

DISS. ETH No. 22191

**FINITE ELEMENT
SIMULATIONS AND OPTIMIZATIONS OF
PLASMONIC STRUCTURES IN LAYERED MEDIA**

A dissertation submitted to the

ETH ZÜRICH

for the degree of
Doctor of Sciences

presented by
MENGYU WANG

B.S. in Electrical and Electronics Engineering
M.S. in Electrical and Computer Engineering
Zhejiang University, Hangzhou, China

born June 20, 1983

citizen of China

accepted on the recommendation of

Prof. Dr. Ch. Hafner, examiner
Prof. Dr. R. Hiptmair, co-examiner
Dr. Ch., Engström co-examiner

2014

Abstract

This thesis focuses on the finite element modeling and optimization of plasmonic structures in layered media. In plasmonics, the lossy and dispersive nature of metals causes special effects, such as surface plasmon resonances and strong local field enhancement. These effects cause many challenges for the numerical solvers, namely rapid field variation and field singularities. Layered media need additional effects, *e. g.*, guided waves. Plasmonic objects embedded in layered media can be utilized as optical antennas, sensors, and couplers, which are of great value in many applications of plasmonics. However, layered media also lead several challenges to numerical solvers. The layers are assumed to extend to infinity. Therefore the computational domain must be properly truncated. Moreover, layered structures lead to more complicated field distributions than standard free space scattering.

We first consider the advantages and disadvantages of many classes of numerical solvers with respect to plasmonic effects. This thesis focuses on the finite element implementation in the frequency domain, which is considered to be most appropriate for complicated plasmonic configurations. After comparing many candidates, the high order curvilinear finite element package **CONCEPTs** is chosen.

Absorbing boundary conditions (ABCs) are formulated to study open scattering problems. Then the Bayliss-Gunzburger-Turkel (BGT) conditions are implemented in **CONCEPTs**. The BGT conditions of different orders are studied and compared. Moreover, the perfectly matched layers (PMLs) are formulated to study the plasmonic structures in layered media. Then Cartesian PML is implemented in **CONCEPTs**. *hp*-FEM analyses are performed thoroughly to study the behavior of PML. Based on them, an *hp*-strategy is proposed and applied.

Another part of the thesis is on the optimization of the plasmonics structures. Unlike the traditional radio frequency (RF) applications, plasmonic devices may resonate even if they are much smaller than the wavelength. Therefore, the design of plasmonic devices is much more demanding. A framework of a combination of numerical optimizers with numerical field solvers is implemented. As an example, we study two versions of ultra short two-dimensional plasmonic waveguide couplers. The program optimizes the problem using an evolution strategy (ES). Finally, optimized geometries are obtained. For the simpler version of the waveguide coupler, the multiple multipole program (MMP) solution is used for a comparison as well.

Zusammenfassung

Diese Dissertation befasst sich mit der Finite Elemente Modellierung und der Optimierung von plasmonischen Strukturen in mehrschichtigen Anordnungen. In der Plasmonik führen Verluste und Dispersion von Metallen zu speziellen Effekten wie Resonanzen von Oberflächenplasmonen und starken lokalen Feldüberhöhungen. Diese Effekte führen zu mehreren Herausforderungen für numerische Feldberechnungsverfahren, namentlich rasche Feldänderungen und Feldsingularitäten.

Mehrschichtstrukturen führen zu weiteren Effekten wie geführten Wellen. Plasmonische Objekte, welche in Mehrschichtstrukturen eingebettet sind können als optische Antennen, Sensoren und Koppler ausgenutzt werden. Diese sind für diverse Anwendungen von grossem Wert. Mehrschichtstrukturen bringen aber auch einige Herausforderungen für numerische Verfahren mit sich. Weil die Schichten als unendlich ausgedehnt betrachtet werden, muss das Deltdgebiet für die Berechnungen passend begrenzt werden. Darüber hinaus führen Mehrschichtstrukturen zu komplizierteren Feldverteilungen als gewöhnlich Streuung an Objekten im Freiraum.

Zu Beginn werden die Vor- und Nachteile verschiedener Klassen numerischer Methoden in Bezug auf plasmonische Effekte betrachtet. Anschliessend wird auf die Finite Elemente Methode (FEM) im Frequenzbereich fokussiert, da diese als besonders aussichtsreich für komplizierte plasmonisch Strukturen erachtet wird. Nach dem Vergleich vieler FEM Kandidaten wird **CONCEPTs** ausgewählt, da dieses mit gekrümmten Elementen hoher Ordnungen arbeiten kann.

Um offene Streufeldprobleme behandeln zu können werden absorbierende Randbedingungen studiert. Anschliessend werden die Bayliss-Gunzburger-Turkel (BGT) Bedingungen in **CONCEPTs** implementiert. Unterschiedliche BGT Ordnungen werden untersucht und verglichen. Darüber hinaus werden perfectly matched layers (PML) untersucht um plasmonische Strukturen in Mehrschichtstrukturen analysieren zu können. Anschliessend werden Kartesische PML in **CONCEPTs** implementiert. Sorgfältige hp-FEM Untersuchungen werden durchgeführt um das PML Verhalten zu bestimmen. Darauf basierend wird eine hp-Strategie vorgeschlagen und angewendet.

Ein weiterer Teil der Dissertation untersucht die Optimierung plasmonischer Strukturen. Anders als bei traditionellen Radiofrequenzanwendungen weisen plasmonische Objekte auch dann Resonanzen auf, wenn sie viel kleiner als die Wellenlänge sind. Das macht das Design plasmonischer Strukturen sehr anspruchsvoll. Eine passende Kombination numerischer Optimierungsverfahren mit Feldberechnungsmethoden wird erarbeitet. Als Beispiele werden zwei Versionen ultra-kurzer plasmonischer Koppler optimiert, wobei eine 'evolution strate-

gy' (ES) zur Anwendung kommt. Auf diese Weise werden optimierte Geometrien gefunden. Für die einfachere Kopplerversion wird auch eine MMP Lösung zum Vergleich herangezogen.