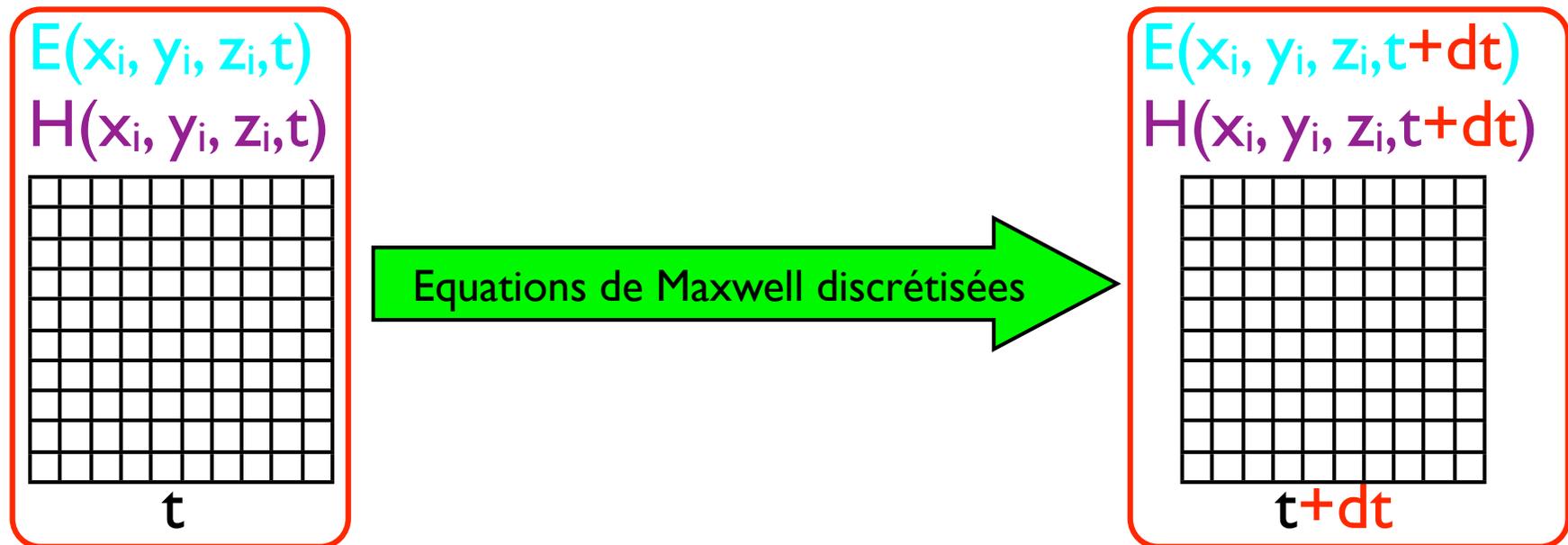


# Calculs de structures de bandes

## Différences finies dans le domaine temporel

---

Résolution numérique des équations de Maxwell en fonction du temps, par des méthodes de différences finies sur un maillage



# Calculs de structures de bandes

## Différences finies dans le domaine temporel

\* On obtient directement l'évolution temporel du champ électromagnétique dans la structure diélectrique et la réponse optique (transmission, réflexion, ...)

\* par contre on n'obtient que indirectement une compréhension physique des phénomènes (modes propres, courbes de dispersion, ...)

\* il est délicat, mais parfois possible, d'inclure des milieux dispersifs ou non-linéaires



méthodes numériques :

"une avalanche de chiffres dans un désert d'idées"

# Différences finies dans le domaine temporel

Plus techniquement :

remplacement des opérations de dérivation par des différences finies

$$\frac{df}{dx}(x) = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{f(x+h) - f(x)}{h} \approx \frac{f(x+h) - f(x)}{h}$$

écrites de préférence sur une forme centrée :

$$\frac{df}{dx}(x) \approx \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h}$$

Le but de la méthode FDTD est de bien choisir le maillage et sélectionner les composantes utiles des champs afin de minimiser l'espace mémoire nécessaire et le temps de calcul

