

Optik Frekanslarında Plasmonik Yapıların Çok Seviyeli Hızlı Çokkutup Yöntemi ile Hızlı ve Doğru Analizleri

Barışcan Karaosmanoğlu, Akif Yılmaz, Özgür Ergül
Orta Doğu Teknik Üniversitesi
Elektrik ve Elektronik Mühendisliği Bölümü
Ankara
bariscan@metu.edu.tr

Özet: Bu çalışmada, optik frekanslarındaki plasmonik yapıların yüzey integral denklemleri ve çok seviyeli hızlı çokkutup yöntemi ile elektromanyetik çözümleri gösterilmiştir. Yüksek plasmonik aktivite gösteren yapıların geleneksel yüzey formülasyonlarıyla gerçekleştirilen benzetimlerde ciddi seviyede hatalar verdiği tespit edilmiştir. Hata kaynaklarının belirlenmesi sonucunda, dengeli matris denklemleri oluşturabilen yeni yüzey integral denklemleri geliştirilmiştir. Geliştirilen yeni formülasyonlar, çeşitli plasmonik yapıların çözümlerinde kullanılmış ve bu formülasyonların geleneksel yöntemlerden daha doğru ve verimli çözümler verdiği gösterilmiştir.

Abstract: In this work, the electromagnetic solutions of plasmonic structures at optical frequencies using surface integral equations and the multilevel fast multipole algorithm are presented. It has been shown that the simulations of the structures with highly plasmonic activities involve high levels of inaccuracy, when the conventional surface formulations are used. By identifying the error sources, novel surface integral equations, that provide balanced matrix equations, are developed. The new formulations are applied on various plasmonic structures and are observed to provide more accurate and efficient results than the conventional methods.

1. Giriş

Son yıllarda nanoteknolojideki gelişmelere paralel olarak, plasmonik yapıların elektromanyetik benzetimleri birçok araştırmaya konu olmuştur [1]-[4]. Optik frekanslarında plasmonik hale gelen metallerin, Lorentz-Drude modelleriyle homojenleştirilebildiği ve yüzey formülasyonları ile çözülebildiği literatürde iyi bilinmektedir. Fakat hangi formülasyonun en doğru, kararlı ve verimli sonuçlar verdiği konusunda ortak bir noktaya varılamamıştır. Gerçekçi plasmonik problemlerin birçoğu elektriksel olarak büyük yapılar içerdiğinden, sayısal çözümler için çok seviyeli hızlı çokkutup yöntemi (MLFMA) gibi hızlı yöntemlere ihtiyaç duyulmaktadır [5], [6]. Dolayısıyla, formülasyonların karşılaştırılması, iteratif çözümler kapsamında gerçekleştirilmelidir.

Bu çalışmada ilk olarak, plasmonik yapıların optik frekanslarında geleneksel yüzey formülasyonları ile çözüldüğünde yeterli doğrulukta sonuçlar elde edilemediği gösterilmektedir. Ardından, matris denklemlerinde, negatif elektriksel geçirgenlik sonucu oluşan dengesiz blokların hatalı sonuçlara yol açtığı gösterilmiştir. Bu doğrultuda, plasmonik problemler için dengeli ve doğru sonuçlar veren matris denklemleri oluşturan, değiştirilmiş birleşik teğet formülasyonu (MCTF) geliştirilmiştir. Sayısal sonuçlar olarak, formülasyonların doğruluklarını analitik sonuçlarla karşılaştırmak adına, plasmonik küre problemlerinin çözümleri gerçekleştirilmiştir. Ayrıca, optik frekanslarında 2x1 gümüş nanoçubuklar içeren iletim problemlerinin analizleri gerçekleştirilmiş ve bu tür gerçekçi problemlerin hızlı ve doğru çözümleri kapsamında, geleneksel ve yeni formülasyonlar karşılaştırılmıştır.

