

© 2009

No está permitida la reproducción total o parcial, ni su tratamiento informático, ni la transmisión de ninguna forma o cualquier medio, ya sea electrónico, por fotocopia, por registro u otros métodos, sin permiso previo y por escrito de los titulares del Copyright.

ISBN: 978-84-692-3931-5

EDITOR: Íñigo Molina Fernández

E.T.S.I. Telecomunicación. Universidad de Málaga.

Campus de Teatinos s/n

29010 Málaga

Aplicación del algoritmo DFDT en redes de difracción holográficas.

Application of the FDTD algorithm to holographic diffraction gratings

Jorge FRANCÉS, Cristian NEIPP, Manuel PEREZ-MOLINA, Mariela L. ÁLVAREZ, Augusto BELÉNDEZ

Departamento de Física, Ingeniería de Sistemas y Teoría de la Señal, EPS, Universidad de Alicante, San Vicente del Raspeig.

Persona de contacto: Jorge Francés (jfonllor@ua.es)

RESUMEN:

Este trabajo muestra la aplicación del algoritmo de las diferencias finitas en el dominio del tiempo (DFDT) como alternativa a otros métodos (Kogelnik, CW o RCW) en la simulación de redes de difracción holográficas. El formalismo matemático y su aplicación a las longitudes de onda ópticas implican la incorporación de técnicas avanzadas en el algoritmo DFDT como la incorporación de PMLs (Perfectly Matched Layers) y de la formulación CT/CD (Campo Total/Campo Dispersado), así como la propagación de campo cercano a lejano (CC/CL). El algoritmo es aplicado obteniendo resultados satisfactorios en redes de difracción de apertura y en redes de difracción holográficas.

Palabras clave: DFDT, red holográfica de volumen

ABSTRACT: (versión inglesa del resumen en español; estilo "ResumAbs")

This work presents the application of Finite-Difference Time-Domain (FDTD) as an alternative method (Kogelnik, CW or RCW) for simulation of volume holographic diffraction gratings. Using this method for optic wavelengths makes necessary to add techniques such as PMLs, TF/SF formulation and Far-Field transformation for improving performance. The algorithm is applied successfully to different volume holographic diffraction gratings.

Key words: FDTD, volume holographic grating

1.- Introducción

Existen diferentes teorías electromagnéticas aplicadas a estudiar la propagación de la radiación electromagnética en redes de difracción holográficas. Algunas de ellas, como la teoría de Kogelnik [1] se basan en modelar redes de variación sinusoidal y dejan de ser precisas a medida que la red deja de ser considerada como una red delgada o la variación del índice de difracción es grande. Existen teorías más rigurosas como CW (*Coupled Wave Theory*) o RCW (*Rigorous Coupled Wave Theory*) [2]. Por otro lado, existen métodos como el método de las Dife-

rencias finitas en el dominio del tiempo (DFDT) utilizadas ampliamente en electromagnetismo que no han sido explotadas en aplicaciones de holografía óptica. En este trabajo se muestra la implementación del algoritmo y la aplicación a redes de difracción de apertura y holográficas.

2.- Formulación DFDT

En esta sección, se van a tratar los aspectos relacionados con el formalismo de las diferencias finitas en el dominio del tiempo (DFDT). Se detallará la formulación en espa-

cio libre de las ecuaciones de Maxwell y adaptación al método DFDT.

2.1.- Formulación en espacio libre de las ecuaciones de Maxwell.

El paradigma de las DFDT se basa en el entrelazado tanto en el espacio como en el tiempo de las componentes de campo magnético y eléctrico. Esta formulación se detalla con más detalle en [3]-[4]-[11]. Cada componente espacial del campo se sitúa en una celda, denominada celda de Yee (véase figura 1), la cual permite realizar la aproximación de las diferencias centrales a las derivadas espaciales.

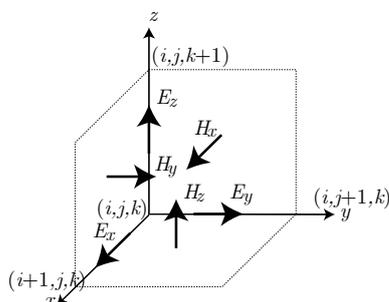


Fig. 1: Celda de Yee[11].

