Simulación Computacional del Campo Electromagnético en Nanoestructuras Usando el Método de Diferencias Finitas en el Dominio del Tiempo

Doctorando: Yohan Jasdid Rodríguez Viveros[1]

[1]Universidad de Sonora

Doctorado en Nanotecnología - Diciembre, 2015

Contenido

La Nanotecnología y La Nanociencia

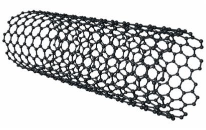
Nanociencia

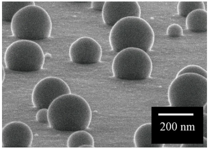
- Estudio de los fenómenos en la escala del nanómetro.
- Estudio de las propiedades de los materiales a escala del nanómetro.
- Estudio de estructuras nanométricas.

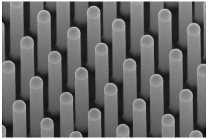
Nanotecnología

- Área de investigación con un crecimiento exponencial en la última década.
- Aplicación de los métodos de la Nanociencia para producir nuevos materiales y dispositivos.

Aplicaciones de la Nanotecnología



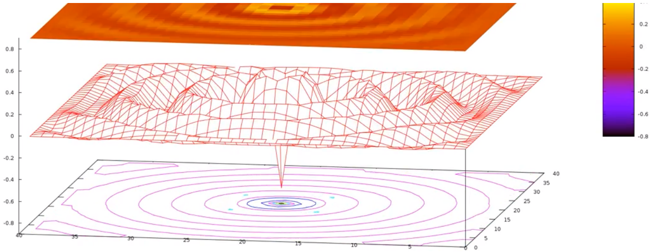




- Estudio de estructuras nanométricas para el desarrollo de dispositivos.
- Estudio de nanocompuestos, nanoalambres, nanopartículas y nanotubos de carbono que permiten mejorar las propiedades mecánicas, térmicas y eléctricas de los materiales.

La Nanotecnología Computacional

- Simulación de fenómenos a nanoescala.
- Aplicación del Método de Diferencias Finitas en el Dominio del Tiempo (FDTD) para el cálculo del campo electromagnético en la escala del nanómetro.



Las Ecuaciones de Maxwell en CGS

Las ecuaciones de Maxwell en el dominio del tiempo son

$$\nabla \times \mathbf{E}(\mathbf{x}, t) = -\frac{1}{c}\frac{\partial}{\partial t}\mathbf{B}(\mathbf{x}, t), \tag{1}$$

$$\nabla \times \mathbf{H}(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{c}\frac{\partial}{\partial t}\mathbf{D}(\mathbf{x}, t) + \frac{4\pi}{c}\mathbf{J}(\mathbf{x}, t), \tag{2}$$

$$\nabla \cdot \mathbf{D}(\mathbf{x}, t) = 4\pi\rho(\mathbf{x}, t), \tag{3}$$

$$\nabla \cdot \mathbf{B}(\mathbf{x}, t) = 0. \tag{4}$$

Las relaciones constitutivas en el dominio de la frecuencia son

$$\mathbf{D}(\mathbf{x}, \omega) = \varepsilon(\mathbf{x}, \omega)\mathbf{E}(\mathbf{x}, \omega) \tag{5}$$

$$\mathbf{B}(\mathbf{x}, \omega) = \mu(\mathbf{x}, \omega)\mathbf{H}(\mathbf{x}, \omega) \tag{6}$$

Las Transformada de Fourier

La forma general de la transformada de Fourier es

$$\mathbf{A}(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \mathbf{A}(\mathbf{x}, \omega) e^{-i\omega t} d\omega \tag{7}$$

$$\mathbf{A}(\mathbf{x}, \omega) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \mathbf{A}(\mathbf{x}, t) e^{i\omega t} dt \tag{8}$$

Se plantea un medio no dispersivo

$$\varepsilon(\mathbf{x}, \omega) = \varepsilon \tag{9}$$

$$\mu(\mathbf{x}, \omega) = \mu \tag{10}$$

Y sin fuentes de carga ni corriente

$$\rho(\mathbf{x}, t) = 0, \tag{11}$$

$$\mathbf{J}(\mathbf{x}, t) = 0 \tag{12}$$

Las Ecuaciones de Maxwell en CGS

Las ecuaciones de Maxwell se escriben

$$\nabla \times \mathbf{E}(\mathbf{x}, t) = -\frac{\mu}{c}\frac{\partial}{\partial t}\mathbf{H}(\mathbf{x}, t), \tag{13}$$

$$\nabla \times \mathbf{H}(\mathbf{x}, t) = \frac{\varepsilon}{c}\frac{\partial}{\partial t}\mathbf{E}(\mathbf{x}, t), \tag{14}$$

$$\nabla \cdot \mathbf{E}(\mathbf{x}, t) = 0, \tag{15}$$

$$\nabla \cdot \mathbf{H}(\mathbf{x}, t) = 0. \tag{16}$$

A partir de estas ecuaciones se puede obtener la ecuación de onda para el campo eléctrico

$$\nabla^2\mathbf{E}(\mathbf{x}, t) = \frac{\mu\varepsilon}{c^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2}\mathbf{E}(\mathbf{x}, t) \tag{17}$$

Polarización

Se considera una polarización del campo eléctrico de la forma

$$\mathbf{E}(\mathbf{x}, t) = \hat{k} E_z(y, t) \tag{18}$$

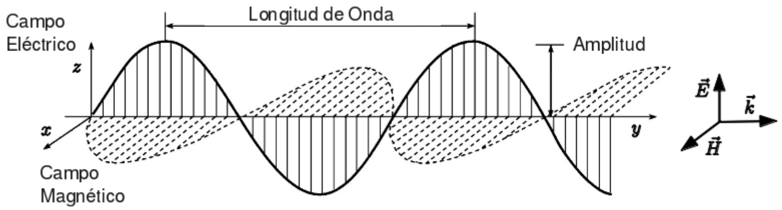


Figura 1: Polarización de onda electromagnética

Ahora se puede escribir la ecuación de onda

$$\frac{\partial^2}{\partial y^2} E_z(y, t) = \frac{\mu\varepsilon}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} E_z(y, t) \tag{19}$$

Separación de Variables

Se considera una separación de variables en la forma

$$E_z(y,t) = Y(y)T(t) \tag{20}$$

De esta forma se tiene que

$$\frac{1}{Y(y)}\frac{\partial^2}{\partial y^2}Y(y) = \frac{\mu\varepsilon}{c^2}\frac{1}{T(t)}\frac{\partial^2}{\partial t^2}T(t) \tag{21}$$