2. Yüzey İntegral Denklemleri

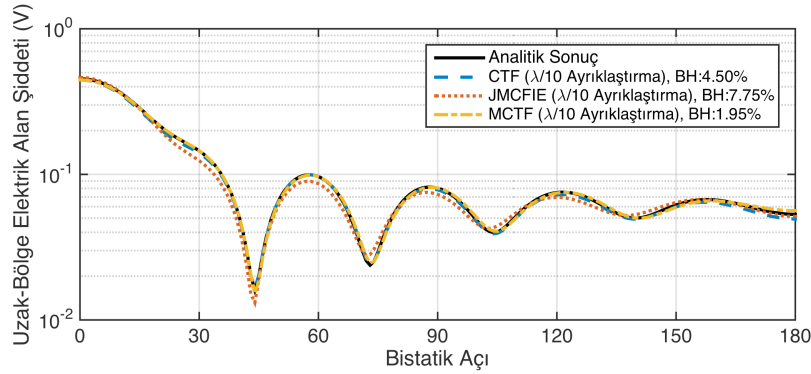
Bu çalışmada, plasmonik yapılar, girilebilir diyelektrik malzemeler olarak ele alınmıştır. Dolayısıyla, yapıların elektriksel geçirgenlik değerleri, $\epsilon = -\epsilon_r + i\epsilon_i$ olarak gösterilebilmektedir. Sınırlar üzerindeki elektrik ve manyetik yüzey akımları, Rao-Wilton-Glisson (RWG) fonksiyonları ile ayrıklaştırılmıştır. Normal ve birleşik formülasyonlarına RWG ayrıklaştırması uygulandığında, teğet formülasyonlarına göre daha hatalı sonuçlar elde edilmektedir [7]. Normal ve birleşik formülasyonlarındaki bu hata, yüksek kontrastlı cisimlerin elektromanyetik

çözümünde daha da çok artmaktadır. Metaller, yakın kızılötesi gibi optik frekanslarında, yüksek ϵ_R değerlerine ulaşmaktadır. Dolayısıyla, birleşik-normal formülasyonu (CNF) [8] ve elektrik ve manyetik akımı birleşik-alan integral denklemi (JMCFIE) [9] gibi yöntemlerle gerçekleştirilen benzetimler, beklendiği üzere hatalı sonuçlar vermektedir. Öte yandan, teğet formülasyonları plasmonik yapılar için çok daha farklı bir davranış sergilemektedir. Poggio-Miller-Chang-Harrington-Wu-Tsai (PMCHWT) formülasyonunun doğru sonuçlar verdiği yıllardır bilinmektedir. Fakat PMCHWT formülasyonu ile oluşturulan matris denklemlerinin çözümlerinde çok yüksek sayılarda iterasyona ihtiyaç duyulmaktadır. Alternatif olarak, birleşik-teğet formülasyonu (CTF) [8] ideal bir teğet formülasyonu olarak gösterilebilir. Ancak, CTF de yüksek ϵ_R değerleri için dengesiz matris blokları oluşturmakta ve hatalı sonuçlar vermektedir. Çözüm olarak değiştirilmiş birleşik-teğet formülasyonu (MCTF) geliştirilmiş, ve bu yeni formülasyonun plasmonik problemler için etkin çözümler ve doğru sonuçlar verdiği gösterilmiştir.

