



VNiVERSiDAD
D SALAMANCA

TRABAJO FIN DE MÁSTER

Propagación no lineal de pulsos
ultracortos intensos:
Generación de segundo armónico
con la técnica FDTD

Autora:
Isabel Rodríguez Pérez

Tutores:
Enrique Conejero Jarque
Javier Rodríguez Vázquez de Aldana

Salamanca, Julio 2022

D. Enrique Conejero Jarque y D. Javier Rodríguez Vázquez de Aldana autorizan la presentación del Trabajo de Fin de Máster en física y tecnología de los láseres titulado “*Propagación no lineal de pulsos ultracortos intensos: Generación de segundo armónico con la técnica FDTD*”, realizado bajo su dirección por Isabel Rodríguez Pérez. Además, la autora y los tutores autorizan a la Dirección del Máster a presentar este trabajo en cualquier proceso de evaluación del título en el que se requieran evidencias sobre el TFM.

En Salamanca, a 10 de julio de 2022

Fdo. Javier Rodríguez Vázquez de Aldana

Fdo. Enrique Conejero Jarque

Este trabajo ha sido posible gracias a un esfuerzo conjunto entre mis tutores y yo. Por la parte que me corresponde, se lo agradezco a ellos, por su dedicación y esfuerzo; a mis compañeros y profesores del máster y a mis seres queridos.

Muchas gracias

Resumen

Las ecuaciones de Maxwell describen el electromagnetismo clásico. Para poder resolverlas es necesario conocer la respuesta del medio material a los campos eléctricos y magnéticos. Dentro de la descripción clásica, la respuesta lineal del medio puede ser explicada por el modelo de Lorentz. En este modelo, los electrones en el medio material que interactúan con el campo externo están unidos a los iones por un potencial de oscilador armónico. Para dar cuenta de los comportamientos no lineales de forma correcta es necesario usar descripciones cuánticas de la respuesta del material, pero cualitativamente se pueden entender algunos fenómenos, como por ejemplo la generación de segundo armónico, si el modelo clásico de Lorentz se modifica incluyendo un término cuadrático en la polarización. En este paradigma, si la intensidad es lo suficientemente grande, se generan nuevas frecuencias que son combinación de las incidentes en materiales microscópicamente no centrosimétricos que presentan susceptibilidad de segundo orden.

Existen diferentes métodos para resolver las ecuaciones de este escenario. Nuestro enfoque se basa en el método de diferencias finitas en el dominio temporal (*Finite-Difference Time-Domain*, FDTD). Este método es una técnica flexible y poderosa para resolver rigurosamente las ecuaciones de Maxwell. El algoritmo FDTD emplea diferencias centrales de segundo orden para obtener “ecuaciones actualizadoras” que expresan los campos futuros (desconocidos) en términos de campos pasados (conocidos). El método FDTD es prácticamente general. Se emplea en lugar de realizar análisis asintóticos o asumir una propagación paraxial. Permite el modelado preciso de una amplia variedad de medios dispersivos y no lineales. En este trabajo resolvemos numéricamente las ecuaciones de Maxwell y calculamos la evolución temporal de los campos electromagnéticos para diferentes situaciones. Agregamos las ecuaciones correspondientes para describir la dispersión y la no linealidad. Por último, completaremos nuestro modelo investigando la generación de segundo armónico de tipo I. Para ello simularemos medio birrefringente, y compararemos los resultados obtenidos en los casos de ajuste y desajuste de fase.

Abstract

Maxwell's equations describe classical electromagnetism. In order to solve them, it is necessary to know the response of the material medium to electric and magnetic fields. Within the classical description, the linear response of the medium can be explained by the Lorentz model. In this model, the electrons in the material medium interacting with the external field are bound to the ions by a harmonic oscillator potential. To account for nonlinear behavior correctly it is necessary to use quantum descriptions of the material response, but qualitatively some phenomena, such as second harmonic generation, can be understood if the classical Lorentz model is modified by including a quadratic term in the polarization. In this paradigm, if the intensity is large enough, new frequencies are generated that are a combination of those incident in microscopically non-centrosymmetric materials that present second order susceptibility.

There are different methods to solve the equations of this scenario. Our approach is based on the finite-difference time-domain (FDTD) method. This method is a flexible and powerful technique for rigorously solving Maxwell's equations. The FDTD algorithm employs second-order central differences to obtain "updating equations" that express future (unknown) fields in terms of past (known) fields. The FDTD method is practically general. It is used instead of performing asymptotic analysis or assuming paraxial propagation. It allows accurate modeling of a wide variety of dispersive and nonlinear media. In this paper, we solve Maxwell's equations numerically and calculate the time evolution of electromagnetic fields for different situations. We incorporate the dispersion and nonlinearity equations into the model. Finally, we will complete our model by investigating the type I second harmonic generation. For this purpose, we will simulate a birefringent medium, and compare the results obtained in the cases of phase matching and phase mismatch.

Índice general

1. Introducción	8
2. Método FDTD	10
2.1. Algoritmo de Yee	11
2.2. Problema en una dimensión	11
2.3. Fuente aditiva	14
2.4. Características generales del método FDTD	15
2.5. Condiciones de contorno	15
3. Propagación lineal	17
3.1. Introducción de la dispersión en el modelo	17
3.2. Cálculo del índice de refracción	21
3.3. Reflexión y transmisión	24
4. Propagación no lineal	26
4.1. Introducción de la no linealidad en el modelo	28
4.2. Introducción de la birrefringencia en el modelo	30
4.2.1. Condición de ajuste de fase	34
4.2.2. Condición de desajuste de fase	36
4.2.3. Intensidad del segundo armónico durante su propagación	37
5. Conclusiones	40
6. Conclusions	42
Apéndices	46
Apéndice A. Código	47

Índice de figuras

2.1. Esquema de la disposición de los nodos de campo eléctrico y magnético en el espacio y el tiempo.	13
3.1. Representación del campo eléctrico para todos los nodos del mallado en un instante de tiempo determinado.	19
3.2. Representación del campo eléctrico para todos los nodos del mallado en un tiempo posterior a la figura 3.1.	20
3.3. Batería de representaciones del campo eléctrico para todas las posiciones de la red en diferentes instantes de tiempo.	22
3.4. Representación del índice de refracción correspondiente a los parámetros de la simulación de las figuras 3.1 y 3.2.	23
3.5. Representación del índice de refracción para los parámetros de la simulación en 3.3.	23
3.6. Estudio de los coeficientes de transmisión y reflexión para los parámetros del material de la figura 3.5. Trabajamos con una frecuencia del pulso láser incidente $\omega = 0,4 \text{ rad/fs}$	25
4.1. Simulación de la propagación no lineal.	30
4.2. Representación del campo E_z del pulso incidente.	33
4.3. Índices de refracción en la condición de ajuste de fase	34
4.4. Pulsos transmitido y generado en el medio birrefringente en la condición de ajuste de fase.	35
4.5. Pulsos transmitido y generado en el medio birrefringente en la condición de ajuste de fase para un instante posterior a la figura 4.4.	35
4.6. Transformada de Fourier de los campos E_z y E_y	36
4.7. Índices de refracción en la condición de desajuste de fase.	36
4.8. Pulsos transmitido y generado en la condición de desajuste de fase.	37
4.9. Intensidad del segundo armónico durante la propagación en las condiciones de ajuste y de desajuste de fase.	38

4.10. Posición de los máximos de la función $\text{sinc}^2(\Delta kl/2)$ comparados con las posiciones de los máximos obtenidos en la simulación del segundo armónico en el caso de desajuste de fase.	39
--	----

Capítulo 1

Introducción

En este trabajo vamos a estudiar numéricamente la propagación de pulsos ultracortos (de pocos ciclos) en medios con susceptibilidad no lineal de segundo orden, resolviendo las ecuaciones de Maxwell con la técnica FDTD (*Finite-Domain Time-Domain*). Las simulaciones que vamos a realizar se podrían utilizar como respaldo de multitud de trabajos experimentales, permitiendo estimar los resultados antes de realizar una medida experimental o entender los resultados de un experimento una vez realizado. Se podría implementar para examinar la propagación lineal o no lineal de un pulso durante una línea experimental. También podría tener aplicaciones más avanzadas, como son la microscopía de segundo armónico, el estudio de superficies y tejidos biológicos o convertidores de frecuencia. Esta investigación está basada y es la continuación de un trabajo previo en la misma materia [1].

Este trabajo está ordenado de la siguiente manera. En el capítulo 2 se plantean las bases del método FDTD. Analizamos el algoritmo de Yee (2.1) y su implementación en una dimensión (2.2). Asimismo, estudiamos la fuente puntual (2.3), la estabilidad del método (2.4) y las condiciones de contorno (2.5) de nuestro programa. En el capítulo 3 tratamos la propagación lineal de pulsos en el vacío y en dieléctricos. En la sección (3.1) introducimos dispersión en el dieléctrico a través de la ecuación diferencial proporcionada por el modelo de Lorentz. Dependiendo de la región en la que estemos trabajando, se observa como el pulso, al propagarse por el medio dispersivo, adquiere un chirp negativo o positivo fruto de la dispersión de la velocidad de grupo (*Group Velocity Dispersion*, GVD) y se pone de manifiesto la diferencia entre la velocidad de fase y la velocidad de grupo. En la sección (3.2) analizamos la expresión del índice de refracción dada por el modelo. Gracias a esta expresión

somos capaces de estudiar los coeficientes teóricos de transmisión y reflexión del pulso láser en la sección (3.3) y contrastarlos con nuestros resultados simulados, comprobando que el modelo y el software desarrollado funcionan de acuerdo con lo esperado. En el capítulo 4 analizamos la propagación no lineal en el medio, generando el segundo armónico y armónicos de orden superior en la sección (4.1). Una vez logrado el segundo armónico se implementa un material birrefringente en la sección (4.2), donde se evalúan los casos de ajuste (4.2.1) y desajuste de fase (4.2.2) y la intensidad del segundo armónico generado (4.2.3). En el capítulo 5 se aportan las conclusiones, haciendo un resumen general del trabajo. En el capítulo 6 se redactan las conclusiones en inglés. Por último, el apéndice A corresponde al código empleado para las simulaciones de la birrefringencia de la sección (4.2).

Capítulo 2

Método FDTD

En este capítulo, se presentan las bases de la formulación del método FDTD en el caso de una dimensión [2, 3]. Partiendo de la formulación proporcionada en este capítulo, es posible aplicar el método FDTD a problemas en dos o tres dimensiones. Se abordará el algoritmo de Yee, su implementación al caso unidimensional, así como conceptos relacionados con la fuente puntual, la estabilidad del método y las condiciones de frontera y los errores.

El método FDTD permite simular la propagación de los campos electromagnéticos, aunque es computacionalmente costoso. La FDTD logra robustez al resolver directamente los campos E y H en el espacio y el tiempo en lugar de realizar análisis asintóticos o asumir una propagación paraxial.

El algoritmo FDTD se utiliza en una amplia gama de aplicaciones que van desde simulaciones con plasmones [4], interferencias [5], simulaciones bioelectromagnéticas [6] a investigación médica [7] hasta el desarrollo militar [8].

El fundamento teórico parte de las series de Taylor de la función $f(x)$ en el entorno $\pm\delta/2$ del punto x_0 para llegar a la expresión para la derivada

$$\left. \frac{df(x)}{dx} \right|_{x=x_0} = \frac{f\left(x_0 + \frac{\delta}{2}\right) - f\left(x_0 - \frac{\delta}{2}\right)}{\delta} + O(\delta^2) \quad (2.1)$$

En diferencias finitas consideramos el “*big-Oh*” despreciable y, por tanto, la expresión anterior (2.1) queda reducida a

$$\left. \frac{df(x)}{dx} \right|_{x=x_0} \simeq \frac{f\left(x_0 + \frac{\delta}{2}\right) - f\left(x_0 - \frac{\delta}{2}\right)}{\delta} \quad (2.2)$$

La ecuación 2.2 es llamada “diferencia central” y proporciona una aproximación para la derivada de la función en el punto x_0 sin necesidad de evaluar la función en

dicho punto. Esta diferencia central tiene precisión de segundo orden, ya que hemos despreciado las contribuciones de mayor orden. Es posible construir diferencias centrales de mayor orden, no obstante nuestro trabajo se restringirá a diferencias finitas de segundo orden.

2.1. Algoritmo de Yee

El algoritmo FDTD fue propuesto por primera vez por Kane Yee en 1966 y emplea diferencias finitas de segundo orden. Los pasos principales del algoritmo son:

- Reemplazar las derivadas temporales y espaciales que aparecen en las leyes de Ampère y Faraday por diferencias finitas. En consecuencia, los campos eléctricos y magnéticos están discretizados en el espacio y en el tiempo.
- Resolver las ecuaciones discretizadas resultantes para obtener las ecuaciones actualizadas que expresan los campos futuros en función de los campos pasados.
- Evaluar el campo magnético en un paso temporal futuro, por lo que se convierte en un campo conocido y, por tanto, presente y se podría utilizar para futuros cálculos.
- Evaluar el campo eléctrico en un paso temporal futuro, por lo que se convierte en un campo conocido. Al igual que en el paso anterior, se puede emplear este conocimiento para los siguientes cálculos.
- Repetir los dos pasos anteriores las veces que se requieran.

2.2. Problema en una dimensión

Consideremos inicialmente en el vacío una región libre de fuentes y corrientes. En esta situación, las ecuaciones de Maxwell en su forma diferencial [9] se pueden expresar de la siguiente manera

$$\frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} = \frac{1}{\varepsilon_0} \nabla \times \mathbf{H} \quad (2.3)$$

$$\frac{\partial \mathbf{H}}{\partial t} = -\frac{1}{\mu_0} \nabla \times \mathbf{E} \quad (2.4)$$

donde \mathbf{E} es el vector campo eléctrico definido en V/m y \mathbf{H} es el vector campo magnético con unidades de A/m . Las constantes μ_0 y ε_0 corresponden a la permeabilidad magnética y la permitividad eléctrica del vacío respectivamente.