# Différences finies dans le domaine temporel

Equations de Maxwell :

$$\nabla \times \vec{E} = -\mu \frac{\partial \vec{H}}{\partial t}$$

$$\nabla \times \vec{H} = \sigma \vec{E} + \varepsilon \frac{\partial \vec{E}}{\partial t}$$

6 équations sous forme scalaire :

$$\frac{\partial H_x}{\partial t} = \frac{1}{\mu} \left( \frac{\partial E_y}{\partial z} - \frac{\partial E_z}{\partial y} \right)$$

$$\frac{\partial H_y}{\partial t} = \frac{1}{\mu} \left( \frac{\partial E_z}{\partial x} - \frac{\partial E_x}{\partial z} \right)$$

$$\frac{\partial H_z}{\partial t} = \frac{1}{\mu} \left( \frac{\partial E_x}{\partial y} - \frac{\partial E_y}{\partial x} \right)$$

$$\frac{\partial E_x}{\partial t} = \frac{1}{\varepsilon} \left( \frac{\partial H_z}{\partial y} - \frac{\partial H_y}{\partial z} - \sigma E_x \right)$$

$$\frac{\partial E_y}{\partial t} = \frac{1}{\varepsilon} \left( \frac{\partial H_x}{\partial z} - \frac{\partial H_z}{\partial x} - \sigma E_y \right)$$

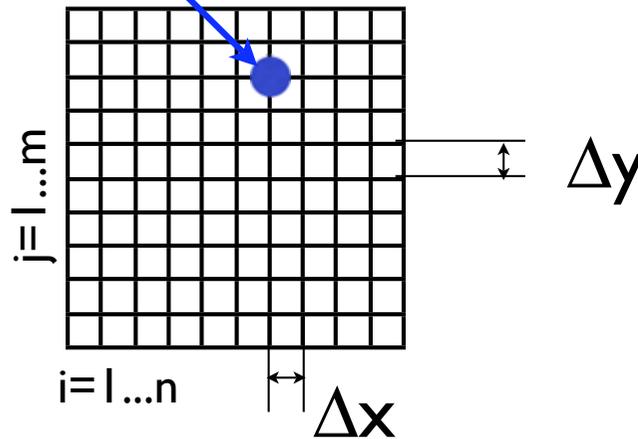
$$\frac{\partial E_z}{\partial t} = \frac{1}{\varepsilon} \left( \frac{\partial H_y}{\partial x} - \frac{\partial H_x}{\partial y} - \sigma E_z \right)$$

# Différences finies dans le domaine temporel

Maillage : le pas de la grille est  $\Delta x, \Delta y, \Delta z$

$$(i, j, k) = (i\Delta x, j\Delta y, k\Delta z)$$

$$F^n(i, j, k) = F(i\Delta x, j\Delta y, k\Delta z, n\Delta t)$$



les dérivées / différences finies s'écrivent :

$$\frac{\partial F^n(i, j, k)}{\partial x} = \frac{F^n(i + 1/2, j, k) - F^n(i - 1/2, j, k)}{\delta}$$

$$\frac{\partial F^n(i, j, k)}{\partial t} = \frac{F^{n+1/2}(i, j, k) - F^{n-1/2}(i, j, k)}{\Delta t}$$

# Différences finies dans le domaine temporel

les 6 équations scalaires se réécrivent :

