

„Vector Wave Propagation Method“

Ein Beitrag zum elektromagnetischen Optikrechnen

Vortrag zur Dissertation
18.03.2011

Dipl. Inform. Matthias Fertig

Inhalt

- Bekannte Simulationsverfahren und Motivation zur VWPM
- Funktionsprinzip der propagativen Simulationsverfahren
- Die „Vector Wave Propagation Method“ (VWPM)
- Bidirektionale Erweiterung der VWPM und Rechengenauigkeit bei Mehrfachreflexionen
- Energieerhaltung und Modellierung evaneszenter Moden
- Praktische Anwendung und parallele VWPM
- Zusammenfassung

Elektromagnetisches Optikrechnen

Maxwellgleichungen, Wellen- und Helmholtzgleichung

Maxwell: „*Licht ist eine elektromagnetische Welle*“ (1864)

→ Maxwell-Gleichungen der Elektrodynamik gültig für Licht

Beschreibung der Wellenausbreitung durch die

Wellengleichung: $\Delta \mathbf{E} - \mu\mu_0\varepsilon\varepsilon_0\partial^2\mathbf{E}/\partial t^2=0$,

oder für monochromatische Felder

Helmholtzgleichung: $(\Delta + \mathbf{k})\mathbf{E}=0$

- Gültigkeit für Vektor- und Skalarfelder in homogenen Medien
- Erweiterung für inhomogene und/oder leitende Medien nötig
→ inhomogene elliptische partielle Differentialgleichung, $(\Delta+\mathbf{k})\mathbf{E}\neq 0$
- analytische Lösung nur für sehr einfache Probleme möglich

→ numerische Simulationsverfahren

Einschränkungen existierender Simulationsverfahren

RCWA (Rigorous Coupled Wave Analysis, Burkhart 1966)

- Eigenwertproblem mit Matrizen hoher Ordnung für 3D-RCWA

FDTD (Finite Difference Time Domain, Yee 1966)

- rigorose Lösung der Maxwell-Gleichungen in Form finiter Differenzen

→ hohe Simulationszeiten und Speicherbedarf

BPM (Beam Propagation Method, Feith & Fleck 1978)

- „Split-Step Propagation“ Algorithmus für skalare Felder

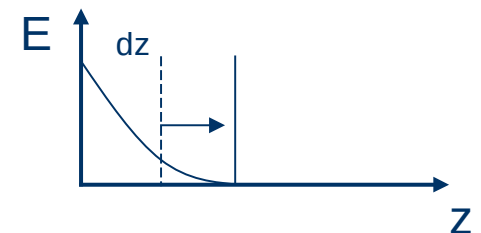
→ paraxiale Lösung, keine Polarisation

WPM (Wave Propagation Method, Brenner & Singer 1993)

- Superposition lokal deformierter Skalarwellen nach Rayleigh-Sommerfeld

→ keine Polarisation, keine evaneszenten Wellen

→ Kein vektorielles propagatives Verfahren!



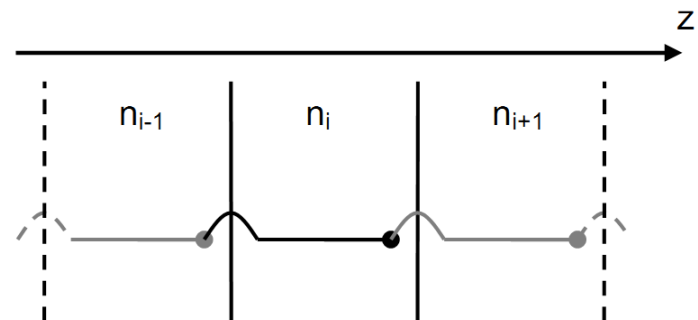
Prinzip

der propagativen Simulationsverfahren

Gegeben ist die Indexverteilung $n(\mathbf{r})$ eines Systems
Gesucht ist die Feldverteilung bei gegebener Eingangswelle
Propagative Lösung:

- System wird in Schichten der Dicke $Z/N_z = dz$ aufgeteilt, mit $\partial n(\mathbf{r}_\perp)/\partial z = 0$ und $\partial n(\mathbf{r}_\perp)/\partial \mathbf{r}_\perp \neq 0$
- iterative Ausbreitung mit Schrittlänge dz entlang der z -Achse (Divide & Conquer)
- keine Reflexionen, da unidirektionale Ausbreitung

→ unidirektionale Ausbreitung:



„Vector Wave Propagation Method“

Ein Beitrag zum elektromagnetischen Optikrechnen

Gesucht: propagatives Verfahren zur Ausbreitung von Vektorfeldern in großen Rechengebieten und ohne paraxiale Beschränkung!

