

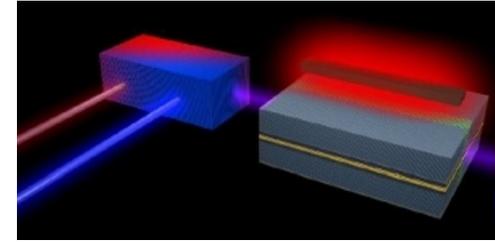
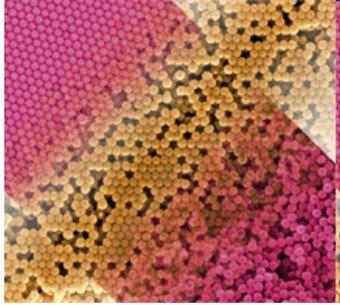
Computación en nanofotónica

Luis Martin-Moreno

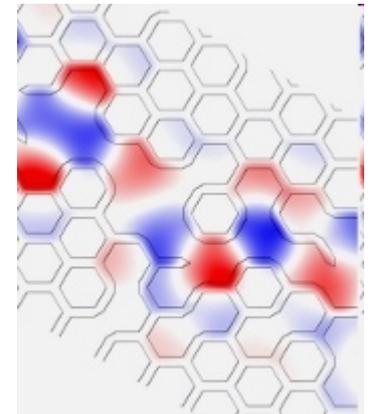
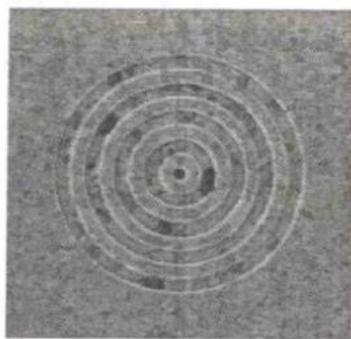
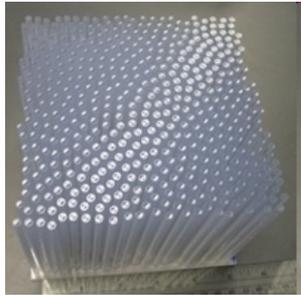


Departamento de
Física de la
Materia Condensada
Universidad Zaragoza



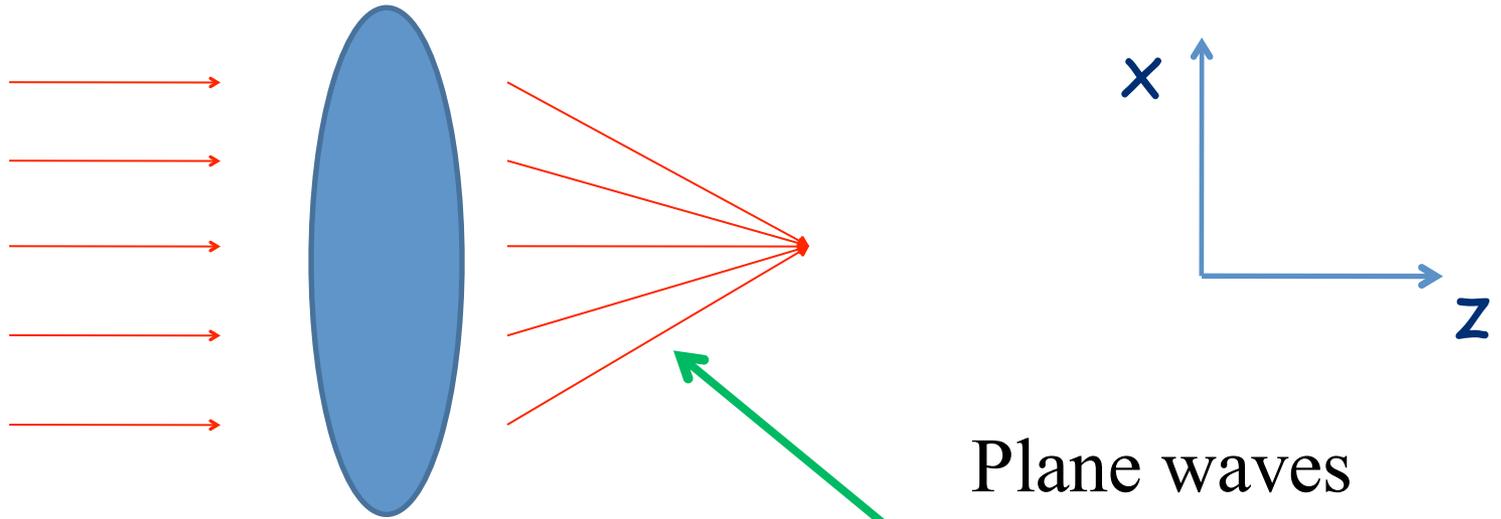


Material para "manejar" la luz



Nanophot. and the diffraction limit

Suppose we try to confine light with a lens



Plane waves

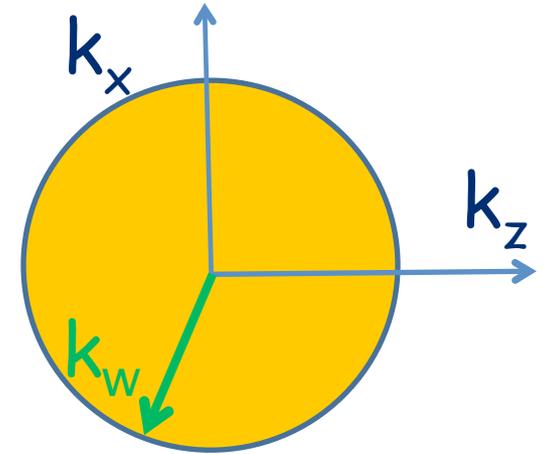
$$\vec{E}(\vec{r}) = \vec{e}_\sigma \times e^{i(\vec{k}\vec{r} - \omega t)}$$

$$\omega^2 = c^2 k^2 = c^2 (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2)$$

Nanophot. and the diffraction limit

$$\omega^2 = c^2 k^2 = c^2 (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2)$$

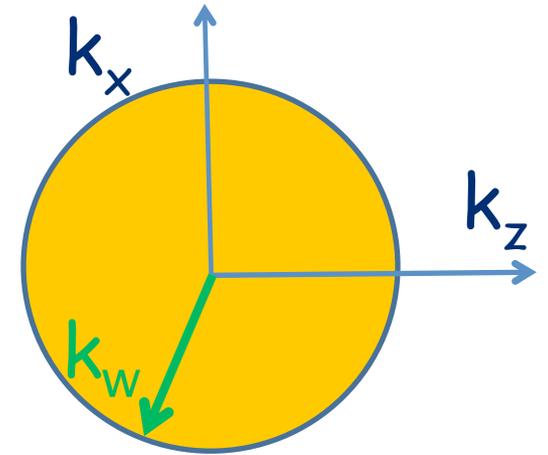
$$k_x < \omega / c = k_\omega = 2\pi / \lambda$$



Nanophot. and the diffraction limit

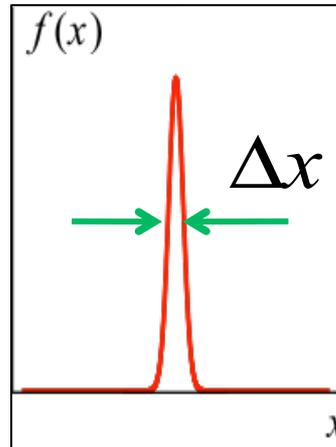
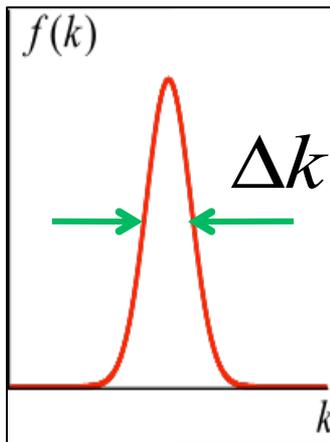
$$\omega^2 = c^2 k^2 = c^2 (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2)$$

$$k_x < \omega / c = k_\omega = 2\pi / \lambda$$



But there is a theorem
in Maths that says: if

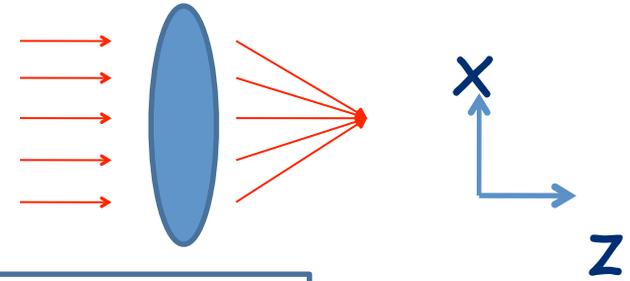
$$f(x) = \int f(k) e^{ikx} dk$$



$$\Delta k \Delta x \geq \pi \rightarrow \Delta x \geq \frac{\lambda}{2}$$

Beating the diffraction limit

$$\omega^2 = c^2 k^2 = c^2 (k_x^2 + k_z^2)$$



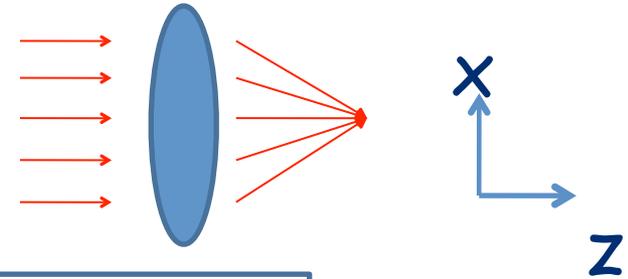
However, we can play with $k_z^2 < 0$

$$k_x^2 = k_\omega^2 - k_z^2 = k_\omega^2 + |k_z^2| \quad \text{as large as we want}$$

$\rightarrow \Delta x$ **arbitrarily small**

Beating the diffraction limit

$$\omega^2 = c^2 k^2 = c^2 (k_x^2 + k_z^2)$$



However, we can play with $k_z^2 < 0$

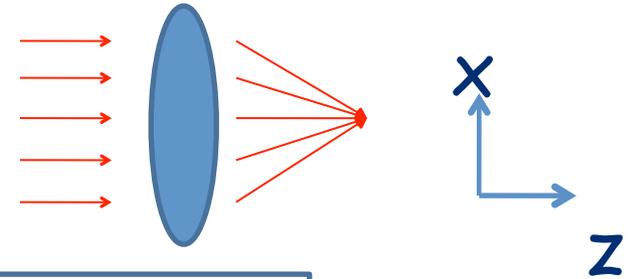
$$k_x^2 = k_\omega^2 - k_z^2 = k_\omega^2 + |k_z^2| \quad \text{as large as we want}$$

$\rightarrow \Delta x$ **arbitrarily small**

$$k_z^2 < 0 \longrightarrow k_z = \pm i |k_z| \quad \rightarrow \quad \vec{E}(\vec{r}) = \vec{e}_\sigma e^{ik_x x} e^{\pm |k_z| z}$$

Beating the diffraction limit

$$\omega^2 = c^2 k^2 = c^2 (k_x^2 + k_z^2)$$



However, we can play with $k_z^2 < 0$

$$k_x^2 = k_\omega^2 - k_z^2 = k_\omega^2 + |k_z^2| \quad \text{as large as we want}$$

$\rightarrow \Delta x$ **arbitrarily small**

$$k_z^2 < 0 \longrightarrow k_z = \pm i |k_z| \quad \rightarrow \quad \vec{E}(\vec{r}) = \vec{e}_\sigma e^{ik_x x} e^{\pm |k_z| z}$$

NANOPHOTONICS -> EM FIELD CLOSE TO SURFACES

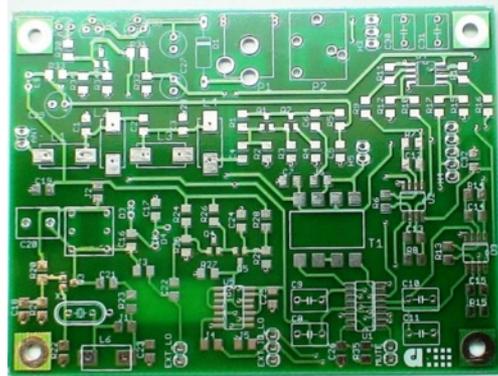
Nanofotónica

Por qué estudiar nanofotónica?

- La **energía** de la luz coincide con la de las **excitaciones electrónicas y vibracionales** de la materia
- **La luz** es 1000 veces **más deprisa** que los electrones.
- Nuestro cerebro está "cableado" para interpretar señales ópticas

Controlando la luz

Circuitos electrónicos (con electrones):



Circuitos ópticos (con luz!):

VENTAJAS:

- *Rapidez ($c \gg v_e$)
- *Luz de distintas λ , por el mismo canal
- *No se calientan

DESVENTAJAS:

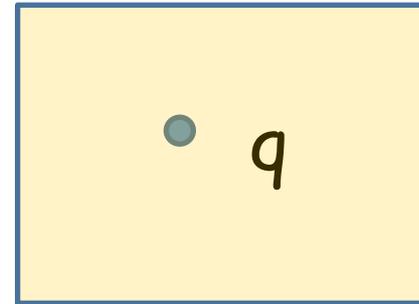
- *Es difícil modificar el paso de la luz dentro del circuito

También en el nano-: metamateriales

Materiales Artificiales (hechos por el hombre)
con propiedades físicas
diferentes de las de los constituyentes

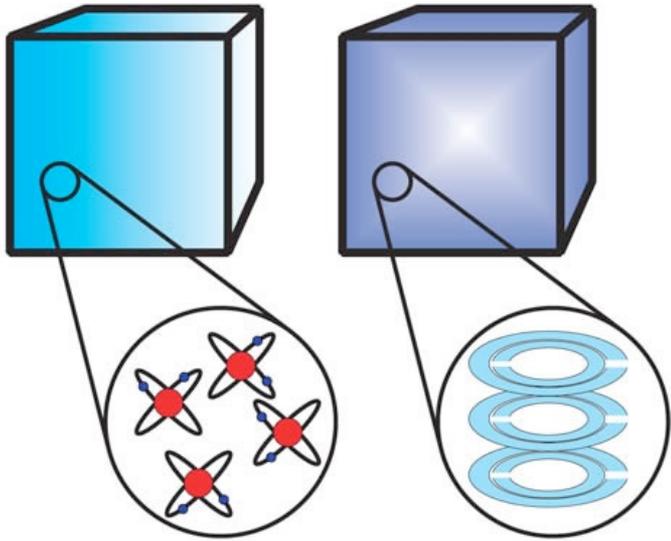


$$V(\vec{r}) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{q}{r}$$

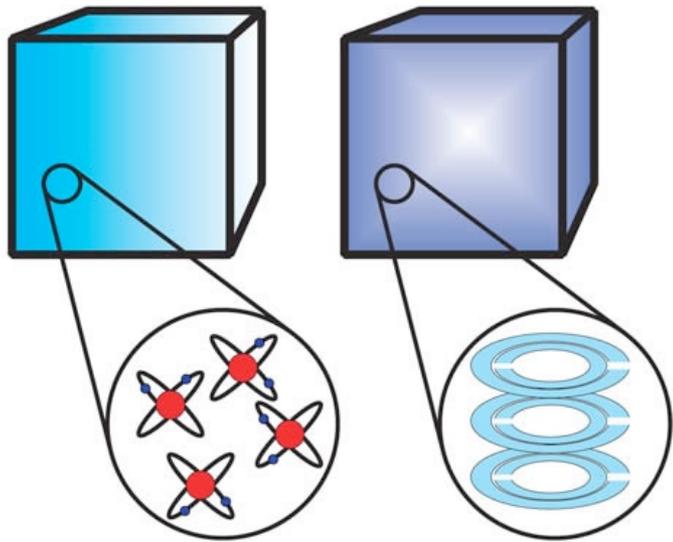


$$V(\vec{r}) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{\epsilon} \frac{q}{r}$$

