Universidade Estadual Paulista
Programa de Pós-Graduação em Ciência e Tecnologia de Materiais

Maria Cecilia Romano

Funções de Wannier para cristais fotônicos unidimensionais

Bauru 2011

Maria Cecilia Romano

Funções de Wannier para cristais fotônicos unidimensionais

Dissertação apresentada ao programa de Pós-graduação Institucional em Ciência e Tecnologia de Materiais da Universidade Estadual Paulista "Júlio de Mesquita Filho", como requisito à obtenção do título de Mestre em Ciência e Tecnologia de Materiais, sob a orientação do professor Dr. Alexys Bruno Alfonso.

Bauru 2011

Romano, Maria Cecilia.
Funções de Wannier para cristais fotônicos unidimensionais / Maria Cecilia Romano, 2011.
64 f. : Il.

Orientador: Alexys Bruno Alfonso

Dissertação (Mestrado)–Universidade Estadual Paulista. Faculdade de Ciências, Bauru, 2011

1. Cristal fotônico. 2. Funções de Wannier. 3. Matriz de transferência. 4. Modos Localizados I. Universidade Estadual Paulista. Faculdade de Ciências. II. Título.

UNIVERSIDADE ESTADUAL PAULISTA
"JÚLIO DE MESQUITA FILHO"
CAMPUS DE BAURU
FACULDADE DE CIENCIAS DE BAURU

ATA DA DEFESA PÚBLICA DA DISSERTAÇÃO DE MESTRADO DE MARIA CECILIA ROMANO, DISCENTE DO PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM CIÊNCIA E TECNOLOGIA DE MATERIAIS, DO(A) FACULDADE DE CIENCIAS DE BAURU.

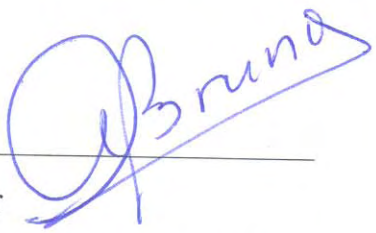
Aos 18 dias do mês de abril do ano de 2011, às 10:00 horas, no(a) Anfiteatro da Pós-graduação / FC, reuniu-se a Comissão Examinadora da Defesa Pública, composta pelos seguintes membros: Prof. Dr. ALEXYS BRUNO ALFONSO do(a) Departamento de Matemática / Faculdade de Ciencias de Bauru, Prof. Dr. ERNESTO REYES GÓMEZ do(a) Medellín / Universidad de Antioquia, Prof. Dr. FABIO DE JESUS RIBEIRO do(a) Escola de Engenharia Industrial Metalúrgica de Volta Redonda / Universidade Federal Fluminense, sob a presidência do primeiro, a fim de proceder a argüição pública da DISSERTAÇÃO DE MESTRADO de MARIA CECILIA ROMANO, intitulada "FUNÇÃO DE WANNIER PARA CRISTAIS FOTONICOS UNIDIMENSIONAIS". Após a exposição, a discente foi argüida oralmente pelos membros da Comissão Examinadora, tendo recebido o conceito final: aprovado . Nada mais havendo, foi lavrada a presente ata, que, após lida e aprovada, foi assinada pelos membros da Comissão Examinadora.

Prof. Dr. ALEXYS BRUNO ALFONSO

Prof. Dr. ERNESTO REYES GÓMEZ

Prof. Dr. FABIO DE JESUS RIBEIRO

Observação: o título da Dissertação de Mestrado de Maria Cecilia Romano, defendida e aprovada em 18 de abril de 2011 é "FUNÇÕES DE WANNIER PARA CRISTAIS FOTÔNICOS UNIDIMENSIONAIS".



Orientador

Prof. Dr. Alexys Bruno Alfonso

Ao meu noivo Aparecido Pieri Júnior, pela confiança no meu trabalho e apoio incondicional.

Agradecimentos

Agradeço primeiramente a Deus, pelo dom da vida e por inspirar a humanidade na busca do conhecimento que leva ao bem comum.

Agradeço aos meus pais, Decio José Romano e Maria Cristina Rosella Romano, por prepararem meus caminhos desde a infância e me mostrarem a importância de lutar para alcançar os objetivos pretendidos. A vocês que me ensinaram a manter a dignidade e ser fiel aos meus princípios, jamais encontrarei palavras para expressar minha gratidão.

Ao meu irmão, Rodrigo, e sua esposa, Cláudia, pelo incentivo e pelo presente mais lindo que poderiam me dar, minha sobrinha Isadora.

À minha irmã, Laura, que um dia chegou para agitar nossas vidas e nos fez ver que tudo pode ser muito mais complicado do que realmente é.

Agradeço e dedico este trabalho à pessoa especial que Deus colocou em minha vida e desde o primeiro momento não me deixou desistir de um só passo que iria dar, meu noivo, Júnior. Pela confiança em mim, por elevar minha auto-estima todos os dias e por investir em meus sonhos como se fossem os seus, serei sempre grata.

Aos parentes e amigos, que me ajudaram a ser quem sou e a chegar até aqui, muito obrigada.

Ao meu colega de trabalho Denis Nacbar, pelas discussões sobre funções de Wannier.

Aos professores Jeverson Teodoro Arantes Júnior, da UFABC, Maria Priscila Pessanha de Castro , da UENF, e Fábio de Jesus Ribeiro, da UFF, pela participação em meu exame de qualificação e pelas sugestões dadas para melhorar meu trabalho.

Aos professores Ernesto Reyes Gómez, da Universidad de Antioquia, e Fábio de Jesus Ribeiro, da UFF, pela participação em minha defesa.

Aos Professores Luiz Eduardo Oliveira, da Unicamp, e Solange Bessa Cavalcanti, da UFAL, pelas sugestões dadas para publicação do meu primeiro artigo científico.

E ao meu orientador, Alexys Bruno Alfonso, pelas incansáveis revisões e por ter acreditado em meu potencial e não ter me deixado desistir mesmo quando achei que não seria capaz de chegar tão longe.

Romano M. C. **Funções de Wannier para cristais fotônicos unidimensionais** 2011. Dissertação (Programa de Pós-graduação em Ciência e Tecnologia de Materiais). UNESP, Bauru, 2011.

RESUMO

Os cristais fotônicos são novos materiais em que a permissividade dielétrica e a permeabilidade magnética apresentam a periodicidade de uma rede de Bravais. No caso dos sólidos cristalinos, é a energia potencial de cada elétron que apresenta esse tipo de periodicidade. Por conta das semelhanças que existem entre as equações que descrevem os sistemas eletrônicos e fotônicos, muitos dos conceitos e métodos da teoria de estados eletrônicos vêm sendo aplicados na investigação de cristais fotônicos. Dentre esses conceitos, as funções de Wannier apresentam vantagens para o tratamento de estados eletrônicos e modos fotônicos localizados. Este trabalho aborda o caso de cristais fotônicos unidimensionais com simetria de inversão. Primeiramente são calculadas e analisadas funções de Wannier bem localizadas. Em seguida são investigados os modos eletromagnéticos localizados produzidos por defeitos em cristais fotônicos, utilizando o método de matriz de transferência e o método da combinação linear das funções de Wannier. Finalmente, é feita a comparação dos resultados obtidos mediante esses métodos e são discutidas as vantagens do uso de funções de Wannier.

Palavras chave: cristal fotônico, funções de Wannier, matriz de transferência, defeitos, modos localizados.

Romano M. C. **Wannier functions for one-dimensional photonic crystals** 2011. Dissertation (Program of Masters Degree in Science and Technology of Materials). UNESP, Bauru, 2011.