→ Erweiterung der skalaren WPM auf Vektorfelder

1. Planwellenzerlegung (Fourier Transformation) des Eingangsfeldes
2. Transformation des Spektrums an Grenzflächen über 2x2 Matrix **M**

$$\tilde{\mathbf{E}}_t^{(2)}(\mathbf{k}_\perp, \mathbf{r}_\perp) = \mathbf{M}(\mathbf{k}_\perp, \mathbf{r}_\perp) \cdot \tilde{\mathbf{E}}_e^{(2)}(\mathbf{k}_\perp)$$

3. Ausbreitung lokal deformierter Vektorwellen

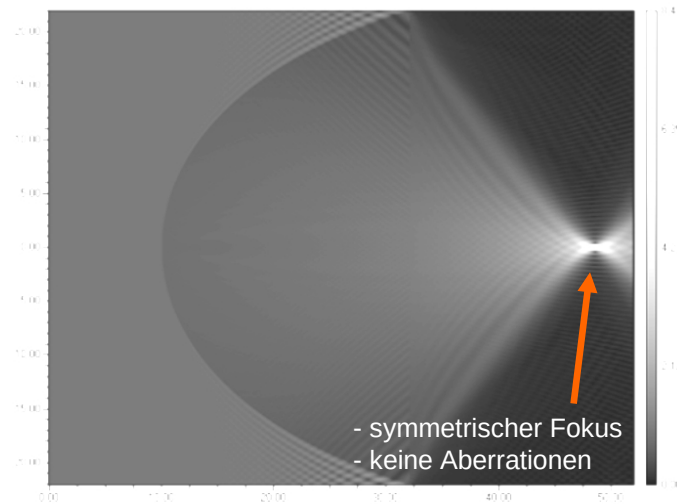
$$\mathbf{W}_t^{(2)}(\mathbf{k}_\perp, \mathbf{r}_\perp) = \tilde{\mathbf{E}}_t^{(2)} e^{+i(\mathbf{k}_\perp \cdot \mathbf{r}_\perp + k_{z,t} \delta z)} = \tilde{\mathbf{E}}_t^{(2)} \mathcal{P} e^{+i(\mathbf{k}_\perp \cdot \mathbf{r}_\perp)}$$

4. Ableitung der z-Komponente aus der Transversalität
5. Superposition über das Spektrum $d\mathbf{k}_\perp^2$

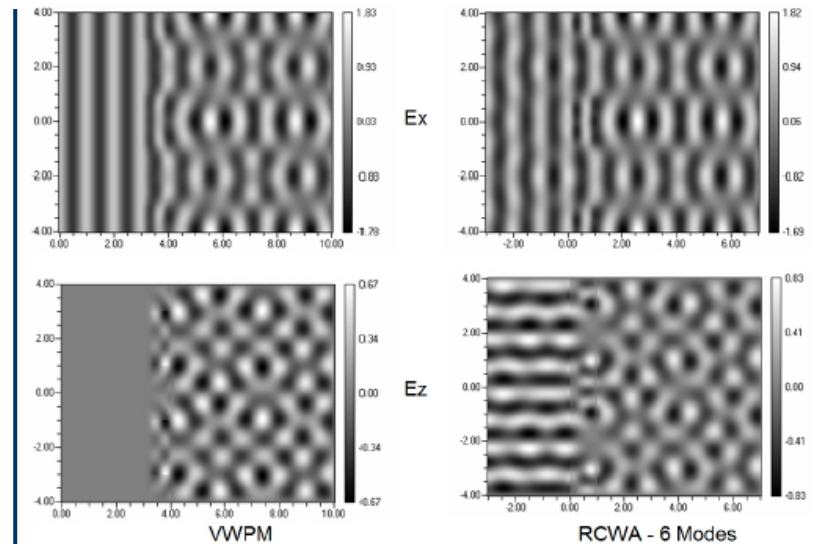
$$\mathbf{E}_t(\mathbf{r}_\perp) = \frac{1}{A} \iint \mathbf{W}_t(\mathbf{k}_\perp, \mathbf{r}_\perp) \frac{d^2 \mathbf{k}_\perp}{(2\pi)^2}$$