Cada una de las ecuaciones de segundo orden se puede igualar a una constante arbitraria que puede ser positiva o negativa

$$\frac{\partial^2}{\partial y^2}Y(y) = \pm k_y^2 Y(y), \tag{22}$$

$$\frac{\partial^2}{\partial t^2}T(t) = \pm \omega^2 T(t). \tag{23}$$

Soluciones Armónicas y Exponenciales

Soluciones Armónicas para $Y(y)$: Caso $-k_y^2$
Para este caso se tiene la ecuación diferencial

$$\frac{\partial^2}{\partial y^2} Y(y) = -k_y^2 Y(y) \tag{24}$$

$$Y(y) = Y_1 \cos(k_y y) + Y_2 \sin(k_y y) \tag{25}$$

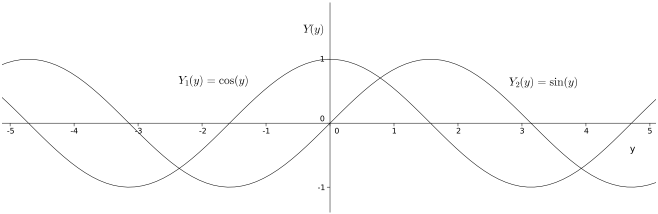


Figura 2: Soluciones armónicas

Soluciones Armónicas y Exponenciales

Soluciones Exponenciales para $Y(y)$: Caso $+k_y^2$

Para este caso se tiene la ecuación diferencial

$$\frac{\partial^2}{\partial y^2} Y(y) = +k_y^2 Y(y) \tag{26}$$

$$Y(y) = Y_3 e^{-k_y y} + Y_4 e^{+k_y y} \tag{27}$$

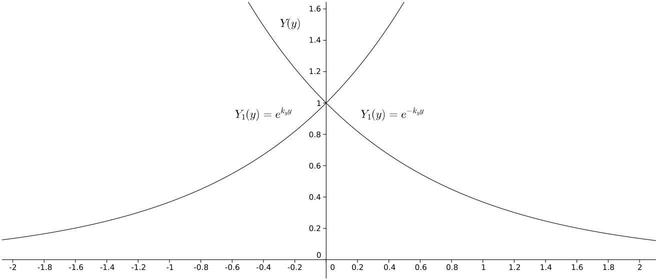


Figura 3: **Soluciones exponenciales**

Separación de Variables

Se considera una polarización de la forma

$$\mathbf{E}(\mathbf{x}, t) = \hat{k} E_z(x, y, t) \tag{28}$$

Ahora se puede escribir la ecuación de onda de la forma

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2}\right) E_z(x, y, t) = \frac{\mu\varepsilon}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} E_z(x, y, t) \tag{29}$$

Se considera que

$$E_z(x, y, t) = X(x) Y(y) T(t) \tag{30}$$

Así, mediante la separación de variables se puede escribir

$$\frac{1}{X(x)} \frac{\partial^2}{\partial x^2} X(x) + \frac{1}{Y(y)} \frac{\partial^2}{\partial y^2} Y(y) = \frac{\mu\varepsilon}{c^2} \frac{1}{T(t)} \frac{\partial^2}{\partial t^2} T(t) \tag{31}$$

Condiciones para Regiones Oscilantes y Decadentes

Para el término en $Y(y)$ y $T(t)$ se proponen soluciones armónicas de la forma

$$Y(y) = Y^{+}e^{ik_y y} + Y^{-}e^{-ik_y y} \tag{32}$$

$$T(t) = T^{+}e^{i\omega t} + T^{-}e^{-i\omega t} \tag{33}$$

De esta manera se puede escribir la ecuación 31 en la forma

$$\frac{1}{X(x)}\frac{\partial^2}{\partial x^2}X(x) - k_y^2 = -k^2 \tag{34}$$

Donde

$$k^2 = \mu\varepsilon\frac{\omega^2}{c^2} \tag{35}$$

Entonces se tiene

$$\frac{1}{X(x)}\frac{\partial^2}{\partial x^2}X(x) = -k^2 + k_y^2 \tag{36}$$

Condiciones para Regiones Oscilantes y Decadentes

Ahora se procede a identificar dos casos, $k > k_y$ y $k < k_y$

Caso $k > k_y$

En este caso se tiene que $-k^2 + k_y^2 < 0$, así se propone

$$X(x) = X^+ e^{ik_x x} + X^- e^{-ik_x x} \tag{37}$$

De esta manera

$$k_x = \sqrt{k^2 - k_y^2} \tag{38}$$

Caso $k < k_y$

En este caso se tiene que $-k^2 + k_y^2 > 0$, así se propone

$$X(x) = X^+ e^{k_x x} + X^- e^{-k_x x} \tag{39}$$

De esta manera

$$k_x = \sqrt{k_y^2 - k^2} \tag{40}$$

Condiciones para Regiones Oscilantes y Decadentes

De esta forma se tiene que si

$$k > k_y \quad \Longrightarrow \quad k_x = \sqrt{k^2 - k_y^2} \tag{41}$$

Se tienen ondas armónicas, por otro lado si

$$k < k_y \quad \Longrightarrow \quad k_x = \sqrt{k_y^2 - k^2} \tag{42}$$

Se tienen ondas decadentes

Las Líneas de Luz

El valor límite de estas dos regiones es

$$k_y^2 - k^2 = 0 \tag{43}$$

De esta manera se puede escribir

$$k_y^2 = \mu\varepsilon\frac{\omega^2}{c^2} \tag{44}$$

A esto se le llama la línea de luz, ya que define la división entre las regiones. La cual se puede graficar manipulando la ecuación

$$\omega = \frac{c}{\sqrt{\mu\varepsilon}}k_y \tag{45}$$

Las Líneas de Luz

Soluciones oscilantes y decadentes para un medio homogéneo

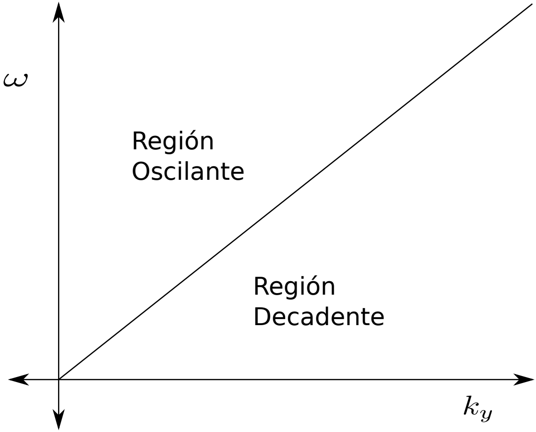


Figura 4: Regiones oscilantes y decadentes

Definición del Sistema

Se considera una función dieléctrica de la forma

$$\varepsilon(x) = \begin{cases} \varepsilon_b & x < -d/2 \\ \varepsilon_a & -d/2 < x < d/2 \\ \varepsilon_b & x > d/2 \end{cases} \tag{46}$$

La placa central tiene una *alta* función dieléctrica ε_a mientras que el medio externo tiene una *baja* función dieléctrica ε_b. Para tener ondas guiadas se requiere que $\varepsilon_a > \varepsilon_b$.

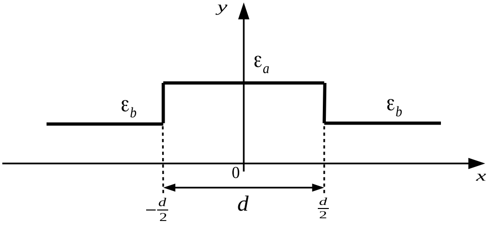


Figura 5: Función dieléctrica de una guía plana

Campo Eléctrico

Para obtener modos con polarización (TM) guiados por ε_a se escoge el campo eléctrico de la forma

$$\mathbf{E}(\mathbf{x}, t) = \hat{k} E_z(x) \cos(k_y y) \cos(\omega t), \tag{47}$$

El $\cos(k_y y)$ y $\cos(\omega t)$ definen una propagación armónica en espacio y tiempo. La dependencia en el eje x se escoge de la forma

$$E_z(x) = \begin{cases} Ae^{+k_{bx}\left(\frac{x+\frac{d}{2}}{d}\right)} & x < -\frac{d}{2} \\ B_1 \cos(k_{ax} x) + B_2 \sin(k_{ax} x) & -\frac{d}{2} < x < \frac{d}{2} \\ Ce^{-k_{bx}\left(\frac{x-\frac{d}{2}}{d}\right)} & x > \frac{d}{2} \end{cases} \tag{48}$$

Esta relación define que el campo al interior de la placa es armónico y al exterior es evanescente.

