

01; 02; 07

© 1990 г.

ИССЛЕДОВАНИЕ ДИНАМИКИ ФОТОИОНИЗАЦИИ ТРЕХУРОВНЕВЫХ ОПТИЧЕСКИ ПЛОТНЫХ СРЕД ЧИСЛЕННЫМИ МЕТОДАМИ

*Я. М. Жилейкин, Б. Б. Крынецкий, М. А. Кузьмина,
В. А. Мишин*

Методом численного моделирования исследована динамика фотоионизации трехуровневой оптически плотной среды при импульсном характере лазерного воздействия. Для математического описания системы (среда+поле) использован аппарат матрицы плотности совместно с уравнениями Максвелла. Рассмотрены два случая: невырожденная среда и среда с большой кратностью вырождения уровней ($J_{1, 2, 3}=6$). Обнаружено, что сравнительно низкая эффективность ионизации среды (30 %) обусловлена различием в скоростях распространения импульсов излучения. Показано, что введение временных задержек между импульсами приводит к увеличению выхода ионов в 1.5 раза.

Среди различных методов лазерного разделения изотопов (ЛРИ) наибольшее развитие получил метод трехступенчатой селективной фотоионизации атомов (СФИА), который, по-видимому, наиболее практичен и может быть реализован для многих элементов таблицы Менделеева. Известны, например, крупные проекты США по разделению изотопов урана этим методом [1].

Вместе с тем реализация этого метода разделения изотопов встречается с трудностями, заключающимися в том, что в его основе лежит использование энергии когерентного излучения, источники которого имеют невысокий КДП и относительно высокую стоимость. Поэтому представляется актуальным провести исследование процессов, протекающих при взаимодействии ЭМ излучения со средой в целях обеспечения оптимальных условий для использования лазерного излучения. Анализ этих процессов в случае, представляющем практический интерес, очень сложен из-за его многопараметричности. Производительность и селективность метода зависят от плотности и температуры атомного пара, спектроскопических и радиационных характеристик среды, спектральных и энергетических характеристик используемых лазерных систем.

Вести сразу прямой крупномасштабный эксперимент с целью получения необходимых зависимостей, конечно, невозможно. Но это исследование весьма эффективно может быть проведено методами математического моделирования. Практическое значение такого расчета трудно переоценить, поскольку он позволяет исследовать во всей полноте процесс селективной фотоионизации атомов, провести его оптимизацию, выдвинуть требования к лазерным системам. Это позволит в конечном итоге сократить время исследований и избежать излишних расходов, необходимых при практическом использовании метода СФИА для целей лазерного разделения изотопов.

Представляется, что наиболее корректное математическое описание процесса должно базироваться на использовании аппарата матрицы плотности совместно с уравнениями Максвелла. В этом случае наиболее естественным образом можно описать процесс, включив в него все практически важные параметры, как то: вырождение уровней и неоднородное уширение линий радиационных переходов, многомодовость и резонансное поглощение лазерного излучения в среде.

Немаловажным является и то обстоятельство, что аппарат матрицы плотности из-за отсутствия внутренних ограничений оставляет возможность дальнейшего развития модели. Такая математическая модель процесса СФИА, отвечающая реальным условиям, существующим в производственных установках для ЛРИ, была нами создана.

Чтобы не увеличивать объем статьи, полную систему уравнений для среды и поля приводить здесь не будем, отметим лишь, что взаимодействие среды и ЭМ поля описывалось в полуклассическом приближении для оператора плотности

$$i\hbar\left(\frac{d}{dt} + \hat{\Gamma}\right)\hat{\rho} = [\hat{H} + \hat{V}, \hat{\rho}],$$

где $\hat{\Gamma}$ — оператор, описывающий релаксацию системы; \hat{H} — гамильтониан невозмущенной системы; \hat{V} — оператор, описывающий ее взаимодействие с ЭМ полями.

