

VII. 17 Partielle Dgl der Elektrodynamik FDTD

für Maxwelldynamik

Die Maxwellgl. (Rotationsgl.) für die Propagierung von elektromagnet. Well.

$$\frac{\partial \underline{B}}{\partial t} + \nabla \times \underline{E} = \underline{J}_B \quad \text{und} \quad \mu_0 \epsilon_0 \frac{\partial \underline{E}}{\partial t} - \nabla \times \underline{B} = \underline{J}_E$$

\uparrow für magnet. Dipol, Eisat. Nichterhaltung, kein nichtlin.
 \uparrow unterschied. Medien oder plasm. Medien
 \uparrow Entlaste z.B. die Polarisation

- 1) Diese z. Lösung hat viele Anwendungen z.B.
 - Antennen z.B. für Handy, Mikrowellen
 - Propagation in Wellenleitern
 - nanostrukturierte Systeme, z.B. Metamaterialien, photonische Kristalle, plasmonische Emittoren, Einzelphotonemitter etc.
- 2.) Typische Methode FDTD (Finite Difference Time Domain) benutzt finite (wird hier besprochen) oder Finite Element Methode (wird im nächsten Abschnitt beschrieben)
- 3.) Viele kommerzielle Solver (z.B. Lumerical, CST, RSoft) aber auch Open Source (z.B. meep).

Wie funktioniert nun FDTD? Ersteres Beispiel für Yee grid!
 (K.S. Yee, IEEE Transactions on antennas and propagation: Vol. 14(3) 802 (1966))
 and Oskooi, Comp Phys (1981) 684-702 (...)

Gleichung als Komponenten:

$$\frac{\partial B_x}{\partial t} + \frac{\partial E_z}{\partial y} - \frac{\partial E_y}{\partial z} = J_x \quad \text{sonst} \quad \mu \epsilon \frac{\partial E_x}{\partial t} - \frac{\partial B_z}{\partial y} + \frac{\partial B_y}{\partial z} = J_x$$

+ Gleichung für y und z + analoges Setz für E_y und E_z

Wichtig ist müssen hier Ort und Zeit diskretisiert werden.
 FDTD verwendet dabei halbe Schritte.

Punkte des Gitters sind $(i\Delta x, j\Delta y, k\Delta z, n\Delta t)$

Die erste Gleichung wird zu (ohne Inkongruenz):

$$\frac{B_x^{n+\frac{1}{2}}(i, j+\frac{1}{2}, k+\frac{1}{2}) - B_x^{n-\frac{1}{2}}(i, j+\frac{1}{2}, k+\frac{1}{2})}{\Delta t} + \frac{E_z^n(i, j+\frac{1}{2}, k+\frac{1}{2}) - E_z^n(i, j, k+\frac{1}{2})}{\Delta y} - \frac{E_y^n(i, j+\frac{1}{2}, k+\frac{1}{2}) - E_y^n(i, j+\frac{1}{2}, k)}{\Delta z} = 0$$

An der Dimension analog

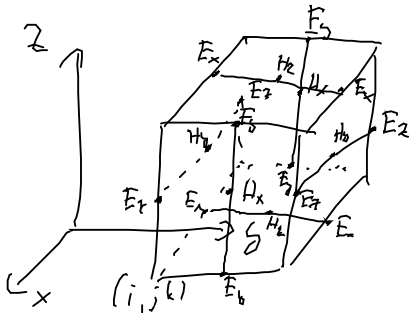
Zweite Gleichung wird zu

$$\frac{E_x^n(i+\frac{1}{2}, j, k) - E_x^{n-1}(i+\frac{1}{2}, j, k)}{\Delta t} + \frac{H_y^{n-\frac{1}{2}}(i+\frac{1}{2}, j, k+\frac{1}{2}) - H_y^{n-\frac{1}{2}}(i+\frac{1}{2}, j, k-\frac{1}{2})}{\Delta z} - \frac{H_z^{n-\frac{1}{2}}(i+\frac{1}{2}, j+\frac{1}{2}, k) - H_z^{n-\frac{1}{2}}(i+\frac{1}{2}, j-\frac{1}{2}, k)}{\Delta y} = \mu_0 \epsilon_0 \frac{\partial \rho}{\partial t}(i+\frac{1}{2}, j, k)$$

analog für alle Dimensionen

Bem:

- 1) E-Feld gibt es für ganzzahlige Zeiten und B-Feld gibt es für Zwischenschritte $n+\frac{1}{2}$
- 2) Auch die Gitter abeten um $\frac{1}{2}$ voneinander! E und B sind um $\frac{1}{2}$ verschaltete.
- 3) Herleitung läuft sich die Gleichung mit Finite Differenzen.
- 4) FDTD Schema



b) Zeitpropagation (Leap Frog Algorithm)

- (i) Schritt: sortieren die Gitter nach der Zeit, die Vergangenheit auf die neue Seite und die Zukunft auf die andere Seite

Bsp:
$$E_x^n(i+\frac{1}{2}, j, k) = E_x^{n-1}(i+\frac{1}{2}, j, k) - \frac{\Delta t}{\epsilon_{\dots}} \frac{H_y^{n-\frac{1}{2}}(i+\frac{1}{2}, j, k+\frac{1}{2}) - H_y^{n-\frac{1}{2}}(i+\frac{1}{2}, j, k-\frac{1}{2})}{\Delta z} + \frac{\Delta t}{\epsilon_{\dots}} \frac{H_z^{n-\frac{1}{2}}(i+\frac{1}{2}, j+\frac{1}{2}, k) - H_z^{n-\frac{1}{2}}(i+\frac{1}{2}, j-\frac{1}{2}, k)}{\Delta y}$$

$$\Delta t \nabla_x^{n-\frac{1}{2}}(j+\frac{1}{2}, j, k)$$

(Zurück Ord. St. für E und B)

(ii) Updates läuft so:

a) Berechne E für $t = (n+1)\Delta t$

b) Berechne H für $t = \Delta t (n+\frac{1}{2})$

c) Randbedingungen aktualisieren zurück zu Schritt a) bis fertig

7) Kriterien für das Grid und Stabilität

a) Falls ϵ, μ variieren sind Konstanten schwierig

$$\sqrt{\Delta x^2 + \Delta y^2 + \Delta z^2} > c \Delta t = \sqrt{\frac{1}{\epsilon \mu}} \Delta t$$

Klar die Diskretisierung hängt über die Lichtgeschwindigkeit zusammen!
Am besten maximal Lichtgeschwindigkeit.

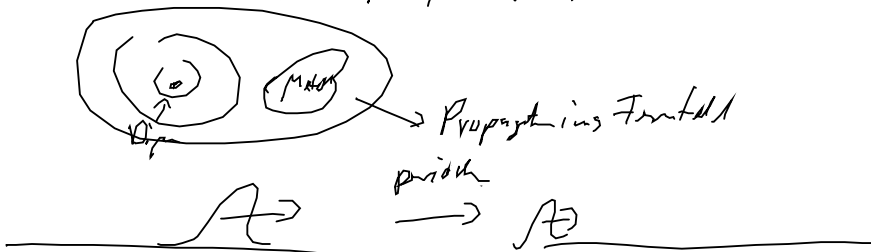
b) $\Delta x, \Delta y, \Delta z \ll \lambda$ Wellenlänge des untersuchten Phänomens.

Werde z.B. plasmonische Strukturen mit Eindringtiefe in nanometer Bereich untersuchen für Licht mit Wellenlänge Röntgen (100nm) mit großer Propagationslänge, das ist ein weiteres Grid nützlich => verschiedene Domänen für die Diskretisierung

8) Randbed.

a) Für TE und TM, Felder in der Ebene entsprechend setzen

b) Wir haben ein Dipolquadrupol in Metall



Harte
Randbed. \rightarrow $\frac{\mathcal{N} \leftarrow}{\text{wird reflektiert}}$

Eigentlich nur bei unendlich Simulationen gibt sinnvolles Ergebnis.