Vectores de Onda

Los vectores de onda k_{ax} y k_{bx} se obtienen a partir de las relaciones

$$k_{ax} = \sqrt{k_a^2 - k_y^2} \tag{49}$$

$$k_{bx} = \sqrt{k_y^2 - k_b^2}. \tag{50}$$

Los vectores de onda en cada medio son

$$k_a = n_a \frac{\omega}{c} \tag{51}$$

$$k_b = n_b \frac{\omega}{c}, \tag{52}$$

Donde los índices de refracción son $n_a = \sqrt{\varepsilon_a \mu_a}$ y $n_b = \sqrt{\varepsilon_b \mu_b}$.

Unidades Reducidas

Estas condiciones establecen que la condición de modos es

$$k_a \geq k_y \geq k_b, \tag{53}$$

Ahora bien, se continúa introduciendo el vector de onda reducido en cada uno de los materiales en la forma

$$Q_a = k_a \frac{d}{2\pi}, \tag{54}$$

$$Q_b = k_b \frac{d}{2\pi}. \tag{55}$$

La frecuencia reducida se define como

$$\Omega = \omega \frac{d}{2\pi c} \tag{56}$$

Los vectores de onda en cada uno de los medios son

$$Q_a = n_a \Omega, \tag{57}$$

$$Q_b = n_b \Omega. \tag{58}$$

Región de Modos Guiados

Se tiene que la condición de modos guiados en términos de vector de onda reducidos $Q_a \geq Q_y \geq Qb$ donde $Q_y = k_y \frac{d}{2\pi}$

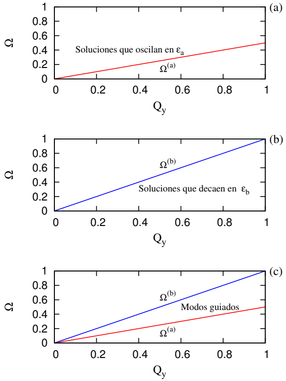


Figura 6: **Región de modos**

Caso Par $(B_2 = 0)$

En la ecuación 48 cuando $B_2 = 0$ tenemos el caso en que el campo eléctrico tiene una polarización par con respecto al eje x como se muestra en la relación

$$E_z(x) = \begin{cases} Ae^{2\pi Q_{bx}\left(\frac{x+\frac{d}{2}}{d}\right)} & x < -\frac{d}{2} \\ B_1 \cos(2\pi Q_{ax} x) & -\frac{d}{2} < x < \frac{d}{2} \\ Ce^{-2\pi Q_{bx}\left(\frac{x-\frac{d}{2}}{d}\right)} & x > \frac{d}{2} \end{cases} \tag{59}$$

Donde el primer y el tercer caso indican campos evanescentes respectivamente, mientras el segundo caso indica un campo oscilante

Caso Par $(B_2 = 0)$

El campo magnético tangencial con respecto al eje x tiene la forma

$$H_y(x) = \begin{cases} A(\frac{2\pi}{d})Q_{bx}e^{2\pi Q_{bx}\left(\frac{x+\frac{d}{2}}{d}\right)} & x < -\frac{d}{2} \\ -B_1(\frac{2\pi}{d})Q_{ax}\sin(2\pi Q_{ax}x) & -\frac{d}{2} < x < \frac{d}{2} \\ -C(\frac{2\pi}{d})Q_{bx}e^{-2\pi Q_{bx}\left(\frac{x-\frac{d}{2}}{d}\right)} & x > \frac{d}{2} \end{cases} \qquad (60)$$

La condición de continuidad del campo eléctrico tangencial en $x = -d/2$ se tiene

$$A = B_1 cos(\pi Q_{ax}) \qquad (61)$$

La continuidad del campo magnético tangencial en $x = -d/2$ define la relación

$$AQ_{bx} = -B_1 Q_{ax} sin(-\pi Q_{ax}) \qquad (62)$$

Caso Par ($B_2 = 0$)

Dividiendo la ecuación 62 sobre 61 se tiene que la condición de modos pares es

$$\tan(\pi Q_{ax}) = \frac{Q_{bx}}{Q_{ax}} \tag{63}$$

Esta es una ecuación trascendente que es necesario resolver en forma numérica. Es conveniente escribirla en la forma

$$\tan(\pi\sqrt{n_a^2\Omega^2 - Q_y^2}) = \frac{\sqrt{Q_y^2 - n_b^2\Omega^2}}{\sqrt{n_a^2\Omega^2 - Q_y^2}} \tag{64}$$

Caso Impar ($B_1 = 0$)

En la ecuación 48 cuando $B_1 = 0$ se tiene el caso en que el campo eléctrico tiene una polarización impar con respecto al eje x como se muestra en la relación

$$E_z(x) = \begin{cases} Ae^{2\pi Q_{bx}\left(\frac{x+\frac{d}{2}}{d}\right)} & x < -\frac{d}{2} \\ B_2 \sin(2\pi Q_{ax} x) & -\frac{d}{2} < x < \frac{d}{2} \\ Ce^{-2\pi Q_{bx}\left(\frac{x-\frac{d}{2}}{d}\right)} & x > \frac{d}{2} \end{cases} \quad (65)$$

Donde el primer y el tercer caso indican campos evanescentes respectivamente, mientras el segundo caso indica un campo oscilante

Caso Impar ($B_1 = 0$)

El campo magnético tangencial con respecto al eje x tiene la forma

$$H_y(x) = \begin{cases} A(\frac{2\pi}{d})Q_{bx}e^{2\pi Q_{bx}\left(\frac{x+\frac{d}{2}}{d}\right)} & x < -\frac{d}{2} \\ B_1(\frac{2\pi}{d})Q_{ax}\cos(2\pi Q_{ax}x) & -\frac{d}{2} < x < \frac{d}{2} \\ -C(\frac{2\pi}{d})Q_{bx}e^{-2\pi Q_{bx}\left(\frac{x-\frac{d}{2}}{d}\right)} & x > \frac{d}{2} \end{cases} \tag{66}$$

La condición de continuidad del campo eléctrico tangencial en $x = -d/2$ se tiene

$$A = B_2\sin(-\pi Q_{ax}) \tag{67}$$

La continuidad del campo magnético tangencial en $x = -d/2$ define la relación

$$AQ_{bx} = B_1 Q_{ax}\cos(-\pi Q_{ax}) \tag{68}$$

Caso Impar ($B_1 = 0$)

Dividiendo la ecuación 67 sobre 68 se tiene que la condición de modos impares es

$$\cot(\pi Q_{ax}) = -\frac{Q_{bx}}{Q_{ax}} \tag{69}$$

Esta es una ecuación trascendente que es necesario resolver en forma numérica. Es conveniente escribirla en la forma

$$\cot\left(\pi\sqrt{n_a^2\Omega^2 - Q_y^2}\right) = -\frac{\sqrt{Q_y^2 - n_b^2\Omega^2}}{\sqrt{n_a^2\Omega^2 - Q_y^2}} \tag{70}$$

Graficando la Ecuación Trascendente

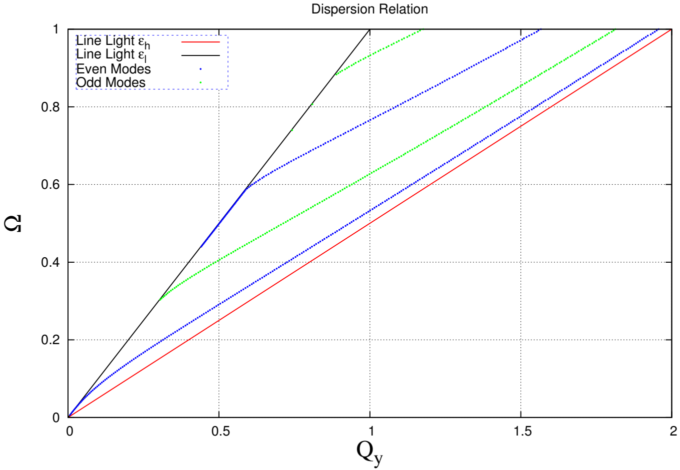


Figura 7: Relación de dispersión de una guía de ondas electromagnéticas

Introducción

- El Método de Diferencias Finitas en el Dominio del Tiempo (FDTD) fue propuesto originalmente por Kane S. Yee en su artículo publicado en 1966.
- Yee propuso una solución discreta de las ecuaciones de Maxwell en base en aproximaciones de diferencias centrales de las derivadas espaciales y temporales de las ecuaciones rotacionales.
- La novedad del enfoque de Yee fue el escalonamiento de los campos eléctricos y magnéticos en el espacio y tiempo.