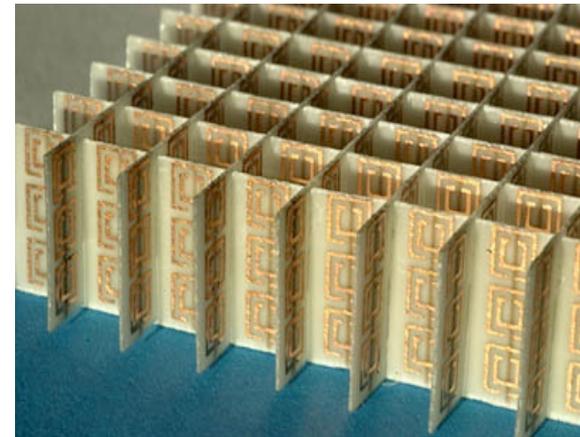
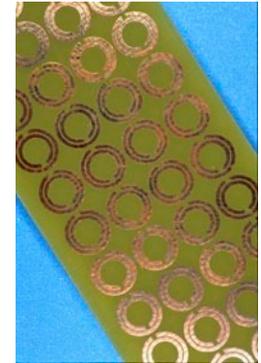
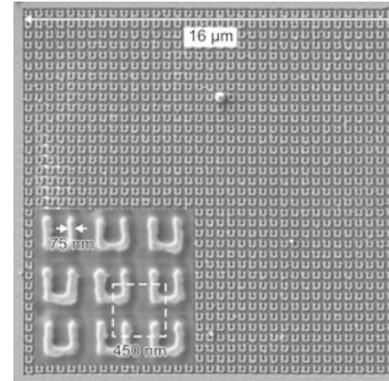
Metamateriales



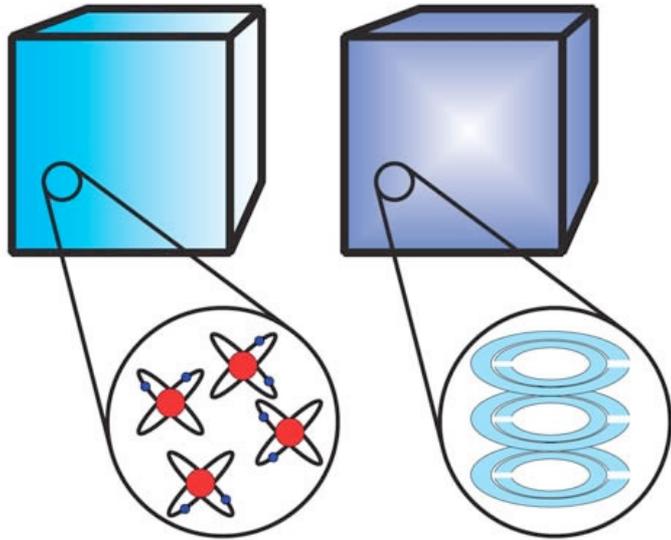
Metamateriales



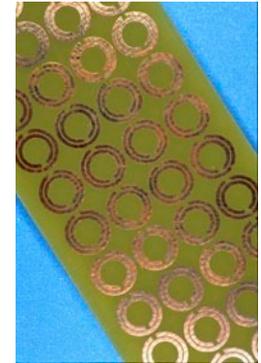
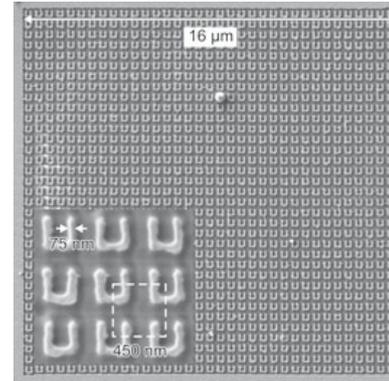
Algunas realizaciones...



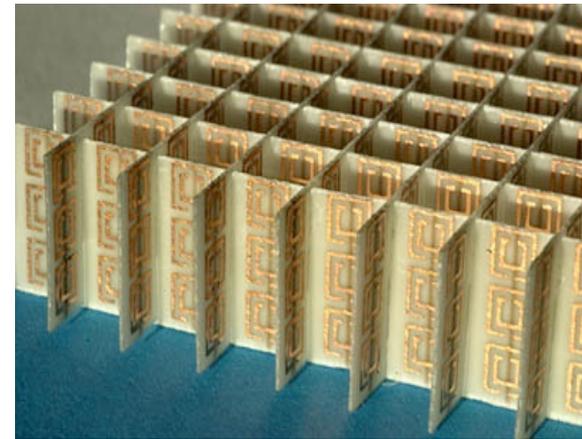
Metamateriales



Algunas realizaciones...



Lentes perfectas,
Invisibilidad,
Optica de transformación...

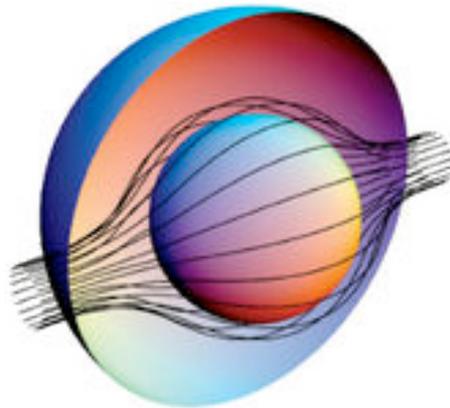
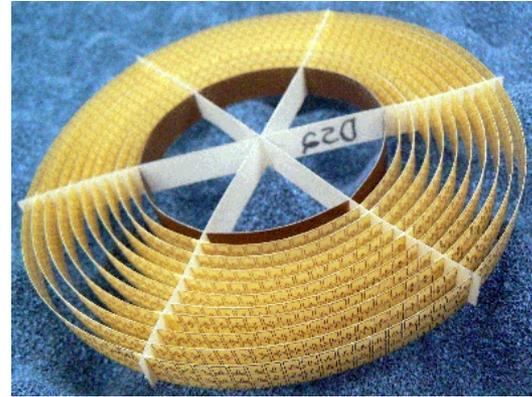


Controlando la luz

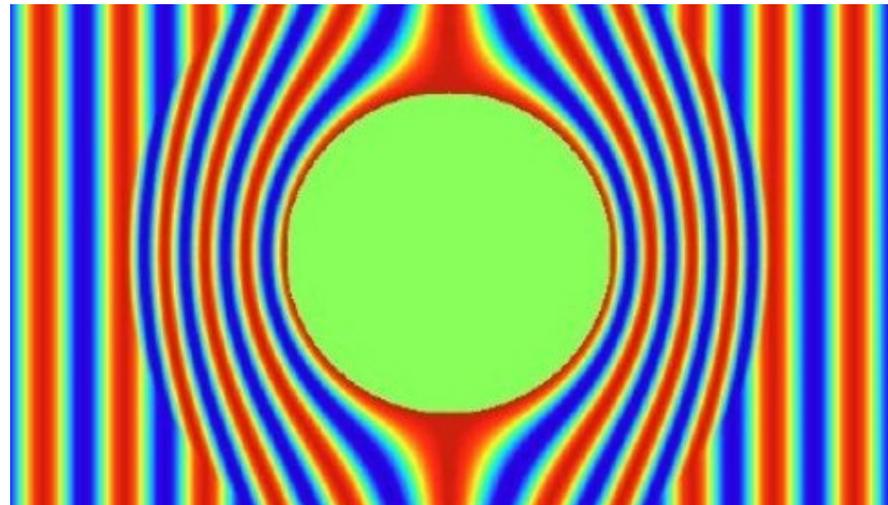
Invisibilidad:

Si conseguimos que la luz
"rodee" los objetos,
no los veremos!

Diseño Experimental

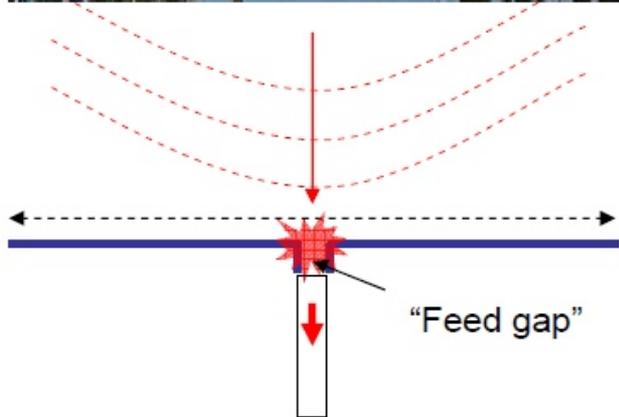
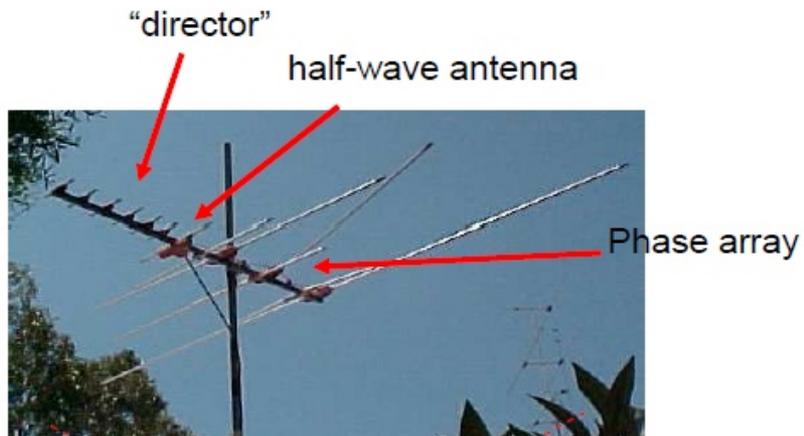


Simulación con Ordenador



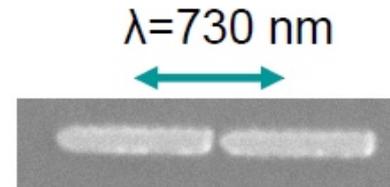
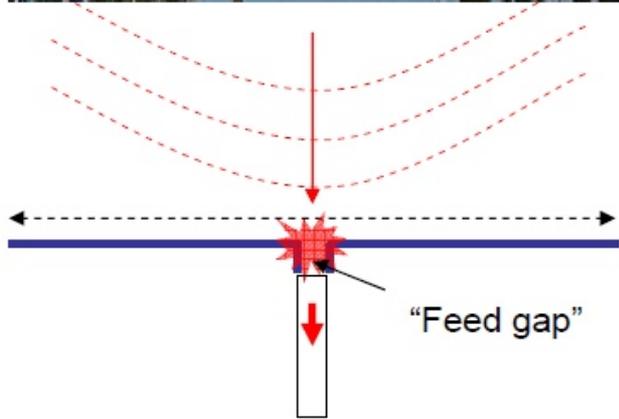
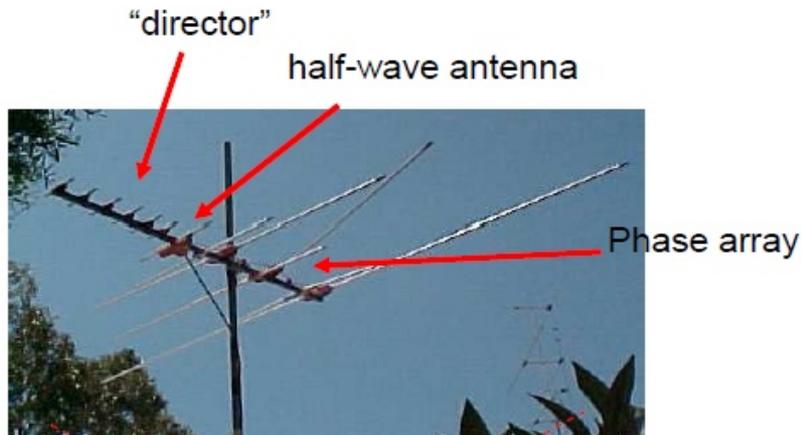
Antenas ópticas eficientes.

Radio antenna

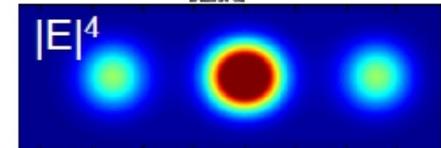
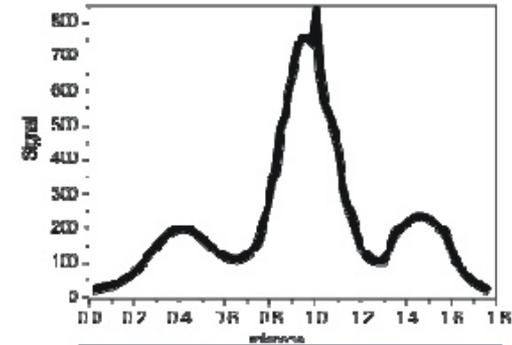
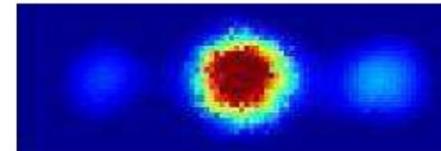


Antenas ópticas eficientes.

Radio antenna



2x 500 nm

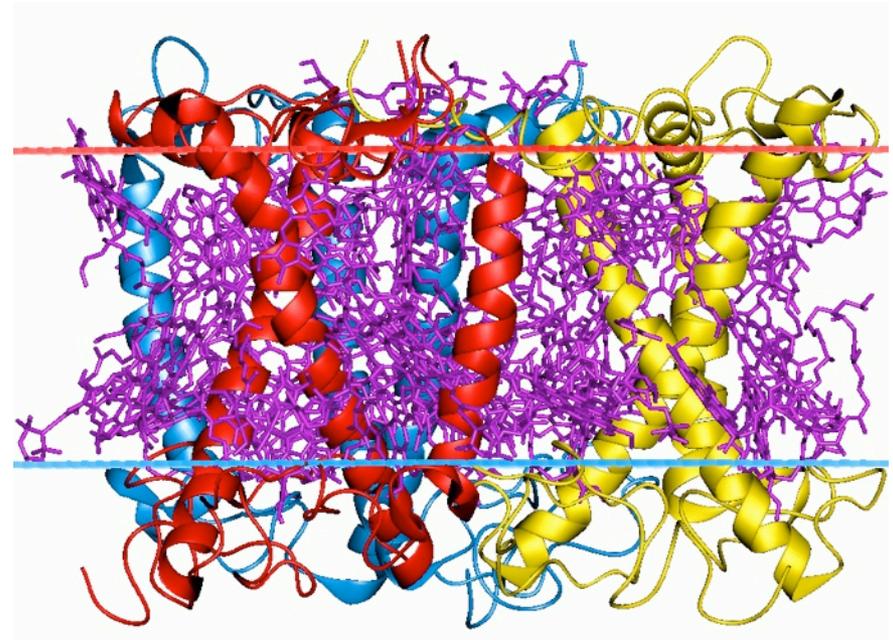


Romain Quidant
(ICFO)

- Proteínas recolectoras de luz

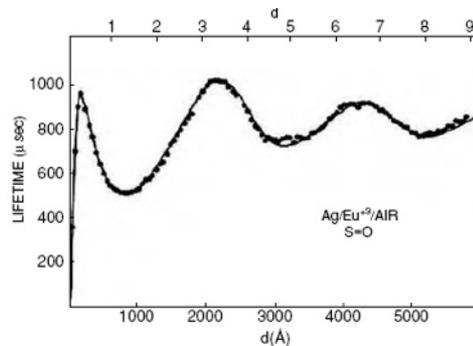
luz → centros de reacción → transferencia de carga

Energía enfocada
en <10nm!



En 1946, Purcell descubrió que la **tasa de decaimiento** de estados electrónicos excitados no es una propiedad intrínseca, sino que **depende del entorno**.

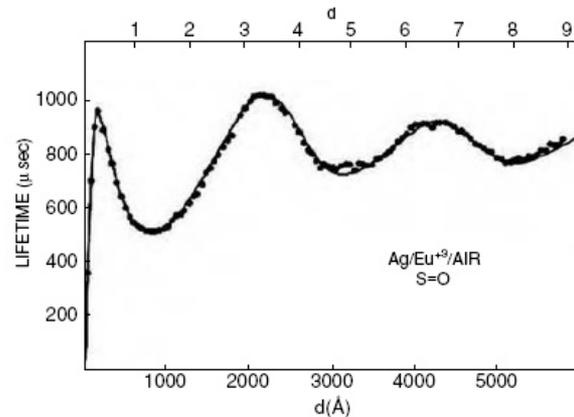
En 1946, Purcell descubrió que la **tasa de decaimiento** de estados electrónicos excitados no es una propiedad intrínseca, sino que **depende del entorno**.



