

**UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO
INSTITUTO DE FÍSICA DE SÃO CARLOS**

Ian Carlo Parra Alzate

**Desenho inteligente de dispositivos fotônicos fabricados
via polimerização por dois fótons**

São Carlos

2023

Ian Carlo Parra Alzate

**Desenho inteligente de dispositivos fotônicos fabricados
via polimerização por dois fótons**

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Física do Instituto de Física de São Carlos da Universidade de São Paulo, para obtenção do título de Mestre em Ciências.

Área de concentração: Física Aplicada

Orientador: Prof. Dr. Cleber Renato Mendonça

Versão original

**São Carlos
2023**

AUTORIZO A REPRODUÇÃO E DIVULGAÇÃO TOTAL OU PARCIAL DESTE TRABALHO, POR QUALQUER MEIO CONVENCIONAL OU ELETRÔNICO PARA FINS DE ESTUDO E PESQUISA, DESDE QUE CITADA A FONTE.

Parra Alzate, Ian Carlo
Desenho inteligente de dispositivos fotônicos
fabricados via polimerização por dois fótons / Ian Carlo
Parra Alzate; orientador Cleber Renato Mendonça -- São
Carlos, 2023.
61 p.

Dissertação (Mestrado - Programa de Pós-Graduação em
Física Teórica e Experimental) -- Instituto de Física de São
Carlos, Universidade de São Paulo, 2023.

1. Desenho inverso. 2. Gradiente descendente. 3.
Fotopolimerização. 4. Absorção de dois fótons. 5.
Dispositivos fotônicos. I. Renato Mendonça, Cleber, orient.
II. Título.

FOLHA DE APROVAÇÃO

Ian Carlo Parra Alzate

Dissertação apresentada ao Instituto de Física de São Carlos da Universidade de São Paulo para obtenção do título de Mestre em Ciências. Área de Concentração: Física Teórica e Experimental.

Aprovado (a) em: 22/08/2023

Comissão Julgadora

Dr(a): Cleber Renato Mendonça

Instituição: (IFSC/USP)

Dr(a): Gustavo Silva Wiederhecker

Instituição: (UNICAMP/Campinas)

Dr(a): Vinícius Tribuzi Rodrigues Pinheiro Gomes

Instituição: (UFSCar/São Carlos)

AGRADECIMENTOS

Agradeço a minha família pelo apoio, acolhimento e motivação, sem eles eu não seria a pessoa que sou.

Aos meus amigos Orlando e Juvenal, pessoas que me apoiaram emocionalmente durante esse processo. Ao meu amigo Kevin, por ter me apoiado na distância e sempre estar presente.

Johan e Camilinha, muito obrigado por ter me recebido no Brasil e me oferecer acolhimento, suporte e uma bonita amizade.

Shirly, Emma, Arnol, Yos e Lora, agradeço vocês por ter oferecido uma amizade sem condições.

Clara, sou grato pelo amor, apoio, carinho, suporte e todo que tu sabe que contribuiu nesse tempo juntos.

Profa. Cristina, minha primeira orientadora, pelo apoio, disposição e preocupação.

Ao meu orientador, professor Cleber, obrigado pela orientação, apoio, paciência e orientação nesse trabalho.

O presente trabalho foi realizado com o apoio da Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior - Brasil (CAPES) - Código de Financiamento 001.

RESUMO

PARRA ALZATE, I., C. **Desenho inteligente de dispositivos fotônicos fabricados via polimerização por dois fótons**. 2023. 61p. Dissertação (Mestrado em Ciências) - Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2023.

Este trabalho explora o projeto de um demultiplexador de comprimento de onda polimérico utilizando algoritmos de desenho inteligente (ou *inverse design*), baseados no método do gradiente descendente. Um demultiplexador é um dispositivo que recebe luz de distintos comprimentos de ondas, os quais são guiados até uma saída específica (demultiplexação), determinada pelo usuário. Neste trabalho se apresenta a metodologia para simular este dispositivo usando as equações de Maxwell no domínio da frequência, que permitem calcular a transmitância do dispositivo, a qual é utilizada para avaliar a sua eficiência. Este parâmetro é usado como função objetivo para maximizar a transmitância em 1300 e 1550 nm, comprimentos de onda utilizados na área de telecomunicações. Por sua vez, a transmitância depende da geometria do dispositivo e distribuição dos materiais que o compõem (índices de refração). O algoritmo do descendente é um método iterativo que permite mapear o espaço constituído pelas variáveis de desenho, encontrado a estrutura ótima que mais se aproxima às nossas especificações. Este problema inverso é conhecido como desenho inteligente. Foram exploradas estruturas com áreas de desenho de 5x5 e 10x10 μm^2 em função da resolução de fabricação, um parâmetro experimental presente na técnica de microfabricação via absorção por dois fótons, responsável por determinar quais estruturas são fabricáveis. Os resultados apontam à existência de um limiar maior a 150 nm de resolução, onde as estruturas apresentam o melhor desempenho, porém, fora do nosso regime de fabricação.

Palavras-chave: Desenho inverso. Gradiente descendente. Fotopolimerização. Absorção de dois fótons. Dispositivos fotônicos.

ABSTRACT

PARRA ALZATE, I., C. **Intelligent design of photonic devices manufactured via two-photon polymerization.** 2023. 61p. Dissertation (Master in Science) - Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2023.

This work explores the design of a polymeric wave length demultiplexer using intelligent design algorithms (or *inverse design*), based on the descending gradient method. A demultiplexer is a device that receives light from different wave lengths, which are guided to a specific output (demultiplexing), determined by the user. This work presents the methodology to simulate this device using the maxwell equations in the frequency domain, which allow to calculate the transmittance of the device, which is used to evaluate its efficiency. This parameter is used as an objective function to maximize transmittance at 1300 and 1550 nm, wavelengths used in the telecommunications area. In turn, the transmission depends on the geometry of the device and distribution of the materials that compose it (refractive indices). The descendant algorithm is an iterative method that allows to map the space consisting of drawing variables, found the great structure that comes closest to our specifications. This reverse problem is known as intelligent design. Structures with drawing areas of 5x5 and 10x10 μm^2 due to the manufacturing resolution, an experimental parameter present in the microfabrication technique via absorption by two photons, responsible for determining which structures are manufactured, were explored. . The results point to the existence of a threshold of greater than 150 nm of resolution, where the structures perform the best performance, but outside our manufacturing regime.

Keywords: Inverse design. Gradient descent. Photopolymerization. Two-photon absorption. Photonic devices.

LISTA DE FIGURAS

Figura 1 – Número de artigos publicados sobre o tema <i>Inverse Design</i> ao longo dos anos. Fonte: Elaborada pelo autor	17
Figura 2 – (a) Demultiplexador de feixe. (b) estrutura binaria construída via desenho inteligente. Quadro azul: região de desenho, quadro amarelo: pixel. O dispositivo controla o fluxo do feixe em função do comprimento de onda (seta verde e vermelha). (c) intensidade de campo elétrico na estrutura. Fonte: Adaptada de SU <i>et al.</i> . (2)	18
Figura 3 – Absorção por dois fótons: (a) degenerado e (b) não degenerado. A linha pontilhada representa o estado virtual. Fonte: Elaborada pelo autor	20
Figura 4 – Composto fluorescente após excitação de um vs dois fótons. Fonte: PIAANT; BOLZE; SPECHT. (10)	21
Figura 5 – Processo de fotopolimerização. Fonte: Adaptada de TOMAZAIO. (13)	21
Figura 6 – Representação de uma simulação em duas dimensões (2D), o dispositivo é simétrico ou infinito ao longo do eixo z. Fonte: Elaborada pelo autor	24
Figura 7 – Representação das aproximações discretas usadas na diferenciação numérica. Fonte: Adaptada de RUMPF.(16)	25
Figura 8 – Representação discreta de duas funções deslocadas na grade. Fonte: Adaptada de RUMPF. (16)	28
Figura 9 – Construção bidimensional dos modos E e H a partir da célula tridimensional de Yee. Fonte: Adaptada de RUMPF. (16)	30
Figura 10 – Representação dos modos E e H em uma grade de Yee 3x3. Fonte: Adaptada de RUMPF. (16)	31
Figura 11 – Representação da técnica de duplicação: (a) modos E e H na grade de Yee 1x embutidos na grade duplicada 2x, (b) tensor de permitividade relativa dos eixos x, y, z e (c) tensor de permeabilidade relativa dos eixos x, y, z extraídas da grade 2x. Fonte: Adaptada de RUMPF. (16)	33
Figura 12 – Carga pontual sem (esquerda) e com (direita) camada absorvente. Fonte: Adaptada de RUMPF. (16)	34

Figura 13 – (a) Campo total e (b) campo espalhado. A linha tracejada indica a interface entre o campo total e o campo espalhado (interface TF/SF), (c) matriz de máscara. Fonte: Elaborada pelo autor	35
Figura 14 – (a) Representação dos pontos (círculo vermelho) mínimos, máximos e de sela para uma função uni-variável. (b) Mínimos e máximos da Função de Ackley 2D. Fonte: Elaborada pelo autor	36
Figura 15 – Criação da área de desenho usando a operação lógica AND feita a partir dos arquivos eps_bg (background) e eps_fg (foreground). Monitores (azul) e região otimizada (vermelho). Fonte: Adaptada de SU <i>et al.</i> . (2)	39
Figura 16 – Linhas de código para criar o espaço computacional 2D (SIM_2D) ou 3D (usando o a linha que contém o <i>else</i>). Fonte: Adaptada de SU <i>et al.</i> . (2)	40
Figura 17 – Linhas de código para posicionar as fontes e os monitores. Fonte: Adaptada de SU <i>et al.</i> . (2)	40
Figura 18 – (a) Seleção dos índices de refração presentes no dispositivo, e atribuição da resolução computacional. (b) Dimensão mínima dentro de uma estrutura. Fonte: Adaptada de SU <i>et al.</i> . (2); RUMPF. (16)	41
Figura 19 – Processo de otimização da área de desenho em um dispositivo fotônico usando o SPINS-B, os círculos roxos mostras as diferencias entre a estrutura continua e discreta. Fonte: Elaborada pelo autor	42
Figura 20 – Eleição do número de iterações contínuas, discretas e imposição da resolução de fabricação. Fonte: Adaptada de SU <i>et al.</i> . (2)	43
Figura 21 – Sistema de fotopolimerização. Fonte: Adaptada de OTUKA. (11)	44
Figura 22 – Montagem das amostras. Fonte: Elaborada pelo autor	45
Figura 23 – Estrutura final dos demultiplexadores de $5 \times 5 \mu\text{m}^2$ em função do tamanho da dimensão mínima. Fonte: Elaborada pelo autor	47

Figura 24 – Função objetivo ao longo do processo de otimização e distribuição final do modo fundamental do campo E em uma estrutura de $5 \times 5 \mu\text{m}^2$ e dimensão mínima de (a) 100 nm e (b) 150 nm. As fases de estágio estão divididas pelas linhas tracejadas. Fonte: Elaborada pelo autor	48
Figura 25 – Variação da (a) transmitância, (b) vazamento e (c) quantidade material (resina) em função da resolução de fabricação em uma estrutura de $5 \times 5 \mu\text{m}^2$. A linha vermelha tracejada indica a porcentagem média de material presente na estrutura simulada. Fonte: Elaborada pelo autor	49
Figura 26 – Valor final da função objetivo em relação à resolução de fabricação. Os eixos indicam o número de células no espaço computacional que contém as estruturas de $5 \times 5 \mu\text{m}^2$. Fonte: Elaborada pelo autor	50
Figura 27 – Processo de otimização das estruturas de $5 \times 5 \mu\text{m}^2$, os gráficos mostram a variação de transmitância e vazamento em cada estágio de otimização para duas estruturas com resolução de (a) 100 nm e (b) 300 nm. Fonte: Elaborada pelo autor	51
Figura 28 – Estrutura final dos demultiplexadores de $10 \times 10 \mu\text{m}^2$ em função do tamanho da dimensão mínima. Os eixos indicam o número de células no espaço computacional. Fonte: Elaborada pelo autor	52
Figura 29 – Distribuição de campo E em estruturas de $10 \times 10 \mu\text{m}^2$ com (a) 100 e (b) 300 nm de resolução de fabricação. Fonte: Elaborada pelo autor	53
Figura 30 – Variação da (a) transmitância, (b) vazamento e (c) quantidade material (resina) em função da resolução de fabricação em uma estrutura de $10 \times 10 \mu\text{m}^2$. A linha vermelha tracejada indica a porcentagem média de material presente na estrutura simulada. Fonte: Elaborada pelo autor	53
Figura 31 – Valor final da função objetivo em relação à resolução de fabricação. Os eixos indicam o número de células no espaço computacional que contém as estruturas de $10 \times 10 \mu\text{m}^2$. Fonte: Elaborada pelo autor	54
Figura 32 – Demultiplexador de $10 \times 10 \mu\text{m}^2$ com resolução de 600 nm e $1.2 \mu\text{m}$: (a) estrutura contínua e (b) binarizada. Fonte: Elaborada pelo autor	55

Figura 33 – Demultiplexador de $10 \times 10 \mu\text{m}^2$ com resolução de $1.2 \mu\text{m}$. Imagem tomada via microscopia eletrônica de varredura.

Fonte: Elaborada pelo autor 55

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	17
2	FUNDAMENTOS	19
2.1	Preliminares da óptica não linear	19
2.1.1	Absorção por dois fótons (A2F)	19
2.1.2	Princípios da técnica de fotopolimerização via absorção de dois fótons (PA2F)	20
2.2	Equações de Maxwell no domínio da frequência	22
2.2.1	Modos de oscilação E e H	23
2.3	Método de diferenças finitas	25
2.3.1	Diferenciação numérica e condições de contorno	25
2.3.2	Representação matricial	26
2.3.3	Funções acopladas e grade deslocada	27
2.4	Aproximação discreta das Equações de Maxwell	29
2.4.1	Esquema de Yee	29
2.4.2	Técnica de duplicação 2x e as camadas PML	32
2.4.3	Técnica TF/SF	35
2.5	Gradiente descendente	36
2.6	Desenho inteligente	37
3	MÉTODOS	39
3.1	SPINS-B	39
3.1.1	Restrições computacionais	43
3.2	Sistema de fotopolimerização	44
3.3	Preparação das amostras	45
4	RESULTADOS	47
4.1	Resultados computacionais	47
4.1.1	Estrutura de $5 \times 5 \mu\text{m}^2$	47
4.1.2	Estrutura de $10 \times 10 \mu\text{m}^2$	52
4.2	Resultados experimentais	54
5	CONCLUSÃO	57
	REFERÊNCIAS	59

1 INTRODUÇÃO

O projeto de dispositivos fotônicos tem sido geralmente realizado baseado na intuição, onde se escolhe uma estrutura geral, de acordo com a teoria analítica, e realiza-se simulações através do ajuste de alguns de parâmetros. Embora essa metodologia tenha tido um longo histórico de sucesso e deu origem a uma ampla biblioteca de *templates*, ela produz dispositivos que não apresentam necessariamente um desempenho ideal.(1) O conceito de *inverse design* (desenho inteligente ou desenho inverso, em português) tem se tornado cada vez mais relevante em diferentes áreas do conhecimento (ver Figura 1). Na área da óptica e fotônica, o *inverse design* tem permitido a criação de estruturas (dispositivos) com propriedades ópticas sob especificação, e otimizadas para atingir o objetivo de uma dada aplicação. Na Figura 1 se mostra o aumento de artigos científicos sobre este tópico com o decorrer dos anos, observando-se um maior interesse nas áreas da engenharia, física e ciência dos materiais.

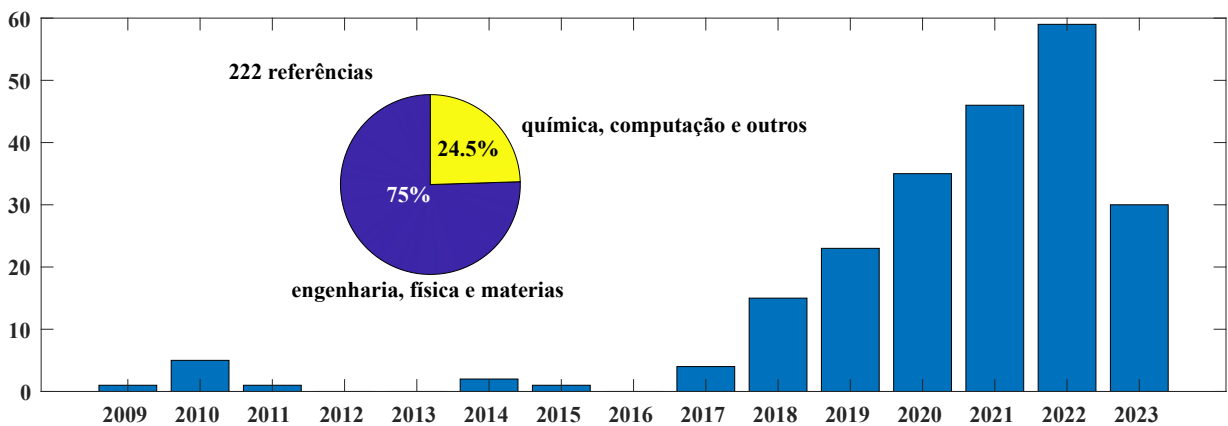


Figura 1 – Número de artigos publicados sobre o tema *Inverse Design* ao longo dos anos.
Fonte: Elaborada pelo autor

Uma das principais componentes do desenho inteligente é a escolha de algoritmos de otimização eficientes como, por exemplo, o gradiente descendente.(2) Esses algoritmos permitem explorar um grande espaço de parâmetros e encontrar estruturas otimizadas que cumpram uma função desejada. O uso de plataformas poliméricas/orgânicas em dispositivos fotônicos integrados (*on-chip*), embora seja uma opção interessante, ainda é bastante escasso. De fato, desconhecemos investigações desta natureza em estruturas orgânicas, principalmente fabricadas via fotopolimerização por dois fótons, embora tais estudos já tenham sido realizados em estruturas semicondutoras.(3) A fotopolimerização via absorção de dois fótons é um processo no qual um material orgânico (monômero), acompanhado de uma molécula fotoiniciadora que é excitada pela absorção de dois fótons, produzindo

uma reação em cadeia capaz de iniciar a polimerização do material. A fotopolimerização via absorção de dois fótons apresenta várias vantagens, como alta resolução espacial, o que a torna uma técnica promissora para aplicações em áreas como microfabricação e fotolitografia de alta resolução.(4)

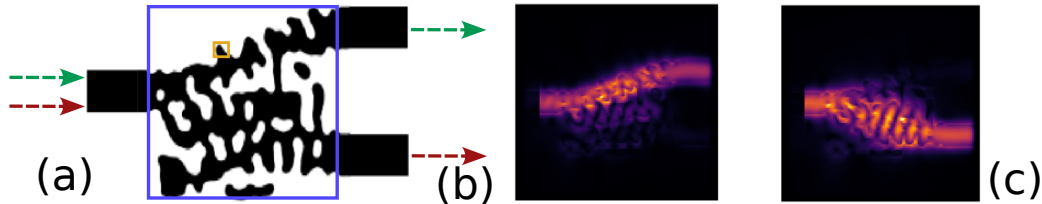


Figura 2 – (a) Demultiplexador de feixe. (b) estrutura binária construída via desenho inteligente. Quadro azul: região de desenho, quadro amarelo: pixel. O dispositivo controla o fluxo do feixe em função do comprimento de onda (seta verde e vermelha). (c) intensidade de campo elétrico na estrutura.