Partimos de las ecuaciones diferenciales de Maxwell:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t} &= \frac{1}{\sqrt{\epsilon_0 \mu_0}} \nabla \times \mathbf{H}, \\ \mathbf{D}(\omega) &= \epsilon_r^*(\omega) \mathbf{E}(\omega), \\ \frac{\partial \mathbf{H}}{\partial t} &= -\frac{1}{\sqrt{\epsilon_0 \mu_0}} \nabla \times \tilde{\mathbf{E}}, \end{aligned} \quad (1)$$

donde las variables del campo y del flujo eléctrico han sido normalizadas respecto a la impedancia intrínseca $\eta = \sqrt{\mu_0 / \epsilon_0}$. Desarrollando las ecuaciones de Maxwell podemos obtener las seis componentes del campo involucradas en el problema tridimensional para propagación en espacio libre [3]-[4]. Tomando la aproximación de las diferencias centrales tanto a las derivadas espaciales como temporales de cada una de las ecuaciones del campo, y teniendo en cuenta la posición en la celda de Yee de cada una de las componentes, se obtendrían seis nuevas ecuaciones. Por comodidad, se mostrará la correspondiente con D_z y de manera análoga se podrían obtener el resto de las ecuaciones:

$$D_z^{n+1/2} = D_z^{n-1/2} + \frac{\Delta t}{\Delta x \sqrt{\epsilon_0 \mu_0}} \left(H_y^{n+1/2, j, k+1/2} - H_y^{n-1/2, j, k+1/2} - H_x^{n+1/2, j, k+1/2} + H_x^{n-1/2, j, k+1/2} \right), \quad (2)$$

donde cada punto del espacio se referencia con la siguiente nomenclatura $(i, j, k) = (i\Delta x, j\Delta y, k\Delta z)$, siendo i, j y k enteros y representando los índices para las dimensiones del espacio (x, y, z) . La variable entera n está relacionada con el tiempo de la forma $t_n = n\Delta t$. La relación entre Δt y Δx debe de verificar la denominada condición de Courant para que el algoritmo sea estable

$$\Delta t \leq \frac{\Delta x}{\sqrt{n} \cdot c_0}, \quad (3)$$

donde n es el número de dimensiones involucradas en la simulación (tres para el caso tridimensional) y se ha asumido celdas de geometría equilátera ($\Delta x = \Delta y = \Delta z$) de arista Δx . El algoritmo *leapfrog* [4]-[11] se resume en el diagrama de flujo mostrado en la figura 2 y explica la razón del uso de superíndices del tipo $n+1/2$.

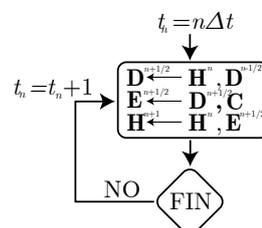


Fig. 2: Diagrama de flujo del algoritmo *leapfrog*.

2.2. Condiciones de frontera (ABCs).

Las condiciones de frontera (ABC-*Absorbing Boundary conditions*) surgen de la necesidad de simular ondas que se propaguen hacia los límites de nuestra red de simulación sin reflexiones indeseadas en los límites del malla. Dichas reflexiones, son debidas a que las celdas situadas en los límites externos del malla hacen uso de valores del campo inicialmente desconocidos. Dichos valores del campo, son tomados arbitrariamente como nulos. Para evitar este problema se ha recurrido a las ABCs, más concretamente a las ABCs de Berenger [3]-[5]-[6] denominadas PMLs (*Perfectly Matched Layers*). Esta

herramienta se basa en añadir unas capas en los extremos de la red de simulación que contemple pérdidas para cada una de las componentes del campo involucradas. Estas pérdidas se modelan a partir de unas constantes dieléctricas ($\varepsilon_{F_m}^*$) y de permeabilidad ($\mu_{F_m}^*$) con $m = x, y, z$. Estas constantes son ficticias y únicamente tienen la función de definir la región de absorción PML, en ningún caso están relacionadas con las características del medio que se estén simulando en el interior del mallado. Estas constantes deben ser de naturaleza compleja ya que la parte imaginaria es la que contiene información sobre las pérdidas. Al mismo tiempo, éstas se definen cumpliendo unos requisitos que aseguran la continuidad en la impedancia [3]-[4]-[8].