Уравнения для элементов матрицы плотности были написаны в резонансном приближении, уравнения Максвелла для ЭМ полей написаны в приближении медленно меняющихся амплитуд. Все эти приближения выполняются с запасом для любого интересующего нас случая. Отметим также, что строгое описание трехступенчатой схемы СФИА требует оперирования с матрицей плотности размерности 4×4 . Однако его можно существенно упростить, заметив, что процесс фотоионизации из верхнего возбужденного состояния может быть описан некогерентно. В этом случае можно считать, что лазерное излучение, осуществляющее фотоионизацию, вносит всего лишь затухание в трехуровневую систему со скоростью

$$W_{\phi_n} = \sigma_{\phi_n} I_{\phi_n} / \hbar\omega_{\phi_n},$$

где I_{ϕ_n} — интенсивность ЭМ поля, $\hbar\omega_{\phi_n}$ — энергия кванта излучения, σ_{ϕ_n} — сечение фотоионизации.

Это допущение позволяет применять аппарат матрицы плотности только для описания трехуровневой системы возбуждения атомов, если считать процесс фотоионизации одним из механизмов релаксации системы и описывать его обыкновенным кинетическим уравнением баланса. В рамках этой же идеологии для фотоионизирующего излучения уравнение Максвелла сводится к кинетическому уравнению для интенсивности.

Математически процесс описывается системой одномерных квазилинейных гиперболических уравнений, для решения которых была применена разностная схема второго порядка точности. Построение схемы основано на идеях метода типа Рунге—Кутты и численного интегрирования [2].

Тестирование математической модели и программы для ЭВМ было проведено методом получения солитонных решений для трехуровневой среды [3], что совместно с постоянным контролем выполнения закона сохранения энергии в системе среда+поле позволяет надеяться на высокую надежность полученных результатов.

В настоящей работе мы хотим сообщить об исследовании методом численного моделирования динамики фотоионизации трехуровневой оптической плотной среды. Чтобы стали понятны возникающие здесь трудности, обсудим сначала в общих чертах схему процесса.

Геометрия задачи и схема трехступенчатой СФИА показаны на рис. 1. Для определенности положим, что волновые векторы всех излучений направлены по оси u .

При реализации метода трехступенчатой СФИА предполагается, что атомы в любом месте среды возбуждаются последовательно из состояния 1 в состояние 2, а затем 3 и далее ионизируются. Для этого необходимо, чтобы распространяющиеся в среде лазерные импульсы в любой момент времени пространственно совпадали. Однако из-за того, что в реальных системах радиационные характеристики переходов на 1-й, 2-й и 3-й ступенях процесса могут значительно различаться, следует ожидать различия и в скорости распространения лазерных импульсов. Это неизбежно приведет к пространственно-временному расогласованию импульсов (ПВРИ), а следовательно, к нарушению порядка сту-

пенчатого возбуждения и низкой эффективности ионизации среды. Причем, как мы увидим далее, влияние этого рассогласования на процесс в целом довольно велико и требует специального исследования.

Для того чтобы яснее выделить предмет исследования в математическую модель, были введены упрощения. Во-первых, были выключены механизмы, приводящие к неоднородному уширению линий и спонтанные релаксации; во-вторых, ЭМ поля предполагались одночастотными, частоты которых точно совпадают с частотами соответствующих радиационных переходов. Так как на характер распространения ЭМ волн в среде влияет фактор вырождения уровней, то исследовались два предельных случая: невырожденный трехуровневой среды и среды с большой кратностью вырождения уровней ($J_{1, 2, 3}=6$). В вырожденных системах состояние поляризации ЭМ излучения во многом определяет динамику среды, поэтому далее везде будем считать, что ЭМ излучение плоскополяризовано и векторы электрического поля направлены вдоль оси z (рис. 1).