Fonte: Adaptada de SU *et al.*. (2)

O objetivo deste trabalho é explorar o desenho de um demultiplexador de comprimento de onda polimérico (ver Figura 2), fabricados via fotopolimerização por absorção de dois fótons. Este dispositivo recebe feixes de luz com distintos comprimentos de onda, os quais são guiados até uma saída específica que é determinada pelo usuário. Este dispositivo seria o análogo óptico de um demultiplexador eletrônico. O processo de desenvolvimento destes dispositivos consiste de duas fases, começando com a simulação e otimização de diversas estruturas usando algoritmos de desenho inteligente, observando as condições de fabricação. Finalmente, baseado nos resultados da primeira fase se pretende fabricar algumas das estruturas obtidas computacionalmente. Cabe esclarecer que o foco principal deste trabalho se centra na parte do desenho computacional e análise do dispositivo. Na Secção 2 são introduzidas as noções teóricas e experimentais básicas que foram utilizadas neste projeto, começando com os fundamentos da óptica não linear e o processo de fotopolimerização, seguindo com as equações de Maxwell no domínio da frequência e sua formulação sob o método das diferenças finitas, Por fim, acabando com os algoritmos de gradiente descendente no contexto do desenho inverso. Na Secção 3 é explicado o algoritmo usado para otimizar os demultiplexadores e são apresentados os critérios com que foram analisadas estas estruturas. Além disso, apresenta-se o processo de preparação, montagem e fabricação das amostras. Na Secção 4 são discutidos os resultados computacionais e experimentais obtidos. Por fim, na Secção 5 são apresentadas as principais conclusões e perspectivas deste trabalho, bem como as possíveis pesquisas a serem realizadas no futuro.

2 FUNDAMENTOS

2.1 Preliminares da óptica não linear

A óptica não-linear refere-se aos efeitos que surgem quando as propriedades ópticas de um material dependem da intensidade da luz. Em 1960, após a demonstração do primeiro laser, Peter Franken e seus colaboradores começaram a explorar a óptica não-linear por meio da observação do fenômeno do segundo harmônico gerado em um cristal de quartzo. Essa descoberta foi um marco significativo na óptica não-linear, pois demonstrou que a interação da luz com um material poderia resultar na geração de frequências ópticas diferentes daquelas inicialmente incidentes. (5) Um campo elétrico \mathbf{E} de $\sim 10^8$ V/m tem a mesma ordem de grandeza dos campos de interação interatômica, dando origem a processos de ordem superior, fenômenos conhecidos como processos não paramétricos. (6) Isto leva a uma perturbação na polarização \mathbf{P} , sendo expressa como:

$$\mathbf{P} = \epsilon_0 \chi^{(1)} \mathbf{E} + \mathbf{P}^{\text{NL}}, \quad (2.1)$$

sendo ϵ_0 a permissividade elétrica do vácuo e \mathbf{P}^{NL} a polarização não linear. A equação 2.1 supõe ϵ_0 como uma quantidade escalar, ou seja, em um material homogêneo e isotrópico. O coeficiente $\chi^{(1)}$ corresponde à susceptibilidade de primeira ordem (regime linear) e, em geral, pode ser assumida como uma constante, mas tendo em vista que é de natureza tensorial, assim como ϵ_0 .

2.1.1 Absorção por dois fótons (A2F)

Maria Göppert Mayer descreveu os fundamentos teóricos que prevem o fenômeno de absorção de dois fótons em sua tese de doutorado na Universidade de Göttingen no ano de 1931.(7) Este fenômeno foi confirmado experimentalmente 30 anos depois por Kaiser *et al*, quando observaram fluorescência induzida via absorção de dois fótons em cristais dopados com Európio (Eu).(8) A absorção de dois fótons é um fenômeno de natureza quântica em que um átomo ou molécula absorve simultaneamente dois fótons de energia suficiente para promover um salto quântico, ou seja, passar do estado fundamental $|0\rangle$ ao excitado $|1\rangle$. Quando os fótons absorvidos possuem a mesma energia, o processo é chamado de absorção de dois fótons degenerado; quando possuem energias diferentes, o processo recebe a denominação de não degenerado.(6) Do ponto de vista teórico, é necessária a existência de um estado intermediário virtual que represente a interação entre o campo eletromagnético e a matéria. Na Figura 3 se ilustra este processo. A absorção de dois fótons não ocorre necessariamente de forma simultânea, mas sim dentro de um intervalo definido pelo princípio de incerteza de Heisenberg:

$$\sigma_t = \frac{h}{4\pi\sigma_E}, \quad (2.2)$$

sendo h a constante de Planck, σ_t a incerteza na medida temporal e σ_E a incerteza na medida de energia. Como esse intervalo de tempo é bastante curto (da ordem de femtossegundos), por simplicidade, consideramos a absorção dos fótons como simultânea. Este fenômeno possibilita a localização espacial da excitação e pode ser explorado em técnicas experimentais como fotopolimerização por absorção de dois fótons.(4)

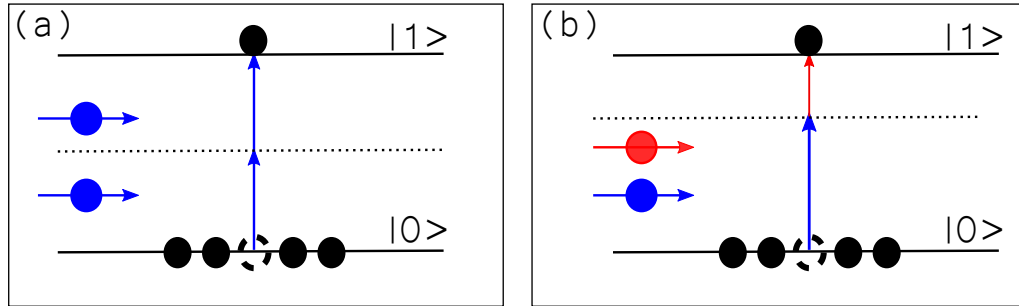


Figura 3 – Absorção por dois fótons: (a) degenerado e (b) não degenerado. A linha pontilhada representa o estado virtual.

Fonte: Elaborada pelo autor

2.1.2 Princípios da técnica de fotopolimerização via absorção de dois fótons (PA2F)

Se a intensidade de luz incidente em um material for consideravelmente alta, e a absorção de dois fótons desse material for significativa, o coeficiente de absorção total da amostra é definido como:

$$\alpha(I) = \alpha_0 + \beta I, \quad (2.3)$$

sendo I a intensidade da fonte e α_0 o coeficiente de absorção linear. A atenuação da intensidade de luz propagada por um material pode ser descrita em termos da Lei de Beer-Lambert:

$$\frac{dI}{dz} = -(\alpha_0 I + \beta I^2), \quad (2.4)$$

sendo β o coeficiente de absorção não linear. Se desprezarmos a absorção linear ($\alpha_0 = 0$), podemos observar que a variação de intensidade diminui proporcionalmente ao quadrado da intensidade da fonte, onde β está relacionado com a probabilidade da amostra absorver dois fótons. Esta característica é vantajosa devido ao confinamento espacial que sofre o feixe de luz quando se propaga no material (9), ver Figura 4.

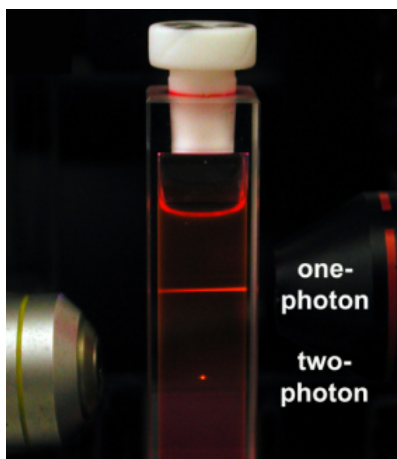


Figura 4 – Composto fluorescente após excitação de um vs dois fótons.
Fonte: PIANI; BOLZE; SPECHT. (10)

Quando ocorre a absorção simultânea de dois fótons, no caso do processo de fotopolimerização, a transição eletrônica pode levar à formação de radicais e à polimerização nas imediações do ponto focal do laser. Isso resulta na solidificação de um pequeno volume denominado *voxel* ao redor do foco. A resolução das estruturas produzidas está diretamente relacionada ao tamanho do *voxel* polimerizado.(11) Na fotopolimerização de dois fótons, o material essencial é composto por monômeros e um fotoiniciador.(12) Os monômeros são moléculas de baixo peso molecular, enquanto o fotoiniciador é um composto sensível à luz que produz uma reação em cadeia para formar o polímero. O sucesso da polimerização depende da escolha adequada do fotoiniciador, que deve ter características favoráveis, como alta capacidade de absorção de dois fótons, rápida taxa de polimerização e ampla solubilidade. (12)

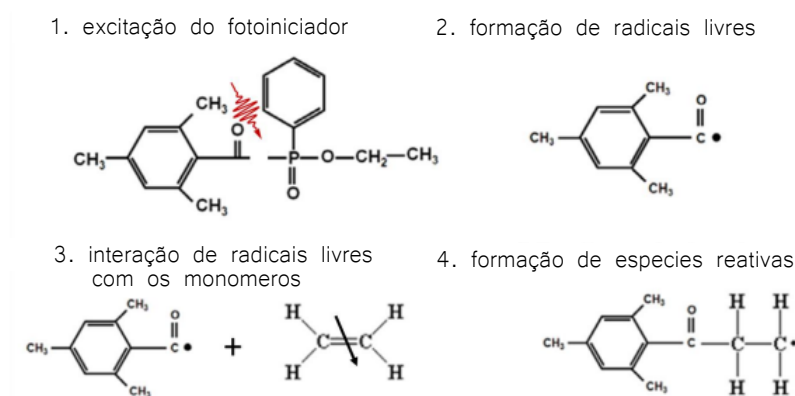


Figura 5 – Processo de fotopolimerização.
Fonte: Adaptada de TOMAZAIO. (13)

Na Figura 5 é representado o processo de fotopolimerização. Primeiramente, a interação do fotoiniciador com a luz gera radicais livres que reagem com os monômeros, quebrando

suas ligações insaturadas e formando espécies reativas. Essas espécies reativas se unem aos monômeros, levando ao aumento do tamanho da cadeia molecular. Cada monômero adicionado cria uma nova espécie reativa, promovendo o crescimento contínuo da cadeia. Eventualmente, as espécies reativas contendo várias centenas de monômeros são suprimidas por meio de reações com outras espécies reativas maiores, resultando na formação de uma mistura polimérica altamente reticulada. (13)

2.2 Equações de Maxwell no domínio da frequência

As equações de Maxwell são o ponto de partida para resolver problemas de eletromagnetismo. À medida que a complexidade dos problemas aumenta, torna-se indispensável recorrer a métodos numéricos para economizar tempo e esforço. Diversas técnicas computacionais têm sido desenvolvidas com o intuito de solucionar problemas relacionados ao eletromagnetismo que não podem ser resolvidos de forma analítica e exata.(14) As equações de Maxwell no domínio do tempo e da frequência são ferramentas que permitem descrever fenômenos eletromagnéticos, as equações no domínio do tempo permitem estudar estados transitórios e dinâmicos, enquanto as equações no domínio da frequência descrevem estados estacionários e permite simular materiais dispersivos de forma precisa.(15) Como preliminares para discutir o método de diferenças finitas no domínio da frequência e a sua aplicação para a descrição da física envolvida no estudo de dispositivos óticos, segue uma breve introdução das Equações de Maxwell no domínio da frequência na forma diferencial em coordenadas cartesianas:

$$\nabla \cdot \vec{D} = \rho_v \quad \text{Lei de Gauss para o deslocamento elétrico,} \quad (2.5)$$

$$\nabla \cdot \vec{B} = 0 \quad \text{Lei de Gauss para a densidade de fluxo magnético,} \quad (2.6)$$

$$\nabla \times \vec{E} = -j\omega\vec{B} \quad \text{Lei de Faraday,} \quad (2.7)$$

$$\nabla \times \vec{H} = \vec{J} + j\omega\vec{D} \quad \text{Lei de Ampere,} \quad (2.8)$$

sendo \vec{E} o campo elétrico, ω a frequência angular, \vec{H} o campo magnético, \vec{J} a densidade de corrente, ρ_v a densidade de carga, e $j = \sqrt{-1}$. Por último,

$$\vec{D} = \varepsilon\vec{E}, \quad (2.9)$$

$$\vec{B} = \mu\vec{H}, \quad (2.10)$$

$$\vec{J} = \sigma\vec{E}, \quad (2.11)$$

com σ como a condutividade elétrica, μ a permeabilidade magnética e ε a permitividade elétrica. As quantidades tensoriais μ e ε satisfazem as seguintes relações,

$$\mu = \mu_0\mu_r, \quad (2.12)$$

$$\varepsilon = \varepsilon_0\varepsilon_r, \quad (2.13)$$

onde o sub índice r significa relativo e o sub índice 0 implica que o valor é referente ao vácuo. Em vários casos é comum supor que $\vec{J} = 0$ para evitar termos dissipativos (perdas de energia) embutidos na permitividade como deduzido das equações 2.8, 2.9 e 2.11. A permitividade complexa é dada por:

$$\tilde{\varepsilon} = \varepsilon + \frac{\sigma}{j\omega}. \quad (2.14)$$

e pode ser introduzida artificialmente como camadas que absorvem parte de energia do campo elétrico ou magnético (ver Figura 6). Isto será apresentado na secção 2.4. Os materiais isotrópicos mostram as mesmas propriedades eletromagnéticas independentemente da direção dos campos. A permitividade e permeabilidade dos meios isotrópicos são grandezas escalares. No entanto, existem materiais que podem exibir propriedades eletromagnéticas diferentes dependendo da direção dos campos. Esses materiais são denominados anisotrópicos. De forma geral:

$$\begin{aligned} \vec{D} = [\varepsilon]\vec{E} \quad \text{ou} \quad \begin{bmatrix} D_x \\ D_y \\ D_z \end{bmatrix} &= \begin{bmatrix} \varepsilon_{xx} & \varepsilon_{xy} & \varepsilon_{xz} \\ \varepsilon_{yx} & \varepsilon_{yy} & \varepsilon_{yz} \\ \varepsilon_{zx} & \varepsilon_{zy} & \varepsilon_{zz} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} E_x \\ E_y \\ E_z \end{bmatrix}, \\ \vec{B} = [\mu]\vec{H} \quad \text{ou} \quad \begin{bmatrix} B_x \\ B_y \\ B_z \end{bmatrix} &= \begin{bmatrix} \mu_{xx} & \mu_{xy} & \mu_{xz} \\ \mu_{yx} & \mu_{yy} & \mu_{yz} \\ \mu_{zx} & \mu_{zy} & \mu_{zz} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} H_x \\ H_y \\ H_z \end{bmatrix}, \end{aligned} \quad (2.15)$$

onde os sub índices x, y, z indicam as orientações no plano cartesiano. Existem apenas três direções espaciais às quais um campo elétrico ou magnético pode ser direcionado. Isso significa que os campos podem ter apenas uma combinação de três valores diferentes de permeabilidade ou permitividade (16), apresentando uma anisotropia diagonal:

$$\begin{aligned} [\varepsilon] &= \begin{bmatrix} \varepsilon_{xx} & 0 & 0 \\ 0 & \varepsilon_{yy} & 0 \\ 0 & 0 & \varepsilon_{zz} \end{bmatrix}, \\ [\mu] &= \begin{bmatrix} \mu_{xx} & 0 & 0 \\ 0 & \mu_{yy} & 0 \\ 0 & 0 & \mu_{zz} \end{bmatrix}. \end{aligned} \quad (2.16)$$

Materiais em que apenas dois dos valores principais são iguais ($\varepsilon_a = \varepsilon_b \neq \varepsilon_c$) são chamados de uniaxiais. (17) Materiais em que todos os três valores principais são diferentes ($\varepsilon_a \neq \varepsilon_b \neq \varepsilon_c$) são chamados de biaxiais. (17)

2.2.1 Modos de oscilação E e H

A partir das equações rotacionais 2.7, 2.8, 2.9, 2.10 e supondo que não existem densidades de correntes livres, chegamos ao conjunto de equações vetoriais acopladas:

$$\nabla \times (E_x \hat{a}_x + E_y \hat{a}_y + E_z \hat{a}_z) = -j\omega[\mu] (H_x \hat{a}_x + H_y \hat{a}_y + H_z \hat{a}_z), \quad (2.17)$$

$$\nabla \times (H_x \hat{a}_x + H_y \hat{a}_y + H_z \hat{a}_z) = j\omega[\varepsilon] (E_x \hat{a}_x + E_y \hat{a}_y + E_z \hat{a}_z). \quad (2.18)$$

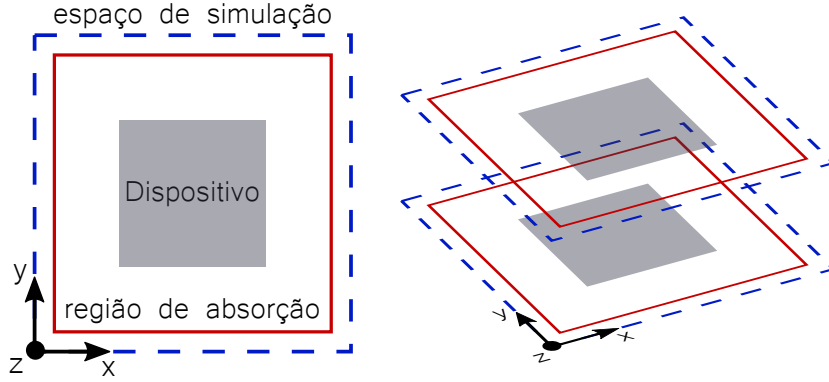


Figura 6 – Representação de uma simulação em duas dimensões (2D), o dispositivo é simétrico ou infinito ao longo do eixo z .

Fonte: Elaborada pelo autor

Desenvolvendo o operador ∇ e supondo que os tensores μ e ε possuem elementos apenas na diagonal principal, obtemos:

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial E_z}{\partial y} - \frac{\partial E_y}{\partial z} \right) \hat{a}_x + \left(\frac{\partial E_x}{\partial z} - \frac{\partial E_z}{\partial x} \right) \hat{a}_y + \left(\frac{\partial E_y}{\partial x} - \frac{\partial E_x}{\partial y} \right) \hat{a}_z \\ = -j\omega\mu_{xx}H_x\hat{a}_x - j\omega\mu_{yy}H_y\hat{a}_y - j\omega\mu_{zz}H_z\hat{a}_z, \end{aligned} \quad (2.19)$$

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial H_z}{\partial y} - \frac{\partial H_y}{\partial z} \right) \hat{a}_x + \left(\frac{\partial H_x}{\partial z} - \frac{\partial H_z}{\partial x} \right) \hat{a}_y + \left(\frac{\partial H_y}{\partial x} - \frac{\partial H_x}{\partial y} \right) \hat{a}_z \\ = j\omega\varepsilon_{xx}E_x\hat{a}_x + j\omega\varepsilon_{yy}E_y\hat{a}_y + j\omega\varepsilon_{zz}E_z\hat{a}_z. \end{aligned} \quad (2.20)$$

No conjunto de equações anteriores pode-se eliminar o termo de derivada de uma das componentes cartesianas, tendo em vista que a física no nosso dispositivo poder ser estudada em apenas duas dimensões. Para isso, devem ser satisfeitas as seguintes condições (16):

1. Os campos \vec{E} e \vec{B} se propagam em um plano (xy por convenção),
2. O dispositivo é isotrópico ou possui anisotropia diagonal,
3. A dimensão onde consideramos nula a derivada, exige que o sistema seja uniforme ou infinito (eixo z por convenção), como exemplificado na Figura 6.