$E_x^{n+1}(i+1/2,j,k)=A_{i+1/2,j,k}E_x^n(i+1/2,j,k)$ $+B_{i+1/2,j,k}[H_z^{n+1/2}(i+1/2,j+1/2,k)-H_z^{n+1/2}(i+1/2,j-1/2,k)$ $+H_y^{n+1/2}(i+1/2,j,k-1/2)-H_y^{n+1/2}(i+1/2,j,k+1/2)]$	$H_x^{n+1/2}(i,j+1/2,k+1/2)=H_x^{n-1/2}(i,j+1/2,k+1/2)$ $+\frac{\Delta t}{\mu\delta}[E_y^n(i,j+1/2,k+1)-E_y^n(i,j+1/2,k)$ $+E_z^n(i,j,k+1/2)-E_z^n(i,j+1,k+1/2)]$
$E_y^{n+1}(i,j+1/2,k)=A_{i,j+1/2,k}E_y^n(i,j+1/2,k)$ $+B_{i,j+1/2,k}[H_x^{n+1/2}(i,j+1/2,k+1/2)-H_x^{n+1/2}(i,j+1/2,k-1/2)$ $+H_z^{n+1/2}(i-1/2,j+1/2,k)-H_z^{n+1/2}(i+1/2,j+1/2,k)]$	$H_y^{n+1/2}(i+1/2,j,k+1/2)=H_y^{n-1/2}(i+1/2,j,k+1/2)$ $+\frac{\Delta t}{\mu\delta}[E_z^n(i+1,j,k+1/2)-E_z^n(i,j,k+1/2)$ $+E_x^n(i+1/2,j,k)-E_x^n(i+1/2,j,k+1)]$
$E_z^{n+1}(i,j,k+1/2)=A_{i,j,k+1/2}E_z^n(i,j,k+1/2)$ $+B_{i,j,k+1/2}[H_y^{n+1/2}(i+1/2,j,k+1/2)-H_y^{n+1/2}(i-1/2,j,k+1/2)$ $+H_x^{n+1/2}(i,j-1/2,k+1/2)-H_x^{n+1/2}(i,j+1/2,k+1/2)]$	$H_z^{n+1/2}(i+1/2,j+1/2,k)=H_z^{n-1/2}(i+1/2,j+1/2,k)$ $+\frac{\Delta t}{\mu\delta}[E_x^n(i+1/2,j+1,k)-E_x^n(i+1/2,j,k)$ $+E_y^n(i,j+1/2,k)-E_y^n(i+1,j+1/2,k)]$

$$A_{i,j,k} = 1 - \frac{\sigma(i,j,k)}{\varepsilon(i,j,k)}$$

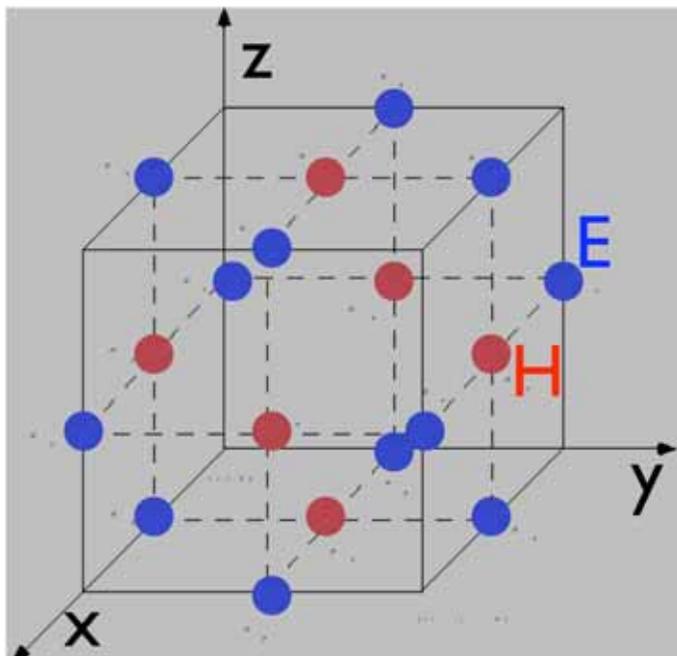
avec :

$$B_{i,j,k} = \frac{\Delta t}{\varepsilon(i,j,k)\delta}$$

# Différences finies dans le domaine temporel

ces équations sont structurées de tel sorte que :

$(n-1/2)\Delta t$	$n\Delta t$	$(n+1/2)\Delta t$
$H_{(n-1/2)\Delta t}$	$E_{(n-1)\Delta t} \rightarrow E_{n\Delta t}$ $H_{(n-1/2)\Delta t}$	$E_{n\Delta t} \rightarrow H_{(n+1/2)\Delta t}$ $H_{(n-1/2)\Delta t}$



Il suffit de connaître les valeurs de E et H sur des maillages interlacés et on calcule alternativement  $E(n\Delta t)$  et  $H(m\Delta t)$  aux temps pairs et impairs