ABSTRACT

Photonic crystals are new materials where both the dielectric permittivity and the magnetic permeability present the periodicity of a Bravais lattice. In the case of electronic states, this property is shown by the mono-eletronic potential energy. Due to the similarities between the electronic and photonic problems, many concepts and methods of the theory of electronic states are being applied to investigate photonic crystals. Among such concepts, the Wannier functions are advantageous to deal with either localized electronic states or localized photonic modes. This work addresses the case of one-dimensional photonic crystals with inversion symmetry. First, well-localized Wannier functions are calculated and analyzed. Then, the localized modes produced by defects in photonic crystals are investigated by using either transfer matrices or linear combination Wannier functions. Finally, the results obtained by the two methods are compared and the advantages of using Wannier functions are discussed.

Key words: photonic crystal, Wannier functions, transfer matrix, defects, localized modes.

Sumário

Sumário **vi**

1 Introdução **9**

2 Equação de ondas para cristais fotônicos **17**

2.1 Introdução 17

2.2 Equação de ondas 17

2.3 Matriz de transferência e bandas de frequências permitidas 20

2.4 Ortonormalização das funções de Bloch 22

2.5 Conclusões do capítulo 23

3 Funções de Wannier para cristais fotônicos unidimensionais **24**

3.1 Introdução 24

3.2 Teoria das funções de Wannier para cristais fotônicos unidimensionais com simetria de inversão 24

3.3 Conclusões do capítulo 28

4 Gráficos e propriedades das funções de Wannier para cristais fotônicos com simetria de inversão **30**

4.1 Introdução 30

4.2 Gráficos e simetria das funções de Wannier para cristais fotônicos com simetria de inversão 30

4.3 Comportamento assintótico das funções de Wannier para cristais fotônicos com simetria de inversão 32

4.4 Conclusões do capítulo 36

5 Cálculo de modos localizados em cristais fotônicos utilizando matriz de transferência **37**

5.1 Introdução 37

5.2 Método da matriz de transferência para cristais unidimensionais com defeito 37

5.3 Frequências e gráficos dos modos localizados em cristais com defeito e simetria de inversão 41

5.4 Comportamento assintótico dos modos localizados 42

5.5 Conclusões do capítulo 44

6 Cálculo de modos localizados em cristais fotônicos utilizando funções de Wannier **47**

6.1 Introdução 47

6.2 Gráficos das funções de Wannier magnéticas para cristais fotônicos unidimensionais 47

6.3 Modos localizados como combinação linear das funções de Wannier 48

6.4 Comparação dos resultados obtidos mediante matriz de transferência com os resultados obtidos mediante funções de Wannier 52

6.5 Conclusões do capítulo 55

7 Conclusões **56**

A Equações Maxwell **58**

B Matriz de Transferência **60**

Referências Bibliográficas **62**

Capítulo 1

Introdução

Os diferentes materiais acompanharam a evolução humana desde os primórdios e contribuíram para o progresso da sociedade. Com o passar do tempo o homem percebeu a importância dos materiais para facilitar suas atividades e proporcionar conforto e comodidade. Isso fez aumentar a busca por novos materiais e levou algumas pessoas a se dedicarem ao estudo de suas propriedades e aplicações na solução de problemas cotidianos. Assim, com a sistematização e aperfeiçoamento dos métodos e ferramentas utilizados, surgiu a Ciência dos Materiais.

A Ciência dos Materiais tem como objetivo estudar as características físicas e químicas dos materiais. Isso se dá mediante modelagens teóricas e técnicas experimentais. Portanto, essa ciência tem caráter multidisciplinar, envolvendo o trabalho de médicos, biólogos, químicos, físicos, matemáticos, engenheiros e programadores computacionais.

Entre os modelos mais usados na Ciência dos Materiais estão os cristais. São assim chamados os materiais com estrutura química periódica que, por isso, apresentam propriedades especiais no que diz respeito ao comportamento dos elétrons. As funções de onda eletrônicas consistentes com a periodicidade são as chamadas funções de Bloch e são identificadas pelo vetor de onda $\vec{k}$. As energias correspondentes também dependem de $\vec{k}$ e formam bandas. Além disso, podem existir intervalos de energias proibidas, chamados de gaps [1].

Para o estudo das propriedades físicas dos cristais são utilizadas inúmeras ferramentas, dentre elas, damos destaque às funções de Wannier. Elas foram introduzidas pelo físico suíço Gregory Hugh Wannier (1911 - 1983), em 1937 [2]. Sabendo que as funções de Bloch dependem periodicamente de $\vec{k}$, elas podem ser representadas por uma série de

Fourier, cujos coeficientes são precisamente as funções de Wannier. Portanto, existe uma transformação linear que converte as funções de Bloch em funções de Wannier e viceversa. Cada um desses conjuntos de funções é uma base que pode gerar os estados eletrônicos em cristais com defeitos ou perturbados por campos externos. Porém, diferentemente das funções de Bloch, que representam estados estendidos, as de Wannier correspondem a estados localizados. O caráter localizado das segundas é que justifica o interesse e a aplicabilidade delas.

Na hora de trabalhar com funções de Wannier é preciso levar em conta que as funções de Bloch não são completamente determinadas pela equação de Schrödinger e a invariância translacional. De fato, é possível adicionar uma função periódica do vetor de onda à fase complexa das funções de Bloch, sem alterar as suas propriedades essenciais. Porém, essa mudança pode afetar apreciavelmente a forma das funções de Wannier. Em particular, a variância da distribuição de probabilidades associada à função de Wannier depende da escolha feita para a fase das funções de Bloch. Isso é muito importante porque a variância é um parâmetro que expressa o grau de localização dos estados: a máxima localização dos estados ocorre quando a variância é mínima [3]. Portanto, sendo a localização o diferencial das funções de Wannier, os pesquisadores devem ajustar a fase das funções de Bloch com o objetivo de conseguir a localização máxima das mesmas.

Em 1959, o físico austríaco Walter Kohn publicou um trabalho sobre funções de Wannier de bandas simples isoladas em cristais unidimensionais com simetria de inversão [4]. Com o avanço dos equipamentos e procedimentos computacionais, a partir da década de 90, o cálculo das funções de Wannier ficou mais viável, rápido e preciso. Em 1997 foi estabelecido um método para calcular funções de Wannier de máxima localização para grupos de bandas em sólidos cristalinos por Marzari e Vanderbilt [3]. Bruno-Alfonso e Hai, em 2003, usaram matrizes de transferência para fazer uma classificação das bandas simples isoladas de cristais unidimensionais com simetria de inversão. Essa classificação permite obter as funções de Wannier-Kohn e prever sua simetria [5].

Além de conhecer as propriedades eletrônicas dos materiais, é muitas vezes importante conhecer e compreender a propagação de ondas eletromagnéticas em diversos meios. No vácuo, essas ondas propagam-se mediante a indução do campo magnético por campo elétrico variável e a indução de campo elétrico por campo magnético variável. A propagação ocorre com velocidade aproximada de 299 792 458 metros por segundo (universalmente de-