Verifikation Beispiel

„Perfekte Asphäre“ & Beugung am Phasengitter



Grundlage: „Theorie der perfekten
Asphäre“ (Ziolkowski, Brenner 2004)
Simulation eines perfekten Fokus
→ Ausbreitung aller spatialen
Frequenzen ohne Approximation



Übereinstimmung der Feldverteilung
→ Übereinstimmung des Spektrums
und der Amplituden

Aber: Keine Reflexionen

Bidirektionale VWPM

Reflexion an Grenzflächen

Erweiterung des unidirektionalen Verfahrens:

- 2a. Berechnung des reflektierten Vektorfeldes mit 2x2 Matrix \mathbf{R}

$$\tilde{\mathbf{E}}_e^{(2)-}(\mathbf{k}_\perp, \mathbf{r}_\perp) = \mathbf{R} \cdot \tilde{\mathbf{E}}_e^{(2)}(\mathbf{k}_\perp)$$

- 3. Ausbreitung des transmittierten und reflektierten Feldes durch inhomogenes Medium

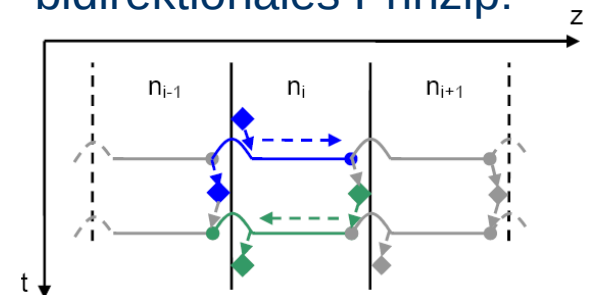
$$\mathbf{W}_t^{(2)+}(\mathbf{k}_\perp, \mathbf{r}_\perp) = (\tilde{\mathbf{E}}_t^{(2)+} + \tilde{\mathbf{E}}_t^{(2)-}) \mathcal{P} e^{+i\mathbf{k}_\perp \cdot \mathbf{r}_\perp}$$

- 5. Superposition aller spatialen Frequenzen

$$\mathbf{E}_t^+(\mathbf{r}_\perp) = \frac{1}{A} \iint \mathbf{W}_t^+ \frac{d^2\mathbf{k}_\perp}{(2\pi)^2}$$

$$\mathbf{E}_e^-(\mathbf{r}_\perp) = \frac{1}{A} \iint \mathbf{W}_e^- \frac{d^2\mathbf{k}_\perp}{(2\pi)^2}$$

bidirektionales Prinzip:



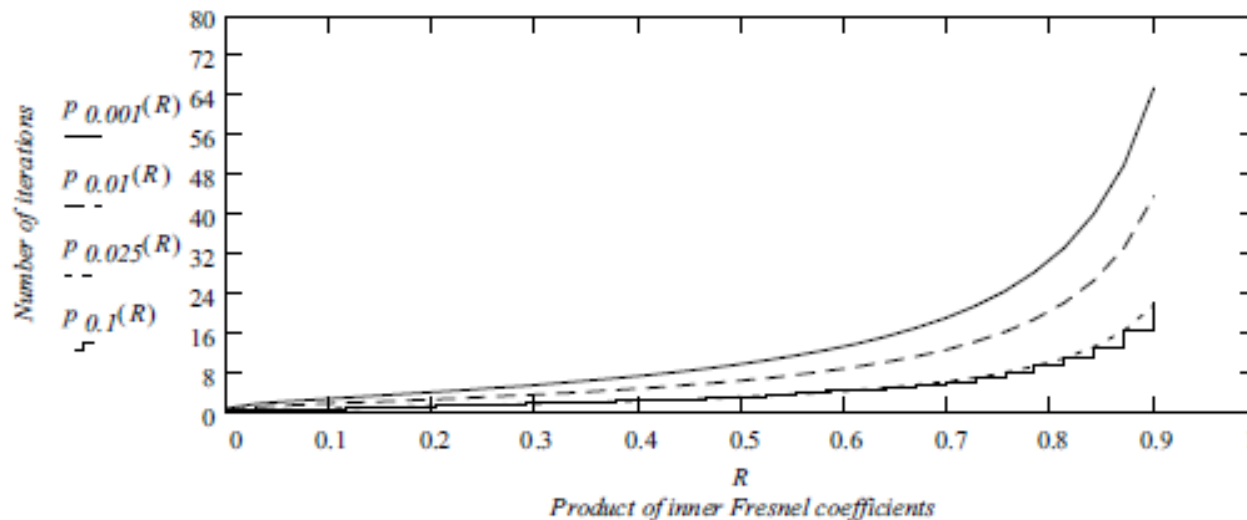
Rechengenauigkeit

Anzahl der Iterationen

Gegeben: Indexverteilung $n(\mathbf{r})$ (mit Mehrfachreflexionen),
gewünschte maximale Abweichung $a = E(p+1)/E(p) = \partial E / \partial p$