Estudiamos la propagación del pulso más simple: una onda plana con el campo eléctrico orientado en el eje Z propagándose a lo largo del eje X . Si sustituimos en la ecuación 2.4

$$-\mu \frac{\partial \mathbf{H}}{\partial t} = \nabla \times \mathbf{E} = \begin{vmatrix} \hat{e}_x & \hat{e}_y & \hat{e}_z \\ \frac{\partial}{\partial x} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & F \end{vmatrix} = -\hat{e}_y \frac{\partial E_z}{\partial x} \quad (2.5)$$

el campo magnético tendrá únicamente componente en el eje Y . Por ese motivo, podemos reescribir la ley de Ampère (2.3) como

$$\varepsilon_0 \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} = \nabla \times \mathbf{H} = \begin{vmatrix} \hat{e}_x & \hat{e}_y & \hat{e}_z \\ \frac{\partial}{\partial x} & 0 & 0 \\ 0 & H_y & 0 \end{vmatrix} = \hat{e}_z \frac{\partial H_y}{\partial x} \quad (2.6)$$

Nuestro sistema de ecuaciones escalares resultante es

$$\mu_0 \frac{\partial H_y}{\partial t} = \frac{\partial E_z}{\partial x} \quad (2.7)$$

$$\varepsilon_0 \frac{\partial E_z}{\partial t} = \frac{\partial H_y}{\partial x} \quad (2.8)$$

El siguiente paso es reemplazar las derivadas temporales y espaciales por diferencias finitas. Para ello el tiempo y el espacio deben discretizarse. Llamando Δt al paso temporal y Δx al paso espacial, los campos toman la forma

$$E_z(x, t) = E_z(m\Delta x, q\Delta t) = E_z^q[m] \quad (2.9)$$

$$H_y(x, t) = H_y(m\Delta x, q\Delta t) = H_y^q[m] \quad (2.10)$$

donde los índices q y m corresponden a las localizaciones de los puntos de la red temporal y espacial respectivamente. Estos puntos espaciales y temporales no son los mismos para el campo eléctrico y el magnético. Los nodos de la red para el campo eléctrico se encuentran separados unos de otros por un paso temporal o uno espacial, al igual que los nodos del campo magnético, mientras los nodos de los campos eléctrico y magnético están entrelazados. La separación entre un nodo del campo eléctrico y uno del campo magnético adyacentes es medio paso espacial y medio paso temporal. La figura 2.1 representa la disposición de los nodos de campo

eléctrico y magnético en el espacio y el tiempo. Los campos pasados, los que se encuentran por debajo de la línea discontinua, son conocidos, mientras los campos futuros, por encima de la línea discontinua, pueden ser determinados a partir de ellos.

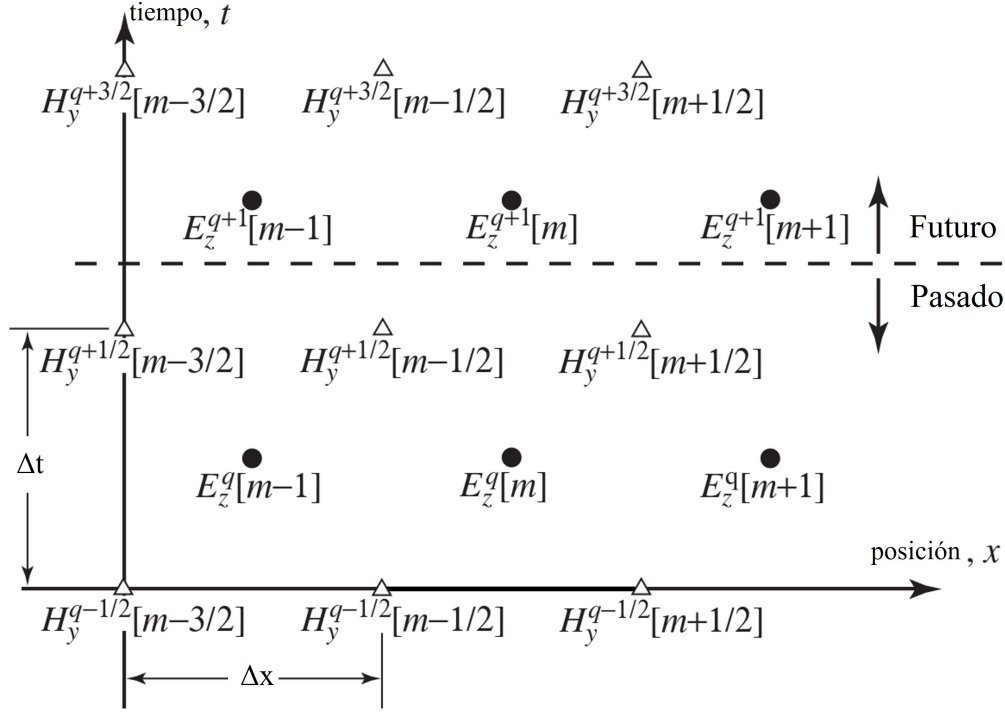


Figura 2.1: Esquema de la disposición de los nodos de campo eléctrico y magnético en el espacio y el tiempo.

En este mallado el campo eléctrico está definido espacialmente desde el nodo 1 a N , siendo N el punto final del mallado espacial. A su vez, el campo magnético abarca desde el nodo 0 y hasta el $N - 1$. La definición de los campos en las fronteras del mallado se aborda en la sección (2.5). La discretización de la ley de Faraday en el punto $(m + 1/2)\Delta x, q\Delta t$, empleado diferencias centrales, conduce a

$$\mu \frac{\partial H_y}{\partial t} \Big|_{(m+1/2)\Delta x, q\Delta t} = \frac{\partial E_z}{\partial x} \Big|_{(m+1/2)\Delta x, q\Delta t} \quad (2.11)$$

La derivada temporal se reemplaza por una diferencia finita que involucra a $H_y^{q+\frac{1}{2}}[m + \frac{1}{2}]$ y $H_y^{q-\frac{1}{2}}[m + \frac{1}{2}]$, mientras que la derivada espacial se reemplaza por una diferencia finita que involucra a $E_z^q[m + 1]$ y $E_z^q[m]$. Esto produce

$$\mu \frac{H_y^{q+\frac{1}{2}}[m + \frac{1}{2}] - H_y^{q-\frac{1}{2}}[m + \frac{1}{2}]}{\Delta t} = \frac{E_z^q[m + 1] - E_z^q[m]}{\Delta x} \quad (2.12)$$

Resolviendo para $H_y^{q+\frac{1}{2}} \left[m + \frac{1}{2} \right]$ finalmente se obtiene

$$H_y^{q+\frac{1}{2}} \left[m + \frac{1}{2} \right] = H_y^{q-\frac{1}{2}} \left[m + \frac{1}{2} \right] + \frac{\Delta t}{\mu \Delta x} (E_z^q[m+1] - E_z^q[m]) \quad (2.13)$$

Procedemos para el campo eléctrico de manera análoga. Partimos de la ley de Ampère evaluando el campo eléctrico en el punto $m\Delta x, (q+1/2)\Delta t$

$$\varepsilon_0 \frac{\partial E_z}{\partial t} \Big|_{m\Delta x, (q+1/2)\Delta t} = \frac{\partial H_y}{\partial x} \Big|_{m\Delta x, (q+1/2)\Delta t} \quad (2.14)$$

Se emplean diferencias finitas en la ecuación anterior, traducándose en

$$\varepsilon_0 \frac{E_z^{q+1}[m] - E_z^q[m]}{\Delta t} = \frac{H_y^{q+\frac{1}{2}} \left[m + \frac{1}{2} \right] - H_y^{q+\frac{1}{2}} \left[m - \frac{1}{2} \right]}{\Delta x} \quad (2.15)$$

Hallamos la expresión para el campo eléctrico en el punto $E_z^{q+1}[m]$

$$E_z^{q+1}[m] = E_z^q[m] + \frac{\Delta t}{\varepsilon_0 \Delta x} \left(H_y^{q+\frac{1}{2}} \left[m + \frac{1}{2} \right] - H_y^{q+\frac{1}{2}} \left[m - \frac{1}{2} \right] \right) \quad (2.16)$$

Las ecuaciones resultantes 2.13 y 2.16 del método FDTD nos permiten propagar un pulso láser cualquiera, siendo estas ecuaciones los pilares de nuestras simulaciones. Estas ecuaciones son válidas tanto en vacío, como en cualquier material con una permeabilidad y permitividad dieléctrica constantes.

2.3. Fuente aditiva

En el caso más simple y como se muestra en el apéndice A el pulso incidente se introduce mediante una fuente puntual en el primer nodo de nuestra simulación. Tiene una envolvente del tipo coseno cuadrado mientras la fase, descrita por un coseno, oscila de manera periódica. El campo es de la forma

$$E(t) = U(t) \cos(\omega_0 t) \quad (2.17)$$

donde $U(t)$ es la envolvente del pulso que sigue la expresión

$$U(t) = \begin{cases} E_0 \cos^2\left(\pi \frac{t}{\tau}\right) & \text{si } -\tau/2 \leq t \leq \tau/2 \\ 0 & \text{si } |t| > \tau/2 \end{cases} \quad (2.18)$$

siendo τ la duración del pulso.

2.4. Características generales del método FDTD

En las simulaciones FDTD existen restricciones sobre cuán grande puede ser el paso temporal. Si es demasiado grande, el algoritmo produce resultados inestables (es decir, los números obtenidos no tienen ningún sentido y generalmente tienden rápidamente a infinito). Sin entrar en profundidad en un análisis riguroso de estabilidad podemos establecer una condición de estabilidad aproximada pensando en la forma en que los campos se propagan en la red FDTD. De manera intuitiva podemos pensar que la energía no puede propagarse más allá de un paso espacial por cada paso temporal, es decir, $c\Delta t \leq \Delta x$. Esto se debe a que en el algoritmo FDTD cada nodo solo afecta a sus vecinos más cercanos. En una iteración temporal, lo más lejos que podría propagarse una perturbación es un paso espacial. El método FDTD es condicionalmente estable, es decir, los errores numéricos de la simulación permanecerán acotados siempre y cuando se cumpla la condición de estabilidad. Definimos esta condición a través del número de Courant, S_c . Por tanto, para las simulaciones unidimensionales consideradas en nuestro programa, fijamos

$$S_c = \frac{c\Delta t}{\Delta x} = 1 \quad (2.19)$$

S_c debe estar en el intervalo $0 \leq S_c \leq 1$ para que la simulación sea estable.

2.5. Condiciones de contorno

En los bordes del mallado, normalmente no se pueden utilizar las ecuaciones que se aplican al resto de los puntos del interior, ya que los puntos de los extremos carecen de alguno de los puntos adyacentes que aparecen explícitamente en las ecuaciones 2.16 y 2.13. En este caso, se aplican condiciones de contorno en los bordes del mallado para solventar este problema. Hay varios tipos diferentes de condiciones de contorno

- Dirichlet: $u(\mathbf{r})$, $\forall \mathbf{r} \in \mathcal{C}$. Se escribe el valor que toma la función en el borde del mallado. Este valor puede ser igual a 0 o ser igual a alguna función dada en la frontera.
- Neumann: $\frac{\partial u}{\partial n}$, $\forall \mathbf{r} \in \mathcal{C}$, donde determinamos cuál es el valor de la derivada de la función en la frontera.
- Cauchy: $u(\mathbf{r})$ o $\frac{\partial u}{\partial n}$, $\forall \mathbf{r} \in \mathcal{C}$. Es una mezcla de las condiciones de Neumann y Dirichlet.

- Condiciones de frontera absorbentes, (*Absorbing Boundary Conditions*, ABC): Son muy utilizadas en diferencias finitas. Se emplea una condición límite que absorba las ondas y refleje la menor cantidad de energía posible. Podemos pensar que se crea una interferencia destructiva en el borde del mallado o que la onda abandona la región de simulación sin reflexión.

Se puede obtener una condición de frontera absorbente discretizando la ecuación de onda unidireccional en los extremos de la región. Esto se conoce como la condición límite de Mur [10]

$$\frac{\partial u}{\partial x} = -\frac{1}{c} \frac{\partial u}{\partial t} \quad (2.20)$$

Esta ecuación tiene soluciones de la forma $u(x, t) = u_0(x - ct)$, que es una onda de forma arbitraria que se mueve hacia la derecha a medida que aumenta el tiempo. Discretizamos esta ecuación, teniendo cuidado de evaluar las derivadas espacial y temporal en el mismo punto, de la misma forma que se realiza en la bibliografía [10]. Resolviendo para u_m^{q+1} resulta

$$u_m^{q+1} = u_{m-1}^q + \frac{S_c - 1}{S_c + 1} (u_{m-1}^{q+1} - u_m^q) \quad (2.21)$$

Asumiendo una red con $N+1$ puntos, desde 0 hasta N , el valor de los campos en los puntos de las fronteras, $E_z[0]$ y $H_y[N]$, se obtiene al aplicar la fórmula 2.21 para ambos nodos. Recordemos que hemos tomado $S_c = 1$ en la sección (2.5). En este caso, las fórmulas para ambos son bastante sencillas, ya que solamente dependen de los puntos adyacentes definidos dentro del mallado

$$E_z^{q+1}[0] = E_z^q[1] \quad (2.22)$$

$$H_y^{q+1}[N - 1] = H_y^q[N - 2] \quad (2.23)$$

Capítulo 3

Propagación lineal

Inicialmente, comprobamos que el algoritmo funciona correctamente estudiando la propagación del pulso en el vacío, donde el pulso no sufre dispersión y viaja sin modificar su amplitud y su forma aplicando las ecuaciones 2.13 y 2.16. Los resultados concuerdan con lo esperado. A continuación, en la sección (3.1) simularemos un material dieléctrico dispersivo puesto a continuación del vacío. Por el cual viajará la parte transmitida del pulso incidente, mientras la parte reflejada continúa propagándose por el vacío.

3.1. Introducción de la dispersión en el modelo

Estudiamos la propagación de un pulso en un medio dispersivo, donde el índice de refracción depende de la frecuencia. El pulso ultracorto oscila a una frecuencia angular ω correspondiente a la longitud de onda central del pulso.

Esta propagación está regida por un comportamiento lineal que se puede explicar a partir del modelo clásico de Lorentz. En él los electrones ligados a los iones interactúan con el campo eléctrico externo mediante un potencial de oscilador armónico.

Por ende, nuestro propósito es buscar una ecuación que describa el comportamiento lineal del medio. Cuando trabajamos con un medio isótropo en la zona de transparencia podemos relacionar el campo eléctrico con el vector desplazamiento a partir de la *relación constitutiva* (que sólo podremos aplicar cuando el campo eléctrico es lo “suficientemente” débil)

$$\mathbf{E} = \frac{1}{\varepsilon_0}(\mathbf{D} - \mathbf{P}) \quad (3.1)$$

donde \mathbf{P} es la polarización y está relacionada con el movimiento de las cargas en el interior del material. Podemos pensar que se crea un dipolo cuando cada electrón se separa de su posición de equilibrio.

\mathbf{P} se describe mediante la expresión

$$P = -eNz(t) \quad (3.2)$$

siendo e la carga del electrón, N la densidad de electrones del medio dispersivo y $z(t)$ el desplazamiento de los electrones con respecto a sus posiciones de equilibrio.

En el modelo clásico de Lorentz [11], la ecuación de movimiento del electrón en el potencial y en presencia del campo externo queda

$$\frac{d^2z(t)}{dt^2} = -\frac{\delta_1}{2} \frac{dz(t)}{dt} - \omega_1^2 z(t) - \frac{e}{m} E(t) \quad (3.3)$$

donde m es la masa del electrón, $\delta_1/2$ es el coeficiente de amortiguamiento y $\omega_1 = 2\pi \cdot f_1$ es la frecuencia de resonancia del medio.

Sustituyendo la expresión de la polarización en la ecuación del movimiento y agrupando términos se obtiene

$$\frac{d^2P(t)}{dt^2} = -\frac{\delta_1}{2} \frac{dP(t)}{dt} - (\omega_1^2 + \omega_p^2) P(t) + \omega_p^2 D(t) \quad (3.4)$$

siendo $\omega_p = \sqrt{Ne^2/m\varepsilon_0} = \omega_1 \sqrt{\varepsilon_s - \varepsilon_\infty}$ la frecuencia de plasma del material, que da cuenta de la intensidad de la respuesta del medio.

