}$ – функции стационарного состояния.

Задача (3) решалась для зоны с наименьшей энергией ($n = 0$) итерационным методом:

$$\phi_i^{m+1} - \phi_i^m - ik\tau_r(\phi^{m+1} + \phi^m)_{\bar{x}} - \tau_r \frac{(\phi^{m+1} + \phi^m)_{\bar{x}\bar{x}}}{2} + \tau_r(U_i + k^2) \frac{\phi_i^{m+1} + \phi_i^m}{2} = 0.$$

Здесь τ_r – параметр итераций, m – номер итерации: $\phi_{n=0,k}$ в узле конечно-разностной сетки i равно $\lim_{m \rightarrow \infty} \phi_i^m$. При вычислении более высоко лежащих зон ($n = 1, 2$) использовался тот же метод с вычитанием гармоник для уже найденных меньших значений n .

В настоящей работе потенциал был выбран согласно формуле

$$U = -U_0 \cdot (f(x) - f(x = L/2)) / (f(x = 0) - f(x = L/2)),$$

$$f(x) = \text{th}^2(x) + \sum_{n=1}^{\infty} (\text{th}^2(x - nL) + \text{th}^2(x + nL)), \quad (4)$$

$L = 4$ ($K_L \approx 0.785$), $U_0 = 1.4$. В сумме (4) достаточно ограничиться первыми двумя членами.

Расчеты и стандартный аналитический анализ показывают, что энергетический спектр вблизи дна зоны ($k = 0$) имеет квадратичную зависимость:

$$\varepsilon_n(k) \approx \varepsilon_{0n} + \alpha_n k^2. \quad (5)$$

Величины α_n^{-1} играют роль эффективных масс и для используемого потенциала (4) равны $\varepsilon_{00} = -0.689$, $\alpha_0 = 0.858$, $\varepsilon_{01} = -1.91$, $\alpha_1 = -455$, $\varepsilon_{02} = 1.93$, $\alpha_2 = 457$. Форма потенциала и структура зон изображена на рисунке 1. При $n = 1, 2$ квадратичный закон (5) выполняется только в малой окрестности точки $k = 0$. Поэтому в необходимом для дальнейшего изложения масштабе рис. 1 создается впечатление, что производная $\partial\varepsilon_n(k)/\partial k$ не равна нулю при $k = 0$. Изложение этих тонкостей в настоящей статье не целесообразно.

В настоящей работе ограничимся случаем, когда в начальный момент времени функция ϕ для уравнения (2) соответствует основному состоянию: $n = 0, k = 0$ в (3). Зависимость электрического поля от времени была следующей:

$$E(t) = dK / dt, \quad K(t) = E_0 \text{th}^2(t / t_L) \frac{\sin(\omega t)}{\omega}.$$

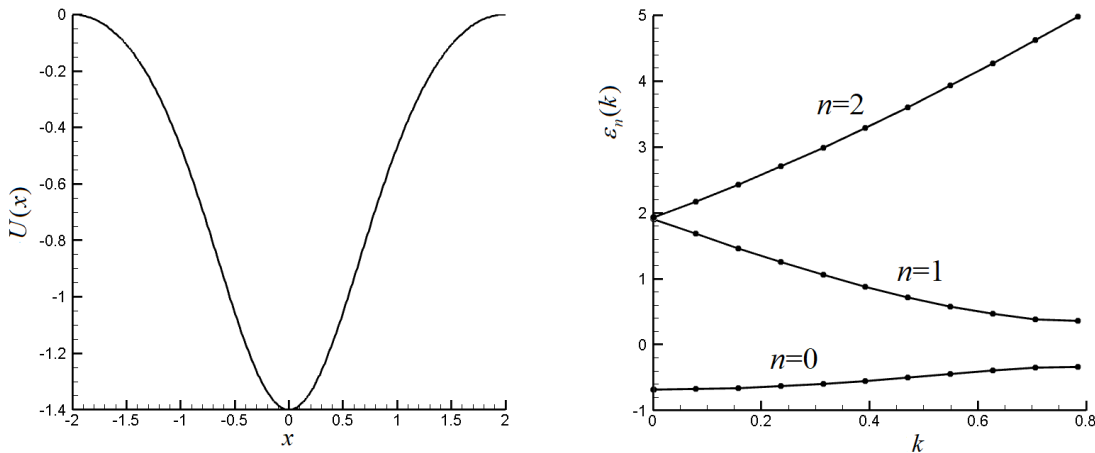


Рис. 1. Форма потенциала и зависимость $\varepsilon_{n=0,1,2}(k)$
 Fig. 1. The potential shape and the dependence $\varepsilon_{n=0,1,2}(k)$

Нас будет интересовать ток

$$J = K + \frac{i}{2} \int_{-L/2}^{L/2} (\phi \phi_x^* - \phi^* \phi_x) dx = K - \int_{-L/2}^{L/2} \text{Im}(\phi \phi_x^*) dx = K + \int_{-L/2}^{L/2} \text{Im}(\phi^* \phi_x) dx,$$

создаваемый электроном благодаря наличию электрического поля. Расчеты показывают следующую зависимость J от времени и амплитуды электрического поля (рис. 2).