Gesucht: Anzahl der Forwärtsiterationen $p_a(R)$

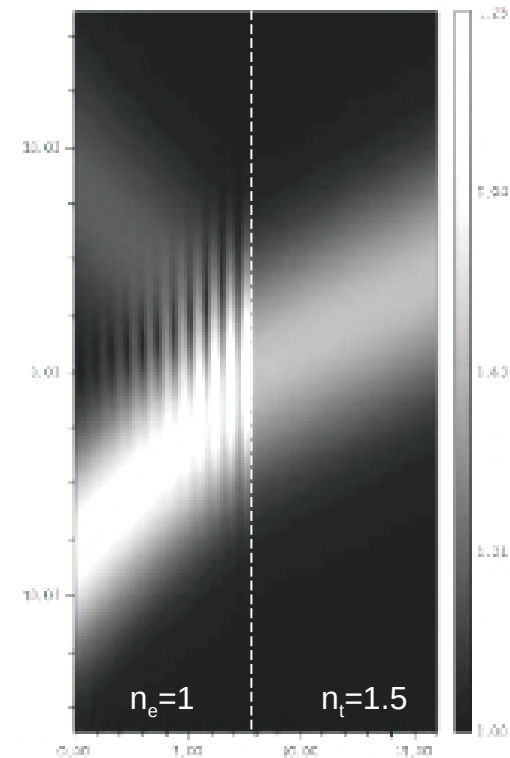
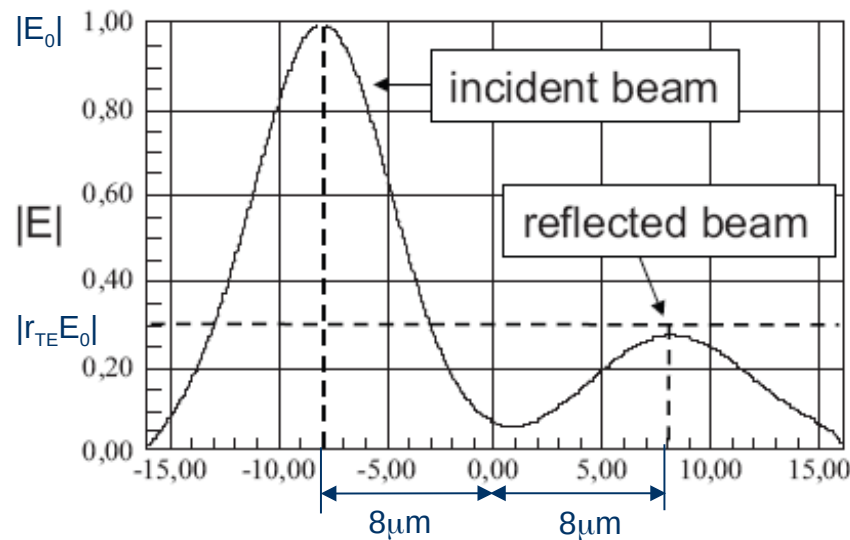
Lösung: $p > \lceil \log_R a \rceil \quad R = \max_{j \in \{1 \dots N-1\}} (|r_{j,j-1} r_{j,j+1}|)$



