

MASARYK UNIVERSITY
F9602 Interakce elektromagnetického pole se živou hmotou

GSVIT hands-on tutorial

Petr Steindl

Faculty of Science
Department Condensed matter physics

1. září 2017

Obsah

1	Teorie elektromagnetického pole	2
1.1	Maxwellovy rovnice	2
1.2	Optické vlastnosti látek	3
2	FDTD solver GSVIT	5
2.1	Metoda FDTD	5
2.1.1	Volba velikosti kroku	6
2.2	GSVIT	7
2.3	Jak seznam parametrů vytvořit	7
3	COMPUTATIONAL DOMAIN	9
4	BASIC PARAMETERS	10
5	BOUNDARY CONDITIONS	12
5.1	type	12
6	SOURCE	14
7	MEDIA	17
7.1	Vytvoření souboru pro zkoumaný předmět	17
7.1.1	code_shape	18
7.1.2	shape_volume_def	18
7.1.3	Načtení ze souboru	19
7.1.4	material	20
7.2	MATMODE.CHECK	21
8	OUTPUTS	22
9	NEAR FIELD to FAR FIELD	25
10	Příklad: Odraz na rovinném rozhraní	27
10.1	Zadání problému	27
10.2	Parametrový soubor	27
10.3	Výsledky simulace	30
	Literatura	33

Projevy interakce světla s materiálovými předměty pozorujeme v každodenním životě a k jejich popisu byla vybudována komplexní teorie interakce elektromagnetického záření v materiálovém prostředí Maxwellem [1]. Pro řešení interakce světla při dopadu na rovinné rozhraní či pro interakci s kulovým předmětem existují analytická řešení, pro složitější geometrie je třeba použít numerické řešení.

V posledních letech se oblíbenou metodou na řešení jevů spojených s šířením elektromagnetického záření v materiálovém prostředí se složitou geometrií stala metoda konečných diferencí v časové oblasti (Finite Difference Time Domain, FDTD).

V první kapitole připomeneme základní teoretický popis pomocí Maxwellových rovnic. V kapitole 2 nastíníme fungování FDTD metody a představíme si FDTD solver GSVIT. Kapitoly 3-9 slouží jako příručka ke GSVITu a přibližují jeho používání. V poslední kapitole demonstrujeme řešení příkladu odrazu elektro-magnetického vlnění na rovném rozhraní kov-vzduch.

Kapitola 1

Teorie elektromagnetického pole

1.1 Maxwellovy rovnice

Interakci světla s materiálovým objektem lze popsat pomocí Maxwellových rovnic:

$$\nabla \cdot \mathbf{D} = \rho_f, \quad (1.1)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0, \quad (1.2)$$

$$\nabla \times \mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t}, \quad (1.3)$$

$$\nabla \times \mathbf{H} = \mathbf{J}_f + \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t}. \quad (1.4)$$

Tyto makroskopické rovnice vzájemně propojují elektrickou \mathbf{D} a magnetickou \mathbf{B} indukci s intenzitou elektrického \mathbf{E} a magnetického \mathbf{H} pole skrze hustotu volného náboje ρ_f a hustotu volného proudu \mathbf{J}_f .

Elektrické a magnetické pole při šíření v materiálovém prostředí vyvolává elektrickou (polarizaci \mathbf{P}) a magnetickou (magnetizaci \mathbf{M}) odezvu, která modifikuje intenzitu celkového elektrického a magnetického pole dle následujících vztahů

$$\mathbf{D} = \epsilon_0 \mathbf{E} + \mathbf{P}, \quad (1.5)$$

$$\mathbf{H} = \frac{1}{\mu_0} \mathbf{B} - \mathbf{M}, \quad (1.6)$$

kde ϵ_0 a μ_0 jsou elektrická permitivita a magnetická permeabilita vakua.

Makroskopické (globální) Maxwellovy rovnice (1.2)-(1.7) jsou doplněny třemi rovnicemi mikroskopickými (lokálními)

$$\mathbf{J}_f = \hat{\sigma} \mathbf{E}, \quad (1.7)$$

$$\mathbf{M} = \mu_0 \hat{\mu}_r \mathbf{H}, \quad (1.8)$$

$$\mathbf{P} = \epsilon_0 \hat{\chi} \mathbf{E}, \quad (1.9)$$

kde $\hat{\sigma}$ je tenzor elektrické vodivosti, $\hat{\mu}_r$ je tenzor relativní permeability a $\hat{\chi}$ je tenzor elektrické susceptibility, který udává, jak snadno se materiál vlivem vnějšího elektrického pole polarizuje.

Dosažením rovnice (1.10) do rovnice (1.6) přepíšeme závislost elektrické indukce \mathbf{D} na elektrické intenzitě \mathbf{E} pomocí standardnější veličiny relativní permitivity $\hat{\epsilon}_r = 1 + \hat{\chi}$:

$$\mathbf{D} = \epsilon_0 \hat{\epsilon}_r \mathbf{E} \quad (1.10)$$

$$\mathbf{B} = \mu_0 \hat{\mu}_r \mathbf{H}, \quad (1.11)$$

Veličiny $\hat{\sigma}$, $\hat{\mu}_r$ a $\hat{\epsilon}_r$ jsou jedinečné pro každý materiál, hovoříme o nich jako o materiálových parametrech, a jejich znalost nám postačuje k vyřešení Maxwellových rovnic v materiálovém prostředí.

Aby se elektromagnetické pole šířilo materiály spojitě, je třeba, aby na rozhraní materiálů byly splněny následující lokální podmínky, které spojitost zaručují. Uvádíme rovnice příslušející rozhraní dvou materiálů, kde materiály odlišujeme indexováním:

$$(\mathbf{D}_2 - \mathbf{D}_1) \cdot \mathbf{n} = \rho_f^m, \quad (1.12)$$

$$(\mathbf{B}_2 - \mathbf{B}_1) \cdot \mathbf{n} = 0, \quad (1.13)$$

$$\mathbf{n} \times (\mathbf{E}_2 - \mathbf{E}_1) = \mathbf{0}, \quad (1.14)$$

$$\mathbf{n} \times (\mathbf{H}_2 - \mathbf{H}_1) = \mathbf{J}_f^m, \quad (1.15)$$

$$(1.16)$$

kde ρ_f^m symbolizuje volný náboj na rozhraní materiálů a \mathbf{J}_f^m značí volný proud mezi materiály; \mathbf{n} je jednotkový vektor kolmý k rozhraní materiálů.

1.2 Optické vlastnosti látek

Optické vlastnosti látek ovlivňují šíření elektromagnetických vln k jejichž popisu se obvykle používá komplexní index lomu N a komplexní dielektrická funkce ϵ_r . Tyto dvě optické veličiny jsou svázány vztahy

$$N = n + ik = \sqrt{\epsilon_r} = \sqrt{\epsilon_1 + i\epsilon_2}, \quad (1.17)$$

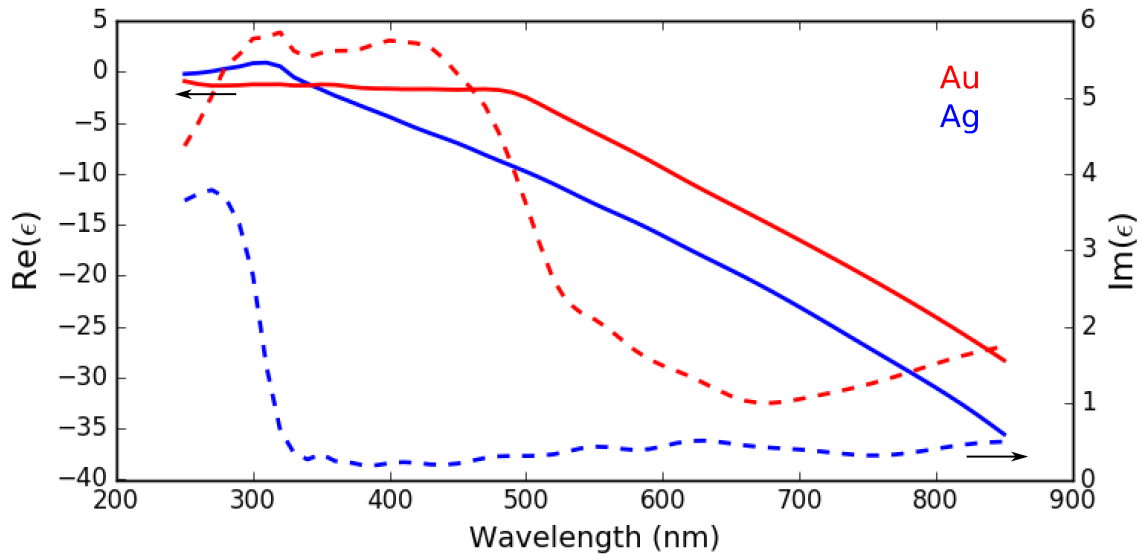
kde jednotlivé komponenty lze navzájem přepočítat pomocí matematických úprav. Uvádíme vyjádření komponent dielektrické funkce v závislosti pouze na složkách komplexního indexu lomu lze psát

