

**THÈSE DE DOCTORAT DE L'ÉTABLISSEMENT UNIVERSITÉ BOURGOGNE  
FRANCHE-COMTÉ**

**PRÉPARÉE À L'UNIVERSITÉ DE FRANCHE-COMTÉ**

École doctorale n°37

Sciences Pour l'Ingénieur et Microtechniques

Doctorat d'Optique

par

**BENOÎT MOREL**

**Modélisation et simulation de l'ionisation des diélectriques par impulsions  
femtosecondes**

Modeling and simulation of dielectric ionization by femtosecond pulses

Thèse présentée et soutenue à Besançon, le 18 décembre 2020

Composition du Jury :

COUAIROU ARNAUD	Directeur de recherche CNRS au Centre de Physique Théorique de l'École Polytechnique	Rapporteur
GUIZARD STÉPHANE	Directeur de Recherche à l'École Polytechnique	Rapporteur
GUY BONNAUD	Professeur INSTN/CEA	Examineur
JACQUOT MAXIME	Professeur à l'Université de Bourgogne Franche-Comté	Président du jury
DUDLEY JOHN M.	Professeur à l'Université de Bourgogne Franche-Comté	Directeur de thèse
COURVOISIER FRANÇOIS	Directeur de recherche CNRS à l'Institut FEMTO-ST	Directeur de thèse



**Titre :** Modélisation et simulation de l'ionisation des diélectriques par impulsions femtosecondes

**Mots-clés :** Impulsions femtosecondes, Faisceaux de Bessel, Diélectrique, Plasma d'électrons-trous, Modèle fluide, Hydrodynamique

**Résumé :**

Les lasers femtosecondes sont des outils efficaces pour induire des modifications, des variations d'indice ou former des nano-vides au sein des matériaux diélectriques. La distribution d'énergie laser déposée est généralement calculée à partir de modèles reposant sur l'hypothèse de quasi-neutralité du plasma d'électrons-trous et en négligeant le transport des porteurs de charge. Ces hypothèses ne sont pas nécessairement vérifiées dans le cas d'une illumination laser par faisceaux de Bessel femtosecondes fortement focalisés, qui peuvent générer des nano-vides dans les diélectriques. Dans ce travail de thèse, nous avons développé un modèle théorique de plasma à deux fluides permettant de décrire le dépôt d'énergie laser à échelle nanométrique dans le volume des diélectriques, en prenant en compte les phénomènes

de transport des électrons et des trous, les ondes plasmas, la photoionisation, l'ionisation par impact, les collisions électron/trou et les interactions avec les phonons. Cette description impose la résolution explicite de trois équations de conservation par espèce de particules (conservations du nombre de particules, de la quantité de mouvement et de l'énergie), en plus des équations de Maxwell. Une étude du dépôt d'énergie laser par une impulsion femtoseconde mise en forme de faisceau de Bessel dans le saphir a été réalisée. Cette étude a montré que la dynamique des trous, le transport et les phénomènes de non-neutralité peuvent fortement influencer sur la distribution du plasma généré et sur l'absorption de l'énergie laser.

**Title:** Modeling and simulation of dielectric ionization by femtosecond pulses

**Keywords:** Femtosecond pulses, Bessel beams, Dielectrics, Electron-hole plasma, Fluid model, Hydrodynamic

**Abstract:**

Femtosecond lasers are powerful tools to induce modifications, index variations or nano-voids within dielectric materials. The deposited laser energy distribution is usually calculated from models based on quasi-neutrality assumption of electron-hole plasma and while neglecting transport of charge carriers. These assumptions are not necessarily verified in the case of laser illumination by highly focused femtosecond Bessel beams, which can generate nano-voids within dielectrics. In this thesis work, we developed a theoretical two-fluid plasma model describing deposited laser energy at the nanometric scale, by taking into

account the transport of electrons and holes, plasma waves, photionization, impact ionization, electron-hole scattering and scattering on phonons. This description imposes the explicit resolution of three conservation equations per particle species (number of particles, momentum and energy), besides Maxwell's equations. A study of deposited laser energy in sapphire by femtosecond Bessel beams was realized. This study showed that holes dynamic, transport and quasi-neutrality phenomena can strongly affect the generated plasma distribution and laser energy absorption.

*À mes parents*

# REMERCIEMENTS

Il est tout naturel de commencer par celui qui a dirigé cette thèse et qui m'a initié au monde de la recherche. Merci François Courvoisier pour la confiance que tu m'as accordée tout au long de ce travail doctoral, pour tes précieux conseils, ta polyvalence d'exception, ainsi que pour toutes les heures que tu as consacrées à transmettre ton savoir et ta rigueur scientifique. Enfin, je suis extrêmement reconnaissant pour les qualités humaines d'écoute et de compréhension dont tu as fait preuve tout au long de ce travail, en particulier en troisième année.

Un immense merci à monsieur Remo Giust pour tous ces échanges enrichissants qui ont contribué à la réussite de cette thèse. Merci d'avoir toujours laissé la porte ouverte pour mes multiples interrogations, qui se sont bien souvent soldées par encore plus de questions ! Ta méthodologie scientifique a toujours été pour moi une grande source d'inspiration dès les premières années universitaires, mais j'ai encore mieux réalisé au cours de cette thèse l'abondance de connaissances que tu détiens. Merci également pour les nombreuses contributions que tu as faites dans ce travail de thèse.

Je remercie par ailleurs John Michael Dudley pour sa supervision plus globale de mes travaux et son soutien. Je souhaiterais également adresser ma gratitude aux autres professeurs de l'université de Bourgogne Franche-Comté qui m'ont permis de réaliser cette évolution de la première année de licence à la dernière année de doctorat. Je tiens tout particulièrement à remercier Luc Froehly pour sa gentillesse et d'avoir fait le lien entre mes besoins et ceux de mes encadrants. Sans lui, ce travail de thèse n'aurait peut-être jamais eu lieu.

Je souhaiterais désormais remercier Arnaud Couairon et Stéphane Guizard de m'avoir fait l'honneur d'être rapporteurs de ce manuscrit de thèse. Merci également au professeur Guy Bonnaud d'avoir accepté d'être examinateur et au professeur Maxime Jacquot d'avoir présidé mon jury de thèse.

Je n'oublie pas également tous les amis et collègues du labo qui ont rendu ces années plus agréables : Rémi, Louis, Thomas, Nicolas, Moïse (soit dit en passant, je te laisse la victoire), Coraline, Solveig, Amar, Clément, Ismail, Kirthanaa, Bogdan, Mostafa, Kazem, Vetti, Pierre-Jean, Abdullah,... Un immense merci à Sheler pour tous ces bons moments passés à échanger autour d'un bon thé, ainsi qu'à tous ces voyages inoubliables ! Un gros *big up* à tous mes amis qui ont rendu ces années universitaires exceptionnelles, et qui sont maintenant aussi bien gravées dans ma mémoire que sur mon disque dur ;- ) : Mathieu, Ludovic, le colloq Cédric, Émilien, Gaëtan, Étienne, Anaïs B., Anaïs G., ... ! Merci aussi à tous les gens qui méritent d'être sur cette page mais que j'ai honteusement oublié.

Je tiens à remercier ma famille pour les encouragements, le soutien et la patience dont elle a fait preuve durant toutes ces années d'études. Au passage, une mention spéciale pour ma nièce Éloïse et mon neveu Florian qui ont vu le jour pendant cette thèse de doctorat.

Merci finalement à Rémi Meyer de m'avoir fourni des mesures expérimentales pour ce manuscrit, ainsi qu'à Pierre-Jean, Mathieu, François et Remo d'avoir contribué à la relecture de ce denier.



# SOMMAIRE

<b>Liste des variables</b>	<b>1</b>
<b>Introduction</b>	<b>3</b>
<b>1 Problématique et État de l’art</b>	<b>9</b>
1.1 Micro-usinage par faisceaux de Bessel femtosecondes . . . . .	9
1.2 Phénomènes physiques et échelles de temps . . . . .	11
1.3 Modélisation théorique et numérique . . . . .	14
1.3.1 Commentaires sur les effets induits par la polarisation non-linéaire du diélectrique . . . . .	15
1.3.2 État de l’art des modèles . . . . .	15
1.3.2.1 Modèle de propagation basé sur la résolution directe des équations de Maxwell . . . . .	16
1.3.2.2 Modèle de propagation basé sur une équation dérivée . . .	17
1.3.2.3 Autres méthodes . . . . .	18
1.4 Modélisation de l’ablation par faisceaux de Bessel . . . . .	19
1.4.1 Précédentes études . . . . .	19
1.4.2 Problématique de la thèse . . . . .	21
1.5 Synthèse du chapitre 1 . . . . .	23
<b>2 Modélisation de la dynamique d’un plasma</b>	<b>25</b>
2.1 Définition d’un plasma . . . . .	25
2.2 Effets relativistes et quantiques . . . . .	26
2.2.1 Effets relativistes . . . . .	26
2.2.2 Effets quantiques . . . . .	27
2.3 Vue d’ensemble de la théorie cinétique classique . . . . .	28
2.3.1 Les différents niveaux de description de la théorie cinétique classique	29
2.3.2 Choix d’un niveau de description . . . . .	30
2.4 Dérivation des modèles de la théorie cinétique classique . . . . .	32
2.4.1 Description exacte du plasma . . . . .	32
2.4.2 Description statistique du plasma . . . . .	35

2.4.3	Description fluide du plasma . . . . .	38
2.4.3.1	Conservation du nombre de particules . . . . .	38
2.4.3.2	Conservation de la quantité de mouvement . . . . .	40
2.4.3.3	Conservation de l'énergie . . . . .	42
2.4.3.4	Relation de fermeture du modèle fluide . . . . .	42
2.4.4	Discussion sur les modèles fluides usuels . . . . .	45
2.5	Synthèse du chapitre 2 . . . . .	45
<b>3</b>	<b>Construction du modèle à deux fluides</b>	<b>47</b>
3.1	Décomposition du terme collisionnel . . . . .	47
3.2	Phénomènes non-ionisants . . . . .	48
3.2.1	Les collisions élastiques électron-trou . . . . .	48
3.2.2	Interactions des électrons avec les phonons . . . . .	49
3.2.3	Interactions des trous avec les phonons . . . . .	51
3.3	Les phénomènes d'ionisation . . . . .	52
3.3.1	Méthode d'inclusion des phénomènes d'ionisation . . . . .	52
3.3.2	Ionisation par impact déclenchée par un électron . . . . .	53
3.3.3	Ionisation par impact déclenchée par un trou . . . . .	56
3.3.4	Photoionisation . . . . .	57
3.4	Les recombinaisons . . . . .	59
3.4.1	Les recombinaisons Auger . . . . .	59
3.4.2	Les excitons auto-piégés . . . . .	60
3.5	Synthèse du chapitre 3 . . . . .	60
<b>4</b>	<b>Résolution numérique du système d'équations</b>	<b>63</b>
4.1	État de l'art sur la résolution numérique du modèle plasma à deux fluides . . . . .	63
4.2	Choix du développement d'un nouvel algorithme . . . . .	65
4.3	Vue d'ensemble du code numérique PSTD/Hydro . . . . .	65
4.4	Résolution des équations fluides . . . . .	66
4.4.1	La forme conservative des équations fluides . . . . .	66
4.4.2	Splitting de Strang . . . . .	66
4.4.3	Intégration numérique du système homogène . . . . .	67
4.4.3.1	Choix d'un schéma composite . . . . .	67
4.4.3.2	Visualisation des effets numériques des schémas . . . . .	70
4.4.3.3	Le schéma de Lax-Friedrichs classique . . . . .	71
4.4.3.4	Le schéma de Lax-Friedrichs à 2 étapes . . . . .	73

4.4.3.5	Le schéma de Lax-Wendroff à 2 étapes . . . . .	75
4.4.4	Intégration du terme source des équations fluides . . . . .	76
4.5	Résolution des équations de Maxwell . . . . .	77
4.5.1	Discussion sur les propriétés de divergence . . . . .	77
4.5.2	La méthode Pseudo-Spectral Time Domain (PSTD) . . . . .	78
4.6	Algorithme complet du code PSTD/Hydro . . . . .	80
4.6.1	Condition de stabilité de l'algorithme complet . . . . .	81
4.7	Version 2 : code PSATD/Hydro . . . . .	82
4.7.1	Méthode PSATD . . . . .	83
4.7.2	Vue d'ensemble du code numérique PSATD/Hydro . . . . .	84
4.8	Conditions aux limites des solveurs . . . . .	84
4.9	Contributions et moyens numériques . . . . .	86
4.10	Synthèse du chapitre 4 . . . . .	86
<b>5</b>	<b>Validation des algorithmes</b>	<b>89</b>
5.1	Solutions des équations fluides . . . . .	89
5.1.1	Modes de propagation dans un plasma tiède . . . . .	89
5.1.2	Absorption résonnante . . . . .	92
5.1.3	Force pondéromotrice . . . . .	93
5.2	Validation de l'implémentation du schéma LWLFn 3D . . . . .	94
5.3	Intégration numérique du terme source . . . . .	96
5.3.1	Instabilité de Rayleigh-Taylor monomode . . . . .	96
5.3.2	Instabilité de Rayleigh-Taylor multimode . . . . .	99
5.4	Validation de l'algorithme PSTD/Hydro . . . . .	101
5.4.1	Système d'équations à résoudre . . . . .	101
5.4.2	Paramètres des 5 prochains tests . . . . .	102
5.4.3	Test 1 : Mode transverse . . . . .	103
5.4.4	Test 2 : Modes longitudinaux . . . . .	104
5.4.5	Test 3 : Absorption résonnante . . . . .	105
5.4.6	Test 4 : Plasmas collisionnels . . . . .	108
5.4.7	Test 5 : Force pondéromotrice . . . . .	110
5.4.8	Conclusion sur la validation du code PSTD/Hydro . . . . .	112
5.5	Validation du code PSATD/Hydro . . . . .	112
5.5.1	Test en polarisation TE . . . . .	112
5.5.2	Test en polarisation TM . . . . .	115

5.5.3	Comparaison des codes PSATD/Hydro et PSTD/Hydro . . . . .	116
5.6	Test avec la génération de charges libres . . . . .	117
5.6.1	Test 6 : Courant de photoionisation . . . . .	117
5.6.2	Test 7 : Plasma d'électrons/trous . . . . .	121
5.7	Synthèse du chapitre 5 . . . . .	123
<b>6</b>	<b>Simulation de l'interaction Bessel/diélectrique</b>	<b>125</b>
6.1	Définition des faisceaux de Bessel . . . . .	125
6.1.1	Description mathématique monochromatique . . . . .	125
6.1.2	Description d'un faisceau de Bessel impulsionnel . . . . .	127
6.2	Injection numérique des faisceaux de Bessel . . . . .	128
6.2.1	Géométrie de l'antenne . . . . .	129
6.2.2	Mise à jour des champs dans l'antenne . . . . .	130
6.3	Résultats numériques d'injection . . . . .	130
6.3.1	Cas monochromatique avec $m = 0$ . . . . .	130
6.3.2	Cas monochromatique avec $m = 1$ . . . . .	132
6.3.3	Cas d'une impulsion gaussienne temporelle . . . . .	133
6.4	Simulation de l'interaction Bessel/diélectrique . . . . .	135
6.4.1	Réflexion totale . . . . .	136
6.4.2	Transport pondéromoteur . . . . .	138
6.4.3	Absorption résonnante . . . . .	140
6.4.3.1	Effets pondéromoteurs . . . . .	140
6.4.3.2	Effets sur l'ionisation . . . . .	141
6.4.4	Gradients du profil de densité . . . . .	142
6.4.5	Température du plasma et limite quantique . . . . .	144
6.4.6	Transport par gradient de pression . . . . .	145
6.4.7	Distribution de fluence . . . . .	147
6.5	Comparaisons avec les résultats expérimentaux . . . . .	148
6.5.1	Ellipticité des dommages . . . . .	148
6.5.2	Distribution de fluence . . . . .	149
6.6	Synthèse du chapitre 6 . . . . .	151
	<b>Conclusion</b>	<b>153</b>

<b>Annexes</b>	<b>179</b>
A Recombinaisons Auger dans le modèle fluide	179
B Excitons auto-piégés dans le modèle fluide	181
C Force pondéromotrice	183
D Approximation de l'enveloppe lentement variable	185
E Test du choc de Brio & Wu	187



# LISTE DES VARIABLES

- $a$  : vitesse du son
- $A_c$  et  $A_v$  : intégrales de recouvrement du taux d'ionisation par impact
- $\mathbf{B}$  : vecteur champ magnétique
- $\mathbf{B}^m$  : vecteur champ magnétique microscopique
- $c$  : vitesse de la lumière dans le vide
- $\mathbf{D}$  : vecteur déplacement électrique
- $Dim$  : nombre de degrés de liberté du fluide
- $\mathbf{E}$  : vecteur champ électrique
- $E_e$  : énergie de l'électron
- $E_{Imp}$  : énergie de l'impulsion laser
- $H_{Inj}$  : champ électrique injecté dans la fenêtre de calcul
- $\mathbf{E}^m$  : vecteur champ électrique microscopique
- $E_T$  : énergie de seuil pour l'ionisation par impact
- $E_0$  : amplitude maximale du champ électrique de l'impulsion laser dans le vide
- $f(r)$  : fonction de pondération radiale de l'injecteur
- $f_s$  : fonction de distribution continue des particules d'espèce  $s$  dans l'espace des phases
- $g$  : constante gravitationnelle
- $G_s$  : distribution de Maxwell-Boltzmann en énergie pour les particules d'espèce  $s$
- $h$  : constante de planck
- $\hbar$  : constante de planck réduite
- $\mathbf{H}$  : vecteur excitation magnétique
- $H_{Inj}$  : excitation magnétique injecté dans la fenêtre de calcul
- $\mathbf{J}$  : vecteur densité de courant
- $\mathbf{J}^m$  : vecteur densité de courant microscopique
- $\mathbf{J}^{ph}$  : courant fictif de photoionisation
- $k_B$  : constante de Boltzmann
- $k_0$  : nombre d'onde dans le vide
- $K$  : composante transverse du vecteur d'onde du faisceau de Bessel
- $m$  : ordre du faisceau de Bessel
- $m_s$  : masse des particules d'espèce  $s$
- $m_s^*$  : masse effective des particules d'espèce  $s$
- $n$  : indice optique ou nombre d'étapes avec un schéma de Lax-Friedrichs dans le cas du schéma composite LWLFn

- $n_c$  : densité critique = densité à laquelle la permittivité totale du milieu s'annule
- $n_{ev}$  : densité d'électrons de valence à un instant  $t$
- $n_{s0}$  : densité initiale de particules d'espèce  $s$
- $n_s$  : densité de particules du fluide d'espèce  $s$
- $n_t$  : densité au point tournant
- $n_0$  : densité initiale d'atomes
- $N_s$  : fonction de distribution discrète des particules d'espèce  $s$  dans l'espace des phases. Si c'est  $N_x$ ,  $N_y$  ou  $N_z$ , c'est le nombre de points dans la fenêtre de calcul dans les directions  $x$ ,  $y$  et  $z$ .
- $p_s$  : pression scalaire du fluide d'espèce  $s$
- $\overline{\mathbf{P}}_s$  : tenseur des pressions du fluide d'espèce  $s$
- $q_s$  : charge électrique des particules d'espèce  $s$
- $\mathbf{Q}_s$  : vecteur flux de chaleur du fluide d'espèce  $s$
- $r$  : coordonnée radiale
- $r_1$  : rayon interne de l'antenne cylindrique
- $\mathbf{Q}$  : vecteur associé aux potentiels de Hertz
- $\mathbf{R}$  : fonction désignant la réponse du milieu à une excitation électrique sous l'effet des charges liées
- $\mathbf{R}$  : vecteur associé aux potentiels de Hertz
- $\mathbf{S}^{\text{Coll}}$  : terme de collision dans les équations fluides
- $\mathbf{S}^{e-h}$  : terme de collision électrons/trous dans les équations fluides
- $\mathbf{S}^{e-P}$  : terme de collision électrons/phonons dans les équations fluides
- $\mathbf{S}^{h-P}$  : terme de collision trous/phonons dans les équations fluides
- $\mathbf{S}^{\text{Imp-e}}$  : terme d'ionisation par impact déclenchée par un électron dans les équations fluides
- $\mathbf{S}^{\text{Imp-h}}$  : terme d'ionisation par impact déclenchée par un trou dans les équations fluides
- $\mathbf{S}^{\text{Ph}}$  : terme de photoionisation dans les équations fluides
- $t_0$  : instant où l'enveloppe temporelle de l'impulsion est à son maximum
- $T_{\text{Imp}}$  : durée d'une impulsion temporelle avec une enveloppe en  $\sin^2$
- $T_{\text{ramp}}$  : durée du régime transitoire dans le cas de l'injection numérique d'une onde monochromatique
- $T_s$  : température du fluide d'espèce  $s$
- $U_{\text{Cinétique}}$  : densité volumique d'énergie cinétique
- $U_{\text{em}}$  : densité volumique d'énergie électromagnétique
- $U_g$  : gap entre la bande de valence et la bande de conduction
- $\mathbf{u}_s$  : vecteur vitesse moyenne du fluide d'espèce  $s$
- $U_{\text{Thermique}}$  : densité volumique d'énergie thermique
- $\mathbf{V}_i$  : vitesse de la  $i^{\text{ème}}$  particule
- $X_i$  : position de la  $i^{\text{ème}}$  particule

- $w_0$  : waist du faisceau gaussien
- $\alpha^{Auger}$  : coefficient de recombinaison Auger
- $\alpha^e$  : taux d'ionisation par impact effectif dans le modèle fluide
- $\alpha^h$  : taux d'ionisation par impact déclenchée par un trou
- $\alpha^{Ph}$  : taux de photoionisation de Keldysh dans les solides
- $\alpha^{Single}$  : taux d'ionisation par impact pour une particule unique
- $\alpha_0^e$  : constante dans le taux d'ionisation par impact
- $\alpha^{STE}$  : taux de génération d'excitons auto-piégés
- $\beta$  : composante longitudinale du vecteur d'onde du faisceau de Bessel
- $\delta r$  : épaisseur de l'antenne cylindrique
- $\Delta t$  : pas temporel de la simulation
- $\Delta x, \Delta y$  et  $\Delta z$  : pas spatiaux de la simulation
- $\Delta d$  : paramètre de perturbation dans le test 2 du chapitre 5
- $\epsilon_0$  : permittivité du vide
- $\epsilon_s$  : densité volumique d'énergie du fluide d'espèce s
- $\epsilon_r$  : permittivité relative du milieu
- $\eta$  : impédance du vide
- $\phi$  : angle azimutal
- $\gamma$  : indice adiabatique
- $\kappa = \frac{2\mu}{m_e^* + m_h^*}$
- $\lambda_0$  : longueur d'onde dans le vide
- $\lambda_p$  : longueur d'onde dans le plasma
- $\lambda_D$  : longueur de Debye
- $\mu$  : masse réduite
- $\mu_0$  : perméabilité du vide
- $\nu_{bie}$  : fréquence du Bremsstrahlung inverse dans le bande de conduction
- $\nu_{bih}$  : fréquence du Bremsstrahlung inverse dans le bande de valence
- $\nu_{eh}$  : fréquence de collision électrons/trous
- $\nu_{ep}$  : fréquence de collision électrons/phonons
- $\nu_{hp}$  : fréquence de collision trous/phonons
- $\nu_r$  : taux de recombinaison
- $\omega_0$  : pulsation de l'onde dans le vide
- $\omega_{pe}$  : pulsation plasma électronique
- $\omega_{pi}$  : pulsation plasma ionique
- $\mathbf{\Pi}$  : vecteur potentiel de Hertz
- $\rho$  : densité volumique de charges libres
- $\rho^m$  : densité volumique de charges libres microscopique
- $\tau_E$  : demi-largeur à 1/e du profil d'amplitude gaussien
- $\theta$  : angle d'incidence si c'est une onde plane ou angle conique si c'est un faisceau de Bessel
- $\theta_m$  : angle conique dans le milieu



# INTRODUCTION

*La science décrit la nature, la poésie la  
peint et l'embellit.*

---

- GEORGES-LOUIS LECLERC DE BUFFON

La construction du premier laser dans les années 60 par T. H. Maiman [1] est suivie de près par l'apparition des lasers impulsionnels [2, 3]. La naissance de nouvelles techniques de mise en forme d'impulsions a ensuite permis l'augmentation des puissances lasers atteignables [4]. L'utilisation de ces impulsions à fortes puissances a révélé un fort potentiel en termes d'applications scientifiques, technologiques et industrielles. C'est par exemple le cas avec les impulsions lasers ultra-courtes (picosecondes et femtosecondes) qui ont montré des avantages uniques en faveur du micro-usinage des matériaux diélectriques [5]. La nature non-linéaire de l'absorption de ces impulsions permet de confiner les modifications de propriété du matériau dans un volume précis. De plus, le mécanisme d'absorption de lumière dépend peu du diélectrique, ce qui offre la possibilité de travailler une large gamme de matériaux [5].

En 1994, une première démonstration de micro-usinage d'un diélectrique par impulsion femtoseconde a été réalisée par D. Du *et al.* [6]. Les auteurs ont reporté des dommages dans la silice fondue en employant des impulsions de 150 fs. Dans un même temps, des dommages de 3  $\mu\text{m}$  de diamètre et 52 nm de profondeur ont été réalisés sur des films métalliques à partir d'impulsions de 200 fs [7]. En 2002, S. Guizard *et al.* soulignent que les lasers femtosecondes sont des outils très prometteurs pour un micro-usinage laser fiable et avec de bonne qualité de surface [8]. Le micro-usinage des matériaux par laser femtoseconde a déjà offert un large panel d'applications, par exemple dans le domaine médicale [9] avec la chirurgie en volume de la cornée [10] et la fabrication d'endoprothèses vasculaires [11], ou encore dans le domaine automobile avec la micro-structuration de composants pour les moteurs diesels [12]. Concernant le domaine de l'optique, les applications sont également nombreuses : fabrication des mémoires optiques [13, 14], commutateurs optiques [15], coupleurs [16, 17], réseaux de Bragg [18, 19], modifications d'indice [20], séparateurs optiques [21], amplificateurs [22], clivage du verre [23] ou encore conception de cristaux photoniques 3D [24].

Malgré toutes ces applications, la physique sous-jacente derrière la modification des propriétés d'un milieu diélectrique par des impulsions laser ultra-courtes n'est pas encore complètement comprise [25].

La compréhension des phénomènes physiques avec des études expérimentales est complexe. En effet, les mesures expérimentales à  $10^{13} - 10^{14}$  W/cm<sup>2</sup> sont difficiles de part leurs natures hautement non-linéaires. De plus, les échelles spatiales sont du même ordre de grandeur que la longueur d'onde, et présentent des forts gradients spatiaux et temporelles. Les simulations numériques sont alors essentielles pour améliorer la compréhension de ces phénomènes physiques.

La détermination de l'énergie laser déposée est le premier point crucial pour effectuer une étude rigoureuse de la structuration d'un matériau par une impulsion laser [26]. De nombreuses approches théoriques/numériques ont été développées pour décrire la propagation d'une impulsion de haute-intensité dans un diélectrique et la distribution du dépôt d'énergie laser [25, 27, 28, 29, 30] en prenant en compte une multitude de phénomènes physiques comme l'effet Kerr, la photoionisation, l'ionisation par impact, les excitons auto-piégés ou encore les collisions entre les porteurs de charge et les interactions avec les phonons. Ces approches ont permis de décrire bon nombre de résultats expérimentaux dans des régimes de filamentation et de dommages optiques induits par des impulsions femtosecondes microjoules. Cependant, elles ne sont pas précisément destinées à des études avec des faisceaux fortement focalisés [31] et/ou des dommages sub-micrométriques [32].

En 2010, notre groupe a exploité la propriété d'invariance des faisceaux de Bessel dans le but d'ouvrir des nano-canaux dans des diélectriques à l'aide d'une seule impulsion femtoseconde [23]. La compréhension de la formation de ces nano-canaux nécessite des modèles de calcul de dépôt d'énergie laser dans les diélectriques. Les modèles de propagation non-linéaire de l'état de l'art, basés sur une description unidirectionnel, n'ont pas permis d'obtenir des résultats en accord qualitatif avec l'expérience [33, 34]. En effet, les simulations numériques ont montré de la génération de plasma dans des régions bien plus larges que les nano-canaux observés expérimentalement dans la référence [23]. Cette étude s'est terminée en soulignant qu'il est nécessaire de changer d'approche pour mieux comprendre les résultats expérimentaux dans le cas des faisceaux de Bessel fortement focalisés. Les modèles de propagation utilisées dans la littérature reposent généralement sur l'hypothèse de neutralité du plasma d'électrons-trous, négligent la dynamique des trous et le transport des porteurs de charge. Nous verrons dans ce manuscrit que ces hypothèses ne sont pas nécessairement vérifiées dans le cas d'un dépôt d'énergie dans les diélectriques par faisceaux de Bessel femtosecondes, et nous étudierons les conséquences de ces phénomènes sur ce dépôt.

Le premier objectif de ce manuscrit est donc de développer un modèle théorique plus réaliste, prenant en compte le transport des électrons et des trous, les ondes plasmas, la photoionisation, l'ionisation par impact, les collisions électron/trou et les interactions avec les phonons. Nous partirons sur une approche basée sur la résolution explicite de trois équations de conservation par espèce de particules (conservations du nombre de particules, de la quantité de mouvement et de l'énergie), en plus des équations de Maxwell. Le second objectif est de résoudre numériquement ce système d'équations et de valider l'implémentation du code numérique. Le troisième objectif, est d'exploiter le code numérique afin de savoir si les phénomènes de non-neutralité et le transport peuvent influencer fortement sur la distribution du dépôt d'énergie dans les diélectriques par faisceaux de Bessel femtosecondes.

Le présent manuscrit est organisé de la façon suivante. Dans le premier chapitre, nous discuterons des différentes descriptions théoriques permettant d'avoir accès à la distribution du dépôt d'énergie dans les diélectriques par impulsions ultra-courtes. Nous terminerons ce premier chapitre en définissant plus précisément la problématique de cette thèse. Au coeur du second chapitre, nous justifierons le choix d'une description fluide classique pour décrire l'interaction Bessel/diélectrique. Ce modèle sera choisi de façon à répondre à

la problématique exposée dans le chapitre 1. Nous listerons ses différentes hypothèses, en faisant la dérivation du modèle fluide à partir d'une description particulaire du plasma. Dans le troisième chapitre, nous inclurons dans le modèle théorique, les réactions liées à la génération (photoionisation et ionisation par impact) et à la relaxation du plasma (collisions). Le quatrième chapitre débutera avec un état de l'art des méthodes numériques utilisées pour résoudre un système d'équations de même nature mathématique que celui composant le modèle théorique développé dans les chapitres 2 et 3. Nous justifierons ensuite le choix du développement d'un nouvel algorithme pour résoudre le système d'équations. La description de l'algorithme, ainsi que les erreurs numériques, seront discutées au sein de ce chapitre. Un code, basé sur l'algorithme décrit dans le chapitre 4, sera écrit et validé par des tests dans le chapitre 5. Les conclusions tirées de ces tests de validation permettront d'améliorer et de simplifier l'algorithme, puis d'écrire un second code. Dans le chapitre 6, nous proposerons une méthode d'injection numérique de faisceaux de Bessel, puis nous utiliserons le code pour simuler les phénomènes d'interaction Bessel/diélectrique. Nous répondrons alors à la problématique de départ portant sur l'influence des phénomènes de non-neutralité et du transport sur la distribution de dépôt d'énergie par faisceaux de Bessel femtosecondes.



# PROBLÉMATIQUE ET ÉTAT DE L'ART

*La connaissance s'acquiert par l'expérience,  
tout le reste n'est que de l'information.*

---

- ALBERT EINSTEIN

Nous avons choisi de développer un modèle théorique et un code numérique pour rendre compte du dépôt d'énergie laser dans les diélectriques lors du micro-usinage par faisceaux de Bessel femtosecondes. L'objectif de ce premier chapitre est de justifier les raisons de ce choix, en donnant notamment le cadre de la thèse, en dressant un état de l'art des modèles existants et en rappelant les précédentes études réalisées.

Dans un premier temps, nous commencerons par situer le contexte dans lequel s'inscrit ce travail de thèse. Nous rappellerons notamment les principaux résultats expérimentaux obtenus par notre groupe. Nous donnerons ensuite un aperçu des phénomènes physiques prépondérants tels qu'ils sont perçus à l'état de l'art, tout en donnant leurs échelles de temps. Nous réaliserons alors un état de l'art des modèles permettant de décrire l'évolution d'une impulsion de haute-intensité dans un milieu diélectrique. Nous présenterons ensuite les précédents calculs de dépôt d'énergie effectués par notre groupe à partir d'un modèle de l'état de l'art. Nous soulignerons le désaccord obtenu entre la distribution du dépôt calculée numériquement et la distribution expérimentale. Nous aborderons le fait que les modèles de l'état de l'art sont initialement destinés à décrire certains effets de propagation sur des longues distances ( $> 10 \mu\text{m}$ ) et non à des calculs de dépôt d'énergie avec des faisceaux fortement focalisés. En effet, nous verrons qu'ils reposent sur série d'hypothèses non valables pour des plasmas sub-micrométriques comme ceux induits faisceaux de Bessel fortement focalisés. Nous justifierons finalement le choix d'un changement d'approche pour modéliser une série d'effets plasmas qui doivent être pris en compte pour calculer plus précisément le dépôt d'énergie laser.

## 1.1 Micro-usinage par faisceaux de Bessel femtosecondes

Un faisceau de Bessel est une onde électromagnétique dont l'amplitude est décrite par une fonction de Bessel de première espèce [35]. Une définition analytique sera donnée dans le chapitre 6. Ce type de faisceau a la particularité d'être non-diffractif et ainsi d'avoir un profil d'intensité invariant dans la direction de propagation. Seules des approximations de ces faisceaux (appelés quasi-faisceaux de Bessel) peuvent être produites expérimentalement en focalisant un faisceau gaussien à l'aide d'une lentille à symétrie cylindrique (axicon) ou d'un modulateur spatial de lumière [36]. Les quasi-faisceaux de Bessel réduisent l'invariance stricte de propagation des faisceaux de Bessel à une quasi-invariance sur plusieurs

dizaines de micromètres à quelques millimètres [35].

La figure 1.1 donne une coupe des distributions d'intensité à symétrie cylindrique numérique et expérimentale d'un faisceau de Bessel focalisant dans l'air en régime linéaire [34]. Nous pouvons remarquer sur cette figure la propriété d'invariance du faisceau sur 300  $\mu\text{m}$  dans la direction de propagation  $z$ . Dans les diélectriques, cette invariance de propagation est maintenue même à des niveaux d'intensité permettant l'ablation de matière [33].

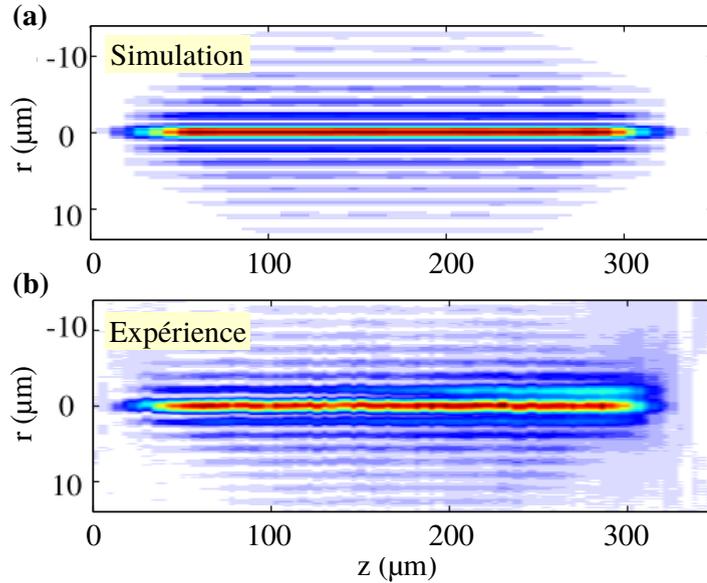


FIGURE 1.1 – Coupes  $(r, z)$  de la distribution d'intensité numérique (a) et expérimentale (b) d'un faisceau de Bessel focalisant dans l'air en régime linéaire.  $r$  est la direction radiale et  $z$  est la direction de propagation du faisceau. Le faisceau de Bessel se propage de la gauche vers la droite dans la direction  $z$ .

En 2010, notre groupe a exploité cette propriété d'invariance des faisceaux de Bessel dans le but d'ouvrir des nano-canaux dans des diélectriques à l'aide d'une seule impulsion femtoseconde. L'ouverture d'un nano-canal nécessite typiquement des impulsions de 1  $\mu\text{J}$  à  $\lambda_0 = 800$  nm, ce qui correspond à des intensités crêtes de l'ordre de  $10^{14}$  W/cm<sup>2</sup> avec des durées d'impulsion de 100 fs. Les nano-canaux obtenus expérimentalement sont quasi-cylindriques avec des diamètres de l'ordre de 200 nm à 800 nm. Comme montré sur la figure 1.2, le facteur d'aspect peut dépasser 100 [23], voire 10 000 dans des résultats plus récents [37].

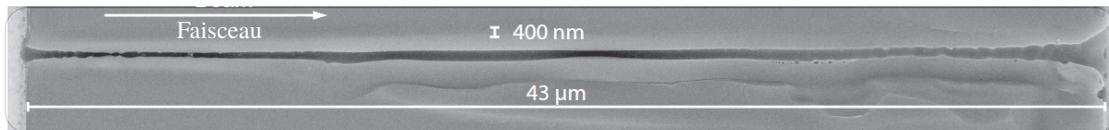


FIGURE 1.2 – Image expérimentale du nano-canal obtenu dans du verre à partir d'un faisceau de Bessel d'angle conique de  $22^\circ$  avec une énergie de 3,1  $\mu\text{J}$ . Le canal mesure 43  $\mu\text{m}$  de longueur et 400 nm de diamètre. Le rapport d'aspect est supérieur à 100.

Ce type de nano-canaux peut avoir des applications concrètes, comme par exemple dans le domaine de la découpe du verre [38]. Notre groupe a par exemple développé un concept pour le clivage de matériaux transparents à ultra-haute vitesse (typiquement 10 cm/s à 1 m/s) en exploitant des faisceaux de Bessel femtosecondes [36]. Ce concept, basé sur un

balayage du faisceau laser, est illustré sur la figure 1.3 où une succession de dommages<sup>1</sup> est générée dans le volume du matériau transparent afin de le fragiliser. L'application d'une légère flexion permet ensuite de le cliver complètement.

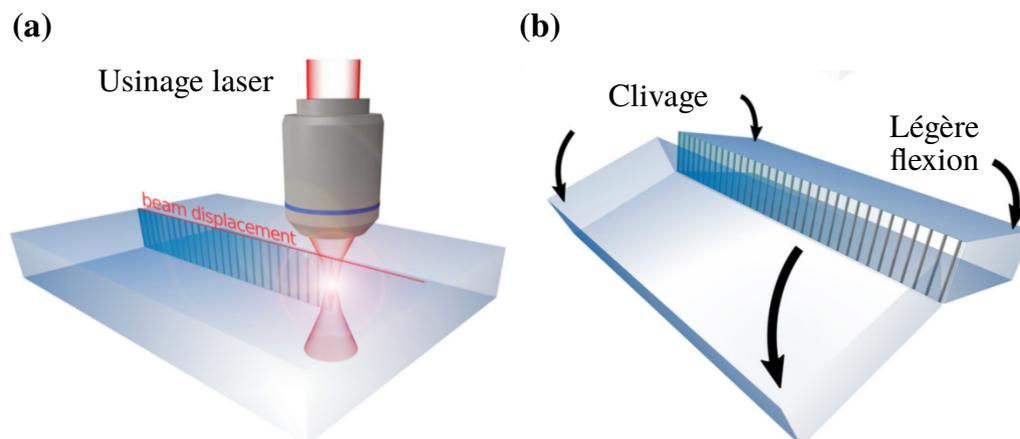


FIGURE 1.3 – Schéma expérimental du clivage à haute vitesse d'un matériau transparent par faisceaux de Bessel femtosecondes. (a) Un balayage du faisceau laser permet de générer une succession de dommages espacés dans le volume du matériau et ainsi de fragiliser ce dernier. (b) L'application d'une légère flexion sur le matériau permet de le cliver. Cette figure est reprise de la référence [38].

De façon plus générale, la capacité des faisceaux de Bessel femtosecondes à déposer de l'énergie sur des échelles nanométriques a fait d'eux un outil idéal pour la structuration en surface et dans le volume des matériaux transparents [39]. En plus des applications précédemment citées, ils sont également utilisés pour générer des nano-réseaux dans le volume des matériaux transparents [40], pour réaliser des soudures [41] ou encore des dommages au niveau de la surface [42].

Concernant l'aspect modélisation, les précédents travaux théoriques et numériques effectués par notre groupe sur la déposition d'énergie par faisceaux de Bessel femtosecondes, n'ont pas permis d'obtenir un accord entre les distributions du dépôt numérique et expérimentale [33]. Nous rentrerons plus dans le détail concernant ces précédents travaux dans la section 1.4 puisqu'il est nécessaire d'introduire certaines notions au préalable. Jusqu'à présent, il n'est donc pas possible de prédire précisément les conséquences du changement d'un paramètre expérimental sur la distribution d'énergie déposée dans le matériau transparent. Or, la détermination de l'énergie laser déposée est le premier point crucial pour effectuer une étude rigoureuse de la structuration d'un matériau par une impulsion laser [26].

## 1.2 Phénomènes physiques et échelles de temps

Avant de faire une liste des modèles de l'état de l'art, commençons par énoncer les différents phénomènes physiques prépondérants ainsi que leurs échelles de temps. Une description plus quantitative et détaillée d'une partie de ces phénomènes sera faite dans

1. espacés typiquement de 5  $\mu\text{m}$  en pratique [36]

le chapitre 3.

Les phénomènes physiques se produisant durant le micro-usinage des diélectriques par impulsions laser femtosecondes sont évoqués dans R. Gattass *et al.* [5]. La figure 1.4 est reprise de cette référence. Elle décrit les échelles de temps des phénomènes physiques prenant place pendant l'interaction d'une impulsion femtoseconde avec un diélectrique. Sur des échelles de temps femtosecondes, l'impulsion laser excite les porteurs de charge. Les phénomènes collisionnels permettent ensuite la thermalisation des porteurs de charge et du diélectrique sur des échelles de temps femtosecondes et picosecondes. Les événements structurels et thermiques apparaissent finalement sur des échelles de temps plus longues, allant de la picoseconde à la nanoseconde, voire la microseconde.

Nous soulignons que ce sont seulement les phénomènes ultra-rapides (excitation des porteurs de charge et collisions) qui doivent être pris en compte dans un modèle destiné à calculer la distribution du dépôt d'énergie laser dans le diélectrique. Les événements structurels et thermiques ont lieu bien après le passage de l'impulsion laser.

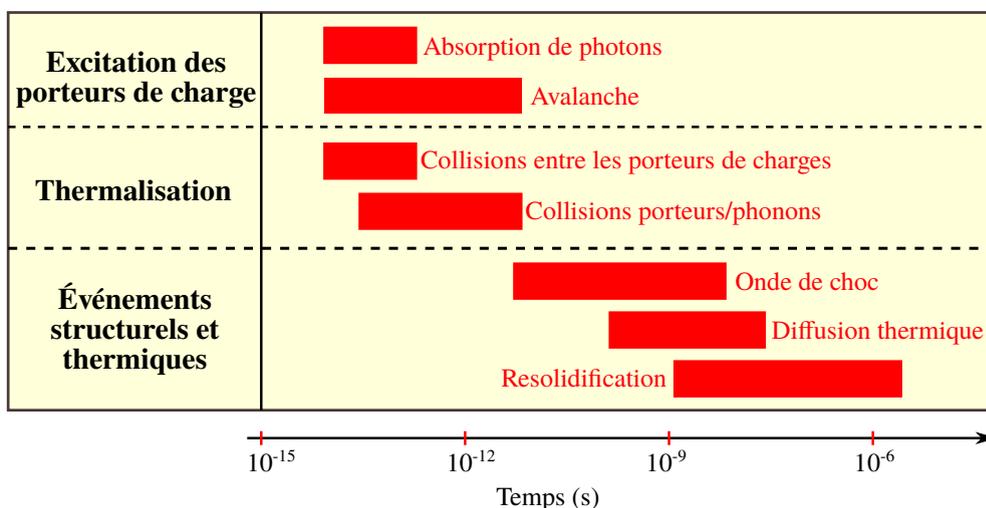


FIGURE 1.4 – Échelle de temps des phénomènes physiques se produisant pendant l'interaction entre une impulsion laser femtoseconde et un matériau diélectrique. Les barres rouges représentent les échelles de temps typiques des différents phénomènes.

Nous détaillons maintenant un peu plus les phénomènes ultra-rapides. Le premier phénomène ultra-rapide énoncé sur la figure 1.4 est l'absorption de photons. À des niveaux d'intensité de  $10^{14}$  W/cm<sup>2</sup>, ce phénomène correspond principalement à l'absorption multiphotonique et à l'effet tunnel<sup>2</sup> [30]. Dans les matériaux diélectriques avec un grand gap, l'absorption de plusieurs photons infra-rouges est nécessaire pour faire passer un électron de la bande de valence à la bande de conduction. Comme le montre la figure 1.5(a) en considérant une simple structure de bande parabolique, un électron de valence (1) absorbe plusieurs photons d'énergie  $\hbar\omega_0$  et est alors promu dans la bande de conduction (1'). Un trou (absence d'électron) apparaît dans la bande de valence. Par exemple, pour la silice fondue avec une énergie de gap  $U_g = 9$  eV [43], il faut typiquement 6 photons d'une impulsion laser centré à  $\lambda_0 = 800$  nm ( $E_{\text{Photon}} \equiv hc/\lambda_0 = 1,55$  eV).

2. L'effet tunnel correspond à la distorsion directe de la barrière de potentiel d'un atome par le champ laser.

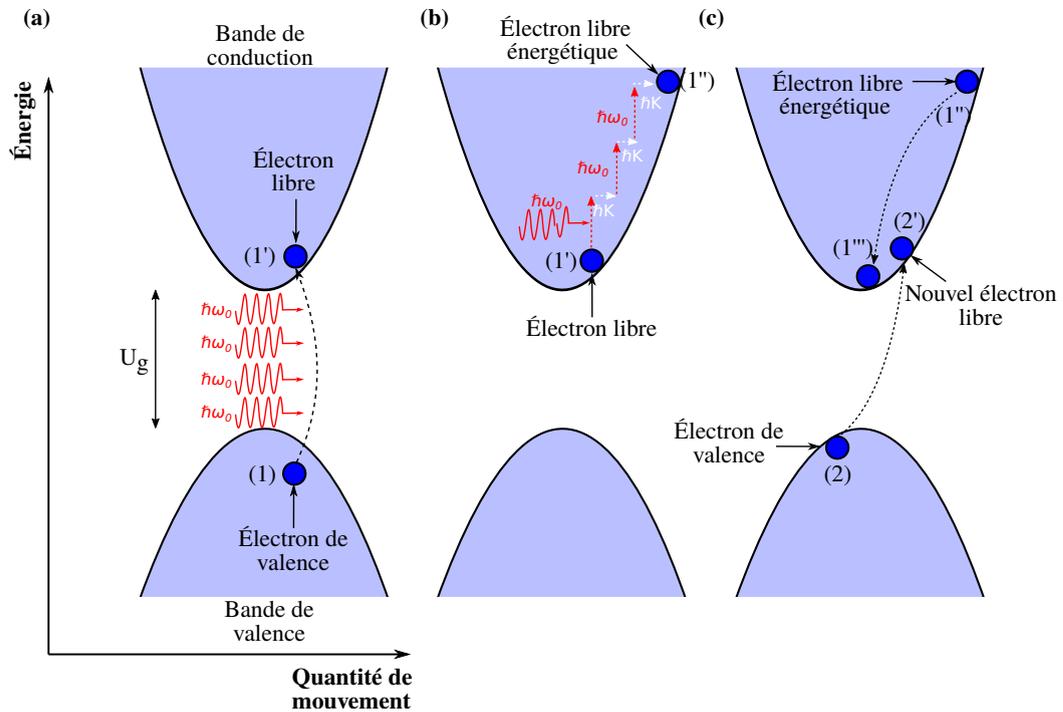


FIGURE 1.5 – Schématisation des phénomènes d’absorption multiphotonique, de Bremsstrahlung inverse et d’ionisation par impact. (a) Un électron de valence (1) absorbe plusieurs photons d’énergie  $\hbar\omega_0$  et est alors promu dans la bande de conduction (1’). (b) L’électron de conduction (1’) absorbe à plusieurs reprises un photon d’énergie  $\hbar\omega_0$  et un phonon de quantité de mouvement  $\hbar K$ , et monte ainsi dans un état énergétique plus élevé (1’’). (c) L’électron énergétique (1’’) entre en collision avec un électron de valence (2) et lui transmet une partie de son énergie et de sa quantité de mouvement. L’électron de valence est alors promu dans la bande de conduction (2’). L’électron de conduction déclencheur de la réaction descend en énergie dans la bande de conduction (1’’’).

Les électrons libérés lors de l’absorption multiphotonique (ou par effet tunnel) vont ensuite pouvoir interagir de façon plus directe avec l’impulsion laser. En effet, comme schématisé sur la figure 1.5(b), à travers les collisions électron-phonon-photon (phénomène de Bremsstrahlung inverse), les porteurs de charge absorbent de l’énergie au champ laser et ont ainsi accès à des niveaux énergétiques bien supérieurs à celui du gap [26]. Un autre processus peut alors entrer en jeu : l’ionisation<sup>3</sup> par impact [44].

Dans ce processus, un électron de conduction énergétique (1’’) collisionne un électron de valence (2) et lui transmet une partie de son énergie et de sa quantité de mouvement (voir figure 1.5(c)). L’électron impacté monte alors dans la bande de conduction (2’) et laisse un trou dans la bande de valence. D’autre part, l’électron énergétique redescend dans le bas de la bande de conduction (1’’’). Les deux électrons de conduction pourront alors absorber de l’énergie laser et entrer en collision avec deux autres électrons de valence. Il se produit une avalanche d’ionisations par impact.

Cet effet d’avalanche a tendance à augmenter fortement la densité d’électrons de conduction et de trous de valence dans la zone irradiée du diélectrique. Cette collection de particules chargées représente alors un plasma d’électrons et de trous au sein du

3. Ionisation au sens "excitation" puisque nous considérons des solides diélectriques.

diélectrique. Ce plasma interagit avec l'impulsion laser, et engendre réflexion et absorption de l'impulsion laser [45, 46]. Par ailleurs, les phénomènes collisionnels élastiques entre les porteurs de charge eux mêmes, et entre les porteurs de charge et la maille du diélectrique (collisions élastiques avec des phonons) prennent place au sein de ce plasma.

L'ensemble des phénomènes ultra-rapides décrit précédemment conduit donc à la création d'un plasma dense et chaud au niveau de la zone irradiée. Le dépôt d'énergie laser qui nous intéresse est maintenant terminé, et le diélectrique est bien loin de son état d'équilibre. Nous terminons cette description rapide par un panorama des phénomènes post-impulsion menant à la formation d'un dommage dans le matériau.

Une onde de pression, ou une onde de choc, originaire de la zone irradiée peut se propager sur des échelles picosecondes. Cela a été observé expérimentalement dans le verre par M. Sakakura *et al.* [47, 48] et dans l'eau par C. Schaffer *et al.* [49]. Quelques instants plus tard (échelle nanoseconde), l'énergie thermique contenue dans la zone irradiée se diffuse dans le reste du diélectrique [5]. Une fois que la diffusion thermique a permis au diélectrique de se refroidir, des phénomènes de resolidification de la matière peuvent se produire [5]. Finalement, l'ensemble de cette réaction en chaîne (absorption multiphotonique, avalanche, collisions élastiques, onde de choc, resolidification) laisse des changements structurels importants au niveau de la zone qui a été irradiée. Des modifications d'indice, ou même encore des vides peuvent être observés expérimentalement [32].

Le scénario précédemment décrit est un cadre général, il peut différer en quelques points d'un matériau à un autre. Par exemple, la dynamique des excitons auto-piégés (discutés dans la section 3.4.2) est négligeable dans le saphir sur des dynamiques sub-picosecondes, mais ne l'est pas dans le silice fondue [50, 51].

### 1.3 Modélisation théorique et numérique

D'après la section précédente, le calcul de la distribution du dépôt d'énergie laser passe par la modélisation des phénomènes ultra-rapides comme l'absorption de photons, l'avalanche d'ionisation par impact ou encore les phénomènes de collision élastique entre porteurs et les interactions avec les phonons. Dans l'état de l'art, il existe un certain nombre de modèles prenant en compte ces effets, mais ils sont principalement destinés à décrire la propagation d'une impulsion de haute-intensité sur des longueurs de plusieurs dizaines de micromètres. Nous montrerons dans la section 1.4.2 que nous cherchons dans notre cas à mettre en évidence des effets d'excitation d'ondes plasmas et de transport du plasma d'électrons/trous sur des échelles sub-micrométriques. Ces phénomènes s'avèrent souvent négligeables dans le cadre d'utilisation des modèles de propagation de l'état de l'art. Nous allons cependant lister les modèles théoriques de l'état de l'art qui ont été sources d'inspiration pour le développement d'un nouveau modèle théorique qui sera détaillé dans les chapitres 2 et 3. Dans le cadre de cette thèse, nous avons choisi de changer d'approche, en développant un modèle plus approprié pour des interactions très confinées dans les diélectriques, où certains effets de plasma doivent être pris en compte (détaillés dans la section 1.4.2) et où les effets de propagation comme les effets Kerr et Raman sont négligeables (justifié dans la prochaine section).

### 1.3.1 Commentaires sur les effets induits par la polarisation non-linéaire du diélectrique

Dans le modèle théorique développé dans les chapitres 2 et 3 de cette thèse, nous avons négligé en première approximation les effets Kerr et Raman.

Concernant l'effet Kerr, il peut être négligé dans une étude avec des faisceaux de Bessel fortement focalisés puisque la zone d'interaction est très faible, ce qui induit peu d'accumulation de phase non-linéaire [52]. D'un point de vue de l'optique géométrique, le flux de rayon est conique, ce qui implique un faible trajet optique croisant la zone de forte intensité (lobe central du faisceau). Ce trajet est typiquement de l'ordre de un à quelques micromètres.

À propos de l'effet Raman, il est non négligeable pour des durées d'impulsion nanosecondes et picosecondes, mais reste faible pour des impulsions femtosecondes où le caractère fortement transitoire réduit l'amplification Stokes [53]. Lors de la propagation d'une impulsion femtoseconde dans un milieu dispersif, la différence entre la vitesse de groupe de la pompe et de l'impulsion Stokes conduit à une distorsion de la phase relative et à la séparation temporelle des deux impulsions, limitant ainsi la longueur d'interaction effective [53, 54]. Ce désaccord de vitesse est une limitation pour l'efficacité de conversion Raman des impulsions femtosecondes dans un milieu dispersif. Nous négligerons donc l'effet Raman dans la suite de cette étude.

### 1.3.2 État de l'art des modèles

Pour calculer le dépôt d'énergie dans le diélectrique, il est nécessaire de décrire le comportement de l'impulsion laser dans le milieu. Cette modélisation s'effectue à l'aide des équations de Maxwell dans la matière en unités du système international (SI) [55, 56] :

$$\nabla \cdot \mathbf{D} = \rho \quad (1.1)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0 \quad (1.2)$$

$$\nabla \times \mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} \quad (1.3)$$

$$\nabla \times \mathbf{H} = \mathbf{J} + \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t} \quad (1.4)$$

où  $\mathbf{D}$  est le vecteur déplacement électrique,  $\mathbf{E}$  le vecteur champ électrique,  $\mathbf{B}$  le vecteur champ magnétique et  $\mathbf{H}$  le vecteur excitation magnétique.  $\rho$  est la densité volumique de charges libres et  $\mathbf{J}$  est le vecteur densité de courant.

Pour calculer la propagation de l'impulsion laser et connaître le dépôt d'énergie laser dans le matériau, il faut définir les grandeurs caractéristiques du milieu portant sur les charges liées par l'intermédiaire de  $(\mathbf{H}, \mathbf{D})$  et sur les charges libres via  $(\rho, \mathbf{J})$ .

Nous considérerons ici que des diélectriques non-magnétiques. Dans ce cas précis, le vecteur excitation magnétique est relié au vecteur champ magnétique par la relation (1.5), où  $\mu_0$  est la perméabilité du vide.

$$\mathbf{H} = \frac{1}{\mu_0} \mathbf{B} \quad (1.5)$$

Nous prenons ensuite en compte la propriété de polarisabilité du diélectrique, portant sur l'effet des charges liées, à travers une relation constitutive de la matière :

$$\mathbf{D} = R(\mathbf{E}) \quad (1.6)$$

où  $R$  est une fonction désignant la réponse du milieu à une excitation électrique sous l'effet des charges liées. Nous détaillerons son expression dans le prochain chapitre. Dans la littérature, elle est souvent spécifiée en introduisant la réponse linéaire du milieu et les effets non-linéaires comme l'effet Kerr ou l'effet Raman [25].

D'autre part, la dynamique des charges libres générées par l'excitation laser peut être décrite via  $\rho$  et  $\mathbf{J}$ , qui peuvent être modélisés à travers un simple modèle de Drude, une équation de taux, une description fluide des plasmas, une description statistique, ou encore une description exacte [57].

### 1.3.2.1 Modèle de propagation basé sur la résolution directe des équations de Maxwell

J. R. Peñano *et al.* [58] ont présenté un modèle basé sur le cadre général de la section précédente, c'est-à-dire sur la résolution directe des équations de Maxwell supplées à des équations d'évolution de  $\rho$  et de  $\mathbf{J}$  pour décrire la réponse du plasma. La densité de charges libres est calculée à partir d'une équation de taux alors que la densité de courant  $\mathbf{J}$  est calculée à partir d'un modèle de Drude-Lorentz. Dans cette même référence, les phénomènes comme l'absorption multiphotonique, les collisions élastiques, les recombinaisons et l'ionisation par impact sont inclus. Ce modèle permet d'étudier la transmission d'énergie laser sur des plasmas sous et sur-critiques.

En 2008, C. Mézel *et al.* [29] ont également présenté un modèle basé sur la résolution directe des équations de Maxwell, couplées à une équation pour la densité de courant (modèle de Drude) ainsi qu'une équation de taux pour la densité d'électrons. L'effet Kerr est introduit dans les équations de Maxwell à travers un terme de polarisation non-linéaire du milieu dans une relation constitutive de la matière. Ce modèle a servi de base pour des simulations numériques 3D pour décrire la propagation et l'absorption d'une impulsion laser sub-picoseconde.

Les modèles présentés dans les deux références ne sont pas en complet accord avec nos besoins puisqu'ils décrivent la dynamique d'un plasma d'électrons/ions, et ne permettent pas de décrire le transport, et par conséquent les ondes plasmas.

En 2011, K. I. Popov *et al.* [59] réalisent également des simulations à partir d'une description basée sur la résolution directe des équations de Maxwell. Leur description inclut l'absorption multiphotonique et les collisions élastiques, mais n'inclut pas l'ionisation par impact. La relation constitutive de la matière leur permet d'introduire un terme de polarisation non-linéaire pour l'effet Kerr, alors qu'une description fluide est employée pour décrire l'évolution de la densité de courant et de la densité de charge. Le système d'équations fluides sélectionné est fermée avec une hypothèse de plasma froid, et décrit l'évolution d'un plasma avec des trous lourds (seul le transport électronique est pris en compte). Lors des simulations numériques, les auteurs négligent finalement le terme de transport en considérant que le plasma est dominé par les collisions et l'ionisation.

En 2013, N. M. Bulgakova *et al.* [25] reprennent et affinent ce système d'équations, en incluant l'ionisation par avalanche, la diffusion Raman, la dispersion d'indice de groupe (à travers un modèle de Sellmeier) et les recombinaisons.

La description des références [59] et [25] modélise la dynamique d'un plasma d'électrons/trous en supposant des trous lourds (le courant de trou est négligé). Dans ce cas particulier, les auteurs ont évalué l'importance du phénomène de transport et ont conclu qu'il était négligeable par rapport aux autres phénomènes. Cette affirmation est valable dans le cadre de leurs travaux avec des intensités utilisées de  $10^{13}$  W/cm<sup>2</sup> et des dimensions du plasma considéré (40  $\mu$ m de longueur et 3  $\mu$ m de rayon). Nous verrons cependant dans la section 1.4.2 qu'elle est limitante pour le cas d'intérêt de cette thèse.

### 1.3.2.2 Modèle de propagation basé sur une équation dérivée

Lorsque des hypothèses supplémentaires peuvent être faites sur la propagation de l'impulsion laser, différentes équations de propagation d'optique non-linéaire peuvent être dérivées et permettent d'éviter la résolution directe des équations de Maxwell qui est bien souvent lourde numériquement. Plusieurs de ces équations de propagation sont dérivées dans la référence [60], et sont basées fondamentalement sur l'approximation unidirectionnelle. Des hypothèses supplémentaires peuvent alors être effectuées pour simplifier les équations : approximation de l'enveloppe lentement variable, approximation paraxiale ou encore approximation scalaire. Parmi ces équations de propagation, nous retrouvons notamment l'équation de Schrödinger non-linéaire couplée avec les équations de la matière. Cette approche est initialement destinée à la modélisation de la filamentation des impulsions brèves dans l'air [61] et elle a ensuite été adaptée pour l'étude de la filamentation sur plusieurs dizaines de micromètres dans les liquides et les solides [18].

En 2002, L. Sudrie *et al.* [27] présentent une description basée sur l'équation de propagation de l'enveloppe scalaire prenant en compte l'effet Kerr, la dispersion de la vitesse de groupe, la diffraction et l'absorption du plasma. Cette équation de propagation est couplée à une équation de taux décrivant la photoionisation, l'ionisation par avalanche et les recombinaisons. En exploitant cette description, les auteurs de la référence [27] soulignaient avoir fourni une première compréhension détaillée des mécanismes responsables des dommages dans le volume de la silice fondue induits par des impulsions laser femtosecondes. En caractérisant ces dommages, les auteurs ont pu corrélérer les résultats expérimentaux et les résultats numériques.

Les descriptions basées sur des équations de propagation similaires à celles de la référence [27] ont permis de comprendre de nombreux autres phénomènes, comme par exemple la propagation dans l'air et dans les liquides d'une impulsion laser infra-rouge de haute-puissance [62, 63], les caractéristiques des dommages induits par une impulsion laser focalisée au coeur d'un échantillon de silice fondue [32, 64, 65], la modification des propriétés du plasma induite par le chirp (phase d'ordre deux) [66], et ont par exemple donné accès à la carte d'énergie laser déposée qui peut être utilisée pour une étude de la déformation structurelle d'un matériau à haute température à partir d'un modèle élasto-plastique thermique [67]. Les dimensions des dommages étudiés dans les références précédemment citées sont supérieures à 20  $\mu$ m de longueur et de l'ordre de 5  $\mu$ m de rayon [18, 62, 64, 65].

Ces modèles, destinés à des problèmes de propagation sur des distances de plusieurs dizaines de micromètres, ont permis d'expliquer bon nombre de résultats expérimentaux dans des régimes de filamentation et de dommages optiques induits par des impulsions femtosecondes d'énergie de l'ordre du microjoule. Il y a cependant quelques limitations à l'emploi de ce type d'approche basée sur une équation de propagation dérivée des équations de Maxwell. I. M. Burakov *et al.* [64] ont trouvé que les seuils de modification

de volume des matériaux ne pouvaient pas être prédits correctement avec ce type de description [31]. Ce type d'approche donne souvent un bon accord avec l'expérience sur les zones de dommage larges ( $>1\mu\text{m}$ ), mais les auteurs observent parfois un désaccord concernant les dimensions sub-micrométriques. C'est par exemple le cas dans la référence [32] où les auteurs ne trouvent pas un bon accord avec l'expérience sur les dimensions transverses de la queue du dommage. Ils soulignent notamment que l'équation d'enveloppe non-linéaire résolue par leur code n'est pas compatible avec la mesure de queues de dommage inférieures à 200 nm [32].

Cette dernière remarque confirme que nous sommes à la limite d'applicabilité de ce type de description pour décrire la déposition d'énergie par faisceaux de Bessel femtosecondes, puisque nous pouvons voir sur la figure 1.2 que le diamètre du dommage est de l'ordre de 400 nm. Nous verrons d'ailleurs dans la section 1.4 que la résolution des équations de propagation dérivée des équations de Maxwell n'a pas permis de retrouver les résultats expérimentaux concernant les dimensions transverses des canaux induits par faisceaux de Bessel fortement focalisés.

Pour terminer cette section, des équations de propagation des faisceaux *fortement focalisés* ont été exploitées ces dernières années [68, 69]. Dans de tels cas, la nature non-paraxiale du problème implique la résolution de l'équation d'onde vectorielle ou des équations de Maxwell directement. Pour éviter ces résolutions qui sont lourdes numériquement, V. Fedorov *et al.* [68] ont présenté une solution où le problème d'optique non-paraxiale est décomposé en un problème de propagation équivalent dans un milieu d'indice fort où la propagation devient paraxiale. Nous n'exploiterons cependant pas ce type d'équation pour la modélisation du dépôt d'énergie par faisceaux de Bessel femtosecondes, puisque que nous verrons dans la section 1.4.2 que nous avons besoin d'une description modélisant les ondes plasmas, la dynamique des trous et les phénomènes de transport qui ne sont pas pris en compte dans ce type de description.

### 1.3.2.3 Autres méthodes

Par ailleurs, d'autres approches ont été explorées pour décrire la propagation d'une impulsion de haute-intensité dans un milieu diélectrique. Une liste non-exhaustive de ces dernières est réalisée dans cette section.

En 1996, les auteurs de la référence [46] ont réalisé des travaux sur les seuils de dommages induits par des impulsions laser dans les diélectriques. Leur description théorique décrit l'ionisation multiphotonique, les collisions élastiques et l'ionisation par avalanche. Leur description de l'ionisation par avalanche est basée sur le développement d'une solution de l'équation de Fokker-Planck (description cinétique des plasmas). Par ailleurs, les auteurs utilisent un modèle de Drude pour calculer la densité de courant. L'impulsion laser est définie à travers une loi exponentielle basée sur la profondeur de peau du matériau. Nous n'utiliserons pas cette description puisqu'elle suppose des trous lourds et impose la forme spatiale du champ laser.

En 2011, B. Chimier *et al.* [30] présentent une étude expérimentale et numérique, sur les dommages et les seuils d'ablation à la surface des matériaux diélectrique, avec des impulsions ultra-courtes. Les simulations numériques sont basées sur la résolution

d'un système d'équations modélisant la photoionisation, les phénomènes de collision élastique, les recombinaisons et l'ionisation par impact. La partie ionisée du diélectrique est décrite avec des équations d'évolution des températures ioniques et électroniques. L'impulsion laser est à nouveau définie à travers une loi exponentielle basée sur la profondeur de peau du matériau. Nous n'utiliserons pas cette description puisqu'elle suppose la neutralité, néglige le transport et impose la distribution spatiale du champ laser.

En parallèle des raffinements des modèles théoriques, des travaux sont réalisés sur les taux de réaction. Par exemple, V. E. Gruzdev [70] fait remarquer que le taux de photoionisation ne dépend pas seulement du gap d'énergie entre les bandes mais également de la structure de bande du matériau dans la formule de Keldysh [71]. V. E. Gruzdev [70] a notamment dérivé des taux de photoionisation pour des bandes non-paraboliques, alors que L. V. Keldysh a dérivé sa formule de photoionisation en s'appuyant sur une structure de bande de type parabolique.

Un autre exemple, B. Rethfeld *et al.* [72, 73] montrent que les processus d'ionisation par avalanche peuvent être reproduits plus précisément en utilisant un ensemble d'équations de taux, décrivant les changements de densité d'électrons libres à différents niveaux d'énergie dans la bande de conduction.

Ces développements parallèles donnent des pistes pour raffiner les taux de réaction présents dans les équations. Ils ne seront pas exploités dans ce manuscrit, mais pourront l'être dans des développements futurs.

Pour conclure, il existe de nombreuses approches pour modéliser la propagation d'une impulsion laser de haute-intensité dans les diélectriques. Ces approches sont basées sur des hypothèses plus ou moins fortes, et sont souvent destinées à modéliser la propagation d'une impulsion laser de haute-intensité sur des dizaines de micromètres et non à calculer un dépôt d'énergie dans le cas d'un faisceau fortement focalisé. Nous allons montrer dans la prochaine section, des résultats numériques obtenus avec une de ces approches qui ne s'accordent pas avec les résultats expérimentaux dans le cas des faisceaux de Bessel fortement focalisés (énergie d'impulsion de  $\approx 1 \mu\text{J}$ ,  $\lambda_0 = 800 \text{ nm}$ , intensité crête  $\approx 10^{14} \text{ W/cm}^2$ , durée d'impulsion  $\approx 100 \text{ fs}$ , angle conique  $\theta = 16^\circ$ ).

## 1.4 Modélisation de l'ablation par faisceaux de Bessel

### 1.4.1 Précédentes études

Pour mieux comprendre les résultats expérimentaux de la section 1.1 portant sur l'ablation de diélectriques par faisceaux de Bessel femtosecondes, notre groupe a déjà exploité une description issue de l'état de l'art [74]. Cette description est basée sur l'équation non-linéaire de Schrödinger [63] et prend en compte la dispersion, la diffraction, l'effet Kerr, l'absorption multiphotonique et l'absorption du plasma. Dans la référence [33] publiée par notre groupe, des cartographies ( $r, z$ ) de la fluence (du dépôt d'énergie) sont tracées. Une partie de ces cartographies sont reprises sur la figure 1.6.

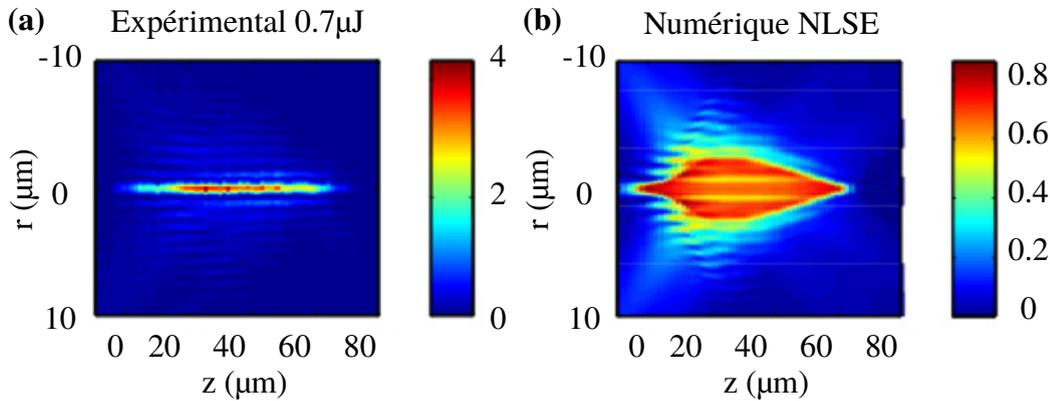


FIGURE 1.6 – Comparaison entre les cartes de fluence expérimentale (a) et numérique (b) obtenue à partir de la résolution de l'équation Schrödinger non-linéaire. L'unité de la fluence utilisée est  $\text{J}/\text{cm}^2$ .

La figure 1.6(a) montre que la propagation expérimentale du faisceau de Bessel est essentiellement non affectée par la génération de plasma et par l'effet Kerr, puisque la structure radiale du faisceau et la position des lobes demeurent constantes au cours de la propagation [33].

La distribution de fluence numérique calculée à partir de l'équation de Schrödinger non-linéaire couplée à un modèle de Drude est affichée sur la figure 1.6(b). Les résultats numériques ne sont pas compatibles avec les résultats expérimentaux de la figure 1.6(a) [34]. Ils prédisent une distribution de fluence et de la génération de plasma dans des régions bien plus larges que le nano-canal observé expérimentalement. Les simulations avec l'équation de Schrödinger non-linéaire ne permettent donc pas de reproduire l'invariance de propagation observée expérimentalement en utilisant des paramètres standards pour la silice fondue.

Dans la référence [33], notre groupe suggère la présence d'un mécanisme d'absorption non identifié et non pris en compte dans une description basée l'équation de Schrödinger non-linéaire. Une simulation annexe à partir des équations de Maxwell a permis d'observer un effet supplémentaire de résonance sur un plasma nanométrique, correspondant à l'excitation d'une onde plasma (absorption résonance discutée plus tard dans la section 5.1.2) [33]. Cet effet de résonance a tendance à réduire la défocalisation liée à la génération de plasma [33]. Cette simulation annexe a mis en évidence la limite de la description de la référence [63] pour des problèmes avec des plasmas nanométriques.

I. Ouadghiri-Idrissi [34] (membre de notre groupe) a investigué la déposition d'énergie par faisceaux de Bessel femtosecondes avec différents taux d'ionisation. Ces travaux n'ont pas permis d'obtenir un accord simulation/expérience et ont renforcé le fait que la description théorique précédemment utilisée était insuffisante pour décrire les résultats de la figure 1.2. I. Ouadghiri-Idrissi [34] conclut finalement que le développement d'un modèle physique approprié est nécessaire pour expliquer l'ablation avec les faisceaux de Bessel.

Par ailleurs, un autre travail sur la déposition d'énergie par faisceaux de Bessel femtosecondes a été rendu publique après le début de ma de thèse de doctorat. R. Beuton [26] a étudié avec le code ARCTIC le profil du dépôt d'énergie laser dans la direction de propagation du faisceau de Bessel [26]. Ce code résout les équations de

Maxwell couplées aux équations décrivant la réponse non-linéaire du milieu diélectrique. Le diélectrique irradié est soumis à des processus de photoionisation, de collision élastique et de recombinaison. Ces processus sont décrits via l'évolution temporelle de la densité d'électrons de conduction. Cette dynamique électronique est modélisée par les équations d'Euler qui fournissent une réponse fluide du gaz d'électrons soumis à l'action du champ électrique. Les résultats obtenus avec le code ont permis de comprendre comment s'établit le dépôt d'énergie et rendent compte des effets des différents processus d'ionisation sur les évolutions des profils de densité et d'énergie électronique. Cependant l'étude ne porte pas sur le profil transverse (dans la direction radiale) du dépôt d'énergie laser.

Pour terminer, des limitations sur la génération de nano-canaux par faisceaux de Bessel femtosecondes ont pu être observées dans le silicium [75] : les résultats expérimentaux obtenus dans le verre n'ont pas pu être reproduits dans le silicium. Les auteurs de la référence [75] soulignent le besoin de simulations de propagation non-linéaire pour élucider ce problème. Cela confirme une fois de plus le besoin de clarification concernant la déposition d'énergie par faisceaux de Bessel femtosecondes.

## 1.4.2 Problématique de la thèse

Nous rentrons maintenant plus dans le détail concernant la problématique de cette thèse, et listons les phénomènes négligés dans les modèles de l'état de l'art destinés à des calculs de propagation, qui ne sont pas négligeables pour le calcul du dépôt d'énergie par faisceaux de Bessel femtosecondes.

Dans la section précédente, nous avons vu que notre groupe a exploité un système d'équations basé sur une équation de propagation dérivée des équations de Maxwell. Or, d'après d'autres travaux de notre groupe [33], il est nécessaire de résoudre les équations de Maxwell pour tenir compte de phénomènes physiques comme l'absorption résonnante. Dans ce manuscrit de thèse, nous exploiterons une description basée sur la résolution directe des équations de Maxwell pour calculer le dépôt d'énergie dans les diélectriques par faisceaux de Bessel femtosecondes.

Cependant, les systèmes d'équations basés sur la résolution directe des équations de Maxwell listés dans la section 1.3.2.1 impliquent bien souvent des hypothèses fortes comme par exemple :

- La masse effective des trous de valence est grande devant celle des électrons de conduction. Cette hypothèse est justifiée en considérant des cas où la bande de valence présente une dispersion plus faible que la bande de conduction. Ainsi, du fait de leur plus grande inertie, la dynamique des trous dans le champ laser peut être négligée [76].
- Les phénomènes de transport sont souvent négligés aux intensités et durées d'impulsion étudiées [26, 59]. Cette hypothèse est justifiable dans les plasmas avec des trous lourds, dans les plasmas d'électrons-ions (c'est-à-dire où la structure de bande a disparu), où encore dans les plasmas micrométriques.
- L'hypothèse de quasi-neutralité du plasma est souvent effectuée. Cette hypothèse ne permet pas de modéliser les ondes plasmas.

Les 3 hypothèses précédentes ne sont pas applicables pour le calcul du dépôt d'énergie par faisceaux de Bessel femtosecondes de nos expériences pour les raisons suivantes :

- Nous étudions des matériaux transparents comme par exemple le saphir, l'oxyde de magnésium ou encore la silice fondue. Or T.V. Perevalov *et al.* [77] ont montré que la masse effective des trous  $m_h^*$  dans le saphir est du même ordre de grandeur que la masse effective des électrons ( $m_h^* = 0.4m_e$ ). De plus, Y.-N. Xu *et al.* [78] ont montré la même chose dans l'oxyde de magnésium où  $m_h^* = 0.35m_e$ . Il n'est alors pas possible de négliger la dynamique des trous tant que la structure de bande du matériau est en place.
- Au vue de la forme et des dimensions du canal de la figure 1.2, nous pouvons raisonnablement nous attendre à la génération d'un plasma aux dimensions nanométriques. Or, un tel plasma peut présenter des forts gradients de densité ou encore de pression. Nous ne pouvons donc pas négliger les phénomènes de transport dans un plasma d'électrons/trous, en particulier si les trous sont légers. Ce transport peut être induit par les gradients de pression ou encore par la force pondéromotrice exercée par le champ laser (force discutée dans la section 5.1.3). Les phénomènes de transport des plasmas d'électrons/trous sont des phénomènes bien connus de la physique des semi-conducteurs [79], et que nous souhaitons les étudier dans les diélectriques à grand gap.
- Finalement, si les gradients sont forts, le phénomène d'absorption résonnante peut jouer un rôle important [80]. L'absorption résonnante correspond à l'excitation d'une onde plasma par le champ laser. Ce phénomène de résonance induit des gradients de champ important qui peuvent eux-mêmes générer du transport à travers la force pondéromotrice [81]. Les ondes plasmas correspondent à des séparations de charge et ne sont modélisées proprement qu'avec une description non basée sur l'hypothèse de quasi-neutralité.

Pour conclure, notre modèle théorique, doit tenir compte de la photoionisation, l'ionisation par impact et les collisions élastiques, mais il doit également inclure des phénomènes souvent négligés : la dynamique des trous, le transport et l'excitation des ondes plasmas. Une étude avec cette approche différente pourra nous donner des informations supplémentaires concernant le régime transitoire (présence d'un plasma d'électrons/trous au sein du diélectrique) sur le dépôt d'énergie laser.

Les objectifs de ce manuscrit peuvent maintenant être clairement définis :

1. Développer un modèle théorique pour étudier la déposition d'énergie dans les diélectriques par faisceaux de Bessel femtosecondes. Ce modèle doit prendre en compte la photoionisation, l'ionisation par impact, les phénomènes collisionnels, le transport, la dynamique des trous et les ondes plasmas.
2. Résoudre numériquement le système d'équations du modèle théorique.
3. Utiliser le code numérique pour apporter des éléments de réponse sur l'importance de la dynamique des trous, du transport et des ondes plasmas lors du micro-usinage avec des faisceaux de Bessel femtosecondes.

Nous terminons cette section par des questions importantes qui sortent du cadre de ce manuscrit, mais qui peuvent avoir une incidence sur l'interprétation des résultats. Comment estimer la transition entre un plasma d'électrons/trous et un plasma d'électrons/ions ? Jusqu'à quel taux d'inversion de population peut-on parler de structure de bande ? À quel instant peut-on parler de plasma d'électrons/ions ? Nous nous efforcerons de faire une

étude, en gardant en tête que le plasma n'est probablement pas un plasma d'électrons et de trous tout au long de l'interaction. Dans la référence [32], les auteurs identifient des régimes où le plasma est composé d'électrons et de trous, puis d'électrons et d'ions. Ils évoquent notamment le fait que lorsque l'ionisation par impact n'est pas effective, la présence d'un plasma d'électrons/trous est attendue, alors que lorsqu'elle devient effective, l'énergie est suffisante pour passer d'un plasma d'électrons/trous à un plasma d'électrons/ions.