Verifikation

durch das Reflexionsgesetz

Gemäß dem Reflexionsgesetz gilt:
Einfallswinkel = Ausfallswinkel

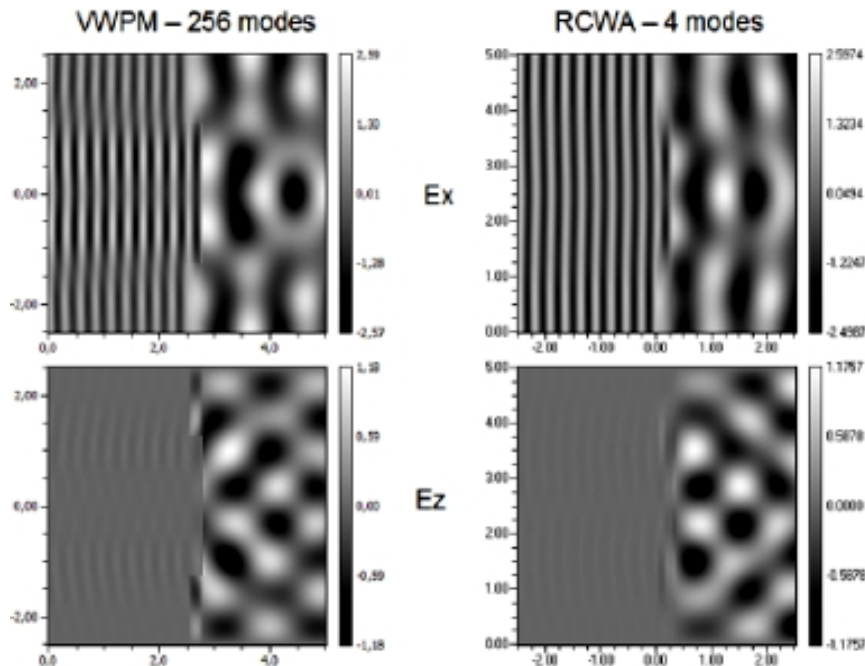


TE-polarized Gaussian beam
 at $\vartheta_e = 45^\circ$

➔ Nicht-Approximierte Berechnung
 der reflektierten Welle

Vergleich mit der RCWA

Bidirektionale VWPM - Beugung am Phasengitter



GaAs Gitter im Vakuum
 $n=3.647+i0.025$
 Periode: 5λ
 Duty-Cycle: 1:1
 Gitterhöhe: 0.3λ

TM-polarisierte Welle
 mit Amplitude 1V/m

$X=Z=5\mu\text{m}$
 256 Fourier-Moden

- ➔ Modulation des Feldes vor dem Phasengitter
- ➔ maximale Abweichung der Amplitude: 0.0713 V/m
 bei Maximumsamplitude 2,6 V/M ➔ 2,7%

Energieerhaltung

„Die Energie in einem energetisch isolierten System ist konstant.“

Beobachtung: Energieanstieg in nicht dissipativen Systemen

- gleiche Beobachtung bei skalarer WPM
(z.B. Wellenleiter mit hohem Indexsprung)
- Systeme mit evaneszentelem Charakter problematisch [1,2]

→ Ursache liegt nicht in vektorieller Berechnung!

Frage nach dem Einfluss der evaneszenten Fourier-Moden

1. Tiefpass-Filterung des Modenraumes \mathbf{k}_\perp → Energieverlust

- ev. Moden verantwortlich für Verletzung d. Energieerhaltung
- ev. Moden nicht vernachlässigbar

2. Tiefpass-Filterung der Indexverteilung $n(\mathbf{r}_\perp)$ → Energieanstieg

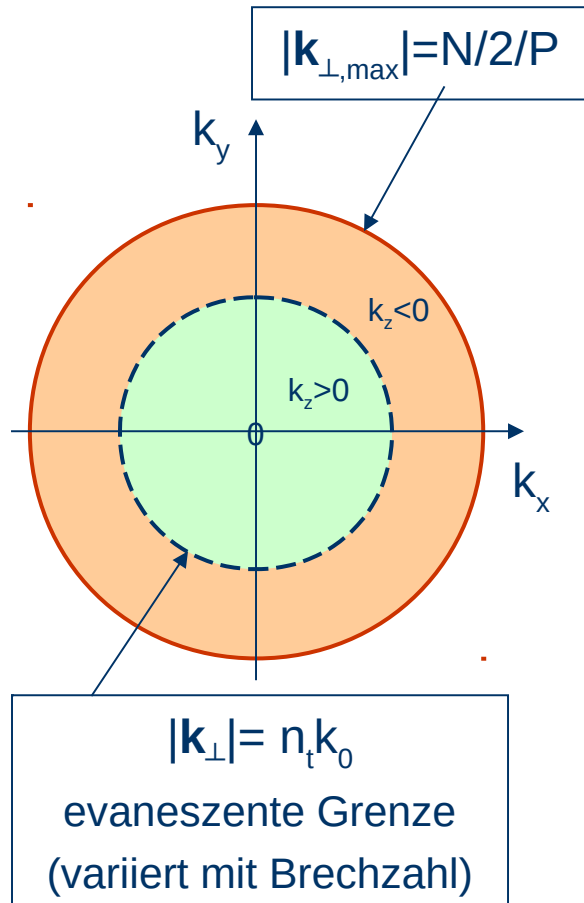
Ansatz: Transfer an der Grenzfläche über komplexe Matrix M
ist nur auf Teile des Spektrums anwendbar