Vida media de iones de Eu, en función de la distancia a una superficie de Ag

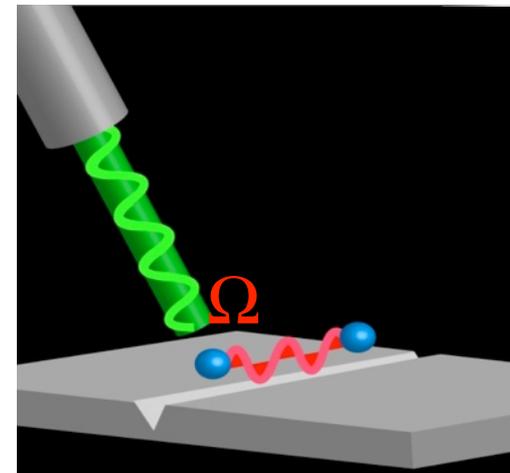
- Inhibición de canales de decaimiento

En 1946, Purcell descubrió que la **tasa de decaimiento** de estados electrónicos excitados no es una propiedad intrínseca, sino que **depende del entorno**.



Vida media de iones de Eu, en función de la distancia a una superficie de Ag

- Inhibición de canales de decaimiento
- Ingeniería de la interacción qubit-qubit



Plasmones de Superficie

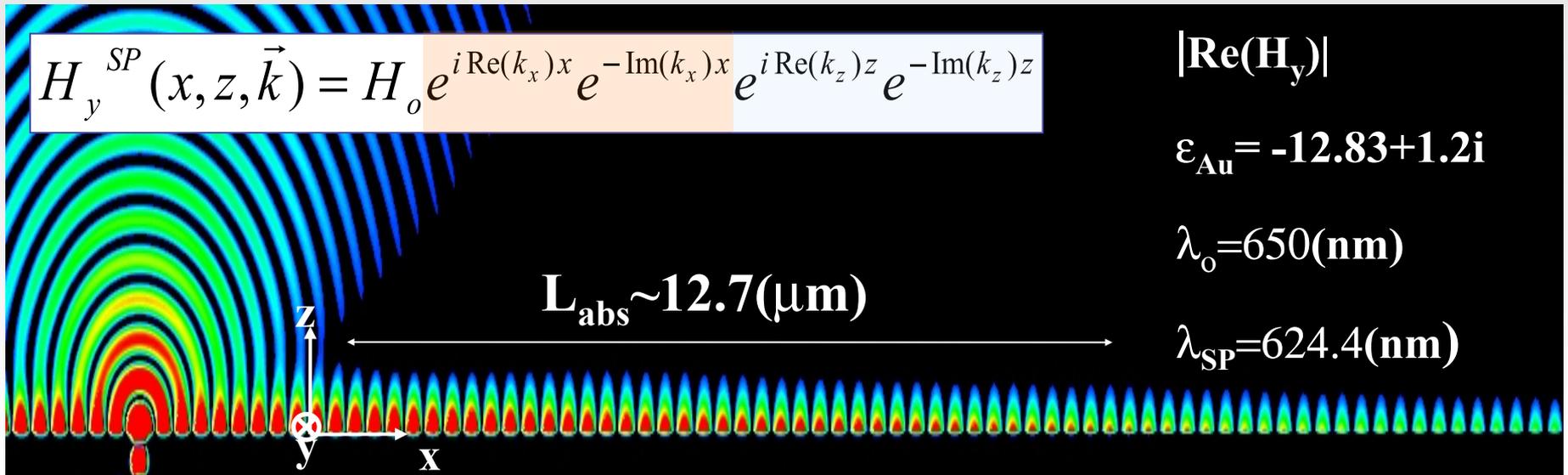
$$H_y^{SP}(x, z, \vec{k}) = H_0 e^{i \operatorname{Re}(k_x)x} e^{-\operatorname{Im}(k_x)x} e^{i \operatorname{Re}(k_z)z} e^{-\operatorname{Im}(k_z)z}$$

$$|\operatorname{Re}(H_y)|$$

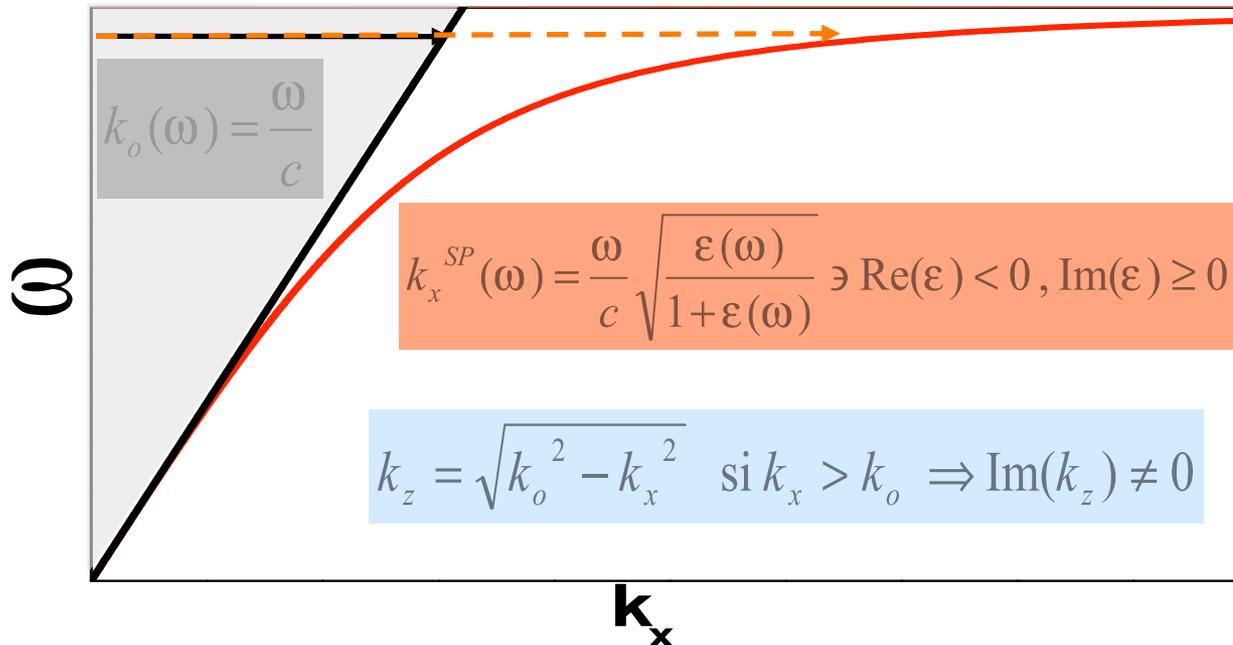
$$\epsilon_{\text{Au}} = -12.83 + 1.2i$$

$$\lambda_0 = 650 \text{ (nm)}$$

$$\lambda_{\text{SP}} = 624.4 \text{ (nm)}$$



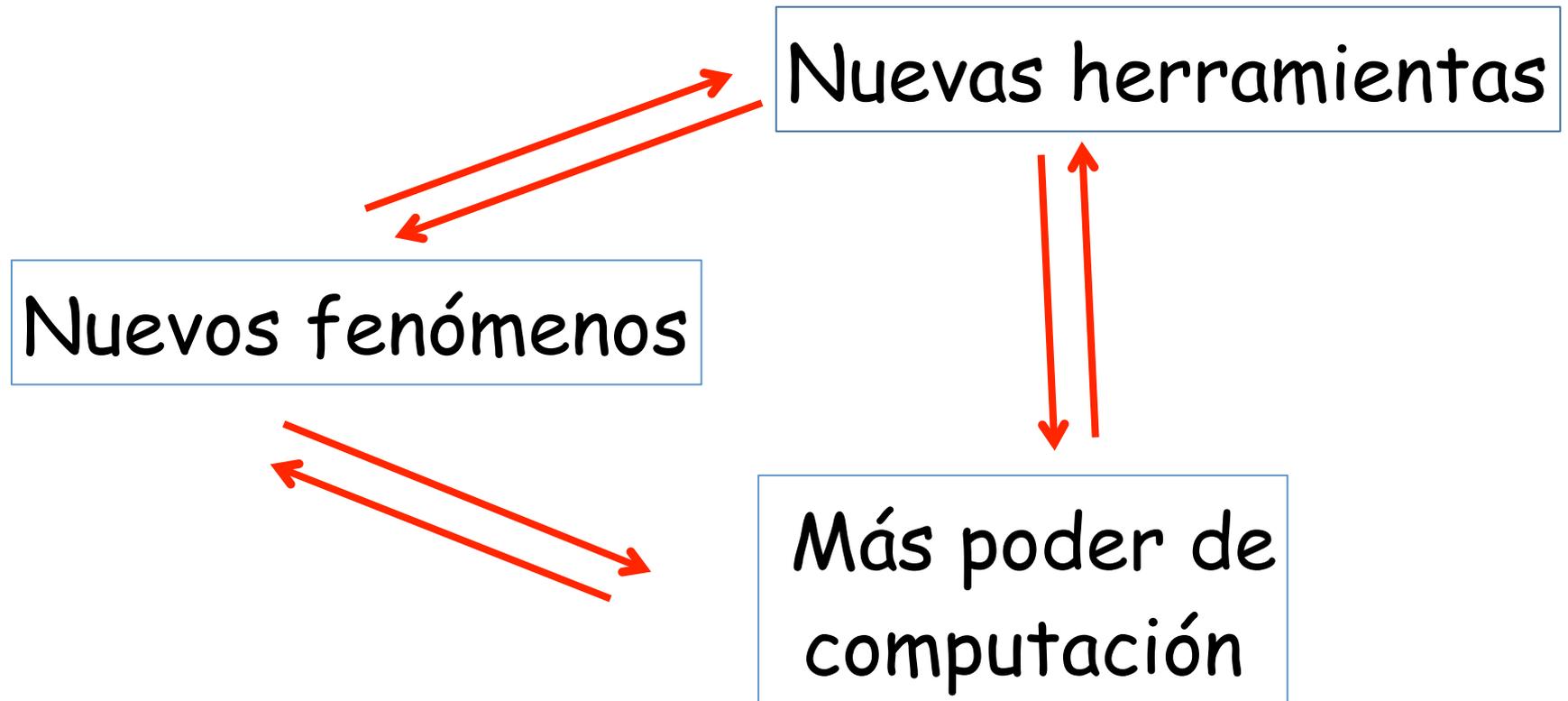
$$L_{\text{abs}} \sim 12.7 \text{ (}\mu\text{m)}$$



Luz horizontal

**Volumen “modal”
pequeño : “Aumento
localizado campo
EM”**

Porqué Nanofotónica ahora?



Computación: sí, pero...





(i) El ordenador es una herramienta. La computación también.
Las herramientas hay que utilizarlas bien y lo que hacen/dicen puede estar mal.



- (i) El ordenador es una herramienta. La computación también. Las herramientas hay que utilizarlas bien y lo que hacen/dicen puede estar mal.

- (ii) La programación científica requiere un gusto por el detalle y la comprobación. Los "atajos" se acaban pagando.



- (i) El ordenador es una herramienta. La computación también.
Las herramientas hay que utilizarlas bien y lo que hacen/dicen puede estar mal.

- (ii) La programación científica requiere un gusto por el detalle y la comprobación.
Los "atajos" se acaban pagando.

- (iii) Las teorías y los programas tienen rangos de aplicabilidad.
Es imprescindible saber cuales son.
Las "cajas negras" son peligrosas.

Programas comerciales: "Cree pero comprueba".

La computación de propiedades electromagnéticas
de metales nano-estructurados
es un problema
bien definido pero difícil

Ecuaciones conocidas

$$\nabla \cdot \vec{D} = \rho$$

$$\nabla \cdot \vec{B} = 0$$

$$\nabla \times \vec{E} = -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t}$$

$$\nabla \times \vec{H} = \frac{\partial \vec{D}}{\partial t} + \vec{j}$$

Hay varias escalas
de longitud
RELEVANTES involucradas

Escalas de longitud típicas

- Longitud de onda del campo EM (λ)-> 350 a 800 nm
- Dimensiones del dispositivo -> 10 a 100 λ
- Dimensiones de los objetos -> 0.05 a 1 λ
- Distancia entre objetos -> 1 a $\sqrt{\epsilon_{diel}} \lambda$
- Penetración del campo en metales -> 20 nm en el rango óptico en Ag, Au ($\lambda/25$)

Para un sistema con dimensiones lineales de 10λ ,
la representación del campo EM cada 10nm
requiere $(500)^3 = \underline{1.25 \times 10^7}$ puntos

La computación de propiedades ópticas es, principalmente, un problema técnico.

La cuestión es cuán difícil es obtener resultados precisos.

- flexibilidad de computación
- tiempo de computación
- requerimiento de memoria RAM
- estabilidad
- precisión

y, también qué método ayuda a desarrollar la intuición física.

$$\begin{aligned}\nabla \cdot \vec{D} &= \rho, & \nabla \cdot \vec{B} &= 0, \\ \nabla \times \vec{E} &= -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t}, & \nabla \times \vec{H} &= \frac{\partial \vec{D}}{\partial t} + \vec{j}\end{aligned}$$

Normalmente trabajamos a frecuencia fija

$$\begin{aligned}\mathbf{D}(\mathbf{r}, t) &= \mathbf{D}(\mathbf{r}) \exp(-i\omega t), & \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) &= \mathbf{E}(\mathbf{r}) \exp(-i\omega t), \\ \mathbf{B}(\mathbf{r}, t) &= \mathbf{B}(\mathbf{r}) \exp(-i\omega t), & \mathbf{H}(\mathbf{r}, t) &= \mathbf{H}(\mathbf{r}) \exp(-i\omega t), \\ \rho(\mathbf{r}, t) &= \rho(\mathbf{r}) \exp(-i\omega t), & \mathbf{j}(\mathbf{r}, t) &= \mathbf{j}(\mathbf{r}) \exp(-i\omega t)\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\nabla \cdot \vec{D} &= \rho, & \nabla \cdot \vec{B} &= 0, \\ \nabla \times \vec{E} &= -i\omega \vec{B}, & \nabla \times \vec{H} &= i\omega \vec{D} + \vec{j}\end{aligned}$$

NO trabajamos a ω fija

- En su lugar, vamos a discretizar TANTO las componentes espaciales como las temporales.
- Seguiremos la evolución temporal de un paquete de ondas inicial y extraeremos información posteriormente.

$$\begin{aligned}\nabla \cdot \vec{D} &= \rho, & \nabla \cdot \vec{B} &= 0, \\ \nabla \times \vec{E} &= -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t}, & \nabla \times \vec{H} &= \frac{\partial \vec{D}}{\partial t} + \vec{j}\end{aligned}$$

Discretización espacial (celda de Yee)

discretización temporal?

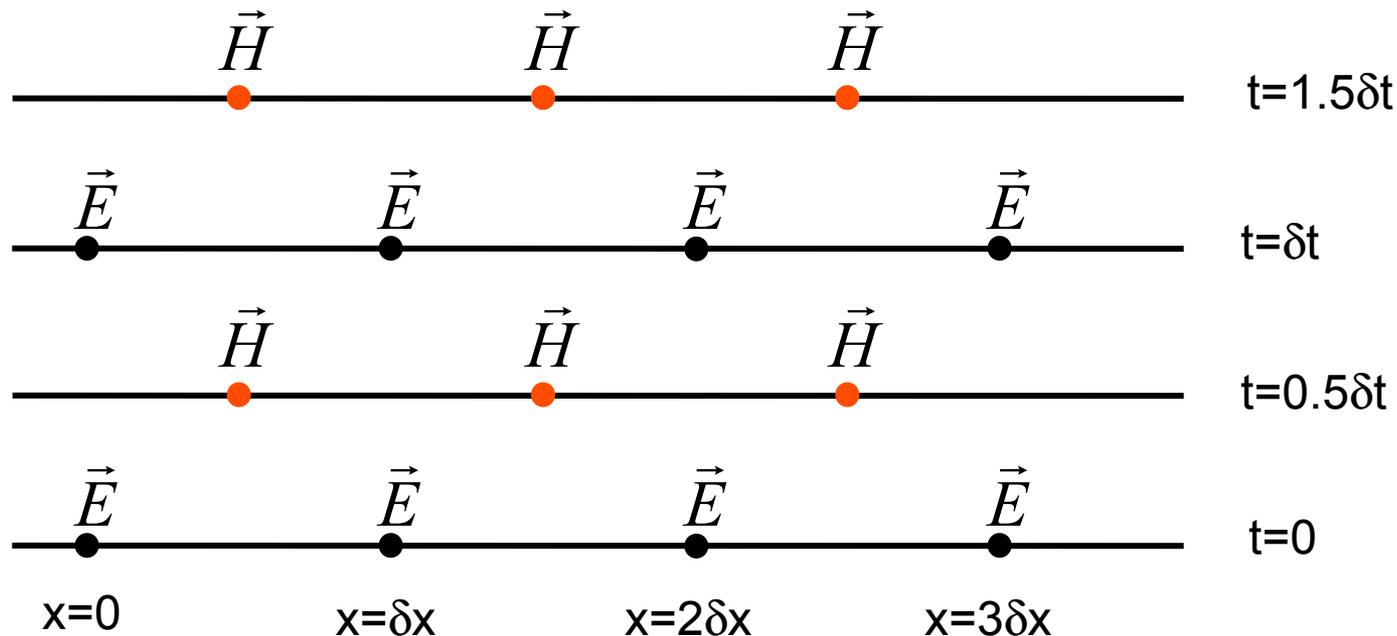
“Computational electrodynamics” Allen Taflove and S. Hagness, Artech House

Esquema de discretización en FDTD.

