



TESE DE DOUTORADO PARA O
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA
ELÉTRICA DA UFBA



PROJETO E ANÁLISE DE ESTRUTURAS PLASMÔNICAS E METAMATERIAIS

DAVI FRANCO RÉGO

Autor

VITALY FÉLIX RODRIGUEZ ESQUERRE

Orientador

SALVADOR

2019

TESE DE DOUTORADO PARA O
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA
ELÉTRICA DA UFBA

**PROJETO E ANÁLISE DE ESTRUTURAS PLASMÔNICAS
E METAMATERIAIS**

Autor: Davi Franco Rêgo
Orientador: Prof. Dr. Vitaly Félix Rodríguez Esquerre

Tese de doutorado elaborada por Davi Franco Rêgo, como parte das exigências para conclusão do curso de pós-graduação stricto-senso em Engenharia Elétrica da Universidade Federal da Bahia, sob a orientação do professor Dr. Vitaly Félix Rodríguez Esquerre.

SALVADOR

2019

Ficha catalográfica elaborada pelo Sistema Universitário de Bibliotecas (SIBI/UFBA),
com os dados fornecidos pelo(a) autor(a).

Franco Rêgo, Davi
PROJETO E ANÁLISE DE ESTRUTURAS PLASMÔNICAS E
METAMATERIAIS / Davi Franco Rêgo. -- Salvador, 2019.
109 f. : il

Orientador: Vitaly Félix Rodríguez-Esquerre.
Tese (Doutorado - Programa de Pós-Graduação em
Engenharia Elétrica) -- Universidade Federal da
Bahia, Politécnica, 2019.

1. Dispositivos plasmônicos. 2. Algoritmo Genético.
3. Filtros Ópticos. 4. Nanofabricação. I. Félix
Rodríguez-Esquerre, Vitaly. II. Título.

Davi Franco Rêgo

"Projeto e Análise de Estruturas Plasmônicas e Metamateriais"

Tese apresentada à Universidade Federal da Bahia, como parte das exigências do Programa de Pós-Graduação em Engenharia Elétrica, para a obtenção do título de Doutor.

APROVADA em: 06 de Dezembro de 2019.

BANCA EXAMINADORA



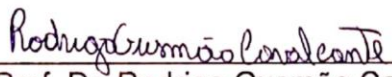
Prof. Dr. Vitaly Felix Rodriguez Esquerre
Orientador/UFBA



Prof. Dr. Giliard Nardel Malheiros Silveira
UNESP



Prof. Dr. Cosme Eustaquio Rubio Mercedes
UEMS



Prof. Dr. Rodrigo Gusmão Cavalcante
IFBA



Prof. Dr. Karcus Day Rosario Assis
UFBA

AGRADECIMENTOS

Ao longo destes anos, foram muitas as pessoas que contribuíram de forma positiva para que fosse possível alcançar os resultados necessários, os numéricos, os analíticos, os burocráticos, os emocionais ou os afetivos. Agradeço enormemente a todas e a todos que de alguma forma fizeram parte da construção deste trabalho.

Aos professores e funcionários do PPGEE e UFBA pela minha formação

Aos amigos do Departamento de Eletrotécnica do IFBA, pelo incentivo e por segurarem a barra para permitir o afastamento para o sanduiche.

Aos amigos do Labtel, em especial Joaquim e Igor, com os quais compartilhei os louros de trabalhos em conjunto.

Aos amigos do OCP, pelas inestimáveis discussões sobre a física da luz no laboratório e sobre os vinhos fora dele.

Ao Professor Benoit, pelos experimentos e acolhida na França.

Ao Professor Vitaly, pelas infinitas ideias de novas estruturas e de memes.

Aos meus Pais, cujos exemplos segui.

Às minhas avós, que estão sempre acompanhando cada passo do neto.

À Cacá e Vitor, pelas conversas e risadas.

À Clívia, por toda compreensão, motivação, carinho e amor.

“Quando perguntados durante o desenvolvimento deste trabalho que tópico é este que nos tira tanto tempo, longe dos prazeres de uma vida normal, nós respondíamos:

- É sobre como partículas pequenas absorvem e espalham a luz.

- Deus do céu! - Seria a resposta.

- E quem é que se importa com isso?

Acontece que cientistas de variadas disciplinas, como: físicos, engenheiros eletricitas, meteorologistas, químicos, biofísicos, astrônomos, adentram neste campo. Alguns para jamais escapar.”

Trecho adaptado de Bohren e Huffman [1]

RESUMO

O desenvolvimento de superfícies de metamateriais plasmônicos tem ampliado as possibilidades de manipulação de ondas eletromagnéticas de maneira sem precedentes. Abriu-se campo de estudo para a pesquisa das aplicações possibilitadas pela revolução fundamental causada pela descoberta das propriedades dos metamateriais plasmônicos. Este trabalho apresenta superfícies absorvedoras baseadas nesta tecnologia, além de propor novos dispositivos desenvolvidos com o auxílio de buscas iterativas baseadas em algoritmos genéticos. São propostos filtros ópticos de banda larga com coeficiente de absorção próximo à unidade. Foi demonstrado um dispositivo com absorção assimétrica construído a partir da superposição de camadas de dielétricos e metais com razão de assimetria de absorção acima de 28 e razão de contraste próximo da unidade. Neste trabalho, são estudados dispositivos capazes de modificar seu comportamento espectral a partir da alteração do estado do arranjo molecular de estruturas baseadas em materiais de mudança de fase. Estes dispositivos foram projetados, simulados, fabricados e caracterizados experimentalmente. Os resultados simulados e medidos apresentaram boa concordância. O método de busca automatizada foi utilizado também para a realização do projeto de grades para acoplamento da luz de uma fibra para um guia de onda integrado de nitreto de silício, com eficiência de acoplamento de até 90%. Também através de busca automatizada, foi proposta uma grade acopladora capaz de direcionar um feixe proveniente de uma fibra para um guia à direita com eficiência de 25% em $\lambda = 1550\text{nm}$ e para um guia à esquerda com eficiência de 27% em $\lambda = 2000\text{nm}$.

ABSTRACT

The development of plasmonic metamaterials surfaces has expanded the possibilities of manipulating electromagnetic waves in an unprecedented way. A new field of study was opened for the research of applications and it has been possible by the fundamental revolution caused by the discovery of the properties of plasmonic metamaterials. This work presents absorptive surfaces based on this technology, in addition to the proposing of new devices developed with the aid of iterative searches based on genetic algorithms. Optical broadband filters with absorption coefficient near the unit are proposed. A device with asymmetric absorption was demonstrated, built from the superposition of layers of dielectrics and metals with an absorption asymmetry ratio above 28 and a contrast ratio close to the unit. In this work, devices capable of modifying their spectral behavior from controlling the state of the molecular arrangement of structures based on phase change materials are proposed. These devices were designed, simulated, manufactured and characterized experimentally and the simulated and experimental results showed a good agreement. The automated search method was also used in the design of a coupling grating for an integrated waveguide of silicon nitride, with coupling efficiency of up to 90%. We also proposed a demultiplexing coupling grating capable of directing a beam from a fiber to two different waveguides with an efficiency of 25% at $\lambda = 1550\text{nm}$ and 27% efficiency at $\lambda = 2000\text{nm}$.

SUMÁRIO

1	Introdução.....	1
1.1	A organização deste trabalho	1
1.2	Motivação	2
1.3	Contribuições	3
2	Os metamateriais e a plasmônica	4
2.1	Fundamentos da plasmônica de superfície	4
2.2	Ressonância de Plasmons de Superfície Localizada	10
2.3	Metassuperfície com absorção e reflexão assimétrica	10
3	Projeto Otimizado de metasuperfícies.....	19
3.1	Estruturas otimizadas por AG baseado em metassuperfícies	20
3.2	Metodologia do AG	20
3.3	A modelagem da estrutura.....	22
3.4	Metodologia de simulação e de busca pela estrutura de absorção multibanda	23
3.5	Busca por estruturas na faixa do visível.....	27
3.5.1	Estrutura com absorção em toda a faixa do visível.....	28
3.5.2	Estrutura com absorção tipo “passa-baixa”	28
3.5.3	Estrutura com absorção tipo “passa-alta”	29
3.5.4	Estrutura com absorção assimétrica	30
4	Absorvedor baseado em material de mudança de fase e nanopartículas de ouro	34
4.1	Procedimento para deposição das nanopartículas de ouro	39
4.2	Caracterização estrutura de mudança de fase sensível à polarização	41
4.3	Caracterização óptica da mudança de fase	48
4.4	Projeto e caracterização da segunda iteração do absorvedor plasmônico	52
4.5	Resultado do tratamento térmico sobre as metassuperfícies plasmônicas	63
5	Projeto de Grades de acoplamento	66
5.1	Grades de acoplamento.....	68
5.2	Validação do modelo de simulação	70
5.3	Projeto de grades acopladoras unidirecional auxiliado por AG	73
5.3.1	Avaliação da busca por AG	74
5.3.2	Modelo de AG com parâmetros representados por conjunto binário	76
5.3.3	Modelo com AG com parâmetros representados por números reais.....	81
5.4	Projeto de grade de acoplamento bidirecional para dois comprimentos de onda	83
6	Conclusão	86
6.1	Publicações em revista associadas ao trabalho	87
6.2	Publicações em congresso associadas ao trabalho	87
	Referências.....	89

LISTA DE FIGURAS

Figura 1. Função dielétrica normalizada de um metal, correspondente à equação (11). A partir da frequência de ressonância plasmônica (ω_p), o metal torna-se transparente à propagação de ondas EM. A região de interesse (hachurada) corresponde àquela em que existe maior interação das ondas com o material e preponderam a reflexão e absorção.	6
Figura 2. Representação de uma interface entre um dielétrico e um metal.	7
Figura 3. Diagrama de dispersão de ondas de superfície em interface metal-dielétrico. A frequência de plasma ω_{ps} e a dispersão no ar balizam a dispersão de um plasmon de superfície em seus limites máximo e mínimo, respectivamente.	9
Figura 4. Estrutura de metamaterial plasmônico proposta e seus parâmetros. A camada de metal é mostrada em vermelho, o ar é mostrado em azul e a matriz do substrato é mostrada em cinza.	11
Figura 5. Corte transversal de perfil de distribuição de campo elétrico (E_x) do plano XY na interface metal-substrato para um comprimento de onda de 599nm para (a) propagação direta e (b) propagação reversa e para comprimento de onda de 733nm para (c) propagação direta e (d) propagação reversa, respectivamente. ($R_1 = 70\text{nm}$ e $R_2 = 70\text{nm}$).	12
Figura 6. Razão de contraste do espectro de absorção para R_1 de 40, 50, 60 e 70nm utilizando a prata como metal.	13
Figura 7. Razão de contraste (CR) do espectro de absorção para R_1 de (a) 40nm, (b) 50nm, (c) 60nm e	14
Figura 8. Desvio de coaxialidade do orifício de ar na camada metálica. O deslocamento mostrado está em escala com as dimensões dos dispositivos simulados.	15
Figura 9. Razão de contraste do coeficiente de absorção para estrutura com desvio de coaxialidade na camada dielétrica. (a) Polarização E_x e (b) Polarização E_y	16
Figura 10. Estrutura de supercélula unitária simulada, composta por nove células unitárias com deslocamentos dY e dX para tornar aleatória as posições dos orifícios de ar.	16
Figura 11. Razão de contraste do coeficiente de absorção para 10 diferentes supercélulas e o erro médio quadrático (EMQ) entre elas. O EMQ se manteve abaixo de 0,02. Os desvios aleatórios da posição dos furos das supercélulas nas direções X e Y foram gerados a partir de uma distribuição normal com média na posição ideal e desvio padrão $\sigma = 10\text{nm}$	17
Figura 12. Razão de contraste do coeficiente de absorção para 10 diferentes supercélulas e o erro médio quadrático (EMQ) entre elas. O EMQ se manteve abaixo de 0,09. Os desvios aleatórios da posição dos furos das supercélulas nas direções X e Y foram gerados a partir de uma distribuição normal com média na posição ideal e desvio padrão $\sigma = 20\text{nm}$	18
Figura 13. Diagrama de blocos (a) da metodologia e interação entre softwares e (b) do AG.	21
Figura 14. Estrutura base utilizada para evolução com AG.	22
Figura 15. Espectros de absorção com picos em 1530nm e 2940nm obtido pela estrutura proposta na literatura a partir do método (vermelho) e simulado [29]. O metal utilizado foi a prata e os parâmetros foram $P=1100\text{nm}$, $w_1=200\text{nm}$, $h_1=300\text{nm}$, $w_2=50\text{nm}$ e $h_2=350$	24
Figura 16. (a) Espectro de absorção (b) com evolução da aptidão avaliado para 150 gerações. (c) estrutura para absorção com picos em 1530nm e 2940nm para a faixa de 1000 a 4000nm. O coeficiente de absorção simulado é exibido em azul e a curva ideal é exibida em vermelho. Os perfis de distribuição (d) do campo magnético e (e) do campo elétrico indicam a presença de ressonância nas cavidades da estrutura no pico de absorção em 2940nm.	25
Figura 17. Resultados obtidos para otimização parcial com 89 gerações. Apesar da menor aptidão obtida, a estrutura apresenta maior pico de absorção para a frequência de interesse	

de 2940nm com relação à estrutura original. (a) Espectro de absorção da estrutura com distribuição e (b) com evolução da aptidão avaliada até a geração 89. O coeficiente de absorção simulado é exibido em azul e a curva ideal é exibida em vermelho. Os perfis de distribuição (d) do campo magnético e (e) do campo elétrico indicam a presença de ressonância nas cavidades da estrutura no pico de absorção em 2940nm.	25
Figura 18. Resultados obtidos para otimização utilizando (a) curva ideal com pico unitário em 1540nm e em 2920nm. A estrutura proposta (c) demonstra pico de absorção de 67,9% em 2898nm e aptidão de 79.84%. A curva (b) mostra que houve evolução significativa até a geração 47.	27
Figura 19. (a) Espectro de absorção da (c) melhor estrutura para absorção em banda larga na faixa de 300 a 700nm obtida pela busca por AG (b) com evolução da aptidão avaliada para 150 gerações. O coeficiente de absorção simulado é exibido em azul e a absorção objetivo é exibida em vermelho. Os perfis de distribuição do campo magnético para (d) o modo TM e para (e) o modo TE indicam a presença de ressonância nas cavidades da estrutura.	28
Figura 20. (a) Espectro de absorção da (c) melhor estrutura para filtragem passa baixa com comprimento de onda de corte em 470nm obtida pela busca por AG (b) com evolução da aptidão avaliada para 150 gerações. O coeficiente de absorção simulado é exibido em azul e a absorção objetivo é exibida em vermelho. Os perfis de distribuição do campo magnético para (d) o modo TM e para (e) o modo TE indicam a presença de ressonância nas cavidades da estrutura.	29
Figura 21. (a) Espectro de absorção da (c) melhor estrutura para filtragem passa alta com comprimento de onda de corte em 470nm obtida pela busca por AG (b) com evolução da aptidão avaliada para 150 gerações. O coeficiente de absorção simulado é exibido em azul e a absorção objetivo é exibida em vermelho.	30
Figura 22. Esquemático de uma seção de arbitrária de uma estrutura. A modelagem da estrutura permitiu 2 parâmetros configuráveis, a altura da camada dielétrica (f_i) e o material dielétrico utilizado (d_i) para cada um dos “n” segmentos da estrutura.	31
Figura 23. Resultados da melhor rodada de busca do AG para $n = 5$. O espectro de absorção para baixo, para cima, o contraste de assimetria e a assimetria ideal são mostrados em (a) respectivamente em azul, laranja, amarelo e roxo. A evolução da aptidão para esta rodada é apresentada em (b), que aponta claramente para convergência a partir da geração 25. A distribuição dos materiais utilizados em (c) tem ar, prata e sílica em amarelo azul e vermelho respectivamente. A distribuição do campo elétrico normalizado com direção para baixo (d), onde indica concentração de campo nas interfaces sílica-prata, enquanto na direção para cima (e) prevalece a reflexão.	32
Figura 24. Resultados da melhor rodada de busca do AG para $n = 10$. O espectro de absorção para baixo, para cima, o contraste de assimetria e a assimetria ideal são mostrados em (a) respectivamente em azul, laranja, amarelo e roxo. A evolução da aptidão para esta rodada é apresentada em (b), que aponta claramente para convergência perto da geração 45. A distribuição dos materiais utilizados em (c) tem ar, prata e sílica em amarelo azul e vermelho respectivamente. A distribuição do campo elétrico normalizado com direção para baixo (d), onde indica concentração de campo nas interfaces sílica-prata, enquanto na direção para cima (e) prevalece a reflexão.	33
Figura 25. Arquitetura de um laser pulsado de cavidade a fibra dopada com érbio.	34
Figura 26. Representação da distribuição dos materiais e parâmetros de projeto da estrutura plasmônica.	36
Figura 27. Espectro de reflexão para o modo TM simulado.	37
Figura 28. Distribuição espacial do campo magnético das estruturas simuladas nos pontos de LSPR.	38
Figura 29. Fluxograma do processo de fabricação das metassuperfícies.	40

Figura 30. Estruturas fabricadas da primeira iteração. As letras que indicam os dispositivos e outras marcações auxiliam na localização das estruturas na amostra.	41
Figura 31. Setup experimental para acoplamento espaço livre – fibra do Laser de Supercontinuum Fianium. Por ser um laser de espaço livre (cabo prateado), foi necessário utilizar um acoplador colimador para a fibra monomodo.	42
Figura 32. Setup experimental para microposicionamento dos guias de entrada e saída sobre as estruturas plasmônicas. O posicionamento da fibra de entrada é realizado por um estágio mecânico e piezoelétrico e a fibra de saída é posicionada por um estágio puramente mecânico. O posicionamento da amostra é realizado por três estágios controlados por motores de passo.....	43
Figura 33. Detalhe da mesa de microposicionamento contendo a amostra com as estruturas, fibras de entrada e saída do feixe óptico. O feixe gerado pelo laser de supercontinuum também possui componentes na faixa do visível.....	43
Figura 34. Estruturas plasmônicas e indicação das regiões onde foram medidas as referências utilizadas para normalização. A ponta da fibra óptica de entrada e sua reflexão também pode ser observadas na imagem.....	44
Figura 35. Espectro de reflexão obtido nas referências em torno das estruturas plasmônicas.	45
Figura 36. Espectro de reflexão medido obtido a partir do setup com laser supercontinuum para as estruturas A, B, C e D, com orientação vertical e horizontal.....	46
Figura 37. Detalhe do espectro de reflexão da estrutura A na vertical.	47
Figura 38. Comparação entre os resultados experimentais e numéricos para a estrutura A.	47
Figura 39. Cristalização e Amorfização de uma camada GeTe em função da temperatura.	48
Figura 40. Índices real e imaginário para GeTe em estado amorfo e em estado cristalino..	49
Figura 41. Regiões expostas à tratamento para ensaio de cristalização. As regiões em vermelho contêm apenas o substrato, sem qualquer estrutura de ouro.	50
Figura 42. Espectro reflexão das regiões do substrato depois de submetidas à feixe luminoso com diferentes potências.	50
Figura 43. Estrutura “D” após tratamento com 50mW. É notável a modificação da coloração percebida na luz branca, que caracteriza a destruição das geometrias nanométricas de ouro.	51
Figura 44. Espectro reflexão da estrutura “D” no estado amorfo e depois da cristalização à 10mW.	52
Figura 45. (a) Modelo tridimensional genérico da célula unitária simulada. (b) Modelo da amostra contendo nove estruturas com diâmetros diferentes: $W_A = 100\text{nm}$, $W_B = 110\text{nm}$, $W_C = 120\text{nm}$, $W_D = 130\text{nm}$, $W_E = 140\text{nm}$, $W_F = 150\text{nm}$, $W_G = 160\text{nm}$, $W_H = 180\text{nm}$ e $W_I = 200\text{nm}$	53
Figura 46. Espectros da reflectância simulado utilizando GeTe no estado amorfo.	54
Figura 47. Espectros da reflectância simulado utilizando GeTe no estado cristalino.	55
Figura 48. Espectro de reflectância para $W = 180\text{nm}$ com distribuição espacial do campo magnético.....	56
Figura 49. Sinais de referência para estruturas com camada GeTe em estado amorfo.	58
Figura 50. Sinais de referência para estruturas com camada GeTe em estado cristalino.....	58
Figura 51. Fotografia das metassuperfícies de ouro. As pontas superiores são as fibras utilizadas no ensaio, as inferiores são as sombras das fibras refletidas. A distância entre a sombra e a fibra permite acessar a altura da fibra em relação ao plano da amostra.	60
Figura 52. Espectros de reflectância para as metassuperfícies fabricadas com diâmetros $W_A = 100\text{nm}$ e $W_B = 110\text{nm}$	60
Figura 53. Espectros de reflectância para as metassuperfícies fabricadas com diâmetros $W_C = 120\text{nm}$ e $W_D = 130\text{nm}$	61

Figura 54. Espectros de reflectância para as metassuperfícies fabricadas com diâmetros $W_E = 140\text{nm}$ e $W_F = 150\text{nm}$.	61
Figura 55. Espectros de reflectância para as metassuperfícies fabricadas com diâmetros $W_G = 160\text{nm}$ e $W_H = 180\text{nm}$.	61
Figura 56. Espectros de reflectância para as metassuperfície fabricada com diâmetro $W_I = 200\text{nm}$.	62
Figura 57. Espectros de reflexão para estado amorfo e cristalino da metassuperfície “T”, com detalhe para a dinâmica entre os dois estados em 1560nm .	63
Figura 58. Espectros de reflexão experimental pós tratamento térmico e simulado com GeTe no estado amorfo com $\Delta W_{\text{Médio}} = -6,4\text{nm}$.	64
Figura 59. Espectros de reflexão experimental pós tratamento térmico e simulado com GeTe no estado cristalino com $\Delta W_{\text{Médio}} = -13,1\text{nm}$.	65
Figura 60. Representação conceitual da grade de acoplamento, guia de onda e núcleo da fibra monomodo. A casca da fibra óptica foi omitida propositalmente para possibilitar a visualização dos outros componentes.	68
Figura 61. Diagrama de refração para uma grade genérica, com ângulos e módulos calculados a partir da equação das grades.	70
Figura 62. Modelo simulado do dispositivo acoplador.	71
Figura 63. Espectro de eficiência de acoplamento para resultado obtido na literatura, que utiliza o método EME (curva em azul) e realizado neste trabalho utilizando FEM (curva em vermelho).	71
Figura 64. Módulo do vetor de Poynting S em 900nm com detalhe da região de interesse.	72
Figura 65. Amplitude do vetor de Poynting S em 940nm com detalhe da região de interesse.	72
Figura 66. Esquemático da modelagem para avaliação da busca por AG.	74
Figura 67. Resultados numéricos para a busca paramétrica no espaço de busca limitado por h com valores de $0,4$ a $0,5$, Λ de $0,5$ a $2,5\mu\text{m}$ e f de $0,25$ a $1,0$. O melhor resultado é apresentado pela estrutura em $\Lambda = 1,1333$, $h = 0,45$ e $f = 0,33$, que demonstrou $\eta = 0,313$.	75
Figura 68. Evolução da busca por AG. Considera-se aptidão = - eficiência de acoplamento.	76
Figura 69. Esquemático da modelagem binária da região de acoplamento. As grades simuladas apresentam 169 retângulos com 180nm de largura.	77
Figura 70. Evolução das rodadas de AG.	77
Figura 71. Configuração dos materiais no dispositivo binário otimizado.	78
Figura 72. Distribuição espacial do fluxo de potência em 1550nm no dispositivo otimizado com detalhe para a região de interesse.	78
Figura 73. Espectro de eficiência de acoplamento para estrutura otimizada para maximizar 1550nm .	78
Figura 74. Projeto no GDS da estrutura otimizada.	79
Figura 75. Imagem do acoplador fabricado, obtido por meio de microscópio eletrônico de varredura.	80
Figura 76. Grade acopladora apodizada fabricada sob a mesma pastilha para efeito de comparação.	80
Figura 77. Detalhe dos defeitos indesejados nos dispositivos fabricados.	81
Figura 78. Modelo de grade de acoplamento com dupla periodicidade.	82
Figura 79. Configuração dos materiais na grade otimizada com dupla periodicidade.	82
Figura 80. Distribuição espacial do fluxo de potência em 1550nm na grade otimizada com dupla periodicidade com detalhe para a região de interesse.	82
Figura 81. Espectro de eficiência de acoplamento para estrutura otimizada para maximizar 1550nm .	83

Figura 82. Configuração dos materiais na grade otimizada com dupla periodicidade para dois comprimentos.	84
Figura 83. Distribuição espacial do fluxo de potência em 1550nm na grade otimizada com dupla periodicidade para dois comprimentos.	84
Figura 84. Distribuição espacial do fluxo de potência em 2000nm na grade otimizada com dupla periodicidade para dois comprimentos.	85
Figura 85. Espectro de eficiência de acoplamento para estrutura otimizada para maximizar 1550nm.	85

LISTA DE TABELAS

Tabela 1. Limites definidos para os valores que os genes podem assumir.	23
Tabela 2. Síntese dos resultados para a melhor estrutura com $n = 5$	32
Tabela 3. Síntese dos resultados para a melhor estrutura com $n = 10$	33
Tabela 4. Parâmetros geométricos das estruturas fabricadas da primeira iteração.....	41
Tabela 5. Dimensões dos diâmetros das metassuperfícies fabricadas.	57
Tabela 6. Comparação entre diferentes acopladores de nitreto de silício simulados	73

LISTA DE ABREVIATURAS

OCP - *Optique de Champ Proche*

LABTEL - Laboratório de Telecomunicações

ICB - *Institut Carnot de Bourgogne*

PPS - Plasmon-Polárítos de Superfície

LSPR - *Localized Surface Plasmon Resonance*

PML - *Perfectly Matched Layers*

CR - Razão de Contraste

EMQ – Erro Médio Quadrático

AG - Algoritmos Genéticos

MEF - Método dos Elementos Finitos

RCWA - *Rigorous Coupled-Wave Analysis*

WDM - *Wavelength Division Multiplexer*

CP - Controlador de Polarização

AO - Acoplador Óptico

AS - Absorvedor Saturável

PCM - *Phase Changing Material*

PMMA - Polimetil Metacrilato

PVD - *Physical Vapor Deposition*

PBS - *Polarization Beam Splitter*

CMOS - *Complementary Metal-Oxide-Semiconductor*

EME - *Eigenmode Expansion*

GDS - *Graphic Data System*

1 INTRODUÇÃO

A plasmônica e os metamateriais tem atraído considerável atenção da comunidade acadêmica na última década, principalmente devido aos impactos revolucionários que estes trazem tanto para a física fundamental quando para aplicações práticas em diferentes áreas da ciência. Nos anos recentes, ambos os campos têm se sobreposto pelo surgimento de novas técnicas de fabricação que possibilitaram a criação de metamateriais que operem em regime óptico.

Novas técnicas de fabricação possibilitam a criação de estruturas com propriedades eletromagnéticas não encontradas naturalmente, que apresentam características exóticas [2], como, por exemplo, uma onda com velocidade de fase em sentido oposto à velocidade de grupo, a partir de um, antes apenas teórico, índice de refração negativo.

A grande atenção dada aos metamateriais é justificada pela variedade de aplicações e possíveis manipulações em subcomprimento de onda de propagações eletromagnéticas na interface entre metais e dielétricos. A plasmônica, aplicada a tecnologias de comunicações e processamento de dados, apresenta características do melhor entre os dois mundos, da eletrônica e da fotônica, por propiciar estruturas nanométricas e que operam em frequências ópticas [3].

Os metamateriais são meios físicos constituídos por arranjos periódicos de células unitárias com dimensões muito menores do que o comprimento de onda para o qual foram projetados para operar. Estes apresentam propriedades eletromagnéticas excepcionais, sintonizáveis a partir da engenharia dos parâmetros geométricos das suas células unitárias, ou seja, de forma fundamentalmente diferente dos materiais naturais, cujas propriedades são derivadas das ligações químicas e componentes químicos [4]. A plasmônica aplicada aos metamateriais permite que o efeito das ressonâncias dos plasmons de superfície, que aumenta enormemente a força da interação entre os materiais de uma célula unitária, seja mais um grau de liberdade no projeto das metassuperfícies.

1.1 A organização deste trabalho

Este trabalho apresenta a fundamentação teórica dos fenômenos físicos que concernem os metamateriais e a plasmônica no capítulo 2. O capítulo 3 trata de aplicações e de dispositivos eletromagnéticos absorvedores com projeto auxiliado por busca automatizada por algoritmos genéticos. No capítulo 4, são abordadas estruturas que utilizam materiais de mudança de fase, que foram projetados, simulados, fabricados e experimentados durante o período sanduíche, no grupo de *Optique de Champ Proche* (OCP), liderado pelo professor Benoit Cluzel, na Universidade de Borgonha, campus Dijon. O capítulo 5 apresenta o projeto

de grades de acoplamento da luz entre guias de fibra óptica e guias fotônicos integrados em nitreto de silício, fruto das demandas que surgiram durante o período sanduíche.

1.2 Motivação

A crescente demanda por transporte e manipulação de informação no formato digital, intensificada na era corrente, implica na necessidade imperativa de se buscar soluções tecnológicas que supram de forma satisfatória a necessidade por banda, processamento e transmissão. A investigação de dispositivos ópticos baseados em plasmônica e em fotônica com aplicações em telecomunicações é a motivação fundamental deste trabalho.

Os desafios impostos pela miniaturização dos dispositivos microeletrônicos, os principais responsáveis pelo poder atual de processamento de dados disponível, foram superados ao longo de décadas de maneira prevista pela lei de Moore. Em sua famosa lei, em 1965, Gordon Moore previu que a quantidade de transistores em um chip dobra a cada dois anos [5].

Décadas depois de proposta, a miniaturização na microeletrônica começa a enfrentar barreiras físicas fundamentais e que, consequentemente, causou necessidade de mudança na abordagem da evolução das tecnologias baseadas em eletrônica. A dificuldade em aumentar a densidade de transistores em um chip é evidenciado na maneira em que a indústria de semicondutores lidou com o problema: suprimindo a demanda da sociedade por poder de processamento aumentando o número de núcleos de processamento em seus sistemas, buscando novos materiais e aumentando a integração das funções [6]. As dificuldades de miniaturização criam oportunidades para o desenvolvimento de outras alternativas com outros fundamentos físicos.

A fotônica aparece neste contexto com a proposta de resolver o problema da dissipação de energia e atraso de sinal em sinais eletrônicos em alta frequência a partir do transporte da informação no domínio óptico dentro dos microchips. A comunicação entre diferentes unidades de processamento é uma tarefa mais apropriada para interconexões fotônicas devido à ausência de perdas indutivas e ôhmicas, comum em interconexões eletrônicas, independente da distância, entre os componentes do sistema, e às baixas perdas associadas no processo de transmissão em frequências ópticas [7]. No entanto, a interface entre o domínio dos elétrons e o domínio dos fótons não é tarefa trivial. O descasamento entre as dimensões dos dispositivos eletrônicos, que tipicamente possuem alguns nanômetros, e os limites de difração inerentes aos meios ópticos, é um desafio intensamente investigado.

A plasmônica, que é área da ciência que trata dos fenômenos oscilatórios combinados entre elétrons e fótons, se apresenta como fundação de excepcional sinergia para realizar o casamento entre os dispositivos eletrônicos e dispositivos fotônicos. A natureza da plasmônica leva a comunidade científica a utilizá-la como peça crucial no interfaceamento entre as duas tecnologias ao propiciar dimensões menores do que os limites de difração e taxas elevadas de operação e transporte de dados [3], [8]–[10].

Os efeitos de grade observados em dispositivos nanométricos constituídos por interfaces entre metais e dielétricos são também fundamentais para aplicações em sensores ópticos. As possibilidades de aplicação em telecomunicações são notáveis em absorsores, que promovem aumento na performance de detectores e estruturas fotoelétricas [11] e [12].

1.3 Contribuições

Os dispositivos plasmônicos apresentados neste trabalho são contribuições válidas, em particular, aquelas decorrentes dos resultados obtidos por experimentação em *setup* óptico e validados por simulação numérica dos absorsores baseados em material de mudança de fase. Estes dispositivos, cujo desenvolvimento foi iniciado pela parceria entre os pesquisadores do Laboratório de Telecomunicações (LABTEL) do Programa de Pós-Graduação em Engenharia Elétrica da UFBA e dos pesquisadores do grupo OCP da Universidade de Borgonha, campus Dijon, possuem aplicações que vão desde chaveamento óptico a absorvedores saturáveis para aplicação em lasers.

Ao longo deste trabalho, o método utilizado envolveu principalmente a implementação da interação entre diferentes pacotes computacionais, com objetivos de simular a física do problema proposto, analisar resultados e propor soluções de melhor qualidade. Esta técnica é de importância inestimável ao passo que a previsão numérica do comportamento eletromagnético de estruturas complexas torna-se tarefa extenuante, custosa e possivelmente infrutífera.

Os projetos de metassuperfícies e estruturas plasmônicas propostas são frutos de extensa revisão bibliográfica, que por si, é também entendida como uma contribuição. Este texto contém, além das estruturas inéditas, validações de resultados presentes na literatura bem como comparação do desempenho de estruturas que realizam a mesma função.

Este trabalho propõe configurações de grades dielétricas baseadas em SiNx, com o objetivo de acoplar potência óptica proveniente de uma fibra para um guia integrado. Estes dispositivos encontram aplicação em lasers baseados em cavidade de fibra óptica e são elementos fundamentais para a óptica integrada.

2 OS METAMATERIAIS E A PLASMÔNICA

Os metamateriais têm sido objeto de extensivo interesse da comunidade científica por apresentar uma gama de propriedades excepcionais. O comportamento físico das estruturas baseadas em metamateriais apresenta diferença fundamental dos materiais naturais por apresentarem grande dependência com as geometrias da estrutura (com dimensões relacionadas aos comprimentos de onda para os quais são projetados). Essa característica é essencialmente diferente do comportamento dos materiais naturais, cujas propriedades dependem fundamentalmente das ligações químicas e arranjos atômicos dos elementos constituintes.

A possibilidade de controlar e moldar ondas eletromagnéticas a partir do projeto da geometria das estruturas é o que torna os metamateriais tão interessantes. A dependência do comportamento físico da estrutura com a geometria possibilita a criação de estruturas com propriedades físicas previstas pela teoria, mas não encontradas na natureza, como estruturas com índice de refração negativo [13] ou índice de refração extremamente elevado [14].

As estruturas de metamateriais são compostas por células periodicamente arranjadas que funcionam em conjunto em um comprimento de onda muitas vezes maior que as dimensões celulares. O comportamento físico predominante da estrutura é baseado no índice de refração efetivo percebido pela onda eletromagnética, que depende da geometria e composição de materiais de cada célula. A maior parte das estruturas baseadas em metamateriais apresentadas na literatura utiliza metais em sua composição, portanto os efeitos plasmônicos são de fundamental importância para a caracterização de tais estruturas, quando operando em comprimentos de onda do espectro óptico.

2.1 Fundamentos da plasmônica de superfície

A oscilação harmônica de elétrons livres, ou oscilação plasmônica, em uma superfície metálica possibilita significativa interação de ondas eletromagnéticas com a matéria. A quantização, ou o quantum, desta oscilação harmônica, recebe a denominação de plasmon. Os plasmon-polártons de superfície (PPS) são quasi-partículas decorrentes do acoplamento entre a luz e o plasmon de superfície, que se localizam na interface entre materiais, e é definido como um quantum da energia de oscilações de cargas com densidade superficial [15] e [16]. É possível desconsiderar as transições entre bandas de energia dos elétrons, de forma que a teoria que fundamenta a plasmônica pode ser baseada em eletromagnetismo clássico, não sendo necessário entrar no terreno da física quântica para explicar a propagação destes pacotes de energia.

A explicação para existência de ondas plasmônicas de superfície perpassa pela teoria do movimento da nuvem de elétrons em um metal. Para obter a resposta de um material à um campo elétrico, considera-se um campo elétrico variante no tempo:

$$\vec{E}(t) = \text{Re}[\vec{E}(\omega)\exp(-i\omega t)]. \quad (1)$$

Partindo da equação do movimento harmônico não amortecido de um elétron livre:

$$m \frac{d^2 \vec{r}}{dt^2} = -e\vec{E}, \quad (2)$$

sendo m a massa do elétron, e a carga elementar e $\vec{r}$ o vetor deslocamento, combinando-a com o momento dipolo de um elétron:

$$\vec{P}(t) = -e\vec{r}(t), \quad (3)$$

tem-se a equação do movimento:

$$m \frac{d^2 \vec{P}}{dt^2} = e^2 \vec{E}. \quad (4)$$

Considerando a dependência harmônica do momento dipolo no tempo, dada por:

$$\vec{P}(t) = \text{Re}[\vec{P}(\omega)\exp(-i\omega t)], \quad (5)$$

substituindo a equação do momento dipolo harmônico (5) na equação do movimento (4) sem qualquer força restauradora (os elétrons são livres na nuvem eletrônica) e aplicando as derivadas temporais, obtemos a relação entre a polarização do material e o campo elétrico:

$$\vec{P}(\omega) = -\frac{e^2}{m\omega^2} \vec{E}. \quad (6)$$

A partir da definição de polarização e susceptibilidade elétrica, a função dielétrica do material, portanto, pode ser obtida:

$$\vec{P}(\omega) = \epsilon_0 \chi_e(\omega) \vec{E}, \quad (7)$$

$$\chi_e(\omega) = \epsilon_r(\omega) - 1, \quad (8)$$

$$\epsilon_r(\omega) = 1 - \frac{ne^2}{\epsilon_0 m \omega^2}, \quad (9)$$

A análise feita a partir de um elétron é convertida para um conjunto de elétrons que se movem em conjunto com densidade volumétrica (n).

A frequência de plasma é definida como sendo:

$$\omega_p^2 = \frac{ne^2}{\epsilon_0 m}. \quad (10)$$

Portanto a função dielétrica para uma nuvem eletrônica não amortecida de um metal pode ser definida como:

$$\epsilon_r(\omega) = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2}. \quad (11)$$

A função dielétrica apresentada na equação (11), com as considerações que foram tomadas, é comumente conhecida como o modelo de Drude [17].

A Figura 1 mostra a curva da função dielétrica (ϵ_r) de um material metálico como o eixo da frequência normalizado pela frequência de ressonância plasmônica ω_p , definido na equação (10). A região de interesse para aplicações na plasmônica é aquela onde $\omega < \omega_p$, na qual a onda eletromagnética sofre atenuação pelo índice de refração negativo do metal, condição essencial para obtenção de PPS.

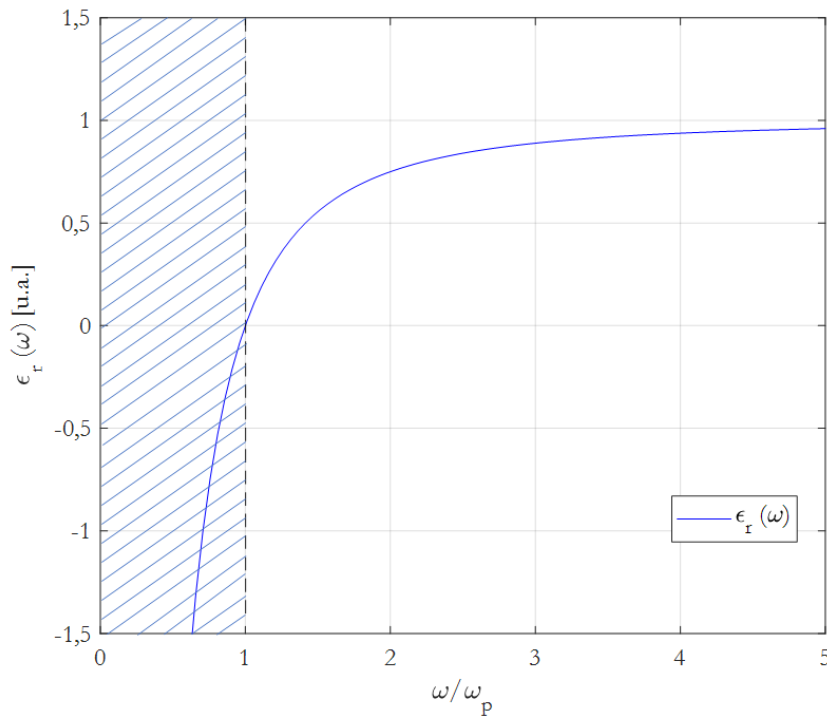


Figura 1. Função dielétrica normalizada de um metal, correspondente à equação (11). A partir da frequência de ressonância plasmônica (ω_p), o metal torna-se transparente à propagação de ondas EM. A região de interesse (hachurada) corresponde àquela em que existe maior interação das ondas com o material e preponderam a reflexão e absorção.

A partir da função dielétrica de um metal, o comportamento eletromagnético de uma interface entre um metal e um dielétrico pode ser deduzido, considerando as equações de Maxwell na forma diferencial, as relações constituintes e condições de contorno apropriadas.

As curvas de dispersão de uma nuvem eletrônica podem ser matematicamente deduzidas pela solução da equação de onda homogênea na ausência de uma fonte externa, que é obtida a partir das quatro equações fundamentais na forma diferencial e as relações constitutivas:

$$\frac{\epsilon_r}{c^2} \frac{\partial^2 \vec{E}(r, t)}{dt^2} = \nabla^2 \vec{E}(r, t). \quad (12)$$

Procurando soluções para a equação de onda na forma de uma onda plana, dada por:

$$\vec{E}(r, t) = \text{Re}[\vec{E}(r, \omega) e^{ikr - i\omega t}]. \quad (13)$$

Substituindo (13) em (12), aplicando as derivadas temporais e espaciais, e utilizando a função dielétrica do metal obtida em (11), a expressão para dispersão de plasma em uma nuvem eletrônica é então obtida:

$$\omega = \sqrt{k^2 c^2 + \omega_p^2}. \quad (14)$$

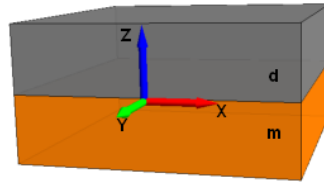


Figura 2. Representação de uma interface entre um dielétrico e um metal.