При малых полях ток совпадает с током $J_0(t) = \alpha_0 K(t)$, который соответствует току формально свободного электрона (квазиэлектрона), имеющего эффективную массу α_0^{-1} :

$$J(t) = J_0(t). \quad (6)$$

При увеличении поля ток становится меньше J_0 (рис. 2, а). При еще больших полях возникают колебания с удвоенной частотой (рис. 2, б). Эти нелинейные эффекты проявляются при волновых векторах K порядка нескольких десятых от вектора обратной решетки π/L . При таких значениях K начинаются ощутимые отклонения от квадратичного закона дисперсии (5). Обозначим это значение K через K_* . При еще больших полях колебания $J(t)$ становятся нерегулярными (рис. 2, в). Изучение результатов расчетов показывает, что в этом случае происходит переход электрона в более высокие энергетические зоны и делокализация волновой функции $\phi(x)$. При очень больших электрических полях зависимость $J(t)$ соответствует колебанию действительно свободного электрона с массой m_{evac} в поле волны: влияние потенциала решетки на движение электрона мало. Этот случай не представляет для нас интереса.

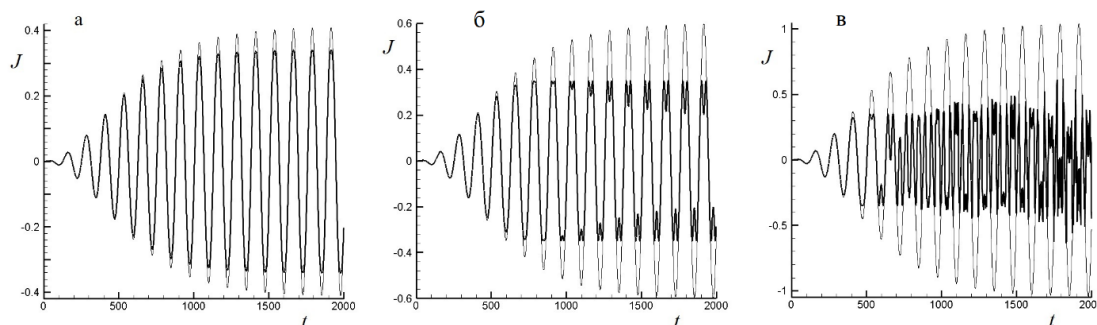


Рис. 2. Зависимость $J(t)$ при $E_0 = 0,024, 0,035, 0,061$ (а, б, в соответственно); $\omega = 0,05$. Для сравнения приведена зависимость $J_0(t)$ (тонкая линия)
 Fig. 2. The dependence of $J(t)$ on $E_0 = 0,024, 0,035, 0,061$ (а, б, в respectively); $\omega = 0,05$. The dependence $J_0(t)$ (thin line) is given for comparison

На рис. 3 изображена зависимость амплитуды колебаний тока J_{max} на больших временах (более точно величины $J_{\text{max}} = \max_{t < 2000} J(t)$) от $K_0 = E_0/\omega$ при различных частотах. Если частота и K_0 невелики, то $J_{\text{max}}(K_0)$ от частоты не зависит. При этом $J_{\text{max}} \approx K_0$ при малых K_0 , а затем выходит на плато, что соответствует ситуации, изображенной на рис. 2, б.

При дальнейшем увеличении K_0 рост J_{max} возобновляется. Причем он происходит более интенсивно. В этом случае имеют место упомянутые выше переходы в другие энергетические зоны, $|\phi|^2$ ощутимо меняет свою форму, появляются дополнительные максимумы на распределении $|\phi|^2$. Величина K_0 , при которой возникают обсуждаемые явления, тем меньше, чем больше частота. При $\omega = 0,3$ это происходит практически уже при $K_0 \approx K_*$.