Las Eq. de Maxwell tienen derivadas de primer orden que se aproximan:

$$\frac{df}{dt} \approx \frac{f(t + \delta t/2) - f(t - \delta t/2)}{\delta t}$$

Y las evaluaciones temporales de E y H están intercaladas



Características del FDTD

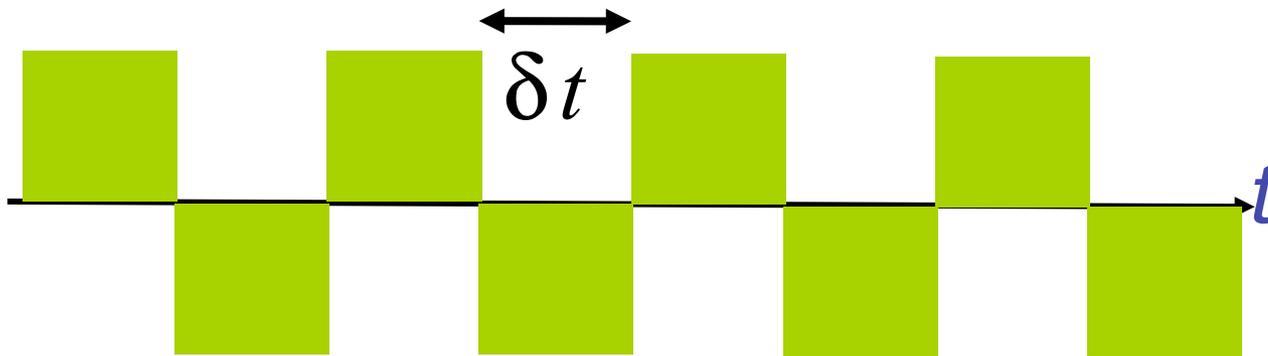
- Los campos E y H se actualizan por ciclos temporales. Dentro de cada ciclo, primero actualizamos uno y luego otro.
- El algoritmo involucra solo productos de matrices "sparse" (no inversión de matrices)
- El algoritmo es no-disipativo: las ondas calculadas numéricamente no decaen espureamente en la red.

Temas a considerar:

- Estabilidad numérica
- Paso temporal y tiempo de simulación
- Tratamiento de metales
- Condiciones iniciales
- Escalado de tiempo de CPU y memoria RAM
- Procesado de datos

FDTD: Paso temporal y tiempo de simulación

- Frecuencia máxima ω_{Max} que puede ser (pobremente) descrita



$$\omega_{Max} = 2\pi \frac{1}{2\delta t}$$

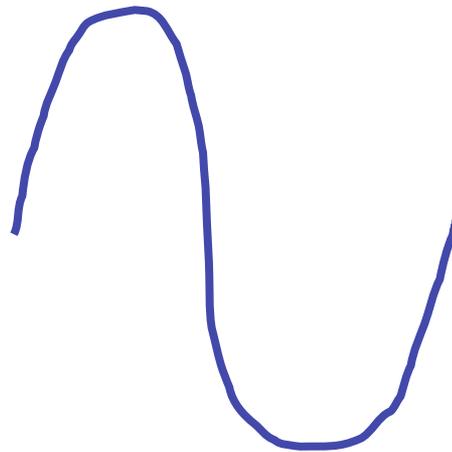
- Frecuencia mínima ω_{min} que puede ser (pobremente) descrita



$$\omega_{min} = 2\pi \frac{1}{T_{Total}}$$

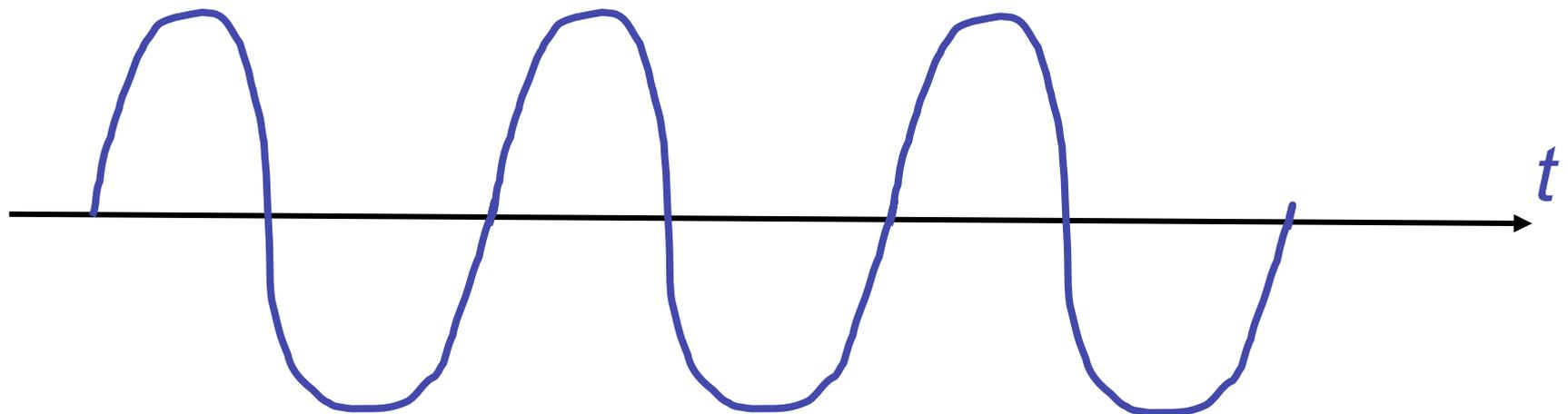
$$T_{Total} = N_t \delta t$$

FDTD: Paso temporal y tiempo de simulación



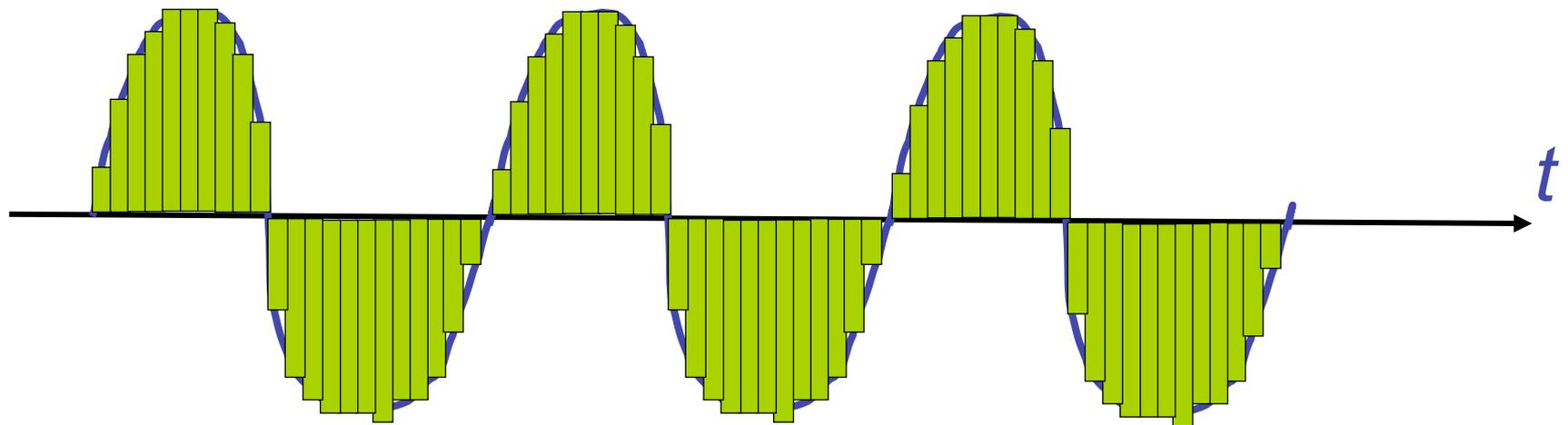
Las frecuencias ω de interes deben satisfacer:

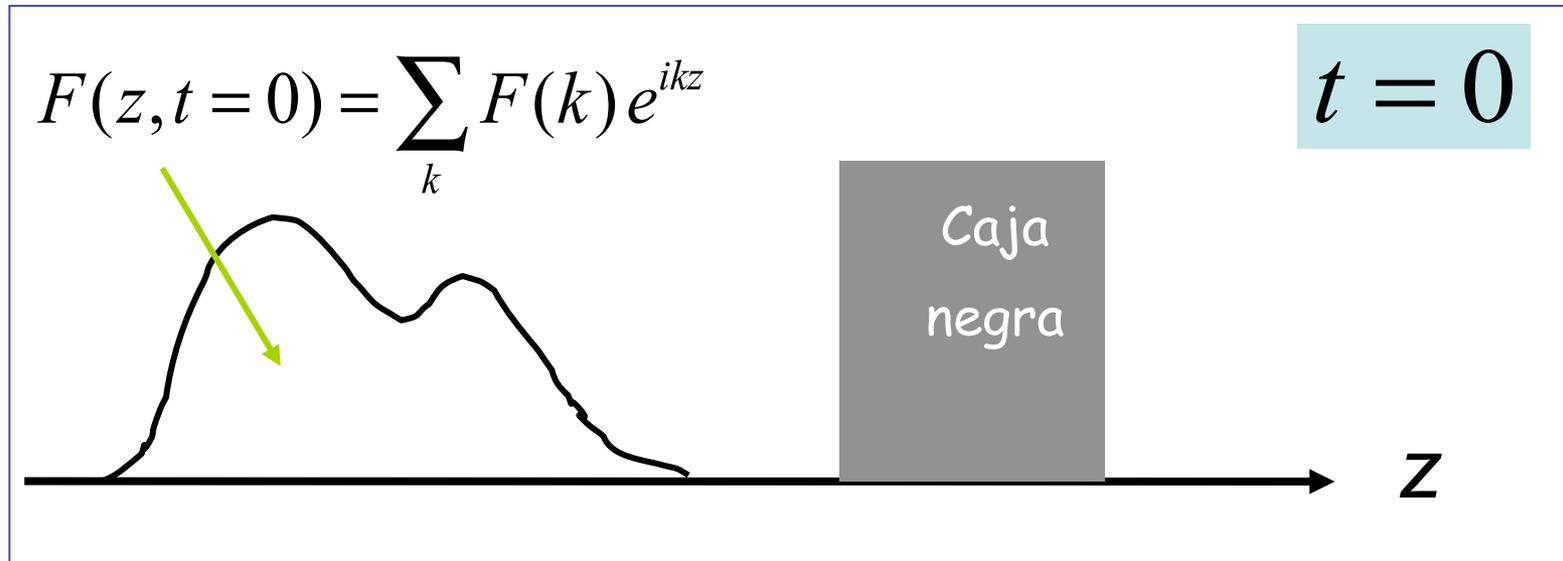
$$\omega_{\min} \ll \omega \ll \omega_{\max}$$



Las frecuencias ω de interes deben satisfacer:

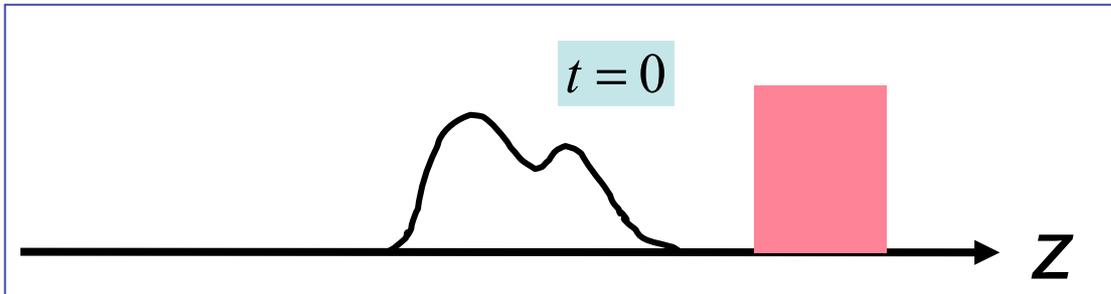
$$\omega_{\min} \ll \omega \ll \omega_{\max}$$



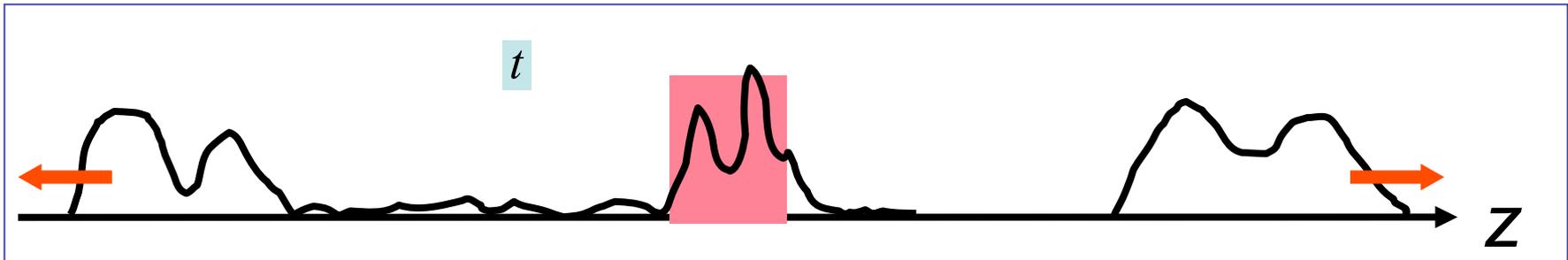


El campo inicial contiene varias
frecuencias a través de $\omega = ck$

FDTD: Condiciones de contorno.

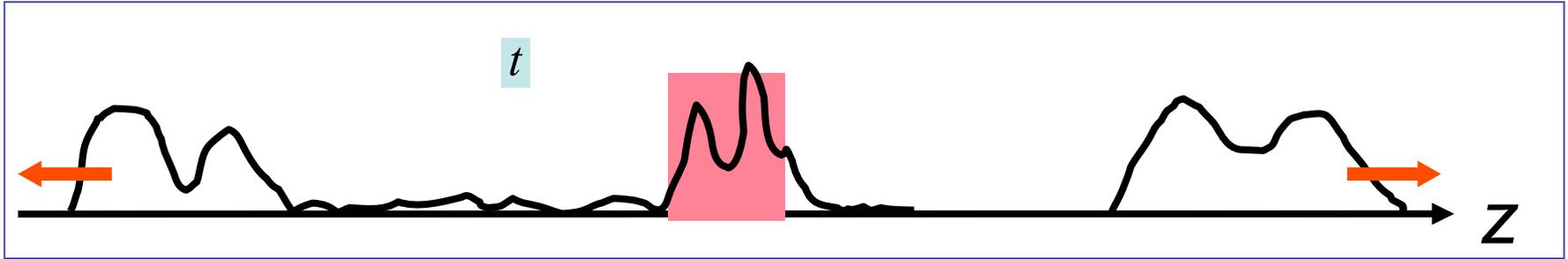


Muy a menudo, la "caja negra" es resonante a algunas frecuencias

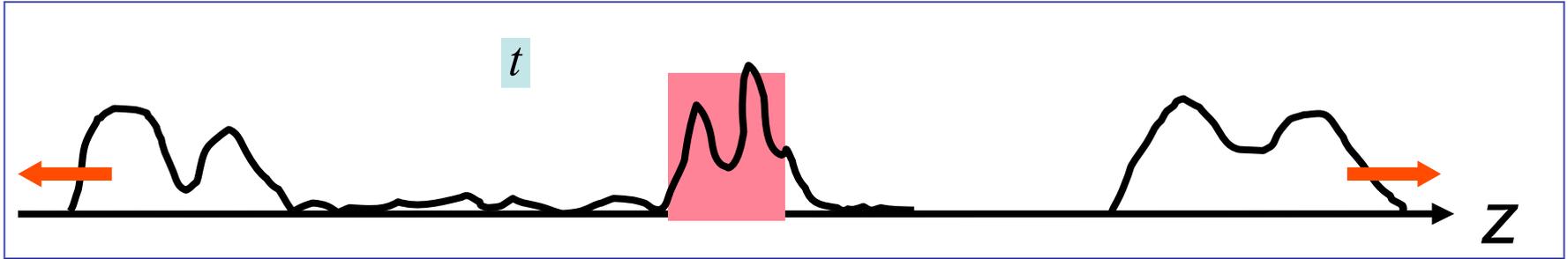


Acabamos simulando sistemas MUY GRANDES!