Das relações em cada componente vetorial nas equações 2.19 e 2.20, e aplicando as considerações de simetria mencionadas anteriormente, conseguimos extrair dois conjuntos de equações que representam os modos de oscilação transversal para o campo elétrico (modos H) e magnético (modos E) (16), o que implica que o campo não possui componente

vetorial paralela ao eixo de propagação. Obtemos então, as equações dos modos H:

$$\begin{aligned} E_x &= \frac{1}{j\omega\varepsilon_{xx}} \frac{\partial H_z}{\partial y}, \\ E_y &= -\frac{1}{j\omega\varepsilon_{yy}} \frac{\partial H_z}{\partial x}, \\ \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{1}{\varepsilon_{yy}} \frac{\partial H_z}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{1}{\varepsilon_{xx}} \frac{\partial H_z}{\partial y} \right) + \omega^2 \mu_{zz} H_z &= 0, \end{aligned} \quad (2.21)$$

e do modo E:

$$\begin{aligned} H_x &= -\frac{1}{j\omega\mu_{xx}} \frac{\partial E_z}{\partial y}, \\ H_y &= \frac{1}{j\omega\mu_{yy}} \frac{\partial E_z}{\partial x}, \\ \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{1}{\mu_{yy}} \frac{\partial E_z}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{1}{\mu_{xx}} \frac{\partial E_z}{\partial y} \right) + \omega^2 \varepsilon_{zz} E_z &= 0. \end{aligned} \quad (2.22)$$

Quando conhecidas as condições de contorno, as equações 2.21 e 2.22 permitem descrever completamente a física envolvida no dispositivo em estudo. Na literatura, estes modos são conhecidos como modos transversais magnéticos (TM) e elétricos (TE). (18)

2.3 Método de diferenças finitas

2.3.1 Diferenciação numérica e condições de contorno

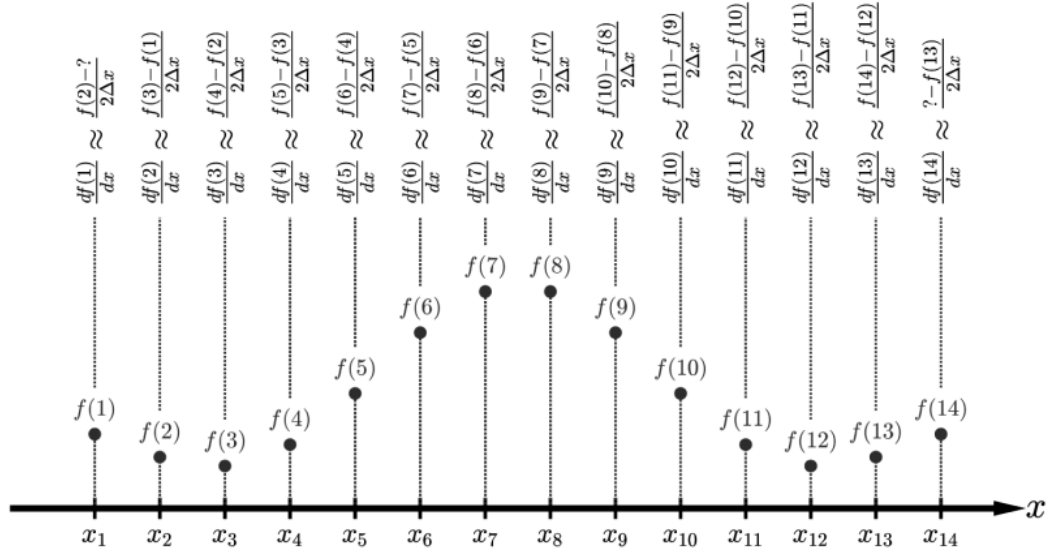


Figura 7 – Representação das aproximações discretas usadas na diferenciação numérica.
Fonte: Adaptada de RUMPF.(16)

Este método permite resolver equações diferenciais com condições de contorno conhecidas em uma região do espaço, ou no nosso caso, no domínio de frequências. O método consiste em substituir as derivadas como uma aproximação por diferenças finitas (19), além disso,

as soluções das equações diferenciais envolvidas, como por exemplo: os campos \vec{E} e \vec{H} , são armazenados em uma grade ou (**gride**) que representa o nosso **espaço de simulação** (ver Figura 6). É importante levar em conta que este método não encontra soluções analíticas, mas sim a forma analítica de uma solução que poderia existir. A ideia chave consiste em fazer uma aproximação discreta das derivadas de uma função f que pode ou não ser multi-variável. Por exemplo, para uma função uni-dimensional $f(x)$, a primeira derivada no ponto n se define como:

$$\frac{df(n)}{dx} \cong \frac{f(n+1) - f(n-1)}{2\Delta x}, \quad (2.23)$$

onde Δx é o espaçamento da gride, ou seja, a distância entre os pontos $x_{n+1} - x_n$, assim como mostrado na Figura 7. A aproximação anterior se conhece como diferença centrada. (19) Uma vantagem da aproximação das derivadas consiste na flexibilidade de introduzir **condições de contorno**, no exemplo uni-dimensional apresentado na Figura 7 é possível introduzir as condições de contorno nos extremos da gride.

$$\frac{df(n)}{dx} \approx \begin{cases} \frac{f(2) - f(N)}{2\Delta x} & n = 1, \\ \frac{f(n+1) - f(n-1)}{2\Delta x} & 2 \leq n \leq N - 1, \\ \frac{f(1) - f(N-1)}{2\Delta x} & n = N. \end{cases} \quad (2.24)$$

Na equação 2.24 se resume o cálculo da derivada para os N pontos da grid, quando nos extremos da função temos que $f(1) = f(N) = 0$, dizemos que a equação diferencial possui **condições de contorno de Dirichlet**, ou **condições de contorno periódicas** no caso em que $f(1) = f(N)$.

2.3.2 Representação matricial

Tal como será apresentado nas seguintes seções, muitos dos problemas que envolvem solução de equações diferenciais costumam utilizar estas aproximações em uma representação matricial devido á relativa facilidade de fazer operações aritméticas com matrizes, assim como a otimização de diversos *softwares* para resolver problemas numéricos baseados em matrizes. Consideremos a seguinte equação diferencial uni-variável:

$$\frac{df(x)}{dx} + c(x)f(x) = b(x), \quad (2.25)$$

a função $f(x)$ é desconhecida, portanto sua versão discreta é guardada no vetor coluna \mathbf{f} , a versão discreta da função $b(x)$ é armazenada no vetor coluna \mathbf{b} . Os dois termos $\frac{df(x)}{dx}$ e $c(x)$ são operações representadas por matrizes quadradas \mathbf{D}_x e \mathbf{C} , respetivamente. A representação matricial do operador de derivada \mathbf{D}_x incluindo condições de contorno de

Dirichlet é:

$$\mathbf{D}_x = \frac{1}{2\Delta x} \begin{bmatrix} & +1 & & & 0 \\ -1 & & +1 & & \\ & -1 & & \ddots & \\ & & & \ddots & +1 \\ 0 & & & -1 & +1 \end{bmatrix}, \quad (2.26)$$

e incluindo as condições de contorno periódicas:

$$\mathbf{D}_x = \frac{1}{2\Delta x} \begin{bmatrix} & +1 & & & -1 \\ -1 & & +1 & & \\ & -1 & & \ddots & \\ & & & \ddots & +1 \\ 1 & & & -1 & +1 \end{bmatrix}, \quad (2.27)$$

portanto, a forma matricial explícita da equação 2.25 é expressada como:

$$\frac{1}{2\Delta x} \begin{bmatrix} & +1 & & & \\ -1 & & \ddots & & \\ & & & \ddots & \\ & & & -1 & +1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} f(1) \\ f(2) \\ \vdots \\ f(N) \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} c(1) & & & & \\ & c(2) & & & \\ & & \ddots & & \\ & & & c(N) & \end{bmatrix} \begin{bmatrix} f(1) \\ f(2) \\ \vdots \\ f(N) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b(1) \\ b(2) \\ \vdots \\ b(N) \end{bmatrix}, \quad (2.28)$$

ou, na sua forma compacta:

$$\mathbf{D}_x \mathbf{f} + \mathbf{C} \mathbf{f} = \mathbf{b}, \quad (2.29)$$

cuja solução é:

$$\mathbf{f} = \mathbf{A}^{-1} \mathbf{b}, \quad \mathbf{A} = \mathbf{D}_x + \mathbf{C}. \quad (2.30)$$

2.3.3 Funções acopladas e gride deslocada

Como mencionado na Secção 2.2, o objetivo é descrever a física envolvida em um dispositivo fotônico específico, o que implica solucionar as equações diferenciais 2.19 e 2.20. Por enquanto, vamos supor que desejamos solucionar um sistema de duas equações diferenciais acopladas $f(x)$ e $g(x)$,

$$\begin{aligned} \frac{df(x)}{dx} + u(x)g(x) &= b_1(x), \\ \frac{dg(x)}{dx} + v(x)f(x) &= b_2(x), \end{aligned} \quad (2.31)$$

observe que as equações anteriores e as funções envolvidas respeitam a mesma estrutura da equação 2.25, porém, o espaçamento dos pontos da nova gride é $x_{n+1} - x_n = \Delta_x/2$. Se definirmos que as funções f, v e b_2 existem nos pontos $1, 2, 3, \dots, N$, as funções g, u e b_1 existem nos pontos $1.5, 2.5, 3.5, \dots, N + 0.5$, ou seja:

$$\begin{aligned} \frac{f(n+1) - f(n)}{\Delta x} + u\left(n + \frac{1}{2}\right) g\left(n + \frac{1}{2}\right) &= b_1\left(n + \frac{1}{2}\right), \\ \frac{g\left(n + \frac{1}{2}\right) - g\left(n - \frac{1}{2}\right)}{\Delta x} + v(n)f(n) &= b_2(n), \end{aligned} \quad (2.32)$$

levando em conta que estamos trabalhando com uma grade discreta e o fato de termos interesse em usar representações matriciais, é útil reescrever as equações anteriores em uma notação que só possua índices discretos,

$$\frac{f|_{n+1} - f|_n}{\Delta x} + u|_n g|_n = b_1|_n, \quad (2.33)$$

$$\frac{g|_{n+1} - g|_n}{\Delta x} + v|_n f|_n = b_2|_n, \quad (2.34)$$

as funções discretas $f|_n$ e $g|_n$ estão deslocadas em relação à grade, como ilustrado na Figura 8. Mesmo que $f|_n$ e $g|_n$ tenham o mesmo índice de matriz n , elas estão localizadas a uma distância de $\Delta_x/2$ uma da outra.

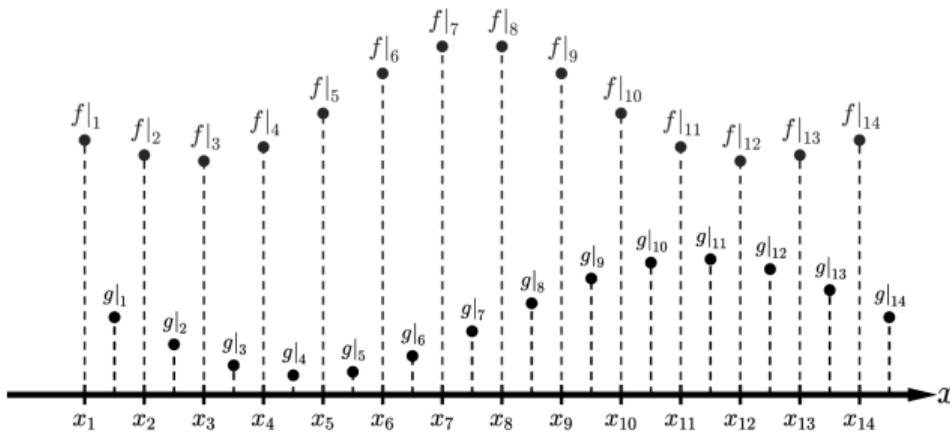


Figura 8 – Representação discreta de duas funções deslocadas na grade.

Fonte: Adaptada de RUMPF. (16)

As equações 2.33 e 2.34 também podem ser escritas em suas formas matriciais explícitas:

$$\frac{1}{\Delta x} \begin{bmatrix} -1 & +1 & & & \\ & -1 & \ddots & & \\ & & \ddots & +1 & \\ & & & -1 & \\ & & & & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} f|_1 \\ f|_2 \\ \vdots \\ f|_N \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} u|_1 & & & & \\ & u|_2 & & & \\ & & \ddots & & \\ & & & u|_N & \end{bmatrix} \begin{bmatrix} g|_1 \\ g|_2 \\ \vdots \\ g|_N \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_1|_1 \\ b_1|_2 \\ \vdots \\ b_1|_N \end{bmatrix}, \quad (2.35)$$

$$\frac{1}{\Delta x} \begin{bmatrix} +1 & & & & \\ -1 & +1 & & & \\ & \ddots & \ddots & & \\ & & & -1 & +1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} g|_1 \\ g|_2 \\ \vdots \\ g|_N \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} v|_1 & & & & \\ & v|_2 & & & \\ & & \ddots & & \\ & & & v|_N & \end{bmatrix} \begin{bmatrix} f|_1 \\ f|_2 \\ \vdots \\ f|_N \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_2|_1 \\ b_2|_2 \\ \vdots \\ b_2|_N \end{bmatrix}, \quad (2.36)$$

ou,

$$\mathbf{D}_x^f \mathbf{f} + \mathbf{U} \mathbf{g} = \mathbf{b}_1, \quad (2.37)$$

$$\mathbf{D}_x^g \mathbf{g} + \mathbf{V} \mathbf{f} = \mathbf{b}_2, \quad (2.38)$$

os super índices f e g indicam os operadores de derivada que pertencem a cada função. Das equações anteriores é possível observar a relação $\mathbf{D}_x^g = -(\mathbf{D}_x^f)^H$, e construir o sistema de equações:

$$\begin{bmatrix} \mathbf{D}_x^f & \mathbf{U} \\ \mathbf{V} & \mathbf{D}_x^g \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{f} \\ \mathbf{g} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{b}_1 \\ \mathbf{b}_2 \end{bmatrix}, \quad (2.39)$$

cujas soluções são:

$$\mathbf{g} = \mathbf{U}^{-1} (\mathbf{b}_1 - \mathbf{D}_x^f \mathbf{f}), \quad (2.40)$$

$$\mathbf{f} = \mathbf{A}^{-1} \mathbf{b}, \quad (2.41)$$

sendo:

$$\mathbf{A} = \mathbf{V} - \mathbf{D}_x^g \mathbf{U}^{-1} \mathbf{D}_x^f, \quad (2.42)$$

e,

$$\mathbf{b} = \mathbf{b}_2 - \mathbf{D}_x^g \mathbf{U}^{-1} \mathbf{b}_1. \quad (2.43)$$

Nas próximas secções será apresentado de forma explícita o poder desta representação para introduzir condições de contorno, propriedades geométricas e camadas condutoras artificiais para simular um meio absorvente (ver Figura 6), isto é necessário para estabelecer um limite do espaço aberto no qual as ondas eletromagnéticas se propagam para fora.(20)

2.4 Aproximação discreta das Equações de Maxwell

2.4.1 Esquema de Yee

Desenvolvido pelo físico chinês Kane Yee, este algoritmo usa a aproximação por diferenças finitas para resolver equações diferenciais parciais (EDPs) em problemas de eletromagnetismo.(21) Como mostrado na Figura 9, o esquema de Yee é baseado em uma grade de células cúbicas tridimensionais onde são embutidas as componentes vetoriais dos campos \mathbf{E} e \mathbf{H} . Isto soluciona a dificuldade de alguns dispositivos (composto de distintos materiais) serem construídos na grade,(22) pois as interfaces de materiais que atravessam o meio das células de Yee colocarão algumas componentes dos campos (\vec{E} ou \vec{H}) dentro de um meio e outras componentes dos campos (\vec{E} ou \vec{H}) em outro.

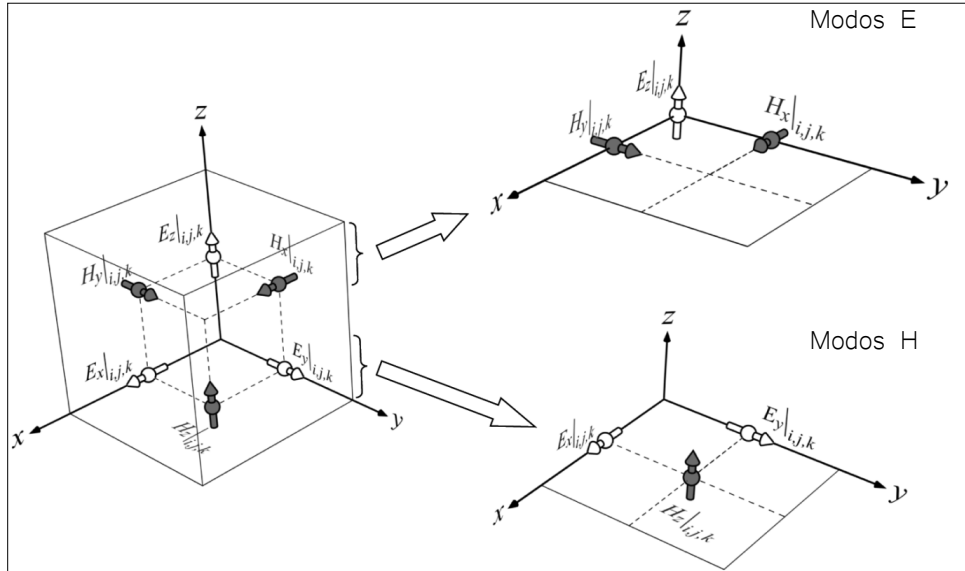


Figura 9 – Construção bidimensional dos modos E e H a partir da célula tridimensional de Yee.