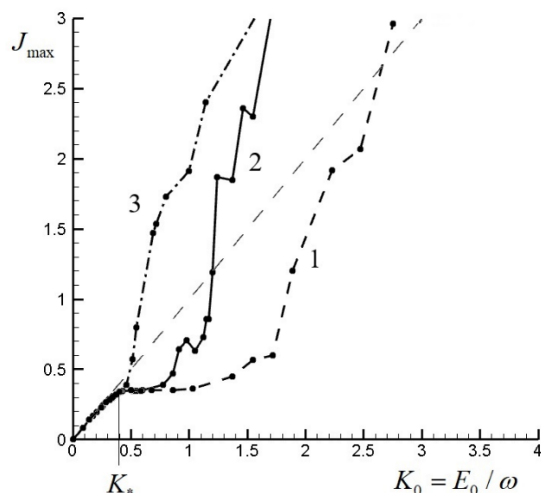


Рис. 3. Зависимость $J_{\text{max}}(K_0)$ при $\omega = 0,025$ (кривая 1), $\omega = 0,05$ (кривая 2), $\omega = 0,3$ (кривая 3)
 Fig. 3. The dependence $J_{\text{max}}(K_0)$ for $\omega = 0,025$ (curve 1), $\omega = 0,05$ (curve 2), $\omega = 0,3$ (curve 3)

Подчеркнем, что описанные выше результаты имеют сугубо качественный характер. Получение каких-либо количественных зависимостей не является целью настоящего исследования. Для дальнейшего изложения будет важно, что нелинейные отклонения появляются при $K > K_*$, где величина K_* имеет порядок $0.5\pi/L$. Ей соответствуют значения импульса электрона P_* и электрического поля E_* , которые в размерных единицах связаны между собой как $K_* = P_* / \hbar = eE_* / (\hbar\omega)$. Для электрического поля это дает

$$E_* [\text{В/А}] \approx \omega[\text{фс}^{-1}]/L[\text{А}].$$

Важно, что зависимость $J(t)$ при различных амплитудах электрического поля, изображенная на рис. 2, а, б, а также зависимость $J_{\max}(K_0)$ на линейном этапе и этапе выхода J_{\max} на плато при различных частотах, изображенная на рисунке 3, с неплохой точностью соответствуют формуле $J(t) = \alpha_0 K(t) / (1 + K^2 / K_*^2)$. В размерных единицах для металла с плотностью электронов зоны проводимости n это эквивалентно выражению для тока

$$J = -neP / \left(m_e \left(1 + P^2 / P_*^2 \right) \right), \quad (7)$$

где импульс электрона P определяется из уравнения $\partial P / \partial t = -eE$, где m_e – эффективная масса в соответствующей зоне при малых интенсивностях, $e > 0$ – элементарный заряд. Формулу (7) можно интерпретировать как зависимость массы электрона от квадрата его импульса (энергии).

2. Модель Друде с учетом нелинейной зависимости скорости электрона от его импульса для описания проникновения излучения в металл

Рассмотрим задачу о проникновении лазерного излучения в металл. Полагаем, что линейно поляризованная волна излучения падает на поверхность раздела вакуум–металл перпендикулярно этой поверхности. Электрическое и магнитное поля в волне параллельны поверхности раздела. Задача одномерная. Ось x направлена в глубь металла ортогонально его поверхности. Таким образом, излучение поляризовано перпендикулярно оси x .

С учетом (7) можно предложить следующую модель для описания взаимодействия интенсивного лазерного излучения с металлами, являющуюся обобщением модели Друде:

$$\begin{aligned} n_0^2 \partial E / \partial t &= \frac{4\pi en}{m_e} \frac{P}{1 + P^2 / P_*^2} + c \partial B / \partial x, \\ \partial P / \partial t &= -eE - \nu P, \\ \partial B / \partial t &= c \partial E / \partial x. \end{aligned}$$

Здесь n_0 – показатель преломления, ν – частота столкновений, c – скорость света в вакууме.

Нормируем время на величину $t_0 = 1$ фс, длину – на $x_0 = 1$ мкм, P – на P_* , электрическое и магнитное поле – на $E_0 = P_*/(et_0)$. Тогда уравнения примут вид

$$n_0^2 \partial E / \partial t = \omega_p^2 P \left(1 + P^2 \right)^{-1} + c \partial B / \partial x, \quad (8)$$

$$\partial P / \partial t = -E - \nu P, \quad (9)$$

$$\partial B / \partial t = c \partial E / \partial x. \quad (10)$$

Здесь $\omega_p^2 = \frac{4\pi ne^2}{m_e}$ – квадрат плазменной частоты, выраженной, как и другие частоты, в обратных фемтосекундах. Скорость света в (8)–(10) выражается в мкм/фс. В начальный момент времени все величины равнялись нулю.

На границе $x = 0$ задаем граничное условие, обеспечивающее падающую из вакуума входящую волну, в которой электрическое поле плавно нарастает от нуля до E_0 :

$$E - B = 2E_0 \text{th}^2(t/t_L) \cos(\omega t). \quad (11)$$

Амплитуда выходящей (отраженной) от границы $x = 0$ волны, соответствующей инварианту Римана $E + B$, используется для вычисления коэффициента отражения R . Более точно под R в настоящих расчетах понимается усредненная по периоду величина $(E + B)^2$ на границе $x = 0$:

$$R = \frac{\pi}{\omega E_0^2} \int_t^{t+2\pi/\omega} (E + B)_{x=0}^2 dt. \quad (12)$$

Использование формул (11) и (12) оправдано непрерывностью E и B на границе вакуум–металл и наличием инвариантов Римана $E \pm B$ в одномерном случае в вакууме.

