



Analyse numérique

Une méthode spectrale pour les équations de Maxwell–Bloch bidimensionnelles dans les cristaux non-linéaires

Olivier Saut

MIP, UMR 5640 (CNRS-UPS-INSA), université Paul-Sabatier, 118, route de Narbonne, 31062 Toulouse cedex 4, France

Reçu le 24 novembre 2004 ; accepté après révision le 22 mars 2005

Disponible sur Internet le 23 mai 2005

Présenté par Olivier Pironneau

Résumé

Pour étudier la propagation d'impulsions ultra-courtes dans un cristal non-linéaire, il est nécessaire de développer de nouveaux modèles mathématiques. Les modèles de l'optique non-linéaire classique ne sont pas adaptés pour ces impulsions à spectre large. Nous avons développé un modèle adapté à l'interaction lumière-matière dans des cristaux non-linéaires [Besse et al., *Math. Model. Numer. Anal.* 38 (2) (2004) 321–344]. Une étude numérique bidimensionnelle basée sur un schéma de Yee [IEEE Trans. Antennas Propag. 14 (1966) 302–307] a été effectuée ailleurs. Pour diminuer le coût numérique et la complexité d'une telle étude, nous présentons ici une nouvelle discrétisation des équations de Maxwell–Bloch basé sur une méthode spectrale [Liu, *Microwave Opt. Techn. Lett.* 15 (1997) 158–165]. **Pour citer cet article : O. Saut, *C. R. Acad. Sci. Paris, Ser. I 340 (2005)*.**

© 2005 Académie des sciences. Publié par Elsevier SAS. Tous droits réservés.

Abstract

A spectral method for the bidimensional Maxwell–Bloch equations in nonlinear crystals. To study the propagation of ultrashort laser pulses in a nonlinear optical crystal, it has become necessary to develop new models. Classical models from nonlinear optics are no longer relevant for such pulses. In Besse et al. [*Math. Model. Numer. Anal.* 38 (2) (2004) 321–344], we have developed a model adequate to study such a propagation. A bidimensional numerical study based on the Yee scheme [IEEE Trans. Antennas Propag. 14 (1966) 302–307] was performed elsewhere. To shorten computation times, we present here a new discretization method adapted from Liu [*Microwave Opt. Techn. Lett.* 15 (1997) 158–165]. **To cite this article : O. Saut, *C. R. Acad. Sci. Paris, Ser. I 340 (2005)*.**

© 2005 Académie des sciences. Publié par Elsevier SAS. Tous droits réservés.

Adresse e-mail : saut@mip.ups-tlse.fr (O. Saut).

Abridged English version

In [2], we have described a semiclassical model, namely the Maxwell–Bloch model, adequate to describe the propagation of ultrashort laser pulses in a nonlinear crystal. This model was shown to be more accurate than most macroscopic models [3]. To discretize the Maxwell–Bloch equations in one and two dimensions in space, we used a FDTD scheme adapted [6] from the Yee scheme [8] for the Maxwell equations.

In the Maxwell–Bloch model, the evolution of the electromagnetic field (\mathbf{E} , \mathbf{H}) obeys the Maxwell equations (1) and (2). We consider two space variables, one – \mathbf{z} – in the direction of propagation and the other – \mathbf{y} – in a transversal direction.

The crystal is statistically described at the quantum-mechanical level by a density matrix ρ . The diagonal elements of ρ represent the populations levels, while the off-diagonal terms represent the coherences between these levels. The evolution of the density matrix ρ is driven by the Bloch equations (3), where $\hbar\omega_{jk}$ is the difference between the energy levels j and k of the free Hamiltonian and μ is the dipolar matrix of the material.

The polarization term \mathbf{P} linking the Maxwell and Bloch equations is computed by Eq. (4), where \mathcal{N} is the density of molecules in the crystal.

To compute the spatial derivatives involved in Maxwell equations (1) and (2), we use a Fourier transform [5], yielding Eq. (5). Thus, we do not need to use staggered grids as in [7,6] to obtain a second-order scheme. The electromagnetic field and the density matrix are discretized as follows:

- *In space*, the electric field \mathbf{E} , the magnetic field \mathbf{H} and the density matrix ρ are discretized at the same points: $(j, k) \equiv (j\delta y, k\delta z)$.
- *In time*, we discretize the electric field at times $t^n \equiv n\delta t$. The magnetic field \mathbf{H} and the density matrix ρ are computed at times $t^{n+1/2} \equiv (n + \frac{1}{2})\delta t$.