Теперь оценим некоторые параметры, существенные для исследуемого явления, имея в виду характерные значения этих параметров в реальных системах

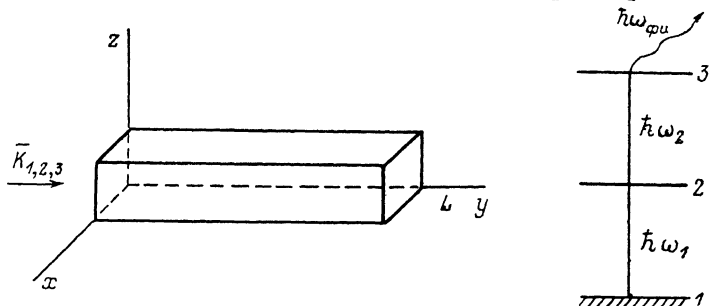


Рис. 1. Геометрия задачи и схема трехступенчатой фотоионизации атомов.

$K_{1, 2, 3}$ — волновые векторы излучений.

для ЛРИ. Во-первых, оценим значение параметра n_0L , где n_0 — концентрация атомов в зоне фотоионизации, а L — ее длина. Проще всего это можно сделать, исходя из следующих соображений. Известно, что величина сечения фотоионизации наименьшая по сравнению с сечениями переходов на 2-й и 1-й ступенях процесса СФИА. Поэтому разумно выбрать значение этого параметра, исходя из условия значительного поглощения, фотоионизирующего излучение $n_0L = = \sigma_{\phi_1}^{-1}$. При меньших значениях этого параметра будут ухудшаться как производительность, так и энергетические характеристики процесса. Взяв величину σ_{ϕ_1} , равную 10^{-19} м², получим, что при n_0 , равном 10^{18} м⁻³, значение L равно 10 м. Но учитывая то обстоятельство, что в реальной ситуации линии радиационных переходов уширены вследствие эффекта Доплера и с монохроматичным лазерным излучением взаимодействует только часть атомов, достаточно взять для численных экспериментов величину n_0 , равную 10^{16} м⁻³. Плотность энергии импульсов выбиралась из условия

$$E_1 = \hbar\omega_1 n_0 L; E_2 = \hbar\omega_2 n_0 L, \quad (1)$$

что соответствует энергии, запасенной средой при ее полной ионизации. Форма импульсов предполагалась гауссовой с характерной шириной T_0 , равной 10 нс,

$$I_i(t) = \frac{E_i}{\sqrt{\pi} T_0} \exp \left\{ - \left(\frac{t}{T_0} \right)^2 \right\} \quad i = 1, 2, 3. \quad (2)$$

Величины дипольных моментов 1-го и 2-го переходов принимались равными $3.3 \cdot 10^{-30}$ Кл·м, что характерно для атомных переходов средней силы (сила осциллятора $f_{ij} = 10^{-2}$). Ионизация среды характеризуется величиной, называемой коэффициентом ионизации, и определяется следующим выражением:

$$K_+ = \frac{1}{L} \int_0^L k(y) dy,$$

где $k(y)$ есть отношение концентрации ионов после прохождения лазерных импульсов к исходной концентрации атомов n_0 .

Уже первые численные эксперименты показали, что синхронность в распространении лазерных импульсов отсутствует. Это можно видеть из рис. 2, где показано распространение лазерных импульсов гауссовой формы в трехуровневой невырожденной среде. Из него видно, что фотоионизирующий импульс, распространяясь в среде со скоростью, близкой к скорости света в вакууме,