notada pelo símbolo c). Além disso, a frequência das ocilações pode tomar valores num amplo espectro. De fato, são usados vários intervalos de frequências para classificar as ondas eletromagnéticas [6]. Em ordem crescente de valores podemos citar: ondas de rádio (30 KHz - 300 MHz), microondas (300 MHz - 300 GHz), raois infravermelhos (300 GHz - 400 THz), luz visível (400 THz - 750 THz), raios ultravioletas (750 THz - 24 PHz), raios X (24 PHz - 48 EHz) e raios gama (48 EHz - 48 ZHz). Juntamente com a periodicidade temporal, as ondas eletromagnéticas apresentam periodicidade espacial cujo período é o comprimento de onda $\lambda_v = \frac{c}{f}$, em que f denota a frequência. Portanto, essas ondas são classificadas segundo o comprimento de onda no vácuo: ondas de rádio (10 Km - 1 m), microondas (1 m - 1 mm), raois infravermelhos (1 mm - 700 nm), luz visível(700 nm - 400 nm), raios ultravioletas (400 nm - 12 nm), raios X (12 nm - 6 pm) e raios gama (6 pm - 6 fm). Esse tipo de onda também se propaga em meios gasosos, líquidos e sólidos. Quando esses meios são isotrópicos, as respostas elétricas e magnéticas são caracterizadas pela permissividade dielétrica relativa ϵ e a permeabilidade magnética relativa μ. Consequentemente a velocidade de propagação das ondas eletromagnéticas é $v = \frac{c}{n}$ em que $n = \sqrt{\mu\,\epsilon}$ é o índice de refração do meio. Verifica-se experimentalmente que n depende da frequência da onda e que suas variações espaciais determinam a trajetória dos feixes. Esse fenômeno, chamado de refração, também é aproveitado na construção de lentes. Também, ajuda a compreender a decomposição da luz branca ao atravessar um prisma e a ocorrência do arcoíris, por exemplo. Quanto à periodicidade espacial, o comprimento de onda no meio é $\lambda = \frac{v}{f} = \frac{\lambda_v}{n}$. Então, sendo que nos meios ópticos comuns $\mu \approx 1$ e $\epsilon > 1$, conclui-se que $v < c$. Assim, a velocidade e o comprimento da onda são menores do que no vácuo [7].

No caso particular dos materiais classificados como cristais fotônicos, a permissividade elétrica e a permeabilidade magnética apresentam a periodicidade de uma rede de Bravais [1, 8]. Essa periodicidade pode se dar em uma, duas ou três direções, o que caracteriza os cristais como uni, bi ou tridimensionais [9] (ver Figura 1.1). Em cristais fotônicos não magnéticos, a permeabilidade magnética do meio é igual a permeabilidade do vácuo, isto é, igual a 1. Sendo assim, a permissividade elétrica é o quadrado do índice de refração do meio. Devido à periodicidade espacial dos cristais fotônicos, os modos de propagação satisfazem a condição de Bloch. Dessa maneira, a frequência de propagação depende do vetor de onda, como ocorre com os níveis de energia eletrônicos num material

cristalino. De fato, existe um conjunto infinito dessas funções que são chamadas de bandas. Também em analogia com o caso eletrônico, podem existir intervalos de frequência que não correspondem a nenhum modo de propagação. Cada um desses intervalos de frequências proibidas é chamado de gap fotônico.

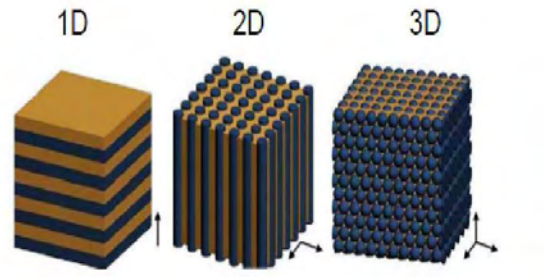


Figura 1.1: Representação esquemática de cristais fotônicos com periodicidades uni, bi e tridimensionais (ver Ref. [9]).

Historicamente, os cristais fotônicos foram chamados pela primeira vez dessa maneira em 1987 por Yablonovitch [10], que estabeleceu o conceito de gap fotônico. Esses cristais podem ser encontrados na natureza (ver Figura 1.2) [11] e são muito utilizados na construção de espelhos de Bragg, switches (comutadores), filtros ópticos, superprismas, guias de ondas, ressonadores ópticos e outros dispositivos ópticos. Paquet *et al.* [9] reportaram exemplos de cristais fotônicos formados por polímeros (ver Figura 1.3).

Como os modos naturais de propagação das ondas eletromagnéticas são funções de Bloch, é pertinente definir as funções de Wannier correspondentes. Devido ao seu caráter localizado, elas podem ser úteis no estudo de modos fotônicos localizados. Com base nessa ideia, alguns trabalhos que utilizam funções de Wannier na modelagem de cristais fotônicos foram publicados. Dentre eles podemos citar o artigo publicado por Leung, em 1993, onde são calculados modos localizados para estruturas de banda fotônicas através da função de Green e da função de Wannier vetorial [12]. Um trabalho sobre funções de Wannier de localização máxima para cristais fotônicos foi apresentado em 2003 por Whittaker e Croucher [13]. Em 2007, funções de Wannier foram utilizadas por Sotirelis e Albrecht [14] para simular numericamente modos localizados em cristais fotônicos.

Em particular, para o caso unidimensional, Talanina e de Sterke [15], em 2000, também apresentaram seus estudos sobre a utilização de funções de Bloch e Wannier para estru-

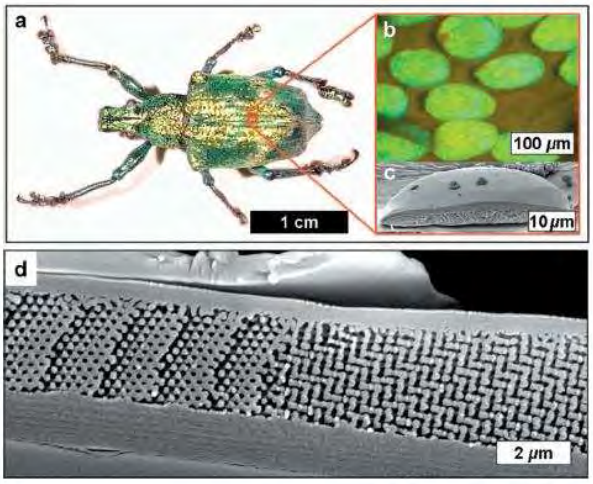


Figura 1.2: (a) Imagem do besouro brasileiro *Lamprocyphus augustus* que apresenta em sua carapaça um exemplo de cristal fotônico (ver Ref. [11]). (b) Fotografia obtida por microscopia óptica de escamas individuais presas ao exoesqueleto do besouro sob iluminação natural. (c) Imagem obtida por SEM (Scanning Electron Microscopy) da secção transversal de uma escama. (d) Detalhe da secção transversal de uma parte da escama.

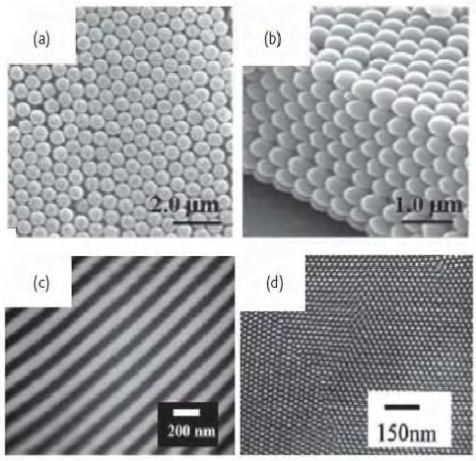


Figura 1.3: (a) Imagem obtida por SEM (Scanning Electron Microscopy) de um cristal de partículas esféricas de poliestireno com arranjo hexagonal (ver Ref. [9]). (b) Secção transversal do cristal descrito em (a). (c) Imagem obtida por TEM (Transmission Electron Microscopy) de um filme de poli(estireno-b-isopreno)(PS-b-PI), onde as regiões escuras correspondem ao PI e as regiões claras correspondem ao PS. Arranjo unidimensional. (d) Fragmento de um arranjo triangular de cilindros de PS em uma matriz de PI.

turas fotônicas periódicas (ver Figura 1.4). Nota-se, no entanto, que esses autores não analisam separadamente as funções magnéticas e elétricas. Um outro estudo importante foi reportado em 2010 por Muradoglu e Baghai-Wadji [16]. Eles investigaram as pro-

priedades das funções de Wannier em estruturas fotônicas. Na Figura 1.5 é possível observar que a segunda e a terceira funções de Wannier apresentam localização fraca. Isso pode ser consequência de uma escolha inadequada da fase das funções de Bloch.