A análise do comportamento eletromagnético de uma onda que se propaga ao longo de uma interface metal-dielétrico pode ser feita considerando uma onda eletromagnética se propagando na direção X, tendo campo magnético em Y e campo elétrico em Z, ou seja, uma onda transversal magnética. Para este cenário, cuja representação geométrica é mostrada na Figura 2, são definidos os campos a seguir. Para $Z > 0$, no dielétrico, tem-se:

$$H_d = (0, H_{y,d}, 0) \exp[i(k_{x,d} X + k_{z,d} Z - \omega t)], \quad (15)$$

$$E_d = (E_{x,d}, 0, E_{z,d}) \exp[i(k_{x,d} X + k_{z,d} Z - \omega t)], \quad (16)$$

para $Z < 0$, no metal, temos:

$$H_m = (0, H_{y,m}, 0) \exp[i(k_{x,d} X + k_{z,d} Z - \omega t)], \quad (17)$$

$$E_m = (E_{x,m}, 0, E_{z,m}) \exp[i(k_{x,m} X + k_{z,m} Z - \omega t)]. \quad (18)$$

Usando os campos no material dielétrico já definidos em (15) e (16), na Lei de Ampère (19)

$$\nabla \times H = \epsilon \frac{\partial E}{\partial t}, \quad (19)$$

$$\left(\frac{\partial H_{z,d}}{\partial y} - \frac{\partial H_{y,d}}{\partial z}, \frac{\partial H_{x,d}}{\partial z} - \frac{\partial H_{z,d}}{\partial x}, \frac{\partial H_{y,d}}{\partial x} - \frac{\partial H_{x,d}}{\partial y} \right) = \epsilon (-i\omega E_{x,d}, 0, -i\omega E_{x,d}),$$

que pode ser reduzido para:

$$(ik_{z,d}H_{y,d}, 0, ik_{x,d}H_{y,d}) = \epsilon_d (-i\omega E_{x,d}, 0, -i\omega E_{x,d}). \quad (20)$$

Temos, portanto, as seguintes relações:

$$k_{z,d}H_{y,d} = -\epsilon_d \omega E_{x,d}. \quad (21)$$

E de forma análoga, se considerarmos os campos no metal, teremos:

$$k_{z,m}H_{y,m} = -\epsilon_m \omega E_{x,m}. \quad (22)$$

Como uma primeira condição de fronteira, considerando a continuidade do campo elétrico entre os materiais, temos que:

$$E_{x,m} = E_{x,d}, \quad (23)$$

portanto, dividindo (21) por (22):

$$\frac{k_{z,d}H_{y,d}}{k_{z,m}H_{y,m}} = \frac{\epsilon_d}{\epsilon_m}. \quad (24)$$

Considerando como segunda condição de fronteira a continuidade do campo magnético na interface dielétrico-metal, temos:

$$H_{y,m} = H_{y,d}. \quad (25)$$

Desta forma, podemos reduzir a expressão (24), obtendo finalmente a relação que define condição de existência de um PPS:

$$\frac{k_{z,d}}{\epsilon_d} - \frac{k_{z,m}}{\epsilon_m} = 0. \quad (26)$$

O vetor de onda $\mathbf{k}$ pode ser expresso genericamente por:

$$k_x^2 + k_y^2 + k_z^2 = k^2. \quad (27)$$

No problema em questão, temos propagação na direção X e componente evanescente na direção Z. Podemos substituir o k^2 , para qualquer uma das regiões (dielétrico ou metal) para obtermos a relação de dispersão:

$$k_x^2 + k_z^2 = \epsilon \frac{\omega^2}{c^2}. \quad (28)$$

Através de manipulação algébrica de (26) e (28) para o dielétrico e para o metal, chega-se à relação de dispersão para um PPS em uma interface entre um metal e um dielétrico:

$$k_x = \frac{\omega}{c} \sqrt{\frac{\epsilon_m \epsilon_d}{\epsilon_m + \epsilon_d}}. \quad (29)$$

A direção considerada para a propagação da onda de superfície é X, portanto, k_x é o vetor de propagação do plasmon de superfície. A dispersão desta onda é comumente analisada através do gráfico de dispersão normalizado, como mostrado na Figura 3.

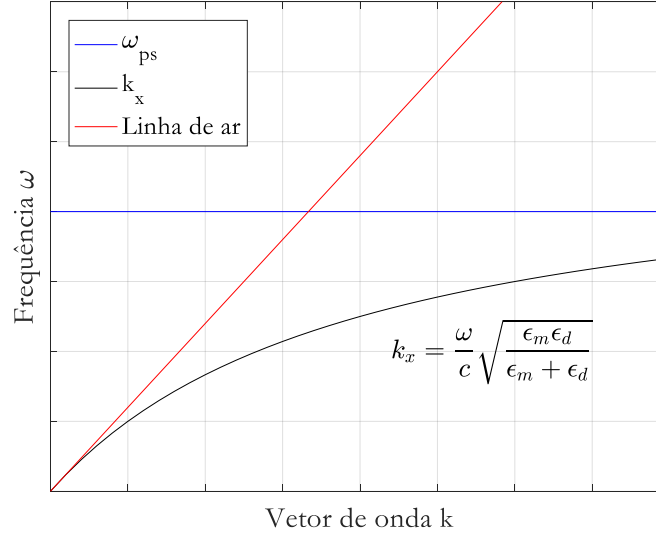


Figura 3. Diagrama de dispersão de ondas de superfície em interface metal-dielétrico. A frequência de plasma ω_{ps} e a dispersão no ar balizam a dispersão de um plasmon de superfície em seus limites máximo e mínimo, respectivamente.

A análise do diagrama de dispersão fornece valiosas informações a respeito do comportamento óptico dos PPS. Para valores de ϵ_d muito próximos de $-\epsilon_m$, o denominador da relação de dispersão torna-se próximo de zero, o vetor de onda tende ao infinito e a frequência tende à frequência de ressonância do plasmon de superfície. Um vetor de onda grande significa pequenos comprimentos de onda. Mesmo com frequências ainda no espectro óptico, é possível obter PPS com comprimentos de onda na ordem de dezenas de nanômetros. A frequência de ressonância de um PPS é aquela para a qual $\epsilon_d \cong -\epsilon_m$, $\epsilon_d + \epsilon_m < 0$ e $\epsilon_d \cdot \epsilon_m < 0$.

O confinamento da luz em um modo plasmônico em nano escala é a característica fundamental para as aplicações pretendidas da plasmônica. O intenso confinamento de um modo plasmônico permite maior interação com parâmetros externos, o que torna a plasmônica extremamente interessante para projetos de sensores. Os parâmetros externos citados também podem ser campos elétricos externos aplicados a partir de componentes eletrônicos, o que possibilita a interação entre ambos o que torna a técnica promissora para aplicações de interfaceamento entre a eletrônica e a fotônica.

2.2 Ressonância de Plasmons de Superfície Localizada

A ressonância de plasmons de superfície localizada (LSPR) é resultante do confinamento de um plasmon de superfície em uma nanopartícula metálica em interface com um dielétrico, quando sob incidência de uma onda eletromagnética com comprimento de onda específico. A LSPR pode ser entendida como a oscilação coletiva da nuvem eletrônica das nanopartículas metálicas em estado acoplado com os fótons, que dissipam energia (absorção) e reemitem de volta (espalhamento) em seu movimento oscilatório.

A LSPR é associada a perdas elevadas, sendo possível analisá-la, portanto, a partir dos seus efeitos dissipativos no domínio óptico através da resposta espectral da estrutura que a suporta, tanto pela absorção quanto pelo espalhamento provocados. A LSPR pode ser também analisada por meios numéricos através do fator de ampliação da intensidade do campo elétrico, que aumenta em algumas ordens de grandeza quando comparado ao caso não ressonante.

A ocorrência da ressonância depende, em suma, do índice de refração dos materiais, geometria da nanopartícula e comprimento de onda do feixe incidente. A dependência da LSPR com o índice de refração permite que este fenômeno seja utilizado vastamente em sensores ópticos em diferentes setores industriais, como o farmacêutico, o alimentício, o petroquímico, além de encontrar vasta aplicabilidade para estudo de novos materiais [18]–[21].

A abordagem teórica comumente utilizada para modelar nanopartículas e o fenômeno da LSPR é a teoria de Mie, que busca fazer estimativa da extinção (absorção + espalhamento) de uma onda eletromagnética provocada por obstáculo de diâmetro muito menor do que o comprimento de onda do feixe incidente [1]. A solução analítica de Mie para as equações de Maxwell fornecem as bases para a medição do tamanho de partículas a partir do espalhamento de radiação eletromagnética.

2.3 Metassuperfície com absorção e reflexão assimétrica

A propriedade não natural de absorção assimétrica da luz dependendo da direção da iluminação é um efeito que possui uma ampla gama de aplicabilidade, desde a coleta de energia térmica até dispositivos de comunicação óptica. Tais estruturas encontram aplicação em sistemas de comunicação e geração de energia limpa.

A propriedade de absorção assimétrica pode ser obtida por meio de cristais fotônicos unidimensionais utilizando materiais com perdas ópticas [22]. No entanto, tais dispositivos,

também conhecidos como grades de Bragg, têm normalmente um grande fator de forma, o que limita sua aplicabilidade.

O comportamento de absorção assimétrico alcançado por uma estrutura bicamada cristalina quadrada [23], é analisado de forma mais aprofundada nesta seção. A estrutura foi modificada de modo que os raios dos orifícios de ar na matriz de semicondutores e no metal fossem diferentes. Resultados numéricos para outras combinações de materiais também foram obtidos. O efeito das imperfeições de fabricação no desempenho do fenômeno de absorção assimétrica foi analisado para sustentar discutir as possibilidades de fabricação de tais estruturas.

O dispositivo é composto por uma estrutura com camadas de metal, ouro ou prata e matriz de substrato semiconductor, nitreto de silício, com furos de tamanhos variados. A estrutura proposta, mostrada na Figura 4, foi modelada e analisada numericamente usando o método dos elementos finitos no domínio da frequência fornecido pelo COMSOL, que calcula os parâmetros S para estruturas de duas portas. A partir dos parâmetros S , obtém-se os coeficientes de absorção. A equação (30) define como o parâmetro absorção é calculado a partir dos parâmetros S , onde S_{11} é a reflexão e S_{21} é a transmissão [24].

$$A = 1 - |S_{11}|^2 - |S_{21}|^2 \quad (30)$$

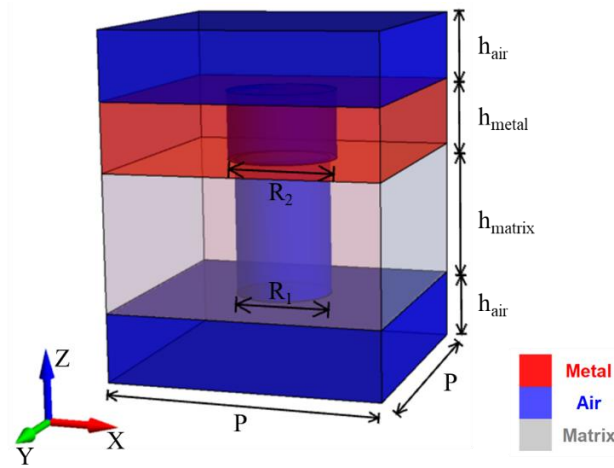


Figura 4. Estrutura de metamaterial plasmônico proposta e seus parâmetros. A camada de metal é mostrada em vermelho, o ar é mostrado em azul e a matriz do substrato é mostrada em cinza.

A estrutura foi simulada com raios (R_1 e R_2) variando de 40 a 70nm, a periodicidade (P) fixada a 350nm, camada de metal e espessuras de camada de matriz de substrato (h_{metal} e h_{matrix}), são fixadas respectivamente a 50nm e 150nm. O ar que circunda a estrutura e limita o domínio computacional teve espessura fixada (h_{air}) em 200nm.

A excitação da onda plana iluminou a estrutura na direção Z. A polarização não foi considerada uma vez que a estrutura é simétrica para qualquer dada rotação. Para simular a estrutura periódica, nos limites do domínio computacional foram configuradas condições de fronteira periódicas de Floquet, com exceção dos limites superiores e inferiores, na direção em que a onda eletromagnética se propaga. Nestes, foram utilizadas portas periódicas combinadas com camadas perfeitamente combinadas (PML), que absorvem a energia refletida incidente, de forma a tornar desprezível qualquer reflexão.

O meio pelo qual se determina o grau de assimetria de um dispositivo é calculando sua razão de contraste (CR), que é dada por:

$$CR = \frac{(A^+ - A^-)}{(A^+ + A^-)}, \quad (31)$$

onde A^+ e A^- são os coeficientes de absorção para as duas direções, incidência direta e incidência reversa, respectivamente. A direção direta é escolhida como a direção Z negativa, enquanto a direção reversa é a da onda que viaja na direção Z positiva.

Quatro raios diferentes do orifício de ar na matriz de substrato R_1 foram simulados (40nm, 50nm, 60nm e 70nm). Um CR negativo significa que a estrutura absorve mais luz quando iluminada na direção reversa. Isso acontece em todas as estruturas analisadas para um determinado comprimento de onda. A Figura 5 apresenta a distribuição espacial dos campos elétricos, nos quais os modos excitados são consideravelmente diferentes em amplitude para cada direção de propagação.

Os resultados apresentados na Figura 6 e na Figura 7 exibem o efeito de vários tamanhos de raios no CR. Para essa análise, variou-se R_2 de 40 a 70nm.

Dependendo da direção da propagação, a frente de onda interage primeiro com o metal, no caso de uma propagação direta, ou com o material do substrato, na propagação reversa, o que causa diferenças nos modos de plasmas de superfície excitados. A diferença nos modos excitados é a razão por trás da diferença entre as absorções para as duas diferentes direções de propagação.

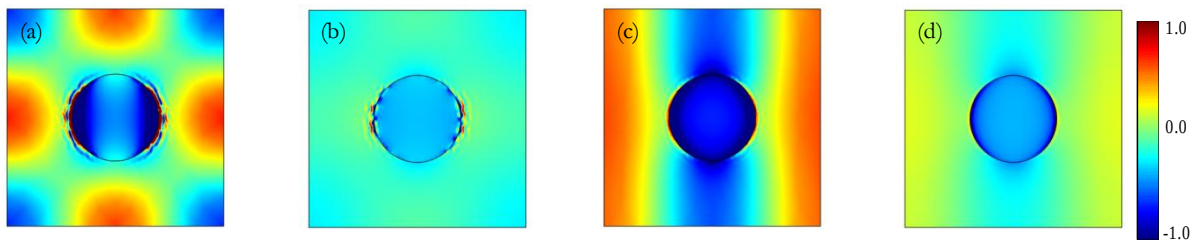


Figura 5. Corte transversal de perfil de distribuição de campo elétrico (E_x) do plano XY na interface metal-substrato para um comprimento de onda de 599nm para (a) propagação direta e (b) propagação reversa e para comprimento de onda de 733nm para (c) propagação direta e (d) propagação reversa, respectivamente. ($R_1 = 70\text{nm}$ e $R_2 = 70\text{nm}$).

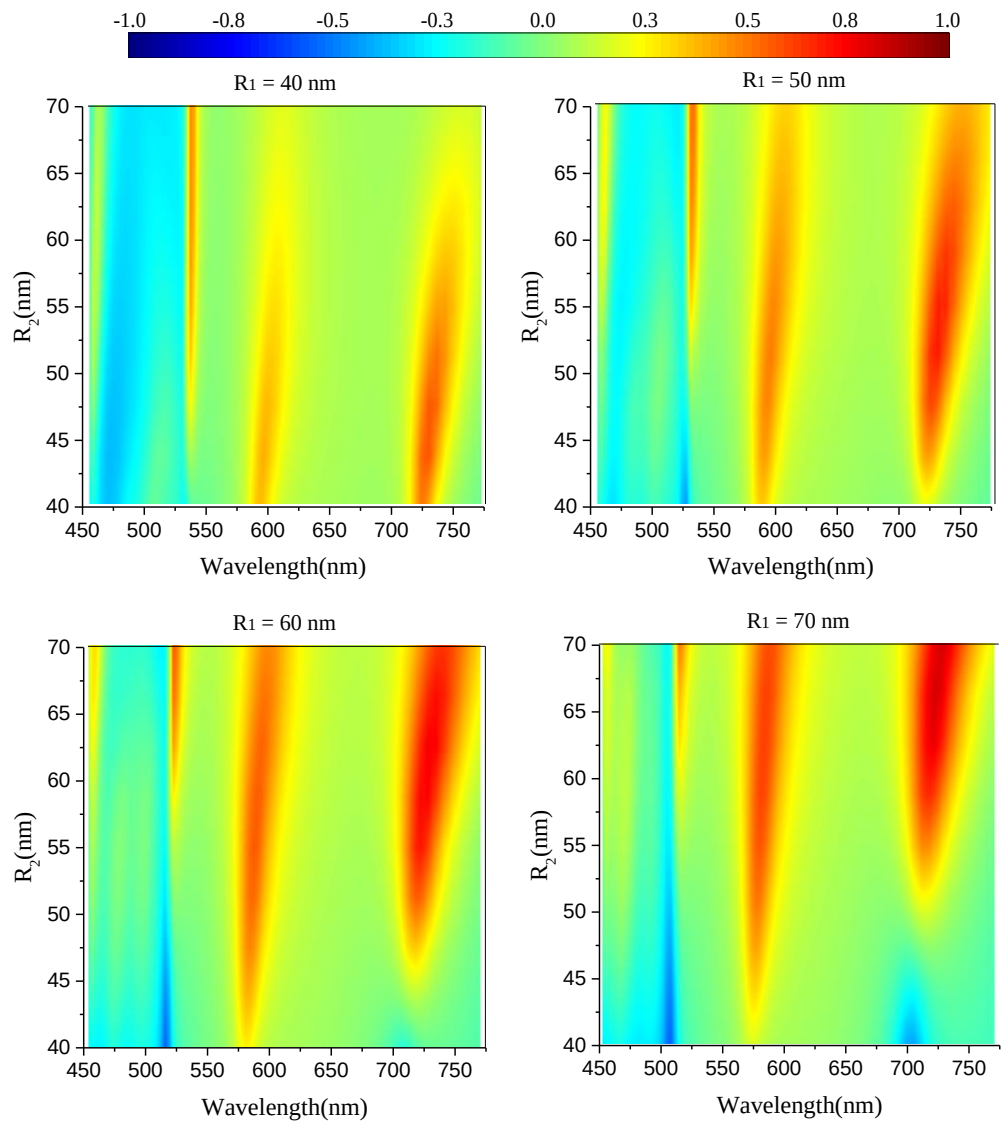


Figura 6. Razão de contraste do espectro de absorção para R_1 de 40, 50, 60 e 70nm utilizando a prata como metal.

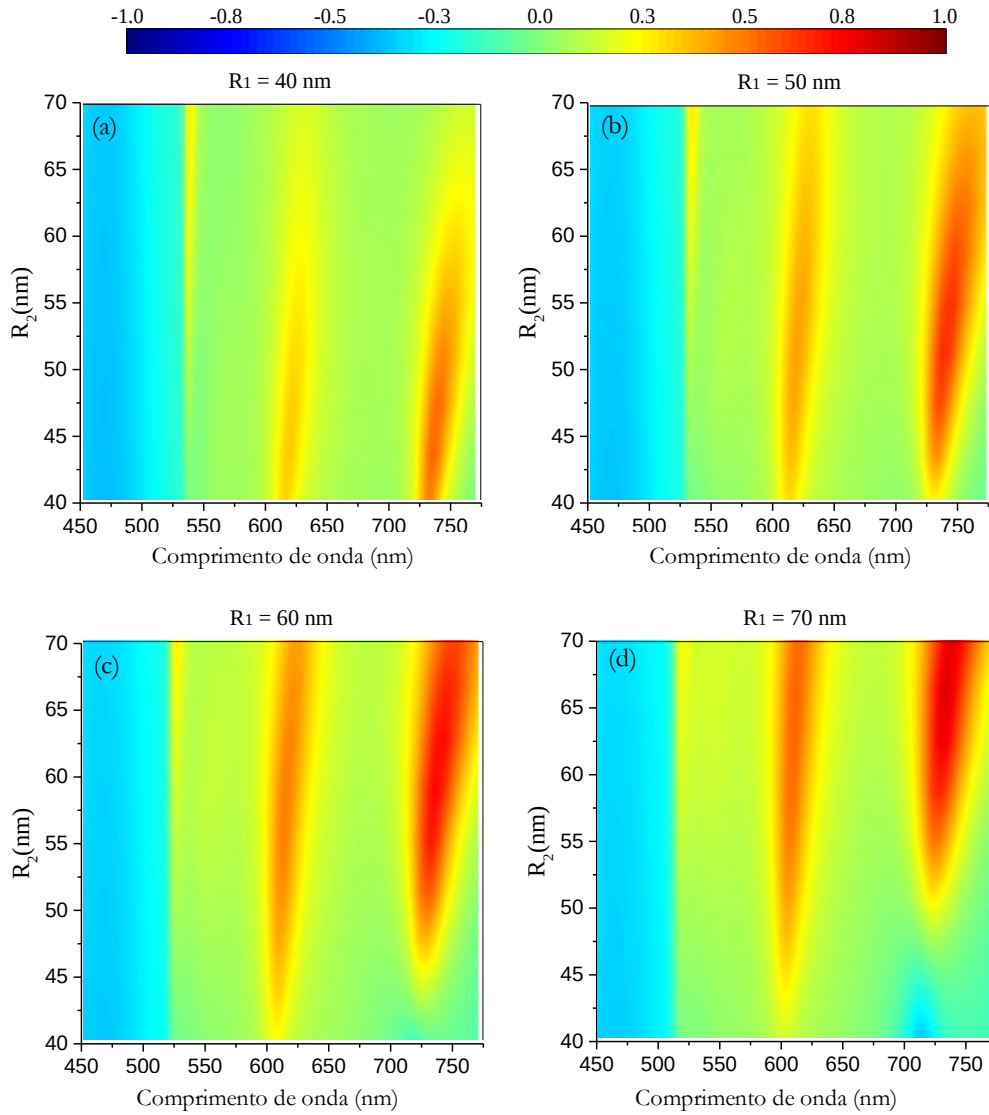


Figura 7. Razão de contraste (CR) do espectro de absorção para R_1 de (a) 40nm, (b) 50nm, (c) 60nm e (d) 70nm utilizando o ouro como metal.

Na Figura 6, consideramos a prata como o material da camada metálica da estrutura proposta. Neste caso, foram encontrados dois modos em que a assimetria de absorção óptica foi obtida com pico unitário próximo aos comprimentos de onda de 580nm e 733nm. Não foi observada mudança na resposta espectral ao realizar varredura paramétrica dos raios. Os resultados exibidos na Figura 7 são da estrutura que tem ouro utilizado como o material na camada metálica. Neste caso, também foram encontrados dois modos em que a assimetria de absorção óptica foi obtida com um pico unitário em comprimentos de onda próximos de 610nm e 733nm.

Para analisar as mudanças no efeito da absorção assimétrica devido a imperfeições de fabricação, propomos não simular toda a estrutura, considerando o deslocamento do orifício de ar, o que exigiria um poder computacional imenso. Em vez disso, simulamos duas

imperfeições diferentes que podem ocorrer no processo de fabricação. O primeiro deles é o desvio de coaxialidade entre os orifícios de ar em ambas camadas. Para analisar este efeito, as simulações foram realizadas em uma única célula unitária com deslocamentos no orifício de ar da camada metálica, como mostrado na Figura 8. Os seis desvios simulados, que consistem em espaçamentos de 10nm nas direções X e Y, devido a simetria rotacional da estrutura, cobre todos os quadrantes da célula unitária. A translação do orifício de ar no metal em relação àquela na matriz do substrato semiconductor cria assimetria na geometria da estrutura, isto pode afetar sua dependência de polarização. Por esse motivo, simulações foram realizadas com direção de campo elétrico tanto na direção X quanto na direção Y. A Figura 9 exhibe a razão de contraste do coeficiente de absorção para todos os seis perfis de furos de ar na prata, com R_1 e R_2 de 70nm.

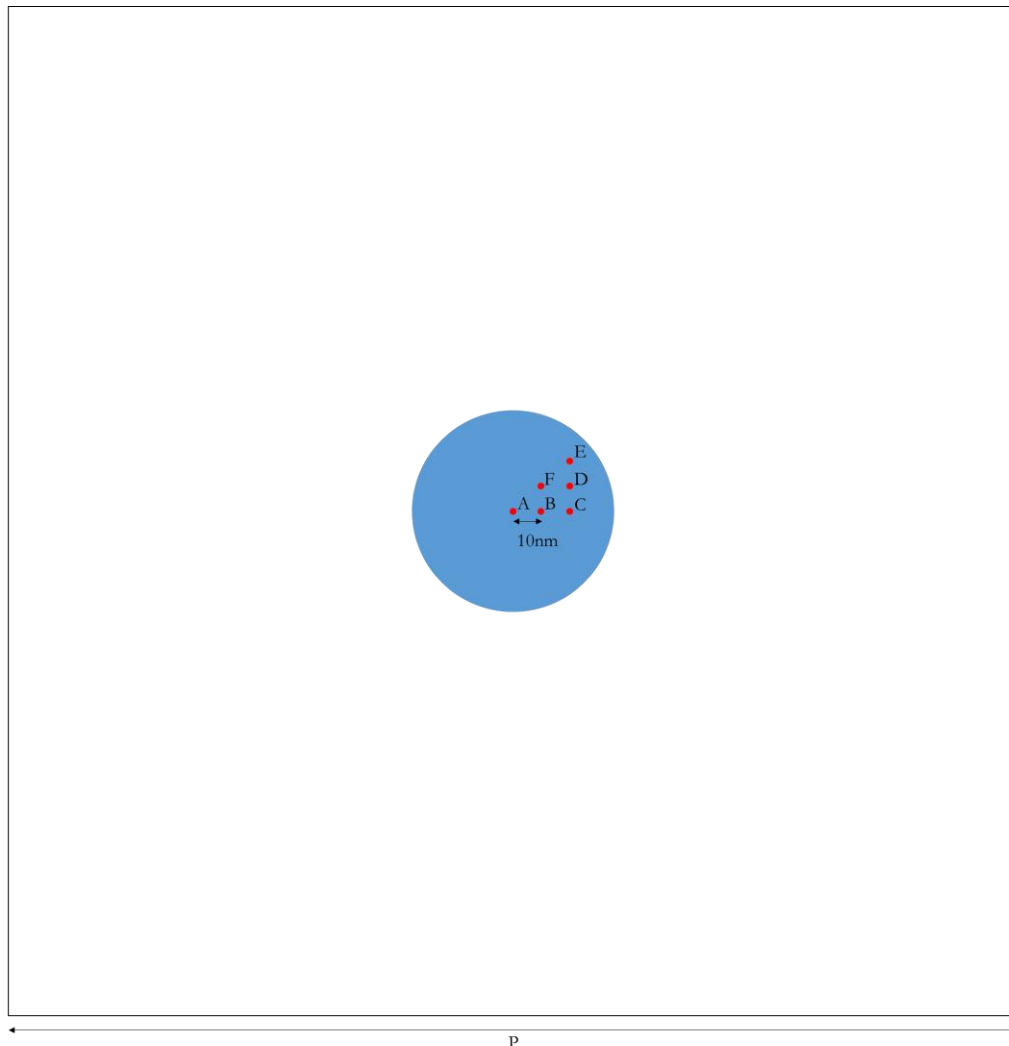


Figura 8. Desvio de coaxialidade do orifício de ar na camada metálica. O deslocamento mostrado está em escala com as dimensões dos dispositivos simulados.

A razão de contraste de absorção mostrada na Figura 9 para os modos de excitação E_x e E_y , respectivamente, mostra um deslocamento azul do pico até 10 nm. A magnitude da proporção mudou menos de 2% para a imperfeição simulada. A segunda imperfeição considerada é o deslocamento de ambos os orifícios de ar na célula unitária de uma supercélula (um conjunto de 9 células unitárias em arranjo quadrado).

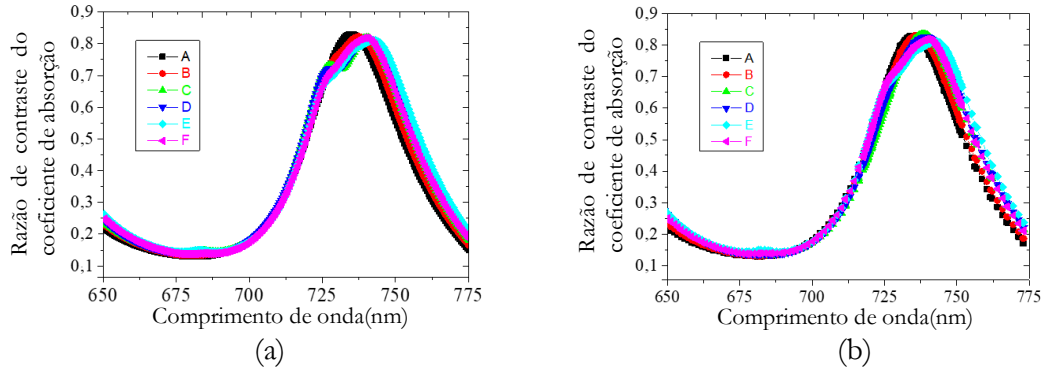


Figura 9. Razão de contraste do coeficiente de absorção para estrutura com desvio de coaxialidade na camada dielétrica. (a) Polarização E_x e (b) Polarização E_y .

Para avaliar o efeito da sensibilidade de fabricação da estrutura proposta em relação à posição do centro dos orifícios de ar em uma determinada célula unitária na estrutura metamaterial, simulamos uma supercélula unitária composto por nove células unitárias simples, cada uma com seu orifício de ar alocado em uma posição transladada. A aleatoriedade da posição para as translações dos furos de ar dX e dY foi realizada com uma função de densidade de probabilidade de distribuição normal truncada, onde a média foi a posição perfeita. Foi utilizado: $3\sigma = R_1 = R_2 = 70nm$, onde σ é o desvio padrão. A Figura 10 mostra a estrutura de uma supercélula unitária simulada, com os orifícios de ar ligeiramente deslocados. Os raios da estrutura simulada foram iguais a 70nm.

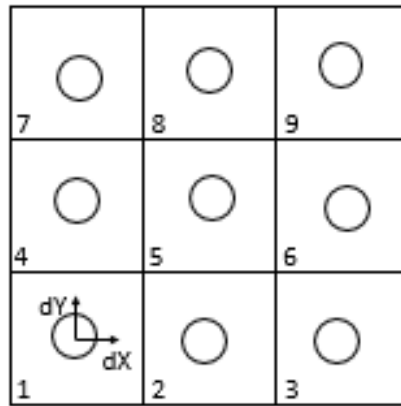


Figura 10. Estrutura de supercélula unitária simulada, composta por nove células unitárias com deslocamentos dY e dX para tornar aleatória as posições dos orifícios de ar.

Nota-se que as translações provocadas nas posições de furos têm dimensões na faixa de 0 a 50nm, tratando-se de defeitos de fabricação exagerados. Espera-se que a estrutura fabricada tenha menor imperfeição e, portanto, produza melhores resultados do que os apresentados aqui.

Foram simuladas 20 diferentes supercélulas cujos desvios das posições dos centros nas direções X e Y foram geradas de forma aleatória, por distribuição normal, com desvios padrão iguais a $\sigma = 10\text{nm}$ (10 supercélulas) e $\sigma = 20\text{nm}$ (10 supercélulas) e médias centradas nas posições ideais. Neste cenário de $\sigma = 10\text{nm}$, o erro médio quadrático (EMQ) da razão de contraste entre as supercélulas se manteve abaixo de 0,02 e no cenário $\sigma = 20\text{nm}$, o EMQ se manteve abaixo de 0,09. Estes resultados mostram não houve impacto significativo no comportamento do dispositivo para os defeitos com os desvios padrão de simulados.

As translações feitas na estrutura proposta resultaram em uma redução do CR de no máximo de 0,81 para 0,73 na pior das 20 estruturas simuladas (caso 6 no cenário de $\sigma = 20\text{nm}$), ou seja, uma degradação, no pico, de aproximadamente 10% do CR.

A Figura 11 apresenta os CR das supercélulas com desvios aleatórios gerados por distribuição normal com $\sigma = 10\text{nm}$ e média centrada na posição ideal, o zero. No caso da Figura 12, os desvios aleatórios foram gerados com $\sigma = 20\text{nm}$.

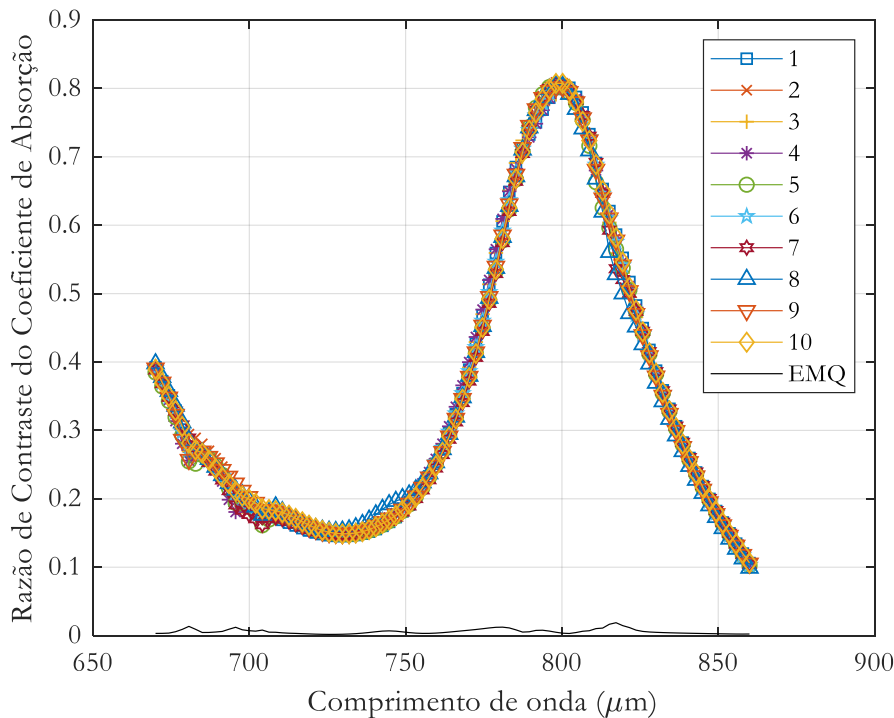


Figura 11. Razão de contraste do coeficiente de absorção para 10 diferentes supercélulas e o erro médio quadrático (EMQ) entre elas. O EMQ se manteve abaixo de 0,02. Os desvios aleatórios da posição dos furos das supercélulas nas direções X e Y foram gerados a partir de uma distribuição normal com média na posição ideal e desvio padrão $\sigma = 10\text{nm}$.

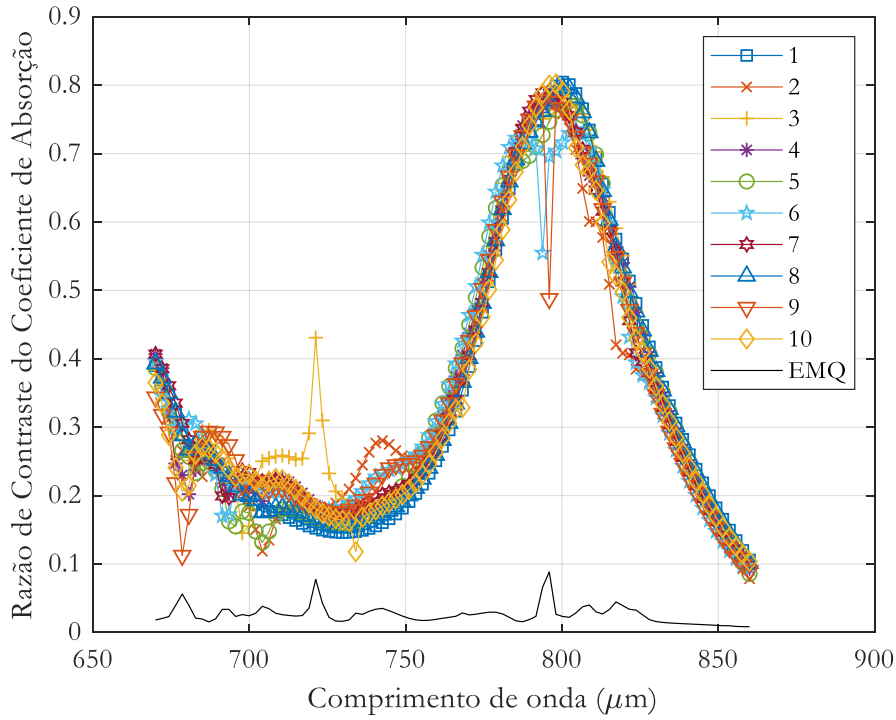


Figura 12. Razão de contraste do coeficiente de absorção para 10 diferentes supercélulas e o erro médio quadrático (EMQ) entre elas. O EMQ se manteve abaixo de 0,09. Os desvios aleatórios da posição dos furos das supercélulas nas direções X e Y foram gerados a partir de uma distribuição normal com média na posição ideal e desvio padrão $\sigma = 20\text{nm}$.

O efeito de absorção óptica assimétrica foi demonstrado pela estrutura de metamaterial plasmônico bicamada apresentada na Figura 4. Cerca de $\text{CR} = 1$ foi obtida em dois comprimentos de onda diferentes para radiação visível, tanto para o ouro quanto para a prata. Os modos de ressonância excitados na estrutura e a excitação de polaridades de plasmon de superfície na iluminação lateral metálica favorecem a absorção, o que explica o comportamento assimétrico observado. Também foi analisada a sensibilidade de fabricação da estrutura considerando a posição do centro dos furos em uma supercélula.

3 PROJETO OTIMIZADO DE METASUPERFÍCIES

Os parâmetros geométricos que definem a distribuição espacial dos materiais nas estruturas de metamateriais influenciam sensivelmente o comportamento eletromagnético de tais estruturas. Encontrar a combinação ideal de parâmetros que promova a resposta eletromagnética desejada se torna uma tarefa árdua à medida em que se aumenta a quantidade de tais parâmetros geométricos (que podem assumir infinitos valores).

A obtenção da resposta de uma determinada estrutura por simulação numérica pode levar de dezenas de segundos a alguns minutos. No entanto, o número de possíveis estruturas é enorme, de forma que a busca pela estrutura ideal é uma tarefa extenuante, que requer imenso tempo computacional e é pouco frutífera se realizada manualmente pelo projetista. Para a realização da tarefa de buscar a estrutura ideal, torna-se, portanto, imperativa a necessidade de utilização de uma ferramenta de busca automatizada. O método dos algoritmos genéticos (AG), apesar de ser antigo, ainda é bastante utilizado e encontra aplicações diversas na área de nano óptica [25]–[28].

O problema de encontrar a estrutura ideal é típico de otimização. Os métodos de busca baseados em algoritmos evolutivos são classicamente utilizados em problemas onde o espaço de busca é multidimensional e desconhecido, como o problema em questão.

O AG é uma classe de métodos de busca iterativa inspirados na reprodução sexuada e funciona a partir de uma primeira geração aleatória de soluções, que são testadas na função objetivo. A partir desta primeira geração, ou população inicial, as gerações subsequentes são geradas a partir de combinações baseadas nas técnicas de evolução comuns na biologia (seleção, cruzamento, mutação e elitismo). A sintetização do conceito por trás de cada uma destas técnicas é apresentada a seguir.

O procedimento de seleção consiste da escolha dos indivíduos de uma geração que servirão de base para a geração subsequente. A seleção deve garantir a diversidade da população bem como aumentar as chances de evolução através da reprodução. O cruzamento promove a mistura entre as características (genes) de uma geração, os pais, para criar novos indivíduos, os filhos. Estes filhos possuem os genes dos pais, cruzados de forma aleatória, assim como em uma reprodução biológica sexuada. Em um algoritmo que implemente apenas seleção e cruzamento (ou permite-se que a mutação tenha expressão irrelevante), é comum acontecer a convergência para uma única solução de toda a população. A diversidade entre os indivíduos desaparece gradativamente e depois de algumas iterações, a população torna-se completamente homogênea em um ponto ótimo local. A solução para este problema é a aumentar as taxas de mutação (que consiste em alterações aleatórias em

genes aleatórios dos indivíduos), garantindo assim maior variedade populacional, a varredura de uma área maior do espaço de soluções e a não convergência prematura da população. O elitismo garante a manutenção dos melhores indivíduos dentro da população a partir do escalonamento de uma geração com seus progenitores.

3.1 Estruturas otimizadas por AG baseado em metassuperfícies

A busca iterativa automatizada através do AG foi implementada para o problema do projeto de uma estrutura plasmônica. A metodologia de busca automática de novas estruturas envolve a interação entre dois pacotes computacionais, o COMSOL e o MATLAB. A implementação do AG é realizada em MATLAB enquanto o COMSOL é utilizado para modelar e possibilitar a avaliação da absorção de cada estrutura.

No COMSOL, inicialmente, é realizada a modelagem genérica, sem definição de valores para os parâmetros geométricos da estrutura. Os materiais não são definidos no modelo genérico. Apenas as características definitivas (aquelas que não são modificadas a cada iteração) é que são definidas, como as condições de fronteira, a excitação do campo e os principais parâmetros da malha. Em um segundo momento, o modelo criado no COMSOL é executado como uma função do MATLAB a fim de obter-se os coeficientes de absorção para a faixa de frequência em questão. A metodologia e interação entre os dois pacotes computacionais é mostrada na Figura 13 (a).