Using this scheme yields Eqs. (6) and (7).

The time-derivatives of the polarization \mathbf{P} are expressed thanks to the Bloch equations (3), which gives Eq. (8) and its discretized form (9). Then we plug Eq. (9) into Eqs. (7). Then in order to compute the electric field \mathbf{E}^{n+1} , we have to solve a diagonal system. This linear system is much easier to solve than the one obtained with the FDTD scheme [6].

The Bloch equations are solved using a Strang splitting method as in [7]. We solve separately the part involving the free Hamiltonian, which could be rewritten as a diagonal system, and the part involving the interaction with the wave-field, for which we know an analytic solution.

To counter the wrap-around effect from the FFT, we use a PML absorbing boundary condition [1].

In Fig. 1, we have plotted a comparison between the FDTD scheme and the spectral scheme (PSTD). We run an experiment of second harmonic generation (see page 78 of [4]) and use different mesh sizes for the spectral scheme. The schemes are in good agreement for the E_y component of the electric field, which evolves mainly by the linear part of the Maxwell equations. For the component E_x , evolving because of the quadratic non-linearity, the schemes are in agreement only for the finest meshes. To have a correct rendering of the nonlinearity, we shall use finer grids than in the linear case [5]. In Fig. 2, we have plotted the energy flux in an experiment of second harmonic generation. The result is in good agreement with what we could expect from the physics.

1. Introduction

Dans [2], nous avons décrit un modèle semi-classique, le modèle de Maxwell–Bloch, adapté à l'étude de l'interaction d'impulsions ultracourtes dans un cristal non-linéaire pour laquelle la plupart des modèles macroscopiques ne sont plus valables [3].

L'étude numérique de ce modèle dans le cas où le champ électromagnétique ne dépendait que d'une seule variable en espace était basée sur un schéma aux différences finies [7] adapté du schéma de Yee [8] pour les équations de Maxwell. On suppose ici que le champ électromagnétique dépend en espace d'une variable dans la direction de propagation notée \mathbf{z} et d'une variable transverse notée \mathbf{y} .

Dans le modèle de Maxwell–Bloch, l'onde électromagnétique est décrite classiquement par les équations de Maxwell. Le champ magnétique \mathbf{H} évolue donc par les équations de Faraday

$$\begin{cases} \partial_t H_x = -\mu_0^{-1}(\partial_y E_z - \partial_z E_y), \\ \partial_t H_y = -\mu_0^{-1}\partial_z E_x, \\ \partial_t H_z = \mu_0^{-1}\partial_y E_x, \end{cases} \quad (1)$$

et le champ électrique \mathbf{E} par les équations d'Ampère,

$$\begin{cases} \partial_t E_x = [\eta_{xx}(\partial_y H_z - \partial_z H_y) - \eta_{xz}\partial_y H_x] - [\eta\partial_t \mathbf{P}]_x, \\ \partial_t E_y = \eta_{yy}\partial_z H_x - [\eta\partial_t \mathbf{P}]_y, \\ \partial_t E_z = [\eta_{zx}(\partial_y H_z - \partial_z H_y) - \eta_{zz}\partial_y H_x] - [\eta\partial_t \mathbf{P}]_z, \end{cases} \quad (2)$$

où le terme \mathbf{P} désigne la polarisation qui contient l'interaction avec le cristal. On a noté η l'inverse du tenseur statique de susceptibilité du cristal.

Le milieu est décrit au niveau microscopique par une matrice densité ρ . Les termes diagonaux représentent la densité de population dans les N niveaux d'énergie de l'Hamiltonien du système hors perturbation par l'onde électromagnétique et les termes extra-diagonaux, les cohérences entre ces niveaux. La matrice densité ρ évolue par les équations de Bloch

$$\partial_t \rho_{jk} = -i\omega_{jk}\rho_{jk} + \frac{i}{\hbar}[\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{E}, \rho]_{jk}, \quad 1 \leq j, k \leq N \quad (3)$$

qui font intervenir les différences ω_{jk} des fréquences de résonance entre les niveaux j et k et où $\boldsymbol{\mu} \in \mathcal{M}_N(\mathbb{C}^3)$ est la matrice dipolaire du cristal décrivant sa structure quantique et donnée ici par [2].