Fonte: Adaptada de RUMPF. (16)

Este esquema permite preparar as Equações de Maxwell para explorar o potencial das aproximações em diferenças finitas, porém, existe um custo computacional devido à relação:

$$\frac{|\vec{E}|}{|\vec{H}|} \cong \frac{377}{\eta}, \quad (2.44)$$

com η_0 sendo a impedância do vácuo. A razão apresentada na equação 2.44 é demonstrada em (16). Para evitar este problema, se usa a seguinte normalização para o campo magnético:

$$\vec{H} = -j\sqrt{\frac{\mu_0}{\varepsilon_0}}\vec{H}, \quad (2.45)$$

sendo o número de onda do vácuo $k_0 = \omega\sqrt{\mu_0\varepsilon_0}$ e a impedância do meio $\eta = \sqrt{\mu/\varepsilon}$. O sinal negativo na equação 2.45 é usado por convenção, e apenas define o sentido de giro do vetor de fase. A partir da normalização anterior, obtemos as equações modificadas:

$$\begin{aligned} \nabla \times \vec{E} &= k_0\mu_r\vec{H}, \\ \nabla \times \vec{H} &= k_0\varepsilon_r\vec{E}, \end{aligned} \quad (2.46)$$

usando as relações de cada componente vetorial e usando a mudança de variáveis $x' = k_0x$,

$y' = k_0 y$ e $z' = k_0 z$, obtemos:

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial E_z}{\partial y'} - \frac{\partial E_y}{\partial z'} &= \mu_{xx} \tilde{H}_x, \\
 \frac{\partial E_x}{\partial z'} - \frac{\partial E_z}{\partial x'} &= \mu_{yy} \tilde{H}_y, \\
 \frac{\partial E_y}{\partial x'} - \frac{\partial E_x}{\partial y'} &= \mu_{zz} \tilde{H}_z, \\
 \frac{\partial \tilde{H}_z}{\partial y'} - \frac{\partial \tilde{H}_y}{\partial z'} &= \varepsilon_{xx} E_x, \\
 \frac{\partial \tilde{H}_x}{\partial z'} - \frac{\partial \tilde{H}_z}{\partial x'} &= \varepsilon_{yy} E_y, \\
 \frac{\partial \tilde{H}_y}{\partial x'} - \frac{\partial \tilde{H}_x}{\partial y'} &= \varepsilon_{zz} E_z.
 \end{aligned} \tag{2.47}$$

Como explanado na Secção 2.2, é possível reduzir alguns problemas tridimensionais para duas dimensões quando: o dispositivo é uniforme ao longo de um eixo de simetria (eixo z por convenção), a propagação das ondas é restrita ao plano xy e os materiais são isotrópicos ou diagonalmente anisotrópicos, isto permite anularmos os termos $\frac{\partial}{\partial z'}$ no conjunto de equações 2.47. Na Figura 10 é exemplificada a geometria bidimensional das componentes

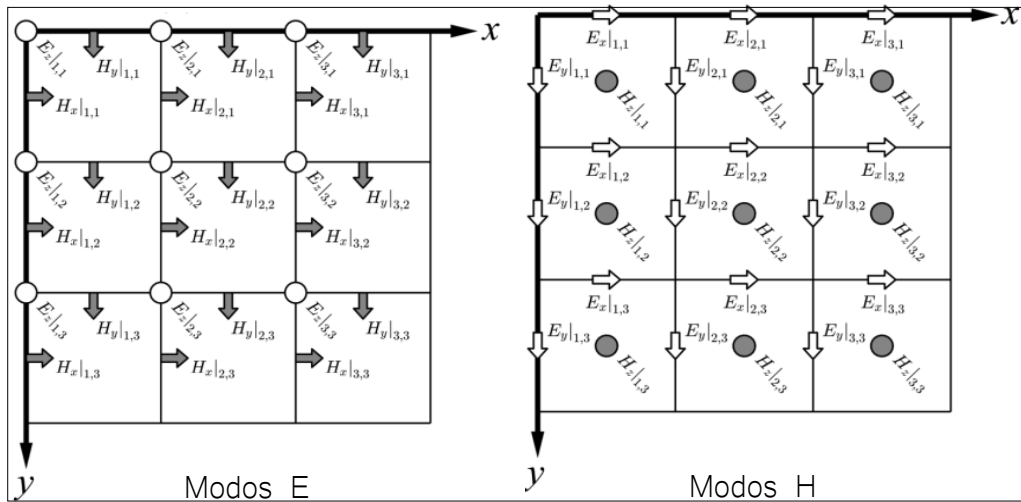


Figura 10 – Representação dos modos E e H em uma grade de Yee 3x3.

Fonte: Adaptada de RUMPF. (16)

vetoriais dos modos \vec{E} e \vec{H} na grade de Yee. Levando em conta as considerações anteriores e usando as aproximações discretas 2.33 e 2.34 no conjunto de equações 2.47, conseguimos

obter as equações em diferenças finitas para os modos E:

$$\begin{aligned}
\frac{E_z|_{i,j+1} - E_z|_{i,j}}{\Delta y'} &= \mu_{xx}|_{i,j} \tilde{H}_x|_{i,j}, \\
-\frac{E_z|_{i+1,j} - E_z|_{i,j}}{\Delta x'} &= \mu_{yy}|_{i,j} \tilde{H}_y|_{i,j}, \\
\frac{\tilde{H}_y|_{i,j} - \tilde{H}_y|_{i-1,j}}{\Delta x'} - \frac{\tilde{H}_x|_{i,j} - \tilde{H}_x|_{i,j-1}}{\Delta y'} &= \varepsilon_{zz}|_{i,j} E_z|_{i,j},
\end{aligned} \tag{2.48}$$

ou, na representação matricial:

$$\begin{aligned}
\mathbf{D}_{y'}^e \mathbf{e}_z &= \mu_{xx} \tilde{\mathbf{h}}_x, \\
-\mathbf{D}_{x'}^e \mathbf{e}_z &= \mu_{yy} \tilde{\mathbf{h}}_y, \\
\mathbf{D}_{x'}^h \tilde{\mathbf{h}}_y - \mathbf{D}_{y'}^h \tilde{\mathbf{h}}_x &= \varepsilon_{zz} \mathbf{e}_z.
\end{aligned} \tag{2.49}$$

Analogamente, as diferenças finitas para os modos H:

$$\begin{aligned}
\frac{\tilde{H}_z|_{i,j} - \tilde{H}_z|_{i,j-1}}{\Delta y'} &= \varepsilon_{xx}|_{i,j} E_x|_{i,j}, \\
-\frac{\tilde{H}_z|_{i,j} - \tilde{H}_z|_{i-1,j}}{\Delta x'} &= \varepsilon_{yy}|_{i,j} E_y|_{i,j}, \\
\frac{E_y|_{i+1,j} - E_y|_{i,j}}{\Delta x'} - \frac{E_x|_{i,j+1} - E_x|_{i,j}}{\Delta y'} &= \mu_{zz}|_{i,j} \tilde{H}_z|_{i,j},
\end{aligned} \tag{2.50}$$

ou, na representação matricial:

$$\begin{aligned}
\mathbf{D}_y^h \tilde{\mathbf{h}}_z &= \varepsilon_{xx} \mathbf{e}_x, \\
-\mathbf{D}_{x'}^h \tilde{\mathbf{h}}_z &= \varepsilon_{yy} \mathbf{e}_y, \\
\mathbf{D}_x^e \mathbf{e}_y - \mathbf{D}_y^e \mathbf{e}_x &= \mu_{zz} \tilde{\mathbf{h}}_z.
\end{aligned} \tag{2.51}$$

Assim como na Secção 2.3, é mantida a notação para os operadores de derivada $\mathbf{D}_{x,y,z}^{h,e}$, onde os super índices h,e indicam que as derivadas correspondem aos campos \vec{H} e \vec{E} , sendo $\tilde{\mathbf{h}}_{x,y,z}$ e $\mathbf{e}_{x,y,z}$ as respectivas matrizes de componentes vectoriais.

2.4.2 Técnica de duplicação 2x e as camadas PML

Embora a grade de Yee tenha várias vantagens numéricas,(23) ela torna mais desafiador construir dispositivos que possuem interfaces de materiais que pertencem a uma mesma célula da grade, ou seja, as componentes vectoriais dos campos elétrico e magnético não podem ser colocados em um mesmo nó da célula Yee tradicional.(20) Como alternativa para esta problema, é necessário posicionar os componentes elétricos e magnéticos no mesmo nó.(24,25) Para isso, duas grades transversais de Yee são sobrepostas, permitindo que os mesmos componentes dos campos elétrico e magnético coexistam nos mesmos

locais, inclusive quando o dispositivo possui características curvas. Este procedimento é chamado de técnica de duplicação 2x.(26) A Figura 11a ilustra as mesmas grades que a Figura 10, porém sobrepostas com uma segunda grade desenhada com linhas tracejadas. A segunda grade tem o mesmo tamanho físico da grade Yee original,(16) mas possui o dobro de células com metade do tamanho da grade Yee original . Essa segunda grade, que possui o dobro de células, é chamada de grade 2x, onde as componentes do campos \vec{E} e \vec{H} da grade Yee se sobrepõem perfeitamente às células únicas na grade 2x. O procedimento para extrair os tensores URxx, URyy e URzz (Figura 11b) e os tensores ERxx, ERyy e ERzz (Figura 11c) precisam de uma notação técnica de linguagem de programação, como é explicado em (16).

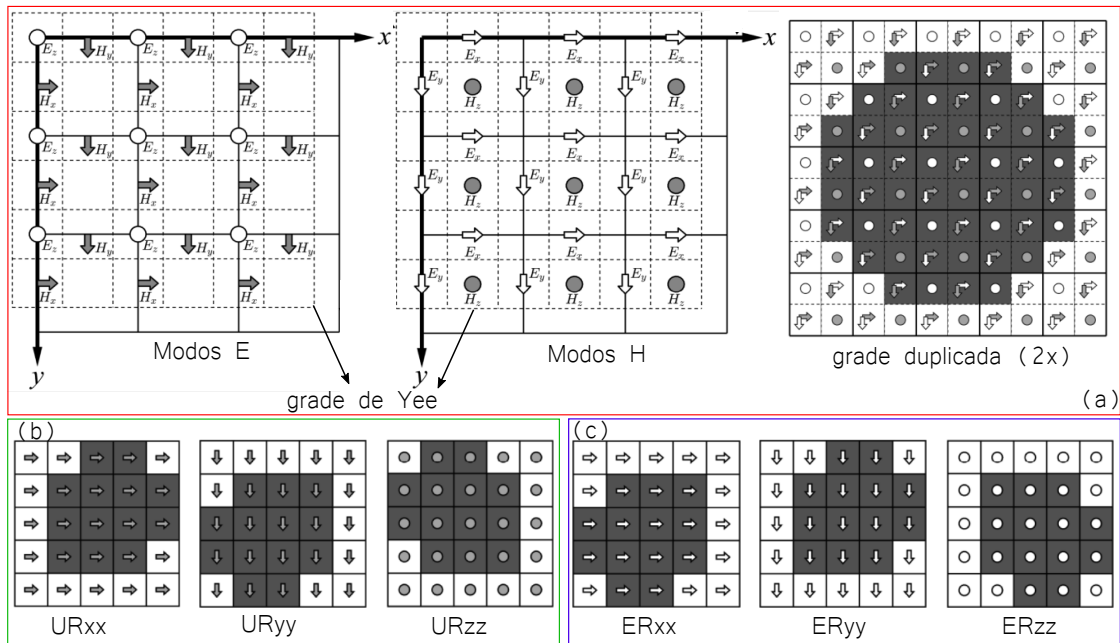


Figura 11 – Representação da técnica de duplicação: (a) modos E e H na grade de Yee 1x embutidos na grade duplicada 2x, (b) tensor de permissividade relativa dos eixos x, y, z e (c) tensor de permeabilidade relativa dos eixos x, y, z extraídas da grade 2x.

Fonte: Adaptada de RUMPF. (16)

Como mencionado na Secção 2.2, é necessário introduzir uma permissividade complexa para modelar as perdas de energia no sistema físico. Isto é feito através das camadas absorventes perfeitamente ajustadas ou PMLs (do inglês Perfectly Matched Layers) (27) embutidas nas Equações de Maxwell, estas camadas são ilustradas na Figura 12 e absorvem as ondas que se propagam para fora em todas as direções.(28) Supondo um material com anisotropia uniaxial na equação 2.16, define-se o tensor que descreve a camada uni-

axial UPML para ondas se propagando nos eixos x, y, z (16, 28):

$$[S] = \begin{bmatrix} \frac{1}{s_x} & 0 & 0 \\ 0 & s_x & 0 \\ 0 & 0 & s_x \end{bmatrix} \begin{bmatrix} s_y & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{s_y} & 0 \\ 0 & 0 & s_y \end{bmatrix} \begin{bmatrix} s_z & 0 & 0 \\ 0 & s_z & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{s_z} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{s_y s_z}{s_x} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{s_x s_z}{s_y} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{s_x s_y}{s_z} \end{bmatrix}, \quad (2.52)$$

sendo s_x, s_y e s_z constantes. A derivação da equação 2.52 é demonstrada em (16). Introduzindo a camada $[S]$ nas equações 2.17 e 2.18 e supondo a que os campos se propagam no plano xy ($s_z = 1$), temos que:

$$\begin{aligned} \nabla \times \vec{E} &= -j\omega [\mu'] \vec{H}, \\ \nabla \times \vec{H} &= j\omega [\varepsilon'] \vec{E}, \end{aligned} \quad (2.53)$$

sendo:

$$[\mu'] = [S][\mu] = \begin{bmatrix} \frac{s_y}{s_x} \mu_{xx} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{s_x}{s_y} \mu_{yy} & 0 \\ 0 & 0 & s_x s_y \mu_{zz} \end{bmatrix}, \quad (2.54)$$

$$[\varepsilon'] = [S][\varepsilon] = \begin{bmatrix} \frac{s_y}{s_x} \varepsilon_{xx} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{s_x}{s_y} \varepsilon_{yy} & 0 \\ 0 & 0 & s_x s_y \varepsilon_{zz} \end{bmatrix}. \quad (2.55)$$

As quantidades s_x e s_y são definidas como (16, 27):

$$s_n(n) = a_n(n) [1 - j60\sigma_n(n)], \quad n = x, y, \quad (2.56)$$

$$\sigma_n(n) = \sigma_{\max} \sin^2 \left(\frac{\pi n}{2L_n} \right), \quad n = x, y, \quad (2.57)$$

$$a_n(n) = 1 + (a_{\max} - 1) \left(\frac{n}{L_n} \right)^p, \quad n = x, y. \quad (2.58)$$

Os parâmetros σ_{\max} , a_{\max} e P são definidos durante a simulação, alguns valores são apresentados em (16), L_x e L_y são as dimensões físicas da camada $[S]$. Por fim, o processo de simulação acaba com a implementação das fontes utilizando o método de campo total/campo espalhado.

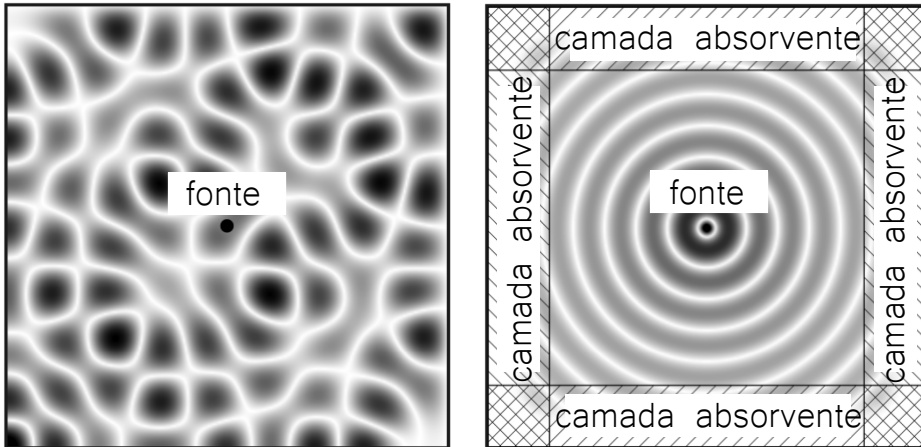


Figura 12 – Carga pontual sem (esquerda) e com (direita) camada absorvente.
Fonte: Adaptada de RUMPF. (16)

2.4.3 Técnica TF/SF

As equações 2.49 e 2.51 têm o formato $\mathbf{A}\mathbf{f} = \mathbf{b}$, a matriz \mathbf{A} impõe as equações de Maxwell e x os campos a serem calculados.(29) Porém, ainda é necessário embutir as fontes \mathbf{b} . Para construir o sistema $\mathbf{A}\mathbf{f} = \mathbf{b}$, introduz-se o método de *campo total/campo espalhado* ou TS/TF (do inglês, total field/scattered field) (21). Este método propõe construir o vetor de fontes através da equação:

$$\mathbf{b} = (\mathbf{Q}\mathbf{A} - \mathbf{A}\mathbf{Q})\mathbf{f}_{\text{src}}, \quad (2.59)$$

sendo \mathbf{Q} a matriz de máscara, a qual é programada manualmente dentro do espaço computacional (ver Figura 13c), a ideia é que os elementos nulos ou zeros (pixels pretos) na matriz de máscara representam o campo total (TF) enquanto os elementos unitários (ou uns, pixels brancos) indicam o campo espalhado (SF). A matriz \mathbf{f}_{src} a representa a fonte física definida no início da simulação.(21) A derivação desta técnica é apresentada em (16).

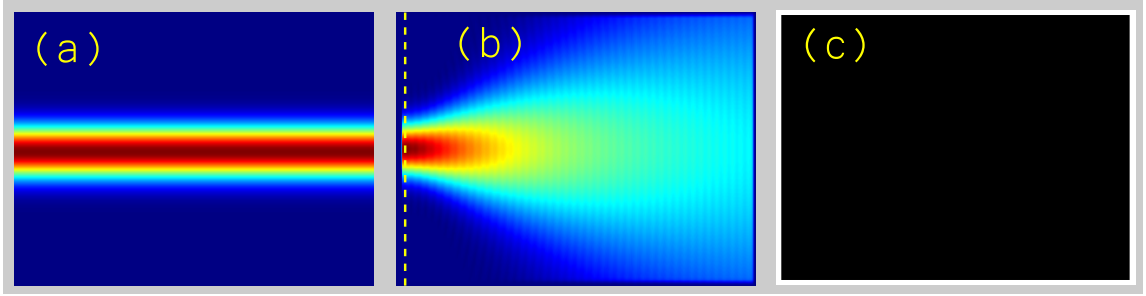


Figura 13 – (a) Campo total e (b) campo espalhado. A linha tracejada indica a interface entre o campo total e o campo espalhado (interface TF/SF), (c) matriz de máscara.

Fonte: Elaborada pelo autor

A Figura 13a mostra o campo total \mathbf{f}_{src} sem incluir a matriz de máscara, enquanto a Figura 13b se mostra uma possível configuração da matriz de máscara (linha amarela) e o campo espalhado. Observa-se que a matriz \mathbf{A} para os modos E na equação 2.49, agora chamada de \mathbf{A}_e , é dada pela expressão:

$$\mathbf{A}_e = \mathbf{D}_{x'}^h \boldsymbol{\mu}_{yy}^{-1} \mathbf{D}_{x'}^e + \mathbf{D}_{y'}^h \boldsymbol{\mu}_{xx}^{-1} \mathbf{D}_{y'}^e + \boldsymbol{\varepsilon}_{zz}, \quad (2.60)$$

analogamente para os modos H na equação 2.51:

$$\mathbf{A}_h = \mathbf{D}_{x'}^e \boldsymbol{\varepsilon}_{yy}^{-1} \mathbf{D}_{x'}^h + \mathbf{D}_{y'}^e \boldsymbol{\varepsilon}_{xx}^{-1} \mathbf{D}_{y'}^h + \boldsymbol{\mu}_{zz}. \quad (2.61)$$

Por fim, seguindo o formato da equação 2.59 consegue-se construir as equações que descrevem toda a física por trás do desenho do dispositivo fotônico:

$$\mathbf{A}_h \tilde{\mathbf{h}}_z = \mathbf{b}_h, \quad \mathbf{b}_h = (\mathbf{Q}\mathbf{A}_h - \mathbf{A}_h\mathbf{Q}) \mathbf{f}_{\text{src}}, \quad (2.62)$$

$$\mathbf{A}_e \tilde{\mathbf{e}}_z = \mathbf{b}_e, \quad \mathbf{b}_e = (\mathbf{Q}\mathbf{A}_e - \mathbf{A}_e\mathbf{Q}) \mathbf{f}_{\text{src}}. \quad (2.63)$$

2.5 Gradiente descendente

O Gradiente Descendente é um dos algoritmos mais populares para realizar otimização e, de longe, o método mais comum para otimizar redes neurais.(30) Otimização refere-se à tarefa de minimizar ou maximizar alguma função $f(\mathbf{x})$ chamada de *função objetivo*,(31) onde o vetor $\mathbf{x} = [x_1, x_2, \dots, x_n]$ representa os parâmetros a serem encontrados e que satisfaçam a condição de otimização. O sub-índice n indica o número de parâmetros, ou seja, a dimensão do espaço de parâmetros (2).