Ao iniciar o programa é realizada a geração de indivíduos com genes aleatórios. Para o problema em questão, os genes são valores atribuídos aos parâmetros geométricos e o material utilizado. O MATLAB executa o simulador, que é baseado em método dos elementos finitos (MEF) no domínio da frequência do COMSOL, como uma função, que retorna uma tabela com os valores de absorção. Os valores retornados para o MATLAB são avaliados em uma função de aptidão, que busca maximizar a absorção. Os critérios de parada são então avaliados. O número de gerações máximo ou a estabilização da curva de evolução são utilizados neste trabalho.

3.2 Metodologia do AG

A implementação do AG foi baseada naquela apresentada na literatura [25], em um trabalho que também utiliza a integração do COMSOL com o MATLAB. O método de seleção utilizado é o da seleção proporcional à aptidão dos indivíduos avaliados, também conhecida como método da roleta. O método consiste em elevar a chance de reprodução de um indivíduo de forma proporcional à sua adaptação ao meio, quanto melhor ou mais apto

for o indivíduo, maior será a chance de este ser selecionado para ser utilizado na reprodução. O diagrama de blocos mostrado na Figura 13 (b) descreve o funcionamento do AG.

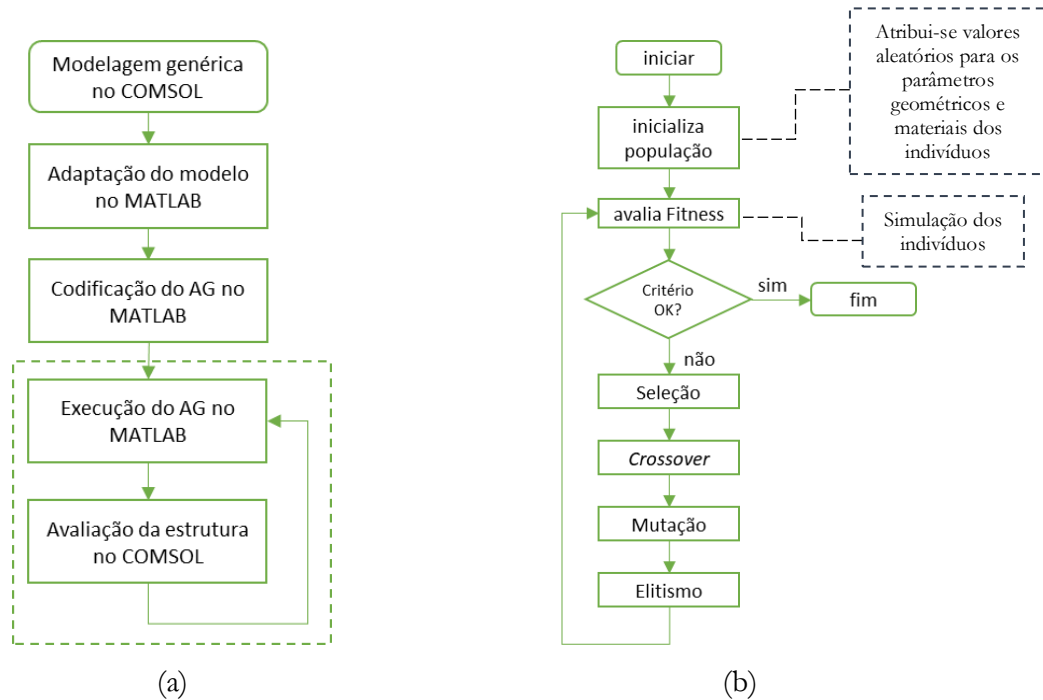


Figura 13. Diagrama de blocos (a) da metodologia e interação entre softwares e (b) do AG.

A mutação propicia a diversidade. Incrementos de valor e ocorrência aleatórios que são somados aos valores dos genes dados por distribuição de probabilidade uniforme. A chance de mutação, ou probabilidade de a mutação ocorrer em um determinado gene é um parâmetro ajustável que determina o grau de diversidade de uma geração. Um segundo parâmetro importante da mutação é a também ajustável amplitude da mutação, representado por um percentual do alcance disponível do gene em questão, respeitando as restrições do problema. A amplitude da mutação é um fator percentual que determina o impacto da mutação no gene, quando de fato a mutação acontecer. A amplitude da mutação aumenta toda vez que a busca começa a convergir para um platô de forma a aumentar a diversidade e a área de busca do algoritmo.

As novas estruturas geradas de forma automática obedecem às restrições do problema e não se repetem ao longo das gerações. A repetição da simulação de um determinado indivíduo é um desperdício de tempo computacional e deve ser evitado a todo custo.

Com a finalidade de evitar desperdício de tempo computacional com a realização de simulações diversas de estruturas muito parecidas entre si, foi definido o parâmetro semelhança (J).

$$S = \sum_{i=1}^{i=N} |g_i^{anterior} - g_i^{atual}| \quad (32)$$

$g_i^{anterior}$: Gene i de um indivíduo anterior

g_i^{atual} : Gene i do indivíduo testado

N: Quantidade de parâmetros

Estruturas novas criadas automaticamente são comparadas com todas as anteriores, gene a gene. Caso o resultado da semelhança desta nova estrutura com relação a alguma outra já avaliada seja maior que o parâmetro Semelhança Limite (SL), a estrutura tem seu valor atribuído a partir das simulações anteriores e o processo de criação continuará a buscar uma nova estrutura. Os “dados” são rolados mais uma vez, uma nova estrutura é criada e o processo de avaliação da semelhança se repete.

É sabido que os indivíduos de uma determinada geração tendem a convergir e terem valores dos genes muito próximos uns dos outros à medida que o algoritmo se aproxima de uma solução ótima. Neste cenário, sob o ponto de vista da busca otimizada, o espaço de busca fica restrito a uma região pequena, de um máximo local, que pode ou não ser o global. A população ideal é aquela que possui grande diversidade e ao mesmo tempo apresenta indivíduos com valores altos de aptidão.

3.3 A modelagem da estrutura

A Figura 14 apresenta a estrutura proposta baseada no absorvedor de banda larga para o infravermelho [29], modelada a partir de sete genes ($P, w_1, h_1, w_2, h_2, dieletrico$ e $metal$) que determinam a expressão fenotípica das larguras e alturas das fendas e dos materiais que compõem a estrutura.

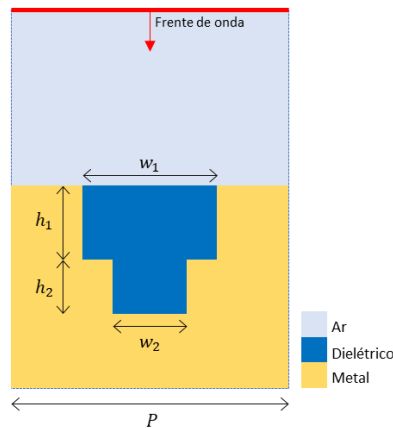


Figura 14. Estrutura base utilizada para evolução com AG.

Os limites definidos para os parâmetros codificados nos genes são mostrados na Tabela 1.

Tabela 1. Limites definidos para os valores que os genes podem assumir.

Gene	Valores possíveis
<i>P</i>	200 a 700 nm
<i>w₁</i>	50 a 600 nm
<i>h₁</i>	10 a 400 nm
<i>w₂</i>	50 a 600 nm
<i>h₂</i>	10 a 400 nm
<i>dieletrico</i>	<i>Ar, SiO₂ ou Si₃N₄</i>
<i>metal</i>	Ouro, Prata ou Níquel

A função aptidão utilizada para realizar a avaliação da qualidade de cada estrutura é a calculada pela média das contribuições da absorção em cada comprimento de onda (ponto a ponto) das distâncias euclidianas, ou erro quadrático médio entre a curva de absorção ideal e a curva de absorção obtida, como expressado na função:

$$F(\mathbf{X}) = 1 - \sqrt{\frac{1}{n} \sum_i^n (x_{ideal,i} - x_i)^2}, \quad (33)$$

onde $\mathbf{X} = [x_1, x_2, \dots, x_n]$ é o vetor que contém a curva de absorção pelo comprimento de onda obtida pela simulação. O x_{ideal} é a curva de absorção ideal para determinado comprimento de onda de índice de i e n é a quantidade comprimentos de onda avaliados, definida pelo usuário a depender do comportamento desejado. A função aptidão $F(\mathbf{X})$ tende a unidade quando a curva obtida é igual à curva ideal. O AG foi programado para maximizar a função objetivo.

3.4 Metodologia de simulação e de busca pela estrutura de absorção multibanda

Com a finalidade de validar o algoritmo de busca desenvolvido foi utilizada uma estrutura proposta na literatura [29], simulada com o método de Análise rigorosa de acoplamento de ondas, ou RCWA (*Rigorous Coupled-Wave Analysis*). A estrutura possibilita a absorção seletiva de duas bandas distintas no infravermelho, com picos em 1530nm e 2940nm. Neste trabalho a estrutura foi simulada utilizando o MEF e os resultados obtidos

foram possuem comportamentos similares. Os espectros de absorção da estrutura fim da literatura e simulada neste trabalho são exibidos na Figura 15.

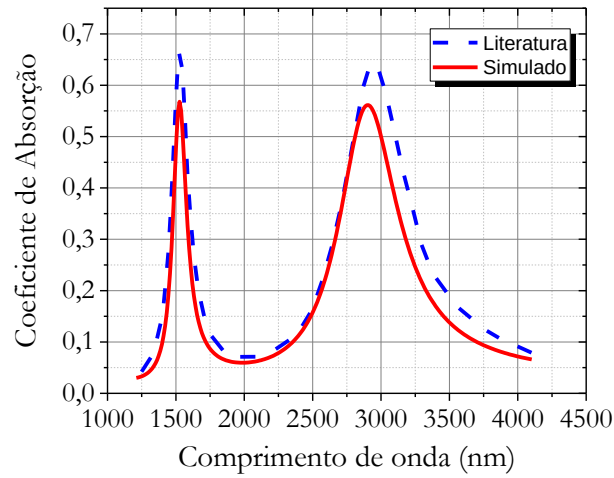


Figura 15. Espectros de absorção com picos em 1530nm e 2940nm obtido pela estrutura proposta na literatura a partir do método (vermelho) e simulado [29]. O metal utilizado foi a prata e os parâmetros foram $P=1100\text{nm}$, $w_1=200\text{nm}$, $h_1=300\text{nm}$, $w_2=50\text{nm}$ e $h_2=350$.

Depois da validação da simulação com os parâmetros originais fornecidos pelo autor, o AG foi configurado para realiza a busca automática pela estrutura já conhecida. Houve convergência para aptidão $F=96,06\%$ depois de 90 gerações, apesar da busca ser configurada para executar 150 gerações. Os valores dos parâmetros geométricos obtidos não corresponderam aos apresentados pela literatura, portanto a estrutura encontrada é nova. A distribuição espacial do campo magnético e campo elétrico, gráfico de evolução do AG, distribuição espacial dos materiais utilizados e espectro de absorção podem ser visualizados na Figura 16.

A busca realizada para a estrutura multibanda resultou na estrutura apresentada pela Figura 16, no entanto, durante a execução da busca, a estrutura encontrada na geração 89, apresentada na Figura 17, possui pico de absorção no comprimento de onda de 2940nm maior do que a estrutura proposta na literatura. A menor aptidão avaliada, neste caso, se deu pela maior diferença entre a curva encontrada com a curva proposta. Esta estrutura encontrada indica a possibilidade de existirem outras estruturas ainda melhores e para busca-las, é necessário modificar a curva ideal para evitar penalização de respostas melhores do que as propostas na literatura.

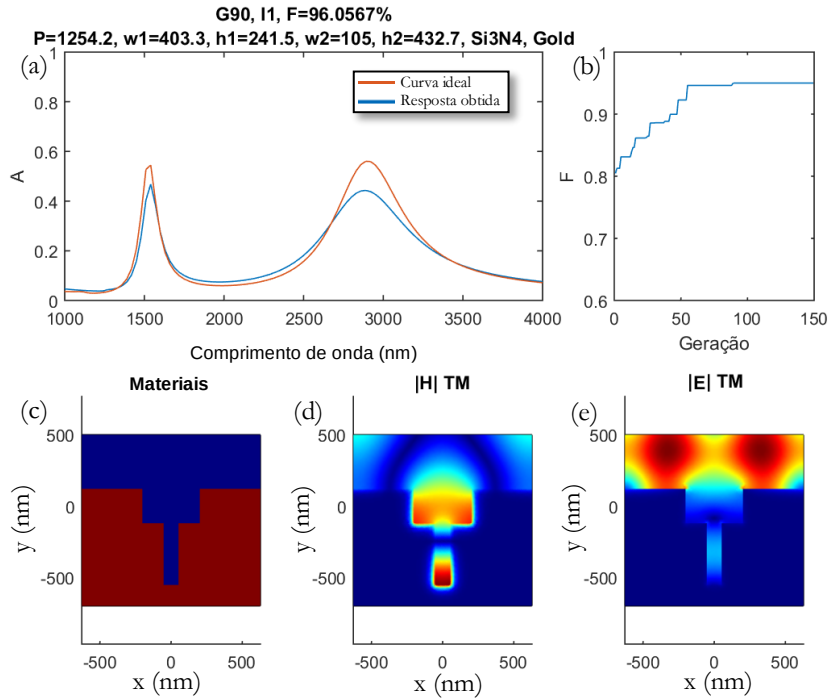


Figura 16. (a) Espectro de absorção (b) com evolução da aptidão avaliada para 150 gerações. (c) estrutura para absorção com picos em 1530nm e 2940nm para a faixa de 1000 a 4000nm. O coeficiente de absorção simulado é exibido em azul e a curva ideal é exibida em vermelho. Os perfis de distribuição (d) do campo magnético e (e) do campo elétrico indicam a presença de ressonância nas cavidades da estrutura no pico de absorção em 2940nm.

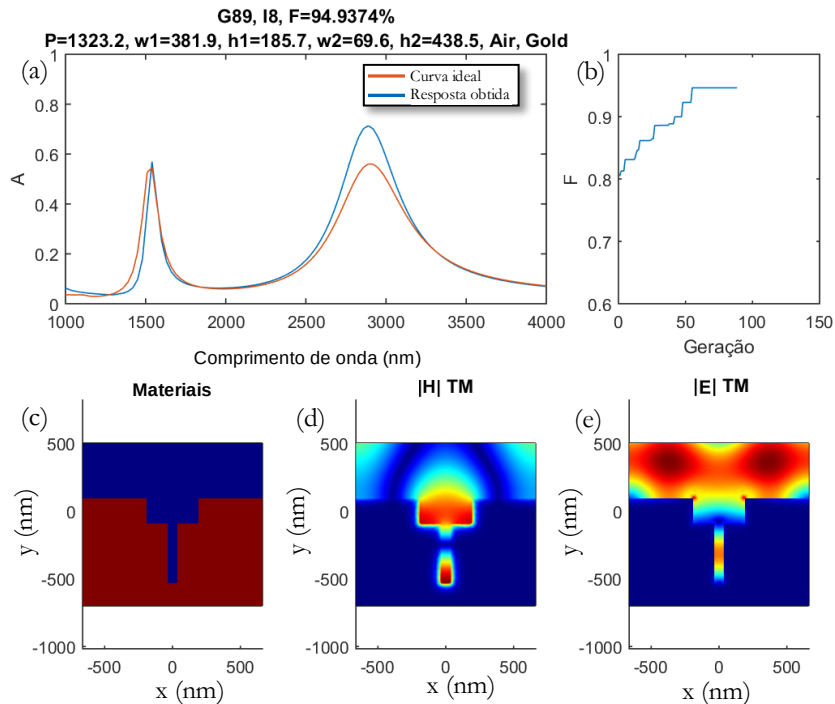


Figura 17. Resultados obtidos para otimização parcial com 89 gerações. Apesar da menor aptidão obtida, a estrutura apresenta maior pico de absorção para a frequência de interesse de 2940nm com relação à estrutura original. (a) Espectro de absorção da estrutura com distribuição e (b) com evolução da aptidão avaliada até a geração 89. O coeficiente de absorção simulado é exibido em azul e a curva ideal é exibida em vermelho. Os perfis de distribuição (d) do campo magnético e (e) do campo elétrico indicam a presença de ressonância nas cavidades da estrutura no pico de absorção em 2940nm.

Plasmons de superfície possuem vetor de onda com magnitude maior do que a da luz no vácuo, o que torna necessário, para a sua excitação, a utilização de um meio de acoplamento que aumente o momento para possibilitar a transferência de energia do fóton para o PPS. Este meio é comumente um prisma, ou uma região com grades periódicas.

O estado de plasmon polariton, entretanto, pode existir na interface entre um metal e um dielétrico de uma estrutura com arranjo periódico, como uma rede de Bragg ou um cristal fotônico que utilize metal em sua composição. Este estado de plasmon polariton pode ter vetor de onda com tamanho próximo de zero. Como consequência, tem-se que é possível excitar opticamente este estado diretamente a partir do ar [30].

Com o objetivo, desta vez, não de reproduzir, mas de encontrar estruturas ainda melhores do que a proposta na literatura, com picos de absorção mais altos, a curva ideal foi modificada para que o pico de absorção mais alto alcançasse a unidade (toda a curva foi dividida por ela mesma). A estrutura obtida ao final de 150 gerações, no entanto, não produziu resultados satisfatórios.

A curva de absorção, seguindo a nova curva ideal proposta, mostrada na Figura 18, apresenta absorção bastante elevada fora da região de interesse, além de o pico não ser significativamente maior, apenas de 67,9% do que o encontrado anteriormente com a curva ideal original, que apresentou pico de 71,2% (Figura 17). Os metais e dielétricos considerados também foram diferentes, ouro e ar para a estrutura obtida com a curva ideal original e níquel e nitrato de silício para a estrutura obtida a partir da curva ideal modificada. As possíveis razões para a não convergência da busca para um resultado satisfatório são:

- A curva de absorção ideal escolhida não foi razoável, por ser inalcançável a partir do espaço de busca disponível. A ampliação da área de busca pode resultar em indivíduos com aptidão melhor.

- A função objetivo não é a mais adequada.

É possível incluir na lista de razões a escolha dos parâmetros para o AG, como número de gerações, número de indivíduos por geração e etc. No entanto, os parâmetros escolhidos foram utilizados nas buscas anteriores que obtiveram resultados satisfatórios.

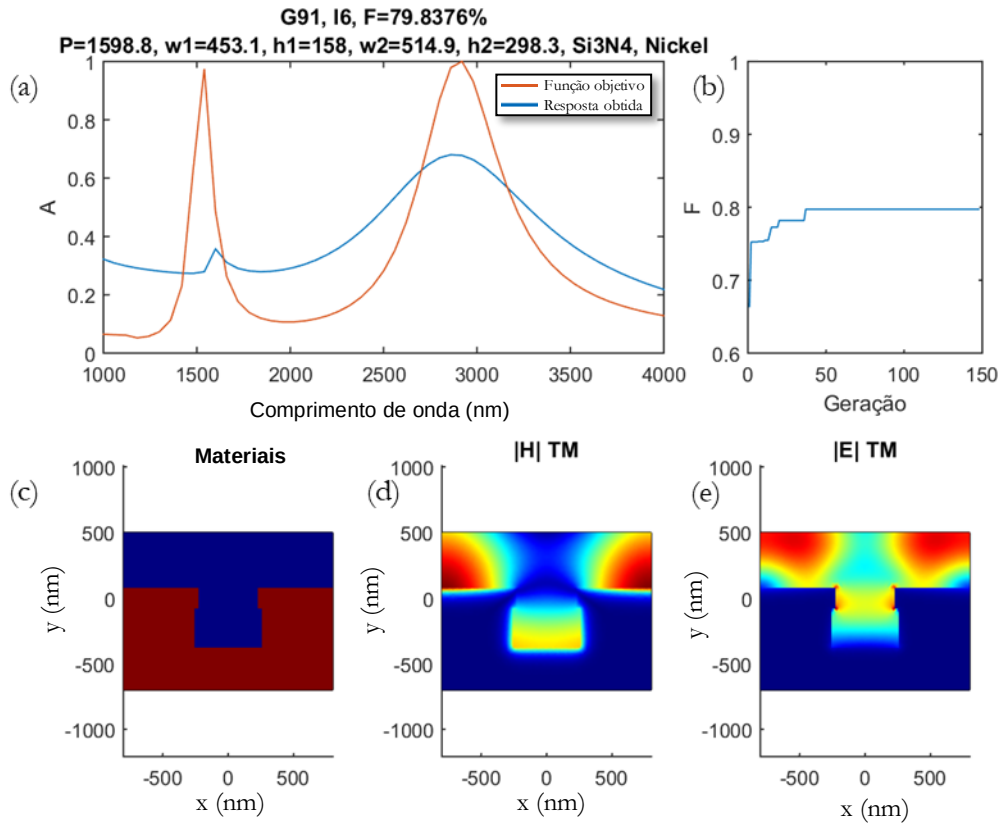


Figura 18. Resultados obtidos para otimização utilizando (a) curva ideal com pico unitário em 1540nm e em 2920nm. A estrutura proposta (c) demonstra pico de absorção de 67,9% em 2898nm e aptidão de 79.84%. A curva (b) mostra que houve evolução significativa até a geração 47.

3.5 Busca por estruturas na faixa do visível

A estrutura proposta pela literatura apresentada na seção anterior tem faixa de operação no infravermelho, no entanto, a metodologia utilizada permite busca em outras faixas de frequência.

Com o objetivo de testar a evolução do AG em outras faixas, foram obtidos resultados adicionais para buscas em quatro diferentes perfis de absorção na faixa do visível: absorção máxima em toda a faixa de comprimento de onda, filtro tipo “rejeita-banda”, filtro “passa-alta” e filtro “passa-baixa”.

As estruturas foram simuladas tanto para polarização TE quanto para polarização TM, de forma que o resultado da otimização fosse independente da polarização da onda incidente. O critério de parada adotado para as buscas foi o número de geração igual a 150. Múltiplas buscas realizadas indicaram que com essa quantidade de gerações há a convergência da busca para um platô, de forma que o prosseguimento da execução do algoritmo não leva a melhores estruturas.

3.5.1 Estrutura com absorção em toda a faixa do visível

A primeira estrutura buscada foi a com absorção total na faixa do visível. A melhor estrutura encontrada obteve aptidão $F=93.16\%$ utilizando apenas o Níquel. A distribuição espacial dos campos eletromagnéticos TE e TM, bem como espectro de absorção e gráfico de evolução do AG são exibidos na Figura 19.

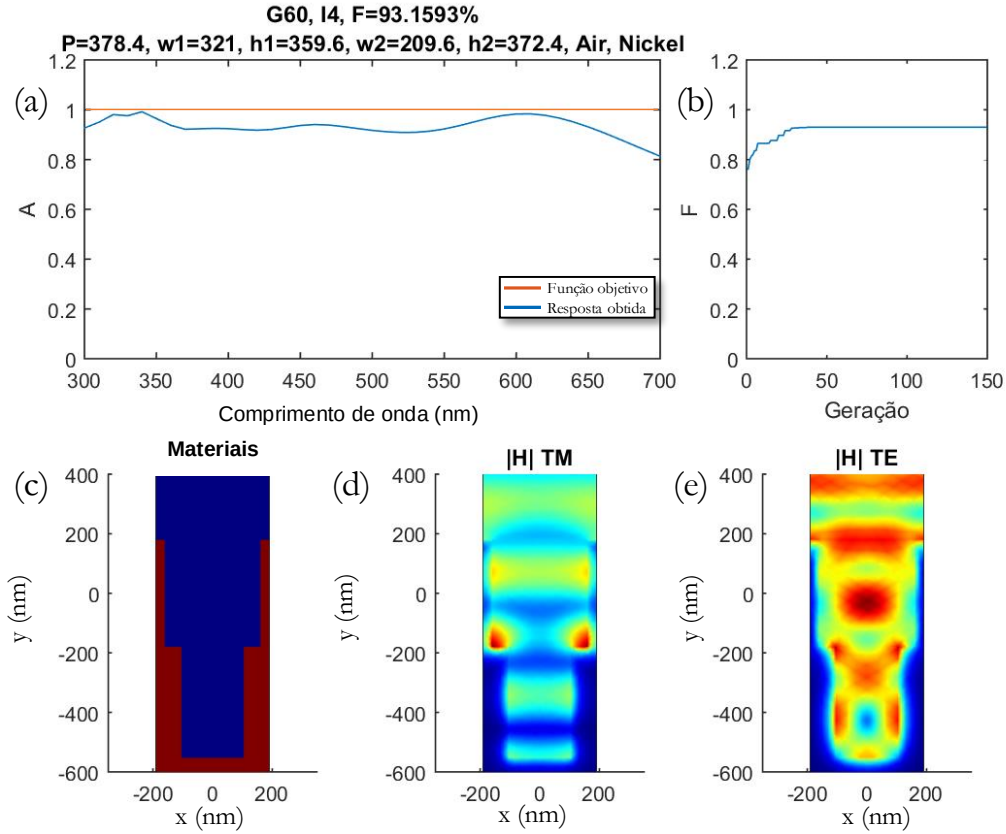


Figura 19. (a) Espectro de absorção da (c) melhor estrutura para absorção em banda larga na faixa de 300 a 700nm obtida pela busca por AG (b) com evolução da aptidão avaliada para 150 gerações. O coeficiente de absorção simulado é exibido em azul e a absorção objetivo é exibida em vermelho. Os perfis de distribuição do campo magnético para (d) o modo TM e para (e) o modo TE indicam a presença de ressonância nas cavidades da estrutura.

3.5.2 Estrutura com absorção tipo “passa-baixa”

A função objetivo foi definida com a característica de um filtro passa-baixa. Neste caso, a estrutura obtida apresentou aptidão de aproximadamente 77,36%. Os resultados para esta busca são exibidos na Figura 20.

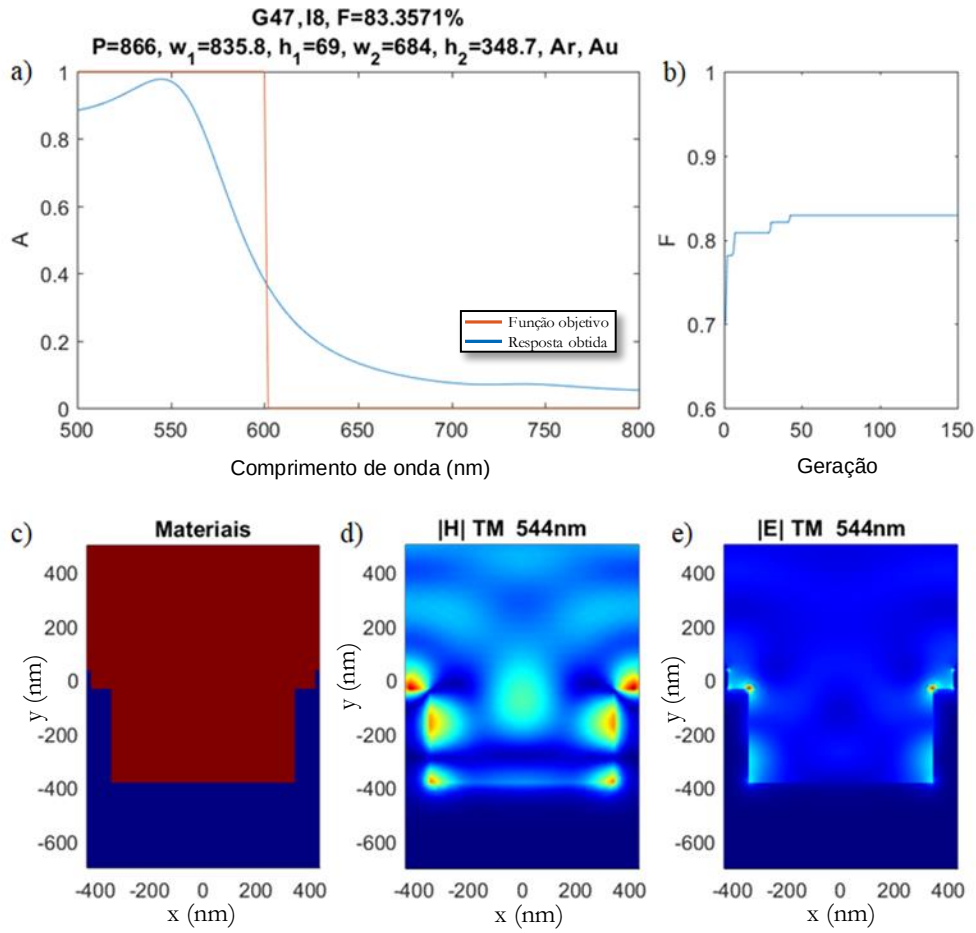


Figura 20. (a) Espectro de absorção da (c) melhor estrutura para filtragem passa baixa com comprimento de onda de corte em 470nm obtida pela busca por AG (b) com evolução da aptidão avaliada para 150 gerações. O coeficiente de absorção simulado é exibido em azul e a absorção objetivo é exibida em vermelho. Os perfis de distribuição do campo magnético para (d) o modo TM e para (e) o modo TE indicam a presença de ressonância nas cavidades da estrutura.

3.5.3 Estrutura com absorção tipo “passa-alta”

O modelo foi utilizado para buscar uma estrutura que se comportasse como um filtro passa-alta. Os resultados apresentados na Figura 21 mostram convergência da aptidão para um valor ruim, com avaliação de apenas 44,57%. A análise visual do gráfico reafirma a conclusão de que a curva de absorção obtida com a estrutura final não é a aquela de um filtro passa-alta.

O fracasso em obter uma estrutura com absorção tipo filtro-passa alta é possivelmente decorrente do fato de que a estrutura proposta, com a modelagem utilizada, não tem em seu domínio a solução. É possível que não existam parâmetros bons (dentro os limites escolhidos aqui) que possibilitem a elaboração de uma estrutura que funcione como um filtro passa-alta.

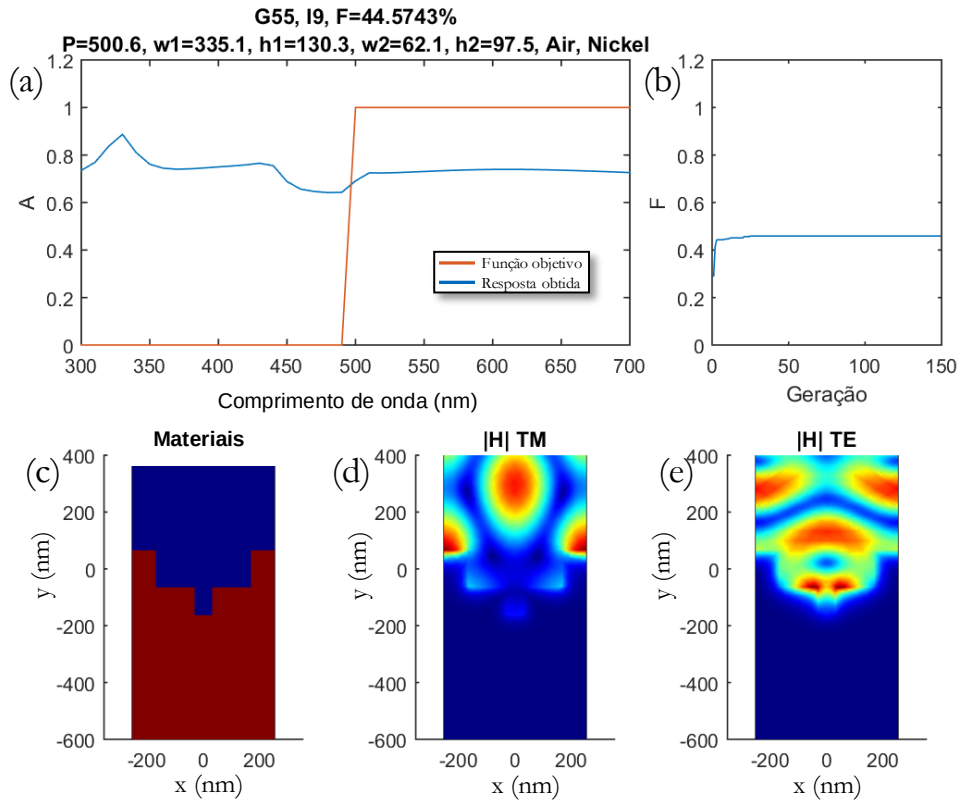


Figura 21. (a) Espectro de absorção da (c) melhor estrutura para filtragem passa alta com comprimento de onda de corte em 470nm obtida pela busca por AG (b) com evolução da aptidão avaliado para 150 gerações. O coeficiente de absorção simulado é exibido em azul e a absorção objetivo é exibida em vermelho.

3.5.4 Estrutura com absorção assimétrica

O deslocamento de fase de uma onda eletromagnética ao ser transmitida através de uma interface metal-dielétrico é um efeito amplamente utilizado em estruturas absorvedoras de banda larga. Um conjunto apropriado de interfaces metal-dielétrico empilhadas possibilita o controle das ressonâncias em estruturas com o propósito de geração fotovoltaica e filtros de cores diversas [31]–[36]. A absorção assimétrica, em função da direção da iluminação, é um comportamento que desempenha papel importante em aplicações como geração fotovoltaica, detectores, moduladores e emissores. Este comportamento é analisado nesta seção em uma proposta de dispositivo baseado em camadas de metal-dielétrico, utilizando busca otimizada por AG.

A estrutura foi modelada com um número (n) de seções como mostrado na Figura 22, que permitiu dois parâmetros livres para cada seção, a altura da camada de material dielétrico e o material dielétrico (sílica ou ar).

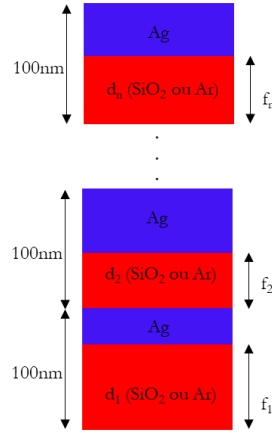


Figura 22. Esquemático de uma seção de arbitrária de uma estrutura. A modelagem da estrutura permitiu 2 parâmetros configuráveis, a altura da camada dielétrica (f_i) e o material dielétrico utilizado (d_i) para cada um dos “n” segmentos da estrutura.

O COMSOL foi utilizado para calcular o coeficiente de absorção no sentido para baixo (A^+) e para cima (A^-) para a faixa de comprimento de onda entre 400 e 800nm, que foram utilizados no MATLAB para calcular o valor da função objetivo (Eq. 32) em cada indivíduo.

As buscas foram realizadas em dois cenários, com 5 e com 10 seções, com cada seção contendo tamanho de até 100nm e tamanho do dielétrico entre 10 e 90nm. Para as buscas em questão, em cada uma das 100 rodadas, foram utilizados 50 indivíduos por geração com critério de parada de 50 gerações.

A estrutura encontrada que apresentou os melhores resultados nas rodadas com $n = 5$ é apresentada na Figura 23, na qual é possível verificar a ocorrência de três picos de razão de contraste de assimetria (A^+/A^-). A maior razão de contraste é observada em $\lambda = 664\text{nm}$ onde A^+ é quase 26 vezes maior que A^- . Os resultados para este dispositivo, contendo as absorções no sentido para cima e para baixo para cada um dos picos são sintetizados na Tabela 2.

A busca realizada com $n = 10$, cujos resultados são apresentados na Figura 24, na melhor estrutura encontrada, houve ocorrência de 5 picos de assimetria. Em $\lambda = 688\text{nm}$, observa-se $A^+/A^- = 28,4$, o maior encontrado para esta estrutura. Os resultados para este dispositivo são sintetizados na Tabela 3.

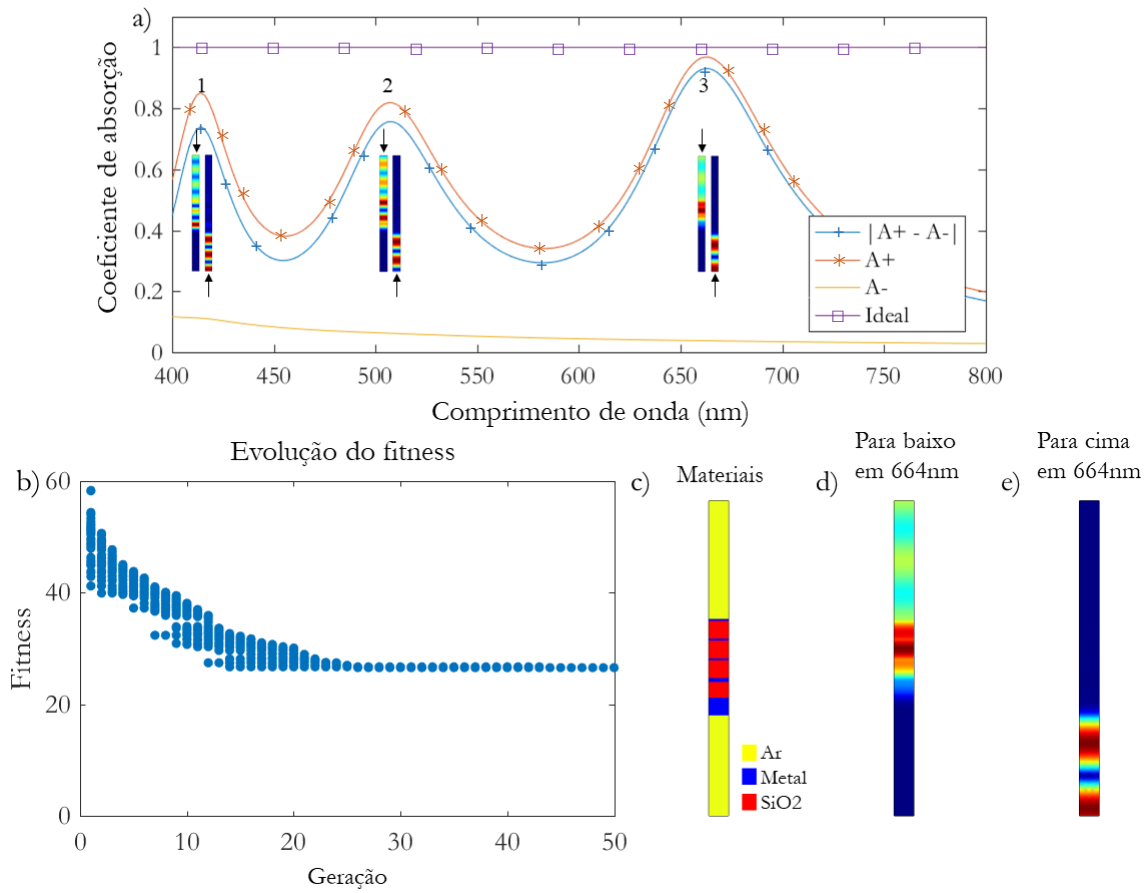


Figura 23. Resultados da melhor rodada de busca do AG para $n = 5$. O espectro de absorção para baixo, para cima, o contraste de assimetria e a assimetria ideal são mostrados em (a) respectivamente em azul, laranja, amarelo e roxo. A evolução da aptidão para esta rodada é apresentada em (b), que aponta claramente para convergência a partir da geração 25. A distribuição dos materiais utilizados em (c) tem ar, prata e sílica em amarelo azul e vermelho respectivamente. A distribuição do campo elétrico normalizado com direção para baixo (d), onde indica concentração de campo nas interfaces sílica-prata, enquanto na direção para cima (e) prevalece a reflexão.

Tabela 2. Síntese dos resultados para a melhor estrutura com $n = 5$.

Ponto	$\lambda(\text{nm})$	$A^+ - A^-$	A^+	A^-	A^+ / A^-
1	414	0,74	0,85	0,11	7,6
2	508	0,76	0,82	0,06	13,2
3	664	0,93	0,97	0,04	25,7

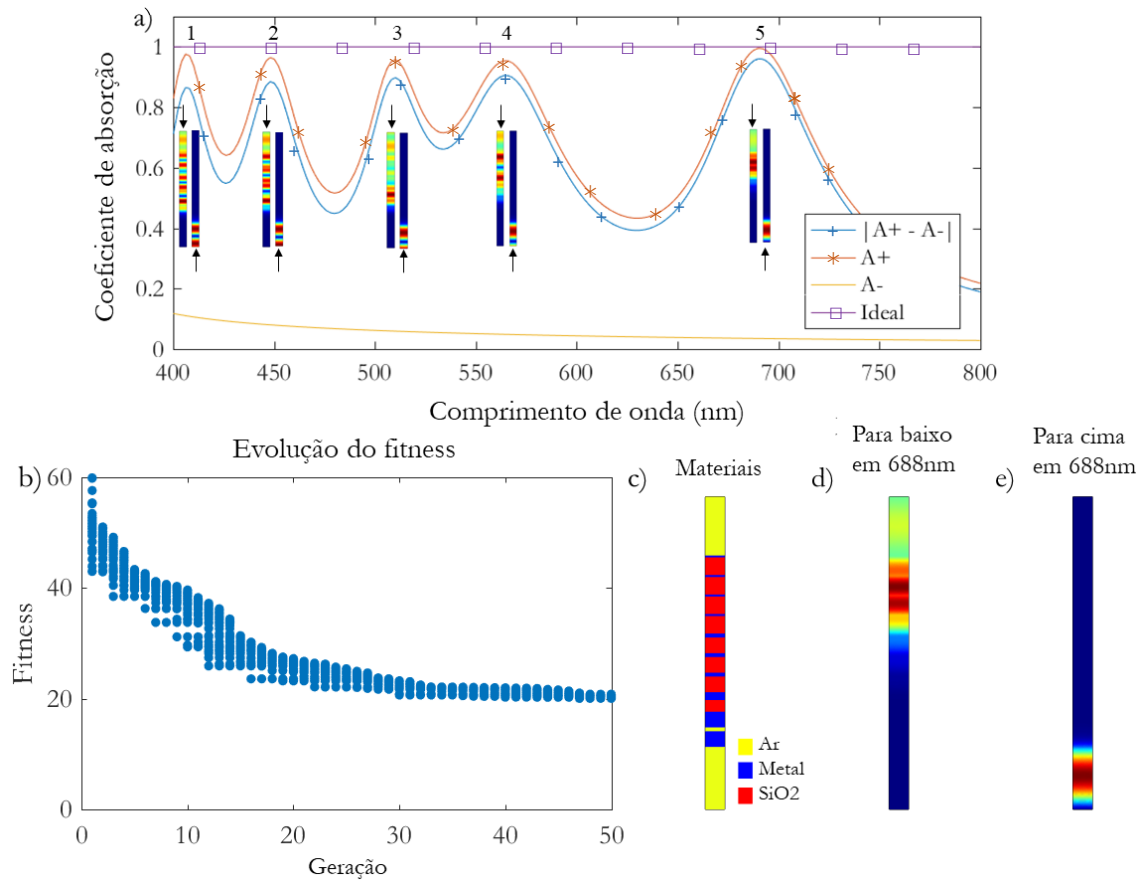


Figura 24. Resultados da melhor rodada de busca do AG para $n = 10$. O espectro de absorção para baixo, para cima, o contraste de assimetria e a assimetria ideal são mostrados em (a) respectivamente em azul, laranja, amarelo e roxo. A evolução da aptidão para esta rodada é apresentada em (b), que aponta claramente para convergência perto da geração 45. A distribuição dos materiais utilizados em (c) tem ar, prata e sílica em amarelo azul e vermelho respectivamente. A distribuição do campo elétrico normalizado com direção para baixo (d), onde indica concentração de campo nas interfaces sílica-prata, enquanto na direção para cima (e) prevalece a reflexão.