Las Ecuaciones de Maxwell en un Medio Dieléctrico

Se plantea la propagación de las ondas electromagnéticas a través de las ecuaciones rotacionales de Maxwell y las relaciones constitutivas en un medio dieléctrico en la forma

$$\frac{\partial}{\partial t}\mathbf{B}(\mathbf{x},t) = -c\nabla \times \mathbf{E}(\mathbf{x},t) \tag{71}$$

$$\mathbf{H}(\mathbf{x},t) = \frac{1}{\mu(\mathbf{x})}\mathbf{B}(\mathbf{x},t) \tag{72}$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\mathbf{D}(\mathbf{x},t) = c\nabla \times \mathbf{H}(\mathbf{x},t) \tag{73}$$

$$\mathbf{E}(\mathbf{x},t) = \frac{1}{\varepsilon(\mathbf{x})}\mathbf{D}(\mathbf{x},t) \tag{74}$$

Propagación de Ondas Electromagnéticas en 1D - Análisis

Se considera una polarización para el campo eléctrico de la forma

$$\mathbf{E}(\mathbf{x}, t) = \hat{k} E_z(y, t) \tag{75}$$

Desarrollando los rotacionales de las ecuaciones de Faraday y Ampere-Maxwell se tiene

$$\nabla \times \mathbf{E}(\mathbf{x}, t) = +\frac{\partial}{\partial y} E_z(y, t)\hat{j} \tag{76}$$

$$\nabla \times \mathbf{H}(\mathbf{x}, t) = -\frac{\partial}{\partial y} H_x(y, t)\hat{k} \tag{77}$$

De esta forma se puede escribir

$$\frac{\partial}{\partial t} B_x(y, t) = -c\frac{\partial}{\partial y} E_z(y, t) \tag{78}$$

$$\frac{\partial}{\partial t} D_z(y, t) = -c\frac{\partial}{\partial y} H_x(y, t) \tag{79}$$

Propagación de Ondas Electromagnéticas en 1D - Discretización

Utilizando las ecuaciones obtenidas se pueden establecer las ecuaciones restantes

$$E_z(y,t) = \frac{1}{\varepsilon(y)} D_z(y,t), \tag{80}$$

$$H_x(y,t) = \frac{1}{\mu(y)} B_x(y,t). \tag{81}$$

Para lograr una formulación discreta de estas ecuaciones, es necesario aproximar las derivadas espacial y temporal en forma de diferencias finitas centrales.

$$\frac{d}{dy} f(y) \simeq \frac{f(y+\Delta y/2) - f(y-\Delta y/2)}{\Delta y} \tag{82}$$

Propagación de Ondas Electromagnéticas en 1D - Algoritmo

Se reorganizan las ecuaciones en forma recursiva para formar un algoritmo computacional

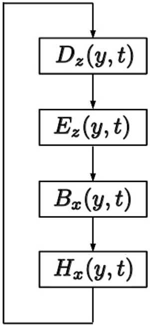


Figura 8: **Algoritmo de actualización de campos**

Propagación de Ondas Electromagnéticas en 1D

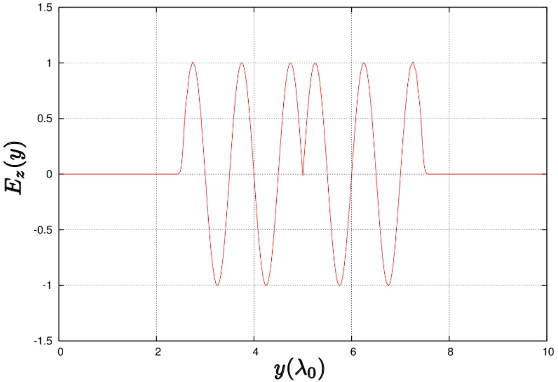


Figura 9: Campo eléctrico debido a una fuente de la forma $E(t) = \Theta(t) sin(\omega_0 t)$

Propagación del Campo Electromagnético en una Multicapa en 1D

Se presenta (a) Multicapa finita compuesta por la repetición periódica de 10 celdas unitarias de espesor d. (b) Celda unitaria compuesta por dos películas delgadas con alta (ε_A) y baja (ε_B) función dieléctrica y espesores d_A y d_B.

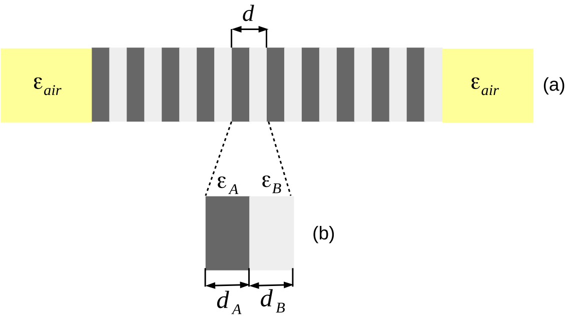


Figura 10: Propagación en multicapa.

Propagación de un Pulso a través de una Multicapa en 1D

Pulso incidiendo de izquierda a derecha hacia una mulicapa.

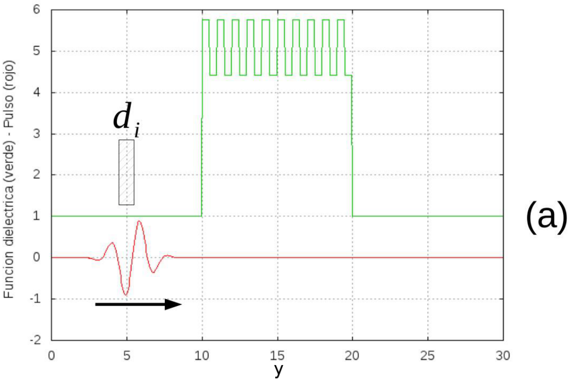


Figura 11: Propagación de un pulso a través de una multicapa.

Propagación de un Pulso a través de una Multicapa en 1D

Pulso que viaja al interior de una multicapa.

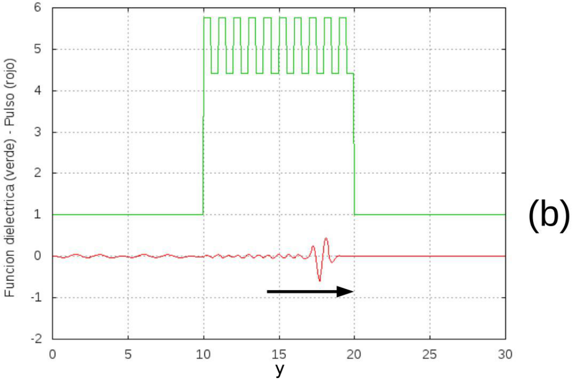
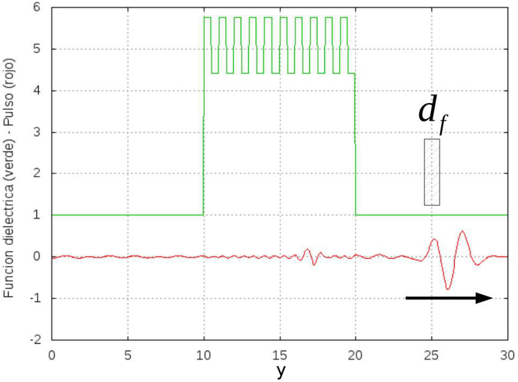


Figura 12: Propagación de un pulso a través de una multicapa.