$$\epsilon_1 = n^2 - k^2, \quad (1.18)$$

$$\epsilon_2 = 2nk. \quad (1.19)$$

Jelikož veličiny N a ϵ_r popisují tytéž optické vlastnosti, je pouze na zvyku, které se pro popis kterých fenoménů používají. Například pro vyjádření reflexe nebo transmise elektromagnetického záření bývá preferován popis pomocí komplexního indexu lomu N . Tattáž veličina se upřednostňuje k popisu šíření elektromagnetické vlny prostředím, kde n vystupuje ve vztahu pro fázovou rychlost vlny a k popisuje útlum vlny během šíření. Naopak dielektrická funkce se volí při popisu rozptylu na částicích, jejichž velikost je malá ve srovnání s vlnovou délkou záření, nebo při popisu mikroskopických mechanismů zodpovědných za optické jevy.

Na obrázku 1.1 vidíme spektrální průběh reálné a imaginární části dielektrické funkce pro typické kovy používané v plazmonice ve viditelném spektru: zlato a stříbro.



OBRÁZEK 1.1: Závislost reálné (plná čára) a imaginární části (přerušovaná) dielektrické funkce pro zlato (červeně) a stříbro (modře) [2]. Šipky naznačují příslušnost křivek k jednotlivým osám.

Kapitola 2

FDTD solver GSVIT

V této kapitole jednoduše přiblížíme fungování metody FDTD a zaměříme se na základní strukturu solveru GSVIT, kterou v dalších kapitolách budeme podrobněji komentovat.

2.1 Metoda FDTD

Metoda FDTD je založena na diskretizaci Maxwellových rovnic (1.4), (1.5) a (1.12) v prostoru i čase. Na 1D příkladě budeme demonstrovat fungování této metody[3].

Uvažujme lineárně polarizovanou elektromagnetickou vlnu šířící se ve směru osy z , jejíž vektor elektrické intenzity \mathbf{E} kmitá ve směru x a vektor magnetické intenzity \mathbf{H} ve směru y . Nejprve je třeba prostor i čas diskretizovat, k tomuto účelu zavedeme indexy m, n , pomocí nichž rozdělíme prostor (ve směru osy z) a čas tak, že m -tý prostorový krok a n -tý časový krok budou s polohou z a časem t souviset vztahy

$$z = m\Delta z, \quad (2.1)$$

$$t = n\Delta t. \quad (2.2)$$

K diskretizaci elektromagnetického pole nahradíme parciální derivace v Maxwellových rovnicích (1.4), (1.5) a (1.12) centrálními diferencemi (předvádíme pro elektrickou intenzitu \mathbf{E} , pro magnetickou intenzitu \mathbf{H} by vztahy vypadaly obdobně),

$$\frac{\partial \mathbf{E}}{\partial z} \rightarrow \frac{\Delta \mathbf{E}}{\Delta z} = \frac{\mathbf{E}(m + \frac{1}{2}) - \mathbf{E}(m - \frac{1}{2})}{\Delta z}, \quad (2.3)$$

$$\frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} \rightarrow \frac{\Delta \mathbf{E}}{\Delta t} = \frac{\mathbf{E}(n + \frac{1}{2}) - \mathbf{E}(n - \frac{1}{2})}{\Delta t}. \quad (2.4)$$

Po této náhradě vypadají Maxwellovy rovnice (1.4) a (1.5) následovně:

$$\frac{E_x^{n+1}(m) - E_x^n(m)}{\Delta t} = -\frac{H_y^n(m + \frac{1}{2}) - H_y^n(m - \frac{1}{2})}{\epsilon_0 \Delta z}, \quad (2.5)$$

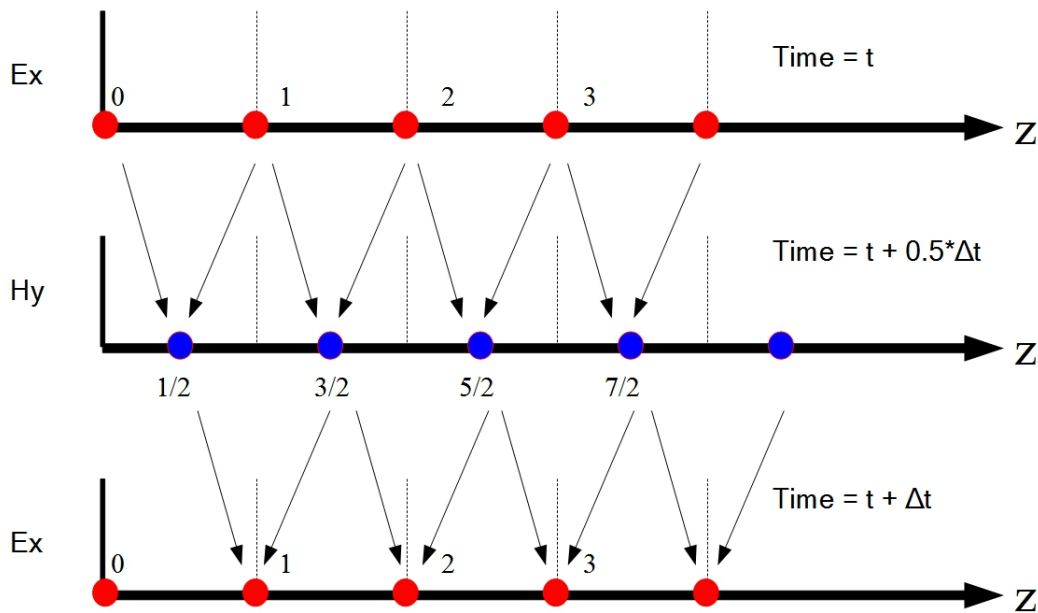
$$\frac{H_y^{n+1}(m + \frac{1}{2}) - H_y^{n-\frac{1}{2}}(m + \frac{1}{2})}{\Delta t} = -\frac{E_x^{n+\frac{1}{2}}(m+1) - E_x^{n+\frac{1}{2}}(m)}{\mu_0 \Delta z}. \quad (2.6)$$

Rovnice (2.5) a (2.6) se následně střídavě řeší v jednotlivých prostorových a časových krocích. Střídání řešení rovnic v prostorových a časových krocích vede k tomu, že časový vývoj jednoho pole v následujícím kroku je počítán z prostorového vývoje druhého pole v kroku předcházejícím.

Zaměříme-li se na vývoj pole v určitém místě v prostoru, lze hodnotu v každém časovém kroku určit ze znalosti polí v předchozím časovém kroku, viz. obrázek 2.1. Toto bude zřejmé, pokud vyjádříme pole pomocí diskretizovaných Maxwellových rovnic (2.5) a (2.6) v posledním časovém kroku

$$E_x^{n+\frac{1}{2}}(m) = E_x^{n-\frac{1}{2}} - \frac{\Delta t}{\epsilon_0 \Delta z} \left[H_y^n \left(m + \frac{1}{2} \right) - H_y^n \left(m - \frac{1}{2} \right) \right], \quad (2.7)$$

$$H_y^{n+1} \left(m + \frac{1}{2} \right) = H_y^n \left(m + \frac{1}{2} \right) - \frac{\Delta t}{\mu_0 \Delta z} \left[E_x^{n+\frac{1}{2}}(m+1) - E_x^{n+\frac{1}{2}}(m) \right]. \quad (2.8)$$



OBRÁZEK 2.1: Demonstrace výpočtu elektromagnetického pole Yeeho algoritmem, kdy se střídají v jednotlivých časových krocích výpočty elektrického a magnetického pole. Obrázek převzat z [4].