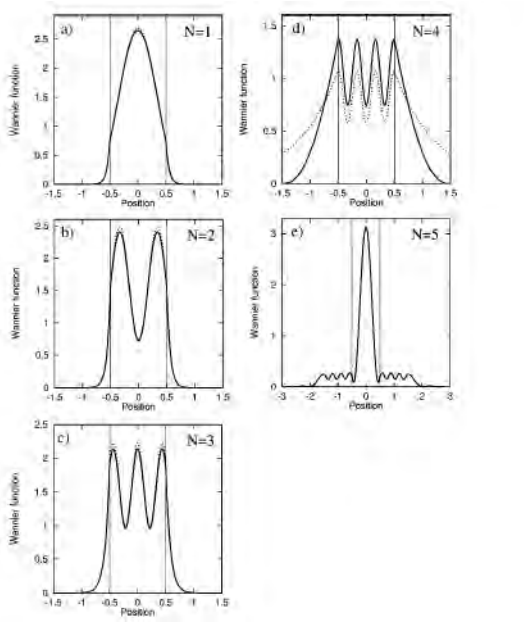


Figura 1.4: Funções de Wannier para as cinco primeiras bandas do cristal fotônico investigado por Talanina e de Sterke [15].

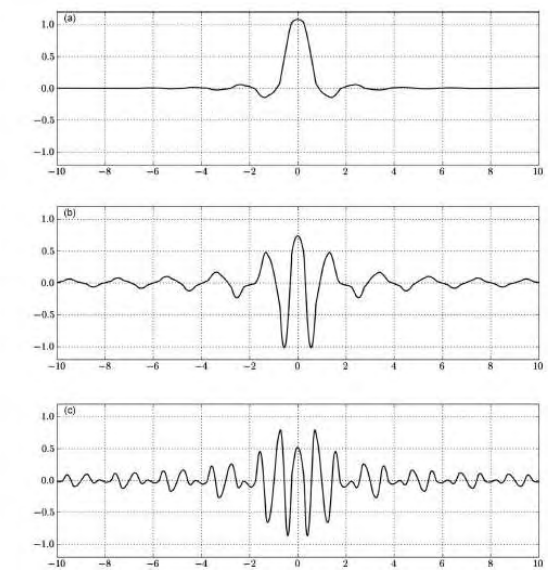


Figura 1.5: Funções de Wannier para as três primeiras bandas do cristal fotônico considerado por Muradoglu *et al.* [16].

Do estudo desses artigos concluímos que ainda seria necessário detalhar e aprofundar

mais o estudo de funções de Wannier fotônicas em uma dimensão. Além disso, seria importante apresentar aplicações dessas funções, por exemplo, na investigação dos modos localizados produzidos por defeitos presentes em cristais fotônicos. Esse problema tem sido abordado por outros autores. Em 1996, Miyazaki *et al.* [17] analizaram teoricamente o comportamento de cristais fotônicos que apresentam em sua estrutura defeitos específicos e interpretaram esses defeitos com uma analogia ao caso eletrônico, classificando-os como do tipo doador ou aceitador. Experimentalmente Armellini *et al.* [18] investigaram cristais fotônicos com uma camada de largura diferente do padrão do cristal, constituindo um defeito (ver Figura 1.6).

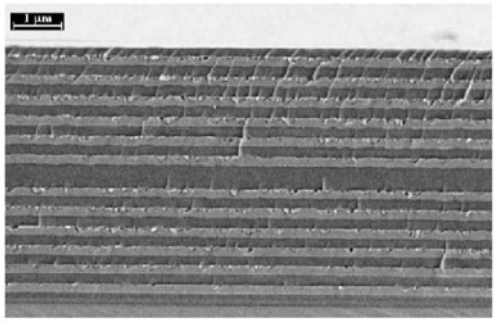


Figura 1.6: Imagem da seção transversal de uma amostra obtida por SEM. As regiões claras correspondem às camadas de TiO_2 e as regiões escuras, a SiO_2 (ver Ref. [18]) .

Esta Dissertação de Mestrado propõe, justamente, a utilização das funções de Wannier para investigar cristais fotônicos unidimensionais. A partir da definição da equação de ondas para esses cristais, mostrada no segundo capítulo, são utilizadas matrizes de transferência para determinar as frequências de ondas elétricas e magnéticas permitidas e proibidas para o cristal fotônico.

No terceiro capítulo, é apresentada a teoria das funções de Wannier para cristais fotônicos e, partindo das funções de Bloch magnéticas e elétricas, são classificadas as bandas de frequência de acordo com Bruno-Alfonso *et al.* [5]. Com isso, torna-se possível prever a paridade e centro de simetria das funções de Wannier eletromagnéticas, antes de calculá-las.

Os gráficos e a simetria das funções de Wannier para cristais fotônicos são mostrados no quarto capítulo. Nesse capítulo também é analisado o comportamento assintótico das funções de Wannier calculadas.

Depois de fundamentar a teoria das funções de Wannier para cristais fotônicos, no

quinto e sexto capítulos, são calculados os modos localizados devidos à presença de um defeito no cristal fotônico, primeiramente utilizando matriz de transferência e depois, funções de Wannier. O comportamento assintótico dos modos localizados é estudado e por fim é feita a comparação dos resultados obtidos mediante os dois métodos de cálculo.

Convém salientar que os principais resultados apresentados até o Capítulo 4 foram publicados recentemente pelo nosso grupo de pesquisa na revista Journal of Physics B [19]. Parte dos resultados do Capítulo 5 reproduzem gráficos reportados por outros autores, mas a abordagem matemática é original e os gráficos dos perfis de campo magnético são inéditos. O Capítulo 6 contém fundamentalmente resultados inéditos.

Capítulo 2

Equação de ondas para cristais fotônicos

2.1 Introdução

Os cristais fotônicos unidimensionais investigados nesse trabalho são formados por camadas alternadas de dois materiais homogêneos. Para esses cristais é possível obter a equação de ondas (Seção 2.2) e trabalhar com a matriz de transferência para encontrar as funções que dão os perfis dos campos magnético e elétrico (Seção 2.3). Além disso, o semi-traço da matriz que transfere os valores dos campos ao longo de um período permite encontrar as faixas de frequências proibidas e permitidas para o cristal fotônico em questão. Por fim, na Seção 2.4, é discutida a ortogonalidade e normalização das funções de Bloch.

2.2 Equação de ondas

As camadas do cristal fotônico estudado neste trabalho são chamadas de A e B, e estão empilhadas ao longo do eixo z (ver Figura 2.1), lembrando que alguns cristais fotônicos também podem ser formados através de técnicas de crescimento como *sputtering*, por exemplo [18]. O plano xy separa uma camada B (à esquerda) de uma camada A (à direita). A largura e a permissividade da camada A (B) é dada por d_A (d_B) e ϵ_A (ϵ_B), respectivamente. Portanto, o tamanho da célula unitária é $a = d_A + d_B$. Além disso, consideramos um cristal fotônico não magnético, i.e., assumimos a permeabilidade

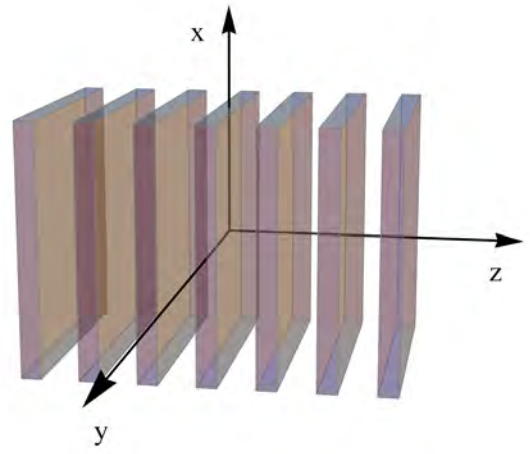


Figura 2.1: Ilustração do cristal fotônico 1D.

magnética como sendo $\mu(z) = 1$ para todos os valores de z.