$$\begin{aligned}\varepsilon_{F_m}^* &= \varepsilon_{F_m} + \frac{\sigma_{D_m}}{j\omega\varepsilon_0} = 1 + \frac{\sigma_D(m)}{j\omega\varepsilon_0}, \\ \mu_{F_m}^* &= \mu_{F_m} + \frac{\sigma_{H_m}}{j\omega\mu_0} = 1 + \frac{\sigma_D(m)}{j\omega\varepsilon_0},\end{aligned}\quad (4)$$

donde $\sigma_D(m)/\varepsilon_0$ se define únicamente en la región donde se sitúan las PML y con perfil creciente a medida que se penetra más en la región absorbente. Los valores entre los que está comprendida oscilan entre 0 y $0.333\varepsilon_0$ [3]-[6]-[7]-[8]. Las constantes de permeabilidad se asignan en los términos de flujo \mathbf{D} mientras que los de permeabilidad se asignan a los términos del campo electromagnético \mathbf{H} . Por simplicidad, se muestra la expresión para el D_z obtenida a partir de (1) con la incorporación de las constantes que modelan las PMLs.

$$\begin{aligned}j\omega\left(1 + \frac{\sigma_D(x)}{j\omega\varepsilon_0}\right)\left(1 + \frac{\sigma_D(y)}{j\omega\varepsilon_0}\right)\left(1 + \frac{\sigma_D(z)}{j\omega\varepsilon_0}\right)^{-1} D_z \\ = c_0 \cdot \nabla \times \mathbf{H} = c_0 \left(\frac{\partial H_y}{\partial x} - \frac{\partial H_x}{\partial y} \right).\end{aligned}\quad (5)$$

El término $1/j\omega$ se corresponde con la transformación de una integral temporal al dominio de Fourier. Para poder introducir dicho término en las ecuaciones de DFDT se debe pasar al dominio temporal a modo de un sumatorio donde las constantes G_i están

definidas. El lector interesado puede encontrar más información relacionada con este tema en [3]-[8], donde se desarrollan ampliamente los conceptos relacionados con las PMLs.

2.3. Formulación de campo total y campo dispersado

Para la simulación de ondas planas se recurre a la definición de dos regiones en el interior de la red de simulación. Dichas regiones son conocidas como región de campo total y región de campo dispersado (TF/SF-Total/Scattered Field) [9]. En el interior de la primera región se encuentra las ondas planas originadas mediante el proceso de iluminación escogido (en nuestro caso, la amplitud de una onda plana se fija en un plano), mientras que en la región de campo dispersado, la onda plana es eliminada para únicamente quedarse con las componentes del campo resultante de las perturbaciones originadas en la región 1 (véase figura 3). Esta técnica se basa en la linealidad de las ecuaciones de Maxwell,

$$\begin{aligned}\mathbf{E}_{\text{tot}} &= \mathbf{E}_{\text{inc}} + \mathbf{E}_{\text{disp}}, \\ \mathbf{H}_{\text{tot}} &= \mathbf{H}_{\text{inc}} + \mathbf{H}_{\text{disp}}.\end{aligned}\quad (8)$$

2.3. Formulación campo cercano a campo lejano.

Para aplicaciones ópticas, las longitudes de onda empleadas son del orden de unos pocos cientos de nanómetros, lo que conlleva unas resoluciones temporales y espaciales muy reducidas. Para simular dispositivos o configuraciones ópticas, en las cuales se quiere estudiar diferentes puntos del espacio alejados de la fuente, se necesitan mallados grandes, en consecuencia el coste computacional aumenta exponencialmente.

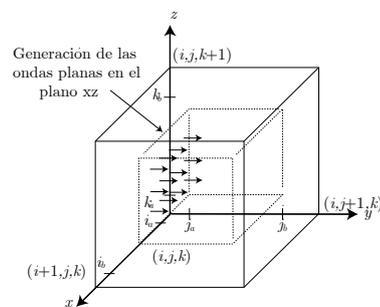


Fig.3. Esquema de las regiones campo total y campo dispersado.

Para evitar este inconveniente se utiliza la transformación de campo cercano a campo lejano (CC/CL). Esta herramienta permite limitar el mado a la región donde se sitúan las fuentes para posteriormente propagar los campos a la región de campo lejano que se desee.