На другой границе $x = x_0$ ставились условия поглощающего слоя (неотражение). В численной реализации (см. ниже) оно заключалось в том, что в окрестности x_0 величины E , P и B на каждом шаге по времени умножались на коэффициент, линейно уменьшающийся от 1 на расстоянии ~ 2 мкм от x_0 до значения $\approx (1 + 10\tau)^{-1} < 1$ при $x = x_0$. Здесь τ – шаг конечно-разностной сетки по времени. Этот коэффициент и размер расчетной области $x_0 \sim 12 \div 30$ мкм выбирались таким образом, чтобы увеличение x_0 не влияло на результаты расчетов. Заметим, что использовать простые формулы, позволяющие избежать отраженной волны на этой границе, нельзя, поскольку законы дисперсии в металле и вакууме существенно отличаются друг от друга.

Уравнения (8) – (10) решались с помощью конечно-разностной схемы второго порядка:

$$\begin{aligned} n_0^2 \frac{E_{i+1/2}^{n+1} - E_{i+1/2}^n}{\tau} &= \frac{\omega_p^2}{1 + P^{n2}} \frac{P_{i+1/2}^{n+1} + P_{i+1/2}^n}{2} + c \frac{B_{i+1}^n - B_i^n}{h}, \quad i = 0, \dots, I_0 - 1 \\ \frac{P_{i+1/2}^{n+1} - P_{i+1/2}^n}{\tau} &= -\frac{E_{i+1/2}^{n+1} + E_{i+1/2}^n}{2} - v \frac{P_{i+1/2}^{n+1} + P_{i+1/2}^n}{2}, \quad i = 0, \dots, I_0 - 1 \\ \frac{B_i^{n+1} - B_i^n}{\tau} &= c \frac{E_{i+1/2}^{n+1} - E_{i-1/2}^{n+1}}{h}, \quad i = 0, \dots, I_0. \end{aligned}$$

Граница вакуум–металл соответствовала $i = 0$. Формулы (11), (12) реализовывались как

$$(E \pm B)_{x=0, t=t^n} = \frac{E_{-1/2}^n + E_{+1/2}^n}{2} \pm B_0^{n-1},$$

т. е. вводилась фиктивная ячейка $i = -1/2$ для поля E . Вычисление электрического поля в сдвинутых на $h/2$ относительно границы вакуум–металл узлах важно, поскольку производные электрического поля по x на этой границе непрерывны, в отличие от производных магнитного поля.

Точность решения контролировалась сравнением с точным решением в линейном случае и расчетами на последовательности сеток в случае больших амплитуд волн.

Для приведенных ниже расчетов были выбраны параметры $n_0^2 = 6$, $\omega_p = 14$ фс⁻¹, $v = 0.15$ фс⁻¹. Это соответствует величинам для типичных металлов. Описываемые расчеты носят качественный характер. Поэтому конкретизация материала в данном случае излишня. Частоты падающей

волны ω были меньше критической $\omega_c = \omega_p/n_0$ и равнялись 2.35, 3.14 и 4.7 fs^{-1} , что соответствует длине волны в вакууме 800, 600 и 400 нм и также является типичными для экспериментов.

Согласно расчетам, картина проникновения волны в металл на больших временах ($t > 200$ фс) такова. При малых амплитудах волны E_0 решение задачи соответствует линейному приближению: электрическое поле в металле колеблется с частотой ω и экспоненциально затухает в глубь металла с показателем экспоненты $\kappa = \omega \text{Im}(\epsilon^{1/2})/c$. Здесь ϵ – обычная диэлектрическая проницаемость плазмы, соответствующая уравнениям (8)–(10) в линейном случае:

$$\epsilon = n_0^2 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2} \frac{\omega}{\omega + i\nu} = - \left(\frac{\omega_p^2}{\omega^2 + \nu^2} - n_0^2 \right) + i \frac{\omega_p^2}{\omega^2 + \nu^2} \frac{\nu}{\omega}. \quad (13)$$

При достаточно больших амплитудах волны электрическое поле на границе $x = 0$ колеблется с частотой волны ω , но при этом колебания могут быть не строго гармоническими. Кроме того, появляется проникающий глубоко в материал шлейф колеблющихся с частотой порядка ω_p волн (рис. 4). Подчеркнем, что эти волны не являются плазменными. В отличие от последних они имеют поперечную поляризацию. Амплитуда и глубина проникновения этих волн тем больше, чем больше амплитуда падающей волны. Коэффициент поглощения T_r , связанный со средним по периоду коэффициентом отражения (12) как $T_r = 1 - R$, на больших временах не зависит от времени. Он оказывается больше, чем в линейной теории (рис. 5). Описываемые отклонения от линейной картины тем заметней, чем больше амплитуда волны и чем ближе частота волны к критической частоте ω_c и меньше частота столкновений.