Lösung Perfectly Matched Layer (PML), um offene Randbed. zu simulieren. Wird auch für andere POEs verwendet.

Idee dahinter: Wir bauen uns absorbierende Schichten, die die Wellen enttarnen.

Problem: Wellen kriecht an der Schicht reflektiert werden, wie hat auf beiden auf schrägen Ecken, wo die Reflexion nicht perfekt ist.

Beispiel für PML (Bergman, J. Comp. Phys 119, 185-200 (1994))

2D Problem zur Illustration mit TE (Transversal elektrische Felder)

Erregung durch $\vec{j} = \sigma \vec{E}$

$$\epsilon_0 \frac{\partial E_x}{\partial t} + \sigma E_x = \frac{\partial B_z}{\partial y} \quad \leftarrow \text{Rotorkomponente, in Teil entkoppelt}$$

$$\epsilon_0 \frac{\partial E_y}{\partial t} + \sigma E_y = -\frac{\partial B_z}{\partial x}$$

$$\frac{\partial B_z}{\partial t} + \sigma \times B_z = \frac{\partial E_x}{\partial y} - \frac{\partial E_y}{\partial x}$$

Analog zu Elektrostatik
ist \vec{j} fiktiv

Fakt $\frac{\sigma}{\epsilon_0} = \frac{\sigma^x}{\epsilon_0}$, das entspricht die Impedanz der das Vakuum.

Bei großer Impedanz gibt es keine Reflexion.

DA kann das PML für TE:

Wir splitten H_z in zwei Komponenten $H_z = H_{zx} + H_{zy}$

...

$$\epsilon_0 \frac{\partial E_x}{\partial t} + \sigma_y E_x = \frac{\partial (H_{2x} + H_{2y})}{\partial y} \Rightarrow \text{künstliche Leitfähigkeit ist nur in Triax.}$$

$$\epsilon_0 \frac{\partial E_y}{\partial t} + \sigma_x E_y = - \frac{\partial (H_{2x} + H_{2y})}{\partial x}$$

$$\mu_0 \frac{\partial H_{2x}}{\partial t} + \sigma_x' H_{2x} = - \frac{\partial E_y}{\partial x}$$

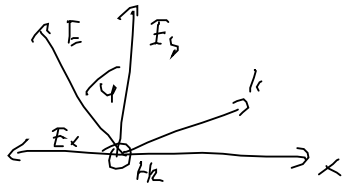
$$\mu_0 \frac{\partial H_{2y}}{\partial t} + \sigma_y' H_{2y} = \frac{\partial E_x}{\partial y}$$

(i) Für $\sigma_x = \sigma_y$, $\sigma_x' = \sigma_y' = 0 \Rightarrow$ leitendes Medium

(ii) Falls $\sigma_x = \sigma_y$ und $\sigma_x' = \sigma_y' \Rightarrow$ absorbierendes Medium

(iii) $\sigma_y = \sigma_y' = 0$, PML absorbiert (E_y, H_{2x}) entlang der x-Achse, aber nicht (E_x, H_{2y}) entlang der y-Achse.

Feldverläufe im PML Medium



Für (σ_x, σ_x') und (σ_y, σ_y') ergibt sich, dass falls $\frac{\sigma_x}{\epsilon_0} = \frac{\sigma_x'}{\mu_0} \sin^2 \theta$

$$z = z_0 e^{-i\omega(t - (x \cos \theta + y \sin \theta)/c)} e^{-(\sigma_x \cos^2 \theta / \epsilon_0 c)x} e^{-(\sigma_y \sin^2 \theta / \mu_0 c)y}$$