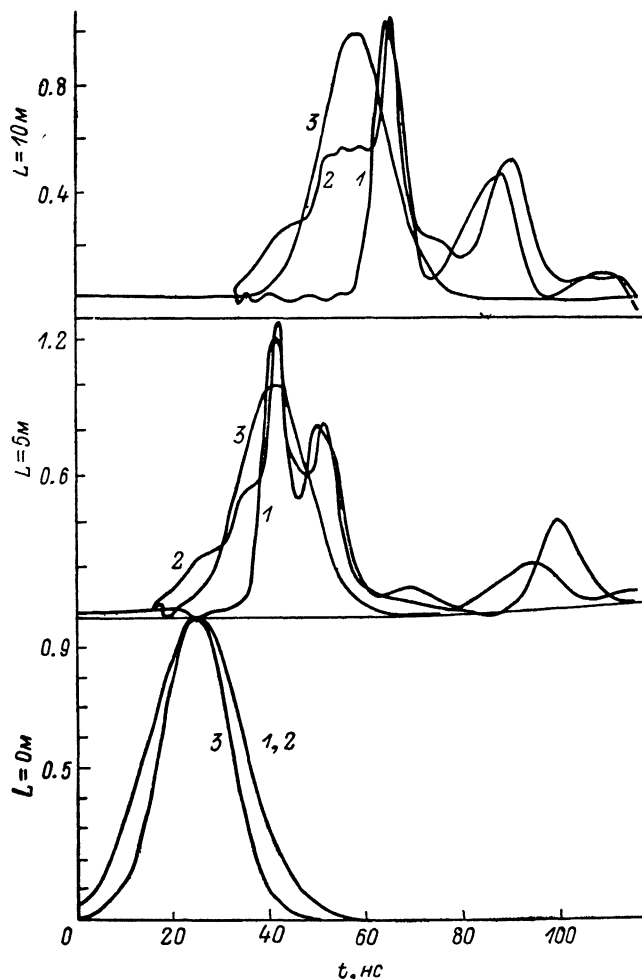


Рис. 2. Динамика распространения лазерных импульсов в трехуровневой невырожденной среде.

1, 2 — огибающие электрического поля импульсов излучения, действующих на 1-й и 2-й переходы; 3 — плотность мощности фотоионизирующего излучения. Амплитуда каждого импульса нормирована на единицу при $L=0$.

обгоняет импульсы излучения на 1-м и 2-м переходах, распространяющиеся со значительно более низкой скоростью, так что на выходе из ячейки перекрытие импульсов весьма мало. Кроме того, наблюдается еще несколько довольно интересных эффектов, приводящих к уменьшению коэффициента ионизации среды. Один из них заключается в том, что наблюдается сильная деградация импульсов излучения на 1-й и 2-й ступенях, выражающаяся в их распаде на некоторое число импульсов меньшей площади подобно тому, что наблюдали Гиббс и Слэшер в двухуровневых системах [4]. Второй более специфичен для трехуровневой среды и заключается в деформации фронтальной части импульса излучения на 2-й ступени процесса. По нашему мнению, это объясняется задержкой реакции среды на воздействие 1-го импульса, поэтому фронтальная часть его 2-го им-

пульса по сути дела, не взаимодействуя со средой, распространяется со скоростью света c , тогда как остальная часть 2-го импульса распространяется с меньшей скоростью.

Все это приводит к тому, что перекрытие импульсов становится малым, часть энергии 2-го импульса и большая часть энергии фотоионизирующего импульса перестают взаимодействовать со средой, что в конечном итоге приводит к низкой эффективности ионизации среды (рис. 3). Таким образом, можно предположить, что уменьшение концентрации ионов по длине ячейки вызвано не уменьшением энергии импульсов, а главным образом эффектом рассинхронизации импульсов.

На рис. 4 показано распространение лазерных импульсов гауссовой формы в трехуровневой вырожденной среде ($J_{1,2,3}=6$). Хотя мы наблюдаем здесь такую же картину, как и в невырожденной системе (рис. 2), однако нельзя не заметить, что форма импульсов становится стабильнее и они не испытывают такого разбиения, как в невырожденных системах. Это несколько улучшает ситуацию, и, безусловно, определяется тем, что распространение ЭМ излучения в сильно вырожденной среде носит усредненный некогерентный характер.

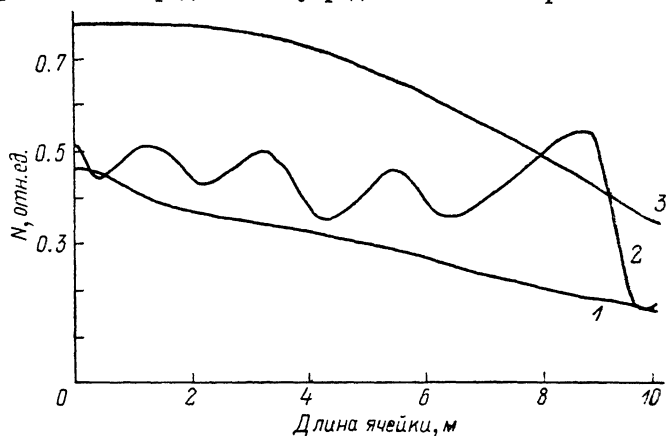


Рис. 3. Распределение относительной концентрации ионов ($n_+(y)/n_0$) в трехуровневой невырожденной среде после прохождения лазерных импульсов.