Para ello, partimos de la expresión del potencial vector

$$\mathbf{A}(r) = \frac{1}{4\pi} \iint_S \mathbf{J}_s(r') \frac{e^{-jkR}}{R} dS', \quad (9)$$

donde $\mathbf{R} = |\vec{r} - \vec{r}'|$ es la distancia euclídea entre los puntos de la región de fuentes \vec{r}' y el punto del espacio en el cual se desea calcular el campo \vec{r} . El término \mathbf{J}_s se corresponde con las fuentes de corriente y el término e^{-jkR}/R es la función de Green en espacio libre. Las componentes del campo magnético pueden obtenerse a partir de la expresión

$$\mathbf{H} = \nabla_r \times \mathbf{A} = \frac{1}{4\pi} \iint_S \left(\mathbf{J}(r') \times \frac{\mathbf{R}}{R} \right) \left(jk + \frac{1}{R} \right) \frac{e^{-jkR}}{R} dS'. \quad (10)$$

Haciendo uso del teorema de dualidad, el campo eléctrico puede obtenerse de forma similar:

$$\mathbf{E} = -\frac{1}{4\pi} \iint_S \left(\mathbf{M}(r') \times \frac{\mathbf{R}}{R} \right) \left(jk + \frac{1}{R} \right) \frac{e^{-jkR}}{R} dS', \quad (11)$$

donde $\mathbf{M} = 2\mathbf{E}_a \times \hat{n}$ se corresponden con las corrientes magnéticas, las cuales son ficticias y permiten describir el campo eléctrico en la superficie donde se va a realizar la transformación de campo cercano a campo lejano.

Finalmente, teniendo en cuenta que el término $jk = j\omega/c_0$ se corresponde con una derivada en el dominio temporal y que el término exponencial se corresponde con un desplazamiento temporal de la forma $f(r, \omega)e^{-j\omega R/c_0} \rightarrow f(r, t - R/c_0)$, obtener una expresión en el dominio temporal para ser aplicada en el algoritmo *leapfrog* es directo (el lector puede encontrar más información al respecto en [11])

$$E_z|_{i,j,k}^n \cong \frac{1}{\pi} \sum_{i'} \sum_{j'} \frac{r_x}{R} \begin{bmatrix} E_a|_{i',j',k'}^{n-2R} - E_a|_{i',j',k'}^{n-2R-1} \\ + \frac{E_a|_{i',j',k'}^{n-2R_{\Delta x}}}{2R} \end{bmatrix}. \quad (12)$$

3.- Resultados

3.1.- Difracción de Fraunhofer de la doble rendija.

Se ha escogido un sistema óptico sencillo formado por dos rendijas de anchura $a = 50\Delta x$ cada una y separadas una distancia $d = 70\Delta x$. La longitud de onda de trabajo es de 633nm y $\Delta x = \lambda/10$. Para poder estudiar el fenómeno de la difracción en campo lejano, debemos de alejarnos de la región de campo cercano. La distancia L a la cual calculamos la propagación de campo cercano a campo lejano debe satisfacer la condición de campo lejano o región de Fraunhofer $F = a^2/L\lambda \ll 1$. En la figura 4 se muestra la configuración de la doble rendija simulada. Para nuestra configuración se ha escogido una distancia $L = 4000\Delta x$ cumpliendo la condición establecida ($F = 0.0625 \ll 1$). Mediante la transformación de campo cercano a lejano se han obtenido los puntos a lo largo del eje z que cortan los planos $x = b/2$ e $y = L$. La intensidad normalizada vista sobre dicho plano (yz) viene dada por la expresión ya conocida [12].

$$I_n(\theta) = \left(\frac{\sin\left(\frac{2\pi a \sin\theta}{\lambda}\right)}{\left(\frac{2\pi a \sin\theta}{\lambda}\right)} \right)^2 \cos^2\left(\frac{2\pi a \sin\theta}{\lambda}\right). \quad (13)$$

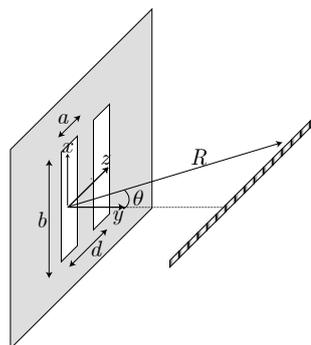


Fig.4. Esquema de para la simulación de difracción de Fraunhofer de la doble rendija.

La simulación del sistema óptico se ha realizado en un mado de 100x60x200 celdas

donde las ranuras se han situado en el plano $y = 20\Delta x$.

