

## Numerical Design of Layered Photonic Microstructures

Erick Ramón Baca Montero (1), Oleksiy V. Shulika (2)

1 [Ingeniería en Comunicaciones y Electrónica, Universidad de Guanajuato] | Dirección de correo electrónico: [er.bacamontero@ugto.mx]

2 [Departamento, División de Ingenierías, Campus Irapuato-Salamanca, Universidad de Guanajuato] | Dirección de correo electrónico: [shulika@yandex.com]

### Resumen

En este trabajo se implementa una simulación FDTD (Finite-Difference Time Domain) unidimensional con sus aspectos importantes para modelar la propagación de pulsos ópticos ultracortos en materiales y estructuras de interés para aplicaciones de fotónica.

Primeramente se presenta el marco teórico del método, comenzando con la representación de las Ecuaciones de Maxwell en diferencias finitas para el modo TE, se presentan los detalles para analizar la estabilidad numérica en la resolución de ecuaciones de diferencias finitas centradas, se introducen las condiciones de Absorción en las fronteras (ABC, Absorbing Boundary Conditions), y se presenta el método de TF/SF para introducir excitaciones electromagnéticas en la red.

Posteriormente, se presentan técnicas para el manejo de estructuras poliestratificadas en el método FDTD, concernientes a la resolución de la red y número de iteraciones.

Finalmente, se analiza un espejo de Bragg de un cuarto de longitud de onda presentado en la literatura, mediante el método desarrollado, se analizan las características obtenidas para dichas estructuras y se comparan con las características obtenidas analíticamente mediante la teoría de modos acoplados en la literatura.

### Abstract

In this paper a one-dimensional FDTD (Finite-Difference Time Domain) is implemented to model the propagation of ultrashort optical pulses in materials and structures of interest for applications in photonics. First, the theoretical framework of the method is presented, starting with the representation of the Maxwell equations in finite differences for the TE mode, the details are presented for analyzing the numerical stability in solving centered finite difference equations, Absorbing Boundary Conditions (ABC) are introduced, and the TF/SF formulation to introduce electromagnetic excitations in the grid is presented. Subsequently, techniques for handling multilayer structures in the FDTD method, concerning the resolution of the grid, number of iterations for convergence are shown. Finally, a Bragg mirror, presented in the literature, is developed by our algorithm, the characteristics obtained for these structures are analyzed and compared to the characteristics obtained analytically by couple-modes theory in the literature.

### Palabras Clave

Diferencias Finitas en el Dominio del Tiempo (FDTD); Total-Field/Scattered-Field; Espejo de Bragg; Reflectancia; Teoría de Modos Acoplados

## INTRODUCCIÓN

El Método de diferencias finitas en el dominio del tiempo (FDTD, Finite-Difference Time Domain) es una técnica numérica para el cálculo de cantidades electrodinámicas basada en discretizar las ecuaciones de rotacional de Maxwell en el espacio y en el tiempo, haciendo uso de aproximaciones de diferencia finitas centradas, y resolverlas en cada punto del espacio y el tiempo. Actualmente el método FDTD se aplica a la modelización de materiales, diseño de antenas, dispositivos de comunicaciones inalámbricas, interconexiones digitales, circuitos de múltiples capas para diseño en UHF (Ultra-High Frequencies) y en aplicaciones biomédicas.

Ecuación de Maxwell-Faraday:

$$\frac{\partial \bar{H}}{\partial t} = -\frac{1}{\mu} \nabla \times \bar{E} - \frac{\sigma^m}{\mu} \bar{H} \quad (1)$$

donde  $\bar{E}$  es el vector de campo eléctrico,  $\bar{H}$  es el vector de intensidad de campo magnético,  $\mu$  es la permeabilidad magnética del medio.  $\sigma^m$  no tiene significado físico real pero permite atenuar el campo magnético (un tipo de pérdidas magnéticas artificiales).

Ecuación de Maxwell-Faraday:

$$\frac{\partial \bar{E}}{\partial t} = \frac{1}{\varepsilon} \nabla \times \bar{H} - \frac{\sigma^e}{\varepsilon} \bar{E} \quad (2)$$

Aquí  $\varepsilon$  es la permitividad eléctrica del medio y  $\sigma^e$  es la conductividad eléctrica.  $\sigma^m$  es un término que permite la simetría de ambas ecuaciones.