## 1.5 Synthèse du chapitre 1

Au cours de ce premier chapitre, nous avons situé le contexte dans lequel s'inscrit ce travail de thèse, en rappelant les principaux résultats expérimentaux obtenus par notre groupe lors du micro-usinage de diélectriques par faisceaux de Bessel femtosecondes. Nous avons souligné que les descriptions habituellement utilisées dans l'état de l'art sont destinées à des problématiques différentes de la nôtre et contiennent des hypothèses trop fortes pour les cas de faisceaux fortement focalisés et des matériaux possédant des trous légers. L'objectif des prochains chapitres est de changer d'approche en construisant un modèle théorique et un code numérique permettant de calculer le dépôt d'énergie laser par faisceaux de Bessel femtosecondes, en prenant en compte le transport, la dynamique des trous et les ondes plasma.



# MODÉLISATION DE LA DYNAMIQUE D'UN PLASMA

*Une théorie nouvelle ne triomphe jamais. Ce  
sont ses adversaires qui finissent par mourir.*

---

- MAX PLANCK

Le chapitre précédent a souligné la nécessité de développer un modèle spécifique pour le cas des nanoplasmas générés par faisceaux de Bessel femtosecondes. Il doit prendre en compte un certain nombre de phénomènes plasmas tels la dynamique des trous, le transport, les ondes plasmas, la photoionisation, l'ionisation par impact ou encore les collisions élastiques. La modélisation de la dynamique spatio-temporelle d'un plasma peut se faire à travers la théorie cinétique. Pour inclure les phénomènes physiques énoncés précédemment dans le modèle, il est nécessaire de comprendre comment les équations de la théorie cinétique sont dérivées : c'est l'objectif de ce chapitre.

Il est divisé en 5 grandes parties, et commence avec une définition d'un plasma et de sa boucle de rétroaction. Nous justifierons ensuite le choix d'une étude de plasmas non relativistes et non quantiques, puis nous résumerons les principaux niveaux de description de la théorie cinétique des plasmas et leurs domaines de validité. Nous terminerons par une dérivation analytique des équations de la description statistique et de la description fluide à partir d'une description classique exacte. Les différentes hypothèses seront soigneusement détaillées. Une bonne connaissance des hypothèses permettra notamment d'éviter des contresens au moment de l'ajout des phénomènes physiques supplémentaires dans le modèle.

## 2.1 Définition d'un plasma

Un plasma est un état dans lequel la matière est partiellement ou complètement ionisée. La caractéristique qui distingue un plasma d'un solide, d'un liquide ou encore d'un gaz est l'aspect collectif du comportement des particules chargées dû aux interactions électromagnétiques entre elles.

La richesse de comportement des plasmas trouve son origine dans le couplage champ-plasma [81] : par exemple dans le cas d'un plasma électrons/ions, les champs électriques et magnétiques ( $\mathbf{E}, \mathbf{B}$ ) induisent le mouvement des électrons et des ions. À travers ces déplacements, les électrons et les ions s'organisent en charges d'espace  $\rho$  et courants électriques

$\mathbf{J}$ , qui eux-mêmes deviennent les termes sources des équations des champs électromagnétiques. Cet effet de couplage entre les champs et les particules du plasma est résumé sur la figure 2.1.

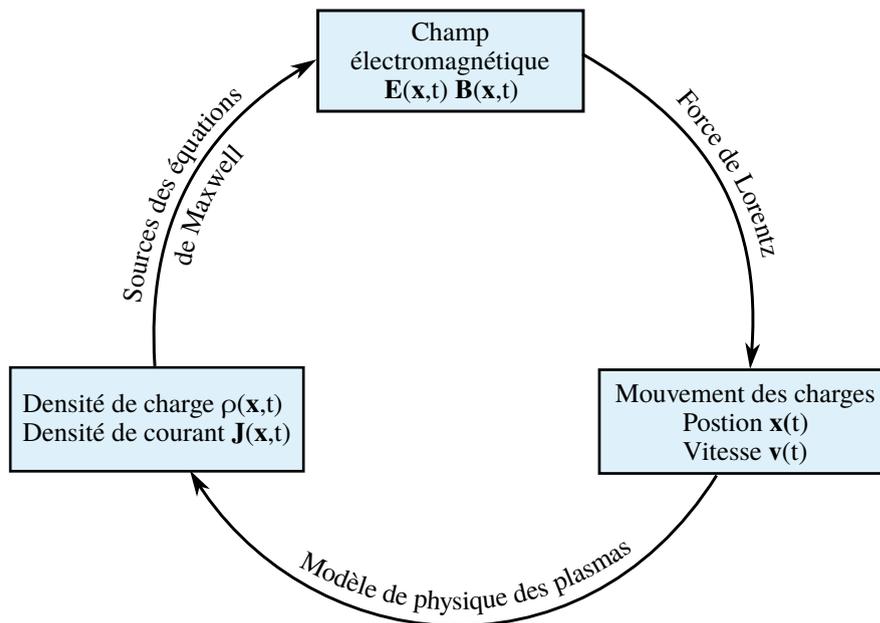


FIGURE 2.1 – Boucle de rétroaction du couplage champ-plasma.

Le plasma étudié dans cette thèse a des caractéristiques bien précises. Il ne s'agit pas d'un plasma d'électrons et d'ions dans le vide, mais d'un plasma d'électrons et de trous au sein d'un milieu diélectrique. Il faut donc tenir compte des effets des charges libres, mais également des effets des charges liées : ce point de sera discuté dans la section 2.4.1.

## 2.2 Effets relativistes et quantiques

La théorie cinétique des plasmas est une théorie relative aux mouvements des particules, qui permet notamment de décrire la dynamique spatio-temporelle d'un plasma. Cette théorie décrit le plasma de façon classique, relativiste ou quantique. L'objectif de cette section est de montrer qu'une description classique du plasma peut être utilisée pour notre problème d'interaction Bessel/diélectrique.

### 2.2.1 Effets relativistes

Commençons par examiner l'importance des effets relativistes en faisant un calcul d'ordre de grandeur. Le facteur relativiste adimensionné pour évaluer l'importance des effets relativistes est donné par [82] :

$$a_0 \equiv \frac{|q_e|E_0}{m_e c \omega_0} \quad (2.1)$$

où  $c$  la vitesse de la lumière dans le vide,  $m_e$  est la masse de l'électron libre,  $q_e$  est sa charge,  $E_0$  est l'amplitude du champ électrique et  $\omega_0$  est la pulsation de l'onde optique.

En physique des plasmas, les effets relativistes sont considérés comme négligeables si le critère suivant est satisfait [82] :

$$a_0 \ll 1 \quad (2.2)$$

Les pics d'intensité utilisés expérimentalement sont de l'ordre de  $I = 1,1 \times 10^{14}$  W/cm<sup>2</sup> [23]. De façon à ne pas alourdir ce calcul d'ordre de grandeur, nous considérons que cette intensité correspond à celle d'une onde plane monochromatique polarisée linéairement et non celle d'un faisceau de Bessel impulsif. Pour une telle onde, la relation liant l'amplitude du champ électrique  $E_0$  et l'intensité est donnée par [83] :

$$E_0 = \sqrt{\frac{2c\mu_0 I}{n}} \simeq 2,3 \times 10^{10} \text{ V/m} \quad (2.3)$$

où  $n = 1,45$  est l'indice optique de la silice fondue. Par ailleurs, dans notre problème, la longueur d'onde centrale des impulsions est  $\lambda_0 = 800$  nm (laser titane-saphir). Cela correspond à une pulsation centrale  $\omega_0 = 2,36 \times 10^{15}$  s<sup>-1</sup>, ce qui donne :

$$\boxed{a_0 \simeq 6 \times 10^{-3} \ll 1} \quad (2.4)$$

Le critère est largement satisfait, les effets relativistes pourront donc être négligés dans notre étude de l'interaction Bessel/diélectrique. Ce critère demeure valide même pour de faibles masses effectives (par exemple  $m_e^* = 0,1m_e$ ). La quantité de mouvement des particules pourra ainsi être écrite sous une forme non relativiste dans la théorie cinétique des plasmas.

### 2.2.2 Effets quantiques

Les effets quantiques sont considérés comme négligeables lorsque la longueur d'onde thermique de De Broglie  $\lambda_{\text{th}}$  est beaucoup plus petite que la distance moyenne entre les particules  $d_e$  [81, 84] :

$$\frac{\lambda_{\text{th}}}{d_e} \ll 1 \quad (2.5)$$

À toute particule de quantité de mouvement  $\mathbf{p}$  est associée une onde de matière de vecteur d'onde  $\mathbf{k}$  vérifiant  $\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}$ , et dont la longueur d'onde de De Broglie  $\lambda_{\text{db}}$  associée a pour expression [85, 86] :

$$\lambda_{\text{db}} = \frac{h}{\|\mathbf{p}\|} \quad (2.6)$$

où  $\|\mathbf{p}\|$  est la norme du vecteur quantité de mouvement, et  $h$  est la constante de Planck. Par ailleurs, la longueur d'onde *thermique* de De Broglie (grandeur issue de la mécanique quantique et de la physique statistique) est définie pour un ensemble de particules. Elle correspond à la longueur d'onde de De Broglie moyenne des particules d'un gaz porté à une certaine température. Cette longueur d'onde thermique de De Broglie  $\lambda_{\text{th}}$  dans un cas non relativiste est définie par la relation suivante [87] :

$$\lambda_{\text{th}} = \sqrt{\frac{2\pi\hbar^2}{m_e k_B T_e}} \quad (2.7)$$

où  $\hbar$  est la constante de Planck réduite,  $k_B$  est la constante de Boltzmann et  $T_e$  est la température électronique.

Les simulations numériques de Mirza *et al.* [88] sur les dynamiques temporelles et le chauffage de la silice fondue par excitation laser, permettent d'avoir accès à un ordre de grandeur de la température électronique et de la densité du plasma. Les simulations numériques ont été effectuées en modélisant l'interaction entre une impulsion femtoseconde d'un laser titane-saphir avec une fluence de  $8 \text{ J/cm}^2$  et de la silice fondue. Ces paramètres sont donc proches des paramètres expérimentaux utilisés dans le cadre de l'interaction Bessel/diélectrique que nous souhaitons étudier [23]. En considérant une fluence de  $8 \text{ J/cm}^2$ , les résultats numériques de Mirza *et al.* [88] montrent des températures électroniques d'environ  $\simeq 100 \text{ eV}$  et une densité de l'ordre de  $\simeq 10^{21} \text{ cm}^{-3}$ . En se basant sur ces données, la longueur d'onde thermique de De Broglie donnée par l'équation (2.7) est :

$$\lambda_{\text{th}} \simeq 0,7 \text{ \AA} \quad (2.8)$$

Calculons maintenant l'ordre de grandeur de la distance moyenne entre deux particules au sein du plasma. En considérant l'estimation de densité  $n_e \simeq 10^{21} \text{ cm}^{-3}$ , la distance moyenne entre deux particules est donnée par :

$$d_e \equiv n_e^{-1/3} = 10 \text{ \AA} \quad (2.9)$$

Évaluons maintenant le critère (2.5) :

$$\boxed{\frac{\lambda_{\text{th}}}{d_e} \simeq 0,07 < 1} \quad (2.10)$$

Pour conclure, la distance moyenne entre deux particules est un ordre de grandeur au-dessus de la longueur d'onde thermique de De Broglie : les effets quantiques sont donc relativement faibles dans le plasma considéré. Cependant, si la température électronique est plutôt de  $10 \text{ eV}$ , le critère deviendrait  $\frac{\lambda_{\text{th}}}{d_e} \simeq 0,22 < 1$  (et même  $\simeq 0,7 < 1$  pour  $1 \text{ eV}$ ) et nous serions à la limite des effets quantiques. Pour des raisons de simplicité, nous considérerons dans ce manuscrit de thèse une description classique de physique des plasmas. Cette approche permettra en premier lieu d'alléger les calculs et de développer un sens physique sur les mécanismes dominants durant l'interaction Bessel/Plasma. Nous verrons plus tard, dans les simulations numériques du chapitre 6, l'ordre de grandeur des températures. Une étude à posteriori sur les effets quantiques durant l'interaction Bessel/Plasma serait bien évidemment enrichissante.

## 2.3 Vue d'ensemble de la théorie cinétique classique

Dans les paragraphes précédents, nous avons montré qu'il est possible dans un premier temps de modéliser notre problème d'interaction Bessel/diélectrique avec une description classique de la théorie cinétique des plasmas. L'objectif de cette section est de donner une vue d'ensemble des différents niveaux de description de la théorie cinétique des plasmas : description exacte, description statistique et description fluide. Cette approche qualitative permettra de souligner les avantages et les inconvénients de chacune des descriptions et ainsi d'éclairer notre choix de modélisation pour notre problème d'interaction Bessel/diélectrique.

### 2.3.1 Les différents niveaux de description de la théorie cinétique classique

Les différents niveaux de description de la théorie cinétique classique des plasmas sont résumés sur la figure 2.2. Cette figure donne, pour un niveau de description du plasma, l'équation régissant sa dynamique, ainsi qu'une caractéristique particulière de l'évolution du plasma.

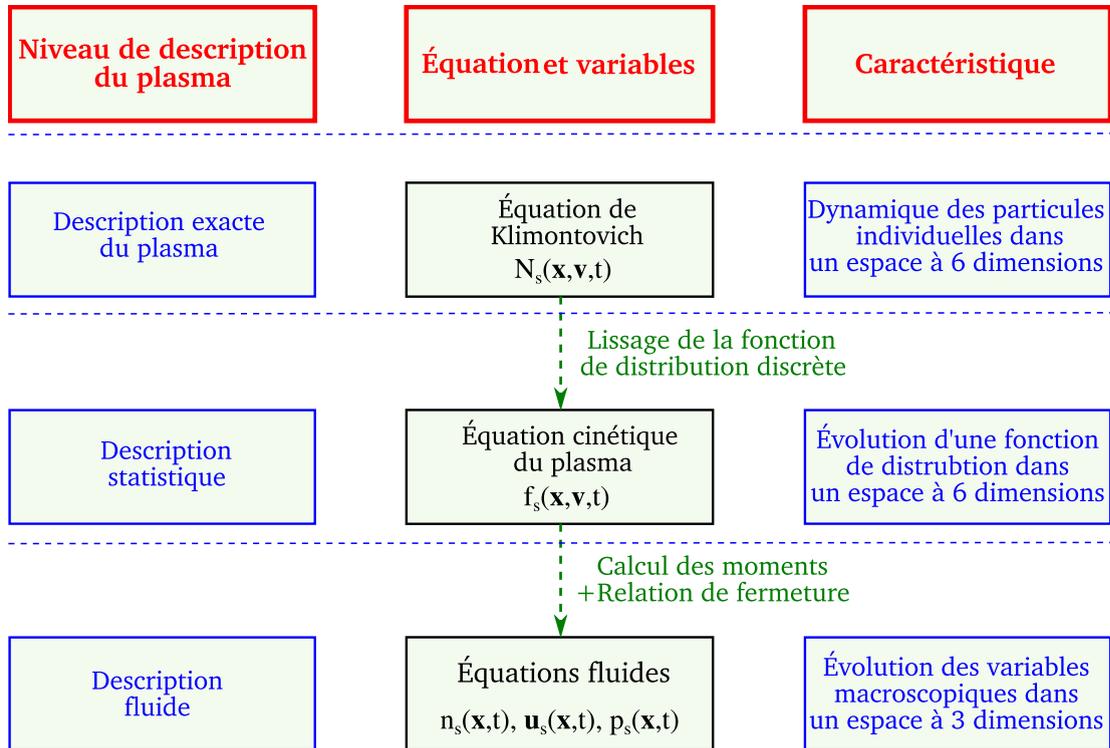


FIGURE 2.2 – Synthèse des différents niveaux de description de la théorie cinétique classique des plasmas.

L'approche la plus fondamentale correspond à une description exacte du plasma. La dynamique des particules individuelles est donnée par une équation de Klimontovich pour chaque espèce  $s$  du plasma<sup>1</sup>. L'équation de Klimontovich décrit l'évolution spatio-temporelle de la fonction de distribution discrète  $N_s$  (*i.e.* une somme de distribution de Dirac). Les champs microscopiques sont calculés à partir des équations de Maxwell. Cette description contient l'information sur la position et la vitesse de chacune des particules du plasma. Elle contient souvent beaucoup plus d'information que nécessaire, et sert souvent de point de départ pour des approximations.

Nous verrons dans la section 2.4.2 qu'un lissage spatial de la fonction de distribution discrète  $N_s$  permet d'obtenir une fonction de distribution continue  $f_s$ . L'évolution spatio-temporelle de cette grandeur statistique est alors donnée par l'équation cinétique du plasma, et les champs moyens sont calculés à partir des équations de Maxwell. Cette description statistique fait évoluer la fonction de distribution  $f_s$  dans un espace à 6 dimensions, et permet de séparer les comportements collectifs du plasma et les

1.  $s = e$  pour les électrons et  $s = h$  pour les trous.

comportements liés aux particules individuelles.

Dans la section 2.4.3, nous verrons qu'en calculant les différents moments en vitesse de l'équation cinétique du plasma, il est possible d'obtenir les équations fluides décrivant l'évolution spatio-temporelle des grandeurs macroscopiques telles que la densité  $n_s$ , la vitesse moyenne  $\mathbf{u}_s$  où encore la pression  $p_s$ . Les champs moyens sont calculés à partir des équations de Maxwell. La description fluide est plus légère, puisque les variables macroscopiques évoluent temporellement dans un espace à 3 dimensions. Cependant, la dérivation des équations fluides à partir de l'équation cinétique du plasma impose de faire une hypothèse sur les moments de la fonction de distribution  $f_s$  : c'est le problème de la relation de fermeture du système fluide.

### 2.3.2 Choix d'un niveau de description

Dans la section précédente, nous avons donné une vue d'ensemble des différents niveaux de description de la théorie cinétique des plasmas. Nous allons maintenant justifier le choix d'un niveau de description pour notre problème d'interaction Bessel/Plasma. Les différentes valeurs des paramètres du plasma étudié sont récapitulées au fur et à mesure dans le tableau 2.1.

TABLE 2.1 – Ordres de grandeur du plasma étudié.

Longueur du plasma	$L_z$	40 $\mu\text{m}$
Rayon du plasma	$r_P$	200 nm
Nombre de particules	$N_P$	$5 \times 10^{10}$
Densité	$n_e$	$10^{21} \text{ cm}^{-3}$
Température électronique	$T_e$	1-100 eV
Longueur thermique de De Broglie	$\lambda_{th}$	0,07-0,7 nm
Longueur de Debye	$\lambda_D$	0,2-2 nm
Paramètre relativiste	$a_0$	$6 \times 10^{-3}$

Dans certains problèmes de physique des plasmas, les descriptions statistiques et fluide ne suffisent pas pour décrire le comportement du plasma [89]. Dans ce cas, il est nécessaire d'étudier le mouvement de chaque particule du plasma. Les ordinateurs modernes peuvent faire cela dans une certaine mesure (typiquement leurs mémoires peuvent stocker  $10^6$  particules dans un espace à 3 dimensions [89]). D'après l'estimation de la section 2.2.2, l'ordre de grandeur des densités en jeu dans notre problème d'interaction Bessel/diélectrique est  $10^{21} \text{ cm}^{-3}$ . Ainsi, un plasma de rayon  $r_P \approx 200 \text{ nm}$  et de longueur  $L_z \approx 40 \mu\text{m}$  (voir figure 1.2) contient environ  $N_P = 5 \times 10^{10}$  particules. Il n'est donc pas envisageable de modéliser notre problème avec une description exacte. La question est donc de savoir s'il est possible dans notre cas d'adopter une description statistique du plasma.

Une description statistique est possible à condition de vérifier deux critères [90] :

$$L \gg \lambda_D \quad (2.11)$$

et :

$$n_e \frac{4}{3} \pi \lambda_D^3 \gg 1 \quad (2.12)$$

où  $L$  est la dimension du système étudié et  $\lambda_D$  est la longueur de Debye<sup>2</sup>. La longueur de Debye est un paramètre important pour l'estimation des échelles auxquelles les comportements collectifs ont lieu [80]. D'après les estimations de température et de densité faites dans la section 2.2.2, cette longueur dans notre problème d'interaction Bessel/diélectrique est de l'ordre de :

$$\lambda_D \simeq 2 \text{ nm} \quad (2.14)$$

Les échelles spatiales étudiées devront être supérieures à 2 nm pour que la description statistique ait un sens. Le diamètre des canaux générés par faisceaux de Bessel sont de l'ordre de 400 nm [23], il n'est donc pas contraignant d'être limité à une résolution de 2 nm. Le premier critère (2.11) est donc satisfait.

Vérifions maintenant le second critère (2.12) :

$$n_e \frac{4}{3} \pi \lambda_D^3 \simeq 50 \gg 1 \quad (2.15)$$

L'équation (2.15) indique qu'il y a en moyenne 50 particules dans une sphère de Debye, la seconde inégalité (2.12) est alors satisfaite. Une description statistique de notre problème d'interaction Bessel/diélectrique est alors possible. Mais, bien entendu, les dynamiques sur des échelles plus petites que la longueur de Debye ne seront pas accessibles [90]. Par ailleurs, nous pouvons remarquer que si la température s'avère plutôt de 1 eV, le critère (2.12) n'est plus satisfait et la description statistique n'est plus adaptée.

Il est possible de pousser plus loin la description statistique en considérant que les phénomènes collisionnels entre particules sont importants. Dans ce cas, il est possible de faire l'hypothèse que le plasma parvient à atteindre un équilibre thermodynamique local. La fonction de distribution  $f_s$  relaxe alors localement vers une distribution de Maxwell-Boltzmann. Le plasma peut ainsi être décrit comme un ensemble de deux fluides (électrons et trous) ayant chacun une densité, une vitesse moyenne et une pression, et interagissant à travers les champs électromagnétiques moyens.

Nous allons faire l'hypothèse que l'effet des collisions est relativement important dans notre problème d'interaction Bessel/Plasma (nous reviendrons sur ce point dans le chapitre 3 afin de justifier cette hypothèse). Elle nous permettra d'utiliser une description fluide du problème et ainsi de bénéficier d'avantages importants. En effet, la description fluide permet de décrire de manière relativement complète la quasi totalité des phénomènes physiques ayant lieu dans le plasma tout en impliquant des calculs beaucoup plus simples que ceux de la description statistique, beaucoup plus lourde à manier et complexe à interpréter [91]. Cependant, certains effets comme l'amortissement Landau<sup>3</sup>, ou encore

---

2. Le concept de la longueur de Debye est le suivant : les charges négatives sont attirées par les charges positives, et réciproquement. Cette tendance naturelle implique que statistiquement, toute charge s'entoure d'un surplus de charges de signe opposé, formant ainsi ce que l'on appelle le nuage de Debye. Il est alors possible de conceptualiser une longueur caractéristique au-delà de laquelle les effets coulombiens d'une particule chargée sont écartés. Dans le cas contraire aux inégalités (2.11) et (2.12), il n'y a pas assez d'espace dans le système pour que les effets collectifs (statistiques) puissent exister [89]. Cette longueur caractéristique est la longueur de Debye et est donnée par [89] :

$$\lambda_D \equiv \sqrt{\frac{\epsilon_0 k_B T_e}{n_e q_e^2}} \quad (2.13)$$

où  $\epsilon_0$  est la permittivité du vide. L'ouvrage de M. Moisan et J. Pelletier [91] contient la démonstration de la relation (2.13).

3. Résonance entre une onde se propageant dans le plasma et les particules d'une certaine classe de vitesse.

les queues de distribution non thermiques ne sont pas pris en compte dans la description fluide [90]. Il est donc intéressant d'utiliser une description fluide dès que possible, mais il faut resté précautionneux sur les hypothèses faites et sur l'interprétation des résultats. Notons qu'il existe une multitude de modèles fluides (modèle multi-fluide, modèle plasma à deux températures, modèle mono-fluide, modèle magnétohydrodynamique) et une multitude de relations de fermeture. Il faudra donc faire un choix judicieux parmi les modèles fluides de façon à décrire convenablement notre problème d'interaction Bessel/diélectrique. Afin d'être conscient de toutes les suppositions des modèles fluides, nous détaillerons toutes les hypothèses nécessaires pour dériver un modèle fluide à partir d'une description exacte du plasma : c'est l'objectif de la section suivante.

## 2.4 Dérivation des modèles de la théorie cinétique classique

Parmi les différents niveaux de description de la théorie cinétique des plasmas, nous avons décidé dans les sections précédentes de nous orienter vers une description fluide classique pour notre problème d'interaction Bessel/matière. L'objectif de cette section est de lister toutes les hypothèses du modèle fluide que nous souhaitons exploiter. Pour cela, nous abordons la dérivation d'un système d'équations fluide classique à partir d'une description exacte du plasma.

Nous ferons quelques étapes d'algèbre de façon à donner l'état d'esprit de la dérivation. Le détail des calculs se retrouve notamment dans les chapitres 5, 6, 7 et 8 de *Fundamentals of plasma physics* de J. A. Bittencourt [84], dans les chapitres 3, 4 et 7 de *Introduction to plasma theory* de D. R. Nicholson [92], ou encore dans *Physique des plasmas* de J. Delcroix et A. Bers [93].

Les descriptions de physique des plasmas que nous allons présentées sont basées sur un ensemble d'hypothèses dont les deux premières sont les suivantes :

### **Hypothèse n°1 :**

Nous faisons ici l'hypothèse de matériaux avec une structure de bande parabolique isotrope. Les masses effectives sont alors indépendantes en position et en direction dans la zone de Brillouin. Cette hypothèse forte permet d'alléger les calculs, mais elle est parfois très réductrice pour les matériaux avec une structure de bande plus complexe.

### **Hypothèse n°2 :**

Les particules du plasma sont décrites par un état classique et sont considérées comme ponctuelles. Cette approche ne permet donc pas de décrire les propriétés quantiques du plasma puisque les particules ne sont pas décrites par un état quantique. Les effets de spin sont par exemple ignorés.

### 2.4.1 Description exacte du plasma

L'objectif premier de la théorie cinétique des plasmas est de trouver une équation décrivant la population de particule, au lieu d'avoir  $N$  équations donnant l'évolution de chacune des particules. En fixant des conditions initiales, il est alors possible de calculer

les trajectoires dans le temps de chacune des particules.

Commençons tout d'abord par poser quelques données du problème :

- Le plasma est constitué de plusieurs espèces indicées  $s$  ( $s = e$  pour les électrons et  $s = h$  pour les trous), représentant chacune  $N_0$  particules.
- À chaque particule d'espèce  $s$  est associée une charge  $q_s$  et une masse effective  $m_s^*$ . Notons au passage que l'utilisation de la masse effective permet de décrire les électrons et les trous comme des particules libres, plutôt que comme des particules de masse fixée évoluant dans un potentiel donné au sein du solide.
- À chaque instant  $t$ , chaque particule  $i$  d'une espèce  $s$  est définie par sa position  $\mathbf{X}_i(t)$  et sa vitesse  $\mathbf{V}_i(t)$ .

L'hypothèse n°2 sur la ponctualité des particules permet de représenter les particules par des distributions de Dirac dans l'espace des phases. La densité de particules  $N_s$  d'une espèce  $s$  dans l'espace des phases peut alors s'écrire sous la forme :

$$N_s(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t) = \sum_{i=1}^{N_0} \delta[\mathbf{x} - \mathbf{X}_i(t)] \delta[\mathbf{v} - \mathbf{V}_i(t)] \quad (2.16)$$

La densité totale du plasma peut s'écrire comme la somme de la densité de chacune des espèces  $s$  :

$$N(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t) = \sum_s N_s(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t) \quad (2.17)$$

La dimension de  $N$  est l'inverse de celle d'un volume de l'espace des phases ( $\Delta\mathbf{x}\Delta\mathbf{v}$ ) et l'intégrale de cette densité sur tout le volume de l'espace des phases permet de remonter au nombre total de particules contenues dans le plasma.

L'objectif est maintenant de montrer que si les positions et les vitesses des particules sont connues à un instant  $t$ , il est alors possible de les connaître à tous les instants ultérieurs. Pour cela, commençons par relier la position  $\mathbf{X}_i(t)$  de la  $i^{\text{ème}}$  particule à sa vitesse  $\mathbf{V}_i(t)$  :

$$\mathbf{V}_i(t) = \dot{\mathbf{X}}_i(t) \quad (2.18)$$

où le point représente une dérivée temporelle.

### **Hypothèse n°3 :**

La force dominante dans le plasma est la force de Lorentz. L'effet des autres forces, comme par exemple la force de gravitation, est négligé.

### **Hypothèse n°4 :**

Le plasma est considéré comme non relativiste. Cette hypothèse, justifiée dans le paragraphe 2.2.1, permet notamment d'écrire la quantité de mouvement des particules sous sa forme classique dans le principe fondamental de la dynamique.

D'après les hypothèses 3 et 4, le principe fondamental de la dynamique pour la  $i^{\text{ème}}$  particule s'écrit :

$$m_s^* \dot{\mathbf{V}}_i(t) = q_s \mathbf{E}^m(\mathbf{X}_i(t), t) + q_s \mathbf{V}_i(t) \times \mathbf{B}^m(\mathbf{X}_i(t), t) \quad (2.19)$$

où l'indice  $m$  indique que les champs électriques et magnétiques sont des champs microscopiques produits par les particules ponctuelles elles-mêmes, en plus des champs externes (comme un champ laser par exemple). Concernant le membre de droite de l'équation (2.19), les parties des champs  $\mathbf{E}^m$  et  $\mathbf{B}^m$  produits par la  $i^{\text{ème}}$  particule sont exclues.

Finalement, les champs microscopiques doivent satisfaire les équations de Maxwell [92] :

$$\nabla \cdot \epsilon_r \mathbf{E}^m = \frac{\rho^m}{\epsilon_0} \quad (2.20)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{B}^m = 0 \quad (2.21)$$

$$\nabla \times \mathbf{E}^m = -\frac{\partial \mathbf{B}^m}{\partial t} \quad (2.22)$$

$$\nabla \times \mathbf{B}^m = \mu_0 \mathbf{J}^m + \frac{1}{c^2} \frac{\partial \epsilon_r \mathbf{E}^m}{\partial t} \quad (2.23)$$

où  $\epsilon_0$  est la permittivité du vide. La densité de charge **microscopique**  $\rho^m$  est directement reliée à la densité de particules dans l'espace des phases par la relation suivante [92] :

$$\rho^m(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t) = \sum_s q_s \int d^3v N_s(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t) \quad (2.24)$$

où l'intégrale est effectuée dans l'espace des phases sur les 3 dimensions des vitesses avec  $d^3v \equiv dv_x dv_y dv_z$ ,

Par ailleurs, la densité de courant microscopique  $\mathbf{J}^m(\mathbf{x}, t)$  s'écrit :

$$\mathbf{J}^m(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t) = \sum_s q_s \int d^3v \mathbf{v} N_s(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t) \quad (2.25)$$

Dans les équations de Maxwell, nous avons pris en compte l'effet des charges liées à travers la permittivité relative  $\epsilon_r$  que nous supposons constante, homogène et isotrope. Comme énoncé et justifié dans la section 1.3.1, nous avons négligé en première approximation les effets non-linéaires comme l'effet Kerr ou l'effet Raman. Nous considérons finalement que la permittivité  $\epsilon_r$  est un scalaire, en négligeant ainsi les propriétés d'anisotropie des matériaux. Même si cette hypothèse n'est pas justifiable dans certains cristaux, nous souhaitons d'abord obtenir des éléments de réponse pour des milieux isotropes avant d'investiguer les potentiels effets de l'anisotropie.

Les 6 équations de (2.20) à (2.25) permettent de déterminer les champs électriques et magnétiques en fonction de la position des particules dans l'espace des phases, alors que les équations (2.18) et (2.19) permettent de déterminer la position des particules dans l'espace des phases en fonction des champs. Le couplage entre les champs et le mouvement des particules est visible dans les équations : c'est la traduction mathématique de la boucle de rétroaction de la figure 2.1. Le système de 8 équations (de (2.18) à (2.25)) indique que si les positions et les vitesses de toutes les particules, ainsi que les champs, sont connus précisément à un instant donné, il est alors possible de les calculer à chaque instant ultérieur.

Nous rendons maintenant le système d'équations plus compact en reliant directement la densité  $N_s$  aux champs  $\mathbf{E}^m$  et  $\mathbf{B}^m$  à travers une même équation. Pour cela, nous commençons par dériver la densité  $N_s$  (équation (2.16)) par rapport au temps :

$$\frac{\partial N_s}{\partial t} = \sum_{i=1}^{N_0} \delta[\mathbf{v} - \mathbf{V}_i(t)] \frac{\partial}{\partial t} \delta[\mathbf{x} - \mathbf{X}_i(t)] + \sum_{i=1}^{N_0} \delta[\mathbf{x} - \mathbf{X}_i(t)] \frac{\partial}{\partial t} \delta[\mathbf{v} - \mathbf{V}_i(t)] \quad (2.26)$$

L'équation (2.26) peut se mettre sous la forme<sup>4</sup> :

$$\frac{\partial N_s}{\partial t} = \sum_{i=1}^{N_0} \dot{\mathbf{X}}_i(t) \delta[\mathbf{v} - \mathbf{V}_i(t)] \nabla_{\mathbf{x}} \delta[\mathbf{x} - \mathbf{X}_i(t)] + \sum_{i=1}^{N_0} \dot{\mathbf{V}}_i(t) \delta[\mathbf{x} - \mathbf{X}_i(t)] \nabla_{\mathbf{v}} \delta[\mathbf{v} - \mathbf{V}_i(t)] \quad (2.27)$$

où  $\nabla_{\mathbf{x}} \equiv (\partial/\partial x, \partial/\partial y, \partial/\partial z)$  et  $\nabla_{\mathbf{v}} \equiv (\partial/\partial v_x, \partial/\partial v_y, \partial/\partial v_z)$ . L'équation (2.27) peut se réécrire de la façon suivante<sup>5</sup> :

$$\frac{\partial N_s}{\partial t} = - \sum_{i=1}^{N_0} \dot{\mathbf{X}}_i(t) \cdot \nabla_{\mathbf{x}} \delta[\mathbf{v} - \mathbf{V}_i(t)] \delta[\mathbf{x} - \mathbf{X}_i(t)] - \sum_{i=1}^{N_0} \dot{\mathbf{V}}_i(t) \cdot \nabla_{\mathbf{v}} \delta[\mathbf{x} - \mathbf{X}_i(t)] \delta[\mathbf{v} - \mathbf{V}_i(t)] \quad (2.28)$$

En utilisant les équations (2.18) et (2.19), il est possible d'exprimer  $\dot{\mathbf{X}}_i$  et  $\dot{\mathbf{V}}_i$  en fonction de  $\mathbf{V}_i$  et des champs  $\mathbf{E}^m$  et  $\mathbf{B}^m$  :

$$\begin{aligned} \frac{\partial N_s}{\partial t} = & - \sum_{i=1}^{N_0} \mathbf{V}_i(t) \cdot \nabla_{\mathbf{x}} \delta[\mathbf{x} - \mathbf{X}_i(t)] \delta[\mathbf{v} - \mathbf{V}_i(t)] \\ & - \sum_{i=1}^{N_0} \left( \frac{q_s}{m_s^*} \mathbf{E}^m(\mathbf{X}_i(t), t) + \frac{q_s}{m_s^*} \mathbf{V}_i(t) \times \mathbf{B}^m(\mathbf{X}_i(t), t) \right) \cdot \nabla_{\mathbf{v}} \delta[\mathbf{x} - \mathbf{X}_i(t)] \delta[\mathbf{v} - \mathbf{V}_i(t)] \end{aligned} \quad (2.29)$$

L'équation (2.29) peut s'écrire<sup>6</sup> :

$$\begin{aligned} \frac{\partial N_s}{\partial t} = & - \mathbf{v} \cdot \nabla_{\mathbf{x}} \underbrace{\sum_{i=1}^{N_0} \delta[\mathbf{x} - \mathbf{X}_i(t)] \delta[\mathbf{v} - \mathbf{V}_i(t)]}_{\equiv N_s} \\ & - \frac{q_s}{m_s^*} (\mathbf{E}^m(\mathbf{x}, t) + \mathbf{v} \times \mathbf{B}^m(\mathbf{x}, t)) \cdot \nabla_{\mathbf{v}} \underbrace{\sum_{i=1}^{N_0} \delta[\mathbf{x} - \mathbf{X}_i(t)] \delta[\mathbf{v} - \mathbf{V}_i(t)]}_{\equiv N_s} \end{aligned} \quad (2.30)$$

Après identification des deux termes de densité dans le membre de droite, l'équation (2.30) s'écrit sous la forme suivante :

$$\boxed{\frac{\partial N_s}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla_{\mathbf{x}} N_s + \frac{q_s}{m_s^*} (\mathbf{E}^m + \mathbf{v} \times \mathbf{B}^m) \cdot \nabla_{\mathbf{v}} N_s = 0} \quad (2.31)$$

Cette équation porte un nom particulier dans la théorie cinétique des plasmas : c'est l'équation de Klimontovich [94]. La combinaison des équations de Maxwell avec celles des équations de Klimontovich pour chacune des espèces  $s$  constitue une description exacte d'un plasma classique. Si l'on connaît  $N_s$  et les champs à un instant donné, il est alors possible de calculer les positions des particules dans l'espace des phases aux instants suivants avec l'équation (2.31).

## 2.4.2 Description statistique du plasma

Comme discuté dans la section 2.3.2, la description de Klimontovich contient le mouvement exact de toutes les particules, et s'avère donc beaucoup trop lourde pour

4. En utilisant la propriété mathématique  $\frac{d}{dt} f[g(t)] = \dot{g} \frac{df}{dg}$ .

5. En utilisant la propriété mathématique  $\frac{\partial}{\partial a} f(a-b) = -\frac{\partial}{\partial b} f(a-b)$ .

6. En utilisant la propriété mathématique  $a\delta(a-b) = b\delta(a-b)$ .

notre problème. L'approche de Klimontovich sert de point de départ pour faire des approximations et dériver une description statistique plus légère. L'objectif de cette section est d'écrire les équations d'évolution de la description statistique et les hypothèses supplémentaires afférentes.

L'approche de Klimontovich de la partie précédente permet de connaître, à un instant donné, s'il y a une particule en un point  $(\mathbf{x}, \mathbf{v})$  de l'espace des phases. Cependant, il est souvent juste nécessaire de savoir quel est le nombre de particules dans un petit volume  $\Delta\mathbf{x}\Delta\mathbf{v}$  de l'espace des phases centré en  $(\mathbf{x}, \mathbf{v})$ . Ce n'est donc pas la fonction discrète  $N_s$  qui est intéressante mais plutôt un lissage de cette fonction. De plus, ce ne sont pas les champs microscopiques  $(\mathbf{E}^m, \mathbf{B}^m)$  vus par chacune des particules qui nous intéressent mais les champs moyens  $(\mathbf{E}, \mathbf{B})$  décrivant l'interaction d'un grand nombre de particules.

### **Hypothèse n°5 :**

Faisons l'hypothèse que la distribution des particules dans l'espace des phases est continue et non discrète (l'information sur la position de chacune des particules individuelles dans l'espace des phases est alors perdue), et définissons alors la fonction de distribution continue suivante :

$$f_s(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t) = \langle N_s(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t) \rangle_{\Delta\mathbf{x}\Delta\mathbf{v}} \quad (2.32)$$

où  $\langle N_s \rangle$  est une moyenne de la distribution microscopique  $N_s$  sur un élément de volume de l'espace des phases. La fonction  $f_s$  est une fonction continue décrivant la densité continue de particules dans l'espace des phases. Elle est appelée fonction de distribution du plasma et est utilisée dans tous les calculs de grandeurs décrivant les propriétés macroscopiques du plasma.

Le volume sur lequel l'intégration est effectuée est suffisamment petit pour que la description soit précise spatialement et à la fois suffisamment grand pour que la description soit précise statistiquement. Le choix du volume doit être fait judicieusement, et doit être au minimum plus grand qu'une sphère de Debye (voir section 2.3.2). Si cette condition est satisfaite, il y a alors suffisamment de particules dans les éléments de volume  $\Delta\mathbf{x}\Delta\mathbf{v}$  pour que les fluctuations soient très faibles par rapport aux valeurs moyennes. Par ailleurs, les variations des micros champs électriques et magnétiques produits par les particules chargées de l'élément de volume peuvent être considérées comme faibles par rapport aux champs moyens supposés agir globalement sur ce même élément de volume.

De façon plus formelle, si le nombre de particules dans le volume est suffisamment grand dans un volume  $\Delta\mathbf{x}\Delta\mathbf{v}$ , chaque quantité peut s'écrire comme la somme d'une composante moyenne et une composante fluctuante :

$$N_s(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t) = f_s(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t) + \delta N_s(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t) \quad (2.33)$$

$$\mathbf{E}^m(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t) = \mathbf{E}(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t) + \delta\mathbf{E}(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t) \quad (2.34)$$

$$\mathbf{B}^m(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t) = \mathbf{B}(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t) + \delta\mathbf{B}(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t) \quad (2.35)$$

où  $\mathbf{B} \equiv \langle \mathbf{B}^m \rangle_{\Delta\mathbf{x}\Delta\mathbf{v}}$ ,  $\mathbf{E} \equiv \langle \mathbf{E}^m \rangle_{\Delta\mathbf{x}\Delta\mathbf{v}}$ ,  $\delta N_s \ll f_s$ ,  $\delta\mathbf{E} \ll \mathbf{E}$  et  $\delta\mathbf{B} \ll \mathbf{B}$ .

La composante fluctuante  $\delta\mathbf{E}$  devient importante que lorsque des particules passent très près l'une de l'autre. L'idée est donc ici, de séparer les interactions coulombiennes *proches* et les interactions *collectives* faites à travers des champs moyens.

Puisque dans chaque élément de volume  $\Delta\mathbf{x}\Delta\mathbf{v}$  le nombre de particules est important, nous pouvons considérer qu'en moyenne, il y a autant de fluctuations positives que de fluctuations négatives de même amplitude :  $\langle\delta N_s\rangle = 0$ ,  $\langle\delta\mathbf{E}\rangle = \mathbf{0}$  et  $\langle\delta\mathbf{B}\rangle = \mathbf{0}$ . En prenant cette considération en compte et insérant les équations (2.33), (2.34) et (2.35) dans l'équation de Klimontovich (2.31), nous obtenons [92] :

$$\boxed{\underbrace{\frac{\partial f_s}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla_{\mathbf{x}} f_s + \left( \frac{q_s}{m_s^*} \mathbf{E} + \frac{q_s}{m_s^*} \mathbf{v} \times \mathbf{B} \right) \cdot \nabla_{\mathbf{v}} f_s}_{\text{Effets collectifs du plasma}} = - \underbrace{\left\langle \left( \frac{q_s}{m_s^*} \delta\mathbf{E} + \frac{q_s}{m_s^*} \mathbf{v} \times \delta\mathbf{B} \right) \cdot \nabla_{\mathbf{v}} \delta N_s \right\rangle}_{\text{Terme collisionnel}}}_{(2.36)}$$

Cette équation est appelée *équation cinétique du plasma* [92]. Le terme de gauche de cette équation est insensible à la nature discrète des particules du plasma alors que le terme de droite est directement sensible à la nature discrète des particules (*i.e.* aux variations de  $N_s$ ). Le terme de gauche contient l'évolution de la distribution continue, sous l'action des champs moyens, il sera donc considéré comme un terme d'*effets collectifs*. Le terme de droite de l'équation, liés à la nature discrète des particules et aux champs microscopiques, est un terme *collisionnel* qui caractérise les collisions coulombiennes de courte portée. C'est ce terme qui assure le mélange d'échelles et qui couple les valeurs moyennes et les fluctuations particulières.

Les champs moyens du membre de gauche de l'équation de (2.36) sont calculés avec les équations de Maxwell (équations de (2.20) à (2.23)) où les champs microscopiques ( $\mathbf{E}^m, \mathbf{B}^m$ ) sont remplacés par les champs moyens ( $\mathbf{E}, \mathbf{B}$ ) et où les densités de charge et de courant (équations de (2.24) à (2.25)) moyennes sont calculées à partir de la fonction de distribution continue  $f_s$  au lieu de la fonction de distribution discrète  $N_s$ .

Le terme de gauche de l'équation (2.36) contient trois termes différents :

- Le premier  $\frac{\partial f_s}{\partial t}$  qui évalue l'évolution temporelle de la fonction de distribution continue.
- Le deuxième terme  $\mathbf{v} \cdot \nabla_{\mathbf{x}} f_s$  représente l'advection de la fonction de distribution. Si le plasma présente un gradient spatial alors sous l'action de leur vitesse, les particules diffusent vers les zones de moindre densité et au bout d'un certain temps le plasma tend vers un état homogène.
- Le troisième terme  $\left( \frac{q_s}{m_s^*} \mathbf{E} + \frac{q_s}{m_s^*} \mathbf{v} \times \mathbf{B} \right) \cdot \nabla_{\mathbf{v}} f_s$  représente les phénomènes d'accélération venant de l'action des forces appliquées. Sous l'action de ces forces, les particules voient leur vitesse varier et donc leur fonction de distribution  $f_s$ .

Le terme de droite correspond aux collisions de courte portée qui tendent sans cesse à restaurer l'équilibre thermodynamique. Plusieurs formalismes permettent d'explicitier le terme collisionnel. Il peut par exemple, s'exprimer sous forme d'un flux (Fokker-Planck [93]), sous forme intégrale (Boltzmann [84] ou Landau [95]) ou avec une approche phénoménologique (terme collisionnel de Bhatnagar-Gross-Krook [96]). De façon à alléger les notations dans les futurs paragraphes, le terme collisionnel est mis sous la forme générique suivante :

$$\left( \frac{\delta f_s}{\delta t} \right)^{\text{Coll}} \equiv - \left\langle \left( \frac{q_s}{m_s^*} \delta\mathbf{E} + \frac{q_s}{m_s^*} \mathbf{v} \times \delta\mathbf{B} \right) \cdot \nabla_{\mathbf{v}} \delta N_s \right\rangle \quad (2.37)$$

Nous terminons cette section avec une remarque. Le terme collisionnel est la conséquence de la décomposition des grandeurs avec une composante moyenne et une compo-

sante fluctuante (équations (2.33), (2.34) et (2.35)). Il est compliqué d'avoir une idée de son expression. Pour introduire ce terme de façon plus naturelle, il est nécessaire de partir d'une approche basée sur l'équation de Liouville et de passer par la hiérarchie BBGKY (Bogoliubov [97], Born et Green [98], Kirkwood [99] et Yvon [100]). Cette approche bien détaillée dans les références [92] et [93] est basée sur l'utilisation de la physique statistique et permet d'introduire de façon plus formelle la notion de fonction de distribution ainsi que les collisions entre les particules (à travers le concept de corrélation). Cette approche n'a pas été choisie dans ce manuscrit car elle nécessite beaucoup plus d'algèbre. L'approche de Klimontovich présente l'avantage d'être plus intuitive, mais l'inconvénient d'introduire les collisions de courte portée de façon moins formelle. En général, le terme de collision est souvent difficile à exprimer. Il peut donc être intéressant de le négliger dès que cela est possible. Ce sera le cas lorsque la fréquence de collision des particules est nettement plus faible que la fréquence plasma. Dans ce cas précis, les effets collectifs dominent dans le plasma. La suppression du terme collisionnel dans l'équation (2.36) conduit directement à l'équation de Vlasov [101].

### 2.4.3 Description fluide du plasma

Comme discuté dans la section 2.3.2, l'équation cinétique des plasmas (2.36) décrit l'évolution des particules dans un espace à 6 dimensions. Il peut être intéressant de réduire le nombre de dimensions pour alléger le système d'équations et ainsi gagner en simplicité et en temps de calcul.

Dans cette section, nous verrons qu'il est possible d'obtenir des équations du type fluide en calculant les différents moments en vitesse  $\mathbf{v}$  de l'équation cinétique des plasmas (2.36). L'idée sous-jacente derrière cette méthode est relativement simple : la fonction de distribution  $f_s$  est une fonction de l'espace, des vitesses et du temps. Or les quantités macroscopiques telles que la densité, la vitesse moyenne, la température ne dépendent plus de la vitesse mais seulement de la position et du temps. Il est donc naturel d'intégrer cette distribution sur l'espace des vitesses pour obtenir les différentes quantités physiques qui nous intéressent.

#### 2.4.3.1 Conservation du nombre de particules

Nous commencerons par détailler le calcul du moment d'ordre 0 en vitesse  $\mathbf{v}$  de l'équation cinétique du plasma (2.36). Calculer le moment d'ordre 0 en  $\mathbf{v}$  est équivalent à intégrer l'équation cinétique des plasmas sur le volume des vitesses dans l'espace des phases.

$$\int d^3v \left( \underbrace{\frac{\partial f_s}{\partial t}}_{\text{Terme 1}} + \underbrace{\mathbf{v} \cdot \nabla_{\mathbf{x}} f_s}_{\text{Terme 2}} + \underbrace{\frac{q_s}{m_s^*} \mathbf{E} \cdot \nabla_{\mathbf{v}} f_s}_{\text{Terme 3}} + \underbrace{\frac{q_s}{m_s^*} [\mathbf{v} \times \mathbf{B}] \cdot \nabla_{\mathbf{v}} f_s}_{\text{Terme 4}} \right) = \underbrace{\int d^3v \left( \frac{\delta f_s}{\delta t} \right)^{\text{Coll}}}_{\equiv S_s} \quad (2.38)$$

Dans la suite, nous séparons les calculs des intégrales de chacun des 4 termes. Le terme collisionnel sera spécifié dans le prochain chapitre, il restera sous une forme générique  $S_s$  dans ce chapitre.

**Terme 1 :**

Commençons d'abord par introduire la grandeur macroscopique suivante :

$$n_s(\mathbf{x}, t) \equiv \int d^3v f_s(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t) \quad (2.39)$$

où  $n_s(\mathbf{x}, t)$  est le nombre de particules de l'espèce  $s$  par unité de volume de l'espace des positions : c'est la densité de particules de l'espèce  $s$  en  $\text{m}^{-3}$ . Le terme 1 peut alors s'écrire sous la forme suivante :

$$\int d^3v \frac{\partial f_s}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial t} \int d^3v f_s \quad (2.40)$$

$$= \frac{\partial}{\partial t} n_s \quad (2.41)$$

**Terme 2 :**

Comme  $f_s$  est une distribution de probabilité, la valeur moyenne d'une fonction de l'espace des phases  $\psi(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t)$  est définie par la relation suivante [90] :

$$\langle \psi(\mathbf{x}, t) \rangle \equiv \frac{1}{n_s} \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(\mathbf{x}, t) f_s(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t) d^3v \quad (2.42)$$

où  $n_s(\mathbf{x}, t)$  est défini par la relation (2.39).

Avant de calculer le terme 2 de l'équation (2.38), définissons une autre grandeur macroscopique :

$$\mathbf{u}_s(\mathbf{x}, t) \equiv \frac{1}{n_s} \int d^3v \mathbf{v} f_s(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t) \quad (2.43)$$

où  $\mathbf{u}_s$  est le vecteur vitesse moyenne des particules fluides d'une espèce  $s$ . Le terme 2 peut alors se réécrire :

$$\int d^3v \mathbf{v} \cdot \nabla_{\mathbf{x}} f_s = \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \int d^3v \mathbf{v} f_s \quad (2.44)$$

puisque la vitesse et la position sont deux variables indépendantes<sup>7</sup>. En utilisant l'équation (2.43), le terme 2 s'exprime de la façon suivante :

$$\int d^3v \mathbf{v} \cdot \nabla_{\mathbf{x}} f_s(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t) = \nabla_{\mathbf{x}} \cdot n_s \mathbf{u}_s(\mathbf{x}, t) \quad (2.45)$$

**Terme 3 :**

Le terme 3 s'annule tout simplement :

$$\int d^3v \frac{q_s}{m_s^*} \mathbf{E} \cdot \nabla_{\mathbf{v}} f_s = \frac{q_s}{m_s^*} \mathbf{E} \int d^3v \cdot \nabla_{\mathbf{v}} f_s = \frac{q_s}{m_s^*} \mathbf{E} [f_s]_{-\infty}^{+\infty} = 0 \quad (2.46)$$

puisque aucune particule n'a une ou des composantes du vecteur vitesse infinies.

**Terme 4 :**

$$\int d^3v \left( \frac{q_s}{m_s^*} \mathbf{v} \times \mathbf{B} \cdot \nabla_{\mathbf{v}} f_s \right) = \frac{q_s}{m_s^*} \int d^3v (\mathbf{v} \times \mathbf{B}) \cdot \nabla_{\mathbf{v}} f_s \quad (2.47)$$

7. La propriété suivante de la divergence a été utilisée :  $\mathbf{B} \cdot \nabla_{\mathbf{x}} a = \nabla_{\mathbf{x}} \cdot (a\mathbf{B}) - a\nabla_{\mathbf{x}} \cdot \mathbf{B}$

Le produit scalaire peut se décomposer en la somme de 3 termes dont le premier est :

$$\frac{q_s}{m_s^*} \iiint dv_x dv_y dv_z (v_y B_z - v_z B_y) \cdot \nabla_{v_x} f_s = \frac{q_s}{m_s^*} \iint dv_y dv_z (v_y B_z - v_z B_y) \int dv_x \nabla_{v_x} f_s \quad (2.48)$$

$$= \frac{q_s}{m_s^*} \iint dv_y dv_z (v_y B_z - v_z B_y) [f_s]_{v_x=-\infty}^{v_x=+\infty} \quad (2.49)$$

$$= 0 \quad (2.50)$$

Le même type de calcul sur les deux autres termes du produit scalaire montre que le terme 4 a une contribution totale nulle.

Il est donc possible de réécrire l'équation (2.38) sous la forme suivante :

$$\boxed{\frac{\partial}{\partial t} n_s + \nabla_{\mathbf{x}} \cdot (n_s \mathbf{u}_s) = S_s} \quad (2.51)$$

Cette équation est l'équation de conservation du nombre de particules d'espèce  $s$  avec un terme source  $S_s$ . Aucune hypothèse supplémentaire n'a été faite pour obtenir l'équation (2.51) à partir de l'équation cinétique des plasmas.

Le terme  $S_s$  représente la densité de particules créées ( $S_s > 0$ ) ou détruites ( $S_s < 0$ ). En l'absence d'interactions menant à la production ou à la perte de particules fluides (*i.e.* en l'absence d'ionisation ou de recombinaison),  $S_s$  est nul et le nombre de particules dans le plasma est conservé. L'objectif du chapitre 3 sera justement de donner une expression à ce terme.

### 2.4.3.2 Conservation de la quantité de mouvement

Nous avons dérivé dans le paragraphe précédent le moment d'ordre 0 de l'équation cinétique des plasmas. Nous ne referons pas ici toute l'algèbre pour la dérivation du moment d'ordre 1 de l'équation cinétique du plasma, puisque l'état d'esprit est le même que pour l'ordre 0. Le moment d'ordre 1 de l'équation de cinétique des plasmas s'écrit<sup>8</sup> :

$$\int d^3v \mathbf{v} m_s^* \left( \frac{\partial f_s}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla_{\mathbf{x}} f_s + \frac{q_s}{m_s^*} \mathbf{E} \cdot \nabla_{\mathbf{v}} f_s + \int d^3v \frac{q_s}{m_s^*} [\mathbf{v} \times \mathbf{B}] \cdot \nabla_{\mathbf{v}} f_s \right) \quad (2.52)$$

$$= \underbrace{\int d^3v \mathbf{v} m_s^* \left( \frac{\delta f_s}{\delta t} \right)^{\text{Coll}}}_{\equiv \mathbf{A}_s} \quad (2.53)$$

Après quelques étapes d'algèbre (voir le chapitre 8 de *Fundamentals of plasma physics* de J.A. Bittencourt [84] et le chapitre 7 de *Introduction to plasma theory* de D. R. Nicholson [92] pour plus de détails), l'équation (2.53) peut s'écrire sous la forme suivante :

$$\boxed{\frac{\partial}{\partial t} m_s^* n_s \mathbf{u}_s + \nabla \cdot (n_s m_s^* \mathbf{u}_s \otimes \mathbf{u}_s + \overline{\mathbf{P}}_s) = n_s q_s (\mathbf{E} + \mathbf{u}_s \times \mathbf{B}) + \mathbf{A}_s} \quad (2.54)$$

8. On a multiplié par la masse effective  $m_s^*$  pour avoir des grandeurs homogènes à une densité volumique de quantité de mouvement. Ainsi, à la fin de la dérivation, nous aurons directement une loi de conservation de la quantité de mouvement.

où  $\otimes$  est le symbole d'un produit tensoriel<sup>9</sup>. L'équation (2.54) traduit la conservation de la quantité de mouvement des particules fluides. Elle a été obtenue en faisant une hypothèse supplémentaire [102] :

**Hypothèse n°6 :**

Le produit  $u_x f_s$  s'annule en  $u_x = \pm\infty$ . Remarque similaire concernant les produits  $u_y f_s$  et  $u_z f_s$ .

Par ailleurs, le calcul du moment d'ordre 1 de l'équation cinétique du plasma a fait apparaître une variable supplémentaire :  $\overline{\mathbf{P}}_s$ . Ce tenseur d'ordre 2 est appelé le tenseur de pression, et est défini par [92] :

$$\overline{\mathbf{P}}_s = \begin{pmatrix} P_{sxx} & P_{sxy} & P_{sxz} \\ P_{syx} & P_{syy} & P_{syz} \\ P_{szx} & P_{szy} & P_{szz} \end{pmatrix} \equiv m_s^* \int d^3v (\mathbf{v} - \mathbf{u}_s) \otimes (\mathbf{v} - \mathbf{u}_s) f_s \quad (2.56)$$

Le tenseur de pression est donc lié au moment centré d'ordre 2 en vitesse, de la fonction de distribution  $f_s$ . D'un point de vue mathématique, le moment d'ordre 2 centré s'identifie avec la matrice de variance. Les coefficients de la matrice de variance mesurent les écarts quadratiques moyens de  $\mathbf{v}$  par rapport à la valeur moyenne  $\mathbf{u}$  de la fonction de distribution : c'est donc une mesure de la largeur de la fonction de distribution.

D'un point de vue physique, l'idée de la pression apparaît. En multipliant le moment centré d'ordre 2 par  $m_s^* n_s$ , il est possible de donner à ce moment les dimensions d'une pression<sup>10</sup> : c'est ce que nous avons fait dans la définition (2.56).

Les termes diagonaux du tenseur de pression représentent la pression décrite en hydrostatique (pression normale à la surface sur laquelle elle s'applique) alors que les termes non diagonaux sont associés à la viscosité. La viscosité correspond à un transfert d'impulsion dans des directions perpendiculaires au mouvement des particules. Les effets de la viscosité sont souvent peu importants dans les dynamique ultra-rapides (typiquement 100 fs) [103]. Dans l'étude des dynamiques ultra-rapides, il est commun de négliger ces effets et donc d'annuler les termes non diagonaux du tenseur de pression.

Par ailleurs, l'approximation de pression scalaire se retrouve souvent dans la littérature des plasmas. Cette approximation implique que les termes diagonaux du tenseur de pression sont égaux. Cela permet d'alléger mathématiquement les équations et facilite la compréhension physique [57], la pression devenant alors un scalaire. Cette hypothèse est en particulier fautive si l'on applique un fort champ magnétique externe au plasma [57]. Sous l'influence d'un fort champ magnétique externe, les propriétés du plasma dans les directions parallèles et perpendiculaires au champ magnétique sont différentes : le plasma devient alors clairement anisotrope.

Nous ne faisons pas l'hypothèse de plasma non-visqueux et de pression scalaire ici. Nous ferons plus tard (section 2.4.3.4) une hypothèse plus forte pour la relation de fermeture qui contient ces deux hypothèses.

9. Le détail des composantes du produit tensoriel  $\mathbf{u}_s \otimes \mathbf{u}_s$  de l'équation (2.54) est :

$$\mathbf{u}_s \otimes \mathbf{u}_s = \begin{pmatrix} u_{sx}^2 & u_{sx}u_{sy} & u_{sx}u_{sz} \\ u_{sy}u_{sx} & u_{sy}^2 & u_{sy}u_{sz} \\ u_{sz}u_{sx} & u_{sz}u_{sy} & u_{sz}^2 \end{pmatrix} \quad (2.55)$$

10. D'un point de vue mathématique, le moment d'ordre 2 de la fonction de distribution est rigoureusement :  $\mathbf{M}_2 \equiv \frac{1}{n_s} \int d^3v (\mathbf{v} - \mathbf{u}_s) \otimes (\mathbf{v} - \mathbf{u}_s) f_s$ . Nous avons donc bien multiplié le moment d'ordre 2 de la fonction de distribution par  $m_s^* n_s$  dans l'équation (2.56).

### 2.4.3.3 Conservation de l'énergie

Le moment d'ordre 2 de l'équation cinétique des plasmas s'écrit <sup>11</sup> :

$$\int d^3v \mathbf{v}^2 \frac{1}{2} m_s^* \left( \frac{\partial f_s}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla_{\mathbf{x}} f_s + \frac{q_s}{m_s^*} \mathbf{E} \cdot \nabla_{\mathbf{v}} f_s + \int d^3v \frac{q_s}{m_s^*} [\mathbf{v} \times \mathbf{B}] \cdot \nabla_{\mathbf{v}} f_s \right) \quad (2.57)$$

$$= \underbrace{\int d^3v \mathbf{v}^2 \frac{1}{2} m_s^* \left( \frac{\delta f_s}{\delta t} \right)^{\text{Coll}}}_{\equiv M_s} \quad (2.58)$$

Après quelques étapes d'algèbre (voir le chapitre 8 de *Fundamentals of plasma physics* de J.A. Bittencourt [84]), l'équation (2.58) peut s'écrire sous la forme suivante :

$$\boxed{\frac{\partial}{\partial t} \left( \frac{p_s}{\gamma - 1} + \frac{1}{2} m_s^* n_s \mathbf{u}_s^2 \right) + \nabla \cdot \left( \left( \frac{p_s}{\gamma - 1} + \frac{1}{2} m_s^* n_s \mathbf{u}_s^2 + p_s \right) \mathbf{u}_s \right) + \nabla \cdot \mathbf{Q}_s = n_s q_s \mathbf{u}_s \cdot \mathbf{E} + M_s} \quad (2.59)$$

où  $\gamma$  est l'indice adiabatique. Ce nombre scalaire est directement dépendant du nombre de degrés de liberté des particules fluides [84] :

$$\gamma = \frac{2 + Dim}{Dim} \quad (2.60)$$

où  $Dim$  est le nombre de directions translationnelles des particules. Pour un système dans un espace des positions à 3 dimensions,  $\gamma = 5/3$ .

Le vecteur  $\mathbf{Q}_s$  est le vecteur flux de chaleur et est lié au moment centré d'ordre 3 de la fonction de distribution [84] :

$$\mathbf{Q}_s \equiv \frac{1}{2} m_s^* \int d^3v (\mathbf{v} - \mathbf{u}_s)^2 (\mathbf{v} - \mathbf{u}_s) f_s \quad (2.61)$$

L'unité de ce vecteur est  $W/m^2$ . Ce vecteur caractérise notamment la diffusion thermique <sup>12</sup> du gaz d'espèce  $s$ .

### 2.4.3.4 Relation de fermeture du modèle fluide

Nous venons de voir que le calcul d'un moment d'ordre  $n$  fait apparaître un moment d'ordre  $n + 1$ . Il y a donc toujours une inconnue de plus que d'équations. En fait, l'équation cinétique des plasmas (2.36) évoluant dans un espace à 6 dimensions peut s'écrire sous la forme d'un système avec une infinité d'équations évoluant dans un espace à 3 dimensions, décrivant toutes l'évolution des différents moments en vitesse de la fonction de distribution  $f_s$ .

Pour fermer le système d'équations, il faudra dans tous les cas faire une hypothèse de façon à avoir autant d'équations que d'inconnues. Le choix de l'hypothèse pour fermer le système d'équations est appelé *fermeture des équations fluides*. Plus l'hypothèse est faite sur des ordres élevés de la fonction de distribution, plus la description sera

11. On a multiplié par  $\frac{1}{2} m_s^*$  pour avoir des grandeurs homogènes à une densité volumique d'énergie. Ainsi, à la fin de la dérivation, nous aurons directement une loi de conservation de l'énergie.

12. Ce vecteur est souvent approximé par un loi de Fourier [84] :  $\mathbf{Q}_s = \kappa_s \nabla T_s$  où  $\kappa_s$  est la conductivité thermique du fluide d'espèce  $s$  qui s'exprime en  $WK^{-1}m^{-1}$ , et  $T_s$  est la température du fluide.

précise. Cependant, faire des hypothèses sur des ordres élevés implique l'écriture (et donc la résolution) d'un grand nombre d'équations d'évolution et nécessite potentiellement une forte puissance de calcul pour résoudre numériquement le système d'équations. Le choix d'une relation de fermeture est délicat : c'est à partir de ce moment-là que le fait d'avoir donné un sens physique aux différents moments de la fonction de distribution prend toute son importance. Si les conditions physiques sont telles qu'il n'est pas possible de faire une hypothèse sur les premiers moments de la fonction de distribution, il est préférable de se rediriger vers une approche plus fondamentale, par exemple une description statistique donnée par l'équation cinétique des plasmas (2.36).

Dans la littérature, plusieurs hypothèses sont couramment utilisées pour fermer le système d'équations fluides, en voici une liste non exhaustive [84, 91, 93] :

- Fermeture du type plasma froid : cette fermeture est très forte puisqu'elle implique que la température (pression) du plasma est nulle. Nous ne la prendrons pas puisque nous avons estimé dans le paragraphe 2.2.2 que la température du plasma pouvait être de l'ordre de  $\simeq 100$  eV.
- Fermeture du type adiabatique : Cette fermeture permet de remplacer l'équation de conservation de l'énergie (2.59) par la simple relation  $p_s n_s^\gamma = \text{constante}$ , où  $p_s$  est la pression scalaire. Cette fermeture suppose de négliger la contribution du vecteur flux de chaleur dans l'équation de conservation de l'énergie (2.59), mais également de négliger le terme collisionnel. La fermeture de type adiabatique ne convient pas pour notre problème d'interaction Bessel/diélectrique puisque nous voulons inclure des termes de collision (photoionisation, impact, collisions élastiques entre porteurs, collisions élastiques porteurs/phonons, ...) dans notre description fluide.
- Fermeture du type isotherme : Dans ce cas, la diffusion thermique est le phénomène dominant dans l'équation de conservation de l'énergie (2.59). Cette considération implique que la température est la même partout dans le plasma. Cette fermeture n'est pas en accord avec notre problème d'interaction Bessel/diélectrique, puisqu'il est très probable qu'il y ait une corrélation entre la distribution d'intensité du faisceau laser et la température du plasma, et donc des gradients de température.
- Fermeture loi des gaz parfaits : Cette fermeture suppose de considérer localement une distribution Maxwellienne définie à travers 3 moments en vitesse (densité, vitesse moyenne, température). Elle implique donc de négliger la contribution du terme  $\nabla \cdot \mathbf{Q}_s$  dans l'équation de conservation de l'énergie (2.59) et de considérer un équilibre thermodynamique local.

La fermeture du type loi des gaz parfaits semble plus en accord avec notre problème d'interaction Bessel/diélectrique, puisque les échelles de temps de la diffusion thermique sont plus grandes que le domaine étudié (*i.e.* les échelles femtosecondes). Par contre, cela nécessite que le taux de collision soit suffisamment important pour que l'hypothèse d'équilibre thermodynamique local soit satisfaite.

Dans le cadre de la fermeture du type loi des gaz parfaits, même si le système n'est pas à l'équilibre thermodynamique d'un point de vue macroscopique, il est possible de décrire localement le système par une distribution de Maxwell-Boltzmann isotrope [84] :

$$f_{\text{MBs}} \equiv n_s \left( \frac{m_s^*}{2\pi k_B T_s} \right)^{3/2} \exp \left[ \frac{-m_s^* (\mathbf{v} - \mathbf{u}_s)^2}{2k_B T_s} \right] \quad (2.62)$$

Sans détailler les calculs, les 3 premiers moments de la fonction de distribution de Maxwell-Boltzmann (2.62) sont [84] :

$$\int d^3v f_{\text{MBs}} = n_s \quad (2.63)$$

$$\frac{1}{n_s} \int d^3v \mathbf{v} f_{\text{MBs}} = \mathbf{u}_s \quad (2.64)$$

$$m_s^* \int d^3v (\mathbf{v} - \mathbf{u}_s) \otimes (\mathbf{v} - \mathbf{u}_s) f_{\text{MBs}} = n_s k_B T_s \bar{\mathbf{I}} \equiv p_s \bar{\mathbf{I}} \quad (2.65)$$

Les équations (2.63) et (2.64) sont conformes aux équations (2.39) et (2.43). L'équation (2.65) est l'équation des gaz parfaits. Le fait d'avoir supposé l'équilibre thermodynamique local permet de lier la pression (moment d'ordre 2) à la température à travers une loi des gaz parfaits. En effet, la température se définit aisément lorsqu'on travaille avec un système à l'équilibre thermodynamique, même si c'est un équilibre thermodynamique local.

Les moments d'ordre supérieurs sont nuls dans la distribution de Maxwell-Boltzmann. Le vecteur flux de chaleur  $\mathbf{Q}_s$  (moment d'ordre 3) représentait en fait l'effet non-Maxwellien le plus important de la fonction de distribution  $f_s$ . Notons au passage que les moments d'ordre plus élevés s'éloignent des grandeurs physiques mesurées habituellement, et donne une plus grande importance aux queues des distributions que les moments d'ordre plus faible.

Par ailleurs, l'équilibre thermodynamique local permet d'affirmer que la fonction de distribution n'a que 3 moments en vitesse non nuls (les 3 premiers), mais également que l'énergie interne du fluide s'écrit sous la forme suivante [104] :

$$\epsilon_s \equiv \frac{p_s}{\gamma - 1} + \frac{1}{2} n_s m_s^* \mathbf{u}_s^2 \quad (2.66)$$

Cette équation traduit le fait que l'énergie du fluide n'a que deux composantes : une composante thermique et une composante moyenne. Les équations fluides (2.51), (2.54) et (2.59) pour un plasma d'électrons/trous sont similaires à celles dans les références [79] et [105]. Dans cette dernière référence, un système d'équations plus complexe est dérivé pour décrire l'évolution du plasma dans un matériau avec une structure de bande non parabolique.

Terminons ce paragraphe en soulignant le fait que les électrons sont des fermions, et qu'ils devraient suivre la statistique de Fermi-Dirac, plutôt que celle de Maxwell-Boltzmann. A. Leone *et al.* [106] précisent que les simulations hydrodynamiques opérant à basse température nécessitent l'incorporation des effets physiques appropriés tels que la statistique de Fermi-Dirac. Cependant, à haute température, les effets quantiques se font moins sentir (nous les avons d'ailleurs négligés dans l'hypothèse n°2), et la statistique de Fermi-Dirac tend vers la statistique de Maxwell-Boltzmann : c'est pour cette raison que nous avons fermé le système d'équations avec une statistique de Maxwell-Boltzmann.

A. Leone *et al.* [106] stipulent que la structure générale du système d'équations ne change pas lorsqu'on introduit la statistique de Fermi-Dirac plutôt que celle de Maxwell-Boltzmann. En effet, il est possible de garder les mêmes équations qu'avec une fermeture à travers une distribution de Maxwell-Boltzmann, et ensuite de lier la température thermodynamique à la température dans une distribution de Fermi-Dirac [106, 107].

Pour résumer de façon très générale, dans cette section 2.4.3.4, nous avons fait une hypothèse supplémentaire forte :

**Hypothèse n°7 :**

Nous avons supposé un équilibre thermodynamique local pour fermer le système d'équations.

### 2.4.4 Discussion sur les modèles fluides usuels

En supprimant les champs électriques et magnétiques ainsi que les termes collisionnels ( $S_s$ ,  $\mathbf{A}_s$  et  $M_s$ ), le système d'équations (2.51), (2.54) et (2.59) a la même forme mathématique que les équations de la physique des fluides (équations de Navier–Stokes). Cela explique notamment pourquoi, le modèle physique des plasmas décrit par ce système d'équations est appelé *modèle fluide*.

Le modèle décrit par un système d'équations (2.51), (2.54) et (2.59) pour chaque espèce  $s$  de particule, est appelé le modèle multi-fluide. Des hypothèses supplémentaires peuvent être formulées de façon à obtenir des modèles fluides plus légers. Par exemple, un modèle plasma à deux températures peut être dérivé du modèle multi-fluide, mais il suppose que la masse d'une espèce de particule est nettement supérieure à celle de l'autre espèce de particule [80, 108]. Cette hypothèse peut être justifiée dans le cas d'un plasma d'électrons/ions où  $m_i \gg m_e$ , et permet d'obtenir un modèle mono-fluide avec deux équations de température. Nous ne pouvons cependant pas nous permettre de faire cette hypothèse dans le cas du plasma d'électrons/trous puisque la masse effective des électrons est du même ordre de grandeur que la masse effective des trous.

Des modèles mono-fluide encore plus simple peuvent être dérivés, c'est par exemple le cas dans la théorie MagnétoHydroDynamique (MHD). Cependant, les hypothèses supplémentaires comme celle de la quasi-neutralité  $\rho = 0$ , ou encore négliger  $\partial\mathbf{E}/\partial t$  dans les équations de Maxwell ne sont pas réalisables dans le problème d'interaction Bessel/plasma que nous souhaitons étudier. Les modèles MHD sont très pratiques dans de nombreux cas, en particulier pour les problèmes avec des basses fréquences par rapport à la fréquence plasma [84].

Par ailleurs, des modèles de transport de plasma d'électrons/trous sont parfois utilisés dans les semi-conducteurs [109]. Ils comportent bien souvent des hypothèses de neutralité  $n_e = n_h$  et imposent aux densités de courant  $\mathbf{J}_e = -\mathbf{J}_h$  [109]. Nous n'allons pas exploiter ces modèles puisque nous avons vu dans le chapitre 1 que les phénomènes de non-neutralité comme l'absorption résonnante peuvent influencer sur la dynamique des plasmas nanométriques.

## 2.5 Synthèse du chapitre 2

Tout au long des sections précédentes, nous avons vu que le modèle multi-fluide est le modèle qui semble le plus intéressant pour faire des simulations Bessel/plasma. Il faut cependant garder à l'esprit que la marge de manoeuvre pour exclure les effets quantiques

du plasma est faible, et que l'hypothèse d'équilibre thermodynamique local ne pourra être justifiée que si les taux de collision sont importants.

Écrivons maintenant de façon compacte le système d'équations que nous souhaitons résoudre. Les équations d'évolution décrivant la dynamique du plasma d'électrons et de trous au coeur d'un diélectrique de permittivité relative  $\epsilon_r$  sont :

$$\frac{\partial}{\partial t} \begin{bmatrix} n_e \\ n_e \mathbf{u}_e \\ \epsilon_e \\ n_h \\ n_h \mathbf{u}_h \\ \epsilon_h \end{bmatrix} + \nabla \cdot \begin{bmatrix} n_e \mathbf{u}_e \\ n_e \mathbf{u}_e \otimes \mathbf{u}_e + \frac{p_e}{m_e^*} \mathbf{I} \\ (\epsilon_e + p_e) \mathbf{u}_e \\ n_h \mathbf{u}_h \\ n_h \mathbf{u}_h \otimes \mathbf{u}_h + \frac{p_h}{m_h^*} \mathbf{I} \\ (\epsilon_h + p_h) \mathbf{u}_h \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ \frac{n_e q_e}{m_e^*} (\mathbf{E} + \mathbf{u}_e \times \mathbf{B}) \\ n_e q_e \mathbf{u}_e \cdot \mathbf{E} \\ 0 \\ \frac{n_h q_h}{m_h^*} (\mathbf{E} + \mathbf{u}_h \times \mathbf{B}) \\ n_h q_h \mathbf{u}_h \cdot \mathbf{E} \end{bmatrix} + \mathbf{S}^{\text{Coll}} \quad (2.67)$$

où pour chacune des espèces  $s$ , la densité d'énergie interne s'écrit :

$$\epsilon_s \equiv \frac{p_s}{\gamma - 1} + \frac{1}{2} n_s m_s^* \mathbf{u}_s^2 \quad (2.68)$$

Le terme collisionnel s'écrit de la façon générique suivante :

$$\mathbf{S}^{\text{Coll}} = \begin{bmatrix} S_e \\ \mathbf{A}_e \\ M_e \\ S_h \\ \mathbf{A}_h \\ M_h \end{bmatrix} \quad (2.69)$$

Le terme collisionnel (2.69) contient l'information sur les collisions de courte portée. L'objectif du prochain chapitre est d'explicitier ce terme de façon à intégrer dans le modèle les phénomènes comme la photoionisation, l'ionisation par impact, les collisions élastiques avec les phonons, les collisions élastiques électron-trou et le phénomène de Bremsstrahlung inverse.

Les champs électromagnétiques apparaissant dans des équations fluides (2.67) sont calculés à partir des équations de Maxwell :

$$\nabla \cdot \epsilon_r \mathbf{E} = \frac{\rho}{\epsilon_0} \quad (2.70)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0 \quad (2.71)$$

$$\nabla \times \mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} \quad (2.72)$$

$$\nabla \times \mathbf{B} = \mu_0 \mathbf{J} + \frac{1}{c^2} \frac{\partial \epsilon_r \mathbf{E}}{\partial t} \quad (2.73)$$

Les densités totales de charge  $\rho$  et de courant  $\mathbf{J}$  sont calculées avec les 2 équations suivantes :

$$\rho = q_e n_e + q_h n_h \quad (2.74)$$

$$\mathbf{J} = q_e n_e \mathbf{u}_e + q_h n_h \mathbf{u}_h \quad (2.75)$$

# CONSTRUCTION DU MODÈLE À DEUX FLUIDES

*Dans la vie, rien n'est à craindre, tout est à comprendre.*

- MARIE SKŁODOWSKA-CURIE

Dans le chapitre précédent, nous avons effectué la dérivation du modèle plasma à deux fluides à partir d'approches plus fondamentales. L'objectif du présent chapitre est d'intégrer dans le modèle théorique des effets physiques supplémentaires, telles que la photoionisation, l'ionisation par impact, les collisions élastiques ou encore le phénomène de Bremsstrahlung inverse. Nous allons d'abord traiter les phénomènes individuellement, puis terminerons en résumant l'ensemble du système d'équations à résoudre.

## 3.1 Décomposition du terme collisionnel

Le terme collisionnel de la section 2.5 est resté jusqu'ici sous forme générique  $\mathbf{S}^{\text{Coll}}$ . Nous procédons maintenant à une description plus fine en le décomposant, à l'instar de E. T. Meier *et al.* [110], en une somme de termes liés à différents processus microscopiques. Ainsi, nous écrivons :

$$\mathbf{S}^{\text{Coll}} \equiv \begin{bmatrix} \mathbf{S}_e^{\text{Coll}} \\ \mathbf{S}_h^{\text{Coll}} \end{bmatrix} \equiv \begin{bmatrix} \mathbf{S}_e^{e-h} \\ \mathbf{S}_h^{e-h} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \mathbf{S}_e^{\text{Imp-e}} \\ \mathbf{S}_h^{\text{Imp-e}} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \mathbf{S}_e^{\text{Imp-h}} \\ \mathbf{S}_h^{\text{Imp-h}} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \mathbf{S}_e^{\text{Ph}} \\ \mathbf{S}_h^{\text{Ph}} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \mathbf{S}_e^{e-p} \\ \mathbf{S}_h^{e-p} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \mathbf{S}_e^{h-p} \\ \mathbf{S}_h^{h-p} \end{bmatrix} \quad (3.1)$$

Dans l'équation (3.1), le terme  $\mathbf{S}^{\text{Coll}}$  est d'abord décomposé en deux parties,  $\mathbf{S}_e^{\text{Coll}}$  qui correspond aux modifications à apporter aux équations du fluide d'électron dans le système fluide (2.67), ainsi que  $\mathbf{S}_h^{\text{Coll}}$  pour celles à apporter au fluide de trou.