3. Sayısal Örnekler

İlk olarak, farklı formülasyonların plasmonik problemlerin çözümündeki doğrulukları karşılaştırılmıştır. Bu doğrultuda, 2λ çapındaki bir kürenin 250 THz'teki saçılımı incelenmiş ve elde edilen sayısal sonuçlar analitik sonuçlarla karşılaştırılmıştır. Materyal olarak, optik frekanslarında sıkça kullanılan gümüş seçilmiştir. Gümüşün göreceli elektriksel geçirgenlik değeri, Lorentz-Drude modelinin kullanılmasıyla, yaklaşık $-60.76+4.3i$ olarak belirlenmiştir [10]. Kürenin yüzeyine $\lambda/10$ boyunda üçgen ayrıklaştırması uygulanmıştır. Tüm formülasyonlar için standart Galerkin yöntemi kullanılmış, baz ve test fonksiyonları RWG olarak seçilmiştir. Ayrıklaştırılmış geometri için üç ayrı formülasyon (CTF, JMCFIE, ve MCTF) kullanılmış ve matris denklemleri iteratif olarak çözülmüştür. İteratif çözücü olarak GMRES tercih edilmiş ve matris-vektör çarpımları MLFMA ile hızlandırılmıştır.

Yukarıda bahsedilen kürenin farklı formülasyonlar için uzak-bölge elektrik alan saçılım değerleri bstatik açıya bağlı olarak Şekil 1'de gösterilmiştir. CTF, JMCFIE, ve MCTF formülasyonlarıyla elde edilen saçılım değerleri, analitik sonuçlar ile karşılaştırıldığında sırasıyla, %4.5, %7.75, ve %1.95 bağıl hata elde edilmiştir. Bir çok uygulama için, CTF ve JMCFIE'de gözlemlenen bu bağıl hatalar kabul edilebilir seviyenin üstündedir. Bu kapsamda, yalnızca MCTF'nin güvenilir sonuçlar verdiği söylenebilmektedir.



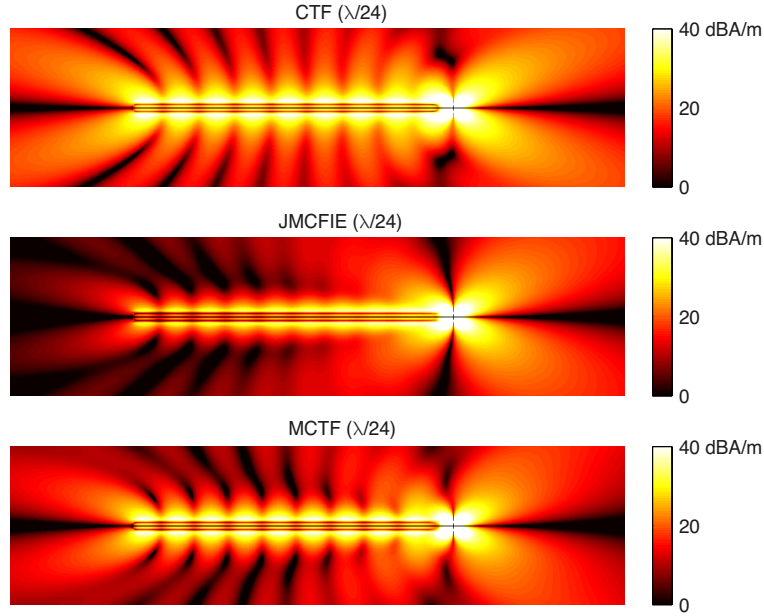
Şekil 1. Çapı 2λ olan gümüş bir kürenin 250 THz'de aydınlatılması sonucu elde edilen uzak-bölge elektrik alan saçılım değerleri. Problem için CTF, JMCFIE, ve MCTF kullanılmış ve elde edilen matris denklemleri MLFMA ile çözülmüştür.

Küre gibi kanonik geometrilerin çözümlerine ek olarak, formülasyonların karşılaştırılması için 2×1 'lik nanoçubuk sisteminden iletim gibi gerçekçi problemler ele alınmıştır. Şekil 2'de gösterilen sonuçlarda kesitleri kare şeklinde olan nanoçubuklar $0.1 \mu\text{m}$ genişliğinde ve $5 \mu\text{m}$ uzunluğundadır. Çubukların arasındaki mesafe $0.1 \mu\text{m}$ olarak sabitlenmiştir. Gümüş olan nanoçubuklar 250 THz'de incelenmiştir. Geometri $\lambda/24$ boyunda üçgenlerle ayrıklaştırılmış ve 4896 bilinmeyenli matris denklemleri elde edilmiştir. Nanoçubuklar, $0.2 \mu\text{m}$ uzağına yerleştirilen, birbiri ile zıt yöndeki iki Hertz dipolü ile aydınlatılmıştır.