Le lien entre les équations d'Ampère (2) et Bloch (3) se fait par la polarisation

$$\mathbf{P} = \mathcal{N} \operatorname{tr}(\boldsymbol{\mu}\rho), \quad (4)$$

où \mathcal{N} est le nombre de molécules par unité de volume.

2. Discrétisation des équations

Pour discrétiser les équations de Maxwell–Bloch, nous allons utiliser une méthode adaptée de [5]. Pour éviter d'utiliser deux grilles décalées d'un demi-pas de temps en espace et en temps pour les champs électrique et magnétique [8], ce qui conduit à une résolution complexe [6], la dérivée spatiale est calculée par transformation de Fourier. La fonction f dépendant de x est dérivée dans la direction \mathbf{d} par la formule

$$\partial_d f(x) = [\overline{\mathcal{F}}(-i\xi_d \mathcal{F}(f))](x), \quad (5)$$

où ξ_d est la variable spectrale associée à x . En calculant ainsi les dérivées spatiales, un schéma d'ordre deux peut être obtenu en discrétisant \mathbf{E} et \mathbf{H} aux mêmes points d'espace.

Les équations de Maxwell–Bloch sont discrétisées de la façon suivante :

- *En espace*, le champ électromagnétique et la matrice sont discrétisés aux mêmes points $(j, k) \equiv (j\delta y, k\delta z)$,
- *En temps*, le champ électrique \mathbf{E} est discrétisé aux temps entiers $t^n = n\delta t$. Le champ magnétique \mathbf{H} et la matrice densité ρ sont discrétisés aux temps demi-entiers $t^{n+1/2} \equiv (n + \frac{1}{2})\delta t$.

L'utilisation de la FFT pour calculer les dérivées spatiales (cf. l'Éq. (5)) a pour effet de périodiser le domaine de calcul. Les ondes réentrantes peuvent perturber la propagation des ondes physiques. Pour limiter les effets de cette périodisation, on utilise des couches absorbantes de type PML [1].

2.1. Discrétisation des équations de Maxwell

Notons \mathbb{D}^t l'opérateur de dérivation temporelle par différences finies et $\mathbb{D}^y, \mathbb{D}^z$ les opérations de dérivation spatiales dans les directions y et z par transformée de Fourier rapide (FFT) à partir de la formule (5).

Les équations de Faraday gouvernant le champ magnétique se discrétisent alors par

$$\begin{aligned} (\mathbb{D}^t H_x)_{j,k}^n &= -\mu_0^{-1} [(\mathbb{D}^y E_z)_{j,k}^n - (\mathbb{D}^z E_y)_{j,k}^n], \\ (\mathbb{D}^t H_y)_{j,k}^n &= -\mu_0^{-1} (\mathbb{D}^z E_x)_{j,k}^n, \\ (\mathbb{D}^t H_z)_{j,k}^n &= \mu_0^{-1} (\mathbb{D}^y E_x)_{j,k}^n. \end{aligned} \quad (6)$$

Ces équations se résolvent donc explicitement pour obtenir $\mathbf{H}_{j,k}^{n+1/2}$, une fois $\mathbf{H}_{j,k}^{n-1/2}$ connu, puisque $(\mathbb{D}^t \mathbf{H})_{j,k}^n = \frac{1}{\delta t} (\mathbf{H}_{j,k}^{n+1/2} - \mathbf{H}_{j,k}^{n-1/2})$.