Ces termes  $\mathbf{S}_e^{\text{Coll}}$  et  $\mathbf{S}_h^{\text{Coll}}$  sont ensuite décomposés en 6 termes faisant référence aux différents phénomènes physiques :

- L'indice "e-h" correspond au phénomène de collision élastique électron-trou.
- L'indice "Imp-e" correspond à l'ionisation par impact déclenchée par un électron énergétique.
- L'indice "Imp-h" correspond à l'ionisation par impact déclenchée par un trou énergétique.
- L'indice "Ph" correspond à la photoionisation induite par le champ laser.
- L'indice "e-p" prend en compte deux phénomènes : les collisions électron-phonon-photon et les collisions électron-phonon.
- Finalement, l'indice "h-p" prend en compte les collisions trou-phonon-photon et les collisions trou-phonon.

Soulignons ici que les collisions élastiques électron-électron et trou-trou ne peuvent pas contribuer aux modifications des équations fluides [109, 84]. La première raison à cela est la suivante : dans l'approche fluide, la forme de la distribution est imposée, et doit être une distribution de Maxwell-Boltzmann avant et après le phénomène de collision. De plus, durant le phénomène de collision, le changement de quantité de mouvement (resp. énergie) d'une particule doit être égal à l'opposé du changement de quantité de mouvement (resp. énergie) de l'autre particule participant au phénomène. Cela signifie qu'il n'y a pas de variation de la quantité de mouvement (resp. énergie) total pour le fluide à travers les collisions élastiques électron-électron ou trou-trou. [84].

L'objectif des prochains paragraphes de ce chapitre est de spécifier l'ensemble des termes génériques de l'équation (3.1). Par ailleurs, en fin de chapitre, nous discuterons de deux phénomènes de relaxation supplémentaires : les recombinaisons Auger et les excitons auto-piégés.

## 3.2 Phénomènes non-ionisants

Commençons d'abord par spécifier les termes de l'équation (3.1) qui sont non-ionisants, et qui n'impliquent donc pas de changement du nombre de particules dans le plasma : collisions électron-trou, collisions électron-phonon-photon, collisions électron-phonon, collisions trou-phonon-photon et collisions trou-phonon.

### 3.2.1 Les collisions élastiques électron-trou

B. E. Sernelius [111] et D. Hulin *et al.* [112] ont montré l'importance des collisions électron-trou lors des irradiations par impulsion laser femtoseconde<sup>1</sup>. Il est donc nécessaire d'inclure ce phénomène dans notre description fluide électron/trou.

De façon générale, il existe de nombreuses façons de décrire les phénomènes de collision élastique dans les plasma (équation de Fokker-Planck, intégrale de Boltzmann, terme collisionnel de Bhatnagar-Gross-Krook) [84]. Les phénomènes de collision sont souvent complexes à décrire et nécessitent souvent l'emploi de fonctions de distribution et donc une approche cinétique [84]. L'approche de Bhatnagar-Gross-Krook (BGK) [96] est utilisée fréquemment en première approche pour inclure les phénomènes de collision élastique dans les plasmas [84].

Nous utiliserons cette approche qui suppose que l'effet des collisions élastiques est de restaurer une situation d'équilibre thermodynamique local. Plus précisément, cette approche suppose que l'équilibre thermodynamique local est atteint exponentiellement dans le temps.

D'un point de vue formel, l'inclusion du terme collisionnel BGK dans le système fluide

---

1. Une collision électron-trou est un mécanisme opérant à travers l'interaction coulombienne entre deux particules de charges opposées. Ce phénomène est parfois appelées diffusions électron-trou.

(2.67) se fait de la façon suivante<sup>2</sup> [113] :

$$\mathbf{S}^{\text{e-h}} \equiv \begin{bmatrix} \mathbf{S}_e^{\text{e-h}} \\ \mathbf{S}_h^{\text{e-h}} \end{bmatrix} \equiv \begin{bmatrix} 0 \\ -n_e \nu_{\text{eh}} \frac{\mu}{m_e^*} (\mathbf{u}_e - \mathbf{u}_h) \\ -\kappa \nu_{\text{eh}} \left[ \frac{p_e}{\gamma-1} - \frac{n_e}{n_h} \frac{p_h}{\gamma-1} + \frac{n_e}{2} (m_e^* \mathbf{u}_e^2 - m_h^* \mathbf{u}_h^2 + (m_h^* - m_e^*) \mathbf{u}_e \cdot \mathbf{u}_h) \right] \\ 0 \\ n_e \nu_{\text{eh}} \frac{\mu}{m_h^*} (\mathbf{u}_e - \mathbf{u}_h) \\ +\kappa \nu_{\text{eh}} \left[ \frac{p_e}{\gamma-1} - \frac{n_e}{n_h} \frac{p_h}{\gamma-1} + \frac{n_e}{2} (m_e^* \mathbf{u}_e^2 - m_h^* \mathbf{u}_h^2 + (m_h^* - m_e^*) \mathbf{u}_e \cdot \mathbf{u}_h) \right] \end{bmatrix} \quad (3.2)$$

où  $\mu = \frac{m_e^* m_h^*}{m_e^* + m_h^*}$  est la masse réduite,  $\kappa = \frac{2\mu}{m_e^* + m_h^*}$  et  $\nu_{\text{eh}}$  est la fréquence de transfert de quantité de mouvement lors des collisions électron-trou. L'équation (3.2) préserve les conservations de la quantité de mouvement et de l'énergie totale, et le phénomène de collision élastique ne change pas le nombre de particules. Les détails concernant la dérivation mathématique et l'intégralité des hypothèses sous-jacentes de l'approche BGK se retrouvent dans la référence de J. L. Raimbault *et al.* [114].

D'un point de vue physique, le terme de l'équation (3.2) montre que l'effet des collisions électron-trou est plus important lorsque les vitesses moyennes des fluides sont différentes, qu'elle convertie l'énergie cinétique du fluide en énergie thermique, et qu'elle tend à égaliser les pressions des deux fluides.

A. Ramer *et al.* ont dérivé, en supposant  $T_e = T_h$ , la fréquence de transfert de quantité de mouvement lors des collisions électron-trou [109] :

$$\nu_{\text{eh}} = \frac{\sqrt{3}\epsilon_0\pi(k_B T_e)^{3/2}}{2q_e^2} \sqrt{\frac{1}{m_e^*} + \frac{1}{m_h^*}} \quad (3.3)$$

L'expression (3.3) servira de première approche dans les simulations numériques des futurs chapitres.

### 3.2.2 Interactions des électrons avec les phonons

Nous allons maintenant spécifier le terme de collision "e-p" de l'équation (3.1), prenant en compte les collisions électron-phonon et les collisions électron-phonon-photon. Ces phénomènes d'interaction avec les phonons ont lieu à des échelles sub-picosecondes [5], et il est nécessaire de les intégrer dans notre description fluide.

Lors de sa propagation dans un réseau parfaitement périodique, un électron de conduction ne subit aucune collision par les atomes du réseau. Le libre parcours moyen d'un électron de conduction n'est donc pas déterminé par les chocs sur les atomes du solide, mais par l'interaction avec toute irrégularité dans la périodicité du potentiel [76]. Les porteurs de charge sont diffusés par les défauts de structure, les impuretés présentes dans le matériau, et en particulier les phonons (vibrations du réseau) [115, 44].

2. La première des six lignes du terme de droite de l'équation (3.2) va s'intégrer dans la conservation du nombre de particules du fluide d'électrons, la seconde ligne va s'intégrer dans la conservation de la quantité de mouvement du fluide d'électron et la troisième dans la conservation d'énergie du fluide d'électrons. Même remarque pour les lignes 4, 5 et 6 insérées dans les lois de conservation du fluide de trous.

Le phénomène de collision électron-phonon est schématisé sur la figure 3.1(a). Un électron de conduction (1) émet un phonon (trait pointillé), et passe dans un autre état (1'). Dans les systèmes d'équations, ce phénomène d'interaction entre électrons et phonons est souvent pris en compte à travers un simple terme de friction [30].

Nous écrirons le terme de collision électron-phonon dans les équations plus tard, nous abordons maintenant les collisions électron-photon-phonon (aussi appelées phénomène de Bremsstrahlung inverse) [76].

Un électron de conduction ne peut pas directement absorber ou émettre de photon dans une même bande car l'énergie et la quantité de mouvement du système électron+photon ne peuvent pas être simultanément conservées lors d'une telle transition. Pour assurer les conservations, un troisième corps doit intervenir. Ce troisième corps peut être une impureté, un défaut, ou un phonon, qui peut être émis ou absorbé au cours de la transition [76]. Parmi ces trois corps pouvant permettre la transition, l'absorption par les porteurs libres est principalement due aux phonons dans les diélectriques [115, 44].

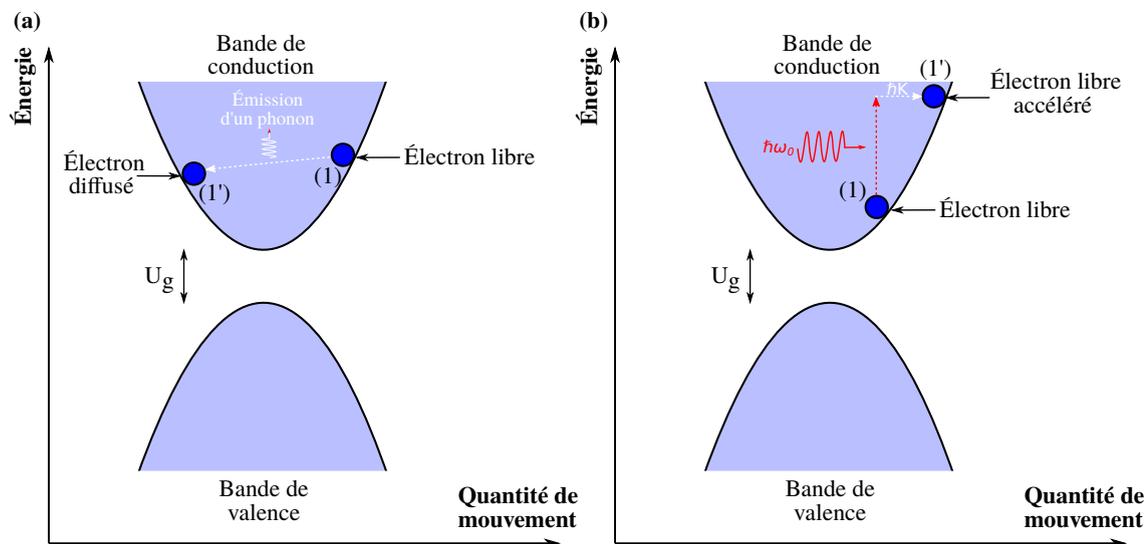


FIGURE 3.1 – (a) Schématisation des collisions électron-phonon : un électron de conduction (1) émet un phonon (trait pointillé), et passe dans un autre état (1') de la même bande. (b) Schématisation de la collision électron-photon-phonon. Un électron de conduction (1) absorbe un photon d'énergie  $\hbar\omega_0$  et un phonon de quantité de mouvement  $\hbar K$ . Cet électron monte alors dans un état énergétique plus élevé (1') à travers cette interaction.

Les collisions électron-photon-phonon sont connues comme étant un mécanisme efficace pour absorber l'énergie laser et ainsi chauffer le gaz d'électrons [9]. Ce type de collision est schématisé sur la figure 3.1(b). Un électron de conduction (1) absorbe un photon et un phonon. Cet électron monte alors dans un état énergétique plus élevé (1') tout en conservant la quantité de mouvement et l'énergie totale.

D'un point de vue formel, deux méthodes peuvent être utilisées pour intégrer les collisions électrons-phonon-photon dans les équations [76] :

- une description classique : dans cette description, le mouvement de l'électron dans le champ électromagnétique est traité classiquement, et l'introduction d'un terme de friction dans l'équation du mouvement permet de rendre compte de façon empirique des collisions. Les échanges de quantité de mouvement et d'énergie entre l'électron,

le champ et les phonons se font alors de façon continue dans le temps.

- une description quantique : cette approche consiste à traiter quantiquement le couplage photon-phonon, et permet de prendre en compte de façon plus rigoureuse le couplage avec le réseau. Les échanges d'énergie entre l'électron et le champ ne se font alors plus de façon continue, mais par des séries de transitions discrètes. Cependant, l'approche quantique bien plus lourde que la précédente.

Dans notre modèle à deux fluides, nous considérons la description classique, puisqu'elle s'intègre plus facilement dans notre modèle classique de transport.

Définissons maintenant les fréquences de réaction  $\nu_{bie}$  pour les collisions électron-photon-phonon<sup>3</sup> et  $\nu_{ep}$  pour les collisions électron-phonon. Comme énoncé précédemment dans cette section, l'inclusion de ces phénomènes dans le système fluide (2.67) peut se faire à travers un terme de friction [76] :

$$\mathbf{S}^{e-p} \equiv \begin{bmatrix} \mathbf{S}_e^{e-p} \\ \mathbf{S}_h^{e-p} \end{bmatrix} \equiv \begin{bmatrix} 0 \\ -\frac{n_e}{m_e^*}(\nu_{bie} + \nu_{ep})\mathbf{u}_e \\ 0 \\ \mathbf{0} \\ 0 \end{bmatrix} \quad (3.4)$$

La référence S. K. Sundaram [116] *et al.* précise que les collisions avec les phonons sont présentes à des échelles sub-picosecondes. Mais les auteurs soulignent que du fait que les phonons portent peu d'énergie, cela prend de nombreux processus de collision, et donc plusieurs picosecondes, pour que les porteurs de charge et le réseau soient à l'équilibre thermodynamique (typiquement 1 ps dans le saphir [117]). C'est la raison pour laquelle nous avons négligé en première approximation les échanges énergétiques entre les électrons de conduction et le réseau dans l'équation (3.4). Cette hypothèse est évidemment non valable pour des dynamiques post-picosecondes.

### 3.2.3 Interactions des trous avec les phonons

Les termes de collision "h-p" prennent en compte les collisions trou-phonon et les collisions trou-phonon-photon. Pour ces phénomènes analogues à ceux du paragraphe 3.2.2, nous adoptons la même méthode pour les intégrer dans les équations fluides. Nous définissons donc les fréquences de réaction  $\nu_{bih}$  pour les collisions trou-photon-phonon et  $\nu_{hp}$  pour les collisions trou-phonon. L'inclusion de ces phénomènes dans le système fluide (2.67) se fait à travers le terme de friction suivant :

$$\mathbf{S}^{h-p} \equiv \begin{bmatrix} \mathbf{S}_e^{h-p} \\ \mathbf{S}_h^{h-p} \end{bmatrix} \equiv \begin{bmatrix} 0 \\ \mathbf{0} \\ 0 \\ 0 \\ -\frac{n_h}{m_h^*}(\nu_{bih} + \nu_{hp})\mathbf{u}_h \\ 0 \end{bmatrix} \quad (3.5)$$

---

3. *bi* pour Bremsstrahlung inverse.

### 3.3 Les phénomènes d'ionisation

Dans cette section, nous spécifions les termes de l'équation (3.1) liés à l'ionisation. Mais avant de les spécifier, nous discuterons d'une méthode générale pour implémenter les phénomènes d'ionisation dans les équation fluides.

#### 3.3.1 Méthode d'inclusion des phénomènes d'ionisation

Dans la littérature, les processus menant à la création ou destruction (ionisation ou recombinaison) de particules sont souvent nommés collisions inélastiques [84]. Les phénomènes d'ionisation pour lesquels, une part de l'énergie cinétique est utilisée pour promouvoir un électron dans la bande de conduction (et supprimer de l'énergie potentielle de liaison), s'inscrivent donc dans ce type de collision.

Décrire rigoureusement les collisions inélastiques dans les systèmes fluides est un problème ardu. C'est la raison pour laquelle des hypothèses fortes et des considérations phénoménologiques sont souvent effectuées pour les implémenter [114]. À la manière de J. L. Raimbault *et al.* [114], nous considérons que les particules créées ou détruites pendant les collisions inélastiques, suivent une distribution de Maxwell-Boltzmann isotrope. La distribution de Maxwell-Boltzmann des particules créées ou détruites peut être différente de celle des particules pré-existantes. Les particules créées (ou détruites), leurs quantités de mouvement et leurs énergies vont s'ajouter (ou se retrancher) à celles des particules pré-existantes (tout en supposant que la forme maxwellienne est conservée lors de cette opération). Ces considérations sur la forme de la distribution sont fortes, mais sont souvent utilisées en première approche [114].

Rappelons que pour une espèce de particule  $s$ , une distribution de Maxwell-Boltzmann isotrope se caractérise par une densité de particule  $n_s$ , une vitesse moyenne  $\mathbf{u}_s$  ainsi qu'une température  $T_s$  [84] :

$$f_{\text{MBs}} \equiv n_s \left( \frac{m_s^*}{2\pi k_B T_s} \right)^{3/2} \exp \left[ \frac{-m_s^* (\mathbf{v} - \mathbf{u}_s)^2}{2k_B T_s} \right] \quad (3.6)$$

Le calcul des moments en vitesse d'ordre 0, d'ordre 1 et d'ordre 2 sont données par [84] :

$$\left[ \begin{array}{c} n_s \\ n_s \mathbf{u}_s \\ \epsilon_s \equiv \frac{p_s}{\gamma-1} + \frac{1}{2} n_s m_s^* \mathbf{u}_s^2 \end{array} \right] \quad (3.7)$$

où  $p_s = n_s k_B T_s$ .

Pour inclure les collisions inélastiques dans les équations fluides, nous devons spécifier la densité de particules créées (ou détruites)  $n_s$ , leur vitesse moyenne  $\mathbf{u}_s$  ainsi que leur pression  $p_s$ . D'un point de vue formelle, nous avons simplement à ajouter dans le terme source, les différents moments de la fonction de distribution des particules créées (ou détruites), affectés d'un taux de réaction [114] :

$$\left[ \begin{array}{c} \nu^{\text{Reac}} n_s \\ \nu^{\text{Reac}} n_s \mathbf{u}_s \\ \nu^{\text{Reac}} \left( \frac{p_s}{\gamma-1} + \frac{1}{2} n_s m_s^* \mathbf{u}_s^2 \right) \end{array} \right] \quad (3.8)$$

où  $\nu^{\text{Reac}}$  est le taux de réaction en  $s^{-1}$ .

Par ailleurs, il faut prendre en compte le fait que la quantité de mouvement totale et l'énergie totale (du système particules libres + champ + liaison chimique) doivent être conservées durant les collisions inélastiques. Cette information implique une dépendance entre les termes sources des différents fluides participant à la réaction.

### 3.3.2 Ionisation par impact déclenchée par un électron

Nous allons maintenant utiliser la méthode énoncée dans le paragraphe précédent pour inclure l'ionisation par impact dans notre modèle. La figure 3.2 décrit le phénomène d'ionisation par impact déclenchée par un électron. Un électron énergétique (1) entre en collision avec un électron de valence (2) et lui transmet une partie de son énergie et de sa quantité de mouvement. L'électron de valence est alors promu dans la bande de conduction (2') et un trou est laissé dans le bande de valence. Par ailleurs, l'électron de conduction (1) déclencheur de la réaction descend en énergie dans la bande de conduction (1').

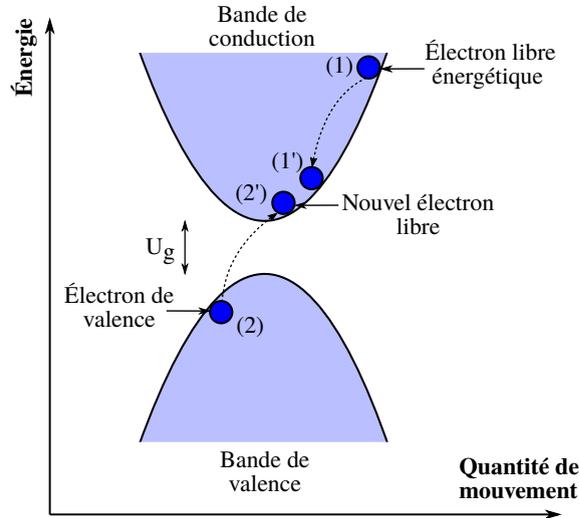


FIGURE 3.2 – Schématisation de l'ionisation par impact amorcée par un électron libre énergétique. L'électron énergétique (1) entre en collision avec un électron de valence (2) et lui transmet une partie de son énergie et de sa quantité de mouvement. L'électron de valence est alors promu dans la bande de conduction (2') et un trou est laissé dans le bande de valence. L'électron de conduction déclencheur de la réaction descend en énergie dans la bande de conduction (1').

Pour inclure l'ionisation par impact dans notre description fluide, nous faisons les deux considérations suivantes :

1. Le nombre de paires électron/trou générées à travers l'ionisation par impact est donné par une équation de taux. Cette équation prend une forme du type  $\frac{\partial}{\partial t} n = S$ , où  $S$  est un terme donnant la variation de densité de particules par unité de temps induit par le processus. Pour l'ionisation par impact, nous allons nous baser sur celle que l'on retrouve dans B. Chimier *et al.* [30], et inclure le terme approprié dans notre système d'équations fluide<sup>4</sup>.

4. Dans cette référence, l'équation de taux est donnée par :  $\frac{\partial}{\partial t} n_e = \frac{n_{ev}}{n_0} (W_{PI} + n_e W_{II}) - \frac{n_e}{\tau_r}$  où  $n_{ev}$  est la densité d'électrons de valence,  $n_0$  est la densité initiale d'atomes,  $W_{PI}$  est la taux de photoionisation de Keldysh,  $W_{II}$  est le taux d'ionisation par impact et  $\tau_r$  est le temps de recombinaison.

2. Les particules créées suivent une distribution de Maxwell-Boltzmann avec une vitesse moyenne nulle et une pression nulle ( $p_s = 0$ ). Cela signifie que les particules générées sont localisées dans le bas de la bande conduction.

À partir des deux considérations précédentes, et en désignant  $\alpha^e$  le taux d'ionisation par impact déclenchée par un électron (en  $s^{-1}$ ), l'inclusion de l'ionisation par impact dans le système fluide (2.67) se fait à travers le terme source suivant :

$$\mathbf{S}^{\text{Imp-e}} \equiv \begin{bmatrix} \mathbf{S}_e^{\text{Imp-e}} \\ \mathbf{S}_h^{\text{Imp-e}} \end{bmatrix} \equiv \begin{bmatrix} \frac{n_{ev}}{n_0} \alpha^e n_e \\ \mathbf{0} \\ -\frac{n_{ev}}{n_0} n_e \alpha^e U_g \\ \frac{n_{ev}}{n_0} \alpha^e n_e \\ \mathbf{0} \\ 0 \end{bmatrix} \quad (3.9)$$

où  $n_{ev}$  est la densité d'électrons de valence disponible (scalaire dépendant du temps et de l'espace) et  $n_0$  est la densité initiale d'atomes. Dans le terme (3.9), nous avons considéré qu'à chaque ionisation par impact déclenchée par un électron, le fluide d'électron perd une énergie  $U_g$  correspondant au gap du matériau.

Par ailleurs, après chaque ionisation, il ne faut pas oublier d'actualiser la densité d'électron de valence :

$$\frac{\partial}{\partial t} n_{ev} = -\frac{n_{ev}}{n_0} \alpha^e n_e \quad (3.10)$$

Le taux d'ionisation par impact est souvent calculé à partir de règle d'or de Fermi et dépend de l'énergie des particules. D'après B. Ridley [44], le taux d'ionisation par impact de Keldysh [118] pour un simple électron de conduction est donné par :

$$\alpha^{\text{Single}} = \begin{cases} \alpha_0^e \left( \frac{E_e - E_T}{U_g} \right)^\Upsilon & \text{pour } E_e \geq E_T \\ 0 & \text{pour } E_e < E_T \end{cases} \quad (3.11)$$

où  $E_e$  est l'énergie de l'électron,  $E_T$  est l'énergie de seuil à partir de laquelle l'ionisation par impact peut se déclencher et  $\Upsilon = 2$  est l'exposant dans la formule de Keldysh. Lorsque  $E_e < E_T$ , il n'est pas possible de conserver à la fois l'énergie et la quantité de mouvement lors du processus. Dans un matériau à bandes paraboliques, cette énergie de seuil est donnée par [44] :

$$E_T = \frac{1 + 2 \frac{m_e^*}{m_h^*}}{1 + \frac{m_e^*}{m_h^*}} U_g \quad (3.12)$$

Le coefficient  $\alpha_0^e$  de l'équation (3.11) est donné par [44] :

$$\alpha_0^e = \left( \frac{q_e^2}{4\pi} \right)^2 \frac{m_e^* A_c^2 A_v^2}{\epsilon_r^2 \hbar^3 (1 + 2 \frac{m_e^*}{m_h^*})^{3/2}} \quad (3.13)$$

où  $A_c$  et  $A_v$  sont des intégrales de recouvrement entre les états initiaux et finaux de l'électron de conduction et de l'électron de valence participant à la réaction [44]. Dans la plus simple des approximations,  $A_c = 1$  et  $A_v = 0$  pour des trous lourds [44]. Ces valeurs sont complexes à déterminer, et les méthodes de calcul mènent parfois à des valeurs très différentes (par exemple 0,38 pour du GaAs avec une méthode et 0,01 avec une autre

méthode) [44].

Le coefficient  $\alpha_0^e$  est aussi parfois mesuré expérimentalement, comme c'est par exemple le cas pour la silice fondue :  $\alpha_0^e = 1.5 \text{ fs}^{-1}$  [58, 119].

De façon à étendre le taux  $\alpha^{\text{Single}}$  à une description fluide, nous intégrons ce coefficient sur la fonction de distribution (à la manière de Peñano *et al.* [58]). Pour estimer ce taux effectif, nous considérons une distribution de Maxwell-Boltzmann décentrée (vitesse moyenne du fluide non nulle)<sup>5</sup>, dont l'expression est :

$$G_e(E_e) = \frac{2}{\sqrt{\pi} m_e^* \|\mathbf{u}_e\|} \left[ \frac{m_e^*}{2k_B T_e} \right]^{1/2} \exp\left(-\frac{m_e^*}{2k_B T_e} \left[ \frac{2E_e}{m_e^*} + \|\mathbf{u}_e\|^2 \right]\right) \sinh\left(\frac{m_e^* \|\mathbf{u}_e\|}{k_B T_e} \sqrt{\frac{2E_e}{m_e^*}}\right) \quad (3.14)$$

Les taux d'ionisation par impact effectif dans la description fluide sont obtenus en intégrant le taux pour un électron simple  $\alpha^{\text{Single}}$  sur la fonction de distribution  $G_e(E_e)$  [58] :

$$\alpha^e = \int_0^\infty \alpha^{\text{Single}}(E_e) G(E_e) dE_e \quad (3.15)$$

Le résultat du calcul numérique de l'intégrale de l'équation (3.15) est représenté sur la figure 3.3.

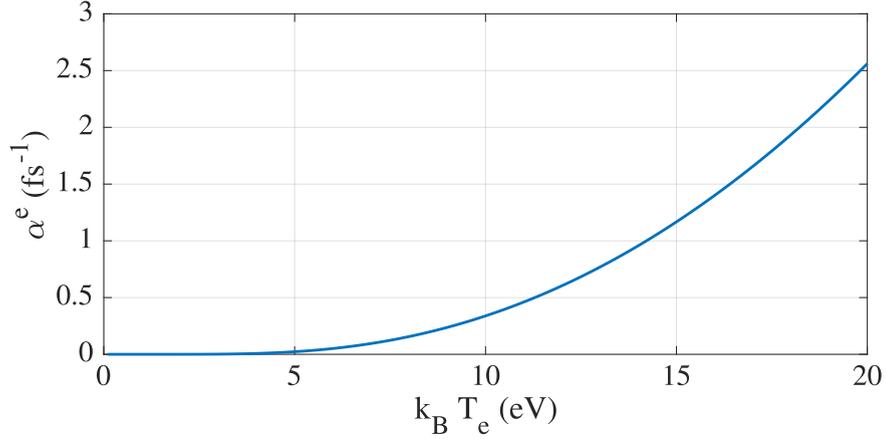


FIGURE 3.3 – Taux d'ionisation par impact dans du saphir en phase  $\alpha$  en fonction de  $k_B T_e$ . Nous avons fixé  $m_e^* = 0,4m_e$  [77] et  $U_g = 10 \text{ eV}$  [120].

Pour obtenir cette figure, nous avons pris les paramètres d'un diélectrique à fort gap : le saphir en phase  $\alpha$ . Dans ce matériau, la masse effective de l'électron de conduction est  $m_e^* = 0,4m_e$  [77] alors que le gap est  $U_g = 10 \text{ eV}$  [120]. Nous avons fixé les intégrales de recouvrement  $A_c = A_v = 1$  comme cela est souvent réalisé en première approximation. De plus, nous avons fixé ici une vitesse moyenne du fluide  $\mathbf{u}_e = \mathbf{0}$  [44]. Nous pouvons remarquer sur la figure 3.3 que pour des températures de l'ordre de 10 eV, le taux d'ionisation par impact est de l'ordre de  $1 \text{ fs}^{-1}$ .

5. et non une distribution centrée comme c'est le cas dans Peñano *et al.* [58].

### 3.3.3 Ionisation par impact déclenchée par un trou

Nous allons maintenant aborder du phénomène d'ionisation par impact déclenchée par un trou [121] illustré par la figure 3.4, et l'inclure dans notre description fluide. La figure 3.4(a) schématise le processus d'un point de vue des trous alors que la figure 3.4(b) schématise ce même phénomène d'un point de vue électronique. Sur la figure 3.4(a), un trou énergétique (1) entre en collision avec un trou de conduction (2) et lui transmet une partie de son énergie et de sa quantité de mouvement. Le trou de conduction est alors promu dans la bande de valence (2') et un trou est laissé dans la bande de conduction (1'). Le trou déclencheur de la réaction descend en énergie dans la bande de valence (1').

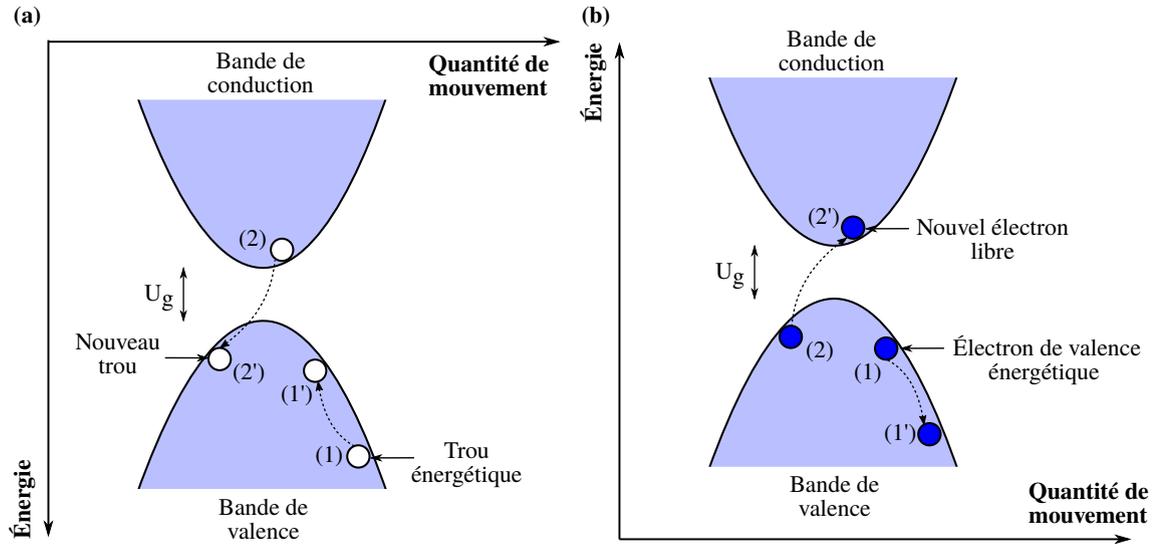


FIGURE 3.4 – Schématisation de l'ionisation par impact déclenchée par un trou énergétique. (a) D'un point de vue des trous, un trou énergétique (1) entre en collision avec un trou de conduction (2) et lui transmet une partie de son énergie et de sa quantité de mouvement. Le trou de conduction est alors promu dans la bande de valence (2'). Le trou déclencheur de la réaction descend en énergie dans la bande de valence (1'). (b) D'un point de vue des électrons, un électron de valence énergétique (1) entre en collision avec un autre électron de valence (2) et lui transmet une partie de son énergie et de sa quantité de mouvement. L'électron de valence (2) est alors promu dans la bande de conduction (2') et une place vacante (trou) est laissée dans la bande de valence. L'électron de valence déclencheur de la réaction descend en énergie dans la bande de valence (1').

En appliquant une procédure identique au cas électronique, nous obtenons :

$$\mathbf{S}^{\text{Imp-h}} \equiv \begin{bmatrix} \mathbf{S}_e^{\text{Imp-h}} \\ \mathbf{S}_h^{\text{Imp-h}} \end{bmatrix} \equiv \begin{bmatrix} \frac{n_{ev}}{n_0} \alpha^h n_h \\ \mathbf{0} \\ 0 \\ \frac{n_{ev}}{n_0} \alpha^h n_h \\ \mathbf{0} \\ -\frac{n_{ev}}{n_0} n_h \alpha^h U_g \end{bmatrix} \quad (3.16)$$

où  $\alpha^h$  est le taux d'ionisation par impact déclenchée par un trou (en  $s^{-1}$ ). Par ailleurs, à chaque paire électron/trou créée, la densité d'électron de valence doit être actualisée :

$$\frac{\partial}{\partial t} n_{ev} = -\frac{n_{ev}}{n_0} \alpha^h n_h \quad (3.17)$$

T. Kunikiyo *et al.* [121] ont montré que le taux d'ionisation par impact déclenchée par les trous est très dépendant de la structure de bande, et qu'il évolue parfois exponentiellement avec l'énergie du trou déclencheur (par exemple dans du quartz en phase  $\alpha$ ), contrairement à l'évolution quadratique prévue dans la formule de Keldysh (équation (3.11)).

### 3.3.4 Photoionisation

Nous incluons finalement dans la description fluide le phénomène de photoionisation. La photoionisation est un phénomène directement dépendant de l'amplitude du champ laser. Dans les diélectriques, et pour des régimes tels que  $E < 2 \times 10^{10}$  V/m, la photoionisation correspond à l'absorption multiphotonique [30] telle que schématisée dans le chapitre 1. À amplitude plus importante ( $E > 2 \times 10^{10}$  V/m), l'effet tunnel devient dominant [30].

De façon à tenir compte du régime multiphoton et du régime tunnel, nous considérons le taux de photoionisation de Keldysh dans les solides en  $m^{-3} \cdot s^{-1}$  [71]. Pour inclure la photoionisation dans la description fluide, nous faisons les 2 considérations suivantes :

1. Le nombre de paires électron/trou générées à travers la photoionisation est décrit par l'équation de taux exprimée par B. Chimier *et al.* [30].
2. À la manière de J. R. Peñano *et al.* [58], nous considérons que les particules créées ont une énergie nulle ( $p_s = 0$  et  $\mathbf{u}_s = \mathbf{0}$ ), cela revient à négliger le résidu d'énergie laissé aux porteurs libres après photoionisation.

En définissant  $\alpha^{Ph}$  le taux de photoionisation de Keldysh dans les solides en  $m^{-3} \cdot s^{-1}$  [71], l'inclusion de la photoionisation dans le système fluide (2.67) se fait à travers le terme source suivant :

$$\mathbf{S}^{Ph} \equiv \begin{bmatrix} \mathbf{S}_e^{Ph} \\ \mathbf{S}_h^{Ph} \end{bmatrix} \equiv \begin{bmatrix} \frac{n_{ev}}{n_0} \alpha^{Ph} \\ \mathbf{0} \\ 0 \\ \frac{n_{ev}}{n_0} \alpha^{Ph} \\ \mathbf{0} \\ 0 \end{bmatrix} \quad (3.18)$$

À chaque paire électron/trou créée, un électron de valence doit être retiré :

$$\frac{\partial}{\partial t} n_{ev} = -\frac{n_{ev}}{n_0} \alpha^{Ph} \quad (3.19)$$

Par ailleurs, pour respecter la conservation de l'énergie totale, nous devons retirer au champ électromagnétique la bonne quantité d'énergie. Nous effectuons cette opération à travers un courant fictif de photoionisation [103, 63]. Le courant fictif de photoionisation est calculé à partir du théorème de Poynting de façon à modéliser artificiellement une perte d'énergie :

$$\mathbf{J}^{Ph} \cdot \mathbf{E} = \frac{n_{ev}}{n_0} \alpha^{Ph} U_g \quad (3.20)$$

En isolant le courant fictif d'ionisation, nous pouvons écrire :

$$\mathbf{J}^{Ph} = \frac{n_{ev}}{n_0} \frac{\alpha^{Ph} U_g}{\mathbf{E}^2} \mathbf{E} \quad (3.21)$$

Ce courant fictif de photoionisation  $\mathbf{J}^{Ph}$  est finalement ajouté au courant de charge libre présent dans l'équation de Maxwell-Ampère (2.73).

Nous terminons cette section en donnant l'expression du taux de photoionisation de Keldysh [71, 30, 122] :

$$\alpha^{\text{Ph}} = \frac{2\omega_0}{9\pi} \left( \frac{\omega_0\mu}{\hbar\gamma_1} \right)^{3/2} Q(\Gamma, x) \times \exp \left[ -\pi E(x+1) \frac{K(\gamma_1) - G(\gamma_1)}{G(\gamma_2)} \right] \quad (3.22)$$

où le symbole  $E(x)$  représente la partie entière du nombre  $x$ ,  $\mu = \frac{m_e^* m_h^*}{m_e^* + m_h^*}$  est la masse réduite,  $\Gamma = \omega_0 \sqrt{\mu U_g} / |q_e| |\mathbf{E}|$  est le paramètre de Keldysh,  $|\mathbf{E}|$  est l'amplitude du champ laser. Les fonctions  $K$  et  $G$  sont les intégrales elliptiques de première et deuxième espèce,  $\gamma_1 = \Gamma / \sqrt{1 + \Gamma^2}$  et  $\gamma_2 = \gamma_1 / \Gamma$ . La fonction  $Q(\Gamma, x)$  de l'équation (3.22) est donnée par [71] :

$$Q(\Gamma, x) = \sqrt{\frac{\pi}{2K(\gamma_2)}} \sum_{n=0}^{\infty} \exp \left[ -\pi n \frac{K(\gamma_1) - G(\gamma_1)}{G(\gamma_2)} \right] \Phi \left( \pi \sqrt{\frac{2E(x+1) - 2x + n}{2K(\gamma_2)G(\gamma_2)}} \right) \quad (3.23)$$

où  $\Phi = \frac{\sqrt{\pi}}{2} e^{-z^2} \text{Erf}(z)$  et  $x = \tilde{U} / \hbar\omega_0$ .  $\tilde{U}$  est le gap effectif donné par :

$$\tilde{U} = \frac{2U_g}{\pi\gamma_1} G(\gamma_2) \quad (3.24)$$

Le taux de photoionisation de Keldysh dans le saphir est tracé sur la figure 3.5.

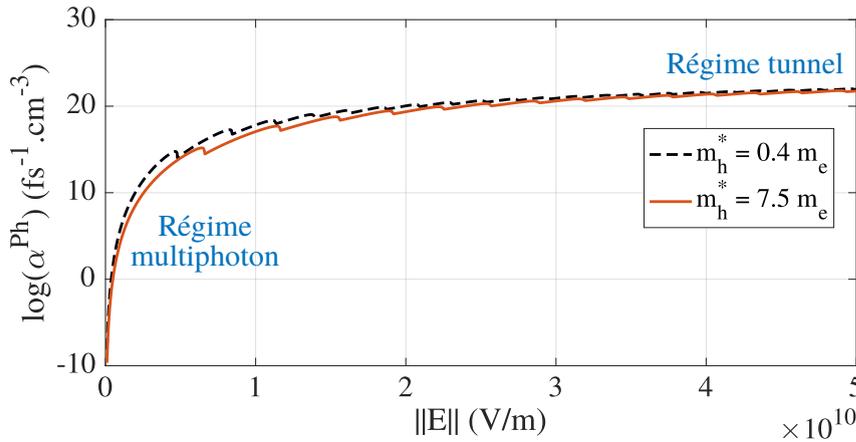


FIGURE 3.5 – Taux de photoionisation de Keldysh dans du saphir en phase  $\alpha$  en fonction de l'amplitude du champ électrique. La masse effective des électrons de conduction est  $m_e^* = 0,4m_e$  [77], le gap est  $U_g = 10$  eV [120] et la longueur d'onde du laser dans le vide est  $\lambda_0 = 0,8 \mu\text{m}$ .

Pour obtenir cette figure, nous avons pris à nouveau les paramètres du saphir en phase  $\alpha$ , et nous avons tracé une courbe pour des trous légers tels que  $m_h^* = 0,4m_e$  [77] (pointillés noirs) et des trous lourds tels que  $m_h^* = 7,5m_e$  [77] (courbe rouge). Nous pouvons remarquer que le taux de photoionisation de Keldysh montre des variations d'un (voire deux) ordre de grandeur vers des amplitudes de  $10^{10}$  V/m, et qu'il est plus important pour des masses effectives légères. Par ailleurs, en régime d'effet tunnel, le changement de masse effective des trous a peu affecté le taux de photoionisation de Keldysh.

Nous terminons cette section en soulignant que le choix de la structure de bande influe fortement sur le taux de photoionisation, comme c'est par exemple montré dans V. E. Gruzdev [70].

## 3.4 Les recombinaisons

Les recombinaisons sont des mécanismes de relaxation qui peuvent prendre place lors de l'interaction de l'impulsion laser avec le matériau diélectrique. Parmi ces mécanismes, nous retrouvons les recombinaisons Auger (voir figure 3.6(a)) et les excitons auto-piégés (voir figure 3.6(b)) qui peuvent parfois avoir un impact sur les échelles sub-picosecondes.

### 3.4.1 Les recombinaisons Auger

D'après S. K. Sundaram *et al.* [116], les recombinaisons Auger se font sur des échelles de temps de l'ordre de la picoseconde. Par ailleurs, sous l'effet des recombinaisons Auger, la densité d'électrons évolue de la façon suivante [109] :  $\frac{\partial}{\partial t} n_e = \alpha^{Auger} n_e^3$ , où  $\alpha^{Auger}$  est le coefficient de recombinaison Auger en  $\text{cm}^6/\text{s}$ .

À défaut de donnée pour un diélectrique à grand gap, nous prenons les valeurs du silicium ( $\alpha^{Auger} = 3.8 \times 10^{-31} \text{ cm}^6/\text{s}$  [109]) pour estimer le nombre de paires électrons/trous recombines.

Dans un plasma avec une densité  $n_e \simeq 1.3 \times 10^{21} \text{ cm}^{-3}$  (densité estimée dans la section 2.2.2), le terme de recombinaison est évalué :  $\alpha^{Auger} n_e^3 = 8.3 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}\text{fs}^{-1}$ . Ainsi, les variations de densité sur 100 fs (typiquement la valeur de la durée d'impulsion) seront inférieures à  $10^{20} \text{ cm}^{-3}$ . Dans notre description fluide, nous négligerons en première approximation ce type de mécanisme, puisqu'il semble influencer peu sur les échelles femtosecondes. Nous l'avons cependant inclus dans notre code pour effectuer d'éventuels calculs, et l'expression du terme source associé est donnée dans l'annexe A.

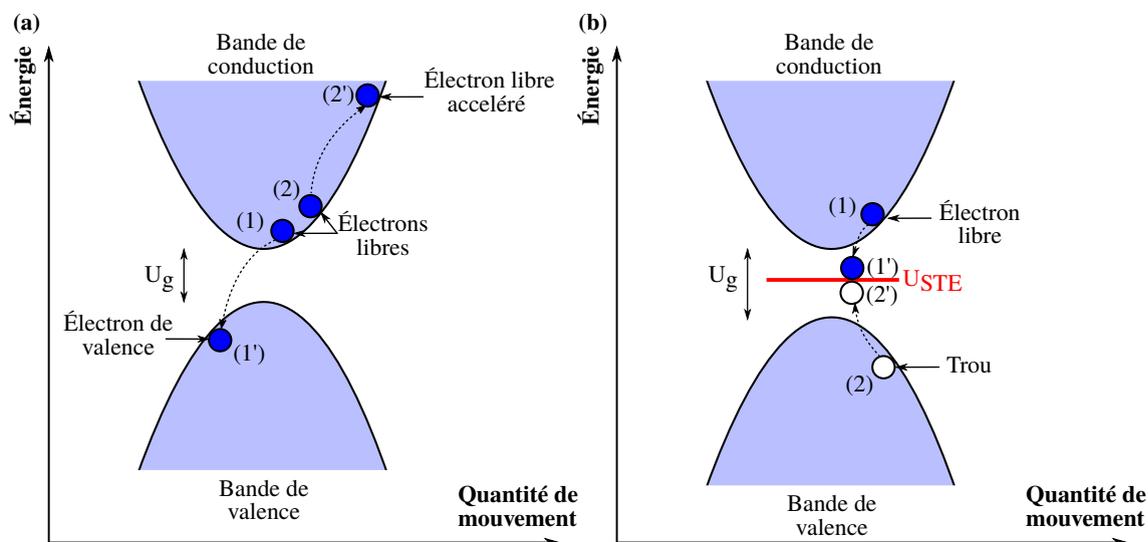


FIGURE 3.6 – (a) Schématisation d'une recombinaison Auger. Un électron (1) transmet une partie de son énergie et de sa quantité de mouvement à un autre électron (2) de la bande de conduction. L'électron (2) est alors accéléré et passe dans l'état (2'), alors que l'électron (1) retombe dans la bande de valence à l'état (1'), et occupe ainsi une place précédemment vacante (la place d'un trou). (b) Schématisation de la génération d'un exciton auto-piégé. Un électron de conduction (1) et un trou (2) se lient à travers l'interaction coulombienne et se piègent au voisinage d'une impureté ou un défaut du diélectrique.

Pour terminer, dans N. M. Bulgakova *et al.* [123], le terme de recombinaison est mis sous

une forme générale à travers l'équation  $\frac{\partial}{\partial t}n_e = -\nu_r n_e$ , où  $\nu_r$  est le taux de recombinaison. Ce terme décrit alors principalement les phénomènes de piégeage (excitons auto-piégés) plutôt que les processus de recombinaison à trois corps comme l'effet Auger [123].

### 3.4.2 Les excitons auto-piégés

Le deuxième mécanisme de recombinaison qui peut avoir une importance sur des échelles femtoseconde est la formation d'excitons auto-piégés (Self-Trapped Exciton (STE) en anglais).

La génération d'exciton auto-piégé est un mécanisme de recombinaison non-radiative dans lequel un électron de conduction et un trou se lient à travers l'interaction coulombienne et se piègent dans une impureté ou un défaut du matériau (voir figure 3.6(b)). Dans certains diélectriques, la formation d'exciton auto-piégé à partir d'une paire électron-trou est énergiquement favorable [124], comme c'est le cas dans la silice fondue [50, 125]. Par ailleurs, les excitons auto-piégés formés peuvent être à nouveau ionisés par le champ laser ou par ionisation impact [30]. Dans le but d'éviter d'alourdir le modèle fluide, nous négligerons l'effet des STEs en étudiant des matériaux diélectriques où ces effets sont insignifiants aux dynamiques sub-picosecondes (comme par exemple le saphir et l'oxyde de magnésium [51, 126]). Nous avons cependant inclus ce processus dans notre code là aussi en vue de développements futurs, et l'expression du terme source associé est donnée dans l'annexe B.

## 3.5 Synthèse du chapitre 3

Au cours de ce troisième chapitre, nous avons explicité le terme collisionnel du système d'équations fluide (2.67). Ce système permet de décrire l'évolution spatio-temporelle d'un plasma d'électrons/trous généré au sein d'un diélectrique par un champ laser. Il tient en compte du transport, de la photoionisation, de l'ionisation par impact, des collisions électron/trou, des collisions porteurs/phonons et de l'effet de Bremsstrahlung inverse.

Les équations d'évolution décrivant la dynamique du plasma d'électrons et de trous au coeur d'un diélectrique de permittivité relative  $\epsilon_r$  sont :

$$\frac{\partial}{\partial t} \begin{bmatrix} n_e \\ n_e \mathbf{u}_e \\ \epsilon_e \\ n_h \\ n_h \mathbf{u}_h \\ \epsilon_h \end{bmatrix} + \nabla \cdot \begin{bmatrix} n_e \mathbf{u}_e \\ n_e \mathbf{u}_e \otimes \mathbf{u}_e + \frac{p_e}{m_e^*} \mathbf{I} \\ (\epsilon_e + p_e) \mathbf{u}_e \\ n_h \mathbf{u}_h \\ n_h \mathbf{u}_h \otimes \mathbf{u}_h + \frac{p_h}{m_h^*} \mathbf{I} \\ (\epsilon_h + p_h) \mathbf{u}_h \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ \frac{n_e q_e}{m_e^*} (\mathbf{E} + \mathbf{u}_e \times \mathbf{B}) \\ n_e q_e \mathbf{u}_e \cdot \mathbf{E} \\ 0 \\ \frac{n_h q_h}{m_h^*} (\mathbf{E} + \mathbf{u}_h \times \mathbf{B}) \\ n_h q_h \mathbf{u}_h \cdot \mathbf{E} \end{bmatrix} + \mathbf{S}^{\text{Coll}} \quad (3.25)$$

où pour chacune des espèces  $s$ , la densité d'énergie interne s'écrit :

$$\epsilon_s \equiv \frac{p_s}{\gamma - 1} + \frac{1}{2} n_s m_s^* \mathbf{u}_s^2 \quad (3.26)$$

D'après les équations (3.1), (3.2), (3.4), (3.5), (3.9), (3.16) et (3.18), le terme collisionnel

s'écrit de la façon suivante :

$$\mathbf{S}^{\text{Coll}} = \begin{bmatrix} \frac{n_{ev}}{n_0} \alpha^e n_e + \frac{n_{ev}}{n_0} \alpha^h n_h + \frac{n_{ev}}{n_0} \alpha^{\text{Ph}} \\ -n_e \nu_{eh} \frac{\mu}{m_e^*} (\mathbf{u}_e - \mathbf{u}_h) - \frac{n_e}{m_e^*} (\nu_{bie} + \nu_{ep}) \mathbf{u}_e \\ -\kappa \nu_{eh} \left[ \frac{p_e}{\gamma-1} - \frac{n_e}{n_h} \frac{p_h}{\gamma-1} + \frac{n_e}{2} (m_e^* \mathbf{u}_e^2 - m_h^* \mathbf{u}_h^2 + (m_h^* - m_e^*) \mathbf{u}_e \cdot \mathbf{u}_h) \right] - \frac{n_{ev}}{n_0} n_e \alpha^e U_g \\ \frac{n_{ev}}{n_0} \alpha^e n_e + \frac{n_{ev}}{n_0} \alpha^h n_h + \frac{n_{ev}}{n_0} \alpha^{\text{Ph}} \\ n_e \nu_{eh} \frac{\mu}{m_h^*} (\mathbf{u}_e - \mathbf{u}_h) - \frac{n_h}{m_h^*} (\nu_{bih} + \nu_{hp}) \mathbf{u}_h \\ +\kappa \nu_{eh} \left[ \frac{p_e}{\gamma-1} - \frac{n_e}{n_h} \frac{p_h}{\gamma-1} + \frac{n_e}{2} (m_e^* \mathbf{u}_e^2 - m_h^* \mathbf{u}_h^2 + (m_h^* - m_e^*) \mathbf{u}_e \cdot \mathbf{u}_h) \right] - \frac{n_{ev}}{n_0} n_h \alpha^h U_g \end{bmatrix} \quad (3.27)$$

D'après les équation (3.10), (3.17) et (3.19), la densité d'électron de valence disponible évolue de la façon suivante :

$$\frac{\partial}{\partial t} n_{ev} = -\frac{n_{ev}}{n_0} \alpha^e n_e - \frac{n_{ev}}{n_0} \alpha^h n_h - \frac{n_{ev}}{n_0} \alpha^{\text{Ph}} \quad (3.28)$$

Les champs électromagnétiques apparaissant dans des équations fluides (3.25) sont calculés à partir des équations de Maxwell :

$$\nabla \cdot \epsilon_r \mathbf{E} = \frac{\rho}{\epsilon_0} \quad (3.29)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0 \quad (3.30)$$

$$\nabla \times \mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} \quad (3.31)$$

$$\nabla \times \mathbf{B} = \mu_0 \mathbf{J} + \frac{1}{c^2} \frac{\partial \epsilon_r \mathbf{E}}{\partial t} \quad (3.32)$$

Les densités totales de charge  $\rho$  et de courant  $\mathbf{J}$  sont calculées avec les 2 équations suivantes :

$$\rho = q_e n_e + q_h n_h \quad (3.33)$$

$$\mathbf{J} = q_e n_e \mathbf{u}_e + q_h n_h \mathbf{u}_h + \frac{n_{ev}}{n_0} \frac{\alpha^{\text{Ph}} U_g}{\mathbf{E}^2} \mathbf{E} \quad (3.34)$$

où le terme  $\frac{n_{ev}}{n_0} \frac{\alpha^{\text{Ph}} U_g}{\mathbf{E}^2} \mathbf{E}$  correspond au courant fictif de photoionisation de l'équation (3.21).



# RÉSOLUTION NUMÉRIQUE DU SYSTÈME D'ÉQUATIONS

*La simplicité est la sophistication suprême.*

---

- LÉONARD DE VINCI

Le chapitre précédent s'est terminé en récapitulant le système d'équations que nous souhaitons résoudre pour modéliser l'interaction Bessel/diélectrique. Au vue de la complexité mathématique du système d'équations, il n'est bien sûr pas envisageable de faire une résolution analytique des équations. Nous avons donc besoin d'une méthode numérique pour résoudre le système d'équations : c'est l'objet de ce quatrième chapitre.

Dans les différentes sections de ce chapitre, nous allons faire un état de l'art sur la résolution numérique du modèle plasma à deux fluides, pour ensuite justifier le choix du développement d'une nouvelle méthode. Nous donnerons à posteriori une vue d'ensemble de l'algorithme développé, avant de rentrer dans les détails sur les différentes méthodes numériques composant l'algorithme. Nous donnerons à la fin de ce chapitre une seconde version de l'algorithme numérique, qui a l'avantage d'être plus précise et plus simple à implémenter.

## 4.1 État de l'art sur la résolution numérique du modèle plasma à deux fluides

La difficulté en matière de résolution de ce type de système d'équations est due à la différence importante entre la vitesse du son caractéristique des systèmes fluides et la vitesse de la lumière [127]. De ce fait, les méthodes numériques permettant de résoudre le modèle de plasma à deux fluides avec une stabilité vérifiée sont peu nombreuses [127]. Le premier code résolvant les équations du modèle plasma à deux fluides est le code ANTHEM datant de 1986 [128, 129]. Il a été utilisé pour simuler des phénomènes rapides dans des plasmas à haute densité : l'étude de ces phénomènes était inaccessible avec des codes Particles-In-Cell (PIC) [130]. Le code ANTHEM est basé sur un schéma *flux corrected transport*<sup>1</sup> (FCT) pour la résolution des équations fluides et sur une méthode de type *Finite Time Domain Method* (FDTD) [131] pour l'évolution des champs électriques et magnétiques. Le code est écrit pour des systèmes 2D et est difficile à étendre à des géométries particulières à cause des grilles décalées de la FDTD [130].

---

1. Ce schéma est particulièrement utile pour les problèmes impliquant des chocs. Il implique deux étapes : une étape de transport et une étape d'anti-diffusion pour réduire les artefacts numériques.

Plus récemment, en 2003, U. Shumlak et J. Loverich [132] ont présenté un code basé sur un solveur de Riemann pour les équations fluides (solveur de Roe [133]) et sur la mise en forme des équations de Maxwell sous forme parfaitement hyperbolique<sup>2</sup>. L'intégration temporelle est faite en traitant le terme source des équations fluides implicitement et le terme de transport explicitement. Ce code nécessite l'introduction de potentiels correcteurs dans le but de conserver les propriétés de divergence des champs  $\mathbf{E}$  et  $\mathbf{B}$  [104]. Des termes correcteurs ont également été ajoutés de façon à augmenter la précision de l'algorithme pour les problèmes à dimensions multiples. Le même groupe a amélioré l'algorithme à posteriori en utilisant la méthode de Galerkin discontinue d'ordre élevé afin d'améliorer la précision des résultats [130, 134, 135, 136]. Il peut être maintenant généralisé à des géométries arbitraires et à un ordre de précision arbitraire, ce qui aide à capturer les instabilités plasmas [130].

Le code complet a été développé par le *Computational Plasma Dynamics Laboratory* de l'université de Washington et a pour but d'observer des effets à deux fluides inaccessibles avec un modèle de magnétohydrodynamique. Le code se nomme WARP (Washington Approximate Riemann Plasma).

Par ailleurs, M. Rieke *et al.* [137] présentent une méthode numérique mixant spatialement la résolution de l'équation de Vlasov et la résolution des équations du modèle plasma à deux fluides. Cette méthode, qui va plus loin que ce qu'on souhaite modéliser, a l'avantage de pouvoir utiliser l'approche statistique (plus précise) dans certaines régions de l'espace, et l'approche fluide dans des régions de l'espace où l'hypothèse d'équilibre thermodynamique local est justifiable. M. Rieke souligne au passage que les solveurs de Riemann sont les meilleurs solveurs pour les problèmes chocs, mais qu'ils sont généralement très difficiles à implémenter [138]. L'algorithme de M. Rieke *et al.* [137] utilise alors comme alternative un schéma CWENO (Central Weighted Essentially Non-Oscillatory<sup>3</sup>) pour intégrer les équations fluides et une méthode FDTD pour l'intégration des équations de Maxwell.

D'autres approches ont été développées avec des méthodes de différences finies : S. Baboobal *et al.* ont présenté une méthode numérique 1D pour la simulation de chocs et de solitons [139]. Par ailleurs, H. Kumar *et al.* ont développé un schéma avec des opérateurs de diffusion numérique adaptés pour la conservation d'entropie [140]. Cependant, le solveur de S. Baboobal *et al.* est limité au cas 1D et le solveur de H. Kumar *et al.* nécessite des méthodes de différences finies lourdes pour éviter la dissipation de l'entropie dans les problèmes avec des chocs.

Plus récemment, en 2018, A. Alvarez Laguna *et al.* [141] ont développé un solveur basé sur une méthode de volume fini implicite avec maillages non-structurés pour la résolution des équations fluides, ainsi que sur une version modifiée du schéma de Rusanov [142] pour les équations de Maxwell. Cependant, ce solveur repose sur des méthodes mathématiques complexes nécessitant des compétences spécialisées importantes.

---

2. Perfectly hyperbolic Maxwell equations (PHM) en anglais.

3. Le but de ce type de schéma est de préserver une précision élevée même au voisinage des discontinuités (par exemple des chocs) et d'éviter l'apparition d'oscillations non-physiques dans la solution. La reconstruction des flux à l'interface s'effectue par interpolation polynomiale favorisant les zones où sur lesquelles la fonction est la plus régulière.

## 4.2 Choix du développement d'un nouvel algorithme

La complexité des méthodes numériques utilisées dans l'état de l'art est en partie liée au fait que les algorithmes ont été développés pour résoudre avec un haut degré de précision les chocs. Ces codes répondent notamment à des problèmes exigeants comme la fusion nucléaire ou l'astrophysique dans lesquels des chocs plasmas sont souvent observés [143]. La validation de tels codes est souvent réalisée avec des problèmes tests complexes comme celui du choc de Brio et Wu [144]. L'objectif de ce test est de s'assurer que le code représente correctement certaines structures complexes de la magnétohydrodynamique.

Nous avons choisi de développer un nouvel algorithme adapté aux besoins des simulations Bessel/diélectrique. L'algorithme que nous souhaitons développer est moins sophistiqué que ceux énoncés dans la section 4.1, mais il a pour but de répondre à nos besoins, d'être relativement simple à implémenter, et d'être flexible pour l'ajout de phénomènes physiques supplémentaires. Il se doit notamment d'être robuste pour des phénomènes comme l'absorption résonnante, la force pondéromotrice ou encore les collisions.

## 4.3 Vue d'ensemble du code numérique PSTD/Hydro

Dans la section précédente, nous avons souligné l'intérêt de développer une nouvelle méthode numérique pour résoudre le système d'équations (3.25). L'algorithme développé dans le cadre de cette thèse est résumé sur la figure 4.1.

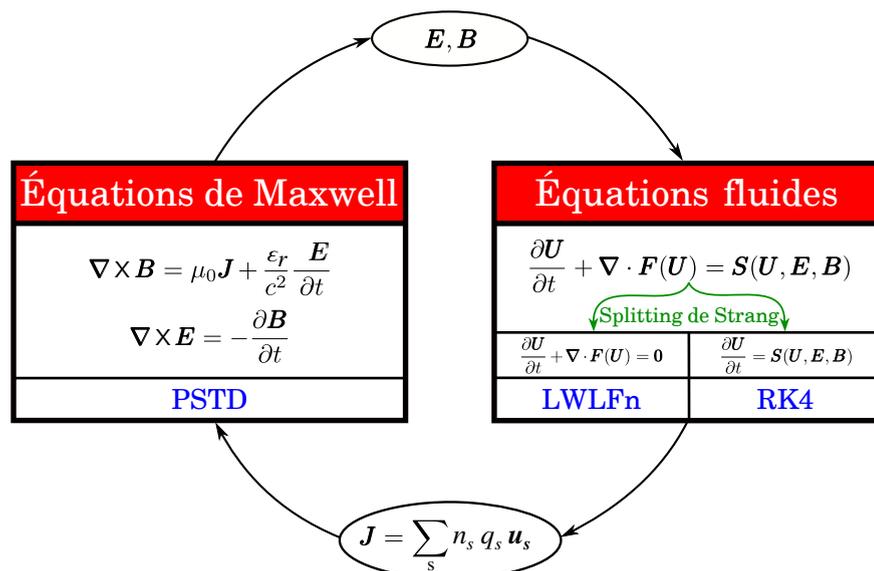


FIGURE 4.1 – Vue générale de l'algorithme.

Les équations de Maxwell sont résolues en utilisant une méthode du type *PseudoSpectral Time-Domain* (PSTD). Les champs électromagnétiques sont ensuite utilisés pour calculer

le terme source des équations fluides. Les équations fluides sont intégrées à partir de la technique du *splitting de Strang* [145] qui permet de séparer l'intégration numérique du terme source et du terme homogène des équations fluides. Au sein du *splitting de Strang*, le terme homogène est intégré avec un schéma composite LWLFn [146] (détaillé dans le paragraphe 4.4.3), alors que le terme source est intégré avec un schéma de Runge-Kutta du 4<sup>ème</sup> ordre (RK4) [147]. Une fois les équations fluides intégrées, la densité de courant est calculée, puis est utilisée comme terme source dans les équations de Maxwell. Les champs électromagnétiques ( $\mathbf{E}, \mathbf{B}$ ) sont alors à nouveau calculés, etc... L'algorithme numérique est basé sur le même principe que la boucle de rétro-action de la figure 2.1.

Dans les prochaines sections, nous allons détailler les schémas LWLFn, RK4 et la méthode PSTD composant l'algorithme global. Nous discuterons au passage des artefacts numériques, des raisons pour lesquelles ces schémas ont été choisis, et des conditions de stabilité.

## 4.4 Résolution des équations fluides

Cette section porte sur la résolution numérique des équations fluides 3D.

### 4.4.1 La forme conservative des équations fluides

Dans les chapitres 2 et 3, nous avons volontairement écrit les équations fluides sous forme conservative, c'est-à-dire sous la forme :

$$\frac{\partial}{\partial t} \text{Quantité conservée} + \nabla \cdot \text{Flux} = \text{Source} \quad (4.1)$$

Dans la littérature, les équations fluides sont pourtant souvent écrites sous forme non-conservative [84, 92]. La forme conservative souligne le fait que les densités de particule, de quantité de mouvement et d'énergie sont conservées. Elle présente de nombreux avantages quant à la résolution numérique des équations (notamment en termes de propagation d'erreurs numériques) ce qui a conduit à l'existence de nombreuses méthodes [148], comme celle du schéma LWLFn que nous présenterons dans le paragraphe 4.4.3.

### 4.4.2 Splitting de Strang

L'intégration numérique du terme source  $\mathbf{S}(\mathbf{U}, \mathbf{E}, \mathbf{B})$  dans les équations fluides est un défi sérieux [148]. Pour résoudre ce problème, la méthode la plus largement utilisée est la méthode du *splitting* qui sépare le système d'équations en deux sous-systèmes : un système homogène (équation (4.2)) et un système source (équation (4.3)).

$$\frac{\partial}{\partial t} \mathbf{U} + \nabla \cdot [\mathbf{F}(\mathbf{U})] = \mathbf{0} \quad (4.2)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \mathbf{U} = \mathbf{S}(\mathbf{U}, \mathbf{E}, \mathbf{B}) \quad (4.3)$$

Comme décrit sur la figure 4.1, les deux systèmes sont intégrés séparément. Le système d'équations (4.2) est un système d'équations aux dérivées partielles hyperboliques alors

que le système (4.3) est un système d'équations différentielles ordinaires. Nous avons choisi d'intégrer le système d'équations aux dérivées partielles avec un schéma LWLFn, et le système d'équations différentielles ordinaires avec un schéma RK4.

Dans notre algorithme, nous nous sommes inspirés de la méthode utilisée dans le code WARP [132], c'est-à-dire l'emploi d'un *splitting de Strang* pour séparer l'intégration du terme homogène et du terme source. Ce *splitting* est précis à l'ordre 2 [145]. L'idée du *splitting de Strang* est de décomposer l'intégration des équations fluides en 3 étapes :

- Intégration du système source (4.3) sur un demi-pas temporel  $\Delta t/2$ .
- Intégration du système homogène (4.2) sur un pas temporel  $\Delta t$ .
- Seconde intégration du système source (4.3) sur un demi-pas temporel  $\Delta t/2$ .

Dans les prochaines sections, nous allons rentrer dans les détails concernant l'intégration numérique du système homogène (4.2), puis celle du système source (4.3).

### 4.4.3 Intégration numérique du système homogène

#### 4.4.3.1 Choix d'un schéma composite

Nous abordons dans cette section l'intégration numérique de la partie homogène du système d'équations (4.2). La partie homogène se présente sous la forme des équations d'Euler, qui se décompose en un système d'équations pour les électrons et un système pour les trous.

Les équations d'Euler représentent un système d'équations aux dérivées partielles hyperboliques non-linéaires. De nombreuses méthodes discutées dans ce manuscrit sont détaillées dans les ouvrages *Finite Volume Methods for Hyperbolic Problems* [149] de R. J. Leveque et *Riemann Solvers and Numerical Methods for Fluid* de E. F. Toro [148]. Les solveurs de Riemann sont particulièrement adaptés pour résoudre les équations d'Euler. Cependant, les solveurs de Riemann permettant de résoudre les systèmes d'équations aux dérivées partielles hyperboliques non-linéaires sont souvent complexes [150]. Nous allons tenter d'utiliser une autre alternative plus simple et qui réponde à nos besoins.

Des solveurs plus simples sont souvent utilisés pour des problèmes hyperboliques moins complexes que les équations d'Euler. Des améliorations concernant ces solveurs ont permis de les étendre au cas des systèmes d'équations hyperboliques non-linéaires et multidimensionnelles.

Par exemple, les schémas aux différences finies de Lax-Friedrichs [151] et de Lax-Wendroff [152] sont des schémas qui permettent de résoudre facilement des problèmes basiques. Cependant, il est bien connu que le schéma de Lax-Friedrichs est diffusif, ce qui engendre un amortissement des chocs plus qu'il n'est souvent acceptable [146], alors que le schéma de Lax-Wendroff est dispersif, ce qui produit des oscillations derrière les chocs. Le schéma de Lax-Friedrichs est précis à l'ordre 1 et introduit de la diffusion numérique<sup>4</sup>, tandis que le schéma de Lax-Wendroff est précis à l'ordre 2 et introduit de la dispersion numérique (nom du phénomène à l'origine des oscillations indésirées derrière les chocs.). L'étude des artefacts numériques de ces deux schémas a fortement influencé le développement de nouvelles méthodes numériques [153].

---

4. Souvent appelée aussi dissipation numérique.

J. Von Neumann, P. Lax and B. Wendroff ont introduit des termes de viscosité artificielle pour vaincre les oscillations générées derrière les chocs par la dispersion numérique [154]. Cependant le choix du bon terme de viscosité est un problème difficile [155], "*qui relève plus d'un art que d'une science*" (R. Liska et B. Wendroff[156]).

De façon analogue, des termes ont été proposés pour vaincre la diffusion numérique engendrée par le schéma de Lax-Friedrichs au niveau des chocs [157]. Bien que cette méthode donne des bons résultats au niveau des chocs, elle introduit une sévère distorsion dans les régions où le profil est doux [156].

En 1972, A. Harten et G. Zwas ont proposé un schéma hybride dans lequel un schéma d'ordre 1 (par exemple Lax-Friedrichs) est utilisé au niveau des chocs et où un schéma d'ordre 2 (par exemple Lax-Wendroff) est utilisé au niveau des régions où le profil est plus doux<sup>5</sup> [158]. Ils introduisirent alors le concept de *commutateur automatique* qui permet de passer d'un schéma à un autre, en se basant sur un limiteur permettant d'estimer les gradients dans chaque région de l'espace. Cette technique conduit à des résultats numériques de meilleure qualité. Cependant, les schémas hybrides deviennent rapidement gourmands en temps de calcul et complexes à implémenter lors de problèmes en 3 dimensions (voir la partie 4.2 de Kucharik *et al.* [159]).

En 1998, R. Liska and B. Wendroff ont introduit la notion de schéma composite [156] en s'inspirant des travaux de Len Margolin sur des codes en météorologie [160]. Cette fois-ci, au lieu de changer de schéma numérique dans l'espace, l'alternance se fait temporellement. Les schémas composites consistent à réaliser plusieurs étapes temporelles avec un schéma dispersif suivies d'une étape avec un schéma diffusif. Cette approche ne nécessite pas de limiteur, est facile à implémenter, précise, robuste et stable [160]. La référence [146] de R. Liska *et al.* se termine par la déclaration suivante :

*"The composite schemes are simple, require neither eigenvector decomposition nor Riemann solvers, and thus they are fast. They work well for a variety of problems, so it seems that they are also robust. To conclude we do not claim that the composite schemes are the best ones, however they are simple, fast, work remarkably well for many problems and can provide a very simple way to get a feeling for the solution of a problem before investing a lot of time in developing a more elaborate method."*

Les schémas composites semblent donc bien s'inscrire dans nos objectifs. D'après T. R. Hagen *et al.* [161], les schémas composites sont probablement les schémas haute résolution les plus simples possibles. La généralisation des schémas composites en 3D est relativement simple [159] et constitue donc un autre point positif.

Nous allons donc choisir un schéma composite LWLFn [156] pour intégrer le système d'équations homogènes (4.2). Ce schéma consiste en  $(n - 1)$  applications temporelles du schéma de Lax-Wendroff à deux étapes ( $LW_2$ ) suivies d'une application du schéma de

---

5. Le schéma de Lax-Wendroff est plus précis que le schéma de Lax-Friedrichs, il doit donc utiliser partout à l'exception des régions avec des forts gradients pour éviter de produire des oscillations indésirées.

Lax-Friedrichs à deux étapes<sup>6</sup> (LF<sub>2</sub>) [156]. Les schémas LF<sub>2</sub> et LW<sub>2</sub> seront décrit respectivement dans les sections 4.4.3.4 et 4.4.3.5. Un exemple de schéma composite avec  $n = 5$  est illustré sur la figure 4.2 : dans le schéma composite LWLF5, 4 pas temporels sont effectués avec un schéma de LW<sub>2</sub>, suivis d'un pas temporel du schéma LF<sub>2</sub>.

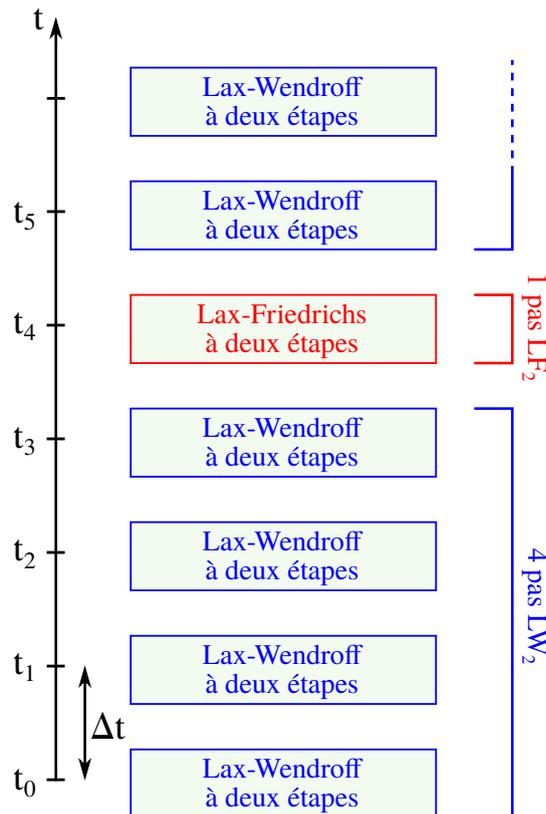


FIGURE 4.2 – Schéma composite LWLF5 : 4 pas temporels sont effectués avec le schéma LW<sub>2</sub>, suivis d'un pas temporel avec le schéma LF<sub>2</sub>.

Le concept de cette méthode numérique est la suivante : le schéma LF<sub>2</sub> étant diffusif, et le schéma LW<sub>2</sub> étant dispersif, l'alternance temporelle des deux est un moyen de surmonter leurs artefacts numériques. La diffusion numérique du schéma LF<sub>2</sub> agit comme un filtre réduisant la dispersion numérique générée par le schéma LW<sub>2</sub> [156].

Le paramètre  $n$  peut être adapté en fonction du problème. Si la solution numérique contient des forts gradients, il est mieux d'utiliser un nombre  $n$  petit (LWLF4 par exemple). D'autre part, si la solution ne présente pas de forts gradients, il est mieux d'utiliser uniquement un schéma LW<sub>2</sub> parce qu'il est plus précis que le schéma LF<sub>2</sub>. Quand la solution physique est complètement inconnue, il est préférable de commencer les simulations numériques avec un nombre  $n$  faible puis de l'augmenter progressivement. Le schéma composite LWLF $n$  offre des possibilités plus intéressantes que les schémas LF<sub>2</sub> et LW<sub>2</sub> seuls, sans pour autant augmenter la complexité d'implémentation.

6. *Two-step Lax-Wendroff* et *Two-step Lax-Friedrichs* en anglais. Le schéma de Lax-Wendroff à deux étapes (resp. Lax-Friedrichs à deux étapes) est une variante du schéma de Lax-Wendroff "classique" (resp. Lax-Friedrichs "classique"). Nous discuterons de la différence avec le schéma de Lax-Wendroff (resp. Lax-Friedrichs) classique plus tard.

#### 4.4.3.2 Visualisation des effets numériques des schémas

Nous allons maintenant visualiser graphiquement les effets de la diffusion numérique et de la dispersion numérique, de façon à mieux comprendre les intérêts du schéma composite LWLF<sub>n</sub>.

Le test choc de Sod [162] est un test commun pour tester la précision des codes fluides, dans lequel l'état initial est une boîte avec à gauche un gaz dense sous pression et à droite un gaz peu dense à faible pression. L'évolution spatio-temporelle du problème est décrite en résolvant les équations d'Euler de la physique des fluides. Sans rentrer dans les détails sur les conditions initiales, les conditions aux limites ou encore l'échantillonnage, nous allons utiliser ce test pour montrer les artefacts numériques des différents schémas. Ce problème présente une solution analytique (courbes noires sur la figure 4.3) composée de chocs, discontinuités de contact et d'ondes de raréfaction [148].

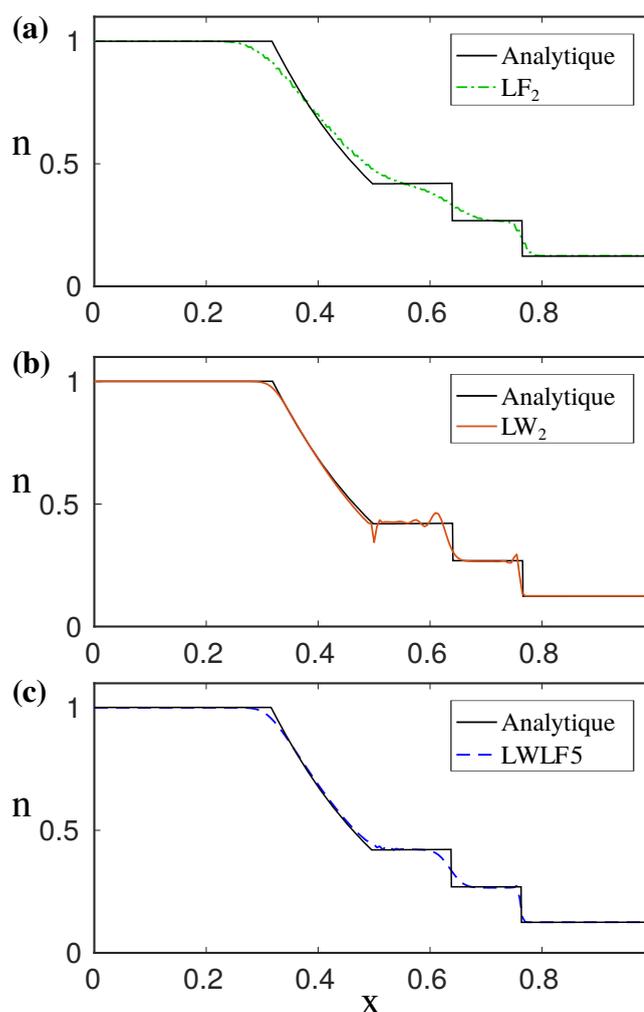


FIGURE 4.3 – Comparaison des résultats obtenus avec le schéma LF<sub>2</sub> (a), le schéma LW<sub>2</sub> (b), et un schéma composite LWLF<sub>5</sub> (c). L'effet de la diffusion numérique qui adouci les gradients est visible sur la figure (a) alors que l'effet de la dispersion numérique qui engendre des oscillations est visible sur la figure (b). La solution numérique du schéma composite LWLF<sub>5</sub> est de meilleure qualité (c).

Un test numérique a été effectué avec le schéma LF<sub>2</sub>. Les résultats numériques en

termes de densité sont affichés sur la figure 4.3(a) en fin de simulation. En comparant la solution analytique (courbe noire) et la solution numérique (courbe verte), nous pouvons voir les effets de la diffusion numérique qui engendre un adoucissement du profil spatial. Par ailleurs, les résultats du test avec un schéma  $LW_2$  (figure 4.3(b)) montrent les effets de la dispersion numérique engendrant des oscillations dans les régions à fort gradient (courbe rouge). Bien que le reste de la solution soit relativement précis, puisque ce schéma est précis à l'ordre 2, ces oscillations ont tendance à s'amplifier dans le temps et provoquer la divergence de la solution numérique.

Finalement, les résultats d'un test avec un schéma composite  $LWLF5$  (figure 4.3(c)) montrent un amortissement des oscillations engendrées par le schéma  $LW_2$ . Comme énoncé précédemment, elles ont été filtrées par la diffusion numérique du schéma  $LF_2$ . La solution numérique est donc de meilleure qualité avec le schéma composite  $LWLF5$  plutôt qu'avec le schéma  $LF_2$  ou encore  $LW_2$ .

### 4.4.3.3 Le schéma de Lax-Friedrichs classique

Avant d'aborder les schémas  $LF_2$  et  $LW_2$ , nous allons détailler le schéma de Lax-Friedrichs classique. Ce dernier est une brique élémentaire permettant la construction des schémas  $LF_2$  et le schéma  $LW_2$ .