Propagación de un Pulso a través de una Multicapa en 1D

Pulso que viaja hacia afuera de la multicapa.



(c)

Figura 13: **Propagación de un pulso a través de una multicapa.**

Propagación de un Pulso a través de una Multicapa en 1D

El pulso incidente está compuesto por una componente gaussiana y una componente sinusoidal de la forma

$$E_i(t) = E_o \sin(\omega t) \exp\left[-\frac{1}{2}\frac{(t-t_0)^2}{\sigma^2}\right] \tag{83}$$

Donde ω es la componente monocromática del pulso, t_0 define el centro temporal del pulso gaussiano, σ es el ancho del pulso temporal. La transformada de Fourier se define mediante la relación

$$E_z(\omega) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} E_z(t) e^{i\omega t} dt \tag{84}$$

Propagación de un Pulso a través de una Multicapa en 1D

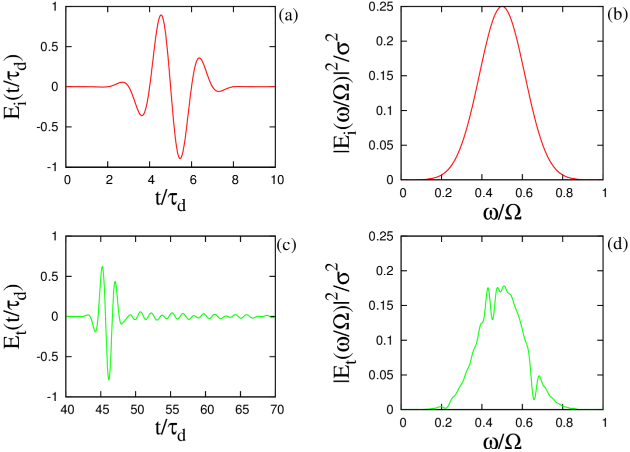


Figura 14: **(a) Distribución temporal del pulso incidente E_i(t). (b) Distribución en frecuencias del pulso incidente $E_i(\omega)$. (c) Distribución temporal del pulso transmitido E_t(t). (d) distribución en frecuencias del pulso transmitido $E_t(\omega)$**

La transmisión a través de la multicapa

La transmisión a través de la multicapa se calcula a través de la relación

$$T(\omega) = \frac{|E_t(\omega)|^2}{|E_i(\omega)|^2} \tag{85}$$

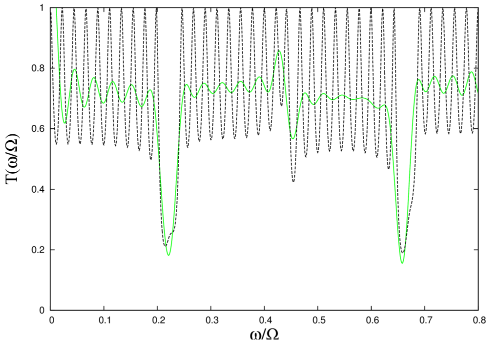
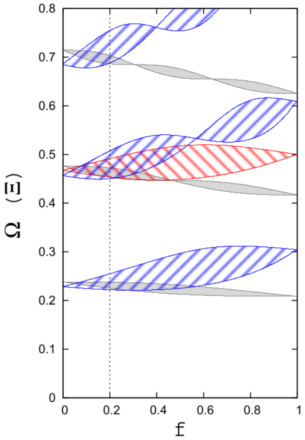


Figura 15: Transmisión a través de una multicapa.

La transmisión a través de la multicapa

Es posible observar la relación de la Figura 15 con la Figura 16, considerando un factor de llenado $f = 0{,}5$, donde coincide la región de bandas prohibidas y bandas permitidas.



Propagación de Ondas EM en 2D Caso TM - Análisis

El caso TM se define por la existencia de los campos $E_z(x,y,t)$, $H_x(x,y,t)$ y $H_y(x,y,t)$.

Se inicia el análisis definiendo la polarización para el campo eléctrico de la forma

$$\mathbf{E}(\mathbf{x},t) = \hat{k}E_z(x,y,t) \tag{86}$$

El rotacional del campo eléctrico es

$$\nabla \times \mathbf{E}(\mathbf{x},t) = \begin{vmatrix} \hat{i} & \hat{j} & \hat{k} \\ \frac{\partial}{\partial x} & \frac{\partial}{\partial y} & \frac{\partial}{\partial z} \\ 0 & 0 & E_z(x,y,t) \end{vmatrix} \tag{87}$$

Propagación de Ondas EM en 2D Caso TM - Análisis

Los campos magnéticos asociados son obtenidos a través de las ecuaciones

$$\frac{\partial}{\partial t} B_x(x, y, t) = -\frac{\partial}{\partial y} E_z(x, y, t) \tag{88}$$

$$\frac{\partial}{\partial t} B_y(x, y, t) = +\frac{\partial}{\partial x} E_z(x, y, t) \tag{89}$$

La relación constitutiva magnética da lugar siguientes relaciones

$$H_x(x, y, t) = \frac{1}{\mu(x, y)} B_x(x, y, t) \tag{90}$$

$$H_y(x, y, t) = \frac{1}{\mu(x, y)} B_y(x, y, t) \tag{91}$$

Propagación de Ondas EM en 2D Caso TM - Análisis

El rotacional para el campo magnético es

$$\nabla \times \mathbf{H}(\mathbf{x}, t) = \begin{vmatrix} \hat{i} & \hat{j} & \hat{k} \\ \frac{\partial}{\partial x} & \frac{\partial}{\partial y} & \frac{\partial}{\partial z} \\ H_x(x, y, t) & H_y(x, y, t) & 0 \end{vmatrix} \qquad (92)$$

La ecuación de Ampere-Maxwell da lugar a la relación

$$\frac{\partial}{\partial t} D_z(x, y, t) = c \frac{\partial}{\partial x} H_y(x, y, t) - c \frac{\partial}{\partial y} H_x(x, y, t) \qquad (93)$$

Es conveniente agrupar las ecuaciones rotacionales de Maxwell y las relaciones constitutivas en la siguiente forma

$$\frac{\partial}{\partial t} D_z(x, y, t) = c \frac{\partial}{\partial x} H_y(x, y, t) - c \frac{\partial}{\partial y} H_x(x, y, t) \qquad (94)$$

Propagación de Ondas EM en 2D Caso TM - Algoritmo

$$E_z(x,y,t) = \frac{1}{\varepsilon(x,y)} D_z(x,y,t), \tag{95}$$

$$\frac{\partial}{\partial t} B_x(x,y,t) = -c\frac{\partial}{\partial y} E_z(x,y,t), \tag{96}$$

$$H_x(x,y,t) = \frac{1}{\mu(x,y)} B_x(x,y,t), \tag{97}$$

$$\frac{\partial}{\partial t} B_y(x,y,t) = c\frac{\partial}{\partial x} E_z(x,y,t), \tag{98}$$

$$H_y(x,y,t) = \frac{1}{\mu(x,y)} B_y(x,y,t). \tag{99}$$

Para lograr una formulación discreta de estas ecuaciones, es necesario aproximar las derivadas espacial y temporal en forma de diferencias finitas centrales.