Empleamos diferencias finitas para la polarización, con lo cual la primera derivada de la polarización toma la forma

$$\frac{dP(t)}{dt} = \frac{P^{q+1} - P^{q-1}}{2\Delta t} \quad (3.5)$$

mientras la segunda derivada se escribe como

$$\frac{d^2P(t)}{dt^2} = \frac{P^{n+1} - 2P^n + P^{n-1}}{\Delta t^2} \quad (3.6)$$

A la hora de programar el código buscamos tener mayor estabilidad y empleamos los valores medios de \mathbf{D} y \mathbf{P} mediante las expresiones

$$P^n = \frac{P^{q+1} + P^{q-1}}{2} \quad (3.7)$$

$$D^n = \frac{D^{q+1} + D^{q-1}}{2} \quad (3.8)$$

La expresión final para la polarización lineal es

$$P_z^{q+1}[m] = \frac{1}{a_1} (c_1 (D_z^{q+1}[m] + D_z^{q-1}[m]) + 4_z P^q[m] + g_1 P_z^{q-1}[m]) \quad (3.9)$$

donde reagrupamos y definimos nuevos términos

$$a_1 = 2 + 2\delta_1\Delta t + \omega_1^2 (1 + (\varepsilon_S - \varepsilon_\infty)) \Delta t^2 \quad (3.10)$$

$$c_1 = \omega_1^2 (\varepsilon_S - \varepsilon_\infty) \Delta t^2 \quad (3.11)$$

$$g_1 = -2 + 2\delta_1\Delta t - \omega_1^2 (1 + (\varepsilon_S - \varepsilon_\infty)) \Delta t^2 \quad (3.12)$$

para tener una expresión más simple.

De esta manera obtenemos la polarización para un instante a partir de los valores de la polarización y el vector desplazamiento en ese instante y anteriores, todos ellos conocidos.

Por tanto, el sistema de ecuaciones de nuestra simulación es

$$\begin{aligned} H_y^{q+1}[m + 1/2] &= H_y^q[m + 1/2] + \frac{\Delta t}{\mu\Delta x} (E_x^{q+1}[m + 1] - E_x^{q+1}[m]) \\ D_z^{q+1}[m + 1] &= D_z^q[m + 1] + \frac{\Delta t}{\Delta x} (H_y^{q+1}[m + 1/2] - H_y^{q+1/2}[m - 1/2]) \\ E_z^{q+1}[m] &= \frac{1}{\varepsilon_0\varepsilon_\infty} (D_z^{q+1}[m] - P_z^{q+1}[m]) \\ P_z^{q+1}[m] &= \frac{1}{a_1} (c_1(D_z^{q+1}[m] + D_z^{q-1}[m]) + 4P_z^q[m] + g_1P_z^{q-1}[m]) \end{aligned} \quad (3.13)$$

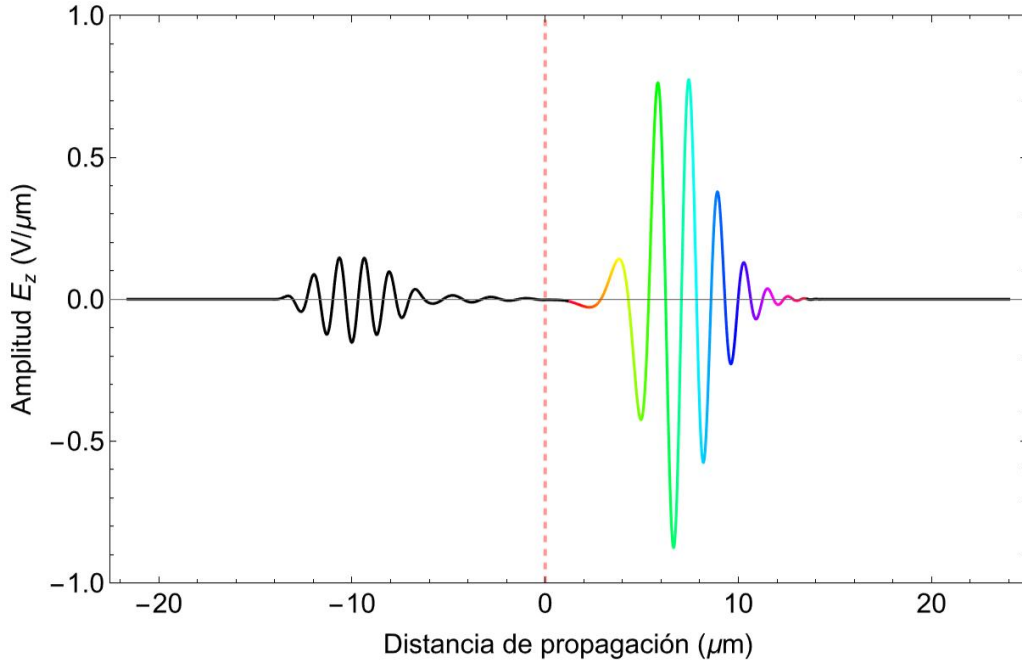


Figura 3.1: Representación del campo eléctrico para todos los nodos del mallado en un instante de tiempo determinado.

En la figura 3.1 podemos ver la representación del campo eléctrico para todos los nodos en un instante temporal. El pulso viaja de izquierda a derecha. Primero se

propaga por el vacío y posteriormente llega a la frontera entre el vacío y el medio, situada en $x = 0 \mu m$, donde una parte del pulso se refleja y la otra se transmite al segundo medio. Este segundo medio es un dieléctrico dispersivo, donde en este caso sufre un chirp negativo debido a la GVD, que se representa de manera visual con una línea de color arcoíris. La parte del pulso que primero llega corresponde a los “azules” y la última parte tiende hacia los “rojos”. Los parámetros de esta simulación son: $\omega = 1,5 \text{ rad/fs}$, $\tau = 30 \text{ fs}$, $f_1 = 0,1 \text{ fs}^{-1}$, $\delta_1 = 0,1 \cdot f_1 \text{ fs}^{-1}$, $\varepsilon_s = 3$ y $\varepsilon_\infty = 1$.

Adicionalmente, en la figura 3.2 representamos el campo eléctrico para todos los nodos para un instante posterior del correspondiente a la figura 3.1. Observamos que a medida que se propaga por el dieléctrico dispersivo, el pulso se alarga, manteniéndose el área del pulso prácticamente constante, puesto que se conserva la energía y la atenuación para estas simulaciones es pequeña. Por otro lado, al comparar ambas figuras apreciamos que el máximo del pulso transmitido se encuentra en una posición relativa dentro del pulso diferente para cada instante. Esto nos indica que la velocidad de fase es diferente de la velocidad de grupo. Naturalmente, esto no ocurre con la parte del pulso que se ha reflejado en el vacío.

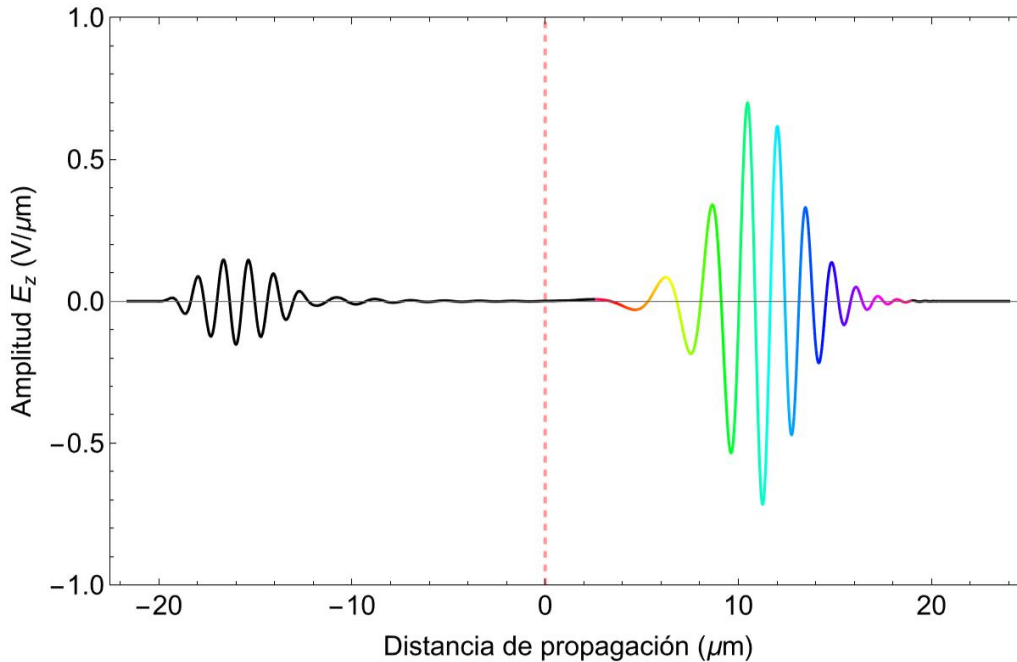


Figura 3.2: Representación del campo eléctrico para todos los nodos del mallado en un tiempo posterior a la figura 3.1.

Para el siguiente caso, que corresponde a la figura 3.3, únicamente modificamos f_1 con respecto a los valores de las simulaciones para las figuras 3.1 y 3.2, donde ahora $f_1 = 0,39 \text{ fs}^{-1}$. Por tanto, nuestros parámetros son: $\omega = 1,5 \text{ rad/fs}$, $\tau = 30 \text{ fs}$,

$$f_1 = 0,39 fs^{-1}, \delta_1 = 0,1 \cdot f_1 fs^{-1}, \varepsilon_s = 3 \text{ y } \varepsilon_\infty = 1.$$

El chirp que sufre la parte transmitida del pulso es positivo, de tal manera que los “rojos” llegan antes que los “azules”. Para este caso tomamos una serie de representaciones del campo eléctrico para diferentes instantes de tiempo para estudiar con profundidad la propagación. Además del alargamiento del pulso, fruto de la dispersión, en este caso hay una fuerte absorción del pulso. Este fenómeno se explicará en la sección (3.3). Debido a la absorción, si el pulso se siguiese propagando por el material terminaría por desaparecer. Se podría considerar otra forma de programar una condiciones de contorno, asegurándonos de que el material es lo suficientemente largo como para que el pulso al llegar a la frontera sea despreciable. Sin embargo, utilizar este método implica un elevado coste computacional debido al aumento del tamaño del mallado o trabajar cerca de la resonancia, lo cual podría no interesarnos en todas las ocasiones.

Dentro de la figura 3.3 en la gráfica (3.3a) se muestra el pulso incidente antes de llegar a la frontera, que se encuentra en la posición $x = 0 \mu m$, en la (3.3b) los pulsos transmitido y reflejado en la frontera y en la (3.3c) el pulso transmitido tras sufrir absorción y estirarse por la dispersión.

3.2. Cálculo del índice de refracción

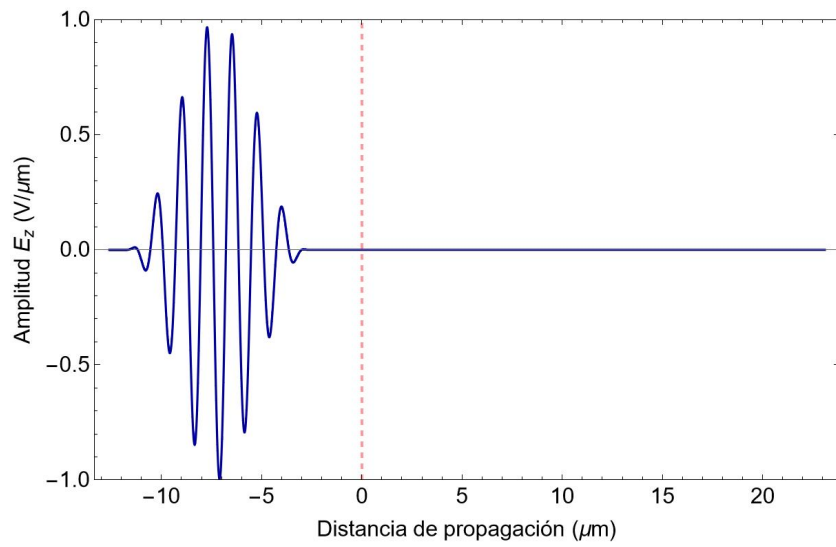
Si consideramos un material con una única resonancia Lorentziana, a través de la solución estática de la ecuación diferencial que nos da el modelo de Lorentz, la expresión para la permitividad eléctrica relativa es de la forma

$$\varepsilon_r(\omega) = \varepsilon_\infty + \frac{(\varepsilon_s - \varepsilon_\infty)\omega_1^2}{\omega_1^2 + 2j\omega\delta_1 - \omega^2} \quad (3.14)$$

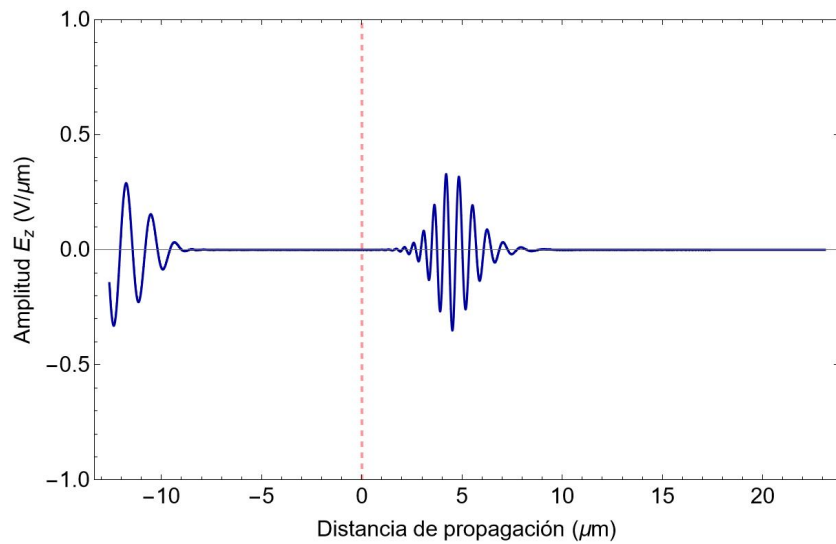
donde ω_1 es la frecuencia de resonancia, $\delta_1/2$ es la constante de amortiguamiento, ε_∞ es la permitividad relativa del material para una frecuencia infinita y ε_0 es la permitividad relativa del material para un campo estático.