Na ausência de cargas e correntes livres, as intensidades e induções do campo eletromagnético satisfazem as equações de Maxwell (ver Apêndice A):

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{D} = 0, \tag{2.1}$$

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{B} = 0, \tag{2.2}$$

$$\vec{\nabla} \times \vec{E} = -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t} \tag{2.3}$$

e

$$\vec{\nabla} \times \vec{H} = \frac{\partial \vec{D}}{\partial t}. \tag{2.4}$$

A resposta do meio óptico ao campo aplicado é considerada linear e isotrópica. Com isso, a relação entre as componentes elétricas e magnéticas são descritas pela permissividade dielétrica relativa $\epsilon(z)$ e pela permeabilidade magnética relativa $\mu(z)$. Isto é, $\vec{D} = \epsilon(z)\epsilon_0\vec{E}$ e $\vec{B} = \mu(z)\mu_0\vec{H}$, onde ϵ_0 e μ_0 são os valores da permissividade e da permeabilidade do vácuo. Devido à periodicidade ao longo do eixo z, a permissividade dielétrica satisfaz $\epsilon(z + a) = \epsilon(z)$.

Para investigar a propagação das ondas monocromáticas, separamos a parte espacial da parte temporal do campo eletromagnético da seguinte forma: $\vec{E}(\vec{r}, t) = e^{-i\omega t}\vec{E}(\vec{r})$ e

$\vec{H}(\vec{r},t) = e^{-i\omega t}\vec{H}(\vec{r})$. Como

$$\epsilon_0\mu_0 = \frac{1}{c^2}, \tag{2.5}$$

a parte espacial do campo eletromagnético satisfaz:

$$\vec{\nabla} \times \left(\frac{1}{\epsilon(z)}\,\vec{\nabla} \times \vec{H}(\vec{r})\right) = \left(\frac{\omega}{c}\right)^2 \vec{H}(\vec{r}) \tag{2.6}$$

e

$$\vec{E}(\vec{r}) = \frac{i}{\omega\epsilon_0\epsilon(z)}\,\vec{\nabla} \times \vec{H}(\vec{r}). \tag{2.7}$$

Se a propagação da onda se dá através de um meio não-magnético homogêneo com permissividade constante ϵ, então:

$$\nabla^2\vec{H} + \left(\frac{\omega}{v}\right)^2 \vec{H} = \vec{0}, \tag{2.8}$$

onde $v = c/\sqrt{\epsilon}$ é a velocidade da luz no meio. Além disso, as soluções naturais são ondas planas, de vetor de onda $\vec{k}$, com $\omega = v|\vec{k}|$ e

$$\vec{H}(\vec{r}) = \vec{u}_0\, e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}},$$

em que o vetor $\vec{u}_0$ é constante e determina a amplitude e polarização da onda.

No cristal fotônico, devido à periodicidade de $\epsilon(z)$, o campo magnético tem a forma de uma onda plana modulada por uma função $\vec{u}(\vec{r})$, que tem a periodicidade de $\epsilon(z)$. Isto é,

$$\vec{H}(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}\,\vec{u}(\vec{r}). \tag{2.9}$$

Por sua vez, isso equivale à condição de Bloch, expressa por:

$$\vec{H}(\vec{r}+\vec{R}) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}}\vec{H}(\vec{r}), \tag{2.10}$$

para todo vetor de translação $\vec{R}$ que leve o cristal nele mesmo.

Quando a propagação da onda ocorre ao longo da direção de empilhamento das camadas, $\vec{k} = k\vec{e}_z$, a polarização das ondas pode ser escolhida como $\vec{H}(\vec{r}) = H_0\sqrt{a}\; h(z)\,\vec{e}_y$, onde H_0 é um valor característico da intensidade do campo magnético. Desta forma, a função $h(z)$ dá o perfil do campo magnético e tem as dimensões físicas de uma densidade de probabilidade. Além disso, a condição de Bloch toma a forma $h(z+a) = e^{ika}\,h(z)$. De acordo com (2.7), o campo elétrico é $\vec{E}(\vec{r}) = E(z)\,\vec{e}_x$, onde

$$E(z) = -\frac{i\,H_0\,\sqrt{a}\,f(z)}{c\,\epsilon_0}, \tag{2.11}$$

com

$$f(z) = \frac{c\,h'(z)}{\omega\,\epsilon(z)}. \tag{2.12}$$

Esta função tem as mesmas dimensões físicas que $h(z)$ e também satisfaz uma condição de Bloch: $f(z+a) = e^{ika}\,f(z)$. Além disso, usando a equação de ondas (2.6) podemos escrever

$$-\,f'(z) = \frac{\omega}{c}\,h(z). \tag{2.13}$$

2.3 Matriz de transferência e bandas de frequências permitidas

A partir de (2.12) e (2.13) vemos que o vetor $\begin{pmatrix} h(z) \\ f(z) \end{pmatrix}$ satisfaz a seguinte equação diferencial de primeira ordem:

$$\frac{d}{dz}\begin{pmatrix} h(z) \\ f(z) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & \epsilon(z)\omega/c \\ -\omega/c & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} h(z) \\ f(z) \end{pmatrix}. \tag{2.14}$$

Consequentemente, para cada par (z_0, z), os valores de $h(z)$ e $f(z)$ dependem linearmente de $h(z_0)$ e $f(z_0)$. A matriz dessa transformação linear é denotada $\mathbf{T}(\omega, z, z_0)$, satisfaz

$$\begin{pmatrix} h(z) \\ f(z) \end{pmatrix} = \mathbf{T}(\omega, z, z_0)\begin{pmatrix} h(z_0) \\ f(z_0) \end{pmatrix}, \tag{2.15}$$

e é chamada de matriz de transferência [20].

Para um cristal fotônico formado por camadas homogêneas, é relativamente simples obter a matriz de transferência entre z_0 e z. De fato, os pontos z_0 e z são sempre separados por uma ou mais regiões onde a permissividade permanece constante. Da esquerda para a direita, vamos denotar por T_i a matriz de transferência entre os extremos da esquerda e da direita da i-ésima região, com $i = 1, \ldots, m$. Sabendo que as funções $h(z)$ e $f(z)$ devem ser contínuas nas interfaces [21], para que possam ser diferenciáveis, obtemos

$$\mathbf{T}(\omega, z, z_0) = \mathbf{T}_m \cdot \mathbf{T}_{m-1} \cdot \ldots \cdot \mathbf{T}_2 \cdot \mathbf{T}_1. \tag{2.16}$$

A mesma equação pode ser aplicada para $z_0 > z$, desde que T_i transfira agora da direita para a esquerda. Assim, tudo que precisamos é uma expressão para a matriz de transferência entre dois pontos z e $z + \Delta z$ dentro de uma região de permissividade ϵ_L, em que

L pode ser A ou B. Essa matriz de transferência pode ser escrita como (ver Apêndice B):

$$\mathbf{T}_L(\omega, \Delta z) = \begin{pmatrix} \cos(\frac{\omega\sqrt{\epsilon_L}\Delta z}{c}) & \sqrt{\epsilon_L}\,\mathrm{sen}(\frac{\omega\sqrt{\epsilon_L}\Delta z}{c}) \\ -\frac{1}{\sqrt{\epsilon_L}}\,\mathrm{sen}(\frac{\omega\sqrt{\epsilon_L}\Delta z}{c}) & \cos(\frac{\omega\sqrt{\epsilon_L}\Delta z}{c}) \end{pmatrix}. \tag{2.17}$$