# Différences finies dans le domaine temporel

Conditions de stabilité / taille du maillage :

$v_{\max}$  : vitesse maximale de propagation de l'onde électromagnétique

$\Delta t$  : pas temporel

$\delta$  : maillage

$$\frac{v_{\max} \Delta t}{\delta} = \frac{1}{\sqrt{N}}$$

cas d'un maillage différent  $\Delta x, \Delta y, \Delta z$  sur  $x, y$  et  $z$

$$v_{\max} \Delta t = \left[ \frac{1}{\Delta x^2} + \frac{1}{\Delta y^2} + \frac{1}{\Delta z^2} \right]^{-1/2}$$

en pratique :

$$\delta = \lambda/10$$

# Différences finies dans le domaine temporel

Sources :

Structure spatiale :

onde plane

source ponctuelle, Gaussienne, ....

Structure temporelle :

excitation harmonique (modes propres ?)

excitation impulsionnelle (réponse spectrale)

Exemples :

$$E^{inc} = E_o e^{-(x-x_o)^2/w^2}$$

source Gaussienne

$$E^{inc}(x, y, z) = E_o(x, y, z) \sin(\omega t)$$

$$E_x^{inc}(i + 1/2, j, k_s) = E_o(i + 1/2, j, k_s) \sin(2\pi f n \delta t)$$

onde plane

---

Techniquement le problème est plus délicat qu'il ne paraît, il existe deux approches

champ total / champ diffracté

IEEE Trans. Electromagnetic Compatibility, vol. 24, 397, 1982.

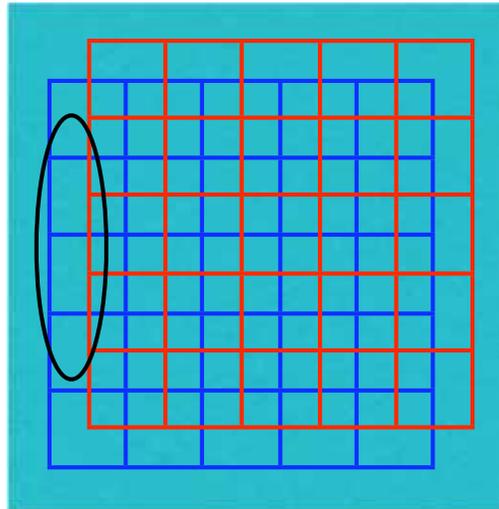
champ diffracté pur

The Finite Difference Time Domain Method for Electromagnetics. CRC Press, 1993.

# Différences finies dans le domaine temporel

Conditions aux bords :

Taille finie du domaine de calcul. Le champs sur la frontière est mal calculé car il manque certaines valeurs voisines



**Stratégie I** : ignorer les valeurs manquantes (=0). Très mauvais. Réflexions parasites non physiques.

# Différences finies dans le domaine temporel

Conditions de bord idéales : absorbeur parfait,  $T=0$  et  $R=0$

Par ordre de mérite et de difficulté de mise en œuvre :

**Stratégie 2** : conditions de **Mur**. Simule la propagation d'une onde sortante au bord

IEEE Transactions on Electromagnetic Compatibility, vol. EMC-23, 377, 1981

**Stratégie 3** : conditions de **Liao**. Interpolation des champs à l'interface

Sci. Sin., Ser.A, 27, 1063, 1984

**Stratégie 4** : couche parfaitement accordée (**PML**). Simule en quelques périodes un matériau idéalement absorbant. Donne des résultats excellents avec une profondeur de seulement quelques mailles