A partir de ella, hallamos la expresión del índice de refracción en función de la frecuencia

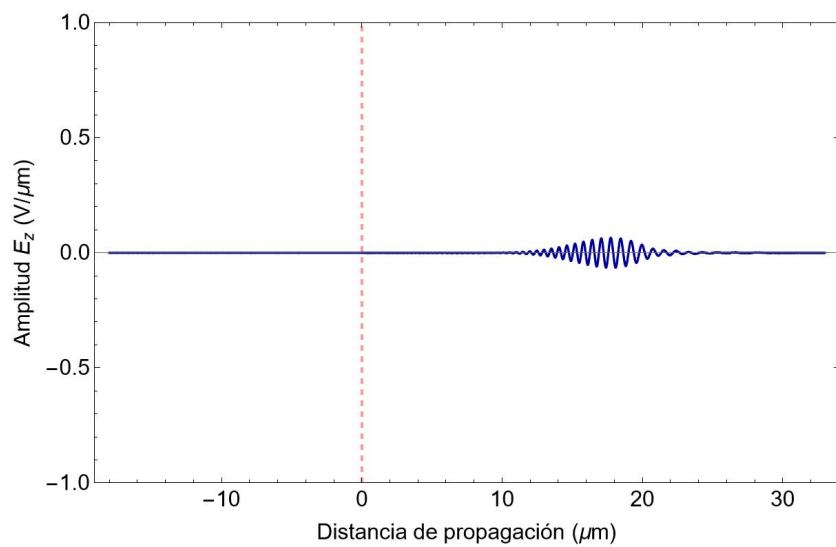
$$n(\omega) = \sqrt{\varepsilon_r(\omega)} \quad (3.15)$$



(a) Primer tiempo.



(b) Segundo tiempo.



(c) Tercer tiempo.

Figura 3.3: Batería de representaciones del campo eléctrico para todas las posiciones de la red en diferentes instantes de tiempo.

En la figura 3.4 podemos ver la parte real en rojo e imaginaria en azul del índice de refracción para los parámetros de la simulación de las figuras 3.1 y 3.2. El índice de refracción para la frecuencia del pulso incidente ω es: $n(\omega) = 0,7579 + i \cdot 0,0045$. La representación de las frecuencias está normalizada a la frecuencia del pulso láser incidente, que corresponde a la línea magenta.

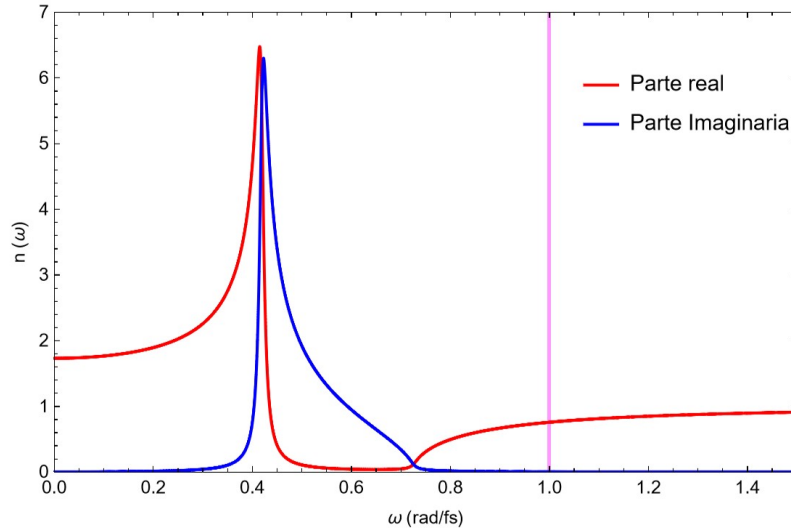


Figura 3.4: Representación del índice de refracción correspondiente a los parámetros de la simulación de las figuras 3.1 y 3.2.

Igualmente, representamos en la figura 3.5 el índice de refracción simulado en la figura 3.3. El índice de refracción para la frecuencia ω es: $n(\omega) = 2,0484 + i \cdot 0,0243$.

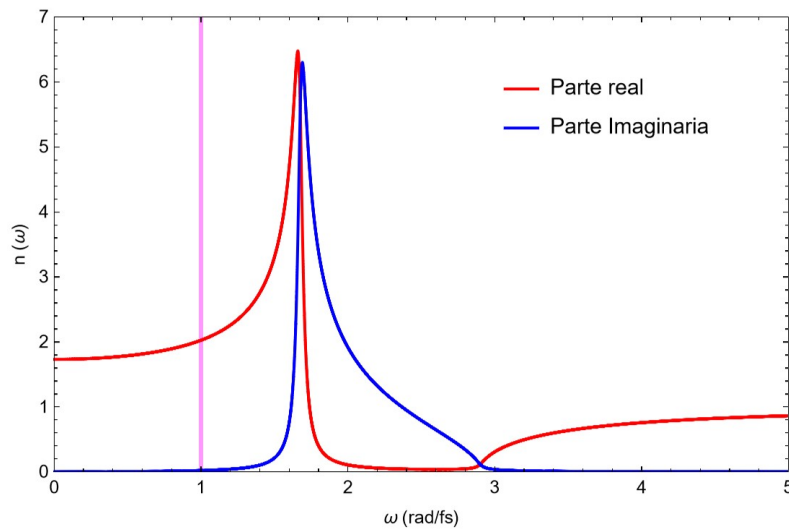


Figura 3.5: Representación del índice de refracción para los parámetros de la simulación en 3.3.

Viendo la figura 3.5 entendemos la simulación 3.3, donde a medida que el pulso

se propaga por el interior del material sufre una fuerte absorción, como muestra la figura 3.3c. Esto es debido a que estamos cerca de la resonancia y la parte imaginaria del índice de refracción tiene una contribución importante.

3.3. Reflexión y transmisión

En las simulaciones que ejecutamos el pulso incide normal a la superficie de separación de ambos medios. Los coeficientes de reflexión y transmisión del pulso en la frontera vienen dados en el caso estático o para pulsos largos por las fórmulas de Fresnel [9]

$$r_{\perp} = \frac{n_1 - n_2}{n_1 + n_2} \quad (3.16)$$

$$t_{\perp} = \frac{2n_1}{n_1 + n_2} \quad (3.17)$$

siendo n_1 el índice de refracción del vacío y n_2 el índice de refracción del dieléctrico.

Comprobamos que se cumplen estas ecuaciones para unos valores concretos de nuestra simulación, estando lejos de la resonancia. Los parámetros del medio dispersivo son los mismos que en la figura 3.3 y modificamos los parámetros del pulso incidente a $\omega = 0,4 \text{ rad/fs}$, una duración $\tau = 60 \text{ fs}$ y una amplitud inicial de $E_z = 1 \text{ } \mu\text{V/m}$ con la finalidad de trabajar lejos de la resonancia y verificar estas expresiones para un pulso corto. Hallamos el índice de refracción del medio dispersivo para esta frecuencia como $n_2(\omega) = 1,7478 + i \cdot 0,003$. Esta simulación se muestra en la figura 3.6, donde las líneas verticales marcan los valores máximos de las amplitudes para las partes transmitida y reflejada del pulso. El máximo de la transmitida es $0,71 \text{ } \mu\text{V/m}$ y el máximo de la reflejada es $0,23 \text{ } \mu\text{V/m}$.

Mediante los parámetros de la simulación podemos calcular el índice de refracción que corresponde para un pulso $\omega = 0,4 \text{ rad/fs}$ y a través de él podemos calcular teóricamente los coeficientes de transmisión y reflexión. Redondeando $t_{\perp} = 0,73 \text{ } \mu\text{V/m}$ y $r_{\perp} = 0,27 \text{ } \mu\text{V/m}$. Por tanto, el error relativo del coeficiente de transmisión es del 3% y para el coeficiente de reflexión el error relativo es del 14%. Los resultados mejoran aún más conforme la frecuencia del pulso está más lejos a la zona de resonancia.

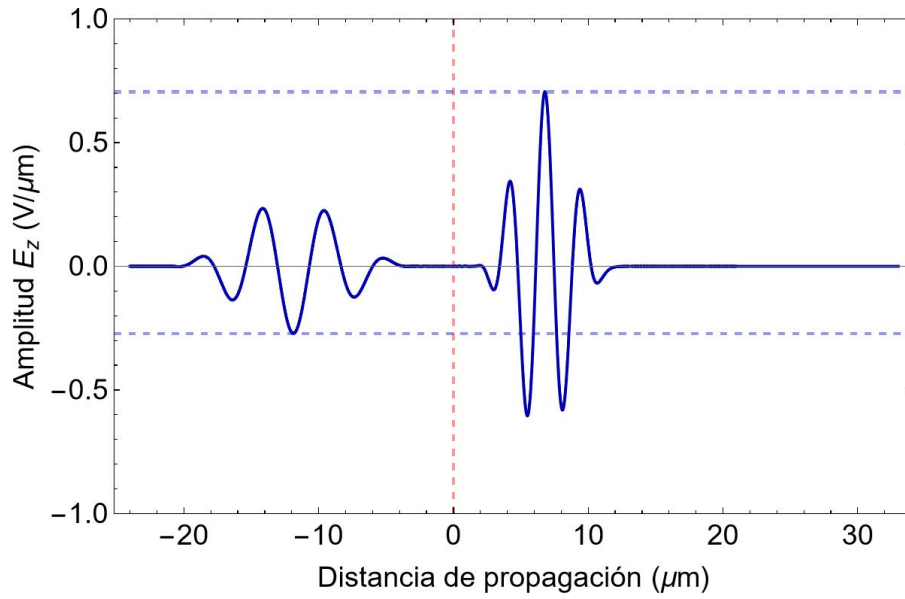


Figura 3.6: Estudio de los coeficientes de transmisión y reflexión para los parámetros del material de la figura 3.5. Trabajamos con una frecuencia del pulso láser incidente $\omega = 0,4 \text{ rad/fs}$.

Si comparamos las longitudes de onda resultantes, comprobamos que la longitud de onda de la parte reflejada del pulso no cambia con respecto a la incidente, como es lógico. El pulso incidente tiene una longitud de onda de

$$\lambda_0 = c/f = \frac{2\pi \cdot c}{\omega} = \frac{2\pi \cdot 0,29979 \mu m/fs}{0,4 \text{ rad/fs}} = 4709 \text{ nm}$$

siendo c la velocidad de la luz en el vacío.

Al atravesar la discontinuidad entre el vacío y el medio dispersivo, se modifica la longitud de onda de la parte transmitida del pulso, teóricamente sería

$$\lambda = \frac{\lambda_0}{n_2} = \frac{4709 \text{ nm}}{1,7478} = 2694 \text{ nm}$$

En la simulación de la figura 3.6 la longitud de onda del medio dispersivo es: $\lambda = 2702 \text{ nm}$ con un error relativo del 0.3% con respecto al valor teórico de la aproximación estática.

Gracias a estas comprobaciones nos aseguramos de que el modelo y el software desarrollado funcionan de acuerdo con lo esperado.

Capítulo 4

Propagación no lineal

Al irradiar un material con un campo lo “suficientemente” intenso [12] surgen efectos no lineales, entre ellos la generación de nuevas frecuencias. Generalmente, un láser es suficientemente intenso para modificar las propiedades ópticas del material y producir efectos no lineales. En este trabajo estudiaremos la generación y propagación del segundo armónico, así como el papel del ajuste de fase por medio de un material birrefringente uniaxial en esta generación. La generación del segundo armónico es producto de la respuesta atómica que escala de forma cuadrática con la fuerza del campo eléctrico aplicado. Por esa razón, la intensidad del segundo armónico tiende a aumentar como el cuadrado de la intensidad aplicada. Buscamos una expresión para la intensidad $I_{2\omega}$, para explicar la fenomenología que se produce en las simulaciones.

Cuando un pulso incide en un material no lineal dispersivo, el campo eléctrico en el interior del medio es la suma de las componentes fundamental y de segundo armónico

$$\mathbf{E}(x, t) = \mathbf{E}_\omega(x, t) + \mathbf{E}_{2\omega}(x, t) \quad (4.1)$$

que debe satisfacer la ecuación de ondas general, que describe la propagación del pulso dentro del medio

$$\nabla^2 \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) - \frac{\varepsilon_r(\omega)}{c^2} \frac{\partial^2 \mathbf{E}(\mathbf{r}, t)}{\partial t^2} = \frac{1}{\varepsilon_0 c^2} \frac{\partial^2 \mathbf{P}_{NL}(\mathbf{r}, t)}{\partial t^2} \quad (4.2)$$

En ausencia de término no lineal, la solución de la ecuación de ondas es una onda plana de frecuencia ω

$$E_\omega(x, t) = \left(E_0 e^{-i(\omega t - k_\omega x)} + c.c \right) \quad (4.3)$$

donde $k_\omega = n(\omega) \cdot \omega/c$ y la amplitud E_0 es constante. Cuando el término no lineal de la ecuación de ondas es pequeño, hay que incluir la dependencia de la amplitud con x en la solución 4.3 resultando en

$$E_\omega(x, t) = \left(E_0(x) e^{-i(\omega t - k_\omega x)} + c.c \right) \quad (4.4)$$

Sustituimos la solución 4.4 para cada componente del campo eléctrico

$$E_\omega(x, t) = \left(E_{0,\omega}(x) e^{-i(\omega t - k_\omega x)} + c.c \right) \quad (4.5)$$

$$E_{2\omega}(x, t) = \left(E_{0,2\omega}(x) e^{-i(2\omega t - k_{2\omega} x)} + c.c \right) \quad (4.6)$$

Por otro lado, descomponemos la polarización no lineal en la suma de dos componentes

$$P_{NL}(x, t) = P_\omega^{NL}(x, t) + P_{2\omega}^{NL}(x, t) \quad (4.7)$$

donde $P_\omega^{NL}(x, t) = P_\omega(x) e^{-i\omega t}$ y $P_{2\omega}^{NL}(x, t) = P_{2\omega}(x) e^{-i2\omega t}$.

Las amplitudes de polarización $P_\omega(x)$ y $P_{2\omega}(x)$ son

$$P_\omega(x) = 2\varepsilon_0 \chi^{(2)} E_{0,2\omega} E_{0,\omega}^0 e^{i(k_{2\omega} - k_\omega)x} \quad (4.8)$$

$$P_{2\omega}(x) = 2\varepsilon_0 \chi^{(2)} (E_{0,\omega})^2 e^{i2k_\omega x} \quad (4.9)$$

Sustituyendo la expresión del campo eléctrico y de la polarización para cada componente en la ecuación de ondas no lineal en la expresión 4.4 se obtiene

$$\omega \rightarrow \left(\frac{d^2 E_{0,\omega}}{dx^2} + 2ik_\omega \frac{dE_{0,\omega}}{dx} \right) e^{ik_\omega x} = -\frac{4d_{eff}\omega^2}{c^2} E_{0,\omega}^* E_{0,2\omega} e^{i(k_{2\omega} - k_\omega)x} \quad (4.10)$$

$$2\omega \rightarrow \left(\frac{d^2 E_{0,2\omega}}{dx^2} + 2ik_{2\omega} \frac{dE_{0,2\omega}}{dx} \right) e^{ik_{2\omega} x} = -\frac{16d_{eff}\omega^2}{c^2} E_{0,\omega} e^{i2k_\omega x} \quad (4.11)$$

con $d_{eff} = 0,5 \chi^{(2)}$.