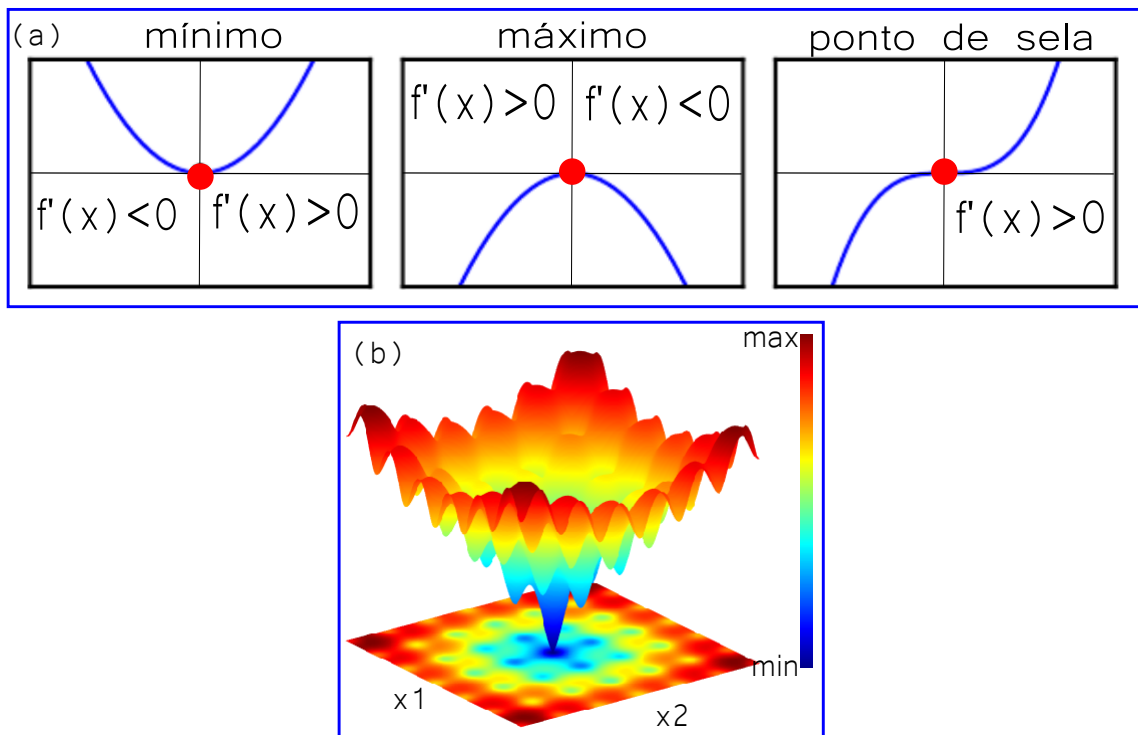


Figura 14 – (a) Representação dos pontos (círculo vermelho) mínimos, máximos e de sela para uma função uni-variável. (b) Mínimos e máximos da Função de Ackley 2D.

Fonte: Elaborada pelo autor

Como explicado na Secção 2.3, pode-se definir a derivada de uma função $f(\mathbf{x})$ como sendo:

$$f(\mathbf{x} + \alpha) \approx f(\mathbf{x}) + \alpha f'(\mathbf{x}), \quad (2.64)$$

onde α pode ser o espaçamento da gride, tamanho do *passo* ou taxa de aprendizado no contexto das redes neurais.(32) A derivada é, portanto, útil para minimizar uma função, pois nos diz como alterar \mathbf{x} para obter uma pequena melhoria em $f(\mathbf{x})$ quando se está realizando a minimização; também podemos chamá-la de *função de custo*.(31) Assim, diminui-se $f(\mathbf{x})$ variando \mathbf{x} em pequenos passos com o sinal oposto da derivada (ver Figura 14a). Como exemplificado na Figura 14a, para uma função dimensional (1D) no espaço de parâmetros, $f'(x) = 0$ fornece informação sobre a direção do gradiente. Além

disso, estes pontos são conhecidos como *pontos críticos*, um *mínimo local* (ou *máximo local*) é um ponto onde $f(x)$ é menor (ou maior) em relação a qualquer outro ponto na vizinhança. Por outro lado, um *ponto de sela* não possui nenhuma das características dos dois casos anteriores. (31) Da mesma forma, dizemos que existe um *máximo ou mínimo global* quando $f(x)$ possui o maior (ou menor) valor no seu domínio, sendo possível a existência de vários mínimos ou máximos globais, ou também, vários mínimos ou máximos locais que não otimizam $f(\mathbf{x})$. Estes mínimos costumam existir em funções não convexas (33), como, por exemplo, a Função de Ackley que possui um único mínimo global e infinitos mínimos locais (ver Figura 14b). Em (34) se apresentam outras técnicas baseadas em gradiente descendente que permitem trabalhar com funções não convexas.

Baseado nos argumentos anteriores, para atualizar os parâmetros \mathbf{x} , define-se o algoritmo de gradiente descendente (32, 33):

$$\mathbf{x}' \leftarrow \mathbf{x} - \alpha \nabla_{\mathbf{x}} f(\mathbf{x}). \quad (2.65)$$

A expressão 2.65 se encontra na forma vetorizada, e indica uma atribuição de parâmetros iterativa, ou seja, para cada iteração, \mathbf{x}' se transforma em \mathbf{x} , sendo $\nabla_{\mathbf{x}} f(\mathbf{x}) = [\frac{\partial}{\partial x_1} f(\mathbf{x}), \frac{\partial}{\partial x_2} f(\mathbf{x}), \dots, \frac{\partial}{\partial x_n} f(\mathbf{x})]$ o vetor das derivadas parciais de f a respeito do parâmetro x_n .

2.6 Desenho inteligente

Também conhecido como *inverse design* ou *problema inverso*, esta metodologia é baseada no método de gradiente descendente e tem sido comprovado como uma ferramenta poderosa para o projeto (*design*) de dispositivos nano-fotônicos lineares arbitrários, tais como divisores de potência (35), grades (36) e demultiplexadores (DEMUX) de comprimento de onda.(37, 38) A metodologia de desenho inteligente permite otimizar estruturas sob especificação (2), como será explicado na Seção 3.1.

Assim como explicado na Seção 2.5, os problemas de desenho inverso podem ser formulados como um problema de otimização:

$$\begin{aligned} & \min_p f(E(\varepsilon(p))), \\ & \text{sujeito a } p \in S_{fab} \end{aligned}, \quad (2.66)$$

sendo f (ou f_{obj}) a função objetivo que contém a informação necessária para descrever o objetivo de otimização: propriedades físicas, geometria do dispositivo, funcionalidades, etc. Na literatura, é comum minimizar a função objetivo em termos do campo elétrico E que depende da permitividade ε e um vetor de parametrização p . Como explicado na introdução deste projeto, o nosso interesse é estudar um demultiplexador binário de dois

comprimentos de onda. Assim, o problema 2.66 torna-se:

$$\begin{aligned} & \min_p f(E(\varepsilon_1(p))) + f(E(\varepsilon_2(p))), \\ & \text{sujeito a } p \in S_{fab} \end{aligned} \quad (2.67)$$

sendo ε_1 e ε_2 as permitividades dos materiais, e S_{fab} o conjunto de possíveis dispositivos fabricáveis. Lembrando que E é a função escalar associada à matriz $\mathbf{A}_e \tilde{\mathbf{e}}_z$ na equação 2.63. A função objetivo a trabalhar é a transmitância, ou seja, para maximizá-la, devemos minimizar o negativo dela:

$$f(p) = -|c^\dagger E(p)|^2, \quad (2.68)$$

onde $c^\dagger E(p)$ é a integral de sobreposição modal ou (em inglês, *modal overlap integral*) (37, 39). A função objetivo que descreve completamente o nosso demultiplexador de dois comprimentos de onda, é definida como (39):

$$f_{obj} = \left(|c^\dagger E_1|^2 - 1\right)_1^2 + \left(|c^\dagger E_2|^2\right)_2^2 + \left(|c^\dagger E_1|^2\right)_1^2 + \left(|c^\dagger E_2|^2 - 1\right)_2^2, \quad (2.69)$$

onde os sub-índices especificam uma saída no demultiplexador, ou seja: um campo E com comprimento de onda λ_1 que é propagado no dispositivo, espera-se que saia no guia de onda que é referenciado como saída 1, valendo a mesma lógica para o segundo campo E_2 . Note que a equação 2.69 é sempre positiva e segue uma distribuição $\chi^{(2)}$ com desvio padrão unitário. Devido ao fato dos campos estarem normalizados, o limiar de transmitância foi limitado à unidade. Note-se que a equação 2.69 garante a demultiplexação dos campos.

Seguindo o raciocínio do gradiente descendente, a permitividade representa os parâmetros de otimização:

$$\epsilon_i = \epsilon_{0,i} + S_i \theta_i(p), \quad (2.70)$$

sendo i o número de iterações, S a matriz de seleção (mais informações em (2)) e $\theta_i(p)$ a matriz de otimização. O objetivo é calcular a derivada:

$$\frac{df_{obj}}{dp} = \frac{\partial f_{obj}}{\partial p} + \sum_i \left(\frac{\partial f_{obj}}{\partial E_i} \frac{dE_i}{dp} + \frac{\partial f_{obj}}{\partial E_i^*} \frac{dE_i^*}{dp} + \frac{\partial f_{obj}}{\partial \epsilon_i} \frac{d\epsilon_i}{dp} + \frac{\partial f_{obj}}{\partial \epsilon_i^*} \frac{d\epsilon_i^*}{dp} \right), \quad (2.71)$$

sendo $*$ o complexo conjugado. Usando as derivadas de Wirtinger para uma função complexa $f(z)$ com $z = x + iy$ (2), chegamos em:

$$\frac{df_{obj}}{dp} = \frac{\partial f_{obj}}{\partial p} + 2 \operatorname{Re} \left[\sum_i \left(\frac{\partial f_{obj}}{\partial E_i} \frac{dE_i}{dp} + \frac{\partial f_{obj}}{\partial \epsilon_i} \frac{d\epsilon_i}{dp} \right) \right], \quad (2.72)$$

sendo:

$$\begin{aligned} \frac{d\epsilon_i}{dp} &= \frac{d\epsilon_i}{d\theta_i} \frac{d\theta_i}{dp}, \\ &= S_i \frac{d\theta_i}{dp}. \end{aligned} \quad (2.73)$$

Estes termos possuem uma dificuldade computacional robusta e de difícil implementação; explicar todas as passagens matemáticas e a sua programação não fazem parte dos objetivos do projeto e podem ser consultadas em (2).

3 MÉTODOS

3.1 SPINS-B

Para implementar a otimização da nossa estrutura, foi utilizado o **SPINS-B**, um código desenvolvido em Python e liberado pela Profa. Jelena Vukovic (2) com o objetivo de implementar um marco de trabalho ou **framework** que permite formular o problema de otimização de diversas estruturas fotônicas.(40,41) Para otimizar o nosso dispositivo, é possível dividir o procedimento em 4 passos:

1. criar a geometria: projetar a camada frontal (**foreground**) e posterior (**background**), assim como posicionar as fontes e monitores.
2. escolher resolução da gride, e fixar os valores de ε_1 e ε_2 ,
3. fixar o número de otimizações contínuas e discretas.

Passo 1: geometria

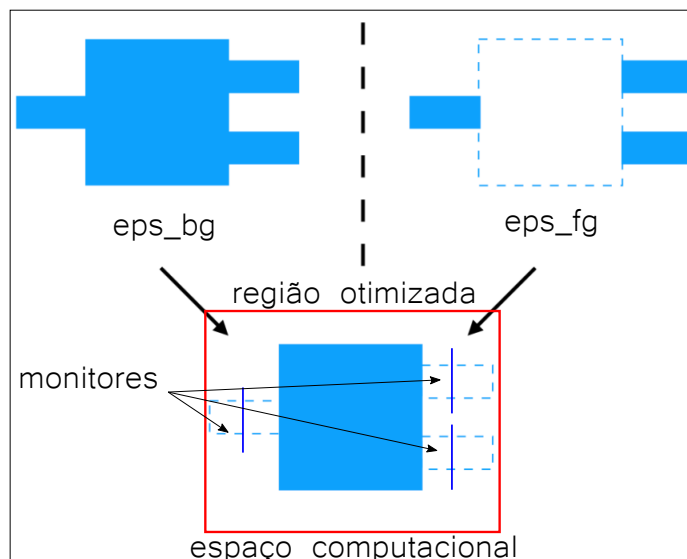


Figura 15 – Criação da área de desenho usando a operação lógica AND feita a partir dos arquivos eps_bg (**background**) e eps_fg (**foreground**). Monitores (azul) e região otimizada (vermelho).

Fonte: Adaptada de SU *et al.*. (2)

Como ilustrado na Figura 15, é construído um arquivo que contém a camada frontal e outro para a camada posterior. O **SPINS-B** carrega estes arquivos e cria a área que será otimizada. Dentro do arquivo também é especificado o tamanho do espaço computacional, assim como o tamanho das regiões de absorção ou PMLs. Os monitores calculam a integral

enunciada na equação 2.68, e que pertence ao espaço computacional criado pelas linhas de código descritas na Figura 16. Os modos que estão sendo analisados são os campos na saída do demultiplexador, em relação á fonte de campo.

```

if SIM_2D:
    # If the simulation is 2D, then we just take a slice through the
    # device layer at z = 0. We apply periodic boundary conditions along
    # the z-axis by setting PML thicknes to zero.
    sim_region = optplan.Box3d(
        center=[0, 0, 0], extents=[5000, 5000, GRID_SPACING])
    pml_thickness = [10, 10, 10, 10, 0, 0]
else:
    sim_region = optplan.Box3d(center=[0, 0, 0], extents=[5000, 5000, 2000])
    pml_thickness = [10, 10, 10, 10, 10, 10]

```

Figura 16 – Linhas de código para criar o espaço computacional 2D (SIM_2D) ou 3D (usando o a linha que contém o *else*).

Fonte: Adaptada de SU *et al.*. (2)

O posicionamento das fontes e dos monitores são determinados pelas funções **wg_source**, **overlap_1300** e **overlap_1500**, respectivamente (ver Figura 17). A função **center** representam a coordenada cartesiana x, y, z do centro da fonte (ou monitor), enquanto **extents** representa o tamanho da dita função. Os nomes dos monitores foram escolhidos de acordo com os comprimento de onda usados neste trabalho (1300 nm e 1550 nm), porém, é possível modificar estes valores.

```

# Create modal overlaps at the two output waveguides.
overlap_1550 = optplan.WaveguideModeOverlap(
    center=[1730, -500, 0],
    extents=[GRID_SPACING, 1500, 600],
    mode_num=0,
    normal=[1, 0, 0],
    power=1.0,
)
overlap_1300 = optplan.WaveguideModeOverlap(
    center=[1730, 500, 0],
    extents=[GRID_SPACING, 1500, 600],
    mode_num=0,
    normal=[1, 0, 0],
    power=1.0,
)

wg_source = optplan.WaveguideModeSource(
    center=[-1770, 0, 0],
    extents=[GRID_SPACING, 1500, 600],
    normal=[1, 0, 0],
    mode_num=0,
    power=1.0,
)

```

Figura 17 – Linhas de código para posicionar as fontes e os monitores.

Fonte: Adaptada de SU *et al.*. (2)

Passo 2: resolução computacional da grade e materiais usados

Nesta fase é importante fixar a resolução computacional da grid, a qual é diferente da resolução de fabricação. Este valor deve ser o suficientemente pequeno como para resolver as Equações de Maxwell nas regiões do dispositivo onde as dimensões podem ser muito pequenas. Esse parâmetro é conhecido na literatura como *minimum feature size* (38), ou traduzido: **dimensão mínima característica** ou **dimensão mínima (resolução de fabricação)**, ver Figura 18b. Este valor é especificado pela variável **GRID_SPACING**, sendo recomendado um valor dez vezes menor do que o comprimento de onda usado na simulação ($\lambda/10$) (38). As permitividades relativas são expressas em termos dos índices de refração $\varepsilon \sim n^2$ (16), sendo indicada pela variável **SIM_2D_INDEX** (caso a simulação seja 2D), **SIM_3D_INDEX** (caso a simulação seja 3D) e **mat_oxide** (ver Figura 18a). A variável **SIM_2D** determina se a simulação é 2D o 3D.

```
# Yee cell grid spacing in nanometers. (a)
GRID_SPACING = 40
# If `True`, perform the simulation in 2D. Else in 3D.
SIM_2D = True
# Silicon refractive index to use for 2D simulations. This should be the
# effective index value.
SI_2D_INDEX = 2.20
# Silicon refractive index to use for 3D simulations.
SI_3D_INDEX = 3.45
```

```
mat_oxide = optplan.Material(index=optplan.ComplexNumber(real=1.5))
if SIM_2D:
    device_index = SI_2D_INDEX
else:
    device_index = SI_3D_INDEX
```

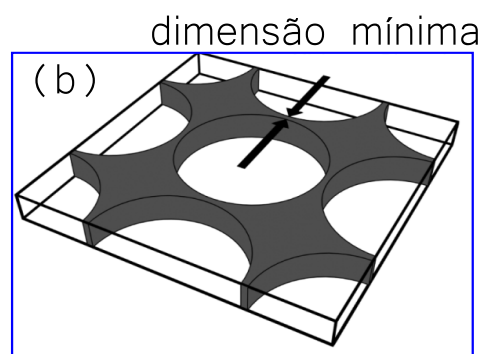


Figura 18 – (a) Seleção dos índices de refração presentes no dispositivo, e atribuição da resolução computacional. (b) Dimensão mínima dentro de uma estrutura. Fonte: Adaptada de SU *et al.* (2); RUMPF. (16)

Passo 3: Otimização contínua e discreta

Esta fase consiste de 3 estágios: primeiramente, a estrutura inicial gerada aleatoriamente com distribuição contínua de permissividade é otimizada (otimização contínua). Em se-

gundo lugar, a estrutura contínua resultante é convertida em uma discreta (discretização). Finalmente, no terceiro estágio, a estrutura discreta é otimizada baseada nas restrições de fabricação, as quais são aplicadas nesse momento (otimização discreta). Essas três etapas são ilustradas na Figura 19.

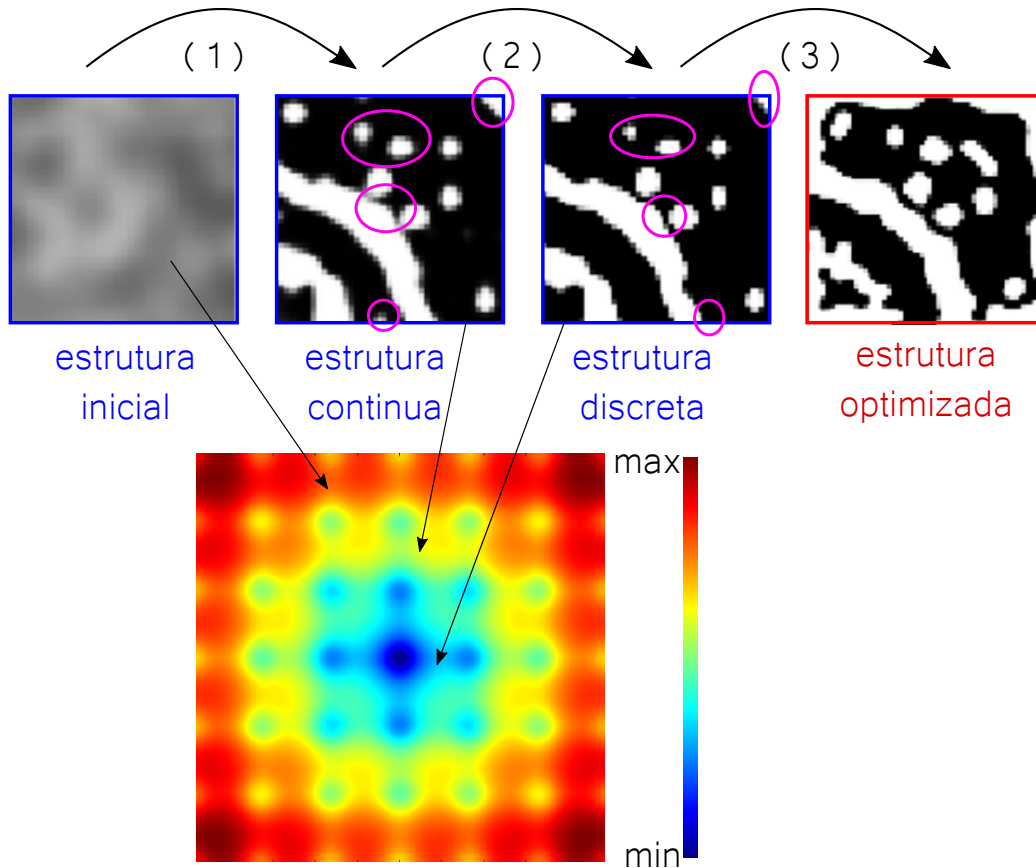


Figura 19 – Processo de otimização da área de desenho em um dispositivo fotônico usando o SPINS-B, os círculos roxos mostras as diferenças entre a estrutura contínua e discreta.