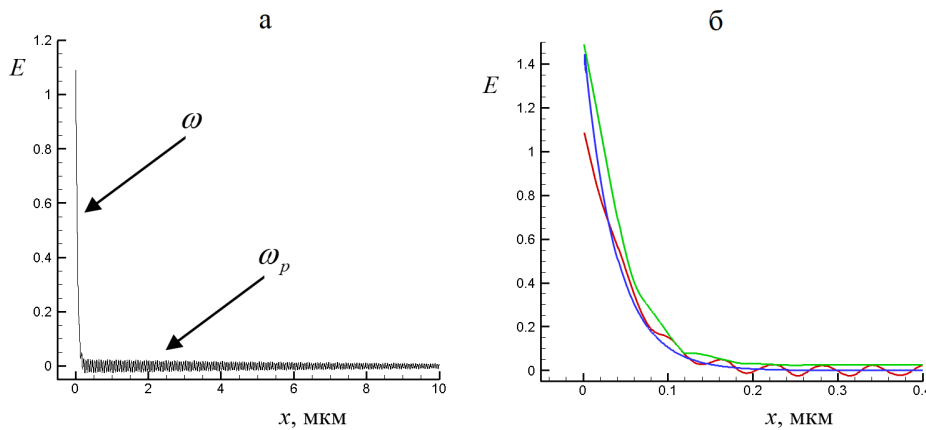


Рис. 4: а – типичное распределение электрического поля E в металле; б – то же, что на панели а, но более подробно вблизи границы $x = 0$ (красная линия). Зеленая линия соответствует $\max E(x, t)$, синяя – функции $e^{-\kappa x} \max E(x = 0, t)$ (затуханию в линейном случае). Параметры задачи: $\omega = 4.7 \text{ fs}^{-1}$, $\nu = 0.15 \text{ fs}^{-1}$, $E_0 = 5$, момент времени $t = 250$ фс

Fig. 4. а—the typical distribution of the electric field E in the metal; б—the same as on the panel а, but in more detail in the vicinity of the boundary $x = 0$ (red line). The green line corresponds to the function $\max E(x, t)$, the blue one—to the function $e^{-\kappa x} \max E(x = 0, t)$ (the linear at tenation). The parameters are $\omega = 4.7 \text{ fs}^{-1}$, $\nu = 0.15 \text{ fs}^{-1}$, $E_0 = 5$, the time moment is $t = 250$ fs

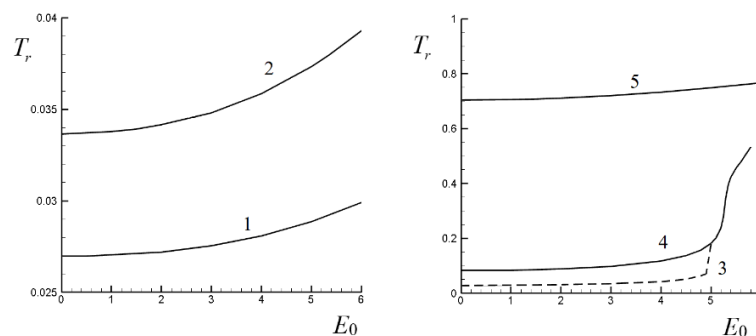


Рис. 5. Зависимость коэффициента поглощения $T_r = 1 - R$ от амплитуды волны при различных частотах волны и частотах столкновений (фс^{-1}). Кривая 1 соответствует $\omega = 2,35$, $\nu = 0,15$; 2— $\omega = 3,14$, $\nu = 0,15$; 3— $\omega = 4,7$, $\nu = 0,05$; 4— $\omega = 4,7$, $\nu = 0,15$; 5— $\omega = 4,7$, $\nu = 3$

Fig. 5. The dependence of the absorption coefficient $T_r = 1 - R$ on the wave amplitude for the different wave and collision frequencies (fs^{-1}). The curve 1 corresponds to $\omega = 2.35$, $\nu = 0.15$; 2— $\omega = 3.14$, $\nu = 0.15$; 3— $\omega = 4.7$, $\nu = 0.05$; 4— $\omega = 4.7$, $\nu = 0.15$; 5— $\omega = 4.7$, $\nu = 3$

Эти результаты можно качественно понять, если рассмотреть падение плоской волны на среду с диэлектрической проницаемостью, описываемой формулой (13). При $\omega < \omega_c$ и ν много меньше ω в линейном приближении отношение электрического поля E_1 в металле вблизи границы к амплитуде падающей волны E_0 тем больше, чем ближе ω к ω_c . Соответственно при одной и той же амплитуде, но при больших частотах падающей волны, нелинейные эффекты будут проявляться при меньших E_0 . В свою очередь используемую в данной работе нелинейность качественно можно рассматривать как уменьшение плазменной частоты с амплитудой: $\omega_p^2 \rightarrow \omega_p^2 (1 + P^2)^{-1}$. Это также приближает ω к ω_c , что улучшает проникновение волны в металл и увеличивает поглощение.