Commençons par écrire de façon générale un système d'équations hyperboliques homogènes 1D :

$$\frac{\partial}{\partial t} \mathbf{U} + \frac{\partial}{\partial x} \mathbf{F}(\mathbf{U}) = \mathbf{0} \quad (4.4)$$

Pour construire un schéma numérique de différences finies, il suffit de remplacer les dérivées partielles dans le système (4.4) par des différences finies (différences finies aval<sup>7</sup>, amont<sup>8</sup> ou centrée<sup>9</sup>). Par exemple, le schéma de Lax-Friedrichs classique se construit en prenant une différence aval en temps, une différence centrée en espace et en remplaçant le terme  $\mathbf{U}_j^n$  par sa moyenne spatiale  $\frac{\mathbf{U}_{j+1}^n + \mathbf{U}_{j-1}^n}{2}$ . Le schéma de Lax-Friedrichs classique s'écrit alors sous la forme suivante [163] :

$$\boxed{\mathbf{U}_j^{n+1} = \frac{1}{2} [\mathbf{U}_{j+1}^n + \mathbf{U}_{j-1}^n] - \frac{\Delta t}{2\Delta x} [\mathbf{F}_{j+1}^n - \mathbf{F}_{j-1}^n]} \quad (4.8)$$

où  $\mathbf{F}_{j+1}^n \equiv \mathbf{F}(\mathbf{U}_{j+1}^n)$ ,  $\mathbf{F}_{j-1}^n \equiv \mathbf{F}(\mathbf{U}_{j-1}^n)$ ,  $j$  est l'indice discret correspondant à la position dans la direction  $x$ ,  $n$  est l'indice discret temporel et  $\Delta t$  est le pas temporel. Le schéma de Lax-Friedrichs classique est précis au premier ordre en temps et en espace [164].

7.

$$\frac{\partial}{\partial x} f(x) \approx \frac{f(x + \Delta x) - f(x)}{\Delta x} + \mathcal{O}(\Delta x) \quad (4.5)$$

8.

$$\frac{\partial}{\partial x} f(x) \approx \frac{f(x) - f(x - \Delta x)}{\Delta x} + \mathcal{O}(\Delta x) \quad (4.6)$$

9.

$$\frac{\partial}{\partial x} f(x) \approx \frac{f(x + \Delta x) - f(x - \Delta x)}{2\Delta x} + \mathcal{O}(\Delta x^2) \quad (4.7)$$

La grille numérique du schéma de Lax-Friedrichs classique est représentée sur la figure 4.4.

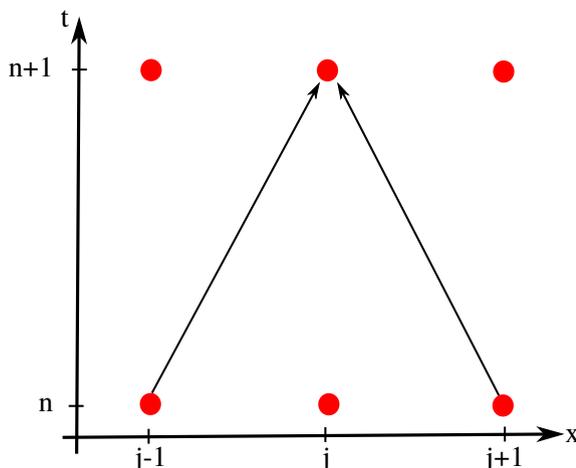


FIGURE 4.4 – Grille numérique dans le schéma de Lax-Friedrichs classique 1D. Les points  $\mathbf{U}_j^n$ ,  $\mathbf{U}_{j-1}^n$  et  $\mathbf{U}_{j+1}^n$  sont nécessaires pour le calcul de  $\mathbf{U}_j^{n+1}$ .

Les artefacts numériques induits par le schéma de Lax-Friedrichs classique (4.8) lors de la résolution d'une équation aux dérivées partielles hyperbolique proviennent de la troncature du terme  $\mathcal{O}(\Delta x)$  dans les différences finies (voir équations (4.5), (4.6) et (4.7)). Examinons, à titre illustratif, les conséquences de ces troncatures sur le schéma de Lax-Friedrichs classique appliqué à une simple équation aux dérivées partielles hyperbolique linéaire scalaire. Cette équation hyperbolique, dite d'advection, s'écrit de la façon suivante :

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho + v \frac{\partial}{\partial x} \rho = 0 \quad (4.9)$$

où  $v$  est la vitesse de transport, choisie comme étant constante. La solution analytique de cette équation est  $\rho(x, t) = \rho_0(x - vt)$  qui traduit le déplacement spatial à la vitesse  $v$  du profil initial  $\rho_0(x)$ .

Lorsqu'on applique le schéma de Lax-Friedrichs classique (4.8) à l'équation (4.9), nous ne résolvons pas numériquement l'équation (4.9) mais en réalité une équation modifiée de la forme [165] :

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho + v \frac{\partial}{\partial x} \rho = \underbrace{\frac{1}{2} v \Delta x \left( 1 - \frac{v \Delta t}{\Delta x} \right) \frac{\partial^2}{\partial x^2} \rho}_{\text{Diffusion}} \quad (4.10)$$

Le membre de droite de l'équation précédente est directement lié aux troncatures propres aux différences finies<sup>10</sup>. La méthode pour la démonstration de cette équation modifiée est faite dans le chapitre *Convergence, Accuracy, and Stability* de R. J. Leveque [149]. Le terme en  $\frac{\partial^2}{\partial x^2} \rho$  induit de la diffusion dans le calcul numérique. L'équation (4.10) est une équation d'advection-diffusion. Ainsi, la solution numérique obtenue avec un schéma de Lax-Friedrichs classique sera celle de l'équation (4.10) et non celle de l'équation de départ (4.9).

10. En réalité, il y a d'autres termes du développement de Taylor dans l'équation modifiée, mais le terme qui est mis en évidence dans l'équation (4.10) est celui avec le poids le plus important.

D'après l'expression du membre de droite de l'équation modifiée (4.10), la diffusion sera d'autant plus forte que la pente sera élevée : c'est pour cela que le phénomène de diffusion numérique amortit principalement les chocs. Dans les régions où le profil est doux,  $\frac{\partial^2}{\partial x^2}\rho$  est faible, et dans ce cas l'équation modifiée est pratiquement égale à l'équation d'advection de départ (4.9).

Nous effectuons finalement quelques remarques sur l'effet du choix de l'échantillonnage en introduisant le nombre de Courant  $\xi \equiv \frac{v\Delta t}{\Delta x}$  :

- En choisissant judicieusement  $\Delta x$  et  $\Delta t$ , il est possible d'avoir  $\xi = 1$ , et donc d'annuler le terme de diffusion numérique dans l'équation (4.10) : nous résolvons alors numériquement précisément l'équation d'advection (4.9). Dans le cas d'un système d'équations, chaque équation peut avoir une vitesse d'advection  $v$  différente, il n'est donc pas possible d'annuler la diffusion numérique pour toutes les équations en même temps. De plus, la diffusion numérique sera d'autant plus importante si les vitesses associées aux diverses équations sont différentes.
- Dans le cas où  $\xi \neq 0$ , il est possible de réduire la diffusion numérique en diminuant le pas spatial  $\Delta x$ . Cela engendre par contre un temps de calcul plus important.

#### 4.4.3.4 Le schéma de Lax-Friedrichs à 2 étapes

Dans la section précédente, nous avons vu comment construire un schéma de Lax-Friedrichs classique, et nous avons mis en évidence l'origine des erreurs numériques de ce schéma.

Le schéma LF<sub>2</sub> amortit moins les basses et les moyennes fréquences que le schéma de Lax-Friedrichs classique, mais il amortit de façon plus significative les hautes fréquences [166, 167]. Le schéma LF<sub>2</sub> sera donc plus efficace que son homologue classique pour amortir les oscillations générées par la dispersion numérique du schéma LW<sub>2</sub>.

Le schéma de Lax-Friedrichs à deux étapes est composé d'une première demi-étape temporelle, appelée le *prédicteur*, effectuée avec schéma de Lax-Friedrichs classique :

$$\boxed{\mathbf{U}_{j+1/2}^{n+1/2} = \frac{1}{2} [\mathbf{U}_{j+1}^n + \mathbf{U}_j^n] - \frac{\Delta t}{2\Delta x} [\mathbf{F}_{j+1}^n - \mathbf{F}_j^n]} \quad (4.11)$$

$$\boxed{\mathbf{U}_{j-1/2}^{n+1/2} = \frac{1}{2} [\mathbf{U}_j^n + \mathbf{U}_{j-1}^n] - \frac{\Delta t}{2\Delta x} [\mathbf{F}_j^n - \mathbf{F}_{j-1}^n]} \quad (4.12)$$

La seconde demi-étape temporelle, appelée *correcteur*, est simplement une autre demi-étape du schéma de Lax-Friedrichs classique basée sur les estimations faites avec le prédicteur :

$$\boxed{\mathbf{U}_j^{n+1} = \frac{1}{2} [\mathbf{U}_{j-1/2}^{n+1/2} + \mathbf{U}_{j+1/2}^{n+1/2}] - \frac{\Delta t}{\Delta x} [\mathbf{F}_{j+1/2}^{n+1/2} - \mathbf{F}_{j-1/2}^{n+1/2}]} \quad (4.13)$$

où  $\mathbf{F}_{j+1/2}^{n+1/2} \equiv \mathbf{F}(\mathbf{U}_{j+1/2}^{n+1/2})$  et  $\mathbf{F}_{j-1/2}^{n+1/2} \equiv \mathbf{F}(\mathbf{U}_{j-1/2}^{n+1/2})$ . Les équations (4.11), (4.12) et (4.13) composent le schéma LF<sub>2</sub>.

La grille numérique du schéma LF<sub>2</sub> est représentée sur la figure 4.5.

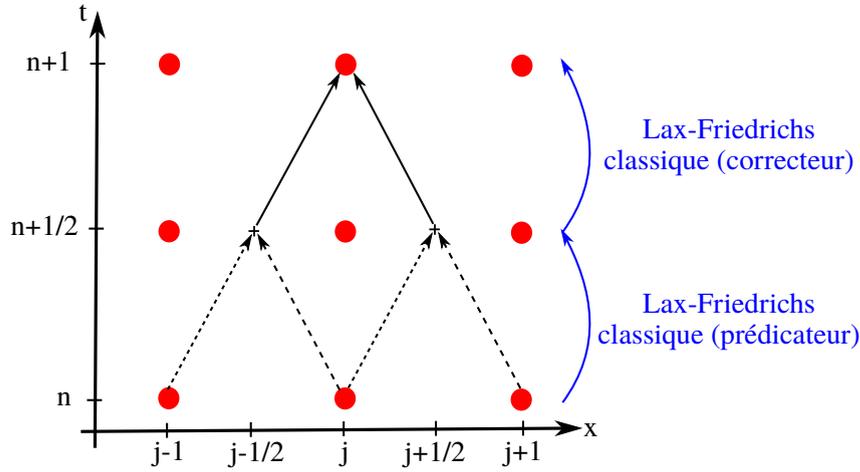


FIGURE 4.5 – Grille numérique dans le schéma LF<sub>2</sub> 1D.

Le schéma LF<sub>2</sub> peut s'étendre de façon simple pour les problèmes multidimensionnels avec la technique *symmetrized dimensionally-split scheme* (SYS) [159]. La technique SYS consiste à approximer successivement les solutions du système 3D comme étant la solution de 3 problèmes 1D :  $\frac{\partial}{\partial t} \mathbf{U} + \frac{\partial}{\partial x} \mathbf{F}_x(\mathbf{U}) = \mathbf{0}$ ,  $\frac{\partial}{\partial t} \mathbf{U} + \frac{\partial}{\partial y} \mathbf{F}_y(\mathbf{U}) = \mathbf{0}$  et  $\frac{\partial}{\partial t} \mathbf{U} + \frac{\partial}{\partial z} \mathbf{F}_z(\mathbf{U}) = \mathbf{0}$ .

Sa mise en oeuvre s'effectue de la manière suivante. Définissons  $L^x$  l'opérateur du schéma LF<sub>2</sub> selon  $x$  :

$$L^x(\mathbf{U}_{j,l,m}^n) = \frac{1}{2} \left[ \mathbf{U}_{j+1/2,l,m}^{n+1/2} + \mathbf{U}_{j-1/2,l,m}^{n+1/2} \right] - \frac{\Delta t}{\Delta x} \left[ \mathbf{F}_{x,j+1/2,l,m}^{n+1/2} - \mathbf{F}_{x,j-1/2,l,m}^{n+1/2} \right] \quad (4.14)$$

avec

$$\mathbf{U}_{j+1/2,l,m}^{n+1/2} = \frac{1}{2} \left[ \mathbf{U}_{j+1,l,m}^n + \mathbf{U}_{j,l,m}^n \right] - \frac{\Delta t}{2\Delta x} \left[ \mathbf{F}_{x,j+1,l,m}^n - \mathbf{F}_{x,j,l,m}^n \right] \quad (4.15)$$

$$\mathbf{U}_{j-1/2,l,m}^{n+1/2} = \frac{1}{2} \left[ \mathbf{U}_{j,l,m}^n + \mathbf{U}_{j-1,l,m}^n \right] - \frac{\Delta t}{2\Delta x} \left[ \mathbf{F}_{x,j,l,m}^n - \mathbf{F}_{x,j-1,l,m}^n \right] \quad (4.16)$$

où  $j$ ,  $l$  and  $m$  sont respectivement les indices pour les directions  $x$ ,  $y$  et  $z$ . De façon à alléger la notation, nous avons posé :  $\mathbf{F}_{x,j,l,m}^n \equiv \mathbf{F}_x(\mathbf{U}_{j,l,m}^n)$ .

Nous définissons de manières similaires  $L^y$  et  $L^z$  les opérateurs du schéma LF<sub>2</sub> selon  $y$  et  $z$  :

$$L^y(\mathbf{U}_{j,l,m}^n) = \frac{1}{2} \left[ \mathbf{U}_{j,l+1/2,m}^{n+1/2} + \mathbf{U}_{j,l-1/2,m}^{n+1/2} \right] - \frac{\Delta t}{\Delta y} \left[ \mathbf{F}_{y,j,l+1/2,m}^{n+1/2} - \mathbf{F}_{y,j,l-1/2,m}^{n+1/2} \right] \quad (4.17)$$

$$\mathbf{U}_{j,l+1/2,m}^{n+1/2} = \frac{1}{2} \left[ \mathbf{U}_{j,l+1,m}^n + \mathbf{U}_{j,l,m}^n \right] - \frac{\Delta t}{2\Delta y} \left[ \mathbf{F}_{y,j,l+1,m}^n - \mathbf{F}_{y,j,l,m}^n \right] \quad (4.18)$$

$$\mathbf{U}_{j,l-1/2,m}^{n+1/2} = \frac{1}{2} \left[ \mathbf{U}_{j,l,m}^n + \mathbf{U}_{j,l-1,m}^n \right] - \frac{\Delta t}{2\Delta y} \left[ \mathbf{F}_{y,j,l,m}^n - \mathbf{F}_{y,j,l-1,m}^n \right] \quad (4.19)$$

$$L^z(\mathbf{U}_{j,l,m}^n) = \frac{1}{2} \left[ \mathbf{U}_{j,l,m+1/2}^{n+1/2} + \mathbf{U}_{j,l,m-1/2}^{n+1/2} \right] - \frac{\Delta t}{\Delta z} \left[ \mathbf{F}_{z,j,l,m+1/2}^{n+1/2} - \mathbf{F}_{z,j,l,m-1/2}^{n+1/2} \right] \quad (4.20)$$

$$\mathbf{U}_{j,l,m+1/2}^{n+1/2} = \frac{1}{2} \left[ \mathbf{U}_{j,l,m+1}^n + \mathbf{U}_{j,l,m}^n \right] - \frac{\Delta t}{2\Delta z} \left[ \mathbf{F}_{z_{j,l,m+1}}^n - \mathbf{F}_{z_{j,l,m}}^n \right] \quad (4.21)$$

$$\mathbf{U}_{j,l,m-1/2}^{n+1/2} = \frac{1}{2} \left[ \mathbf{U}_{j,l,m}^n + \mathbf{U}_{j,l,m-1}^n \right] - \frac{\Delta t}{2\Delta z} \left[ \mathbf{F}_{z_{j,l,m}}^n - \mathbf{F}_{z_{j,l,m-1}}^n \right] \quad (4.22)$$

La méthode SYS permet d'obtenir la valeur  $\mathbf{U}_{j,l,m}^{n+1}$  à partir de  $\mathbf{U}_{j,l,m}^n$  en moyennant toutes les combinaisons possible de splitting simple [159] :

$$\mathbf{U}_{j,l,m}^{n+1} = \frac{1}{6} (L^x L^y L^z + L^x L^z L^y + L^y L^x L^z + L^y L^z L^x + L^z L^x L^y + L^z L^y L^x) \mathbf{U}_{j,l,m}^n \quad (4.23)$$

#### 4.4.3.5 Le schéma de Lax-Wendroff à 2 étapes

Le schéma  $LW_2$  est une alternative au schéma de Lax-Wendroff classique qui permet d'éviter le calcul des matrices jacobiennes [168]. Il y a de nombreuses façons de dériver le schéma  $LW_2$ . Une des façons de faire est de combiner un schéma de Lax-Friedrichs classique avec un schéma saute-mouton<sup>11</sup> [164] sur des demis périodes temporelles. Le premier schéma est de type Lax-Friedrichs classique sur un demi-pas temporel :

$$\mathbf{U}_{j+1/2}^{n+1/2} = \frac{1}{2} \left[ \mathbf{U}_{j+1}^n + \mathbf{U}_j^n \right] - \frac{\Delta t}{2\Delta x} \left[ \mathbf{F}_{j+1}^n - \mathbf{F}_j^n \right] \quad (4.24)$$

$$\mathbf{U}_{j-1/2}^{n+1/2} = \frac{1}{2} \left[ \mathbf{U}_j^n + \mathbf{U}_{j-1}^n \right] - \frac{\Delta t}{2\Delta x} \left[ \mathbf{F}_j^n - \mathbf{F}_{j-1}^n \right] \quad (4.25)$$

Le second est de type saute-mouton :

$$\mathbf{U}_j^{n+1} = \mathbf{U}_j^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} \left[ \mathbf{F}_{i+1/2}^{n+1/2} - \mathbf{F}_{j-1/2}^{n+1/2} \right] \quad (4.26)$$

Les équations (4.24), (4.25) et (4.26) composent le schéma  $LW_2$  [164, 168]. Ce schéma numérique est précis au deuxième ordre en temps et en espace [164]. Graphiquement, la grille numérique du schéma  $LW_2$  est représentée sur la figure 4.6.

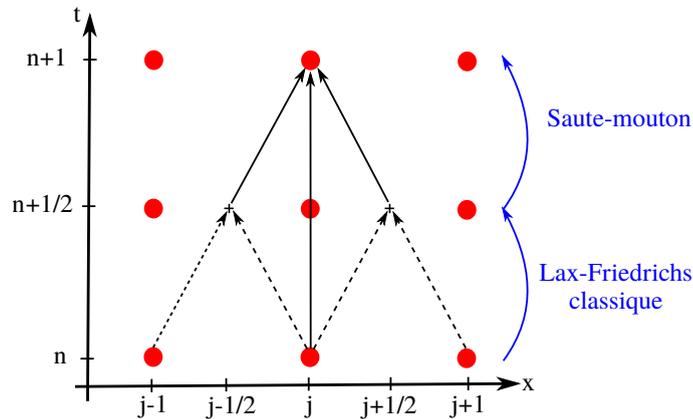


FIGURE 4.6 – Grille numérique dans le schéma  $LW_2$  1D.

11. Nous ne rentrerons pas dans les détails pour la démonstration de ce type de schéma numérique. En anglais, ce schéma est connu sous le nom de *leapfrog*.

À titre illustratif, examinons les conséquences des troncatures liées à l'emploi des différences finies pour construire le schéma  $LW_2$ . Regardons les conséquences sur l'équation d'advection linéaire scalaire :

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho + v\frac{\partial}{\partial x}\rho = 0 \quad (4.27)$$

Lorsqu'on applique le schéma  $LW_2$  à l'équation (4.27), nous ne résolvons pas l'équation (4.27) mais plutôt une équation modifiée de la forme [149] :

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho + v\frac{\partial}{\partial x}\rho = \underbrace{-\frac{1}{6}v\Delta x^2\left(1 - \frac{v^2\Delta t^2}{\Delta x^2}\right)}_{\text{Dispersion}}\frac{\partial^3}{\partial x^3}\rho \quad (4.28)$$

Le membre de droite de l'équation (4.28) est directement lié aux troncatures propres aux différences finies [149]. Le terme en  $\frac{\partial^3}{\partial x^3}\rho$  induit de la dispersion dans le calcul numérique. L'équation (4.28) est une équation d'advection-dispersion.

D'après l'équation (4.28), la dispersion sera d'autant plus forte que la pente sera élevée : c'est le phénomène de dispersion qui provoque les oscillations derrière les chocs, vues notamment dans le test de Sod de la figure 4.3(b). Dans les régions où le profil est doux,  $\frac{\partial^3}{\partial x^3}\rho$  est faible, et dans ce cas l'équation modifiée est pratiquement égale à l'équation d'advection.

L'extension en 3D du schéma  $LW_2$  se fait de façon similaire à celle du schéma  $LF_2$ . Il suffit simplement de remplacer les équations (4.14), (4.17) et (4.20) respectivement par :

$$L^x(\mathbf{U}_{j,l,m}^n) = \mathbf{U}_{j,l,m}^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} \left[ \mathbf{F}_{\mathbf{x}_{j+1/2,l,m}}^{n+1/2} - \mathbf{F}_{\mathbf{x}_{j-1/2,l,m}}^{n+1/2} \right] \quad (4.29)$$

$$L^y(\mathbf{U}_{j,l,m}^n) = \mathbf{U}_{j,l,m}^n - \frac{\Delta t}{\Delta y} \left[ \mathbf{F}_{\mathbf{y}_{j,l+1/2,m}}^{n+1/2} - \mathbf{F}_{\mathbf{y}_{j,l-1/2,m}}^{n+1/2} \right] \quad (4.30)$$

et

$$L^z(\mathbf{U}_{j,l,m}^n) = \mathbf{U}_{j,l,m}^n - \frac{\Delta t}{\Delta z} \left[ \mathbf{F}_{\mathbf{z}_{j,l,m+1/2}}^{n+1/2} - \mathbf{F}_{\mathbf{z}_{j,l,m-1/2}}^{n+1/2} \right] \quad (4.31)$$

#### 4.4.4 Intégration du terme source des équations fluides

Nous avons vu précédemment que le schéma composite  $LWLF_n$  permettait de résoudre de façon relativement simple et précise le système d'équations homogènes (4.2). La résolution du système d'équations sources (4.3) sera effectuée par un schéma de Runge-Kutta 4 qui se décompose en 5 étapes [147] :

$$\mathbf{k}_1 = \mathbf{S}(\mathbf{U}^n, \mathbf{E}^n, \mathbf{B}^n) \quad (4.32)$$

$$\mathbf{k}_2 = \mathbf{S}\left(\mathbf{U}^n + \frac{1}{2}\Delta t\mathbf{k}_1, \mathbf{E}^n, \mathbf{B}^n\right) \quad (4.33)$$

$$\mathbf{k}_3 = \mathbf{S}\left(\mathbf{U}^n + \frac{1}{2}\Delta t\mathbf{k}_2, \mathbf{E}^n, \mathbf{B}^n\right) \quad (4.34)$$

$$\mathbf{k}_4 = \mathbf{S}\left(\mathbf{U}^n + \Delta t\mathbf{k}_3, \mathbf{E}^n, \mathbf{B}^n\right) \quad (4.35)$$

$$\mathbf{U}^{n+1} = \mathbf{U}^n + \frac{1}{6} \Delta t [\mathbf{k}_1 + 2\mathbf{k}_2 + 2\mathbf{k}_3 + \mathbf{k}_4] \quad (4.36)$$

La méthode de Runge-Kutta 4 est une méthode numérique stable et d'ordre 4, ce qui signifie que l'erreur commise à chaque étape est de l'ordre de  $\Delta t^5$  [147]. Nous avons choisi un schéma précis à l'ordre de 4 parce que le coût de calcul est quasi-identique à celui obtenu avec un schéma Runge-Kutta 2 ou Runge-Kutta 3, et qu'il reste bien moins important que pour l'intégration du système homogène ou des équations de Maxwell.

## 4.5 Résolution des équations de Maxwell

Dans les sections différentes, nous avons discuté de la résolution des équations fluides. Nous allons maintenant aborder la méthode de résolution pour les équations de Maxwell. Pour faciliter la lecture, nous rappelons les ici :

$$\nabla \cdot \epsilon_r \mathbf{E} = \frac{\rho}{\epsilon_0} \quad (4.37)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0 \quad (4.38)$$

$$\nabla \times \mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} \quad (4.39)$$

$$\nabla \times \mathbf{B} = \mu_0 \mathbf{J} + \frac{1}{c^2} \frac{\partial \epsilon_r \mathbf{E}}{\partial t} \quad (4.40)$$

### 4.5.1 Discussion sur les propriétés de divergence

Dans ce paragraphe, nous allons montrer qu'il n'est pas nécessaire d'intégrer numériquement les équations (4.37) et (4.38) portant sur la divergence des champs électromagnétiques [84, 143].

La loi de conservation de la charge électrique peut être obtenue en sommant les équations de conservation du nombre de particules (2.51) pour chacune des espèces, et en multipliant par un facteur  $q_s$  :

$$\frac{\partial}{\partial t} \sum_s q_s n_s + \nabla \cdot \left( \sum_s q_s n_s \mathbf{u}_s \right) = \sum_s q_s S_s \quad (4.41)$$

Lors d'une photoionisation, d'une ionisation par impact, d'une collision élastique ou d'une recombinaison, le terme  $\sum_s q_s S_s$  est nul puisqu'il y a conservation de la neutralité [84]. En utilisant les définitions de  $\rho$  (équation (2.74)),  $\mathbf{J}$  (équation (2.75)), l'équation (4.41) se réécrit alors :

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho + \nabla \cdot \mathbf{J} = 0 \quad (4.42)$$

En prenant la divergence de l'équation de Maxwell-Ampère (4.40), et en soustrayant le résultat à l'équation (4.42), nous pouvons obtenir :

$$\frac{\partial}{\partial t} \left( \nabla \cdot \epsilon_r \mathbf{E} - \frac{\rho}{\epsilon_0} \right) = 0 \quad (4.43)$$

L'équation de Maxwell-Gauss (4.37) est en fait une réaffirmation de la conséquence de la résolution de l'équation de conservation du nombre de particules (2.51) et de l'équation de Maxwell-Ampère (4.40) [143]. Si l'équation de Maxwell-Gauss (4.37) est vérifiée initialement, la résolution des équations (2.51) et (4.40) imposeront la vérification de cette équation.

Concernant l'équation  $\nabla \cdot \mathbf{B} = 0$ , nous remarquons qu'en prenant la divergence de l'équation (4.39) portant sur le rotationnel de  $\mathbf{E}$ , nous obtenons :

$$\frac{\partial}{\partial t} \nabla \cdot \mathbf{B} = 0 \quad (4.44)$$

L'équation (4.44) stipule que  $\nabla \cdot \mathbf{B}$  est conservée dans le temps.

L'équation (4.38) peut donc être considérée comme une condition initiale de l'équation (4.39), puisque si initialement nous choisissons  $\nabla \cdot \mathbf{B} = 0$ , l'équation (4.39) implique que cette condition demeurera satisfaite à tous les instants ultérieurs [84].

Pour conclure, si les équations (4.37) et (4.38) sont vérifiées initialement, elles le seront également en résolvant les équations fluides et les équations de Maxwell portant sur les rotationnels. Il n'est donc pas nécessaire d'intégrer numériquement les équations (4.37) et (4.38).

## 4.5.2 La méthode Pseudo-Spectral Time Domain (PSTD)

Dans la section précédente, nous avons vu qu'il n'était pas nécessaire d'intégrer numériquement les équations (4.37) et (4.38) portant sur la divergence des champs électromagnétiques. Nous allons maintenant décrire la méthode PSTD qui permet l'intégration des équations de Maxwell-Faraday (4.39) et de Maxwell-Ampère (4.40).

La résolution numérique des équations de Maxwell est un problème largement étudié [131, 169, 170, 171, 172, 173]. La méthode PSTD [169] est une méthode pseudo-spectrale simple à implémenter et qui ne nécessite pas obligatoirement une grille spatiale décalée, contrairement à la méthode FDTD<sup>12</sup> [131]. Elle est ainsi plus flexible pour être couplée avec un autre algorithme sans faire d'interpolations spatiales. De plus, elle introduit peu de dispersion numérique puisqu'elle fournit une relation de dispersion précise avec seulement deux cellules spatiales par longueur d'onde. L'erreur relative de cette méthode avec deux cellules par longueur d'onde est plus faible que celle de la FDTD avec 16 cellules par longueur d'onde [169].

L'emploi de la FDTD dans notre algorithme fluide imposerait : (1) une résolution spatiale plus forte qu'avec la PSTD et donc un coût de calcul plus lourd (2) faire des interpolations spatiales pour aligner sur la grille la densité de courant et les champs dans la description fluide, ce qui induiraient des erreurs numériques supplémentaires. Nous privilégions alors le choix de la PSTD dans notre algorithme fluide.

Une autre méthode pour résoudre les équations de Maxwell a attiré notre attention : la méthode Pseudo-Spectral *Analytical* Time-Domain (PSATD) [174]. Nous verrons

12. La grille temporelle est cependant décalée, comme pour la FDTD.

plus tard (section 4.7.1) que la PSATD peut présenter encore plus d'avantages que la méthode PSTD. Nous développerons d'ailleurs dans la section 4.7 une seconde version du code basée sur cette méthode. La PSATD n'est pas contrainte par une condition de stabilité CFL (Courant-Friedrich-Lévy), n'induit pas de dispersion numérique lors de la propagation des ondes électromagnétiques transverses, et peut être écrite sans grilles décalées spatiales et *temporelles*. Cependant, contrairement à la PSTD, elle ne permet pas de simuler la propagation dans un milieu avec une permittivité de fond  $\epsilon_r$  inhomogène spatialement. Dans des développements futurs, il ne sera donc pas possible d'inclure l'effet Kerr dans la permittivité de fond  $\epsilon_r$ , il faudra le faire à travers le courant  $\mathbf{J}$ .

Nous n'avions cependant pas pu développer un code PSATD/Hydro avant 2019, parce que nous ne disposions pas de techniques pour inclure des PMLs<sup>13</sup> (Perfectly Matched Layer) dans la PSATD. Nous avons alors implémenté un code PSTD/Hydro<sup>14</sup> que nous avons validé avec les tests présentés dans le prochain chapitre.

En 2019, nous avons finalement pu réaliser des PMLs dans la PSATD grâce à la référence [175] datant de cette même année. Nous avons alors couplé la PSATD au solveur fluide (code PSATD/Hydro décrit dans la section 4.7.2), simplifier un maximum l'algorithme en se basant sur l'expérience des tests effectués avec le code PSTD/Hydro, puis nous avons validé cette seconde version du code (voir section 5.5 du prochain chapitre).

Nous allons maintenant présenter la méthode PSTD qui compose la première version du code. Dans cette méthode, les dérivées spatiales sont réalisées dans le domaine spectral en utilisant un algorithme *Fast Fourier Transform* (FFT) [169]. Par ailleurs, une différence finie centrée est utilisée pour approximer la dérivée temporelle. La méthode PSTD est basée sur une grille spatiale non-décalée et sur une grille temporelle décalée. Par exemple, si  $\mathbf{E}$  est défini à  $t = n\Delta t$ ,  $\mathbf{B}$  est défini à  $t = \left(n + \frac{1}{2}\right) \Delta t$ .

Nous présentons dans cette section un algorithme PSTD valide dans un milieu de permittivité de fond  $\epsilon_r$ , auquel une densité de courant est ajoutée. Les dérivées spatiales sont réalisées dans l'espace de Fourier. L'équation (4.45) montre comment la dérivée partielle de  $E_y$  par rapport à  $x$  est calculée :

$$\left(\frac{\partial E_y}{\partial x}\right)^n = i \text{FFT}_x^{-1} \left[ k_x \text{FFT}_x \left[ E_y^n \right] \right] \quad (4.45)$$

où  $\text{FFT}_x^{-1}$  désigne la FFT inverse dans la direction  $x$ . Toutes les dérivées spatiales des équations de Maxwell-Faraday (4.39) et de Maxwell-Ampère (4.40) sont effectuées dans l'espace de Fourier comme montré dans l'équation (4.45).

Du fait que ce seront des demi-étapes temporelles de PSTD qui seront effectuées dans l'algorithme complet du code PSTD/Hydro (voir section 4.6), nous allons ici détailler la méthode PSTD sur une demi-étape  $\Delta t/2$ . Connaissant le champ magnétique à  $t^{n-1/4}$  et toutes les dérivées partielles du champ électrique à  $t^n$ , le champ magnétique  $\mathbf{B}^{n+1/4}$  est calculé de la façon suivante :

$$B_x^{n+1/4} = B_x^{n-1/4} + \frac{\Delta t}{2} \left[ \left(\frac{\partial E_y}{\partial z}\right)^n - \left(\frac{\partial E_z}{\partial y}\right)^n \right] \quad (4.46)$$

13. Les PMLs sont des couches absorbantes artificielles qui permettent de modéliser des systèmes ouverts.

14. Nous pouvions inclure des PML dans la PSTD.

$$\boxed{B_y^{n+1/4} = B_y^{n-1/4} + \frac{\Delta t}{2} \left[ \left( \frac{\partial E_z}{\partial x} \right)^n - \left( \frac{\partial E_x}{\partial z} \right)^n \right]} \quad (4.47)$$

$$\boxed{B_z^{n+1/4} = B_z^{n-1/4} + \frac{\Delta t}{2} \left[ \left( \frac{\partial E_x}{\partial y} \right)^n - \left( \frac{\partial E_y}{\partial x} \right)^n \right]} \quad (4.48)$$

Les dérivées spatiales de  $\mathbf{B}^{n+1/4}$  sont effectuées de la même manière que pour le champ électrique (voir équation (4.45)). Finalement,  $\mathbf{E}^{n+1/2}$  est mis à jour en utilisant  $\mathbf{E}^n$  et les dérivées spatiales du champ magnétique :

$$\boxed{\epsilon_r E_x^{n+1/2} = \epsilon_r E_x^n + c^2 \frac{\Delta t}{2} \left[ \left( \frac{\partial B_z}{\partial y} \right)^{n+1/4} - \left( \frac{\partial B_y}{\partial z} \right)^{n+1/4} \right] - \frac{\Delta t}{2\epsilon_0} J_x} \quad (4.49)$$

$$\boxed{\epsilon_r E_y^{n+1/2} = \epsilon_r E_y^n + c^2 \frac{\Delta t}{2} \left[ \left( \frac{\partial B_x}{\partial z} \right)^{n+1/4} - \left( \frac{\partial B_z}{\partial x} \right)^{n+1/4} \right] - \frac{\Delta t}{2\epsilon_0} J_y} \quad (4.50)$$

$$\boxed{\epsilon_r E_z^{n+1/2} = \epsilon_r E_z^n + c^2 \frac{\Delta t}{2} \left[ \left( \frac{\partial B_y}{\partial x} \right)^{n+1/4} - \left( \frac{\partial B_x}{\partial y} \right)^{n+1/4} \right] - \frac{\Delta t}{2\epsilon_0} J_z} \quad (4.51)$$

où  $J_x$ ,  $J_y$  and  $J_z$  sont les composantes du vecteur densité de courant. Le vecteur densité de courant est calculé à partir des variables fluides comme décrit sur la figure 4.1.

Précisons que la méthode PSTD impose naturellement des conditions périodiques parce qu'elle est basée sur des algorithmes de transformée de Fourier rapide (FFT). Cependant, des systèmes ouverts peuvent être modélisés en utilisant des PMLs [176].

## 4.6 Algorithme complet du code PSTD/Hydro

Comme décrit dans les sections précédentes, nous résolvons les équations de Maxwell avec la méthode PSTD, et nous résolvons les équations fluides en combinant un schéma LWLFn et RK4 à travers un splitting de Strang. L'objectif de cette section est de décrire l'algorithme complet et notamment la façon de coupler les différents schémas. Le couplage est fait à travers la densité de courant  $\mathbf{J}$  des équations de Maxwell et via les champs électromagnétiques des équations fluides.

L'algorithme complet est détaillé sur la figure 4.7. Cette figure montre comment avancer les valeurs des variables fluides  $\mathbf{U}$ , du champ électrique  $\mathbf{E}$  et du champ magnétique  $\mathbf{B}$  de l'instant  $t^n$  à l'instant  $t^{n+1}$ .

Commençons par définir l'état initial :

- Le vecteur des variables fluides  $\mathbf{U}^n$  est connu à l'instant  $t^n$ .
- Le champ électrique est connu à l'instant  $t^n$ . À cause de la grille temporelle décalée de la PSTD, le champ magnétique  $\mathbf{B}$  est connu à l'instant  $t^{n-1/4}$  et à  $t^{n+1/4}$ . Nous calculons  $\mathbf{B}^n$  avec une interpolation linéaire entre  $\mathbf{B}^{n-1/4}$  et  $\mathbf{B}^{n+1/4}$ . Pour alléger la figure 4.7, nous n'avons pas mis en évidence le décalage de grille temporelle du champ magnétique défini sur les points temporels  $t^{n-1/4}$ ,  $t^{n+1/4}$ ,  $t^{n+3/4}$  et  $t^{n+5/4}$ . Cependant, les valeurs de  $\mathbf{B}^n$ ,  $\mathbf{B}^{n+1/2}$  et  $\mathbf{B}^{n+1}$  sont issus d'interpolation à partir des valeurs de  $\mathbf{B}$  à ces instants non affichés.

Une fois les conditions initiales définies, l'algorithme complet se décompose en 5 étapes :

1. Intégration du terme source (4.3) avec un schéma RK4 sur  $\Delta t/2$  en utilisant  $\mathbf{E}^n$ ,  $\mathbf{B}^n$  et  $\mathbf{U}^n$  pour obtenir la valeur intermédiaire des variables fluides  $\mathbf{U}^*$ .
2. Intégration du système homogène (4.2) avec un schéma LWLFn sur  $\Delta t$  en utilisant le vecteur des variables fluides  $\mathbf{U}^*$  pour obtenir la valeur intermédiaire  $\mathbf{U}^{**}$ .
3. Calcul de la densité de courant  $\mathbf{J}$  avec les densités et vitesses issues de  $\mathbf{U}^{**}$ . Ensuite, effectuer une étape de PSTD avec  $\mathbf{J}$  pour calculer  $\mathbf{E}^{n+1/2}$  et  $\mathbf{B}^{n+3/4}$ . Calculer  $\mathbf{B}^{n+1/2}$  en utilisant une interpolation linéaire entre  $\mathbf{B}^{n+1/4}$  et  $\mathbf{B}^{n+3/4}$ .
4. Intégration du terme source (4.3) avec un schéma RK4 sur  $\Delta t/2$  en utilisant  $\mathbf{U}^{**}$ ,  $\mathbf{E}^{n+1/2}$  et  $\mathbf{B}^{n+1/2}$  pour obtenir la valeur finale du vecteur des variables fluides  $\mathbf{U}^{n+1}$ .
5. Calculer la densité de courant  $\mathbf{J}$  avec les densités et les vitesses issues de  $\mathbf{U}^{n+1}$ . Ensuite, effectuer une étape de PSTD avec  $\mathbf{J}$  pour calculer  $\mathbf{E}^{n+1}$  et  $\mathbf{B}^{n+5/4}$ . Finalement, calculer  $\mathbf{B}^{n+1}$  en utilisant une interpolation linéaire entre  $\mathbf{B}^{n+3/4}$  et  $\mathbf{B}^{n+5/4}$ .

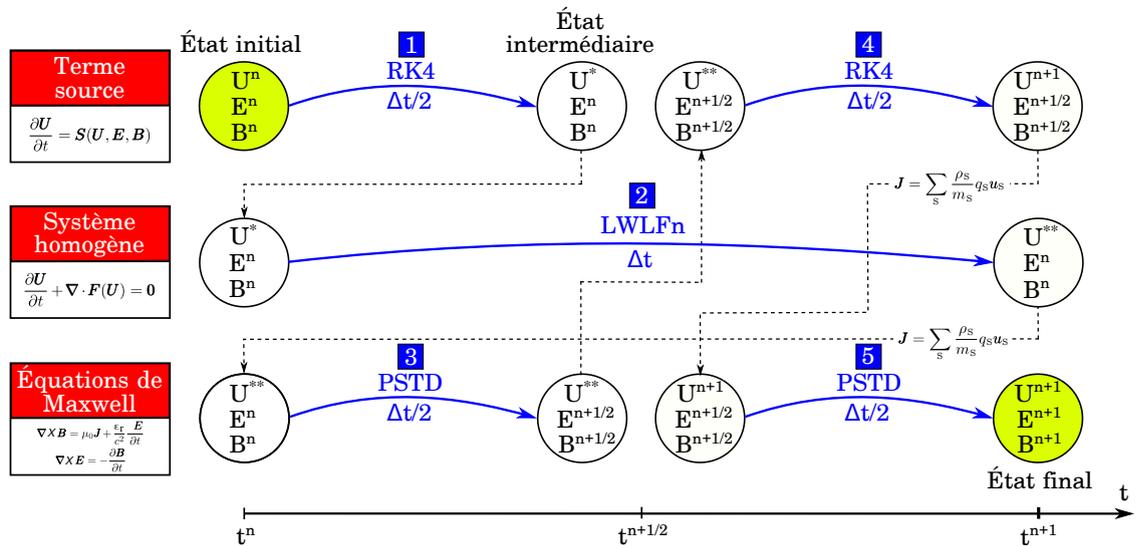


FIGURE 4.7 – Description de l'algorithme PSTD/Hydro développé pour résoudre les équations du modèle plasma à deux fluides. Un schéma RK4 est utilisé pour intégrer le terme source des équations fluides, un schéma LWLFn est utilisé pour intégrer le système d'équations homogènes, et la méthode PSTD est utilisée pour avancer les champs. L'algorithme implique 5 étapes, montrées en bleues sur la figure, pour avancer les champs et les variables fluides d'un instant  $t^n$  à un instant  $t^{n+1}$ .

### 4.6.1 Condition de stabilité de l'algorithme complet

Nous terminons cette partie en expliquant comment fixer les pas spatiaux et temporels dans les simulations.

D'après R. Liska *et al.* [146], il n'y a pas d'analyse de stabilité disponible pour la résolution de systèmes d'équations avec un schéma composite LWLFn. Cependant, les auteurs soulignent que l'expérience montre qu'une condition de stabilité de type condition CFL permet d'atteindre la stabilité avec les schémas composites. Du fait que l'analyse de stabilité d'un schéma composite est déjà extrêmement complexe, il n'est pas envisageable

de faire une démonstration mathématique de la condition de stabilité de l'algorithme complet de la figure 4.7. Nous allons donc nous définir une méthode pour fixer le pas spatial  $\Delta x$  et le pas temporel  $\Delta t$  dans l'algorithme développé.

Loverich *et al.* souligne que pour capturer la physique du système d'équations complet, il est nécessaire de résoudre la fréquence maximale [130], qui est soit la pulsation laser  $\omega_0$ , soit la pulsation hybride suivante [104] :

$$\omega_{\max} = \sqrt{\omega_p^2 + \omega_c^2} \quad (4.52)$$

où la fréquence  $\omega_p$  est la fréquence plasma du système et  $\omega_c$  est la fréquence cyclotron<sup>15</sup>.

Deux cas sont alors distinguables :

- En pratique, lorsqu'un champ électromagnétique transverse est attendu ou injecté dans la simulation numérique (un champ laser par exemple), nous utilisons le critère de stabilité de la méthode PSTD (équation (4.53)), qui est souvent la contrainte la plus exigeante [169] :

$$\Delta t \leq \frac{2}{\pi} \frac{\Delta x}{c \sqrt{Dim}} \quad (4.53)$$

où  $Dim$  est le nombre de dimensions dans la simulation. Le pas spatial  $\Delta x$  doit être choisi suffisamment petit pour résoudre le plasma et les ondes, et suffisamment grand pour que l'approche fluide ait un sens<sup>16</sup>.

- En l'absence de champ électromagnétique transverse, l'échantillonnage temporel doit être adapté pour résoudre à la fois vitesse thermique du plasma<sup>17</sup> et la fréquence hybride (4.52). Encore une fois, le pas spatial  $\Delta x$  doit être choisi suffisamment petit pour résoudre le plasma et les ondes, et suffisamment grand pour que l'approche fluide ait un sens.

## 4.7 Version 2 : code PSATD/Hydro

Comme nous l'avons énoncé dans la section 4.5.2, nous avons développé une seconde version du code basée sur la méthode PSATD. Nous allons décrire ici l'algorithme du code PSATD/Hydro.

Au vu des résultats des tests effectués avec le code PSTD/Hydro (qui seront montrés dans le prochain chapitre), nous avons pu tirer deux conclusions qui permettent de simplifier l'algorithme de cette seconde version du code. **(1)** La technique SYS de l'équation (4.23) n'est pas toujours nécessaire. En effet, un simple splitting du type  $\mathbf{U}_{j,l,m}^{n+1} = L^x L^y L^z \mathbf{U}_{j,l,m}^n$  a mené au même résultat sur les tests du chapitre 5 qui concernent la physique que nous souhaitons étudier. Cette simplification permet notamment de diminuer d'un facteur 6 le temps de calcul de l'intégration du système fluide homogène. Cependant, la technique SYS se justifie pour les problèmes chocs multidimensionnels, comme ce sera le cas dans le test de Noh 3D présenté dans le prochain chapitre. **(2)** L'ajout de diffusion

15. Dans le cas d'un plasma d'électrons/ions  $\omega_p = \sqrt{n_e q_e^2 / m_e \epsilon_0}$  et  $\omega_c = q_e B / m_e$ . Dans un plasma d'électrons/trous, ces fréquences sont différentes, ce point sera discuté plus tard.

16. Comme discuté dans la section 2.3.2, le pas spatial doit être plus grand que la longueur de Debye.

17.  $v_{th} = \sqrt{\frac{\gamma p}{mn}}$

numérique avec un schéma  $LF_2$  n'est pas toujours nécessaire dans les problèmes physiques que nous souhaitons étudiés. C'est le cas en particulier lorsque le système présente de la dissipation physique, comme c'est le cas dans un plasma collisionnel. Il faut cependant garder en tête que si par la suite les gradients spatiaux se montrent importants et entraînent une divergence de la solution numérique, nous pouvons avoir recours à l'utilisation de la diffusion numérique avec un schéma  $LF_2$ .

### 4.7.1 Méthode PSATD

Dans la section 4.5.2, nous avons discuté des avantages de la méthode PSATD par rapport à la PSTD. Cette méthode peut s'écrire sur une grille spatiale et temporelle non décalée, ce qui permet de supprimer les interpolations temporelles de l'algorithme PSTD/Hydro présenté dans la section 4.6. Comme énoncé précédemment, la PSATD n'est pas sujette à une condition CFL, et relâche donc la condition restrictive (4.53).

L'algorithme PSATD est donné par les équations suivantes [174] :

$$\tilde{\mathbf{E}}^{n+1} = C_0 \tilde{\mathbf{E}}^n + i v S_0 \boldsymbol{\kappa} \times \tilde{\mathbf{B}}^n - \frac{1}{\epsilon_0 \epsilon_r} \frac{S_0}{k v} \tilde{\mathbf{J}}^{n+1/2} + (1 - C_0) \boldsymbol{\kappa} \cdot (\boldsymbol{\kappa} \cdot \tilde{\mathbf{E}}^n) + \frac{1}{\epsilon_0 \epsilon_r} \left( \frac{S_0}{k v} - \Delta t \right) \boldsymbol{\kappa} \cdot (\boldsymbol{\kappa} \cdot \tilde{\mathbf{J}}^{n+1/2}) \quad (4.54)$$

$$\tilde{\mathbf{B}}^{n+1} = C_0 \tilde{\mathbf{B}}^n - i \frac{S_0}{v} \boldsymbol{\kappa} \times \tilde{\mathbf{E}}^n + i \mu_0 \frac{1 - C_0}{k} \boldsymbol{\kappa} \times \tilde{\mathbf{J}}^{n+1/2} \quad (4.55)$$

où  $C_0 = \cos(kv\Delta t)$ ,  $S_0 = \sin(kv\Delta t)$ ,  $\boldsymbol{\kappa} = \mathbf{k}/k$  et  $v = \frac{c}{\epsilon_r^{1/2}}$ . Les deux hypothèses principales faites pour obtenir les équations (4.54) et (4.55) de l'algorithme PSATD sont [174] :

1. Le pas temporel  $\Delta t$  est suffisamment petit pour supposer que la densité de courant est constante sur  $\Delta t$ .
2. La permittivité  $\epsilon_r$  de fond est homogène et isotrope.

### 4.7.2 Vue d'ensemble du code numérique PSATD/Hydro

L'algorithme complet du code PSATD/Hydro est décrit sur la figure 4.8 et se décompose en 4 étapes :

1. Intégration du terme source (4.3) avec un schéma RK4 sur  $\Delta t/2$  en utilisant  $\mathbf{E}^n$ ,  $\mathbf{B}^n$  et  $\mathbf{U}^n$  pour obtenir la valeur intermédiaire des variables fluides  $\mathbf{U}^*$ .
2. Intégration du système homogène (4.2) avec un schéma LW sur  $\Delta t$  en utilisant le vecteur des variables fluides  $\mathbf{U}^*$  pour obtenir la valeur intermédiaire  $\mathbf{U}^{**}$ .
3. Calcul de la densité de courant  $\mathbf{J}^{n+1/2}$  avec les densités et vitesses issues de  $\mathbf{U}^{**}$ . Ensuite, effectuer une étape de PSATD avec  $\mathbf{J}^{n+1/2}$  pour calculer  $\mathbf{E}^{n+1}$  et  $\mathbf{B}^{n+1}$ .
4. Intégration du terme source (4.3) avec un schéma RK4 sur  $\Delta t/2$  en utilisant  $\mathbf{U}^{**}$ ,  $\mathbf{E}^{n+1}$  et  $\mathbf{B}^{n+1}$  pour obtenir la valeur finale du vecteur des variables fluides  $\mathbf{U}^{n+1}$ .

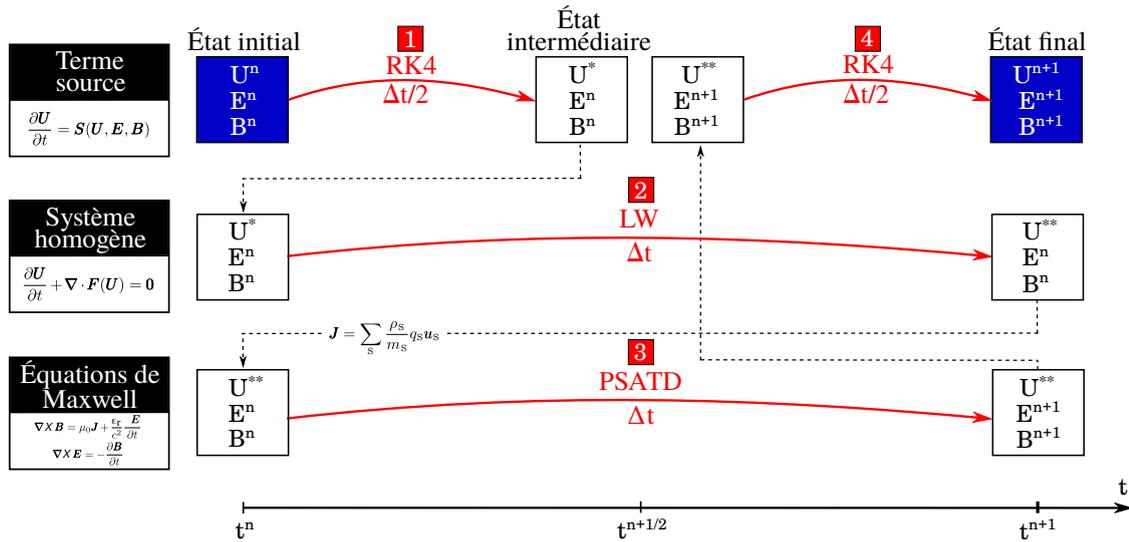


FIGURE 4.8 – Description de l'algorithme PSATD/Hydro développé pour résoudre les équations du modèle plasma à deux fluides. Un schéma RK4 est utilisé pour intégrer le terme source des équations fluides, un schéma LW est utilisé pour intégrer le système d'équations homogènes, et la méthode PASTD est utilisée pour avancer les champs. L'algorithme implique 4 étapes, indiquées en rouge sur la figure, pour avancer les champs et les variables fluides d'un instant  $t^n$  à un instant  $t^{n+1}$ .

Pour résumer, le code PSATD/Hydro présente plusieurs avantages par rapport au code PSTD/Hydro : il ne nécessite plus d'interpolation temporelle du champ magnétique, il n'introduit pas de dispersion numérique dans les régions sans courant, et il n'est pas contraint par la condition CFL liée à la vitesse de la lumière. Cependant, le code PSATD/Hydro ne permet pas de simuler un milieu avec une permittivité  $\epsilon_r$  inhomogène spatialement, alors que cela était réalisable avec un code PSTD/Hydro.

## 4.8 Conditions aux limites des solveurs

Dans les futures simulations du manuscrit, nous utiliserons uniquement des conditions aux limites pour modéliser des systèmes périodiques et des systèmes ouverts. Les méthodes d'implémentation des conditions aux limites ne sont pas les mêmes pour

le solveur fluide LWLFn que pour le solveur des équations de Maxwell (PSTD ou PSATD).

Concernant le solveur fluide LWLFn, les conditions aux limites permettent de définir les valeurs de  $\mathbf{U}_{j-1}^n$  et  $\mathbf{U}_{j+1}^n$  dans les relations (4.11) et (4.12) pour les points en bord de grille<sup>18</sup>.

Premièrement, dans le cas de conditions aux limites périodiques, les flux sortants par une extrémité du domaine sont réinjectés à l'autre extrémité. En pratique, sur un exemple avec une grille 1D telle que  $j \in [1;N]$ , les conditions périodiques sont modélisés avec les égalités suivantes :  $\mathbf{U}_{j=N}^n = \mathbf{U}_{j=1}^n$ .

Deuxièmement, les conditions aux bords ouverts permettent aux flux de densité, de quantité de mouvement et d'énergie de quitter librement le domaine numérique. Pour simuler un système ouvert, nous considérons des conditions de Neumann où les dérivées de toutes les grandeurs fluides sont prises comme étant nulles aux bords de la fenêtre de calcul. Dans le cas 1D précédemment défini, les conditions aux bords ouverts sont modélisés avec les égalités suivantes :  $\mathbf{U}_{j=0}^n = \mathbf{U}_{j=1}^n$  et  $\mathbf{U}_{j=N+1}^n = \mathbf{U}_{j=N}^n$ . Les erreurs faites sur ces conditions aux limites sont d'autant plus fortes que les gradients en bord de fenêtre sont importants. Ainsi, dans les problèmes avec un transport important, nous nous arrangeons souvent pour avoir des gradients faibles en bord de fenêtre. Nous verrons que c'est par exemple le cas dans les simulations d'interaction Bessel/diélectrique du chapitre 6 où le plasma est localisé au centre de la fenêtre de calcul, ce qui permet d'avoir des densités et des gradients faibles en bord de fenêtre.

Comme nous l'avons énoncé précédemment, les solveurs des équations de Maxwell (PSTD et PSATD) imposent naturellement des conditions périodiques. Il faut donc entreprendre des modifications pour modéliser des systèmes ouverts, notamment en ajoutant des PMLs. Au coeur des PMLs, les équations de Maxwell sont modifiées en incluant des termes de conductivité supplémentaires qui absorbent le champ électromagnétique sans induire de réflexion à l'interface entre le milieu et les PMLs. De plus, cette absorption doit se faire progressivement pour éviter des forts gradients du champ dans les PMLs qui engendreraient des erreurs numériques importantes<sup>19</sup>. L'épaisseur des PMLs est choisie de façon à atténuer progressivement et fortement le champ (plusieurs dBs typiquement). Dans les simulations des prochains chapitres, nous utiliserons bien souvent des PMLs d'épaisseur variant entre  $15\Delta x$  à  $30\Delta x$ .

La séparation des conditions aux limites des solveurs de Maxwell et du solveur fluide permet de définir des fenêtres de différentes tailles pour les deux solveurs. Nous verrons par exemple dans le chapitre 6 que nous prenons une fenêtre plus grande pour le solveur PSATD que pour le solveur fluide. Cela permet de ne pas définir la zone d'injection des faisceaux de Bessel dans la fenêtre du plasma et de réduire le temps de calcul.

---

18. Les relations (4.11) et (4.12) concernent le schéma LF<sub>2</sub>. Pour le schéma LW<sub>2</sub>, ce sont les équations (4.24) et (4.25) qui sont concernées.

19. C'est encore plus vrai dans une FDTD précise à l'ordre 2, que dans la PSTD et PSATD qui sont bien plus précisent suite à leurs aspects pseudo-spectraux.

## 4.9 Contributions et moyens numériques

Nous discutons maintenant des contributions et des moyens numériques qui ont permis le développement des codes.

Les solveurs des équations de Maxwell (PSTD et PSATD) et les PMLs ont été implémentés par un autre membre l'équipe, Remo Giust. Il a également développé la technique d'injection des faisceaux de Bessel que nous verrons dans le chapitre 6. Pour ma part, j'ai développé le modèle théorique des précédents chapitres, j'ai implémenté le solveur fluide (LWLFn et RK4), et j'ai développé le concept du couplage entre ce solveur et le solveur des équations de Maxwell. J'ai choisi et implémenté les tests de validation que nous verrons dans le chapitre 5, et j'ai finalement effectué les simulations numériques que nous verrons dans le chapitre 6.

Remo Giust a également contribué à l'écriture du code sur une version GPU<sup>20</sup> sous matlab, afin d'accélérer le calcul des produits directes de matrice et des nombreuses FFTs composant l'algorithme. Cette implémentation sur GPU a permis d'obtenir une réduction du temps de calcul d'un facteur 10 par rapport à la version CPU<sup>21</sup> lors des simulations numériques 3D du chapitre 6. Typiquement les mêmes simulations d'interaction Bessel/diélectrique 3D de 510 fs dans une fenêtre de  $460 \times 460 \times 26$  avec un pas  $\Delta t = 53$  as prenaient 30h de calcul sur CPU et 3h avec la version GPU. Ces simulations ont été réalisées sur le mésocentre de calcul de l'université de Franche-Comté, sur une carte GPU Nvidia K40<sup>22</sup>. Pour information, nous avons fait le choix d'une évolution GPU plutôt qu'une parallélisation du code sur CPU, parce que le temps nécessaire pour comprendre les modifications à apporter au code et les implémenter semblait moins important avec la première option.

## 4.10 Synthèse du chapitre 4

Nous avons fait le choix de développer un nouvel algorithme numérique en accord avec nos besoins, pour faciliter l'inclusion d'éléments physiques supplémentaires dans le code : photoionisation, ionisation par impact, collisions avec les phonons et Bremsstrahlung inverse. La méthode développée repose uniquement sur des différences finies et des FFTs, sur une grille spatiale non décalée.

Nous avons développé deux versions du code. Dans la première version du code (appelé code PSTD/Hydro), les équations de Maxwell (4.39) et (4.40) sont intégrées avec la méthode PSTD décrite dans la section 4.5.2. Les champs électromagnétiques solutions sont transférés aux équations fluides. Les équations fluides (3.25) sont intégrées à travers un splitting de Strang. Dans ce splitting, le terme source est intégré avec un schéma RK4 (voir section 4.4.4), alors que le terme homogène est intégré avec un schéma LWLFn mixant un schéma LF<sub>2</sub> (équations (4.14), (4.17),(4.20) et (4.23)) et un schéma LW<sub>2</sub> (équations (4.29), (4.30),(4.31) et (4.23)). Le courant est ensuite calculé avec les variables fluides (équation (3.34)), puis transféré à la PSTD pour calculer les nouveaux champs

---

20. Graphics Processing Unit

21. Central Processing Unit

22. 2880 coeurs CUDA, 12 GB de mémoire et 745 MHz fréquence d'horloge des processeurs.

électromagnétiques solutions. L'algorithme complet est détaillé dans la section 4.6 et la méthode pour le choix du pas spatial et du pas temporel est donnée dans la section 4.6.1.

Dans la deuxième version du code (appelé code PSATD/Hydro), nous résolvons les équations de Maxwell avec la méthode PSATD présentée dans la section 4.7.1. L'algorithme est décrit dans la section 4.7.2 et est moins complexe que celui du code PSTD/Hydro. Le code PSATD/Hydro est moins dispersif que son prédécesseur, ne contient pas d'interpolation temporelle, et n'est pas contraint par la condition de stabilité CFL de l'équation (4.53). Cependant, il ne permet pas de simuler la propagation dans un milieu avec une permittivité de fond  $\epsilon_r$  inhomogène spatialement.

Avant de faire les simulations d'interaction Bessel/diélectrique qui nous intéressent, nous allons valider les codes avec des tests pour s'assurer que les algorithmes développés sont stables et permettent de retrouver des résultats connus de la littérature : c'est l'objet du prochain chapitre.



# VALIDATION DES ALGORITHMES

*C'est le propre de l'homme de se tromper ; seul  
l'insensé persiste dans son erreur.*

---

- CICÉRON

L'objectif de ce cinquième chapitre est d'écrire et de valider les deux codes numériques (PSTD/Hydro puis PSATD/Hydro) basés sur les deux algorithmes présentés au chapitre 4. La validation se fera par étapes et commencera par une discussion autour des solutions du système d'équations, en particulier celles liées aux phénomènes physiques qui nous intéresseront dans la suite (modes de propagation dans un plasma, absorption résonnante et force pondéromotrice). Nous validerons ensuite la résolution du système homogène des équations fluides (schéma LWLFn), puis celle du système avec un terme source (schéma LWLFn + schéma RK4), et finalement l'algorithme complet (schéma LWLFn + schéma RK4 + solveur des équations de Maxwell). Nous comparerons finalement les algorithmes PSTD/Hydro et PSATD/Hydro.

## 5.1 Solutions des équations fluides

Avant de passer à la validation des algorithmes numériques, il est nécessaire de donner quelques informations sur la physique des tests réalisés. Pour cela, nous allons rappeler les solutions connues des systèmes fluides qui nous intéressent : les 3 modes de propagation d'onde dans un plasma tiède, l'absorption résonnante et la force pondéromotrice.

### 5.1.1 Modes de propagation dans un plasma tiède

Commençons par détailler les 3 modes de propagation d'onde dans un plasma tiède<sup>1</sup>, isotrope, homogène et infini. Le plasma étudié ici sera un plasma d'électrons/ions dans le vide, où l'hypothèse  $m_e \ll m_i$  est valide. Considérer cette hypothèse dans ce paragraphe permet **(1)** de bénéficier du fait que la physique des plasmas d'électrons/ions a été très largement étudiée et d'en rappeler les principaux résultats de la physique des plasmas d'électrons/ions qui serviront de base pour valider le futur code numérique **(2)** de comprendre les comportements caractéristiques dans un plasma d'électrons/ions pour mieux appréhender ceux des plasmas d'électrons/trous.

---

1. Ce n'est pas un plasma froid, puisqu'on considère ici que la température est non nulle. D'autre part, l'approche plasma chaud est souvent utilisée pour mettre en avant des phénomènes physiques non contenus dans l'approche plasma froid et plasma tiède. L'approche plasma chaud se fait en étudiant l'évolution spatio-temporelle des fonctions de distribution avec une description statistique.

Les calculs menant aux équations que nous présenterons dans cette section sont détaillés dans les chapitres 17 et 18 de *Fundamentals of plasma physics* de J.A. Bittencourt [84]. Pour synthétiser, l'idée de base de ces calculs est de réaliser une approche perturbative de façon à linéariser l'équation de Vlasov.

Rappelons avant de détailler les modes de propagation, qu'une onde longitudinale (ou onde électrostatique) est une onde ayant le vecteur d'onde  $\mathbf{k}$  parallèle au champ  $\mathbf{E}$ , contrairement à une onde transverse où  $\mathbf{E}$  est perpendiculaire à  $\mathbf{k}$ . Il n'y a donc pas de champ magnétique associé à l'onde longitudinale, par opposition à l'onde transverse où un champ magnétique oscillant y est associé.

Dans un plasma tiède, isotrope, homogène et infini, il existe 3 modes de propagation d'onde : le mode électromagnétique transverse, le mode longitudinal électronique et le mode longitudinal ionique. Leurs relations de dispersion sont schématisées sur la figure 5.1.

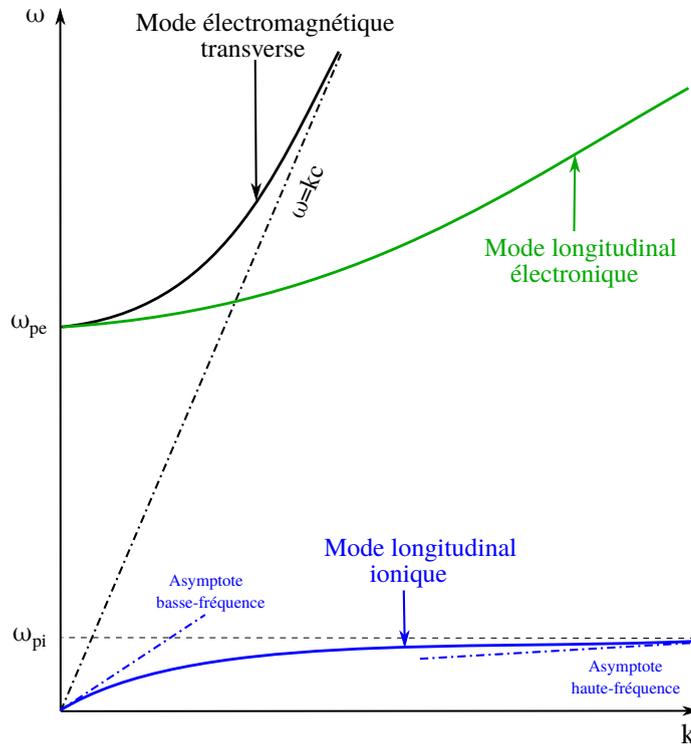


FIGURE 5.1 – Vue schématique des relations de dispersion des modes de propagation d'onde dans un plasma tiède isotrope.

Le premier mode de propagation que nous abordons est le mode électromagnétique transverse, qui correspond la propagation d'une onde électromagnétique au sein d'un plasma. Ce mode de propagation est caractérisé par la relation de dispersion suivante [81, 84] :

$$\omega^2 = \omega_{pe}^2 + \omega_{pi}^2 + k^2 c^2 \quad (5.1)$$

avec  $\omega_{pe} = \sqrt{\frac{n_e q_e^2}{\epsilon_0 m_e}}$  la fréquence plasma électronique,  $\omega_{pi} = \sqrt{\frac{n_i q_i^2}{\epsilon_0 m_i}}$  la fréquence plasma ionique et  $k$  est le nombre d'onde. La relation de dispersion (5.1) indique que les modes

électromagnétiques transverses se propageant dans un plasma sont des perturbations électromagnétiques couplées aux mouvements des charges du plasma. Elle indique également qu'une onde électromagnétique de pulsation  $\omega$  peut se propager dans un plasma seulement lorsque  $\omega^2 > \omega_{pe}^2 + \omega_{pi}^2$ , puisque cela correspond à un nombre d'onde  $k$  réel [177]. Lorsque  $\omega^2 < \omega_{pe}^2 + \omega_{pi}^2$ , le nombre d'onde  $k$  est imaginaire pur et l'onde associée est évanescence. Remarquons finalement que la partie haute fréquence de la relation de dispersion ( $\omega \gg \omega_{pe}$  et  $\omega \gg \omega_{pi}$ ) se raccorde à la propagation d'une onde plane monochromatique harmonique dans le vide ( $\omega^2 = k^2 c^2$ ).

Le deuxième mode de propagation est le mode longitudinal électronique, appelé aussi onde plasma électronique ou encore onde de Langmuir [84]. Il est associé à la relation de dispersion de Bohm-Gross [81, 84] :

$$\omega^2 = \omega_{pe}^2 + \omega_{pi}^2 + \frac{\gamma k_B T_e}{m_e} k^2 \quad (5.2)$$

Ce mode est purement longitudinal, il n'y a donc pas de champ magnétique associé à ce mode. La vitesse de phase et la vitesse de groupe de ce mode sont donc intimement liées à la température électronique.

*Commentaire sur l'amortissement Landau :* En faisant un calcul plus rigoureux à partir de l'équation de Vlasov linéarisée, autrement dit en ne faisant pas l'hypothèse que la vitesse de phase  $v_\phi = \omega/k$  de l'onde de Langmuir est très grande devant la vitesse des particules, un terme supplémentaire s'ajoute à la relation de Bohm-Gross (5.2). C'est un terme purement imaginaire lié à un pôle correspondant à l'égalisation de la vitesse des particules et de la vitesse de phase  $v_\phi$  de l'onde de Langmuir [84]. Ce terme imaginaire s'associe à un amortissement temporel de l'onde, et est appelé amortissement Landau. L'amortissement Landau correspond donc à un transfert d'énergie entre l'onde de Langmuir et les particules ayant une vitesse proche de la vitesse de phase  $v_\phi$  de l'onde de Langmuir. Cet amortissement non collisionnel n'est pas inclus dans la description fluide [90].

La dynamique des ions révèle un troisième mode, qui est cette fois-ci caractérisé par des fréquences plus basses que le mode longitudinal électronique : c'est le mode longitudinal ionique. Les limites asymptotiques basses et hautes fréquences de la relation de dispersion de ce mode sont connues [84]. À basse fréquence ( $\omega^2 \ll \omega_{pi}^2 \left[1 + \frac{T_i}{T_e}\right]$ ) la relation de dispersion du mode longitudinal ionique est la suivante [84] :

$$\omega^2 = \gamma \frac{k_B (T_i + T_e)}{m_i} k^2 \quad (5.3)$$

où  $T_i$  est la température ionique. La dénomination *onde acoustique ionique* est souvent associée à la partie basse fréquence du mode longitudinal ionique.

La limite haute fréquence ( $\omega^2 \gg \omega_{pi}^2 \left[1 + \frac{T_i}{T_e}\right]$ ) de la relation de dispersion est donnée par [84] :

$$\omega^2 = \gamma \frac{k_B T_i}{m_i} k^2 \quad (5.4)$$

Comme énoncé précédemment, la figure 5.1 récapitule l'ensemble des relations de dispersion des trois modes précédemment évoqués. Cette représentation donne une idée des courbes de dispersion mais est loin d'être quantitative : par exemple la fréquence plasma ionique est en réalité plusieurs ordres de grandeur en dessous de la pulsation plasma électronique.

### 5.1.2 Absorption résonnante

Nous avons discuté dans le chapitre 1 du fait que l'excitation d'une onde plasma<sup>2</sup> est un phénomène observé lors des simulations d'interaction entre un faisceau de Bessel et un plasma nanométrique. Ce phénomène, appelé absorption résonnante, correspond au transfert d'énergie d'un mode transverse vers un mode longitudinal électronique. Nous discuterons dans cette section de ce phénomène en prenant l'approche de W. Kruer [178], puis nous donnerons les paramètres influant sur l'efficacité de transfert énergétique.

Nous considérons ici une rampe de plasma avec une densité linéaire dans la direction  $z$ , telle que la densité critique<sup>3</sup>  $n_c$  soit atteinte en  $z = L$  (voir Fig. 5.2).

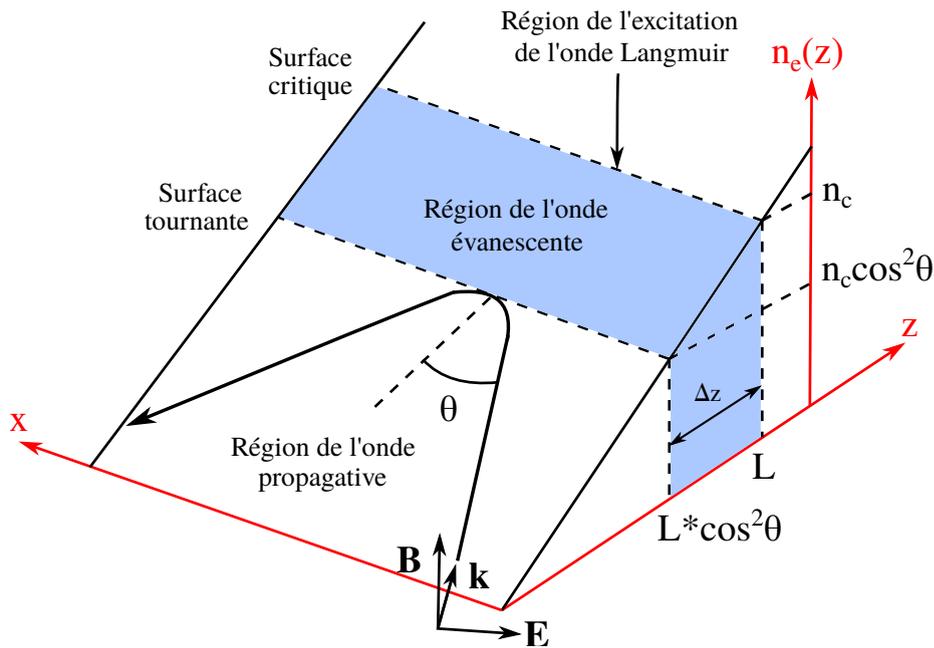


FIGURE 5.2 – Représentation schématique de la géométrie d'un problème mettant en lumière le phénomène d'absorption résonnante. Une onde électromagnétique polarisée TM et se propageant dans le plan  $(x, z)$  illumine en incidence oblique (angle  $\theta$ ) un plasma. La densité de celui-ci évolue linéairement avec  $z$ . L'onde se réfléchit au niveau de la surface tournante (en  $z = L \cos^2 \theta$ ). Le champ évanescent de l'onde électromagnétique vient alors exciter de façon résonnante l'onde plasma au niveau de la surface critique (en  $z = L$ ), surface à laquelle la permittivité du plasma s'annule. Une partie de l'énergie de l'onde électromagnétique est convertie en onde plasma (mode purement longitudinal).

Une onde électromagnétique transverse magnétique (TM), de pulsation  $\omega_0$ , arrive en incidence oblique sur la rampe de plasma. L'onde électromagnétique, présente alors une composante du champ électrique dans la direction du gradient de densité, et peut donc potentiellement faire osciller les charges dans la direction du gradient, et donc faire naître une perturbation de densité de charge dans le plasma. Lorsque l'onde commence à pénétrer dans la rampe, elle rencontre des densités inférieures à la densité critique (cas  $\omega_0 > \omega_{pe}$ )

2. correspondante au mode longitudinal électronique abordée dans la section précédente

3. La densité critique est la densité électronique au-delà de laquelle une onde électromagnétique en incidence normale ne peut plus se propager dans le plasma.

et se propage donc en tant que mode électromagnétique transverse dans le plasma jusqu'à une profondeur  $z = L \cos^2 \theta$  (appelé point tournant) [178]. En ce point, l'onde subit une réflexion totale. Au delà de  $z = L \cos^2 \theta$ , l'onde est ainsi évanescente. Même si l'amplitude du champ est diminuée, le pied évanescent parvient tout de même jusqu'à  $z = L$ . En ce point peut alors se produire un phénomène de résonance. C'est à cet endroit précis que la conversion de mode opère : l'énergie contenue dans le champ évanescent au point critique se transfère dans le mode longitudinal électronique. Évidemment, plus l'amplitude du champ évanescent au point critique est importante, plus l'énergie convertie dans le mode longitudinal électronique est élevée.

L'efficacité de conversion énergétique est intimement lié à la pente de la rampe de plasma et à l'angle d'incidence  $\theta$ . D'une part, plus l'angle  $\theta$  est élevé, plus l'amplitude associée à la composante  $E_z$  de l'onde électromagnétique est importante, et donc plus l'énergie potentiellement convertible sera importante. D'autre part, lorsque l'angle d'incidence est élevé, l'onde électromagnétique se réfléchit plus tôt dans la rampe de plasma et donc plus loin de la densité critique<sup>4</sup>. En d'autres termes, la distance  $\Delta z$  entre le point critique et le point tournant augmente. L'amplitude du champ évanescent au niveau de la résonance diminue, ce qui provoque une diminution de l'énergie transférée. Il y a donc un optimum qui permet à la fois d'avoir un angle suffisamment grand pour que l'amplitude de la composante  $E_z$  soit importante, mais que cet angle soit suffisamment petit pour que la distance  $\Delta z$  soit faible. Nous verrons la courbe caractérisant cet optimum dans le chapitre 5.

L'énergie stockée dans l'onde plasma augmente en fonction du nombre de cycles optiques [80]. L'amplitude de l'onde peut être amortie soit par des collisions, soit par l'amortissement Landau ou soit par le phénomène de wavebreaking<sup>5</sup> [80].

### 5.1.3 Force pondéromotrice

Terminons cette partie sur les solutions des systèmes fluides en abordant un autre phénomène important dans la suite du manuscrit : la force pondéromotrice. C'est une force non-linéaire qui naît lorsque les particules chargées d'un plasma sont soumises à un champ électrique oscillant dont l'amplitude est inhomogène spatialement [81]. Elle est désignée par le vecteur  $\mathbf{F}_p$  et son expression est donnée par la relation suivante [81] :

$$\mathbf{F}_p = -\frac{q_e^2}{4m_e\omega_0^2}\nabla\mathbf{E}^2 \quad (5.5)$$

Cette relation est dérivée dans l'annexe C à partir d'une approche découplant les mouvements hautes fréquences (oscillations dans le champ) et les mouvements moyennés. La force pondéromotrice de l'équation (5.5) traduit une dérive séculaire de l'électron. Cette dérive se fait à travers une force dépendant de la masse et de l'inhomogénéité spatiale du champ électrique, mais ne dépendant pas du signe de la charge. Cette force pousse les particules des zones de champ fort vers les zones de champ faible.

4. C'est-à-dire, plus loin de la résonance.

5. En 1959, il a été montré que dans un plasma froid les oscillations plasmas sont amorties lorsque la vitesse d'oscillation des particules est égale à la vitesse de phase de l'oscillation [179]. En fait, lorsque la vitesse des particules dans le champ est proche de la vitesse de phase, les particules interagissent de façon résonnante avec le champ. Un fort amortissement non linéaire intervient puisque que les électrons résonnants se retrouvent efficacement accélérés par l'oscillation plasma : c'est le wavebreaking [178]. Ce phénomène est probablement le mécanisme d'amortissement de l'onde plasma le plus efficace [180]

Au sein d'un champ oscillant, l'effet d'ordre 1 de la force de Lorentz est l'oscillation des particules à la pulsation  $\omega_0$ , et l'effet d'ordre 2 est la dérive des particules par la force pondéromotrice. Notons finalement que l'expression de la force pondéromotrice est la même pour un champ électromagnétique transverse que pour un champ longitudinal [81].

## 5.2 Validation de l'implémentation du schéma LWLFn 3D

Dans la suite, nous validons le code PSTD/Hydro que nous avons développé. Nous commençons par valider le solveur fluide seul. Le schéma LWLFn est un schéma numérique composant l'algorithme complet décrit sur la figure 4.7, et nous commençons donc par valider son implémentation. Les méthodes pour estimer rigoureusement les erreurs des solutions obtenues numériquement sont pratiquement inexistantes [153] (voir Kröner *et al.*[181] pour un début). Il est donc généralement reconnu que la validation des codes se fait avec des tests sur des problèmes difficiles présentant une solution analytique [153]. C'est le cas du test de Noh 3D [182] qui montre la capacité d'un code à convertir l'énergie cinétique en énergie thermique. Le test de Noh 3D est un problème difficile [153] qui est basé sur la résolution des équations d'Euler 3D (5.6) [159].

$$\frac{\partial}{\partial t} \begin{bmatrix} n_m \\ n_m u_x \\ n_m u_y \\ n_m u_z \\ \epsilon_m \end{bmatrix} + \frac{\partial}{\partial x} \begin{bmatrix} n_m u_x \\ n_m u_x^2 + \frac{p_m}{m_m} \\ n_m u_x u_y \\ n_m u_x u_z \\ u_x(\epsilon_m + p_m) \end{bmatrix} + \frac{\partial}{\partial y} \begin{bmatrix} n_m u_y \\ n_m u_y u_x \\ n_m u_y^2 + \frac{p_m}{m_m} \\ n_m u_y u_z \\ u_y(\epsilon_m + p_m) \end{bmatrix} + \frac{\partial}{\partial z} \begin{bmatrix} n_m u_z \\ n_m u_z u_x \\ n_m u_z u_y \\ n_m u_z^2 + \frac{p_m}{m_m} \\ u_z(\epsilon_m + p_m) \end{bmatrix} = 0 \quad (5.6)$$

avec

$$\epsilon_m = \frac{p_m}{\gamma - 1} + \frac{1}{2} n_m m_m (u_x^2 + u_y^2 + u_z^2) \quad (5.7)$$

où  $n_m$  est la densité du gaz monoatomique,  $u_x$ ,  $u_y$ ,  $u_z$  sont les composantes cartésiennes du vecteur vitesse,  $p_m$  la pression scalaire,  $\epsilon_m$  la densité d'énergie interne et  $\gamma = 5/3$  est l'indice adiabatique du gaz monoatomique. Le système d'équations (5.6) a la même forme que la partie homogène des 3 premières équations du système (3.25). Il est donc intéressant de valider le schéma LWLFn avec un test comme le test de Noh 3D qui se base directement sur la résolution des équations d'Euler 3D.