Journal of Computational Physics, 114, 185, 1994

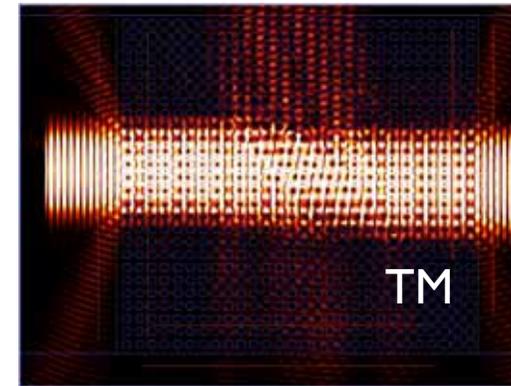
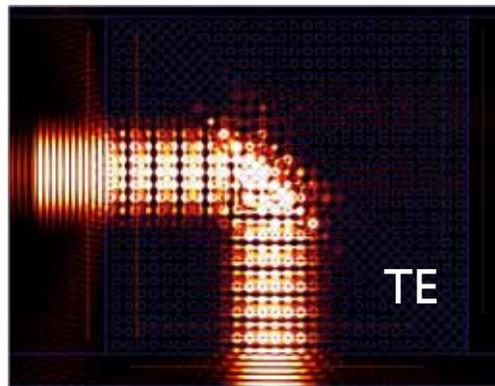
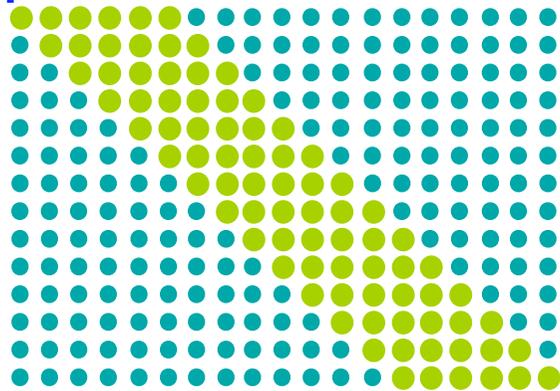
# Différences finies dans le domaine temporel

## Exemples

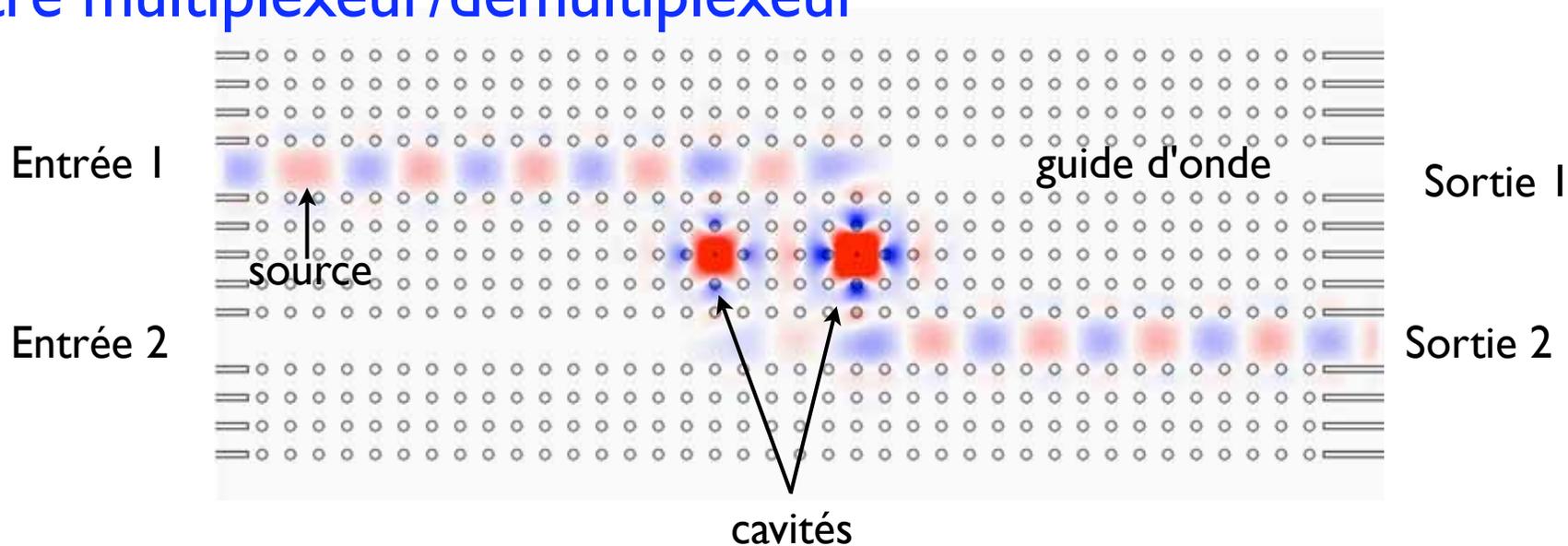
Régime continu (harmonique)