2.1.1 Volba velikosti kroku

Velikost kroku je pro FDTD zásadním parametrem, ovlivňuje totiž nejen kvalitu získaných výsledků, ale taktéž náročnost a délku výpočtu. Obecně platí, že každý rozměr buňky by měl být menší, než desetina nejmenší v simulaci použité vlnové délky λ_{\min} ,

$$\Delta z \leq \frac{\lambda_{\min}}{10}. \quad (2.9)$$

Dále je třeba dbát na to, aby na simulované struktury připadlo dostatečné množství buněk. V neposlední řadě pamatujme na to, že diskretizací jsme prostor rozdělili na kvádry, takže pokud z nich chceme vysvavět zakřivený povrch, je nutné taktéž uzpůsobit (zjemnit) krok.

Časový krok se řídí tzv. Courantovou podmínkou

$$\Delta t \leq \frac{\Delta z}{2c}, \quad (2.10)$$

kde c značí rychlost světla ve vakuu.

2.2 GSVIT

GSVIT[5] je jeden z mnoha solverů k řešení Maxwellových rovnic v časové doméně. Jeho výhodou oproti komerčním solverům (např. Lumerical[6]) je jeho přístupnost, neboť jde o open source solver. Tato výhoda je ovšem znevážena horším grafickým rozhraním pro nastavení řešené úlohy.

XSVIT, grafické rozhraní GSVITu, ve skutečnosti generuje pouze textový soubor *.par*, který se následně spouští pomocí binárního programu, což přináší možnost si parametrové vstupní soubory snadno skriptovat.

2.3 Jak seznam parametrů vytvořit

Seznam parametrů doporučujeme vytvářet v libovolném textovém editoru (případně v grafickém prostředí XSVIT). Po naplnění dokumentu kýženými parametry, přidáme při ukládání souboru příponu *.par*, díky čemuž bude k obsahu přístupovat GSVIT jako k seznamu parametrů.

Aby GSVIT věděl, který parametr si má kam zařadit, je důležité dodržovat určitou syntax (viz dále), která se opírá o několik hesel, psaných kapitálkami.

Zde uvádíme možnou ukázkou parametrového souboru *main.par*:

```

POOL
200 200 200 1e-06 1e-06 1e-06

COMP
800

VERBOSE
1

THREADS
-1

GPU
0

UGPU
0

SOURCE_TSF
10 10 10 190 190 190 0 0 0 1 5.5e-07 1.0

BOUNDARY_ALL
```

```
liao

OUT_IMAGE
Ey 10 -1 -1 100 Ey_XY

OUT_FILE
mfmball_depGWY_mfm_10pixel1e-6.gwy

MEDIUM_VECTOR
ball.txt
```

Spuštění simulace

Spuštění simulace je možné pomocí příkazové řádky zadáním následujícího příkazu, v ukázce naznačujeme spuštění souboru `main.par`, jehož naplnění předvedeme v následujících kapitolách,

```
steindl: ~/gsvit/bin$ ./gsvit main.par
```

případně z grafického rozhraní XSVIT.

Kapitola 3

COMPUTATIONAL DOMAIN

POOL

POOL
200 250 200 1e-06 1e-06 1e-06

Heslo **POOL** odkazuje na definici výpočetního objemu.

První tři argumenty (označeny červeně) rozdělí výpočetní kvádr na daný počet segmentů v daném směru; (v ukázce postupně 200 segmentů ve směru x , 250 ve směru y a 200 ve směru z).

Další tři argumenty (označeny modře) nastavují velikost jednoho segmentu v každém směru; (v ukázce jde o segment – krychličku o délce hrany 1e-06 metru).

Kapitola 4

BASIC PARAMETERS

COMP

COMP
800

Heslo **COMP** charakterizuje výpočetní čas, jako argument přijímá počet časových kroků (v ukázce jsme nastavili 800 časových kroků).

DT_MULT

DT_MULT
0.5

Heslo **DT_MULT** nastavuje multiplikativní faktor pro časový krok. Přidání tohoto parametru je především nutné pro pokročilé modely kovů.

Výše jsme zvolili hodnotu multiplikativního faktoru 0.5, čímž jsme dvakrát zkrátily velikost časového kroku.

VERBOSE

VERBOSE
1

Heslo **VERBOSE** je spojeno s množstvím vypsaných informací od GSVITu v průběhu výpočtu.

VERBOSE = 0 nevypisuje nic.

VERBOSE = 1 vypisuje pouze číslo kroku, který probíhá.

VERBOSE > 1 vypisuje informace o stavu dokončení jednotlivých fází (především stav započtení okrajových podmínek pro jednotlivé složky elmag. záření).

THREADS

THREADS

-1

THREADS souvisí s počtem použitých jader k výpočtu. Lze nastavit hodnotu -1, která odpovídá automatické detekci počtu jader a následnému využití všech automaticky dohledaných jader.

GPU

GPU

0

GPU souvisí s počtem použitých grafických karet, při nastavení GPU =< @0@ > probíhá výpočet na procesoru počítače.

Kapitola 5

BOUNDARY CONDITIONS

Při výpočtu FDTD hrají zásadní roli okrajové podmínky. V GSVITu se dají nastavit okrajové podmínky pro celý početní objem stejného typu **BOUNDARY_ALL**, pro každou stěnu výpočetního kvádrů podmínky jiné **BOUNDARY**, případně podmínky periodické **MBOUNDARY**.

Z počátku pojednáme o možných typech okrajových podmínek.

5.1 type

Typ **none** odpovídá hranici bez odrazu, tedy představuje rozhraní mezi výpočetním objemem a ideálním elektrickým vodičem.

Typ **liao** odpovídá druhému řádu absorpce, poskytuje základní absorpci, ovšem ne tak kvalitní jako okrajové podmínky **cpml**.

Typ **cpml** (Convolutional Perfectly Matched Layer) očekává parametry **depth**, **power**, σ_{\max} , a_{\max} , κ_{\max} a pomocí nich dopočítává absorpci. Tato metoda je navržena tak, aby rozhraní neodráželo žádné vlny zpět do výpočetního objemu.

Parametry σ_{\max} , a_{\max} , κ_{\max} slouží ke generování souřadnic protahování a polynomální tlumení stupně **power** na vrstvě tloušťky **depth**.

Při nastavení $\sigma_{\max} = -1$, bude parametr σ_{\max} optimalizován. Aby byl výpočet stabilní, musí být parametry σ_{\max} , a_{\max} kladné a $\kappa_{\max} > 1$.

BOUNDARY

V této sekci se zaměříme na zápis podmínek pro jednotlivé hranice výpočetního objemu. Postupně jsou ukázány zápisy pro různé typy okrajových podmínek.

```

BOUNDARY_XO
liao

BOUNDARY_XN
liao

BOUNDARY_YO
cpml 10 3 -1 0.03 4

BOUNDARY_YN
cpml 10 3 -1 0.03 4

BOUNDARY_ZO
none

BOUNDARY_ZN
none

```

Výpočetní objem bude tedy ohraničen ve směru osy x okrajovými podmínkami **liao**, ve směru y **cpml** (s parametry **depth=10**, **power=3**, $\sigma_{\max}=-1$, $a_{\max}=0.03$, $\kappa_{\max}=4$), ve směru z vlna volně opouští na obou koncích výpočetní objem.

BOUNDARY_ALL

V případě, že chceme pro všechny hranice nastavit stejný typ okrajových podmínek, použijeme příkaz **BOUNDARY_ALL**. Ke spuštění potřebujeme jen upřesnit typ okrajových podmínek (typy okrajových podmínek jsou uvedeny v sekci **type**). Uvádíme příklad použití **liao** podmínek (okrajové podmínky **none**).

```

BOUNDARY_ALL
liao

```

MBOUNDARY

GSVIT umožňuje nastavit i umělé periodické uvnitř výpočetního objemu. Ukážeme zápis pro umělé podmínky vložené na pozici $x = 10$ a $x = 90$, námi nenastavené hodnoty jsou automaticky nastaveny na okraj výpočetního objemu.

```

MBOUNDARY_XO
periodic 10

MBOUNDARY_XN
periodic 90

```

Zde je třeba poznamenat, že nastavení typu **MBOUNDARY_ALL**, jak bychom mohli intuitivně očekávat, které funguje pro nastavení všech okrajových podmínek na stejný typ, není podporováno.