Propagación de Ondas EM en 2D Caso TM - Algoritmo

Se reorganizan las ecuaciones en forma recursiva para formar un algoritmo computacional

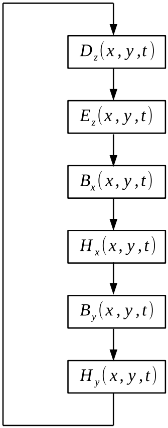


Figura 17: Algoritmo de Actualización de Campos

Propagación de Ondas EM en 2D caso TM

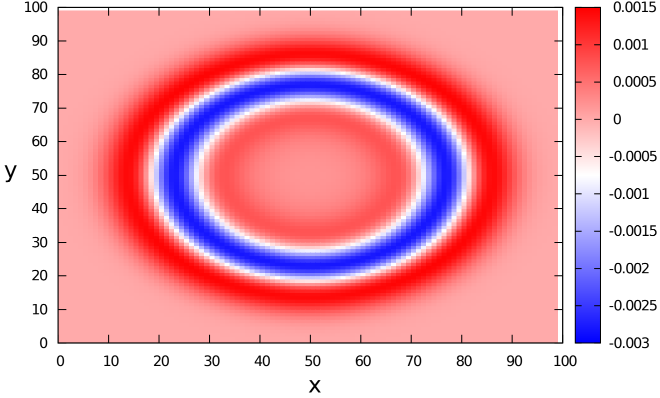


Figura 18: Campo eléctrico en dos dimensiones

Phoxonics

Phoxonics

- Diseñado para fotónica y fonónica. Por ahora solo implementa fotónica
- Software creado durante la investigación doctoral
- Desarrollado en C++
- Soporta 1D y 2D
- Cuenta con un editor web para diseñar simulaciones
- Utiliza el estándar HDF5 para guardar datos y visualización
- Soporta simulaciones en tiempo real
- Cuenta con un sistema de configuración utilizando JSON
- Soporta el formato SVG para importar geometrías
- Arquitectura desacoplada y en forma de librerías

Phoxonics - Problemas a resolver

1. Necesidad de integrar múltiples métodos numéricos.
   - Se quiere poder resolver múltiples ecuaciones.

   Solución:
   - Phoxonics implementa un sistema de abstracciones y un mecanismo de instanciación genérico.
2. Necesidad de crear geometrías arbitrarias.
   - Se pretende poder crear geometrías arbitrarias.

   Solución:
   - Phoxonics implementa un editor de simulaciones son soporte para importar geometrías en SVG.
3. Necesidad de un diseño paralelizable.
   - Se quiere poder resolver las ecuaciones en paralelo.

   Solución:
   - Phoxonics todavía no soporta paralelización, pero se ha diseñado para soportarla.

Phoxonics - Entidad Simulation

Representa una simulación y contiene las entidades relacionadas a la misma.

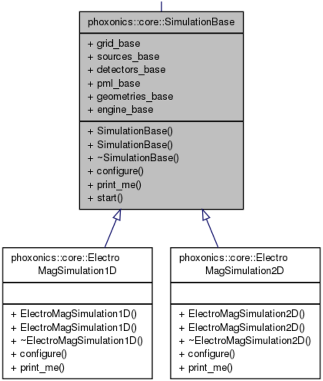


Figura 19: Entidad Simulation

Phoxonics - Entidad Grid

Representa una malla de simulación la cual a su vez contiene celdas.

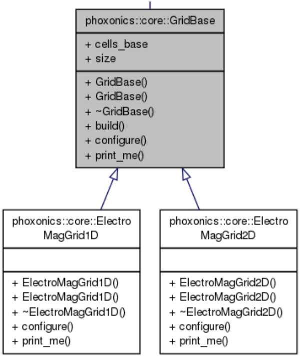


Figura 20: **Entidad Grid**

Phoxonics - Entidad Cells

Representa un grupo de celdas en la malla de simulación de una o dos dimensiones.

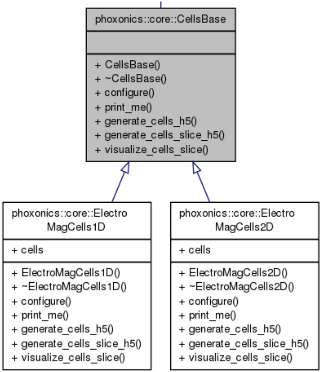


Figura 21: Entidad Cells

Phoxonics - Entidad Material

Representa un tipo de material, se utiliza en las celdas y en las geometrías para definir de que tipo de material están constituidos.

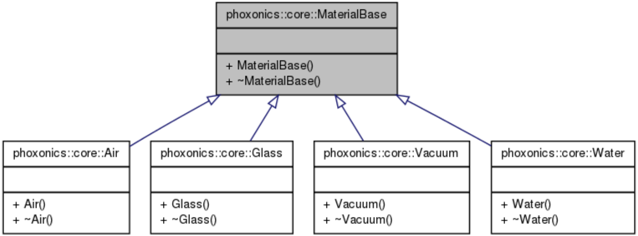


Figura 22: Entidad Material

Phoxonics - Entidad Geometry

Representa una geometría en la simulación, se pueden definir una cantidad ilimitada de geometrías de materiales distinto.

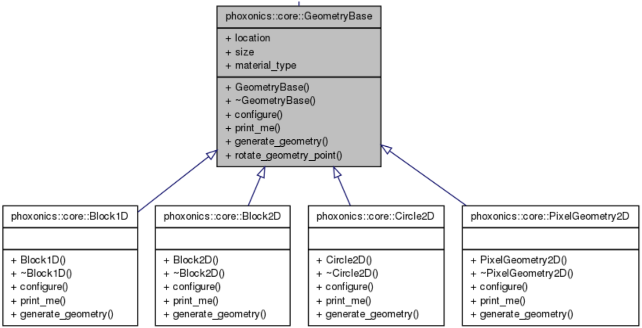


Figura 23: **Entidad Geometry**

Phoxonics - Entidad Source

Representa una fuente en la simulación, se pueden definir una cantidad ilimitada de fuentes en diferentes lugares de la malla de simulación, de distintos tamaños y de diferente tipo.

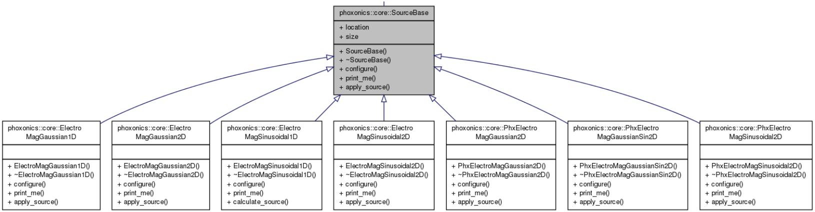


Figura 24: Entidad Source

Phoxonics - Entidad Detector

Representa un detector en la simulación. Se pueden definir una cantidad ilimitada de detectores en diferentes lugares de la malla de simulación y de diferentes tamaños.

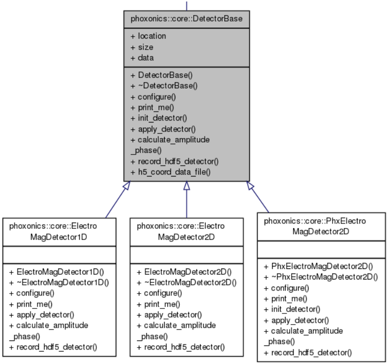


Figura 25: **Entidad Detector**

Phoxonics - Entidad Pml

Representa la capa de absorción perfecta en la simulación.