Escribiendo los componentes del operador rotacional, que sólo implican  $E_x, E_y, y H_z$ , y considerando que inicialmente en  $t = 0, E_x = 0$ , sin cambios  $E_x$  se mantiene igual a cero durante toda la observación y por lo tanto en nuestro modo TE particular en una dimensión, tenemos solo dos ecuaciones

$$\frac{\partial E_y}{\partial t} = \frac{1}{\varepsilon} \left( -\frac{\partial H_z}{\partial x} - \sigma^e E_y \right) \quad (3)$$

$$\frac{\partial H_z}{\partial t} = \frac{1}{\mu} \left( -\frac{\partial E_y}{\partial x} - \sigma^m H_z \right) \quad (4)$$

En [1], se desarrollan rigurosamente las ecuaciones 3 y 4 mediante diferencias finitas centradas para obtener las ecuaciones que serán recalculadas durante cada iteración de la simulación FDTD

$$E_y|_i^{n+1} = E_y|_i^n \cdot \left[ \frac{1 - \frac{\Delta t \sigma^e}{2\varepsilon}}{1 + \frac{\Delta t \sigma^e}{2\varepsilon}} \right] - H_z|_{i+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}} \cdot \left[ \frac{\frac{\Delta t}{\varepsilon \Delta x}}{1 + \frac{\Delta t \sigma^e}{2\varepsilon}} \right] + H_z|_{i-\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}} \cdot \left[ \frac{\frac{\Delta t}{\varepsilon \Delta x}}{1 + \frac{\Delta t \sigma^e}{2\varepsilon}} \right] \quad (5)$$

$$H_z|_{i+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}} = H_z|_{i+\frac{1}{2}}^{n-\frac{1}{2}} \cdot \left[ \frac{1 - \frac{\Delta t \sigma^m}{2\mu}}{1 + \frac{\Delta t \sigma^m}{2\mu}} \right] - E_y|_{i+1}^n \cdot \left[ \frac{\frac{\Delta t}{\mu \Delta x}}{1 + \frac{\Delta t \sigma^m}{2\mu}} \right] - E_y|_i^n \cdot \left[ \frac{\frac{\Delta t}{\mu \Delta x}}{1 + \frac{\Delta t \sigma^m}{2\mu}} \right] \quad (6)$$

El  $\Delta x$  representa los incrementos espaciales de la cuadrícula y  $\Delta t$  es el incremento temporal uniforme utilizado durante el intervalo de observación. Expresiones de diferencias finitas centradas se utilizan para las derivadas de espacio y tiempo. Los campos eléctricos y magnéticos se calculan en términos de campos pasados hasta que finaliza el ciclo temporal.

### Estabilidad del Método FDTD

La condición de Courant, Friedrich, y Levy (CFL) [2] es una condición para la estabilidad en la resolución de ecuaciones diferenciales parciales por el método de diferencias finitas. De acuerdo con esta condición, cuando una onda se propaga a través de una cuadrícula espacial finita y su amplitud es calculada en incrementos de tiempo uniformes, este incremento temporal debe ser igual o menor que el tiempo requerido para que la onda viaje un

incremento espacial. Si el incremento de tiempo es demasiado grande, el algoritmo producirá resultados incorrectos.

En una dimensión la condición de CFL es

$$\Delta t = C \frac{\Delta x}{c_0} \quad (7)$$

donde  $C$  es el número de Courant y  $c_0$  la velocidad de la luz en el vacío. El número de Courant puede variar de acuerdo al tiempo que le toma a la onda moverse una celda a otra dentro de  $C < 1$ .

#### Condición de Fuentes de excitación

Los tipos de fuente son un punto importante para la introducción de excitaciones electromagnéticas en la cuadrícula FDTD para problemas de modelado.