При еще больших амплитудах волны, когда импульс электрона на границе $P(x=0)$ настолько велик, что эффективная критическая частота $\omega_c (1 + P^2(x=0))^{-1/2}$ становится близкой к частоте падающей волны ω , проникновение волны в металл становится особенно эффективным, а рост коэффициента поглощения с увеличением амплитуды падающей волны — особенно быстрым (кривые 3 и 4 на рис. 5). Возможно возникновение ситуации, когда электрическое поле на границе, т. е. отраженная волна, испытывает биения (рис. 6). При этом средний за период коэффициент отражения (12) изменяется со временем. При $\omega = 4.7$ и $\nu = 0.15 \text{ фс}^{-1}$ эти явления возникают при $E_0 \geq 6$. Уменьшение частоты столкновений ν до 0.05 фс^{-1} снижает порог до $E_0 \approx 5.2$. При $\omega = 3.14$ и $\nu = 0.15 \text{ фс}^{-1}$ порог E_0 приблизительно равен 13, а при $\omega = 2.35$ и $\nu = 0.15 \text{ фс}^{-1}$ он равен 22.

Пороговые значения E_0 можно оценить следующим образом. Имеем: $\omega \approx B\omega_c (1 + P^2(x=0))^{-1/2} \approx B\omega_c (1 + A^2 E_0^2 / \omega^2)^{-1/2}$. Здесь B — коэффициент порядка 1, а A — число, приблизительно равное коэффициенту, связывающему амплитуду падающей волны и электрическое поле вблизи границы металл–вакуум в линейной теории. Соответственно приблизительно равенство эффективной критической частоты и частоты волны достигается при $E_0^2 \approx (B\omega_c^2 - \omega^2) / A^2$.

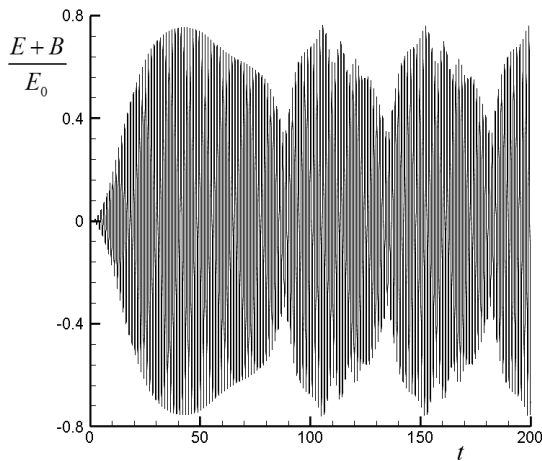


Рис. 6. Зависимость нормированного инварианта Римана на границе $x = 0$ от времени (отраженная волна) $(E + B)/E_0$ в случае возникновения биений. Зависимость получена при параметрах $\omega = 4,7 \text{ фс}^{-1}$, $\nu = 0,15 \text{ фс}^{-1}$, $E_0 = 6$

Fig. 6. The dependence of the normalized Riemann invariant on the boundary $x = 0$ on time (the reflected wave) $(E + B)/E_0$ in case of presence of the wobble. The dependence is obtained for the parameters $\omega = 4.7 \text{ fs}^{-1}$, $\nu = 0.15 \text{ fs}^{-1}$, $E_0 = 6$

При получении изложенных выше результатов предполагалось, что частота столкновений ν постоянна. В реальности поглощение приводит к нагреву электронов и увеличению ν . Поэтому были проведены расчеты при ν порядка нескольких фс^{-1} . При таких частотах столкновений коэффициент поглощения T_r велик уже в линейном пределе. Нелинейность увеличивает T_r , но незначительно (рис. 5). Глубина проникновения и амплитуда колебаний с плазменными частотами уменьшаются при увеличении ν .

Заключение

В настоящей работе показано, что отклик (ток) электрона, помещенного в кристаллическую решетку, на периодическое электрическое поле в некотором диапазоне частот и амплитуд этого поля может быть неплохо описан формулой (7). По существу (7) описывает зависимость массы электрона зоны проводимости от его энергии. Эти эффекты возникают в полях напряженностью порядка 1 В/Ангстрем. Учет (7) в задаче о проникновении электромагнитной волны в металл в приближении модели Друде–Максвелла (8) – (10) показал, что (7) приводит к увеличению поглощения волны (уменьшению коэффициента отражения) и возникновению волн с плазменной частотой, глубоко проникающих в металл. Эти эффекты проявляются тем ярче, чем ближе частота волны к критической частоте. В некоторых случаях стационарной картины отражения не устанавливается, а наблюдаются биения.