[1] Rao, Steel, Scarmozzio „Complex Propagators for Evanescent Waves in Beam Propagation Method“, JLT, Vol 18, No 8, 2000

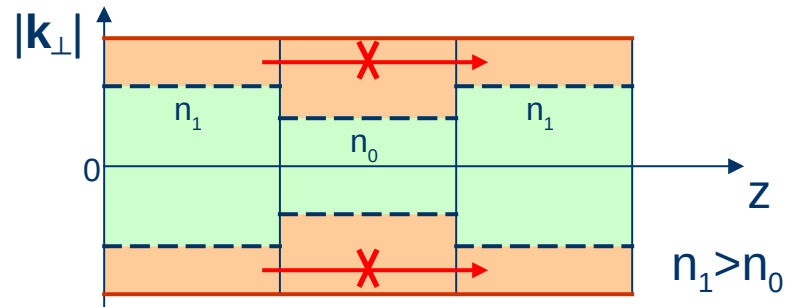
[2] Lu, Ho „Beam propagation method using a $[p-1/p]$ Pade approximant of the propagator“, Optics Letters, Vol 27, No 9, 2002

Evaneszente Moden in der VWPM

Modenselektion und Modellierung



1. Modenselektion durch 'reduzierten Propagator' \mathbf{P}



2. Modell der quergedämpften Welle nach Born & Wolf

prop. \rightarrow ev.:

$$\tilde{\mathbf{E}}_t(\mathbf{k}_\perp, \mathbf{r}_\perp) = \begin{pmatrix} \hat{t}_{TM} \hat{k}_{z,t} / k_t (\tilde{\mathbf{E}}_e \cdot \mathbf{e}_{TM}) \\ \hat{t}_{TE} (\tilde{\mathbf{E}}_e \cdot \mathbf{e}_{TE}) \\ \hat{t}_{TM} n_e k_\perp / n_t / k_t (\tilde{\mathbf{E}}_e \cdot \mathbf{e}_{TM}) \end{pmatrix}$$

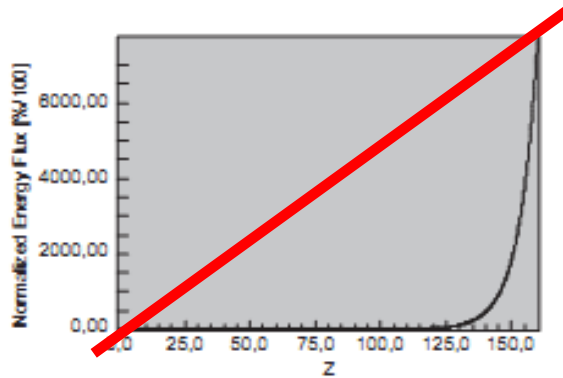
ev. \rightarrow prop.:

$$\tilde{\mathbf{E}}_t^{(2)}(\mathbf{k}_\perp, \mathbf{r}_\perp) = \begin{pmatrix} \hat{t}_{TM} k_{z,t} / k_t \tilde{\mathbf{E}}_{e,x} \\ \hat{t}_{TE} \tilde{\mathbf{E}}_{e,y} \end{pmatrix}$$

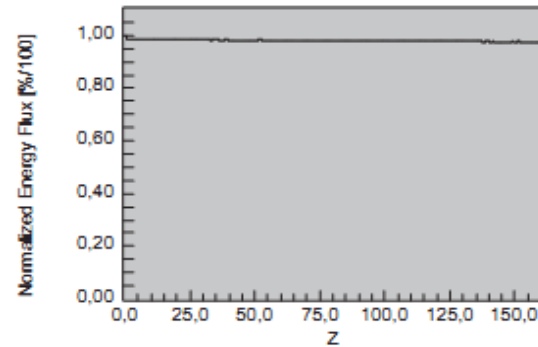
Überprüfung am Beispiel

Energieerhaltung und reduzierter Propagator

Nicht-reduzierter Propagator:



reduzierter Propagator:



$$n_c = 1$$

$$n_f = 1.5$$

Praktische Anwendung

Resonante Phasengitter und lokale Absorption

Optimierungsproblem I:

Erhöhung der lokalen Absorption in dünnen Schichten für eine Wellenlänge (optischer „on-chip“ Detektor)

→ Erhöhung der Absorption ~11 (RCWA) [1]

Optimierungsproblem II:

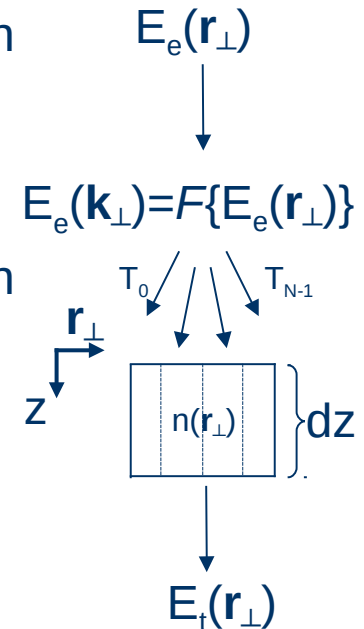
Erhöhung der lokalen Absorption in dünnen Schichten über gesamtes Spektrum (Dünnschichtsolarzelle)

→ Erhöhung der Absorption ~1.5 (VWPM)

Aber: Laufzeitproblematik: 3D-VWPM ist in $O(n^4)$

→ Parallele VWPM:

- Verteilung der Berechnung über den Ort \mathbf{r}
- Simulationszeit skaliert linear mit Anzahl der Threads



Zusammenfassung

- Berechnung von elektromagnetischen Vektorfeldern in inhomogenen Systemen ohne paraxiale Einschränkung
- Bidirektionale Erweiterung zur Berechnung von (Mehrfach-) Reflexionen mit Kriterium zur Kontrolle der Rechengenauigkeit
- Parallele Berechnung reduziert Laufzeit
- Verwendung des propagativen Verfahrens reduziert Speicherbedarf
- Praktische Anwendbarkeit am Beispiel der Dünnschichtsolarzelle

Die VWPM ist geeignet zur **Simulation von Vektorwellen** in **großen Rechengebieten** und **ohne paraxiale Einschränkung!**



Vielen Dank!

Rechengenauigkeit

bei Mehrfachreflexionen

Frage: Wieviele Iterationen sind nötig ?

- Betrachtung der relativen Abweichung des el. Vektorfeldes im Resonator
- Finesse F liefert ein Kriterium für die Güte des Resonators (Anzahl der Reflexionen)

$$F_j = 4r_{j,j+1}r_{j,j-1}/(1 - r_{j,j+1}r_{j,j-1})^2$$

- $E_j(p+1)/E_j(p) = \partial E/\partial p = a_j(p)$ ist eine streng monoton fallende Funktion mit Aussage über die relative Abweichung von E_j für $p \rightarrow p+1$

$$|r_{j,j-1}r_{j,j+1}|^p < a_j$$

mit p ist die Anzahl der Vorwärtsiterationen

$$p > \lceil \log_R a \rceil \quad R = \max_{j \in \{1 \dots N-1\}} (|r_{j,j-1}r_{j,j+1}|)$$

→ Anzahl der Iterationen = $2p$, damit $|E_{\text{VWPM}} - E_{\text{Theorie}}| < a$

Paraxiale Approximation und „Split Step Propagation“ Algorithmus

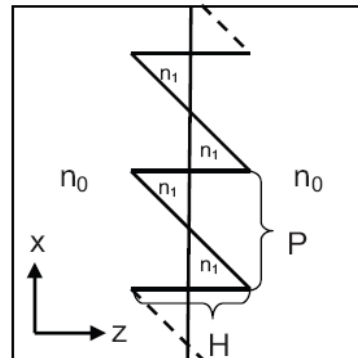
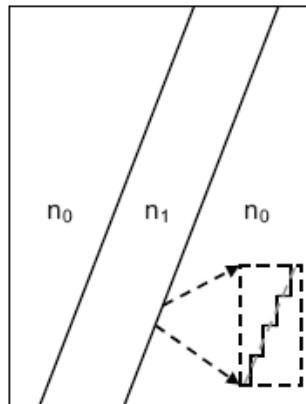
$$\begin{aligned}
 \sqrt{n^2 k_0^2 - k_\perp^2} &= \sqrt{(\bar{n} + \delta n)^2 k_0^2 - k_\perp^2} \\
 &= \sqrt{\bar{n}^2 k_0^2 - k_\perp^2 + 2\bar{n} \delta n k_0^2 + \delta n^2 k_0^2} \\
 &= \sqrt{\bar{n}^2 k_0^2 - k_\perp^2} \cdot \sqrt{1 + \frac{2\bar{n} \delta n k_0^2 + \delta n^2 k_0^2}{\bar{n}^2 k_0^2 - k_\perp^2}} \\
 &= \sqrt{\bar{n}^2 k_0^2 - k_\perp^2} \cdot \left(1 + \frac{\bar{n} \delta n k_0^2}{\bar{n}^2 k_0^2 - k_\perp^2} + \mathcal{O}(\delta n^2) \right) \\
 &\stackrel{(1)}{\approx} \sqrt{\bar{n}^2 k_0^2 - k_\perp^2} + \frac{\bar{n} \delta n k_0^2}{\sqrt{\bar{n}^2 k_0^2 - k_\perp^2}} \\
 &\stackrel{(2)}{\approx} \sqrt{\bar{n}^2 k_0^2 - k_\perp^2} + \frac{\bar{n} \delta n k_0^2}{\bar{n} k_0} \\
 &= \sqrt{\bar{n}^2 k_0^2 - k_\perp^2} + k_0 \delta n = k_z
 \end{aligned}$$