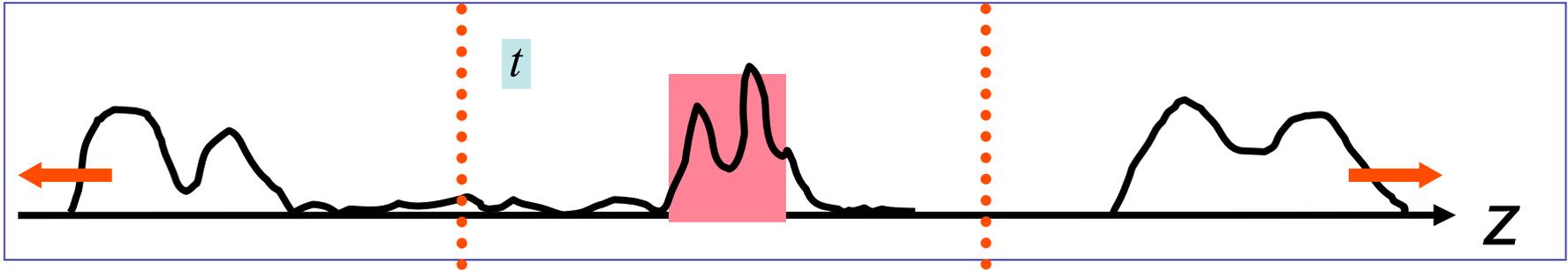
FDTD: Condiciones de contorno.



Idea:

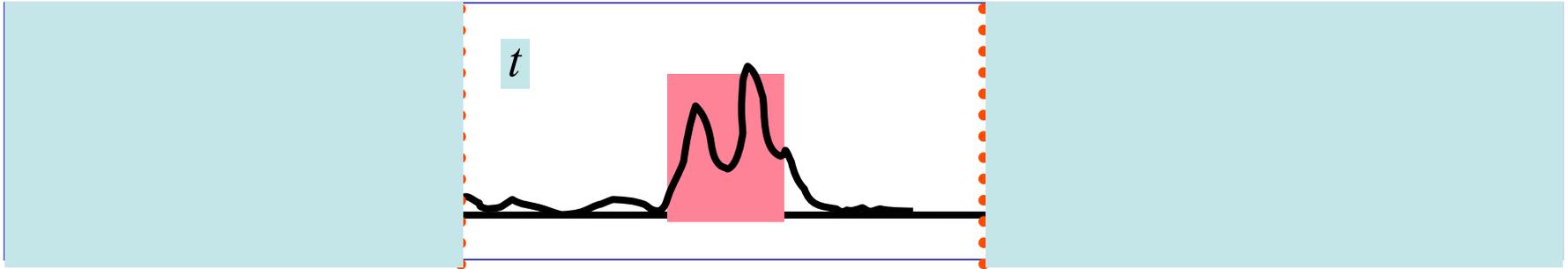


Idea:



- Introducimos superficies donde medimos la energía que sale.
- No seguimos la evolución temporal de los campos en las regiones "exteriores".

Idea:

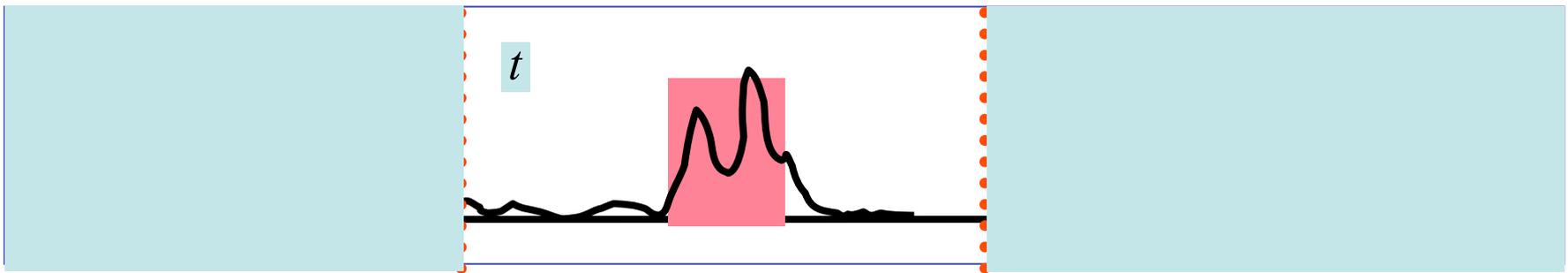


- Introducimos superficies donde medimos la energía que sale.
- No seguimos la evolución temporal de los campos en las regiones "exteriores".

PROBLEMA:

Los campos en la frontera satisfacen las
Eq. FDTD \rightarrow

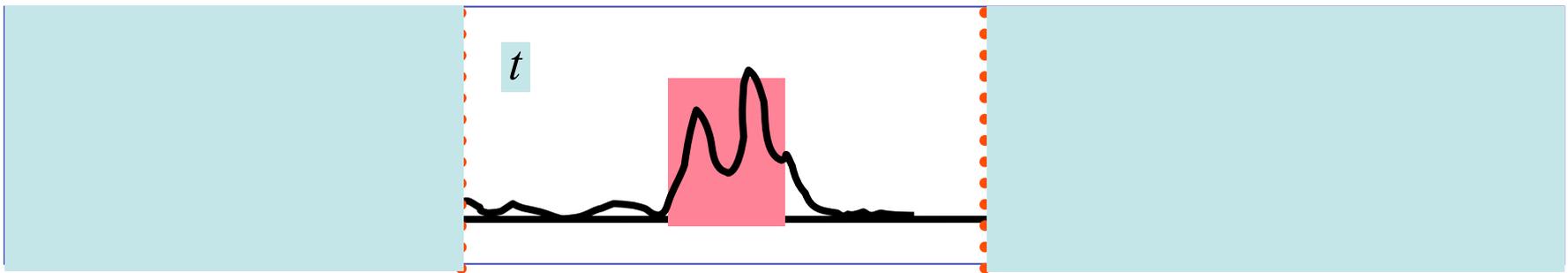
los campos en la región exterior se necesitan
para poder actualizar los campos dentro



PROBLEMA:

Los campos en la frontera satisfacen las
Eq. FDTD ->

los campos en la región exterior se necesitan
para poder actualizar los campos dentro

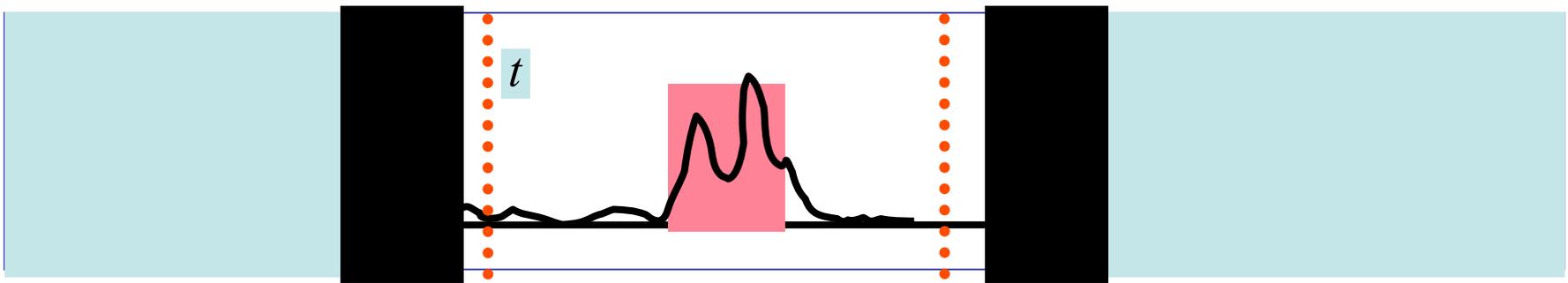


- Malas soluciones: campos fuera=0, poner fuera medios con alta $\text{Im}(\varepsilon)$...
- Hay varias propuestas para **Condiciones de Contorno Absorbentes (Absorbing Boundary Conditions, ABC)**

Una de las mejores soluciones (en 2008) define una

Perfect Matched Layer (PML)

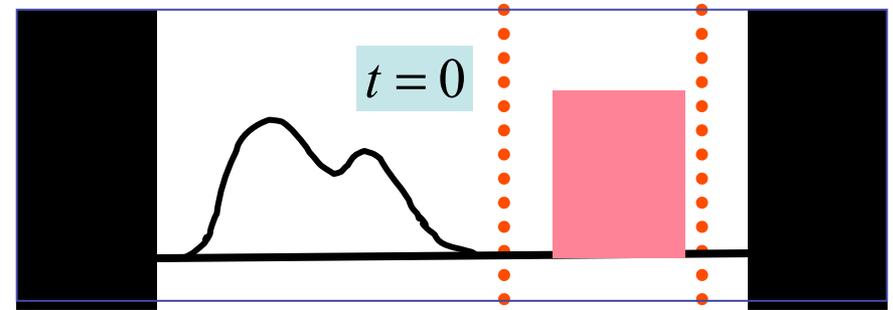
donde los campos satisfacen unas NUEVAS ecuaciones, que proporcionan una reflexión virtualmente nula.



- Requiere "tunear" parámetros: anchura de la PML, parámetros que controlan la absorción de las PML...
- La reflexión es minimizada para incidencia normal (campo E paralelo a la superficie), pero aumenta para incidencia a ángulos finitos.

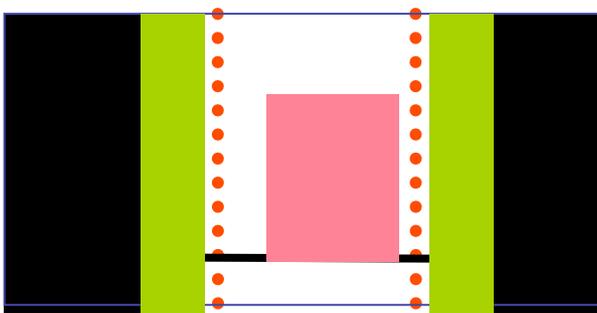
FDTD: Método "campo total - campo dispersado"

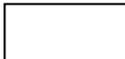
Problema: Aún tenemos que acomodar la onda inicial



Hay una formulación refinada (**Total Field-Scattered Field**) que no requiere el expresar la onda inicial en todo el espacio

Idea: $F = F_{\text{incidente}} + F_{\text{dispersada}}$. ambas partes satisfacen las Eq. de Maxwell.



En  se guarda F

En  se guarda $F_{\text{dispersada}}$

- Sólo necesitamos $F_{\text{incidente}}(r, t)$

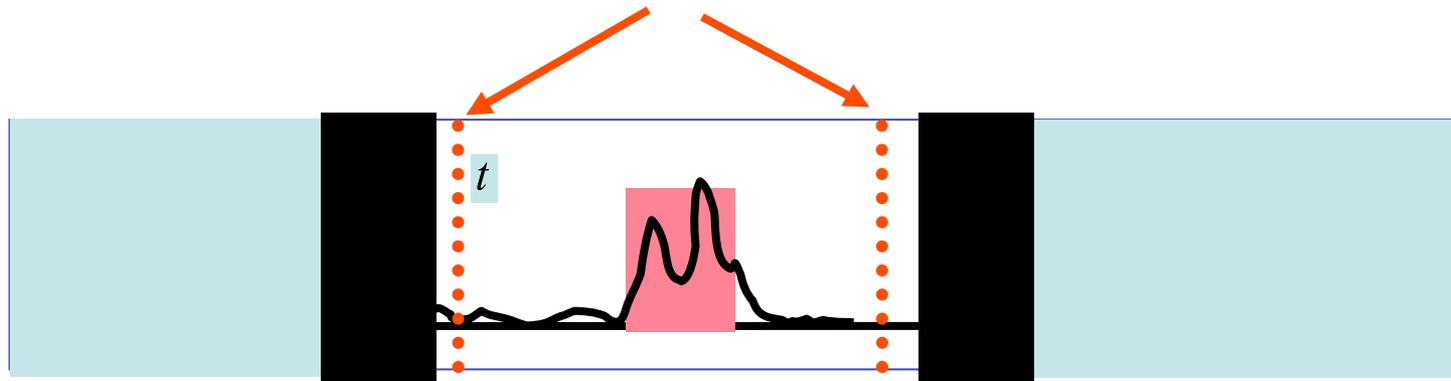
en la frontera entre  y 

FDTD: Requerimientos de memoria

- A cada t , necesitamos del orden de $O(N_s)$ variables para guardar los campos (no N_s^2 como en métodos donde hay que invertir matrices)
- Los campos se deben guardar en N_t puntos temporales para el post-procesado.

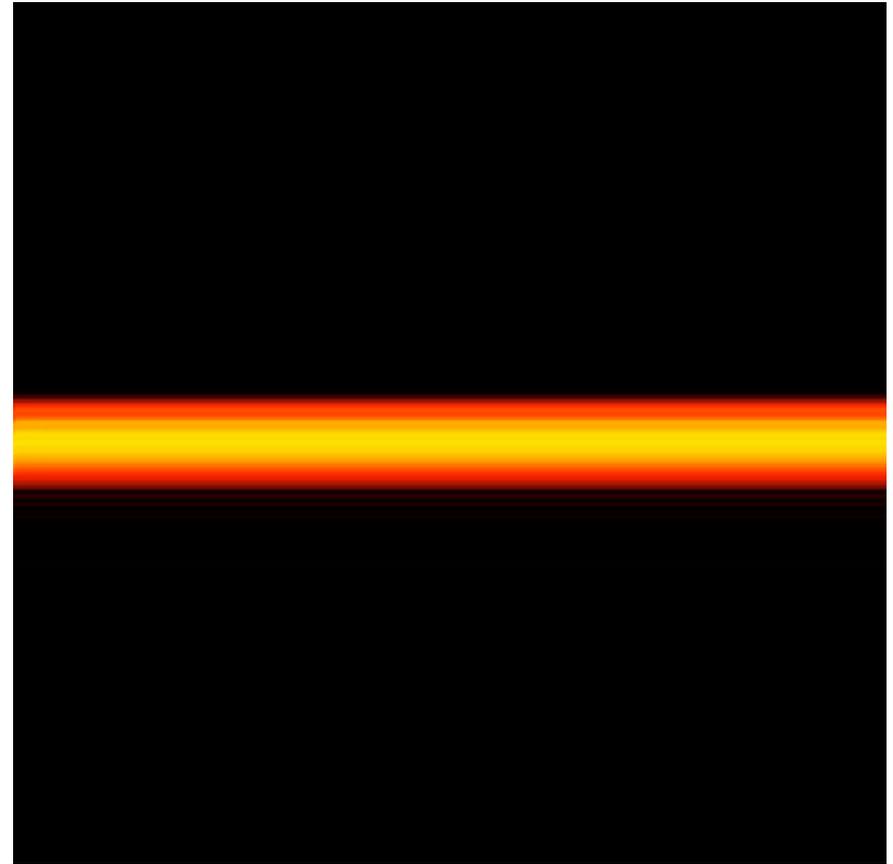
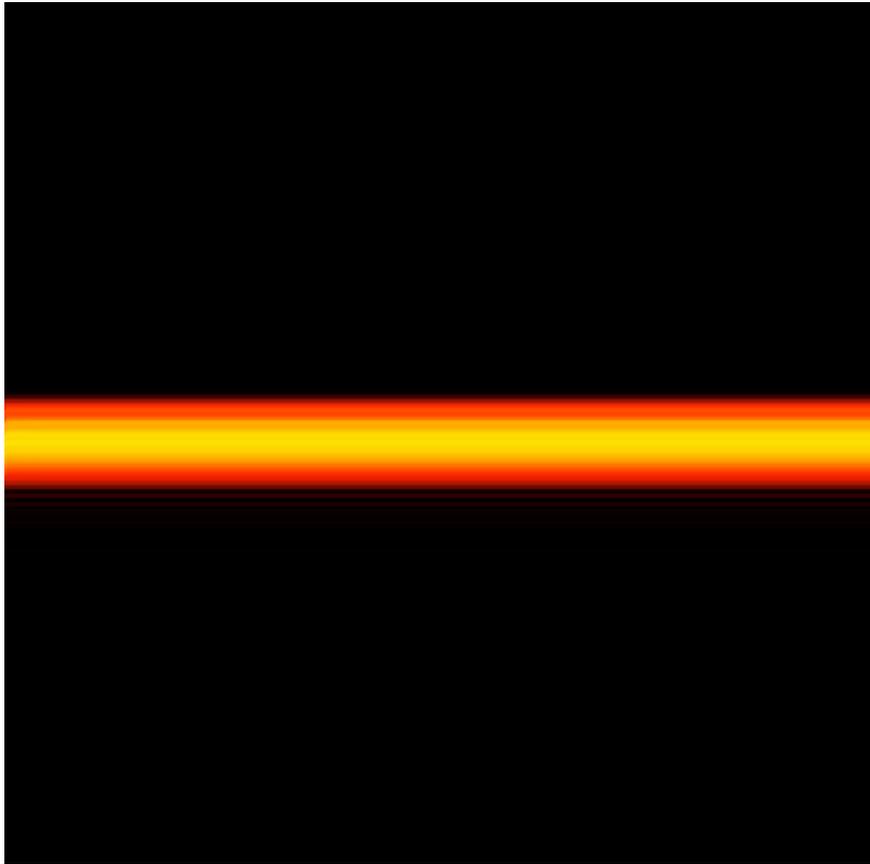
Pero... muy a menudo no necesitamos los campos en todo el espacio para todas las frecuencias