Fonte: Elaborada pelo autor

Como explicado na Secção 2.5, o número de dimensões da função objetivo depende da quantidade de parâmetros a serem otimizados, foi mostrado na Introdução deste trabalho que as possíveis combinações de pixels em um material binário cresce como 2^m , sendo m o número de pixels, portanto, a quantidade de parâmetros de ajuste cresce com a mesma taxa e torna-se impossível representar graficar uma função de mais de 4 dimensões, sendo a quarta dimensão a cor. Na Figura 19 se usou como função objetivo a Função de Ackley para exemplificar a não-convexidade do nosso problema de otimização. No processo de otimização pode acontecer que o método de gradiente descendente fique preso em um mínimo local (zonas azul claro na Figura 19) e nunca encontre o mínimo global (zonas azul escuro na Figura 19). Porém, isto depende da estrutura inicial, da taxa de aprendizagem α na equação 2.65, restrições de fabricação, etc. Este projeto está limitado ao dois primeiros

estágios, sendo o terceiro estágio parte da versão privativa do código SPINS-B, chamada de SPINS (2). Na Figura 20 são determinadas as variáveis **cont_iters**, **num_stages** e **min_feature**. **cont_iters** é o número de iterações contínuas a serem implementadas no gradiente descendente para tentar encontrar um mínimo global ou um bom mínimo local. **num_stages** é a quantidade de iterações discretas e **min_feature** o valor da dimensão mínima dentro do dispositivo.

```
def create_transformations(
    obj: optplan.Function,
    monitors: List[optplan.Monitor],
    sim_space: optplan.SimulationSpaceBase,
    cont_iters: int,
    num_stages: int,
    min_feature: float,
```

Figura 20 – Eleição do número de iterações contínuas, discretas e imposição da resolução de fabricação.

Fonte: Adaptada de SU *et al.* (2)

3.1.1 Restrições computacionais

1 Utilizou-se o *software* **SPINS-B** para simular e estudar a eficiência (transmitância) do demultiplexador em função do tamanho (área) e dimensão mínima (resolução de fabricação). As características e parâmetros usados na simulação foram:

- Foram simulados dois demultiplexadores de 5x5 e 10x10 μm^2 ,
- utilizou-se dois comprimentos de onda: 1300 e 1550 nm,
- os índices de refração utilizados foram 1.0 (ar) e 1.5 (resina),
- a resolução da gride computacional escolhida foi 80 nm,
- a dimensão mínima foi variada entre 100, 120, 150, 200, 250, 300, 500, 650, 800 e 1000 nm,
- largura dos guias de onda: 1 μm ,
- iterações contínuas: 30,
- iterações discretas: 3,
- tipo de campo propagado: gaussiano.

As escolhas dos valores nas iterações contínuas garantem uma otimização em volta do 95% segundo (2), portanto, permitem um bom custo-benefício computacional e temporal. O número mínimo de iterações discretas foi determinado ao realizar vários testes que

geraram estruturas com o mesmo desempenho. O comprimento dos guias de onda não afeta o processo de otimização e, por tanto, não será analisado.

3.2 Sistema de fotopolimerização

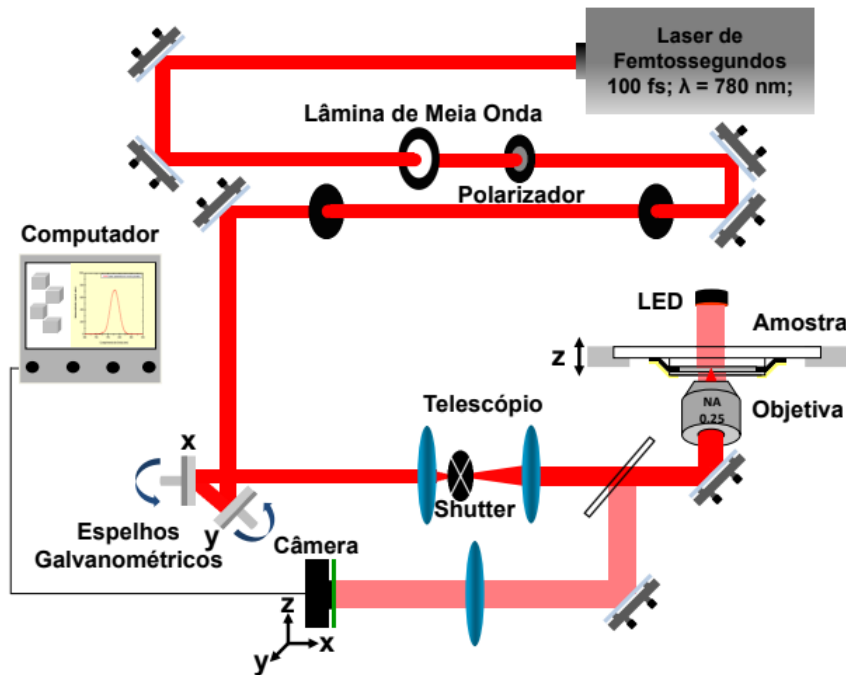


Figura 21 – Sistema de fotopolimerização.
Fonte: Adaptada de OTUKA. (11)

O aparato experimental utilizado para fabricar as estruturas é esquematizado na Figura 21. Este sistema usa, como fonte de excitação, um oscilador laser de Ti:safira em modo pulsado, bombeado por um laser contínuo de 532 nm. O laser de bombeio opera com uma potência média de cerca de 4.5 W, resultando em uma potência média de saída do laser de Ti:safira de aproximadamente 400 mW. O oscilador laser de Ti:safira operava a uma taxa de repetição de 82 MHz, gerando pulsos com duração de cerca de 100 fs, estando centralizado em 780 nm, com uma largura espectral de cerca de 50 nm. Para controlar a potência do laser, empregamos uma lâmina de meia onda e um polarizador. Dois espelhos acoplados a motores galvanométricos, permitindo a deflexão do feixe antes de atingir uma objetiva com uma abertura numérica de 0.25. Também utilizamos um obturador mecânico no foco das lentes de expansão do feixe para evitar polimerizações indesejadas e otimizar a abertura e o fechamento do feixe. O processo de polimerização pode ser acompanhado em tempo real utilizando um sistema independente de imageamento.

3.3 Preparação das amostras

Na fotopolimerização, a formação de radicais livres induzida por luz inicia uma reação em cadeia, que leva à formação de polímeros de alta massa molecular. Esses polímeros são estruturas tridimensionais entrelaçadas, que em geral apresentam uma qualidade estrutural significativa. A resina usada para criar as estruturas possui índice de refração de 1.5 (valor usado nas simulações), estando composta por dois tipos de monômeros acrílicos: SR499 e SR368. A proporção dos monômeros na resina base é crucial para determinar as propriedades mecânicas do polímero formado. O monômero SR368 proporciona rigidez adequada às microestruturas, permitindo que suportem sua estrutura tridimensional e resistam à lavagem para remover a resina não polimerizada. No entanto, um excesso desse monômero pode levar a microestruturas quebradiças. Para evitar isso, o monômero SR499 é adicionado à resina base, prevenindo o encolhimento durante a polimerização e conferindo flexibilidade às microestruturas produzidas. (13). Em este projeto se usou a proporção de resina com 70% SR368, 27% SR499 e 3% Lucirin, sendo este último o fotoiniciador responsável por gerar das espécies reativas. Os ingredientes são agitados magneticamente por 60 minutos até obter uma solução homogênea. Durante todo o processo de preparação, é crucial manter a solução em ambiente escuro para evitar a fotopolimerização induzida pela luz visível.

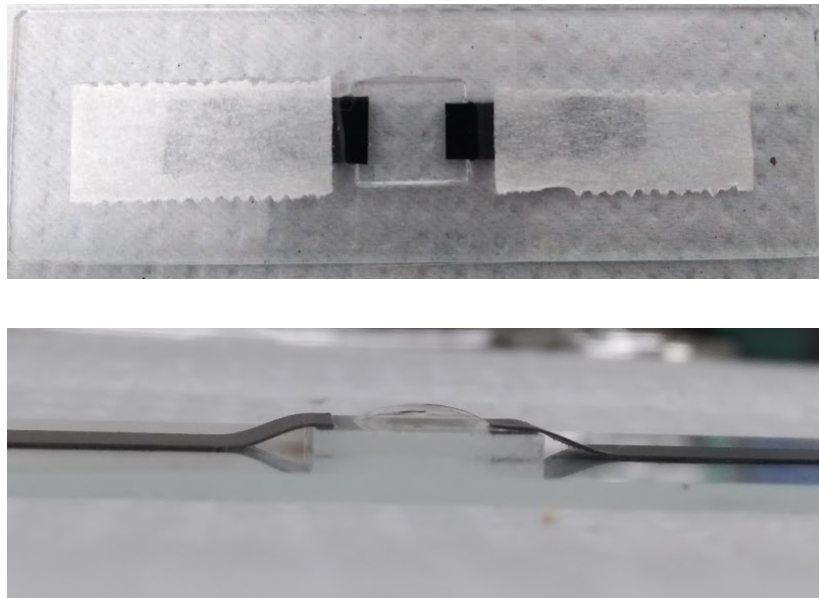


Figura 22 – Montagem das amostras.

Fonte: Elaborada pelo autor

Na Figura 22 se mostra a montagem final da amostra no substrato. Numa lâmina de microscópio é fixada, usando fitas adesivas, uma pequena lâmina de vidro (substrato base), limpa e seca cuidadosamente para evitar impurezas. As fitas adesivas também atuam como espaçadores, determinando a altura máxima das microestruturas. Após aplicar a

resina líquida no substrato base, uma lamínula de microscopia é colocada para espalhar a resina no substrato. A lamínula é fixada à lâmina de microscópio com fitas adesivas. A amostra é posicionada com a lamínula voltada para a objetiva, e um estágio de translação é conectado ao suporte da amostra para permitir o movimento tridimensional da estrutura fabricada. Após a fabricação, é necessário remover a resina não polimerizada. Para isso, se deixa a amostra submersa em álcool etílico absoluto (90 ou 100% de pureza) a uma temperatura de 70 graus centígrados durante 10 minutos.

4 RESULTADOS

4.1 Resultados computacionais

4.1.1 Estrutura de $5 \times 5 \mu\text{m}^2$

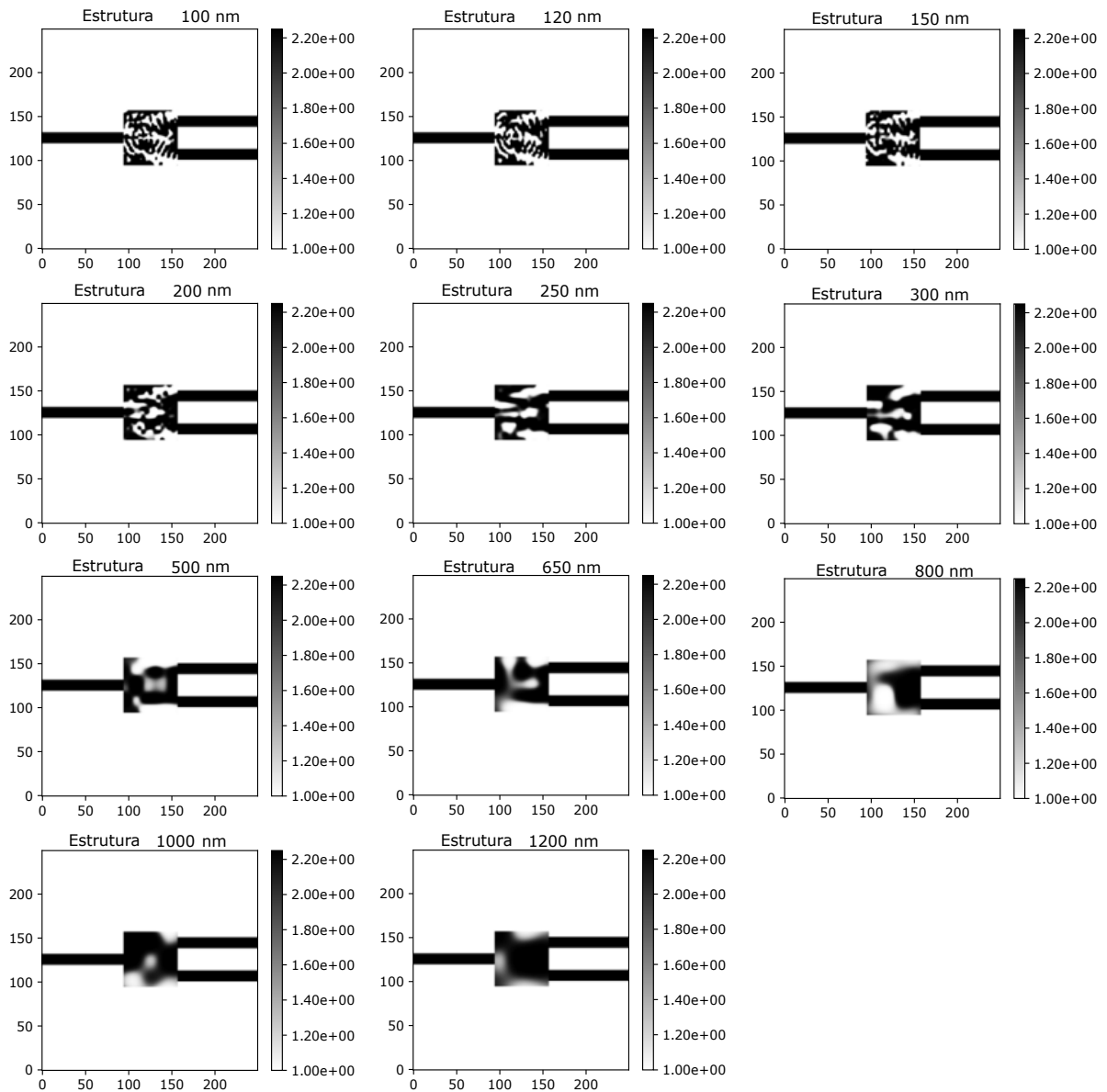


Figura 23 – Estrutura final dos demultiplexadores de $5 \times 5 \mu\text{m}^2$ em função do tamanho da dimensão mínima.

Fonte: Elaborada pelo autor

Na Figura 23 se mostram as estruturas finais após o processo de simulação e restrições descritas na Secção 3.1, o tempo de computo das estruturas de $5 \times 5 \mu\text{m}^2$ foi em média 6 horas. Observa-se que quando as dimensões mínimas são menores do que 250 nm, as estruturas estão 98% binarizadas, sendo o pixel preto $\varepsilon_1 = n_1^2 = 1.0$ e o pixel branco

$\varepsilon_2 = n_2^2 = 2.20$. Isto foi determinado fazendo a contagem de pixels cinzas. Por outro lado, quando este parâmetro é igual ou maior do que 250 nm, observa-se a formação de um contínuo de índice de refração nas estruturas. Uma possível evidência que aponta a este resultado se encontra no comportamento da função objetivo mostrado na Figura 24, podendo se observar um valor menor associado à estrutura que possui 100 nm de dimensão mínima, ou seja, estando mais próxima do mínimo global.

Note-se que a equação 2.69 aparenta ser muito sensível às variações das dimensões mínimas. Esta característica é refletida na distribuição do campo E em cada estrutura, tal como se mostra na Figuras 24. A formação deste contínuo é também uma consequência do algoritmo usado, como explicado na Secção 2.4, a gride da estrutura simulada possui duas vezes o número de células do que a gride dos modos E ou H , sendo necessário utilizar métodos de interpolação.

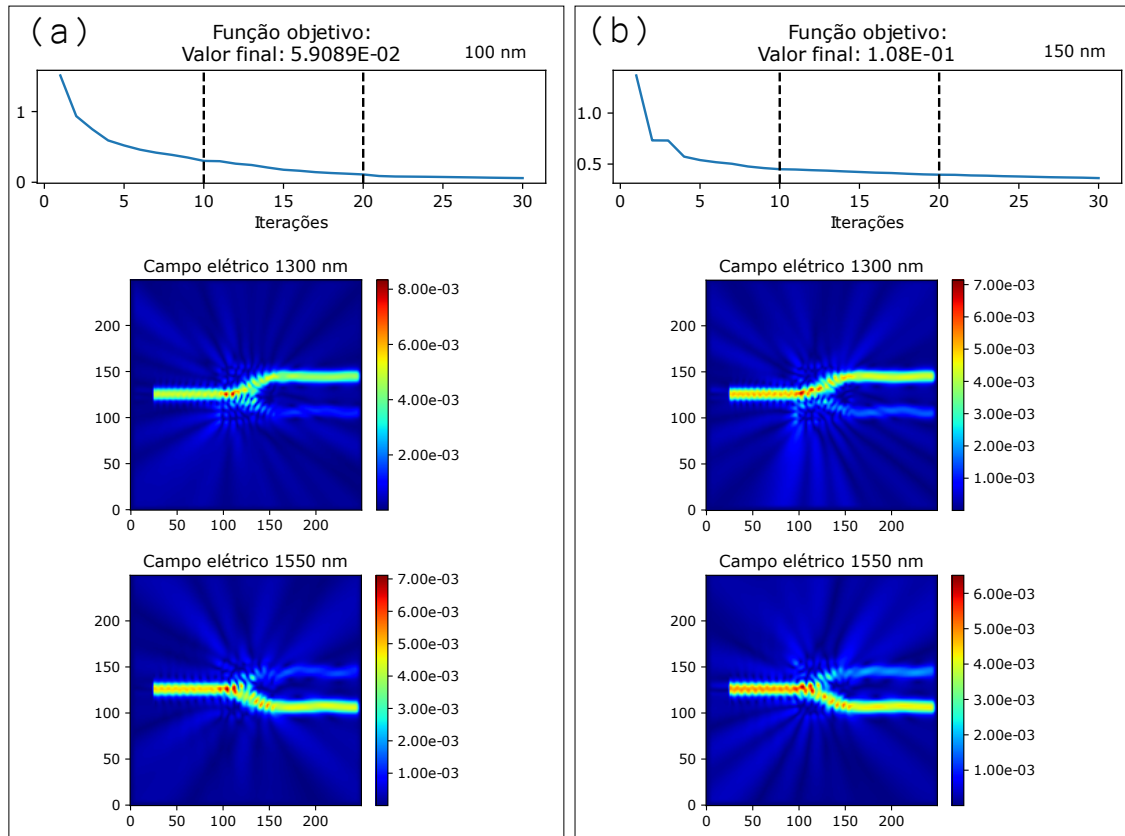


Figura 24 – Função objetivo ao longo do processo de otimização e distribuição final do modo fundamental do campo E em uma estrutura de $5 \times 5 \mu\text{m}^2$ e dimensão mínima de (a) 100 nm e (b) 150 nm. As fases de estágio estão divididas pelas linhas tracejadas.