Haciendo la aproximación de envolvente lentamente variable (*Slowly Varying Envelope Approximation*, SVEA)

$$\left| \frac{d^2 E_{0,2\omega}}{dx^2} \right| \ll \left| k_{2\omega} \frac{dE_{0,2\omega}}{dx} \right| \quad (4.12)$$

tenemos entonces el siguiente sistema de ecuaciones

$$\begin{aligned} \frac{dE_{0,\omega}}{dx} &= \frac{i2d_{eff}\omega^2}{k_\omega c^2} E_{0,\omega}^* E_{0,2\omega} e^{-i\Delta k x} \\ \frac{dE_{0,2\omega}}{dx} &= \frac{i8d_{eff}\omega^2}{k_{2\omega} c^2} E_{0,\omega} e^{i\Delta k x} \end{aligned} \quad (4.13)$$

donde $\Delta k = 2k(\omega) - k(2\omega) = \frac{2\omega}{c} (n(\omega) - n(2\omega))$.

Suponemos que la amplitud del pulso fundamental ($E_{0,\omega}$) es constante. La intensidad de segundo armónico se calcula a través del módulo del vector de Poynting, como aparece a continuación

$$I_{2\omega} = 2n_{2\omega}\varepsilon_0c |E_{0,2\omega}|^2 \quad (4.14)$$

Para determinar $E_{0,2\omega}$ consideramos un material no lineal de espesor l , a la salida

$$E_{0,2\omega} = \int_0^l \frac{i8d_{eff}\omega^2}{k_{2\omega}c^2} E_{0,\omega}^2 e^{i\Delta kx} dx = \frac{8d_{eff}\omega^2}{k_{2\omega}c^2} (E_{0,\omega})^2 \left(\frac{e^{i\Delta kl} - 1}{\Delta k} \right) \quad (4.15)$$

Finalmente, encontramos la expresión para la intensidad del segundo armónico

$$I_{2\omega} = 2n_{2\omega}\varepsilon_0c \left(\frac{8d_{eff}\omega^2}{k_{2\omega}c^2} (E_{0,\omega})^2 \right)^2 \left| \frac{e^{i\Delta kl} - 1}{\Delta k} \right|^2 \quad (4.16)$$

que podemos reescribir en términos de la intensidad de la frecuencia fundamental

$$I_{2\omega} = \frac{32l^2 d_{eff}^2 \omega^4}{n_{\omega}^2 n_{2\omega} \varepsilon_0 c^3} I_{\omega}^2 \text{sinc}^2 \left(\frac{\Delta kl}{2} \right) \quad (4.17)$$

En esta aproximación, la intensidad y la eficiencia del segundo armónico dependen de la intensidad del pulso de frecuencia fundamental y del espesor del material de manera cuadrática. El término $\text{sinc}^2(\Delta kl/2)$ tiene en cuenta el ajuste o desajuste de fase entre los pulsos de la frecuencia fundamental y su segundo armónico y puede limitar la eficiencia máxima de conversión. La máxima intensidad solo puede aparecer si $\Delta k = 0$, es decir, cuando $n(\omega) = n(2\omega)$. Esta situación se conoce como ajuste de fase (*phase matching*). Por el contrario, si estamos en una situación de desajuste de fase ($\Delta k \neq 0$) la intensidad caerá notablemente.

4.1. Introducción de la no linealidad en el modelo

Implementamos la contribución no lineal a la polarización en nuestro código a través de la expresión

$$P_{NLz}^{q+1}[m] = \xi_1 \left(\frac{P_z^q[m] + P_z^{q-1}[m]}{2} \right)^2 \quad (4.18)$$

donde $\xi_1 = 1/4\varepsilon_0\chi^{(2)}(E_{0,\omega})^2$.

Introduciendo esta ecuación y jugando con los parámetros de la simulación se obtiene la figura 4.1. Los parámetros bajo los que se ha obtenido este resultado son los mismos que para la figura 3.3: un pulso incidente con una frecuencia $\omega = 1,5 \text{ rad/fs}$ y una duración $\tau = 30 \text{ fs}$, y los parámetros del medio son: $f_1 = 0,39 \text{ fs}^{-1}$,

$\delta_1 = 0,1 \cdot f_1 \text{ fs}^{-1}$, $\varepsilon_s = 3$ y $\varepsilon_\infty = 1$. En este caso añadimos el factor de la no linealidad con un valor de $\xi_1 = 7 \cdot 10^9 \text{ } \mu\text{m}^2/\text{C}$

En la figura 4.1a podemos ver el pulso antes de incidir en el medio no lineal dispersivo, así como el pulso propagándose por él en la figura 4.1b. En la figura 4.1c vemos la intensidad espectral para el tiempo final, cuando el pulso se ha propagado cierta distancia dentro del material. La intensidad espectral describe la intensidad de cada una de las frecuencias que componen el espectro. Analíticamente, se puede obtener a partir de la transformada de Fourier del campo eléctrico en el dominio temporal, mediante la expresión

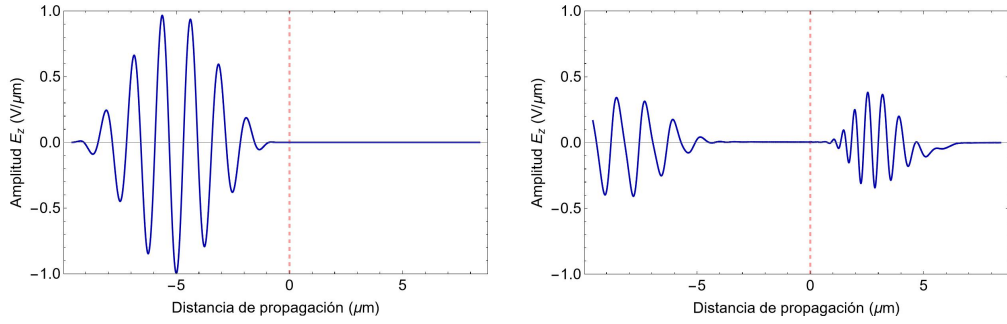
$$I(\omega) = |E(\omega)|^2 = \left| \int_{-\infty}^{\infty} E(t) \exp(-i\omega t) dt \right|^2 \quad (4.19)$$

en nuestro caso realizamos la transformada de Fourier discreta,

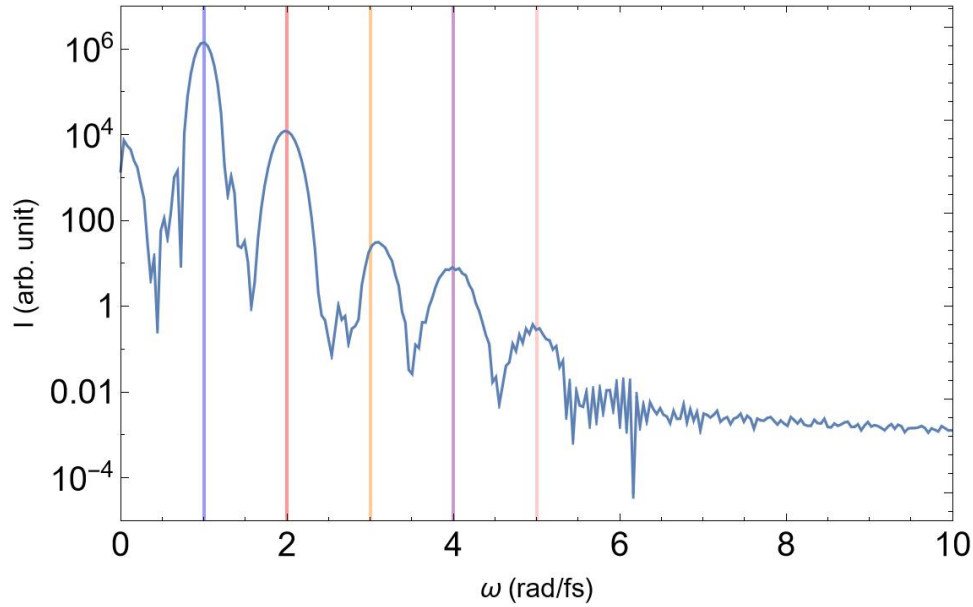
$$E(\omega) = \sum_{t=0}^{t_{fin}} E(t_n) \exp(-i\omega t_n) \quad (4.20)$$

donde el sumatorio abarca el tiempo de transcurrido en la simulación. Por tanto, para hallar la intensidad espectral de un punto del mallado, hay que recopilar el valor del campo eléctrico para todos los tiempos de la simulación en dicho punto. Después se realiza la transformada rápida de Fourier (*Fast Fourier Transform*, FFT) [13] incorporando una librería en C. La FFT es un algoritmo que reduce el tiempo de cálculo de la transformada de Fourier discreta. En otras partes del código, por ejemplo, en la sección (4.2) se realiza la FFT en Mathematica o Matlab. Usar la FFT va a exigir “reordenar” el resultado obtenido, ya que habitualmente se representa el espacio de frecuencias en el intervalo: $\omega = (-\omega_{\text{máx}}/2, \dots, 0, \dots, \omega_{\text{máx}}/2 - \Delta\omega)$, mientras la FFT ordena las frecuencias de la forma: $\omega = (0, \dots, (N-1)\Delta\omega = \omega_{\text{máx}} - \Delta\omega)$.

Fruto de la fuerte no linealidad podemos ver que se han generado el segundo, tercer, cuarto y quinto armónico. La intensidad está representada en escala logarítmica, ya que la intensidad de los armónicos generados es mucho menor que la intensidad de la frecuencia fundamental. El resto del espectro corresponde a ruido numérico. Para la frecuencia $\omega = 0 \text{ rads/fs}$ se registra una elevada intensidad en el espectro y es comparable a la obtenida para la señal de segundo armónico. Corresponde a un campo estático asociado al fenómeno de la rectificación óptica, que también se está generando producto de la no linealidad de segundo orden.



(a) Representación del campo eléctrico para un tiempo inicial. (b) Representación del campo eléctrico para el tiempo final.



(c) Espectro del campo eléctrico para un punto próximo a la superficie de discontinuidad entre el vacío y el medio dispersivo no lineal.

Figura 4.1: Simulación de la propagación no lineal.

4.2. Introducción de la birrefringencia en el modelo

El procedimiento más común para lograr el ajuste de fase es utilizar la birrefringencia que presentan muchos cristales. La birrefringencia es la dependencia del índice de refracción con la dirección de polarización de la radiación incidente. No todos los cristales muestran birrefringencia; en particular, los cristales que pertenecen al sistema cúbico son ópticamente isotrópicos y, por lo tanto, es imposible realizar el *phase matching* por birrefringencia y generar el segundo armónico.

Por lo general, el *phase matching* se logra mediante ajuste del ángulo. Este mé-

todo implica una orientación angular precisa del cristal con respecto a la dirección de propagación de la luz incidente. Se describe de manera más simple para el caso de un cristal uniáxico, y la siguiente discusión se restringe a este caso [12]. Los cristales uniáxicos se caracterizan por una dirección particular conocida como eje óptico (para nuestras simulaciones será el eje Y). La luz polarizada perpendicular al plano que contiene el vector de propagación \mathbf{k} y el eje óptico se denomina polarización ordinaria. El pulso que se propaga en esta dirección se verá afectado por el índice de refracción ordinario, n_o . La luz polarizada en el plano que contiene \mathbf{k} y el eje óptico se denomina polarización extraordinaria y experimenta un índice de refracción $n_e(\theta)$ que depende del ángulo θ entre el eje óptico y \mathbf{k} según la relación

$$\frac{1}{n_e(\theta)^2} = \frac{\sin^2 \theta}{\bar{n}_e^2} + \frac{\cos^2 \theta}{n_o^2} \quad (4.21)$$

donde \bar{n}_e es el valor del índice de refracción extraordinario para $\theta = 90^\circ$. En nuestra simulación se genera un segundo armónico de tipo I, donde se mezclan dos fotones con polarización paralela (ordinaria o extraordinaria) para generar el segundo armónico en la componente contraria. Mientras que en la de tipo II se mezcla un fotón de la componente ordinaria y otro de la extraordinaria para generar un fotón de segundo armónico de cualquiera de los dos tipos. Consideramos el caso de generación de segundo armónico tipo I en un cristal uniáxico negativo. La condición de *phase matching* correspondiente a la ecuación 4.21 entonces se convierte en

$$n_e(2\omega, \theta) = n_o(\omega) \quad (4.22)$$

o

$$\frac{\sin^2 \theta}{\bar{n}_e(2\omega)^2} + \frac{\cos^2 \theta}{n_o(2\omega)^2} = \frac{1}{n_o(\omega)^2} \quad (4.23)$$

Para simplificar esta ecuación, reemplazamos $\cos^2 \theta$ por $1 - \sin^2 \theta$ y resolvemos para $\sin^2 \theta$ para obtener

$$\sin^2 \theta = \frac{\frac{1}{n_o(\omega)^2} - \frac{1}{n_o(2\omega)^2}}{\frac{1}{\bar{n}_e(2\omega)^2} - \frac{1}{n_o(2\omega)^2}} \quad (4.24)$$

Esta ecuación muestra cómo debe orientarse el cristal para lograr la condición de ajuste de fase.

A la hora de programar la birrefringencia en el segundo medio, insertamos dos frecuencias de resonancia, ω_{1z} y ω_{1y} y de relajación, δ_{1z} y δ_{1y} , en el eje Z y el eje Y correspondientemente. En nuestro caso, en vez de modificar el ángulo de incidencia del pulso láser, que vamos a mantener siempre normal a la frontera, para sintonizar

el ajuste de fase, jugamos con los parámetros intrínsecos del material. Modificamos la posición de una de las frecuencias de resonancia y fijamos la otra para lograr una situación de ajuste de fase. Alternativamente, se puede modificar la longitud de onda del pulso incidente para que cumpla la condición de ajuste de fase con los parámetros fijos para ambos ejes.

Añadimos las ecuaciones de propagación para cada componente de la polarización que se propagan de forma independiente, salvo por el acoplamiento no lineal, por el cual están ligadas. Por lo tanto, la polarización lineal en Z contribuirá a la polarización no lineal en Y y viceversa. De esta manera, comenzamos con un pulso incidente cuyo campo eléctrico está linealmente polarizado en la dirección del eje Z. Finalmente se registra una señal del campo eléctrico en el eje Y al cabo de propagarse por el medio no lineal dispersivo birrefringente.

Las ecuaciones que introducimos en nuestro código para el medio no lineal birrefringente están basadas en las ecuaciones 4.18 y 3.13, donde cada eje tiene diferentes valores para cada parámetro.

