



Warszawa, 20 grudnia 2018

Co naprawdę się dzieje na femtosekundowych skrzyżowaniach?

Gdy wiązki biegnących w tę samą stronę ultrakrótkich impulsów laserowych przecinają się ze sobą pod zauważalnym kątem, między impulsami dochodzi do różnorodnych oddziaływań. Zjawiska fizyczne się komplikują, a ich opis matematyczny staje się złożony obliczeniowo. Do przeprowadzenia odpowiednich symulacji trzeba wtedy angażować całe klastry komputerowe. Najnowsza wersja oprogramowania Hussar pozwala uporać się z obliczeniami nawet na zwykłym laptopie.

Impulsy świetlne o czasie trwania milionowych części jednej miliardowej sekundy odgrywają dziś kluczową rolę w wielu eksperymentach i układach pomiarowych. Gdy wiązek laserowych z impulsami jest więcej niż jedna, pojawiają się ciekawe efekty związane z ich wzajemnym oddziaływaniem. Niestety, wykorzystanie tych efektów było dotychczas utrudnione. Gdy nakładające się wiązki biegną współliniowo, modelowanie ich wzajemnego wpływu można zrealizować bez przybliżeń, stosunkowo szybko i wydajnie. Ale w wielu zastosowaniach ultrakrótkie impulsy laserowe muszą się zbiegać pod kątem. Opis matematyczny zachodzących zjawisk staje się wtedy tak skomplikowany, że w celu zakończenia symulacji w sensownym czasie konieczne jest użycie metod wymagających całych klastrów komputerowych. Teraz, dzięki oprogramowaniu Hussar z Centrum Laserowego Instytutu Chemii Fizycznej Polskiej Akademii Nauk (IChF PAN) i Wydziału Fizyki Uniwersytetu Warszawskiego, każdy zainteresowany może odpowiednie symulacje przeprowadzić nawet na zwykłym komputerze.

„Zmiany wprowadzone w najnowszej wersji programu Hussar są radykalne. Eksperymenty, których nie były w stanie modelować nawet największe ośrodki laserowe, teraz będą mogły być zaprojektowane – a po pewnym czasie zapewne i wykonane – przez badaczy ze znacznie mniejszych laboratoriów”, mówi dr Tomasz Kardaś (IChF PAN), autor oprogramowania.

Do tej pory by dokładnie opisać interakcję dwóch lub więcej zbiegających się ze sobą wiązek ultrakrótkich impulsów elektromagnetycznych sięgano po metodę FDTD (Finite Difference Time Domain), korzystającą z pełnych równań Maxwella. Pod względem rachunkowym FDTD jest wyjątkowo czasochłonna: pojedyncza symulacja zajmuje superkomputery na wiele dni. Sytuację pogarszał fakt, że nawet po zaangażowaniu klastrów obliczeniowych, w akceptowalnym czasie otrzymywano wyniki dotyczące małych objętości, nierzadko o rozmiarach zaledwie mikrometrowych. Z powyższych względów optycy ratowali się tzw. metodami jednokierunkowymi. Korzystano zwłaszcza z równania znanego jako NLSE (nieliniowe równanie Schrödingera) oraz mniej popularnego, lecz dokładniejszego UPPE (Unidirectional Pulse Propagation Equation).

Równania te pozwalały śledzić propagację impulsów nawet na odcinkach sięgających metrów, ale jednocześnie narzucały poważne ograniczenie: nakładające się wiązki musiały być współliniowe (dopuszczalne były przybliżone obliczenia dla odchyień nie większych od jednego stopnia).

„Od pewnego czasu rozwijamy własne oprogramowanie do symulowania bez przybliżeń tego, co się dzieje podczas nakładania się femtosekundowych impulsów laserowych, naturalnie przy uwzględnieniu zjawisk nieliniowych. Podobnie jak inni, z powodów obliczeniowych ograniczaliśmy się do wiązek współliniowych. Na szczęście ostatnio udało się nam wyraźnie poprawić opis matematyczny i w efekcie użyć metod jednokierunkowych do symulacji krzyżujących się wiązek. Przy okazji stworzyliśmy ciekawe narzędzia, na przykład do obrotów pola elektrycznego impulsów w trójwymiarowej przestrzeni. Nasz nowy algorytm realizuje je tysiąc razy szybciej od zazwyczaj używanej w tym celu interpolacji”, wyjaśnia dr Kardaś i podkreśla, że testy zmodernizowanego oprogramowania były możliwe m.in. dzięki współpracy z Interdyscyplinarnym Centrum Modelowania Matematycznego i Komputerowego Uniwersytetu Warszawskiego.