Ejemplo: para coeficientes de transporte sólo necesitamos los campos en



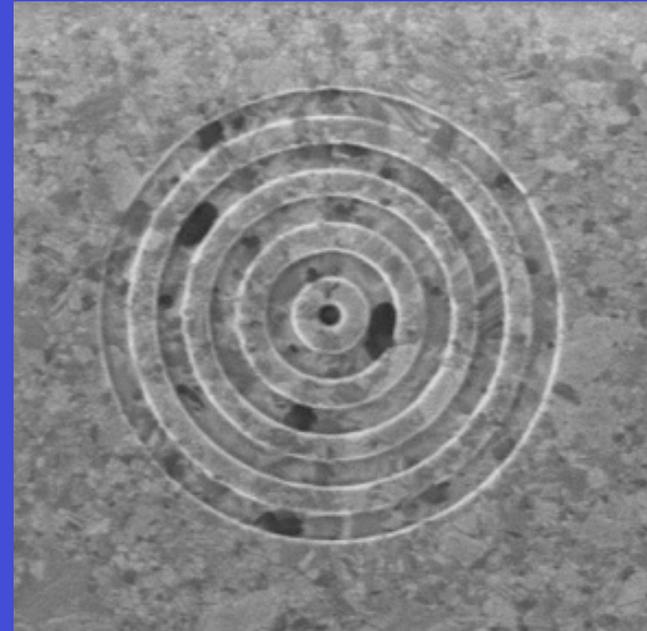
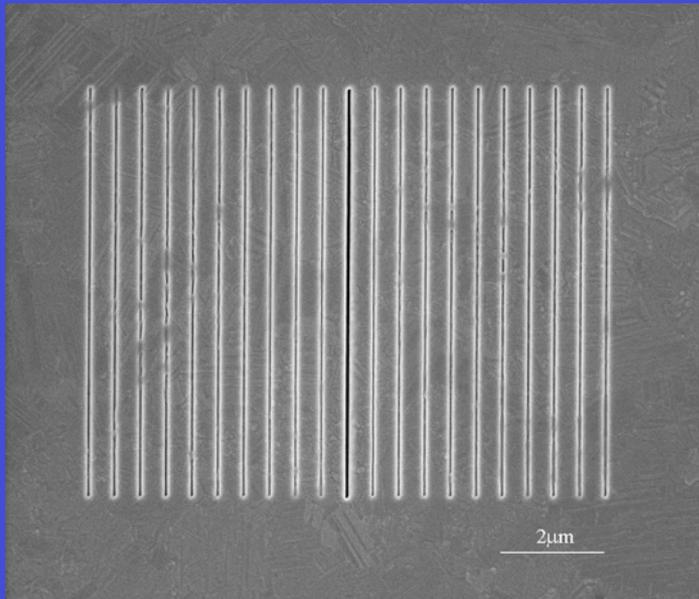
Efecto de las capas absorbentes (PML)

Haz Gaussiano incidente moviendose en $+z$
(campo electrico apuntando a $+x$)



SINGLE APERTURES + CORRUGATION

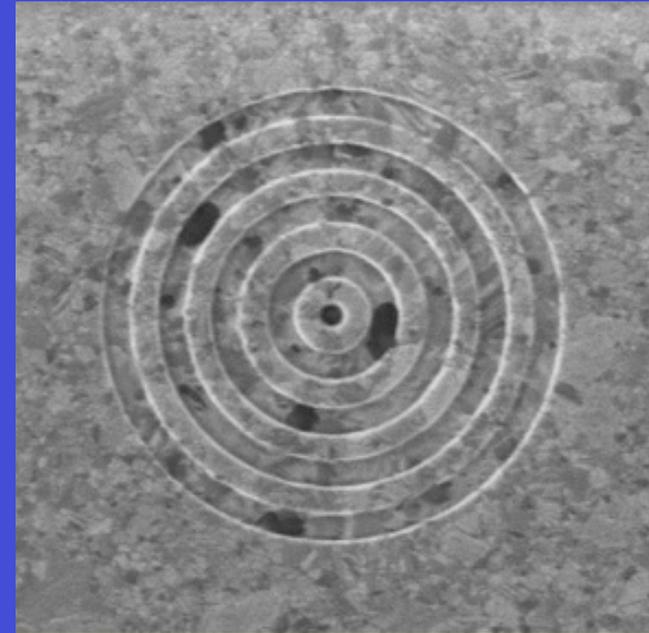
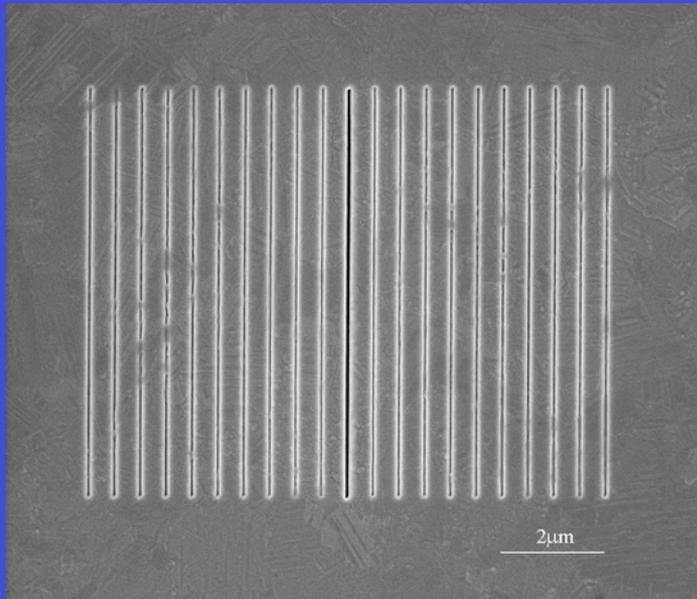
Will single aperture + periodic corrugation also display SPP enhanced transmission ?



H.J. Lezec, A. Degiron, E. Devaux, R.A. Linke, L. Martín-Moreno, F.J. García-Vidal and T.W. Ebbesen, *Science* 297, 820 (2002)

SINGLE APERTURES + CORRUGATION

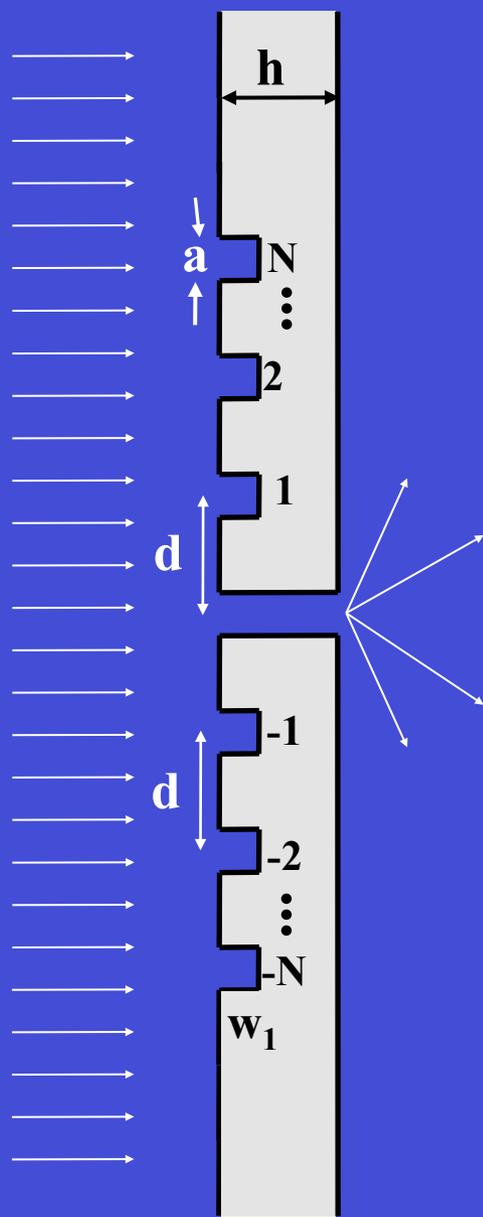
Will single aperture + periodic corrugation also display SPP enhanced transmission ?



- **Periodic texture on incidence side** → **enhanced transmission**
- **Periodic texture on exit side** → **BEAMING light**

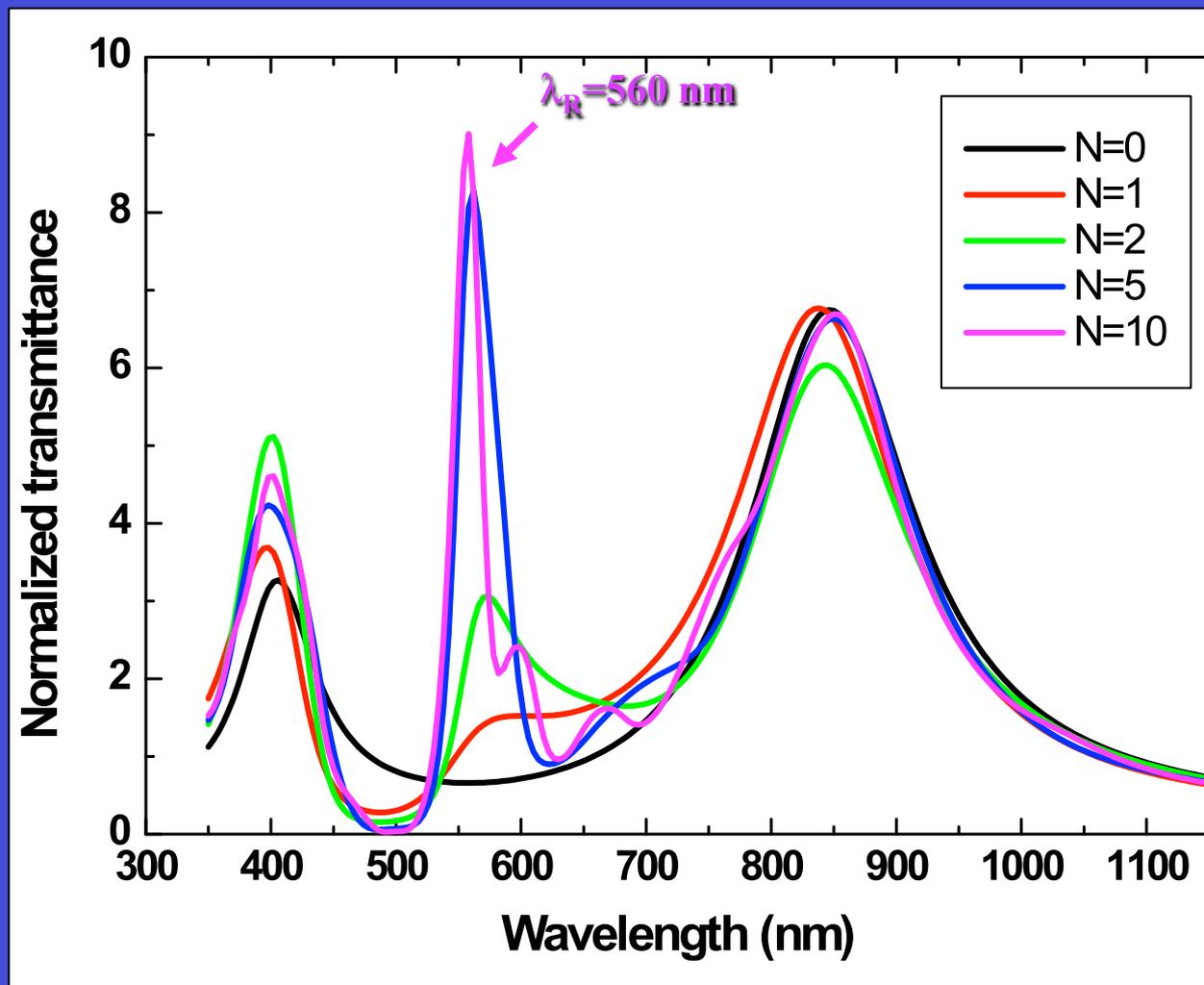
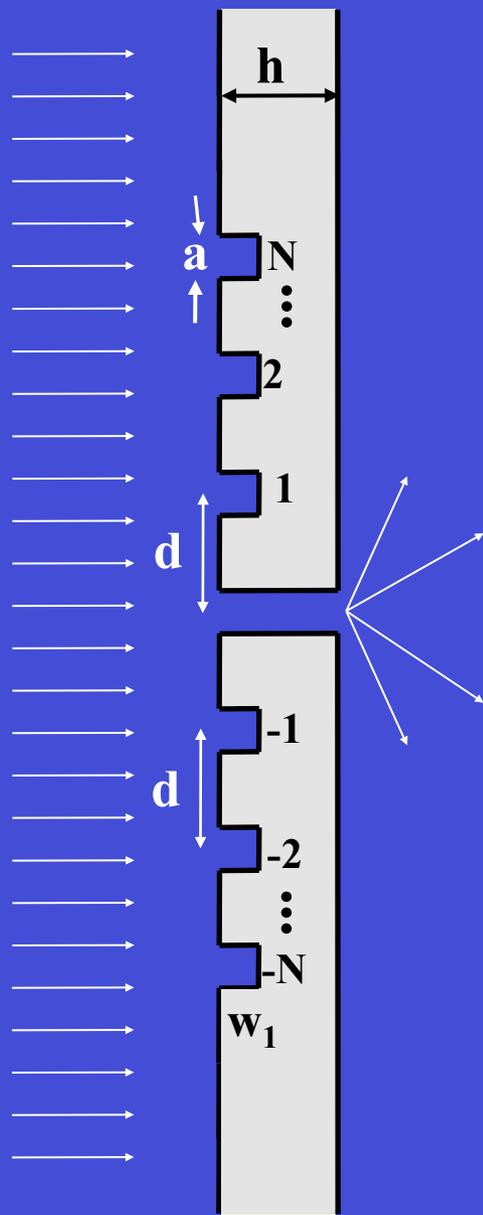
H.J. Lezec, A. Degiron, E.Devaux, R.A.Linke, L. Martín-Moreno, F.J. García-Vidal and T.W.Ebbesen, *Science* 297, 820 (2002)

Aperturas + corrugación. Textura en la cara incidente.