Les conditions initiales du test de Noh 3D que nous utiliserons sont telles que la densité et la masse sont égales à 1 en tout point, la pression scalaire est nulle et les vecteurs vitesses sont dirigés vers l'origine avec une amplitude égale à 1. Il y a donc un flux d'énergie cinétique dirigé vers le centre [159].

La solution analytique du problème à l'instant  $t$  différent de zéro est un choc sphérique issu de l'origine [159]. À l'intérieur du choc, la densité est de 64, la vitesse est nulle et la pression est de  $64/3$ . La vitesse du choc est de  $1/3$ . À l'extérieur du choc (c'est-à-dire pour un rayon  $r > t/3$ ), la densité est donnée par  $(1 + t/r)^2$ , alors que la vitesse et la pression restent les mêmes que initialement.

Notre fenêtre de calcul sera un cube avec  $0 \leq x \leq 1$ ,  $0 \leq y \leq 1$  et  $0 \leq z \leq 1$  (nous fixons ici  $\Delta x = \Delta y = \Delta z = 1/90$ ). La simulation numérique s'arrêtera à l'instant  $t_{\text{final}} = 2,7$ . Le

pas temporel  $\Delta t$  est calculé avant chaque itération avec la condition CFL suivante [159] :

$$\Delta t = \frac{\Delta x}{\text{Max}(\|u_x + a\|, \|u_y + a\|, \|u_z + a\|, \|u_x - a\|, \|u_y - a\|, \|u_z - a\|)} \quad (5.8)$$

où  $a = \sqrt{\frac{\gamma p_m}{m_m n_m}}$  est la vitesse du son. Cette condition CFL stipule que les zones où les variations opèrent rapidement contraignent le pas temporel pour toute la fenêtre de calcul.

Nous utilisons des conditions de symétrie miroir en  $x = 0$ ,  $y = 0$  et  $z = 0$  (pour réduire le temps de calcul), ainsi que les valeurs de la solution analytique aux limites  $x = 1$ ,  $y = 1$  et  $z = 1$  [159]. La figure 5.3 décrit les conditions aux limites sur une coupe (X-Y).

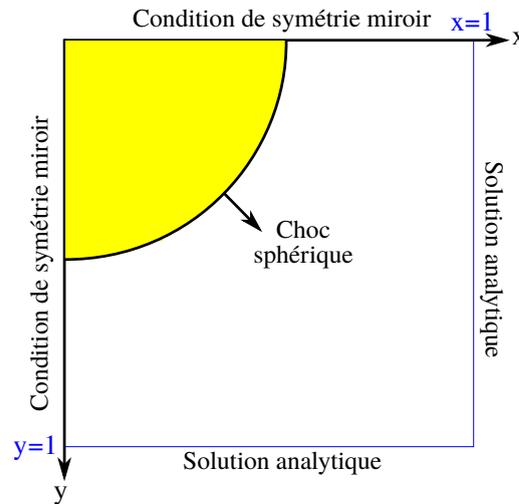


FIGURE 5.3 – Conditions aux limites utilisées pour le test de Noh.

Comme dans la référence de Kucharik *et al.* [159], nous utilisons un schéma composite LWLF4 pour résoudre le système d'équations (5.6). Les résultats numériques à  $t_{\text{final}} = 2,7$  sont affichés sur la figure 5.4.

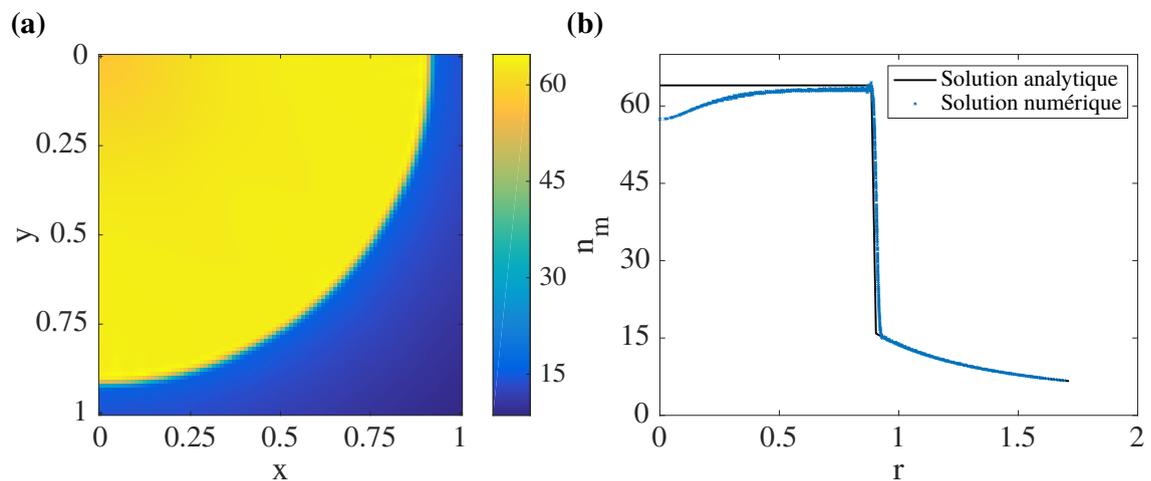


FIGURE 5.4 – (a) Coupe (X-Y) de la densité  $n_n$  à  $t_{\text{final}} = 2,7$ . (b) Graphique en nuage de points de  $n_m$  à  $t_{\text{final}} = 2,7$ . La courbe noire est la solution analytique alors que le nuage de points bleus correspond à la solution numérique obtenue avec un schéma LWLF4.

La figure 5.4(a) montre une coupe (X-Y) de la densité à l'instant  $t_{\text{final}} = 2,7$ . Nous observons bien, comme attendu en théorie, un choc sphérique avec une densité au centre de 64. La figure 5.4(b) montre un graphique affichant la densité du gaz en fonction du rayon  $r$  défini par  $r^2 = x^2 + y^2 + z^2$ . La courbe noire correspond à la solution analytique alors que le nuage de points bleus correspond à la solution numérique obtenue avec le schéma LWLF4 (toutes les coupes radiales de la densité). La solution numérique est donc relativement proche de la solution analytique. Le choc (discontinuité autour de  $r = 0,9$ ) est bien tenu, le schéma LF<sub>2</sub> a permis de bien filtrer les oscillations générées par le schéma LW<sub>2</sub> derrière le choc.

Par ailleurs, le léger creux vers l'origine  $r = 0$  est présent sur de nombreuses références [153, 159]. C'est un problème numérique bien connu sous la dénomination anglaise de *wall-heating*, et l'erreur numérique semble persister même si le pas spatial  $\Delta x$  est réduit [183].

Au vu de la complexité du test de Noh [153], la qualité de la solution numérique de la figure 5.4 est très satisfaisante avec un schéma aussi simple à implémenter que le schéma LWLFn. Les résultats numériques de la figure 5.4 sont similaires à ceux obtenus dans Kucharik *et al.* [159] et sont relativement proches de la solution analytique : l'implémentation du schéma LWLFn 3D est donc validée.

## 5.3 Intégration numérique du terme source

Nous complexifions maintenant le système d'équations à résoudre, en incluant un terme source aux équations d'Euler. Un tel test permettra de valider le couplage LWLFn+RK4 à travers un splitting de Strang, technique qui est notamment utilisée dans l'algorithme complet de la figure 4.7.

Le test de l'instabilité de Rayleigh-Taylor est un bon candidat pour la validation du couplage LWLFn+RK4, puisqu'il se base sur la résolution des équations d'Euler avec un terme source gravitationnelle. Le problème de l'instabilité de Rayleigh-Taylor consiste à placer une zone de forte densité au-dessus d'une zone de faible densité, en présence d'une accélération gravitationnelle [184]. La configuration initiale est donc un équilibre instable, et la moindre perturbation à l'interface entre les densités fluides mène à la croissance d'une instabilité. L'objectif de ce test est d'observer la croissance de l'instabilité de Rayleigh-Taylor. Nous allons faire le test avec une perturbation à l'interface monomode, puis avec une perturbation multimode.

### 5.3.1 Instabilité de Rayleigh-Taylor monomode

Le test de l'instabilité de Rayleigh-Taylor se base sur la résolution des équations d'Euler en présence d'une force gravitationnelle [161] :

$$\frac{\partial}{\partial t} \begin{bmatrix} n_m \\ n_m u_x \\ n_m u_y \\ n_m u_z \\ \epsilon_m \end{bmatrix} + \frac{\partial}{\partial x} \begin{bmatrix} n_m u_x \\ n_m u_x^2 + \frac{p_m}{m_m} \\ n_m u_x u_y \\ n_m u_x u_z \\ u_x(\epsilon_m + p_m) \end{bmatrix} + \frac{\partial}{\partial y} \begin{bmatrix} n_m u_y \\ n_m u_y u_x \\ n_m u_y^2 + \frac{p_m}{m_m} \\ n_m u_y u_z \\ u_y(\epsilon_m + p_m) \end{bmatrix} + \frac{\partial}{\partial z} \begin{bmatrix} n_m u_y \\ n_m u_z u_x \\ n_m u_z u_y \\ n_m u_z^2 + \frac{p_m}{m_m} \\ u_z(\epsilon_m + p_m) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ n_m g \\ 0 \\ n_m m_m u_y g \end{bmatrix} \quad (5.9)$$

avec

$$\epsilon_m = \frac{p_m}{\gamma - 1} + \frac{1}{2} n_m m_m (u_x^2 + u_y^2 + u_z^2) \quad (5.10)$$

où  $g$  est l'accélération de la pesanteur. Le terme source est donc un terme communiquant du mouvement vertical en  $y$  et de l'énergie au fluide à travers la force gravitationnelle.

Les conditions initiales du test de l'instabilité de Rayleigh-Taylor sont présentées sur le site internet du département d'astrophysique de l'université de Princeton<sup>6</sup> [185]. La densité du fluide est de 2 en  $y > 0$  alors qu'elle est de 1 pour  $y \leq 0$ . La pression initiale est donnée par la condition d'équilibre hydrostatique :  $p_m = p_0 + m_m n_m g y$  avec  $P_0 = 2,5$ . La composante  $x$  du vecteur vitesse est nulle alors que la composante  $y$  est définie par<sup>7</sup> :  $u_y = 0,01[1 + \cos(4\pi x)][1 + \cos(3\pi y)]/4$ . L'indice adiabatique  $\gamma$  est finalement fixé à 1,4 et la constante gravitationnelle est telle que  $g = -0,1$ .

La fenêtre de calcul est définie par  $-0,25 \leq x < 0,25$  et  $-0,75 \leq y \leq 0,75$ . Nous prenons une grille avec un seul point d'épaisseur en  $z$ . Le pas temporel varie à chaque itération et est défini par :

$$\Delta t = \frac{\Delta x}{\text{Max}(\|u_x + a\|, \|u_y + a\|, \|u_z + a\|, \|u_x - a\|, \|u_y - a\|, \|u_z - a\|)} \quad (5.11)$$

où  $a = \sqrt{\frac{\gamma p_m}{m_m n_m}}$  est la vitesse du son.

Les conditions aux limites sont périodiques en  $\|x\| = 0,25$  et de symétrie miroir sont en  $\|y\| = 0,75$ . En  $z$ , les conditions sont périodiques : il y a donc une invariance du problème en  $z$ .

Les résultats numériques de la densité à  $t = 12,75$  sont présentés sur les figures 5.5(a) et 5.5(b). La figure 5.5(a) a été obtenue avec un pas spatial  $\Delta x = \Delta y = \Delta z = 0,005$  alors que la 5.5(b) a été obtenue avec un pas spatial plus fin  $\Delta x = \Delta y = \Delta z = 0,0025$ . La résolution numérique s'est faite avec le couplage LWLFn+RK4 à travers un splitting de Strang. Nous avons fixé  $n = 400$  et donc utilisé un schéma LWLF400. Il est possible de prendre un nombre  $n$  grand ici, puisque le problème ne présente pas de fortes discontinuités : l'emploi du schéma LW<sub>2</sub> (plus précis que le schéma LF<sub>2</sub>) peut donc se faire en grande majorité.

L'instabilité de Rayleigh-Taylor est clairement visible sur les figures 5.5(a) et 5.5(b). Les faibles densités situées en bas tentent de remonter alors que les plus fortes densités tentent de redescendre sous l'effet du champ de gravitation. Les détails sur la figure 5.5(b) sont légèrement plus fins que ceux sur la figure 5.5(a) ce qui est normal puisque la résolution spatiale est plus fine.

Nous remarquons que nous n'avons pas un résultat identique à ceux des figures 5.5(c) et 5.5(d) obtenues par J. Stones dans les mêmes conditions : la position et l'amplitude sont similaires, mais la forme de l'instabilité est légèrement différente.

6. La page internet est mis à jour par J. Stone, le co-développeur des codes ZEUS et ATHENA, très largement utilisés en astrophysique.

7. D'après J. Stone [185], il est préférable de perturber la variable vitesse plutôt que la variable densité, afin d'éviter des erreurs de grille. C'est pour cette raison que la perturbation se fait sur une des composantes du vecteur vitesse. La perturbation en  $y$  se fait avec une seule composante fréquentielle, c'est pour cette raison que ce test d'instabilité de Rayleigh-Taylor est dit *monomode*.

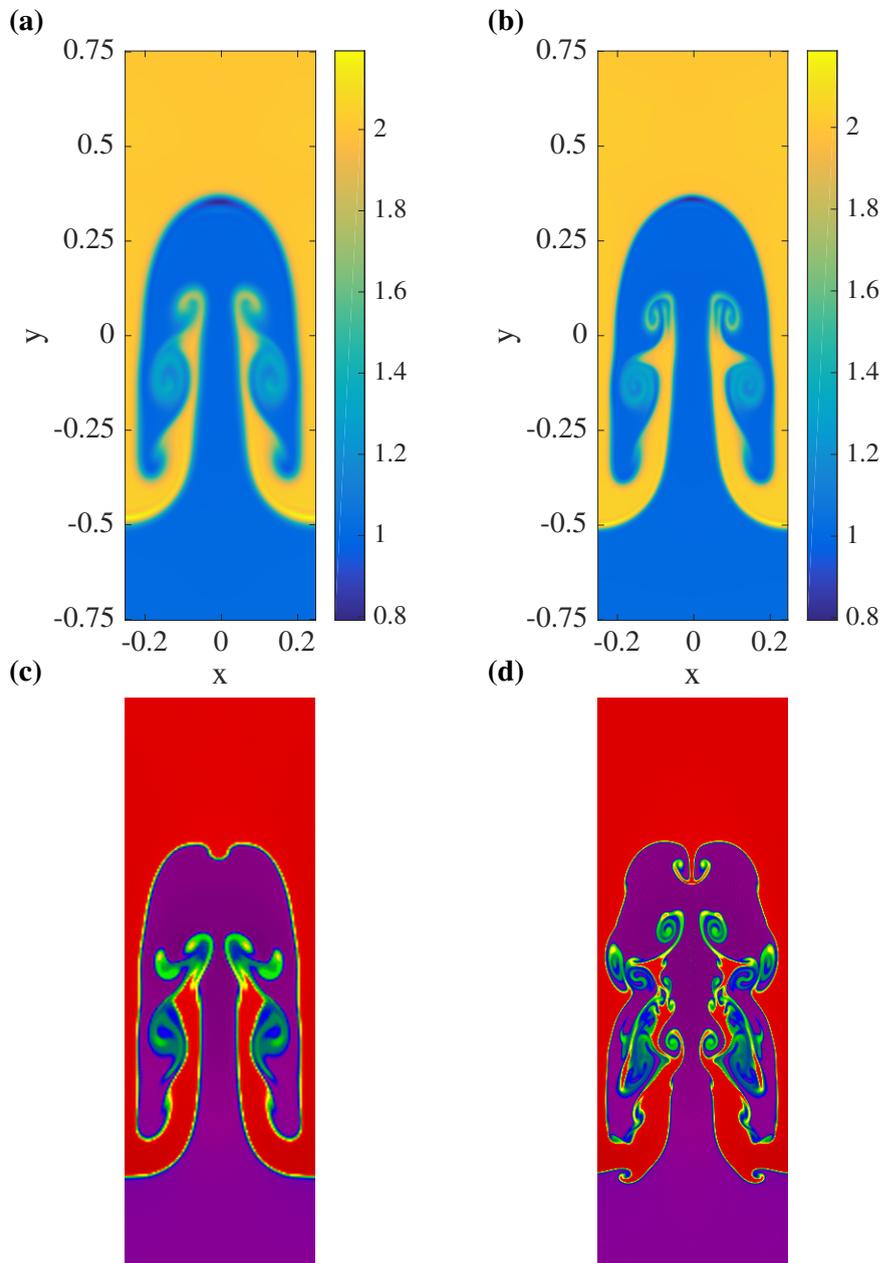


FIGURE 5.5 – Coupes (X-Y) de la densité numérique  $n_m$  à  $t = 12,75$ . (a) solveur LWLF400+RK4  $\Delta x = \Delta y = \Delta z = 0,005$  (b) solveur LWLF400+RK4  $\Delta x = \Delta y = \Delta z = 0,0025$  (c) solveur HLLC (Harten-Lax-van Leer-Contact) du code ATHENA  $\Delta x = \Delta y = \Delta z = 0,005$  (d) solveur HLLC [185]  $\Delta x = \Delta y = \Delta z = 0,0025$ . Les figures (c) et (d) sont extraites de la référence [185] et la barre de couleur non affichée sur ces figures est comprise entre 0,9 et 2,1.

J. Stone souligne que la façon dont le terme source est intégré dans l'algorithme peut avoir des effets importants sur le résultat numérique [185], et que la netteté de l'interface entre les deux zones de densité est une indication de la diffusion numérique du schéma [184]. Cela nous permet de comprendre qu'il est difficile de retrouver exactement le même niveau de détail sur la figure finale en utilisant deux techniques d'intégration différentes.

La figure 5.6 issue de la référence [153] met en lumière cette problématique en comparant notamment les résultats obtenus avec 8 schémas numériques différents dans conditions initiales identiques<sup>8</sup>. Nous pouvons clairement voir cette figure que les résultats sont différents avec les 8 schémas. Les différences entre les figures 5.5(a)(b) et les figures 5.5(c)(d) ne sont donc pas surprenantes au vu des résultats obtenus dans R. Liska *et al.* [153]. De façon à renforcer la validation de l’algorithme, nous avons vérifié que les premiers instants de la simulation ( $t < 1,5$ ) étaient en accord avec la théorie de croissance de l’instabilité de Rayleigh-Taylor en régime linéaire. Nous ne présenterons pas cette étude ici puisqu’elle nécessite l’introduction de nouvelles notions comme le nombre d’Atwood [186], qui ne seront pas utiles dans la suite de ce manuscrit.

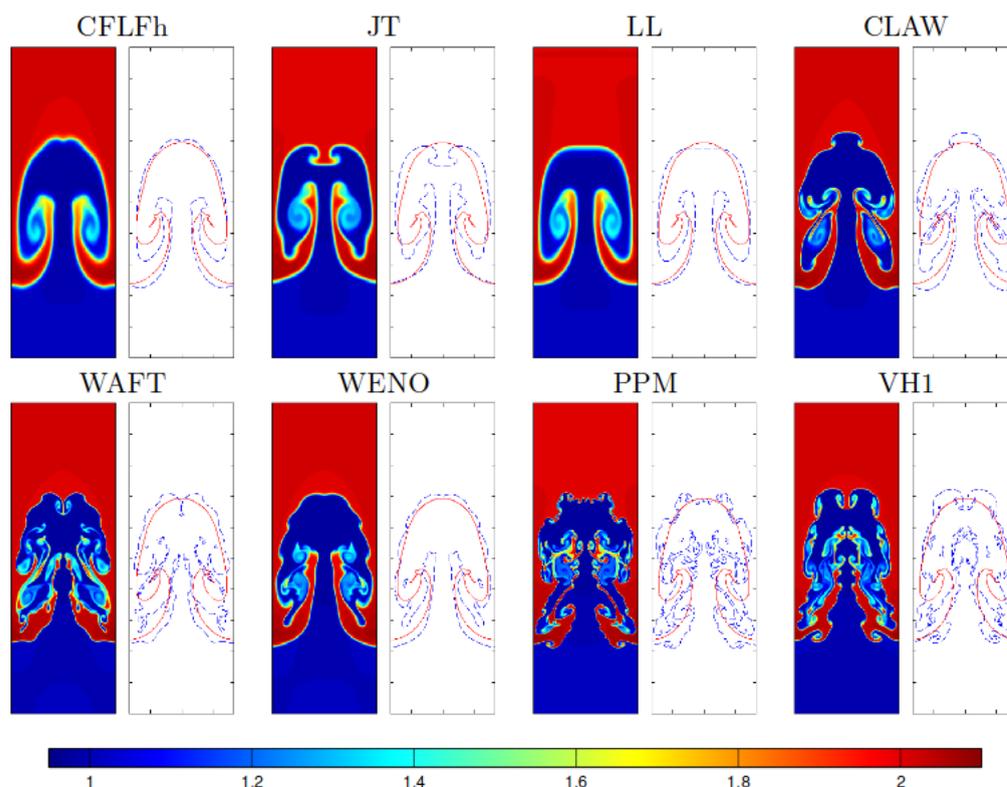


FIGURE 5.6 – Résultats obtenus sur un problème d’instabilité de Rayleigh-Taylor avec 8 schémas numériques différents. Figure reprise de la référence R. Liska *et al.* [153].

### 5.3.2 Instabilité de Rayleigh-Taylor multimode

Nous réalisons brièvement un test supplémentaire en prenant cette fois une perturbation à l’interface multimode. Les conditions initiales du test de Rayleigh-Taylor multimode sont également données sur le site internet de l’université de Princeton [185]. Il y a notamment deux changements à effectuer par rapport au test monomode :

1. La composante  $u_y$  est maintenant définie par :  $u_y = A[1 + \cos(8\pi y/3)]/2$  où  $A$  est un nombre aléatoire.

<sup>8</sup>. Ces conditions initiales sont légèrement différentes de celles que nous avons utilisées pour notre test.

2. La dimension de la fenêtre de calcul est modifiée dans la direction  $y$  :  $-0,375 \leq y \leq 0,375$ .

La densité numérique, obtenue avec le schéma LWLF400+RK4, est représentée à l'instant  $t = 4,47$  sur la figure 5.7(a) et à l'instant  $t = 13,42$  sur la figure 5.7(b).

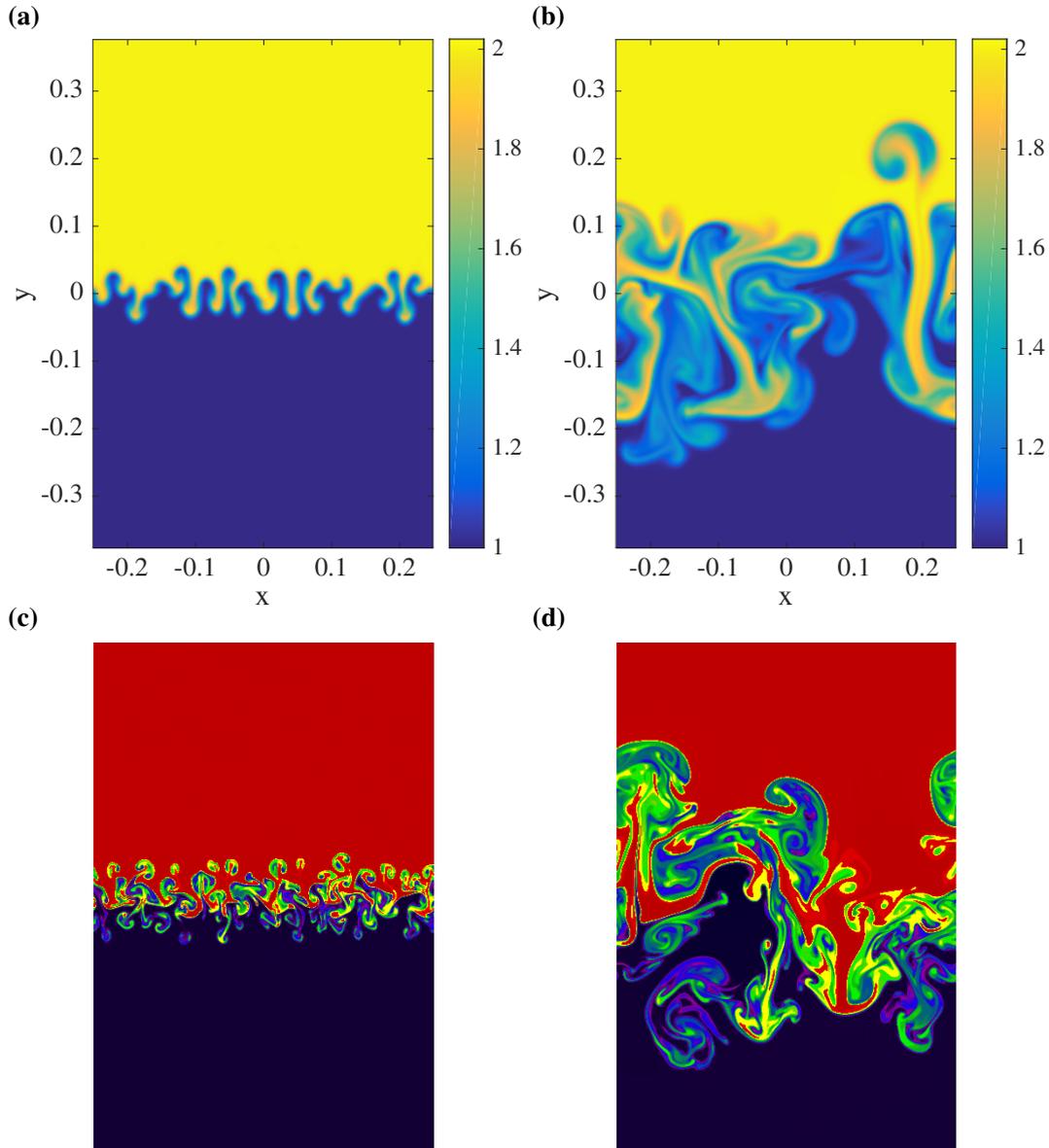


FIGURE 5.7 – (a) Coupe (X-Y) de la densité à  $t = 4,47$  obtenue avec un solveur LWLF400+RK4 (b) Coupe (X-Y) de la densité à  $t = 13,42$  obtenue avec un solveur LWLF400+RK4 (c) Coupe (X-Y) de la densité à  $t = 4,47$  obtenue avec un solveur HLLC du code ATHENA [185] (d) Coupe (X-Y) de la densité à  $t = 13,42$  obtenue un solveur HLLC du code ATHENA [185]. Les figures (c) et (d) sont extraites de la référence [185] et la barre de couleur non affichée sur ces figures est comprise entre 0,99 et 2,01. Les quatre figures sont obtenues en prenant initialement une perturbation multimode, et un pas spatial  $\Delta x = \Delta y = \Delta z = 0,0025$ .

Les résultats des figures 5.7(a)(b) peuvent encore une fois être comparés quantitativement aux figures 5.7(c)(d) obtenues par J. Stone [185]. Les résultats de ces deux simulations

ne peuvent pas être identiques puisque les nombres aléatoires  $A$  ne le sont pas. Cependant, en comparant les figures 5.7(a)(b) et 5.7(c)(d), nous pouvons voir que la position, l'amplitude et la forme de l'instabilité sont relativement similaires.

Les résultats obtenus avec la méthode de couplage LWLFn+RK4 à travers un splitting de Strang sont donc encore une fois satisfaisants. Nous n'allons pas rentrer plus dans les détails sur la validation de ce couplage, puisque c'est la validation de l'intégration de l'algorithme complet avec les équations de Maxwell qui nous intéresse.

## 5.4 Validation de l'algorithme PSTD/Hydro

L'objectif de cette section est de valider l'algorithme complet de la figure 4.7 (code PSTD/Hydro) avec des résultats issus de la littérature.

La validation se fera dans un premier temps en considérant un plasma d'électrons et d'ions, puisque les résultats de référence sont nombreux dans la littérature pour ce type de système. Parmi les prochains tests de validation, nous allons tenter de retrouver numériquement les relations de dispersion des 3 modes propres d'un plasma tiède décrit dans la section 5.1.1, puis nous allons effectuer un test sur l'absorption résonnante décrite dans la section 5.1.2, avant de valider l'implémentation du terme collisionnel dans un autre test. Un test supplémentaire sera réalisé sur la force pondéromotrice, phénomène physique discutée dans la section 5.1.3.

### 5.4.1 Système d'équations à résoudre

Les cinq tests qui vont suivre sont donc basés sur la résolution numérique du système d'équations décrivant l'évolution d'un plasma électrons/ions collisionnel. Dans un premier temps, nous omettons les termes d'ionisation, et nous considérons un plasma dans le vide :  $\epsilon_r = 1$ . En utilisant le terme collisionnel BGK de la section 3.2.1 pour modéliser les collisions élastiques électron/ion, le système d'équations à résoudre avec l'algorithme PSTD/Hydro est le suivant :

$$\frac{\partial}{\partial t} \begin{bmatrix} n_e \\ n_e \mathbf{u}_e \\ \epsilon_e \\ n_i \\ n_i \mathbf{u}_i \\ \epsilon_i \end{bmatrix} + \nabla \cdot \begin{bmatrix} n_e \mathbf{u}_e \\ n_e \mathbf{u}_e \otimes \mathbf{u}_e + \frac{p_e}{m_e} \mathbf{I} \\ (\epsilon_e + p_e) \mathbf{u}_e \\ n_i \mathbf{u}_i \\ n_i \mathbf{u}_i \otimes \mathbf{u}_i + \frac{p_i}{m_i} \mathbf{I} \\ (\epsilon_i + p_i) \mathbf{u}_i \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ \frac{n_e q_e}{m_e} (\mathbf{E} + \mathbf{u}_e \times \mathbf{B}) \\ n_e q_e \mathbf{u}_e \cdot \mathbf{E} \\ 0 \\ \frac{n_i q_i}{m_i} (\mathbf{E} + \mathbf{u}_i \times \mathbf{B}) \\ n_i q_i \mathbf{u}_i \cdot \mathbf{E} \end{bmatrix} + \mathbf{S}^{\text{BGK}} \quad (5.12)$$

avec

$$\mathbf{S}^{\text{BGK}} = \begin{bmatrix} 0 \\ -n_e \nu_{ei} \frac{\mu_{ei}}{m_e} (\mathbf{u}_e - \mathbf{u}_i) \\ -\kappa_{ei} \nu_{ei} \left[ \frac{p_e}{\gamma-1} - \frac{n_e}{n_i} \frac{p_i}{\gamma-1} + \frac{n_e}{2} (m_e \mathbf{u}_e^2 - m_i \mathbf{u}_i^2 + (m_i - m_e) \mathbf{u}_e \cdot \mathbf{u}_i) \right] \\ 0 \\ n_e \nu_{ei} \frac{\mu_{ei}}{m_i} (\mathbf{u}_e - \mathbf{u}_i) \\ +\kappa_{ei} \nu_{ei} \left[ \frac{p_e}{\gamma-1} - \frac{n_e}{n_i} \frac{p_i}{\gamma-1} + \frac{n_e}{2} (m_e \mathbf{u}_e^2 - m_i \mathbf{u}_i^2 + (m_i - m_e) \mathbf{u}_e \cdot \mathbf{u}_i) \right] \end{bmatrix} \quad (5.13)$$

où  $\kappa_{ei} \equiv \frac{2m_e m_i}{(m_e + m_i)^2}$  et  $\mu_{ei} \equiv \frac{m_e m_i}{m_e + m_i}$ . Pour chacune des espèces  $s$  ( $s = e$  pour les électrons et  $s = i$  pour les ions), la densité d'énergie interne s'écrit :

$$\epsilon_s \equiv \frac{p_s}{\gamma - 1} + \frac{1}{2} n_s m_s \mathbf{u}_s^2 \quad (5.14)$$

Les équations de Maxwell a intégrer sont :

$$\nabla \times \mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} \quad (5.15)$$

$$\nabla \times \mathbf{B} = \mu_0 \mathbf{J} + \frac{1}{c^2} \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} \quad (5.16)$$

avec

$$\mathbf{J} = q_e n_e \mathbf{u}_e + q_i n_i \mathbf{u}_i \quad (5.17)$$

## 5.4.2 Paramètres des 5 prochains tests

Les paramètres numériques et les conditions aux limites (CL) des 5 tests sont résumés dans le tableau 5.1. Pour les 5 tests, nous fixons  $m_e = 9,11 \times 10^{-31}$  kg,  $q_e = -1,60 \times 10^{-19}$  C,  $q_i = -q_e$ ,  $\epsilon_0 = 8,85 \times 10^{-12}$  F/m,  $c = 3,00 \times 10^8$  m/s,  $k_B = 1,38 \times 10^{-23}$  J/K et  $\epsilon_r = 1$ .

TABLE 5.1 – Résumé des paramètres et conditions aux limites des 5 prochains tests.

Paramètres	Test 1	Test 2	Test 3	Test 4	Test 5
$\Delta x = \Delta y = \Delta z$	10 nm	0,2 nm	60 nm	20 nm	10 nm
$\Delta t$	14 as	6,34 as	96 as	28 as	14 as
LWLFn	LWLF5000	LWLF5000	LWLF5000	LWLF5000	LWLF5000
$N_x$	4096	16384	512	2048	4096
$N_y$	2	2	2	2	2
$N_z$	2	2	512	2	2
CL $x$ PSTD	Périodique	Périodique	PML	Périodique	Périodique
CL $y$ PSTD	Périodique	Périodique	Périodique	Périodique	Périodique
CL $z$ PSTD	PML	PML	PML	PML	PML
CL $x$ LWLFn	Périodique	Périodique	Ouvert	Périodique	Périodique
CL $y$ LWLFn	Périodique	Périodique	Périodique	Périodique	Périodique
CL $z$ LWLFn	Ouvert	Ouvert	Ouvert	Ouvert	Ouvert
$\mathbf{u}_e$ et $\mathbf{u}_i$ initiales	<b>0</b>	<b>0</b>	<b>0</b>	<b>0</b>	<b>0</b>
$m_i/m_e$	1800	25	1800	1800	1800
$p_e$ et $p_i$ initiales	0	voir test 2	0	0	0
$\nu_{ei}$ (fs <sup>-1</sup> )	0	0	0	variable	0.5
$\gamma$	5/3	5/3	5/3	5/3	5/3

### 5.4.3 Test 1 : Mode transverse

La propagation d'une onde électromagnétique transverse au sein d'un plasma est caractérisée par une relation de dispersion (5.1) qui peut se réécrire sous la forme suivante :

$$\lambda_p = \frac{2\pi c}{\sqrt{\omega^2 - \omega_{pe}^2 - \omega_{pi}^2}} \quad (5.18)$$

où  $\lambda_p$  est la longueur d'onde au sein du plasma. L'objectif du premier test est de retrouver numériquement la relation (5.18) avec le code PSTD/Hydro.

Pour ce premier test, nous considérons les densités et champs initiaux suivants :

- Les densités initiales sont uniformes et telles que  $n_{e0} = n_{i0}$ . Plusieurs simulations seront effectuées avec des densités différentes comprises entre  $0,05 \times 10^{21} \text{ cm}^{-3}$  et  $1,4 \times 10^{21} \text{ cm}^{-3}$ .
- Les champs électriques et magnétiques sont initialement nuls partout. Une onde plane monochromatique se propageant en  $z$  est injectée numériquement<sup>9</sup>. L'onde électromagnétique est polarisée selon  $x$ , a une longueur d'onde dans le vide  $\lambda_0 = 0,8 \text{ }\mu\text{m}$  et une amplitude dans le vide  $E_0 = 10^{10} \text{ V/m}$ .

Le temps final des simulations avec le code PSTD/Hydro est  $t_{\text{final}} = 150 \text{ fs}$ . Pour chaque simulation, une transformée de Fourier selon  $z$  est effectuée sur la composante  $E_x$  de façon à extraire la longueur dans le plasma  $\lambda_p$ . Les longueurs d'ondes numériques en fonction des densités du plasma sont affichées avec des croix rouges sur la figure 5.8. Les barres d'erreur sont liées à l'échantillonnage. Les résultats numériques sont en excellent accord avec la courbe théorique en pointillés noirs obtenue à partir de la relation (5.18). Nous pouvons donc conclure que le code PSTD/Hydro permet de retrouver avec une bonne précision ( $< 1\%$ ) la relation de dispersion d'une onde électromagnétique dans un plasma.

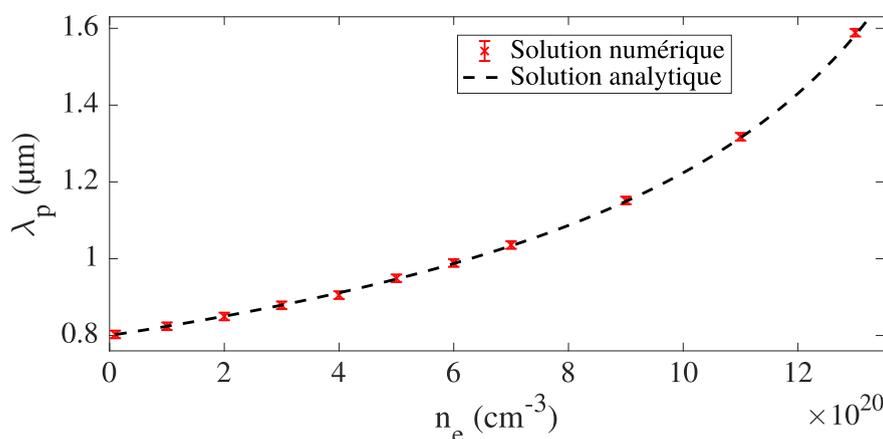


FIGURE 5.8 – Longueur d'onde de l'onde électromagnétique dans le plasma en fonction de la densité. Les résultats numériques sont affichés avec des croix rouges alors que la courbe en pointillés noirs est obtenue à partir de la relation théorique (5.18).

9. Un régime transitoire de  $\sim 50 \text{ fs}$  est utilisé afin d'avoir le spectre le plus monochromatique possible au moment de la mesure de la longueur d'onde dans le plasma.

### 5.4.4 Test 2 : Modes longitudinaux

L'objectif du second test est de retrouver la relation de dispersion du mode longitudinal électronique et les asymptotes de la relation de dispersion du mode longitudinal ionique : ces relations ont été écrites dans la section 5.1.1. Rappelons que la relation de dispersion pour le mode longitudinal électronique est donnée par :

$$\omega^2 = \omega_{pe}^2 + \omega_{pi}^2 + \frac{\gamma k_B T_e}{m_e} k^2 \quad (5.19)$$

Par ailleurs, les asymptotes basses-fréquences et hautes-fréquences de la relation de dispersion du mode longitudinal ionique sont données respectivement par :

$$\omega^2 = \gamma \frac{k_B (T_i + T_e)}{m_i} k^2 \quad (5.20)$$

et :

$$\omega^2 = \gamma \frac{k_B T_i}{m_i} k^2 \quad (5.21)$$

Concernant les conditions initiales, la densité d'ions initiale est uniforme :  $n_i = 5 \times 10^{21} \text{ cm}^{-3}$ . Pour les électrons, elle est quasi-uniforme mais présente une légère perturbation autour de  $z = 0$  :  $n_e = n_{e0} \left[ 1 + \Delta d \frac{z}{W_z} \exp(-z^2/W_z^2) \right]$  où  $n_{e0} = 5 \times 10^{21} \text{ cm}^{-3}$ ,  $\Delta d = 10^{-10}$  et  $W_z = 1 \text{ nm}$ . Il est possible de remonter au champ initial associé à cette perturbation en utilisant la loi de Maxwell-Gauss (3.29), et la composante  $E_z$  associée à cette perturbation est :  $E_z = -\frac{n_{e0} q_e W_z \Delta d}{2\epsilon_0} \exp(-z^2/W_z^2)$ . Les autres composantes du champ électrique et du champ magnétique sont initialement nulles. Par ailleurs, les températures électronique et ionique initiales sont fixées à  $T_e = 5 \times 10^6 \text{ K}$  et  $T_i = 2 \times 10^5 \text{ K}$ . Les pressions initiales sont liées aux températures via la loi des gaz parfaits :  $p_s = n_s k_B T_s$ . Pour terminer, le rapport entre la masse ionique  $m_i$  et la masse électronique  $m_e$  est fixé à 25 de façon à observer le mode longitudinal ionique et le mode longitudinal électronique dans une même simulation.

Nous traçons sur la figure 5.9 le diagramme de dispersion  $(\omega, k_z)$  du champ  $E_z$  après 130 fs de simulation avec le code PSTD/Hydro.

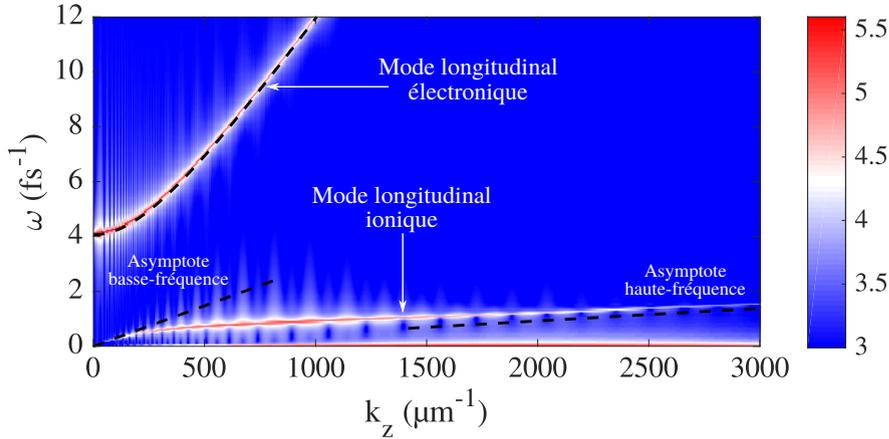


FIGURE 5.9 – Diagramme de dispersion  $(\omega, k_z)$  du champ  $E_z$ . L'échelle de couleur logarithmique est associée aux résultats numériques obtenus avec le code PSTD/Hydro. Les lignes en pointillés noirs sont basées sur les équations théoriques (5.19), (5.20) et (5.21).

Ce diagramme de dispersion a été tracé avec une échelle de couleur logarithmique. Les relations théoriques (5.19), (5.20) et (5.21) sont représentées en pointillés noirs sur la figure 5.9. Nous pouvons remarquer que les résultats numériques obtenus avec code PSTD/Hydro sont en bon accord avec les courbes théoriques basées sur les équations (5.19), (5.20) et (5.21). Pour conclure, le code PSTD/Hydro permet de retrouver les relations de dispersion des modes longitudinaux.

### 5.4.5 Test 3 : Absorption résonnante

Dans un troisième test, nous vérifions que le code PSTD/Hydro permet de modéliser le phénomène de conversion de mode (absorption résonnante discutée en début de chapitre). La dérivation de solutions analytiques pour ce problème complexe nécessite un certain nombre d'approximations, qui limite la validité du résultat, notamment au niveau des zones proches de la densité critique. Le phénomène d'absorption résonnante a été largement étudiée, et nous avons sélectionné quelques résultats de la littérature pour effectuer des comparaisons avec les résultats numériques obtenus avec le code PSTD/Hydro. Parmi les résultats sélectionnés, nous avons choisi les asymptotes théoriques de Speziale *et al.* [187] dérivées analytiquement, les résultats analytiques de Hinkel-Lipsker *et al.* [188], ainsi que les résultats numériques Particle-In-Cell (PIC) de Forslund *et al.* [189]. Notons au passage que les résultats sélectionnés sont en accord avec les résultats expérimentaux présentés dans *The physics of laser plasma interactions* de W. Kruer [178].

Le dispositif numérique utilisé est décrit sur la figure 5.10(a) :

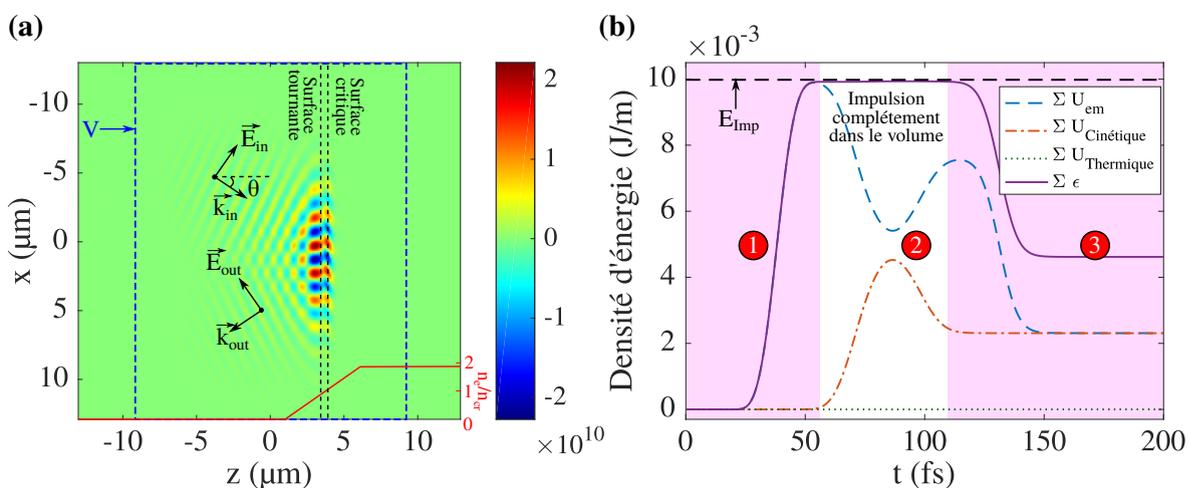


FIGURE 5.10 – (a) Principe de la simulation numérique du test 3. Une impulsion laser polarisée TM arrive en incidence oblique sur un plasma inhomogène suivant l'axe  $z$ . La ligne rouge en bas à droite de la figure correspond au profil de densité. Le contour en pointillés bleus correspond au volume d'intégration  $V$ . Les lignes verticales en pointillés rouges donnent les positions des surfaces critique et tournante. (b) Évolutions temporelles des densités linéaires d'énergie : énergie électromagnétique (tirets bleus), énergie cinétique (tirets-pointillés rouges), énergie thermique (pointillés verts), et énergie totale (ligne continue violette). Pour obtenir ce résultat, l'angle d'incidence est  $\theta = 15^\circ$ . La densité linéaire d'énergie théorique  $E_{Imp}$  est affichée en pointillés noirs sur la figure. Les résultats des figures a) et b) sont obtenus avec le code PSTD/Hydro.

Une impulsion laser spatialement gaussienne (avec un waist  $w_0 = 4 \mu\text{m}$ ) se propage en incidence oblique avec un angle d'incidence  $\theta$  sur une rampe de plasma. Le profil de densité est invariant dans les directions  $x$ ,  $y$  et la densité augmente linéairement dans la direction  $z$ . Le profil de densité est indiqué avec la ligne rouge située en bas à droite de la figure 5.10(a). L'impulsion laser polarisé TM est décrite temporellement par une période de  $\sin^2$  définie<sup>10</sup> par  $T_{\text{Imp}} = 40 \text{ fs}$  (profil d'amplitude du champ). L'impulsion laser est invariante dans la direction  $y$ . La surface critique ( $n = n_{cr}$ ) et la surface tournante ( $n = n_{cr} \cos^2 \theta$ ) sont tracées avec des pointillés noirs sur la figure 5.10(a).

Pour ce troisième test, nous considérons les densités et les champs initiaux suivants :

- Les densités initiales  $n_{i0}$  et  $n_{e0}$  ont la forme suivante (en  $\text{cm}^{-3}$ ) :

$$n_{i0} = n_{e0} = \begin{cases} 0 & z < 1 \mu\text{m} \\ 0,57 \times 10^{21}(z - 1) & 1 \mu\text{m} \leq z \leq 6 \mu\text{m} \\ 2,85 \times 10^{21} & z > 6 \mu\text{m} \end{cases} \quad (5.22)$$

Ce profil correspond à une échelle de densité plasma  $L = 3,08 \mu\text{m}$  correspondant à la longueur à laquelle la densité critique est atteinte. Un faible fond de densité de  $10^{19} \text{ cm}^{-3}$  est ajouté partout dans la fenêtre de calcul afin d'éviter les divisions par zéro dans l'algorithme numérique ainsi qu'une trop forte discontinuité au début de la rampe de plasma.

- Les champs électriques et magnétiques initiaux sont initialement nuls. L'impulsion laser est injectée sur une ligne située en  $z = -12 \mu\text{m}$ . La longueur d'onde centrale dans le vide de l'impulsion est  $\lambda_0 = 0,8 \mu\text{m}$  et son amplitude maximale dans le vide est  $E_0 = 10^{10} \text{ V/m}$ .

Au coeur de ce test, nous étudions la conversion d'énergie. Nous considérons alors un volume fermé  $V$  tracé en pointillés bleus sur la figure 5.10(a), compris entre  $z_1 = -9 \mu\text{m}$  et  $z_2 = 9 \mu\text{m}$ . Ce volume contient tous les points dans les directions  $x$  et  $y$ . L'étude de la conservation de l'énergie nécessite de définir les différentes formes d'énergie présentent dans le problème : énergie électromagnétique, énergie cinétique des fluides, énergie thermique des fluides et énergie théorique de l'impulsion.

La densité volumique d'énergie électromagnétique est définie par [56] :

$$U_{\text{em}} = \frac{1}{2} [\mathbf{E} \cdot \mathbf{D} + \mathbf{B} \cdot \mathbf{H}] = \frac{1}{2} \left[ \epsilon_0 \epsilon_r |\mathbf{E}|^2 + \frac{1}{\mu_0} |\mathbf{B}|^2 \right] \quad (5.23)$$

La densité linéaire d'énergie électromagnétique  $\Sigma U_{\text{em}}$  est calculée en intégrant la densité volumique d'énergie  $U_{\text{em}}$  sur le volume  $V$  puis en divisant par l'épaisseur de la boîte dans la direction  $y$ .

La densité volumique d'énergie thermique s'écrit  $U_{\text{Thermique}} \equiv \sum_s \frac{p_s}{\gamma - 1}$  et la densité volumique d'énergie cinétique est  $U_{\text{Cinétique}} \equiv \sum_s \frac{1}{2} m_s n_s |\mathbf{u}_s|^2$ . Avec la même méthode que pour l'énergie électromagnétique<sup>11</sup>, nous pouvons déduire les densités linéaires d'énergie thermique  $\Sigma U_{\text{Thermique}}$  et cinétique  $\Sigma U_{\text{Cinétique}}$ . Finalement, la densité linéaire d'énergie totale est définie par :  $\Sigma \epsilon = \Sigma U_{\text{em}} + \Sigma U_{\text{Thermique}} + \Sigma U_{\text{Cinétique}}$ .

10.  $G(t) = \sin^2 \frac{\pi t}{T_{\text{Imp}}}$  pour  $0 \leq t \leq T_{\text{Imp}}$  et sinon  $G(t) = 0$ .

11. Intégration de la densité volumique d'énergie sur le volume  $V$  puis division par l'épaisseur de la boîte dans la direction  $y$ .

Par ailleurs, le calcul analytique de la densité linéaire d'énergie de l'impulsion incidente  $E_{\text{Imp}}$  dans le plan (X-Z) donne le résultat suivant :

$$E_{\text{Imp}} = \frac{E_0^2}{2} \sqrt{\frac{\epsilon_0}{\mu_0}} \frac{3}{8} T_{\text{Imp}} w_0 \sqrt{\frac{\pi}{2}} = 10 \text{ mJ/m} \quad (5.24)$$

La figure 5.10(b) retrace l'évolution des différentes densités linéaires d'énergie lors de la simulation avec le code PSTD/Hydro avec un angle d'incidence  $\theta = 15^\circ$ . Nous observons trois séquences temporelles principales, indiquées par des cercles rouges sur la figure 5.10(b) :

1. La densité d'énergie électromagnétique (tirets bleus) augmente lorsque l'impulsion entre dans le volume  $V$  entre  $t = 0$  and  $t < 50$  fs. À  $t = 55$  fs, l'impulsion est contenue complètement dans le volume  $V$  mais n'a pas encore interagi avec la rampe de plasma. La densité d'énergie numérique dans le volume correspond bien à celle prédite en théorie par la relation (5.24) (pointillés noirs).
2. Entre 55 fs - 110 fs, un échange d'énergie avec le plasma a lieu : l'énergie cinétique des fluides (tirets-pointillés rouges) augmente alors que l'énergie électromagnétique diminue. Remarquons la conservation de l'énergie totale (ligne continue violette) pendant cette séquence où l'impulsion est contenue complètement dans le volume  $V$ .
3. Entre 110 fs et 150 fs, le faisceau réfléchi quitte le volume  $V$  ce qui engendre une diminution de l'énergie électromagnétique. Nous remarquons qu'après  $t = 150$  fs, une fraction de l'énergie est restée dans le volume  $V$  : cette énergie résiduelle correspond à l'énergie de l'onde électromagnétique convertie en mode longitudinal électronique (onde plasma). Le facteur en conversion d'énergie est ici de 46%.

Notons finalement que du fait que la fréquence de collision soit nulle dans ce test, l'énergie thermique (pointillés verts) est restée nulle durant toute la simulation numérique.

Nous avons répété le même type de simulation numérique, mais avec différents angles d'incidence. Les facteurs de conversion numériques obtenus sont représentés avec des croix bleues sur la figure 5.11.

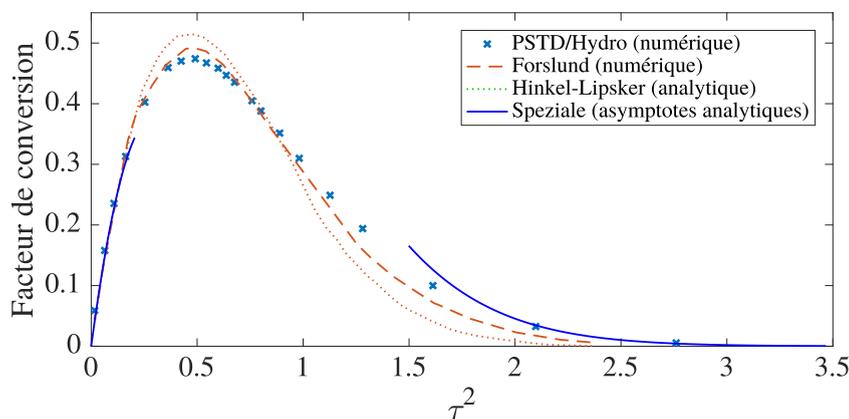


FIGURE 5.11 – Facteur de conversion en fonction de  $\tau^2 = \left(\frac{2\pi L}{\lambda_0}\right)^{2/3} \sin^2 \theta$ . Les croix bleues correspondent aux points numériques obtenus avec le code PSTD/Hydro. Les résultats des autres références sont montrés pour comparaison : simulation PIC de Forslund *et al.* (tirets rouges) [189], approche analytique de Hinkel-Lipsker *et al.* (pointillés verts) [188] et les asymptotes théoriques de Speziale *et al.* (lignes bleues) [187].

Les résultats des références précédemment discutées sont affichés sur cette figure pour réaliser des comparaisons. Nous pouvons remarquer que les résultats numériques obtenus avec le code PSTD/Hydro sont proches des résultats des autres références.

Le fait d'avoir injecté une impulsion courte (polychromatique) spatialement gaussienne au lieu d'une onde plane monochromatique peut expliquer les légères différences avec les autres références. De plus, les résultats analytiques de Speziale *et al.* [187] et Hinkel-Lipsker *et al.* [188] sont obtenus à partir d'hypothèses qui ne sont pas incluses dans le modèle plasma à deux fluides que nous résolvons. Ces deux commentaires peuvent expliquer les légères différences observées entre les résultats obtenus avec le code PSTD/Hydro, et les résultats des autres références. Malgré tout, les résultats obtenus avec le code PSTD/Hydro sont satisfaisants puisqu'ils sont en bon accord avec l'état de l'art.

### 5.4.6 Test 4 : Plasmas collisionnels

Un quatrième test est réalisé afin de valider l'intégration du terme collisionnel BKG dans le code PSTD/Hydro. Dans ce test, nous réalisons des comparaisons entre les résultats numériques avec le terme BGK et un simple modèle théorique de Drude. Le modèle de Drude suppose un plasma froid, des ions lourds et fournit la permittivité complexe suivante [190] :

$$\epsilon_{\text{Drude}} = 1 - \frac{\omega_{\text{pe}}^2 \tau_c^2}{1 + \omega_0^2 \tau_c^2} + i \frac{\omega_{\text{pe}}^2 \tau_c}{\omega_0 (1 + \omega_0^2 \tau_c^2)} \quad (5.25)$$

où  $\tau_c$  est le temps de collision du modèle de Drude et  $\omega_0$  est la pulsation de l'onde électromagnétique.

Nous pouvons lier le temps de collision du modèle de Drude  $\tau_c$  avec le temps de collision du terme BGK défini par  $\tau_{\text{ei}} \equiv \frac{1}{\nu_{\text{ei}}}$ . En effet, ces temps ont été inclus de façon similaire dans l'équation du mouvement : en supposant  $\mathbf{u}_i \ll \mathbf{u}_e$ ,  $m_e \ll m_i$  et  $p_e = 0$ , l'équation du mouvement des électrons du modèle fluide est la même que l'équation du mouvement des électrons permettant de dériver la permittivité du modèle de Drude [190]. Dans de telles conditions, il est alors possible de réaliser des comparaisons entre le l'approche collisionnel BGK et le modèle de Drude : c'est ce que nous ferons dans la suite, en vérifiant que les simulations à l'aide du terme BGK permet bien de reproduire le modèle de Drude. Un calcul analytique basique à partir du modèle de Drude permet d'avoir accès à la distance à laquelle l'amplitude de l'onde plane est amortie d'un facteur  $1/e$  dans le plasma :

$$z_{1/e} = \frac{c}{\Im(\sqrt{\epsilon_{\text{Drude}}})\omega_0} \quad (5.26)$$

où  $\Im(\sqrt{\epsilon_{\text{Drude}}})$  correspond à la partie imaginaire de  $\sqrt{\epsilon_{\text{Drude}}}$ . L'équation (5.26) nous servira de référence théorique pour réaliser des comparaisons avec les résultats numériques du code PSTD/Hydro.

Pour ce quatrième test, les conditions initiales suivantes sont utilisées :

- Les densités de plasma initiales  $n_{e0}$  et  $n_{i0}$  sont uniformes et sont fixées à  $0,3 \times 10^{21} \text{ cm}^{-3}$  pour une première série de simulations, puis à  $0,9 \times 10^{21} \text{ cm}^{-3}$  pour une seconde série de simulations. Le plasma est défini seulement pour des régions telles que  $z \geq 0$ .
- La fréquence de collision  $\nu_{\text{ei}}$  varie dans les simulations sur une gamme de  $0,25\text{-}20 \text{ fs}^{-1}$ .

- Les champs électriques et magnétiques sont fixés initialement à zéro. Une onde plane monochromatique se propageant en  $z$  croissant est injectée. Cette onde est polarisée selon  $x$  avec une longueur d'onde dans le vide  $\lambda_0 = 0,8 \mu\text{m}$  et une amplitude dans le vide de  $E_0 = 10^{10} \text{ V/m}$ .

Sur la figure 5.12(a), nous avons tracé l'amplitude du champ électrique obtenue avec le code PSTD/Hydro en fonction de la distance de propagation  $z$ . Comme attendu en théorie, un amortissement de l'onde électromagnétique est observé.

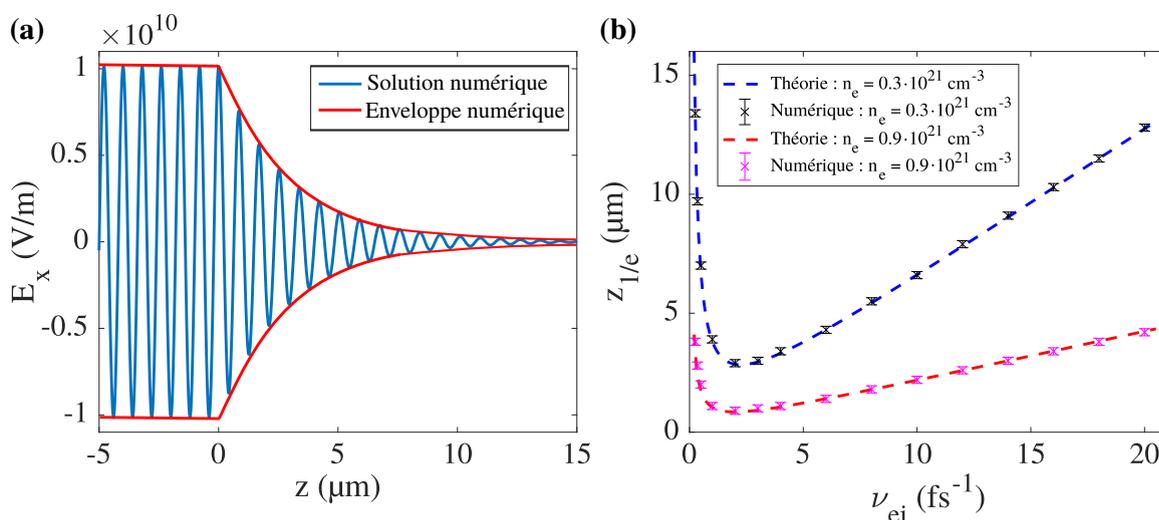


FIGURE 5.12 – (a) Profil spatial de l'amplitude de l'onde électromagnétique se propageant au sein d'un plasma homogène de densité  $0,3 \times 10^{21} \text{ cm}^{-3}$  avec une fréquence de collision de  $2 \text{ fs}^{-1}$ . L'interface vide/plasma est située en  $z = 0$ . (b) Distances caractéristiques  $z_{1/e}$  numériques et théoriques en fonction de la fréquence de collision  $\nu_{ei}$ . Les résultats sont tracés pour deux densités différentes :  $0,3 \times 10^{21} \text{ cm}^{-3}$  (pointillés bleus et croix noires) et  $0,9 \times 10^{21} \text{ cm}^{-3}$  (pointillés rouges et croix magenta). Les résultats des figures a) et b) sont obtenus avec le code PSTD/Hydro.

Sur la figure 5.12(b), nous avons reporté (croix bleues et noires) les différentes distances  $z_{1/e}$  obtenues à partir des simulations numériques avec le code PSTD/Hydro. Les barres d'erreurs correspondent aux erreurs de lecture graphique de  $z_{1/e}$  sur des graphiques comme celui de la figure 5.12(a). Par ailleurs, les résultats analytiques donnés par l'équation (5.26) sont présentés avec des pointillés bleus et magenta. Nous pouvons remarquer un excellent accord entre les points numériques et les courbes théoriques du modèle de Drude.

Séparément, nous avons testé la conservation de l'énergie dans le plasma collisionnel. La même simulation que pour la figure 5.10(b) est réalisée, mais en prenant un plasma collisionnel avec  $\nu_{ei} = 0,05 \text{ fs}^{-1}$ . Les résultats numériques sont montrés sur la figure 5.13.

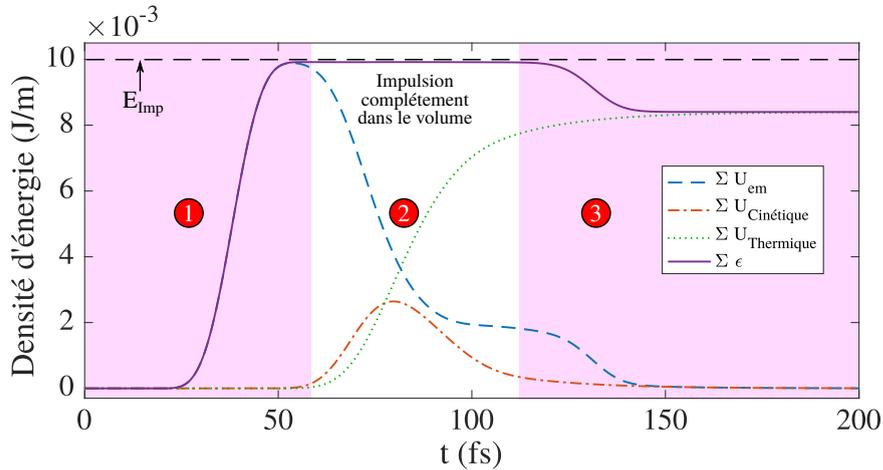


FIGURE 5.13 – Évolutions temporelles des densités linéaires d'énergie numériques : énergie électromagnétique (tirets bleus), énergie cinétique (tirets-pointillés rouges), énergie thermique (pointillés verts), et énergie totale (ligne continue violette). La densité linéaire d'énergie  $E_{\text{Imp}}$  est affichée en pointillés noirs sur la figure. La fréquence de collision est fixée à  $\nu_{ei} = 0,05 \text{ fs}^{-1}$ . Les autres paramètres sont les mêmes que ceux ayant permis l'obtention de la figure 5.10(b).

Nous observons sur cette figure une évolution similaire à celle de la figure 5.10(b), excepté que maintenant, à cause des collisions élastiques, l'énergie des ondes est convertie sous forme thermique. Dans la zone numérotée 2 sur la figure 5.10(b), c'est-à-dire lorsque l'impulsion est complètement dans le volume  $V$ , nous observons bien la conservation de l'énergie totale  $\Sigma\epsilon$ . Le code PSTD/Hydro permet donc de préserver l'énergie dans un plasma collisionnel, et d'observer la conversion de l'énergie cinétique dirigée en énergie thermique liée aux collisions. Par ailleurs, nous avons également pu observer (non montré ici) que le code conserve la quantité de mouvement, et sur du plus long terme, que les collisions entraînent bien la thermalisation du plasma, c'est-à-dire que l'énergie thermique des électrons se transfère aux ions jusqu'à ce que les températures électronique et ionique soient identiques.

Pour conclure, les résultats obtenus, avec le code PSTD/Hydro simulant un plasma collisionnel, sont conformes aux attentes théoriques du modèle de Drude et permettent de retrouver les lois de conservation.

### 5.4.7 Test 5 : Force pondéromotrice

Nous réalisons finalement un cinquième test basé sur la force pondéromotrice, phénomène physique déjà abordé dans la section 5.1.3.

Nous considérons dans ce test, deux impulsions laser contra-propagatives au sein d'un plasma sous-critique. L'interférence de ces deux ondes génère un motif périodique avec des régions alternées de haute et basse intensité. Il sera alors possible d'observer l'effet de la force pondéromotrice qui devrait pousser les particules du plasma dans les régions de basse intensité (voir équation (5.5)). Cette force a une dépendance en  $1/m$  : ainsi les ions plus lourds ne pourront pas se déplacer aussi rapidement que les électrons sous l'action de la force pondéromotrice. Ce décalage donnera lieu à la création d'une charge d'espace et par conséquent à un champ longitudinal, appelé *wakefield* [180]. Notons finalement que l'uti-

lisation de deux ondes contra-propagatives pour former une figure d'interférence permet d'observer des effets pondéromoteurs forts sans utiliser d'intensités lasers relativistes [191].

Essayons de reproduire une telle situation physique avec le code PSTD/Hydro. Les conditions initiales du cinquième test sont les suivantes :

- Le plasma sous-critique a une densité uniforme :  $n_{i0} = n_{e0} = 5 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$  avec une fréquence de collision  $\nu_{ei} = 0,5 \text{ fs}^{-1}$ .
- Les champs électriques et magnétiques sont fixés initialement à zéro dans le plasma. Deux impulsions électromagnétiques planes sont injectées pour générer une figure d'interférence. La première onde plane est injectée en  $z = -20 \text{ }\mu\text{m}$  et se propage dans la direction  $z$ . La seconde onde plane est injectée en  $z = 20 \text{ }\mu\text{m}$  et se propage dans la direction opposée. Les deux impulsions sont polarisées selon l'axe  $x$  avec  $\lambda_0 = 0,8 \text{ }\mu\text{m}$  et une amplitude  $E_0 = 10^{11} \text{ V/m}$ . Le profil temporel du champ en amplitude est une période de  $\sin^2$  de 150 fs.

La simulation numérique avec le code PSTD/Hydro se termine lorsque les centres des enveloppes des impulsions ont atteint  $z = 0$ . La figure 5.14(a) affiche à cet instant le profil de densité des électrons (ligne continue bleue) et la valeur absolue de  $E_x$  (ligne continue rouge). La densité initiale d'électrons est affichée avec des pointillés bleus sur la figure 5.14(a). Nous pouvons remarquer sur la figure 5.14(a) le déplacement des électrons dans les zones de basse intensité.

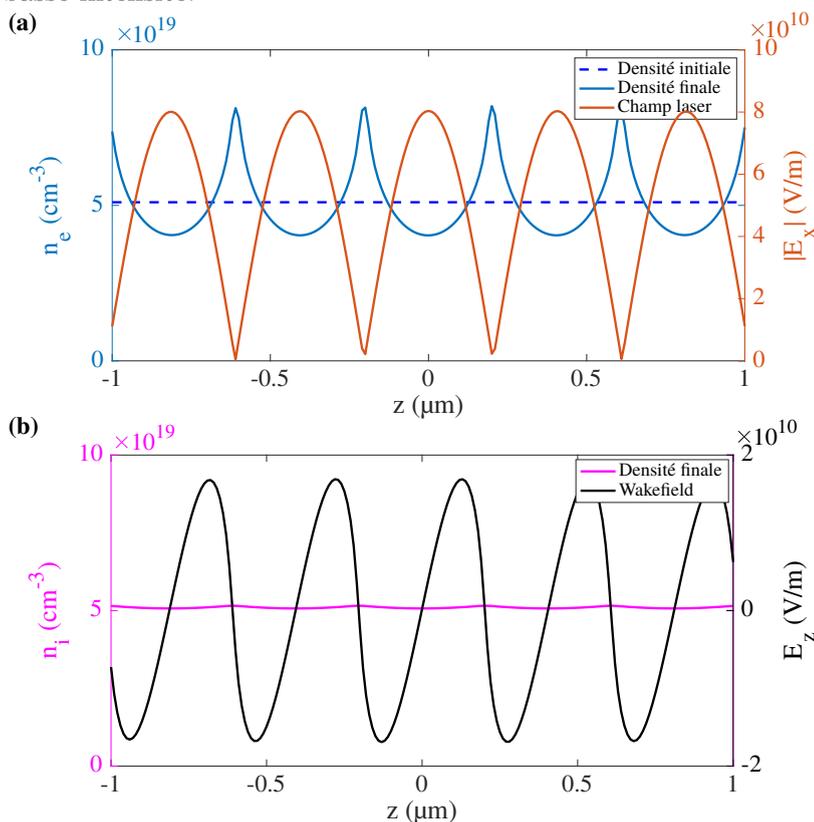


FIGURE 5.14 – (a) Densité initiale (pointillés bleus) et finale d'électrons (ligne continue bleue). La composante  $|E_x|$  finale est tracée avec une ligne continue rouge. (b) Densité finale d'ions (ligne continue magenta) et wakefield  $E_z$  final (ligne continue noire). Les résultats des figures (a) et (b) sont obtenus avec le code PSTD/Hydro.

Par ailleurs, la figure 5.14(b) montre la densité finale d'ions (ligne magenta) ainsi que la composante  $E_z$  du champ (wakefield) tracée avec une ligne noire. Nous pouvons remarquer que malgré l'amplitude importante des champs et des densités relativement faibles, les ions se sont peu déplacés par rapport aux électrons comme attendu. Cet écart entre la densité ionique et électronique donne lieu à une charge d'espace qui induit un champ longitudinal (wakefield).

Les résultats obtenus avec le code PSTD/Hydro montrent un bon accord qualitatif avec la référence de P. Gibbon [80]. D'un point de vue quantitatif, Smorenburg *et al.* [191] donne une estimation de wakefield de l'ordre de  $\sim 10^9$  V/m pour des intensités de la figure d'interférence de  $\sim 10^{15}$  W/cm<sup>2</sup>. Dans notre test, chaque onde plane a une intensité :  $I = E_0^2 / (2c\mu_0) \sim 1,3 \cdot 10^{15}$  W/cm<sup>2</sup>. Nous avons donc utilisé dans notre test une intensité laser légèrement supérieure à celle énoncée dans Smorenburg *et al.* [191], et nous obtenons un wakefield sur la figure 5.14(b) d'environ  $\sim 10^{10}$  V/m. Les résultats obtenus sont donc cohérents avec les estimations de Smorenburg *et al.* [191]. Par ailleurs, notons finalement que des modifications importantes du profil de densité (jusqu'à 50%) sont atteintes, sans pour autant compromettre la stabilité de la solution numérique du code PSTD/Hydro. Le code PSTD/Hydro permet donc de tenir compte des effets pondéromoteurs dans les plasmas.

### 5.4.8 Conclusion sur la validation du code PSTD/Hydro

Pour conclure, le code PSTD/Hydro permet de modéliser les phénomènes qui nous intéressent comme l'absorption résonnante, la propagation des ondes et la force pondéromotrice.

Nous avons fait également des tentatives sur un test supplémentaire : le test de Brio & Wu. Nous n'avons pas pu réaliser ce test dans des conditions identiques à celles de la référence [104] par manque de ressources numériques. Le détail du travail qui a été réalisé est présenté en annexe E, mais il ne permet pas jusqu'ici de garantir avec certitude le domaine de validité du code pour des simulations sur les structures complexes de la magnétohydrodynamique. Les conclusions de ce test sont données dans l'annexe, et ce début d'étude pourra servir de base pour des investigations complémentaires.

Dans la prochaine section, nous allons valider le deuxième code (code PSATD/Hydro) avec des tests similaires, le comparer avec le code PSTD/Hydro, puis tester sa stabilité lors de l'inclusion des phénomènes d'ionisation.

## 5.5 Validation du code PSATD/Hydro

### 5.5.1 Test en polarisation TE

Nous effectuons dans cette section un test similaire à celui de la figure 5.10(a) de façon à vérifier la stabilité de l'algorithme PSATD/Hydro. Contrairement au test de la figure 5.10(a), l'impulsion injectée est maintenant polarisée TE : il n'y a donc pas de

composante du champ électrique le long du gradient de densité. Le phénomène d'absorption résonnante observé dans la section 5.4.5 ne devrait donc pas avoir lieu dans ce cas. Quelques changements mineurs, sans impact notable sur la physique en jeu, sont à noter par rapport aux paramètres du paragraphe 5.4.5 :

- Le volume d'intégration  $V$  est légèrement plus grand, il est compris entre  $z_1 = -14 \mu\text{m}$  et  $z_2 = 14 \mu\text{m}$ .
- L'amplitude du champ laser dans le vide est  $E_0 = 4,3 \cdot 10^{10} \text{ V/m}$ . D'après la relation (5.24), la densité linéaire d'énergie de l'impulsion est alors  $E_{Imp2} = 0,185 \text{ J/m}$ .

En utilisant la même méthode que celle présentée dans la section 5.4.5, nous traçons sur la figure 5.15(a) l'évolution temporelle des différentes densités linéaires d'énergie.

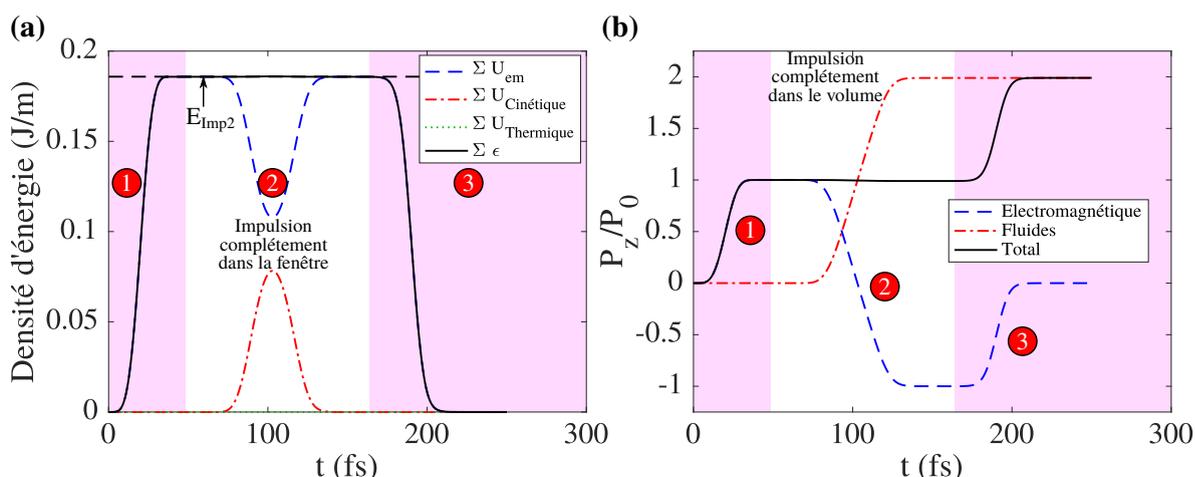


FIGURE 5.15 – (a) Évolutions temporelles des densités linéaires d'énergie : énergie électromagnétique (tirets bleus), énergie cinétique (tirets-pointillés rouges), énergie thermique (pointillés verts), et énergie totale (ligne continue violette). L'angle d'incidence permettant d'obtenir ce résultat est  $\theta = 15^\circ$ . La densité linéaire d'énergie théorique  $E_{Imp2}$  est affichée en pointillés noirs sur la figure. (b) Évolutions temporelles des quantités de mouvement normalisées : électromagnétique (tirets bleus), fluides (tirets-pointillés rouges), et totale (ligne continue noire). Les résultats des figures a) et b) sont obtenus avec le code PSATD/Hydro.

Nous observons trois séquences temporelles principales, indiquées par des cercles rouges, sur la figure 5.15(a) :

1. La densité d'énergie électromagnétique (tirets bleus) augmente lorsque l'impulsion entre dans le volume  $V$  entre  $t = 0$  and  $t < 50$  fs. À  $t = 55$  fs, l'impulsion est contenue complètement dans le volume  $V$  mais n'a pas encore interagit avec la rampe de plasma. La densité d'énergie numérique dans le volume correspond bien à celle prédite en théorie :  $E_{Imp2} = 0,185 \text{ J/m}$ .
2. Dans la fenêtre temporelle 70fs - 130 fs, un échange d'énergie avec le plasma a lieu : l'énergie cinétique des fluides (tirets-pointillés rouges) augmente alors que l'énergie électromagnétique diminue. Remarquons la conservation de l'énergie totale (ligne continue violette) pendant cette période où l'impulsion est contenue complètement dans le volume  $V$ . L'erreur sur la conservation totale de l'énergie est d'environ 0,1%. Le code PSATD/Hydro préserve donc la conservation de l'énergie avec une bonne précision (précision similaire au code PSTD/Hydro par ailleurs).

3. Entre 130 fs et 210 fs, le faisceau réfléchi quitte le volume  $V$  et l'énergie électromagnétique diminue. Nous remarquons cette fois-ci, en opposition au cas TM traité sur la figure 5.10(b), qu'il ne reste pas d'énergie dans le volume de calcul lorsque l'impulsion a quitté le volume d'intégration. Comme attendu en théorie, il n'y pas de phénomène d'absorption résonnante dans le cas TE. Ainsi, si le plasma est non collisionnel, l'impulsion laser ne dépose pas d'énergie dans le plasma lors de son passage.