---

Filtre polariseur



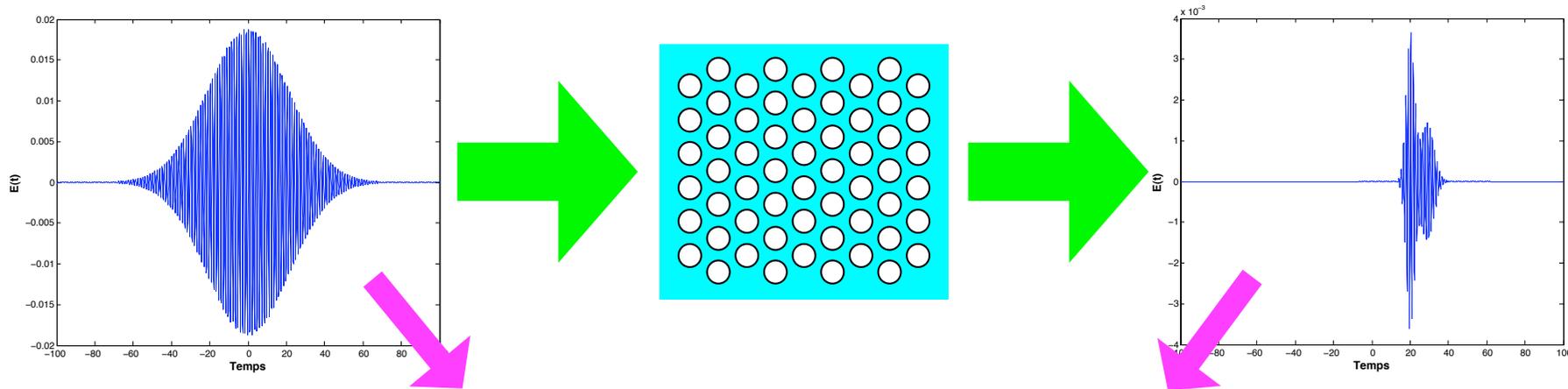
Filtre multiplexeur/démultiplexeur



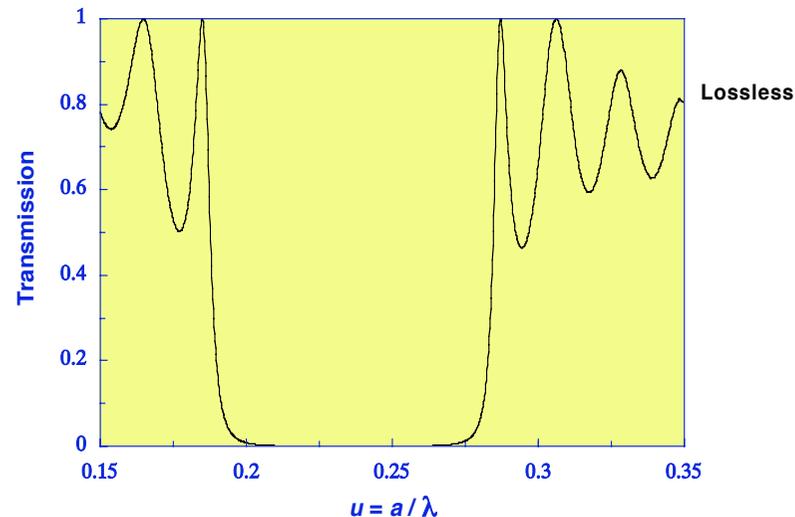
# Différences finies dans le domaine temporel