Najnowsza wersja programu Hussar pozwala projektować na przykład aparaturę do czasowo rozdzielczej fluorescencji. W tego typu przyrządach wykorzystuje się fakt, że gdy femtosekundowy impuls laserowy wraz ze słabym sygnałem fluorescencji wlatują do wnętrza kryształu nieliniowego, pojawia się trzecia wiązka, o częstości będącej sumą częstości obu wiązek pierwotnych. Sygnał fluorescencji można więc sumować z impulsem bramkującym, co umożliwi dokładne ustalenie chwili jego powstania w próbce. Opisane procesy stają się jednak szczególnie wydajne wtedy, gdy kąt między oddziałującymi impulsami wynosi ok. 20 stopni. Symulowanie takich układów wykraczało poza możliwości dotychczas istniejącego oprogramowania. Tymczasem za pomocą programu Hussar można teraz modelować wiązki krzyżujące się nawet pod kątem 140 stopni.

Udoskonalone oprogramowanie działa na zwykłych komputerach. Za jego pomocą można projektować doświadczenia optyczne wymagające do tej pory kolejnych, kosztownych, iteracyjnych poprawek w laboratorium. Przykładowo, jeśli jeden z impulsów jest bardzo silny, zmienia wokół siebie ośrodek, przez który podróżuje. W rezultacie drugi impuls zachowuje się tak, jakby przechodził przez soczewkę wyindukowaną przez pierwszy impuls i w konsekwencji zaczyna się skupiać. Zjawisko to pozwala budować ultraszybkie migawki, o czasie „otwarcia” sięgającym femtosekund. Sam eksperyment jest przy tym w zasięgu nawet małego laboratorium optycznego.

Hussar może wesprzeć także wielkie eksperymenty optyczne, takie jak projektowanie niewspółliniowych wzmacniaczy parametrycznych. Przyrządy te mogą zwiększać moc laboratoryjnych laserów nawet do wartości liczonych w petawatach. Nie mniej ciekawe możliwości rysują się w odniesieniu do układów optycznych z trzema lub jeszcze większą liczbą wiązek. Aparatura o takiej konstrukcji jest używana m.in. w spektroskopii dwuwymiarowej 2D-IR i echu fotonowym.

Oprogramowanie Hussar jest bezpłatne. Zainteresowane osoby znajdą je na stronie domowej projektu: <http://ufs.edu.pl/index.php?article=hussar&lang=en>.

Instytut Chemii Fizycznej Polskiej Akademii Nauk (<http://www.ichf.edu.pl/>) został powołany w 1955 roku jako jeden z pierwszych instytutów chemicznych PAN. Profil naukowy Instytutu jest silnie powiązany z najnowszymi światowymi kierunkami rozwoju chemii fizycznej i fizyki chemicznej. Badania naukowe są prowadzone w dziewięciu zakładach naukowych. Działający w ramach Instytutu Zakład Doświadczalny CHEMIPAN wdraża, produkuje i komercjalizuje specjalistyczne związki chemiczne do zastosowań m.in. w rolnictwie i farmacji. Instytut publikuje około 200 oryginalnych prac badawczych rocznie.

KONTAKT:

dr **Tomasz Kardaś**
Instytut Chemii Fizycznej Polskiej Akademii Nauk w Warszawie
tel.: +48 22 3433253
email: tkardas@ichf.edu.pl

PUBLIKACJE NAUKOWE:

1. „Noncollinear and nonlinear pulse propagation”
T. M. Kardaś, Y. Stepanenko, Cz. Radzewicz
Scientific Reports, 8(1):14350
DOI: 10.1038/s41598-018-32676-9

POWIĄZANE STRONY WWW:

<http://ufs.edu.pl/index.php?article=hussar&lang=en>
Strona domowa oprogramowania Hussar

<http://www.ichf.edu.pl/>
Strona Instytutu Chemii Fizycznej Polskiej Akademii Nauk.

<http://www.ichf.edu.pl/press/>
Serwis prasowy Instytutu Chemii Fizycznej PAN.

<http://www.ichfdlafirm.pl/>
Oferta Instytutu Chemii Fizycznej PAN skierowana do przedsiębiorców i przemysłu.

MATERIAŁY GRAFICZNE:

ICHF181220b_fot01s.jpg

HR: http://ichf.edu.pl/press/2018/12/ICHF181220b_fot01.jpg

Dr Tomasz Kardaś z Centrum Laserowego Instytutu Chemii Fizycznej PAN i Wydziału Fizyki Uniwersytetu Warszawskiego w świąteczny sposób wizualizuje zbiegające się pod kątem wiązki ultrakrótkich impulsów laserowych, symulowane przez oprogramowanie Hussar. (Źródło: IChF PAN, Grzegorz Krzyżewski)

ICHF181220b_fot02s.jpg

HR: http://ichf.edu.pl/press/2018/12/ICHF181220b_fot02.jpg

W programie Hussar można teraz wydajnie modelować oddziaływania femtosekundowych impulsów laserowych zbiegających się pod kątem nawet 140 stopni. (Źródło: IChF PAN)