kleine Indexvariationen

Paraxiale Ausbreitung

$$u(\mathbf{r}_\perp; z + \delta z) = \mathcal{F}^{-1} \left\{ \mathcal{F} \{ u(\mathbf{r}_\perp; z) \} \underbrace{e^{i \delta z \sqrt{\bar{n}^2 k_0^2 - k_\perp^2}}}_{\mathcal{D}} \right\} \underbrace{e^{i \delta z \delta n(\mathbf{r}_\perp; z) k_0}}_S$$

Rechengenauigkeit und z-Sampling



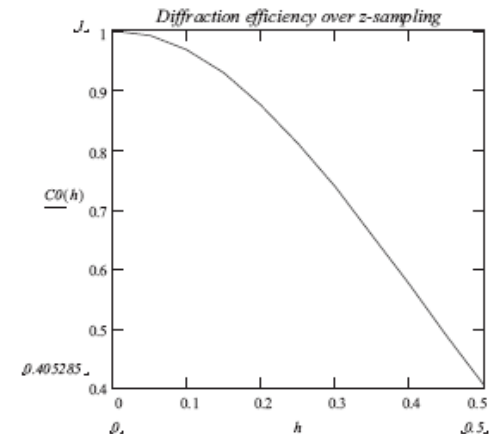
$$\begin{aligned} \delta\phi(x, \delta z) &= \frac{2\pi}{\lambda} h(x) \delta n \\ &= k_0 h(x) (n_1 - n_0) \\ &= 2\pi (n_1 - 1) \frac{2}{P} \frac{\delta z}{\lambda} x \end{aligned}$$

$$u(x, \delta z) = e^{i\delta\phi(x, \delta z)}$$

$$h(x) = \frac{H}{P} x$$



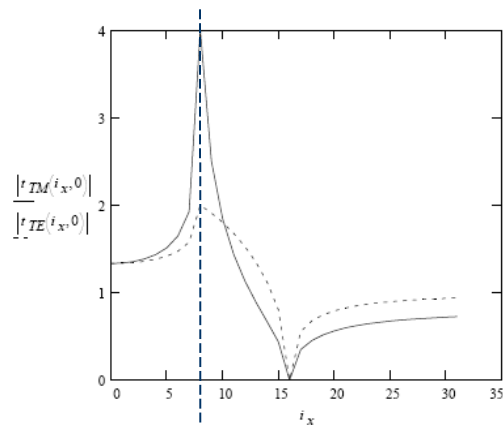
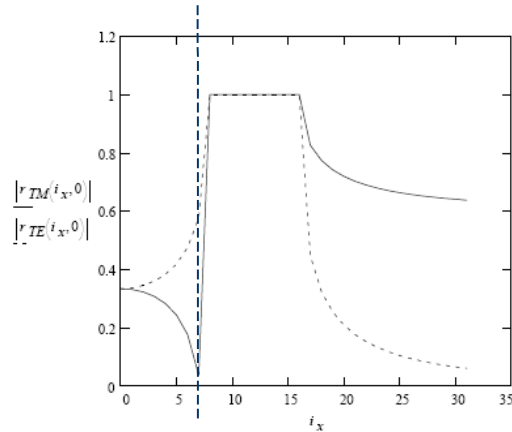
$$c_m(\delta z) = \left| \int_{-P/2}^{P/2} u(x, \delta z) e^{i\frac{2\pi}{P} m x} dx \right|^2$$



Fresnel Koeffizienten (1/2)

für propagative und evaneszente Moden

$n_t > n_e$



$n_e > n_t$

