

VII. 17 Partielle Dgl der Elektrodynamik FDTD

für Maxwelldynamik

Die Maxwellgl. (Rotationsgl.) für die Propagierung von elektromagnetischen Wellen.

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

\uparrow für magnetische Eigenschaften, kein nichtlinear.
 \uparrow unterschiedliche Werte oder plasmenartige Materialien
 \uparrow Entlastung z.B. durch Polarisation

- 1) Diese Gleichungen 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 Differenzen (wird im nächsten Abschnitt beschrieben) 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 Set 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 Integrität):

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

An der Dimension analog

Zweite Gleichung wird zu

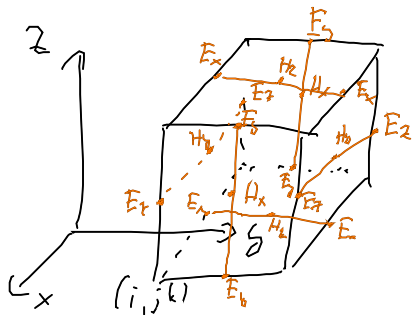
$\mu_0 \epsilon_0$
links
and rechts

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

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 abtasten um $\frac{1}{2}$ Vorzeichen! E und B sind um $\frac{1}{2}$ verschaltete
- 3) Herleitung liefert sich die Gleichung mit Finite Differenzen
- 4) FDTD Schema



b) Zeitpropagation (Leap Frog Algorithm)

(i) Schritt: sortieren die Gitter nach der Zeit, die Vorgehensweise auf die eine 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.

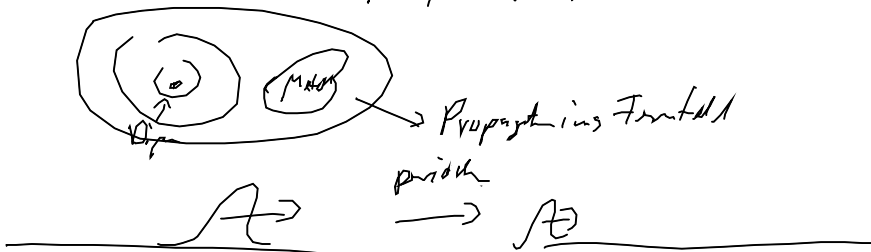
b) $\Delta x, \Delta y, \Delta z \ll \lambda$ Wellenlänge des untersuchten Phänomens.

Werde z.B. plasmonische Strukturen mit Eindringtiefe in nanometer Bereich untersuchen für Licht mit Wellenlänge Röntgenbereich (100nm) mit großer Propagationslänge, das ist ein weiteres Grid notwendig => 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 POE's 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)

Erving also ist $\vec{j} = \sigma \underline{E}$

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

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

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

Analog zu Elektrostatik
ist \vec{j} fiktiv

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

Bei großer Impedanz gibt es keine Reflexion.

JA! kann das PML für TE:

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

...

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

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

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

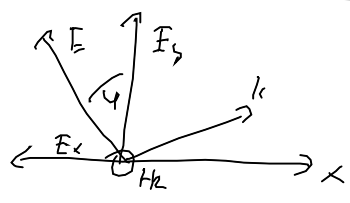
$$\mu_0 \frac{\partial H_{2y}}{\partial t} + \sigma_y' H_{2y} = \frac{\partial E_x}{\partial z}$$

(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 $\frac{\sigma_x}{\epsilon_0} = \frac{\sigma_x'}{\mu_0} \sin^2 \theta$

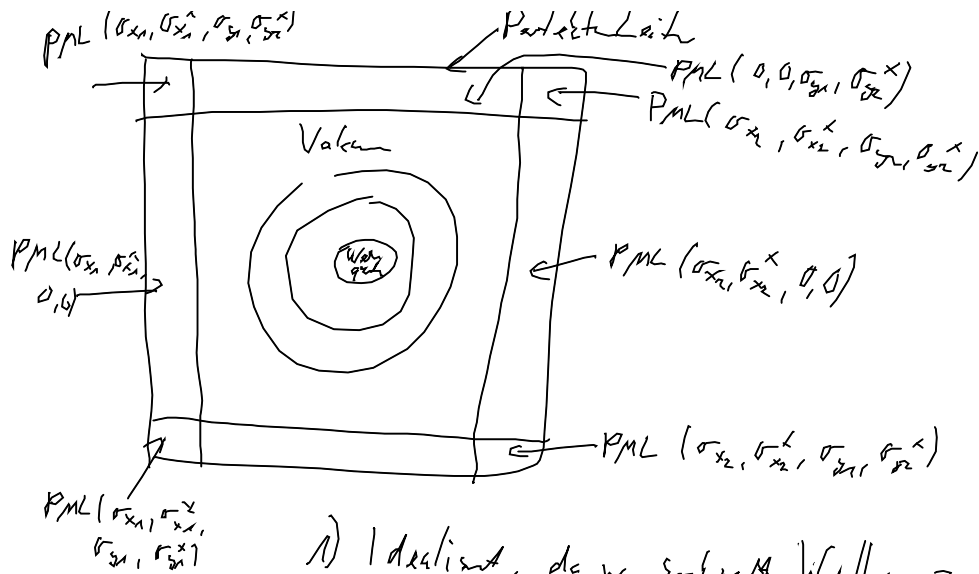
$$z = z_0 e^{-i\omega(t - (x \cos \theta + y \sin \theta)/c)} e^{-(\sigma_x \cos^2 \theta / \epsilon_0 c)x} e^{-(\sigma_y \sin^2 \theta / \mu_0 c)y}$$

- 1) Exponentielle Zersetzung mit $z = \sqrt{\frac{\mu_0}{\epsilon_0}}$
- 2) Impedanz des Vakuum

PML - PML Interface ... Huygens analog zur Elektrodynamik

- Reflektion 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

$$R(\omega) = e^{-2\int_0^g \sigma(g) dg}$$

5) Aber abrupte Änderungen von σ führen zu unmerklicher Reflexion, daher wird σ (wegen Verlust) $R(b) = e^{-2 \int_0^g \sigma(g) dg}$

Typische Werte $\sigma(g) = \sigma_m \left(\frac{g}{g_0}\right)^m$ Schichtdicke

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

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