Para el campo magnético en Z y el campo eléctrico en Y tenemos el sistema de ecuaciones

$$\begin{aligned} H_z^{q+1}[m+1/2] &= H_z^q[m+1/2] + \frac{\Delta t}{\mu \Delta x} (E_y^{q+1}[m+1] - E_y^{q+1}[m]) \\ D_y^{q+1}[m+1] &= D_y^q[m+1] + \frac{\Delta t}{\Delta x} (H_z^{q+1}[m+1/2] - H_z^{q+1/2}[m-1/2]) \\ P_{NL_y}^{q+1}[m] &= \xi_{1y} \left(\frac{P_y^q[m] + P_z^{q-1}[m]}{2} \right)^2 \end{aligned} \quad (4.25)$$

$$\begin{aligned} E_y^{q+1}[m] &= \frac{1}{\varepsilon_0 \varepsilon_\infty} (D_y^{q+1}[m] - P_y^{q+1}[m] - P_{NL_y}^{q+1}[m]) \\ P_y^{q+1}[m] &= \frac{1}{a_{1y}} (c_{1y} (D_y^{q+1}[m] + D_y^{q-1}[m]) + 4P_y^q[m] + g_{1y} P_y^{q-1}[m]) \end{aligned}$$

con

$$a_{1y} = 2 + 2\delta_{1y}\Delta t + \omega_{1y}^2 (1 + (\varepsilon_{Sy} - \varepsilon_{\infty y})) \Delta t^2 \quad (4.26)$$

$$c_{1y} = \omega_{1y}^2 (\varepsilon_{Sy} - \varepsilon_{\infty y}) \Delta t^2 \quad (4.27)$$

$$g_{1y} = -2 + 2\delta_{1y}\Delta t - \omega_{1y}^2 (1 + (\varepsilon_{Sy} - \varepsilon_{\infty y})) \Delta t^2 \quad (4.28)$$

Mientras que para el término de la polarización no lineal en Z se añade la polarización en Y

$$P_{NL_z}^{q+1}[m] = \xi_{1z} \left(\frac{P_z^q[m] + P_y^{q-1}[m]}{2} \right)^2 \quad (4.29)$$

y para la contribución de la polarización lineal en Z la ecuación 3.9 se transforma en

$$P_z^{q+1}[m] = \frac{1}{a_{1z}}(c_{1z}(D_z^{q+1}[m] + D_z^{q-1}[m]) + 4P_z^q[m] + g_{1z}P_z^{q-1}[m]) \quad (4.30)$$

con

$$a_{1z} = 2 + 2\delta_{1z}\Delta t + \omega_{1z}^2(1 + (\varepsilon_{sz} - \varepsilon_{\infty z}))\Delta t^2 \quad (4.31)$$

$$c_{1z} = \omega_{1z}^2(\varepsilon_{sz} - \varepsilon_{\infty z})\Delta t^2 \quad (4.32)$$

$$g_{1z} = -2 + 2\delta_{1z}\Delta t - \omega_{1z}^2(1 + (\varepsilon_{sz} - \varepsilon_{\infty z}))\Delta t^2 \quad (4.33)$$

Con estas nuevas ecuaciones ejecutamos el código para los parámetros del pulso incidente: $\omega = 1 \text{ rad/fs}$ y una duración $\tau = 40 \text{ fs}$ y los parámetros del medio birrefringente: $f_{1z} = 0,7 \text{ fs}^{-1}$, $\delta_{1z} = 0,5 \cdot f_1 \text{ fs}^{-1}$, $\varepsilon_{sz} = 2$, $\varepsilon_{\infty z} = 1$ y $\xi_{1z} = 8 \cdot 10^6 \mu\text{m}^2/\text{C}$ para el eje Z y $f_{1y} = 0,5 \text{ fs}^{-1}$, $\delta_{1y} = 0,2 \cdot f_1 \text{ fs}^{-1}$, $\varepsilon_{sy} = 1,6289$, $\varepsilon_{\infty y} = 1$ y $\xi_{1y} = 10^9 \mu\text{m}^2/\text{C}$ para el eje Y. Elegimos estos parámetros para lograr ajuste de fase como mostraremos en el siguiente apartado (4.2.1).

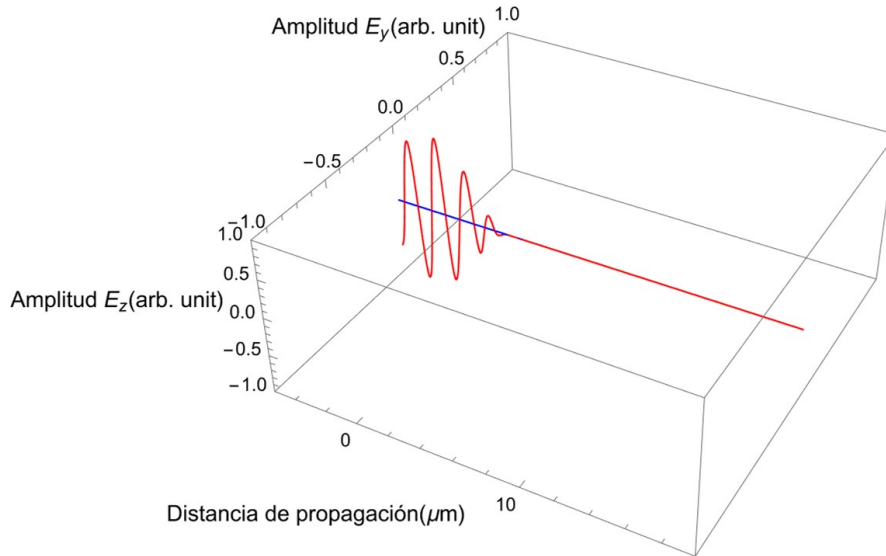


Figura 4.2: Representación del campo E_z del pulso incidente.

La figura 4.2 corresponde a la representación de los campos eléctricos E_z y E_y para un instante de tiempo antes de atravesar la superficie de separación entre el vacío y el segundo medio. No hay campo eléctrico en Y mientras que el pulso incidente en Z se propaga por el vacío.

4.2.1. Condición de ajuste de fase

Para lograr el ajuste de fase buscamos tener $n_z(\omega) = n_y(2\omega)$. Representamos los parámetros de la simulación de la figura 4.2 en la figura 4.3. Aparecen representadas la parte real del índice de refracción de n_z y de n_y . Como vemos, se cumple la condición de ajuste de fase, $n_z(\omega) = 1,4329 + i \cdot 0,014$ y $n_y(2\omega) = 1,4329 + i \cdot 0,025$. Asimismo, se busca trabajar lo “suficientemente” cerca de la resonancia ω_{1z} para que la polarización lineal en Z tenga una mayor contribución y genere el segundo armónico en el eje Y. A su vez trabajar cerca de la frecuencia de resonancia ω_{1y} hace que la señal de segundo armónico generada sufra una dispersión notable.

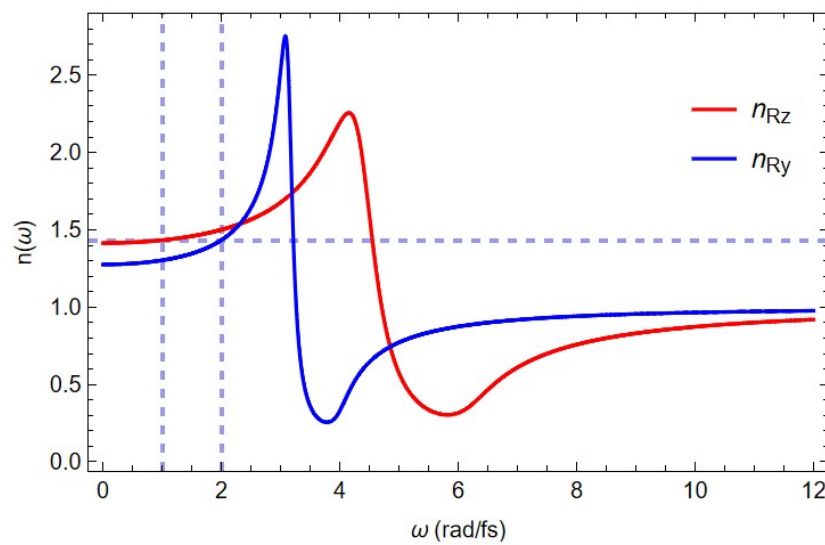


Figura 4.3: Índices de refracción en la condición de ajuste de fase

Ejecutamos el código de la simulación, en este caso dejamos propagar durante más tiempo la simulación de la figura 4.2 de tal forma que una parte del pulso se transmite al segundo medio.

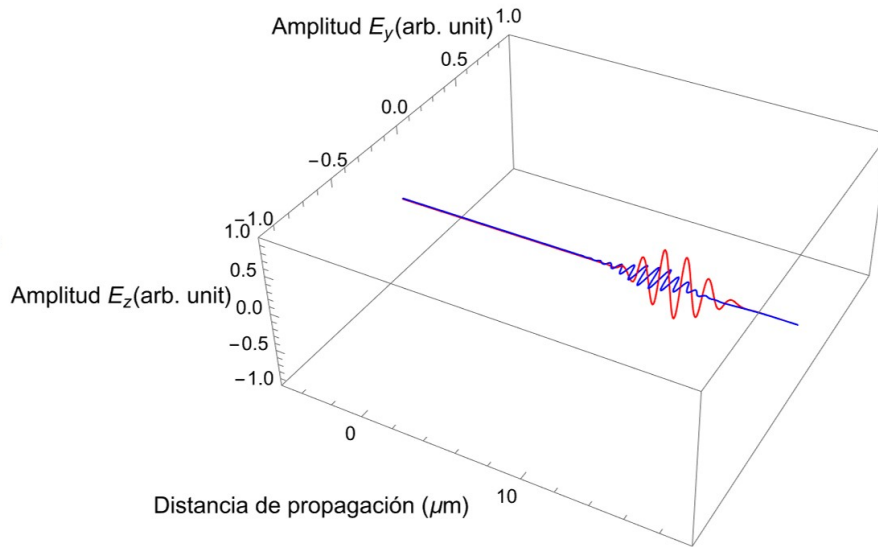


Figura 4.4: Pulsos transmitido y generado en el medio birrefringente en la condición de ajuste de fase.

La línea en azul corresponde al campo eléctrico generado en el eje Y. Inicialmente, podría parecer que ambos campos se propagan solidariamente. No obstante, si representamos los campos para un instante posterior, como muestra la figura 4.5 vemos que el campo E_y con frecuencia 2ω se retrasa con respecto al campo E_z con frecuencia ω , ya que las velocidades de grupo son muy diferentes.

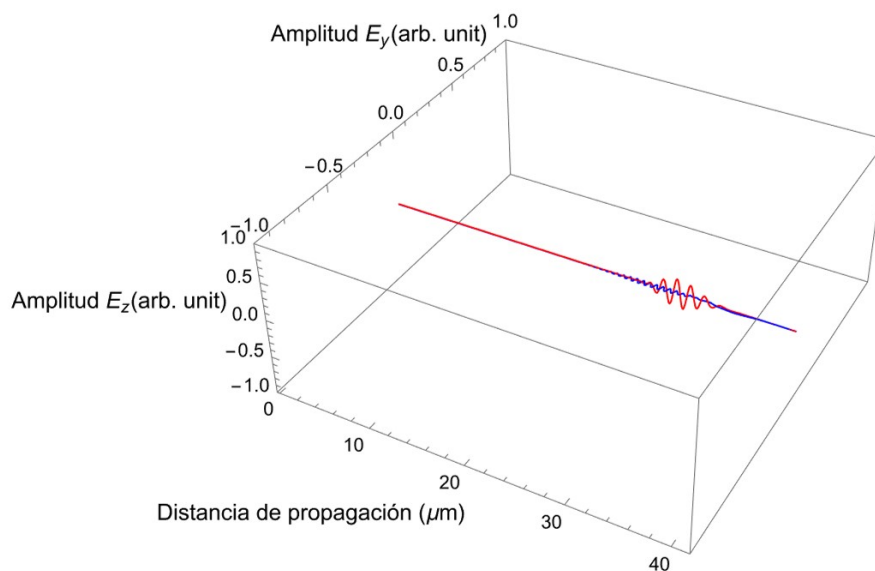


Figura 4.5: Pulsos transmitido y generado en el medio birrefringente en la condición de ajuste de fase para un instante posterior a la figura 4.4.

En la figura 4.6 realizamos la transformada de Fourier para las señales E_z y

E_y . Verificamos a través del espectro registrado que la señal generada en el eje Y corresponde al segundo armónico. Además de una señal para la frecuencia $\omega = 0 \text{ rads/fs}$, que nos indica la creación de un campo estático.

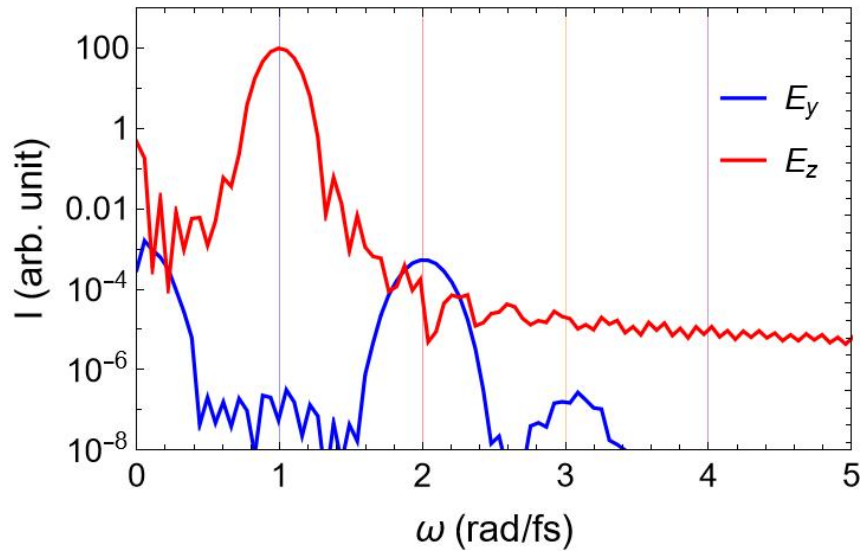


Figura 4.6: Transformada de Fourier de los campos E_z y E_y .

4.2.2. Condición de desajuste de fase

Para realizar la simulación en el caso de desajuste de fase utilizaremos los mismos parámetros que en las simulaciones de las figuras 4.2 y 4.4 salvo ε_{sy} que tendrá un valor $\varepsilon_{sy} = 14,6289$.

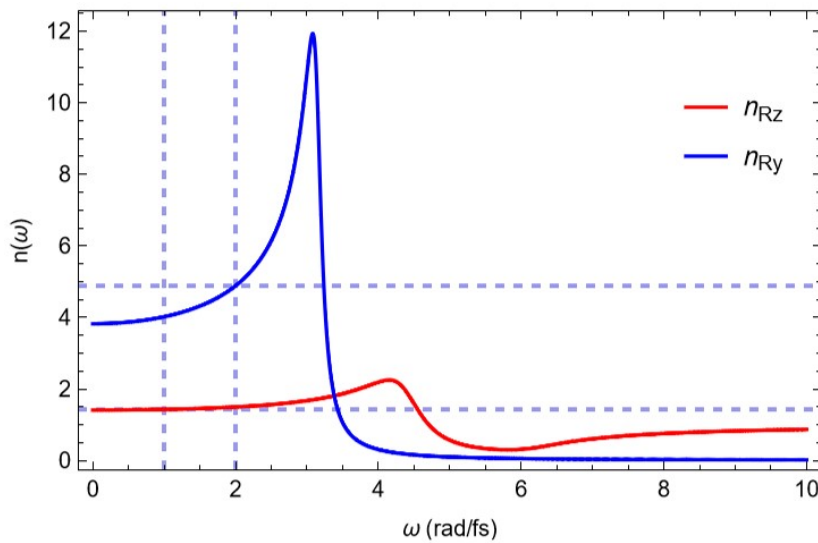


Figura 4.7: Índices de refracción en la condición de desajuste de fase.