Para obter uma relação entre a frequência e o vetor de onda, é útil considerar a matriz $\mathbf{M}$ que transfere os valores do campo através da célula unitária (ver Figura 2.2), com

$$\mathbf{M}(\omega) = \mathbf{T}(\omega, a, 0) = \mathbf{T}_B(\omega, d_B) \cdot \mathbf{T}_A(\omega, d_A). \tag{2.18}$$

Levando em conta a condição de Bloch, essa matriz satisfaz:

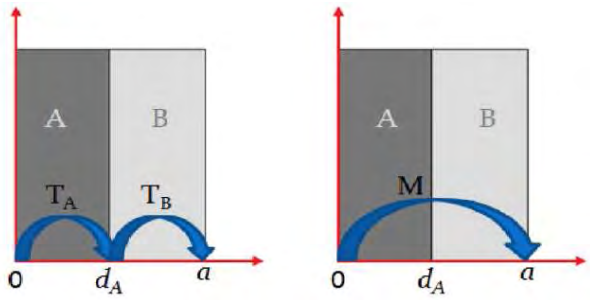


Figura 2.2: Representação esquemática da matriz $\mathbf{M}(\omega)$ que transfere os valores do campo através da célula unitária que consiste de camadas A e B.

$$\begin{pmatrix} h(a) \\ f(a) \end{pmatrix} = \mathbf{M}(\omega) \begin{pmatrix} h(0) \\ f(0) \end{pmatrix} = e^{ika} \begin{pmatrix} h(0) \\ f(0) \end{pmatrix}. \tag{2.19}$$

Como $h(0)$ e $f(0)$ não podem ser simultaneamente nulos, a relação entre ω e k é dada por:

$$\cos(ka) = R(\omega), \tag{2.20}$$

onde $R(\omega)$ é o semi-traço de $\mathbf{M}(\omega)$, i.e.,

$$\begin{aligned} R(\omega) &= \left[M_{11}(\omega) + M_{22}(\omega)\right]/2 \\ &= \cos(\omega\,\tau_A)\cos(\omega\,\tau_B) - \frac{1}{2}\left(\sqrt{\frac{\epsilon_A}{\epsilon_B}} + \sqrt{\frac{\epsilon_B}{\epsilon_A}}\right)\mathrm{sen}(\omega\,\tau_A)\;\mathrm{sen}(\omega\,\tau_B), \end{aligned} \tag{2.21}$$

com $\tau_A = d_A\sqrt{\epsilon_A}/c$ e $\tau_B = d_B\sqrt{\epsilon_B}/c$ sendo os tempos em que a luz atravessa as camadas A e B, respectivamente. Nesse ponto, salientamos que a forma das bandas de frequência e as funções de Wannier que serão mostradas neste trabalho são determinadas pelos valores das permissividades ϵ_A e ϵ_B e pela razão entre as espessuras das camadas, isto é, d_B/d_A.

Portanto, as frequências calculadas mudam de escala proporcionalmente ao inverso do tamanho da célula unitária.

A função $R(\omega)$ oscila como ilustrado na Figura 2.3. Notamos que as frequências onde $|R(\omega)| > 1$ são proibidas para a propagação de ondas ao longo do cristal. Assim, para cada vetor de onda k na primeira zona de Brillouin, i.e., $-\pi/a < k \leq \pi/a$, a equação (2.20) define implicitamente uma sequência infinita de funções $\omega_j(k)$, com $j = 1, 2, \ldots$. Essas funções são as bandas de frequência. As funções de Bloch magnéticas e elétricas da j-ésima banda são denotadas por $h_{j,k}(z)$ e $f_{j,k}(z)$, respectivamente.

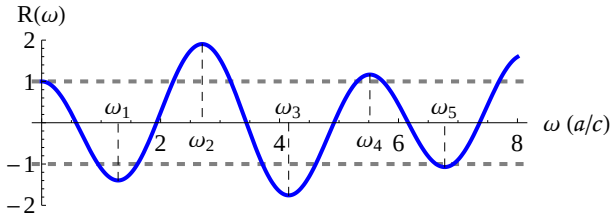


Figura 2.3: O semi-traço $R(\omega)$ da matriz $\mathbf{M}(\omega)$ que transfere os valores do campo através da célula unitária do cristal fotônico, como uma função da frequência da onda. A célula unitária consiste de camadas A e B de igual espessura e permissividades dielétricas $\epsilon_A = 13$ e $\epsilon_B = 1$, respectivamente. O período do cristal é a. As linhas verticais marcam os zeros de $R'(\omega)$.

2.4 Ortonormalização das funções de Bloch

A respeito da ortogonalidade e normalização das funções de Bloch, é importante notar que $h_{j,k}(z)$ e $f_{j,k}(z)$ satisfazem diferentes equações diferenciais de segunda ordem. De um lado, as funções de Bloch magnéticas satisfazem a seguinte equação de auto-valores:

$$\hat{L}\, h_{j,k}(z) = \frac{\omega_j^2(k)}{c^2}\, h_{j,k}(z). \tag{2.22}$$

com

$$\hat{L} = -\frac{d}{dz}\frac{1}{\epsilon(z)}\frac{d}{dz}. \tag{2.23}$$

Dessa maneira, o operador diferencial, $\hat{L}$, dessa equação é hermitiano [22] e as funções $h_{j,k}(z)$ com diferentes valores de j podem ser escolhidas como sendo ortogonais. Além disso as funções de Bloch magnéticas são convenientemente normalizadas à unidade sobre a célula unitária. Com isso, temos

$$\int_0^a h^*_{j,k}(z) h_{j',k}(z)\, dz = \delta_{j,j'}. \tag{2.24}$$

Consequentemente, a normalização em todo o cristal se dá por

$$\int_{-\infty}^{+\infty} h^*_{j,k}(z) h_{j',k'}(z)\, dz = \delta_{j,j'} \frac{2\pi}{a} \delta(k' - k). \tag{2.25}$$

Por outro lado, a função de Bloch elétrica satisfaz a seguinte equação de auto-valores:

$$-\frac{1}{\epsilon(z)} \frac{d^2}{dz^2} f_{j,k}(z) = \frac{\omega_j^2(k)}{c^2} f_{j,k}(z). \tag{2.26}$$

Desta vez, o operador diferencial não é hermitiano. De acordo com (2.12), (2.13) e (2.24), a condição de ortonormalização correspondente é

$$\int_0^a f^*_{j,k}(z) f_{j',k}(z) \epsilon(z)\, dz = \delta_{j,j'}. \tag{2.27}$$

É importante lembrar que as funções de Bloch não são únicas, podendo ser multiplicadas por um fator independente de z, mas dependente de k, e ainda assim satisfazer a equação de ondas e a condição de Bloch.

2.5 Conclusões do capítulo

Neste capítulo foram apresentadas as características básicas dos cristais fotônicos que serão estudados nesta dissertação. Foi apresentada a equação de ondas para cristais fotônicos. A matriz de transferência foi utilizada para obter os perfis dos campos magnético e elétrico. O semi-traço da matriz que transfere o valor dos campos magnético e elétrico ao longo de um período permite calcular as frequências proibidas para a propagação de ondas no cristal fotônico estudado. Também concluímos que as funções de Bloch magnética e elétrica satisfazem equações de auto-valores, porém a primeira tem operador diferencial hermitiano, equanto que a segunda tem operador diferencial não-hermitiano. Veremos no próximo capítulo como escolher as funções de Bloch para otimizar a localização das funções de Wannier.