- *Formulación TF/SF*

La formulación TF/SF (Total-Field/Scattered-Field)[3] es una técnica para inyectar una fuente de una sola dirección en la red FDTD y que evita las dificultades causadas por el uso de fuentes duras. La formulación TF/SF asume que los campos físicos eléctrico y magnético totales  $E_{y,total}$  y  $H_{z,total}$  pueden descomponerse como:

$$E_{y,total} = E_{y,inc} + E_{y,scat} \quad (8)$$

$$H_{z,total} = H_{z,inc} + H_{z,scat} \quad (9)$$

Aquí,  $E_{y,inc}$  y  $H_{z,inc}$  son los valores de los campos incidentes, asumidas como cantidades conocidas antes de la simulación. Estos son los campos que existirían en el vacío, si no hay materiales de cualquier tipo en el espacio de modelado.  $E_{y,scat}$  y  $H_{z,scat}$  son los valores de los campos dispersos, que son inicialmente desconocidos. Estos son resultado de la interacción de la onda incidente con cualquier material de dentro de la red FDTD. Las operaciones en diferencias finitas del algoritmo del método FDTD pueden aplicarse con igual validez al campo incidente, al campo dispersado, y al campo total. La rejilla FDTD se divide en dos regiones distintas: Región I, donde se supone que los campos totales son almacenados; y la Región 2 (que rodea la Región 1), donde los campos

dispersos se almacenan. Las regiones 1 y 2 están separados por una superficie virtual no física que sirve para conectar los campos en cada región, y de ese modo genera la onda incidente.

La estructura de interés está incrustada en la región 1, en la región 2 del algoritmo funciona solamente con componentes de campo dispersas.

En [1] se desarrolla rigurosamente la formulación TF/SF para una dimensión y se obtienen las ecuaciones que permiten introducir una fuente incidente en el punto  $i_L$

$$E_y|_i^{n+1} = E_y|_i^n \cdot \left[ \frac{1 - \frac{\Delta t \sigma^e}{2\epsilon}}{1 + \frac{\Delta t \sigma^e}{2\epsilon}} \right] + H_{z,inc}|_{i-\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}} \cdot \left[ \frac{\frac{\Delta t}{\epsilon \Delta x}}{1 + \frac{\Delta t \sigma^e}{2\epsilon}} \right] \quad (10)$$

$$H_z|_{i+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}} = H_z|_{i+\frac{1}{2}}^{n-\frac{1}{2}} \cdot \left[ \frac{1 - \frac{\Delta t \sigma^m}{2\mu}}{1 + \frac{\Delta t \sigma^m}{2\mu}} \right] + E_{y,inc}|_{i_L}^n \cdot \left[ \frac{\frac{\Delta t}{\mu \Delta x}}{1 + \frac{\Delta t \sigma^m}{2\mu}} \right] \quad (11)$$

Es necesario calcular las funciones incidentes,  $E_{y,inc}$  y  $H_{z,inc}$  antes del ciclo principal FDTD.

La amplitud de estas funciones puede ser diferente debido a que estas se relacionan a través de la impedancia de los materiales a modelar, tienen medio incremento espacial de desfase y tienen un pequeño retardo de tiempo entre ellos.

#### Condiciones de Frontera

En el enfoque FDTD es necesario limitar el tamaño del dominio de cálculo ya que es imposible almacenar datos de manera infinita por lo tanto es necesario terminar la red FDTD de tal forma que el dominio de cálculo sea lo suficientemente grande para encerrar la estructura de interés.

Debido a esto, las Condiciones de Absorción en la Frontera (Absorbing Boundary Conditions, ABC) tienen la necesidad de suprimir el campo reflejado en la dirección interna de la red FDTD y amortiguar los campos salientes para mantener la solución FDTD válida en todos los incrementos de tiempo.

Las ABC no se pueden obtener directamente mediante algoritmos numéricos.

- Condición de absorción en la frontera para una dimensión

En el Método FDTD necesitamos saber los valores del campo  $H_z$  circundantes para calcular el campo  $E_y$ . En el borde del dominio espacial FDTD no tendremos el valor en uno de los lados.

Consideraremos el caso particular donde el número de Courant,  $C = 1/2$ . Esto permite que se cumpla la condición de estabilidad y significa que se necesitan dos incrementos de tiempo para que un frente de onda cruce una celda  $x$ . Utilizando la ecuación (5) para el campo eléctrico y la ecuación (7) tenemos una condición frontera aceptable

$$E_y|_0^n = E_y|_1^{n-2} \quad (12)$$

El objetivo de este trabajo es llevar a cabo una simulación FDTD unidimensional con los aspectos importantes del método, tales como las condiciones de estabilidad, fuente de excitación y condiciones de absorción en las fronteras, para modelar materiales para aplicaciones fotónicas.

Se describen los detalles de la aplicación del método FDTD para estructuras poliestratificadas, concernientes a la introducción del dispositivo den la red, resolución de la red y numero de iteraciones.

