

Título em Português: Estudo das Propriedades Ópticas de Estruturas Plasmônicas Usando Simulação Numérica

Título em Inglês: Study of the Optical Properties of Plasmonic Structures Using Numerical Simulation

Autor: Gabriel Lima Alves

Instituição: Universidade de São Paulo

Unidade: Instituto de Física de São Carlos

Orientador: Euclides Marega Junior

Área de Pesquisa /
SubÁrea: Física da Matéria Condensada

Agência Financiadora: CNPq - PIBIC

Estudo das Propriedades Ópticas de Estruturas Plasmônicas Usando Simulação Numérica

Gabriel Lima Alves

Euclydes Marega Junior

IFSC/USP

gabriel.limaalvs@usp.br

Objetivos

O objetivo deste projeto é realizar uma investigação das características ópticas de grades plasmônicas. Essas grades são formadas por uma repetição ordenada de nanoestruturas metálicas, organizadas em padrões periódicos. A pesquisa foi realizada através de simulações numéricas, utilizando o método FDTD pelo software MEEP. Com essas simulações, obteve-se propriedades como o espectro de transmissão óptica extraordinária, o espectro de reflectância, além do mapeamento do perfil do campo evanescente na interface entre o metal e o dielétrico. Por fim, o projeto também visa avaliar os resultados obtidos com o MEEP.

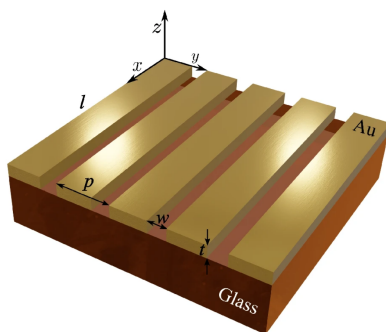


Figura 1: Simulacro 3D de uma grade plasmônica similar à utilizada neste relatório (3).

Métodos e Procedimentos

Neste projeto, foi empregada a ferramenta MEEP (MIT Electromagnetic Equation

Propagation) para realizar simulações numéricas. O MEEP é um software de código aberto desenvolvido para modelar campos eletromagnéticos em materiais, sendo amplamente utilizado para resolver as equações de Maxwell em diferentes contextos. Seu uso é particularmente relevante em áreas como nanofotônica e plasmônica. A metodologia do MEEP se baseia no método das diferenças finitas no domínio do tempo (FDTD).

Nesse método, o espaço e o tempo são discretizados em uma grade regular, e os campos elétricos e magnéticos são atualizados iterativamente a cada passo temporal, levando em conta suas interações locais, o que permite a propagação da solução ao longo do tempo. O FDTD possibilita a simulação da interação de ondas eletromagnéticas com diversos materiais com geometrias complexas.

Resultados

Foram realizadas simulações para medir a transmitância e reflectância de cinco grades bastante similares, diferindo unicamente por suas periodicidades de 300 nm, 400 nm, 500 nm, 700 nm e 900 nm. A análise dos dados mostrou que os resultados obtidos com o MEEP são bastante próximos dos gerados por outro software comercial, o Lumerical, já utilizado pelo grupo. Observou-se que os resultados obtidos com o MEEP são similares

do LUMERICAL com variações que ajustes nos parâmetros da simulação.

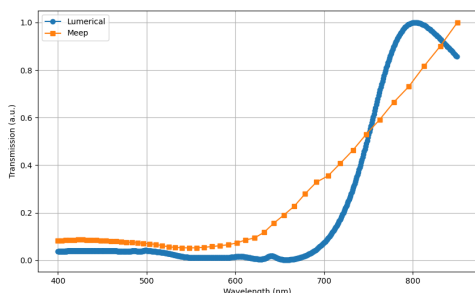


Figura 2: Transmitância medida: Lumerical e MEEP (periodicidade 500nm). Fonte: elaborada pelo autor

Posteriormente, a grade com periodicidade de 500 nm foi selecionada para novas simulações, nas quais dois diferentes parâmetros, o número de pontos por frequência e a resolução, foram sucessivamente ajustados no MEEP. Os resultados indicaram que a resolução tem impacto direto na forma da curva de resposta, conforme o esperado, enquanto o número de pontos por frequência influi principalmente na suavização das curvas.