Kapitola 6

SOURCE

Total/Scattered field source – TSF_SOURCE

```
SOURCE_TSF
area_from area.to *angles mode
```

Rovinná vlna (TSF) má 4 základní argumenty – odkud kam se v objemu šíří, pod jakým úhlem dopadá na objem a vlastnosti záření.

Tedy na místě `area_from` (`x_start`, `y_start`, `z_start`) a `area.to` (`x_end`, `y_end`, `z_end`) se očekávají souřadnice k vymezení objemu, ve kterém se bude záření šířit.

`*angles` (θ , ϕ , ψ) první dva úhly určují orientaci šíření vlny výpočetním objemem, viz obrázek 6.1. V případě nastavení nulových úhlů dopadá záření kolmo na stěnu výpočetního kvádrů a není nutné tento argument zadávat. Třetí argument udává polarizaci propagující rovinné vlny. **Úhly je třeba zadávat v radiánech!**

Abychom určili charakter záření, lze volit ze tří módů:

`mode = 0` umožňuje načíst průběh elektrického pole ze souboru, je nutné, aby data v souboru byla uspořádána do dvou sloupců, kde první sloupec odpovídá jednotlivým časovým krokům (zde je třeba dbát, aby v souboru bylo obsaženo alespoň stejně hodnot, kolik jsme zadali časových kroků v **COMP**). Tato varianta si vyžádá zadat do zdrojového souboru.

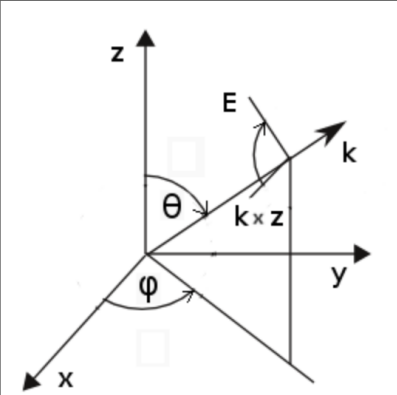
```
SOURCE_TSF
area_from area.to *angles 0 název_souboru
```

V `mode = 1` si GSVIT vytvoří sinusový signál sám, postačí mu dodat vlnovou délku [v metrech] a amplitudu [ve Voltech] záření. Do zdrojového souboru tedy zapíšeme.

```
SOURCE_TSF
area_from area.to *angles 1 vlnová_délka amplituda
```

`mode = 2` je obdobou `mode = 1` s gaussovským tlumením. Signál si opět GSVIT vytvoří sám, musíme mu jen dodat vlnovou délku záření [v metrech], šířku gaussovské obálky [v počtu časových kroků] a amplitudu [ve Voltech] záření. Do zdrojového souboru se zapisuje

direction	polarisation	theta [deg]	phi [deg]	psi [deg]
x axis	y	90	0	0
x axis	z	90	0	90
y axis	x	90	90	0
y axis	z	90	90	90
z axis	x	0	0	90
z axis	y	0	0	0



OBRÁZEK 6.1: Obrázek zachycující smysl úhlů a způsob nastavení polarizace podél příslušné osy. Obrázek převzat z dokumentace GSVIT [5].

SOURCE_TSF

area_from area_to *angles 2 vlnová_délka šířka_gauss_obálky amplituda

TSF_SKIP

TSF_SKIP umožňuje nastavit chování záření na rozhraní s objemem, kterým jsme záření omezili. Tento příkaz rozhoduje, zda se na určité hraně uplatní okrajové podmínky, nebo nikoliv. V následující ukázce vynecháváme okrajové podmínky ve stěně yz připadající $x = x_start$ ($i0$) a ve stěně xy připadající $z = z_end$ (in).

TSF_SKIP

$i0$

TSF_SKIP

in

SOURCE_POINT

SOURCE_POINT

position mode angles

Pro šíření rovinné vlny z bodového zdroje z místa **position**, je nutné kromě souřadnic (x_0, y_0, z_0) dodat také úhly **angles** (θ, ϕ) [úhly odpovídají obr. 6.1], do kterých se záření šíří a charakterizovat záření pomocí volby **modu**.

Mody rozlišujeme, podobně jako u **TSF_SOURCE**.

mode = 0 umožňuje načíst časový průběh elektrického a magnetického pole ze souboru, je nutné, aby data v souboru byla uspořádána do sloupců v pořadí (čas, E_x , E_y , E_z , H_x , H_y , H_z). I zde dbejte, aby v souboru bylo obsaženo alespoň stejně hodnot, kolik jsme zadali časových kroků v **COMP**). Tato varianta si vyžádá zadat do zdrojového souboru.

SOURCE_POINT

position 0 název_souboru angles

V `mode = 1` si GSVIT vytvoří časovou závislost se sinusovým průběhem sám (hodnoty uloží do aktuální složky pod názvem `tmpsource`), postačí mu dodat vlnovou délku [v metrech] a amplitudu [ve Voltech] záření. Do zdrojového souboru tedy zapíšeme

```
SOURCE_POINT  
position 1 vlnová.délka amplituda angles
```

`mode = 2` je obdobou `mode = 1` s gaussovským tlumením. Signál si opět GSVIT vytvoří sám, musíme mu jen dodat vlnovou délku záření [v metrech], šířku gaussovské obálky [v počtu časových kroků] a amplitudu záření [ve Voltech]. Do zdrojového souboru se zapisuje

```
SOURCE_POINT  
position 2 vlnová.délka šířka-gauss.obálky amplituda angles
```

Kapitola 7

MEDIA

FDTD simulací sledujeme obvykle interakci elmag. záření s vloženým předmětem. Tento předmět je charakterizován tvarem a materiálem. V této části se zaměříme, jak GSVITu vnútit námi požadovaný tvar a materiál předmětu, který budeme sledovat. V počátku si ukážeme, jak definovat materiál pixel po pixelu (`MEDIUM.LINEAR`), následně se budeme věnovat definování materiálu pomocí řádky parametrů (`MEDIUM.VECTOR`).

7.1 Vytvoření souboru pro zkoumaný předmět

GSVIT umožňuje vkládat do výpočetního objemu zkoumaný předmět ve dvou režimech. `MEDIUM.LINEAR`, který je vhodný pro výpočet komplikovaných nebo plynule se měnících struktur. Pro jednodušší geometrické objekty se doporučuje použít režim reprezentovaný řádkou parametrů `MEDIUM.VECTOR`.

Dále budeme předpokládat, že soubory `medium_linear.txt` a `medium.txt` jsou umístěny ve stejném adresáři jako hlavní soubor `main.par`, pokud tomu tak není, bude nutné název materiálového souboru nahradit v následujícím celou cestou k tomuto souboru.

MEDIUM_LINEAR

`MEDIUM_LINEAR` přijímá jako argument název souboru (`medium_linear.txt`), který je vyplněn binárními daty reprezentující materiál pixel po pixelu.

```
MEDIUM_LINEAR
medium_linear.txt
```

Strutura souboru musí být následující (symboly reprezentují sloupečky):

$$position \quad \epsilon \quad \sigma \quad \mu \quad \sigma_M$$

position (3 sloupečky reprezentující souřadnice voxelů v x , y a z) – segmentace v x , y , z musí odpovídat počtu voxelů, na které jsme v části 3 rozdělily výpočetní objem. V těchto bodech musí být vyčísleny materiálové parametry relativní permitivita ϵ , relativní permeabilita σ , elektrická μ a magnetická vodivost σ_M . Souřadnice musí být reprezentovány integery v 32-bitovém zápisu, materiálové parametry floaty v 32-bitovém zápisu.

MEDIUM_VECTOR

Doporučujeme oddělit hlavní tělo parametrů od souboru týkajícího se předmětu vloženého do elmag. pole. To provedeme založením nového souboru, např. `medium.txt`. Do hlavního souboru parametrů `main.par` zaneseme informaci, že GSVIT má hledat parametry zkoumaného předmětu v souboru `medium.txt` následovně (zde předpokládáme, že soubor `medium.txt` je umístěn ve stejném adresáři jako hlavní soubor `main.par`, pokud tomu tak není, je zde třeba vyplnit celou cestu k souboru `medium.txt`)

```
MEDIUM_VECTOR
medium.txt
```

Dále veškeré informace v této kapitole budeme zapisovat do souboru `medium.txt`. Informace zapisované do souboru mají následující charakter.

```
code_shape shape_volume_def material
```

7.1.1 code_shape

Pomocí `code_shape` nadefinujeme, jaký tvar chceme do výpočetního objemu vložit.