En la figura 4.7 se aprecia que estamos lejos de la condición de ajuste de fase. La parte real del índice de refracción en Z para la frecuencia ω el valor es el mismo

que en el caso de ajuste de fase: $n_z(\omega) = 1,4329 + i \cdot 0,014$, mientras el índice de refracción en Y para 2ω es aproximadamente $n_y(2\omega) = 4,8822 + i \cdot 0,1592$.

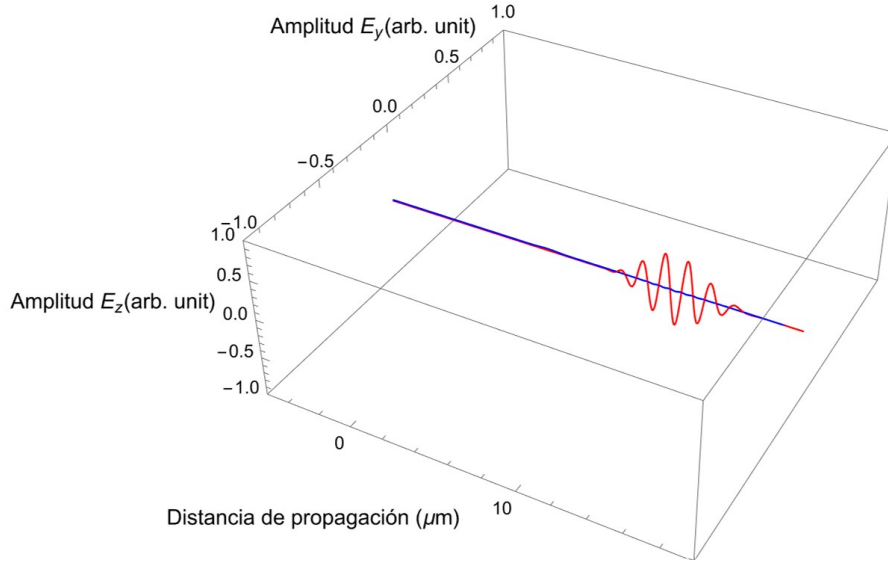


Figura 4.8: Pulsos transmitido y generado en la condición de desajuste de fase.

En la figura 4.8 comprobamos como en el caso de desajuste, la señal del campo eléctrico generado en Y tiene una intensidad muchísimo menor, prácticamente desaparece.

4.2.3. Intensidad del segundo armónico durante su propagación

Por último, estudiemos la intensidad del segundo armónico generado en el caso de ajuste y de desajuste de fase.

En la figura 4.9 vemos que en el caso de ajuste de fase la generación del segundo armónico es altamente eficiente, aumentado su valor durante la propagación. Mientras que para el caso de desajuste de fase la intensidad del segundo armónico es mucho menor, oscila y se absorbe a medida que se propaga. La intensidad del caso de desajuste de fase tiene oscilaciones periódicas en el espacio. Se corresponden con múltiplos enteros de la longitud de coherencia, $L_c = \pi/|\Delta k|$. En nuestro programa, hallamos $L_c = 0,18 \mu m$, mientras que teóricamente

$$L_c = \frac{\pi}{|\Delta k|} = \frac{\pi}{\left| \frac{2\omega}{c}(n(\omega) - n(2\omega)) \right|} = \frac{\pi}{\left| \frac{2 \cdot 1 \text{ rad/fs}}{c}(1,4329 - 4,8822) \right|} = 0,14 \mu m$$

El error relativo del resultado de nuestra simulación con respecto al valor teórico es del 29%. Este error puede tener varias causas: estamos trabajando con un pulso

muy corto no monocromático, a la dispersión del medio, o a la absorción debido a la contribución de la parte imaginaria del índice de refracción. Además, hay que tener presente que cuando la amplitud del pulso fundamental cambia ligeramente, la longitud de coherencia se ve modificada. Aun así, este cálculo nos permite realizar una estimación de la longitud de coherencia.

Analizando la intensidad del pulso de frecuencia fundamental ($\omega = 1 \text{ rad/fs}$) observamos que aunque disminuye ligeramente, prácticamente es constante, durante la propagación, tanto para el caso de ajuste como el de desajuste de fase. Por ello, podemos deducir que estamos en la situación de *undepleted pump*, donde la intensidad del pulso de frecuencia fundamental permanece constante durante la propagación. En la figura 4.9 las intensidades de la frecuencia fundamental en ambos casos aparecen solapadas y tienen una intensidad mucho mayor que las señales de segundo armónico generadas.

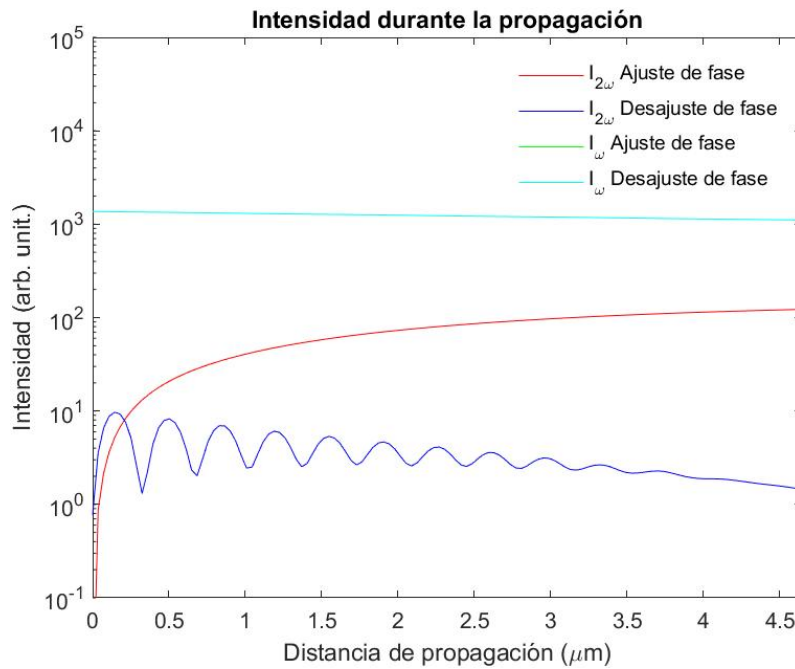


Figura 4.9: Intensidad del segundo armónico durante la propagación en las condiciones de ajuste y de desajuste de fase.

En la figura 4.10 comparamos los máximos teóricos de la señal $\text{sinc}^2(\Delta kl/2)$ con los máximos obtenidos en la figura 4.9 para el segundo armónico, en el caso de desajuste de fase. A pesar de comenzar siendo las dos posiciones muy similares, observamos como el error relativo en la longitud de coherencia se hace más notorio conforme aumenta la distancia de propagación en el interior del material, ya que se va acumulando. Al cabo de una distancia, el máximo teórico y el máximo obtenido

en nuestra simulación vuelven a ser similares y después vuelven a desajustarse.

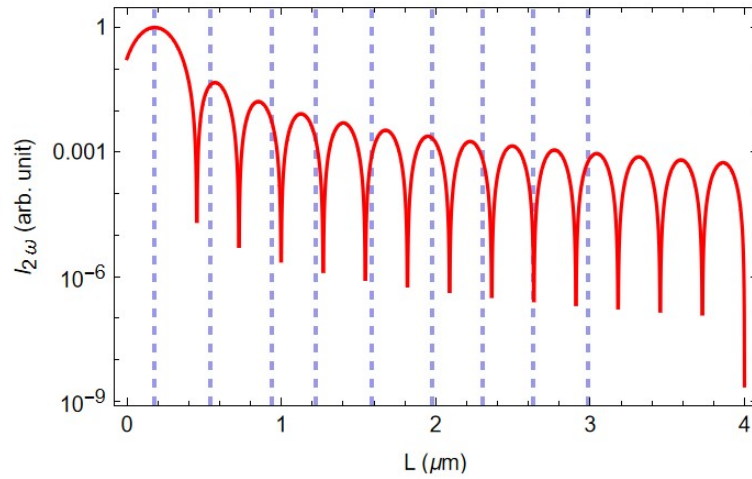


Figura 4.10: Posición de los máximos de la función $\text{sinc}^2(\Delta kl/2)$ comparados con las posiciones de los máximos obtenidos en la simulación del segundo armónico en el caso de desajuste de fase.

Las líneas azules punteadas corresponden a la posición de los máximos del segundo armónico obtenidos en la simulación de la figura 4.9 para el caso de desajuste de fase.

Capítulo 5

Conclusiones

En este trabajo hemos estudiado numéricamente la propagación de pulsos ultracortos (pocos ciclos) en medios con susceptibilidad no lineal de segundo orden, resolviendo las ecuaciones de Maxwell con la técnica FDTD.

Antes de realizar las simulaciones expuestas en este trabajo comprobamos la propagación de un campo electromagnético a través del vacío y en un medio lineal con permitividad estática y la permeabilidad del vacío. Para este modelo, únicamente necesitamos las ecuaciones de propagación del método FDTD.

El siguiente paso consistió en añadir la dispersión en el medio lineal situado a continuación del vacío. Para estudiar la dispersión se ha utilizado el modelo de Lorentz, caracterizando el comportamiento del material en función de la frecuencia. Mediante este modelo, se elabora la expresión para la polarización lineal que se implementa en el código. En estas simulaciones hemos observado como el pulso sufre chirp positivo o negativo, el cambio que experimenta la velocidad de fase con respecto a la de grupo, así como el estiramiento del pulso a medida que se propaga. Además, cuando la frecuencia del pulso láser incidente es próxima a la frecuencia de resonancia, la señal se absorbe. En este caso, comprobamos que nuestras simulaciones funcionan correctamente calculando los valores teóricos de los coeficientes de reflexión y transmisión y los comparamos con los valores de obtenidos en la simulación. Asimismo, verificamos que el cambio en la longitud de onda producido por el cambio de medio coincide con el resultado teórico.

A continuación, se ha estudiado la propagación en un medio dispersivo no lineal, introduciendo la contribución de la polarización no lineal. Estudiamos el espectro del pulso generado a través de la transformada de Fourier. Debido a la fuerte no

linealidad se generan el segundo, tercero, cuarto y quinto armónico, además de una señal a frecuencia $\omega = 0 \text{ rads/fs}$ que podría tratarse del fenómeno de la rectificación óptica, siendo este otro efecto no lineal de segundo orden.

Por último, analizamos el caso de un material dispersivo birrefringente donde se genera el segundo armónico en la condición de ajuste y desajuste de fase. Comprobamos que la intensidad y eficiencia del segundo armónico están determinadas por la longitud del material y por la condición de ajuste de fase. En el caso de *phase matching* (ajuste de fase perfecto) la intensidad del segundo armónico crece a medida que recorre una mayor distancia dentro del material no lineal. En el caso de desajuste de fase vemos como la señal de segundo armónico oscila y decrece a medida que se propaga por el interior del material. Los puntos donde la oscilación es máxima son múltiplos enteros de la longitud de coherencia.

Este trabajo permite modelar con precisión una amplia gama de materiales no lineales, lo que es particularmente importante en el área de la óptica no lineal. Para ello, el único requisito es conocer el valor de los parámetros utilizados durante las simulaciones.

Para el futuro podríamos añadir una no linealidad de orden mayor, lo cual nos permitiría estudiar la fenomenología de la generación del tercer armónico, así como la mezcla de cuatro ondas o el efecto Kerr óptico. También se podría estudiar la generación de segundo armónico en el caso del *pump depletion*.

Capítulo 6

Conclusions

In this work we have numerically studied the propagation of ultrashort pulses (few cycles) in media with second order nonlinear susceptibility, solving Maxwell's equations with the FDTD technique.

Before performing the simulations presented in this work, we checked the propagation of an electromagnetic field through the vacuum and inside a linear medium with static permittivity and vacuum permeability. For this model, we only needed the propagation equations of the FDTD method.

The next step was to add a dispersive linear medium below the vacuum. We employed the Lorentz's model to study dispersion, characterizing the response of the material as a function of frequency. Using this model, the expression for the linear polarization is elaborated and implemented in the code. In these simulations we have observed how the pulse undergoes positive or negative chirp, the change in phase velocity with respect to the group velocity, as well as the stretching of the pulse as it propagates. In addition, when the frequency of the incident laser pulse is close to the resonance frequency, the signal is absorbed. In this model, we check that our simulations work properly by the theoretical calculus of the reflection and transmission coefficients. Later, we compared them with the values obtained in the simulation. We also verified that the modification of the wavelength produced by the change of medium is pretty similar to the theoretical result.

Next, we studied the propagation in a nonlinear dispersive medium by the contribution of the nonlinear polarization equation. We studied the generated pulse's spectrum through the Fourier transform. Due to the strong nonlinearity second, third, fourth and fifth harmonics are generated, in addition to a signal at frequency

$\omega = 0$ *rads/fs* which could be the optical rectification, another second order nonlinear effect.

Finally, we analyze the case of a birefringent dispersive material, where the second harmonic is generated in the cases of phase matching and phase mismatch. We verify that the intensity and efficiency of the second harmonic are determined by the length of the material and by the phase-matching condition. In the case of phase matching the intensity of the second harmonic grows as it travels a longer distance inside the nonlinear material. In the phase mismatch case, we see how the second harmonic signal oscillates and decreases as it propagates inside the material. The points where the oscillation is maximum are integer multiples of the coherence length.

This code can model a wide range of nonlinear materials. It can be particularly important in the area of nonlinear optics. For this, the only requirement is to know the value of the parameters used during the simulations.

For the future we could add higher order nonlinearity, which would allow us to study the phenomenology of third harmonic generation, as well as four-wave mixing or the optical Kerr effect. Second harmonic generation could also be studied in the case of pump depletion.