Tabela 3. Síntese dos resultados para a melhor estrutura com $n = 10$.

Ponto	λ (nm)	$A^+ - A^-$	A^+	A^-	A^+ / A^-
1	406	0,87	0,98	0,11	8,8
2	448	0,88	0,96	0,08	12,0
3	510	0,90	0,96	0,06	16,2
4	564	0,91	0,95	0,05	19,6
5	688	0,96	0,99	0,03	28,4

4 ABSORVEDOR BASEADO EM MATERIAL DE MUDANÇA DE FASE E NANOPARTÍCULAS DE OURO

Os absorvedores saturáveis são dispositivos não lineares vastamente utilizados para geração de pulsos ultracurtos [37]. Quando introduzidos em uma cavidade de laser, o absorvedor saturável assume o papel de um filtro de baixas potências, deixando passar, após a saturação, pulsos de potências mais elevadas. A absorção saturável é normalmente exibida por materiais em potências próximas a aquelas que causam dano óptico no próprio material. Neste estudo, são investigados dispositivos capazes de demonstrar absorção saturável em níveis de potência não destrutivos, para operação em regime pulsado de lasers de cavidade a fibra dopada com érbio.

A Figura 25 apresenta uma aplicação típica para um absorvedor saturável. A partir da interrupção abrupta da absorção no momento da saturação, provocada pelo absorvedor saturável (AS), o feixe de laser é interrompido. Neste momento, é iniciado o aumento dos níveis de energia dos átomos da fibra ativa e a emissão estimulada é reiniciada. O WDM tem a função de permitir acoplar o feixe de bombeamento em $\lambda = 980\text{nm}$ na direção da fibra ativa. A emissão da fibra ativa se propaga apenas pelo WDM e apenas no comprimento de onda específico de 1550nm na direção do controlador de polarização (CP). O CP permite alterar a polarização do feixe com o intuito de obter o travamento dos modos de propagação, e como consequência, o regime pulsado. O acoplador óptico (AO) permite realimentar o anel para que ocorra emissão estimulada na fibra dopada e também provê uma saída para o feixe de luz pulsada.

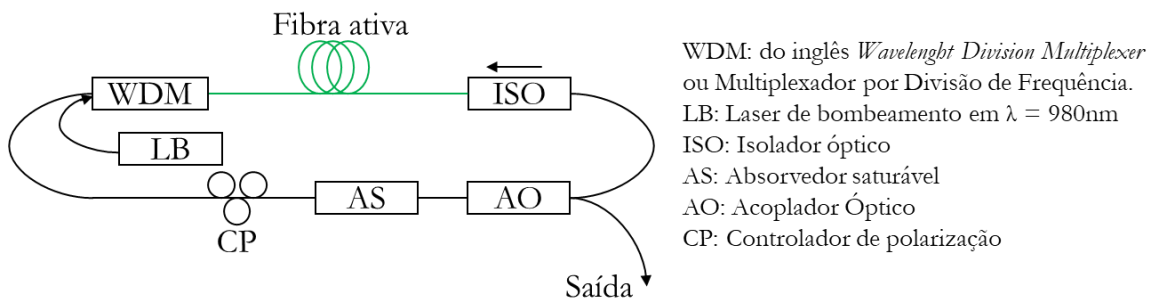


Figura 25. Arquitetura de um laser pulsado de cavidade a fibra dopada com érbio.

Um dispositivo absorvedor plasmônico saturável foi projetado neste trabalho baseado na aplicação da ressonância localizada de plasmon de superfície e no controle do índice de refração em materiais de mudança de fase, do inglês *Phase Changing Material* (PCM). A LSPR que acontece em um espaço confinado de um dielétrico entre duas interfaces

metálicas, eleva consideravelmente intensidade de campo na região, aumentando as perdas ôhmicas nos comprimentos de onda ressonantes. A ocorrência de LSPR depende fortemente da geometria e dos índices de refração dos materiais envolvidos.

Os PCM possuem índice de refração que depende da sua estrutura cristalina, que são tipicamente duas, a amorfa e a cristalina. A mudança de fase em um PCM é o fenômeno que possibilita a tecnologia dos CDs, DVDs e Blu-ray regraváveis e acontece através do aquecimento por um feixe luminoso na faixa do visível. A cristalização acontece através de um pulso luminoso de baixa intensidade de longa duração, já a amorfização é realizada através de um pulso curto de alta intensidade.

Neste trabalho, um dispositivo composto de camadas de telureto de germânio (GeTe), que é um PCM comumente utilizado na indústria, sílica, alumínio, silício e ouro foi projetado, fabricado e caracterizado. O dispositivo possibilitaria o controle do coeficiente de reflexão da estrutura a partir da modificação da fase da camada de GeTe. Estudos anteriores demonstraram que a modificação da fase da camada de GeTe pode ser obtida a partir de pulsos luminosos com potência na ordem de alguns miliwatts e duração de décimos de microssegundos [38].

Os resultados apresentados nesta seção foram obtidos em conjunto com os pesquisadores do grupo de pesquisa de óptica de campo próximo (*Optique de Champ Proche*, OCP), do laboratório Interdisciplinar Carnot de Borgonha (*Laboratoire Interdisciplinaire Carnot de Bourgogne*), da Universidade de Borgonha, em Dijon, na França, sob supervisão do professor Benoit Cluzel. A pesquisa foi proposta por Cluzel como parte inicial de um projeto maior, que envolve a utilização do dispositivo proposto dentro de uma cavidade de laser a fibra óptica.

A elaboração dos dispositivos foi realizada em dois processos distintos, a fabricação das camadas (SiO₂, Al, GeTe e Si) e a deposição das estruturas em Au (ver Figura 26). A primeira etapa foi realizada no complexo científico europeu MINATEC em Grenoble, em parceria com o OCP. A segunda, etapa de deposição das estruturas de ouro, foi realizada na sala limpa do ICB, ao qual o OCP possibilita livre acesso aos seus membros e pesquisadores visitantes. O processo de deposição de ouro para este projeto foi realizado por Jiyong Wang, pesquisador em pós-doutorado contratado pelo ICB.

A primeira iteração da geometria da camada de ouro do dispositivo fabricada foi proposta pelo colega Igor L. G. Souza, que realizou a simulação da estrutura apresentada na Figura 26. A caracterização da estrutura é apresentada neste trabalho e fundamenta a

necessidade para uma segunda rodada de simulações para a fabricação da segunda iteração das geometrias das metassuperfícies.

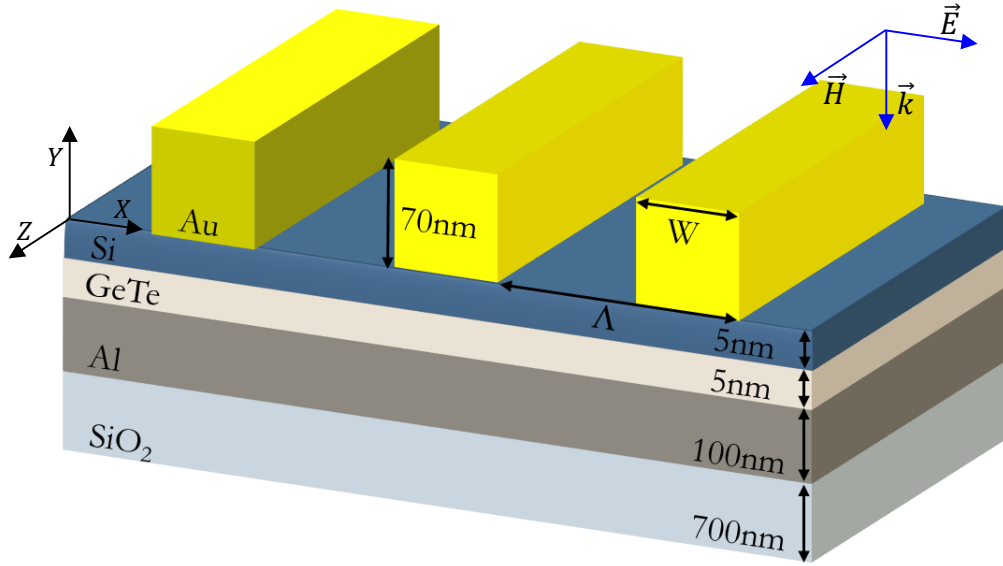


Figura 26. Representação da distribuição dos materiais e parâmetros de projeto da estrutura plasmônica.

As simulações das estruturas indicaram a presença de ressonância plasmônica em cada uma das grades fabricadas. A equipe tinha ideia de que os picos de ressonância das estruturas fabricadas deveriam ter um deslocamento para o azul ou para o vermelho em relação ao simulado e, portanto, para obter ao menos uma estrutura com pico no comprimento de onda de 1550nm, as estruturas escolhidas fabricação tinham pico de ressonância diferente de 1550nm. As simulações foram realizadas na faixa de comprimento de onda entre 1300 e 1700nm.

Os espectros de reflectância das estruturas simuladas são apresentados na Figura 27, na qual é possível verificar vales que correspondem a picos de absorção. As distribuições espaciais dos campos magnéticos (o valor absoluto da parte real da componente fora do plano Z), na Figura 28, possibilita verificar o adensamento do campo na região entre o Au e o Al nos picos de absorção. A presença de ressonância na região entre 1350 e 1400nm não é estritamente decorrente do aparecimento de excitação plasmônica. Na Figura 28 (a) e (b) é possível verificar que existe intensidade de campo magnético fora da região entre os metais, que seriam modos excitados nas paredes externas das estruturas de Au.

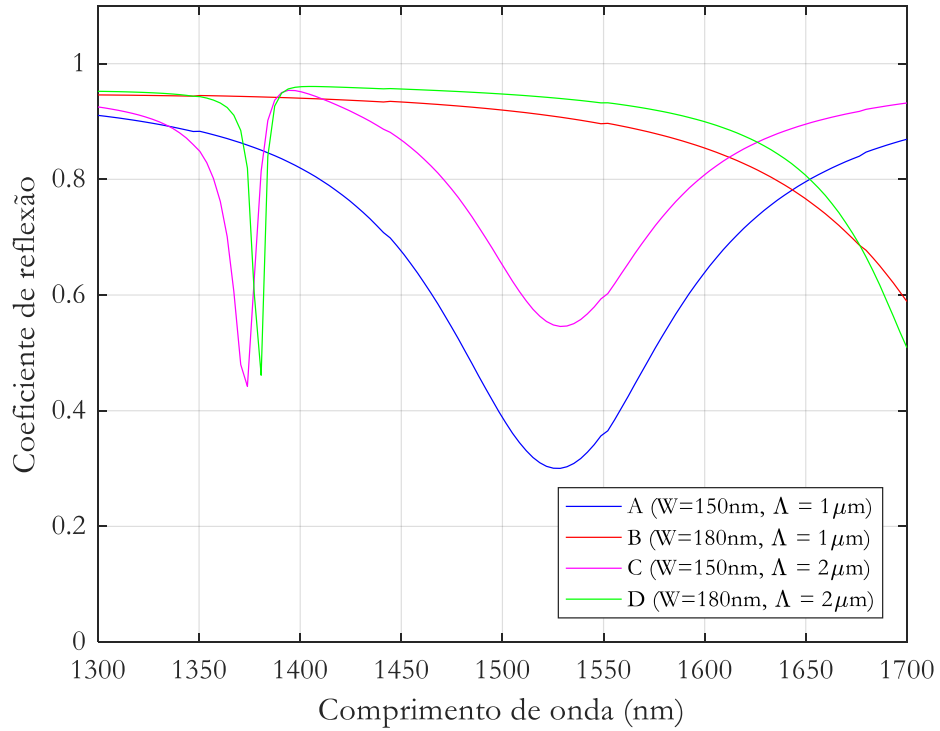


Figura 27. Espectro de reflexão para o modo TM simulado.

A comparação entre os resultados experimentais e aqueles simulados não é trivial de ser realizada, à medida que a simulação numérica admite geralmente apenas uma polarização. É possível, no entanto, aplicar o teorema da superposição quando o problema é linear. O dispositivo em questão, por ser baseado em excitação plasmônica, e consequentemente envolver perdas, torna a superposição incerta. Uma forma interessante de obter validação experimental da estrutura seria a de utilizar um feixe com o mesmo estado de polarização daquele simulado, o que não foi possível com os recursos disponíveis.

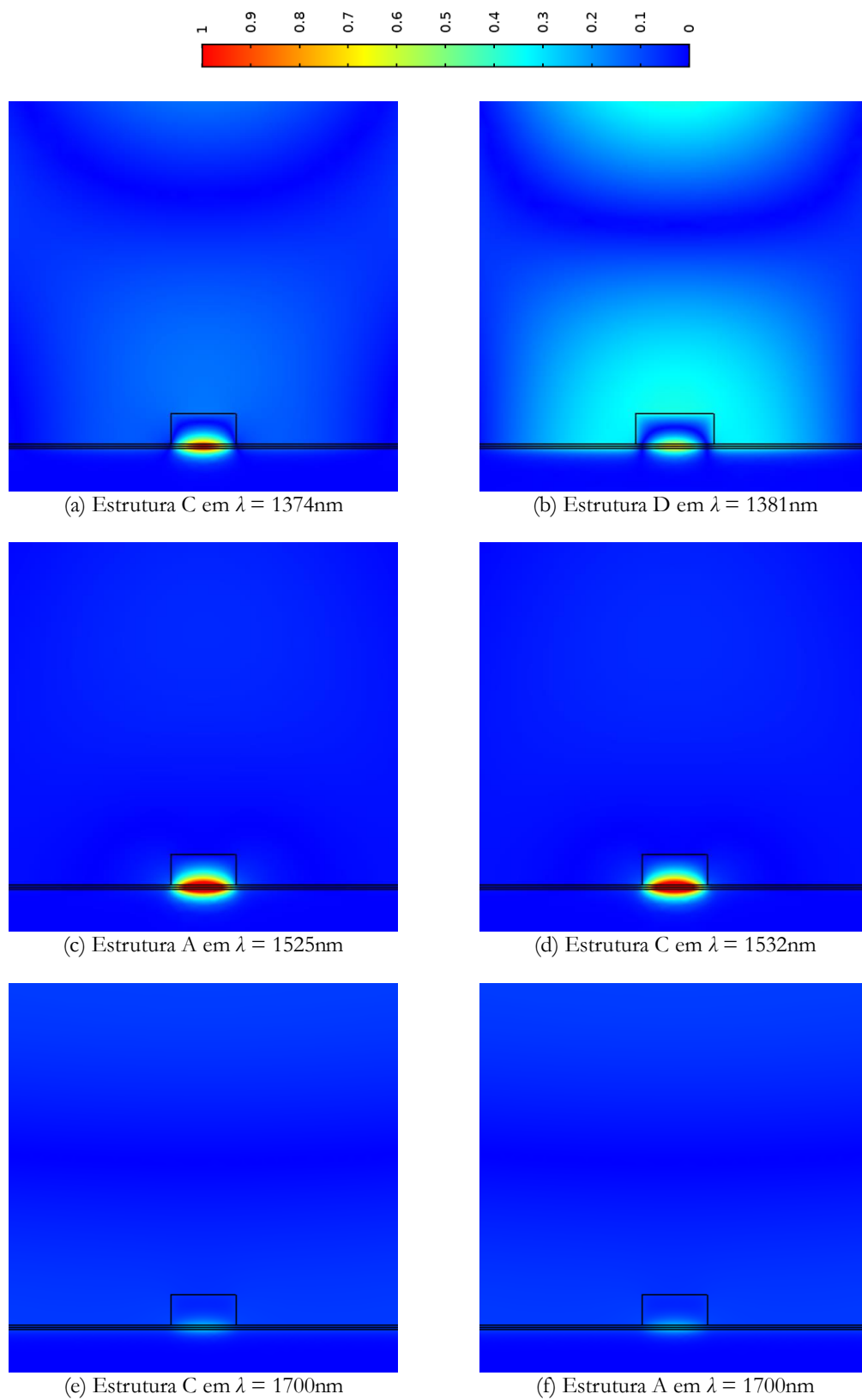


Figura 28. Distribuição espacial do campo magnético das estruturas simuladas nos pontos de LSPR.

4.1 Procedimento para deposição das nanopartículas de ouro

O processo de deposição da metassuperfície, cujo fluxograma é apresentado na Figura 29, é iniciado com a limpeza, Fig. 27 (a), para a remoção de partículas orgânicas do substrato com uma solução “Piranha”, composto por ácido sulfúrico e peróxido de hidrogênio, em banho ultrassônico.

Após a limpeza, é realizada a deposição, Fig. 27 (b), por rotação de polimetil metacrilato (PMMA) 50K a 5000 rpm durante 60 segundos, seguida de cura a 150°C por 3 minutos. Uma segunda camada de PMMA 200K é depositada, Fig. 27 (c), também seguida de cura. Uma terceira camada é depositada, Fig. 27 (d), desta vez por um polímero condutor (Electra 92 da ALLRESIST GmbH) para evitar acumulação de cargas durante o processo de exposição ao feixe eletrônico.

O substrato é então introduzido no equipamento de litografia, Fig. 27 (e), para ser exposto ao feixe eletrônico com os padrões desenhados no projeto das estruturas. As regiões do PMMA que foram expostas são reveladas pelo AR 600-56 da ALLRESIST, Fig. 27 (f), em seguida submetidas à solução tampão de álcool isopropílico para interromper a revelação do PMMA que forma as estruturas.

A amostra, a partir de então, possui as geometrias desejadas desenhadas em PMMA, deixando exposta a camada de sílica na região onde o ouro será depositado. Após verificação em microscópio de campo escuro, verifica-se que a amostra está pronta para a deposição das estruturas metálicas.

O processo de deposição física de vapor (PVD), Fig. 27 (g), é utilizado para deposição de uma camada fina de 2nm de cromo sobre a superfície da amostra, que tem a função de servir como camada de aderência entre o ouro e a sílica. O ouro é, em seguida, depositado sobre toda a superfície da amostra.

Após a deposição dos metais, a amostra segue para imersão em solução de acetona durante dois dias, Fig. 27 (h), para dissolução e remoção da camada de PMMA, que leva consigo o ouro indesejado depositado sobre o PMMA em um processo conhecido como *liftoff*. As metassuperfícies estão então finalmente prontas para serem caracterizadas.

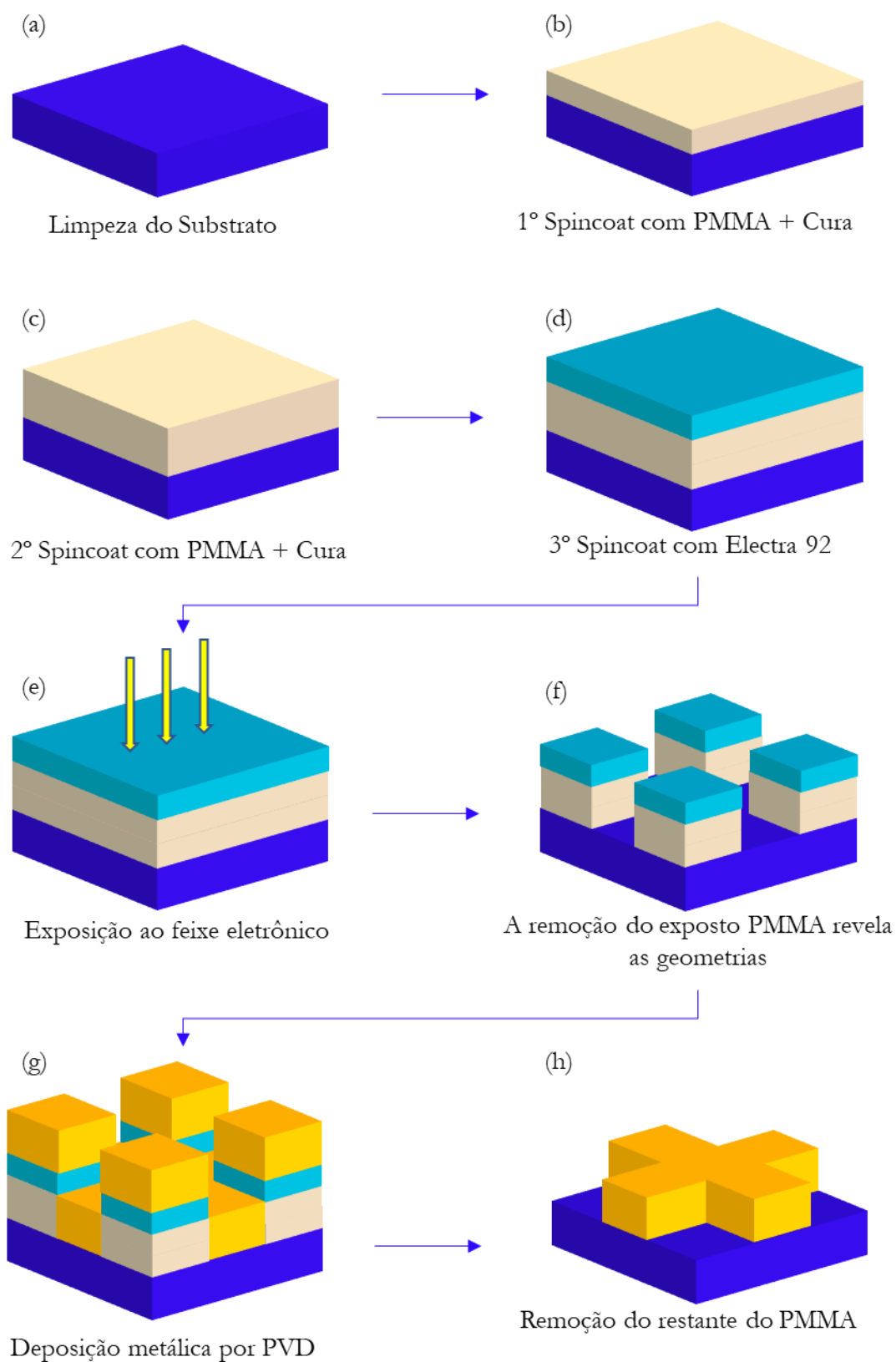


Figura 29. Fluxograma do processo de fabricação das metassuperfícies.

4.2 Caracterização estrutura de mudança de fase sensível à polarização

A geometria das estruturas em ouro proposta na primeira iteração foi retangular, portanto, sensível à polarização. A excitação plasmônica acontece quando o campo magnético é paralelo às barras de ouro, modo TM, e depende dos parâmetros geométricos: periodicidade (A) e largura das barras de ouro (W). Cada estrutura tem dimensão total de $100 \times 100 \mu\text{m}$ e cada barra de ouro tem comprimento de $10 \mu\text{m}$.

O feixe luminoso usado para caracterização é guiado por uma fibra monomodo, que tem diâmetro de núcleo de $10 \mu\text{m}$, ou seja, 10 vezes menor que o tamanho das estruturas. Quatro diferentes estruturas foram fabricadas com parâmetros expressos na Tabela 4. As estruturas fabricadas são exibidas na Figura 30.

Tabela 4. Parâmetros geométricos das estruturas fabricadas da primeira iteração

	A	W
A	$1 \mu\text{m}$	150nm
B	$1 \mu\text{m}$	180nm
C	$2 \mu\text{m}$	150nm
D	$2 \mu\text{m}$	180nm

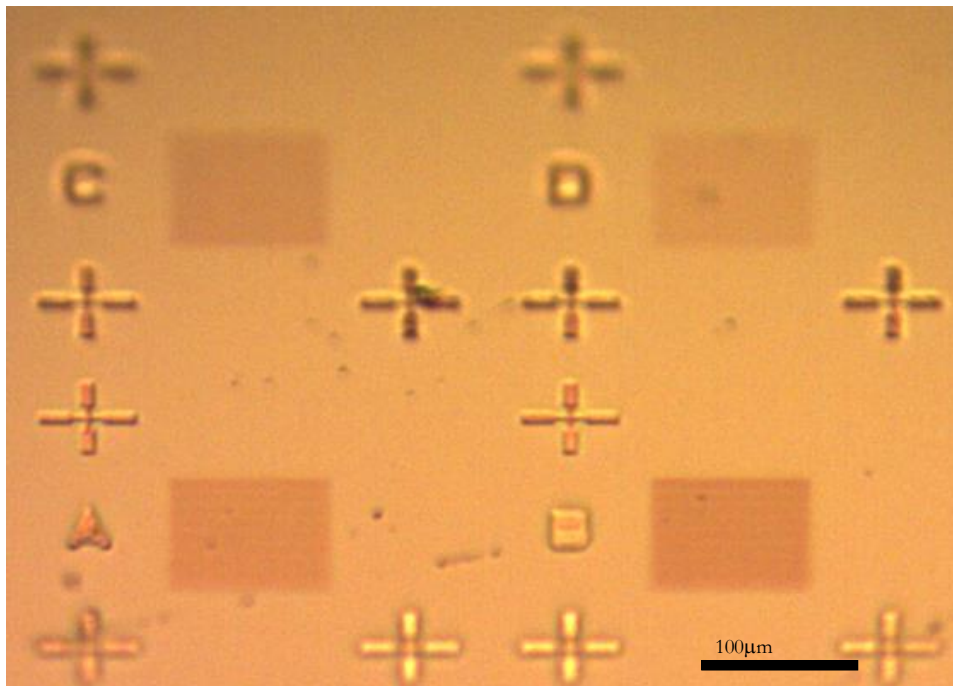


Figura 30. Estruturas fabricadas da primeira iteração. As letras que indicam os dispositivos e outras marcações auxiliam na localização das estruturas na amostra.

As medições das propriedades ópticas das estruturas fabricadas foram realizadas utilizando uma fonte de supercontinuum (400 - 2000nm), não polarizada. O laser tem saída na configuração de espaço livre, no entanto, o experimento foi realizado com fibras. Foi

necessário, portanto, montar um *setup* para acoplar o feixe em espaço livre para a fibra monomodo. Um divisor de feixe polarizador (PBS) foi utilizado antes do acoplador para fibra monomodo com a intenção de guiar apenas uma polarização. O setup mostrado na Figura 31 contém uma caixa preta que serve para bloquear eventuais reflexões do feixe de laser, provocados por filtros (colocados no interior da caixa). Após a otimização do acoplamento, foi adicionado ao caminho óptico um filtro passa altas para eliminar componentes da faixa do visível.

O setup experimental para microposicionamento dos guias de entrada e saída sobre as estruturas plasmônicas é apresentado na Figura 32 e 28. O posicionamento da fibra de entrada é realizado por um estágio mecânico e piezoelétrico e a fibra de saída é posicionada por um estágio puramente mecânico. O posicionamento da amostra é realizado por três estágios controlados por motores de passo com precisão micrométrica.

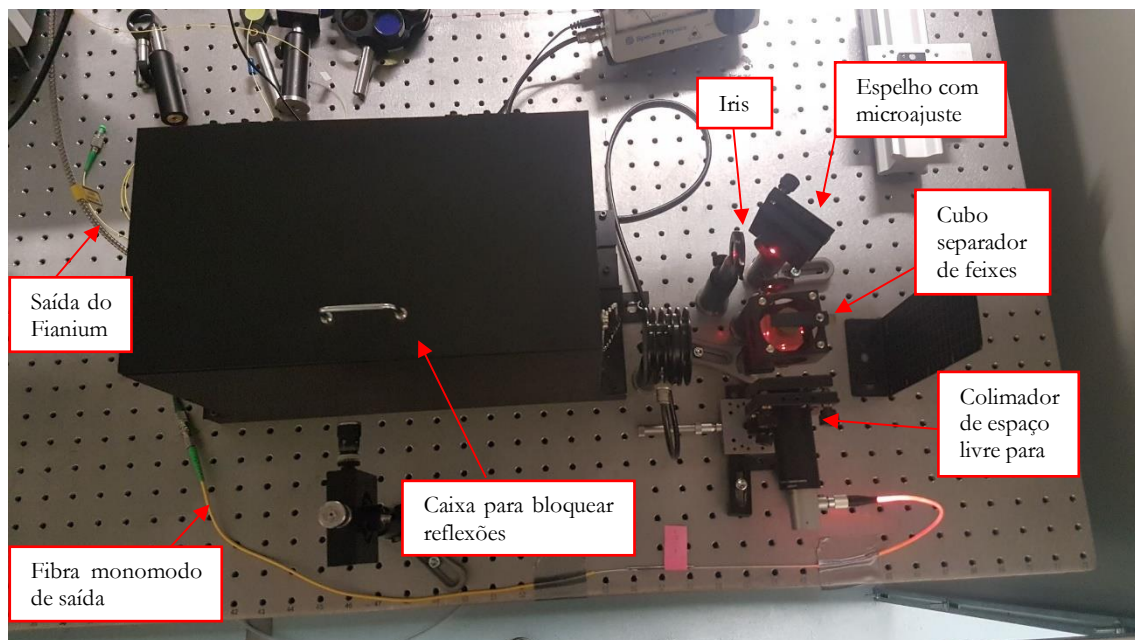


Figura 31. Setup experimental para acoplamento espaço livre – fibra do Laser de Supercontinuum Fianium. Por ser um laser de espaço livre (cabo prateado), foi necessário utilizar um acoplador colimador para a fibra monomodo.

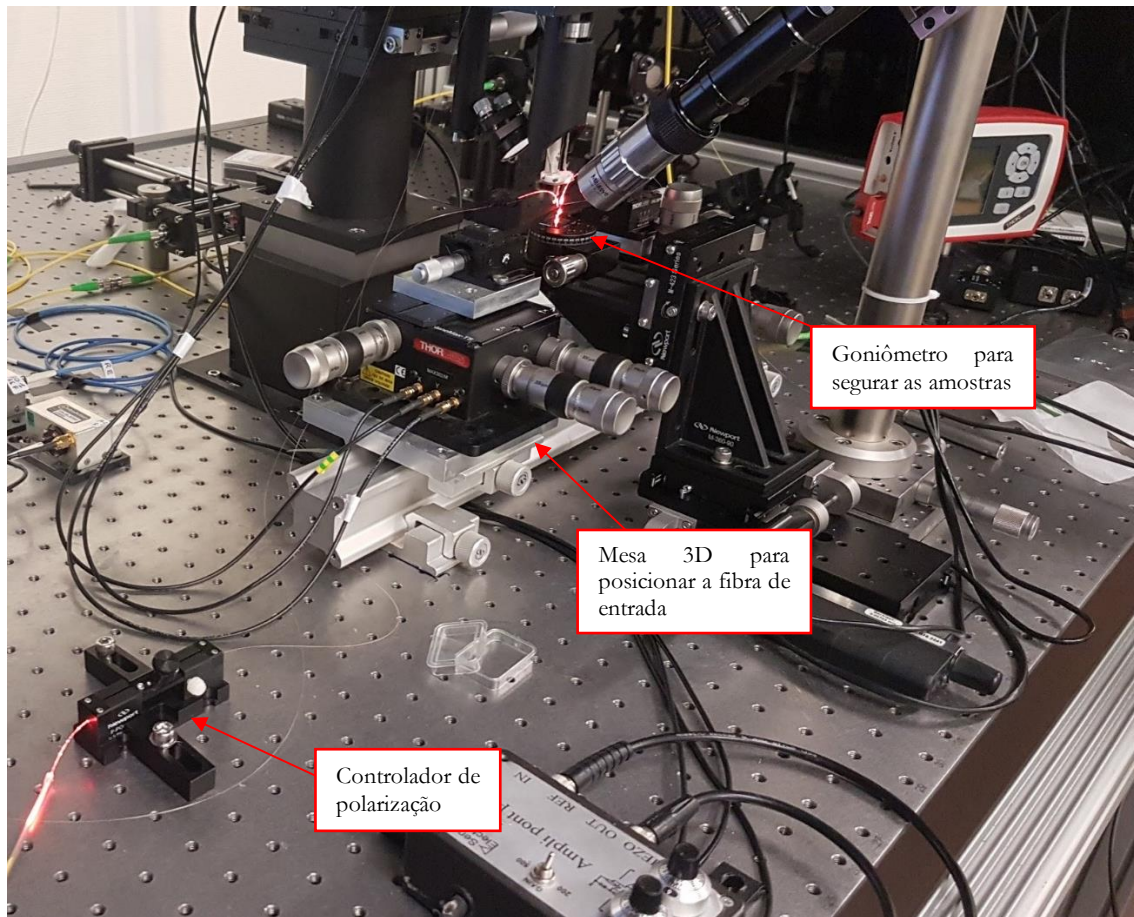


Figura 32. Setup experimental para microposicionamento dos guias de entrada e saída sobre as estruturas plasmônicas. O posicionamento da fibra de entrada é realizado por um estágio mecânico e piezoelétrico e a fibra de saída é posicionada por um estágio puramente mecânico. O posicionamento da amostra é realizado por três estágios controlados por motores de passo.



Figura 33. Detalhe da mesa de microposicionamento contendo a amostra com as estruturas, fibras de entrada e saída do feixe óptico. O feixe gerado pelo laser de supercontinuum também possui componentes na faixa do visível.

Devido ao comprimento da fibra do ponto de coleta ao ponto de entrega na amostra (bobina de 100m), a alta intensidade do feixe na coleta ($\sim 15\text{mW}$ em 1550nm) e a característica pulsada do laser de supercontinuum, efeitos de rotação de polarização não linear ao longo da propagação na fibra inserem novamente as componentes de polarização que foram removidas. Este efeito introduz um erro de medição que foi desprezado, por haver diferença significativa entre as polarizações nas medições realizadas em cada orientação (as estruturas foram medidas na vertical e na horizontal).

A diferença entre as medições obtidas em cada orientação seria maior se o setup experimental pudesse eliminar uma das polarizações no ponto de entrega do feixe (sobre a amostra). O feixe de luz branca incide com ângulo de 10° (com a normal da superfície da amostra) sobre a estrutura em teste e parte da luz refletida é acoplada em um modo guiado pela fibra de saída, que também tem ângulo de 10° .

Para a obtenção do espectro refletido, a fibra de saída é conectada a um analisador de espectro óptico (OSA), ANRITSU MS9710B, que tem banda de operação de $0,6$ a $1,75\mu\text{m}$. Antes de realizar a medição da estrutura, espectro de referência é tomado em uma região sem deposição de estruturas de ouro, próximo às estruturas, como mostrado na Figura 34. Os sinais de referência, exibidos em Figura 35, são utilizados para normalizar os espectros de reflexão de cada estrutura, eliminando, desta forma, as contribuições da característica espectral do laser e do *setup* experimental óptico.

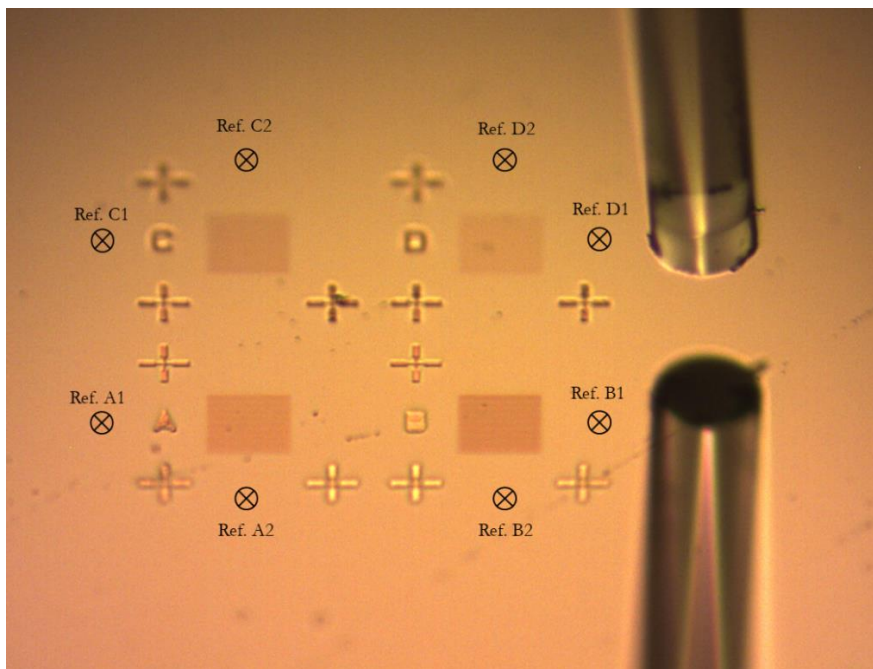


Figura 34. Estruturas plasmônicas e indicação das regiões onde foram medidas as referências utilizadas para normalização. A ponta da fibra óptica de entrada e sua reflexão também pode ser observadas na imagem.

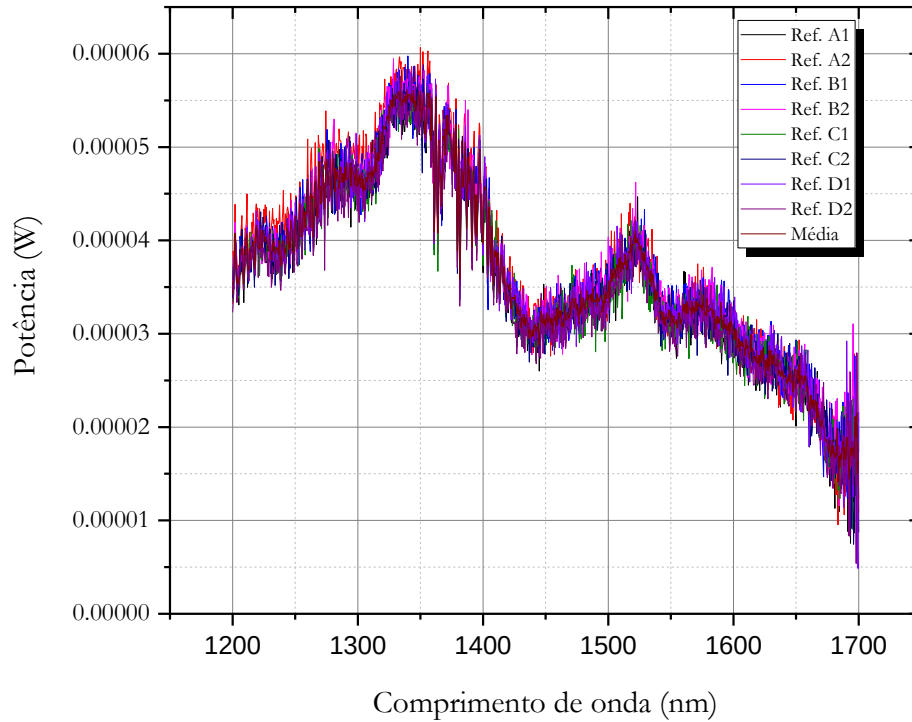


Figura 35. Espectro de reflexão obtido nas referências em torno das estruturas plasmônicas.

A incerteza sobre o estado de polarização da onda incidente levou à necessidade da realização de quatro medições em cada estrutura. As estruturas foram medidas no sentido vertical e horizontal, e para cada orientação o estado de polarização foi alterado utilizando um controlador de polarização (CP) para obter a máxima e a mínima reflexão possível.

Assume-se que o estado de polarização que leva à máxima reflexão corresponde ao modo TE, aquele que não provoca excitação plasmônica e, portanto, causa menor absorção. Por outro lado, o estado de polarização que causa maior absorção corresponde ao modo TM devido à excitação plasmônica.

O comportamento de maior interesse é aquele apresentado pelas envoltórias dos dados brutos, em azul e em vermelho forte, que trazem o espectro de reflexão do dispositivo para os modos TE e TM. A presença de pontos da envoltória que são maiores que a unidade de reflexão não é, naturalmente, um efeito real, tratando-se de um artefato do algoritmo da envoltória e deve ser desconsiderado.

Os espectros de reflexão obtidos experimentalmente, apresentados na Figura 36, demonstraram comportamento similares aos simulados para as medições realizadas com orientação horizontal, no modo que foi assumido como TM (linhas em vermelho que indicam as envoltórias inferiores). A estrutura que apresentou comportamento mais

interessante foi a “A”, que apresentou pico de ressonância na região perto do comprimento de onda de 1550nm, tanto nos resultados experimentais quanto nos resultados numéricos.