TABULKA 7.1: Kody náležící k různým tvarům vkládaným do GSVITu.
* Gwyddion výškové pole.

tvar	koule	kvádr	válec	kužel	uříznutý kužel	čtyřstěn	soubor	Gwyddion*
<code>code_shape</code>	4	8	7	107	108	12	21	22

7.1.2 shape_volume_def

V předchozím jsme vybrali tvar, který vložíme do výpočetního objemu, zde mu nadefinujeme ukotvení v prostoru a rozměrově ho vymežíme.

Koule

Koule je v prostoru charakterizována umístěním středu (x, y, z) a jejím poloměrem (`radius`).

```
4 x y z radius material
```

Kvádr

Kvádr charakterizujeme pomocí souřadnic dvou bodů, které jsou vůči sobě úhlopříčně umístěny. Jeden bod nechť charakterizují souřadnice ($x0, y0, z0$), druhý bod (xN, yN, zN). Píšeme potom:

```
8 x0 y0 z0 xN yN zN material
```

Válec

Válec udejme pomocí pozice středu jedné podstavy (x_0, y_0, z_0), středu druhé podstavy (x_N, y_N, z_N) a poloměru podstav `radius`.

```
7 x0 y0 z0 xN yN zN radius material
```

Kužel

Kužel zadejme pomocí pozice vrcholu (x_0, y_0, z_0), středu podstavy (x_N, y_N, z_N) a jejím poloměrem `radius`.

```
107 x0 y0 z0 xN yN zN radius material
```

Uříznutý kužel

Uříznutý kužel je do výpočetního prostoru umístěn pomocí definování středů (x_0, y_0, z_0), (x_N, y_N, z_N) a poloměrů `radius0`, `radiusN` obou podstav.

```
108 x0 y0 z0 xN yN zN radius0 radiusN material
```

Čtyřstěn

Čtyřstěn definujeme pomocí souřadnic všech jeho vrcholů.

```
12 x0 y0 z0 x1 y1 z1 x2 y2 z2 x3 y3 z3 material
```

7.1.3 Načtení ze souboru

Soubory obsahující informace k načtení tvaru musí být ve formátu `.node` a `.ele` (v ukázce `filebase.node`, `filebase.ele`). K vytvoření využijeme příslušných programů. Abychom mohli nastavit správnou velikost a umístění v prostoru, posunutí v prostoru zajistíme pomocí `xshift yshift zshift`, velikost naškálujeme pomocí `xmult ymult zmult`. Soubory `filebase.node`, `filebase.ele` mohou obsahovat indexy `material_index`, kterými se definuje podmnožina bodů, která bude sloužit jako materiál. Tohoto parametru se dá využít v případě, že soubory obsahují několik indexů a každému se přiřadí jiný materiál. Píšeme:

```
21 filebase attribute_num material_index xshift yshift zshift xmult ymult zmult material
```

Zde je příklad kódu odpovídající použití `material_index`.

```
21 cube.1 0 1 0 0 0 1 1 1 material1
21 cube.1 0 0 0 0 0 1 1 1 material2
```

```
# my little cube
6 4 1
# elements (tetrahedrons), links to corresponding node list
#
1      6      7      1      5      1
```

2	1	8	3	4	0
3	3	7	1	2	<u>1</u>
4	1	7	6	2	0
5	1	7	3	8	<u>1</u>
6	7	8	1	5	0

Symbolem 1 značíme příslušnost k materiálu `material1`, podtržítka zde je jen pro zvýraznění.

7.1.4 material

Použití materiálů ukážeme pro jednoduchost na kuličce o poloměru 10 voxelů vložené na pozici 50, 50, 50.

vakuum

V případě, že budeme vkládat do výpočetního objemu objekt z vakua, použijeme

```
4 50 50 50 10 0
```

ideální elektrický vodič (pec)

```
4 50 50 50 10 10
```

lineární prostředí

U lineárního prostředí je třeba zadat relativní permitivitu ϵ , relativní permeabilitu μ a elektrickou σ a magnetickou vodivost σ_M .

```
4 50 50 50 10 1  $\epsilon$   $\sigma$   $\mu$   $\sigma_M$ 
```

CP model

Drudeho model s kritickými body (CP model, 5) s předpisem permitivity [7, 8]

$$\epsilon_{\text{CP}}(\omega) = \epsilon_{\infty} - \frac{\omega_{\text{P}}^2}{\omega^2 + i\gamma\omega} + \sum_{p=1}^2 A_p \Omega_p \left(\frac{e^{i\phi_p}}{\Omega_p - \omega - i\Gamma_p} + \frac{e^{-i\phi_p}}{\Omega_p + \omega + i\Gamma_p} \right). \quad (7.1)$$

vyžaduje zadání statické permitivity ϵ_{∞} , parametry související s Drudeho modelem (plasmová frekvence ω_{P} , frekvence tlumení γ) a dvě sady popisující kritické body (amplituda A , fáze ϕ , rezonanční frekvence ω a frekvence tlumení Γ).

```
5 50 50 50 10 4  $\epsilon_{\infty}$   $\omega_{\text{P}}$   $\gamma$   $A1$   $\phi1$   $\omega1$   $\Gamma1$   $A2$   $\phi2$   $\omega2$   $\Gamma2$ 
```

Pro zlato GSVIT přebírá parametry z [7]

```
4 50 50 50 10 5 1.11683 0 13.1839e15 0.0207332e15 3.04155 -1.09115 4.20737e15 2.35409e15 0.273221
-1.18299 3.88123e15 0.452005e15
```

a pro stříbro

```
4 50 50 50 10 5 0.89583 0 13.8737e15 0.0207332e15 1.3735 -0.504659 7.59914e15 4.28431e15 0.304478
-1.48944 6.15009e15 0.659262e15
```

načtení z databáze

GSVIT využívá informací z *SOPRA* (www.sspectra.com/sopra.html) databáze a z webových stránek <https://refractiveindex.info>. Volbou 99 určíme, že chce vybírat materiál z databáze GSVITu a následným argumentem vybereme konkrétní sloučeninu. Seznam dostupných sloučenin v databázi nejlépe zjistíte, když rozkliknete adresář, kam jste GSVIT nainstalovali a dále cestou `/gsvit/gsvit-1.8.1/data/spectra` dojdete do databáze. V ukázce vybíráme z databáze **A1ON**.

```
4 50 50 50 10 99 A1ON
```

Do databáze lze přidávat další materiály, v takovém případě doporučujeme postupovat podle <http://gsvit.net/spectra.php>, kde je problematika popsána.

7.2 MATMODE_CHECK

```
MATMODE_CHECK
```

```
1
```

Při volbě 1 zkontroluje nastavení materiálu a pokud je to možné, alokuje menší část paměti. Především se jedná o použití jednodušších rovnic v případě nemagnetického materiálu nebo při výpočtech ve vakuu, čímž lze zkrátit výpočetní čas. Defaultně je tento parametr nastaven na 0.

Kapitola 8

OUTPUTS

V této části popíšeme sondy integrované do GSVITu. Poznamenejme, že výběr správných sond a jejich vhodné nastavení je zásadní pro námi simulovaný jev. Dodejme, že vypisování výsledků stojí nějaký čas, proto se snažíme vypisování omezit a soustředit se pouze na podstatné veličiny.

OUT_FILE

Příkaz **OUT_FILE** slouží k definování výstupního souboru, do kterého má GSVIT zapisovat 2D data. Pro soubor se volí formát Gwyddionu, uveďme příklad se zápisem do souboru **gwyout.gwy**.

```
OUT_FILE
gwyout.gwy
```

OUT_POINT

Chceme-li sledovat vybranou složku elmag. pole v určitém místě, využijeme funkce **OUT_POINT**, které specifikujeme, o kterou složku **elmag.type** a v kterém bodě **position** se zajímáme, s jakým časovým krokem **time_step** a do jakého souboru **filename** se má zapisovat.

```
OUT_POINT
elmag.type nskip position filename
```

GSVIT umožňuje sledovat v libovolném bodě výpočetního objemu jednotlivé složky elmag. pole. Jednotlivé značky elmag. pole najdeme v tab. 8.1.