Les équations d'Ampère sont discrétisées par

$$\begin{aligned} (\mathbb{D}^t E_x)_{j,k}^{n+\frac{1}{2}} &= \eta_{xx} [(\mathbb{D}^y H_z)_{j,k}^{n+\frac{1}{2}} - (\mathbb{D}^z H_y)_{j,k}^{n+\frac{1}{2}}] - \eta_{xz} (\mathbb{D}^y H_x)_{j,k}^{n+\frac{1}{2}} - \eta_{xx} (\partial_t P_x)_{j,k}^{n+\frac{1}{2}} - \eta_{xz} (\partial_t P_z)_{j,k}^{n+\frac{1}{2}}, \\ (\mathbb{D}^t E_y)_{j,k}^{n+\frac{1}{2}} &= \eta_{yy} (\mathbb{D}^z H_x)_{j,k}^{n+\frac{1}{2}} - \eta_{yy} (\partial_t P_y)_{j,k}^{n+\frac{1}{2}}, \\ (\mathbb{D}^t E_z)_{j,k}^{n+\frac{1}{2}} &= -\eta_{zz} (\mathbb{D}^y H_x)_{j,k}^{n+\frac{1}{2}} + \eta_{zx} [(\mathbb{D}^y H_z)_{j,k}^{n+\frac{1}{2}} - (\mathbb{D}^z H_y)_{j,k}^{n+\frac{1}{2}}] - \eta_{zx} (\partial_t P_x)_{j,k}^{n+\frac{1}{2}} - \eta_{zz} (\partial_t P_z)_{j,k}^{n+\frac{1}{2}}. \end{aligned} \quad (7)$$

Il reste à calculer la partie non-linéaire induite par le terme de polarisation \mathbf{P} . Pour cela, on procède comme dans le cas des schémas aux différences finies [7]. La dérivée temporelle de la polarisation est calculée exactement par

$$\partial_t P_d = \mathcal{N} \operatorname{tr}(\mu_d \partial_t \rho), \quad d \in \{x, y, z\},$$

on utilise alors les équations de Bloch (3)

$$\partial_t P_d = \mathcal{N} \operatorname{tr}(\mu_d R(\rho)) - \frac{i\mathcal{N}}{\hbar} \operatorname{tr}(\mu_d [V, \rho]), \quad d \in \{x, y, z\}, \quad (8)$$

où $V = -\mu \cdot \mathbf{E} = -E_x \mu_x - E_y \mu_y - E_z \mu_z$ (on note μ_d la matrice obtenue à partir de μ en ne gardant que la coordonnée d de chacun de ses coefficients) et $R(\rho)_{jk} = -i\omega_{jk} \rho_{jk}$. En supposant que la matrice densité au temps $t^{n+1/2}$ est connue, l'Éq. (8) se discrétise suivant le schéma décrit précédemment par

$$(\partial_t P_d)_{j,k}^{n+1/2} = \mathcal{N} \operatorname{tr}(\mu_d R(\rho_{j,k}^{n+1/2})) - \frac{i\mathcal{N}}{\hbar} \operatorname{tr}\left(\mu_d \left[\frac{V_{j,k}^{n+1} + V_{j,k}^n}{2}, \rho\right]\right). \quad (9)$$

On injecte alors cette équation dans les équations d'Ampère discrétisées (7). La valeur du champ électrique $\mathbf{E}_{j,k}^{n+1}$ est donc obtenue en résolvant un système linéaire 3×3 . La résolution des équations d'Ampère est donc beaucoup plus rapide que dans [6] où l'on devait résoudre un système linéaire de taille $(N_y \times N_z)^2$ – pour une grille de taille $N_y \times N_z$ – non symétrique par une méthode GMRES, ce qui de plus complexifiait fortement le développement d'un algorithme parallèle.

2.2. Discrétisation des équations de Bloch

Les équations de Bloch (3) sont résolues comme dans [7] par un splitting de Strang. On résout séparément la partie hamiltonien libre

$$\partial_t \rho_{j,k} = -i\omega_{jk} \rho_{j,k}, \quad (10)$$

pour tout $1 \leq j, k \leq N$ qui se ramène à un système diagonal et la partie due à la perturbation électromagnétique

$$\partial_t \rho_{j,k} = -\frac{i}{\hbar} [V, \rho]_{j,k}, \tag{11}$$

que l'on résout numériquement à l'aide de la solution exacte de l'équation précédente soit

$$\rho(t) = e^{-\frac{i}{\hbar} \int_0^t V(s) ds} \rho_0 e^{+\frac{i}{\hbar} \int_0^t V(s) ds}.$$

3. Expériences numériques

Pour étudier l'efficacité de notre schéma, nous allons mener une expérience de génération de seconde harmonique. Une impulsion à la fréquence ω est envoyée dans le cristal à l'accord de phase. Du fait de la non-linéarité du milieu, une impulsion à la fréquence 2ω est créée et s'amplifie au cours de la propagation. Pour plus de détails, on pourra consulter [4] à partir de la page 78. Si le champ électrique initial à la fréquence ω est polarisé dans la direction \mathbf{y} , la deuxième harmonique apparaît dans la polarisation \mathbf{x} (du fait de la forme de la susceptibilité quadratique du cristal).