1 — при синхронном включении импульсов ($K=0.295$), 2 — при задержанных относительно друг друга импульсах ($K=0.43$), 3 — при предварительной когерентной инверсии среды ($K=0.65$).

Из всего вышеизложенного становится ясно, что в нашем случае невысокая эффективность ионизации среды обусловлена в основном двумя причинами: несогласованием скоростей распространения импульсов в среде и расплыванием импульсов, которое сильно выражено в невырожденных средах и несколько слабее в вырожденных (с большой кратностью вырождения уровней). Но поскольку коэффициенты ионизации для вырожденной и невырожденной сред весьма близки (рис. 3, 5), то можно сделать вывод о том, что наиболее важной причиной, приводящей к уменьшению коэффициента ионизации среды, является несогласование в скоростях распространения импульсов.

Для решения этой проблемы существуют всего две возможности: когерентная инверсия среды, а затем ее ионизация; нахождение таких условий, которые бы обеспечили более согласованное распространение импульсов в среде.

В первую очередь был опробован метод когерентной инверсии среды. Принцип ее получения весьма прост: действуя на трехуровневую среду поочередно перекрывающимися по времени импульсами излучения с площадью [5]

$$S_i = \frac{d_i}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} \mathcal{E}_i(t) dt, \quad (3)$$

можно инвертировать ее сначала из состояния 1 в состояние 2, затем из состояния 2 в состояние 3 (рис. 1), а после этого включить импульс фотоионизирующей

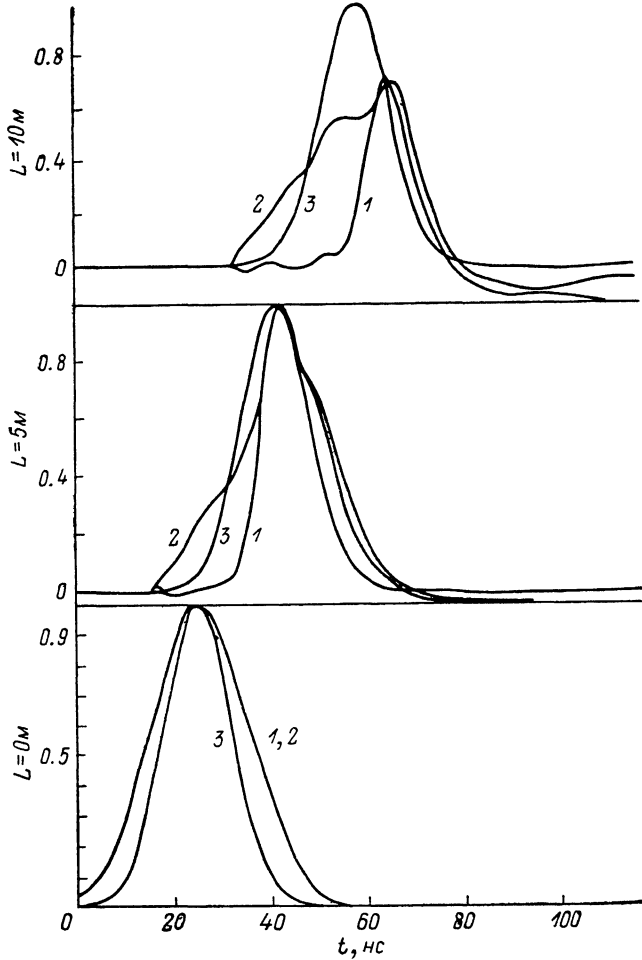


Рис. 4. Динамика распространения лазерных импульсов в трехуровневой вырожденной среде ($J_{1, 2, 3}=6$).