Por fim, foi realizada a análise do perfil do módulo do campo evanescente (V^2/m^2) na interface entre o metal e o dielétrico, utilizando os parâmetros de simulação otimizados com base nas etapas anteriores.

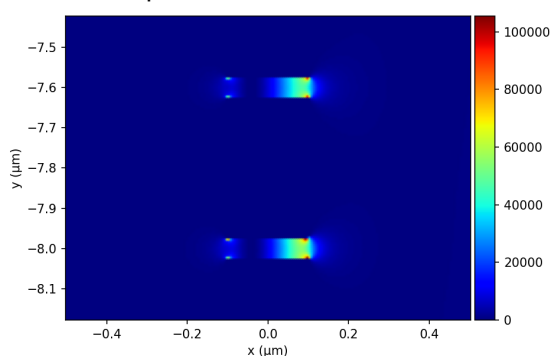


Figura 3: Perfil do campo evanescente em (V^2/m^2). Fonte: elaborada pelo autor

Na simulação apresentada, pode-se observar a formação de plasmons nas extremidades das fendas, conforme era esperado.

Conclusões

Concluímos que o MEEP, assim como em outros simuladores, estes apresentam um aumento significativo no tempo de execução das simulações à medida que se aumenta a resolução na discretização da malha. Esse problema pode ser atenuado por meio da utilização de programação paralela, recomendada para trabalhos futuros. Além disso, por ser um software baseado em Python, o MEEP oferece uma interface menos intuitiva em comparação com outros programas comerciais de simulação.

Apesar dessas limitações, o MEEP demonstra grande potencial, podendo competir com ferramentas comerciais. Sua maior vantagem é o fato de ser desenvolvido em Python, o que facilita a integração com outros pacotes e softwares na mesma linguagem. Isso possibilita a criação de um ambiente de simulação completo, que combina o MEEP com ferramentas adicionais para simulações, tratamento de dados e até métodos computacionais avançados, como redes neurais.

Agradecimentos

Bolsa CNPq: código 2023-5879

Referências

- (1) MEEP Development Team. MEEP Documentation. <https://meep.readthedocs.io/en/master/>. Acessado: 2024-08-12.
- (2) Learn Electrical Engineering. Computational EM. <https://www.learn-electrical-engineering.com/computational-em/computational-em.php>. Acessado: 2024-08-12.
- (3) C., G. L. et al. Demonstração de interferência quântica múltipla e realização de ressonância de fano em campo distante nanoestrutura plasmônica em vidro telurito dopado com er^{3+} . Scientific Reports, v. 12, 2022.

Study of the Optical Properties of Plasmonic Structures Using Numerical Simulation

Gabriel Lima Alves

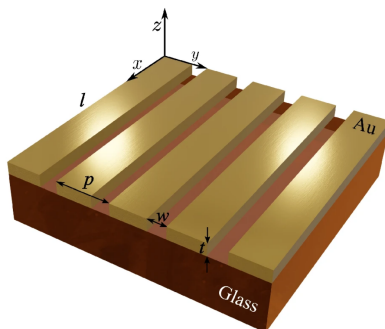
Euclides Marega Junior

IFSC/USP

gabriel.limaalvs@usp.br

Objectives

The objective of this project is to investigate the optical characteristics of plasmonic gratings. These gratings are formed by an ordered repetition of metallic nanostructures, organized in periodic patterns. The research was conducted through numerical simulations using the FDTD method in the MEEP software. These simulations provided properties such as the extraordinary optical transmission spectrum, the reflectance spectrum, and the mapping of the evanescent field profile at the metal-dielectric interface. Finally, the project also aims to evaluate the results obtained with MEEP.



Picture 1: 3D Simulacrum of a plasmonic grating similar to the one used in this report (3).