Capítulo 3

Funções de Wannier para cristais fotônicos unidimensionais

3.1 Introdução

No capítulo anterior tratamos das funções de Bloch dos campos magnético e elétrico. A partir delas calcularemos, neste capítulo, as funções de Wannier. Essas funções são os coeficientes de Fourier das funções de Bloch. Como as funções de Bloch não são únicas, veremos como fazer a escolha delas que garante a máxima localização das funções de Wannier. Estudaremos também a simetria das funções de Wannier magnéticas e elétricas e sua relação com a simetria das funções de Bloch.

3.2 Teoria das funções de Wannier para cristais fotônicos unidimensionais com simetria de inversão

As funções de Bloch do campo magnético e do campo elétrico estudadas no capítulo anterior permitem calcular as funções de Wannier magnética, $w_{j,n}^{(h)}(z)$, e elétrica, $w_{j,n}^{(f)}(z)$. A função de Wannier magnética da n-ésima célula e da j-ésima banda é dada por $w_{j,n}^{(h)}(z) = w_j^{(h)}(z - na)$, onde [23]

$$w_j^{(h)}(z) = \frac{a}{2\pi} \int_{-\pi/a}^{\pi/a} h_{j,k}(z)\, dk, \tag{3.1}$$

isto é, as funções de Wannier da j-ésima banda são os coeficientes de Fourier das funções de Bloch, as quais são periódicas no espaço recíproco, ou seja,

$$h_{j,k}(z) = \sum_{n \in Z} w_{j,n}^{(h)} e^{iknd}. \tag{3.2}$$

Como uma consequência de (2.24), as funções de Wannier magnéticas satisfazem a condição de ortonormalização [24]

$$\int_{-\infty}^{+\infty} [w_{j,n}^{(h)}(z)]^* w_{j',n'}^{(h)}(z) dz = \delta_{j,j'} \delta_{n,n'}. \tag{3.3}$$

No caso do cristal com simetria de inversão, a função de Wannier também é simétrica ou antissimétrica em relação a um dos centros de inversão do cristal [4]. Aqui escolhemos a fase de $h_{j,k}(z)$ mediante adaptação do método reportado por Bruno-Alfonso e Hai [5], para o caso eletromagnético. Levando em conta a simetria de inversão do cristal fotônico, é útil trabalhar com a matriz $\mathbf{S}(\omega) = \mathbf{T}(\omega, z_B, z_A)$. Esta é a matriz de transferência de z_A (o centro da camada A) para z_B (o centro da camada B à direita da camada A), como mostrado na Figura 3.1. A partir disso, obtemos $\mathbf{S}(\omega) = \mathbf{T}_B(\omega, d_B/2) \cdot \mathbf{T}_A(\omega, d_A/2)$, cujos elementos têm a seguinte forma:

$$S_{11}(\omega) = \cos\left(\frac{\omega\,\tau_B}{2}\right)\cos\left(\frac{\omega\,\tau_A}{2}\right) - \frac{\sqrt{\epsilon_B}}{\sqrt{\epsilon_A}}\,\mathrm{sen}\left(\frac{\omega\,\tau_B}{2}\right)\,\mathrm{sen}\left(\frac{\omega\,\tau_A}{2}\right), \tag{3.4}$$

$$S_{12}(\omega) = \sqrt{\epsilon_A}\cos\left(\frac{\omega\,\tau_B}{2}\right)\,\mathrm{sen}\left(\frac{\omega\,\tau_A}{2}\right) + \sqrt{\epsilon_B}\,\mathrm{sen}\left(\frac{\omega\,\tau_B}{2}\right)\cos\left(\frac{\omega\,\tau_A}{2}\right), \tag{3.5}$$

$$S_{21}(\omega) = -\frac{1}{\sqrt{\epsilon_B}}\,\mathrm{sen}\left(\frac{\omega\,\tau_B}{2}\right)\cos\left(\frac{\omega\,\tau_A}{2}\right) - \frac{1}{\sqrt{\epsilon_A}}\cos\left(\frac{\omega\,\tau_B}{2}\right)\,\mathrm{sen}\left(\frac{\omega\,\tau_A}{2}\right) \tag{3.6}$$

e

$$S_{22}(\omega) = \cos\left(\frac{\omega\,\tau_B}{2}\right)\cos\left(\frac{\omega\,\tau_A}{2}\right) - \frac{\sqrt{\epsilon_A}}{\sqrt{\epsilon_B}}\,\mathrm{sen}\left(\frac{\omega\,\tau_B}{2}\right)\,\mathrm{sen}\left(\frac{\omega\,\tau_A}{2}\right). \tag{3.7}$$

Esses elementos matriciais são mostrados em função da frequência na Figura 3.2.

As bordas das bandas ocorrem nas frequências que anulam algum dos termos da matriz $\mathbf{S}(\omega)$ (ver Ref. [5]). Além disso, cada termo é associado com um tipo de simetria das funções de Bloch magnéticas (ver Figura 3.3). De fato, as funções de Bloch do ponto Γ

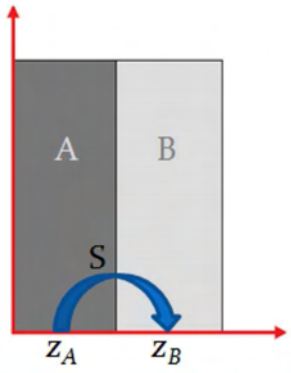


Figura 3.1: Representação esquemática da matriz $\mathbf{S}(\omega)$ que transfere os valores do campo entre os centros de camadas A e B consecutivas no cristal fotônico.

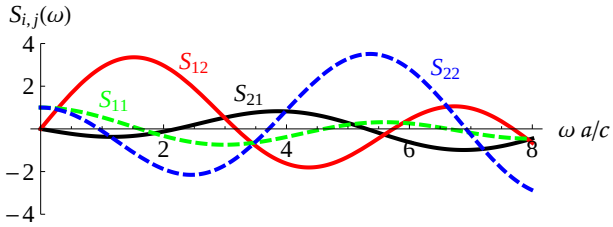


Figura 3.2: Os elementos da matriz $\mathbf{S}(\omega)$ que transfere os valores do campo entre os centros de camadas A e B consecutivas no cristal fotônico, como uma função da frequência da onda. Os parâmetros do cristal são os mesmos da Figura 2.3.

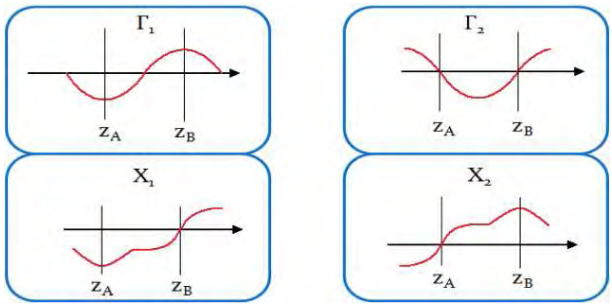


Figura 3.3: Representação esquemática das simetrias das funções de Bloch. Se for do tipo Γ_1 (Γ_2), então a função de Bloch é par (ímpar) em z_A e z_B. Quando do tipo X_1 (X_2), ela é par em z_A e ímpar em z_B (ímpar em z_A e par em z_B).

($k = 0$) têm a mesma simetria em todos os centros de inversão. As funções pares (ímpares) são classificadas como modos Γ_1 (Γ_2) e correspondem aos zeros de S_{21} (S_{12}). Por sua vez, as funções de Bloch do ponto X ($k = \pi/a$) têm diferentes simetrias em centros de inversão consecutivos. Se a função é par (ímpar) sobre o centro da camada A, ela é classificada como um modo X_1 (X_2) e corresponde a $S_{11} = 0$ ($S_{22} = 0$). Essas classificações estão

descritas na Figura 3.4. Com isso, cada banda é de um dos seguintes tipos: $\Gamma_1 - X_1$, $\Gamma_2 - X_2$, $\Gamma_1 - X_2$, ou $\Gamma_2 - X_1$.