Обозначение и нормировка импульсов те же, что и на рис. 2.

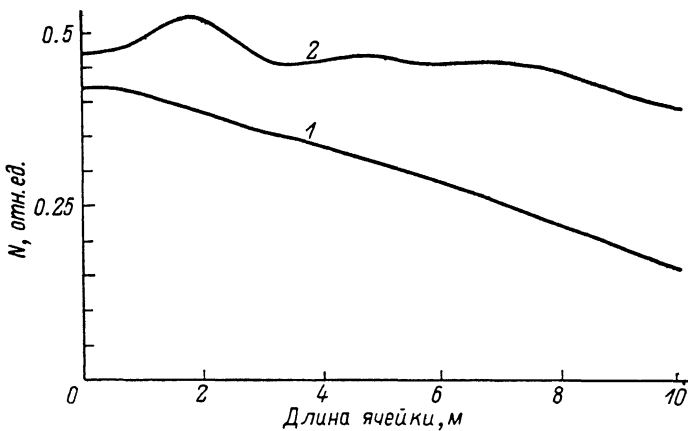


Рис. 5. Распределение относительной концентрации ионов ($n_+(y)/n_0$) в трехуровневой вырожденной среде ($J_{1, 2, 3}=6$) после прохождения лазерных импульсов.

1 — при синхронном включении импульсов ($K=0.30$), 2 — при задержанных относительно друг друга импульсах ($K=0.46$), 3 — при предварительной когерентной инверсии ($K=0.65$).

щего излучения. Легко понять, что в этом случае не требуется синхронности в распротранении импульсов, а эффективность ионизации была бы весьма высока, т. е. фотоионизирующее излучение взаимодействовало бы с полным числом атомов, находящихся в зоне фотоионизации.

Однако ожидать стабильности такого импульса в среде не приходится, так как заранее известно, что π -импульс неустойчив в среде [4]. И действительно, в результате численного эксперимента было выяснено, что при заданных параметрах длина, на которой среда инвертируется, не превышает сантиметра и, хотя эффективность ионизации в начальной части среды высока и достигает

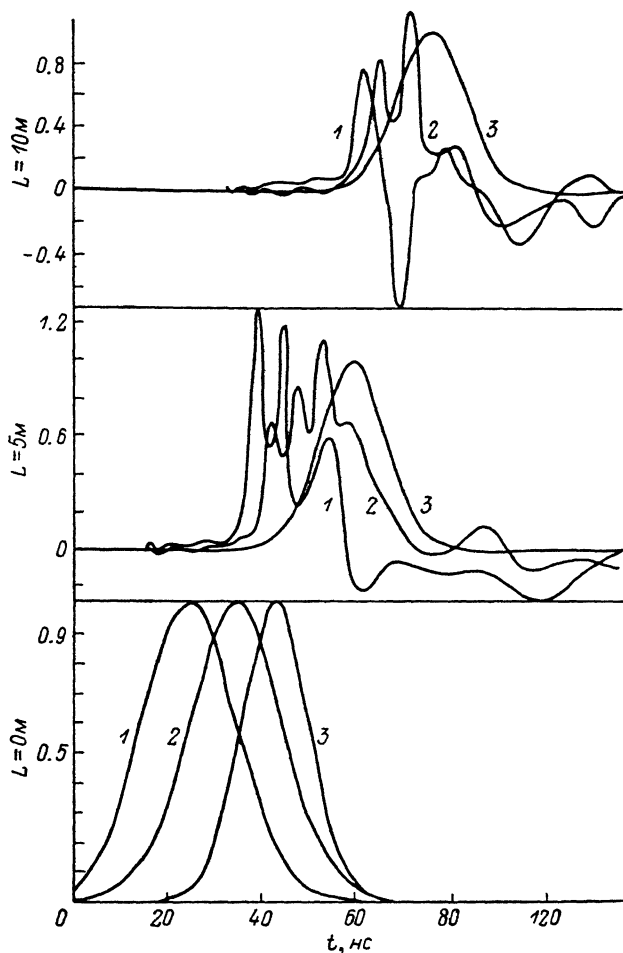


Рис. 6. Динамика распространения лазерных импульсов в трехуровневой невырожденной среде.