## Exemples

### Régime impulsionnel, réponse spectrale

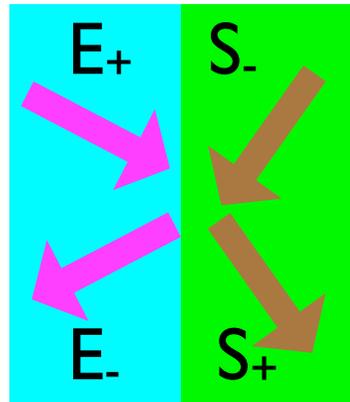


Exemple: transmission à travers 8 rangées, réseau triangulaire de trous, direction  $\Gamma K$ , TE :



# Méthodes de matrice de transfert

Techniques de matrice de transfert pour les couches minces :



$$\begin{pmatrix} S_+ \\ S_- \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_+ \\ E_- \end{pmatrix}$$

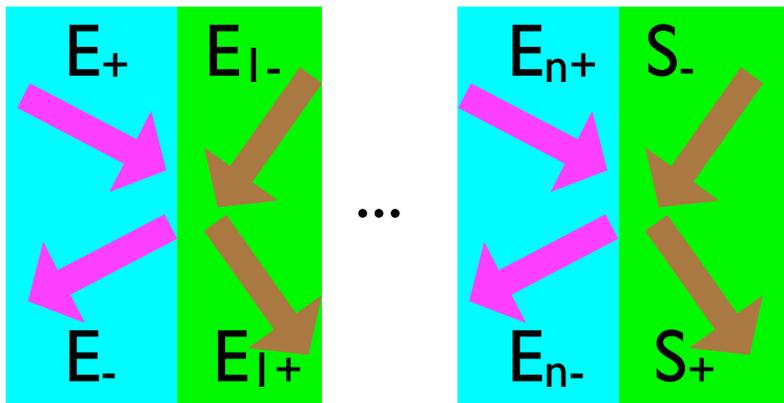
matrice de transfert

$$\begin{pmatrix} E_- \\ S_- \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \alpha & \beta \\ \gamma & \delta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_+ \\ S_{+-} \end{pmatrix}$$

matrice de diffusion

a, b ... calculés selon lois de Fresnel

Couche complète :



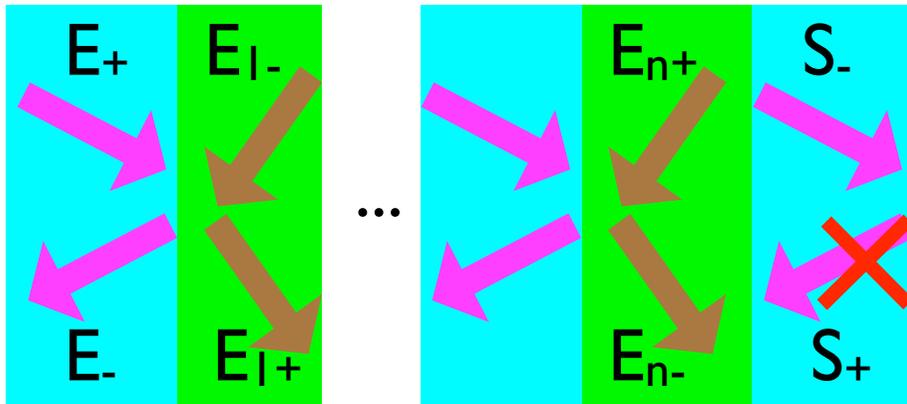
$$\begin{pmatrix} S_+ \\ S_- \end{pmatrix} = \prod_{i=1..n} T_i \begin{pmatrix} E_+ \\ E_- \end{pmatrix}$$

avec  $T_i$  matrice de transfert à une interface ou bien matrice de propagation

Ref : tout bon livre d'optique

# Méthodes de matrice de transfert

Les coefficients de réflexion et de transmission sont calculés en annulant la quatrième onde dans le milieu final, qui n'est pas excitée