D'autre part, sur la figure 5.15(b), nous avons tracé les évolutions temporelles des différentes quantités de mouvement dans la direction  $z$ . Ces quantités de mouvement ont été normalisées par rapport à la composante  $z$  de la quantité de mouvement de l'impulsion laser incidente, nommée  $P_0$ . Pour mesurer ce facteur de normalisation, nous avons réalisé au préalable une simulation sans plasma, où nous avons mesuré la composante  $P_0$  en intégrant la composante  $z$  du vecteur (5.27) sur le volume de calcul  $V$ .

Nous rappelons maintenant les expressions des différentes densités volumiques de quantité de mouvement. La densité volumique de quantité de mouvement électromagnétique dans la description de Minkowski<sup>12</sup> est définie par [56] :

$$\mathbf{P}_{\text{em}} = \epsilon_0 \epsilon_r \mathbf{E} \times \mathbf{B} \quad (5.27)$$

Par ailleurs, la densité volumique de quantité de mouvement des fluides est donnée par l'équation (5.28).

$$\mathbf{P}_f = n_e m_e \mathbf{u}_e + n_i m_i \mathbf{u}_i \quad (5.28)$$

Les tirets bleus de la figure 5.15(b) correspondent à la composante  $z$  du vecteur (5.27) intégrée dans le volume  $V$  et normalisée à  $P_0$ . De façon analogue, les tirets-pointillés rouges de la figure 5.15(b) correspond à la composante  $z$  du vecteur (5.28) intégrée dans le volume  $V$  et normalisée à  $P_0$ . Finalement, la ligne noire de la figure 5.15(b) correspond à la somme des quantités de mouvement électromagnétique et des fluides.

Nous observons trois séquences temporelles principales, indiquées par des cercles rouges, sur la figure 5.15(b) :

1. La quantité de mouvement électromagnétique (tirets bleus) augmente entre  $t = 0$  et  $t < 50$  fs. À  $t = 55$  fs, l'impulsion est complètement contenue dans le volume  $V$ , et n'a pas encore interagit avec la rampe de plasma. Nous remarquons alors que la quantité de mouvement électromagnétique correspond bien à  $P_0$ .
2. Entre 70 fs et 130 fs, un échange de quantité de mouvement a lieu : le moment électromagnétique (tirets bleus) diminue jusqu'à  $-P_0$ , alors que la quantité de mouvement des fluides (tirets-pointillés rouges) augmente jusqu'à  $2P_0$ . C'est la signature que l'impulsion laser a transféré deux fois sa quantité de mouvement au plasma durant sa réflexion sur la rampe de plasma sur-critique : c'est le résultat attendu en théorie.
3. Entre 170 fs et 210 fs, l'impulsion laser réfléchie quitte le volume  $V$  et est absorbée par les PMLs : la quantité de mouvement électromagnétique tend alors vers zéro.

Nous pouvons remarquer sur la zone 2 de la figure 5.15(b) que la quantité de mouvement totale est conservée lorsque l'impulsion est contenue complètement dans le volume  $V$ . L'erreur sur la conservation totale du moment est sensiblement moins de 1% : c'est raisonnable au vu du pas spatial et du pas temporel choisis. Pour conclure, le code PSATD/Hydro

12. Nous nous plaçons dans la description de Minkowski, puisque nous avons pris l'effet des charges liées à travers la permittivité relative  $\epsilon_r$  et non à travers un courant de charges liées comme dans la description d'Abraham [56]. Rappelons cependant que nous avons fixé  $\epsilon_r = 1$  dans cette simulation.

préserve la conservation de l'énergie mais également la conservation de la quantité de mouvement avec une bonne précision.

### 5.5.2 Test en polarisation TM

Nous faisons maintenant un test rapide pour vérifier que le code PSATD/Hydro converge également avec une impulsion incidente polarisée TM. Cela revient donc à faire un test semblable à celui réalisé avec le code PSTD/Hydro dans la section 5.4.5. Les évolutions temporelles des différentes densités linéaires d'énergie, obtenue avec le code PSATD/Hydro, sont tracées sur la figure 5.16(a). Sur cette figure, nous mesurons un facteur de conversion de 46% à la fin de la simulation numérique, comme c'était le cas sur la figure 5.10(b) obtenue avec le code PSTD/Hydro.

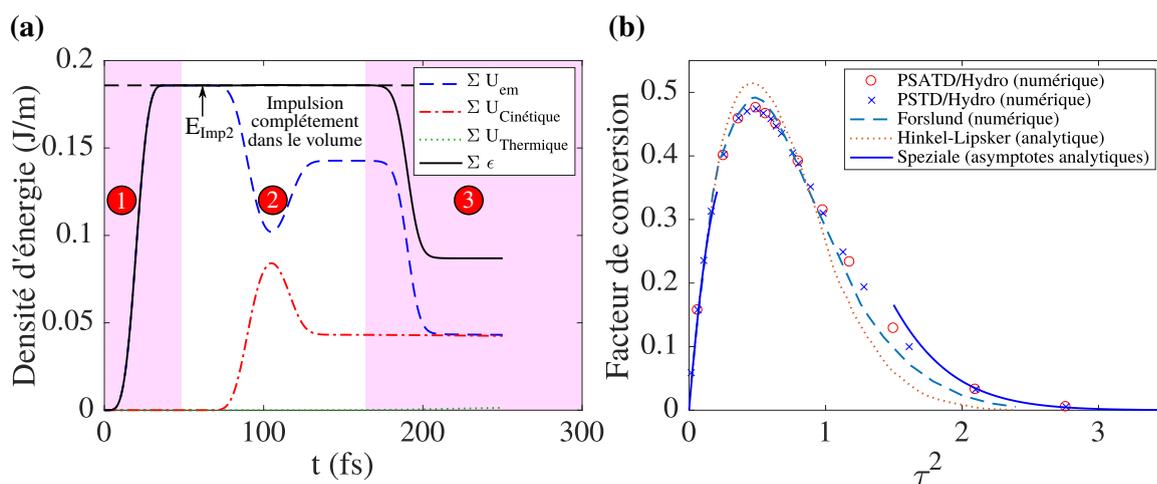


FIGURE 5.16 – (a) Évolutions temporelles des densités linéaires d'énergie numériques : énergie électromagnétique (tirets bleus), énergie cinétique (tirets-pointillés rouges), énergie thermique (pointillés verts), et énergie totale (ligne continue violette). Pour obtenir ces résultats, l'angle d'incidence est fixé à  $\theta = 15^\circ$ . La densité linéaire d'énergie théorique  $E_{Imp2}$  est affichée en pointillés noirs sur la figure. (b) Facteur de conversion en fonction de  $\tau^2 = \left(\frac{2\pi L}{\lambda_0}\right)^{2/3} \sin^2 \theta$ . Les ronds rouges correspondent aux résultats numériques du code PSATD/Hydro alors que les croix bleues correspondent aux résultats numériques précédents obtenus avec le code PSTD/Hydro. Les résultats des autres références, comme sur la figure 5.11, sont montrés pour comparaison.

Sur la figure 5.16(b), nous avons affiché avec des ronds rouges les facteurs de conversion, obtenus avec le code PSATD/Hydro, en fonction de  $\tau^2 = \left(\frac{2\pi L}{\lambda_0}\right)^{2/3} \sin^2 \theta$ . Sur cette même figure 5.16(b), nous avons rappelé les résultats obtenus avec le code PSTD/Hydro sur la figure 5.11 ainsi que les résultats de références discutés dans la section 5.4.5. Nous pouvons alors remarquer que les résultats du code PSATD/Hydro (ronds rouges) sont en accord avec ceux du code PSTD/Hydro (croix bleues), et proches de ceux de l'état de l'art. Des suppositions concernant les différences avec les résultats de l'état ont déjà été discutées dans la section 5.4.5.

L'implémentation du code PSTAD/Hydro est donc validée, et le changement d'algorithme ne semble pas avoir impacté la stabilité du code numérique.

### 5.5.3 Comparaison des codes PSATD/Hydro et PSTD/Hydro

Les tests des sections 5.5.1 et 5.5.2 n'ont pas mis en avant les avantages de l'algorithme PSATD/Hydro par rapport à l'algorithme PSTD/Hydro : c'est justement l'objet de cette section. Nous réalisons ici la même simulation numérique avec les deux codes et nous comparons quantitativement les résultats.

Nous simulons numériquement la propagation d'une impulsion monocycle de type onde plane polarisée selon  $x$ , arrivant en incidence normale sur un plasma. La longueur d'onde centrale de l'impulsion est  $\lambda_0 = 0,8 \mu\text{m}$ , alors que l'amplitude maximale est  $E_0 = 4,3 \times 10^{10} \text{ V/m}$ . Nous utilisons la grille de calcul suivante :  $N_z = 512$  et  $N_x = N_y = 1$ . Des conditions périodiques sont implémentées dans les directions  $x$  et  $y$ . Des PMLs sont implémentées dans la direction  $z$  pour les champs alors que des bords ouverts sont implémentés pour la partie fluide. Nous fixons  $\Delta x = \Delta y = \Delta z = 60 \text{ nm}$  et  $\gamma = 5/3$ . Un plasma d'électrons/ions est défini en  $z \leq -5 \mu\text{m}$ , mais son profil aura peu d'importance dans ce test<sup>13</sup> : c'est la raison pour laquelle nous n'allons pas rentrer dans les détails sur celui-ci. Dans la simulation numérique avec le code PSTD/Hydro, le pas temporel est fixé à  $\Delta t = 50 \text{ as}$  puisque nous sommes contraints par les conditions CFL de la PSTD donnée par l'équation (4.53). Par ailleurs, le pas temporel pour le code PSATD/Hydro est fixé à  $\Delta t = 200 \text{ as}$ , puisque nous sommes seulement contraints par l'échantillonnage de l'impulsion laser et des ondes plasmas.

Sur la figure 5.17(a), nous avons représenté l'impulsion laser juste avant que la solution analytique (pointillés noirs) pénètre dans le plasma.

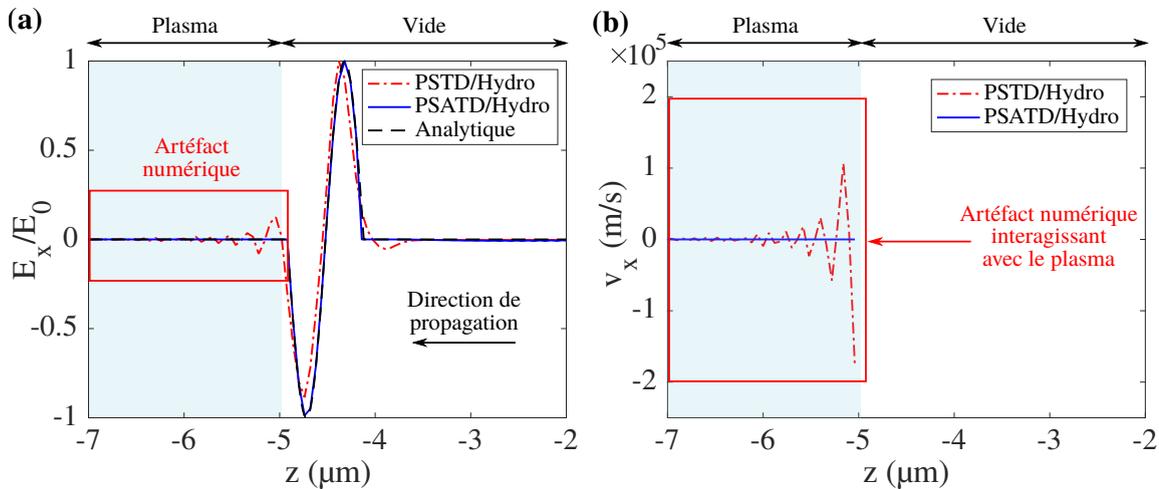


FIGURE 5.17 – (a) Propagation d'une impulsion monocycle avec le code PSTD/Hydro (tirets-pointillés rouges) et avec le code PSATD/Hydro (ligne continue bleue). La courbe du code PSATD/Hydro est superposée à la solution analytique en pointillés noirs. Les artefacts numériques engendrés par la dispersion numérique de la méthode PSTD sont encadrés en rouge. (b) Composante  $v_x$  de la vitesse du fluide d'électrons au même instant. Dans les figures (a) et (b), le plasma est défini dans la zone  $z \leq -5 \mu\text{m}$  qui est coloriée en bleu clair.

13. Pour information, c'est une rampe de plasma du même type que celle du paragraphe 5.4.5, mais orientée dans le  $z$  décroissant.

Les résultats de la propagation numérique avec les différents codes sont affichés avec des tirets-pointillés rouges pour le code PSTD/Hydro et avec une ligne continue bleue pour le code PSATD/Hydro. La propagation se fait de droite à gauche comme indiqué par une flèche sur la figure 5.17(a).

Nous pouvons observer que la solution numérique du code PSTD/Hydro (tirets-pointillés rouges) présente une distorsion de l'impulsion laser : la dispersion numérique de la PSTD a généré des artefacts numériques, qui se traduisent par des pré-impulsions. L'amplitude de la dernière pré-impulsion (localisée en  $z \simeq -5 \mu\text{m}$ ) atteint environ 15 % de l'amplitude de l'impulsion principale. Au contraire, la solution du code PSATD/Hydro (ligne continue bleue) est superposée avec la solution analytique.

Sur la figure 5.17(b), nous avons représenté au même instant la vitesse du fluide d'électrons avec les différents codes. Nous observons une vitesse nulle du fluide d'électrons dans le code PSATD/Hydro (ligne continue bleue) puisque l'impulsion n'a pas encore pénétré dans le plasma. Cependant, avec le code PSTD/Hydro, nous observons des vitesses de l'ordre de  $10^5$  m/s liées à l'interaction de l'artefact numérique avec le plasma. Cet effet est évidemment indésirable, et particulièrement gênant dans le cas des simulations avec des impulsions avec quelques cycles comme effectuées dans la référence [192].

Au cours de ce test de comparaison, nous avons obtenu des meilleurs résultats avec le code PSATD/Hydro alors que le pas temporel  $\Delta t$  était 4 fois plus grand que celui utilisé dans le code PSTD/Hydro. Le fait que la PSATD ne soit pas contrainte par une condition CFL, permet de relâcher cette forte dépendance entre le pas spatial et le pas temporel. Le gain numérique est particulièrement important dans le cas des simulations demandant une forte résolution spatiale et une résolution temporelle moins importante. Nous finissons ce paragraphe en rappelant une restriction forte de la méthode PSATD : la permittivité de fond  $\epsilon_r$  doit être uniforme. Le code PSATD/Hydro est donc plus intéressant que le code PSTD/Hydro dans tous les cas, sauf lorsque l'utilisateur souhaite introduire une  $\epsilon_r$  non-uniforme.

## 5.6 Test avec la génération de charges libres

Dans les précédents tests de ce chapitre, nous avons considéré des plasmas pré-existants. Nous faisons maintenant un test pour vérifier que la génération de plasma n'altère pas la stabilité du code PSATD/Hydro.

### 5.6.1 Test 6 : Courant de photoionisation

Ce sixième test porte sur la validation de l'implémentation du courant fictif de photoionisation de l'équation (3.34). Le dispositif numérique est inspiré de la référence [59]. L'objectif ici est de retrouver des comportements similaires à ceux de cette référence.

Comme décrit sur la figure 5.18(a), nous simulons la propagation d'une onde plane se propageant dans la direction  $z$ , et en incidence sur un milieu d'indice  $n = 1$  dont le seul mécanisme présent est la photoionisation.

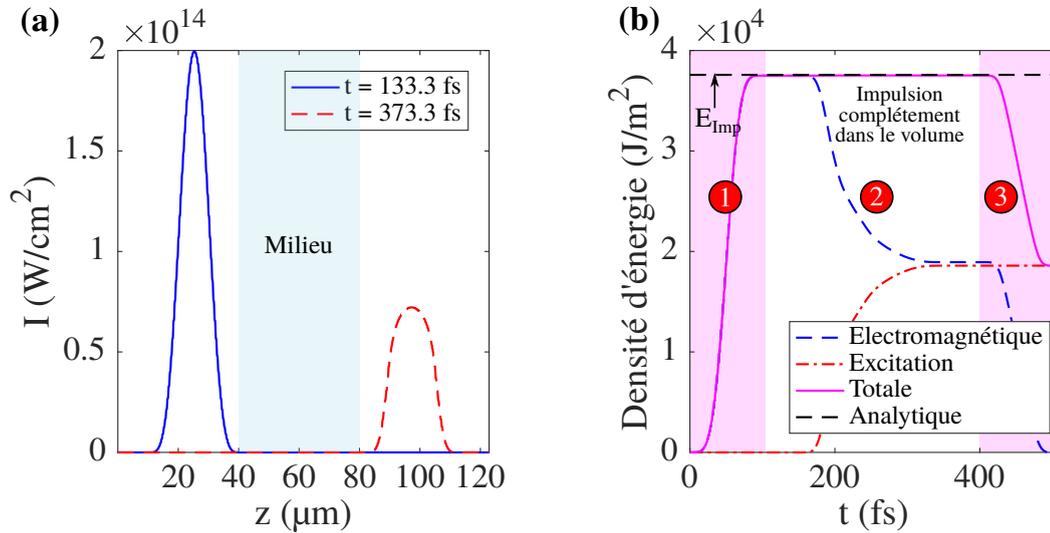


FIGURE 5.18 – (a) Intensité au cours de la propagation de l’impulsion dans la direction  $z$ . Le milieu est localisé entre  $z = 40 \mu\text{m}$  et  $z = 80 \mu\text{m}$ . L’impulsion bleue est l’impulsion initiale envoyée sur le milieu alors que l’impulsion en tirets rouges est celle en sortie. (b) Évolutions temporelles des densités volumique d’énergie intégrées en  $z$  : énergie électromagnétique (tirets bleus), énergie d’excitation consommée pour promouvoir les électrons dans la bande de conduction (tirets-pointillés rouges), et énergie totale (ligne continue violette). La densité théorique  $E_{\text{Imp}}$  est affichée en pointillés noirs sur la figure. Les résultats des figures (a) et (b) sont obtenus avec le code PSATD/Hydro.

Pour la simulation, le taux de photoionisation utilisé est celui de Keldysh donné par l’équation (3.22). Le milieu est localisé entre  $z = 40 \mu\text{m}$  et  $z = 80 \mu\text{m}$ , et est caractérisé par une densité initiale d’atomes  $n_0 = 1,75 \times 10^{22} \text{ cm}^{-3}$ . Le gap énergétique du milieu est  $U_g = 9 \text{ eV}$ . Le milieu ionisé est un plasma d’électrons/ions tel que  $m_i/m_e = 1800$ . L’impulsion de type onde plane est décrite temporellement par une période de  $\sin^2$  définie par  $T_{\text{Imp}} = 100 \text{ fs}$  (profil d’amplitude du champ). L’intensité crête de l’impulsion incidente est  $I_{\text{Inc}} = 2 \times 10^{14} \text{ W/cm}^2$ . Les autres paramètres de simulation sont données dans le tableau 5.2.

Sur la figure 5.18(a), nous affichons l’intensité de l’impulsion avant ( $t = 133,3 \text{ fs}$ ) et après le milieu ( $t = 373,3 \text{ fs}$ ). Nous remarquons que l’impulsion en sortie du milieu est écrêtée à  $I_{\text{Tr}} = 0,75 \times 10^{14} \text{ W/cm}^2$ . Le courant fictif de photoionisation semble donc bien avoir retranché de l’énergie à l’impulsion.

Vérifions maintenant que la conservation de l’énergie est prise en compte correctement. Sur la figure 5.18(b), nous traçons la conservation de l’énergie en fonction du temps. Nous pouvons voir que l’énergie totale est conservée dans la zone décrite par le cercle rouge n°2 (zone où toute l’impulsion est contenue dans la boîte). Le courant fictif de photoionisation a donc retranché la bonne énergie à l’impulsion, c’est-à-dire l’énergie d’excitation consommée pour promouvoir les électrons dans la bande de conduction. Le courant fictif de photoionisation s’intègre donc de façon stable dans l’algorithme numérique PSATD/Hydro.

TABLE 5.2 – Résumé des paramètres et conditions aux limites des tests 6 et 7.

Paramètres	Test 6	Test 7
$\Delta x = \Delta y = \Delta z$	15 nm	48,8 nm
$\Delta t$	53,3 as	53,3 as
$N_x$	8192	512
$N_y$	2	2
$N_z$	2	1024
CL $x$ PSTD	Périodique	PML
CL $y$ PSTD	Périodique	Périodique
CL $z$ PSTD	PML	PML
CL $x$ LWLFn	Périodique	Ouvert
CL $y$ LWLFn	Périodique	Périodique
CL $z$ LWLFn	Ouvert	Ouvert
$\mathbf{u}_e$ et $\mathbf{u}_i$ initiales	$\mathbf{0}$	$\mathbf{0}$
$m_i/m_e$	1800	voir test
$p_e$ et $p_i$ initiales	0	0
$\nu_{ei}$ ( $\text{fs}^{-1}$ )	0	1
$\gamma$	5/3	5/3
$\epsilon_r$	1	2.1

À l'instar de K. I. Popov *et al.* [59], nous avons effectué plusieurs simulations avec différentes intensité crêtes  $I_{\text{Inc}}$ , puis relevé celles après passage dans le milieu  $I_{\text{Tr}}$ . Sur la figure 5.19, nous traçons  $I_{\text{Tr}}$  en fonction de  $I_{\text{Inc}}$ .

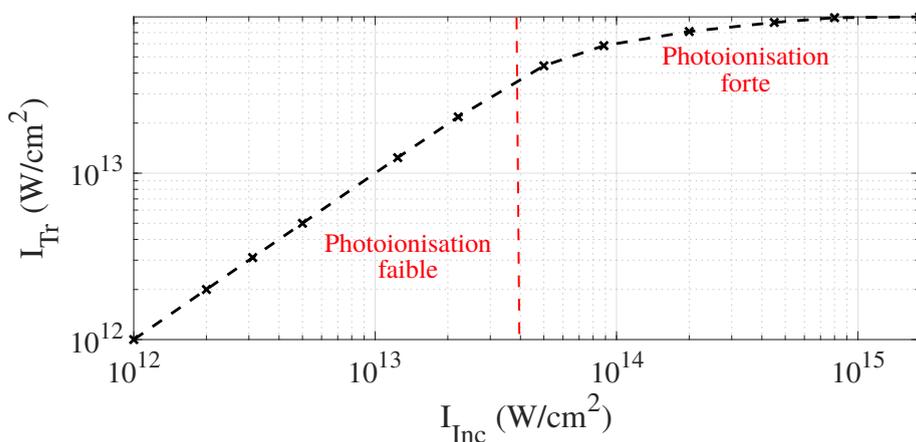


FIGURE 5.19 – Intensité crête de l'impulsion transmise  $I_{\text{Tr}}$  en fonction de l'intensité crête de l'impulsion incidente  $I_{\text{Inc}}$ .

Nous observons un phénomène d'aplatissement de la courbe lorsque l'intensité incidente est supérieure à  $I_{\text{Inc}} = 4 \times 10^{13} \text{ W/cm}^2$ . Pour mieux comprendre ce phénomène, nous avons tracé sur la figure 5.20 le taux de photoionisation de Keldysh en fonction de l'intensité de l'onde plane. Nous avons alors pu identifier deux régimes séparés par une ligne en pointillés rouges sur les figures 5.19 et 5.20. Lorsque  $I < 4 \times 10^{13} \text{ W/cm}^2$ , le taux de Keldysh est très faible ( $< 10^{18} \text{ fs}^{-1}\text{cm}^{-3}$ ) et le nombre de charges générées par l'impulsion sur les 40  $\mu\text{m}$  de propagation dans le milieu est trop faible pour affecter l'impulsion elle-même. Nous sommes alors dans un régime linéaire. Par ailleurs, lorsque  $I > 4 \times 10^{13} \text{ W/cm}^2$ , le

taux de Keldysh est fort ( $> 10^{18} \text{ fs}^{-1} \text{ cm}^{-3}$ ) et le nombre de charges générées pendant la propagation est important. L'énergie de l'impulsion diminue alors de façon conséquente suite aux nombreux processus de photoionisation, ce qui induit une réduction de l'intensité crête de l'impulsion transmise (visible sur la figure 5.19). Dans toute l'étude, nous sommes dans des cas très éloignés du dépeuplement complet de la bande de valence dans l'ensemble du milieu ( $< 10\%$  d'inversion de la population totale) : il n'y a donc pas de phénomène de saturation de tout le milieu qui induirait des comportements différents. Rappelons également que nous avons négligé le courant électronique et les autres effets du plasma, et que l'impulsion est uniquement affectée par la photoionisation au cours de sa propagation : il n'y a donc pas d'effets de réflexion induit par les charges libres générées.

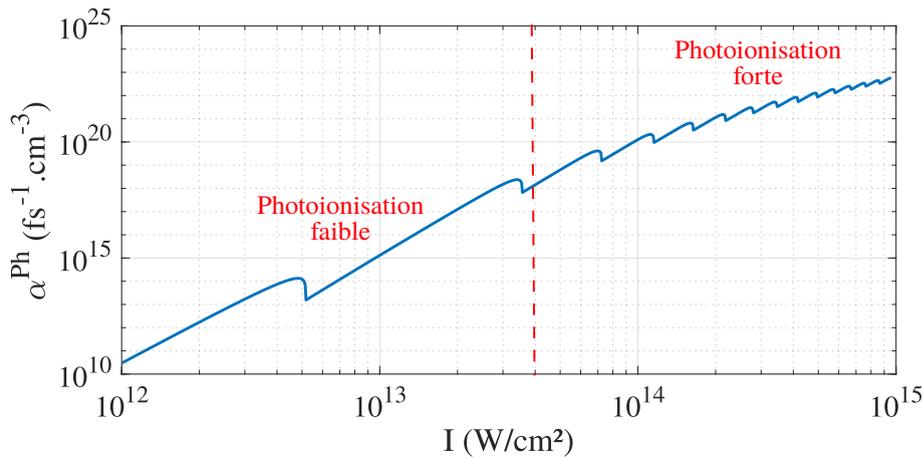


FIGURE 5.20 – Taux de photoionisation de Keldysh en fonction de l'intensité.

Dans la référence [59], les auteurs observent ce changement de régime à des intensités légèrement plus faibles ( $I_{\text{Inc}} = 2 \times 10^{13} \text{ W/cm}^2$ ). Cette différence s'explique par le fait qu'ils aient modélisé la photoionisation avec un simple coefficient d'absorption multiphotonique qui a tendance à surestimer la photoionisation dans les hautes intensités ( $> 10^{13} \text{ W/cm}^2$ ) en comparaison du taux de Keldysh [30].

Nous terminons ce test par une remarque importante. Pour calculer le taux de photoionisation de Keldysh  $\alpha^{\text{Ph}}$  de l'équation (3.22), nous avons utilisé le champ réel *instantané*. Nous avons ensuite calculé le courant fictif *instantané* à partir du théorème de Poynting *instantané*, puis nous l'avons injecté dans les équations Maxwell pour retrancher aux champs l'énergie perdue par photoionisation. Cependant, c'est la valeur *moyenne* du champ sur un cycle optique (l'amplitude de l'enveloppe) qui est utilisée dans le calcul du taux de photoionisation de Keldysh. Un courant fictif *moyen* pourrait alors être calculé à travers le théorème de Poynting *moyenné*. Mais dans notre code, nous n'avons accès qu'à la valeur *instantanée* des champs, il faudrait alors "convertir" le courant fictif *moyenné* en un courant fictif *instantané* pour retrancher la bonne quantité d'énergie aux champs. Nous n'avons pas encore réussi à réaliser cette étape, et nous nous contenterons dans ce manuscrit de travailler avec l'approche purement instantanée. Cette difficulté concernant la mélange d'approches instantanée et moyennée est traitée par différentes hypothèses dans la littérature.

Par exemple, les auteurs de la référence [59] ont également utilisé le champ instantané au lieu du champ moyen dans une modélisation d'absorption multiphotonique et ils ont mon-

tré que cette méthode induit une erreur sur l'intensité de seuil de dommage de l'ordre de 35%. Ils soulignent que cette hypothèse est équivalente à considérer que la photoionisation a lieu sur des échelles de temps inférieures au cycle optique.

De notre côté, nous avons estimé l'erreur faite dans le cadre de cette approximation sur le nombre de porteurs libres générées par photoionisation. Nous avons fait une estimation des taux de génération dans le cas d'une onde plane d'intensité de  $10^{14}$  W/cm<sup>2</sup>. L'approximation faite sous-estime d'environ un facteur 4 le nombre de charges générées par photoionisation sur un cycle optique<sup>14</sup>.

### 5.6.2 Test 7 : Plasma d'électrons/trous

Pour ce septième test, nous résolvons le système complet d'équations de la section 3.5. L'objectif est de voir si l'algorithme est stable avec l'ensemble des phénomènes. Les paramètres du test 7 sont donnés dans le tableau 5.2.

Au coeur de ce test, un faisceau gaussien 2D polarisé dans la direction  $x$  et se propageant dans la direction  $z$ , se focalise dans un milieu de permittivité relative  $\epsilon_r = 2,1$ . La largeur totale à mi-hauteur du profil d'intensité est de  $1 \mu\text{m}$  au niveau du waist. Le faisceau gaussien est injecté en  $z = -22 \mu\text{m}$  et atteint le waist en  $z = -3.5 \mu\text{m}$ . L'intensité maximale au niveau du waist est de  $10^{14}$  W/cm<sup>2</sup>. L'impulsion est décrite temporellement par une période de  $\sin^2$  définie par  $T_{\text{imp}} = 141,4$  fs (profil d'amplitude du champ). En l'absence de la dynamique des charges libres, le faisceau gaussien est représenté à  $t = 189$  fs sur la figure 5.21(a).

---

14. Pour obtenir ce facteur 4, nous avons calculer sur une période optique  $T_0$  le nombre de charges générées avec les intégrales  $\int_0^{T_0} \alpha^{\text{Ph}}(E^{\text{moy}}) dt$  et  $\int_0^{T_0} \alpha^{\text{Ph}}(E^{\text{inst}}) dt$ , où  $E^{\text{moy}}$  est le champ moyen et  $E^{\text{inst}}$  est le champ instantané.

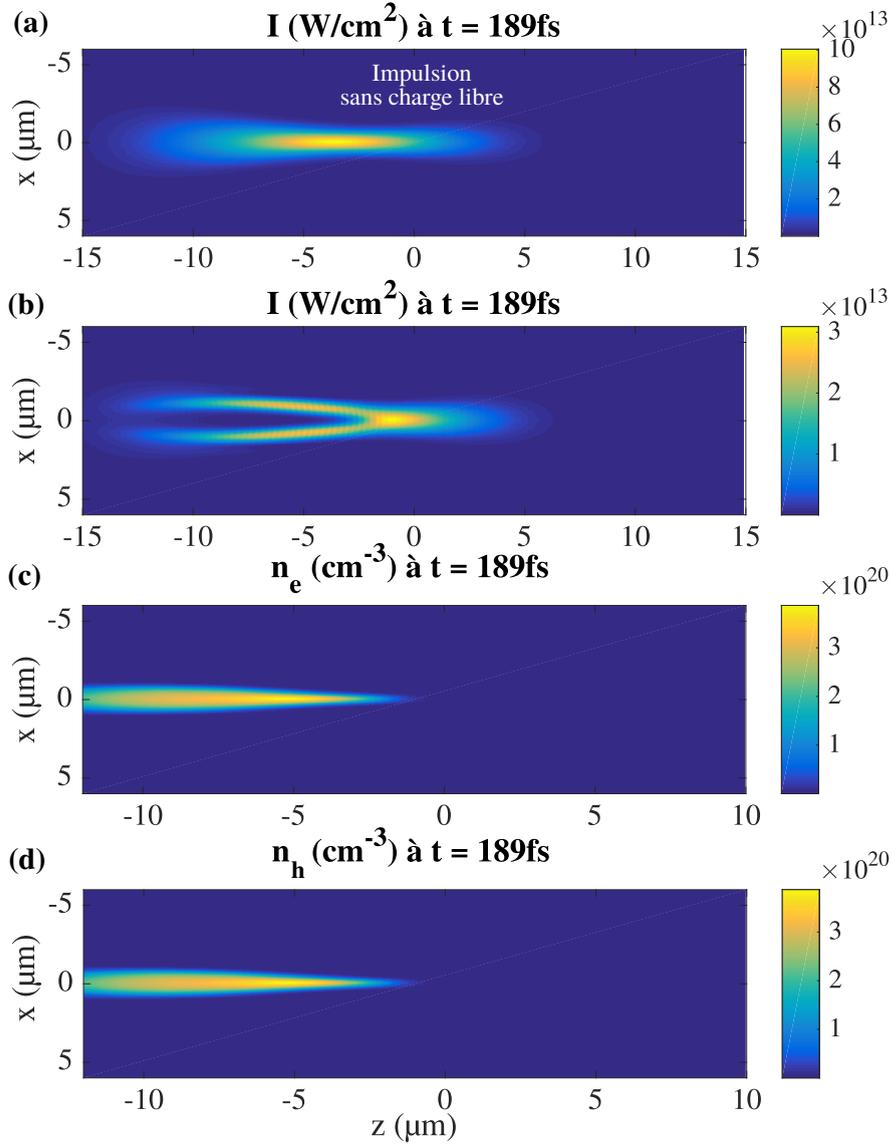


FIGURE 5.21 – (a) Cartographie de l'intensité de l'impulsion laser à  $t = 189$  fs, dans un milieu diélectrique sans charge libre. (b) Intensité de l'impulsion laser à  $t = 189$  fs en prenant en compte la dynamique des charges libres. (c) Densité d'électrons libres à  $t = 189$  fs. (d) Densité de trous de valence à  $t = 189$  fs. Les résultats des figures (a), (b), (c) et (d) sont obtenus avec le code PSATD/Hydro.

Nous considérons maintenant les phénomènes d'ionisation. Le gap énergétique du milieu considéré est  $U_g = 10$  eV. La densité d'atomes est  $n_0 = 1,75 \times 10^{22}$   $\text{cm}^{-3}$ . La masse effective des trous est donnée par  $m_h^* = 4m_e$  alors que la masse effective des électrons est  $m_e^* = 0,4m_e$ . Le taux de photoionisation est celui de Keldysh donné par l'équation (3.22). La fréquence de collision électrons/trous est donnée par la relation (3.3). La fréquence de collision des électrons et des trous avec les phonons est donnée respectivement par  $\nu_{bie} + \nu_{ep} = 0,5 \times 10^{15}$   $\text{fs}^{-1}$  et  $\nu_{bih} + \nu_{hp} = 0,5 \times 10^{15}$   $\text{fs}^{-1}$ . Le coefficient d'ionisation par impact déclenchée par les électrons est donnée par la relation (3.15) où nous fixons les intégrales de recouvrement à  $A_c = 1$   $A_v = 1$ . Nous considérons que le coefficient d'ionisation par impact déclenchée par les trous est le même que le coefficient d'ionisation par impact déclenchée par les électrons.

En prenant en compte la génération et la dynamique des charges libres, nous traçons l'intensité de l'impulsion à  $t = 189$  fs sur la figure 5.21(b). Nous remarquons une zone d'ombre en  $(x \approx 0 \mu\text{m}, z < 0 \mu\text{m})$  correspondant à la présence d'un plasma qui induit de l'absorption de l'impulsion laser. Les figures 5.21(c) et 5.21(d) représentent respectivement les cartographies de la densité d'électrons et de trous. Nous remarquons la présence du plasma dans la zone  $(x \approx 0 \mu\text{m}, z < 0 \mu\text{m})$  avec des densités de l'ordre de  $4 \times 10^{20} \text{ cm}^{-3}$ .

La conservation de l'énergie au court du temps lors de la simulation donnant les figures 5.21(b) et 5.21(c) est fournie par la figure 5.22.

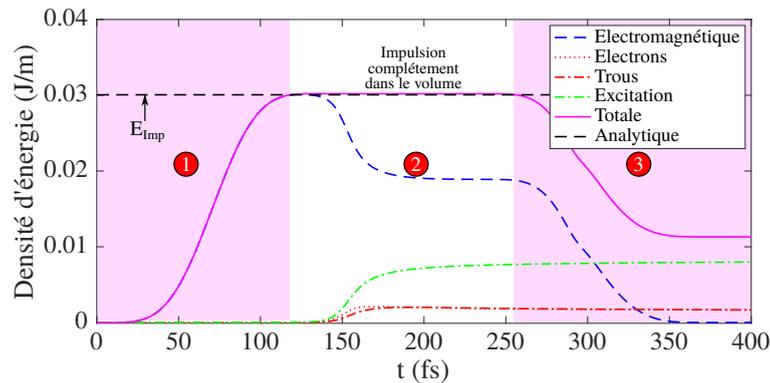


FIGURE 5.22 – Évolutions temporelles des densités volumique d'énergie intégrées dans le plan  $(X,Z)$  : énergie électromagnétique (tirets bleus), énergie des électrons (pointillés rouges), énergie des trous (tirets-pointillés rouges), énergie d'excitation consommée pour promouvoir les électrons dans la bande de conduction (tirets-pointillés verts), et énergie totale (ligne continue violette). La densité théorique  $E_{\text{Imp}}$  est affichée en pointillés noirs sur la figure.

Nous pouvons voir sur cette figure que l'énergie totale est conservée dans la zone décrite par le cercle rouge n°2 (zone où toute l'impulsion est contenue dans la boîte). L'énergie électromagnétique absorbée est redistribuée aux électrons et aux trous. Pour commencer, une partie de cette énergie a été utilisée pour promouvoir les électrons dans la bande de conduction à travers les processus d'ionisation (photoionisation et ionisation par impact). Nous pouvons ensuite remarquer qu'autour de  $t = 150$  fs, les électrons de conduction (plus légers que les trous) absorbent plus d'énergie aux champs que les trous<sup>15</sup>. Les collisions électron/trou conduisent ensuite à une égalisation de l'énergie des électrons et de celle des trous, ce qui correspond à une température identique pour les deux espèces. Compte tenu des comportements observés dans les tests 6 et 7, nous concluons que la résolution numérique du système complet d'équations de la section 3.5 s'effectue de façon stable avec l'algorithme PSATD/Hydro.

## 5.7 Synthèse du chapitre 5

Pour conclure, nous avons développé et validé un code PSATD/Hydro qui répond à nos besoins, qui est relativement simple à implémenter, qui ne nécessite pas de grilles

<sup>15</sup>. Les particules les plus légères répondent plus facilement à l'excitation du champ.

décalées et qui permet de retrouver des résultats de référence pour des simulations d'interaction Laser/Plasma. Nous disposons par ailleurs d'un second code (PSTD/Hydro), moins performant et légèrement plus complexe à implémenter, mais qui permet de réaliser des simulations avec une permittivité de fond  $\epsilon_r$  inhomogène spatialement. Nous pouvons maintenant utiliser les codes numériques développés afin d'améliorer notre compréhension de la déposition d'énergie laser dans un diélectrique par faisceau de Bessel femtoseconde : c'est l'objet du prochain chapitre.

# SIMULATION DE L'INTERACTION BESSEL/DIÉLECTRIQUE

*J'appelle absolu tout ce qui contient en soi la  
nature pure et simple que l'on cherche.*

- ISAAC NEWTON

Dans les précédents chapitres, nous avons développé un modèle théorique et un code numérique pour simuler l'interaction d'une impulsion ultra-courte intense dans un milieu diélectrique. Au coeur du présent chapitre, nous allons utiliser le code PSATD/Hydro pour étudier la déposition d'énergie par faisceaux de Bessel femtosecondes dans un diélectrique, et donner des éléments de réponse à la problématique de départ.

Ce chapitre est divisé en deux grandes parties. La première concerne la proposition d'une solution pour injecter numériquement un faisceau de Bessel femtoseconde dans la fenêtre de calcul alors que la seconde porte sur l'étude de l'interaction entre ce dernier et un diélectrique.

## 6.1 Définition des faisceaux de Bessel

### 6.1.1 Description mathématique monochromatique

D'un point de vue mathématique, les faisceaux de Bessel font partie d'une famille de solutions de l'équation d'onde, dans laquelle l'amplitude du champ est exprimée par une fonction de Bessel de première espèce [35]. De nombreux auteurs ont dérivé les solutions particulières de type Bessel à partir des équations de Maxwell dans un milieu homogène, isotrope et non magnétique [193, 194, 195]. Cependant, leurs solutions n'étaient pas complètement générales en termes d'état de polarisation. Nous présentons ici une approche faite par mon collègue Remo Giust, partant du potentiel vecteur de Hertz [196] pour dériver des expressions plus générales.

Un champ électromagnétique arbitraire dans un milieu homogène, linéaire et isotrope peut être défini à travers un seul vecteur : le potentiel vecteur de Hertz  $\mathbf{\Pi}$ . Le potentiel vecteur de Hertz est un formalisme mathématique efficace pour résoudre les problèmes électromagnétiques. L'équation d'onde du potentiel de Hertz dans un milieu homogène, linéaire et isotrope s'écrit de la façon suivante [196] :

$$\nabla^2 \mathbf{\Pi} - \mu_0 \epsilon_0 \epsilon_r \partial_t^2 \mathbf{\Pi} = \mathbf{0} \quad (6.1)$$

Il existe généralement deux types de solution (liés aux états de polarisation TE et TM en symétrie cylindrique) pour les champs électromagnétiques satisfaisant l'équation (6.1).

Ces solutions prennent la forme suivante pour des champs monochromatiques avec une variation temporelle en  $\exp(-i\omega t)$  :

$$(\mathbf{E}_1, \mathbf{E}_2) = (\nabla \times \nabla \times \mathbf{\Pi}, i\omega \mu_0 \nabla \times \mathbf{\Pi}) \quad (6.2)$$

$$(\mathbf{H}_1, \mathbf{H}_2) = (-i\omega \epsilon_0 \epsilon_r \nabla \times \mathbf{\Pi}, \nabla \times \nabla \times \mathbf{\Pi}) \quad (6.3)$$

Les solutions peuvent être déterminées en utilisant deux vecteurs donnés par :

$$(\mathbf{Q}, \mathbf{R}) = (\nabla \times \mathbf{\Pi}, \nabla \times \nabla \times \mathbf{\Pi}) \quad (6.4)$$

Ainsi, les équations (6.2) et (6.3) se réécrivent respectivement de la façon suivante :

$$(\mathbf{E}_1, \mathbf{E}_2) = (\mathbf{R}, i k_0 \mathbf{Q}) \quad (6.5)$$

$$(\eta \mathbf{H}_1, \eta \mathbf{H}_2) = (-i k_0 \epsilon_r \mathbf{Q}, \mathbf{R}) \quad (6.6)$$

où  $k_0 = \frac{\omega}{c}$  est le nombre d'onde dans le vide et  $\eta = \mu_0 c$  est l'impédance du vide. Pour obtenir des solutions de l'équation (6.1) du type Bessel, les trois potentiels vecteurs de Hertz suivants sont souvent utilisés (coordonnées cartésiennes), la propagation se fait suivant l'axe  $z$  :

$$\mathbf{\Pi}_x \equiv \begin{pmatrix} J_m(K r) e^{i m \phi} e^{i(\omega t - \beta z)} \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (6.7)$$

$$\mathbf{\Pi}_y \equiv \begin{pmatrix} 0 \\ J_m(K r) e^{i m \phi} e^{i(\omega t - \beta z)} \\ 0 \end{pmatrix} \quad (6.8)$$

$$\mathbf{\Pi}_z \equiv \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ J_m(K r) e^{i m \phi} e^{i(\omega t - \beta z)} \end{pmatrix} \quad (6.9)$$

où  $r = \sqrt{x^2 + y^2}$  est la coordonnée radiale en coordonnée cylindrique,  $m$  est l'ordre de la fonction de Bessel et  $\phi$  est l'angle azimutal. Par ailleurs,  $\beta$  est la composante axiale (selon l'axe  $z$ ) du vecteur d'onde, et  $K$  est la composante transverse (dans le plan  $(x-y)$ ) du vecteur d'onde. Nous pouvons ainsi écrire la relation  $k^2 = \beta^2 + K^2 = \epsilon_r k_0^2$ . L'angle conique  $\theta$ , classiquement utilisé pour définir les faisceaux de Bessel, intervient dans les relations suivantes :  $K = k \sin \theta$  et  $\beta = k \cos \theta$ . La permittivité  $\epsilon_r$  est la permittivité relative du matériau diélectrique de fond.

En injectant les équations (6.7), (6.8) et (6.9) dans l'équation d'onde (6.4), et en faisant quelques étapes d'algèbre, nous pouvons déduire les vecteurs  $(\mathbf{Q}, \mathbf{R})$  associés aux trois vecteurs potentiels de Hertz  $\mathbf{\Pi}_x$ ,  $\mathbf{\Pi}_y$  et  $\mathbf{\Pi}_z$ . En coordonnées cartésiennes, nous obtenons les solutions suivantes :

Cas  $\mathbf{\Pi}_x$  :

$$\mathbf{Q} = e^{i(\omega t - \beta z + m \phi)} \begin{pmatrix} 0 \\ i \beta J_m(K r) \\ \frac{K}{2i} [J_{m+1}(K r) e^{i \phi} + J_{m-1}(K r) e^{-i \phi}] \end{pmatrix} \quad (6.10)$$

$$\mathbf{R} = e^{i(\omega t - \beta z + m \phi)} \begin{pmatrix} \frac{k^2 + \beta^2}{2} J_m(K r) + \frac{K^2}{4} [J_{m+2}(K r) e^{2i \phi} + J_{m-2}(K r) e^{-2i \phi}] \\ i \frac{K^2}{4} [J_{m-2}(K r) e^{-2i \phi} - J_{m+2}(K r) e^{2i \phi}] \\ \frac{i \beta K}{2} [J_{m-1}(K r) e^{-i \phi} - J_{m+1}(K r) e^{i \phi}] \end{pmatrix} \quad (6.11)$$

Cas  $\Pi_y$  :

$$\mathbf{Q} = e^{i(\omega t - \beta z + m\phi)} \begin{pmatrix} -i\beta J_m(Kr) \\ 0 \\ -\frac{K}{2} [J_{m+1}(Kr) e^{i\phi} - J_{m-1}(Kr) e^{-i\phi}] \end{pmatrix} \quad (6.12)$$

$$\mathbf{R} = e^{i(\omega t - \beta z + m\phi)} \begin{pmatrix} i\frac{K^2}{4} [J_{m-2}(Kr) e^{-2i\phi} - J_{m+2}(Kr) e^{2i\phi}] \\ \frac{k^2 + \beta^2}{2} J_m(Kr) - \frac{K^2}{4} [J_{m+2}(Kr) e^{2i\phi} + J_{m-2}(Kr) e^{-2i\phi}] \\ -\frac{\beta K}{2} [J_{m+1}(Kr) e^{i\phi} + J_{m-1}(Kr) e^{-i\phi}] \end{pmatrix} \quad (6.13)$$

Cas  $\Pi_z$  :

$$\mathbf{Q} = e^{i(\omega t - \beta z + m\phi)} \begin{pmatrix} i\frac{K}{2} [J_{m+1}(Kr) e^{i\phi} + J_{m-1}(Kr) e^{-i\phi}] \\ \frac{K}{2} [J_{m+1}(Kr) e^{i\phi} - J_{m-1}(Kr) e^{-i\phi}] \\ 0 \end{pmatrix} \quad (6.14)$$

$$\mathbf{R} = e^{i(\omega t - \beta z + m\phi)} \begin{pmatrix} -i\frac{\beta K}{2} [J_{m+1}(Kr) e^{i\phi} - J_{m-1}(Kr) e^{-i\phi}] \\ -\frac{\beta K}{2} [J_{m+1}(Kr) e^{i\phi} + J_{m-1}(Kr) e^{-i\phi}] \\ K^2 J_m(Kr) \end{pmatrix} \quad (6.15)$$

Les deux premières solutions ( $\Pi_x$  et  $\Pi_y$ ) génèrent des faisceaux de Bessel avec une polarisation linéaire (en réalité l'état de polarisation est plus complexe puisque le champ a aussi une composante  $z$ ). La troisième solution ( $\Pi_z$ ) donne des faisceaux de Bessel avec une polarisation purement radiale ou azimutale pour  $m = 0$ . Notons au passage, que nous retrouvons les équations (7) et (8) de la référence J. J. Wang *et al.* [195] à partir des équations (6.12) et (6.13), et que nous retrouvons les équations (12a) et (12b) de Y. Yu *et al.* [194] à partir des équations (6.14) et (6.15).

Nous avons utilisé jusqu'ici des grandeurs adimensionnées, nous modifions alors les solutions en se basant sur l'angle conique et l'amplitude du champ électrique  $E_0$  de façon à donner la bonne dimensions aux champs. La variable  $E_0$  correspond à l'amplitude du champ électrique sur l'axe optique ( $r = 0$ ) et pour  $m = 0$ . Les champs associés ( $\mathbf{E}, \mathbf{H}$ ) pour les polarisations TE et TM sont donnés respectivement par les équations (6.16) et (6.17).

$$(\mathbf{E}, \mathbf{H}) = k_0^{-2} (E_0 k_0 \mathbf{Q}, H_0 \mathbf{R}) e^{i(\omega t - \beta z)} e^{im\phi} \quad (6.16)$$

$$(\mathbf{E}, \mathbf{H}) = k_0^{-2} (E_0 \mathbf{R}, H_0 k_0 \mathbf{Q}) e^{i(\omega t - \beta z)} e^{im\phi} \quad (6.17)$$

où  $H_0 = n/\eta E_0$  et  $n = \epsilon_r^{1/2}$  est l'indice de réfraction.

### 6.1.2 Description d'un faisceau de Bessel impulsif

L'expression donnée au paragraphe précédent était celle d'un faisceau de Bessel infini monochromatique. Il est nécessaire pour notre étude de rendre compte de la nature impulsif de nos champs. Pour ce faire, nous passerons par la définition du spectre de l'impulsion que nous supposerons gaussienne par commodité.

L'impulsion gaussienne temporelle sera décrite par l'équation d'enveloppe :

$$G(t) = e^{-(t-t_0)^2/\tau_E^2} \quad (6.18)$$

où  $\tau_E$  est la demi-largeur à  $1/e$  du profil d'amplitude et  $t_0$  l'instant où l'enveloppe est à son maximum. Le spectre temporel de l'impulsion  $G(\omega)$  est décrit par la transformée de Fourier de  $G(t)$  :

$$G(\omega) = \int_{-\infty}^{+\infty} dt e^{-i\omega t} G(t) = \tau_E \sqrt{\pi} e^{-(\omega-\omega_0)^2/\Delta\omega^2} \quad (6.19)$$

où  $\Delta\omega \equiv 2/\tau_E$ . Dans le domaine temporel, le faisceau de Bessel impulsif est défini par :

$$\mathbf{E}(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega e^{i\omega t} G(\omega) \mathbf{E}(\mathbf{x}, \omega) \quad (6.20)$$

où  $\mathbf{E}(\mathbf{x}, \omega)$  est le champ monochromatique calculé à partir d'un potentiel vecteur de Hertz. Cette intégrale peut être simplifiée à différents ordres d'approximation, qui peuvent faciliter l'injection numérique du faisceau impulsif. Nous donnons dans l'annexe D la méthode permettant de calculer les différents ordres d'approximation de l'équation (6.20). Dans cette annexe, nous montrons que l'intégrale de Fourier typique d'une composante du champ :

$$E_\alpha(r, \phi, z, t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega E_0 J_m(Kr) e^{i\omega(t-\beta(\omega)z)} e^{-(\omega-\omega_0)^2/\Delta\omega^2} \quad (6.21)$$

se simplifie à l'ordre 0 sous la forme :

$$E_\alpha(r, \phi, z, t) = \frac{E_0 \Delta\omega}{2\sqrt{\pi}} e^{i(\omega_0 t - \beta_0 z)} J_m(\omega_0 \tau) e^{-\Delta\omega^2 t^2/4} \quad (6.22)$$

où  $\tau = r \sin \theta / c$  et  $\beta_0 = \beta(\omega_0)$ . C'est l'expression analytique (6.22) qui sera utilisée dans les futures simulations numériques. L'avantage qu'elle offre sur la méthode précédente, donnée par l'équation (6.20), est l'augmentation de la rapidité de calcul puisqu'une seule fonction de Bessel est nécessaire pour effectuer le calcul. L'inconvénient est que nous perdons le phénomène de propagation de l'enveloppe comme on le voit directement sur l'expression (6.22), la seule partie propagative étant liée au terme de phase  $e^{i(\omega_0 t - \beta_0 z)}$ . Cela n'est guère préjudiciable puisque l'extension de la zone sur laquelle le plasma joue un rôle important est de l'ordre du micron qui correspond à un temps de propagation de l'ordre de  $r \sin \theta / c \approx 1,4$  fs (pour  $\theta = 25^\circ$ ) très inférieur à la durée d'impulsion ( $\approx 100$  fs). Il est donc possible de considérer que sur la zone d'intérêt du plasma, l'enveloppe du champ varie instantanément.

Dans la suite, nous ferons des simulations exploitant la périodicité en  $z$  du faisceau de Bessel (conditions aux limites périodiques dans la direction  $z$ ). Cela nous permettra de considérer des fenêtres de calcul très réduites en  $z$  et rendra cette hypothèse d'approximation à l'ordre zéro justifiable.

## 6.2 Injection numérique des faisceaux de Bessel

Dans les paragraphes précédents, nous avons défini théoriquement les faisceaux de Bessel monochromatiques et impulsifs. Nous proposons désormais une méthode d'injection pour générer numériquement des faisceaux de Bessel avec l'algorithme PSATD.

### 6.2.1 Géométrie de l'antenne

Notre groupe a proposé récemment une méthode pour injecter des faisceaux de Bessel avec un algorithme FDTD [197]. Nous utilisons ici une méthode similaire, mais la résolution des équations de Maxwell est effectuée avec un algorithme PSATD. Dans la référence [197], l'injection numérique d'un faisceau de Bessel se fait en donnant à certains points de la grille, la solution analytique du faisceau de Bessel donnée dans la section 6.1. Les points d'injection de la grille sont définis sur un anneau creux de façon à respecter la symétrie cylindrique des faisceaux de Bessel. Une coupe ( $x$ - $y$ ) de cette antenne cylindrique est montrée sur la figure 6.1.

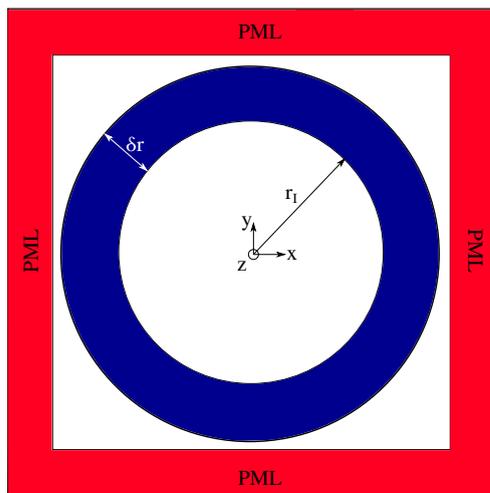


FIGURE 6.1 – Représentation d'une coupe ( $x$ - $y$ ) de l'antenne cylindrique. L'anneau bleu représente l'antenne d'épaisseur  $\delta r$  et de rayon interne  $r_I$ , alors que la zone rouge représente les PMLs.

L'antenne est caractérisée par un anneau creux ayant un rayon interne  $r_I$  et une épaisseur  $\delta r$ . Par ailleurs, de façon à éviter les réflexions du faisceau sur les bords de la boîte numérique, des PMLs sont placées sur les bords ( $x_{min}, x_{max}$ ) et ( $y_{min}, y_{max}$ ), comme montré sur la figure 6.1.

De façon à pouvoir utiliser des conditions périodiques en  $z$  dans les simulations numériques, nous devons fixer le pas spatial  $\Delta z$  de façon à ce que le rapport  $\lambda_z/\Delta z$  soit un nombre entier, où  $\lambda_z$  est la période du faisceau en  $z$ . Utiliser une seule période en  $z$  permet d'économiser fortement les ressources numériques par rapport au cas d'un faisceau de Bessel-Gauss ayant une dimensions de plusieurs dizaines de micromètre en  $z$  [197]. Même avec une seule période en  $z$ , nous pouvons avoir accès à des informations sur les dimensions latérales du plasma, la densité, la température, l'importance des phénomènes de transport ou encore les différents types d'onde.

La longueur de l'antenne selon l'axe  $z$  est donc fixée par la périodicité en  $z$  du faisceau de Bessel :

$$\lambda_z = \frac{\lambda_0}{n \cos \theta_m} \quad (6.23)$$

où  $\lambda_0$  est la longueur d'onde dans le vide,  $n$  est l'indice de réfraction du milieu et  $\theta_m = \sin^{-1}(\sin(\theta)/n)$  est l'angle conique dans le milieu.

## 6.2.2 Mise à jour des champs dans l'antenne

Nous avons défini dans la section précédente la forme géométrique de l'antenne, nous explicitons maintenant formellement la mise à jour des champs au sein de l'antenne.

Premièrement, pour alléger l'injection de la solution analytique dans l'antenne, nous utilisons l'approximation à l'ordre 0 de l'équation (6.20). Cette approximation correspond aux solutions  $(\mathbf{E}, \mathbf{H})$  des équations (6.16) ou (6.17) multipliées par un profil temporel gaussien centré en  $t_0$  :  $G(t) = e^{-(t-t_0)^2/\tau_E^2}$ . Par exemple, dans le cas d'un faisceau de Bessel polarisé TE (dérivé de l'équation (6.16)), les champs injectés dans l'antenne sont :

$$\mathbf{E}_{\text{Inj}} = \Re \left[ k_0^{-2} E_0 k_0 \mathbf{Q} e^{i(\omega t - \beta z)} e^{i m \phi} e^{-(t-t_0)^2/\tau_E^2} \right] \quad (6.24)$$

$$\mathbf{H}_{\text{Inj}} = \Re \left[ k_0^{-2} H_0 \mathbf{R} e^{i(\omega t - \beta z)} e^{i m \phi} e^{-(t-t_0)^2/\tau_E^2} \right] \quad (6.25)$$

Nous avons choisi une antenne de type source douce<sup>1</sup> pour éviter la diffusion de l'onde sur la source (typiquement présente dans le cas des sources dures<sup>2</sup>) [197]. Avec les sources douces, les points de l'antenne sont mis à jour en sommant les valeurs des champs issus du calcul PSATD, avec les valeurs des champs injectés des équations (6.24) et (6.25). Les champs  $\mathbf{E}_I$  et  $\mathbf{H}_I$  dans l'injecteur ont alors les formes suivantes :

$$\mathbf{E}_I(x, y, z, t) = \mathbf{E}_I(x, y, z, t) + \mathbf{E}_{\text{Inj}}(x, y, z, t)f(r) \quad (6.26)$$

$$\mathbf{H}_I(x, y, z, t) = \mathbf{H}_I(x, y, z, t) + \mathbf{H}_{\text{Inj}}(x, y, z, t)f(r) \quad (6.27)$$

Dans les équations (6.26) et (6.27), le champ injecté est multiplié par une fonction radiale  $f(r)$ . Cette fonction radiale a pour but d'éviter une trop forte violation des propriétés de divergence au sein de l'antenne. Au niveau de l'antenne, nous avons la propriété de divergence suivante :  $\nabla \cdot f(r)\epsilon_r \mathbf{E} = \epsilon_r \mathbf{E} \nabla \cdot f(r)$ . En prenant une fonction  $f(r)$  douce, nous nous rapprochons d'un champ à divergence nulle, c'est-à-dire de la solution exacte des équations de Maxwell. Dans les futures simulations, le profil radial sera typiquement une gaussienne centrée en  $r_I + \delta r/2$  et dont la largeur à mi-hauteur est quelques fois plus faible que l'épaisseur de l'injecteur.

## 6.3 Résultats numériques d'injection

Nous montrons dans les prochaines sections les résultats numériques obtenus avec l'antenne cylindrique, et les comparons aux résultats analytiques donnés par l'équation (6.20).

### 6.3.1 Cas monochromatique avec $m = 0$

L'antenne est ici testée avec un Bessel d'ordre  $m = 0$  polarisé selon  $x$ , d'angle conique  $\theta = 25^\circ$  (soit  $\theta_m = 16,9^\circ$  dans le milieu), se focalisant au coeur de la silice fondue où l'indice de réfraction est  $n = 1,45$  à  $\lambda_0 = 0,8 \mu\text{m}$ . L'injection est faite de façon à être

1. "soft source" en anglais.

2. "hard sources" en anglais. Contrairement à la source douce où l'injection se fait avec les équations (6.26) et (6.27), elle se fait avec les équations  $\mathbf{E}_I(x, y, z, t) = \mathbf{E}_{\text{Inj}}(x, y, z, t)f(r)$  et  $\mathbf{H}_I(x, y, z, t) = \mathbf{H}_{\text{Inj}}(x, y, z, t)f(r)$  pour une source dure.

dans un régime quasi-monochromatique : nous avons injecté un faisceau de Bessel avec un profil temporel  $G(t)$  correspondant à une rampe douce sur  $T_{\text{ramp}} = 100$  fs suivie d'un plateau<sup>3</sup>. Les mesures sont effectuées autour de  $t = 200$  fs, c'est-à-dire dans un régime quasi-monochromatique.

Nous utilisons une grille telle que  $N_x = N_y = 460$  et  $N_z = 32$ . Le pas  $\Delta x$  est choisi tel que  $\frac{\lambda_z}{\Delta x} = 32$ , soit  $\Delta x \approx 18,0$  nm. Le pas temporel  $\Delta t$  est fixé tel que  $\frac{2\pi}{\omega_0 \Delta t} = 50$  soit  $\Delta t \approx 53,3$  as. Le rayon interne de l'antenne est  $r_I = 180 \Delta x \approx 3,24$   $\mu\text{m}$  alors que l'épaisseur de l'antenne est donnée par  $\delta r = 30 \Delta x \approx 540$  nm.

Les résultats numériques obtenus avec la PSATD et les courbes analytiques sont affichés sur la figure 6.2.

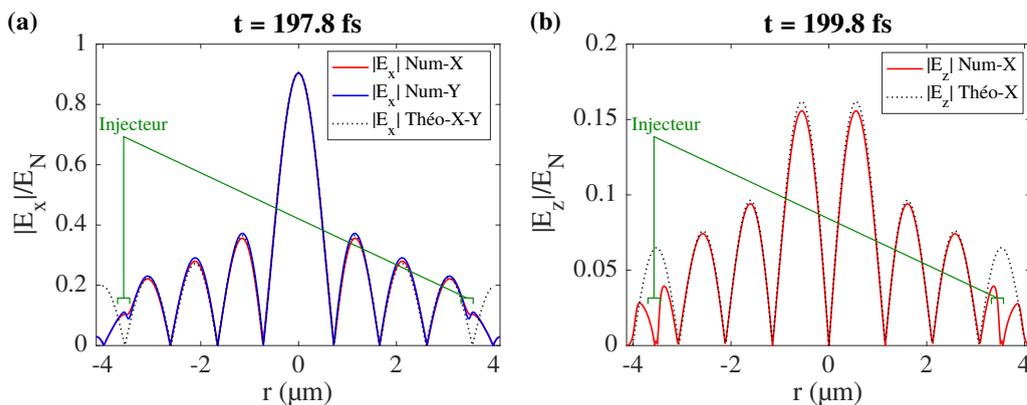


FIGURE 6.2 – Comparaison des champs numériques et analytiques. Cas d'un  $J_0$ , polarisé en  $x$ ,  $\lambda_0 = 0,8$   $\mu\text{m}$  et  $n = 1,45$ . (a)  $|E_x|/E_N$  à  $t = 197,8$  fs, (b)  $|E_z|/E_N$  à  $t = 199,8$  fs.

Les abréviations Num-X et Num-Y correspondent respectivement aux coupes X et Y du champ numérique alors que les abréviations Théo-X et Théo-Y correspondent respectivement aux coupes X et Y du champ théorique calculé à partir de l'équation (6.20). Les champs numériques obtenus ont été renormalisés avec une constante  $E_N$ , afin de pouvoir être comparés directement avec les champs analytiques. Avant de conclure sur les résultats, nous affichons sur la figure 6.3 une coupe 2D des composantes numériques  $E_x$  et  $E_z$ .

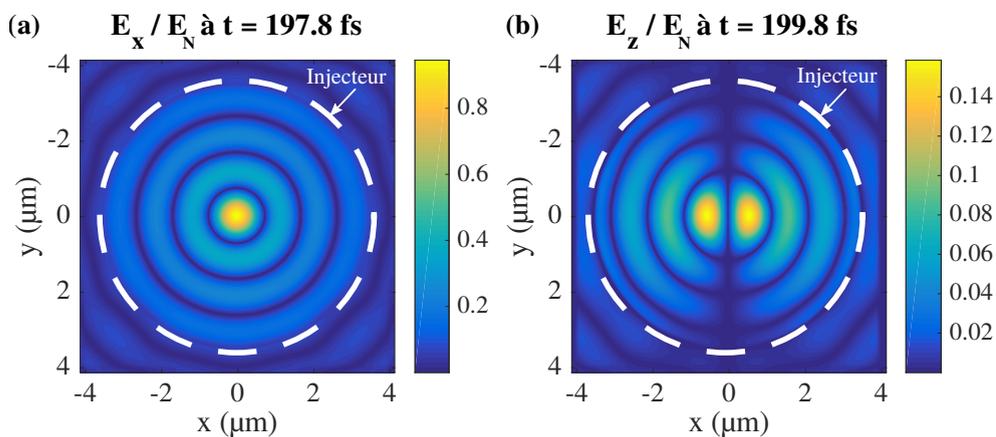


FIGURE 6.3 – Coupes 2D des champs numériques. Cas d'un  $J_0$ , polarisé en  $x$ ,  $\lambda_0 = 0,8$   $\mu\text{m}$  et  $n = 1,45$ . (a)  $|E_x|/E_N$  à  $t = 197,8$  fs, (b)  $|E_z|/E_N$  à  $t = 199,8$  fs.

3.  $G(t) = \sin^2 \frac{\pi t}{T_{\text{ramp}}}$  pour  $t \leq T_{\text{ramp}}$  et  $G(t) = 1$  pour  $t > T_{\text{ramp}}$ .

L'erreur numérique au niveau de la position du premier zéro de  $E_x$  est de 0,4%, et celle sur le contraste entre le lobe central et le premier lobe extérieur est de 2,2%. L'erreur numérique concernant le rapport d'amplitude maximale entre les composantes  $E_x$  et  $E_z$  est évaluée à 3,7%. Nous pouvons d'ailleurs voir sur la figure 6.2 que la forme de la solution numérique à l'intérieur de l'injecteur est proche de celle attendue en théorie. D'autre part, la symétrie circulaire du Bessel est bien respectée sur la figure 6.3. La composante  $E_y$  est nulle et notre résultat numérique est inférieur à  $5 \times 10^{-6}$ . Pour terminer, au niveau et en dehors de l'injecteur, la solution n'est plus satisfaisante. Cependant, cette zone ne fait pas partie de la zone d'étude, puisque nous nous attendons à de la génération de plasma au niveau du lobe central et seulement des premiers lobes extérieurs.

Pour conclure, cette méthode d'injection basée sur une antenne cylindrique permet bien de modéliser un faisceau de Bessel monochromatique d'ordre 0 dans les régimes d'angle conique et d'indice optique souhaités.

### 6.3.2 Cas monochromatique avec $m = 1$

Réalisons maintenant un test dans des conditions numériques similaires à celles de la section 6.3.1, mais en choisissant un Bessel d'ordre  $m = 1$  polarisé principalement selon  $y$ . Les résultats numériques et analytiques obtenus sont affichés sur la figure 6.4.

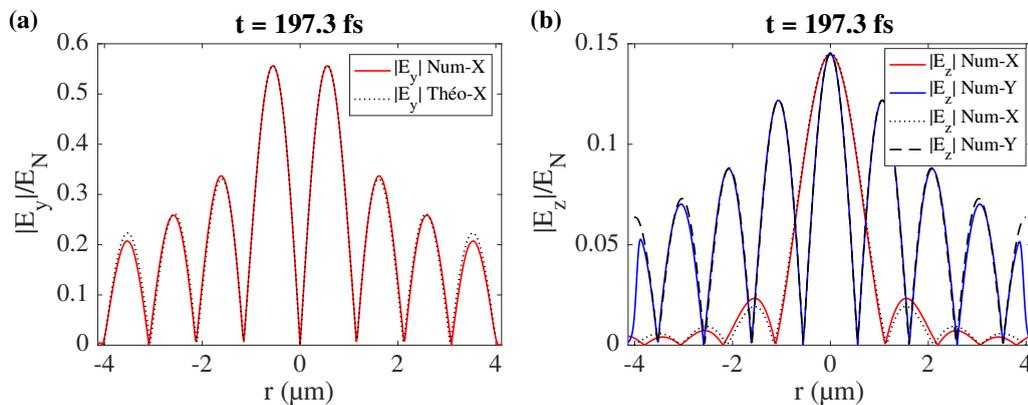


FIGURE 6.4 – Comparaison des champs numériques et analytiques. Cas d'un  $\text{BJ}_1$  polarisé selon  $y$ ,  $\lambda_0 = 0,8 \mu\text{m}$  et  $n = 1,45$ . (a)  $|E_y|/E_N$  à  $t = 197,3$  fs, (b)  $|E_z|/E_N$  à  $t = 197,3$  fs.

L'erreur numérique au niveau de la position du deuxième zéro de  $E_y$  (celui autour de  $1,2 \mu\text{m}$ ) est de 1,1%, et celle portant sur le contraste entre les premiers et les seconds lobes extérieurs est de 1,8%. Concernant le rapport d'amplitude maximale des composantes  $E_y$  et  $E_z$ , elle est de 0,6%. Nous avons également mesuré que les résidus de la composante  $E_x$  nulle en théorie (non affichée) sont inférieurs à  $2,7 \times 10^{-3}$ . Comme dans le cas  $m = 0$ , la solution n'est plus satisfaisante au niveau et en dehors de l'injecteur.

L'antenne cylindrique nous permet donc également de modéliser le faisceau de Bessel monochromatique d'ordre supérieur dans les régimes d'angle conique et d'indice optique souhaités. Nous avons par ailleurs fait un test avec  $m = 2$  (non détaillé ici) qui s'est avéré d'aussi bonne qualité que le test pour  $m = 1$ .

### 6.3.3 Cas d'une impulsion gaussienne temporelle

Nous avons vu dans les sections précédentes que l'antenne cylindrique permet d'injecter numériquement des faisceaux de Bessel monochromatique avec une précision raisonnable. Nous vérifions maintenant que l'injection se fait correctement en utilisant une impulsion et un développement limité à l'ordre zéro (voir paragraphe 6.1.2).

Nous injectons ici un faisceau de Bessel impulsif d'ordre 0, polarisé principalement selon  $x$ , et focalisant dans du saphir où l'indice de réfraction est  $n = 1,76$  à  $\lambda_0 = 0,8 \mu\text{m}$ . L'angle conique dans le vide du Bessel sera  $\theta = 25^\circ$  (soit  $\theta_m = 13,9^\circ$  dans le saphir). Concernant l'aspect temporel, le temps  $t_0$  est fixé à 250 fs, ce qui correspond à un maximum d'amplitude sur l'axe  $z$  à l'instant  $t_{\text{max}} = t_0 + \frac{(r_1 + \delta r/2)n^2}{c \sin \theta} = 335.8$  fs. Dans la suite du manuscrit, les temps seront toujours mesurés par rapport à l'instant  $t_{\text{max}}$ . Par ailleurs, la demi-largeur à  $1/e$  du profil d'amplitude  $\tau_G$  est fixé à 84,9 fs ce qui correspond à une largeur totale à mi-hauteur en intensité de  $\tau_G \sqrt{2 \ln 2} = 100$  fs.

Notons finalement quelques changements par rapport au dispositif numérique de la section 6.3.1. Le pas  $\Delta x$  est choisi tel que  $\frac{\lambda_z}{\Delta x} = 26$ , soit  $\Delta x \approx 18,0$  nm. Le nombre d'échantillons dans la direction  $z$  est donc  $N_z = 26$ . Le pas spatial est choisi de façon à ce que la taille de la boîte permette de réaliser une injection convenable et de façon à ne pas dépasser les 12 GB de mémoire de la carte GPU Nvidia K40 stockant les variables et les données sauvegardées.

À la fin de la simulation avec la PSATD, nous traçons les résultats numériques et analytiques à différents instants sur la figure 6.5.

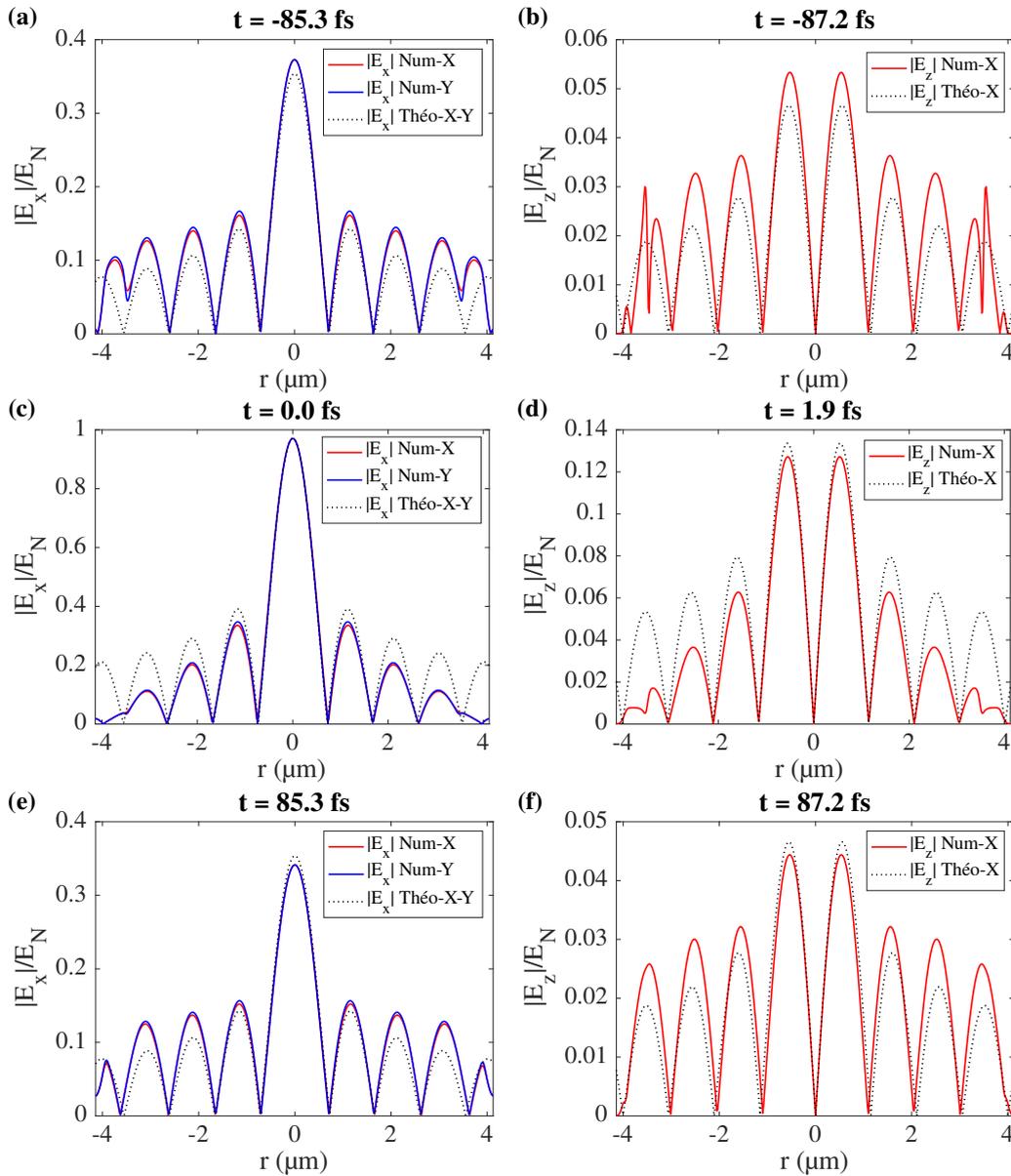


FIGURE 6.5 – Comparaison des champs numériques et analytiques. Cas d'un Bessel impulsionnel d'ordre 0, polarisé en  $x$ ,  $\lambda_0 = 0,8 \mu\text{m}$  et  $n = 1,76$ . (a)  $|E_x|/E_N$  à  $t = -85,3 \text{ fs}$ , (b)  $|E_z|/E_N$  à  $t = -87,2 \text{ fs}$ , (c)  $|E_x|/E_N$  à  $t = 0 \text{ fs}$ , (d)  $|E_z|/E_N$  à  $t = 1,9 \text{ fs}$ , (e)  $|E_x|/E_N$  à  $t = 85,3 \text{ fs}$ , (f)  $|E_z|/E_N$  à  $t = 87,2 \text{ fs}$ .

L'erreur numérique au niveau de la position du premier zéro de  $E_x$  est de 2,4% à  $t = 0$  et 2,5% à  $t = -85,3 \text{ fs}$ . Le contraste entre le lobe central et le premier lobe extérieur de  $E_x$  montre une erreur de 11% à  $t = 0$  et de 10% à  $t = -85,3 \text{ fs}$ . Le rapport d'amplitude maximale entre les composantes  $E_x$  et  $E_z$  est de 5% autour de  $t = 0$  et de 8% proche de  $t = -85 \text{ fs}$ . Par ailleurs, les résidus numériques de la composante  $E_y$  nulle en théorie (non affichée) sont inférieurs à  $5 \times 10^{-6}$ .

L'accord entre la solution numérique et théorique pour un faisceau de Bessel impulsionnel est raisonnable ( $\approx 10\%$  en terme de contraste et  $\approx 2\%$  au niveau de la position des zéros) sur une large gamme temporelle ( $>170 \text{ fs}$ ). Les solutions obtenues sur la figure

6.5 sont satisfaisantes pour réaliser des simulations d'interaction Bessel/diélectrique<sup>4</sup>. Nous avons remarqué à travers diverses simulations numériques que les résultats numériques étaient de meilleure qualité pour des angles coniques forts et pour une antenne plus épaisse. Nous avons trouvé des comportements similaires à ceux obtenus avec la FDTD dans la référence [197].

## 6.4 Simulation de l'interaction Bessel/diélectrique

Maintenant que l'injection de faisceaux de Bessel impulsionnels est possible avec la PSATD, nous pouvons commencer à étudier l'interaction entre ces derniers et un matériau diélectrique. Nous avons réalisé une centaine de simulations numériques d'interaction Bessel/diélectrique en résolvant le système d'équations de la section 3.5 avec le code PSATD/Hydro. Nous allons donner dans cette section les premiers comportements identifiés dans ce début d'étude.

Le diélectrique de l'étude est du saphir en phase  $\alpha$  ( $m_e^* = 0,4m_e$  [77],  $U_g = 10$  eV [120]). La masse des trous sera toujours celle des trous légers du saphir ( $m_h^* = 0,4m_e$ ), sauf quand nous écrirons explicitement que nous prenons la masse des trous lourds ( $m_h^* = 7,5m_e$ ). La densité initiale d'atomes est  $n_0 = 2,35 \times 10^{22}$  cm<sup>-3</sup> [198]. Comme énoncé dans le chapitre 2, nous négligeons l'anisotropie de l'indice optique du saphir pour simplifier le problème :  $n = 1,76$  à  $\lambda_0 = 0,8$   $\mu\text{m}$ .

Dans les simulations, lorsque l'ionisation est incluse, le taux de photoionisation est calculé à partir de la relation (3.22), et les taux d'ionisation par impact pour les électrons et les trous seront calculé à partir de l'expression (3.15). Les taux de collision avec les phonons, et électrons/trous seront donnés.

Les caractéristiques des faisceaux de Bessel impulsionnels utilisés dans les simulations sont les suivantes : polarisation selon  $x$ , ordre  $m = 0$ , angle conique  $\theta = 25^\circ$  (soit  $\theta_m = 13,9^\circ$  dans le saphir) et une largeur totale à mi-hauteur du profil temporel gaussien en intensité de 100 fs. L'intensité maximale  $I_{\text{Max}}$  atteinte par le faisceau de Bessel en l'absence de plasma variera de  $4 \times 10^{12}$  W/cm<sup>2</sup> à  $4 \times 10^{14}$  W/cm<sup>2</sup> dans les simulations numériques.