Şekil 2'de iki nanoçubuk sisteminin dipol ile aydınlatılması sonucu, çevresinde oluşan toplam manyetik alan değerleri dB cinsinden gösterilmiştir. Yakınsama analizleri doğrultusunda, birbirinden farklı sonuçlar veren formülasyonlardan sadece MCTF'nin güvenilir değerler verdiği tespit edilmiştir.

4. Sonuç

Plasmonik yapılar, reel kısmı negatif olan karmaşık elektriksel geçirgenlik değerleriyle modellendiklerinde, yüzey formülasyonları ile çözülebilmektedir. Ancak, elektriksel geçirgenliğin negatif reel kısmı, geleneksel yüzey formülasyonlarının hatalı sonuçlar vermesine sebep olmaktadır. Bu çalışmada, MCTF adında, sayısal olarak dengeli matris denklemi oluşturabilen, yeni bir formülasyon geliştirilmiştir. MCTF'nin kanonik ve gerçekçi plasmonik problemleri, geleneksel formülasyonlara göre, daha hassas olarak modelleyebildiği gösterilmiştir.



Şekil 2. 2x1 gümüş nanoçubukların, 250 THz'de iki Hertz dipolu ile aydınlatılması sonucu etrafında oluşan manyetik alan dağılımı.

Kaynaklar

- [1]. Rodriguez-Oliveros, R. ve Sanchez-Gil, J. A., "Localized surface-plasmon resonances on single and coupled nanoparticles through surface integral equations for flexible surfaces," Opt. Exp., cilt.16, no.13, s.12208–12219, Haz. 2011.
- [2]. Ergül, Ö., "Analysis of composite nanoparticles with surface integral equations and the multilevel fast multipole algorithm," J. Opt., cilt.14, no.6, s.062701-1–062701-4, Haz. 2012.
- [3]. Makitalo, J., Kauranen, M., ve S. Suuriniemi, "Modes and resonances of plasmonic scatterers," Phys. Rev. B., cilt.89, no.165429, Nis. 2014.
- [4]. Gomez-Sousa, H., Rubinos-Lopez, O., ve Martinez-Lorenzo, J. A., "Comparison of iterative solvers for electromagnetic analysis of plasmonic nanostructures using multiple surface integral equation formulations," Online: arXiv:1510.05337.
- [5]. Chew, W. C., Jin, J.-M., Michielssen, E., ve Song, J., "Fast and Efficient Algorithms in Computational Electromagnetics", Artech House, 2001.
- [6]. Ergül, Ö., "Solutions of large-scale electromagnetics problems involving dielectric objects with the parallel multilevel fast multipole algorithm," J. Opt. Soc. Am. A., cilt.28, no.11, s.2261–2268, Kas. 2011.
- [7]. Ergül, Ö. ve Gürel, L., "Discretization error due to the identity operator in surface integral equations," Comput. Phys. Comm., cilt.180, no.10, s.1746–1752, Eki. 2009.
- [8]. Yla-Oijala, P., Taskinen, M., ve Jarvenpaa, S., "Surface integral equation formulations for solving electromagnetic scattering problems with iterative methods," Radio Sci., cilt.40, no.6002, Ara. 2005.
- [9]. Yla-Oijala, P. ve Taskinen, M., "Application of combined field integral equation for electromagnetic scattering by dielectric and composite objects," IEEE Trans. Antennas Propag., cilt.53, no.3, s.1168–1173, Mar. 2005.
- [10]. Johnson, P. B. ve Christy, R. W., "Optical constants of the noble metals," Phys. Rev. B, cilt.6, no.12, s.4370–4379, Ara. 1972.