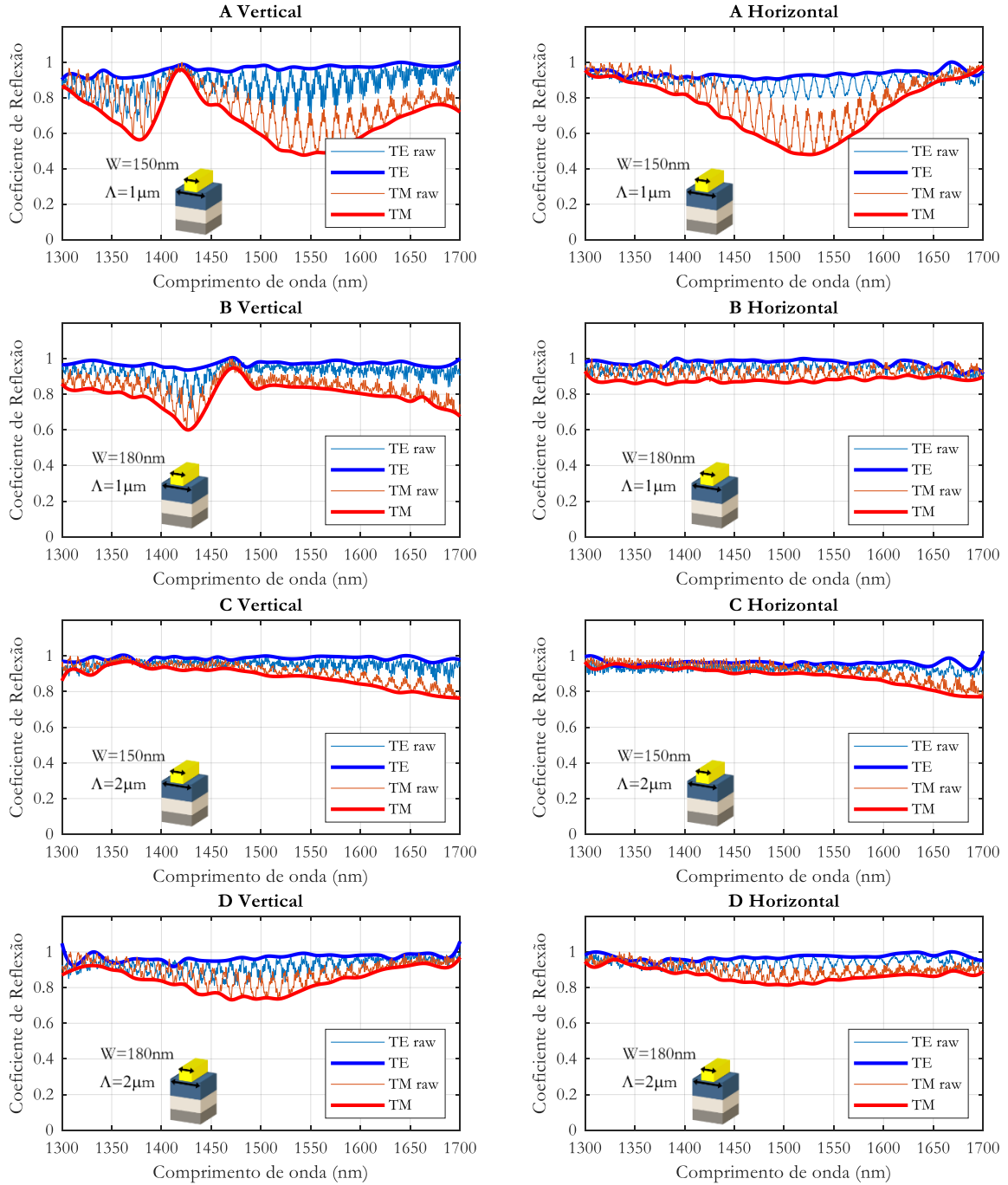


Figura 36. Espectro de reflexão medido obtido a partir do setup com laser supercontinuum para as estruturas A, B, C e D, com orientação vertical e horizontal.

Os dados de reflexão obtidos experimentalmente apresentam padrões oscilatórios que trouxeram dúvidas quanto à sua origem física. Os dois padrões observados, melhor visualizados na Figura 37, apresentam periodicidade em torno de 2nm e 13nm e podem ter

origem em modos excitados nas camadas de GeTe e Si entre o Au e o Al (ver Figura 26). Para investigar com maior profundidade estas oscilações, seria necessário ensaiar outros dispositivos com camadas de GeTe e Si distintas, utilizando a mesma fonte. Estes padrões, no entanto, não causam impacto na aplicação pretendida da estrutura, que é de absorver ao máximo em 1550nm, e são causadas por um efeito combinado das grades com o laser de supercontinuum (que é pulsado), que possui um estado de polarização desconhecido.

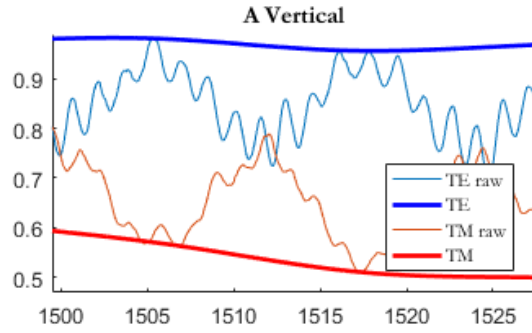


Figura 37. Detalhe do espectro de reflexão da estrutura A na vertical.

A estrutura “A” foi aquela que apresentou melhor concordância entre os dados numéricos e experimentais. Os espectros de reflexão, apresentados na Figura 38, indicam ressonância plasmônica com pico em 1525nm tanto para a estrutura simulada quanto para a fabricada.

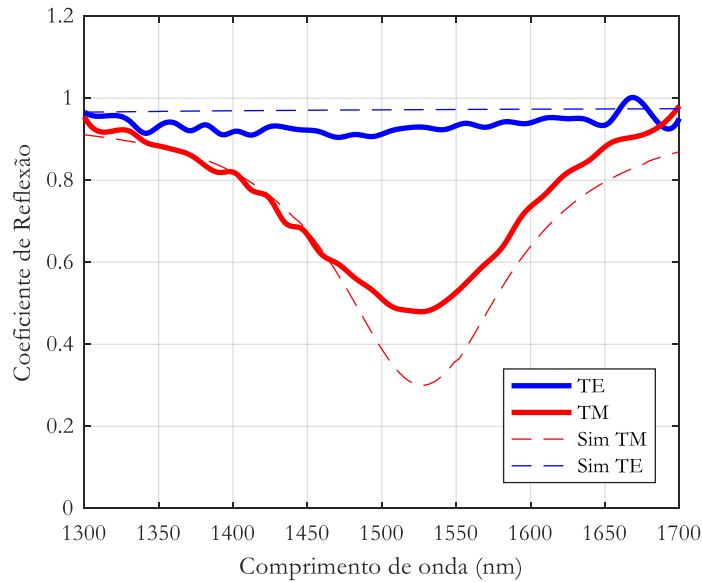


Figura 38. Comparação entre os resultados experimentais e numéricos para a estrutura A.

4.3 Caracterização óptica da mudança de fase

A camada depositada de GeTe tem fase inicial amorfa e pode ser cristalizada por um pulso luminoso que eleve a temperatura do material até acima da temperatura de fusão (T_F) que é em torno de 600K. Ao cessar o pulso, o material esfria rapidamente sem dar chance de ocorrer formação de redes cristalinas, fazendo com que material permaneça no estado amorfo. A cristalização pode ser realizada ao levar a temperatura do material entre a temperatura de cristalização (T_C), em torno de 400K, e da T_F (Figura 39).

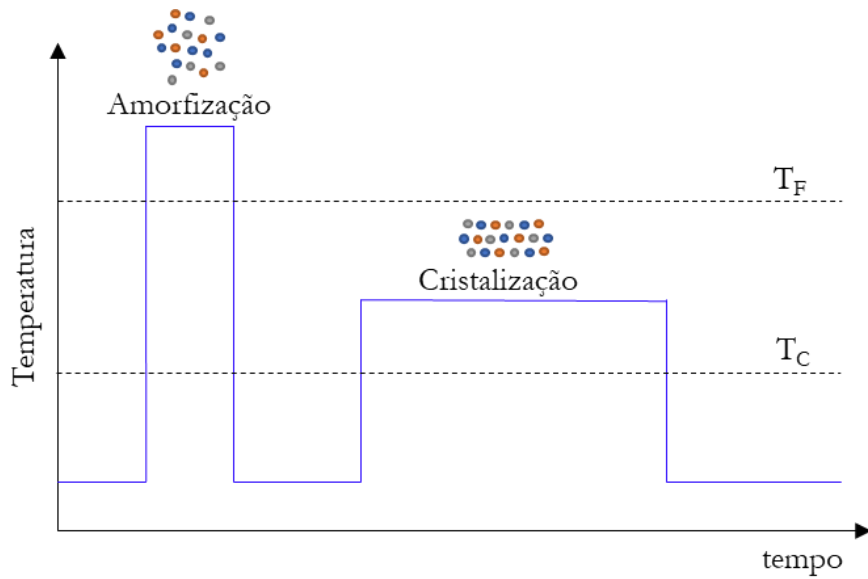


Figura 39. Cristalização e Amorfização de uma camada GeTe em função da temperatura.

A cristalização da camada de GeTe modifica o seu índice de refração de forma significativa. A componente real do índice de refração, em $\lambda = 1500\text{nm}$, passa de aproximadamente 7,3 para 4,1 (ver Figura 40), de forma que as respostas ópticas da estrutura são modificadas também consideravelmente. A diferença entre os índices de refração entre o estado amorfo e o estado cristalino para o GeTe é a sua característica mais importante para este estudo e que levou à sua escolha para utilização nos dispositivos propostos.

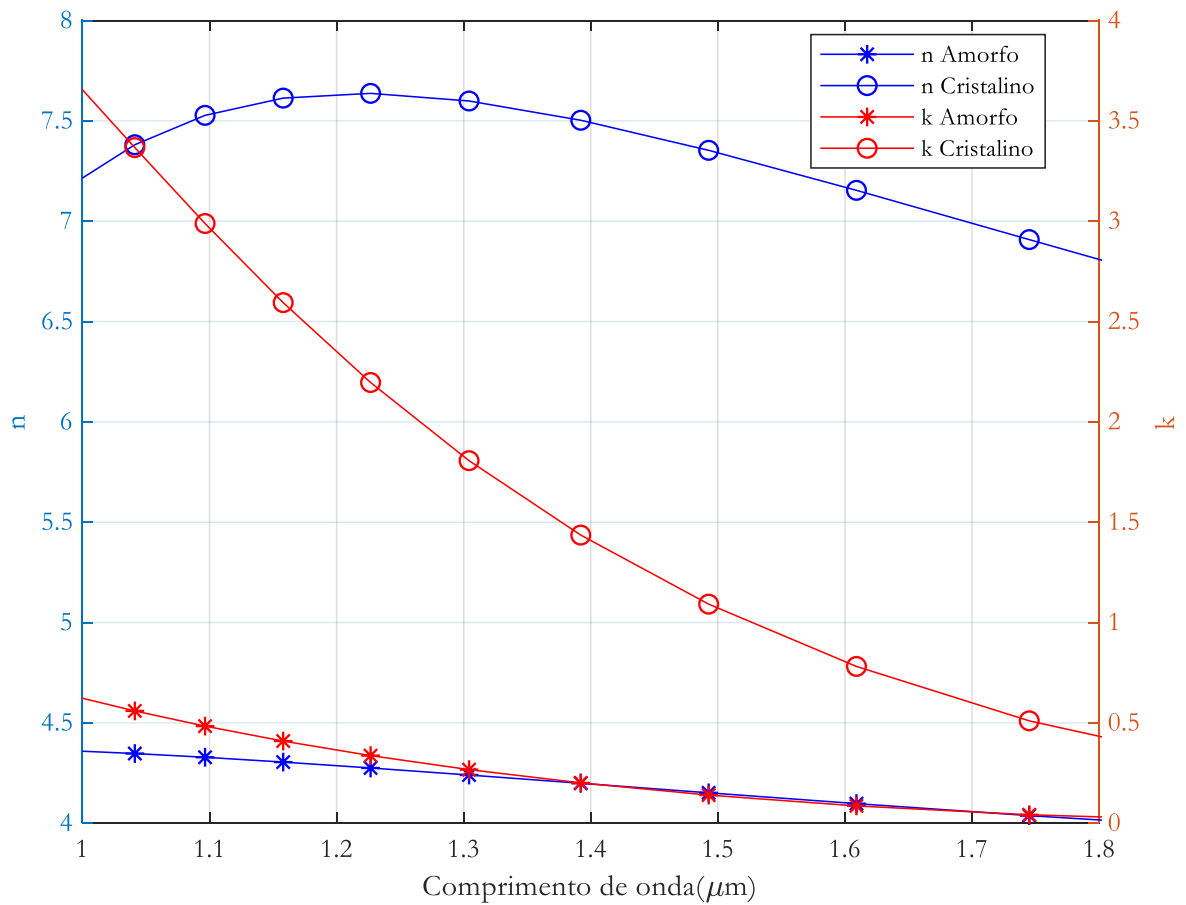


Figura 40. Índices real e imaginário para GeTe em estado amorfo e em estado cristalino.

O setup experimental necessário para realizar ambas transições (amorfização e cristalização) não foi possível de ser montado durante o tempo disponível devido à falta de laser pulsado com as especificações de potência de pico e largura de pulso necessárias. No entanto, foi possível realizar a cristalização da estrutura (sem posterior amorfização), utilizando o setup experimental montado com laser para caracterização de espalhamento Raman em espaço livre, que conta com possibilidade de varredura hiperespectral. Em ensaios preliminares para testar os parâmetros do setup para cristalização, três regiões do substrato foram expostas à um feixe de 633nm (regiões expostas exibidas na Figura 41, com diâmetro na superfície de aproximadamente 100nm e potências de 10mW, 50mW e 100mW em um pulso de largura temporal de 100ns.

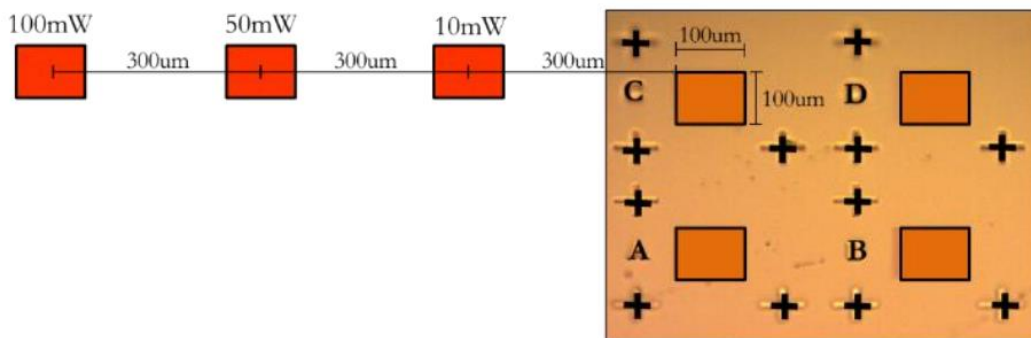


Figura 41. Regiões expostas à tratamento para ensaio de cristalização. As regiões em vermelho contêm apenas o substrato, sem qualquer estrutura de ouro.

Os espectros de reflexão das regiões expostas ao feixe, apresentados na Figura 42, foram medidos e neles é possível observar a modificação da resposta óptica em função da potência do óptica utilizada. Não foi estritamente possível afirmar que houve cristalização da camada de GeTe, apesar da mudança no espectro de reflexão. Interações mais complexas com os outros materiais que fazem parte do substrato podem eventualmente ter ocasionado a mudança da resposta óptica. No entanto, o tratamento realizado serviu como ponto de partida para a tentativa de cristalização das estruturas.

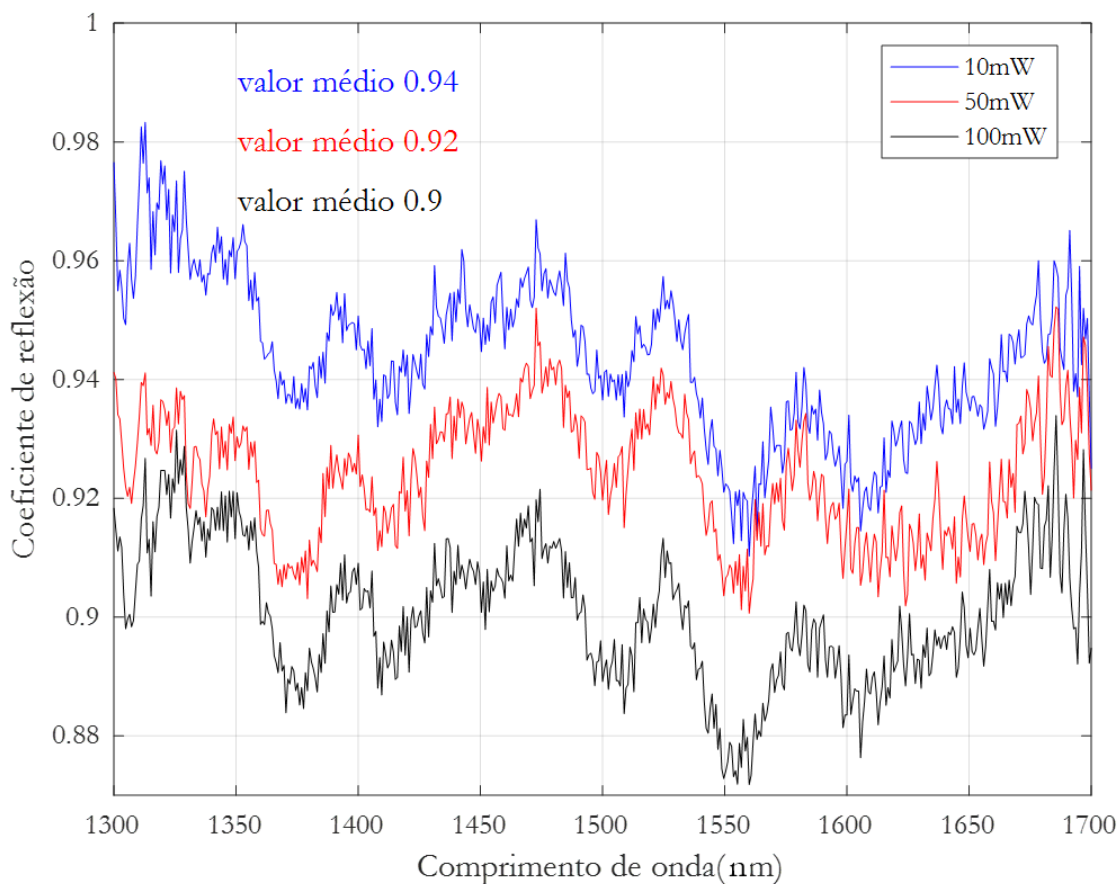


Figura 42. Espectro reflexão das regiões do substrato depois de submetidas à feixe luminoso com diferentes potências.

A estrutura “D” foi submetida ao mesmo processo de tratamento para cristalização. Na metodologia adotada, a intenção inicial foi de submeter estrutura à um feixe de 10mW, em seguida realizar as medições dos espectros de reflexão. O mesmo procedimento seria adotado para potência de 50mW e de 100mW, no entanto, o dispositivo foi destruído quando submetido à potência de 50mW.

A região do substrato submetida à tratamento não possuía estruturas de ouro. No tratamento da região onde o ouro é presente, a energia necessária para mudar a fase da camada de GeTe deveria ser menor, devido ao aumento da absorção causado pela presença de metal, que possui parte imaginária do índice de refração elevado, além da ocorrência de ressonância plasmônica. O aquecimento do metal levou à queima prematura da estrutura com potência de apenas 50mW. A estrutura depois de queimada pode ser vista na Figura 43.

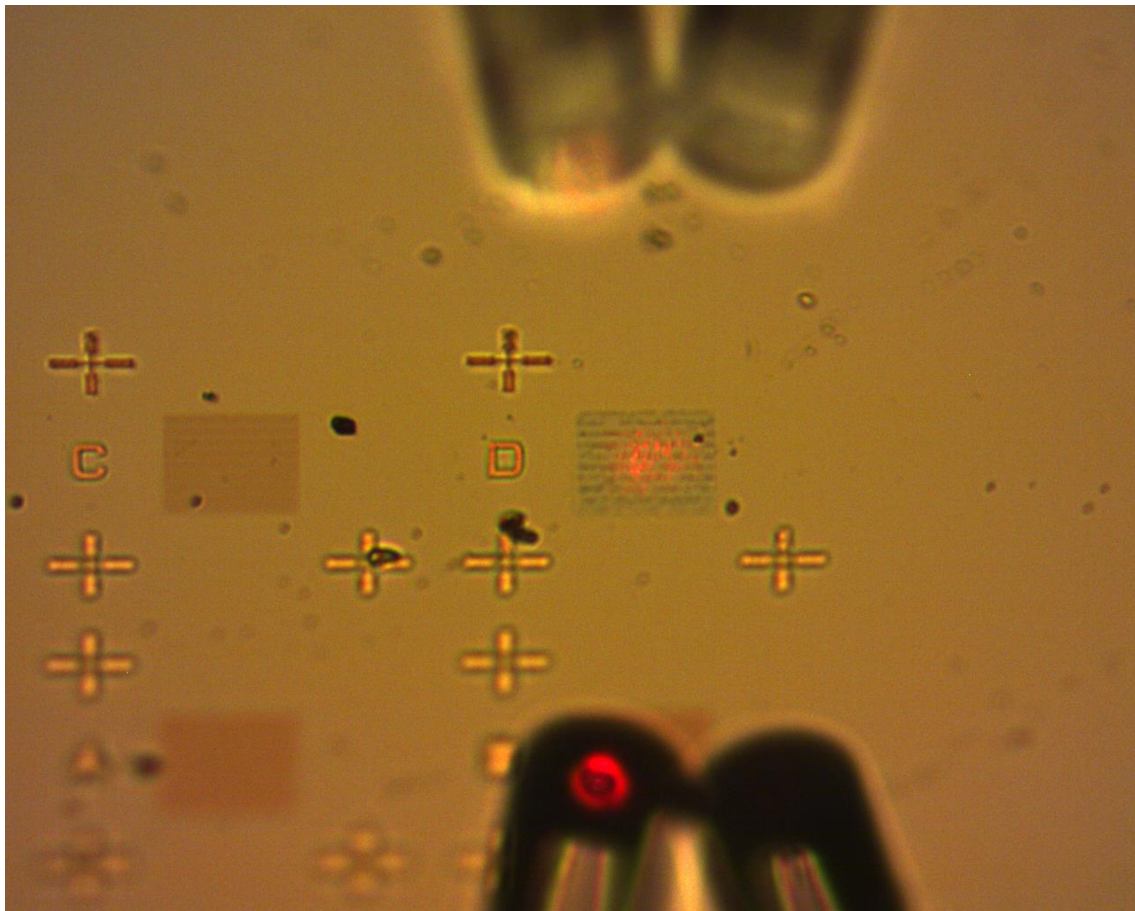


Figura 43. Estrutura “D” após tratamento com 50mW. É notável a modificação da coloração percebida na luz branca, que caracteriza a destruição das geometrias nanométricas de ouro.

Foi possível, obter, no entanto, a comparação entre o estado amorfo e aquele obtido depois do tratamento por 10mW (Figura 44). É possível notar mudança na ressonância

plasmônica para a esquerda (*blueshift*). A mudança foi sutil, o que indica que a mudança de estado de amorfo para cristalino não foi realizado de forma completa e, portanto, seria necessário utilizar outro método para realizar a cristalização. As outras estruturas desta amostra (“A”, “B” e “C”) não foram ensaiadas utilizando este método devido ao risco de derretimento das estruturas de ouro e ficaram disponíveis para análises posteriores.

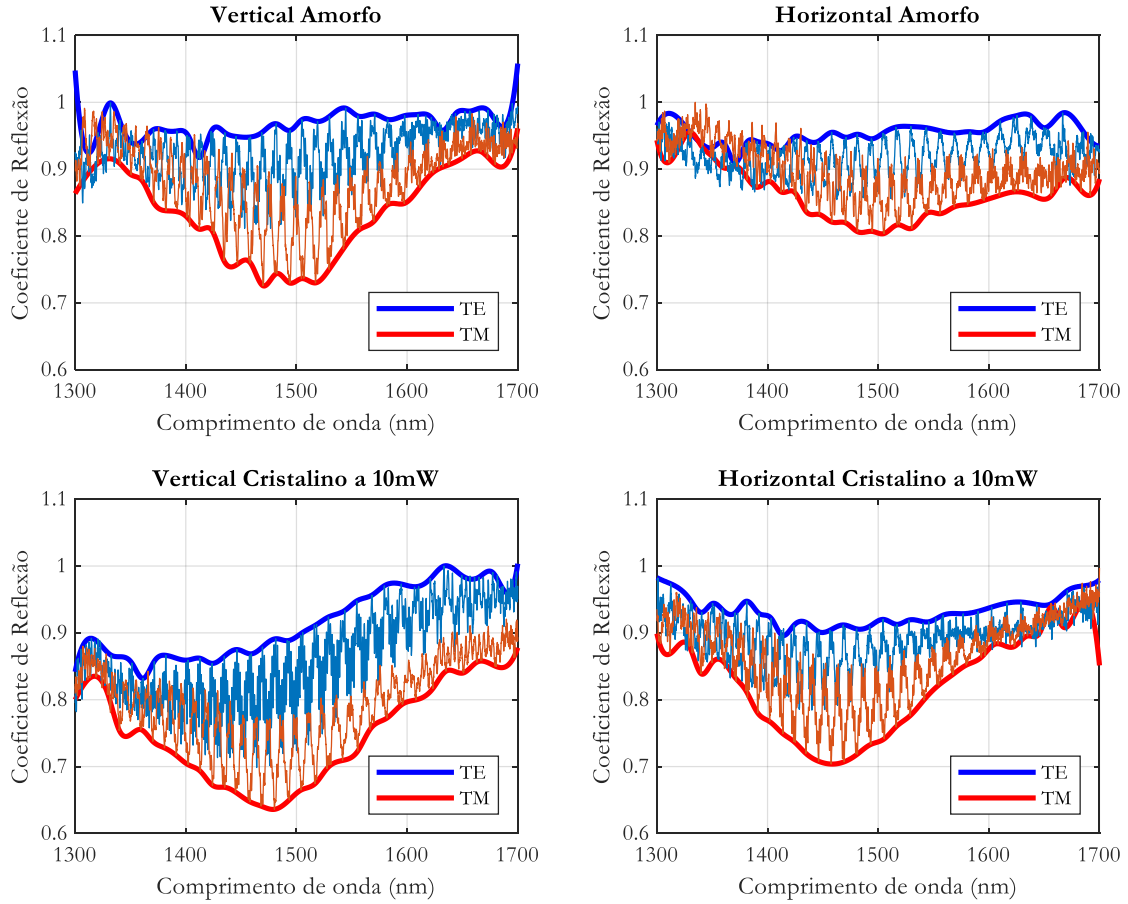


Figura 44. Espectro reflexão da estrutura “D” no estado amorfo e depois da cristalização à 10mW.

A continuação da investigação proposta no projeto ocorreu com o desenvolvimento de um novo conjunto de estruturas, que, desta vez, eliminassem a contribuição da orientação das estruturas com relação ao campo incidente, ou seja, fossem insensíveis à polarização. O projeto destas novas estruturas é tratado na seção seguinte.

4.4 Projeto e caracterização da segunda iteração do absorvedor plasmônico

A segunda iteração da metassuperfície absorvedora foi projetada para não ser sensível à polarização do campo incidente. As estruturas cilíndricas foram simuladas utilizando o MEF em modelo tridimensional com condições de contorno periódicas nas laterais, excitação de onda plana paralela ao plano de superfície do substrato. O objetivo das

estruturas de ouro é provocar modo de ressonância plasmônica no comprimento de onda de 1550nm. Para tal, algumas estruturas diferentes foram propostas.

O substrato utilizado foi o mesmo da primeira iteração: de baixo para cima, tem-se 700nm de Si, 100nm de Al, 5nm de GeTe e 5nm de SiO₂. As estruturas depositadas de ouro foram simuladas com altura de 50nm, no entanto, a altura real das estruturas fabricadas pode diferir consideravelmente (± 20 nm) a depender da calibração do sistema de deposição de vapor metálico. A representação da célula unitária e das amostras fabricadas podem ser vistas na Figura 45.

Os resultados numéricos mostram que “a pegada” da ressonância plasmônica, vista como uma depressão no espectro de reflectância, apresenta *redshift* com o aumento do diâmetro das estruturas de ouro, como pode ser visto na Figura 46 e na Figura 47. A intensidade da ressonância plasmônica também é maior em periodicidades menores.

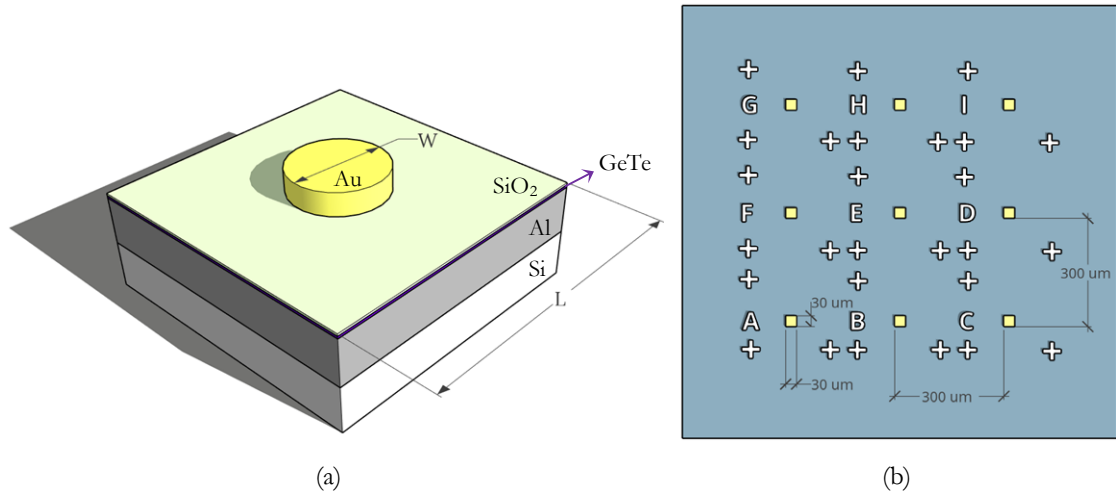


Figura 45. (a) Modelo tridimensional genérico da célula unitária simulada. (b) Modelo da amostra contendo nove estruturas com diâmetros diferentes: $W_A = 100$ nm, $W_B = 110$ nm, $W_C = 120$ nm, $W_D = 130$ nm, $W_E = 140$ nm, $W_F = 150$ nm, $W_G = 160$ nm, $W_H = 180$ nm e $W_I = 200$ nm.

Para escolher os parâmetros das estruturas de ouro a serem depositadas, que são diâmetro (W) e periodicidade (L), um estudo paramétrico com varredura de W e L foi realizado considerando o GeTe no estado amorfo (Figura 46) e no estado cristalino (Figura 47).

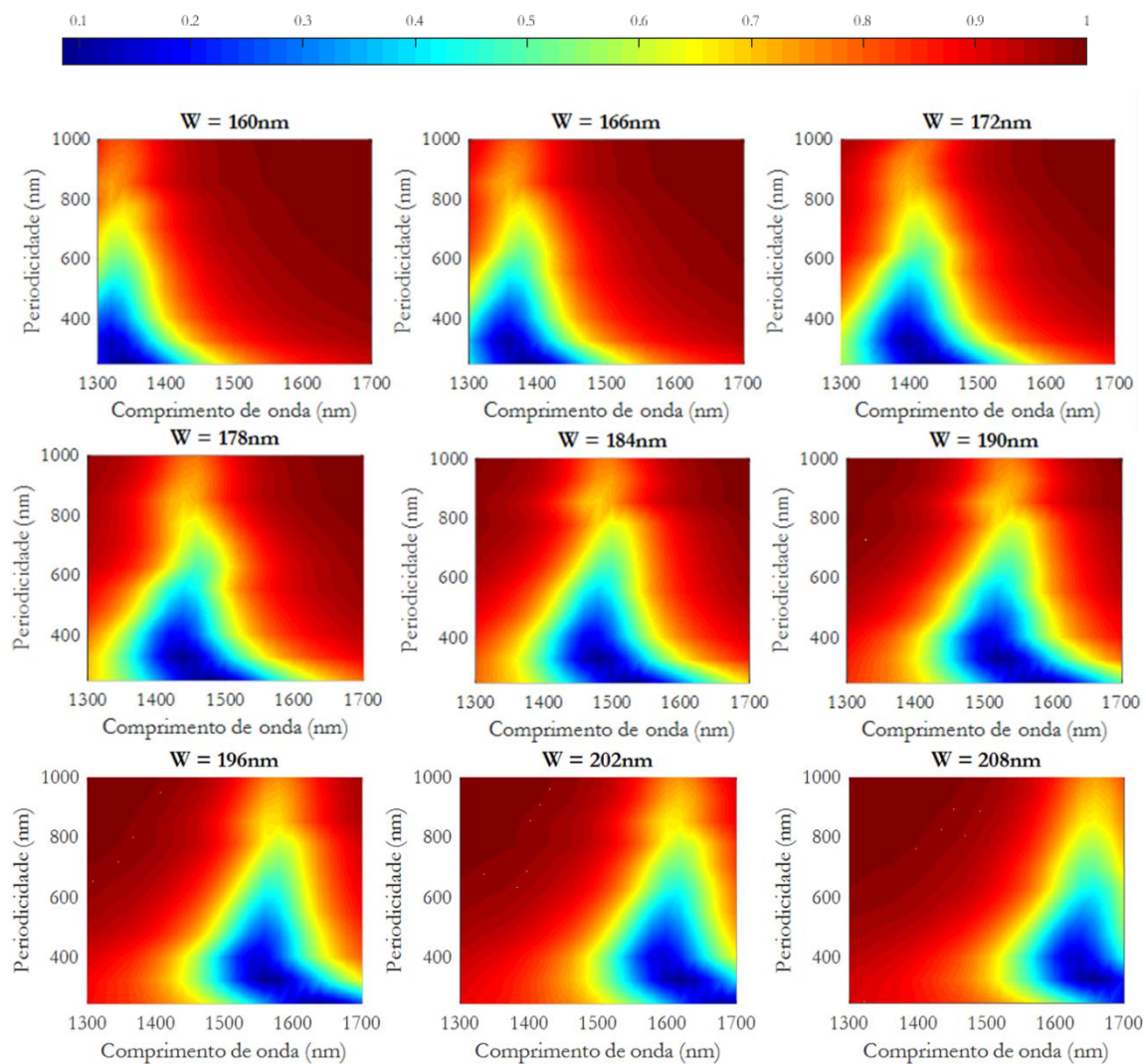


Figura 46. Espectros da reflectância simulado utilizando GeTe no estado amorfo.

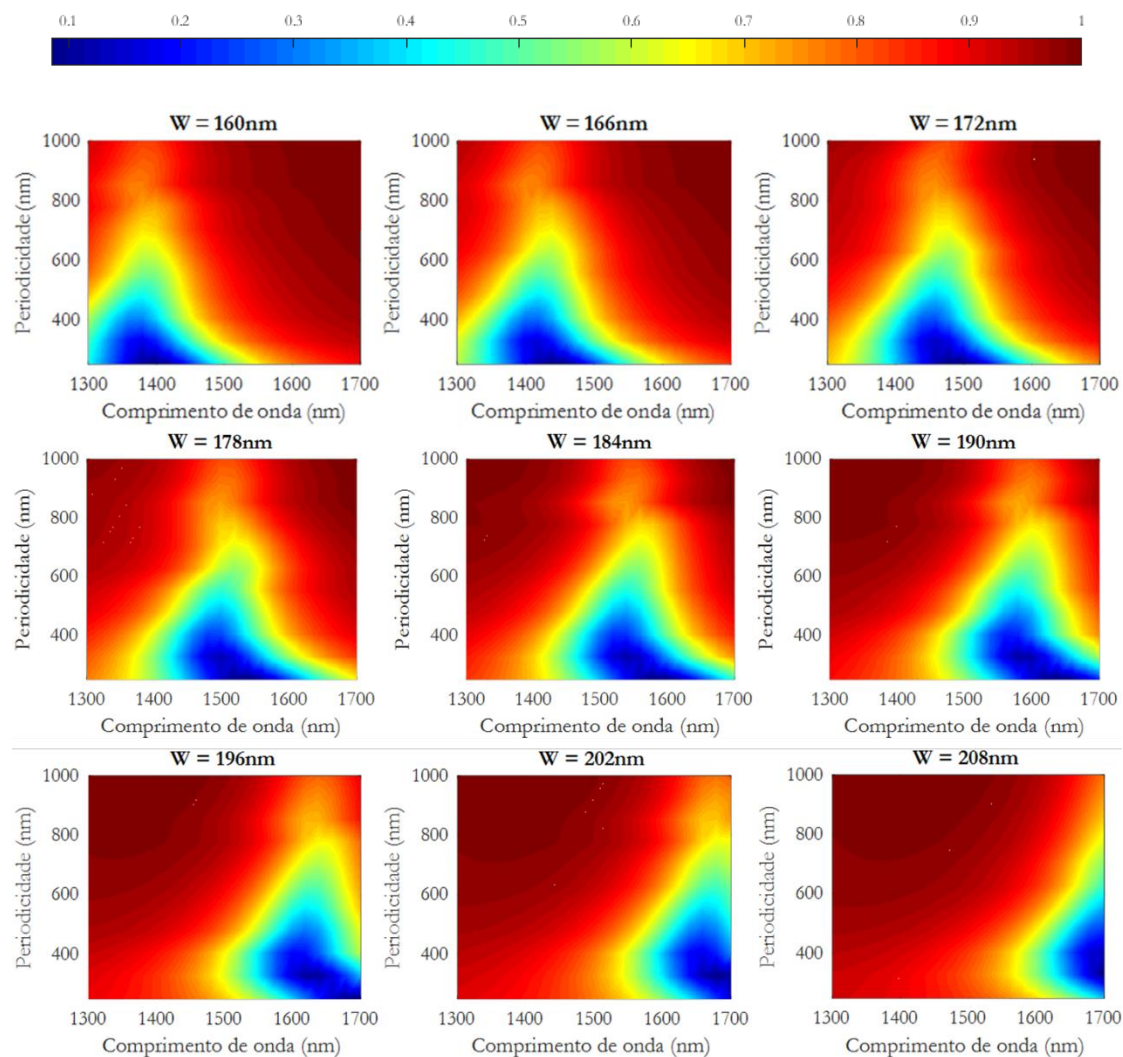


Figura 47. Espectros da reflectância simulado utilizando GeTe no estado cristalino.

As distribuições espaciais dos campos magnéticos absolutos, apresentadas sobre o espectro de reflectância da estrutura com $W = 180\text{nm}$, na Figura 48, possibilita verificar o adensamento do campo na região entre os dois metais no pico de absorção, o que propicia maior interação com a camada de GeTe.

Os resultados numéricos também mostram que o comprimento de onda central da ressonância plasmônica depende do estado da camada de GeTe, se amorfo ou se cristalino. É possível notar deslocamento da ressonância para a direita no espectro de comprimento de onda ao mudar o estado da camada de GeTe de amorfo para cristalino. A sensibilidade à mudança do índice de refração é realçada devido à densidade volumétrica de campo elétrico, e da consequente maior interação com o material dielétrico, provocada pela ressonância plasmônica. Este efeito é bastante útil em sensores diversos [39]–[43].

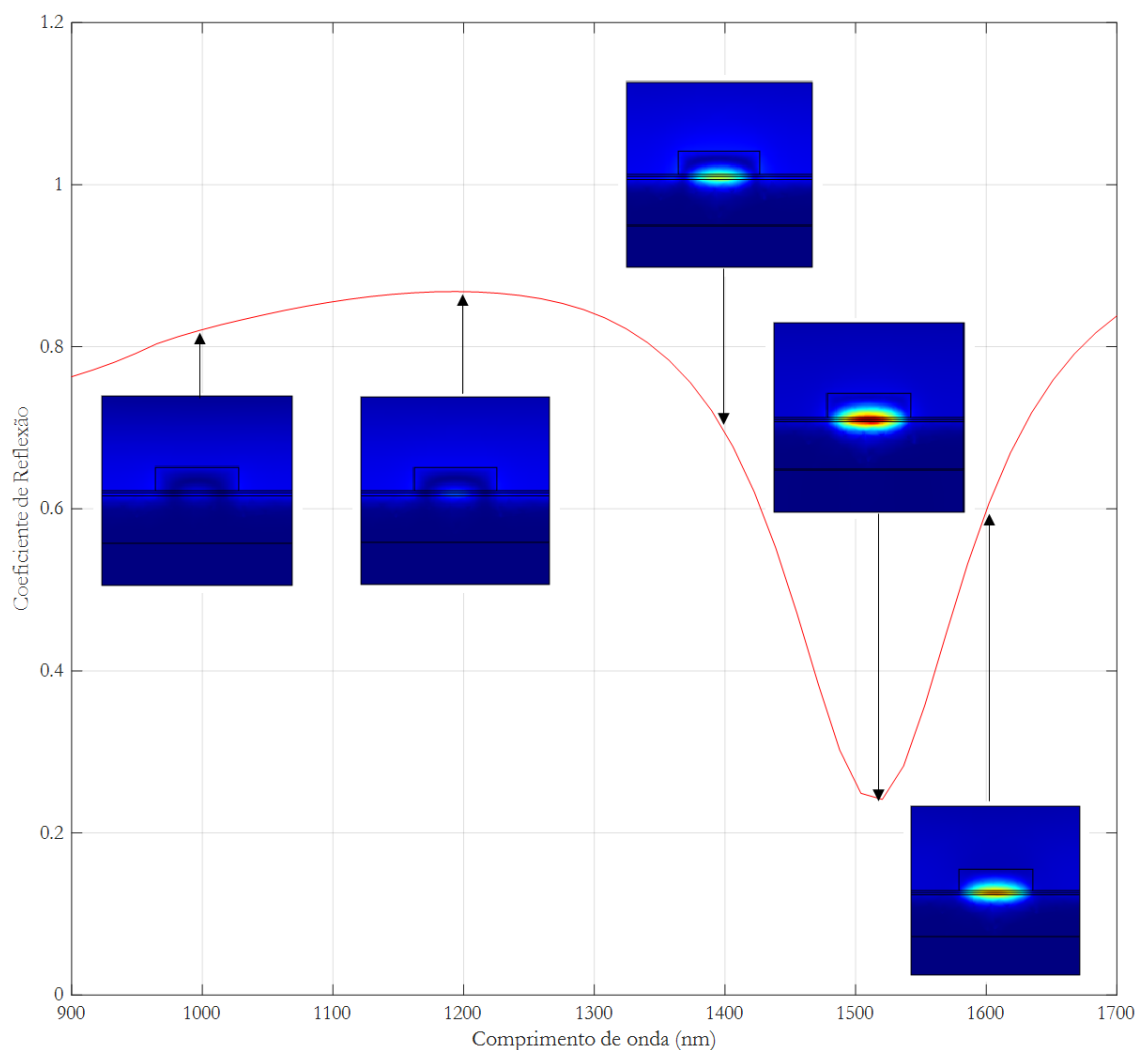


Figura 48. Espectro de reflectância para $W = 180\text{nm}$ com distribuição espacial do campo magnético.