La fenêtre numérique pour la PSATD (pour les champs) est identique à celle de la section 6.3.3 :  $N_x = N_y = 460$  et  $N_z = 26$ . Par ailleurs, nous définissons pour le solveur fluide une fenêtre de calcul plus réduite. En effet, il est raisonnable de penser que le plasma sera généré essentiellement au niveau du lobe central (et éventuellement sur les premiers lobes latéraux). Nous prendrons donc les paramètres suivants pour le solveur fluide :  $N_{xP} = N_{yP} = 289$  et  $N_{zP} = 26$ . Cette fenêtre plus réduite est centrée au milieu de celle du solveur PSATD dans le plan  $(x, y)$ . Cette technique avec une grille plus petite pour le solveur fluide présente deux avantages : (1) il n'y a pas de risque de génération de plasma à l'intérieur et à l'extérieur de l'injecteur (2) elle diminue les besoins de ressources en mémoire et en temps de calcul.

4. Notons d'ailleurs qu'expérimentalement le contraste entre les lobes n'est pas rigoureusement celui attendu, la précision numérique obtenue ici est donc largement suffisante.

Dans les directions  $x$  et  $y$ , les conditions aux limites du solveur LW<sub>2</sub> sont des bords ouverts déjà discutés dans la section 4.8, alors qu'une condition aux limites périodiques est utilisée dans la direction  $z$ . Le pas spatial est fixé tel que  $\frac{\lambda_z}{\Delta z} = 26$ , soit  $\Delta z = \Delta y = \Delta x \approx 18,0$  nm. Le pas temporel  $\Delta t$  est tel que  $\frac{2\pi}{\omega_0 \Delta t} = 50$  soit  $\Delta t \approx 53,3$  as. Par ailleurs, l'antenne a les mêmes paramètres géométriques que dans la section 6.3.

Dans les sections suivantes, nous allons donner les comportements importants relevés lors de la série de simulations numériques d'interaction Bessel/diélectrique.

### 6.4.1 Réflexion totale

Un effet important des charges libres d'un plasma est de réduire la permittivité du milieu dans lequel les ondes électromagnétiques se propagent. Dans notre cas, cela signifie que l'onde injectée dans le diélectrique non perturbé se propagera normalement jusqu'à atteindre une région dans laquelle la génération de plasma se fera : un phénomène de réflexion peut avoir lieu. Il est donc important de considérer ce problème et de voir comment il impacte la propagation des faisceaux de Bessel dans nos expériences. Pour cela nous allons rappeler deux notions déjà abordées dans la section 5.1.2, celle de densité critique et celle de point tournant.

La densité critique  $n_c$  d'un plasma est la densité de porteurs libres pour annuler la permittivité d'un matériau. Dans notre où plusieurs types de porteurs existent, la permittivité du matériau en présence de plasma s'écrit [109] :

$$\epsilon = \epsilon_r - \frac{n_e q_e^2}{\epsilon_0 \omega_0^2} \left[ \frac{1}{m_e^* \left(1 + i \frac{\nu_e}{\omega_0}\right)} + \frac{1}{m_h^* \left(1 + i \frac{\nu_h}{\omega_0}\right)} \right] \quad (6.28)$$

La densité critique s'exprime donc comme :

$$n_c = \frac{\epsilon_r \epsilon_0 \omega_0^2}{q_e^2} \left[ \frac{1}{m_e^* \left(1 + \frac{\nu_e^2}{\omega_0^2}\right)} + \frac{1}{m_h^* \left(1 + \frac{\nu_h^2}{\omega_0^2}\right)} \right]^{-1} \quad (6.29)$$

où par analogie entre leur approche et la nôtre,  $\nu_e$  peut être associé à notre terme de collision élastique<sup>5</sup>  $\nu_{bie} + \nu_{ep}$ , et  $\nu_h$  à  $\nu_{bih} + \nu_{hp}$ .

La notion de point tournant est issue de l'optique géométrique et correspond dans un plasma inhomogène à la position pour laquelle une onde transverse subi une réflexion totale. Dans notre cas, les composantes en ondes planes d'un faisceau de Bessel sont réparties sur un cône d'angle au sommet égal à  $\theta_m$ . L'angle d'incidence sur un plasma à symétrie axiale sera donc égal à  $\theta_{Inc} = \frac{\pi}{2} - \theta_m$ . La densité  $n_t$  pour laquelle le plasma est totalement réfléchissant s'écrit alors :

$$n_t = n_c \cos^2 \theta_{Inc} = n_c \sin^2 \theta \quad (6.30)$$

5. La permittivité de notre milieu est en réalité plus complexe du fait que notre modèle prenne en compte des phénomènes de non-neutralité, ou encore des effets de transport, mais cela ne sera pas contraignant pour l'analyse de cette section.

Pour fixer les idées, nous avons réalisé une simulation avec un plasma pré-existant, dont la coupe ( $x, y=0, z=0$ ) de sa densité<sup>6</sup> est tracée en bleue sur la figure 6.6.

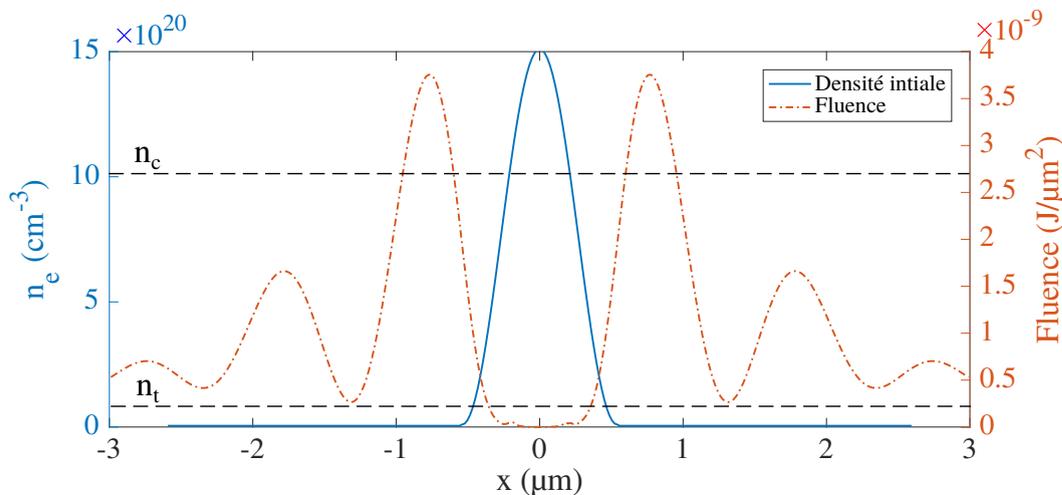


FIGURE 6.6 – Coupes ( $x, y=0, z=0$ ) de la densité électronique initiale (ligne continue bleue) et de la fluence numérique en fin de simulation (tirets pointillés rouges). Les pointillés noirs représentent les niveaux de la densité critique  $n_c = 1,08 \times 10^{21} \text{ cm}^{-3}$  et de la densité au point tournant  $n_t = 0,06 \times 10^{21} \text{ cm}^{-3}$ .

De façon à mieux mettre en évidence l'effet de réflexion totale, nous avons supprimé dans cette simulation les phénomènes d'ionisation et nous avons fixé des fréquences de collision très inférieures à la fréquence de l'onde optique :  $\nu_{\text{bie}} + \nu_{\text{ep}} = \nu_{\text{bih}} + \nu_{\text{hp}} = 0,05 \text{ fs}^{-1}$  et  $\nu_{\text{eh}} = 0 \text{ fs}^{-1}$ . (La simulation de la figure 6.6 a été effectuée avec faisceau de Bessel d'ordre  $m = 0$  avec une intensité maximale  $I_{\text{Max}} = 4 \times 10^{12} \text{ W/cm}^2$ , soit deux ordres de grandeur en dessous des intensités utilisées expérimentalement pour obtenir les canaux de la figure 1.2).

Nous avons également représenté en pointillés rouges sur la figure 6.6, la coupe ( $x, y=0, z=0$ ) de la distribution de fluence dont l'intégration est réalisée sur les 510 fs de la simulation numérique. Nous remarquons que la distribution de fluence est quasi-nulle dans tout le plasma, exceptée sur les bords où un pied évanescent semble pouvoir pénétrer sur une centaine de nanomètres. Le phénomène de réflexion totale limite donc fortement le dépôt d'énergie au sein même du plasma.

La densité du point tournant est très faible dans le cas étudié à cause de la faible valeur de l'angle conique des faisceaux de Bessel dans le saphir ( $\theta_m = 13,9^\circ$ ), et compte tenu des faibles masses effectives des électrons et des trous ( $0,4m_e$ ). Dans le cadre de cette simulation, dès que la densité du plasma d'électrons/trous atteint 0.2% de la densité d'atomes  $n_0$ , le faisceau de Bessel est réfléchi. Ce phénomène de réflexion totale est particulièrement restrictif pour l'absorption des faisceaux de Bessel à angle conique faible. Nous verrons dans la section 6.4.7 qu'il empêche les zones de forte intensité du faisceau de Bessel de se former, et freine la densification du plasma même lorsque les taux d'ionisation sont forts. Cependant, dans la section 6.4.7 nous verrons que l'effet des collisions tend à augmenter la valeur de la densité critique et donc de celle au point tournant, comme cela est indiqué par l'équation (6.29).

6. Le plasma initial est à symétrie circulaire et est invariant dans la direction  $z$ . Par ailleurs, la densité de trou est initialement égale à la densité électronique.

## 6.4.2 Transport pondéromoteur

Nous allons maintenant augmenter l'intensité du faisceau optique pour observer le transport pondéromoteur discuté dans la section 5.1.3. L'intensité maximale du faisceau de Bessel est maintenant  $I_{\text{Max}} = 4 \times 10^{14} \text{ W/cm}^2$ .

Nous réalisons à nouveau une simulation avec un pré-plasma de façon à isoler l'effet pondéromoteur des effets d'ionisation. Nous considérons dans une première simulation un plasma avec les fréquences de collision suivantes :  $\nu_{\text{bie}} + \nu_{\text{ep}} = \nu_{\text{bih}} + \nu_{\text{hp}} = 0,1 \text{ fs}^{-1}$  et  $\nu_{\text{eh}} = 1 \text{ fs}^{-1}$ .

Sur la figure 6.7(a), nous avons représenté la coupe ( $x, y=0, z=0$ ) de la densité initiale (en bleue) et la coupe de la densité finale après passage du faisceau de Bessel impulsif (pointillés rouges). Nous pouvons observer sur cette figure une compression du profil de densité du plasma. Cette compression est la conséquence de la force pondéromotrice de l'équation (5.5) exercée par le faisceau sur le plasma. Nous avons vu dans la section 5.1.3 que cette force dépend directement des gradients du champ ( $\nabla \mathbf{E}^2$ ), qui s'avèrent suffisamment importants dans cette simulation pour induire du transport pondéromoteur, et ainsi comprimer le plasma au centre.

Nous avons représenté les mêmes coupes pour la densité de trous sur la figure 6.7(b), et nous observons des comportements similaires à ceux de la densité électronique.

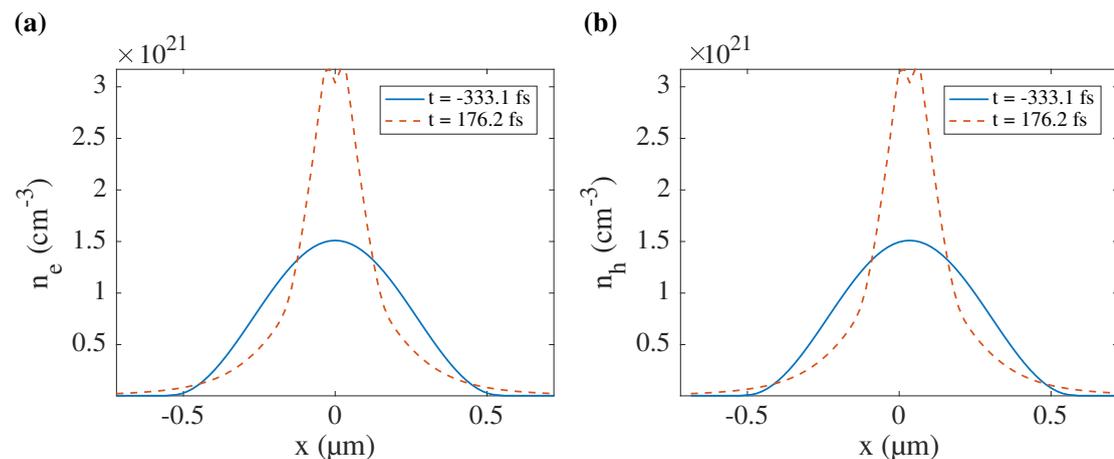


FIGURE 6.7 – (a) Coupes ( $x, y=0, z=0$ ) du profil de densité électronique initial (ligne bleue) et final (pointillés rouges). (b) Coupes ( $x, y=0, z=0$ ) du profil de densité de trous initial (ligne bleue) et final (pointillés rouges).

Nous avons réalisé une seconde simulation numérique avec des fréquences de collision plus fortes :  $\nu_{\text{bie}} + \nu_{\text{ep}} = \nu_{\text{bih}} + \nu_{\text{hp}} = 1 \text{ fs}^{-1}$  et  $\nu_{\text{eh}} = 1 \text{ fs}^{-1}$ . Le résultat est affiché sur la figure 6.8(a) où nous pouvons remarquer que la compression du profil de densité est très réduite par rapport à celle observée sur la figure 6.7(a).

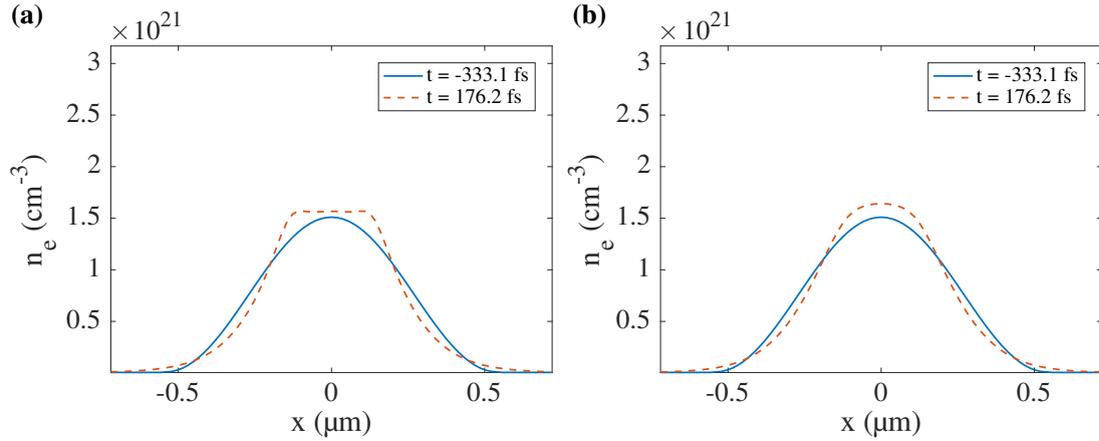


FIGURE 6.8 – (a) Coupes ( $x, y=0, z=0$ ) du profil de densité électronique initial (ligne bleue) et final (pointillés rouges) dans un plasma avec des fréquences de collision avec les phonons fortes. (b) Coupes ( $x, y=0, z=0$ ) du profil de densité électronique initial (ligne bleue) et final (pointillés rouges) lors d'une simulation avec les trous lourds du saphir.

La force pondéromotrice communique aux fluides une vitesse moyenne dirigée vers le centre. Les phénomènes de collision avec les phonons ont tendance à convertir cette vitesse moyenne en vitesse aléatoire (thermique), et ainsi s'opposer à ce phénomène. Il s'en suit que lorsque la fréquence de collision avec les phonons est de l'ordre de la fréquence optique, le transport pondéromoteur est fortement affaibli aux intensités optiques étudiées. Concernant les collisions électron/trou, elles s'opposent moins au transport que celles avec les phonons (électrons/phonons et trous/phonons) puisqu'elles induisent un transfert du flux de quantité de mouvement entre le fluide d'électrons et le fluide de trous qui convergent tous deux au centre. Ce phénomène tend donc à conserver l'existence de ce flux convergent engendré par la force pondéromotrice.

Nous avons réalisé une troisième simulation en prenant la masse des trous lourds du saphir ( $m_{\text{h}}^* = 7,5m_e$ ) et en reprenant les mêmes fréquences de collision que celles ayant permis d'obtenir la figure 6.7(a). Le résultat est affiché sur la figure 6.8(d) où nous remarquons que le transport pondéromoteur est plus faible que sur la figure 6.7(a). Ce comportement est en accord avec l'équation (5.5) qui stipule que la force pondéromotrice est inversement proportionnelle à la masse. Ainsi, dans cette simulation, les trous lourds se déplacent plus lentement que les électrons de conduction ( $m_e^* = 0,4m_e$ ), et cela engendre une force coulombienne de rappel importante dès que les électrons tendent à s'éloigner des trous lourds via la force pondéromotrice. Ce phénomène de rappel réduit considérablement la compression du plasma.

Pour conclure, lorsque les trous de valence ont une masse effective faible (typiquement  $m_{\text{h}}^* = 0,4m_e$ ), le transport pondéromoteur peut jouer un rôle non négligeable dans la distribution du dépôt d'énergie dans le diélectrique. Nous avons montré ici une étude avec un plasma pré-existant, mais la force pondéromotrice peut être réduite lorsque les

phénomènes d'ionisation sont inclus. En effet, l'ionisation tend à réduire l'amplitude des champs et donc des gradients, limitant ainsi l'effet de transport.

### 6.4.3 Absorption résonnante

Rappelons que des phénomènes de résonance apparaissent lorsque les ondes polarisées TM atteignent les points où la densité des plasmas est égale à la densité critique (cf paragraphe 5.1.2). Nous cherchons ici à comprendre l'effet des ces phénomènes résonnants sur les effets pondéromoteurs ainsi que d'ionisation.

#### 6.4.3.1 Effets pondéromoteurs

Nous reprenons pour ici les résultats de la simulation numérique de la section 6.4.1 qui portait sur le phénomène de réflexion totale sur un plasma pré-existant. Nous affichons sur la figure 6.9 des coupes ( $x, y=0, z=0$ ) de la densité électronique initiale (courbe bleue), de la densité à  $t = 109,5$  fs (pointillés bleus) et de la valeur absolue de  $E_x$  à  $t = -13,1$  fs. Nous traçons à nouveau en pointillés noirs la position de la densité critique et de la densité au point tournant.

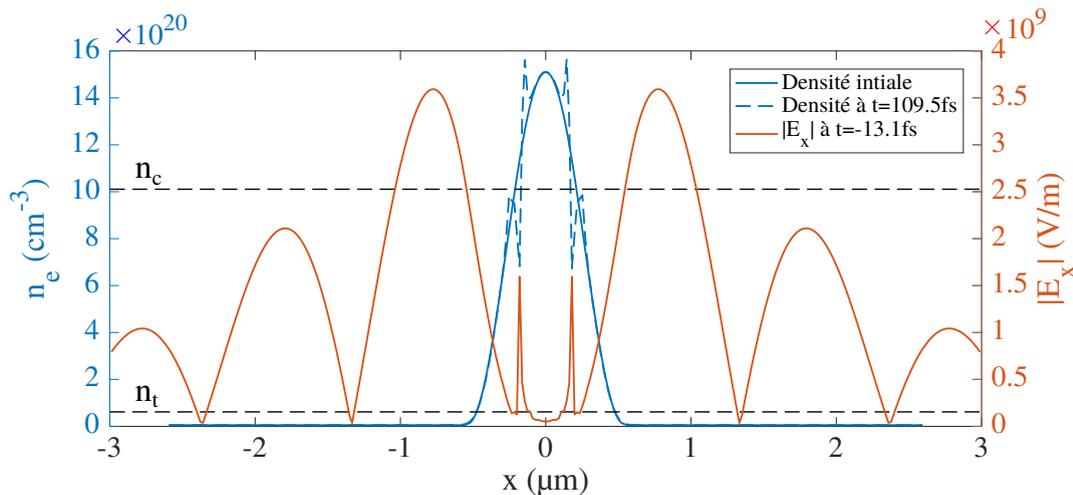


FIGURE 6.9 – Coupes ( $x, y=0, z=0$ ) de la densité du plasma initiale (ligne continue bleue), à  $t = 109,5$  fs (pointillés bleus) et du champ numérique à  $t = -13,1$  fs (ligne continue rouge).

Nous pouvons remarquer sur la figure 6.9 un pic de résonance dans la région de la densité critique. Nous avons observé (non montré ici) que ce pic était absent dans la coupe  $y$  (direction orthogonale à la direction polarisation du faisceau), et que l'onde caractérisant ce pic a un caractère longitudinal<sup>7</sup>. Ce pic de résonance correspond donc à une onde plasma excitée à travers le phénomène d'absorption résonnante discuté dans la section 5.1.2.

D'autre part sur la figure 6.9, nous observons une modification du profil de densité au niveau de la région de la densité critique. Nous avons conclu que l'onde plasma excitée

7. Nous avons séparé dans l'espace de Fourier spatial le champ en deux composantes, une longitudinale  $\mathbf{k} \cdot (\mathbf{k} \cdot \tilde{\mathbf{E}}^n)$  et une transverse  $\tilde{\mathbf{E}}^n - \mathbf{k} \cdot (\mathbf{k} \cdot \tilde{\mathbf{E}}^n)$ , où  $\mathbf{k}$  est le vecteur des fréquences spatiales. Nous avons remarqué qu'au niveau de la résonance le champ est de nature longitudinale.

présente des gradients de champ importants, qui induisent du transport pondéromoteur<sup>8</sup> (même pour une onde longitudinale [81]).

Nous soulignons finalement que dans cette simulation numérique, l'intensité du faisceau n'était pas suffisante ( $I_{\text{Max}} = 4 \times 10^{12} \text{ W/cm}^2$ ) pour comprimer le plasma comme c'était le cas dans la section précédente. Cependant, même à ces niveaux d'intensité, les gradients de densité de l'onde plasma sont suffisamment forts pour induire du transport pondéromoteur au niveau de la densité critique.

L'excitation de l'onde plasma a lieu uniquement dans la direction de polarisation  $x$ , et engendre ainsi des modifications du profil de densité différentes dans les directions  $x$  et  $y$ .

Pour conclure cette section, nous avons mis en évidence l'effet de transport pondéromoteur induit par l'onde plasma lors de l'interaction Bessel/diélectrique. Nous l'avons montré dans un plasma pré-existant, mais une telle amplification de la résonance n'est pas toujours possible lorsque les taux de collision avec les phonons sont conséquents ( $\approx 10^{15} \text{ fs}^{-1}$ ) ou même lorsque les phénomènes d'ionisation sont inclus. En effet, ces derniers génèrent des variations de densité dans le temps, et donc des variations de la position de la densité critique. La conversion d'énergie vers l'onde plasma s'opère donc en plusieurs positions différentes dans le plasma, réduisant ainsi l'amplitude crête de celle-ci, ainsi que les effets pondéromoteurs sous-jacents.

### 6.4.3.2 Effets sur l'ionisation

Nous avons vu dans la section précédente que l'onde plasma excitée peut induire une anisotropie du profil de densité par transport pondéromoteur. Nous allons voir ici un autre type d'anisotropie générée par cette même onde.

Nous avons tracé sur la figure 6.10 des coupes  $x$  et  $y$  de  $|E_x|$  à  $t = 2,85 \text{ fs}$  en vert, et de la densité électronique en fin de simulation en bleue<sup>9</sup>.

---

8. Remarque : L'effet pondéromoteur de la résonance était quasi-nul sur la figure 6.7 à cause des taux de collision plus fort dans la simulation. La résonance n'a pu s'amplifier comme sur la figure 6.9 suite à un amortissement plus rapide.

9. Nous avons obtenus cette figure à partir d'une simulation prenant en compte la photoionisation et l'ionisation par impact. Le taux d'ionisation par impact est celui de la prochaine section avec  $\Upsilon = 6,7$ , et l'intensité maximale de l'impulsion sans le plasma est  $I_{\text{Max}} = 10^{14} \text{ W/cm}^2$ .

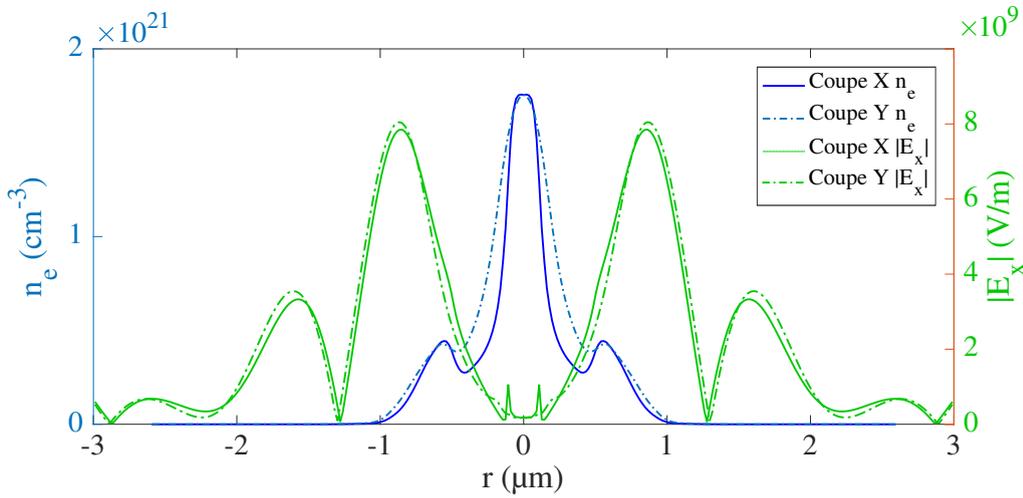


FIGURE 6.10 – Coupes ( $x, y=0, z=0$ ) et ( $x=0, y, z=0$ ) de la densité électronique à  $t_{\text{final}} = 176,2$  fs (lignes bleues), et de  $|E_x|$  à  $t = 2,85$  fs (lignes vertes).

Nous remarquons que le plasma est plus étroit dans la direction de polarisation  $x$  que dans la direction orthogonale  $y$  (typiquement 400 nm de diamètre dans la direction  $x$  à  $n_e = 0,5 \times 10^{21} \text{ cm}^{-3}$  contre 800 nm dans la direction  $y$ ).

Nous avons deux explications concernant cette anisotropie du profil de densité. (1) La résonance induit des valeurs de champs différentes dans les directions  $x$  et  $y$  et donc des taux d'ionisation différents dans les deux directions. (2) D'après la référence [199] et [200] la croissance du champ dans un nano-plasma est plus forte dans la direction orthogonale à la direction polarisation que dans cette dernière<sup>10</sup>, favorisant ainsi l'ionisation dans la direction  $y$ .

Pour conclure, nous avons mis en évidence l'importance de bien modéliser les ondes plasmas dans les problèmes d'interaction Bessel/diélectrique. En effet, lorsque les conditions favorisent l'excitation de ces ondes, des anisotropies du profil de densité non négligeables du plasma peuvent être observées.

La prise en compte des ondes plasmas dans les modèles impose de ne pas faire l'hypothèse de neutralité ( $n_e = n_h$ ), puisque par définition une onde plasma est une onde longitudinale caractérisée par une séparation de charge :  $n_e \neq n_h$ . Le champ généré par la séparation de charge est décrit par l'équation de Maxwell-Gauss  $\nabla \cdot \epsilon_r \mathbf{E} = \frac{q_e n_e + q_h n_h}{\epsilon_0}$  qu'il est important d'intégrer pour décrire un champ longitudinal.

#### 6.4.4 Gradients du profil de densité

Nous avons remarqué dans la série de simulation numérique que les profils de densité sont fortement dépendants des paramètres choisis pour l'ionisation par impact.

Le taux d'ionisation par impact de Keldysh est déterminé à partir l'équation (6.31) (correspondant à l'équation (3.15) du chapitre 3).

$$\alpha^{\text{Single}} = \begin{cases} \alpha_0^e \left( \frac{E_e - E_T}{U_g} \right)^{\Upsilon=2} & \text{pour } E_e \geq E_T \\ 0 & \text{pour } E_e < E_T \end{cases} \quad (6.31)$$

10. valable même pour un plasma sous-critique.

avec

$$\alpha_0^e = \left( \frac{q_e^2}{4\pi} \right)^2 \frac{m_e^* A_c^2 A_v^2}{\epsilon_r^2 \hbar^3 \left( 1 + 2 \frac{m_e^*}{m_h^*} \right)^{3/2}} \quad (6.32)$$

La valeur de ce taux est difficile à calculer précisément. D'une part, les intégrales de recouvrement  $A_c$  et  $A_v$  sont complexes à calculer, et les méthodes de calcul utilisées mènent parfois à des valeurs très différentes (variant de 0,01 à 0,38 pour GaAs) [44]. D'autre part, le taux d'ionisation par impact peut évoluer avec un exposant  $\Upsilon$  différent de celui donné par la formule d'ionisation par impact de Keldysh ( $\Upsilon = 2$ ). En effet, cette dernière stipule une dépendance quadratique entre ce taux et l'énergie des particules  $E_e$ , mais d'autres références ont montré qu'il peut évoluer dans du quartz à la puissance 6,7 ou voire exponentiellement<sup>11</sup> [121]. Par exemple, dans le diamant, les calculs sur la structure de bande complète ont montré que le taux d'ionisation par impact pouvait être approximé avec une bonne précision avec une évolution à la puissance 4,5 [201].

Nous avons fait ici une étude en faisant varier l'exposant  $\Upsilon$ . L'intensité maximale dans les simulations est  $I_{\text{Max}} = 10^{14}$  W/cm<sup>2</sup>. Nous affichons sur la figure 6.11 des coupes  $x$  et  $y$  de densités électroniques à  $t_{\text{final}} = 176,2$  fs issues de ces simulations.

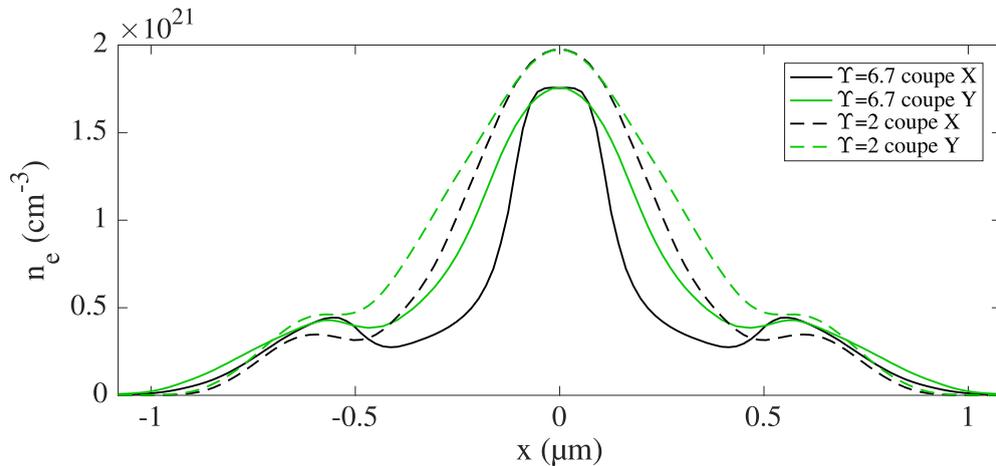


FIGURE 6.11 – Coupes ( $x, y=0, z=0$ ) et Y de la densité électronique finale lors des simulations avec une valeur d'exposant  $\Upsilon = 6,7$  (lignes continues) et  $\Upsilon = 2$  (pointillés).

Les lignes pointillées correspondent à la simulation avec  $\Upsilon = 2$  alors que les lignes continues correspondent à celle avec  $\Upsilon = 6,7$ . Par ailleurs, nous notons que la constante  $\alpha_0^e$  n'était pas la même pour les deux simulations, mais cela n'est pas contraignant pour le point discuté dans cette section. Le grand nombre de simulations réalisées nous a montré que les gradients du profil de densité sont plus importants lorsque l'exposant  $\Upsilon$  augmente (comme c'est le cas sur la figure 6.11), puisque induits par une non-linéarité plus forte. Cette augmentation des gradients de densité vont de paire avec des effets de résonance accrus<sup>12</sup>, engendrant ainsi une anisotropie plus forte du profil de densité. Cela est visible sur la figure 6.11 où les écarts entre les coupes  $x$  et  $y$  sont plus forts dans la simulation avec  $\Upsilon = 6,7$  que dans celle avec  $\Upsilon = 2$ .

11. Les auteurs de cette référence ont étudié le taux d'ionisation par impact déclenchée par les trous, mais ce type d'évolution non quadratique peut être également vraie pour l'ionisation par impact déclenchée par les électrons de conduction.

12. Le facteur de conversion en énergie est plus important puisque la distance entre le point tournant et le point critique se voit réduite.

Pour conclure, lorsque le coefficient d'ionisation par impact est faiblement non-linéaire (par exemple  $\Upsilon = 2$ ), le phénomène d'absorption résonnante est modéré.

### 6.4.5 Température du plasma et limite quantique

Nous allons maintenant étudier l'évolution de la densité et de la température du plasma en fonction du taux d'ionisation par impact.

Dans la série de six simulations numériques à venir, nous fixons les fréquences de collision à :  $\nu_{\text{bie}} + \nu_{\text{ep}} = \nu_{\text{bih}} + \nu_{\text{hp}} = 1 \text{ fs}^{-1}$  et  $\nu_{\text{eh}} = 0$ . De plus, l'intensité maximale du faisceau de Bessel est  $I_{\text{Max}} = 10^{14} \text{ W/cm}^2$ .

Nous avons relevé pour six valeurs différentes de coefficient d'impact  $\alpha_0^e$ , la température électronique maximale du plasma sur l'axe  $z$  ainsi que la densité maximale du plasma atteinte durant la simulation. Nous avons représenté ces données sur la figure 6.12.

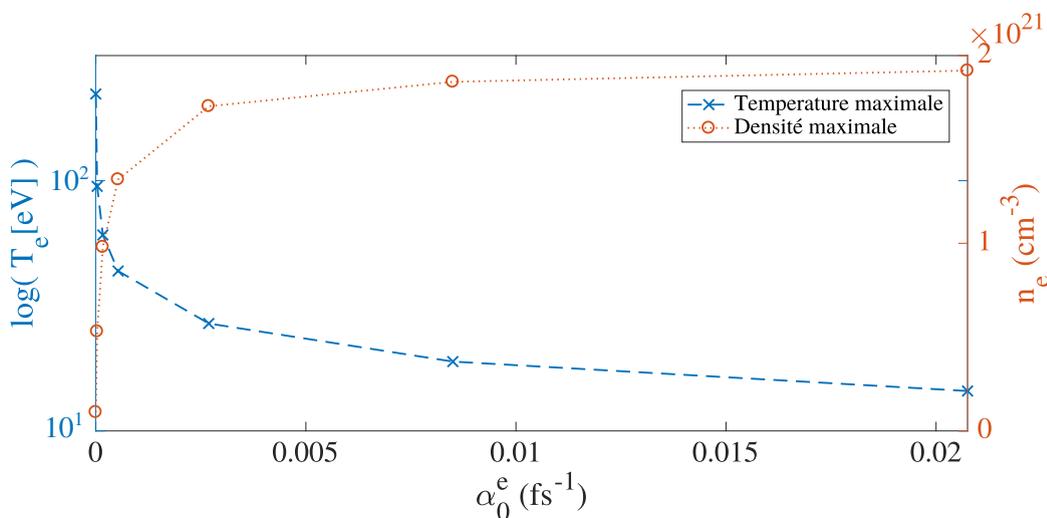


FIGURE 6.12 – Température maximale (tirets bleus) et densité maximale (pointillés rouges) pendant les simulations en fonction du taux d'impact  $\alpha_0^e$ .

Nous remarquons qu'en régime de photoionisation (c'est-à-dire lorsque  $\alpha_0^e \rightarrow 0$ ) la température électronique est haute ( $\approx 200 \text{ eV}$ ), alors qu'elle est d'une dizaine d'eV lorsque l'ionisation par impact devient effective<sup>13</sup>. Cette diminution de la température s'explique par le fait que lorsque le coefficient d'impact augmente, les particules énergétiques ont une plus grande probabilité d'ioniser par impact, et donc de voir leur énergie réduite au profit de la création d'une particule froide.

Nous revenons alors sur la discussion de la section 2.2.2 où nous avons vu que lorsque la température est inférieure à 10 eV, la limite quantique est presque atteinte puisque la longueur d'onde thermique de De Broglie est du même ordre de grandeur que la distance entre les particules. Ainsi, dans les simulations d'interactions Bessel/diélectrique dominées par l'ionisation par impact, la limite quantique peut être atteinte, et une description

13. Cette remarque est valable pour la température des trous puisque leur masse effective est ici similaire à celle des électrons de conduction.

quantique du plasma peut s'avérer nécessaire.

Nous revenons maintenant sur la figure 6.12 pour commenter la courbe rouge représentant la densité maximale du plasma en fonction du taux d'ionisation par impact. Nous observons qu'elle tend à saturer à  $2 \times 10^{21} \text{ cm}^{-3}$  même lorsque le coefficient d'ionisation par impact devient fort. Nous expliquons cela à travers le phénomène de réflexion totale discutée dans la section 6.4.1 : lorsque le faisceau ne peut plus pénétrer dans le plasma, il ne peut plus ioniser les zones denses et va plutôt ioniser des régions plus éloignées de l'axe  $z$ . Nous avons illustré cette remarque avec la figure 6.13 où les profils de densité électronique en fin de simulation ont été tracés pour deux valeurs du taux d'ionisation par impact différentes. Nous observons bien une différence de densité entre ces deux simulations plus importante hors axe ( $|x| \approx 0,7 \mu\text{m}$ ) plutôt qu'au centre du plasma.

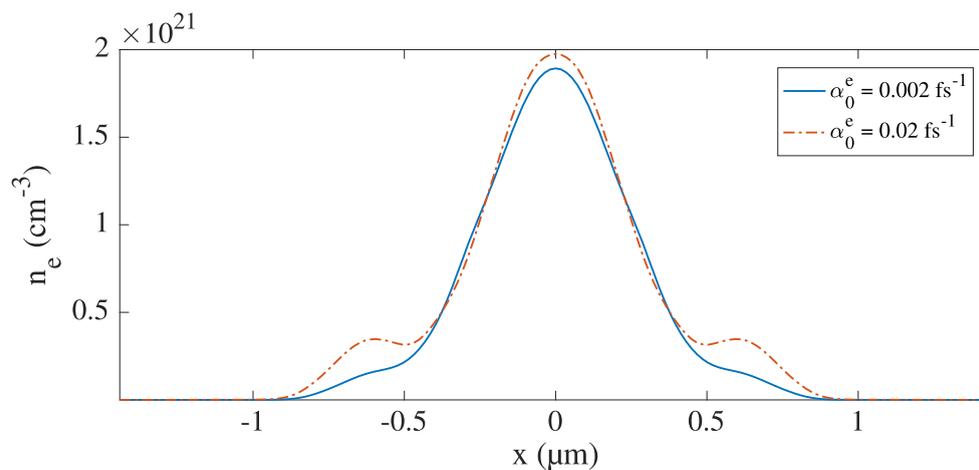


FIGURE 6.13 – Coupe ( $x, y=0, z=0$ ) de la densité électronique du plasma à  $t_{\text{final}} = 176,2 \text{ fs}$  pour des taux d'ionisation par impact  $\alpha_0^e = 0,002 \text{ fs}^{-1}$  (ligne continue bleue) et  $\alpha_0^e = 0,02 \text{ fs}^{-1}$  (tirets-pointillés rouges).

Pour conclure, le phénomène de réflexion totale freine la densification du plasma lors des interactions Bessel/diélectrique. Même lorsque les diélectriques présentent des taux d'ionisation par impact importants, il n'est pas évident d'atteindre des densités supérieures à  $2 \times 10^{21} \text{ cm}^{-3}$ . Ce niveau de densité représente une inversion de population de l'ordre 10%, et il serait intéressant de mener une étude complémentaire pour connaître l'état de la structure de bande avec un tel taux d'inversion. Ce questionnement est important même à nos échelles de temps puisque d'après la référence [202], des transitions de phase peuvent avoir lieu sur des échelles de temps de l'ordre de quelques centaines de femtoseconde.

### 6.4.6 Transport par gradient de pression

Les effets de transport ne sont pas seulement dûs aux effets pondéromoteurs des champs, mais ils peuvent être induits par des forts gradients de pression.

Dans la simulation numérique que nous avons réalisée, les fréquences de collision avec les phonons sont faibles pour mettre en évidence ce phénomène de transport :  $\nu_{\text{bie}} + \nu_{\text{ep}} = \nu_{\text{bih}} + \nu_{\text{hp}} = 0,01 \text{ fs}^{-1}$ . Par ailleurs, la fréquence de collision électron/trou

$\nu_{\text{eh}}$  est calculée avec la relation (3.3). L'intensité maximale du faisceau de Bessel est  $I_{\text{Max}} = 10^{14} \text{ W/cm}^2$ .

Le profil de densité généré à  $t = 24,2 \text{ fs}$  est affiché en bleu sur la figure 6.14. Nous avons également tracé en pointillés rouges le profil de densité en fin de simulation ( $t_{\text{final}} = 176,2 \text{ fs}$ ).

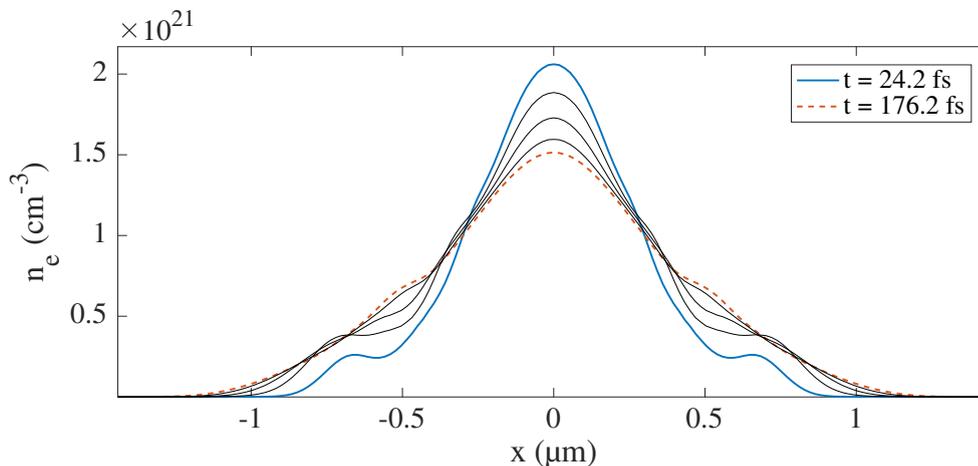


FIGURE 6.14 – Coupes ( $x, y=0, z=0$ ) de la densité électronique du plasma à  $t = 24,2 \text{ fs}$  (ligne continue bleue) et à  $t_{\text{final}} = 176,2 \text{ fs}$  (pointillés rouges). Les lignes noires décrivent le profil de densité à des instants intermédiaires.

Cette figure permet de mettre en évidence qu'une expansion du profil de densité dans le temps a eu lieu. C'est un phénomène de transport qui est à l'origine de l'expansion du plasma, et nous avons remarqué que les gradients de pression sont suffisamment importants ici pour induire du transport<sup>14</sup> (sur  $500 \text{ nm}$ , la température varie de plusieurs eVs et la densité de  $2 \times 10^{21} \text{ cm}^{-3}$ ). Dans les équations de conservation de la quantité de mouvement des fluides, le terme  $\nabla p$  tend à homogénéiser la pression au sein du plasma et communique ainsi du mouvement aux particules fluides. Les faibles masses effectives des électrons et des trous ont favorisé cette mobilité du plasma. Comme pour le transport pondéromoteur, il a pu être observé (non montré ici) que le transport par gradient de pression est réduit par les phénomènes de collision avec les phonons (lorsque les temps de collision avec les phonons sont de l'ordre du temps de transport, ce dernier est affaibli).

Le transport par gradient de pression peut donc avoir lieu dans les interactions Bessel/diélectrique. Ce transport peut opérer sur des centaines de nanomètres, et être ainsi non négligeable dans les plasmas nanométriques.

14. Entre les deux instants de la figure 6.14, il y a seulement une augmentation de 7% de la densité totale liée à l'ionisation : l'ionisation était donc quasiment terminée à  $t = 24,2 \text{ fs}$ . Le transport est donc le phénomène expliquant la modification de profil puisqu'il n'y a pas de phénomène de recombinaison dans la simulation.

### 6.4.7 Distribution de fluence

Le distribution de fluence est un diagnostic expérimental accessible et non ambigu. Nous allons donner ici des informations qui peuvent aider à caractériser un plasma à partir de la mesure de cette dernière.

Nous avons réalisé ici des simulations numériques avec un faisceau de Bessel d'intensité maximale  $I_{\text{Max}} = 2 \times 10^{14}$  W/cm<sup>2</sup>. Une première simulation sans plasma a fourni la distribution de fluence<sup>15</sup> intégrée sur les 510 fs de la simulation en  $(x, y, z = z_{\text{max}})$  (figure 6.15(a)). Au passage, nous calculons cette énergie totale de l'impulsion en faisant l'intégrale de la fluence dans le plan  $(x, y)$  : nous obtenons 0,44  $\mu\text{J}$ . C'est en accord avec une intégration analytique où nous avons obtenu 0,46  $\mu\text{J}$ . L'écart de 4% est du même ordre de grandeur que celui observé entre les champs numériques et analytiques dans la section 6.3.3.

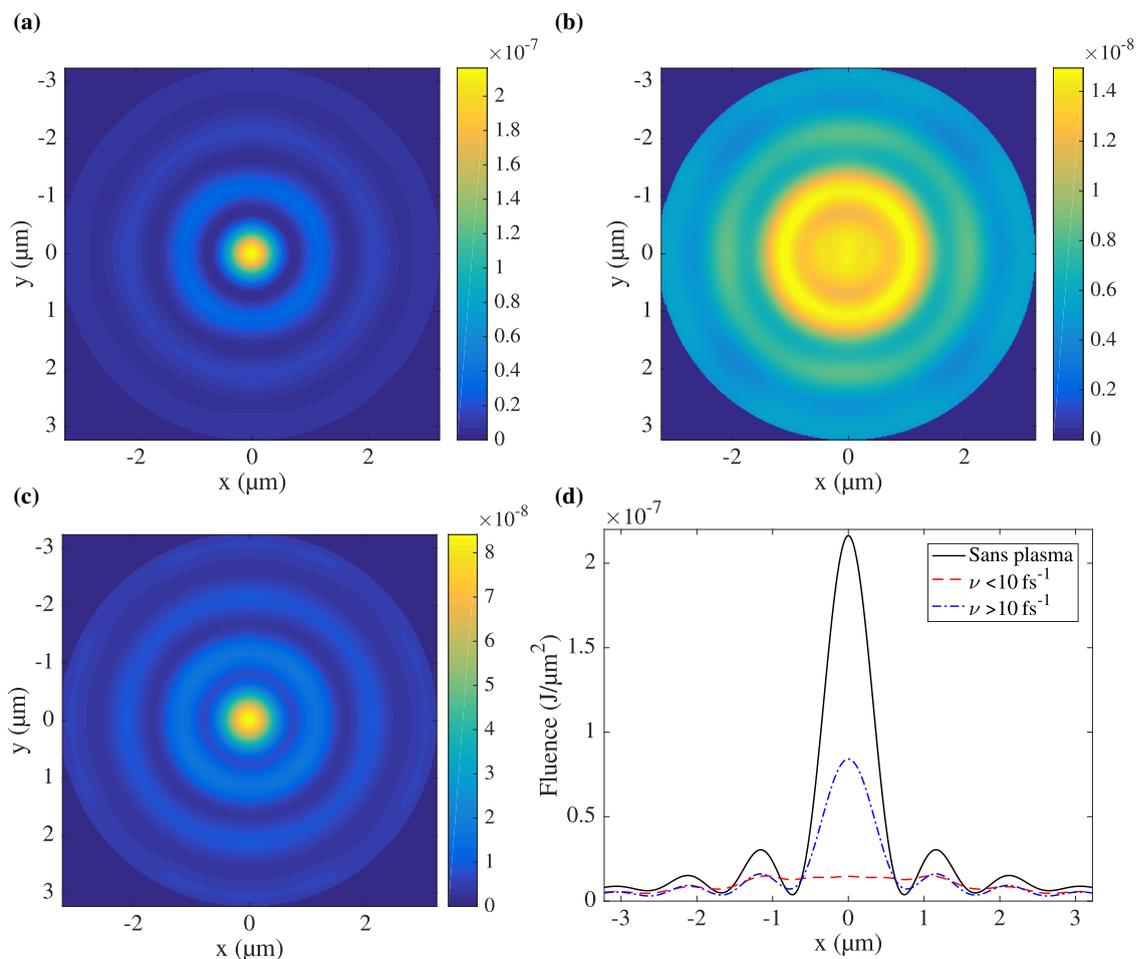


FIGURE 6.15 – Coupes  $(x, y, z = z_{\text{max}})$  de la fluence numérique du faisceau de Bessel (a) sans plasma (b) avec un plasma présentant des taux de collision d'environ  $1 \text{ fs}^{-1}$  (c) et un plasma présentant des taux de collision supérieurs à  $10 \text{ fs}^{-1}$ . (d) Coupes  $x$  des fluences des figures (a), (b) et (c).

Nous avons ensuite réalisé une simulation avec un plasma présentant des taux de

15. Sur cette figure, nous avons volontairement mis à zéro les points en dehors de l'injecteur à zéro de façon à calculer précisément l'énergie totale du faisceau qui interagira avec le futur plasma.

collision d'environ  $1 \text{ fs}^{-1}$ . Le profil de fluence est affichée sur la figure 6.15(b), et permet de calculer l'absorption de l'énergie du faisceau par le milieu : 43,7%. En comparaison à la figure 6.15(a), nous remarquons sur cette figure un brouillage des zéros due au phénomène de réflexion totale discutée dans la section 6.4.1, qui a tendance à décaler la position des zéros du faisceau de Bessel lorsque la densité du plasma varie dans le temps.

Nous avons fait une troisième simulation avec des taux de collision supérieurs à  $10 \text{ fs}^{-1}$ , et nous avons affiché le profil de fluence sur la figure 6.15(c). Nous avons également résumé sur la 6.15(d) les coupes  $x$  des différentes distributions de fluence des trois simulations. Nous remarquons que la position des zéros est peu brouillée dans cette troisième simulation avec des taux de collision supérieures à  $10 \text{ fs}^{-1}$ . Nous voyons que la fréquence de collision est suffisamment importante pour que la densité  $n_c$  de l'équation (6.29) et donc la densité  $n_t$  de l'équation (6.30) soient grandes. Typiquement, avec un taux de collision de l'ordre de  $2 \times 10 \text{ fs}^{-1}$ , la densité au point tournant est  $n_t = 4,5 \times 10^{21} \text{ cm}^{-3}$ , facilitant ainsi la propagation du faisceau de Bessel dans le plasma. Nous notons finalement que cette figure correspond à une absorption de 42,5% de l'énergie du faisceau incident<sup>16</sup>. Dans la deuxième simulation, l'absorption de l'énergie était principalement liée aux collisions élastiques alors que dans la troisième simulation elle est principalement liée à l'ionisation.

Pour conclure, les collisions avec les phonons et les collisions électron/trou ont tendance à rehausser la valeur de la densité du point tournant, facilitant ainsi la formation du lobe central du faisceau de Bessel. Les positions des zéros du profil de fluence sont alors proches de celles de la figure sans plasma. Cette remarque peut avoir intérêt pour estimer l'ordre de grandeur des taux de collision expérimentaux.

## 6.5 Comparaisons avec les résultats expérimentaux

Le travail présenté dans ce manuscrit a pour objectif de servir de support pour réaliser des comparaisons entre les comportements observés dans les simulations numériques et les données expérimentales.

### 6.5.1 Ellipticité des dommages

Des dommages expérimentaux dans du saphir à partir d'impulsions d'énergie  $1 \mu\text{J}$  mises en forme de faisceaux de Bessel  $J_0$  d'angle conique  $26^\circ$  (soit  $14,6^\circ$  dans le saphir) ont été réalisés au sein de notre équipe. La largeur totale à mi-hauteur en intensité des impulsions expérimentales est  $120 \text{ fs}$ . Les images au microscope à balayage électronique du profil  $(x, y)$  de la surface de sortie des nano-canaux obtenus dans l'échantillon de saphir sont affichées sur la figure 6.16 pour différents états de polarisation (la direction de polarisation est indiquée par des flèches).

---

16. Remarque : un taux de collision très fort n'est pas forcément synonyme d'absorption très forte. C'est lorsque le taux de collision est proche de la fréquence optique que l'absorption est la plus forte [51]

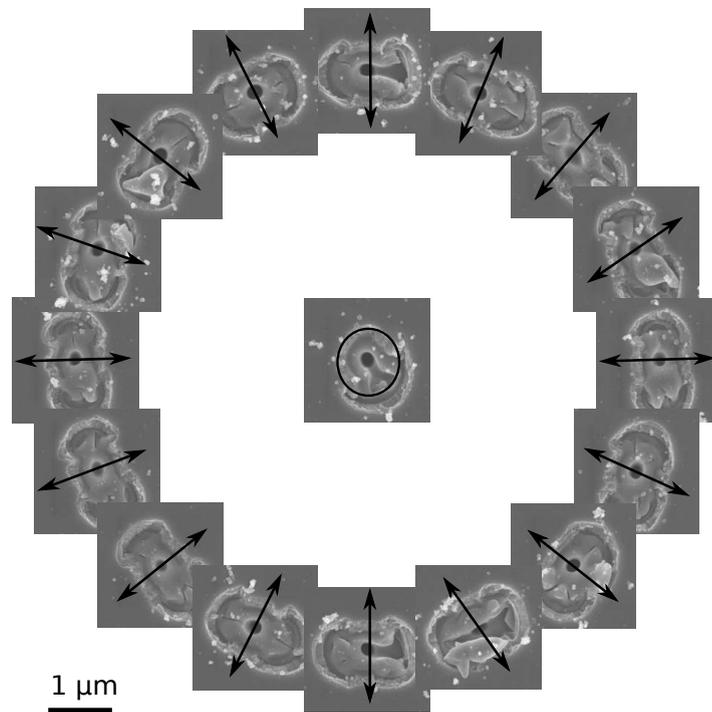


FIGURE 6.16 – Coupes  $(x, y)$  de la surface de sortie des nano-canaux obtenus dans l'échantillon de saphir à partir d'impulsions de  $1 \mu\text{J}$ .

Nous observons d'une part sur cette figure des dommages elliptiques lorsque la polarisation du faisceau de Bessel est linéaire, et d'autre part des dommages circulaires lorsqu'elle est circulaire (cas affiché au centre de la figure 6.16). De plus, cette ellipticité suit directement l'état de polarisation du faisceau, et le petit axe de l'ellipse est toujours dans la direction de polarisation. Le rapport entre le grand axe de l'ellipse ( $\approx 1,59 \mu\text{m}$ ) et le petit axe ( $\approx 1,08 \mu\text{m}$ ) est typiquement de 1,47.

Cette ellipticité observée va dans le même sens que les résultats numériques discutés dans la section 6.4.3 sur l'absorption résonnante. En effet, nous avons obtenu sur la figure 6.10 des plasmas numériques plus larges dans la direction orthogonale que dans la direction de polarisation. Le rapport entre les largeurs à mi-hauteur du profil de densité des coupes  $x$  et  $y$  numériques était typiquement  $0,62 \mu\text{m}/0,45 \mu\text{m}=1,37$ .

Nous avons cependant remarqué que la largeur du profil du plasma généré est très dépendant du taux d'ionisation par impact. Même si la comparaison quantitative ne conduit pas jusqu'à présent à des valeurs identiques entre les largeurs des nano-canaux et celle du plasma numérique<sup>17</sup>, nous avons tout de même un bon accord qualitatif (même forme elliptique du plasma et même orientation par rapport à la polarisation).

## 6.5.2 Distribution de fluence

Nous nous penchons maintenant sur les distributions de fluence expérimentales et numériques. Les distributions de fluence pour les mêmes impulsions que dans la section précédente ont été relevées expérimentalement. Les résultats pour deux régimes (linéaire et avec des impulsions de  $1 \mu\text{J}$ ) pour différents états de polarisation sont affichés sur la

17. Bien évidemment, entre le plasma et le dommage final, la valeur de l'ellipticité peut changer, mais nous nous attendons pas à une modification de l'orientation.

figure 6.17.

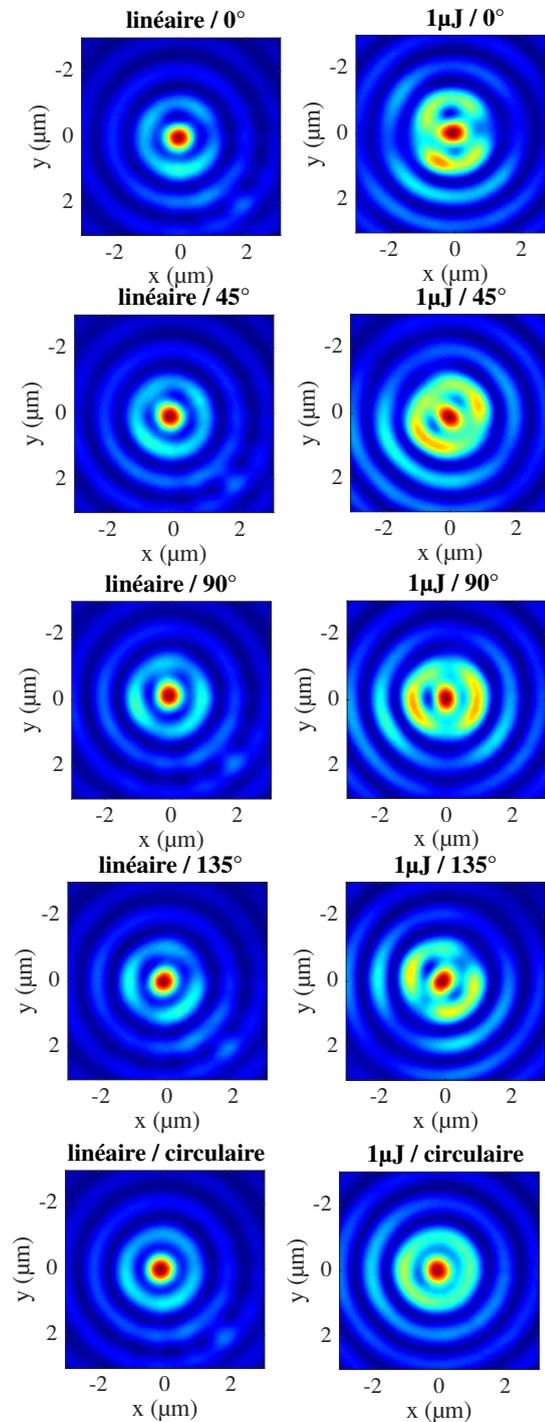


FIGURE 6.17 – Coupes  $(x, y)$  des distributions de fluence expérimentales dans le saphir en régime linéaire (colonne de gauche) et pour des impulsions  $J_0$  de 1  $\mu\text{J}$  (colonne de droite). L'angle de l'état de polarisation par rapport à l'axe  $y$  est donné en degré sur les images, excepté lorsque la polarisation est circulaire. Les distributions sont normalisée au maximum de fluence présente chacune des images.

Nous observons tout d'abord sur la figure 6.17 que la distribution expérimentale de fluence est indépendante de la polarisation en régime linéaire. Cependant, pour des

impulsions de 1  $\mu\text{J}$ , le profil de fluence montre une dépendance avec l'état de polarisation. En effet, nous observons souvent un creux de fluence dans la direction de polarisation sur le premier lobe latéral. Ce creux pourrait correspondre à une absorption supplémentaire dans la direction de polarisation, comme c'est typiquement le cas dans le phénomène d'absorption résonante. Nous soulignons que la fluence ne représente que l'énergie associée aux champs transverses, la présence d'un champ longitudinal (comme celui d'une onde plasma) n'est donc pas directement détectable dans le profil de fluence. Il se pourrait que ce creux de fluence dans la direction de polarisation soit due localement à la conversion d'énergie d'un mode transverse vers un mode longitudinal (absorption résonante).

Les fluences affichées sur la figure 6.17 ne montrent pas le même profil que celles de la figure 6.15. En effet, sur ces dernières, les profils de fluence étaient quasi-identiques dans les directions  $x$  et  $y$  alors que ce n'est pas le cas expérimentalement. Cependant, les distributions de fluence numériques de la figure 6.15 ont été obtenues avec des taux de collision relativement forts ( $\geq 1$  fs) ne permettant pas à la résonance de s'amplifier fortement et de générer des anisotropies importantes. Il peut être intéressant dans un futur proche de relever les profils de fluence dans des simulations plus marquées par l'effet d'absorption résonante.

Pour terminer, le bilan énergétique expérimental avec des impulsions  $J_0$  de 1  $\mu\text{J}$  a montré que l'absorption totale est de 48%, soit 10% de plus que les valeurs numériques de la section 6.4.7.

Nous pouvons noter que le code que nous avons développé est stable dans le régime de paramètres qui permet des comparaisons directes avec les expériences. Ces premiers tests montrent néanmoins qu'il est encore difficile d'obtenir un accord quantitatif avec les expériences. Un travail d'ajustement des paramètres sera nécessaire.

## 6.6 Synthèse du chapitre 6

Au coeur de ce dernier chapitre, nous avons présenté une méthode d'injection de faisceaux de Bessel. Cette méthode est basée sur une source douce appliquée dans une antenne à symétrie cylindrique. Elle a donné des bons résultats sur des faisceaux de Bessel d'ordre  $m = 0$ , d'ordres plus élevés, monochromatiques et impulsions.

Nous avons ensuite réalisé des simulations d'interaction Bessel/saphir pour donner des éléments de réponse à la problématique de départ. Les résultats ont montré l'importance de prendre la dynamique des trous en compte lorsqu'ils sont légers. En effet, leur réponse influe sur la position du point tournant, sur la position d'une éventuelle résonance, sur le transport pondéromoteur ou encore sur le transport par gradient de pression. Nous avons également vu l'importance de ne pas faire l'hypothèse de non-neutralité dans les plasmas nanométriques générés par faisceaux de Bessel, puisque la modélisation des ondes plasma permet de rendre compte l'absorption résonante qui peut induire d'éventuelles anisotropies du plasma (par effet pondéromoteur et/ou par ionisation). Nous avons finalement vu que la limite quantique est presque atteinte dans des régimes d'ionisation par impact, rendant ainsi une description quantique peut-être nécessaire.

Les données expérimentales obtenues par notre groupe dans du saphir ont montré une

anisotropie de la coupe transverse des dommages. Cette anisotropie suit directement la direction de polarisation du faisceau de Bessel, comme prédit par les simulations numériques. Cependant, l'accord entre les simulations numériques et les données expérimentales est incomplet jusqu'à présent, mais le modèle théorique doit faire l'objet de nombreux raffinements sur les taux de réaction pour être plus réaliste. En effet, ces derniers sont bien souvent restés sous une forme simple dans ce manuscrit (constants ou valables uniquement pour une structure de bande parabolique).

# CONCLUSION

*La science, c'est ce que le père enseigne à son fils. La technologie, c'est ce que le fils enseigne à son papa.*

---

- MICHEL SERRES

Nous avons développé dans ce manuscrit un modèle théorique de calcul de dépôt d'énergie laser dans les diélectriques. Il repose sur une approche bi-fluides électrons/trous et prend compte les phénomènes de transport, les ondes plasmas, la photoionisation, l'ionisation par impact, les collisions électron/trou et les collisions avec les phonons. Les étapes de dérivation et les hypothèses de ce modèle ont été données depuis une description exacte du plasma dans les chapitres 2 et 3.

Deux algorithmes numériques ont ensuite été développés pour résoudre le système d'équations du modèle théorique. Le premier est basé sur une méthode PSTD pour résoudre les équations de Maxwell, sur un schéma composite LWLFn pour intégrer la partie homogène des équations fluides et sur un schéma de Runge-Kutta 4 pour intégrer le terme source. Le second algorithme est relativement similaire, et suggère un remplacement de la méthode PSTD par la méthode PSATD, et quelques simplifications portant sur l'intégration des équations fluides. Par rapport au premier, le second algorithme est moins dispersif, n'est pas contraint par la condition de stabilité de la PSTD, et ne présente pas d'interpolations temporelles. Cependant, il n'est pas applicable pour un plasma localisé au sein d'un milieu de permittivité de fond non-uniforme. Nous avons ensuite validé ces deux algorithmes avec des tests portant sur la physique en jeu lors des interactions laser/plasma : modes de propagation dans un plasma tiède, absorption résonnante et force pondéromotrice.

Après avoir proposé une technique d'injection numérique de faisceaux de Bessel, nous avons réalisé des simulations numériques d'interaction Bessel/saphir. Ces dernières ont mis en évidence la forte influence des phénomènes de non-neutralité et de transport sur la distribution du plasma généré et sur l'absorption de l'énergie laser. Les résultats ont montré l'importance de prendre en compte la dynamique des trous lorsqu'ils sont légers, puisque leur réponse influe sur la position du point tournant, la position d'une éventuelle résonance, le transport pondéromoteur ou encore le transport par gradient de pression. Nous avons également vu l'importance de ne pas faire l'hypothèse de non-neutralité dans les plasmas nanométriques générés par faisceaux de Bessel puisque l'absorption résonance peut engendrer une source d'absorption d'énergie supplémentaire et des anisotropies du plasma par effet pondéromoteur et/ou par ionisation. Par ailleurs, les données expérimentales obtenues par notre groupe dans du saphir ont montré une anisotropie qui suit directement la direction de polarisation du faisceau de Bessel, comme prédit par les simulations numériques.

De nombreuses investigations supplémentaires peuvent être réalisées avec le code développé dans ce manuscrit. C'est par exemple le cas d'études prenant en compte

l'effet Auger et les STEs, mais également de simulations portant sur l'influence de la durée d'impulsion, de la longueur d'onde ou encore de l'intensité sur le dépôt d'énergie dans le diélectrique. De plus, la méthode d'injection numérique permet de modéliser correctement des faisceaux de Bessel d'ordres supérieurs, il est alors possible d'étudier l'interaction entre ces derniers et un matériau diélectrique. Des comparaisons avec des données expérimentales peuvent également être enrichissantes.

Les perspectives de raffinement du modèle théorique sont très nombreuses. Par exemple, les phénomènes de polarisation non-linéaire comme l'effet Kerr et Raman ont été négligés dans ce manuscrit, mais il est possible de les ajouter pour étendre le domaine de validité du modèle théorique et du code numérique. Autre exemple, la permittivité de fond a jusqu'ici été considérée uniforme et isotrope, cette grandeur peut faire l'objet d'un travail de généralisation à des milieux d'indice non-uniforme et anisotrope.

Nous abordons maintenant des perspectives demandant un travail plus conséquent. Le modèle théorique présenté dans ce manuscrit s'applique à des matériaux à structure de bande parabolique, et n'est donc pas valable dans bon nombre de matériaux diélectriques. Il peut être envisagé de modifier notre modèle de transport pour le rendre valable dans un matériau à structure de bande non-parabolique et anisotrope comme c'est le cas dans la référence [105].

Concernant à nouveau la structure de bande, elle a été supposée ici invariante dans le temps. Il serait cependant envisageable d'inclure une dynamique temporelle de la structure de bande (variations temporelles du gap et des masses effectives) en fonction du taux d'inversion de population entre la bande de valence et la bande de conduction.

Des descriptions fluides plus générales ont par ailleurs émergées ces dernières années, comme par exemple des systèmes d'équations fluides à dix moments [203] (le modèle dans ce manuscrit est à cinq moments : un pour la densité, trois pour le vecteur vitesse et un pour l'énergie). Ces descriptions présentent l'avantage de prendre en compte des effets non-maxwelliens, mais ont l'inconvénient d'être moins maniables et de demander plus de ressource numérique que leurs prédécesseurs. Elles restent cependant plus légères que les descriptions statistiques et peuvent ainsi constituer une bonne alternative pour passer à un niveau de description supérieur.

Les taux de réaction peuvent également faire l'objet de nombreux raffinements. En effet, ils sont restés bien souvent sous une forme simple dans ce manuscrit (constants ou valables uniquement pour une structure de bande parabolique). De plus, notre méthode d'intégration des réactions d'ionisation dans notre modèle suppose des hypothèses fortes énoncées dans le chapitre 3, comme par exemple une distribution maxwellienne des particules créées ou détruites. Un modèle basé sur d'autres formes de distribution, et permettant de prendre en compte l'excédent d'énergie après l'ionisation peut être développé.

Pour terminer, nous avons observé dans les simulations numériques du chapitre 6 que la limite quantique peut être atteinte lorsque l'ionisation par impact est effective. Un changement d'approche, basée une description purement quantique du plasma d'électrons-trous, pourrait être envisagée, mais le coût en temps de calcul pourrait s'avérer rédhibitoire.

# BIBLIOGRAPHIE

- [1] T. H. Maiman, “Stimulated optical radiation in ruby,” *Nature*, vol. 187, pp. 493–494, 1960.
- [2] F. J. McClung and R. W. Hellwarth, “Giant optical pulsations from ruby,” *Journal of Applied Physics*, vol. 33, no. 3, pp. 828–829, 1962.
- [3] C. V. Shank and E. P. Ippen, “Subpicosecond kilowatt pulses from a mode-locked cw dye laser,” *Applied Physics Letters*, vol. 24, no. 8, pp. 373–375, 1974.
- [4] D. Strickland and G. Mourou, “Compression of amplified chirped optical pulses,” *Opt. Commun.*, vol. 55, no. 6, pp. 447–449, 1985.
- [5] R. Gattass and E. Mazur, “Femtosecond laser micromachining in transparent materials,” *Nat. Photonics*, vol. 2, pp. 219–225, 2008.
- [6] D. Du, X. Liu, G. Korn, J. Squier, and G. Mourou, “Laser-induced breakdown by impact ionization in sio2 with pulse widths from 7 ns to 150 fs,” *Applied Physics Letters*, vol. 64, no. 23, pp. 3071–3073, 1994.
- [7] P. P. Pronko, S. K. Dutta, J. Squier, J. V. Rudd, D. Du, and G. Mourou, “Machining of sub-micron holes using a femtosecond laser at 800 nm,” *Optics Communications*, vol. 114, no. 1, pp. 106–110, 1995.
- [8] S. Guizard, A. Semerok, J. Gaudin, M. Hashida, P. Martin, and F. Quéré, “Femtosecond laser ablation of transparent dielectrics : measurement and modelisation of crater profiles,” *Applied Surface Science*, vol. 186, no. 1, pp. 364–368, 2002.
- [9] A. Vogel, J. Noack, G. Hüttman, and G. Paltauf, “Mechanisms of femtosecond laser nanosurgery of cells and tissues,” *Appl. Phys. B*, vol. 81, p. 10151047, 2005.
- [10] I. Ratkay-Traub, I. Ferincz, R. M. Kurtz, and R. R. Krueger, “First clinical results with the femtosecond neodymium-glass laser in refractive surgery,” *J. Refract. Surg.*, vol. 19, pp. 94–103, 2003.
- [11] M. Noorhafiza and L. Lin, “Underwater femtosecond laser micromachining of thin nitinol tubes for medical coronary stent manufacture,” *Applied Physics A*, vol. 107, pp. 849–861, 2012.
- [12] K. Sugioka and Y. Cheng, “Ultrafast lasers-liable tools for advanced materials processing,” *Light : Science & Applications*, vol. 3, p. 149, Apr. 2014.
- [13] E. N. Glezer, M. Milosavljevic, L. Huang, R. J. Finlay, T.-H. Her, J. P. Callan, and E. Mazur, “Three-dimensional optical storage inside transparent materials,” *Opt. Lett.*, vol. 21, no. 24, pp. 2023–2025, 1996.
- [14] M. Watanabe, H. Sun, S. Juodkazis, T. Takahashi, S. Matsuo, Y. Suzuki, J. Nishii, and H. Misawa, “Three-dimensional optical data storage in vitreous silica,” *Japanese Journal of Applied Physics*, vol. 37, no. 2, pp. L1527–L1530, 1998.
- [15] B. Dromey, S. Kar, M. Zepf, and P. Foster, “The plasma mirror—a subpicosecond optical switch for ultrahigh power lasers,” *Review of Scientific Instruments*, vol. 75, no. 3, pp. 645–649, 2004.

- [16] A. M. Streltsov and N. F. Borrelli, "Fabrication and analysis of a directional coupler written in glass by nanojoule femtosecond laser pulses," *Opt. Lett.*, vol. 26, no. 1, pp. 42–43, 2001.
- [17] K. Minoshima, A. M. Kowalevich, I. Hartl, E. P. Ippen, and J. G. Fujimoto, "Photonic device fabrication in glass by use of nonlinear materials processing with a femtosecond laser oscillator," *Opt. Lett.*, vol. 26, no. 19, pp. 1516–1518, 2001.
- [18] L. Sudrie, M. Franco, B. Prade, and A. Mysyrowicz, "Writing of permanent bi-refracting microlayers in bulk fused silica with femtosecond laser pulses," *Optics Communications*, vol. 171, no. 4, pp. 279–284, 1999.
- [19] K. Kintaka, J. Nishii, Y. Kawamoto, A. Sakamoto, and P. G. Kazansky, "Temperature sensitivity of ge-b-sio2 waveguide bragg gratings on a crystallized glass substrate," *Opt. Lett.*, vol. 27, no. 16, pp. 1394–1396, 2002.
- [20] K. M. Davis, K. Miura, N. Sugimoto, and K. Hirao, "Writing waveguides in glass with a femtosecond laser," *Opt. Lett.*, vol. 21, no. 21, pp. 1729–1731, 1996.
- [21] J. Liu, Z. Zhang, S. Chang, C. Flueraru, and C. P. Grover, "Directly writing of 1-to-n optical waveguide power splitters in fused silica glass using a femtosecond laser," *Optics Communications*, vol. 253, no. 4, pp. 315–319, 2005.
- [22] R. Osellame, S. Taccheo, G. Cerullo, M. Marangoni, D. Polli, R. Ramponi, P. Laporta, and S. De Silvestri, "Optical gain in er-yb doped waveguides fabricated by femtosecond laser pulses," *Electronics Letters*, vol. 38, no. 17, pp. 964–965, 2002.
- [23] M. K. Bhuyan, F. Courvoisier, P. A. Lacourt, M. Jacquot, R. Salut, L. Furfaro, and J. M. Dudley, "High aspect ratio nanochannel machining using single shot femtosecond bessel beams," *Appl. Phys. Lett.*, vol. 97, no. 8, pp. 081–102, 2010.
- [24] M. Deubel, G. Von Freymann, M. Wegener, S. Pereira, K. Busch, and C. M. Soukoulis, "Direct laser writing of three-dimensional photonic-crystal templates for telecommunications," *Nature Mater.*, vol. 3, pp. 444–447, 2004.
- [25] N. M. Bulgakova, V. P. Zhukov, and Y. P. Meshcheryakov, "Theoretical treatments of ultrashort pulse laser processing of transparent materials : toward understanding the volume nanograting formation and "quill" writing effect," *Appl. Phys. B*, vol. 113, no. 3, pp. 437–449, 2013.
- [26] R. Beuton, *Modélisation de la structuration d'un matériau diélectrique irradié par une impulsion laser femtoseconde*. Thèse de l'Université de Bordeaux, 2018.
- [27] L. Sudrie, A. Couairon, M. Franco, B. Lamouroux, B. Prade, S. Tzortzakis, and A. Mysyrowicz, "Femtosecond laser-induced damage and filamentary propagation in fused silica," *Phys. Rev. Lett.*, vol. 89, p. 186601, 2002.
- [28] D. M. Rayner, A. Naumov, and P. B. Corkum, "Ultrashort pulse non-linear optical absorption in transparent media," *Opt. Express*, vol. 13, no. 9, pp. 3208–3217, 2005.
- [29] C. Mézel, L. Hallo, A. Bourgeade, D. Hébert, V. T. Tikhonchuk, B. Chimier, B. Nkonga, G. Schurtz, and G. Travaillé, "Formation of nanocavities in dielectrics : A self-consistent modeling," *Physics of Plasmas*, vol. 15, no. 9, pp. 093–504, 2008.
- [30] B. Chimier, O. Utéza, N. Sanner, M. Sentis, T. Itina, P. Lassonde, F. Légaré, F. Vidal, and J. C. Kieffer, "Damage and ablation thresholds of fused-silica in femtosecond regime," *Phys. Rev. B*, vol. 84, pp. 094–104, 2011.
- [31] N. M. Bulgakova, V. P. Zhukov, Y. P. Meshcheryakov, L. Gemini, J. Brajer, D. Ros-tohar, and T. Mocek, "Pulsed laser modification of transparent dielectrics : what can be foreseen and predicted by numerical simulations?," *J. Opt. Soc. Am. B*, vol. 31, no. 11, pp. C8–C14, 2014.

- [32] A. Couairon, L. Sudrie, M. Franco, B. Prade, and A. Mysyrowicz, “Filamentation and damage in fused silica induced by tightly focused femtosecond laser pulses,” *Phys. Rev. B*, vol. 71, p. 125435, 2005.
- [33] C. Xie, R. Giust, J. Zhang, V. Jukna, R. Meyer, L. Furfaro, M. Jacquot, L. Froehly, J. M. Dudley, A. Couairon, and F. Courvoisier, “Enhanced absorption and plasmon excitation in the bulk of fused silica with femtosecond Bessel beams,” in *2016 Conference on Lasers and Electro-Optics (CLEO)*, pp. 1–2, 2016.
- [34] I. Ouadghiri-Idrissi, *Nonlinear instabilities and filamentation of Bessel beams*. PhD thesis, Université Bourgogne Franche-Comté, 2018.
- [35] J. Durnin, J. J. Miceli, and J. H. Eberly, “Diffraction-free beams,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 58, pp. 1499–1501, 1987.
- [36] L. Rapp, R. Meyer, L. Furfaro, C. Billet, R. Giust, and F. Courvoisier, “High speed cleaving of crystals with ultrafast Bessel beams,” *Opt. Express*, vol. 25, no. 8, pp. 9312–9317, 2017.
- [37] R. Meyer, L. Froehly, R. Giust, J. Del Hoyo, L. Furfaro, C. Billet, and F. Courvoisier, “Extremely high-aspect-ratio ultrafast Bessel beam generation and stealth dicing of multi-millimeter thick glass,” *Appl. Phys. Lett.*, vol. 114, p. 201105, 2019.
- [38] R. Meyer, M. Jacquot, R. Giust, J. Safioui, L. Rapp, L. Furfaro, P.-A. Lacourt, J. M. Dudley, and F. Courvoisier, “Single-shot ultrafast laser processing of high-aspect-ratio nanochannels using elliptical Bessel beams,” *Opt. Lett.*, vol. 42, no. 21, pp. 4307–4310, 2017.
- [39] R. Stoian, M. Bhuyan, G. Zhang, G. Cheng, R. Meyer, and F. Courvoisier, “Ultrafast Bessel beams : advanced tools for laser materials processing,” *Advanced Optical Technologies*, vol. 7, no. 3, pp. 165–174, 2018.
- [40] M. Mikutis, T. Kudrius, G. Vlekys, D. Paipulas, and S. Juodkazis, “High 90% efficiency Bragg gratings formed in fused silica by femtosecond Gauss-Bessel laser beams,” *Opt. Mater. Express*, vol. 3, pp. 1862–1871, Nov 2013.
- [41] G. Zhang, R. Stoian, W. Zhao, and G. Cheng, “Femtosecond laser Bessel beam welding of transparent to non-transparent materials with large focal-position tolerant zone,” *Opt. Express*, vol. 26, pp. 917–926, Jan 2018.
- [42] F. He, J. Yu, and Y. e. a. Tan, “Tailoring femtosecond 1.5- $\mu\text{m}$  Bessel beams for manufacturing high-aspect-ratio through-silicon vias,” *Sci Rep*, vol. 7, p. 40785, 2017.
- [43] A. Q. Wu, I. H. Chowdhury, and X. Xu, “Femtosecond laser absorption in fused silica : Numerical and experimental investigation,” *Phys. Rev. B*, vol. 72, pp. 085–128, 2005.
- [44] B. K. Ridley, *Quantum processes in semiconductors*. Oxford university press, 2013.
- [45] B. C. Stuart, M. D. Feit, A. M. Rubenchik, B. W. Shore, and M. D. . Perry, “Laser-induced damage in dielectrics with nanosecond to subpicosecond pulses,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 74, p. 2248–2251, 1995.
- [46] B. C. Stuart, M. D. Feit, S. Herman, A. M. Rubenchik, B. W. Shore, and M. D. Perry, “Nanosecond-to-femtosecond laser-induced breakdown in dielectrics,” *Phys. Rev. B*, vol. 53, pp. 1749–1761, 1996.
- [47] M. Sakakura and M. Terazima, “Initial temporal and spatial changes of the refractive index induced by focused femtosecond pulsed laser irradiation inside a glass,” *Phys. Rev. B*, vol. 71, pp. 024–113, 2005.