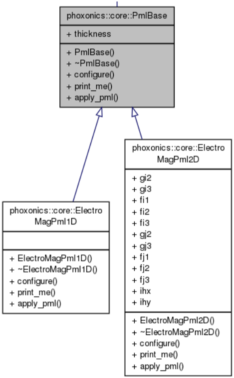


Figura 26: Entidad Pml

Phoxonics - Entidad Engine

Representa el motor de cálculo a utilizar en la simulación.

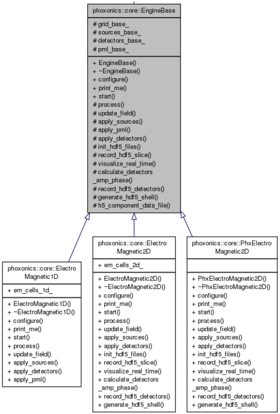


Figura 27: **Entidad Engine**

Phoxonics - Mecanismo de Configuración

Se utiliza JSON para manejar la configuración de simulaciones, las configuraciones están divididas en secciones que se asemejan a las entidades.

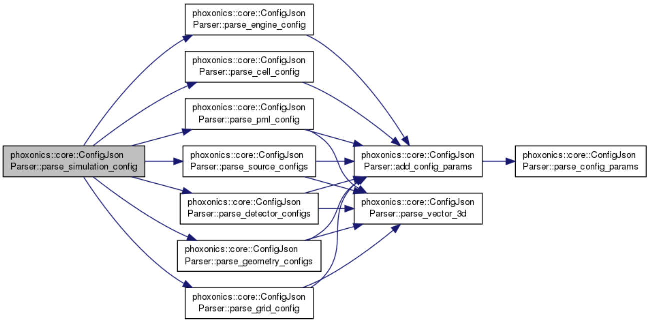


Figura 28: **Mecanismo de Configuración**

Phoxonics - Administrador de Simulaciones

Se encarga de iniciar, terminar y administrar el estado de simulaciones.

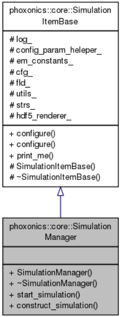


Figura 29: Administrador de Simulaciones

Phoxonics - Construcción de la simulación

Consta de dos partes, la primera es una clase que genera las celdas, geometrías y la simulación. La segunda es utilizar el patrón factory para instanciar las entidades de simulación.

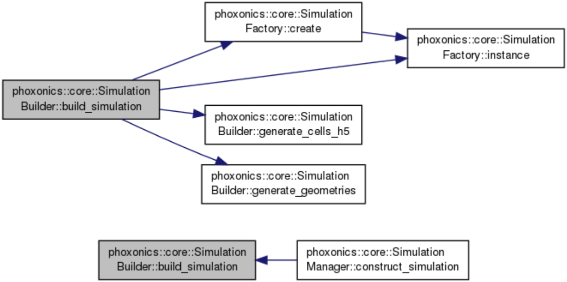


Figura 30: Construcción de Simulaciones

Phoxonics - Editor Web

Es la parte gráfica del software en donde el usuario final elige opciones y construye simulaciones.

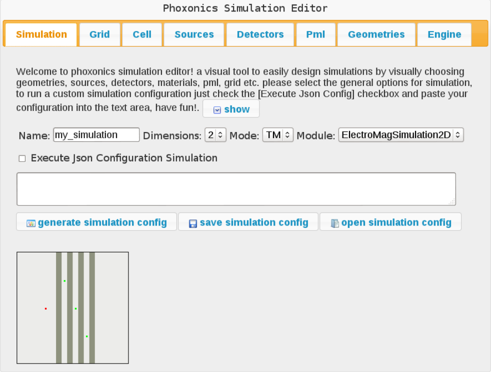


Figura 31: **Editor Web**

Phoxonics - Editor Web

Geometría de la simulación generada a partir de los archivos de datos HDF5, en este caso se generaron cuatro bloques de vidrio y una fuente que emite campo.

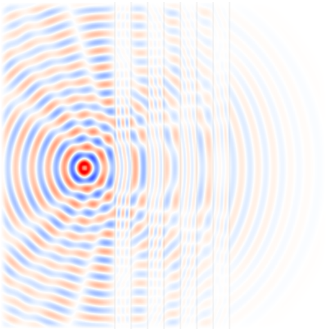
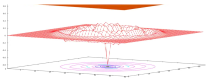
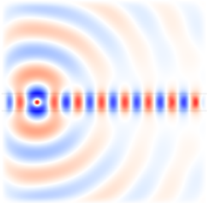


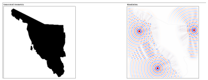
Figura 32: Simulación - Campo Electromagnético

Phoxonics - Videos

1. Visualización en tiempo real.
2. Editor web para simulaciones amigables.
3. Soporte del formato vectorizado para importar geometrías.





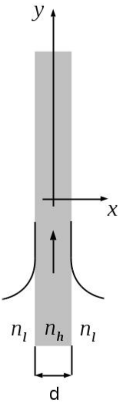


Resumen

1. Se estudia la propagación de la luz en una guía de ondas en la escala de la longitud de onda donde existe un doblez.
2. Se observa la conversión de modos de una onda guiada con un perfil simétrico que incide en el doblamiento de una guía de onda.
3. La conversión de modos a través del doblamiento se cuantifica mediante el cálculo de la transformada de Fourier del perfil del campo eléctrico.
4. Se descubre que la tasa de conversión del doblamiento es una función del ángulo.

Teoría

se presenta la geometría básica de una guía de onda plana compuesta de un bloque de alto índice de refracción (n_h) de diámetro d entre dos medios semi-infinitos de bajo índice de refracción (n_l).



Teoría

La relación de dispersión se obtiene resolviendo numéricamente dos ecuaciones trascendentes. Por un lado, la condición para los eigenmodos pares con respecto al eje x es

$$\tan(\pi Q_{x,h}) = \frac{Q_{x,l}}{Q_{x,h}}. \tag{100}$$

Por otro lado, la condición para los eigenmodos impares es

$$\cot(\pi Q_{x,h}) = -\frac{Q_{x,l}}{Q_{x,h}}. \tag{101}$$

Los vectores de onda reducidos en el eje x para los medios de alto y bajo índice de refracción son

$$Q_{x,h} = \sqrt{n_h^2 \Omega^2 - Q_y^2} \tag{102}$$

$$Q_{x,l} = \sqrt{Q_y^2 - n_l^2 \Omega^2} \tag{103}$$

Teoría

La frecuencia reducida es

$$\Omega = \frac{\omega d}{2\pi c}, \tag{104}$$

Y el vector de onda reducido en el eje y es

$$Qy = \frac{k_y d}{2\pi}. \tag{105}$$

A continuación se presenta la relación de dispersión para la guía de onda plana. Los índices de refracción altos y bajos son $n_h = 2$ y $n_l = 1$.

Teoría

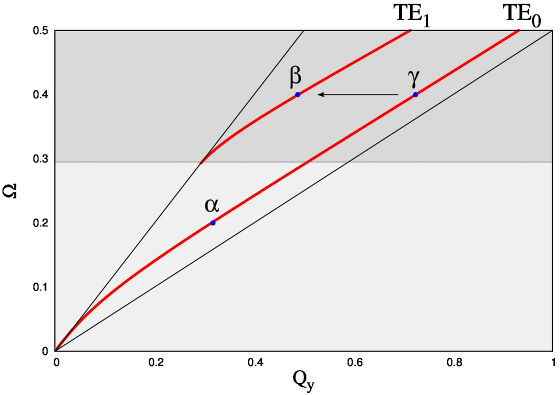


Figura 33: Relación de dispersión para una guía de onda plana. Las regiones gris claro y obscuro son los regímenes monomodal y multimodal. Los puntos α y γ pertenecen al modo TE_0 mientras que el punto β es parte del modo TE_1.

