

DISS. ETH No. 21381

**NUMERICAL ANALYSIS OF
PHOTONIC NANO STRUCTURES
IN LAYERED GEOMETRIES**

A dissertation submitted to the

ETH ZÜRICH

for the degree of
Doctor of Sciences

presented by

AYTAÇ ALPARSLAN

B.S. in Electrical and Electronics Engineering

M.S. in Electrical and Computer Engineering

Koç University, Istanbul, Turkey

born January 23, 1983

citizen of Turkey

accepted on the recommendation of

Prof. Dr. Ch. Hafner, examiner

Prof. Dr. M. I. Aksun, co-examiner

Prof. Dr. L. Novotny, co-examiner

2013

Abstract

Layered geometries play a very important role in electromagnetics (EM). Their unique features (guided/surface waves, localization of energy, transmission and reflection characteristics, etc) were used in a vast number of applications in the microwave and radio frequency regimes for decades. Recently, following the improvements in the fabrication techniques of structures with dimensions comparable with the wavelength of the visible spectrum, layered geometries have become quite popular in nano photonics. Following this increased interest, it has been highly desirable to analyze nano structures built in layered geometries in an efficient and reliable way. The method of multiple multipoles (MMP), which is a semi-analytic boundary discretization method, is a very strong candidate for such an analysis. But the complexity of classical MMP solutions (that use homogenous medium basis functions) increases dramatically with the number of layers, since special truncation techniques are needed for infinitely long boundaries of the layered media that requires advanced user experience. In order to tackle this problem and to use the advantages of MMP with no additional complexity, layered media Green's functions in 2D and 3D geometries are included in the MMP analysis.

In MMP, linear combinations of analytical solutions of Maxwell's equations (called expansions) are used for the general analysis of structures in presence of EM radiation. Therefore, the layered media Green's functions (which require the numerical evaluation of oscillatory and singular integrals, called Sommerfeld integrations) should be obtained with a high accuracy for using them as new expansion sets in MMP. In this thesis, numerical techniques for obtaining layered media Green's functions in 2D and 3D settings with very high accuracy, are introduced. The impact of the Sommerfeld integration path on the efficiency of layered media Green's function calculations is analyzed in detail. As a result of this analysis, several rules for the shape of the Sommerfeld integration path are introduced in order to obtain the layered media Green's functions for all kinds of material parameters and thickness values of layers. Computationally demanding numerical examples are also included, in order to demonstrate the efficiency of the technique together with discussions on important aspects.

Several unique updates are also introduced in the definition of layered media Green's functions in order to perform new types of analyses or to further decrease the complexity of the problems. One of these updates is the modified 2D layered media Green's functions with a nonzero out-of-plane wave vector component, used in the MMP eigenvalue analysis of 2D photonic waveguides in layered geometries (in commercial software literature this is often called mode

analysis). By this new technique it is possible to obtain all the physical eigenvalues (modes) of a waveguide in the range of interest, which is a demanding task for all of the well known numerical methods. The second unique update is the so called complex origin layered media Green's functions that changes the propagation pattern of fields generated by infinitesimal sources in layered geometries. This update uses the concept of complex origin multipole expansions in free space that produce beams. By using the complex origin layered expansions in MMP, it is possible to decrease the total number of expansions and the solution time for the simulations, especially for long structures compared to the wavelength. Finally, all the numerical tools needed and results of the derivations are documented as an appendix for writing a general computer code from scratch, that calculates the layered geometry Green's functions, including the updates mentioned above in 2D and 3D settings.

MMP, that is used extensively in the thesis, is described including a detailed analysis of the structure of the corresponding matrix equations. The details of the MMP scattering and eigenvalue analyses for the nano structures built in layered geometries are introduced and important aspects are addressed. Various numerical examples including the comparison of results with commercial software, scattering cross section calculations, implementation of complex origin layered expansions in MMP problems, eigenvalue analysis of plasmonic waveguides and optimization of nano structures are also presented to demonstrate the efficiency of the new method in the different analyses of nano structures in layered geometries. As a result of this work, a robust, reliable and efficient numerical tool for the analysis of nano structures in layered media is presented.

Zusammenfassung

Geschichtete Strukturen spielen seit langem eine grosse Rolle in der elektromagnetischen Feldtheorie. Deren spezielle Eigenschaften (geführte und Oberflächenwellen, Energielokalisation, Transmissions- und Reflexionscharakteristik, usw.) wurden über Jahrzehnte in unzähligen Anwendungen im Mikrowellen- und Radiofrequenzbereich ausgenutzt. Dank Fortschritten in der Herstellung von geschichteten Strukturen mit Dimensionen im Bereich der Wellenlänge des sichtbaren Lichts, haben sie auch weit verbreitet Anwendung gefunden in der Nanophotonik. Folglich entstand ein grosses Bedürfnis, Nanostrukturen in geschichteten Geometrien auch numerisch analysieren zu können. MMP (multiple multipoles), eine semi-analytische Grenzflächendiskretisierungsmethode, ist eine geeignete Methode für solche Berechnungen.