- [48] M. Sakakura, M. Terazima, Y. Shimotsuma, K. Miura, and K. Hirao, "Observation of pressure wave generated by focusing a femtosecond laser pulse inside a glass," *Opt. Express*, vol. 15, no. 9, pp. 5674–5686, 2007.
- [49] C. B. Schaffer, N. Nishimura, E. N. Glezer, A. M. Kim, and E. Mazur, "Dynamics of femtosecond laser-induced breakdown in water from femtoseconds to microseconds," *Opt. Express*, vol. 10, no. 3, pp. 196–203, 2002.
- [50] S. Mao, F. Quéré, S. Guizard, X. Mao, R. Russo, G. Petite, and P. Martin, "Dynamics of femtosecond laser interactions with dielectrics," *Appl. Phys. A*, vol. 79, no. 7, pp. 1695–1709, 2004.
- [51] F. Quéré, S. Guizard, P. Martin, G. Petite, O. Gobert, P. Meynadier, and M. Perdrux, "Ultrafast carrier dynamics in laser-excited materials : subpicosecond optical studies," *Applied Physics B*, vol. 68, pp. 459–463, 1999.
- [52] P. Polesana, M. Franco, A. Couairon, D. Faccio, and P. Di Trapani, "Filamentation in kerr media from pulsed bessel beams," *Phys. Rev. A*, vol. 77, p. 043814, 2008.
- [53] S. Klewitz, S. Sogomonian, M. Woerner, and S. Herminghaus, "Stimulated raman scattering of femtosecond bessel pulses," *Optics Communications*, vol. 154, no. 4, pp. 186 – 190, 1998.
- [54] R. L. Carman, F. Shimizu, C. S. Wang, and N. Bloembergen, "Theory of stokes pulse shapes in transient stimulated raman scattering," *Phys. Rev. A*, vol. 2, pp. 60–72, 1970.
- [55] J. C. Maxwell, "Independent phase and amplitude control of a laser beam by use of a single-phase-only spatial light modulator," *Philosophical Transactions of the Royal Society of London*, vol. 155, p. 459–512, 1865.
- [56] J. D. Jackson, *Classical electrodynamics*. John Wiley & Sons, 1998. Third edition.
- [57] J. A. Bittencourt, *Fundamentals of Plasma Physics*. Pergamon press, 1 ed., 1986.
- [58] J. R. Peñano, P. Sprangle, B. Hafizi, W. Manheimer, and A. Zigler, "Transmission of intense femtosecond laser pulses into dielectrics," *Phys. Rev. E*, vol. 72, p. 036412, 2005.
- [59] K. I. Popov, C. McElcheran, K. Briggs, S. Mack, and L. Ramunno, "Morphology of femtosecond laser modification of bulk dielectrics," *Opt. Express*, vol. 19, no. 1, pp. 271–282, 2011.
- [60] A. Couairon, E. Brambilla, T. Corti, D. Majus, J. Ramírez-Góngora, and M. Kolesik, "Practitioner's guide to laser pulse propagation models and simulation," *Eur. Phys. J. Spec. Top.*, vol. 199, pp. 5–76, 2011.
- [61] L. Bergé and A. Couairon, "Nonlinear propagation of self-guided ultra-short pulses in ionized gases," *Physics of Plasmas*, vol. 7, no. 1, pp. 210–230, 2000.
- [62] A. Couairon, "Filamentation length of powerful laser pulses," *Appl. Phys. B*, vol. 76, p. 789–792, 2003.
- [63] A. Couairon and A. Mysyrowicz, "Femtosecond filamentation in transparent media," *Phys. Rep.*, vol. 441, p. 47189, 2007.
- [64] I. M. Burakov, N. M. Bulgakova, R. Stoian, A. Mermillod-Blondin, E. Audouard, A. Rosenfeld, A. Husakou, and I. V. Hertel, "Spatial distribution of refractive index variations induced in bulk fused silica by single ultrashort and short laser pulses," *Journal of Applied Physics*, vol. 101, no. 4, p. 043506, 2007.

- [65] A. Mermillod-Blondin, I. M. Burakov, Y. P. Meshcheryakov, N. M. Bulgakova, E. Audouard, A. Rosenfeld, A. Husakou, I. V. Hertel, and R. Stoian, “Flipping the sign of refractive index changes in ultrafast and temporally shaped laser-irradiated borosilicate crown optical glass at high repetition rates,” *Phys. Rev. B*, vol. 77, p. 104205, 2008.
- [66] J. R. Gulley, S. W. Winkler, W. M. Dennis, C. M. Liebig, and R. Stoian, “Interaction of ultrashort-laser pulses with induced undercritical plasmas in fused silica,” *Phys. Rev. A*, vol. 85, p. 013808, 2012.
- [67] Y. Meshcheryakov and N. Bulgakova, “Thermoelastic modeling of microbump and nanojet formation on nanosize gold films under femtosecond laser irradiation,” *Appl. Phys. A*, vol. 82, p. 363, 2005.
- [68] V. Y. Fedorov, M. Chanal, D. Grojo, and S. Tzortzakis, “Accessing extreme spatio-temporal localization of high-power laser radiation through transformation optics and scalar wave equations,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 117, p. 043902, 2016.
- [69] D. E. Shipilo, I. A. Nikolaeva, V. Y. Fedorov, S. Tzortzakis, A. Couairon, N. A. Panoov, and O. G. Kosareva, “Tight focusing of electromagnetic fields by large-aperture mirrors,” *Phys. Rev. E*, vol. 100, p. 033316, 2019.
- [70] V. E. Gruzdev, “Photoionization rate in wide band-gap crystals,” *Phys. Rev. B*, vol. 75, p. 205106, 2007.
- [71] L. V. Keldysh, “Ionization in the field of a strong electromagnetic wave,” *J. Exptl. Theoret. Phys.*, vol. 20, p. 1307, 1965.
- [72] B. Rethfeld, “Unified model for the free-electron avalanche in laser-irradiated dielectrics,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 92, p. 187401, 2004.
- [73] A. Kaiser, B. Rethfeld, M. Vicanek, and G. Simon, “Microscopic processes in dielectrics under irradiation by subpicosecond laser pulses,” *Phys. Rev. B*, vol. 61, p. 437450, 2000.
- [74] F. Courvoisier, J. Zhang, M. K. Bhuyan, M. Jacquot, and J. M. Dudley, “Applications of femtosecond Bessel beams to laser ablation,” *Applied Physics A : Materials Science & Processing*, vol. 112, no. 1, pp. 29–34, 2013.
- [75] D. Grojo, A. Mouskeftaras, P. Delaporte, and S. Lei, “Limitations to laser machining of silicon using femtosecond micro-bessel beams in the infrared,” *Journal of Applied Physics*, vol. 117, no. 15, p. 153105, 2015.
- [76] F. Quéré, *Etude des mécanismes d’excitation électronique associés au claquage des diélectriques induit par un champ laser intense*. Thèse de l’Université Paris 6, 2000.
- [77] T. V. Perevalov, V. A. Gritsenko, and V. V. Kaichev, “Electronic structure of aluminum oxide : ab initio simulations of  $\alpha$  and  $\gamma$  phases and comparison with experiment for amorphous films,” *The European Physical Journal - Applied Physics*, vol. 52, no. 3, p. 30501, 2010.
- [78] Y.-N. Xu and W. Y. Ching, “Self-consistent band structures, charge distributions, and optical-absorption spectra in mgo,  $\alpha$ -al<sub>2</sub>o<sub>3</sub>, and mgal<sub>2</sub>o<sub>4</sub>,” *Phys. Rev. B*, vol. 43, pp. 4461–4472, 1991.
- [79] K. Blotekjaer, “Transport equations for electrons in two-valley semiconductors,” *IEEE Transactions on Electron Devices*, vol. 17, no. 1, pp. 38–47, 1970.
- [80] P. Gibbon, *Short Pulse Laser Interactions with Matter : An Introduction*. Imperial College Press, 2005.

- [81] J.-M. Rax, *Physique des plasmas : Cours et applications*. Dunod, 2005.
- [82] A. V. Arefiev, V. N. Khudik, A. P. L. Robinson, G. Shvets, L. Willingale, and M. Schollmeier, “Beyond the ponderomotive limit : Direct laser acceleration of relativistic electrons in sub-critical plasmas,” *Phys. of Plasmas*, vol. 23, no. 5, p. 056704, 2016.
- [83] J. P. Perez, *Optique : Fondements et applications*. Dunod, 7 ed., 2004.
- [84] J. A. Bittencourt, *Fundamentals of Plasma Physics*. Springer, 3 ed., 2013.
- [85] L. De Broglie, “Waves and quanta,” *Nature*, vol. 112, no. 2815, p. 540, 1923.
- [86] C. G. Douglas, *Physique générale : Ondes, optique et physique moderne*. De Boeck, 1980.
- [87] C. Kittel and H. Kroemer, *Optique : Fondements et applications*. W. H. Freeman, 2 ed., 1980.
- [88] I. Mirza, N. M. Bulgakova, J. Tomáščík, V. Michálek, O. Haderka, L. Fekete, and T. Mocek, “Ultrashort pulse laser ablation of dielectrics : Thresholds, mechanisms, role of breakdown,” *Sci. Rep.*, vol. 6, no. 39133, 2016.
- [89] F. Chen, *Introduction to Plasma Physics and Controlled Fusion*. Springer, 3 ed., 2016.
- [90] D. G. Swanson, *Plasma Kinetic Theory*. CRC Press, 2008.
- [91] M. Moisan and J. Pelletier, *Plasmas collisionnels : Physique des décharges RF et micro-onde*. EDP Sciences, 2014.
- [92] D. R. Nicholson, *Introduction to plasma theory*. Wiley, 1983.
- [93] A. Bers and J. Delcroix, *Physique des plasmas. 2*. EDP Sciences, 2012.
- [94] I. Klimontovich, *The Statistical Theory of Non-equilibrium Processes in Plasma*. M.I.T. Press, 1967.
- [95] B. M. Smirnov, *Theory of Gas Discharge Plasma*. Springer, 2014.
- [96] P. L. Bhatnagar, E. P. Gross, and M. Krook, “A model for collision processes in gases. I. small amplitude processes in charged and neutral one-component systems,” *Phys. Rev.*, vol. 94, pp. 511–525, 1954.
- [97] N. N. Bogoljubov, *Problems of a Dynamical Theory in Statistical*. Geophysics Research Directorate, 1960.
- [98] H. S. Green, *A General Kinetic Theory of Liquids*. University of Edinburgh, 1947.
- [99] J. G. Kirkwood, “The Statistical Mechanical Theory of Transport Processes I. General Theory,” *J. Chem. Phys.*, vol. 14, no. 3, pp. 180–201, 1946.
- [100] J. Yvon, *La théorie statistique des fluides et l'équation d'état*. Hermann & cie, 1935.
- [101] A. A. Vlasov, “On the kinetic Theory of an Assembly of Particules with Collective Interaction,” *J. Phys. USSR*, 1945.
- [102] S. Braginskii, “Transport processes in a plasma,” *Rev. Plasma Phys*, vol. 1, pp. 205–311, 1965.
- [103] P. Mulser, F. Cornolti, and D. Bauer, “Modeling field ionization in an energy conserving form and resulting nonstandard fluid dynamics,” *Phys. Plasmas*, vol. 5, p. 569, 1998.
- [104] A. Hakim, J. Loverich, and U. Shumlak, “A high resolution wave propagation scheme for ideal Two-Fluid plasma equations,” *J. Comput. Phys.*, vol. 219, pp. 418–442, 2006.

- [105] D. Woolard, H. Tian, R. Trew, M. Littlejohn, and K. Kim, “Hydrodynamic electron-transport model : Nonparabolic corrections to the streaming terms,” *Phys Rev B Condens Matter.*, vol. 44, p. 11119-11132, 1991.
- [106] A. Leone, A. Gnudi, and G. Baccarani, “Hydrodynamic simulation of semiconductor devices operating at low temperature,” *IEEE Transactions on Computer-Aided Design of Integrated Circuits and Systems*, vol. 13, no. 11, pp. 1400–1408, 1994.
- [107] M. Povolotskyi, L. Prokopeva, and A. Kildishev, “Coupling electron transport with maxwell equations for modelling optically tunable photonic elements,” in *2018 International Applied Computational Electromagnetics Society Symposium (ACES)*, pp. 1–2, 2018.
- [108] D. Nicholas, *The development of fluid codes for the laser compression of plasma*, vol. 14. RL-82-083, 1982.
- [109] A. Ramer, O. Osmani, and B. Rethfeld, “Laser damage in silicon : Energy absorption, relaxation, and transport,” *Journal of Applied Physics*, vol. 116, no. 5, pp. 053–508, 2014.
- [110] E. T. Meier and U. Shumlak, “A general nonlinear fluid model for reacting plasma-neutral mixtures,” *Phys. Plasmas*, vol. 19, p. 072508, 2012.
- [111] B. E. Sernelius, “Optical free-carrier absorption of an electron-hole plasma in silicon,” *Phys. Rev. B*, vol. 39, pp. 10825–10830, 1989.
- [112] D. Hulin, M. Combescot, J. Bok, A. Migus, J. Y. Vinet, and A. Antonetti, “Energy transfer during silicon irradiation by femtosecond laser pulse,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 52, pp. 1998–2001, 1984.
- [113] V. E. Golant, A. P. Zhilinsky, and I. E. Sakharov, *Fundamentals of Plasma Physics*. John Wiley & Sons, 1980.
- [114] J. L. Raimbault and R. Smets, *Modelisation fluides des plasmas*. Cours de l’ecole polytechnique, 2013-2014.
- [115] P. Daguzan, *Dynamique ultra-rapide des porteurs photoexcites dans les solides a grande bande interdite*. These de l’Universite Paris 6, 1996.
- [116] S. K. Sundaram and E. Mazur, “Inducing and probing non-thermal transitions in semiconductors using femtosecond laser pulses,” *Nature Materials*, vol. 1, pp. 217–224, 2002.
- [117] N. Bulgakova, R. Stoian, A. Rosenfeld, G. Petite, I. Hertel, W. Marine, and E. Campbell, “A general continuum approach to describe fast electronic transport in pulsed laser irradiated materials : The problem of coulomb explosion,” *Applied Physics A*, vol. 81, pp. 345–356, 2005.
- [118] L. V. Keldysh, “Kinetic theory of impact ionization in semiconductors,” *J. Exptl. Theoret. Phys.*, vol. 37, p. 713727, 1960.
- [119] D. Arnold, E. Cartier, and D. J. DiMaria, “Acoustic-phonon runaway and impact ionization by hot electrons in silicon dioxide,” *Phys. Rev. B*, vol. 45, pp. 1477–1480, 1992.
- [120] M. Garcia-Lechuga, L. Haahr-Lillevang, J. Siegel, P. Balling, S. Guizard, and J. Solis, “Simultaneous time-space resolved reflectivity and interferometric measurements of dielectrics excited with femtosecond laser pulses,” *Phys. Rev. B*, vol. 95, p. 214114, 2017.

- [121] T. Kunikiyo, K. Ishikawa, Y. Inoue, Y. Kamakura, K. Taniguchi, and N. Kotani, “Model of hole-initiated impact-ionization rate in  $\alpha$ -quartz for a full band monte carlo simulation,” *Journal of Applied Physics*, vol. 94, no. 2, pp. 1096–1104, 2003.
- [122] N. Shcheblanov, *Numerical study of femtosecond laser interactions with dielectric materials : application to the definition of damage threshold of optical components*. Thèse de l’Université Jean Monnet à Saint-Étienne, 2013.
- [123] N. M. Bulgakova, R. Stoian, A. Rosenfeld, I. V. Hertel, and E. E. B. Campbell, “Electronic transport and consequences for material removal in ultrafast pulsed laser ablation of materials,” *Phys. Rev. B*, vol. 69, p. 054102, 2004.
- [124] Y. Toyozawa, *Electrons, Holes and Excitons in Deformable Lattice*. Springer, Berlin, 1980.
- [125] R. F. Haglund and I. Itoh, *Laser ablation. Principles and applications*. Springer, Berlin Heidelberg New York, 1994.
- [126] G. Petite, P. Daguzan, S. Guizard, and P. Martin, “Ultrafast optical measurements of defect creation in laser irradiated sio<sub>2</sub>,” *Journal de Physique III*, vol. 6, no. 12, pp. 1647–1676, 1996.
- [127] R. Abgrall and H. Kumar, “Robust Finite Volume Schemes for Two-Fluid Plasma Equations,” *Journal of Scientific Computing*, vol. 60, no. 3, pp. 584–611, 2014.
- [128] R. J. Mason and C. W. Cranfill, “Hybrid Two-Dimensional Electron Transport in Self-Consistent Electromagnetic Fields,” *IEEE Transactions on Plasma Science*, vol. 14, no. 1, pp. 45–52, 1986.
- [129] R. J. Mason, “An electromagnetic field algorithm for 2d implicit plasma simulation,” *Journal of Computational Physics*, vol. 71, no. 2, pp. 429–473, 1987.
- [130] J. Loverich, A. Hakim, and U. Shumlak, “A Discontinuous Galerkin Method for Ideal Two-Fluid Plasma Equations,” *Communications in Computational Physics*, vol. 9, no. 2, pp. 240–268, 2011.
- [131] K. S. Yee, “Numerical solution of initial boundary value problems involving Maxwell’s equations in isotropic media,” *IEEE Trans. Antennas and Propagation*, pp. 302–307, 1966.
- [132] U. Shumlak and J. Loverich, “Approximate Riemann solver for the two-fluid plasma model,” *J. Comput. Phys.*, vol. 187, pp. 620–638, 2003.
- [133] P. L. Roe, “Approximate Riemann solvers, parameter vectors, and difference schemes,” *J. Comput. Phys.*, vol. 43, pp. 357–372, 1981.
- [134] J. Loverich and U. Shumlak, “A discontinuous Galerkin method for the full two-fluid plasma model,” *Comput. Phys. Commun.*, vol. 169, pp. 251–255, 2005.
- [135] B. Srinivasan and U. Shumlak, “Analytical and computational study of the ideal full two-fluid plasma model and asymptotic approximations for Hall-magnetohydrodynamics,” *Phys. Plasmas*, vol. 18, pp. 092–113, 2011.
- [136] E. M. Sousa and U. Shumlak, “A blended continuous-discontinuous finite element method for solving the multi-fluid plasma model,” *J. Comput. Phys.*, vol. 326, pp. 56–75, 2016.
- [137] M. Rieke, T. Tros, and R. Grauer, “Coupled Vlasov and two-fluid codes on GPUs,” *Journal of Computational Physics*, vol. 283, pp. 436–452, 2015.
- [138] M. Rieke, *Coupling of kinetic and fluid descriptions of collisionless plasma on GPU-Introduction to Plasma Physics and Controlled Fusion*. Universität Bochum, 2013.

- [139] S. Baboolal and R. Bharuthram, “Two-scale Numerical Solution of the Electromagnetic Two-fluid plasma-Maxwell Equations : Shock and Soliton Simulation,” *Math. Comput. Simul.*, vol. 76, pp. 3–7, 2007.
- [140] H. Kumar and S. Mishra, “Entropy Stable Numerical Schemes for Two-Fluid Plasma Equations,” *J. Sci. Comput.*, vol. 52, pp. 401–425, 2012.
- [141] A. Alvarez Laguna, N. Ozak, A. Lani, H. Deconinck, and S. Poedts, “Fully-implicit finite volume method for the ideal two-fluid plasma model,” *Comput. Phys. Commun.*, vol. 231, pp. 31–44, 2018.
- [142] V. V. Rusanov, “Calculation of interaction of non-steady shock waves with obstacles,” *J. Comput. Math. Phys.*, pp. 267–279, 1961.
- [143] Z. Li and D. Livescu, “High-order two-fluid plasma solver for direct numerical simulations of plasma flows with full transport phenomena,” *Physics of Plasmas*, vol. 26, no. 1, p. 012109, 2019.
- [144] M. Brio and C. C. Wu, “An upwind differencing scheme for the equations of ideal magnetohydrodynamics,” *J. Comput. Phys.*, vol. 75, pp. 400–422, 1988.
- [145] G. Strang, “On the Construction and Comparison of Difference Schemes,” *SIAM J. Numer. Anal.*, vol. 5, pp. 506–517, 1968.
- [146] R. Liska and B. Wendroff, *Composite Centered Schemes for Multidimensional Conservation Laws*. Birkhauser, 1999.
- [147] J. C. Butcher, *Numerical Methods for Ordinary Differential Equations*. John Wiley & Sons, 2004.
- [148] E. F. Toro, *Riemann Solvers and Numerical Methods for Fluid Dynamics : A Practical Introduction*. Springer, 2013.
- [149] R. J. Leveque, *Finite Volume Methods for Hyperbolic Problems*. Cambridge University Press, 2002.
- [150] V. A. Titarev, E. I. Romenski, and E. F. Toro, “Development and application of generalized MUSTA schemes,” 2006.
- [151] P. D. Lax, “Weak solutions of nonlinear hyperbolic equations and their numerical computation,” *Communications on Pure and Applied Mathematics*, vol. 7, no. 1, pp. 159–193, 1954.
- [152] P. Lax and B. Wendroff, “Systems of conservation laws,” *Communications on Pure and Applied Mathematics*, vol. 13, no. 2, pp. 217–237, 1960.
- [153] R. Liska and B. Wendroff, “Comparison of Several Difference Schemes for the Euler Equations in 1d and 2d,” in *Hyperbolic Problems : Theory, Numerics, Applications*, pp. 831–840, Springer, Berlin, Heidelberg, 2003.
- [154] J. VonNeumann and R. D. Richtmyer, “A Method for the Numerical Calculation of Hydrodynamic Shocks,” *Journal of Applied Physics*, vol. 21, pp. 232–237, Mar. 1950.
- [155] E. Caramana, M. J. Shashkov, and P. Whalen, “Formulations of Artificial Viscosity for Multi-dimensional Shock Wave Computations,” *Journal of Computational Physics*, vol. 144, no. 1, pp. 70–97, 1998.
- [156] R. Liska and B. Wendroff, “Composite Schemes for Conservation Laws,” *SIAM Journal on Numerical Analysis*, vol. 35, no. 6, pp. 2250–2271, 1998.
- [157] D. L. Book, J. P. Boris, and K. Hain, “Flux-corrected transport II : Generalizations of the method,” *Journal of Computational Physics*, vol. 18, no. 3, pp. 248–283, 1975.

- [158] A. Harten and G. Zwas, “Self-adjusting hybrid schemes for shock computations,” *Journal of Computational Physics*, vol. 9, no. 3, pp. 568–583, 1972.
- [159] M. Kuchařík, R. Liska, S. Steinberg, and B. Wendroff, “Optimally-stable second-order accurate difference schemes for non-linear conservation laws in 3d,” *Applied Numerical Mathematics*, vol. 56, no. 5, pp. 589–607, 2006.
- [160] A. R. Appadu, M. Z. Dauhoo, and S. D. D. V. Rughooputh, “Control of numerical effects of dispersion and dissipation in numerical schemes for efficient shock-capturing through an optimal Courant number,” *Computers & Fluids*, vol. 37, no. 6, pp. 767–783, 2008.
- [161] T. R. Hagen, M. O. Henriksen, J. M. Hjelmervik, and K.-A. Lie, “How to Solve Systems of Conservation Laws Numerically Using the Graphics Processor as a High-Performance Computational Engine,” in *Geometric Modelling, Numerical Simulation, and Optimization*, pp. 211–264, Springer, Berlin, Heidelberg, 2007.
- [162] G. A. Sod, “A survey of several finite difference methods for systems of nonlinear hyperbolic conservation laws,” *J. Comput. Phys.*, vol. 27, pp. 1–31, 1978.
- [163] F. J. Vesely, *Computational Physics : An Introduction*. Springer US, 2 ed., 2001.
- [164] D. E. Potter, *Computational Physics*. John Wiley & Sons, 1988.
- [165] R. J. LeVeque, *Numerical Methods for Conservation Laws*. Springer Science & Business Media, 1992.
- [166] L. F. Shampine, “Two-step Lax–Friedrichs method,” *Applied Mathematics Letters*, vol. 18, no. 10, pp. 1134–1136, 2005.
- [167] A. R. Appadu and M. Z. Dauhoo, “A note on the two versions of Lax-Friedrichs scheme,”
- [168] D. Richtmyer, “A Survey of Difference Methods for Non-Steady Fluid Dynamics,” 1962.
- [169] Q. H. Liu, “The PSTD algorithm : A time-domain method requiring only two cells per wavelength,” *Microw. Opt. Technol. Lett.*, vol. 15, pp. 158–165, 1997.
- [170] H. Vincenti and J.-L. Vay, “Ultrahigh-order Maxwell solver with extreme scalability for electromagnetic pic simulations of plasmas,” *Comput. Phys. Commun.*, vol. 228, pp. 22–29, 2018.
- [171] J. Shang and R. M. Fithen, “A Comparative Study of Characteristic-Based Algorithms for the Maxwell Equations,” *J. Comput. Phys.*, vol. 125, pp. 378–394, 1996.
- [172] C. D. Munz, P. Ommes, and R. Schneider, “A three-dimensional finite-volume solver for the Maxwell equations with divergence cleaning on unstructured meshes,” *Comput. Phys. Commun.*, vol. 130, pp. 83–117, 2000.
- [173] A. Monorchio, A. R. Bretones, R. Mittra, G. Manara, and R. G. Martin, “A hybrid time-domain technique that combines the finite element, finite difference and method of moment techniques to solve complex electromagnetic problems,” *IEEE Trans. Antennas Propag.*, vol. 52, pp. 2666–2674, 2004.
- [174] J. L. Vay, I. Haber, and B. B. Godfrey, “A domain decomposition method for pseudo-spectral electromagnetic simulations of plasmas,” *J. Comput. Phys.*, vol. 243, pp. 260–268, 2013.
- [175] O. Shapoval, J. L. Vay, and H. Vincenti, “Two-step perfectly matched layer for arbitrary-order pseudo-spectral analytical time-domain methods,” *Comput. Phys. Commun.*, vol. 235, pp. 102–110, 2019.

- [176] J.-P. Berenger, “A perfectly matched layer for the absorption of electromagnetic waves,” *J. Comput. Phys.*, vol. 114, pp. 185–200, 1994.
- [177] C. Kittel, *Introduction to Solid State Physics*. Wiley, 2004.
- [178] W. Kruer, *The Physics Of Laser Plasma Interactions*. Avalon Publishing, 2003.
- [179] J. M. Dawson, “Nonlinear Electron Oscillations in a Cold Plasma,” *Physical Review*, vol. 113, no. 2, pp. 383–387, 1959.
- [180] P. Mulser and D. Bauer, *High Power Laser-Matter Interaction*. Springer Science & Business Media, 2010.
- [181] D. Kröner and M. Oehlberger, “A Posteriori Error Estimates for Upwind Finite Volume Schemes for Nonlinear Conservation Laws in Multi Dimensions,” *Mathematics of Computation*, vol. 69, no. 229, pp. 25–39, 2000.
- [182] W. F. Noh, “Errors for calculations of strong shocks using an artificial viscosity and an artificial heat flux,” *Journal of Computational Physics*, vol. 72, no. 1, pp. 78–120, 1987.
- [183] M. Shashkov and B. Wendroff, “A Composite Scheme for Gas Dynamics in Lagrangian Coordinates,” *Journal of Computational Physics*, vol. 150, pp. 502–517, Apr. 1999.
- [184] J. M. Stone, T. A. Gardiner, P. Teuben, J. F. H., and J. B. Simon, “Athena : A New Code for Astrophysical MHD,” *The Astrophysical Journal Supplement Series*, vol. 178, no. 1, p. 137, 2008.
- [185] J. M. Stone, “Rayleigh-taylor instability test,” 2010. <https://www.astro.princeton.edu/~jstone/Athena/tests/rt/rt.html>.
- [186] P. G. Drazin and W. H. Reid, *Hydrodynamic Stability*. Cambridge University Press, 2004.
- [187] T. Speziale and P. J. Catto, “Linear wave conversion in an unmagnetized, collisionless plasma,” *Phys. Fluids*, vol. 20, pp. 990–997, 1977.
- [188] D. E. Hinkel-Lipsker, B. D. Fried, and G. J. Morales, “Analytic expression for mode conversion of Langmuir and electromagnetic waves,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 62, pp. 2680–2682, 1989.
- [189] D. W. Forslund, J. M. Kindel, K. Lee, E. L. Lindman, and R. L. Morse, “Theory and simulation of resonant absorption in a hot plasma,” *Phys. Rev. A*, vol. 11, pp. 679–683, 1975.
- [190] N. W. Ashcroft and N. D. Mermin, *Solid State Physics*. Cengage Learning, 2011.
- [191] P. W. Smorenburg, J. H. M. Kanters, A. Lassise, L. P. J. Brussaard, and O. J. Luiten, “Polarization-dependent ponderomotive gradient force in a standing wave,” *Phys. Rev. A*, vol. 83, p. 063810, 2011.
- [192] S. K. Mishra, A. Andreev, and M. P. Kalashnikov, “Reflection of few cycle laser pulses from an inhomogeneous overdense plasma,” *Opt. Express*, vol. 25, pp. 11637–11651, May 2017.
- [193] S. Mishra, “A vector wave analysis of a Bessel beam,” *Optics Communications*, vol. 85, no. 2, pp. 159 – 161, 1991.
- [194] Y. Yu and W.-B. Dou, “Vector analyses of nondiffracting Bessel beams,” *Progress in Electromagnetics Research Letters*, vol. 5, pp. 57–71, 01 2008.
- [195] J. J. Wang, T. Wriedt, J. A. Lock, and L. Mädler, “General description of circularly symmetric Bessel beams of arbitrary order,” *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, vol. 184, pp. 218–232, 2016.

- [196] J. A. Stratton, *Electromagnetic Theory*. McGraw-Hill, 2007.
- [197] K. Ardaneh, R. Giust, B. Morel, and F. Courvoisier, “Generation of a bessel beam in fdtd using a cylindrical antenna,” *Opt. Express*, vol. 28, pp. 2895–2908, 2020.
- [198] S. Juodkazis, K. Nishimura, and H. Misawa, “In-bulk and surface structuring of sapphire by femtosecond pulses,” *Applied Surface Science*, vol. 253, no. 15, pp. 6539 – 6544, 2007.
- [199] Y. Liao, J. Ni, L. Qiao, M. Huang, Y. Bellouard, K. Sugioka, and Y. Cheng, “High-fidelity visualization of formation of volume nanogratings in porous glass by femtosecond laser irradiation,” *Optica*, vol. 2, no. 4, pp. 329–334, 2015.
- [200] P. P. Rajeev, M. Gertsvolf, C. Hnatovsky, E. Simova, R. S. Taylor, P. B. Corkum, D. M. Rayner, and V. R. Bhardwaj vol. 40, pp. S273–S282, may 2007.
- [201] J. Gaudin, *Processus électroniques d’excitation et de relaxation dans les solides diélectriques excités par des impulsions ir et xuv ultracourtes*. Thèse de l’Université de Bordeaux I, 2005.
- [202] K. H. Bennemann, “Photoinduced phase transitions,” *Journal of Physics : Condensed Matter*, vol. 23, p. 073202, feb 2011.
- [203] A. Hakim, “Extended mhd modelling with the ten-moment equations,” *Journal of Fusion Energy*, vol. 27, no. 1-2, pp. 36–43, 2008.

# TABLE DES FIGURES

1.1	Coupes $(r, z)$ de la distribution d'intensité numérique (a) et expérimentale (b) d'un faisceau de Bessel focalisant dans l'air en régime linéaire. $r$ est la direction radiale et $z$ est la direction de propagation du faisceau. Le faisceau de Bessel se propage de la gauche vers la droite dans la direction $z$ . . . . .	10
1.2	Image expérimentale du nano-canal obtenu dans du verre à partir d'un faisceau de Bessel d'angle conique de $22^\circ$ avec une énergie de $3,1 \mu\text{J}$ . Le canal mesure $43 \mu\text{m}$ de longueur et $400 \text{ nm}$ de diamètre. Le rapport d'aspect est supérieur à 100. . . . .	10
1.3	Schéma expérimental du clivage à haute vitesse d'un matériau transparent par faisceaux de Bessel femtosecondes. (a) Un balayage du faisceau laser permet de générer une succession de dommages espacés dans le volume du matériau et ainsi de fragiliser ce dernier. (b) L'application d'une légère flexion sur le matériau permet de le cliver. Cette figure est reprise de la référence [38]. . . . .	11
1.4	Échelle de temps des phénomènes physiques se produisant pendant l'interaction entre une impulsion laser femtoseconde et un matériau diélectrique. Les barres rouges représentent les échelles de temps typiques des différents phénomènes. . . . .	12
1.5	Schématisation des phénomènes d'absorption multiphotonique, de Bremsstrahlung inverse et d'ionisation par impact. (a) Un électron de valence (1) absorbe plusieurs photons d'énergie $\hbar\omega_0$ et est alors promu dans la bande de conduction (1'). (b) L'électron de conduction (1') absorbe à plusieurs reprises un photon d'énergie $\hbar\omega_0$ et un phonon de quantité de mouvement $\hbar K$ , et monte ainsi dans un état énergétique plus élevé (1''). (c) L'électron énergétique (1'') entre en collision avec un électron de valence (2) et lui transmet une partie de son énergie et de sa quantité de mouvement. L'électron de valence est alors promu dans la bande de conduction (2'). L'électron de conduction déclencheur de la réaction descend en énergie dans la bande de conduction (1'''). . . . .	13
1.6	Comparaison entre les cartes de fluence expérimentale (a) et numérique (b) obtenue à partir de la résolution de l'équation Schrödinger non-linéaire. L'unité de la fluence utilisée est $\text{J}/\text{cm}^2$ . . . . .	20
2.1	Boucle de rétroaction du couplage champ-plasma. . . . .	26
2.2	Synthèse des différents niveaux de description de la théorie cinétique classique des plasmas. . . . .	29

- 3.1 (a) Schématisation des collisions électron-phonon : un électron de conduction (1) émet un phonon (trait pointillé), et passe dans un autre état (1') de la même bande. (b) Schématisation de la collision électron-phonon-photon. Un électron de conduction (1) absorbe un photon d'énergie  $\hbar\omega_0$  et un phonon de quantité de mouvement  $\hbar K$ . Cet électron monte alors dans un état énergétique plus élevé (1') à travers cette interaction. . . . . 50
- 3.2 Schématisation de l'ionisation par impact amorcée par un électron libre énergétique. L'électron énergétique (1) entre en collision avec un électron de valence (2) et lui transmet une partie de son énergie et de sa quantité de mouvement. L'électron de valence est alors promu dans la bande de conduction (2') et un trou est laissé dans la bande de valence. L'électron de conduction déclencheur de la réaction descend en énergie dans la bande de conduction (1'). . . . . 53
- 3.3 Taux d'ionisation par impact dans du saphir en phase  $\alpha$  en fonction de  $k_B T_e$ . Nous avons fixé  $m_e^* = 0,4m_e$  [77] et  $U_g = 10$  eV [120]. . . . . 55
- 3.4 Schématisation de l'ionisation par impact déclenchée par un trou énergétique. (a) D'un point de vue des trous, un trou énergétique (1) entre en collision avec un trou de conduction (2) et lui transmet une partie de son énergie et de sa quantité de mouvement. Le trou de conduction est alors promu dans la bande de valence (2'). Le trou déclencheur de la réaction descend en énergie dans la bande de valence (1'). (b) D'un point de vue des électrons, un électron de valence énergétique (1) entre en collision avec un autre électron de valence (2) et lui transmet une partie de son énergie et de sa quantité de mouvement. L'électron de valence (2) est alors promu dans la bande de conduction (2') et une place vacante (trou) est laissée dans la bande de valence. L'électron de valence déclencheur de la réaction descend en énergie dans la bande de valence (1'). . . . . 56
- 3.5 Taux de photoionisation de Keldysh dans du saphir en phase  $\alpha$  en fonction de l'amplitude du champ électrique. La masse effective des électrons de conduction est  $m_e^* = 0,4m_e$  [77], le gap est  $U_g = 10$  eV [120] et la longueur d'onde du laser dans le vide est  $\lambda_0 = 0,8 \mu\text{m}$ . . . . . 58
- 3.6 (a) Schématisation d'une recombinaison Auger. Un électron (1) transmet une partie de son énergie et de sa quantité de mouvement à un autre électron (2) de la bande de conduction. L'électron (2) est alors accéléré et passe dans l'état (2'), alors que l'électron (1) retombe dans la bande de valence à l'état (1'), et occupe ainsi une place précédemment vacante (la place d'un trou). (b) Schématisation de la génération d'un exciton auto-piégé. Un électron de conduction (1) et un trou (2) se lient à travers l'interaction coulombienne et se piègent au voisinage d'une impureté ou un défaut du diélectrique. . . . . 59
- 4.1 Vue générale de l'algorithme. . . . . 65
- 4.2 Schéma composite LWLF5 : 4 pas temporels sont effectués avec le schéma LW<sub>2</sub>, suivis d'un pas temporel avec le schéma LF<sub>2</sub>. . . . . 69

4.3 Comparaison des résultats obtenus avec le schéma  $LF_2$  (a), le schéma  $LW_2$  (b), et un schéma composite  $LWLF5$  (c). L'effet de la diffusion numérique qui adouci les gradients est visible sur la figure (a) alors que l'effet de la dispersion numérique qui engendre des oscillations est visible sur la figure (b). La solution numérique du schéma composite  $LWLF5$  est de meilleure qualité (c). . . . . 70

4.4 Grille numérique dans le schéma de Lax-Friedrichs classique 1D. Les points  $U_j^n$ ,  $U_{j-1}^n$  et  $U_{j+1}^n$  sont nécessaires pour le calcul de  $U_j^{n+1}$ . . . . . 72

4.5 Grille numérique dans le schéma  $LF_2$  1D. . . . . 74

4.6 Grille numérique dans le schéma  $LW_2$  1D. . . . . 75

4.7 Description de l'algorithme PSTD/Hydro développé pour résoudre les équations du modèle plasma à deux fluides. Un schéma RK4 est utilisé pour intégrer le terme source des équations fluides, un schéma  $LWLF_n$  est utilisé pour intégrer le système d'équations homogènes, et la méthode PSTD est utilisée pour avancer les champs. L'algorithme implique 5 étapes, montrées en bleues sur la figure, pour avancer les champs et les variables fluides d'un instant  $t^n$  à un instant  $t^{n+1}$ . . . . . 81

4.8 Description de l'algorithme PSATD/Hydro développé pour résoudre les équations du modèle plasma à deux fluides. Un schéma RK4 est utilisé pour intégrer le terme source des équations fluides, un schéma LW est utilisé pour intégrer le système d'équations homogènes, et la méthode PASTD est utilisée pour avancer les champs. L'algorithme implique 4 étapes, indiquées en rouge sur la figure, pour avancer les champs et les variables fluides d'un instant  $t^n$  à un instant  $t^{n+1}$ . . . . . 84

5.1 Vue schématique des relations de dispersion des modes de propagation d'onde dans un plasma tiède isotrope. . . . . 90

5.2 Représentation schématique de la géométrie d'un problème mettant en lumière le phénomène d'absorption résonnante. Une onde électromagnétique polarisée TM et se propageant dans le plan  $(x, z)$  illumine en incidence oblique (angle  $\theta$ ) un plasma. La densité de celui-ci évolue linéairement avec  $z$ . L'onde se réfléchit au niveau de la surface tournante (en  $z = L \cos^2 \theta$ ). Le champ évanescent de l'onde électromagnétique vient alors exciter de façon résonnante l'onde plasma au niveau de la surface critique (en  $z = L$ ), surface à laquelle la permittivité du plasma s'annule. Une partie de l'énergie de l'onde électromagnétique est convertie en onde plasma (mode purement longitudinal). . . . . 92

5.3 Conditions aux limites utilisées pour le test de Noh. . . . . 95

5.4 (a) Coupe (X-Y) de la densité  $n_n$  à  $t_{\text{final}} = 2,7$ . (b) Graphique en nuage de points de  $n_m$  à  $t_{\text{final}} = 2,7$ . La courbe noire est la solution analytique alors que le nuage de points bleus correspond à la solution numérique obtenue avec un schéma  $LWLF4$ . . . . . 95

- 5.5 Coupes (X-Y) de la densité numérique  $n_m$  à  $t = 12,75$ . (a) solveur LWLF400+RK4  $\Delta x = \Delta y = \Delta z = 0,005$  (b) solveur LWLF400+RK4  $\Delta x = \Delta y = \Delta z = 0,0025$  (c) solveur HLLC (Harten-Lax-van Leer-Contact) du code ATHENA  $\Delta x = \Delta y = \Delta z = 0,005$  (d) solveur HLLC [185]  $\Delta x = \Delta y = \Delta z = 0,0025$ . Les figures (c) et (d) sont extraites de la référence [185] et la barre de couleur non affichée sur ces figures est comprise entre 0,9 et 2,1. . . . . 98
- 5.6 Résultats obtenus sur un problème d'instabilité de Rayleigh-Taylor avec 8 schémas numériques différents. Figure reprise de la référence R. Liska *et al.* [153]. . . . . 99
- 5.7 (a) Coupe (X-Y) de la densité à  $t = 4,47$  obtenue avec un solveur LWLF400+RK4 (b) Coupe (X-Y) de la densité à  $t = 13,42$  obtenue avec un solveur LWLF400+RK4 (c) Coupe (X-Y) de la densité à  $t = 4,47$  obtenue avec un solveur HLLC du code ATHENA [185] (d) Coupe (X-Y) de la densité à  $t = 13,42$  obtenue avec un solveur HLLC du code ATHENA [185]. Les figures (c) et (d) sont extraites de la référence [185] et la barre de couleur non affichée sur ces figures est comprise entre 0,99 et 2,01. Les quatre figures sont obtenues en prenant initialement une perturbation multimode, et un pas spatial  $\Delta x = \Delta y = \Delta z = 0,0025$ . . . . . 100
- 5.8 Longueur d'onde de l'onde électromagnétique dans le plasma en fonction de la densité. Les résultats numériques sont affichés avec des croix rouges alors que la courbe en pointillés noirs est obtenue à partir de la relation théorique (5.18). . . . . 103
- 5.9 Diagramme de dispersion  $(\omega, k_z)$  du champ  $E_z$ . L'échelle de couleur logarithmique est associée aux résultats numériques obtenus avec le code PSTD/Hydro. Les lignes en pointillés noirs sont basées sur les équations théoriques (5.19), (5.20) et (5.21). . . . . 104
- 5.10 (a) Principe de la simulation numérique du test 3. Une impulsion laser polarisée TM arrive en incidence oblique sur un plasma inhomogène suivant l'axe  $z$ . La ligne rouge en bas à droite de la figure correspond au profil de densité. Le contour en pointillés bleus correspond au volume d'intégration  $V$ . Les lignes verticales en pointillés rouges donnent les positions des surfaces critique et tournante. (b) Évolutions temporelles des densités linéaires d'énergie : énergie électromagnétique (tirets bleus), énergie cinétique (tirets-pointillés rouges), énergie thermique (pointillés verts), et énergie totale (ligne continue violette). Pour obtenir ce résultat, l'angle d'incidence est  $\theta = 15^\circ$ . La densité linéaire d'énergie théorique  $E_{\text{Imp}}$  est affichée en pointillés noirs sur la figure. Les résultats des figures a) et b) sont obtenus avec le code PSTD/Hydro. . . . . 105
- 5.11 Facteur de conversion en fonction de  $\tau^2 = \left(\frac{2\pi L}{\lambda_0}\right)^{2/3} \sin^2 \theta$ . Les croix bleues correspondent aux points numériques obtenus avec le code PSTD/Hydro. Les résultats des autres références sont montrés pour comparaison : simulation PIC de Forslund *et al.* (tirets rouges) [189], approche analytique de Hinkel-Lipsker *et al.* (pointillés verts) [188] et les asymptotes théoriques de Speziale *et al.* (lignes bleues) [187]. . . . . 107

5.12 (a) Profil spatial de l'amplitude de l'onde électromagnétique se propageant au sein d'un plasma homogène de densité  $0,3 \times 10^{21} \text{ cm}^{-3}$  avec une fréquence de collision de  $2 \text{ fs}^{-1}$ . L'interface vide/plasma est située en  $z = 0$ . (b) Distances caractéristiques  $z_{1/e}$  numériques et théoriques en fonction de la fréquence de collision  $\nu_{ei}$ . Les résultats sont tracés pour deux densités différentes :  $0,3 \times 10^{21} \text{ cm}^{-3}$  (pointillés bleus et croix noires) et  $0,9 \times 10^{21} \text{ cm}^{-3}$  (pointillés rouges et croix magenta). Les résultats des figures a) et b) sont obtenus avec le code PSTD/Hydro. . . . . 109

5.13 Évolutions temporelles des densités linéaires d'énergie numériques : énergie électromagnétique (tirets bleus), énergie cinétique (tirets-pointillés rouges), énergie thermique (pointillés verts), et énergie totale (ligne continue violette). La densité linéaire d'énergie  $E_{\text{Imp}}$  est affichée en pointillés noirs sur la figure. La fréquence de collision est fixée à  $\nu_{ei} = 0,05 \text{ fs}^{-1}$ . Les autres paramètres sont les mêmes que ceux ayant permis l'obtention de la figure 5.10(b). . . . . 110

5.14 (a) Densité initiale (pointillés bleus) et finale d'électrons (ligne continue bleue). La composante  $|E_x|$  finale est tracée avec une ligne continue rouge. (b) Densité finale d'ions (ligne continue magenta) et wakefield  $E_z$  final (ligne continue noire). Les résultats des figures (a) et (b) sont obtenus avec le code PSTD/Hydro. . . . . 111

5.15 (a) Évolutions temporelles des densités linéaires d'énergie : énergie électromagnétique (tirets bleus), énergie cinétique (tirets-pointillés rouges), énergie thermique (pointillés verts), et énergie totale (ligne continue violette). L'angle d'incidence permettant d'obtenir ce résultat est  $\theta = 15^\circ$ . La densité linéaire d'énergie théorique  $E_{\text{Imp}2}$  est affichée en pointillés noirs sur la figure. (b) Évolutions temporelles des quantités de mouvement normalisées : électromagnétique (tirets bleus), fluides (tirets-pointillés rouges), et totale (ligne continue noire). Les résultats des figures a) et b) sont obtenus avec le code PSATD/Hydro. . . . . 113

5.16 (a) Évolutions temporelles des densités linéaires d'énergie numériques : énergie électromagnétique (tirets bleus), énergie cinétique (tirets-pointillés rouges), énergie thermique (pointillés verts), et énergie totale (ligne continue violette). Pour obtenir ces résultats, l'angle d'incidence est fixé à  $\theta = 15^\circ$ . La densité linéaire d'énergie théorique  $E_{\text{Imp}2}$  est affichée en pointillés noirs sur la figure. (b) Facteur de conversion en fonction de  $\tau^2 = \left(\frac{2\pi L}{\lambda_0}\right)^{2/3} \sin^2 \theta$ . Les ronds rouges correspondent aux résultats numériques du code PSATD/Hydro alors que les croix bleues correspondent aux résultats numériques précédents obtenus avec le code PSTD/Hydro. Les résultats des autres références, comme sur la figure 5.11, sont montrés pour comparaison. . . . . 115

- 5.17 (a) Propagation d'une impulsion monocycle avec le code PSTD/Hydro (tirets-pointillés rouges) et avec le code PSATD/Hydro (ligne continue bleue). La courbe du code PSATD/Hydro est superposée à la solution analytique en pointillés noirs. Les artefacts numériques engendrés par la dispersion numérique de la méthode PSTD sont encadrés en rouge. (b) Composante  $v_x$  de la vitesse du fluide d'électrons au même instant. Dans les figures (a) et (b), le plasma est défini dans la zone  $z \leq -5 \mu\text{m}$  qui est coloriée en bleu clair. . . . . 116
- 5.18 (a) Intensité au cours de la propagation de l'impulsion dans la direction  $z$ . Le milieu est localisé entre  $z = 40 \mu\text{m}$  et  $z = 80 \mu\text{m}$ . L'impulsion bleue est l'impulsion initiale envoyée sur le milieu alors que l'impulsion en tirets rouges est celle en sortie. (b) Évolutions temporelles des densités volumique d'énergie intégrées en  $z$  : énergie électromagnétique (tirets bleus), énergie d'excitation consommée pour promouvoir les électrons dans la bande de conduction (tirets-pointillés rouges), et énergie totale (ligne continue violette). La densité théorique  $E_{\text{Imp}}$  est affichée en pointillés noirs sur la figure. Les résultats des figures (a) et (b) sont obtenus avec le code PSATD/Hydro. 118
- 5.19 Intensité crête de l'impulsion transmise  $I_{\text{Tr}}$  en fonction de l'intensité crête de l'impulsion incidente  $I_{\text{Inc}}$ . . . . . 119
- 5.20 Taux de photoionisation de Keldysh en fonction de l'intensité. . . . . 120
- 5.21 (a) Cartographie de l'intensité de l'impulsion laser à  $t = 189 \text{ fs}$ , dans un milieu diélectrique sans charge libre. (b) Intensité de l'impulsion laser à  $t = 189 \text{ fs}$  en prenant en compte la dynamique des charges libres. (c) Densité d'électrons libres à  $t = 189 \text{ fs}$ . (d) Densité de trous de valence à  $t = 189 \text{ fs}$ . Les résultats des figures (a), (b), (c) et (d) sont obtenus avec le code PSATD/Hydro. . . . . 122
- 5.22 Évolutions temporelles des densités volumique d'énergie intégrées dans le plan  $(X,Z)$  : énergie électromagnétique (tirets bleus), énergie des électrons (pointillés rouges), énergie des trous (tirets-pointillés rouges), énergie d'excitation consommée pour promouvoir les électrons dans la bande de conduction (tirets-pointillés verts), et énergie totale (ligne continue violette). La densité théorique  $E_{\text{Imp}}$  est affichée en pointillés noirs sur la figure. . . . . 123
- 6.1 Représentation d'une coupe  $(x-y)$  de l'antenne cylindrique. L'anneau bleu représente l'antenne d'épaisseur  $\delta r$  et de rayon interne  $r_1$ , alors que la zone rouge représente les PMLs. . . . . 129
- 6.2 Comparaison des champs numériques et analytiques. Cas d'un  $J_0$ , polarisé en  $x$ ,  $\lambda_0 = 0,8 \mu\text{m}$  et  $n = 1,45$ . (a)  $|E_x|/E_N$  à  $t = 197,8 \text{ fs}$ , (b)  $|E_z|/E_N$  à  $t = 199,8 \text{ fs}$ . . . . . 131
- 6.3 Coupes 2D des champs numériques. Cas d'un  $J_0$ , polarisé en  $x$ ,  $\lambda_0 = 0,8 \mu\text{m}$  et  $n = 1,45$ . (a)  $|E_x|/E_N$  à  $t = 197,8 \text{ fs}$ , (b)  $|E_z|/E_N$  à  $t = 199,8 \text{ fs}$ . . . . . 131
- 6.4 Comparaison des champs numériques et analytiques. Cas d'un  $\text{BJ}_1$  polarisé selon  $y$ ,  $\lambda_0 = 0,8 \mu\text{m}$  et  $n = 1,45$ . (a)  $|E_y|/E_N$  à  $t = 197,3 \text{ fs}$ , (b)  $|E_z|/E_N$  à  $t = 197,3 \text{ fs}$ . . . . . 132

6.5 Comparaison des champs numériques et analytiques. Cas d'un Bessel impulsional d'ordre 0, polarisé en  $x$ ,  $\lambda_0 = 0,8 \mu\text{m}$  et  $n = 1,76$ . (a)  $|E_x|/E_N$  à  $t = -85,3 \text{ fs}$ , (b)  $|E_z|/E_N$  à  $t = -87,2 \text{ fs}$ , (c)  $|E_x|/E_N$  à  $t = 0 \text{ fs}$ , (d)  $|E_z|/E_N$  à  $t = 1,9 \text{ fs}$ , (e)  $|E_x|/E_N$  à  $t = 85,3 \text{ fs}$ , (f)  $|E_z|/E_N$  à  $t = -87,2 \text{ fs}$ . 134

6.6 Coupes ( $x, y=0, z=0$ ) de la densité électronique initiale (ligne continue bleue) et de la fluence numérique en fin de simulation (tirets pointillés rouges). Les pointillés noirs représentent les niveaux de la densité critique  $n_c = 1,08 \times 10^{21} \text{ cm}^{-3}$  et de la densité au point tournant  $n_t = 0,06 \times 10^{21} \text{ cm}^{-3}$ . 137

6.7 (a) Coupes ( $x, y=0, z=0$ ) du profil de densité électronique initial (ligne bleue) et final (pointillés rouges). (b) Coupes ( $x, y=0, z=0$ ) du profil de densité de trous initial (ligne bleue) et final (pointillés rouges). . . . . 138

6.8 (a) Coupes ( $x, y=0, z=0$ ) du profil de densité électronique initial (ligne bleue) et final (pointillés rouges) dans un plasma avec des fréquences de collision avec les phonons fortes. (b) Coupes ( $x, y=0, z=0$ ) du profil de densité électronique initial (ligne bleue) et final (pointillés rouges) lors d'une simulation avec les trous lourds du saphir. . . . . 139

6.9 Coupes ( $x, y=0, z=0$ ) de la densité du plasma initiale (ligne continue bleue), à  $t = 109,5 \text{ fs}$  (pointillés bleus) et du champ numérique à  $t = -13,1 \text{ fs}$  (ligne continue rouge). . . . . 140

6.10 Coupes ( $x, y=0, z=0$ ) et ( $x=0, y, z=0$ ) de la densité électronique à  $t_{\text{final}} = 176,2 \text{ fs}$  (lignes bleues), et de  $|E_x|$  à  $t = 2,85 \text{ fs}$  (lignes vertes). . . . . 142

6.11 Coupes ( $x, y=0, z=0$ ) et  $Y$  de la densité électronique finale lors des simulations avec une valeur d'exposant  $\Upsilon = 6,7$  (lignes continues) et  $\Upsilon = 2$  (pointillés). . . . . 143

6.12 Température maximale (tirets bleus) et densité maximale (pointillés rouges) pendant les simulations en fonction du taux d'impact  $\alpha_0^e$ . . . . . 144

6.13 Coupe ( $x, y=0, z=0$ ) de la densité électronique du plasma à  $t_{\text{final}} = 176,2 \text{ fs}$  pour des taux d'ionisation par impact  $\alpha_0^e = 0,002 \text{ fs}^{-1}$  (ligne continue bleue) et  $\alpha_0^e = 0,02 \text{ fs}^{-1}$  (tirets-pointillés rouges). . . . . 145

6.14 Coupes ( $x, y=0, z=0$ ) de la densité électronique du plasma à  $t = 24,2 \text{ fs}$  (ligne continue bleue) et à  $t_{\text{final}} = 176,2 \text{ fs}$  (pointillés rouges). Les lignes noires décrivent le profil de densité à des instants intermédiaires. . . . . 146

6.15 Coupes ( $x, y, z = z_{\text{max}}$ ) de la fluence numérique du faisceau de Bessel (a) sans plasma (b) avec un plasma présentant des taux de collision d'environ  $1 \text{ fs}^{-1}$  (c) et un plasma présentant des taux de collision supérieurs à  $10 \text{ fs}^{-1}$ . (d) Coupes  $x$  des fluences des figures (a), (b) et (c). . . . . 147

6.16 Coupes ( $x, y$ ) de la surface de sortie des nano-canaux obtenus dans l'échantillon de saphir à partir d'impulsions de  $1 \mu\text{J}$ . . . . . 149

6.17 Coupes ( $x, y$ ) des distributions de fluence expérimentales dans le saphir en régime linéaire (colonne de gauche) et pour des impulsions  $J_0$  de  $1 \mu\text{J}$  (colonne de droite). L'angle de l'état de polarisation par rapport à l'axe  $y$  est donné en degré sur les images, excepté lorsque la polarisation est circulaire. Les distributions sont normalisée au maximum de fluence présent chacune des images. . . . . 150

- E.1 Densité de masse du fluide d'ions à  $t = 9,92$ . Le test est effectué avec  $m_i = 500m_e$  et  $q_i/m_i = 100$ . . . . . 187
- E.2 Exemple de tracé obtenue dans la référence [104] dans le cadre du test du choc de Brio & Wu [104] à  $t = 10$  pour  $m_i = 1832,6m_e$  et  $q_i/m_i = 1000$ . La courbe rouge est obtenue à partir du modèle plasma à deux fluides alors que la courbe bleue est une courbe de référence en magnétohydrodynamique. Cette figure montre des effets à deux fluides non pris en compte avec les modèles magnétohydrodynamiques standards. . . . . 188

# LISTE DES TABLES

2.1	Ordres de grandeur du plasma étudié. . . . .	30
5.1	Résumé des paramètres et conditions aux limites des 5 prochains tests. . . .	102
5.2	Résumé des paramètres et conditions aux limites des tests 6 et 7. . . . .	119



## ANNEXES



# A

## RECOMBINAISONS AUGER DANS LE MODÈLE FLUIDE

Nous donnons ici les termes sources décrivant les processus de recombinaison Auger dans le modèle fluide. Commençons par faire les deux considérations suivantes :

1. Le nombre de paires électron/trou recombinées par effet Auger est décrit par l'équation de taux donnée dans A. Ramer *et al.* [109].
2. Les électrons de conduction détruits lors de la recombinaison passent d'un état (1) localisé dans le bas de la bande de conduction (vitesse moyenne nulle et une pression nulle) vers un état (1') localisé dans le haut de la bande de valence.

À partir des deux considérations précédentes, et en désignant  $\alpha^{Auger-e}$  le taux de recombinaison Auger déclenchée par un électron (en  $\text{cm}^6 \cdot \text{s}^{-1}$ ), l'inclusion de ce processus dans le système fluide (2.67) se fait à travers le terme source suivant :

$$\mathbf{S}^{Auger-e} \equiv \begin{bmatrix} \mathbf{S}_e^{Auger-e} \\ \mathbf{S}_h^{Auger-e} \end{bmatrix} \equiv \begin{bmatrix} -\alpha^{Auger-e} n_e^3 \\ \mathbf{0} \\ \alpha^{Auger-e} n_e^3 U_g \\ -\alpha^{Auger-e} n_e^3 \\ \mathbf{0} \\ 0 \end{bmatrix} \quad (\text{A.1})$$

En appliquant un raisonnement identique au cas électronique, les recombinaisons Auger amorcées par des trous (phénomène inverse de l'ionisation par impact déclenchée par un trou) sont présent en compte à travers le terme source suivant :

$$\mathbf{S}^{Auger-h} \equiv \begin{bmatrix} \mathbf{S}_e^{Auger-h} \\ \mathbf{S}_h^{Auger-h} \end{bmatrix} \equiv \begin{bmatrix} -\alpha^{Auger-h} n_h^3 \\ \mathbf{0} \\ 0 \\ -\alpha^{Auger-h} n_h^3 \\ \mathbf{0} \\ \alpha^{Auger-h} n_h^3 U_g \end{bmatrix} \quad (\text{A.2})$$



# B

## EXCITONS AUTO-PIÉGÉS DANS LE MODÈLE FLUIDE

Nous donnons ici le terme source décrivant le processus de génération d'excitons auto-piégés dans le modèle fluide. Commençons par faire les deux considérations suivantes :

1. Le nombre de paires électron/trou recombinaison en excitons auto-piégés est décrit par l'équation de taux donnée dans B. Chimier *et al.* [30].
2. Les électrons de conduction participant à la recombinaison sont localisés dans le bas de la bande de conduction (vitesse moyenne nulle et une pression nulle), alors que les trous sont localisés dans le haut de la bande de valence.

À partir des deux considérations précédentes, et en désignant  $\alpha^{STE}$  le taux de génération d'excitons auto-piégés (en  $s^{-1}$ ), l'inclusion de ce processus dans le système fluide (2.67) se fait à travers le terme source suivant :

$$\mathbf{S}^{STE} \equiv \begin{bmatrix} \mathbf{S}_e^{STE} \\ \mathbf{S}_h^{STE} \end{bmatrix} \equiv \begin{bmatrix} -\alpha^{STE} n_e \\ \mathbf{0} \\ +\alpha^{STE} n_e (U_g - U_{STE}) \\ -\alpha^{STE} n_e \\ \mathbf{0} \\ \alpha^{STE} n_e U_{STE} \end{bmatrix} \quad (\text{B.1})$$

où  $U_{STE}$  est le niveau énergétique où se localise les excitons auto-piégés.



## FORCE PONDÉROMOTRICE

Dans cette annexe, nous dérivons l'expression de la force pondéromotrice usuellement utilisée. La description faite ici est très simplifiée, mais elle permet d'avoir de l'intuition sur le comportement de cette force.

Commençons par considérer le champ électrique haute fréquence suivant :

$$\mathbf{E}(\mathbf{x}_e, t) = \mathbf{E}^0(\mathbf{x}_e) \cos \omega_0 t \quad (\text{C.1})$$

où  $\mathbf{E}^0(\mathbf{x}_e)$  caractérise la dépendance spatiale du champ. Le champ  $\mathbf{E}(\mathbf{x}_e, t)$  peut être celui d'un mode électromagnétique transverse (par exemple celui généré par un laser) ou d'un mode longitudinal (par exemple celui d'une onde de Langmuir excitée par absorption résonante). L'équation du mouvement d'un électron libre soumis à la force de Lorentz est la suivante :

$$m_e \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{v}_e = q_e \mathbf{E}(\mathbf{x}_e, t) + q_e \mathbf{v}_e \times \mathbf{B}(\mathbf{x}_e, t) \quad (\text{C.2})$$

Le champ magnétique  $\mathbf{B}(\mathbf{x}_e, t)$  dans l'équation (C.2) est le champ magnétique induit dans l'équation de Maxwell-Faraday (2.72).

L'objectif est maintenant de séparer les effets moyens (basses fréquences) et les effets hautes fréquences induits par la force de Lorentz sur un électron. Séparons alors le mouvement en une composante moyenne (basse fréquence) et une composante haute fréquence (fréquence du champ électrique) :

$$\mathbf{x}_e = \langle \mathbf{x} \rangle + \mathbf{x}_{\text{hf}} \quad (\text{C.3})$$

$$\mathbf{v}_e = \langle \mathbf{v} \rangle + \mathbf{v}_{\text{hf}} \quad (\text{C.4})$$

où nous avons utilisé la notation  $\langle \dots \rangle$  pour désigner les basses fréquences (mouvement moyen) d'une grandeur, et l'indice *hf* pour désigner la partie haute fréquence du mouvement.

Continuons notre approche perturbative en écrivant le champ électrique  $\mathbf{E}^0(\mathbf{x}_e)$  avec un développement de Taylor à l'ordre 1 :

$$\mathbf{E}^0(\mathbf{x}_e) = \mathbf{E}^0(\langle \mathbf{x} \rangle) + (\mathbf{x}_{\text{hf}} \cdot \nabla) \mathbf{E}^0(\mathbf{x} = \langle \mathbf{x} \rangle) \quad (\text{C.5})$$

L'équation du mouvement d'ordre 1 donne la réponse linéaire à l'excitation électrique :

$$m_e \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{v}_{\text{hf}} = q_e \mathbf{E}^0(\langle \mathbf{x} \rangle) \cos \omega_0 t \quad (\text{C.6})$$

L'effet du champ magnétique  $q_e \mathbf{v}_e \times \mathbf{B}$  est d'ordre 2, c'est la raison pour laquelle il n'intervient pas dans l'équation du mouvement d'ordre 1 (C.6). L'intégration temporelle de l'équation (C.6) donne :

$$\mathbf{v}_{\text{hf}} = \frac{q_e}{m_e \omega_0} \mathbf{E}^0(\langle \mathbf{x} \rangle) \sin \omega_0 t \quad (\text{C.7})$$

et

$$\mathbf{x}_{\text{hf}} = -\frac{q_e}{m_e \omega_0^2} \mathbf{E}^0(\langle \mathbf{x} \rangle) \cos \omega_0 t \quad (\text{C.8})$$

L'effet d'ordre 1 du champ électrique de l'équation (C.1) est simplement une oscillation de l'électron à la même fréquence que le champ.

Avant d'écrire l'équation du mouvement d'ordre 2, commençons par donner l'expression du champ magnétique  $\mathbf{B}$  en fonction du champ électrique  $\mathbf{E}$ . Pour cela, intégrons temporellement l'équation de Maxwell-Faraday (2.72) :

$$\mathbf{B}(\mathbf{x}_e, t) = -\int \nabla \times \mathbf{E}^0(\mathbf{x} = \langle \mathbf{x} \rangle) \cos \omega_0 t dt \quad (\text{C.9})$$

$$= -\frac{\sin \omega_0 t}{\omega_0} \nabla \times \mathbf{E}^0(\mathbf{x} = \langle \mathbf{x} \rangle) \quad (\text{C.10})$$

L'équation du mouvement d'ordre 2 est la somme du terme d'ordre 2 de l'équation (C.5) et du terme associé au champ magnétique  $q_e \mathbf{v}_{\text{hf}} \times \mathbf{B}(\mathbf{x}_e, t)$  :

$$m_e \frac{\partial}{\partial t} \langle \mathbf{v} \rangle = q_e (\mathbf{x}_{\text{hf}} \cdot \nabla) \mathbf{E}^0(\mathbf{x} = \langle \mathbf{x} \rangle) \cos \omega_0 t + q_e \mathbf{v}_{\text{hf}} \times \mathbf{B}(\mathbf{x}_e, t) \quad (\text{C.11})$$

soit en remplaçant le champ magnétique par l'expression de l'équation (C.10), et en utilisant les expressions (C.7) et (C.8) de  $\mathbf{v}_{\text{hf}}$  et  $\mathbf{x}_{\text{hf}}$  :

$$m_e \frac{\partial}{\partial t} \langle \mathbf{v} \rangle = -\frac{q_e^2 \cos^2 \omega_0 t}{m_e \omega_0^2} (\mathbf{E}^0(\mathbf{x} = \langle \mathbf{x} \rangle) \cdot \nabla) \mathbf{E}^0(\mathbf{x} = \langle \mathbf{x} \rangle) \quad (\text{C.12})$$

$$- \frac{q_e^2 \sin^2 \omega_0 t}{m_e \omega_0^2} \mathbf{E}^0(\mathbf{x} = \langle \mathbf{x} \rangle) \times (\nabla \times \mathbf{E}^0(\mathbf{x} = \langle \mathbf{x} \rangle)) \quad (\text{C.13})$$

L'intégration temporelle sur une période  $T_0 = 2\pi/\omega_0$  de l'équation (C.13) donne :

$$\mathbf{F}_p \equiv m_e \frac{1}{T_0} \int_t^{t+T_0} \langle \mathbf{v} \rangle dt \quad (\text{C.14})$$

$$= -\frac{q_e^2}{2m_e \omega_0^2} \left( (\mathbf{E}^0(\mathbf{x} = \langle \mathbf{x} \rangle) \cdot \nabla) \mathbf{E}^0(\mathbf{x} = \langle \mathbf{x} \rangle) + \mathbf{E}^0(\mathbf{x} = \langle \mathbf{x} \rangle) \times (\nabla \times \mathbf{E}^0(\mathbf{x} = \langle \mathbf{x} \rangle)) \right) \quad (\text{C.15})$$

L'équation (C.15) peut se réécrire sous la forme suivante<sup>1</sup> [81] :

$$\mathbf{F}_p = -\frac{q_e^2}{4m_e \omega_0^2} \nabla \mathbf{E}^0(\mathbf{x} = \langle \mathbf{x} \rangle)^2 \quad (\text{C.16})$$

---

1. En utilisant l'identité vectorielle  $\nabla(\mathbf{A} \cdot \mathbf{B}) = (\mathbf{A} \cdot \nabla)\mathbf{B} + (\mathbf{B} \cdot \nabla)\mathbf{A} + \mathbf{A} \times (\nabla \times \mathbf{B}) + \mathbf{B} \times (\nabla \times \mathbf{A})$ .

# D

## APPROXIMATION DE L'ENVELOPPE LENTEMENT VARIABLE

Nous donnons ici la méthode permettant de calculer les différents ordres d'approximation de l'équation (6.20). Partons de l'intégrale de Fourier typique d'une composante du champ :

$$E_\alpha(r, \phi, z, t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega E_0 J_m(Kr) e^{i\omega(t-\beta(\omega)z)} e^{-(\omega-\omega_0)^2/\Delta\omega^2} \quad (\text{D.1})$$

La première approximation consiste à supposer que la dispersion des composantes  $z$  du vecteur d'onde est nulle et à les remplacer par sa valeur moyenne :

$$\beta(\omega) = n(\omega) \frac{\omega}{c} \approx \beta(\omega_0) = \beta_0 \quad (\text{D.2})$$

De ce fait, nous négligeons toutes variations de la distribution du champ optique suivant l'axe  $z$ . La composante du vecteur d'onde du champ optique suivant l'axe  $r$  est :

$$K = \frac{\omega \sin \theta}{c} \quad (\text{D.3})$$

L'équation (D.1) à estimer devient donc :

$$E_\alpha(r, \phi, z, t) = \frac{E_0}{2\pi} e^{-i\beta_0 z} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega J_m(\omega\tau) e^{i\omega t} e^{-(\omega-\omega_0)^2/\Delta\omega^2} \quad (\text{D.4})$$

où  $\tau = r \sin \theta / c$ . La deuxième étape consiste à faire un développement limité de la fonction de Bessel :

$$J_m(\omega\tau) = \sum_{p=0} \frac{J_m^{(p)}(\omega_0\tau)}{p!} \tau^p (\omega - \omega_0)^p \quad (\text{D.5})$$

ainsi qu'un changement de variable dans l'intégrale pour obtenir :

$$E_\alpha(r, \phi, z, t) = \frac{E_0}{2\pi} e^{i(\omega_0 t - \beta_0 z)} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \sum_{p=0} \frac{J_m^{(p)}(\omega_0\tau)}{p!} \tau^p \omega^p e^{i\omega t} e^{-\omega^2/\Delta\omega^2} \quad (\text{D.6})$$

$$= \frac{E_0}{2\pi} e^{i(\omega_0 t - \beta_0 z)} \sum_{p=0} \frac{J_m^{(p)}(\omega_0\tau)}{p!} \tau^p \left[ i \frac{d}{dt} \right]^p \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega e^{i\omega t} e^{-\omega^2/\Delta\omega^2} \quad (\text{D.7})$$

$$= \frac{E_0 \Delta\omega}{2\sqrt{\pi}} e^{i(\omega_0 t - \beta_0 z)} \sum_{p=0} \frac{J_m^{(p)}(\omega_0\tau)}{p!} \tau^p \left[ i \frac{d}{dt} \right]^p e^{-\Delta\omega^2 t^2 / 4} \quad (\text{D.8})$$

Nous pouvons dès lors utiliser les formules suivantes basées sur l'utilisation des polynômes d'Hermite :

$$J_m^{(p)}(x) = \sum_{q=0}^p (-1)^q \frac{p!}{q!(p-q)!} \frac{J_{m-p+2q}(x)}{2^p} \quad (\text{D.9})$$

$$\left[ i \frac{d}{dt} \right]^p e^{-\Delta\omega^2 t^2/4} = \left[ \frac{i\Delta\omega}{2} \right]^p H_p \left( \frac{\Delta\omega t}{2} \right) e^{-\Delta\omega^2 t^2/4} \quad (\text{D.10})$$

À l'ordre zéro, l'intégrale initiale (D.1) se simplifie grandement sous la forme :

$$E_\alpha(r, \phi, z, t) = \frac{E_0 \Delta\omega}{2\sqrt{\pi}} e^{i(\omega_0 t - \beta_0 z)} J_m(\omega_0 \tau) e^{-\Delta\omega^2 t^2/4} \quad (\text{D.11})$$

# E

## TEST DU CHOC DE BRIO & WU

Nous montrons dans cette annexe, les tentatives effectuées au niveau du test du choc de Brio & Wu [144]. Comme énoncé dans le chapitre 4, ce test est standard pour les codes destinés à la fusion nucléaire ou l'astrophysique, dans lesquels des chocs plasmas sont souvent observés [143]. A. Hakim *et al.* [104] ont réadapté le test de Brio & Wu pour le modèle plasma à deux fluides, alors qu'il était initialement conçu pour des codes résolvant les équations de la magnétohydrodynamique. Ils ont notamment montré que des effets supplémentaires sont visibles lorsque que l'on résout les équations du modèle plasma à deux fluides et non celles de la magnétohydrodynamique.

Pour résumer brièvement, le système étudié est un plasma d'électrons/ions plongé dans un champ magnétique. Initialement, la moitié gauche de la fenêtre de calcul présente une forte densité et une forte pression, par rapport à la moitié droite. Dans la phase de relaxation du système, un choc se propage de la gauche vers la droite.

Sur la figure E.1, nous avons tracé la densité de masse ionique obtenue avec le code PSTD/Hydro à  $t = 9,92$ .

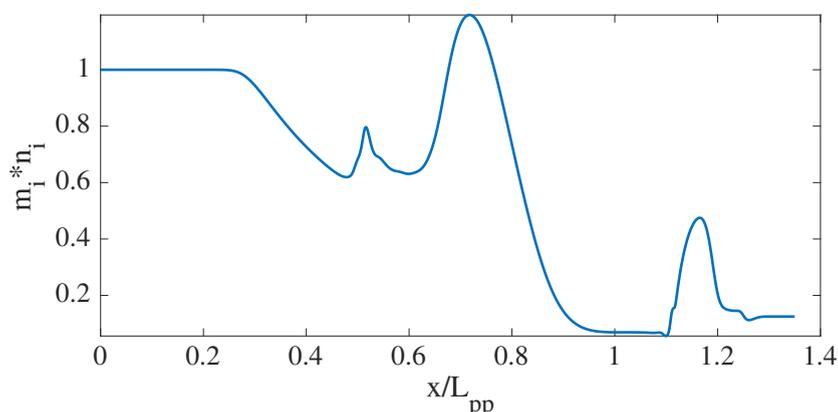


FIGURE E.1 – Densité de masse du fluide d'ions à  $t = 9,92$ . Le test est effectué avec  $m_i = 500m_e$  et  $q_i/m_i = 100$ .

Comme dans la référence [104], nous avons normalisé l'axe des abscisses par rapport

à la profondeur de peau ionique<sup>1</sup>  $L_{pp}$ . Dans ce test, nous avons fixé  $N_x = 25500$  et  $N_y = N_z = 1$ . Pour le solveur LWLfn et la PSTD, des conditions périodiques sont implémentées dans les directions  $y$  et  $z$ . Dans la direction  $x$ , des conditions aux limites de Dirichlet sont utilisées : les variables prennent leurs valeurs initiales<sup>2</sup>. Pour amortir en partie les oscillations générées par le schéma  $LW_2$ , nous fixons  $n = 4$  dans le schéma LWLfn.

Les auteurs de la référence [104] énoncent le fait que le nombre de points (50 000) utilisés dans la grille dans leurs simulations peut paraître excessif. Cependant, ils déclarent que la physique ne peut pas être résolue avec une grille plus grossière, en particulier lorsqu'un rapport  $m_i/m_e$  réaliste est utilisé. Un calcul du même type que ceux qu'ils ont effectué prendrait plusieurs semaines. Pour éviter cela, nous avons choisi de fixer  $m_i = 500 m_e$ , au lieu de  $m_i = 1832,6 m_e$  comme dans cette référence, puis nous avons choisi un pas spatial 4 fois plus grossier que celui utilisé dans cette référence.

Les résultats obtenus avec le code PSTD/Hydro (figure E.1) ne peuvent donc pas être comparés quantitativement à ceux des figures du paragraphe 7.1 de la référence [104]. Un exemple de tracé issu de cette référence est malgré tout donné sur la figure E.2. Les comparaisons qualitatives avec la courbe rouge de cette figure ne sont cependant pas convaincantes.

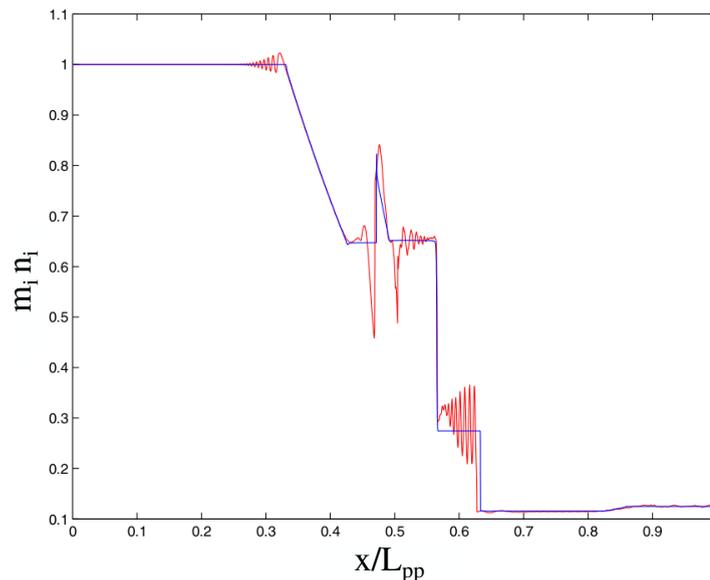


FIGURE E.2 – Exemple de tracé obtenue dans la référence [104] dans le cadre du test du choc de Brio & Wu [104] à  $t = 10$  pour  $m_i = 1832,6 m_e$  et  $q_i/m_i = 1000$ . La courbe rouge est obtenue à partir du modèle plasma à deux fluides alors que la courbe bleue est une courbe de référence en magnétohydrodynamique. Cette figure montre des effets à deux fluides non pris en compte avec les modèles magnétohydrodynamiques standards.

L'origine des différences peut venir de plusieurs raisons :

1.  $L_{pp} \equiv \frac{c}{\sqrt{\frac{4\pi n_i Z^2 q_i^2}{m_i}}}$ , où  $Z$  est le numéro atomique ( $Z = 1$  dans le test).
2. L'implémentation de ces conditions avec un solveur LWLfn est simple. Néanmoins, pour la PSTD, nous avons utilisé une astuce pour reproduire ce type de condition aux limites : nous avons symétrisé le dispositif en  $x$  de façon à utiliser des conditions aux limites périodiques, et ainsi reproduire l'effet désiré dans le code.

- Le rapport des masses  $m_i/m_e$  n'est pas le même, les échelles et la physique en jeu sont modifiées.
- Le pas utilisé avec le code PSTD/Hydro est 4 fois plus grossier, la résolution n'est peut être pas suffisante pour converger vers la solution physique.
- Rappelons que les équations modifiées résolues par le solveur ont la forme de l'équation (4.10) avec le schéma de Lax-Friedrichs, ou encore la forme de l'équation (4.28) avec le schéma de Lax-Wendroff. Dans les deux cas, les effets numériques explosent lorsque les gradients sont extrêmement importants. C'est notamment le cas lors des chocs, où il y a une discontinuité. Il ne faut donc pas écarter, la possibilité que l'algorithme complet PSTD/Hydro ne supporte pas les chocs.

Nous avons vu dans le chapitre 1, qu'une onde de choc est attendue dans les problèmes d'interaction entre une impulsion femtoseconde et un diélectrique (voir figure 1.4). Cependant, cette onde de choc apparaît plusieurs picosecondes après le passage de l'impulsion. L'onde de choc n'est donc pas dans le domaine temporelle étudié dans ce manuscrit. C'est pour cette raison que nous n'avons pas persévéré sur le problème du choc de Brio & Wu. Le temps de calcul est trop conséquent, pour un test dont la physique est éloignée de notre domaine d'étude. Le travail présenté dans ce paragraphe pourra néanmoins servir de base pour des études complémentaires.