Materials and Methods

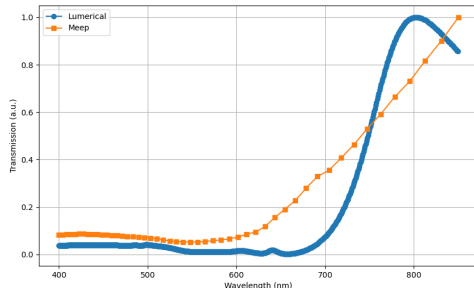
In this project, the MEEP (MIT Electromagnetic Equation Propagation) tool was employed to perform numerical simulations. MEEP is an open-source software developed to model

electromagnetic fields in materials and is widely used to solve Maxwell's equations in different contexts. Its use is particularly relevant in areas such as nanophotonics and plasmonics.

MEEP's methodology is based on the finite-difference time-domain (FDTD) method. In this method, space and time are discretized on a regular grid, and the electric and magnetic fields are updated iteratively at each time step, taking into account their local interactions, which allows the solution to propagate over time. FDTD enables the simulation of the interaction of electromagnetic waves with various materials and complex geometries.

Results

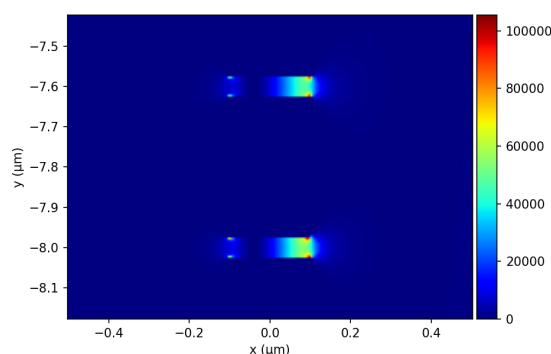
Simulations were performed to measure the transmittance and reflectance of five very similar gratings, differing only in their periodicities of 300 nm, 400 nm, 500 nm, 700 nm, and 900 nm. Data analysis showed that the results obtained with MEEP are quite close to those generated by another commercial software, Lumerical, which is already used by the group. It was observed that the results obtained with MEEP are similar to those from Lumerical, with variations that can be adjusted by fine-tuning the simulation parameters.



Picture 2: Measured Transmittance: Lumerical and MEEP (500 nm periodicity). Source: prepared by the author

Subsequently, the grating with a periodicity of 500 nm was selected for further simulations, in which two different parameters, the number of points per frequency and the resolution, were successively adjusted in MEEP. The results indicated that the resolution has a direct impact on the shape of the response curve, as expected, while the number of points per frequency mainly influences the smoothing of the curves.

Finally, an analysis of the evanescent field modulus profile (V^2/m^2) at the metal-dielectric interface was performed using the simulation parameters optimized based on the previous steps.



Picture 3: Evanescent field profile in (V^2/m^2). Source: prepared by the author

In the presented simulation, the formation of plasmons at the edges of the slits can be observed, as expected.

Conclusions

We conclude that MEEP, like other simulators, shows a significant increase in simulation execution time as the resolution in mesh discretization is increased. This issue can be mitigated by using parallel programming, which is recommended for future work. Additionally, as MEEP is a Python-based software, it offers a less intuitive interface compared to other commercial simulation programs.

Despite these limitations, MEEP demonstrates great potential and can compete with commercial tools. Its major advantage is being developed in Python, which facilitates integration with other packages and software in the same language. This enables the creation of a comprehensive simulation environment that combines MEEP with additional tools for simulations, data processing, and even advanced computational methods such as neural networks.

Acknowledgements

CNPq Scholarship: code 2023-5879

References

- (1) MEEP Development Team. MEEP Documentation. <https://meep.readthedocs.io/en/master/>. Acessado: 2024-08-12.
- (2) Learn Electrical Engineering. Computational EM. <https://www.learn-electrical-engineering.com/computational-em/computational-em.php>. Acessado: 2024-08-12.
- (3) LOZANO C, G. et al. Demonstration of multiple quantum interference and Fano resonance realization in far-field from plasmonic nanostructure in Er³⁺-doped tellurite glass. Scientific Reports, v. 12, n. 1, p. 5015, 2022.