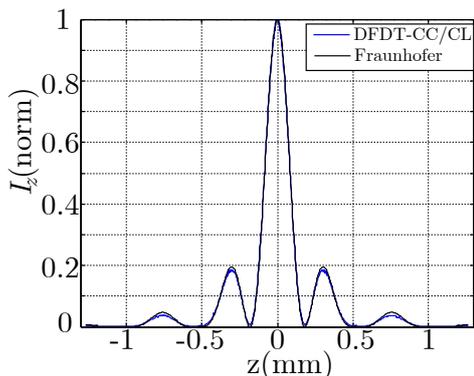


Fig 5: Comparación patrones de intensidad normalizada para el caso de doble rendija.

Se puede apreciar en la figura 5, que el patrón de intensidad obtenida mediante la simulación numérica se ajusta en gran medida a la curva teórica esperada.

3.2. Simulación de una red de difracción de volumen.

En esta sección se presentarán los resultados obtenidos utilizando el algoritmo DFDT explicado en la sección 2 para el análisis de redes de difracción por transmisión de 1200 líneas/mm. La modulación del índice de refracción de las redes se tomó como $n_1 = 0.025$, lo que corresponde a un valor típico para algunos materiales, como emulsiones fotográficas, utilizados para el registro de las redes de difracción. En la figura 6 muestra la situación después de que una onda plana haya incidido sobre la red. Se eligió un punto situado cerca de la red para observar el campo emergente con idea de evitar los efectos de la difracción de los bordes. En principio, en el caso de una red de volumen, sólo dos órdenes se propagan en el material, por lo que cabría esperar un patrón interferencial de dos ondas planas observable en el punto elegido después de la simulación.

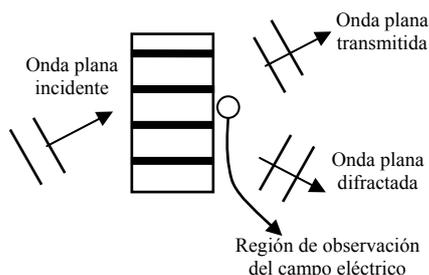


Fig 6: Esquema de una red de difracción de volumen.

2.1.- Simulaciones para una red de difracción

La figura 7 muestra los resultados obtenidos mediante la simulación numérica para los campos a la salida correspondientes a una red de difracción por transmisión de 1200 líneas/mm después de que una onda plana de longitud de onda $\lambda = 633 \text{ nm}$ haya incidido sobre ella en condición de Bragg. Puesto que no existe un medio periódico en este caso ($n_1 = 0$) se puede observar que la onda plana se transmite sin que haya difracción.

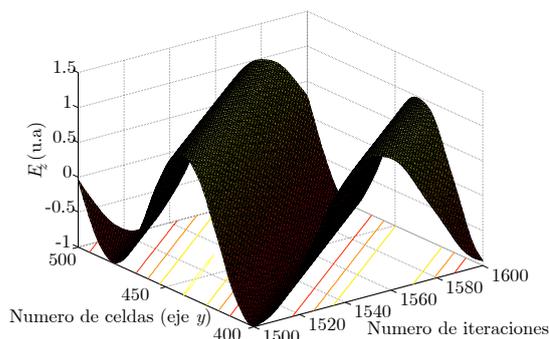


Fig7: Simulación numérica del campo a la salida de la red de 1200 líneas/mm en ángulo de Bragg y $n_1 = 0$.

Finalmente las figuras 8 y 9 muestran los resultados obtenidos para redes de difracción con dos espesores diferentes. En el primer caso el espesor de la red es de $1,5 \mu\text{m}$, mientras que en el segundo caso el espesor elegido es de $7,9 \mu\text{m}$. Se observa como en el primer caso la amplitud de la onda difractada es mucho menor que la de la onda transmitida, mientras que en el segundo caso ambas amplitudes son similares. Estos resultados coinciden con los obtenidos mediante la aplicación de la Teoría de Kogelnik que predice el rendimiento de la onda difractada en condición de Bragg según la ecuación:

$$\eta = \text{sen}^2(\nu), \quad (15)$$

siendo ν :

$$\nu = \frac{\pi n_1 d}{\lambda \cos \theta}, \quad (16)$$

donde n_1 es la modulación del índice de refracción, d es el espesor de la red, λ es la longitud de la onda incidente y θ es el ángulo que forma la onda transmitida con la nor-

mal a la red en el interior del medio periódico. Cuando las amplitudes de las ondas difractada y transmitida coinciden $\eta = 1/2$,