Задержка между 1-м и 2-м импульсами 10 нс, между 1-м и 3-м импульсами 18 нс. Обозначение и нормировка импульсов те же, что и на рис. 2.

при $E_3 = 8 \text{ Дж} \cdot \text{м}^{-2}$ величины 0.85, средний по всей длине коэффициент ионизации мал и не превышает 0.02.

Для того чтобы выяснить причину малой эффективности взаимодействия ЭМ поля со средой, определим энергию импульса, удовлетворяющую условию (3). Известно, что плотность мощности ЭМ излучения связана с напряженностью электрического поля в бегущей волне следующим соотношением:

$$I_i(t) = \frac{\epsilon_0 c}{2} |\mathcal{E}_i(t)|^2 \quad i = 1, 2, \quad (4)$$

где ϵ_0 , c — электрическая проницаемость и скорость света в вакууме.

Так как форма импульса ЭМ излучения предполагалась гауссовой, то плотность энергии импульса E_i , удовлетворяющую условию (3), получим, принимая во внимание выражения (2)–(4),

$$E_i = \varepsilon_0 c \pi^{3/2} \hbar^2 / 4 d_i^2 T_0. \quad (5)$$

Теперь плотность энергии импульса ЭМ поля, удовлетворяющая условию (3), связана однозначно через длительность импульса и дипольный момент пере-

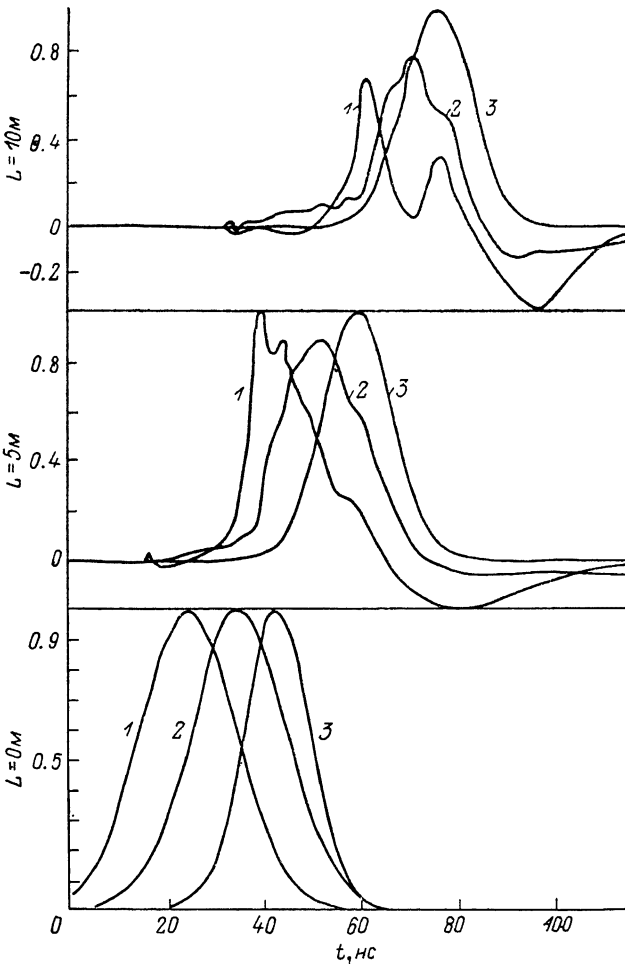


Рис. 7. Динамика распространения лазерных импульсов в трехуровневой вырожденной среде ($J_{1, 2, 3} = 6$).

Задержки между импульсами те же, что и на рис. 6. Обозначение и нормировка импульсов те же, что и на рис. 2.