Sur la Fig. 1, nous avons représenté le champ électrique après 20 μm de propagation dans un cristal de KDP d'un faisceau de 20 fs, d'intensité 10^8 V/m et de longueur d'onde $1,06 \mu\text{m}$. Pour la méthode spectrale, nous avons testé plusieurs tailles de grilles allant de 40 à 100 points par longueur d'onde.

L'amplitude de la composante E_y (à gauche sur la Fig. 1) est calculée correctement par les deux schémas et pour toutes les tailles de grille considérées (on observe un déphasage entre les deux schémas, l'interface entre le milieu linéaire et le cristal n'est pas prise aux mêmes points). La composante E_x étant nulle initialement, la composante E_y est peu affectée par la non-linéarité au début de la propagation.

Par contre, on peut observer des différences dans l'intensité de la composante E_x calculée par les schémas. Cette composante évolue du fait de la non-linéarité introduite dans les équations de Maxwell. On retrouve un fait observé avec le schéma FDTD [6] : pour décrire convenablement les effets non-linéaires, la grille utilisée doit être beaucoup plus fine que ce que l'on pouvait espérer a priori (dans [5], des grilles de deux points par longueur d'onde sont utilisées, pour un schéma de Yee linéaire des grilles de 16 points par longueur d'onde suffisent).

Étudions maintenant la propagation d'une impulsion bidimensionnelle. On considère un profil gaussien de 10 fs et 100 μm dans la direction \mathbf{y} , le cristal est situé après 20 μm de milieu linéaire. On a représenté, en unités arbitraires,

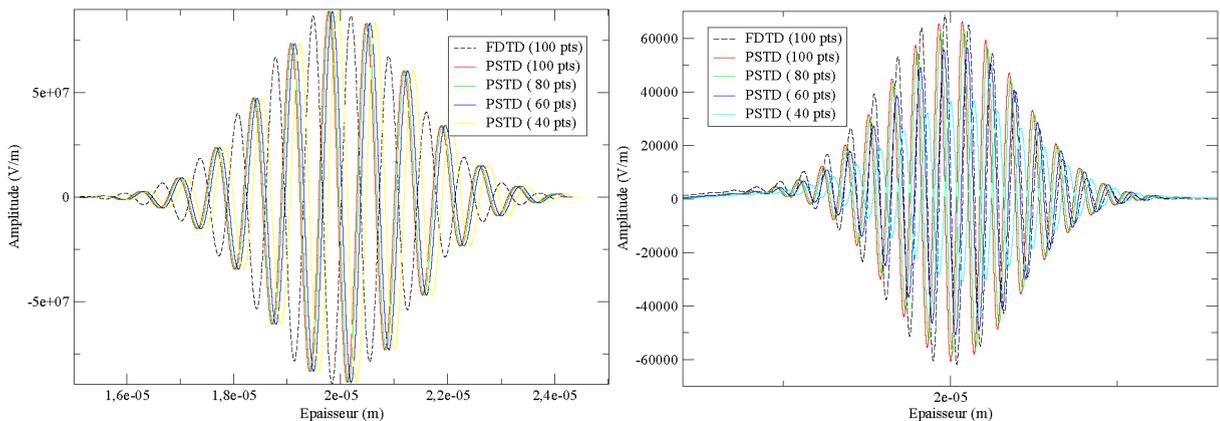


Fig. 1. Évolution du champ électrique (E_y , E_x) pour les deux schémas (FD = différences finies, PS = pseudo-spectral).

Fig. 1. Evolution of the electric field (E_y , E_x) for the finite difference (FD) and pseudo-spectral (PS) schemes.