Fonte: Elaborada pelo autor

Como descrito anteriormente, a eficiência do dispositivo é determinada pela transmitância e vazamento. Defina-se a transmitância como a intensidade de luz associada a um campo E_i que é medida na saída i , em relação à fonte. Por outro lado, o vazamento como

a transmitância do campo E_i medida em uma saída diferente de i . Além disso, quando dizemos que a dimensão mínima diminui, é equivalente a dizer que a resolução de fabricação aumenta. Deve ser considerado o fato da luz poder vazar em qualquer região do dispositivo, pelo que a transmitância e vazamento não representam a quantidade total de intensidade da fonte.

Na Figura 25a e 25b se mostram as porcentagens de transmitância e vazamento em 1300 e 1500 nm, respetivamente. O dispositivo é capaz de demultiplexar o feixe com comprimento de onda de 1300 nm com transmitância ($>60\%$) em resoluções maiores ou iguais a 150 nm, mantendo o vazamento inferior a 15% nesta faixa de resoluções. Em 200 nm, a transmitância cai até 45%, ainda com um vazamento próximo a 18%, sendo considerado ainda como um desempenho satisfatório de demultiplexação. Em 250 e 300 nm de dimensão mínima, o dispositivo mantém uma transmitância quase constante em torno a 35% enquanto o vazamento se mantém em torno de 45%, exibindo, portanto, um comportamento análogo a um *beam splitter*. Quando o dispositivo opera em 1550 nm acontece algo similar, a transmitância é maior a 45% e o vazamento é menor a 18% quando a dimensão mínima é inferior a 200 nm. O dispositivo também parecer ter um comportamento tipo *beam splitter* na faixa de 250 a 650 nm de resolução.

Fora das faixas mencionadas anteriormente, o vazamento é maior do que a transmitância, motivo pelo qual o dispositivo não atende a uma funcionalidade do nosso interesse. Na Figura 25 se mostra a quantidade de material (resina) em função da resolução de fabricação. Cada estrutura contém em torno de 65% de resina na sua constituição até 650 nm de resolução. Após este valor, as estruturas são atípicas e estão constituídas praticamente por resina.

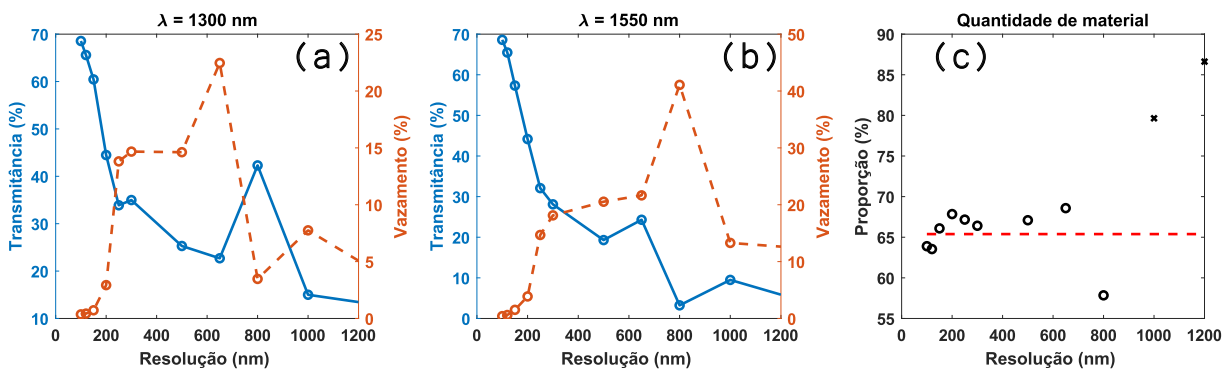


Figura 25 – Variação da (a) transmitância, (b) vazamento e (c) quantidade material (resina) em função da resolução de fabricação em uma estrutura de $5 \times 5 \mu\text{m}^2$. A linha vermelha tracejada indica a porcentagem média de material presente na estrutura simulada.

Fonte: Elaborada pelo autor

Os resultados anteriores sugerem duas hipóteses: (i) a função objetivo é sensível às peque-

nas variações nas dimensões mínimas, afastando-a do mínimo global e gerando estruturas com funcionalidades não desejadas. (ii) existe a possibilidade da estrutura não existir, pois estamos tentando criar um dispositivo que satisfaz uma dinâmica física específica. Analisando a Figura 26, observamos como a função objetivo (valor final no estágio contínuo) aumenta quando a resolução de fabricação diminui. Isto poderia ser explicado pelo fato de que o comprimento de onda e a dimensão mínima estarem em ordens de grandeza suficientemente diferentes para perder os efeitos de demultiplexação. Esta análise se sustenta no fato de estarmos no regime de sub-comprimento de onda, ou seja, do comprimento de onda do campo associado ao feixe de luz ser menor do que a estrutura onde é confinado.

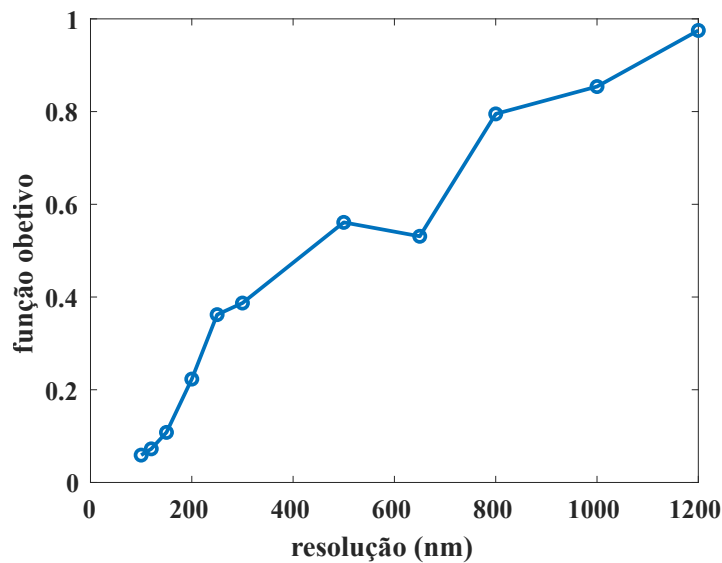


Figura 26 – Valor final da função objetivo em relação à resolução de fabricação. Os eixos indicam o número de células no espaço computacional que contém as estruturas de $5 \times 5 \mu\text{m}^2$.

Fonte: Elaborada pelo autor

Note que quando o modo fundamental do feixe é embutido no guia de onda de entrada (Figura 25a), a distribuição de intensidade se mantém nos guias de onda de saída, embora não seja exato falar sobre a coerência do feixe, o algoritmo tenta achar uma estrutura onde a função matemática dos campos de entrada e saída sejam iguais. A Figura 27 é apresentado o processo de otimização de duas estruturas de $5 \times 5 \mu\text{m}^2$ com duas resoluções de fabricação: 100 nm e 300 nm. Na Figura 27a mostra como o algoritmo otimiza a transmitância em cada guia de onda de saída enquanto vazamento é reduzido. Por outro lado, a Figura 27b mostra como se perde a funcionalidade de demultiplexação; como dito anteriormente, uma dimensão mínima maior do que 150 nm faz o algoritmo gerar estruturas que não satisfazem as nossas especificações. Nossas simulações mostraram que mais do que 3 estágios na otimização discreta não melhora significativamente as estruturas. Para testar as hipóteses iniciais, aplicou-se as análises anteriores em estruturas de $10 \times 10 \mu\text{m}^2$.

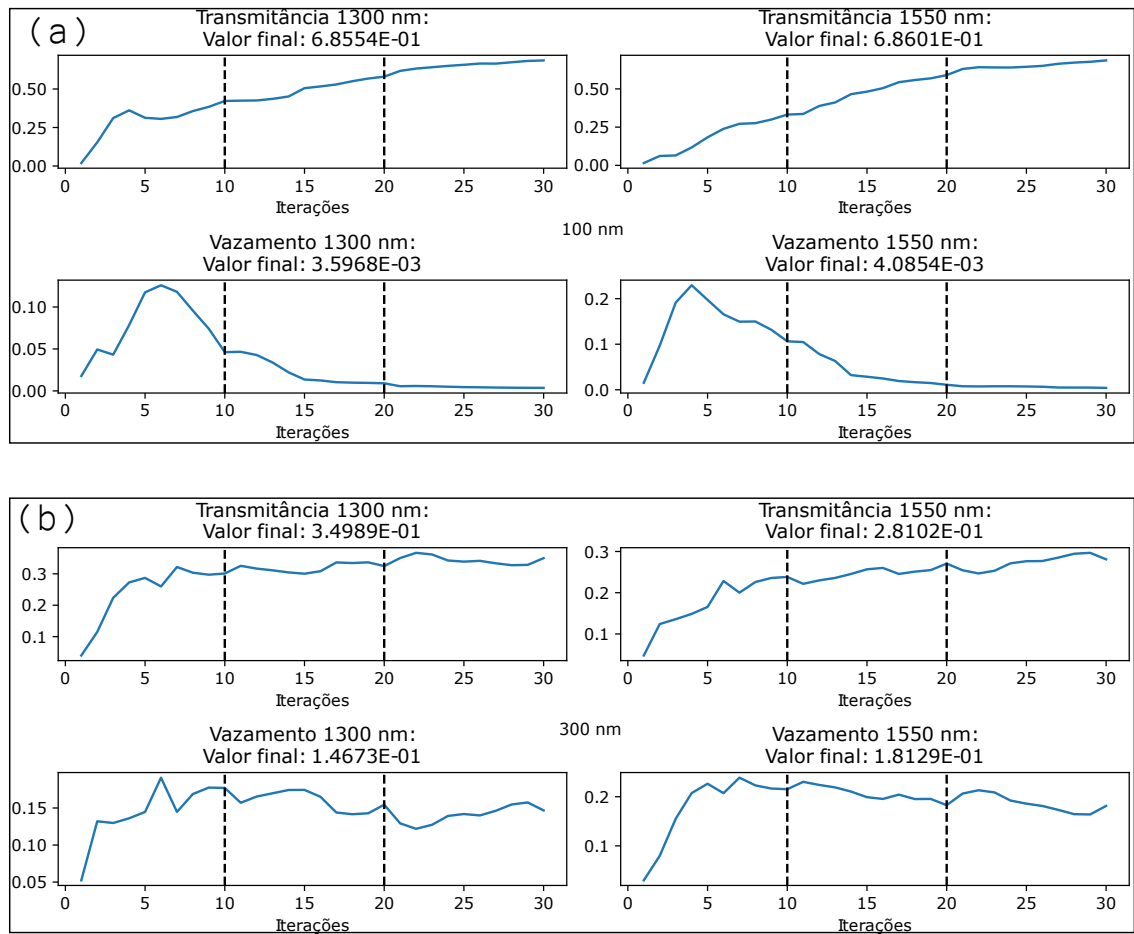


Figura 27 – Processo de otimização das estruturas de $5 \times 5 \mu\text{m}^2$, os gráficos mostram a variação de transmitância e vazamento em cada estágio de otimização para duas estruturas com resolução de (a) 100 nm e (b) 300 nm.

Fonte: Elaborada pelo autor

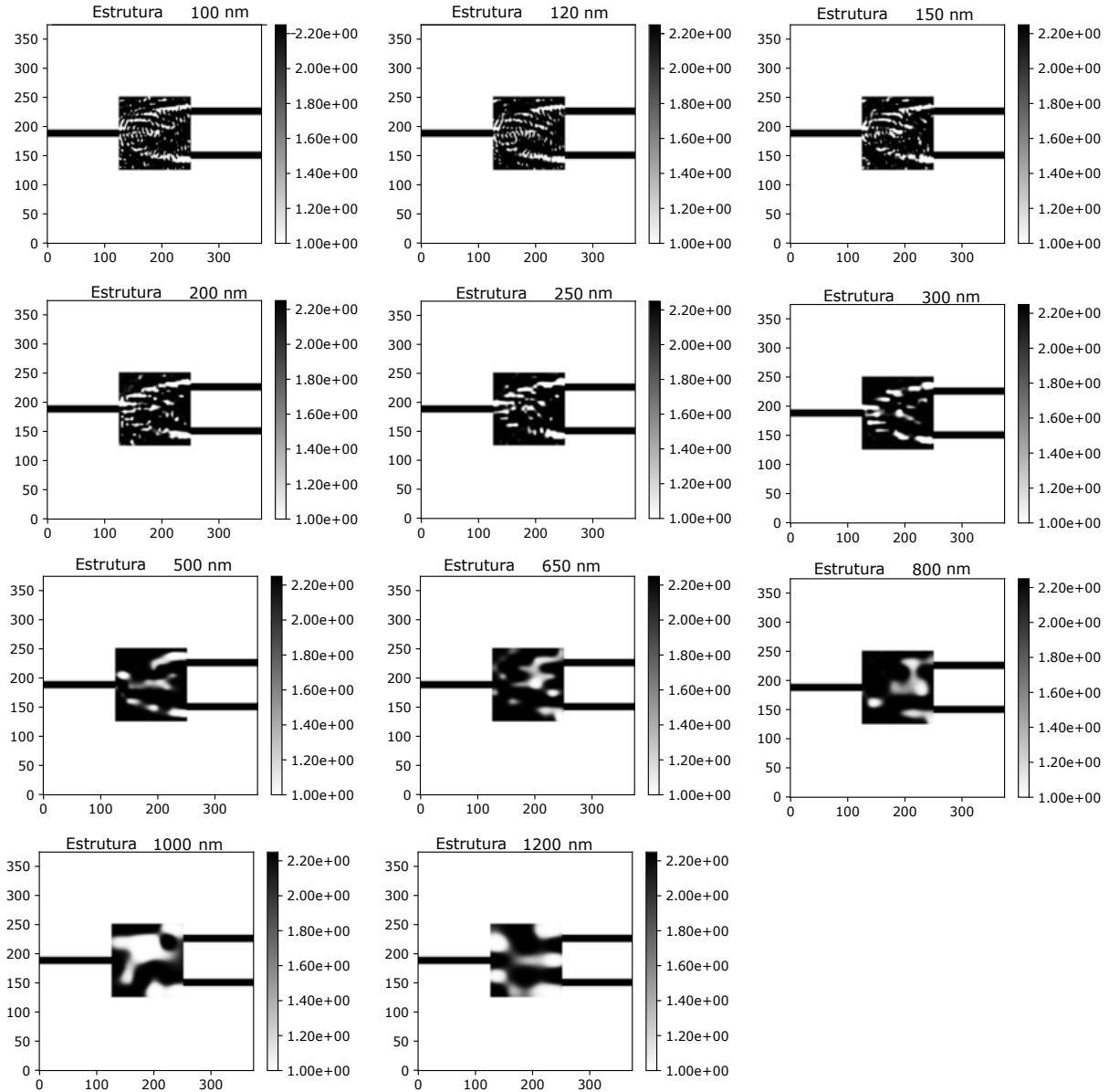
4.1.2 Estrutura de $10 \times 10 \mu\text{m}^2$ 

Figura 28 – Estrutura final dos demultiplexadores de $10 \times 10 \mu\text{m}^2$ em função do tamanho da dimensão mínima. Os eixos indicam o número de células no espaço computacional.

Fonte: Elaborada pelo autor

A Figura 28 mostra as estruturas de $10 \times 10 \mu\text{m}^2$ obtidas com o SPINS-B. O tempo de computo de cada estrutura foi em média 10 horas. Assim como para as estruturas de $5 \times 5 \mu\text{m}^2$, foi feita a contagem de pixels cinzas, encontrando estruturas 95% binarizadas quando a dimensão mínima é menor ou igual a 300 nm. Estas novas estruturas apresentam um padrão de índice de refração afunilado, a qual é perdida em 500 nm de resolução. A distribuição do campo E nestas estruturas é mostrada na Figura 29 para 100 e 300 nm de resolução de fabricação.

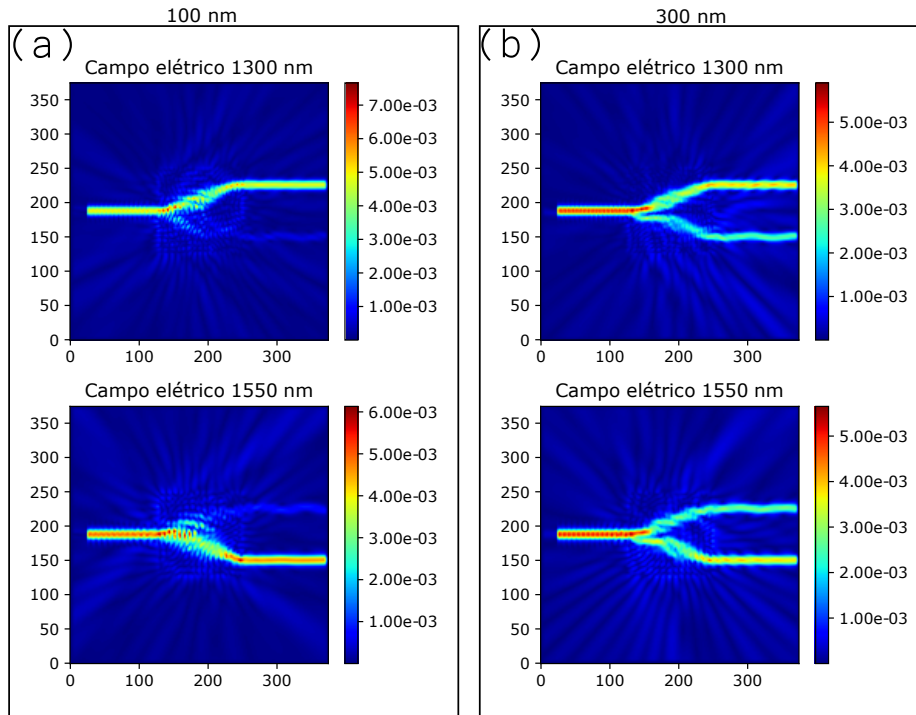


Figura 29 – Distribuição de campo E em estruturas de $10 \times 10 \mu\text{m}^2$ com (a) 100 e (b) 300 nm de resolução de fabricação.

Fonte: Elaborada pelo autor

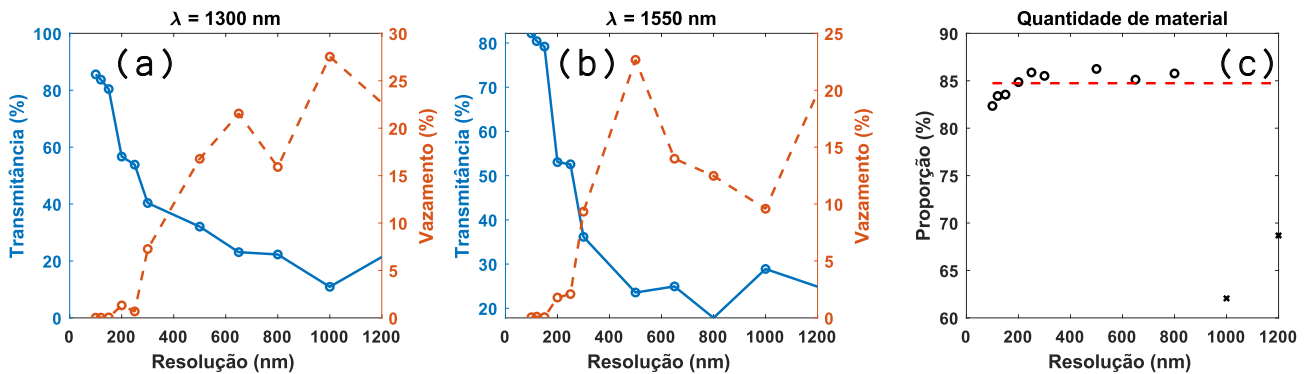


Figura 30 – Variação da (a) transmitância, (b) vazamento e (c) quantidade material (resina) em função da resolução de fabricação em uma estrutura de $10 \times 10 \mu\text{m}^2$. A linha vermelha tracejada indica a porcentagem média de material presente na estrutura simulada.