A partir da análise dos resultados das simulações e das capacidades de fabricação, foram escolhidas nove metassuperfícies com diferentes diâmetros para serem fabricadas. As combinações de parâmetros de fabricação são descritas na Tabela 5. Todas as metassuperfícies foram fabricadas com periodicidade de 600nm, para evitar a possibilidade da ocorrência de efeitos de grade, que trariam complexidade à análise da estrutura. Com o intuito de obter alguma estrutura com ressonância plasmônica próximo de 1550nm, foram especificados diâmetros menores e maiores do que aquele que resulta no comportamento desejado. A experiência da equipe de fabricação sugere que as estruturas fabricadas apresentassem desvios em suas dimensões devido às incertezas sobre o diâmetro do feixe de elétrons do equipamento de litografia.

Tabela 5. Dimensões dos diâmetros das metassuperfícies fabricadas.

Estrutura	Diâmetro (W)
A	100nm
B	110nm
C	120nm
D	130nm
E	140nm
F	150nm
G	160nm
H	180nm
I	200nm

O laser de supercontinuum Fianium foi utilizado como fonte para a caracterização das estruturas, o que permitiu a varredura dos comprimentos de onda entre 1300nm e 1700nm. Apesar de haver componentes espectrais acima de 1700nm, o analisador de espectro utilizado não tem operação fora desta faixa. A saída do feixe de laser foi preparada com o mesmo setup apresentado na Figura 31 e as medições foram realizadas com o mesmo método descrito na seção 4.2.

Os sinais de referência utilizados para normalização foram tomados nas regiões do substrato perto das estruturas “A”, “C”, “D”, “F”, “G” e “I”. As referências demonstraram bom nível de concordância entre si, o que é um indicativo de qualidade da fabricação, em especial, uniformidade das espessuras das camadas do substrato, ao menos na região ensaiada. Os sinais que serviram como referências para as medições no estado amorfo são mostradas na Figura 49 e para o estado cristalino na Figura 50. Estes sinais, tomados em pontos diferentes do substrato, se sobrepõem.

Os sinais tomados sobre as estruturas são divididos pela média dos sinais de referência para se obter os espectros de reflectância. Os sinais normalizados são exibidos antes e depois de filtragem por transformada rápida de Fourier, para eliminação de componentes de alta frequência que são decorrentes de flutuações na medição amplificadas pela normalização. Observa-se que houve maior absorção nas estruturas fabricadas do que aquelas simuladas, como se a periodicidade fosse menor do que 600nm, o que só poderá ser verificado após a realização de todos os experimentos de caracterização óptica das estruturas.

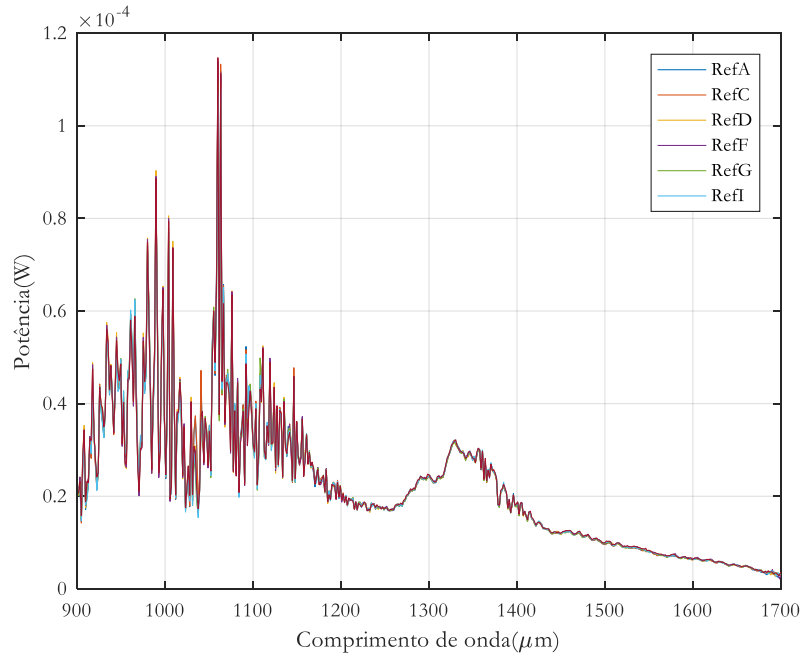


Figura 49. Sinais de referência para estruturas com camada GeTe em estado amorfo.

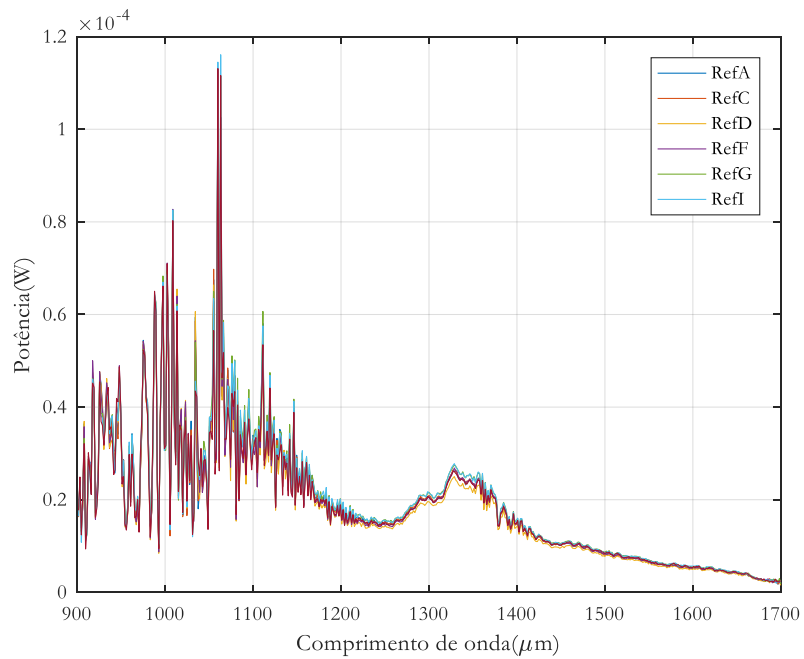


Figura 50. Sinais de referência para estruturas com camada GeTe em estado cristalino.

O procedimento para tentativa de cristalização da camada de GeTe foi realizado por meio de tratamento térmico da amostra em forno com controle de malha fechada. A amostra foi aquecida até 350°C durante aproximadamente 15 minutos e novamente resfriada até 75°C durante 1 hora e 45 minutos. O problema identificado com este método de cristalização é que a temperatura da chapa não é necessariamente a temperatura da superfície da amostra.

Apesar dos cuidados tomados com relação ao tempo de resfriamento, pequenas flutuações de temperatura poderiam danificar as finas camadas do substrato.

O método utilizado para cristalização provoca inevitavelmente a deformação das estruturas de ouro, que modificam seu fator de forma, mesmo em temperaturas muito abaixo do ponto de fusão do ouro (1063°C). A técnica do recozimento (*annealing*), na qual a temperatura de um material é elevada à aproximadamente 350°C e reduzida gradualmente, aplicada sobre camadas finas (3 a 13nm) de ouro sobre sílica é utilizada para produção de nanopartículas de ouro capazes de produzir LSPR [44]. Filmes finos de ouro depositados utilizando a técnica de litografia de nanoesferas, quando submetido ao recozimento, também conformam estruturas de ouro hexagonais transformando-as em nanopartículas de ouro [45], [46]. Ao recozimento por pulsos de laser também é utilizada para sintonizar o tamanho de nanopartículas de ouro [47], com modificação dos diâmetros em até 19nm e deslocamento do pico de ressonância em 144nm.

É forte, portanto, a suspeita de que as nanopartículas de ouro (que possuem altura de 50nm) podem ter tido seus diâmetros modificados pelo recozimento, na tentativa de realizar a cristalização da camada de GeTe.

A comparação realizada das medições experimentais com as simulações baseadas nas dimensões de projeto foi a única possível. A medição das dimensões fabricadas por microscópio varredura eletrônica não pode ser realizada antes que todas as medições ópticas fossem tomadas. Ficou pendente a realização do experimento de mudança de fase dinâmica em simultaneidade com a medição de espectro de reflexão, que será realizada no complexo científico europeu MINATEC em Grenoble por membros da equipe ICB, especialistas em materiais de mudança de fase.

As estruturas fabricadas, vistas na Figura 51, apresentaram espectro de reflexão similar ao simulado, exibindo o mesmo perfil com uma ressonância. Houve boa concordância entre o experimento e a simulação para as metassuperfícies no estado amorfo. No entanto, para o estado dito cristalino, o deslocamento da ressonância foi o oposto ao esperado. Ao invés de ocorrer *redshift*, como prevê a simulação, houve *blueshift*. Existe a suspeita de que o comportamento inesperado seja devido à deformação das estruturas de ouro, que aumentaram de diâmetro com o tratamento térmico, que deverá ser verificado com microscópio de varredura eletrônica (SEM).

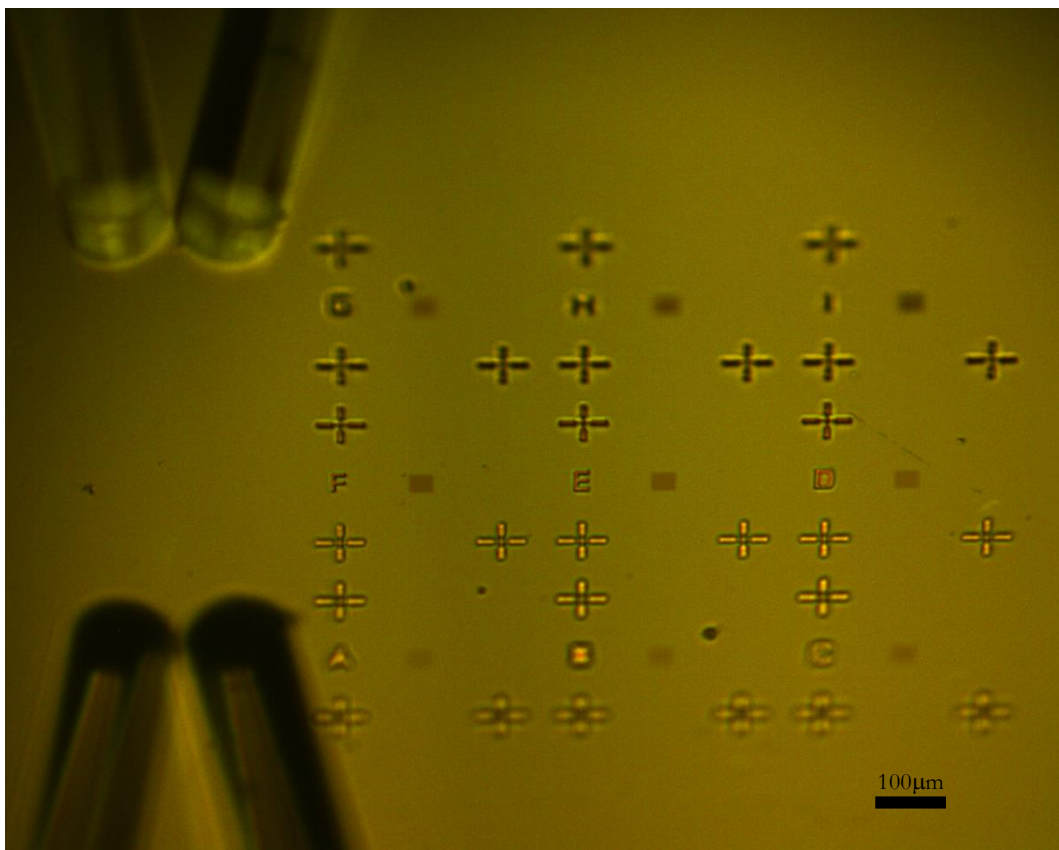


Figura 51. Fotografia das metassuperfícies de ouro. As pontas superiores são as fibras utilizadas no ensaio, as inferiores são as sombras das fibras refletidas. A distância entre a sombra e a fibra permite acessar a altura da fibra em relação ao plano da amostra.

Não é possível, com os métodos utilizados, fazer inferência sobre o estado da camada de material de mudança de fase, já que o comportamento foi o oposto do esperado. As Figuras de Figura 52 a Figura 56 contém os espectros de reflexão de todas as metassuperfícies fabricadas e simuladas, com GeTe no estado amorfo e no estado tomado como sendo o cristalino.

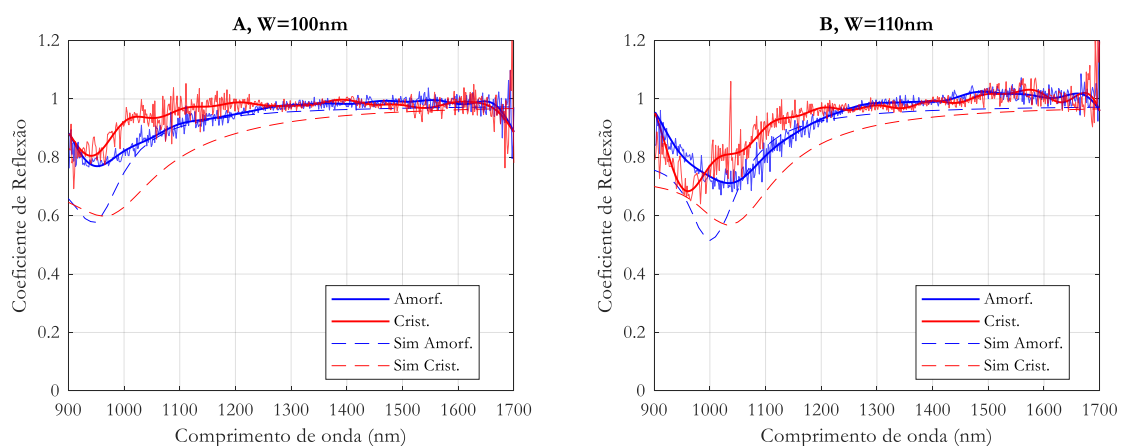


Figura 52. Espectros de reflectância para as metassuperfícies fabricadas com diâmetros $W_A = 100\text{nm}$ e $W_B = 110\text{nm}$.

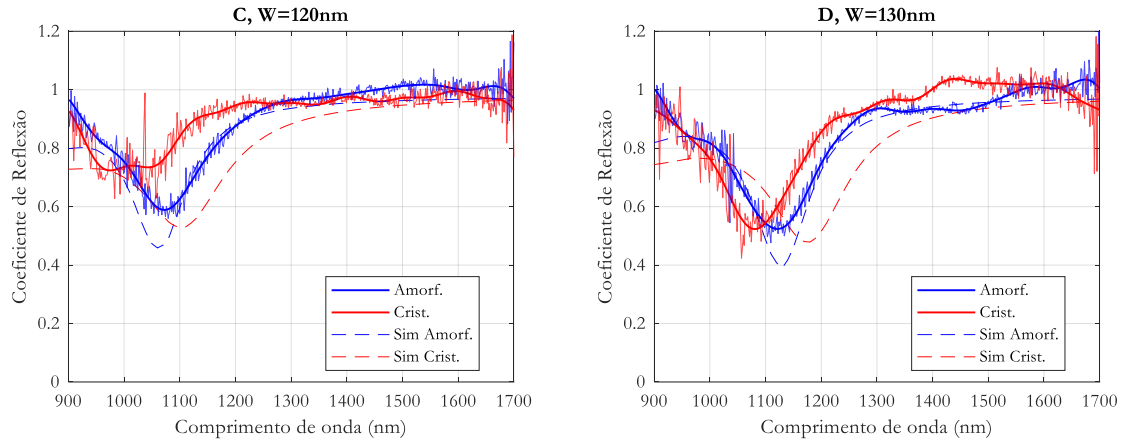


Figura 53. Espectros de reflectância para as metassuperfícies fabricadas com diâmetros $W_C = 120\text{nm}$ e $W_D = 130\text{nm}$

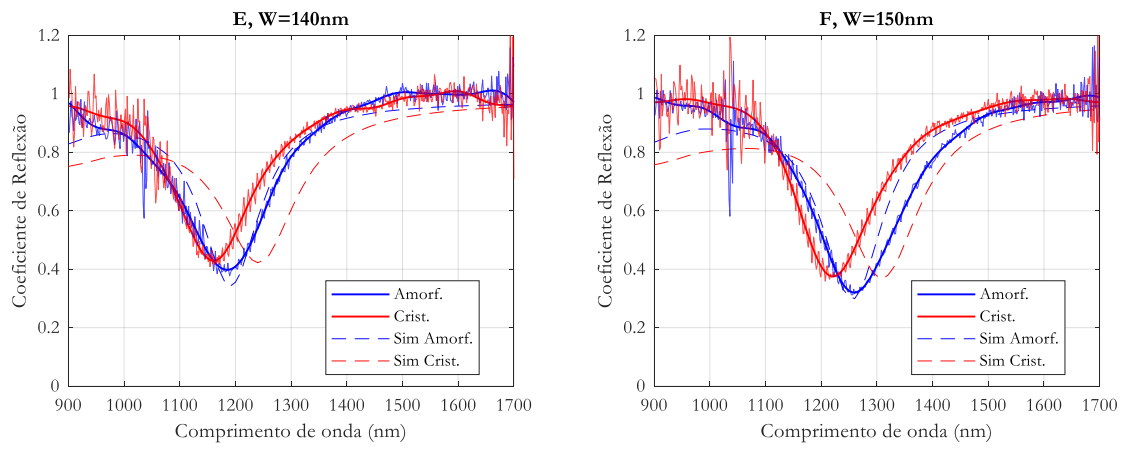


Figura 54. Espectros de reflectância para as metassuperfícies fabricadas com diâmetros $W_E = 140\text{nm}$ e $W_F = 150\text{nm}$.

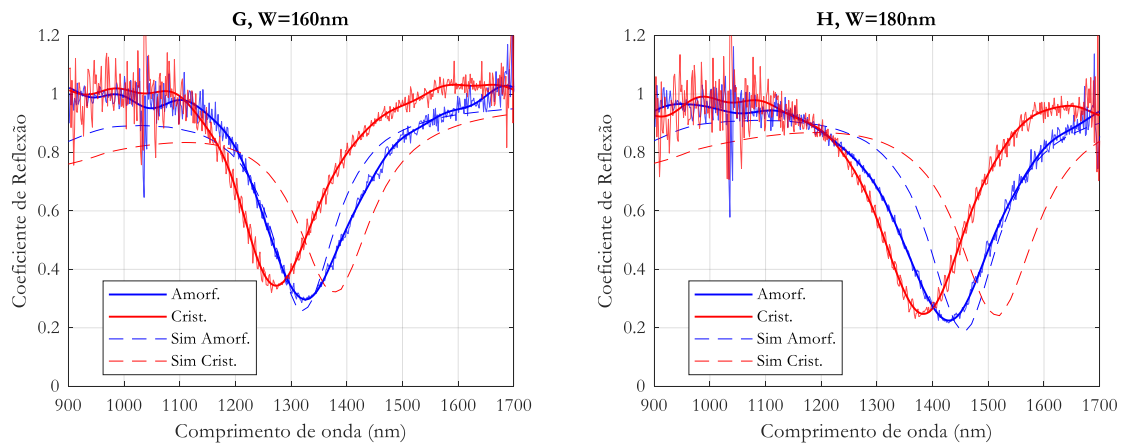


Figura 55. Espectros de reflectância para as metassuperfícies fabricadas com diâmetros $W_G = 160\text{nm}$ e $W_H = 180\text{nm}$.

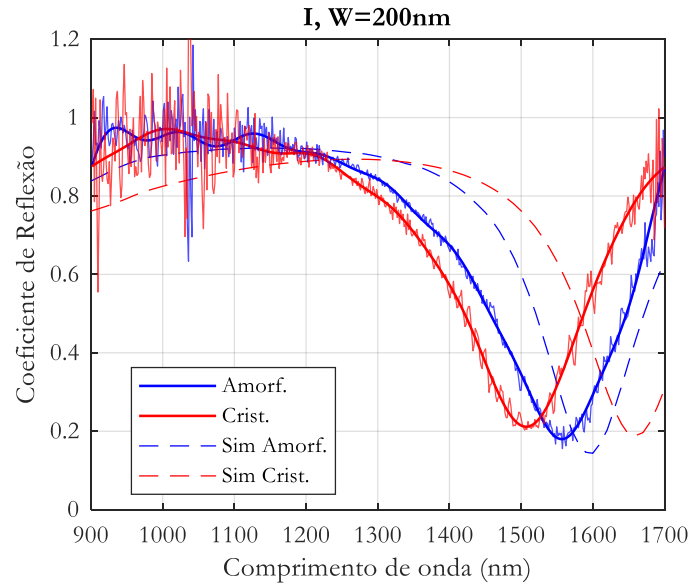


Figura 56. Espectros de reflectância para as metassuperfície fabricada com diâmetro $W_1 = 200\text{nm}$.

O sucesso da validação experimental das estruturas levanta questionamentos a respeito das próximas etapas e ações a serem tomadas sobre estas metassuperfícies para realizar a sua aplicação pretendida. A característica interessante destas metassuperfícies é a habilidade de modificação do espectro de reflexão em função do estado da camada de GeTe. Para um dado comprimento de onda, por exemplo 1560nm, a estrutura “I” apresenta aumento de até aproximadamente 94% no seu coeficiente de reflexão, ao passar de 0,18 para 0,35, como consequência da mudança de estado de amorfo para cristalino da camada de GeTe (Figura 57).

A significativa mudança do coeficiente de reflexão torna a metassuperfície um potencial candidato para aplicação como um absorvedor saturável (artificial já que o mecanismo físico é, na verdade, baseado na mudança de índice de refração, e não depleção da capacidade de absorção). Ao mudar de estado e passar a refletir, em um setup onde a reflexão retroalimenta a cavidade de um laser, tem-se a possibilidade de obter laser em modo travado passivo [48].

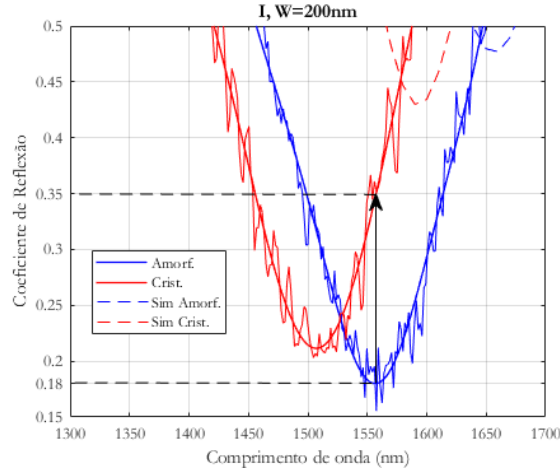


Figura 57. Espectros de reflexão para estado amorfo e cristalino da metassuperfície “I”, com detalhe para a dinâmica entre os dois estados em 1560nm.

4.5 Resultado do tratamento térmico sobre as metassuperfícies plasmônicas

O recozimento realizado sobre a amostra, que tinha como intenção principal provocar cristalização da camada de GeTe, no entanto, causou também deformação das estruturas de ouro, modificando os diâmetros das nanopartículas. Dois parâmetros importantes então podem ter sido modificados de forma simultânea ou não. A consequência de diâmetros diferentes é o deslocamento espectral da LSPR e do pico de absorção.

A partir da análise dos dados experimentais pós tratamento térmico, e de novas simulações com diferentes diâmetros, foi possível quantificar o tamanho da modificação do diâmetro (ΔW) das nanopartículas de ouro necessária para causar a resposta óptica obtida experimentalmente, supondo que não houve (Figura 58) e que houve (Figura 59) cristalização da camada de GeTe.

As estruturas simuladas tomando a camada de GeTe como amorfas, com diâmetros em média 6,4nm menor que o esperado para o caso de não ter havido cristalização e 13,1nm menor caso o GeTe tenha sido cristalizado. As simulações apresentam espectro de reflexão com excelente concordância com a curva experimental, confirmando que as nanopartículas de ouro tiveram seu retículo cristalino diminuído ao serem submetidas ao tratamento térmico.

Pressupondo que houve cristalização completa da camada GeTe com o tratamento térmico, houve concordância com os espectros simulados com GeTe no estado cristalino quando a diminuição dos diâmetros foi de 10nm em média. Para o caso dos espectros de reflexão da Figura 58, as simulações foram realizadas utilizando o índice de refração da camada de GeTe no estado amorfo e com $\Delta W_{\text{MÉDIO}} = -6,4\text{nm}$. Na Figura 59, o GeTe foi simulado como cristalino, que resultou em $\Delta W_{\text{MÉDIO}} = -13,1\text{nm}$.

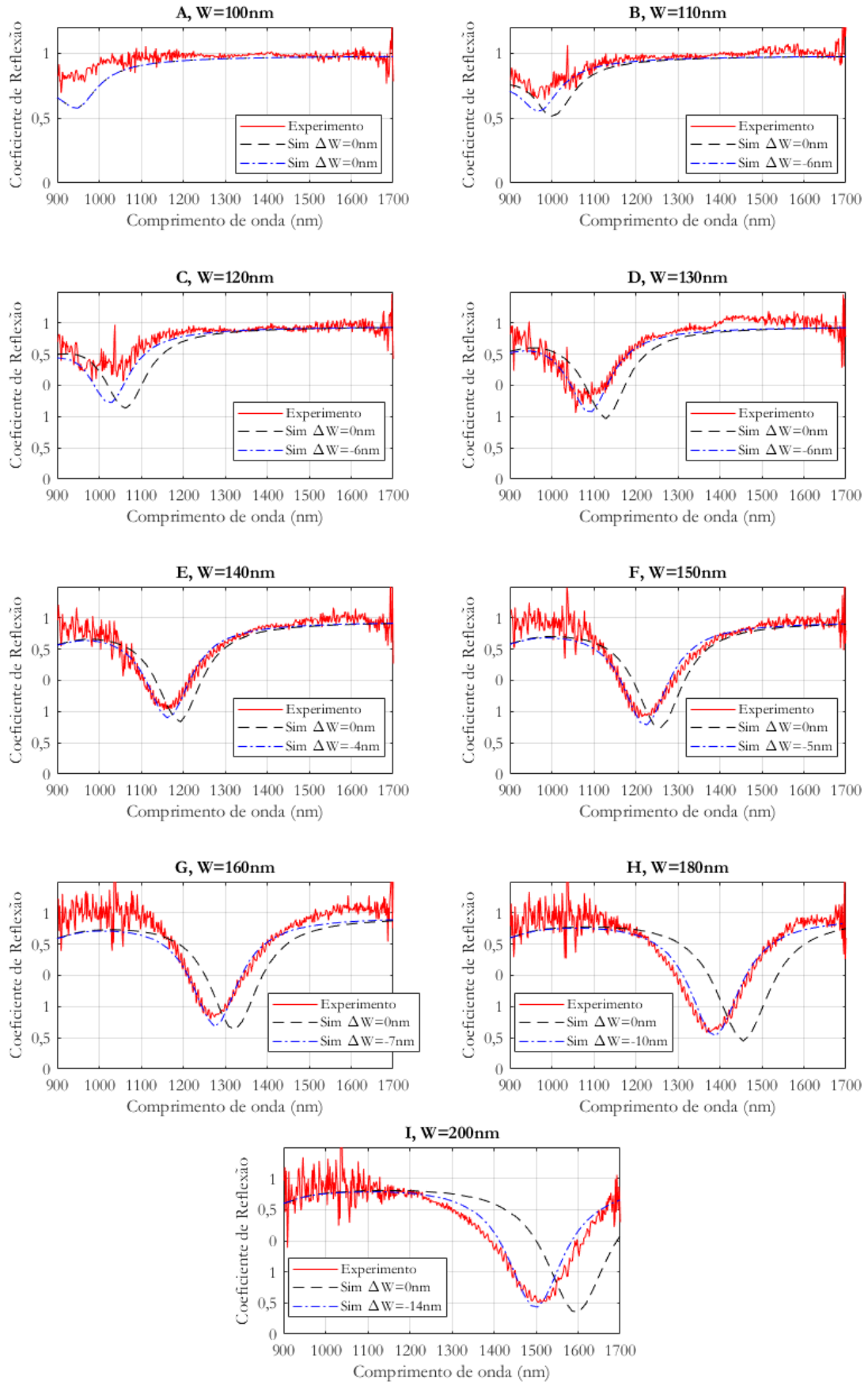


Figura 58. Espectros de reflexão experimental pós tratamento térmico e simulado com GeTe no estado amorfo com $\Delta W_{\text{Médio}} = -6.4 \text{ nm}$.

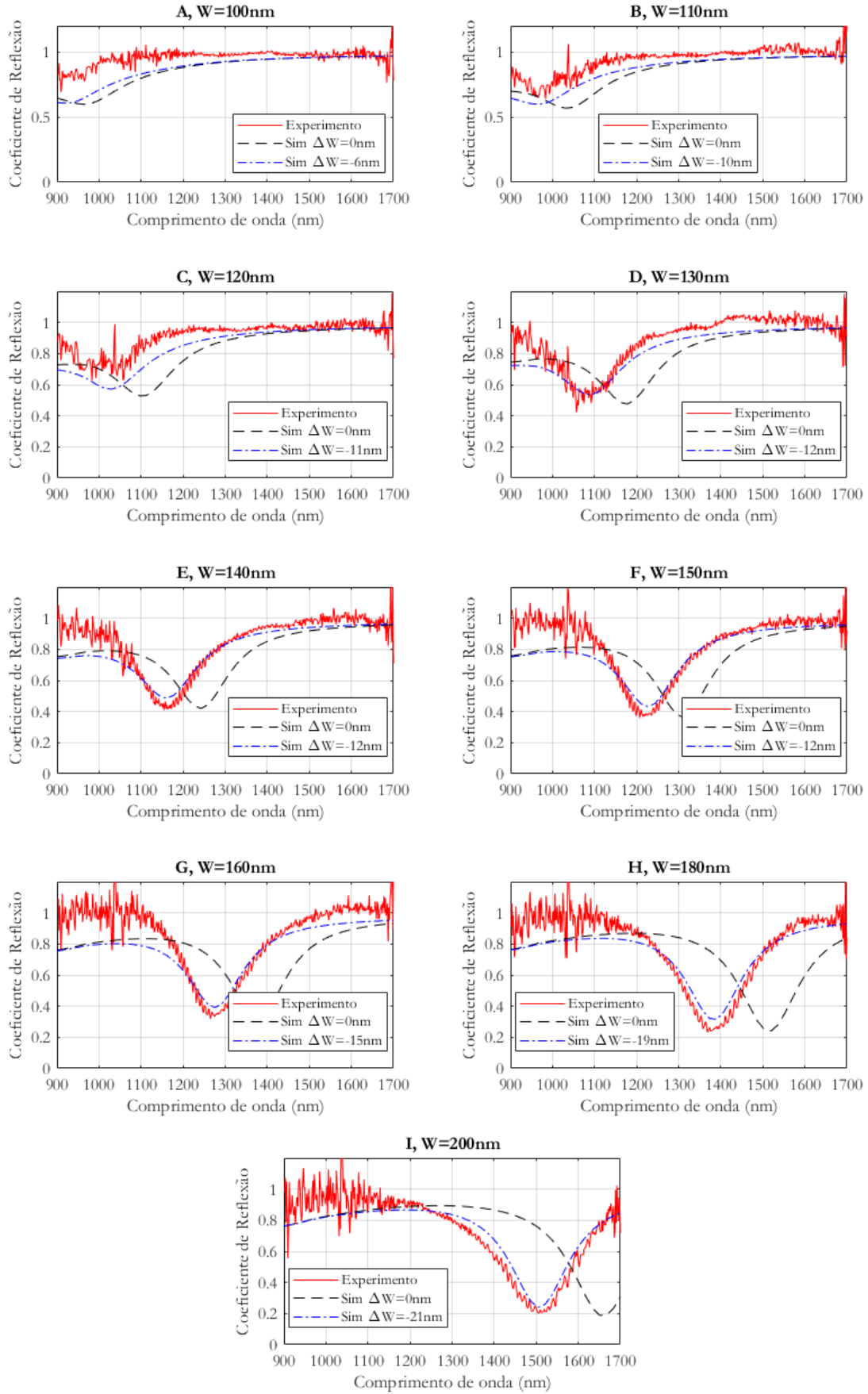


Figura 59. Espectros de reflexão experimental pós tratamento térmico e simulado com GeTe no estado cristalino com $\Delta W_{\text{Médio}} = -13.1 \text{ nm}$.

5 PROJETO DE GRADES DE ACOPLAMENTO

A óptica integrada possibilita aplicações diversas em telecomunicações e processamento de dados, bem como em aplicações em sensoriamento de grandezas físicas e químicas. Guias integrados de nitreto de silício (Si_3N_4) apresentam interessantes propriedades não lineares, que são observadas em altas intensidades de campo. A integração de sistemas que utilizam guias ópticos integrados e fibras ópticas é um ponto crítico de tais sistemas e é abordada neste capítulo.

O projeto de grades de acoplamento de fibra monomodo para guias de onda integrado é realizado numericamente utilizando o MEF. O pacote computacional utilizado (COMSOL) permite a determinação dos campos elétricos e magnéticos na estrutura simulada em 2D, com os quais é possível calcular o vetor de Poynting. Esta grandeza especifica a magnitude e a direção da taxa de transferência de energia eletromagnética, por isso, é de grande utilidade em problemas que envolvem cálculo de transmissividade de uma onda eletromagnética, sendo utilizado no cálculo das potências transmitidas de uma fibra monomodo para um guia de onda integrado. Este método é aplicado no projeto de acopladores tanto para guias de onda dielétricos quanto para guias de onda plasmônicos.

O vetor de Poynting médio no tempo, expresso em termos fasoriais, é calculado a partir dos campos elétricos e magnéticos obtidos numericamente pelo MEF:

$$\mathbf{S} = \frac{1}{2} \mathbf{E} \times \mathbf{H}^* \quad (34)$$

Realizando o produto vetorial, tem-se:

$$2\mathbf{S}_x = \mathbf{E}_y \cdot \mathbf{H}_z^* - \mathbf{E}_z \cdot \mathbf{H}_y^* \quad (35)$$

$$2\mathbf{S}_y = \mathbf{E}_z \cdot \mathbf{H}_x^* - \mathbf{E}_x \cdot \mathbf{H}_z^* \quad (36)$$

$$2\mathbf{S}_z = \mathbf{E}_x \cdot \mathbf{H}_y^* - \mathbf{E}_y \cdot \mathbf{H}_x^* \quad (37)$$

Finalmente obtém-se o módulo do vetor de Poynting que é útil para visualização do fluxo de potência óptica nos dispositivos:

$$|\mathbf{S}| = \sqrt{S_x^2 + S_y^2 + S_z^2} \quad (38)$$

A possibilidade de fabricação de circuitos fotônicos compactos utilizando materiais compatíveis com CMOS, do inglês *complementary metal-oxide-semiconductor*, eleva o interesse científico e tecnológico sobre o nitreto de silício. Guias de ondas integrados fabricados com este material possibilitam o guiamento com baixas perdas na faixa do visível e é cada vez mais utilizado em aplicações que envolvem efeitos não lineares[49]. Em silício e sílica, o acoplamento de um feixe emitido pela face de uma fibra óptica monomodo para um guia integrado é comumente realizado por grade de acoplamento periódica [50] ou apodizada [51].

Grades periódicas realizadas em nitreto de silício para acoplamento da potência luminosa de uma fibra óptica monomodo para um guia integrado são objetos de relevante interesse científico. O descasamento entre os tamanhos dos modos propagantes em uma fibra óptica e em um guia integrado, que é grande, é o problema que as grades periódicas resolvem na integração de tais sistemas fotônicos. Uma fibra monomodo tem diâmetro interno entre 8 e 10 μm enquanto que os guias de onda integrados retangulares utilizados neste trabalho possuem entre 0,9 e 1,2 μm de largura e até 0,5 μm de altura. As grades de acoplamento possuem comprimento total de aproximadamente 30 μm e as larguras das grades diminuem progressivamente até o guia de onda. Este afinamento aumenta o acoplamento ao promover variação gradual do índice de refração entre os modos. Os índices de refração utilizados foram, $n_{\text{Si}} = 3,450$, $n_{\text{SiO}_2} = 1,444$ e $n_{\text{SiNx}} = 2,071$. A representação conceitual do dispositivo, do guia de onda e de parte da fibra monomodo é mostrada na Figura 60.

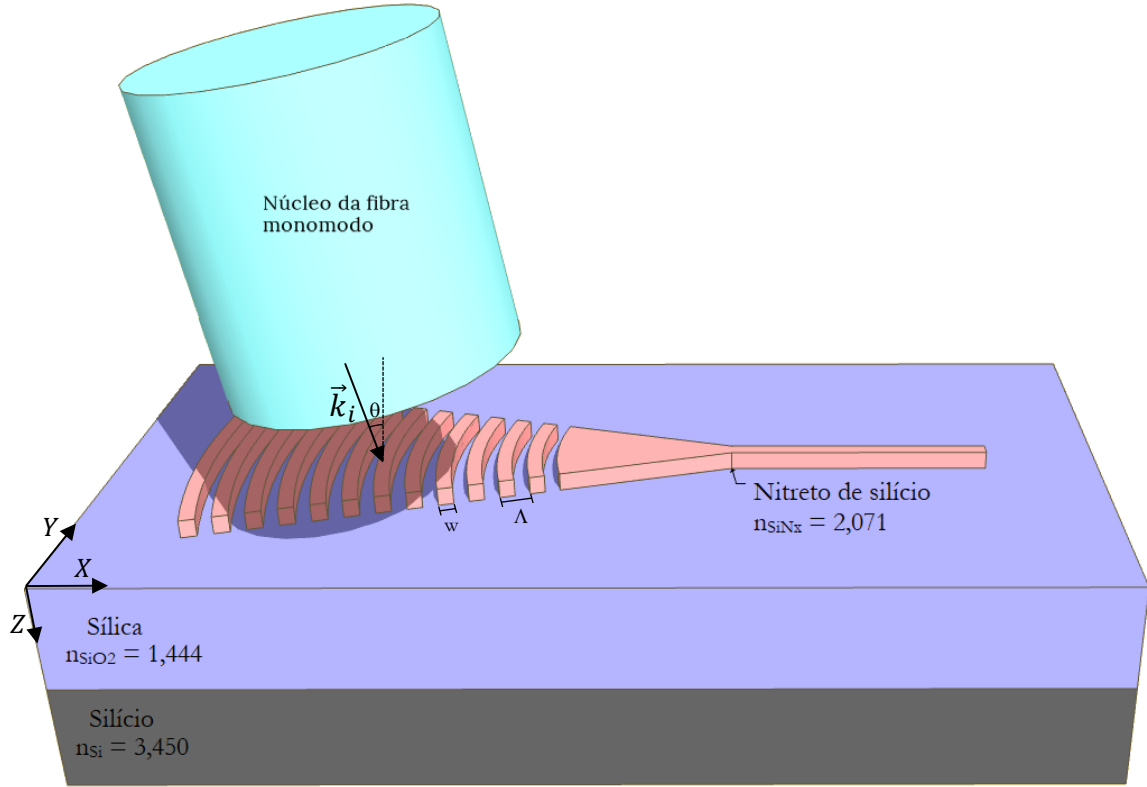


Figura 60. Representação conceitual da grade de acoplamento, guia de onda e núcleo da fibra monomodo. A casca da fibra óptica foi omitida propositalmente para possibilitar a visualização dos outros componentes.

5.1 Grades de acoplamento

As grades de acoplamento, em sua forma mais simples, consistem em uma região periódica que precede um guia de onda, feita a partir da gravura de um material com elevado índice de refração. O campo incidente na estrutura periódica é difratado pela grade em direções permitidas, as ordens de difração.