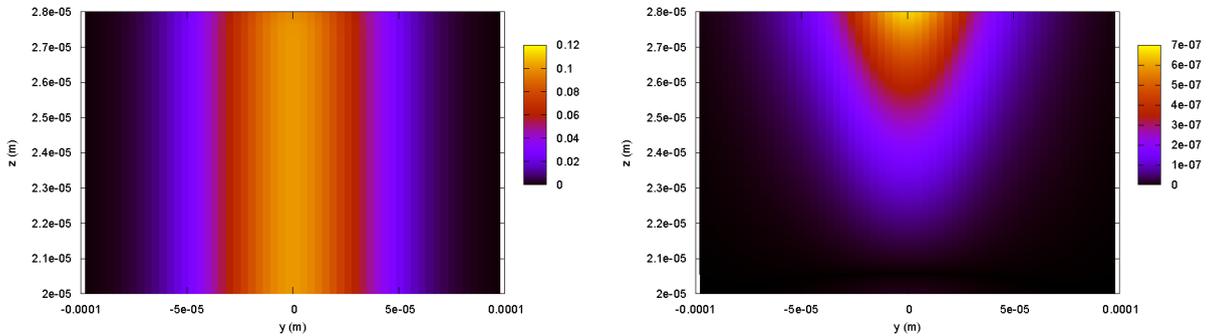


Fig. 2. Flux d'énergie (F_y , F_x) dans une expérience de génération de double harmonique après $1,08 \times 10^{-13}$ s.

Fig. 2. Energy flux (F_y , F_x) in a second harmonic generation experiment after 1.08×10^{-13} s.

le flux d'énergie en y et en x après $1,08 \times 10^{-13}$ s. On a pris une grille de 75 points par longueur d'onde dans la direction z et 80 points dans la direction y (voir Fig. 2).

On observe bien la propagation de l'harmonique fondamentale (sur F_y) et la croissance de la seconde harmonique (sur F_x). L'intensité du faisceau est plus forte au centre, c'est là que l'intensité de la deuxième harmonique est la plus grande. Ces résultats sont conformes à la physique du problème.

4. Conclusion

La méthode de discrétisation que nous avons développée est donc moins coûteuse numériquement qu'une discrétisation par différences finies [6]. En effet, on peut utiliser une grille plus grossière et le système linéaire obtenu à partir des équations d'Ampère est beaucoup plus simple que précédemment. Cette méthode donne sensiblement les mêmes résultats en des temps plus courts, ce qui permet d'étudier des propagations sur de plus grandes épaisseurs de cristal. De plus, du fait du caractère local de ce schéma, le développement d'un algorithme de résolution parallèle est beaucoup plus aisée qu'avec le schéma FDTD [6], où l'on devait utiliser une version parallèle du solveur itératif GMRES.

Références

- [1] J.-P. Berenger, A perfectly matched layer for the absorption of electromagnetic waves, *J. Comput. Phys.* 114 (2) (1994) 185–200.
- [2] C. Besse, B. Bidégaray, A. Bourgeade, P. Degond, O. Saut, A Maxwell–Bloch model with discrete symmetries for wave propagation in nonlinear crystals: an application to KDP, *M2AN Math. Model. Numer. Anal.* 38 (2) (2004) 321–344.
- [3] A. Bourgeade, O. Saut, Comparison of macroscopic and microscopic models for ultrashort pulses propagation in nonlinear crystals, 2004, submitted for publication.
- [4] R.W. Boyd, *Nonlinear Optics*, Academic Press, 1992.
- [5] Q.H. Liu, The PSTD algorithm: a time-domain method requiring only two cells per wavelength, *Microwave Opt. Techn. Lett.* 15 (1997) 158–165.
- [6] O. Saut, Bidimensional study of the Maxwell–Bloch model in a nonlinear crystal, 2004, submitted for publication.
- [7] O. Saut, Computational modeling of ultrashort powerful laser pulses in an anisotropic crystal, *J. Comput. Phys.* 197 (2) (2004) 624–646.
- [8] K.S. Yee, Numerical solution of initial boundary value problems involving Maxwell's equations in isotropic media, *IEEE Trans. Antennas Propag.* AP-14 (1966) 302–307.