Teoría

Se observa que los modos TE_0 correspondientes a los eigenmodos α y γ (a) y (c) tienen una simetría par. Y el modo TE_1 que corresponde al eigenmodo β en (b) tiene una simetría impar.

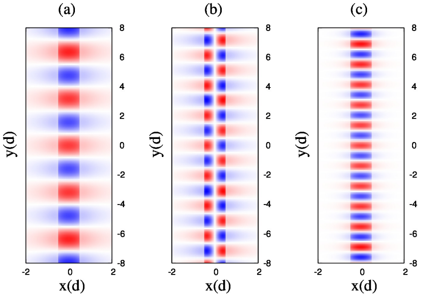


Figura 34: **Perfil de campo eléctrico para los eigenmodos α, β y γ se presentan en (a), (b) y (c).**

Método Numérico

En la figura 35(a) y 35(c) la distribución espacial del modo TE_0 se ilustra cuando las fuentes están emitiendo en las frecuencias reducidas $\Omega = 0{,}2$ y $\Omega = 0{,}4$, respectivamente.

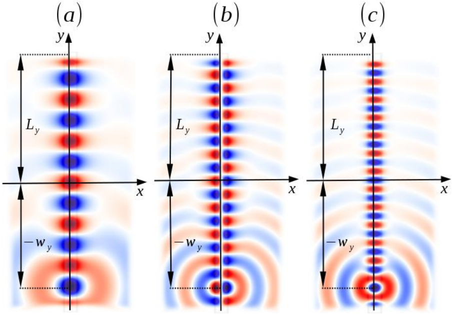


Figura 35: **Simulación de la propagación del campo eléctrico mediante FDTD. La excitación de los eigenmodos α, β y γ se presentan en (a), (b) y (c), respectivamente.**

Conversión de Modos

Se considera el caso donde el modo TE_0 incide en el doblez. En la figura se muestra una guía de onda plana con un ángulo de doblez θ cercano al origen del sistema de coordenadas.

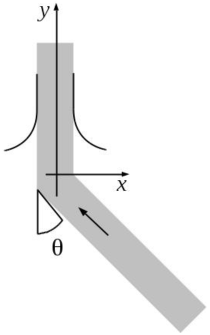


Figura 36: **Guía de onda plana con un ángulo de doblez θ. El doblez se coloca en la cercanía del origen del sistema de coordenadas.**

Conversión de Modos

Se simula la propagación de la luz en el régimen monomodal. Un perfil de haz par correspondiente al modo TE_0 con una frecuencia reducida de $\Omega = 0{,}2$ está incidiendo en el doblez de la guía de onda.

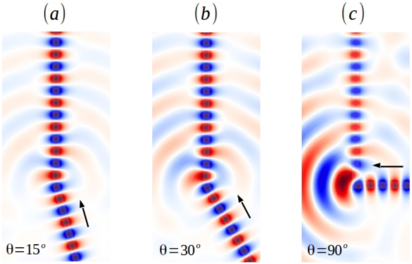


Figura 37: Propagación en el régimen monomodal ($\Omega = 0{,}2$) del modo TE_0 a través de una guía de onda con un doblez angular θ. Los casos $\theta = 15^0$, $\theta = 30^0$, y $\theta = 90^0$ se presentan en (a), (b) y (c).

Conversión de Modos

En la Figura se simula la propagación en el régimen multimodal

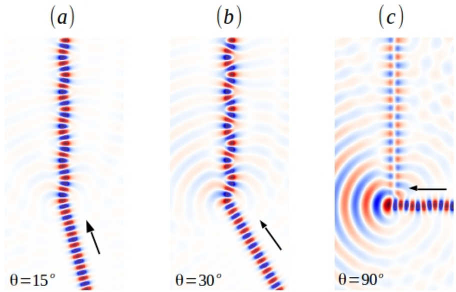


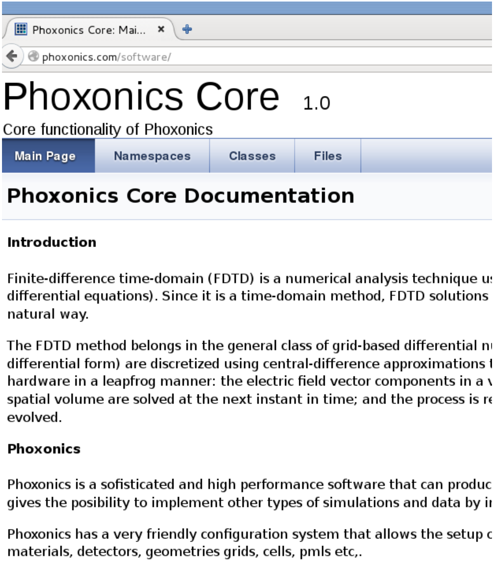
Figura 38: Propagación en el régimen multimodal ($\Omega = 0{,}4$) del modo TE_0 a través de una guía de ondas con un doblez angular θ. Los casos $\theta = 15^0$, $\theta = 30^0$ y $\theta = 90^0$ se muestran en (a), (b) y (c).

Resultados - Publicación de Libro

Publicación del libro Simulación Computacional de Nanoestructuras con Meep: Técnicas, análisis y modelado computacional en Meep con el método (FDTD)

Resultados - Desarrollo del Software Phoxonics

Creación de Phoxonics. Phoxonics es un software computacional sofisticado y flexible que utiliza el método FDTD para resolver cálculos electromagnéticos.



Resultados - Publicación de Artículos

- Mode conversion caused by bending in photonic subwavelength waveguides

ACES The Applied Computational Electromagnetics Society

- Non-perpendicular hypersonic and optical stop-bands in porous silicon multilayers

AIP Applied Physics Letters

Conclusiones

- En esta tesis se han presentado los conceptos básicos sobre nanotecnología, nanotecnología computacional, estructuras nanométricas y nanofotónica computacional entre otros. Se establecen las razones por las cuales es importante la investigación de estructuras a nanoescala.
- Se ha mostrado la forma analítica de resolver sistemas físicos. Se da a conocer el álgebra necesaria para describir los fenómenos que se quieren estudiar tomando como herramientas la física y la matemática.

Conclusiones

- Se ha descrito el método FDTD y como sus avances promueven inmensamente el desarrollo del campo de el electromagnetismo computacional y como este juega un papel cada vez más fundamental en las aplicaciones de la nanotecnología.
- Los resultados del capítulo 5 demuestran que las guías de onda nanométricas con doblez no solo transmiten luz pasivamente desde un punto a otro. En el régimen multimodal, el doblez de una guía de onda nanométrica actúa como un convertidor de modos excitando modos de alto orden. Por lo tanto, el doblez de la guía de onda debe ser considerado intrínsecamente como un dispositivo activo debido a que provoca una redistribución espacial de los campos.

Trabajo Futuro

La mayor parte del trabajo futuro involucra nuevas técnicas de optimización de en cómputo así como el desarrollo de nuevos componentes que permitirán resolver ecuaciones distintas a las electromagnéticas. Estos son los puntos contemplados

1. Soporte para 3 dimensiones
2. Análisis de submallas
3. Diseño de bloques para FDTD acústico
4. Paralelización con CPUs
5. Paralelización con GPUs

Gracias

¡Gracias!