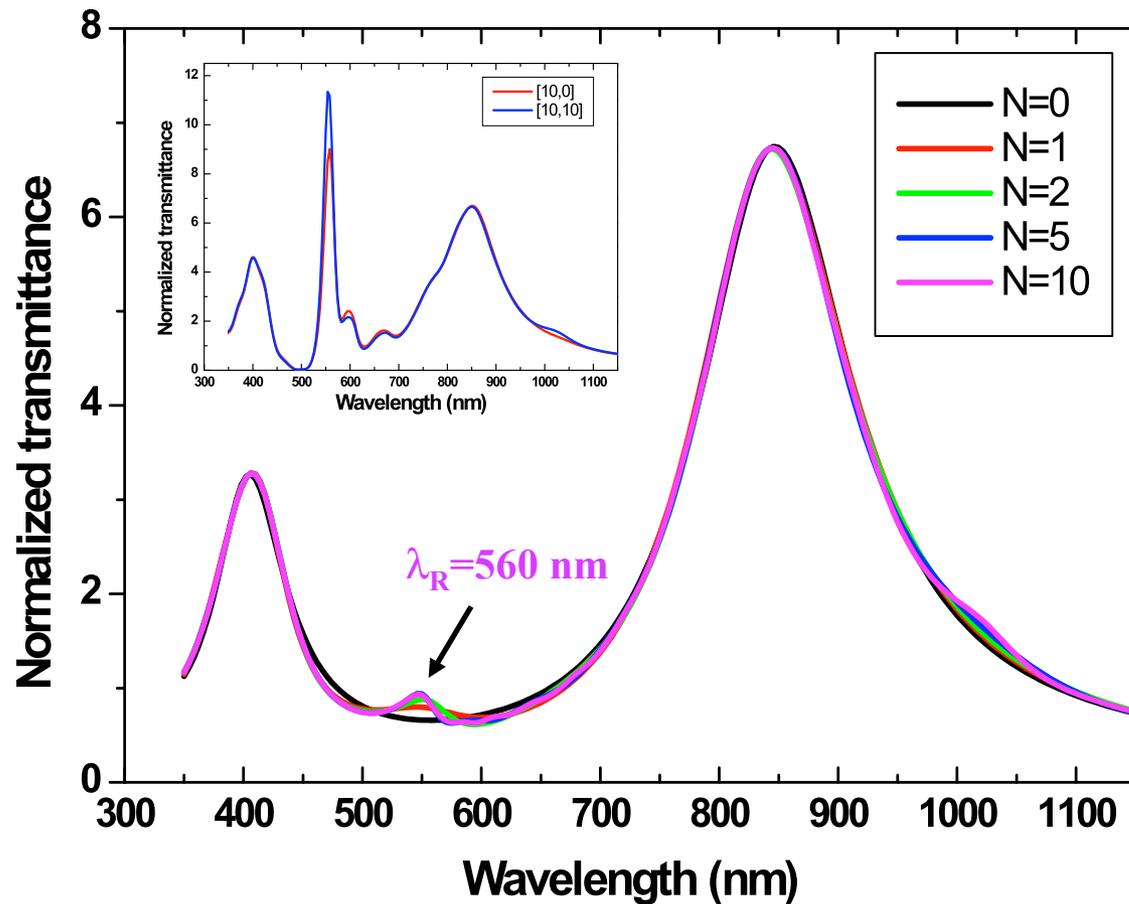
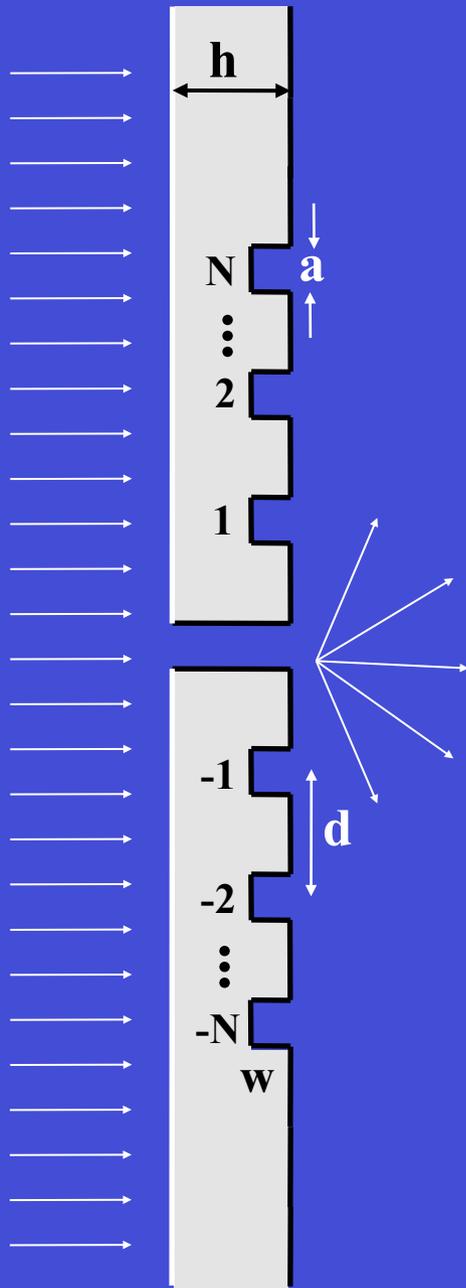
Aperturas + corrugación. Textura en la cara incidente.

$a=40\text{nm}$ $d=500\text{nm}$ $w=100\text{nm}$ $h=350\text{nm}$



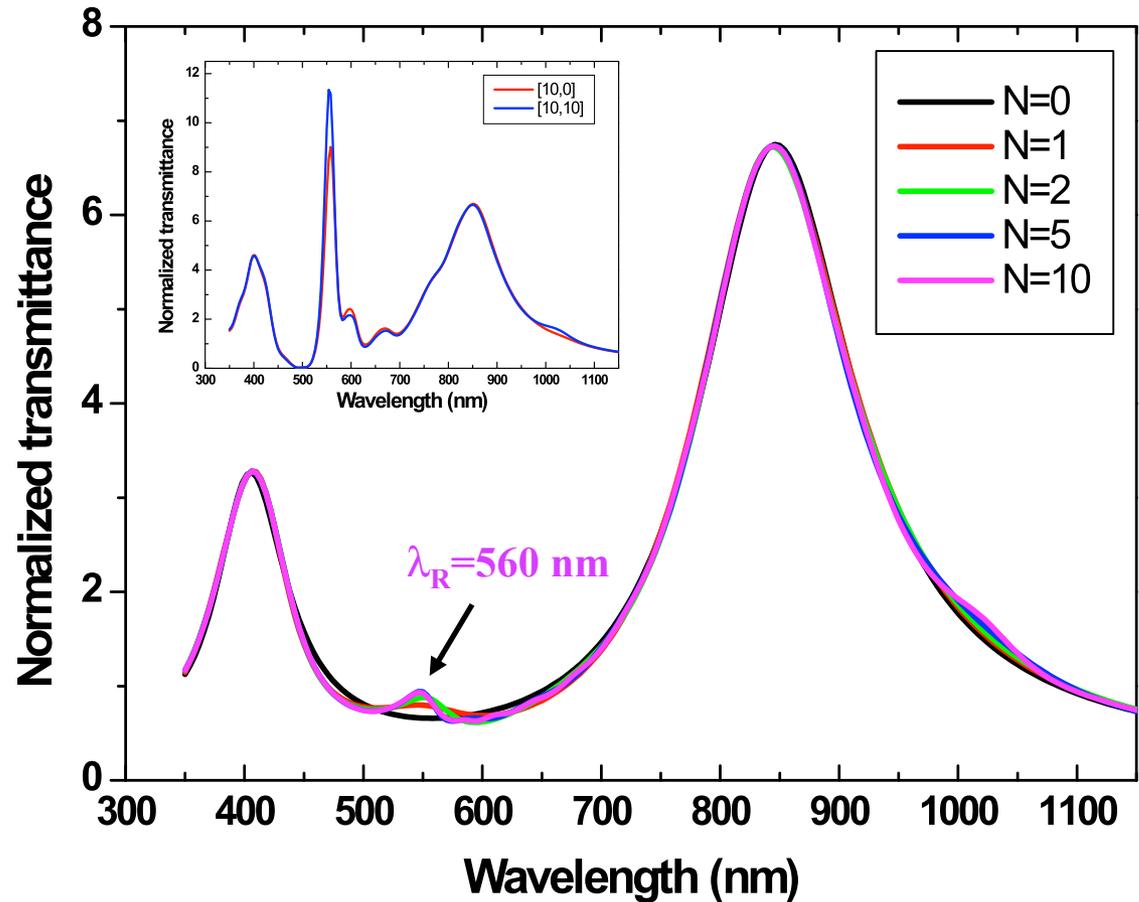
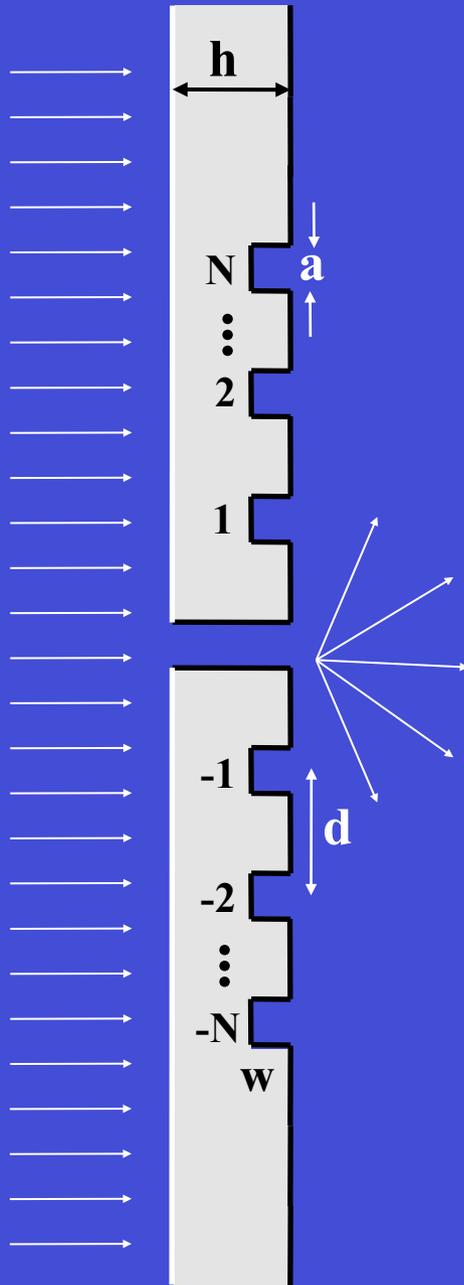
Aperturas + corrugación. Textura en la cara de salida.

$a=40\text{nm}$ $d=500\text{nm}$ $w=100\text{nm}$ $h=350\text{nm}$



Aperturas + corrugación. Textura en la cara de salida.

$a=40\text{nm}$ $d=500\text{nm}$ $w=100\text{nm}$ $h=350\text{nm}$

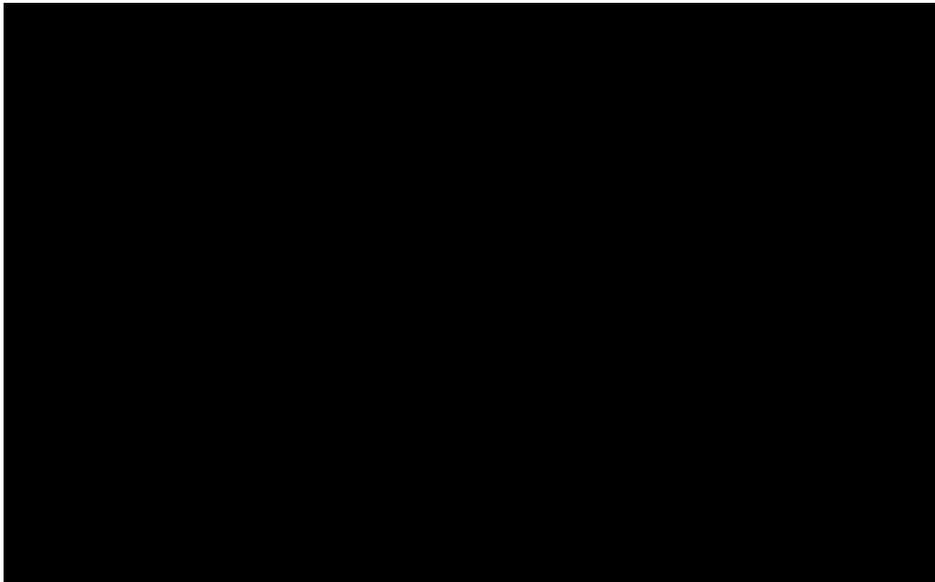


Total transmittance is basically controlled by input corrugation!