A grade de difração pode ser caracterizada por um vetor $\vec{K}$, cuja magnitude pode ser expressa por:

$$|\vec{K}| = \frac{m2\pi}{\Lambda}. \quad (39)$$

O modo proveniente da fibra, que é casado com o modo do guia de onda tem relação com o vetor $\vec{K}$ através de um número inteiro discreto m , que representa a ordem de difração em uma grade com período Λ . O vetor de onda difratado $\vec{k}_m$ é resultado do vetor de onda incidente (ordem zero, ou $m = 0$) subtraído do vetor da grade de difração. Esta condição descrita permite infinitas ordens de difração ($m = 0, 1, 2, 3, \dots$), cujos vetores são dados por:

$$\vec{k}_m = \vec{k}_i - m\vec{K}. \quad (40)$$

A componente tangencial do vetor de onda deve ser contínua em uma interface, portanto, tem-se a condição de casamento de fase que é dada por:

$$\vec{k}_x(m) = \vec{k}_{x,i} - m\vec{K}_x. \quad (41)$$

Rescrevendo a condição de casamento de fase em função dos índices de refração, desenvolvendo os vetores, chega-se à equação da grade:

$$k_0 n_{ef} \sin(\theta_m) = k_0 n_{ar} \sin(\theta_i) - m \frac{2\pi}{\Lambda}. \quad (42)$$

Que pode ser reescrita no seguinte formato:

$$n_{ef} \sin(\theta_m) = n_{ar} \sin(\theta_i) - m \frac{\lambda_0}{\Lambda}, \quad (43)$$

onde n_{ef} e n_{ar} , são os índices de refração efetivos da região de acoplamento e do ar, respectivamente. Nota-se que a lei de Snell é um caso particular da equação da grade em que $m = 0$, que é utilizada para calcular ângulo do feixe transmitido.

A equação da grade pode ser reescrita em função da periodicidade:

$$\Lambda = \frac{m\lambda_0}{n_{ar} \sin(\theta_i) - n_{ef} \sin(\theta_m)}. \quad (44)$$

O melhor acoplamento que uma grade convencional consegue realizar é aquele no qual o as primeiras ordens de difração, carregam maior parte da potência, possuem ângulos de $\theta_m = 90^\circ$ (ângulo de vetor de onda paralelo ao guia de onda), de forma que o vetor de onda aponte na direção de propagação do guia de onda. O modo de ordem $m = -1$ é utilizado para propagação acoplamento direcional (ângulo entre fibra e guia de onda é maior que 90°) e o $m = -1$ para acoplamento contradirecional (ângulo entre fibra e guia de onda é menor que 90°). Para o caso do dispositivo simulado com o intuito de validação, cujo fator de preenchimento $f = 0,5$ de uma grade de SiNx, no comprimento de onda de 900nm, a periodicidade calculada é de aproximadamente 660nm. A distribuição dos modos refratados em uma grade genérica é demonstrada na Figura 61, na qual os modos de ordem zero são os feixes transmitido e refletido.

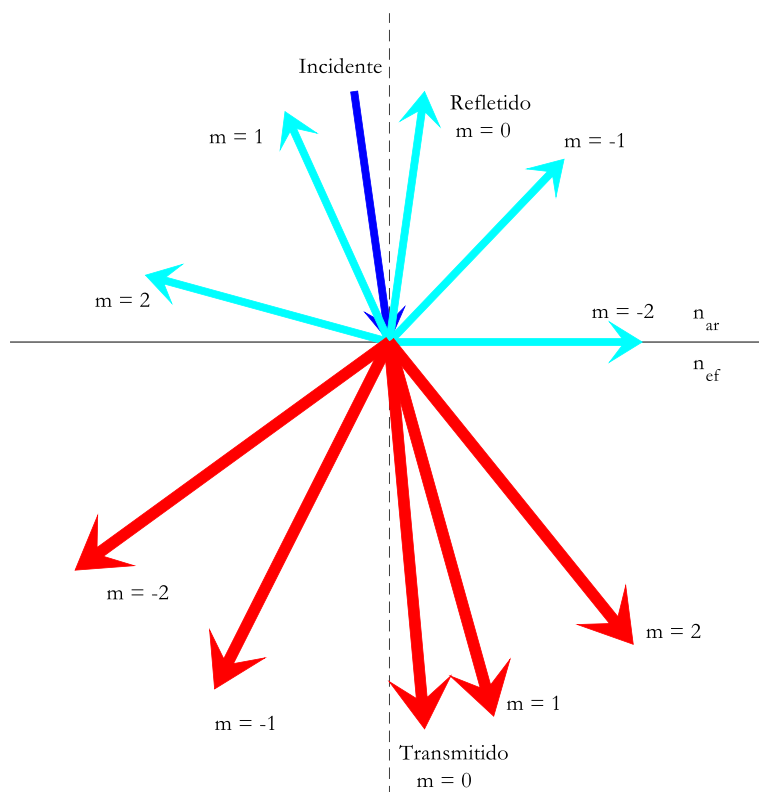


Figura 61. Diagrama de refração para uma grade genérica, com ângulos e módulos calculados a partir da equação das grades.

O projeto do acoplador para guias de onda foi realizado neste trabalho em duas etapas: na primeira, uma grade acopladora presente na literatura foi replicada com a intenção de validar o modelo numérico. Após a validação, na segunda etapa, o modelo foi modificado para possibilitar a aplicação de otimização por AG.

5.2 Validação do modelo de simulação

O dispositivo escolhido para ser replicado foi aquele apresentado em [52], que consiste em uma grade simples, com $\Lambda = 630\text{nm}$ e fator de preenchimento de 50%, otimizado para o comprimento de onda de 900nm . O modelo do dispositivo contendo a distribuição espacial dos materiais é mostrado na Figura 62. Os espectro de transmitância obtido pela simulação realizada neste trabalho e a obtida em [52] são apresentados na Figura 63. As distribuições do vetor de Poynting, em 900nm , onde a eficiência é máxima, e em 940nm , onde a eficiência é mínima, são mostradas na Figura 64 e na Figura 65 respectivamente. A compatibilidade entre os resultados obtidos foi considerada satisfatória, dado que os métodos numéricos utilizados são distintos. Na referência supracitada foram utilizados o pacote computacional FIMMWAVE (PhotonDesign) para projeto dos guias de

onda e CAMFR para projeto da grade de acoplamento, ambos baseados no método computacional EME (*EigenMode Expansion*)[53], enquanto neste trabalho a estrutura foi toda simulada com o COMSOL, que utiliza o método dos elementos finitos. As etapas subsequentes de otimização das grades de acoplamento foram baseadas no modelo validado.

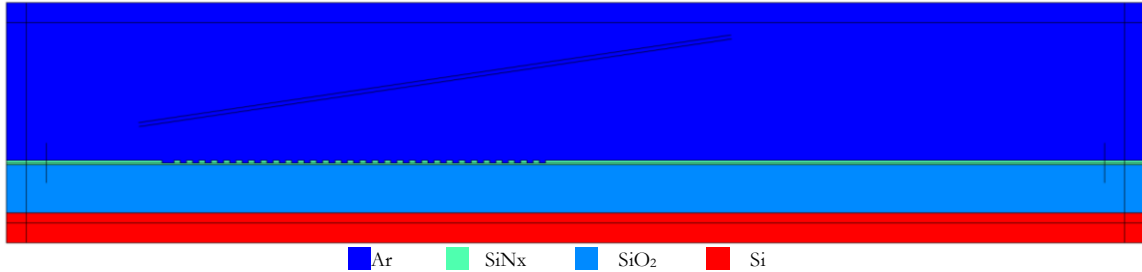


Figura 62. Modelo simulado do dispositivo acoplador.

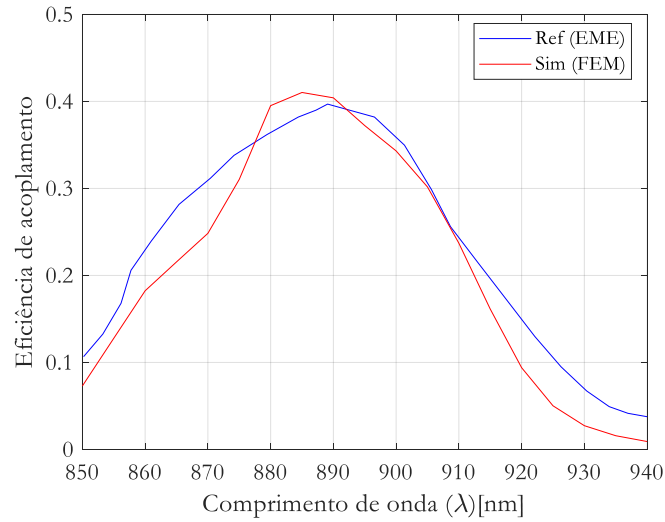


Figura 63. Espectro de eficiência de acoplamento para resultado obtido na literatura, que utiliza o método EME (curva em azul) e realizado neste trabalho utilizando FEM (curva em vermelho).

A eficiência de acoplamento pode ser qualitativamente avaliada nas distribuições espaciais do vetor de Poynting a partir da intensidade na saída do guia integrado a direita neste dispositivo simulado.

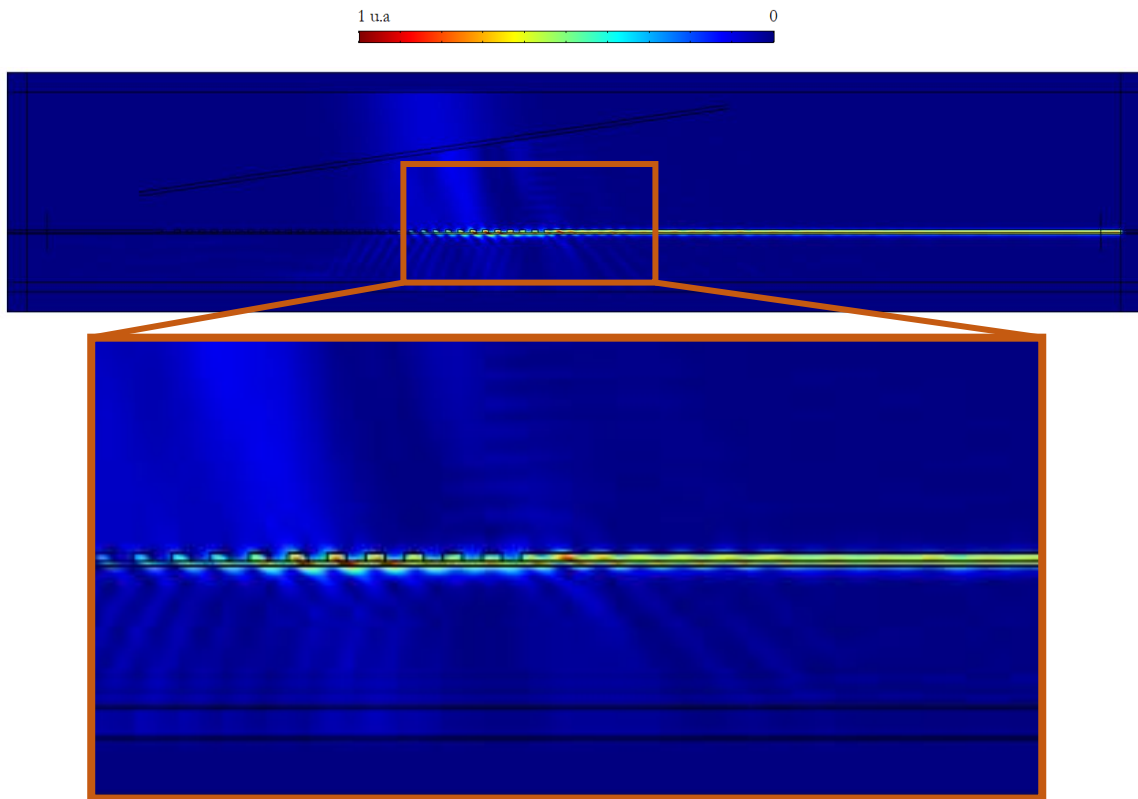


Figura 64. Módulo do vetor de Poynting $|S|$ em 900nm com detalhe da região de interesse.

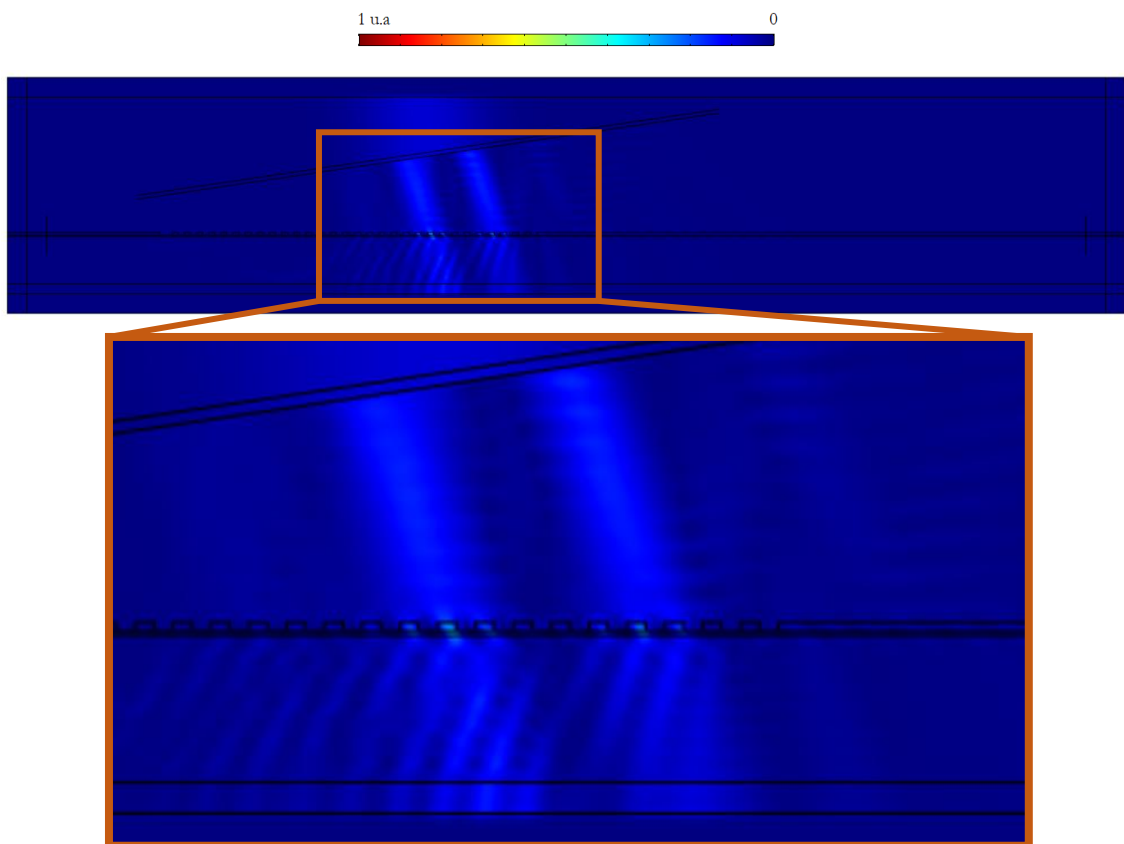


Figura 65. Amplitude do vetor de Poynting $|S|$ em 940nm com detalhe da região de interesse.

A comparação realizada entre resultados obtidos por grades de acoplamento projetada por diferentes autores é resumida na Tabela 6. As principais características que configuram o mérito do acoplador são a largura de banda (BW) quando a perda é de 1dB da máxima, o comprimento de onda (λ) onde o acoplamento é máximo, e a eficiência máxima de acoplamento (η). Os dispositivos comparados diferem principalmente em aspectos como a presença ou não de camadas refletoras no fundo do dispositivo, no material que envolve a região de acoplamento e na quantidade de camadas da região acopladora. Foram considerados na comparação os resultados obtidos por meio de simulação numérica. As estruturas comparadas utilizam guias de onda de nitreto de silício apenas e tem o campo incidente definido pelo modo fundamental que sai de uma fibra óptica monomodo.

Tabela 6. Comparação entre diferentes acopladores de nitreto de silício simulados

Ref	BW em 1dB	λ Central	η	Comentário
[54]	116nm	600nm	60%	Guias de onda suspensos
[55]	57,7nm	1540nm	59%	Duas camadas de SiNx
[56]	90nm	1580nm	80%	Com refletor de Bragg Silício e Sílica
[52]	37nm	890nm	39%	Refletor de silício simples
[57]	22.3nm	1550nm	86%	Simulado em 3D-FDTD com fibra distante da grade
[58]	49nm	1573nm	74%	Grade de SiNx combinado com refletor de fundo

5.3 Projeto de grades acopladoras unidirecional auxiliado por AG

A estrutura foi otimizada utilizando evolução por AG com o fluxo de trabalho apresentado na seção 3.2 deste texto. A modelagem da estrutura foi realizada de duas maneiras diferentes, uma com elementos discretos que possibilitasse a utilização de AG binário, em uma estrutura comumente tratada como metassuperfície binária, e uma segunda modelagem que possibilitou a evolução a partir de genes representados por números reais ao invés de binários, para que fosse possível também utilizar outros otimizadores não lineares, como o método do gradiente descendente.

A função objetivo utilizada visou maximizar a relação potência de saída sobre potência de entrada. O campo elétrico de entrada tem componente no eixo fora do plano (ver Figura 69). As potências são calculadas a partir da integral de linha do vetor de Poynting sobre os sensores posicionados na saída e na entrada. A função do COMSOL utilizada foi:

$$P = \sqrt{ewfd.Poavx^2 + ewfd.Poavy^2 + ewfd.Poavz^2}, \quad (45)$$

onde $ewfd.Poav$ são as variáveis do COMSOL que armazena as três componentes do vetor de Poynting, como descrito nas equações 35, 36 e 37.

A função objetivo a ser maximizada é a eficiência de acoplamento (η):

$$\eta = \frac{P_{saída}}{P_{entrada}} \quad (46)$$

5.3.1 Avaliação da busca por AG

Uma versão reduzida do problema foi utilizada para realizar a busca por AG com avaliar a sua performance, ao menos em escala reduzida, com apenas três parâmetros geométricos. O AG foi montado para otimizar a altura do guia de onda de SiNx (h), a periodicidade (Λ) e o *gap* (g), como mostrado na Figura 66. O fator de preenchimento (f) é dado por $f = \Lambda/g$.

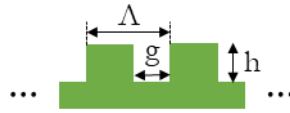


Figura 66. Esquemático da modelagem para avaliação da busca por AG.

O AG permite a sintonização de diversos parâmetros, como taxa de mutação e cruzamento, a forma de seleção dos pais, os critérios de parada, a forma como a população inicial é gerada, os tamanhos das populações e o tamanho do grupo dos indivíduos elite que são levados para a geração seguinte. A otimização de tais parâmetros não é objetivo deste estudo, mas existe a evidente necessidade de avaliar se o AG, com o conjunto de parâmetros escolhidos, é capaz de razoavelmente chegar à solução ótima dos problemas propostos.

O problema da otimização dos três parâmetros (h , Λ e f) foi resolvido inicialmente com uma varredura paramétrica, no espaço de busca limitado por h com valores de 0,4 a 0,5 (10 passos), Λ de 0,5 a 2,5 (20 passos) e f de 0,25 a 1,0 (10 passos). Cada simulação demora aproximadamente 30 segundos e toda a varredura demorou em torno de 17h para ser concluída. O melhor resultado apresentado pela varredura paramétrica foi $\eta = 0,313$ em $\Lambda = 1,1333$, $h = 0,45$ e $f = 0,33$. Os mapas com resultados da varredura paramétrica são exibidos na Figura 67.

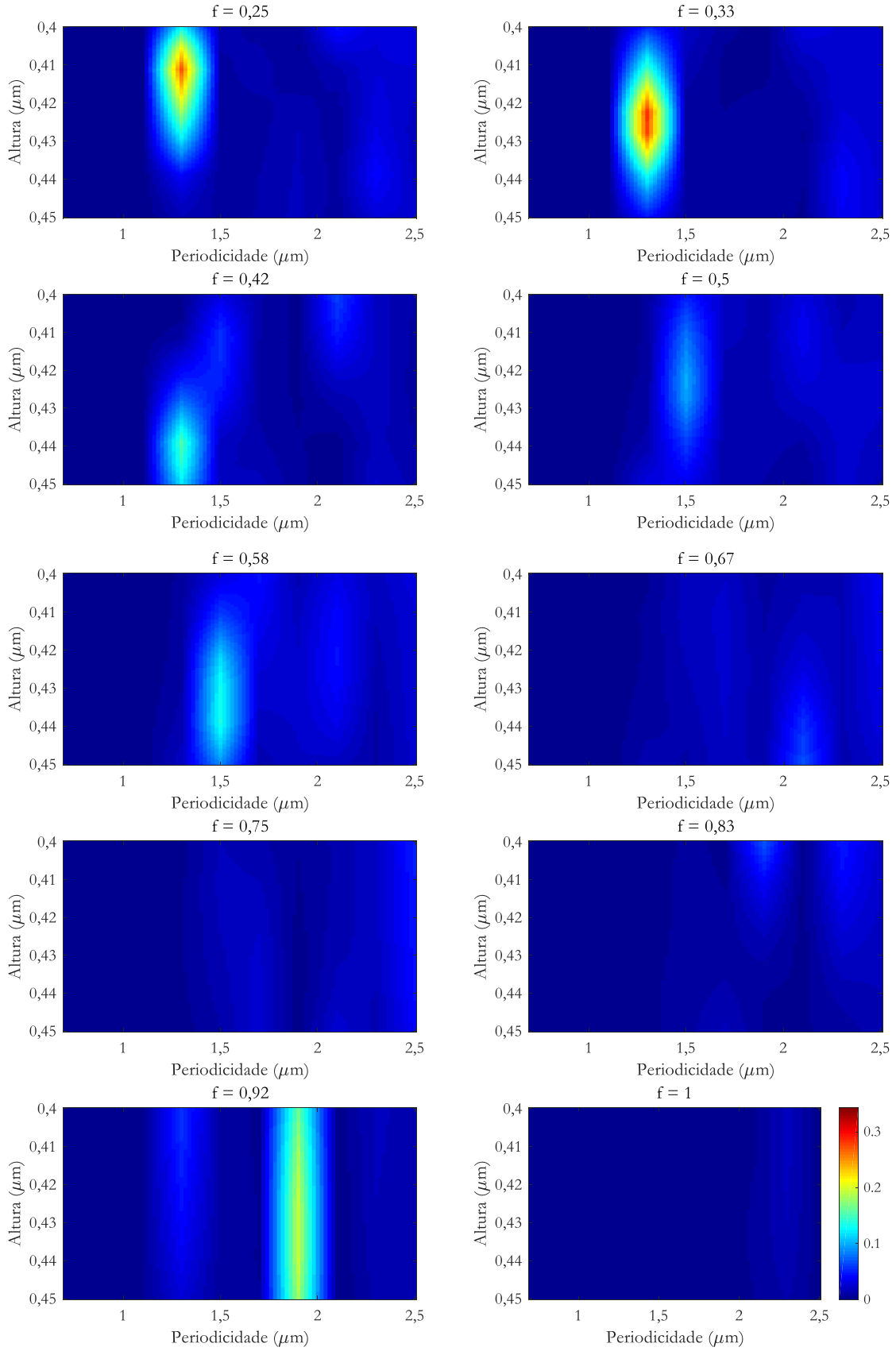


Figura 67. Resultados numéricos para a busca paramétrica no espaço de busca limitado por h com valores de 0,4 a 0,5, Λ de 0,5 a 2,5 μm e f de 0,25 a 1,0. O melhor resultado é apresentado pela estrutura em $\Lambda = 1,1333$, $h = 0,45$ e $f = 0,33$, que demonstrou $\eta = 0,313$.

No caso da busca utilizando AG, o melhor resultado é apresentado pela estrutura com $h = 0,40791\mu\text{m}$, $\Lambda = 1,075\mu\text{m}$ e $f = 0,40231$, que demonstrou $\eta = 0,384$. A evolução da busca pelo AG chegou à próximo de 90% do ponto ótimo em apenas 5 gerações, com menos de 500 indivíduos avaliados, e ao ponto ótimo em 26 gerações. A evolução do AG é apresentada na Figura 68, considerando que a eficiência de acoplamento é o valor negativo da aptidão calculado para cada indivíduo.

Ressalta-se que a resolução de fabricação disponível não permite fabricar com definição de alguns nanômetros. Tendo em mente apenas o objetivo de avaliar o AG, não foi necessário considerar a resolução disponível da fabricação, que é fator determinante em etapas seguintes.

O AG foi, portanto, capaz de atingir e ultrapassar o valor máximo da função no espaço de busca utilizado em tempo compatível com a disponibilidade de processamento disponível para a execução deste trabalho.

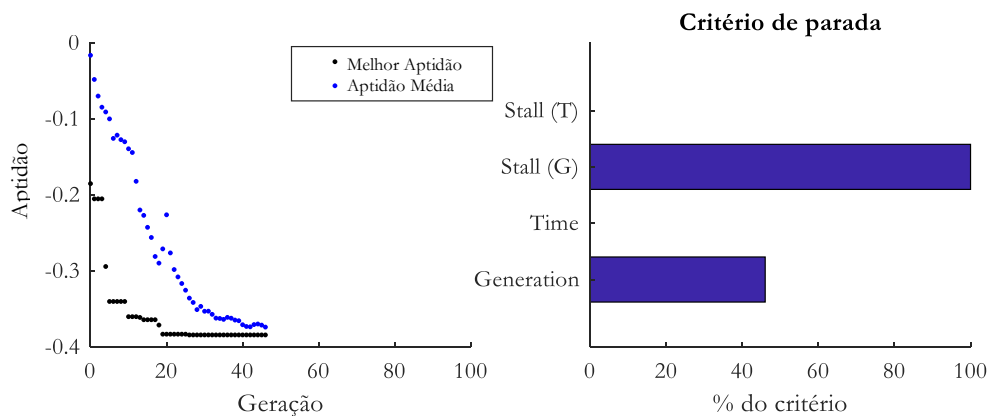


Figura 68. Evolução da busca por AG. Considera-se aptidão = - eficiência de acoplamento.

5.3.2 Modelo de AG com parâmetros representados por conjunto binário

Na otimização por codificação dos elementos de forma binárias, a região de acoplamento foi dividida em 169 células as quais são constituídas pela presença de SiNx (bit 1) ou por ar (bit 0). As células têm largura com tamanho fixo de 180nm, que é definido pela resolução na fabricação. O esquemático da modelagem binária da estrutura é apresentado na Figura 69, que mostra também a linha de entrada de campo com incidência de 10° .

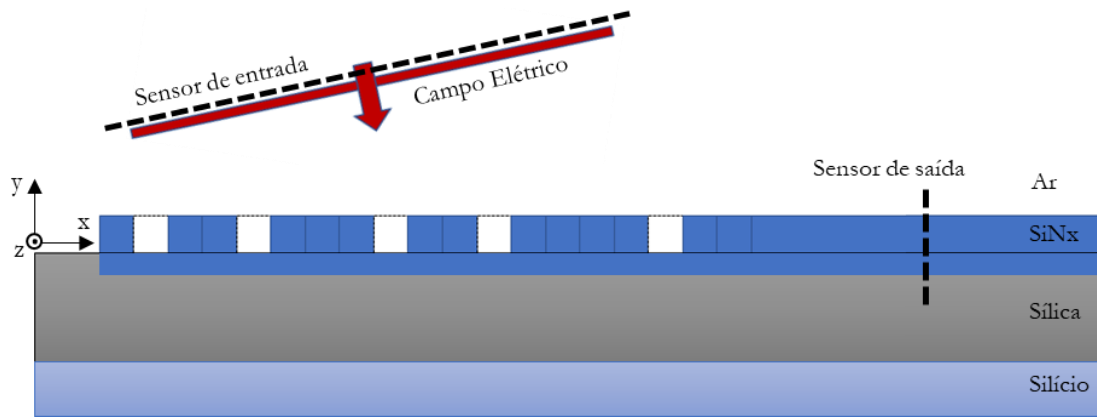


Figura 69. Esquemático da modelagem binária da região de acoplamento. As grades simuladas apresentam 169 retângulos com 180nm de largura.

O AG foi executado aproveitando os melhores resultados de rodadas anteriores em parte da sua população inicial, de forma a garantir que uma rodada seguinte tenha ao menos a mesma performance que a anterior. O AG foi rodado 23 vezes, totalizando mais de 500 gerações completas. Cada execução teve taxa de cruzamento modificada de forma aleatória, entre 0,7 e 0,95. A evolução das execuções do AG custou cerca de 200h e é mostrada na Figura 70, que contém também as taxas de cruzamento utilizadas. A distribuição espacial dos materiais da estrutura final encontrada é apresentada na Figura 71 e a distribuição do fluxo de potência na Figura 72. Otimizado para o comprimento de onda de 1550nm, o dispositivo apresentou banda com largura a meia altura, FWHM (do inglês full width at half maximum), de aproximadamente 17nm (ver Figura 73).

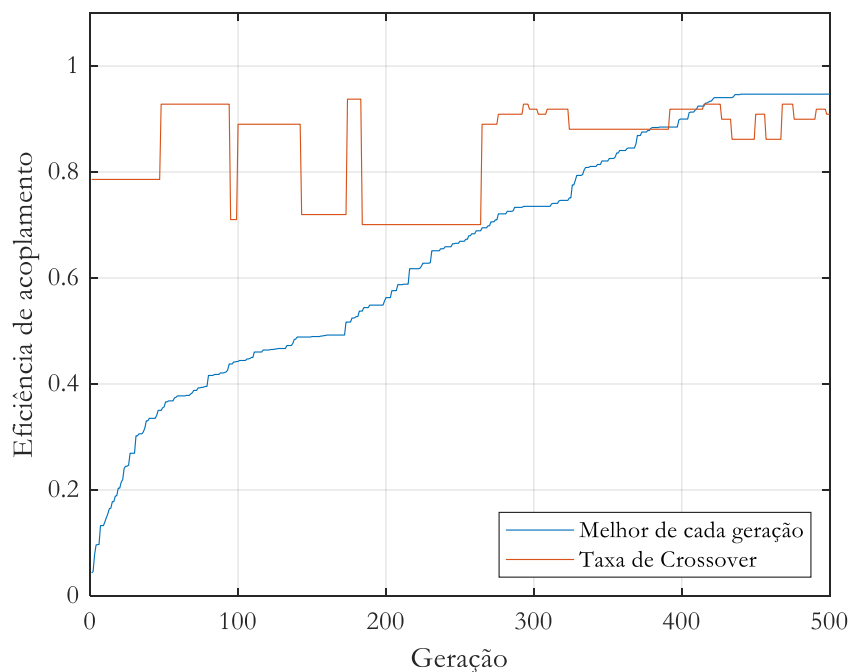


Figura 70. Evolução das rodadas de AG.

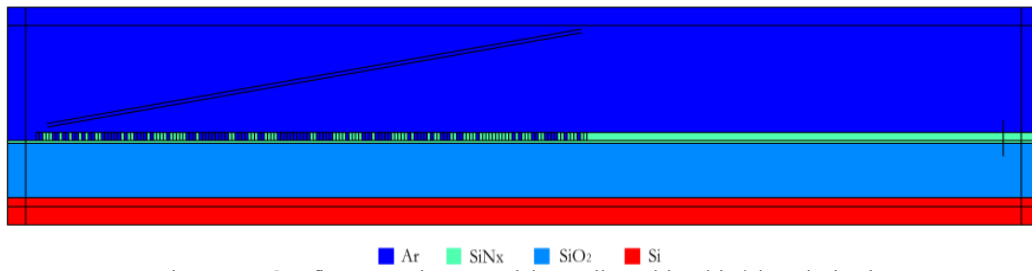


Figura 71. Configuração dos materiais no dispositivo binário otimizado.

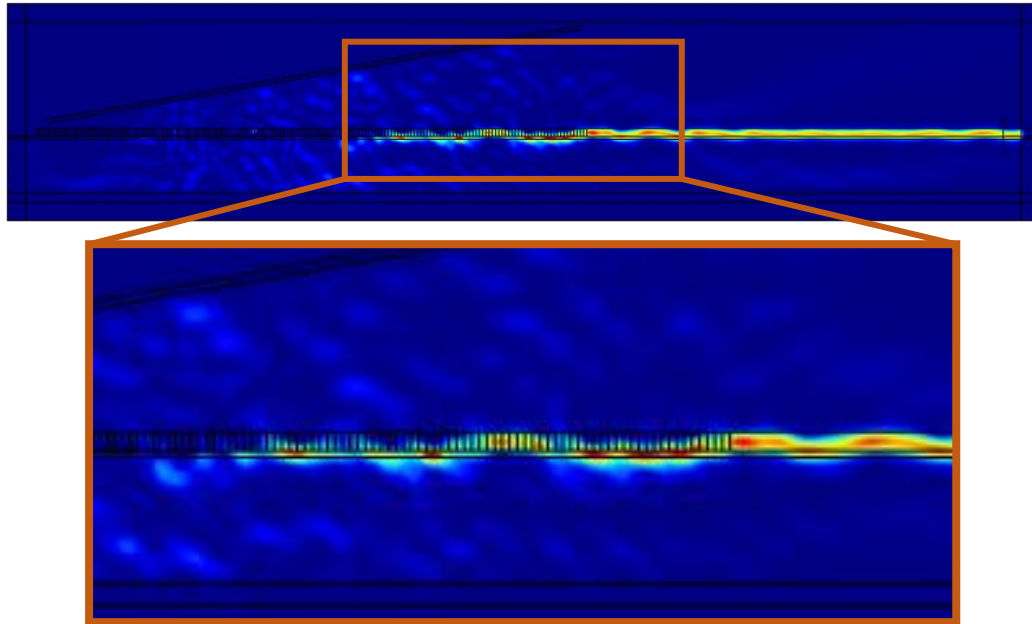


Figura 72. Distribuição espacial do fluxo de potência em 1550nm no dispositivo otimizado com detalhe para a região de interesse.

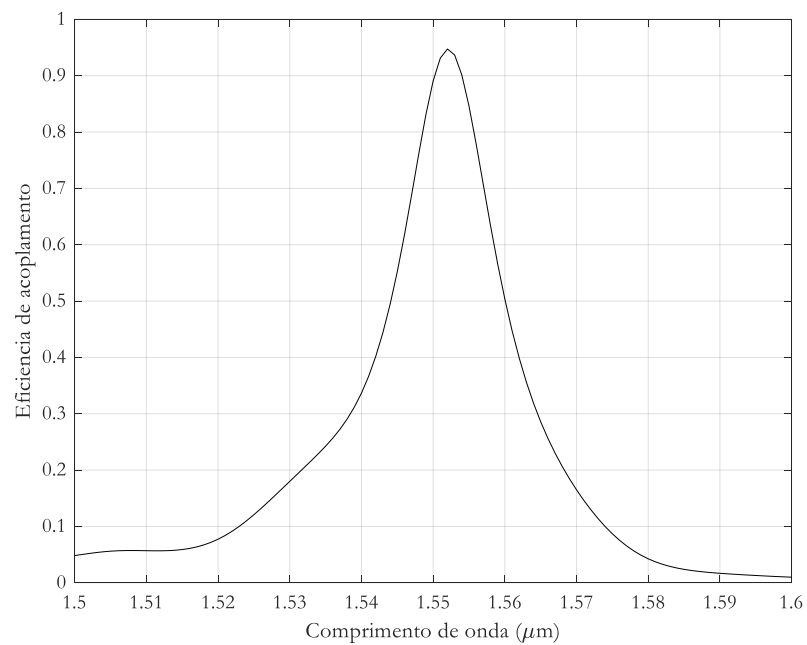


Figura 73. Espectro de eficiência de acoplamento para estrutura otimizada para maximizar 1550nm.

O projeto de grade otimizada foi transportado para o formato *Graphic Data System* (GDS) para ser utilizado no processo de criação da máscara de litografia por feixes de elétrons. Para realizar a conversão do formato das geometrias para o GDS, foi necessário elaborar uma rotina no MATLAB que realizasse a descrição das coordenadas espaciais do dispositivo necessário para as manobras de litografia. A Figura 74 contém uma das estruturas, produto final antes da etapa de fabricação, derivado da rotina para elaboração do acoplador otimizado, visualizado através do *KLayout*.

Entre as melhores estruturas encontradas pela busca otimizada, sete foram escolhidas para serem fabricadas, como por exemplo, a estrutura apresentada na Figura 75 e Figura 76. O critério de escolha foi a menor quantidade de variações de largura dos vales. A grande quantidade de variação dos vales é um problema na fabricação devido à dificuldade de se ajustar a espessura da camada de PMMA e as doses do feixe de elétrons.

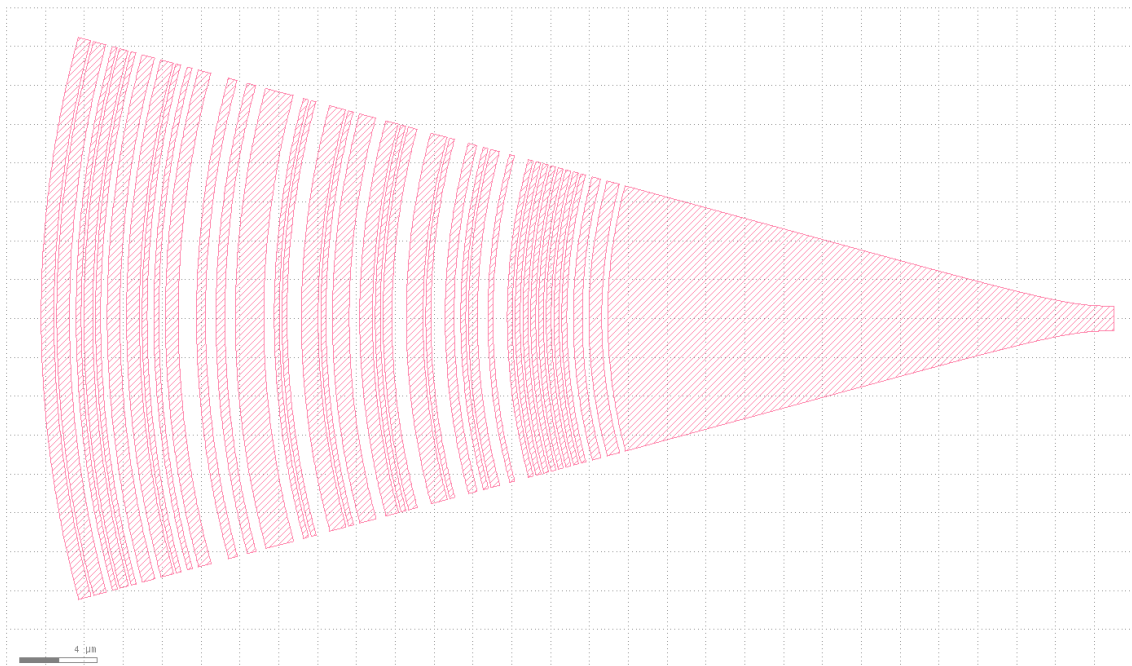


Figura 74. Projeto no GDS da estrutura otimizada.

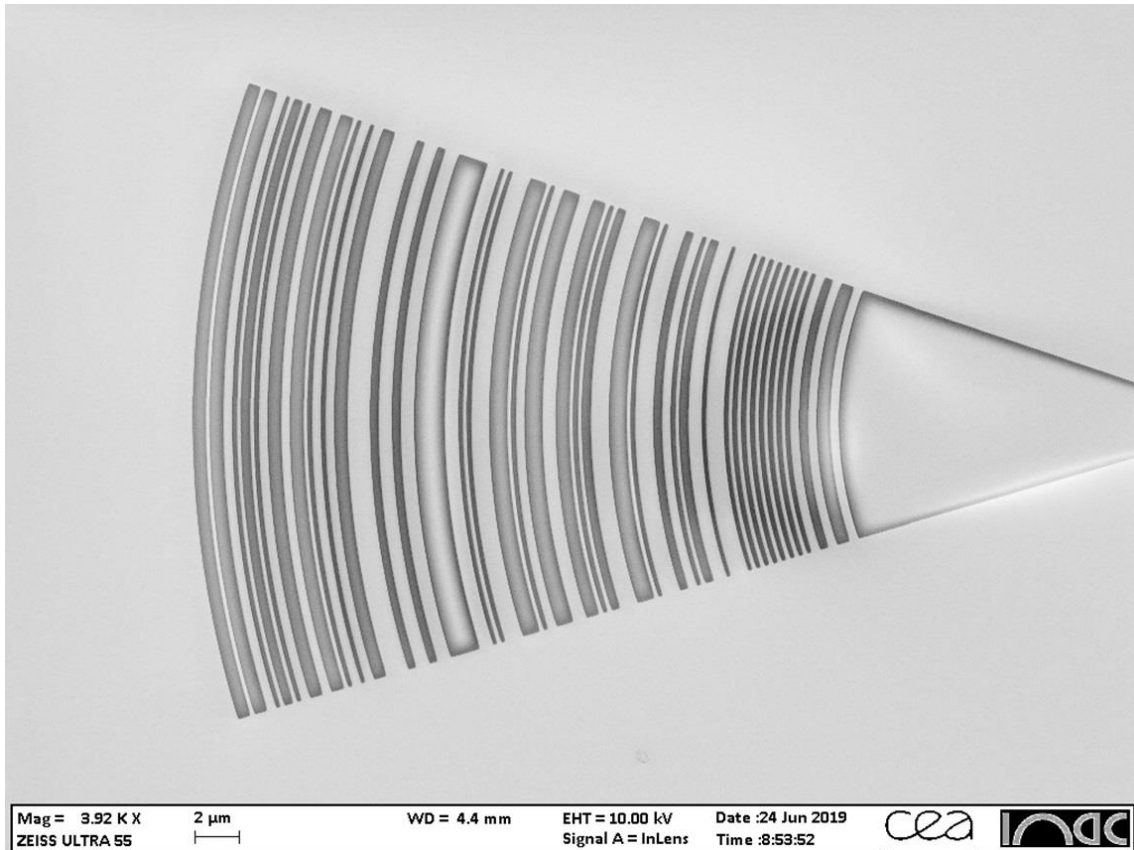


Figura 75. Imagem do acoplador fabricado, obtido por meio de microscópio eletrônico de varredura.