## MATERIALES Y MÉTODOS

Es de gran importancia garantizar una representación apropiada de la estructura dentro de la red FDTD. Así, la teoría mostrada en los capítulos anteriores se puede utilizar de manera eficiente para modelar las estructuras multicapas de interés.

En esta sección, se analiza el caso de un espejo de Bragg de un cuarto de longitud de onda y de uno lejano a un cuarto de longitud de onda.

Un espejo de Bragg consiste en una serie de pares de capas con índices de refracción  $n_h$  y  $n_l$ . Esta estructura presenta un período de perfil de índice determinado por  $\Lambda = d_h + d_l$  donde  $d_h$  es el espesor de la capa de alto índice y  $d_l$  es el espesor de la capa de bajo índice. El número de onda de

Bragg,  $k_B = \frac{2\pi}{\lambda_B}$ , donde la longitud de onda Bragg es  $\lambda_B = 2 \cdot (n_h d_h + n_l d_l)$ , determina dónde se produce la reflexión más fuerte, y se define como

$$k_B = \frac{2\pi}{\lambda_B} = \frac{\pi}{n_h d_h + n_l d_l} \quad (13)$$

Primeramente se analiza el caso de un espejo de Bragg de un cuarto de longitud de onda con 5 periodos de pares de capas, el espejo tiene una capa de bajo índice de  $SiO_2$  ( $n_l = 1.5$ ), y una capa de alto índice de  $TiO_2$  ( $n_h = 2.5$ ) y la longitud de onda de Bragg en 800 nm. Para que se cumpla la condición de un cuarto de la longitud de onda de Bragg se tiene

$$n_h d_h = n_l d_l = \frac{1}{4} \cdot \lambda_B \quad (14)$$

En nuestro caso particular, para  $\lambda_B = 800nm$ ,  $n_h d_h = n_l d_l = 200nm$ . De acuerdo con esto,  $d_h = 80nm$  y  $d_l = 133,333nm$ . La resolución de la cuadrícula debe ser suficiente para resolver la longitud de onda más corta, en este caso  $\lambda_{min} = 100nm$  y se establecerá arbitrariamente un numero  $N_\lambda = 200$  de tal forma que se calcula un factor  $\Delta_\lambda = \frac{100nm}{200} = 0,5nm$ . La resolución también debe resolver la característica mecánica más pequeña, en este caso la característica más pequeña es la capa de alto índice,  $d = d_h = 80nm$ . En este caso debido a que el espejo es una estructura altamente resonante se establece arbitrariamente un numero  $N_{device} = 100$ , y se calcula un factor  $\Delta_{device} = \frac{80nm}{100} = 0,8nm$ . Elegimos el valor mínimo  $\Delta_x = \min[\Delta_\lambda, \Delta_{device}] = 0,5nm = \min$ . Así el número de incrementos espaciales de la red que representa el espesor de la característica más pequeña es

$$N_{d_h} = \frac{d}{\Delta_x} = \frac{80nm}{0,5nm} = 160$$

Ahora, se determina el número de incrementos para la capa de bajo índice

$$N_{d_l} = \frac{d_l}{\Delta_x} = \frac{133,3333nm}{0,5nm} = 266,66662$$

aquí es imposible representar el espesor de la capa exactamente con esta resolución de la red, por lo que el número de incrementos es redonda hasta el número entero superior más cercano. El tamaño de la red se ajusta para encajar el dispositivo. El número de incrementos necesarios para el espejo de Bragg son  $5 \cdot (N_{d_h} + N_{d_l})$ , y se añaden una celda para la inyección de la fuente, una para registrar los campos reflejados y uno para grabar los campos transmitidos. Debido a esto, la Dimensión de la red es  $N_x = 2138$ . Para utilizar correctamente las ecuaciones (5) y (6) es necesario introducir los parámetros del dispositivo,  $n_h$  y  $n_l$  través de la ecuación  $\varepsilon_r = n^2$ .

Aquí los índices de refracción se representan como permitividades, y el dispositivo es incrustado en la red FDTD.

El incremento de tiempo se calcula en función del incremento de espacio  $\Delta x$ , de acuerdo a la condición de estabilidad,  $\Delta t = 8,3391 \times 10^{-19} s$ . Debido a las ventajas que representa el enfoque de fuente TF/SF, se aplica esta para inyectar un pulso gaussiano modulado con duración  $\tau = 4 fs$  y una longitud de onda central  $\lambda_0 = 800 nm$ , como se muestra en la imagen 1. El pulso se encuentra centrado en  $t_0 = 6\tau$ .