Agujero con y sin antena A LA ENTRADA



SIN corrugación

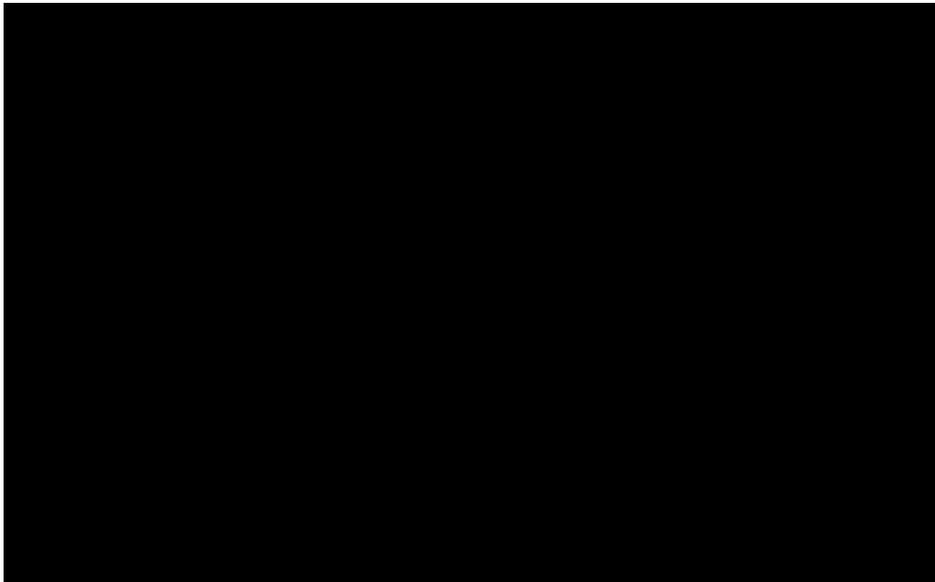


CON corrugación

Agujero con y sin antena A LA SALIDA



SIN corrugación:
radiación isotropa

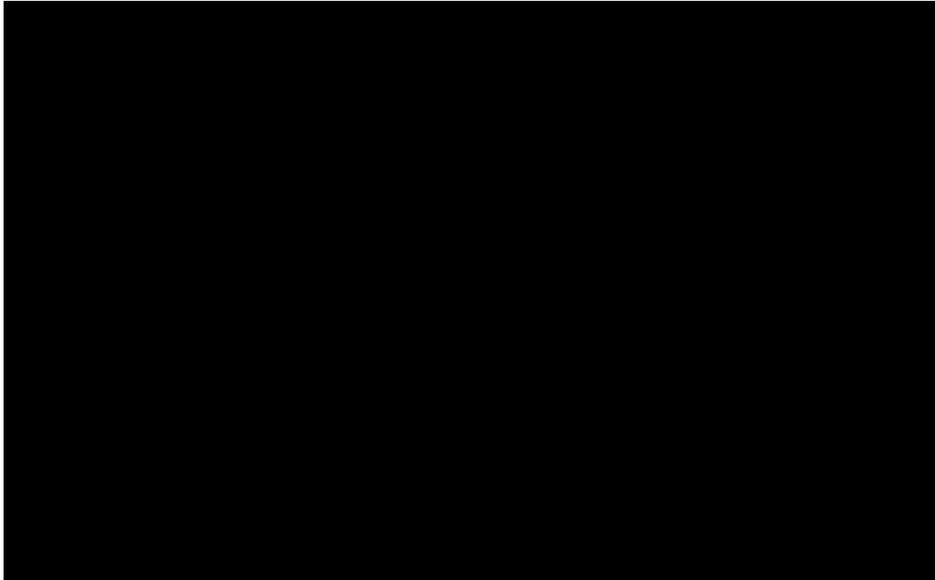


CON corrugación:
focalización
a la longitud de onda
resonante

Paso de la luz por un agujero con y sin antena

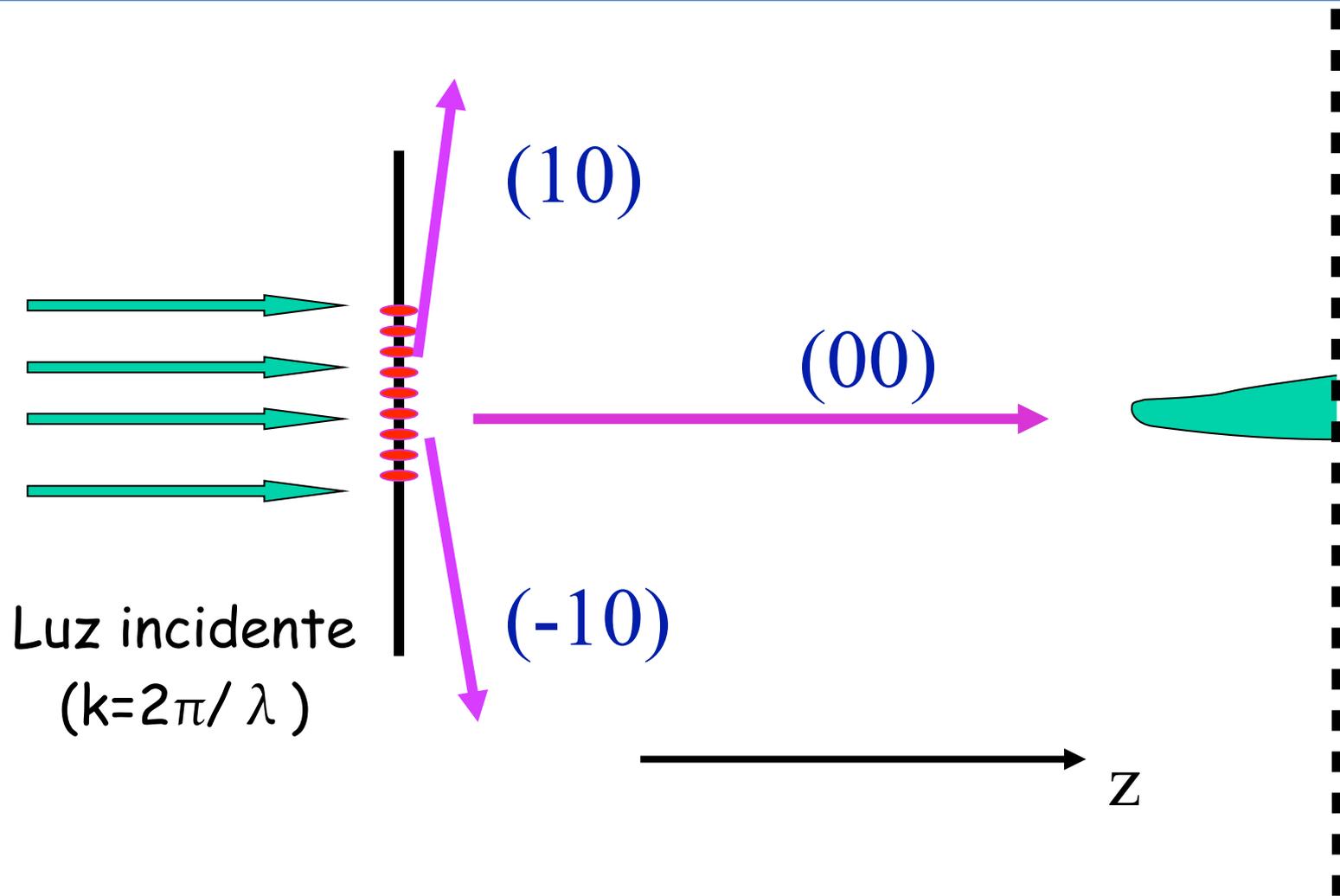


CON corrugación:
longitud de onda
RESONANTE



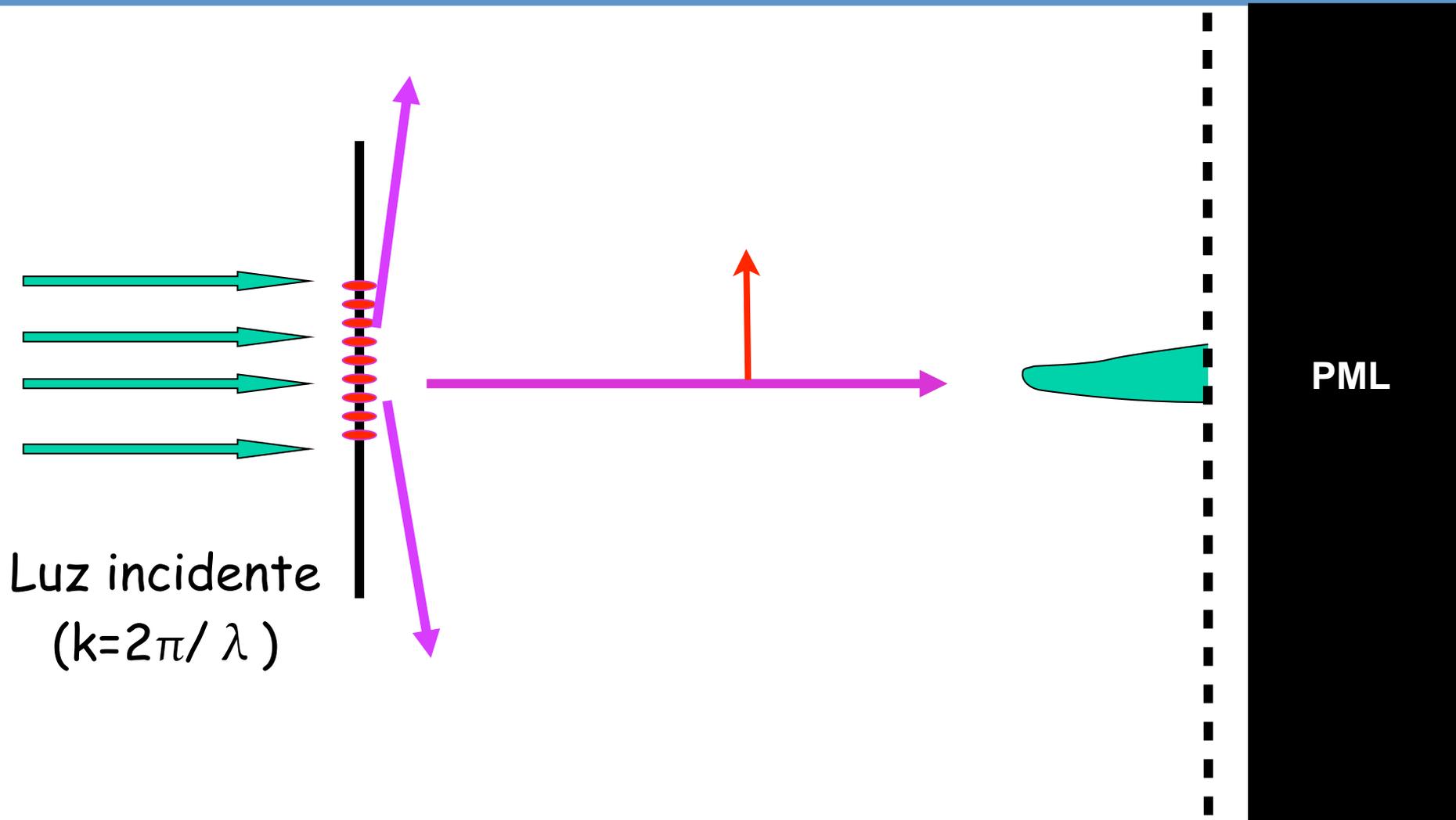
CON corrugación:
longitud de onda
NO RESONANTE

Sistemas periódicos: Dispersión de Bragg.



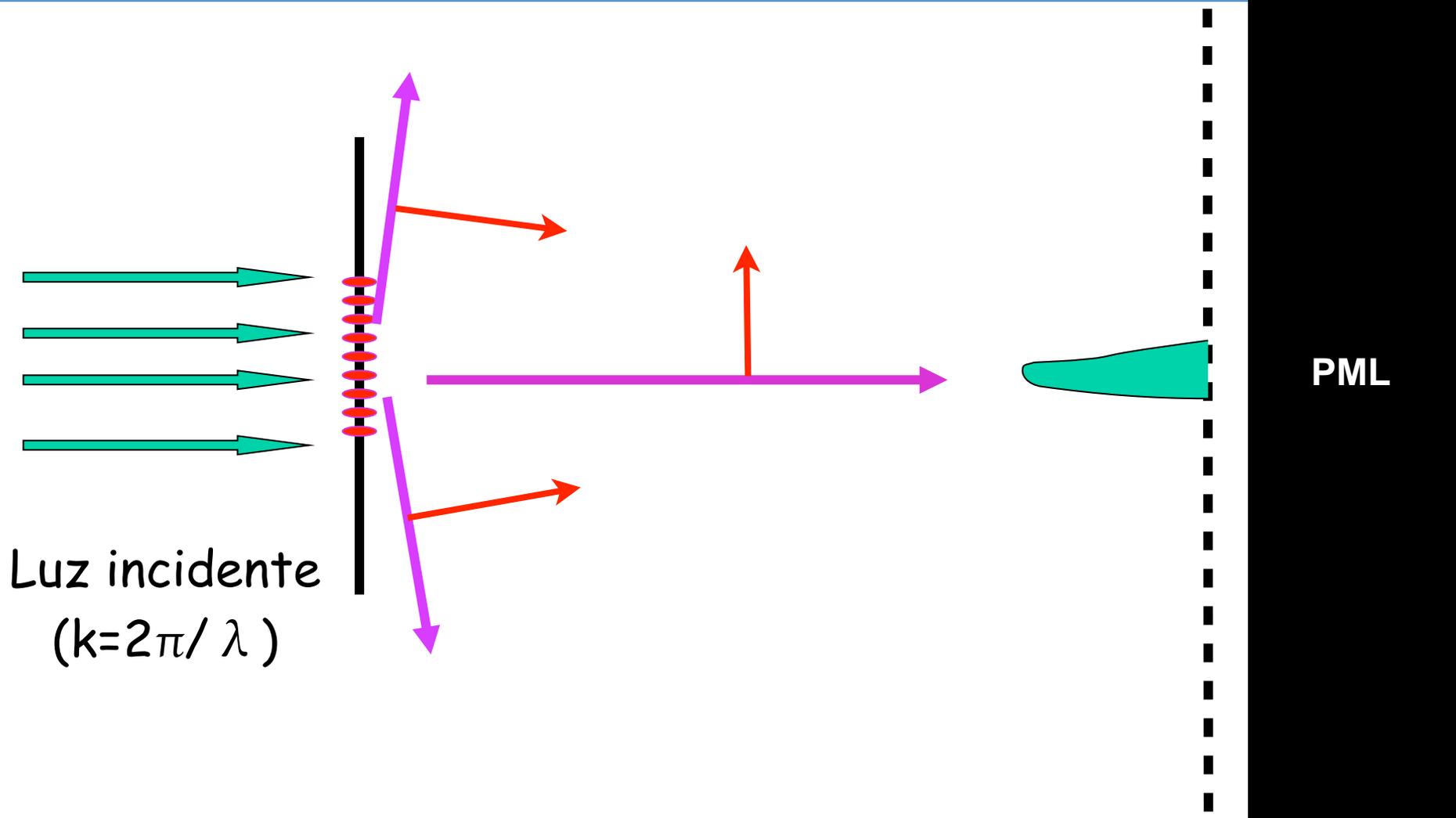
Rayos "paralelos" cuando el Periodo y la longitud de onda son parecidos

Sistemas periódicos: Dispersión de Bragg.



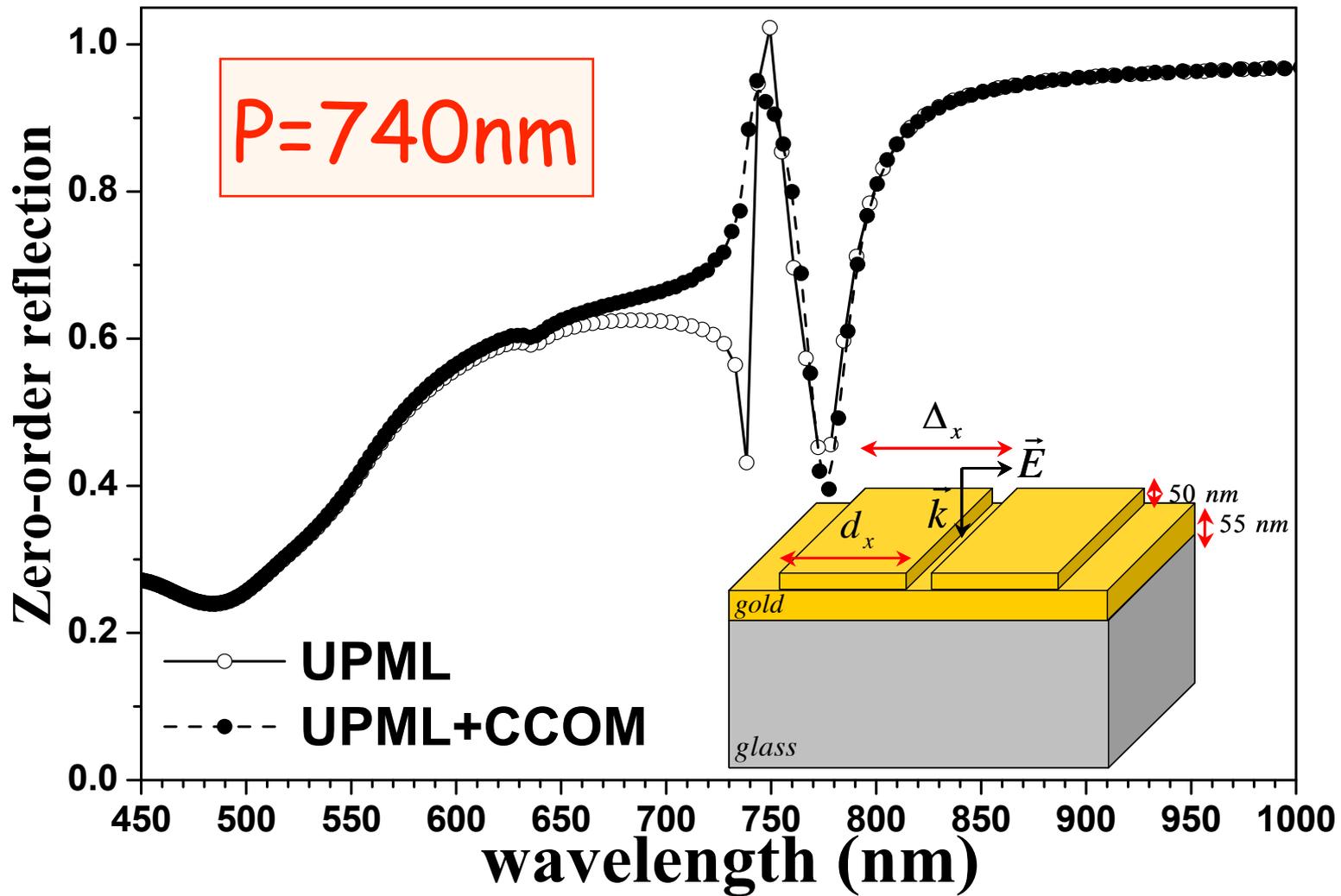
Rayos "paralelos" cuando el Periodo y la longitud de onda son parecidos

Sistemas periódicos: Dispersión de Bragg.



El campo electrico incide perpendicular a las PML!

Sistemas periodicos. Combinación de "absorbentes perfectos"



Computación: sí, pero...



Imm@unizar.es



- (i) El ordenador es una herramienta.
La computación también.
Las herramientas hay que utilizarlas bien y lo que hacen/dicen puede estar mal.

Imm@unizar.es



(i) El ordenador es una herramienta.

La computación también.

Las herramientas hay que utilizarlas bien y lo que hacen/dicen puede estar mal.

(ii) La programación requiere un gusto por el detalle y la comprobación.

Los "atajos" se acaban pagando.

Imm@unizar.es



(i) El ordenador es una herramienta.

La computación también.

Las herramientas hay que utilizarlas bien y lo que hacen/dicen puede estar mal.

(ii) La programación requiere un gusto por el detalle y la comprobación.
Los "atajos" se acaban pagando.

(iii) Las teorías y los programas tienen rangos de aplicabilidad.

Es imprescindible saber cuales son.

Las "cajas negras" son peligrosas.

Programas comerciales: "Cree pero comprueba".

Imm@unizar.es