TABULKA 8.1: Tabulka symbolů odpovídajícím jednotlivým složkám elmag. pole.

složka	x	y	z
elektrická	Ex	Ey	Ez
magnetická	Hx	Hy	H_z
všechny	All		

Mimo chování jednotlivých složek elmag. vlny umožňuje GSVIT v tomto výstupu zaznamenávat i protékající proud, relativní permitivitu a permeabilitu a vodivost. Odpovídající značení pro zdrojový kod je v tab. 8.2.

TABULKA 8.2: Další možné parametry sledování v případě **OUT_POINT** režimu výstupu.

permitivita	Epsilon
permeabilita	Mu
vodivost	Sigma
Sigast	Sigast

Uvádíme příklad zápisu všech složek v bodě zájmu na pozici (50, 50, 50) se zápisem do souboru `all_output.txt` vždy po 10 hodnotách a zápis pouze elektrické x-ové složky na stejné pozici se zápisem do `ex_output.txt` po 5 hodnotách. V případě zápisu pomocí více **OUT_POINT** (ať už z důvodu více bodů zájmu nebo sledování průběhu více složek, je nutné volit **různé výstupní soubory**, jinak dochází k **přepisování dat**)!

```
OUT_POINT
All 10 50 50 50 all_output.txt

Ex 5 50 50 50 ex_output.txt
```

OUT_IMAGE

```
OUT_IMAGE
elmag_type timestep position description
```

OUT_IMAGE je funkce zapisující do zvoleného `gwy` souboru, který byl zvolen v rámci **OUT_FILE**, 2D data odpovídající řezu výpočetním objemem podél jedné souřadnicové osy. Tedy v případě nastavení řezu například na $x = 10$, musíme zbylé souřadnice nastavit na hodnotu -1. Argument `elmag_type` se volí dle popisu v části **OUT_POINT**.

Ukážeme příklad pro nastavení řezu v místě $x = 10$, kdy dochází k zápisu každých 5 časových kroků. Zapisovat `Ex` komponentu pole budeme do souboru `gwyout.gwy`, kde po otevření Gwyddionem budou tato data popsána jako `Ex_out`.

```
OUT_FILE
gwyout.gwy

OUT_IMAGE
Ex 5 10 -1 -1 Ex_out
```

OUT_PLANE

je obdobou **OUT_IMAGE**. Opět zaznamenává 2D data, ale ukládá je do formátu `raw`, odpovídající řezu výpočetním objemem (obdobně jako výše). Nadefinujeme o kterou složku máme zájem pomocí `elmag_type` (diskutováno výše). Dalšími argumenty vybereme časový krok `timestep` ukládání, začátek a konec detekce `timestart timestep`. Argument `ASCII=1` zapisuje výsledky v ASCII kodu.

DÁLE NUTNO OVĚŘIT FUNKČNOST.

```
OUT_PLANE
elmag_type timestep ASCII timestart timestep position filename
```

OUT_SUM

Tato varianta zaznamenává součet elektrické intenzity pole (buď jednotlivé složky **Ex**, **Ey**, **Ez** a nebo všech dohromady **All**) nebo absorpci **Abs**. Sumování probíhá ve vymezeném kvádru s danými materiálovými konstantami ϵ , σ , μ a σ_M .

```
OUT_SUM
elmag.type timestep position  $\epsilon$   $\sigma$   $\mu$   $\sigma_M$  filename
```

Pozice kvádrů je určena pomocí souřadnic dvou úhlopříčně umístěných bodů. Na místo **position** vkládáme následující

```
x0 y0 z0 xN yN zN
```

OUT_FORCE

Pro zachycení optické síly působící na definovaný objem (**x0 y0 z0 xN yN zN**) slouží **OUT_FORCE**. Hodnota přiřazená každému bodu definovaného objemu odpovídá časovému průměru přes periodu zdroje. Optická síla je pak dopočtena pomocí Maxwellova stress tenzoru.

```
OUT_FORCE
timestep x0 y0 z0 xN yN zN filename
```

Kapitola 9

NEAR FIELD to FAR FIELD

Transformace blízkého pole na vzdálené pole je metoda používaná k výpočtu hodnoty pole mimo výpočetní objem. Pro použití není ovšem nezbytné, aby bod počítaný jako v dalekém poli ležel mimo výpočetní objem, proto můžeme porovnávat hodnoty získané pro daleké pole s hodnotou získanou z Yeeho algoritmu (to je úkolem příkladu na http://gsvit.net/xex16_4.php).

NFFF

Příkaz **NFFF** definuje objem, ze kterého se bude počítat transformace **NEAR FIELD to FAR FIELD**. Funkce vyžaduje zadat souřadnice dvou bodů (x_0 y_0 z_0 x_N y_N z_N) umístěných úhlopříčně a začátek `sum_from` a konec `sum_to` integrace.

```
NFFF
x0 y0 z0 xN yN zN sum_from sum_to
```

NFFF_SKIP

Tento příkaz určuje oblast (hranici), která bude z NFFF výpočtu vyloučena. Pomocí parametrů vybereme o kterou hranici jde a následně z ní můžeme 'vykrojit' obdelník (vybereme ho pomocí 4 souřadnic ze 6 i_0 j_0 k_0 i_N j_N k_N , kde první dvě hodnoty značí horní levní roh a další dvě hodnoty dolní pravý roh obdelníku), který se nezapočítá do NFFF výpočtu.

```
NFFF_SKIP
boundary i0 j0 iN jN
```

Argument `boundary` volíme dle tab. 9.1.

TABULKA 9.1: Značení pro hranice.

hranice	x_0	y_0	z_0	x_N	y_N	z_N
značení	i_0	j_0	k_0	i_N	j_N	k_N

NFFF_RAMAHI_POINT

Umožňuje zvolit bod, do kterého se přesunou hodnoty vypočtené pomocí NFFF výpočtu. Je třeba definovat pozici bodu (x y z) a název souboru `filename` pro výpis hodnot elektrického pole. Tento bod může být umístěn i mimo výpočetní objem.

NFFF_RAMAHI_POINT

x y z `filename`

Kapitola 10

Příklad: Odraz na rovinném rozhraní

V této kapitole se zaměříme na konkrétní simulaci v GSVITu. Vybrali jsme řešení problému odrazu elektromagnetického záření na rovinném rozhraní. Budeme sledovat odrazivost a lokální zesílení pole na tomto rozhraní. Výsledky z GSVIT simulace porovnáme s analytickým řešením.

10.1 Zadání problému

Vyšetřete spektrální průběh odrazivosti na rovinném rozhraní vzduch–kov (zlato nebo stříbro) a studujte lokální zesílení elektrického pole přímo na tomto rozhraní.

Lokální zesílení LFIEF se definuje jako podíl celkové intenzity na rozhraní a dopadajícího záření

$$\text{LFIEF} = \frac{|\mathbf{E}_A + \mathbf{E}'_A|^2}{|\mathbf{E}_A|^2}, \quad (10.1)$$

kde \mathbf{E}_A (\mathbf{E}'_A) značí elektrickou složku dopadající (odražené) vlny, přičemž pro kolmý dopad se dá vztah vyjádřit pouze jako podíl dielektrických konstant (index M odpovídá kovu, A vzduchu)

$$\text{LFIEF} = 4 \left| \frac{\sqrt{\epsilon_A}}{\sqrt{\epsilon_M} + \sqrt{\epsilon_A}} \right|^2. \quad (10.2)$$

10.2 Parametrový soubor

V této části se zaměříme na řešení navrženého problému pomocí GSVITu. Ke spuštění vytvoříme soubor parametrů *planar_surface.par*.

```
POOL
60 60 120 1e-9 1e-9 1e-9
COMP
9001
DT_MULT
0.8
```

```
VERBOSE
0
THREADS
-1
GPU
0

SOURCE_TSF
10 10 15 50 50 220 0 0 0 1 340e-6 1

TSF_SKIP
j0
TSF_SKIP
jn
TSF_SKIP
i0
TSF_SKIP
in
TSF_SKIP
kn

BOUNDARY_ALL
liao

MBOUNDARY_X0
periodic 15
MBOUNDARY_XN
periodic 45
MBOUNDARY_Y0
periodic 15
MBOUNDARY_YN
periodic 45

OUT_FILE
planar_surface.gwy
OUT_POINT
Ey 100 30 30 10 outputR.txt
OUT_POINT
Ey 100 30 30 50 output_surface.txt

MEDIUM_VECTOR
deska.txt
```

PARAMETROVÝ SOUBOR 10.1: Ukázka souboru parametrů *planar_surface.par* pro GSVIT – detekce odrazivosti a zesílení na povrchu rozhraní vzduch-kov.