Bibliografía

- [1] N. Casquero. Modelo FDTD para la Propagación de Pulsos Láser en Medios No Lineales. Trabajo Fin de Máster, Universidad de Salamanca, 2017.
- [2] John B Schneider. Understanding the finite-difference time-domain method. *School of electrical engineering and computer science Washington State University*, 28, 2010.
- [3] Rose M Joseph and Allen Taflove. FDTD maxwell's equations models for non-linear electrodynamics and optics. *IEEE Transactions on Antennas and Propagation*, 45(3):364–374, 1997.
- [4] Guo-Ying Yao, Qing-Lu Liu, and Zong-Yan Zhao. Studied localized surface plasmon resonance effects of Au nanoparticles on TiO₂ by FDTD simulations. *Catalysts*, 8(6):236, 2018.
- [5] Min Li, Joe Nuebel, James L Drewniak, Richard E DuBroff, Todd H Hubing, and Thomas P Van Doren. EMI from cavity modes of shielding enclosures-FDTD modeling and measurements. *IEEE Transactions on Electromagnetic Compatibility*, 42(1):29–38, 2000.
- [6] Cynthia M Furse. Application of the finite-difference time-domain method to bio-electromagnetic simulations. *Applied Computational Electromagnetics Society Newsletter*, 12(1):28–57, 1997.
- [7] Susan C Hagness, Allen Taflove, and Jack E Bridges. Two-dimensional FDTD analysis of a pulsed microwave confocal system for breast cancer detection: Fixed-focus and antenna-array sensors. *IEEE transactions on biomedical engineering*, 45(12):1470–1479, 1998.
- [8] JR Bourgeois and Glenn S Smith. A complete electromagnetic simulation of the

- separated-aperture sensor for detecting buried land mines. *IEEE Transactions on Antennas and Propagation*, 46(10):1419–1426, 1998.
- [9] Max Born and Emil Wolf. *Principles of optics: electromagnetic theory of propagation, interference and diffraction of light*. Cambridge University Press, seventh edition, 1999.
- [10] Gerrit Mur. Absorbing boundary conditions for the finite-difference approximation of the time-domain electromagnetic-field equations. *IEEE transactions on Electromagnetic Compatibility*, EMC-23(4):377–382, 1981.
- [11] Mark Fox. *Optical properties of solids*. Oxford University Press, second edition, 2010.
- [12] Robert W. Boyd. *Nonlinear Optics*. Academic Press, fourth edition, 2020.
- [13] Matteo Frigo and Steven G. Johnson. The design and implementation of FFTW3. *Proceedings of the IEEE*, 93(2):216–231, 2005. Special issue on “Program Generation, Optimization, and Platform Adaptation”.

Apéndices

Apéndice A

Código

En esta sección incluimos el código para simular un medio dispersivo no lineal birrefringente con un pulso incidente con el campo eléctrico orientado a lo largo de la dirección Z propagándose en X. Fruto del ajuste de fase por birrefringencia se genera un campo eléctrico orientado a lo largo del eje Y y un campo magnético orientado en la dirección Z, ambos perpendiculares a la dirección de propagación en X.

Este código permite generar las figuras [4.2](#), y [4.4](#).

```
#include <stdio.h>
#include <stdlib.h>
#include <math.h>

/*Número de nodos del mallado*/
#define SIZE 14000

int main()
{
    /* Impedancia del vacío en ohmios*/
    double imp0=377.0;
    double e0=8.854*pow(10.0,-12.0);
    double pi = M_PI;
    double mu0=4*pi*pow(10.0,-7);
    double c=1/sqrt(e0*mu0);

    /* Abrimos ficheros donde guardaremos los datos
    obtenidos*/
    FILE* archivoPlotNodos1;
    FILE* archivoPlotNodos2;
    FILE* archivoTF;
    FILE* archivoIntensidadSHG;

    /*Abrimos los archivos*/
    archivoPlotNodos1=fopen ("Enodos1.txt", "w"); /*
    " " para el tiempo que
    atraviesa la discontinuidad*/
    archivoPlotNodos2=fopen ("Enodos2.txt", "w"); /*
    " " para el tiempo que ha
    pasado la discontinuidad*/
    archivoTF=fopen ("datosTF.txt", "w"); /* Escribimos la
    TF para un punto barriendo todos los tiempos*/
    archivoIntensidadSHG=fopen ("datosIntensidadSHG.txt", "
    w");
```



```

/* Declaramos los arrays de los campo M (A/m), E (V/m) y D
(C/m^2)*/
double ezt3[SIZE]={0.}, hyt3[SIZE]={0.}, dzt3[SIZE
]= {0.};
double eyt3[SIZE]={0.}, hzt3[SIZE]={0.}, dyt3[SIZE
]= {0.};

int wall=3000; /*Posición de la discontinuidad*/

/* Parámetros de la fuente puntual*/
double wz=1; /* Frecuencia del pulso 10^15 rad/s*/
// double wy=1;
double tau=40; /* Periodo en el que se define el pulso
de coseno^2 en fs (10^-15 s)*/

int numTime=19000; /* Número de divisiones temporales*/
double qTime=0; /* Tiempo inicial */
double deltatime=0.006; /* Paso temporal en fs*/

double foto1,foto2;
fprintf (archivoPlotNodos1, "%g 0 0\n%d 0 0\n%d 0 0\n",
deltatime, SIZE, wall);
fprintf (archivoPlotNodos2, "%g 0 0\n%d 0 0\n%d 0 0\n",
deltatime, SIZE, wall);

int j; /* j es la variable del bucle temporal*/
int mm; /* mm es la variable que recorre los nodos de
los campo M y E*/

/* La primera fila del archivo es para definir los pará
metros de la TF en Mathematica*/
fprintf (archivoTF,"%d %f\n%f 0\n",numTime,deltatime,
wz);

/*-----TRANSMITIDA Y REFLEJADA-----*/
/* Máximos y mínimos de la transmitida y reflejada*/
double maxtransfEz=0, maxrefleEz=0;
double mintransfEz=0,minrefleEz=0;

/* Posiciones máximos y mínimos de la transmitida y
reflejada*/
int pos1transEz ,pos2transEz ,pos1refleEz ,pos2refleEz;

/* Longitud de onda en el vacío y en el dieléctrico*/
double lambda0Ez ,lambdaprimaEz;

/*--PARÁMETROS DISPERSIÓN: Campo eléctrico en z--*/
double f1z=0.7,delta1z=0.5*f1z;
double w1z=2*pi*f1z;

double esz=2, einfz=1,G1z=1;
double b1z=G1z*(esz-einfz);

double a1z,c1z,g1z;
double pzt1[SIZE]={0.}, pzt2[SIZE]={0.},pzt3[SIZE
]= {0.},dzt1[SIZE]={0.},dzt2[SIZE]={0.};

/*Fórmulas: Artl Joseph, R. M., & Taflove, A. (1997)*/

```

```

a1z=2+2*delta1z*deltatime+pow(w1z,2)*pow(deltatime,2)
    *(1+b1z); /*17.a*/
c1z=pow(w1z,2)*pow(deltatime,2)*b1z;
    /*17.b*/
g1z=-2+2*delta1z*deltatime-pow(w1z,2)*pow(deltatime,2)
    *(1+b1z); /*17.c*/

/*--PARÁMETROS DISPERSIÓN: Campo eléctrico en y--*/
double f1y=0.5,delta1y=0.2*f1y;
double w1y=2*pi*f1y;

double esy=1.62702, einfy=1,G1y=1;
double b1y=G1y*(esy-einfy);

double a1y,c1y,g1y;
double pyt1[SIZE]={0.}, pyt2[SIZE]={0.},pyt3[SIZE]
    ]={0.},dyt1[SIZE]={0.},dyt2[SIZE]={0.};

/*Fórmulas: Artl Joseph, R. M., & Taflove, A. (1997)*/
a1y=2+2*delta1y*deltatime+pow(w1y,2)*pow(deltatime,2)
    *(1+b1y); /*17.a*/
c1y=pow(w1y,2)*pow(deltatime,2)*b1y;
    /*17.b*/
g1y=-2+2*delta1y*deltatime-pow(w1y,2)*pow(deltatime,2)
    *(1+b1y); /*17.c*/

/*-----SEGUNDO ARMÓNICO-----*/
/*Peso del segundo armónico*/
double factorez=8000000;
double factorey=10000000000;

/*Declaramos los arrays de la no linealidad 2 orden*/
double pzNLt3[SIZE]={0.};
double pyNLt3[SIZE]={0.};

/*-----TRANSFORMADA DE FOURIER-----*/

int medidaTF=wall+10;
int mTF=0;
int sumamTF=20;
int mTFlimit=130;
fprintf (archivoIntensidadSHG, "%d\n%f\n%f\n%d\n%d\n%d\n",
    numTime,deltatime,wz,mTFlimit,sumamTF,medidaTF);

/*-----FDTD-----*/
//Activar este bucle en caso de querer hacer la TF
// para mTFlimit puntos del mallado con un paso de sumamTF
//for(mTF = 0; mTF<mTFlimit; mTF++){
    /*Inicializamos los campos a cero para todos los nodos
    */
    for (mm = 0; mm < SIZE; mm++){
        ezt3[mm] = 0.0;
        dzt3[mm] = 0.0;
        pzt1[mm] = 0.0;
        pzt2[mm] = 0.0;
        pzt3[mm] = 0.0;
        dzt2[mm] = 0.0;
        dzt1[mm] = 0.0;
        pzNLt3[mm] = 0.0;

```

```

//Componente perpendicular
eyt3[mm] = 0.0;
dyt3[mm] = 0.0;
pyt1[mm] = 0.0;
pyt2[mm] = 0.0;
pyt3[mm] = 0.0;
dyt2[mm] = 0.0;
dyt1[mm] = 0.0;
pyNLt3[mm] = 0.0;

}
for (mm = 0; mm < SIZE-1; mm++){
    hyt3[mm] = 0.0;
    //Componente perpendicular
    hzt3[mm] = 0.0;
}

/* Bucle temporal */
for (j = 0; j < numTime ; j++){

    /* Método LEAP-FROG*/
    /* Bucle campo M en el espacio*/
    for (mm = 0; mm < SIZE - 1; mm++){
        hyt3[mm] = hyt3[mm] + (ezt3[mm + 1] - ezt3[mm])
            / imp0;
        hzt3[mm] = hzt3[mm] + (eyt3[mm + 1] - eyt3[mm])
            / imp0;
    }

    /* Fuente en el nodo 0*/
    if(qTime<=tau){
        ezt3[0]=pow((sin((pi*qTime)/tau)),2)*cos(wz*
            qTime);
        //No programamos la fuente en y
        // eyt3[0]=pow((sin((pi*qTime)/tau)),2)*cos(wy*
            qTime);
    }
    else{
        ezt3[0]=ezt3[1]; /*Condición de contorno en la
            pared del vacío*/
        eyt3[0]=eyt3[1];
    }

    /* Bucle campo E en el espacio*/
    for (mm = 1; mm < wall; mm++){ /*Propagación vacío
        */
        dzt3[mm] = dzt3[mm] + (hyt3[mm] - hyt3[mm - 1])
            * (imp0)*e0;
        ezt3[mm] = dzt3[mm]/e0;

        dyt3[mm] = dyt3[mm] + (hzt3[mm] - hzt3[mm - 1])
            * (imp0)*e0;
        eyt3[mm] = dyt3[mm]/e0;
    }

    /*Propagación dieléctrico sin pérdidas */
    for (mm > wall; mm < SIZE ; mm++){
        pzt1[mm]=pzt2[mm];
    }
}

```

```

    pzt2[mm]=pzt3[mm];

    dzt1[mm]=dzt2[mm];
    dzt2[mm]=dzt3[mm];
    dzt3[mm] = dzt3[mm] + (hyt3[mm] - hyt3[mm - 1])
        * (imp0)*e0;

    /*Fórmulas: Artl Joseph, R. M., & Taflove, A.
    (1997)*/
    pzt3[mm]=(4*pzt2[mm]+g1z*pzt1[mm]+c1z*(dzt3[mm
    ]+dzt1[mm]))/a1z; /*16.a*/
    pzNLt3[mm]=factorez*((pzt3[mm]+pyt2[mm])/2)*((
    pzt3[mm]+pyt2[mm])/2);
    ezt3[mm] = (dzt3[mm]-(pzt3[mm]+pzNLt3[mm]))/(e0
    *einfz);

    //Componente perpendicular
    pyt1[mm]=pyt2[mm];
    pyt2[mm]=pyt3[mm];

    dyt1[mm]=dyt2[mm];
    dyt2[mm]=dyt3[mm];
    dyt3[mm] = dyt3[mm] + (hzt3[mm] - hzt3[mm - 1])
        * (imp0)*e0;

    pyt3[mm]=(4*pyt2[mm]+g1y*pyt1[mm]+c1y*(dyt3[mm
    ]+dyt1[mm]))/a1y;
    pyNLt3[mm]=factorey*((pyt3[mm]+pzt2[mm])/2)*((
    pyt3[mm]+pzt2[mm])/2);
    eyt3[mm] = (dyt3[mm]-(pyt3[mm]+pyNLt3[mm]))/(e0
    *einfy);

    //printf ("%d %g %g\n",mm, ezt3[mm], eyt3[mm]);
}

fprintf (archivoTF, "%f %f\n", eyt3[medidaTF], ezt3[
medidaTF]);
fprintf (archivoIntensidadSHG, "%f\n", eyt3[medidaTF
]);

for (mm = 0; mm < SIZE; mm++){
    /*Guardamos todos los valores de ez para un
    determinado tiempo*/
    foto1=28;
    if ((qTime>foto1-deltatime/2) & (qTime<foto1+
    deltatime/2)){
        fprintf (archivoPlotNodos1, "%d %g %g\n",mm
        ,eyt3[mm], ezt3[mm]);
    }
    foto2=100;
    if ((qTime>foto2-deltatime/2) & (qTime<foto2+
    deltatime/2)){
        fprintf (archivoPlotNodos2, "%d %g %g\n",mm
        ,eyt3[mm], ezt3[mm]);
    }

    /*Condiciones para obtener el valor y la posición
    de los máximo y mínimo transmitida y reflejada*/
    if((mm>wall) & (maxtransfEz<ezt3[mm])){
        maxtransfEz=ezt3[mm];
    }
}

```

```

        pos1transEz=mm;
    }
    if((mm>wall) & (mintransfEz>ezt3[mm])){
        mintransfEz=ezt3[mm];
        pos2transEz=mm;
    }
    if((mm<wall) & (maxrefleEz<ezt3[mm])){
        maxrefleEz=ezt3[mm];
        pos1refleEz=mm;
    }
    if((mm<wall) & (minrefleEz>ezt3[mm])){
        minrefleEz=ezt3[mm];
        pos2refleEz=mm;
    }
    }
    }
    /*Paso temporal*/
    qTime=qTime+deltatime;
}
//medidaTF=medidaTF+sumamTF;
//qTime=0;
//}

printf("Simulacion terminada para el tiempo: %g\n",
    qTime);
printf("Max y min de la transmitida: %g y %g\n",
    maxtransfEz, mintransfEz);
printf("Max y min de la reflejada: %g y %g\n",
    maxrefleEz, minrefleEz);

/*La longitud de onda en el vacio será el doble de la
    distancia entre el mínimo y el máximo absolutos de
    la reflejada en nm*/
lambda0Ez=abs((pos1refleEz-pos2refleEz)*2);
lambdaprimaEz=abs((pos1transEz-pos2transEz)*2);
printf("Longitud de onda en el vacio: %g\ny en el otro
    medio: %g\n", lambda0Ez, lambdaprimaEz);
printf ( "Coeficientes dispersion en z: %g %g %g \n\n",
    a1z,c1z,g1z);
printf ( "Coeficientes dispersion en y: %g %g %g \n\n",
    a1y,c1y,g1y);

/* Cerramos los archivos cuando termina el bucle
    temporal*/
fclose(archivoPlotNodos1);
fclose(archivoPlotNodos2);
fclose(archivoTF);

return 0;
}

```