хода. В рассмотренном выше случае E_i равно $3.7 \cdot 10^{-4}$ Дж/см², что значительно меньше плотности энергии, необходимой для возбуждения всех атомов в среде (1). Но, приравняв их, получим такие условия связи параметров среды, которые, как мы надеемся, обеспечат условие, близкое к π -импульсу для всей среды,

$$d_i = \left(\frac{\hbar \pi^{3/2} \varepsilon_0 c}{4 \omega_i n_0 L T_0} \right)^{1/2}. \quad (6)$$

Подставив в это выражение значения параметров n_0 , L , T_0 , ω_i , получим для d_i новые значения $d_{1, 2} = 3.5 \cdot 10^{-31}$ Кл·м. На рис. 3 показано распределение концентрации ионов в зоне фотоионизации после прохождения импульсов из-

лучения. Из него видно, что среда инвертируется почти полностью: $(1/L) \int_0^L n_2 dy = 0.85$, что обеспечивает высокий коэффициент ионизации среды 0.65.

Отсюда можно заключить, что если схему переходов в атоме выбрать так, чтобы дипольные моменты переходов удовлетворяли условию (6), то возможно инвертировать трехуровневую среду на заданной длине и при заданной плотности атомов. Это в свою очередь позволяет получить наивысший при заданных E_3 и $n_0 L$ коэффициент ионизации. Но, несмотря на столь высокую эффективность, нельзя не признать, что этот случай представляет скорее чисто академический интерес и вряд ли может быть применен на практике. Например, в том случае, если уровни системы вырождены, то рассматриваемый когерентный способ фотоионизации среды становится неэффективен, поскольку нельзя выполнить условие (3) для всех подсистем, входящих в систему. Поэтому следует рассмотреть другие возможности повышения эффективности фотоионизации.

Наиболее очевидным и легко реализуемым способом сведения к минимуму последствий рассинхронизации является введение временных задержек между лазерными импульсами. В этом случае можно ожидать более оптимального взаимодействия лазерного излучения с трехуровневой системой, что и было подтверждено в ходе численного эксперимента.

На рис. 6 показано распространение лазерных импульсов гауссовой формы в трехуровневой невырожденной среде. Здесь импульсы излучения на 2-й и 3-й ступенях процесса задержаны относительно 1-го импульса на 10 и 18 нс. Величины задержек оптимизировались по максимальному выходу ионов при постоянных плотностях энергий импульсов. При этом коэффициент ионизации среды увеличился по сравнению с синхронным включением импульсов более чем на треть и достиг величины 0.42 (рис. 3). Обращает на себя внимание тот факт, что задержка 2-го импульса относительно 1-го сделала его более стабильным и, хотя распад импульсов на 1-й и 2-й ступенях процесса сохранился, расщепление 2-го импульса, связанное с отрывом его фронтальной части, практически отсутствует.

Распространение импульсов гауссовой формы в трехуровневой вырожденной среде ($J_{1,2,3}=6$) показан на рис. 7. Параметры среды и величины задержек между импульсами те же, что и в предыдущем случае. Можно видеть (рис. 5), что введение задержек между импульсами увеличивает коэффициент ионизации среды до 0.46.

Таким образом, введение задержек между импульсами позволяет при той же энергии импульсов увеличить выход ионов в 1.5 раза по сравнению с синхронным включением.

В заключение авторы выражают благодарность А. М. Прохорову за постоянный интерес и поддержку работы, а также О. А. Кузьмину за неоценимую помощь в работе.

Список литературы

- [1] *Davis J. I., Rockower E. B.* // IEEE J. Quantum Electron. 1982. Vol. QE-18. N 2. P. 980—982.
- [2] Современные проблемы математического моделирования. Стандартные программы для решения задач волновой механики. М.: Изд-во МГУ, 1984. С. 164—166.
- [3] *Konopinski M. J., Eberly J. H.* // Phys. Rev. A. 1981. Vol. 24. N 5. P. 2567—2583.
- [4] *Gibbs H. M., Slusher R. E.* // Phys. Rev. Lett. 1970. Vol. 24. P. 638.
- [5] *Аллен Л., Эберли Дж.* Оптический резонанс и двухуровневые атомы. М.: Мир, 1978.

Институт общей физики АН СССР
Москва

Поступило в Редакцию
16 мая 1988 г.
В окончательной редакции
3 января 1989 г.