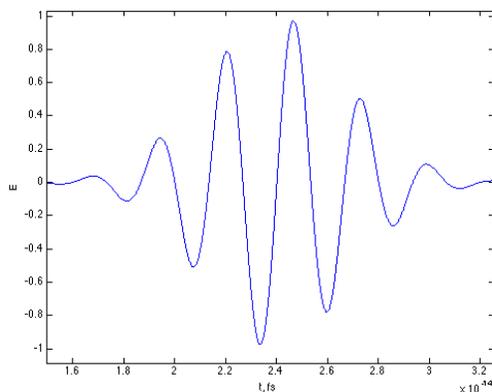


IMAGEN 1: Pulso incidente utilizado para excitar la simulación, con duración de 4fs y centrado en  $t_0 = 6\tau$ .

El tiempo de propagación del pulso en la red es  $t_{prop} = \frac{n_{max} N_x \Delta x}{c_0} = 8,9145 \times 10^{-15} s$ , donde  $n_{max}$  es el índice de refracción más grande dentro de la red. Como condición inicial, la duración de la simulación se establece como  $T = 12\tau + 100t_{prop}$ . Esto debido a la alta resonancia del dispositivo y con el propósito de lograr la convergencia del algoritmo.

Finalmente tras aplicar la ABC en una dimensión en ambas fronteras es posible realizar modelar la estructura.

## RESULTADOS Y DISCUSIÓN

La reflectancia computada mediante el algoritmo (línea azul) del espejo de Bragg de un cuarto de longitud de onda y los resultados obtenidos para la misma estructura, mediante la teoría de modos acoplados y presentados en [4] (línea roja), se muestran en la imagen 2. Los resultados se muestran respecto al número de onda normalizado al número de onda de Bragg  $k_B$ .

Es posible observar que los resultados obtenidos muestran consistencia con los observados en la literatura.

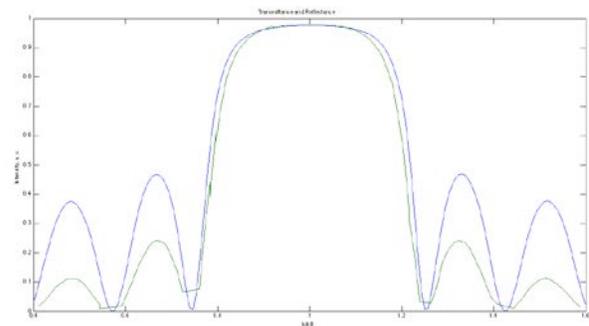


IMAGEN 2: Reflectancia del espejo de Bragg de un cuarto de longitud de onda con capas de  $n_l = 1.5$ , y  $n_h = 2.5$ . Línea azul FDTD, línea roja Teoría de modos acoplados.

## CONCLUSIONES

A través de este trabajo, se ha descrito el método de diferencias finitas en el dominio del tiempo en

una dimensión, así mismo se ha observado que es fácilmente implementado para modelar la propagación de campos electromagnéticos con precisión y puede ser utilizado en una amplia gama de problemas.

Se desarrollo una simulación FDTD en una dimensión para modelar estructuras fónicas multicapas, y se generó un algoritmo robusto y flexible.

Mediante el algoritmo desarrollado se analizó una estructura de espejo de Bragg y se observo que los resultados obtenidos son coincidentes con los resultados presentados en la literatura para dichas estructuras.

## REFERENCIAS

- [1] Taflove, A. & Hagness, S. (2005). Computational Electrodynamics: Finite-Difference Time-Domain Method (3rd ed.). Norwood MA: Artech House.
- [2] Courant, R., Friedrichs, K., Lewy, H. (1928). On the partial difference equations of Mathematical Physics. *Mathematische Annalen*, volumen(100), pp. 32-74.
- [3] Merewether, D. E., Fisher, R., & Smith F. W. (1980). On implementing a numeric Huygen's source scheme in a finite difference program to illuminate scattering bodies. *IEEE Trans. Nuclear Science*, volumen(27), pp. 1829-1833.
- [4] Matuschek, N. (1999). Theory and Design of Double-Chirped Mirrors. Dissertation.