Die Komplexität von klassischen MMP Lösungen erhöht sich dramatisch mit der Zahl der Schichten. Zudem müssen die im Prinzip unendlich langen Grenzflächen in geeigneter Weise begrenzt werden, was viel Erfahrung des Benutzers erfordert. Um dem Abhilfe zu schaffen und die Vorteile von MMP ohne zusätzliche Komplexität ausnützen zu können, werden adaptierte Green's Funktionen für geschichtete 2D und 3D Strukturen als Neuerung in MMP eingeführt. Um die elektromagnetischen Felder in einer gewünschten Struktur mit MMP berechnen zu können, werden analytische Lösungen der Maxwell Gleichungen (genannt Entwicklungsfunktionen) gebraucht. Damit die Green's Funktionen für geschichtete 2D und 3D Strukturen als neues Set von Entwicklungsfunktionen für MMP verwendet werden können müssen sie mit hoher Genauigkeit berechnet werden können (dies erfordert die numerische Berechnung von oszillierenden und singulären Integralen, auch Sommerfeld Integrale genannt). In der vorliegenden Dissertation werden numerische Methoden eingeführt, um diese Berechnungen mit sehr hoher Genauigkeit ausführen zu können. Ausserdem wird der Einfluss des Integrationspfades auf die Berechnungseffizienz des Sommerfeld Integrals im Detail analysiert. Daraus werden verschiedene Regeln für die Form des Sommerfeld Integrationspfades abgeleitet um die Green's Funktionen für verschiedenste Schichtdicken und Materialien effizient berechnen zu können. Die Leistungsfähigkeit und wichtige Aspekte der Technik werden anhand von rechenintensiven Beispielen demonstriert.

Die Green's Funktionen für mehrschichtige Strukturen werden mit einigen besonderen Erweiterungen versehen um neuartige Auswertungen vornehmen zu können oder Um die Komplexität des Problems weiter verringern zu können. Eine dieser Erweiterungen ist eine modifizierte 2D Greens Funktion für geschichtete Strukturen, die einen von null verschiedenen Wellenvektor aus der Ebene

heraus erlaubt. Dies wird in MMP für die Eigenwertberechnung von 2D photonischen Wellenleitern in geschichteten Strukturen benötigt (in kommerzieller Software wird dies oft als Moden Analyse bezeichnet). Mit dieser neuen Technik ist es möglich, alle physikalischen Eigenwerte (Moden) eines Wellenleiters zu finden; etwas, was für alle bekannten numerischen Methoden eine herausfordernde Aufgabe ist. Die zweite Erweiterung sind die sogenannten Greens Funktionen für geschichtete Strukturen mit komplexem Ursprung die das Ausbreitungsmuster von Feldern verändern, die von einer infinitesimalen Quelle angeregt werden. Dies erlaubt die Reduktion der Zahl der Entwicklungsfunktionen und damit der Rechenzeit, speziell für Strukturen die gross sind im Verhältnis zur Wellenlänge. Diese Neuerung ist inspiriert vom Konzept der Multipol Entwicklung komplexen Ursprungs für homogene Geometrien.

MMP wird in der vorliegenden Arbeit intensiv gebraucht und wird deshalb detailliert beschrieben inklusive einer Analyse der Struktur der zugehörigen Matrix Gleichungen. Ebenso werden die Details und wichtige Aspekte der Streuprozess- und Eigenwertanalyse in MMP für Nano Strukturen in geschichteten Geometrien eingeführt und diskutiert.

Verschiedenste numerische Beispiele wie der Vergleich mit kommerziellen Softwarepaketen, die Streuquerschnittberechnung, die Eigenwertanalyse von plasmatischen Wellenleitern und die Optimierung von nano Strukturen demonstrieren die Leistungsfähigkeit der neuen Methode.

Schliesslich werden alle benötigten numerischen Methoden und Herleitungen im Anhang zusammengefasst. Dies erlaubt die Entwicklung von Software Code für die Berechnung der Green's Funktionen inklusive der oben erwähnten Erweiterungen von Grund auf.

Aus der vorliegenden Arbeit resultiert ein zuverlässiges, robustes und effizientes numerisches Tool für die Analyse von Nanostrukturen in geschichteten Geometrien.