1) Exponentielle Zerfall mit $z = \sqrt{\frac{\mu_0}{\epsilon_0}}$

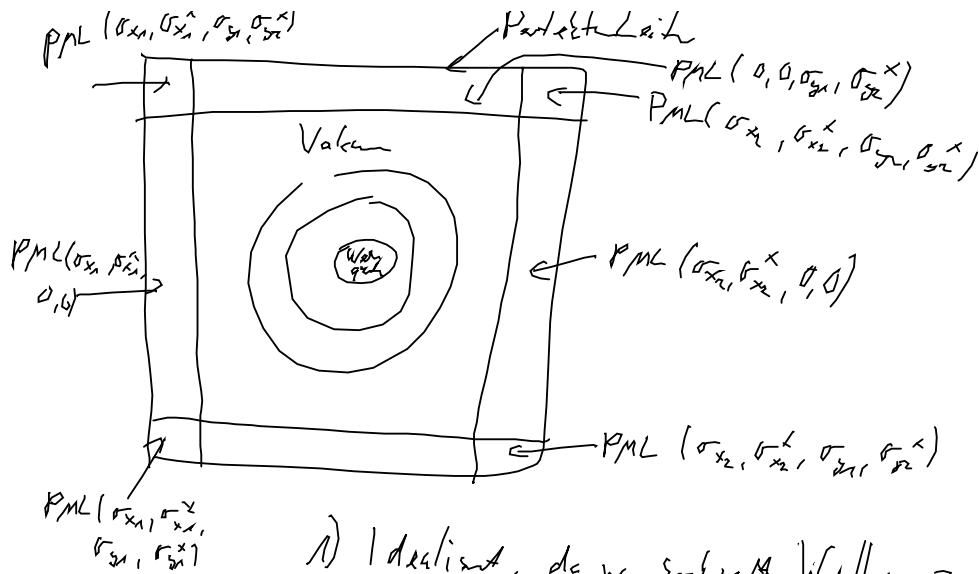
2) Impedanz des Vakuum

PML-PML Interface ... Herleitung analog zur Elektrodynamik

Reflexion verschwindet falls:

- Grenzfläche senkrecht zu x falls σ_y, σ_y' in beiden Medien gleich
- Grenzfläche senkrecht zu y falls σ_x, σ_x' in beiden Medien gleich
- Fläche senkrecht zu x zwisch. Vakuum und $(\sigma_x, \sigma_x', 0, 0)$ PML und zu $(0, 0, \sigma_y, \sigma_y')$ und $(\sigma_x, \sigma_x', \sigma_y, \sigma_y')$
- Fläche senkrecht zu y zwisch. Vakuum und $(0, 0, \sigma_y, \sigma_y')$ und zu $(\sigma_x, \sigma_x', 0, 0)$ und $(\sigma_x, \sigma_x', \sigma_y, \sigma_y')$

Implementierung für FDTD



- 1) Idealisiert, da w. evtl. Wellen an Oberfläche nicht reflektiert werden!
- 2) Spielt in der Praxis bei Rolle, solange Computer-Domänen groß genug
- 3) Snell'sche Gesetz gilt immer (an PML Grenzfläche)
 \Rightarrow Form der Welle bleibt erhalten
- 4) Reflexion an der PML ist

$$R(\omega) = \frac{-2i\omega \sigma(\omega) \delta}{1 - i\omega \sigma(\omega) \delta}$$

- 5) Aber abrupte Änderungen von σ führen zu unmerklicher Reflexion, daher wird σ (wegen Verlust)

$$R(\omega) = \frac{-2(\omega \sigma / \epsilon c) \int_0^{\delta} \sigma(\omega) d\omega}{1}$$

Typische Werte $\sigma(\omega) = \sigma_m \left(\frac{\omega}{\omega_c}\right)^m$ Schichtdicke

- 6) Das war das Beispiel der ersten PML, weiterhin gibt es noch weitere, siehe z.B.

Sedizis et al. IEEE Transactions on Antennas and Propagation, 58(3), 838 (2010).