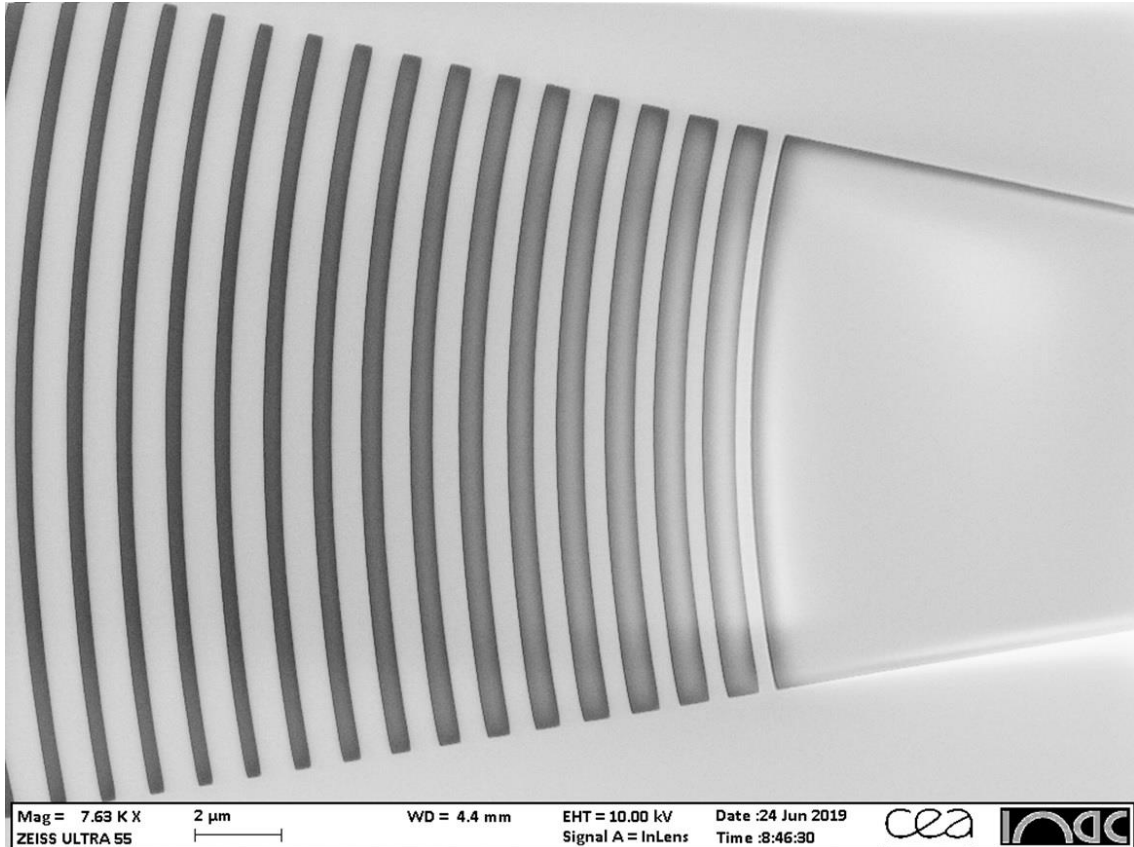


Figura 76. Grade acopladora apodizada fabricada sob a mesma pastilha para efeito de comparação.

Os resultados experimentais para as estruturas fabricadas não foram, no entanto, satisfatórios devido às dificuldades enfrentadas pela variação da camada de PMMA. A maioria das grades fabricadas teve defeitos, como mostrado na Figura 77. Foram fabricadas grades periódicas convencionais e apodizadas, para efeito de controle e comparação (Figura 76). Estas também não produziram o acoplamento esperado. Novas etapas de fabricação serão realizadas em tempo.

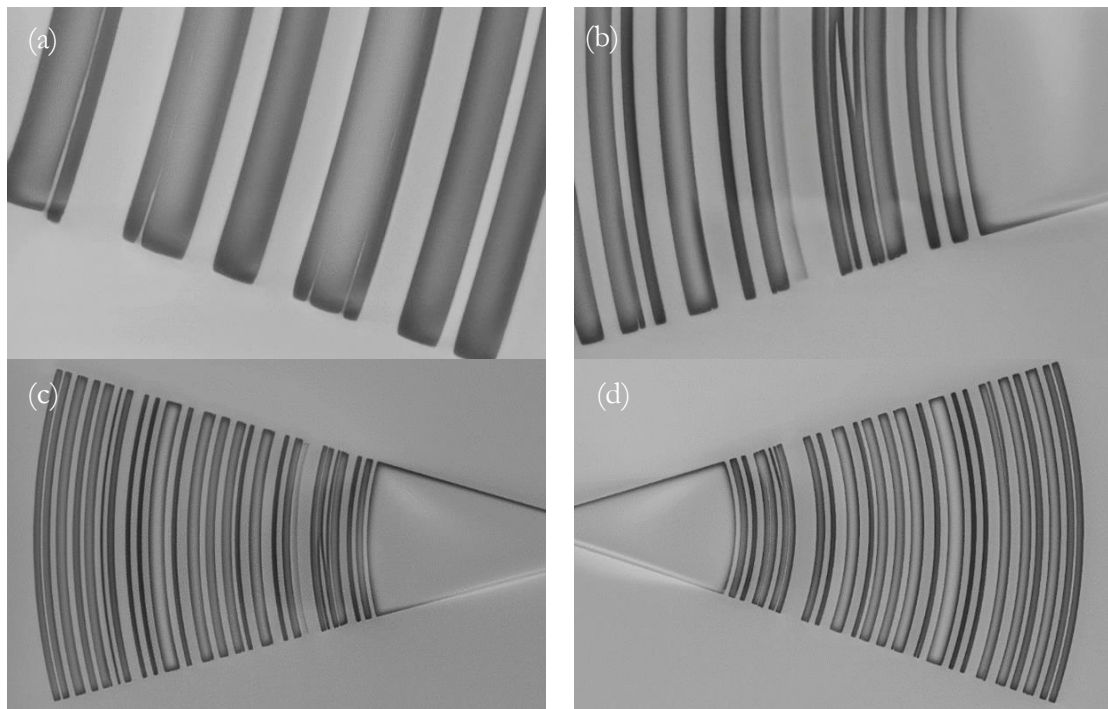


Figura 77. Detalhe dos defeitos indesejados nos dispositivos fabricados.

5.3.3 Modelo com AG com parâmetros representados por números reais

A dificuldade de fabricação decorrente da grande quantidade de variações de tamanho das depressões na estrutura inspirou uma nova rodada de busca. Desta vez, a abordagem foi simplificada utilizando otimização por números reais em um modelo com dupla periodicidade e possibilidade de parametrizar a altura da camada de SiNx, h_1 , e a profundidade da corrosão, h_2 (ver Figura 78).

Após 105 rodadas da rotina de AG e 37000 estruturas avaliadas, o melhor resultado foi aquele apresentado pela combinação de parâmetros $a = 398\text{nm}$, $b = 474\text{nm}$, $c = 598\text{nm}$, $d = 589\text{nm}$, $h_1 = 669\text{nm}$ e $h_2 = 599\text{nm}$. Para essa estrutura, os resultados numéricos indicam aproximadamente 52,5% de eficiência de acoplamento em 1550nm. A configuração dos materiais na grade otimizada com dupla periodicidade otimizada é apresentada na Figura 79,

a distribuição espacial do vetor de Poynting na Figura 80 e o espectro de eficiência de acoplamento e podem ser vistos na Figura 81.

Nota-se que existem duas saídas para a potência que incide sobre a grade, o da esquerda, que não foi utilizado nesta etapa, e o da direita, que é projetado para ter máxima potência de saída. O ângulo de incidência da onda eletromagnética é de 10° .

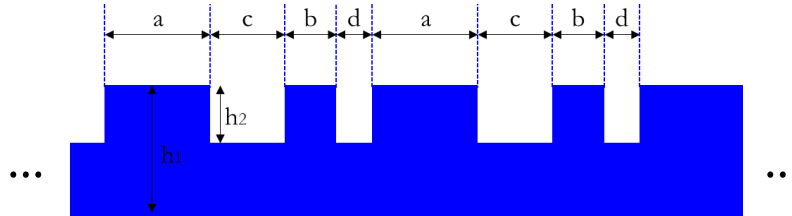


Figura 78. Modelo de grade de acoplamento com dupla periodicidade.

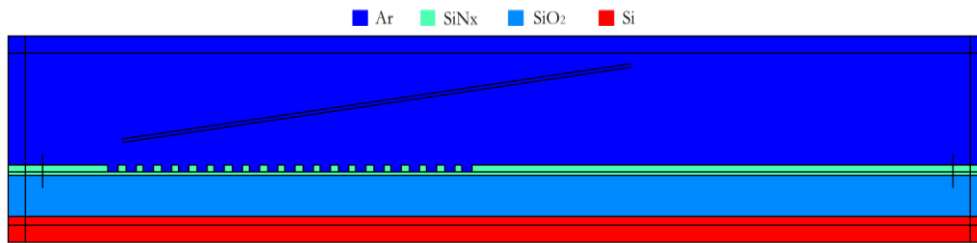


Figura 79. Configuração dos materiais na grade otimizada com dupla periodicidade.

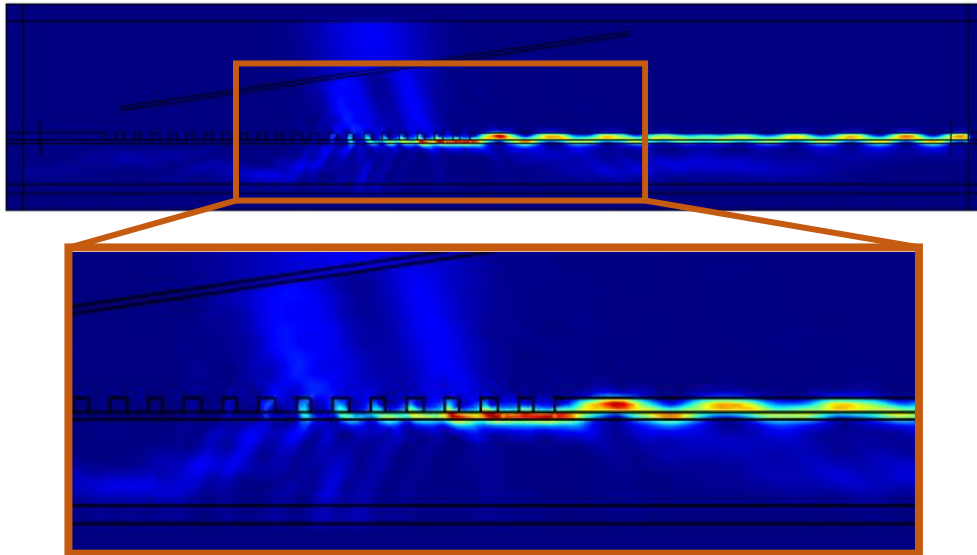


Figura 80. Distribuição espacial do fluxo de potência em 1550nm na grade otimizada com dupla periodicidade com detalhe para a região de interesse.

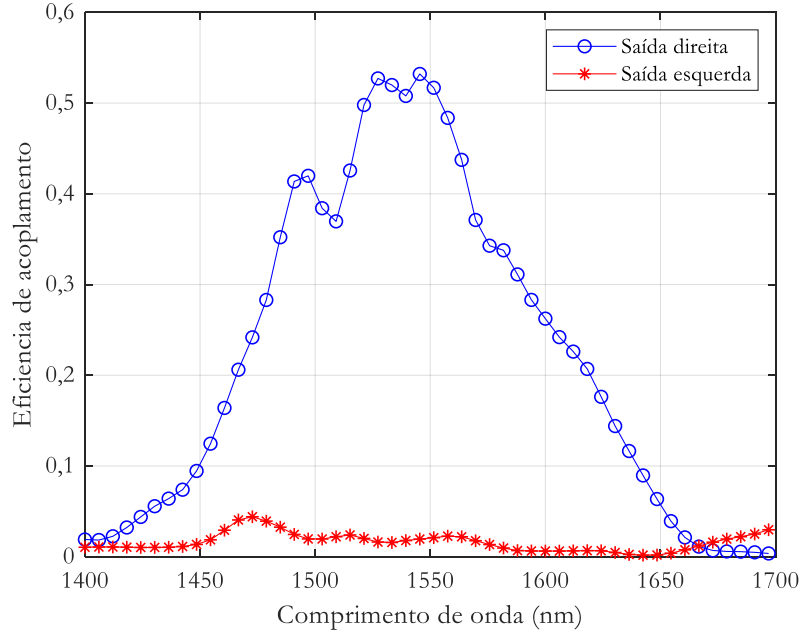


Figura 81. Espectro de eficiência de acoplamento para estrutura otimizada para maximizar 1550nm.

5.4 Projeto de grade de acoplamento bidirecional para dois comprimentos de onda

O modelo apresentado na seção anterior (ver Figura 78) foi utilizado para otimizar um acoplador cuja direção de acoplamento, para o guia da esquerda ou da direita, depende do comprimento de onda de operação, 1550nm ou 2000nm.

A função objetivo utilizada pelo AG precisou ser modificada para incluir a eficiência de acoplamento para o guia da esquerda, que foi desconsiderado na seção anterior. O AG buscou otimizar a função:

$$f = \frac{\eta_{D\lambda_1} + \eta_{E\lambda_2}}{2} \cdot \left(1 - \left| \frac{\eta_{D\lambda_1} - \eta_{E\lambda_2}}{\eta_{D\lambda_1} + \eta_{E\lambda_2}} \right| \right), \quad (47)$$

onde $\eta_{D\lambda_1}$ é a eficiência de acoplamento de 1550nm para o guia da direita, $\eta_{E\lambda_2}$ é a eficiência de acoplamento de 2000nm para o guia da esquerda. O objetivo, neste cenário, foi de otimizar o acoplamento para ambos comprimentos de onda e em direções de propagação opostas.

O termo entre parênteses foi inserido depois de sucessivas tentativas frustradas de otimização, que resultavam sempre na otimização de apenas uma das direções. Este termo tende à zero à medida em que os valores de eficiência de acoplamento em ambos os sentidos se aproximam. Utilizando este termo, foi possível otimizar simultaneamente a eficiência de acoplamento para a esquerda em 2000nm e para a direita em 1550nm.

Foram executadas 105 rodadas da rotina de AG, com 41268 avaliações da função objetivo. A grade que apresentou o melhor resultado tem como parâmetros $a = 407\text{nm}$, $b = 130\text{nm}$, $c = 384\text{nm}$, $d = 239\text{nm}$, $h_1 = 779\text{nm}$ e $h_2 = 597\text{nm}$. Com esta estrutura, foi possível obter aproximadamente 25% de eficiência de acoplamento para 1550nm no guia da direita e aproximadamente 26% de acoplamento para 2000nm no guia da esquerda.

A configuração dos materiais na grade otimizada com dupla periodicidade para dois comprimentos de onda, a distribuição espacial do vetor de Poynting em 1550nm e em 2000nm e o espectro de eficiência de acoplamento e podem ser vistos na Figura 82, Figura 83, Figura 84 e Figura 85, respectivamente.

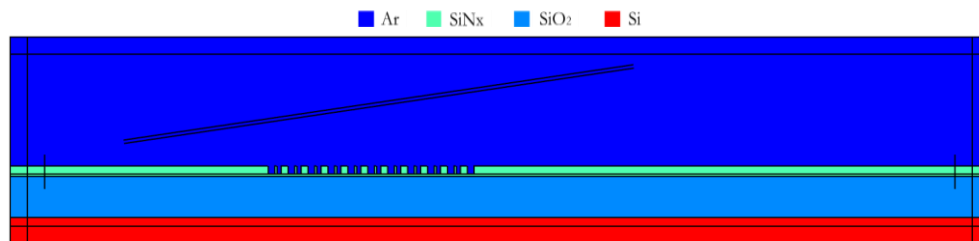


Figura 82. Configuração dos materiais na grade otimizada com dupla periodicidade para dois comprimentos.

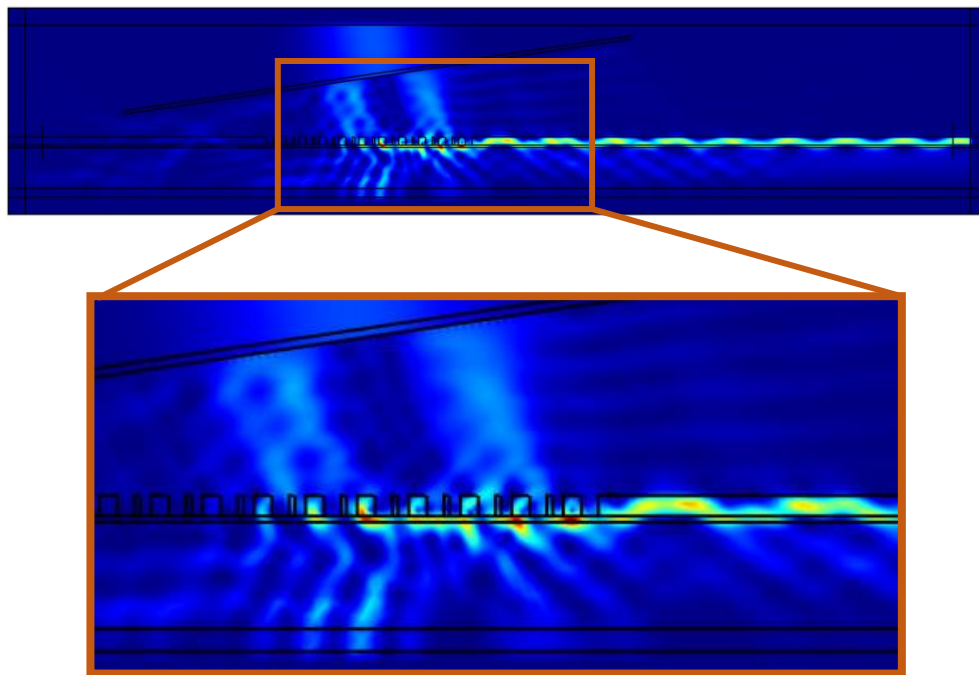


Figura 83. Distribuição espacial do fluxo de potência em 1550nm na grade otimizada com dupla periodicidade para dois comprimentos.

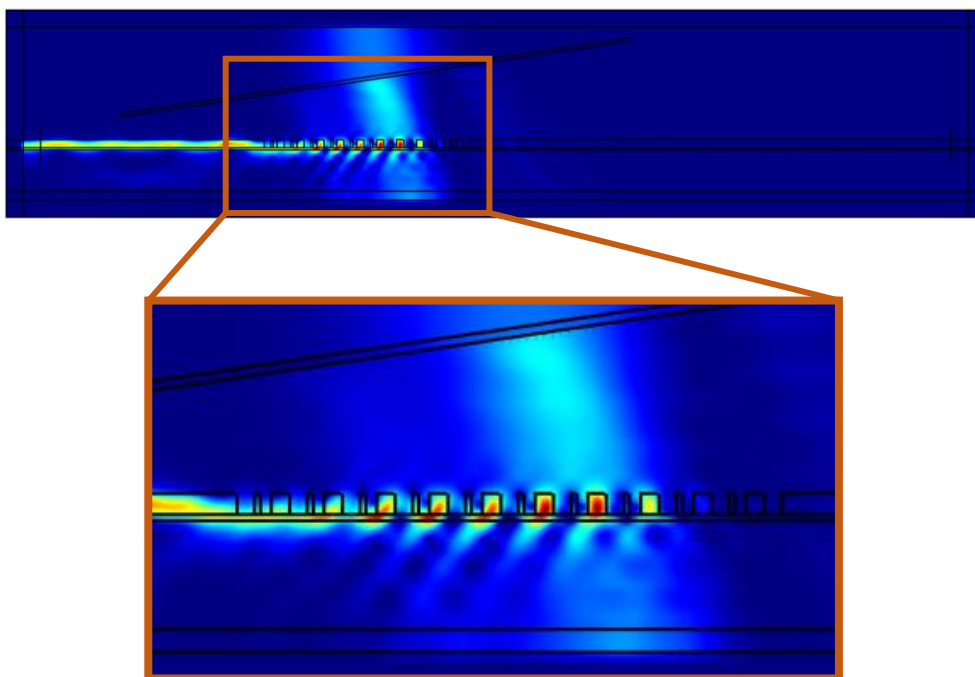


Figura 84. Distribuição espacial do fluxo de potência em 2000nm na grade otimizada com dupla periodicidade para dois comprimentos.

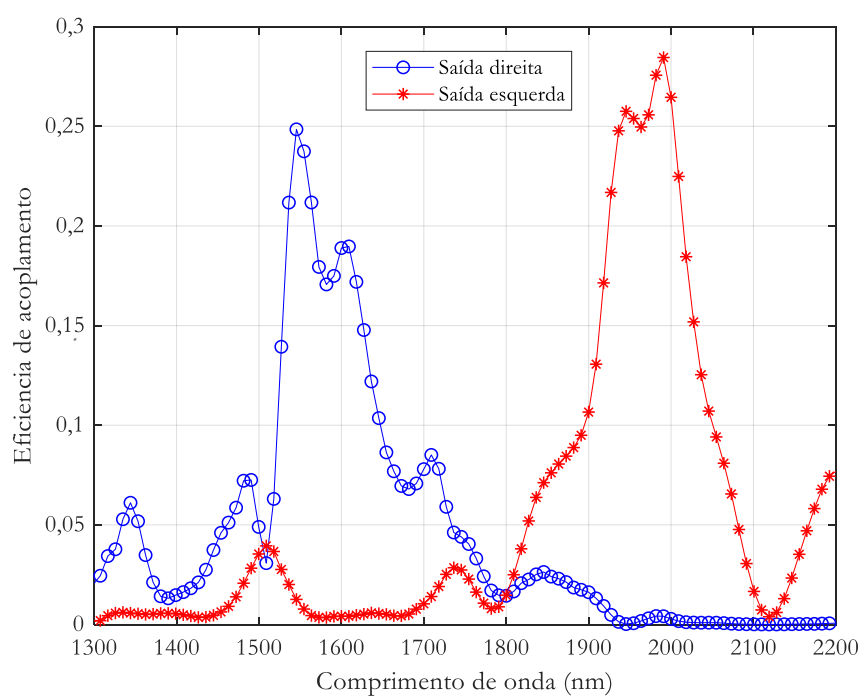


Figura 85. Espectro de eficiência de acoplamento para estrutura otimizada para maximizar 1550nm.

6 CONCLUSÃO

Este trabalho discute a utilização do fenômeno da ressonância plasmônica aplicada a metassuperfícies que apresentam absorção assimétrica em função da direção de propagação da onda eletromagnética incidente. O dispositivo proposto no capítulo 2 apresenta assimetria de absorção óptica com um pico unitário em comprimentos de onda próximos de 610nm e 733nm. Este dispositivo foi analisado por simulação quanto à sua sensibilidade à fabricação.

No terceiro capítulo, estruturas plasmônicas inovadoras são apresentadas. Estas estruturas, que foram projetadas a partir de busca otimizada auxiliada por AG, encontram aplicação em filtros ópticos em comprimentos de ondas sintonizáveis. São propostos filtros com absorção próximo à unidade em banda larga e passa-baixa com corte em $\lambda = 600\text{nm}$. Não foi possível obter filtro do tipo passa-alta com resultados satisfatórios, no entanto, as possíveis causas para a dificuldade do método utilizado em obter a resposta desejada foram discutidas e podem ser desenvolvidas em trabalhos futuros. Também foram propostos filtros multicamadas com comportamento assimétrico para a absorção, com picos de assimetria próximos à unidade.

A metodologia de busca utilizada para a realização dos dispositivos apresentados neste trabalho vem sendo utilizada no desenvolvimento de diversos outros estudos na área da fotônica. Baseado no paradigma do desenho inverso, no qual o comportamento físico desejado serve de parâmetro de entrada do problema, na forma de uma função objetivo, as diversas estruturas propostas neste trabalho foram projetadas com sucesso. Esta abordagem tem grande potencial diante do crescente aumento da complexidade dos sistemas ópticos, cujas funções buscam imitar os existentes componentes eletrônicos.

Os absorsores projetados, simulados, fabricados e caracterizados experimentalmente, apresentados no capítulo 4, demonstraram excelente concordância teórica-experimental. Estes dispositivos plasmônicos possuem aplicação em lasers pulsados de cavidade a fibra por propiciarem mecanismo de absorção saturável.

No capítulo 5, são propostas grades de acoplamento em parceria com os pesquisadores do grupo OCP, anfitriões durante o período sanduiche na França, e serão utilizadas para aplicação em lasers com cavidade de fibra óptica. Utilizando o AG, foi possível obter dispositivo que propicia eficiência de acoplamento próximo a 95% em $\lambda = 1550\text{nm}$. Também são apresentadas grades com acoplamento em duas direções, para dois comprimentos de onda diferentes, com eficiências próximas a 25% em $\lambda = 1550\text{nm}$ com feixe acoplado para a direção direita e 27% em $\lambda = 2000\text{nm}$ com acoplamento para a esquerda.

6.1 Publicações em revista associadas ao trabalho

- **Rêgo, Davi Franco**, Igor L. Gomes de Souza, e Vitaly Felix Rodriguez-Esquerre. *“Ultra-broadband plasmonic groove absorbers for visible light optimized by genetic algorithms”* OSA Continuum Vol. 1, Issue 3, pp. 796-804 (2018) DOI:10.1364/OSAC.1.000796
- I. L. Gomes de Souza, V. F. Rodriguez-Esquerre, e **D. F. Rêgo**, *“Wide-angle filters based on nanoresonators for the visible spectrum”* APPLIED OPTICS, v. 57, p. 6755, 2018. DOI: 10.1364/ao.57.006755
- J. Lima, J. Adam, **D. Rego**, V. Esquerre, e V. Bordo, *“Optical properties of nanowire metamaterials with gain”*, Optics Communications, Volume 379, 15 November 2016, Pages 25-31, DOI: 10.1016/j.optcom.2016.05.049

6.2 Publicações em congresso associadas ao trabalho

- **D. Franco Rego** e V. F. Rodriguez-Esquerre *“Automatic design of fiber to integrated silicon nitride waveguide coupling grating”*, NANOP2019, Munique, Livro de resumos, NANOPHOTONICS INTERNATIONAL CONFERENCE 2019.
- V. F. Rodriguez-Esquerre e **D. Franco Rego**, *“Asymmetrical absorption in plasmonic devices optimized by genetic algorithms,”* in *Plasmonics: Design, Materials, Fabrication, Characterization, and Applications XVI*, 2018, p. 110. DOI: 10.1117/12.2323206
- V. F. Rodriguez-Esquerre, I. L. Gomes de Souza e **D. Franco Rego**, *“Ultra-broadband plasmonic groove absorbers for visible light optimized by genetic algorithms”* SPIE 2018 V Proceedings Volume 10671, Metamaterials XI; 106712F DOI: 10.1117/12.2306446

- V. F. Rodriguez-Esquerre, I. L. Gomes de Souza e **D. Franco Rego**, *“Optical planar filter for visible RGB resonance”*, 2018, Strasbourg. Metamaterials XI, 2018. p. 83. DOI: 10.1117/12.2306444
- V. F. Rodriguez-Esquerre, I. L. Gomes de Souza e **D. Franco Rego**, *“Wideangle plasmonic filter for visible light applications,”* in *Plasmonics: Design, Materials, Fabrication, Characterization, and Applications XV*, 2017, p. 108. DOI: 10.1117/12.2273878
- V. F. Rodriguez-Esquerre e **D. Franco Rego**, *“Polarization independent asymmetric light absorption in plasmonic nanostructure”* Proc. SPIE 10346, Plasmonics: Design, Materials, Fabrication, Characterization, and Applications XV, 103462Q; DOI: 10.1117/12.2273741
- J. Lima, J. Adam, **D. Rego**, V. Esquerre, e V. Bordo, *“Propagation properties of silver nanowires embedded in a substrate with gain”* Proc. SPIE Metamaterials, Metadevices, and Metasystems 2016, vol. 9918, p. 99182Q. DOI: 10.1117/12.2239005

REFERÊNCIAS

- [1] C. F. Bohren and D. R. Huffman, *Absorption and scattering of light by small particles*. Wiley, 1998.
- [2] A. Boltasseva and H. A. Atwater, “Low-loss plasmonic metamaterials,” *Science*, vol. 331, no. 6015, pp. 290–291, 21-Jan-2011.
- [3] D. K. Gramotnev and S. I. Bozhevolnyi, “Plasmonics beyond the diffraction limit,” *Nature Photonics*, vol. 4, no. 2, pp. 83–91, Feb-2010.
- [4] K. Yao and Y. Liu, “Plasmonic metamaterials,” *Nanotechnol. Rev.*, vol. 3, no. 2, Jan. 2014.
- [5] G. E. Moore, “Cramming more components onto integrated circuits, Reprinted from Electronics, volume 38, number 8, April 19, 1965, pp.114 ff.,” *IEEE Solid-State Circuits Soc. Newsl.*, vol. 11, no. 3, pp. 33–35, Feb. 2009.
- [6] J. M. Shalf and R. Leland, “Computing beyond moore’s law,” *Computer (Long. Beach. Calif.)*, vol. 48, no. 12, pp. 14–23, Dec. 2015.
- [7] T. Alexoudi *et al.*, “Optics in computing: From photonic network-on-chip to chip-to-chip interconnects and disintegrated architectures,” *J. Light. Technol.*, vol. 37, no. 2, pp. 363–379, Jan. 2019.
- [8] E. Ozbay, “Plasmonics: Merging photonics and electronics at nanoscale dimensions,” *Science*, vol. 311, no. 5758, pp. 189–193, 13-Jan-2006.
- [9] W. L. Barnes, A. Dereux, and T. W. Ebbesen, “Surface plasmon subwavelength optics,” *Nature*, vol. 424, no. 6950, pp. 824–830, 2003.
- [10] S. A. Maier and H. A. Atwater, “Plasmonics: Localization and guiding of electromagnetic energy in metal/dielectric structures,” *Journal of Applied Physics*, vol. 98, no. 1, 01-Jul-2005.
- [11] J. N. Munday and H. A. Atwater, “Large integrated absorption enhancement in plasmonic solar cells by combining metallic gratings and antireflection coatings,” *Nano Lett.*, vol. 11, no. 6, pp. 2195–2201, Jun. 2011.
- [12] A. Baba, N. Aoki, K. Shinbo, K. Kato, and F. Kaneko, “Grating-coupled surface plasmon enhanced short-circuit current in organic thin-film photovoltaic cells,” *ACS Appl. Mater. Interfaces*, vol. 3, no. 6, pp. 2080–2084, Jun. 2011.
- [13] D. R. Smith, J. B. Pendry, and M. C. K. Wiltshire, “Metamaterials and negative refractive index,” *Science (80-.)*, vol. 305, no. 5685, pp. 788–792, 2004.

- [14] M. Choi *et al.*, “A terahertz metamaterial with unnaturally high refractive index,” *Nature*, vol. 470, no. 7334, p. 369, 2011.
- [15] S. A. Maier, *Plasmonics: fundamentals and applications*. Springer Science & Business Media, 2007.
- [16] M. Yamamoto, “Surface plasmon resonance (SPR) theory: tutorial,” *Rev. Polarogr.*, vol. 48, no. 3, pp. 209–237, 2002.
- [17] L. Novotny and B. Hecht, *Principles of nano-optics*. Cambridge university press, 2012.
- [18] L. K. Chau, Y. F. Lin, S. F. Cheng, and T. J. Lin, “Fiber-optic chemical and biochemical probes based on localized surface plasmon resonance,” *Sensors Actuators, B Chem.*, vol. 113, no. 1, pp. 100–105, Jan. 2006.
- [19] C. Valsecchi and A. G. Brolo, “Periodic Metallic Nanostructures as Plasmonic Chemical Sensors,” *Langmuir*, vol. 29, no. 19, pp. 5638–5649, May 2013.
- [20] S. Liu and Z. Tang, “Nanoparticle assemblies for biological and chemical sensing,” *J. Mater. Chem.*, vol. 20, no. 1, pp. 24–35, 2010.
- [21] B. Sepúlveda, P. C. Angelomé, L. M. Lechuga, and L. M. Liz-Marzán, “LSPR-based nanobiosensors,” *Nano Today*, vol. 4, no. 3, pp. 244–251, Jun-2009.
- [22] S. Butun and K. Aydin, “Asymmetric Light Absorption and Reflection in Freestanding Nanostructured Metallic Membranes,” *ACS Photonics*, vol. 2, no. 12, pp. 1652–1657, Dec. 2015.
- [23] S. Shu, Y. Zhan, C. Lee, J. Lu, and Y. Y. Li, “Wide angle and narrow-band asymmetric absorption in visible and near-infrared regime through lossy Bragg stacks,” *Sci. Rep.*, vol. 6, p. 27061, 2016.
- [24] J. Hao, L. Zhou, and M. Qiu, “Nearly total absorption of light and heat generation by plasmonic metamaterials,” *Phys. Rev. B*, vol. 83, no. 16, p. 165107, 2011.
- [25] L. Bourke and R. J. Blaikie, “Genetic algorithm optimization of grating coupled near-field interference lithography systems at extreme numerical apertures,” *J. Opt.*, vol. 19, no. 9, 2017.
- [26] D. Choi, Y. Lim, S. Roh, I.-M. Lee, J. Jung, and B. Lee, “Optical beam focusing with a metal slit array arranged along a semicircular surface and its optimization with a genetic algorithm,” *Appl. Opt.*, vol. 49, no. 7, pp. A30–A35, 2010.
- [27] A. Mirzaei, A. E. Miroshnichenko, I. V Shadrivov, and Y. S. Kivshar, “Superscattering of light optimized by a genetic algorithm,” *Appl. Phys. Lett.*, vol. 105, no. 1, p. 11109, 2014.

- [28] C. Forestiere *et al.*, “Genetically engineered plasmonic nanoarrays,” *Nano Lett.*, vol. 12, no. 4, pp. 2037–2044, 2012.
- [29] Y. Cui, K. H. Fung, J. Xu, S. He, and N. X. Fang, “Multiband plasmonic absorber based on transverse phase resonances,” *Opt. Express*, vol. 20, no. 16, pp. 17552–17559, 2012.
- [30] M. Kaliteevski *et al.*, “Tamm plasmon-polaritons: Possible electromagnetic states at the interface of a metal and a dielectric Bragg mirror,” *Phys. Rev. B*, vol. 76, no. 16, p. 165415, 2007.
- [31] N. P. Sergeant, O. Pincon, M. Agrawal, and P. Peumans, “Design of wide-angle solar-selective absorbers using aperiodic metal-dielectric stacks,” *Opt. Express*, vol. 17, no. 25, pp. 22800–22812, 2009.
- [32] W. Wang *et al.*, “Efficient multiband absorber based on one-dimensional periodic metal–dielectric photonic crystal with a reflective substrate,” *Opt. Lett.*, vol. 39, no. 2, pp. 331–334, 2014.
- [33] M. Diem, T. Koschny, and C. M. Soukoulis, “Wide-angle perfect absorber/thermal emitter in the terahertz regime,” *Phys. Rev. B - Condens. Matter Mater. Phys.*, vol. 79, no. 3, p. 033101, Jan. 2009.
- [34] M. Pu *et al.*, “Ultrathin broadband nearly perfect absorber with symmetrical coherent illumination,” *osapublishing.org*.
- [35] I. L. Gomes de Souza, V. F. Rodriguez-Esquerre, and D. F. Rêgo, “Wide-angle filters based on nanoresonators for the visible spectrum,” *Appl. Opt.*, vol. 57, no. 23, p. 6755, Aug. 2018.
- [36] Z. Zhang, Z. Yu, Y. Liang, and T. Xu, “Dual-band nearly perfect absorber at visible frequencies,” *Opt. Mater. Express*, vol. 8, no. 2, pp. 463–468, 2018.
- [37] J. A. Valdmanis, R. L. Fork, and J. P. Gordon, “GENERATION OF FEMTOSECOND OPTICAL PULSES DIRECTLY FROM LASERS BALANCING SELF-PHASE MODULATION, GROUP VELOCITY DISPERSION, SATURABLE ABSORPTION, AND SATURABLE GAIN,” 1985, pp. 80–82.
- [38] P. K. Khulbe, E. M. Wright, and M. Mansuripur, “Crystallization behavior of as-deposited, melt quenched, and primed amorphous states of Ge₂Sb_{2.3}Te₅ films,” *J. Appl. Phys.*, vol. 88, no. 7, p. 3926, Sep. 2000.

- [39] A. Dolatabady, N. Granpayeh, and V. Foroughi Nezhad, "A nanoscale refractive index sensor in two dimensional plasmonic waveguide with nanodisk resonator," *Opt. Commun.*, vol. 300, pp. 265–268, 2013.
- [40] J. H. Zhu, X. G. Huang, J. Tao, X. P. Jin, and X. Mei, "Nanometric plasmonic refractive index sensor," *Opt. Commun.*, vol. 285, no. 13–14, pp. 3242–3245, Jun. 2012.
- [41] S. Zou, F. Wang, R. Liang, L. Xiao, and M. Hu, "A nanoscale refractive index sensor based on asymmetric plasmonic waveguide with a ring resonator: A review," *IEEE Sens. J.*, vol. 15, no. 2, pp. 646–650, Feb. 2015.
- [42] F. Cheng, X. Yang, and J. Gao, "Enhancing intensity and refractive index sensing capability with infrared plasmonic perfect absorbers," *Opt. Lett.*, vol. 39, no. 11, pp. 3185–3188, 2014.
- [43] Z. Liu *et al.*, "Enhancing refractive index sensing capability with hybrid plasmonic–photonic absorbers," *J. Mater. Chem. C*, vol. 3, no. 17, pp. 4222–4226, 2015.
- [44] R. E. Ionescu *et al.*, "Fabrication of Annealed Gold Nanostructures on Pre-Treated Glow-Discharge Cleaned Glasses and Their Used for Localized Surface Plasmon Resonance (LSPR) and Surface Enhanced Raman Spectroscopy (SERS) Detection of Adsorbed (Bio)molecules," *Sensors (Basel)*, vol. 17, no. 2, Jan. 2017.
- [45] B. J. Y. Tan, C. H. Sow, T. S. Koh, K. C. Chin, A. T. S. Wee, and C. K. Ong, "Fabrication of Size-Tunable Gold Nanoparticles Array with Nanosphere Lithography, Reactive Ion Etching, and Thermal Annealing," *J. Phys. Chem. B*, vol. 109, no. 22, pp. 11100–11109, Jun. 2005.
- [46] M. Bechelany *et al.*, "Synthesis Mechanisms of Organized Gold Nanoparticles: Influence of Annealing Temperature and Atmosphere," *Cryst. Growth Des.*, vol. 10, no. 2, pp. 587–596, Feb. 2010.
- [47] M. M. P. Arnob, F. Zhao, J. Zeng, G. M. Santos, M. Li, and W.-C. Shih, "Laser rapid thermal annealing enables tunable plasmonics in nanoporous gold nanoparticles," *Nanoscale*, vol. 6, no. 21, pp. 12470–12475, 2014.
- [48] K. Niu, R. Sun, Q. Chen, B. Man, and H. Zhang, "Passively mode-locked Er-doped fiber laser based on SnS₂ nanosheets as a saturable absorber," *Photonics Res.*, vol. 6, no. 2, p. 72, Feb. 2018.
- [49] D. T. H. Tan, K. Ikeda, P. C. Sun, and Y. Fainman, "Group velocity dispersion and self phase modulation in silicon nitride waveguides," *Appl. Phys. Lett.*, vol. 96, no. 6, p. 061101, Feb. 2010.

- [50] D. Taillaert *et al.*, “An out-of-plane grating coupler for efficient butt-coupling between compact planar waveguides and single-mode fibers,” *IEEE J. Quantum Electron.*, vol. 38, no. 7, pp. 949–955, Jul. 2002.
- [51] X. Chen, C. Li, C. K. Y. Fung, S. M. G. Lo, and H. K. Tsang, “Apodized Waveguide Grating Couplers for Efficient Coupling to Optical Fibers,” *IEEE Photonics Technol. Lett.*, vol. 22, no. 15, pp. 1156–1158, Aug. 2010.
- [52] A. Z. Subramanian, S. Selvaraja, P. Verheyen, A. Dhakal, K. Komorowska, and R. Baets, “Near-Infrared Grating Couplers for Silicon Nitride Photonic Wires,” *IEEE Photonics Technol. Lett.*, vol. 24, no. 19, pp. 1700–1703, Oct. 2012.
- [53] D. F. G. Gallagher and T. P. Felici, “Eigenmode Expansion Methods for Simulation of Optical Propagation in Photonics-Pros and Cons,” Photonics West, 2003.
- [54] Y. Zhu *et al.*, “Ultra-compact silicon nitride grating coupler for microscopy systems,” *Opt. Express*, vol. 25, no. 26, p. 33297, Dec. 2017.
- [55] E. W. Ong, N. M. Fahrenkopf, and D. D. Coolbaugh, “SiN_x bilayer grating coupler for photonic systems,” *OSA Contin.*, vol. 1, no. 1, p. 13, Sep. 2018.
- [56] C. R. Doerr, L. Chen, Y.-K. Chen, and L. L. Buhl, “Wide Bandwidth Silicon Nitride Grating Coupler,” *IEEE Photonics Technol. Lett.*, vol. 22, no. 19, pp. 1461–1463, Oct. 2010.
- [57] Y. Chen, R. Halir, Í. Molina-Fernández, P. Cheben, and J.-J. He, “High-efficiency apodized-imaging chip-fiber grating coupler for silicon nitride waveguides,” *Opt. Lett.*, vol. 41, no. 21, p. 5059, Nov. 2016.
- [58] S. Nambiar, A. Kumar, R. Kallega, P. Ranganath, and S. K. Selvaraja, “High-Efficiency Grating Coupler in 400 nm and 500 nm PECVD Silicon Nitride With Bottom Reflector,” *IEEE Photonics J.*, vol. 11, no. 5, pp. 1–13, Aug. 2019.