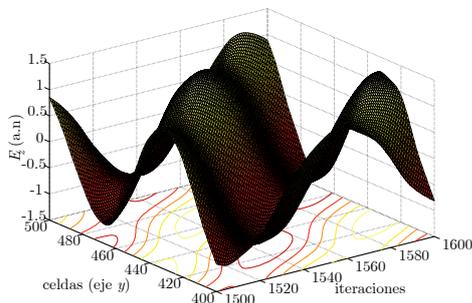


Fig 8: Campo a la salida de la red de espesor de $1.5 \mu\text{m}$ y $n_1 = 0.025$.

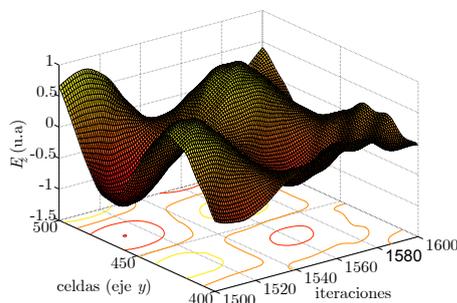


Fig 9: Campo a la salida de la red con espesor de $7.9 \mu\text{m}$ y $n_1 = 0.025$.

y el valor de d correspondiente, con los datos utilizados en la simulación es de $7 \mu\text{m}$, por lo que para valores aproximados a $7 \mu\text{m}$ el patrón interferencial coincide con el de la figura 9.

4.- Conclusión

En este trabajo se muestra la aplicación de la técnica DFDT a la simulación de redes holográficas de volumen. Se han implementado diferentes técnicas: PMLs, TF/SF y la transformación a campo lejano para poder mejorar las prestaciones del algoritmo y reducir el coste computacional. Se ha aplicado a una red de difracción de apertura y comparada con el patrón de difracción en región de Fraunhofer con resultados satisfactorios, así como a una red holográfica de volumen donde se han podido simular diferentes periodos de red con resultados también satisfactorios.

Agradecimientos: Parte de este trabajo ha sido subvencionado por el Ministerio de Ciencia e Innovación (proyecto FIS2008-05856-Co0-02)

Referencias

- [1] H. KOGELNIK, "Coupled wave theory for thick hologram gratings", Bell Systems Technology Journal **48**, 2909-2947 (1969).
- [2] M. G. MOHARAM, T. K. GAYLORD, "Rigorous coupled-wave analysis of planar-grating diffraction", Journal of the Optical Society of America **71**, 811-818 (1981).
- [3] Dennis M. SULLIVAN, "Electromagnetic simulation using the FDTD method", (IEEE Press Editorial Board, 2000)
- [4] Allen TAFLOVE, "Computational electrodynamics: The Finite-Difference Time-Domain Method", (Artech House Publishers, 1995).
- [5] J.P. BERENGER, "A perfectly matched layer for the absorption of electromagnetic waves", J. Comput. Phys., **114**, 185-200, 1994.
- [6] J.P. BERENGER, "Three-dimensional perfectly matched layer for the absorption of electromagnetic waves", J. Comput. Phys., **127**, 363-379, 1995.
- [7] D.M. SULLIVAN, "A simplified PML for use with the FDTD method", IEEE Microwave and Guided Wave letters, **6**, 97-99, 1996.
- [8] R. LEE, Z. S. SACKS, D. M. KINGSLAND, J. F. LEE. "A perfectly matched anisotropic absorber for use as an absorbing boundary condition", IEEE Trans. Anten. And Prop., **43**, 1460-1463, 1995.
- [9] A. TAFLOVE, K. R. UMASHANKAR, "A novel method for analyze electromagnetic scattering of complex objects", IEEE Trans. Electromagnetic Compatibility, **24**, 397-405, 1982
- [10] K.S. YEE, "Numerical solution of initial boundary value problems involving Maxwell's equations in isotropic media", IEEE Trans. On Antennas and Propagation, **17**, 585-589, 1966.
- [11] J. DE MOERLOOSE, D. DE ZUTTER. "Surface integral representation radiation boundary condition for the FDTD method", IEEE Trans. On Antennas and Propagation, **AP-45**, 1655-1663, 1997.
- [12] E. HECHT "Óptica" (Pearson Addison Wesley, 2003).