Nastavení výpočetního objemu

V první řadě musíme vytvořit výpočetní objem, to znamená nastavit velikost objemu a jeho členění, což se dělá v části POOL a počet časových kroků, které se nastavují v části COMP.

V našem příkladu jsme vytvořili objem o $60 \times 60 \times 120$ voxelích, kde jsme voxely volili jako krychličky o hraně 1 nm ($1e-9$).

V části COMP jsme zvolili 9001 časových kroků. Zkušenosti uživatelů simulujících úlohy s kovovými materiály přiměly vývojáře přidat od verze GSVIT 1.8.2 parametr DT_MULT. Jedná se vlastně o multiplikátor regulující délku časového kroku. Pro kovové materiály je třeba krok zkrátit, proto volba 0.8.

Vypisování a hardware

Parametr VERBOSE umožňuje nastavit, kolik informací má GSVIT vypisovat v průběhu simulací. Parametr je kaskádován od 'Vypiš všechno' (3) až po 'Nevypisuj nic' (0).

Volba THREADS '-1' nastaví maximální počet dostupných jader (GSVIT si jejich počet zjistí sám).

GPU umožňuje pouštět GSVIT na grafických kartách. Zvolením '0' spustíme výpočet na procesoru.

Zdroje záření

Aby se definovaným objemem mohla šířit elektromagnetická vlna, musíme ji do objemu vložit. GSVIT disponuje několika typy elektromagnetického zdroje, více informací najdete v kapitole 6 nebo dokumentaci [5]. Pro naši úlohu jsme použili postupnou rovinou vlnu, kterou charakterizuje oddíl SOURCE_TSF. Pomocí 10 10 15 50 50 220 jsme prostorově vymezili šíření elektromagnetické vlny. Další tři argumenty 0 0 0 značí úhly (v radiánech), pomocí nichž se definuje směr a polarizace elektromagnetické vlny, dle obrázku 6.1.

Poslední tři číselné argumenty umožňují nastavit mód, vlnovou délku a amplitudu vlny. Módy 0/1/2 odpovídají postupně možnosti načtení profilu elmag. záření ze souboru/ sinusový signál/sinusový signál s gaussovským tlumením. Pro úlohu jsme nechali vygenerovat GSVIT sinusovou vlnu (1) o vlnové délce $wl = 340e - 6$ (v metrech) a amplitudou 1 (ve Voltech).

Podotkněme, že GSVIT umí simulovat pouze jednu vlnovou délku, chce-li uživatel získat spektrální závislost, musí simulaci pustit opakovaně, vždy pro jednu vlnovou délku.

Okrajové podmínky

Jelikož metodou FDTD řešíme diferenciální rovnice, je řešení zásadně ovlivněno nastavením okrajových podmínek. Celý výpočetní objem jsme obalili absorpčními okrajovými podmínkami *liao*. Dále jsme díky symetrii úlohy zavedli do objemu periodické okrajové podmínky MBOUNDARY, kterými jsme ve směrech x a y vymezili objem (mezi voxely 15 a 45 v obou směrech).

TSF_SKIP vyloučí zadanou stěnu TSF objemu z aplikace TSF_SOURCE.

Výstupy

Abychom získali informace o rozložení a intenzitě elektromagnetického pole, musíme do objemu zavést vhodné sondy. Pro účely naší úlohy byly zvoleny dva výstupy OUT_POINT, do kterých se zapisuje zvolená komponenta elektromagnetického pole (E_y) v závislosti na čase vyčítaná z určitého místa v prostoru (30 30 10). Data se každých 100 časových kroků zapíše do souboru `outputR.txt`.

Výstup `outputR.txt` zapisuje odraženou vlnu v dalekém poli, výstup `output_surface.txt` zaznamenává vlnu v blízkém poli (na povrchu rozhraní). Aby bylo možné výstupy vypisovat, potřebuje mít GSVIT zadaný OUT_FILE.

Vložené materiály

Abychom mohli studovat interakci elektromagnetické vlny s materiálem, je třeba ho do výpočetního objemu vložit, k tomu slouží oddíl `MEDIUM.VECTOR`. Standardně se jako argument používá textový soubor, ve kterém jsou uložena všechna specifika, co se materiálů týká.

```
8 10 10 50 50 50 210 model material
```

PARAMETROVÝ SOUBOR 10.2: Ukázka souboru *deska.txt* pro definování materiálů použitých v simulaci.

GSVIT má předdefinované základní geometrické útvary, které do něj lze vložit, těmto útvarům odpovídá první argument v materiálovém souboru (8 - kvádr). Tento geometrický útvar se dále umísťuje do prostoru sadou argumentů (u kvádru jde o pozice vrcholů ležících na tělesové úhlopříčce, 10 10 50 50 50 210). Dále je nutné přiřadit geometrickému útvaru správné fyzikální konstanty, aby ho elektromagnetická vlna vnímala jako vyrobený ze specifického materiálu. K tomu je třeba vybrat model, dle kterého si GSVIT přepočítá materiálové parametry. Každý model si vynucuje nějaké vlastní parametry, kterých je zapotřebí k simulování konkrétního materiálu.

Pro naše simulace jsme použili Drudeho model s kritickými body (CP model, `model=5`), který vyžaduje zadání materiálových parametrů na místě `material` GSVIT přebírá z [7], pro stříbro (následující sekvenci je třeba zadat do *deska.txt* na místo `material`):

```
0.89583 0 13.8737e15 0.0207332e15 1.3735 -0.504659 7.59914e15 4.28431e15 0.304478 -1.48944 6.15009e15 0.659262e15
```

PARAMETROVÝ SOUBOR 10.3: Materiálové parametry pro stříbro [7].

a pro zlato:

```
1.11683 0 13.1839e15 0.0207332e15 3.04155 -1.09115 4.20737e15 2.35409e15 0.273221 -1.18299 3.88123e15 0.452005e15
```

PARAMETROVÝ SOUBOR 10.4: Materiálové parametry pro zlato [7].

Spuštění simulace

Spuštění simulace je možné pomocí příkazové řádky zadáním následujícího příkazu,

```
steindl: ~/gsvit/bin$ ./gsvit planar_surface.par
```

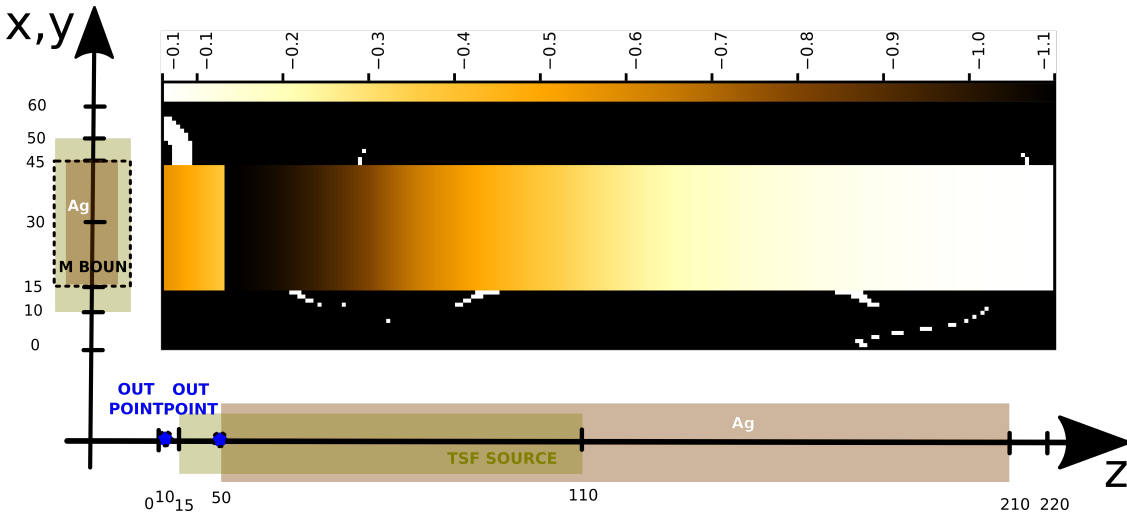
případně prostřednictvím grafického rozhraní XSVIT.

10.3 Výsledky simulace

Nyní srovnáme výsledky simulace pro kolmý dopad elektromagnetické vlny na rovné rozhraní vzduch-kov s analytickou formulí (10.2).