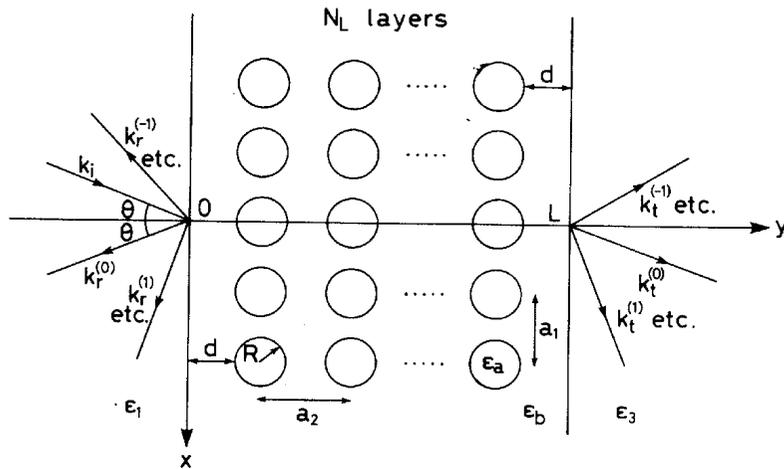
$$\begin{pmatrix} 0 \\ S_- \end{pmatrix} = \prod_{i=1..n} T_i \begin{pmatrix} E_+ \\ E_- \end{pmatrix}$$

$$R = \frac{|E_-|^2}{|E_+|^2} \quad T = \frac{|S_+|^2}{|E_+|^2}$$

⚠ attention aux indices initiaux et finaux

# Sakoda et autres méthodes de matrice de transfert

Généralisation des techniques de matrice de transfert pour les couches minces en incluant les modes diffractés



$$\begin{pmatrix} [S_+^i] \\ [S_-^i] \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} [a] & [b] \\ [c] & [d] \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_+^i \\ E_-^i \end{pmatrix}$$

matrices de taille infinie, tronquées à l'ordre n

Toute la difficulté réside dans le calcul des coefficients de diffusion

- "Diffraction gratings", SPIE Milestone series, vol. MS83, 1993
- Pure Appl. Opt., 3, 975, 1994

Une variante due à S. Sakoda, implémente cette approche dans les cristaux photoniques 2D

- Phys. Rev. B, 52, 8992, 1995

Ces méthodes ont souvent de sérieux problèmes d'instabilités numériques

# Autres techniques

Autres méthodes moins utilisées :

- multipolaire
- éléments finis
- équations intégrales / fonctions de Green
- méthode différentielle / ondes couplés
- homogénéisation
- fonction enveloppe / "masse effective"
- ...

Pour une revue et des références sur ces méthodes, voir par exemple :

Photonic crystals : towards nanoscale photonic devices / J.-M. Lourtioz, Berlin : Springer

Les cristaux photoniques ou la lumière en cage / J.-M. Lourtioz, Paris : Hermes-Sciences

# Les codes accessibles

<http://www.pbglink.com/software.html>

## Gratuits

- Meep <http://ab-initio.mit.edu/wiki/index.php/Meep>
- MIT Photonic Band [http://ab-initio.mit.edu/wiki/index.php/MIT\\_Photonic\\_Bands](http://ab-initio.mit.edu/wiki/index.php/MIT_Photonic_Bands)
- CAMFR <http://camfr.sourceforge.net/>
- Geo-Radar <http://carsten.welcomes-you.com/radarfdtd/>
- GFDTD <http://gfDTD.kldp.net/>
- BigBoy <http://sourceforge.net/projects/bigboy>
- EMP3 <http://www.fieldp.com/emp3/emp3.html>
- EM Explorer <http://www.emexplorer.net/news.htm>
- GprMax <http://www.gprmax.org/>

## Commerciaux

- Photon Design (CrystalWave, OmniSim, FIMMPROP) <http://www.photond.com/>
- ISE / Synopsis <http://www.synopsys.com/>
- EM photonics <http://www.emphotonics.com/>
- RSoft <http://www.rsoftinc.com/>
- COMSOL <http://www.comsol.com/>
- Optiwave <http://www.optiwave.com/>
- Apollo Photonics <http://www.apollophoton.com/apollo/>
- SEMCAD [http://www.iis.ee.ethz.ch/research/bioemc/em\\_simulation\\_platform.en.html](http://www.iis.ee.ethz.ch/research/bioemc/em_simulation_platform.en.html)

Démo et pratique modélisation

05 juin 2007 H3 I

V. Zabelin