Представленные исследования носят качественный характер. Для вычисления отклика металла необходимо учитывать реальный 3-мерный потенциал решетки и соответствующую ему структуру энергетических зон, эффекты Ферми-статистики и т. п. Даже в рамках использованной в настоящей работе модели при определенных амплитудах и частотах отклик может иметь более сложный характер, чем (7) (рис. 2, в; кривая 3 на рис. 3). Но и в этом случае происходит генерация более высокочастотных колебаний, которые при $\omega < \omega_c$ лучше поглощаются металлом. Поэтому можно ожидать, что использование (7) может дать возможность учесть эти эффекты по крайней мере качественно. При этом параметры P^* и m_e можно рассматривать как подгоночные коэффициенты.

В настоящей работе частота столкновений полагалась постоянной. В реальности она существенно изменяется в результате нагрева электронов. Причем этот нагрев неравномерен в пространстве. Для учета подобных эффектов необходимо использовать более сложные модели, учитывающие эволюцию температуры (прежде всего электронов). При этом для расчета нагрева необходимо использовать уравнения Максвелла, дополненные, например, уравне-

ниями для тока в рамках модели Друде–Лоренца [13] с зависящей от температуры частотой столкновений и учетом (7). Модель Друде–Лоренца лучше описывает частотную зависимость диэлектрической проницаемости металлов, чем использованная в настоящей работе модель Друде. Заметим, что часто применяемая для вычисления поглощенной энергии формула распределения интенсивности излучения внутри металла $I = (1 - R)I_0 \exp\left(-\int \alpha dx\right)$ в случае температуры, меняющейся на расстояниях порядка длины волны, неприменима. Здесь α – локальный, зависящий от температуры, коэффициент поглощения.

Автор выражает благодарность Н.М. Булгаковой, Т. Дирену (Т. J.-Y. Derrien), С.А. Лизуну за полезные обсуждения.

Список литературы

1. **Bauerle D. W.** Laser Processing and Chemistry. Berlin: Springer-Verlag, 2000. 649 p.
2. **Pique A., Kim H., Arnold C. B.** Laser forward transfer of electronic and power generating materials, In: Laser Ablation and its Application//C. Phipps (Ed.). 2007. P. 339–373.
3. **Guo B., Sun J., Hua Y., Zhan N., Jia J., Chu K.** Femtosecond laser micro/nano-manufacturing: Theories, measurements, methods, and applications // Nanomanufacturing and Metrology. 2020. Vol. 3. P. 26–67.
4. **Gamaly E. G., Rode A. V.** Physics of ultra-short laser interaction with matter: From phonon excitation to ultimate transformations // Prog. Quant. Electron. 2013. Vol. 37. P. 215–323.
5. **Булгаков А. В., Булгакова Н. М., Бураков И. М. и др.** Синтез наноразмерных материалов при воздействии мощных потоков энергии на вещество // Новосибирск: Институт теплофизики СО РАН, 2009. 462 с.
6. **Korte F., Nolte S., Chichkov B. N., Bauer T., Kamlage G., Wagner T., Fallnich C., Welling H.** Far-field and near field material processing with femtosecond laser pulses // Appl. Phys. A. 1999. Vol. 69. P. S7–S11.
7. **Mo M. Z., Chen Z., Li R. K., Dunning M., Witte B. B. L., Baldwin J. K., Fletcher L. B., Kim J. B., Ng A., Redmer R., Reid A. H., Shekhar P., Shen X. Z., Shen M., Sokolowski-Tinten K., Tsui Y. Y., Wang Y. Q., Zheng Q., Wang X. J., Glenzer S. H.** Heterogeneous to homogeneous melting transition visualized with ultrafast electron diffraction // Science. 2018. Vol. 360. Is. 6396. P. 1451-1454.
8. **Vorobyev A. Y., Guo C.** Reflection of femtosecond laser light in multipulse ablation of metals // J. Appl. Phys. 2011. Vol. 110. P. 043102.
9. **Лизунов С. А., Жуков В. П., Булгаков А. В., Булгакова Н. М.** Численное исследование динамики нагрева золота ультракороткими дихроматическими импульсами лазерного излучения // Сибирский физический журнал. 2021. Т. 16, вып. 1. С. 5–20. Siberian Journal of Physics, 2021, vol. 16, no. 1 A Numerical Study of the Dynamics of Gold Heating by Ultra-Short Dichromatic Laser Pulses S. A. Lizunov, V. P. Zhukov, A. V. Bulgakov, N. M. Bulgakova
10. **Wellershoff S.-S., Hohlfeld J., Gudde J., Matthias E.** The role of electron-phonon coupling in femtosecond laser damage of metals // Appl. Phys. A. 1999. Vol. 69. P. S99–S107.
11. **Wen C.-D., Mudawar I.** Modeling the effects of surface roughness on the emissivity of aluminum alloys // Intern. J. Heat Mass Transfer. vol. 49, pp. 4279–4289, 2006.
12. **Uemoto M., Kurata S., Kawaguchi N., Yabana K.** First-principles study of ultrafast and nonlinear optical properties of graphite thin films//ArXiv:2009.01979v2 [physics.optics] 9 Jan 2021 14 p.
13. **Ren Y., Chen J., Zhang Y., Huang J.** Ultrashort laser pulse energy deposition in metal films with phase changes //Appl. Phys. Lett. 2011. vol. 98. paper 191105.