Fonte: Elaborada pelo autor

As curvas de transmitância e vazamento das Figuras 25 e 30 mostram um comportamento parecido, porém, apesar de ter uma estrutura 4 vezes maior, a resolução de fabricação mostra ser o fator determinante no desempenho do dispositivo. Esta sensibilidade na função 2.69 também se mostra na Figura 31, onde se observa uma dependência linear da função objetivo em relação à resolução de fabricação. O dispositivo consegue demultiplexar

em 1300 nm com transmitância maior do que 55% quando a resolução de fabricação é maior ou igual a 200 nm, nesta mesma faixa, o vazamento é menor do que 5%. Quando este parâmetro é igual a 250 nm, a transmitância é de 40% e o vazamento de 25%, o que ainda pode ser considerado como demultiplexação. Em 1550 nm de comprimento de onda, a transmitância é maior do que 50% e o vazamento menor do que 25% quando a resolução de fabricação é maior ou igual a 250 nm, sendo também um resultado compatível com uma demultiplexação. Fora das faixas anteriores, o dispositivo não apresenta funcionalidades de interesse. A quantidade média de material usado nesta estrutura foi de 85%, como se mostra na Figura 30c. Os valores de transmitância e vazamento não equivalem ao total de luz aplicada no dispositivo, a luz não está confinada dentro do demultiplexador, podendo vazar em diferentes regiões como mostrado na distribuição de campo E na Figura 29.

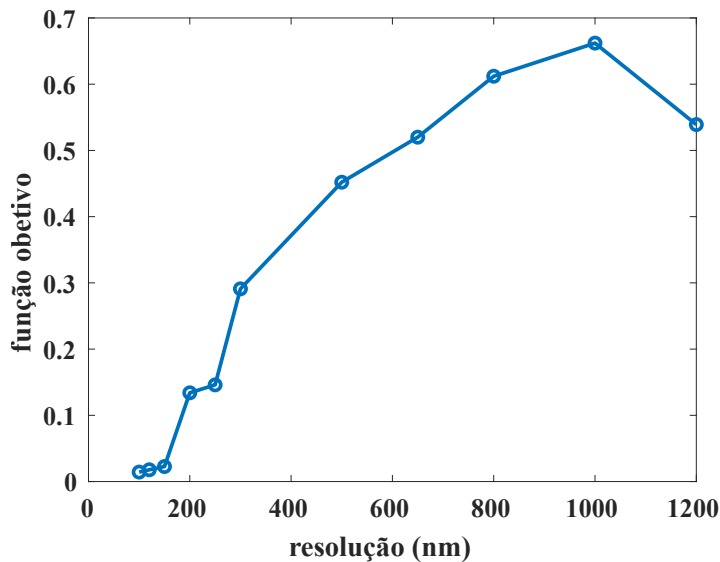


Figura 31 – Valor final da função objetivo em relação à resolução de fabricação. Os eixos indicam o número de células no espaço computacional que contém as estruturas de $10 \times 10 \mu\text{m}^2$.

Fonte: Elaborada pelo autor

4.2 Resultados experimentais

Tendo obtido os resultados computacionais, observamos que a resolução de fabricação exigida pelas estruturas é, em geral, maior do que a resolução que a técnica de microfabricação via fotopolimerização por absorção de dois fótons, implementada no grupo de fotônica, permite alcançar ($> 1 \mu\text{m}$). Mesmo assim, foram feitas tentativas de fabricação de algumas estruturas que estavam no limite de fabricação do nosso sistema de fabricação, especificamente, uma estrutura de $10 \times 10 \mu\text{m}^2$ com $1.2 \mu\text{m}$ de resolução de fabricação. Porém, foi necessário criar uma rotina de código para binarizar manualmente a estrutura, de forma a viabilizar a fabricação. Vale ressaltar que o objetivo desta parte do projeto foi meramente exploratório, para tomar conhecimento dos desafios para a fabricação das

estruturas modeladas/desenhadas.

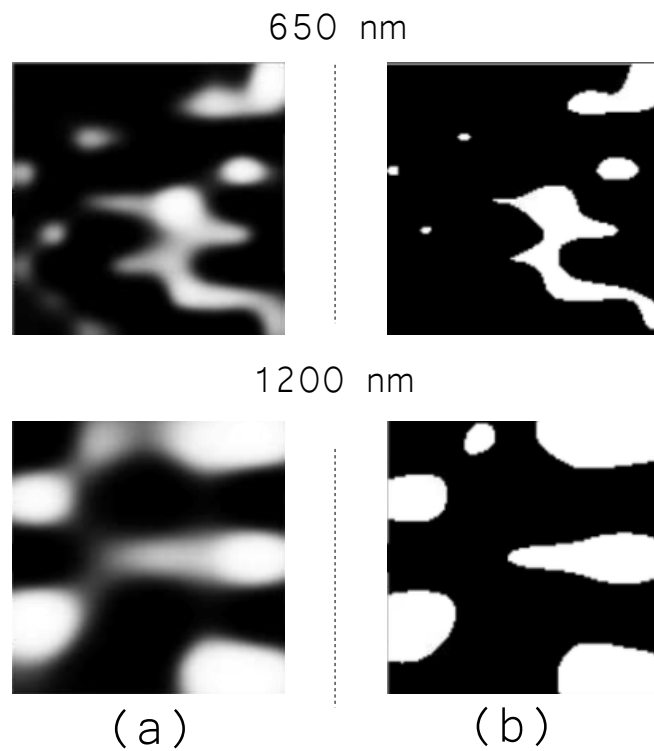


Figura 32 – Demultiplexador de $10 \times 10 \mu\text{m}^2$ com resolução de 600 nm e $1.2 \mu\text{m}$: (a) estrutura contínua e (b) binarizada.
Fonte: Elaborada pelo autor

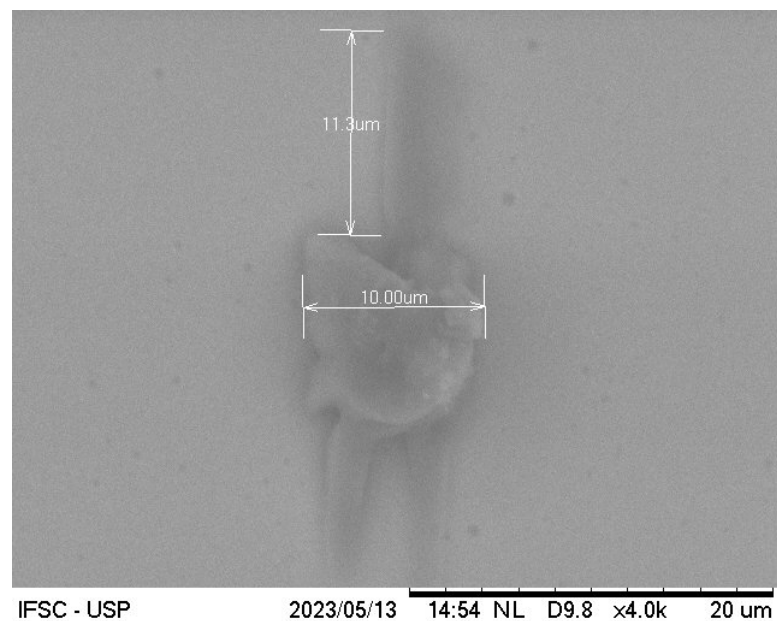


Figura 33 – Demultiplexador de $10 \times 10 \mu\text{m}^2$ com resolução de $1.2 \mu\text{m}$. Imagem tomada via microscopia eletrônica de varredura.
Fonte: Elaborada pelo autor

A Figura 32 apresenta a área de desenho processada com o código, observa-se que algumas regiões onde existiam pixels cinzas desapareceram, e aprimorando as zonas onde existe maior quantidade de pixels pretos e brancos. Estes resultados apresentam, visualmente, similaridade com os obtidos pela Profa. Jelena Vukovic usando o método de funções de nível ou *level set functions* (2). No entanto, o fato de não conseguir fabricar as estruturas com o nível de resolução requerido, impede testar esta ferramenta como estratégia no processo de otimização. Após este processamento, a estrutura foi fabricada via fotopolimerização via absorção de dois fótons. Uma das estruturas fabricadas é mostrada na Figura 33, onde se observa que um detalhamento baixo devido à limitação na resolução de fabricação. Neste trabalho não foram estudadas as condições ótimas de fabricação, como por exemplo, a proporção dos componentes presentes na resina, ou influência da intensidade do pulso, etc; isto devido a fato de não fazerem parte dos objetivos do projeto.

5 CONCLUSÃO

Neste projeto estudamos a teoria física e matemática por trás de um dos algoritmos mais famosos de desenho inteligente, baseado no método de gradiente descendente. Foi detalhado passo a passo a formulação matricial das equações de Maxwell no domínio da frequência usando o método de diferenças finitas, com o intuito de embuti-las na gride de Yee para construir a geometria do nosso dispositivo fotônico. Foi utilizado o *software* SPINS-B, um código livre que permite implementar as equações de Maxwell e realizar o processo de otimização de estruturas fotônicas, no nosso caso o demultiplexador de comprimento de onda. Este processo de familiarização com o código permitiu desenvolver códigos na linguagem de programação Python para criar os arquivos que continham a estrutura a ser otimizada dentro de espaço computacional.

1. Inicialmente, o código original do SPINS-B só permitia monitorar a função de erro e a transmitância ao longo dos estágios de otimização contínua e discreta, sendo necessário fazer algumas modificações para conseguir monitorar o vazamento em cada um dos comprimentos de onda utilizados. Apesar de não possuir o código privativo de binarização original, foi desenvolvida em Python e Matlab uma rotina para binarizar as nossas estruturas.
2. Devido ao custo computacional, foram simulados demultiplexadores com áreas de 5×5 e $10 \times 10 \mu\text{m}^2$ e várias resoluções de fabricação, com o intuito de determinar em que ponto a funcionalidade de divisão de comprimento de onda não era atingida. Para isso, foram analisadas as curvas de transmitância e vazamento em cada comprimento de onda, conseguindo identificar um regime onde o dispositivo parece se comportar como um *beam splitter*. Os nossos resultados parecem indicar que a área do demultiplexador não influencia a funcionalidade do dispositivo, mas sim o a resolução das dimensões mínimas. Isto pode ser explicado em termos da diferença na ordem de grandeza entre o comprimento de onda e o tamanho das dimensões mínimas.
3. Baseado no comportamento da função objetivo, podemos deduzir que ela é muito sensível às variações de resolução do dispositivo. Porém, existe uma alta possibilidade das estruturas alvo não existirem no mundo real. Devido às nossas condições experimentais e limitações de resolução, não foi possível fabricar as estruturas que apresentaram o melhor desempenho. No entanto, foi possível se familiarizar com os princípios fundamentais da técnica de fotopolimerização via absorção de dois fótons.
4. Como perspectivas futuras, seria interessante implementar um sistema de fabricação com melhor resolução para produzir as estruturas que apresentaram o melhor

desempenho, e assim, conseguir comparar diretamente os resultados teóricos e experimentais.

REFERÊNCIAS

- 1 MOLESKY, S. *et al.* Inverse design in nanophotonics. **Nature Photonics**, v. 12, n. 11, p. 659–670, 2018.
- 2 SU, L. *et al.* Nanophotonic inverse design with spins: Software architecture and practical considerations. **Applied Physics Reviews**, v. 7, n. 1, p. 011407, 2020.
- 3 MOURADIAN, S. L. *et al.* Scalable integration of long-lived quantum memories into a photonic circuit. **Physical Review X**, APS, v. 5, n. 3, p. 031009, 2015.
- 4 MARUO, S.; NAKAMURA, O.; KAWATA, S. Three-dimensional microfabrication with two-photon-absorbed photopolymerization. **Optics Letters**, v. 22, n. 2, p. 132–134, 1997.
- 5 FRANKEN, e. P. *et al.* Generation of optical harmonics. **Physical Review Letters**, APS, v. 7, n. 4, p. 118, 1961.
- 6 BOYD, R. W.; GAETA, A. L.; GIESE, E. **Nonlinear optics**. Berlin: Springer, 2008. 1097–1110 p.
- 7 GÖPPERT-MAYER, M. Über elementarakte mit zwei quantensprüngen. **Annalen der Physik**, v. 401, p. 273–294, 1931. ISSN 00033804.
- 8 KAISER, W.; GARRETT, C. Two-photon excitation in ca f 2: Eu 2+. **Physical Review Letters**, APS, v. 7, n. 6, p. 229, 1961.
- 9 GALAS, L. *et al.* Probe, sample, and instrument (psi)”: the hat-trick for fluorescence live cell imaging. **Chemosensors**, v. 6, n. 3, p. 40, 2018.
- 10 PIANT, S.; BOLZE, F.; SPECHT, A. Two-photon uncaging, from neuroscience to materials. **Optical Materials Express**, v. 6, n. 5, p. 1679–1691, 2016.
- 11 OTUKA, A. J. G. **Estruturas poliméricas com nanotubos de carbono: processamento a laser, caracterização e aplicações**. 2017. Tese (Doutorado) — Escola de Engenharia de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2017.
- 12 LAFRATTA, C. N. *et al.* Multiphoton fabrication. **Angewandte Chemie International Edition**, v. 46, n. 33, p. 6238–6258, 2007.
- 13 TOMAZIO, N. B. **Direct laser writing of high-Q polymeric microresonators for Photonics**. 2020. Tese (Doutorado) — Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2020.
- 14 SADIKU, M.; PETERSON, A. A comparison of numerical methods for computing electromagnetic fields. *In: IEEE PROCEEDINGS ON SOUTHEASTCON*, New Orleans. **Proceedings [...]** New Orleans: IEEE, 1990, p. 42–47.
- 15 SHIN, W. **3D finite-difference frequency-domain method for plasmonics and nanophotonics**. 2013. PhD Thesis (Doctor in Philosophy) - Stanford University, Palo Alto, 2013.

- 16 RUMPF, R. C. **Electromagnetic and photonic simulation for the beginner: finite-difference frequency-domain in MATLAB®**. Massachusetts: Artech House, p. 355, 2022.
- 17 BERTACCINI, D.; DURASTANTE, F. **Iterative methods and preconditioning for large and sparse linear systems with applications**. Boca Raton: CRC Press, 2018.
- 18 GRIFFITHS, D. J. **Introduction to electrodynamics**. Cambridge: Cambridge University Press, 2017, p. 620.
- 19 LEVEQUE, R. J. **Finite difference methods for ordinary and partial differential equations**. Pennsylvania: Society for Industrial and Applied Mathematics, 2007.
- 20 ALKAN, E. *et al.* **Double-grid finite-difference frequency-domain (DG-FDFD) method for scattering from chiral objects**. Berlin: Springer International Publishing, 2013.
- 21 YEE, K. Numerical solution of initial boundary value problems involving maxwell's equations in isotropic media. **IEEE Transactions on Antennas and Propagation**, v. 14, p. 302–307, 1966.
- 22 CHEN, M. yun; HSU, S. ming; CHANG, H.-C. A finite-difference frequency-domain method for full-vectorial mode solutions of anisotropic optical waveguides with arbitrary permittivity tensor. **Optics Express**, v. 17, p. 5965, 2009.
- 23 KUZU, L. *et al.* Electromagnetic scattering from chiral material using the finite difference frequency domain method. *In: BIENNIAL IEEE CONFERENCE ON ELECTROMAGNETIC FIELD COMPUTATION*, 12., 2006, Miami. **Proceedings [...]** Miami: IEEE, 2006., p. 167–167.
- 24 GRANDE, A. *et al.* Fdtd modeling of transient microwave signals in dispersive and lossy bi-isotropic media. **IEEE Transactions on Microwave Theory and Techniques**, v. 52, n. 3, p. 773–784, 2004.
- 25 GRANDE, A. *et al.* Two-dimensional extension of a novel fdtd technique for modeling dispersive lossy bi-isotropic media using the auxiliary differential equation method. **IEEE Microwave and Wireless Components Letters**, v. 15, n. 5, p. 375–377, 2005.
- 26 CHAPRA, S.; CANALE, R. **Numerical methods for engineers**. 7th ed. New York: McGraw-Hill, 2015.
- 27 BÉRENGER, J.-P. **Perfectly matched layer (PML) for computational electromagnetics**. Berlin: Springer International Publishing, 2007.
- 28 RUMPF, R. C. Simple implementation of arbitrarily shaped total-field/scattered-field regions in the finite-difference frequency-domain. **Progress in Electromagnetics**, v. 36, p. 221–248, 2012.
- 29 LANG, H.-D. **The finite-difference frequency-domain method**. Disponível em: http://www.hade.ch/docs/report_FDFD.pdf. Acesso em: 23 jan. 2022.

-
- 30 RUDER, S. **An overview of gradient descent optimization algorithms. 2016.** Disponível em: <https://arxiv.org/pdf/1609.04747.pdf>. Acesso em: 30 out. 2022.
- 31 GOODFELLOW, I.; BENGIO, Y.; COURVILLE, A. **Deep learning.** Massachusetts: MIT press, 2016.
- 32 MURPHY, K. P. **Machine learning: a probabilistic perspective.** Massachusetts: MIT press, 2012.
- 33 BISHOP, C. M.; NASRABADI, N. M. **Pattern recognition and machine learning.** Berlin: Springer, 2006.
- 34 ZHANG, J.; BI, S.; ZHANG, G. A directional gaussian smoothing optimization method for computational inverse design in nanophotonics. **Materials & Design**, v. 197, p. 109213, 2021.
- 35 PIGGOTT, A. Y. *et al.* Fabrication-constrained nanophotonic inverse design. **Scientific Reports**, v. 7, p. 1786, 2017.
- 36 FAHRENKOPF, N. M. *et al.* The aim photonics mpw: a highly accessible cutting edge technology for rapid prototyping of photonic integrated circuits. **IEEE Journal of Selected Topics in Quantum Electronics**, v. 25, n. 5, p. 1–6, 2019.
- 37 PIGGOTT, A. Y. *et al.* Inverse design and demonstration of a compact and broadband on-chip wavelength demultiplexer. **Nature Photonics**, v. 9, p. 374–377, 6 2015.
- 38 PIGGOTT, A. Y. *et al.* Fabrication-constrained nanophotonic inverse design. **Scientific Reports**, v. 7, n. 1, p. 1786, 2017.
- 39 SU, L. *et al.* Inverse design and demonstration of a compact on-chip narrowband three-channel wavelength demultiplexer. **ACS Photonics**, v. 5, n. 2, p. 301–305, 2018.
- 40 DORY, C. *et al.* Inverse-designed diamond photonics. **Nature Communications**, v. 10, n. 1, p. 3309, 2019.
- 41 SU, L. *et al.* Fully-automated optimization of grating couplers. **Optics Express**, v. 26, n. 4, p. 4023–4034, 2018.