GSVIT nám po spuštění simulace zapíše do souboru dva sloupčky, které odpovídají časovému kroku a (v našem případě, viz nastavení `OUT_POINT`) elektrické intenzitě E_y .

Ze získaných dat dopočteme maximální intenzitu v daném místě, čímž získáme reflektivitu i zesílení na kovovém povrchu ($LFIEF = |E_{\text{sur}} + E'_{\text{sur}}|^2 / |E_{\text{sur}}|^2$).

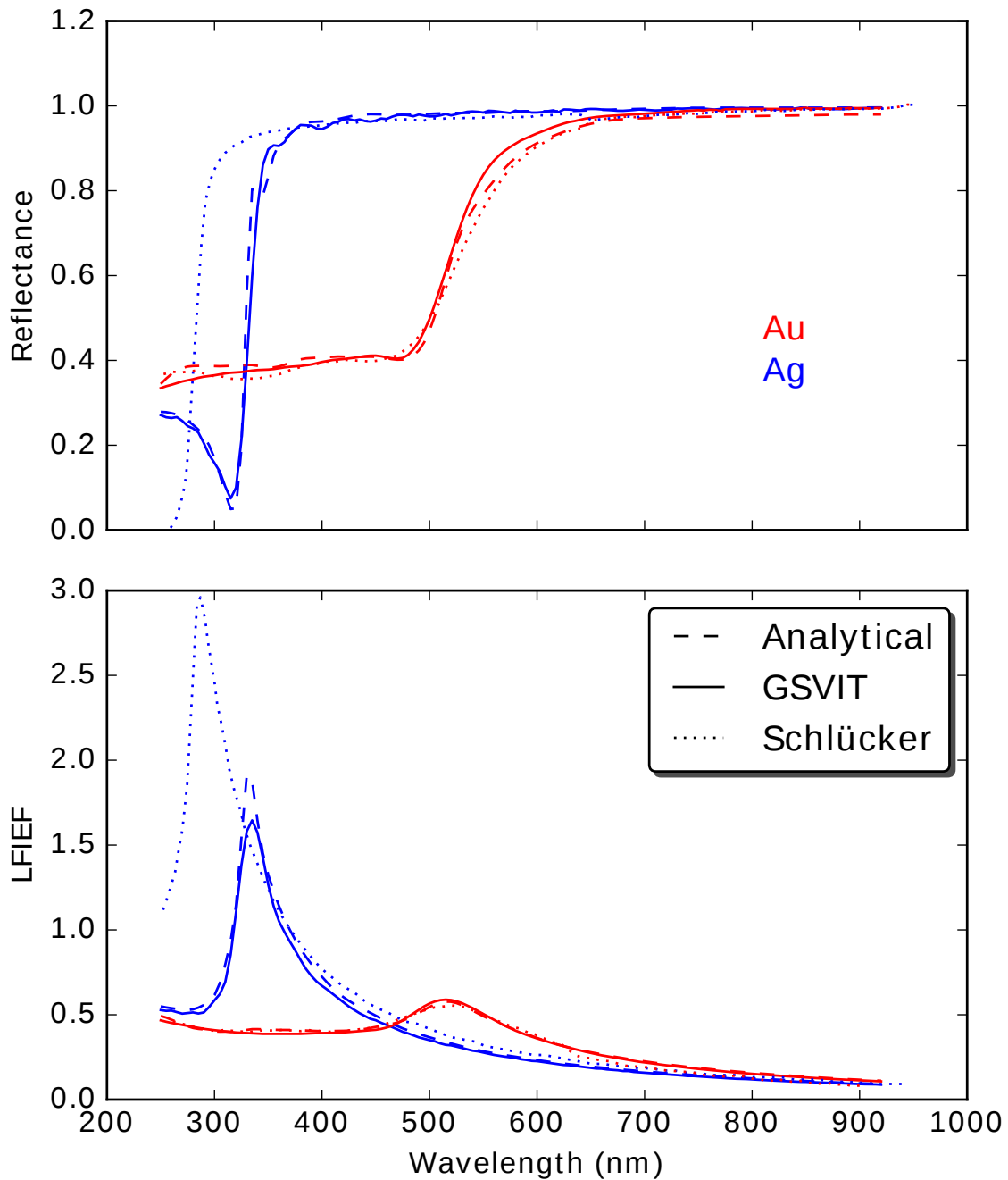


OBRÁZEK 10.1: Komponenta E_y po 9000 časových krocích v simulovaném objemu pro úlohu rovinného rozhraní vzduch–stříbro. Použité elektromagnetické záření má vlnovou délku 340 nm. V obrázku je dále naznačena geometrie a uspořádání úlohy. Číselné údaje v obrázku jsou ve voxelech nebo nanometrech.

Obrázek 10.1 zachycuje rozložení komponenty E_y po 9000 krocích simulace. Největší (absolutní) hodnotu vidíme u rozhraní. Stejný obrázek zachycuje i grafický návrh úlohy.

V obrázku 10.2 sledujeme srovnání výsledků z FDTD simulace s analytickým výpočtem (rovnice (10.2)) a literaturou [9]. Simulace s analytickým výsledkem se velmi dobře shodují, to je způsobeno jednak jednoduchostí úlohy a především použitím stejných materiálových parametrů [2]. Při pohledu na křivky odpovídající Schlückerově knize [9] vidíme posunutí struktur ve spektru stříbra. Toto posunutí vůči ostatním výsledkům souvisí s tím, že Schlücker použil jiné optické konstanty pro stříbro.

V obrázku 10.2b) je vyneseno lokální zesílení LFIEF, které je obecně pro rovné rozhraní vzduch–kov menší než 1 ve srovnání se situací, že bychom zde rozhraní neměli. Ideální bezztrátový kov by vytvořil na povrchu pole, které by vyrušilo dopadající vlnu ($E_i + E_r = 0$), muselo by dojít tedy k absolutnímu odrazu. Obecně tedy můžeme říct, že malé LFIEF souvisí s velkou odrazivostí. Tento trend je patrný i na obrázku 10.2, kde LFIEF > 1 pouze pro stříbro okolo 330 nm, kde zároveň stříbro přestává dobře odrážet světlo.



OBRÁZEK 10.2: Stříbro modře, zlato červeně: a) Porovnání reflektivity z FDTD simulace získané pomocí GSVITu (plná čára) s tabulovanou reflektivitou [2] (přerušovaně) a literaturou [9] (tečkovaně). b) Srovnání lokálního zesílení na povrchu LFIEF rovinného rozhraní vzduch–kov: plná čára odpovídá FDTD výpočtu, přerušovaná analytickému výpočtu dle rovnice (10.2) s parametry dle [2], tečkovaná čára značí výsledek ze Schlückerovy učebnice[9].

Literatura

- [1] J. Clerk Maxwell. A Dynamical Theory of the Electromagnetic Field. *Phil. Trans. R. Soc. Lond.*, 115:459–512, 1865.
- [2] P. B. Johnson and R. W. Christy. Optical constants of the noble metals. *Phys. Rev. B*, 6:4370–4379, Dec 1972. doi: 10.1103/PhysRevB.6.4370. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.6.4370>.
- [3] D. W. Ward and K. A. Nelson. Finite-difference time-domain (FDTD) simulations of electromagnetic wave propagation using a spreadsheet. *Comput. Appl. Eng. Educ.*, 13:213–221, 2005.
- [4] Obrázek – princip Yeeho algoritmu. zhnotes.wordpress.com/2013/08/09/one-dimensional-fdtd-simulation-of-laser-pulse-in-vacuum, 2017.
- [5] GSVIT 1.8.2. <http://gsvit.net/index.php>, 2017.
- [6] Lumerical. <https://www.lumerical.com/>, 2017.
- [7] Chun Kyungwon, Kim Huioon, Kim Hyounggyu, and Chung Youngjoo. PLRC and ADE implementations of Drude-critical point dispersive model for the FDTD method. *Progress In Electromagnetics Research*, 135: 373–390, 2013.
- [8] A. Vial and T. Laroche. Comparison of gold and silver dispersion laws suitable for FDTD simulations. *Applied Physics B*, 93:139–143, June 2008.
- [9] Sebastin Schlücker. *Surface Enhanced Raman Spectroscopy*. WILEY-VCH Verlag Co. KGaA, 2011.