References

1. **Bauerle D. W.** Laser Processing and Chemistry. Berlin: Springer-Verlag, 2000. 649 p.
2. **Pique A., Kim H., Arnold C. B.** Laser forward transfer of electronic and power generating materials, In: Laser Ablation and its Application; Ed. C. Phipps. 2007, pp. 339–373.
3. **Guo B., Sun J., Hua Y., Zhan N., Jia J., Chu K.** Femtosecond laser micro/nano-manufacturing: Theories, measurements, methods, and applications. *Nanomanufacturing and Metrology*, 2020, vol. 3, pp. 26–67.
4. **Gamaly E. G., Rode A. V.** Physics of ultra-short laser interaction with matter: From phonon excitation to ultimate transformations. *Prog. Quant. Electron*, 2013, vol. 37, pp. 215–323.
5. **Bulgakov A. V., Bulgakova N. M., Burakov I. M. et al.** Nanosized material synthesis by action of high-power energy fluxes on matter. Novosibirsk, Institute of Thermophysics SB RAS, 2009, 462 p. (in Russ.)
6. **Korte F., Nolte S., Chichkov B. N., Bauer T., Kamlage G., Wagner T., Fallnich C., Welling H.** Far-field and near field material processing with femtosecond laser pulses. *Appl. Phys. A.*, 1999, vol. 69, pp. 7–11.
7. **Mo M. Z., Chen Z., Li R. K., Dunning M., Witte B. B. L., Baldwin J. K., Fletcher L. B., Kim J. B., Ng A., Redmer R., Reid A. H., Shekhar P., Shen X. Z., Shen M., Sokolowski-Tinten K., Tsui Y. Y., Wang Y. Q., Zheng Q., Wang X. J., Glenzer S. H.** Heterogeneous to homogeneous melting transition visualized with ultrafast electron diffraction. *Science*, 2018, vol. 360, iss. 6396, pp. 1451–1454.
8. **Vorobyev A. Y., Guo C.** Reflection of femtosecond laser light in multipulse ablation of metals. *J. Appl. Phys.*, 2011, vol. 110, 043102.
9. **Lizunov S. A., Zhukov V. P., Bulgakov A. V., Bulgakova N. M.** A Numerical Study of the Dynamics of Gold Heating by Ultra-Short Dichromatic Laser Pulses. *Siberian Journal of Physics*, 2021, vol. 16, no. 1.
10. **Wellershoff S.-S., Hohlfeld J., Gudde J., Matthias E.** The role of electron-phonon coupling in femtosecond laser damage of metals. *Appl. Phys. A.*, 1999, vol. 69, pp. 99–107.
11. **Wen C.-D., Mudawar I.** Modeling the effects of surface roughness on the emissivity of aluminum alloys. *Intern. J. Heat Mass Transfer*, vol. 49, pp. 4279–4289, 2006.
12. **Uemoto M., Kurata S., Kawaguchi N., Yabana K.** First-principles study of ultrafast and non-linear optical properties of graphite thin films. ArXiv:2009.01979v2 [physics.optics] 9 Jan 2021. 14 p.
13. **Ren Y., Chen J., Zhang Y., Huang J.** Ultrashort laser pulse energy deposition in metal films with phase changes. *Appl. Phys. Lett.*, 2011, vol. 98, 191105.

Информация об авторе

Жуков Владимир Петрович, доктор физико-математических наук

Information about the Author

Vladimir P. Zhukov, Doctor of Sciences (Physics and Mathematics), Federal Research Center for Information and Computational Technologies, Novosibirsk, Russia

*Статья поступила в редакцию 17.10.2022; одобрена после рецензирования 17.11.2022;
принята к публикации 17.11.2022*

*The article was submitted 17.10.2022; approved after reviewing 17.11.2022;
accepted for publication on 17.11.2022*