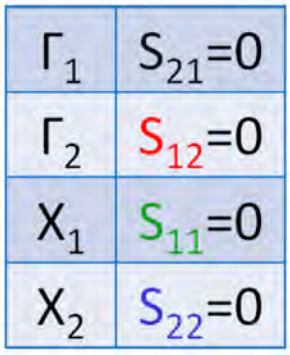


Figura 3.4: Classificação dos modos de acordo com as raízes dos elementos da matriz $\mathbf{S}(\omega)$.

Segundo a equação (2.15), dados o valor de ω e os valores iniciais de $h(z_0)$ e $f(z_0)$ num ponto z_0, escolhido convenientemente, é fácil calcular os perfis de $h(z)$ e $f(z)$. Seguindo a referência [5], a escolha de z_0 e dos valores iniciais $h(z_0)$ e $f(z_0)$ para as funções de Bloch de cada tipo de banda é dada na segunda e na terceira colunas da Tabela 3.1. Desta maneira, as funções de Wannier magnéticas são reais e satisfazem a condição de ortonormalização (3.3). Além disso, elas apresentam a máxima localização possível, ou seja, mínima variância [23]. A simetria da função de Wannier correspondente é prevista na quarta coluna. Por um lado, $w^{(h)}(z)$ é par em $z = z_A$ ($z = z_B$) para bandas do tipo $\Gamma_1 - X_1$ ($\Gamma_1 - X_2$). Por outro, $w^{(h)}(z)$ é ímpar em $z = z_A$ ($z = z_B$) para as bandas classificadas como $\Gamma_2 - X_2$ ($\Gamma_2 - X_1$).

Já as funções de Wannier elétricas são obtidas a partir das funções de Bloch elétricas, $f_{j,k}(z)$. Em analogia com as funções de Wannier magnéticas, a função de Wannier elétrica da n-ésima célula e da j-ésima banda é dada por $w^{(f)}_{j,n}(z) = w^{(f)}_j(z - na)$, onde

$$w^{(f)}_j(z) = \frac{a}{2\pi} \int_{-\pi/a}^{\pi/a} f_{j,k}(z)\, dk. \tag{3.8}$$

Agora, segundo (2.27), as funções de Wannier elétricas satisfazem a condição de ortonormalização [24]

$$\int_{-\infty}^{+\infty} [w^{(f)}_{j,n}(z)]^* w^{(f)}_{j',n'}(z)\, \epsilon(z) dz = \delta_{j,j'}\delta_{n,n'}. \tag{3.9}$$

Escolhendo as condições iniciais dadas na Tabela 3.1, as funções de Wannier elétricas são reais e satisfazem (3.9).

Tipo de Banda	$h(z_A)$	$f(z_A)$	$w^{(h)}(z)$	$w^{(f)}(z)$
Γ_1−X_1	$\sqrt{-\frac{S_{12}S_{22}}{\beta_k}}$	$\frac{\alpha_k h(z_A)}{S_{12}S_{22}}$	par em $z = z_A$	ímpar em $z = z_A$
Γ_2−X_2	$\frac{\alpha_k f(z_A)}{S_{21}S_{11}}$	$\sqrt{\frac{S_{21}S_{11}}{\beta_k}}$	ímpar em $z = z_A$	par em $z = z_A$
Tipo de Banda	$h(z_B)$	$f(z_B)$	$w^{(h)}(z)$	$w^{(f)}(z)$
Γ_1−X_2	$\sqrt{-\frac{S_{11}S_{12}}{\beta_k}}$	$\frac{\alpha_k h(z_B)}{S_{11}S_{12}}$	par em $z = z_B$	ímpar em $z = z_B$
Γ_2−X_1	$\frac{\alpha_k f(z_B)}{S_{22}S_{21}}$	$\sqrt{\frac{S_{22}S_{21}}{\beta_k}}$	ímpar em $z = z_B$	par em $z = z_B$

Tabela 3.1: Escolha dos valores iniciais de $h(z)$ e $f(z)$ para as funções de Bloch de cada banda de acordo com o tipo de banda. Os tipos são definidos pela classificação das funções de Bloch magnéticas das bordas das bandas como Γ_1, Γ_2, X_1 e X_2. As quarta e quinta colunas dão a simetria das funções de Wannier magnéticas e elétricas, respectivamente. A matriz $\mathbf{S}(\omega)$ transfere os valores do campo de z_A para z_B, que são os centros de inversão de duas camadas consecutivas A e B, respectivamente. Além disso, $\alpha_k = i\,\mathrm{sen}(ka)/2$ e $\beta_k = cR'(\omega)/2$.

Também, de acordo com (2.12), quando uma função de Bloch magnética é simétrica ou antissimétrica num ponto dado do cristal, a função elétrica apresenta o tipo oposto de simetria. Isto significa que as funções de Bloch magnéticas dos tipos Γ_1, Γ_2, X_1 e X_2 correspondem às funções de Bloch elétricas dos tipos Γ_2, Γ_1, X_2 e X_1, respectivamente. Dessa maneira, a simetria das funções de Wannier elétricas podem ser previstas pela quinta coluna da Tabela 3.1. Notamos que as funções de Wannier magnéticas e elétricas de cada banda compartilham o mesmo centro de inversão, mas têm diferentes simetrias de inversão.

Adicionalmente, vale ressaltar que trabalhamos convenientemente com $f(z)$ ao invés de $E(z)$ [ver (2.11)]. As principais razões são: (i) $f(z)$ tem as unidades de $h(z)$, (ii) as equações com $f(z)$ são mais simples que as equações com $E(z)$, e (iii) as funções de Wannier de $f(z)$ são reais, enquanto as de $E(z)$ são puramente imaginárias [24].

3.3 Conclusões do capítulo

Neste capítulo mostramos como calcular as funções de Wannier magnética e elétrica para cristais fotônicos unidimensionais. Através da matriz que transfere do centro de uma das camadas até o centro da camada consecutiva, podemos prever os centros de simetria

das funções de Wannier. Vimos que as funções de Wannier elétrica e magnética possuem simetrias opostas no mesmo centro de inversão do cristal.

Capítulo 4

Gráficos e propriedades das funções de Wannier para cristais fotônicos com simetria de inversão

4.1 Introdução

Após definidas as funções de Wannier de localização máxima para cristais fotônicos e seus respectivos centros de simetria e tipo de paridade, expomos neste capítulo os gráficos para as seis primeiras bandas de frequência de um cristal fotônico unidimensional com simetria de inversão. Como veremos, as funções calculadas mostram as simetrias esperadas e decaimento exponencial ou em forma de potência.

4.2 Gráficos e simetria das funções de Wannier para cristais fotônicos com simetria de inversão

Foram calculadas as seis primeiras bandas de frequência e suas correspondentes funções de Wannier para um cristal fotônico com uma célula unitária contendo as camadas A e B de igual largura e permissividades $\epsilon_A = 13$ e $\epsilon_B = 1$ (que é a permissividade do ar), respectivamente. A escolha desses parâmetros é baseada na literatura [25], onde $\epsilon_A = 13$ corresponde, aproximadamente, à permissividade do GaAs, além disso, esse valor apresenta um bom contraste com com o valor da permissividade do ar. A Figura 4.1

mostra a frequência como uma função do vetor de onda, dentro da primeira zona de Brillouin. As faixas de frequência proibida (gaps) são indicadas pelas regiões sombreadas. Cada borda de banda é classificada de acordo com a simetria da função de Bloch. Assim, os tipos de banda podem ser facilmente obtidos. Por exemplo, a segunda e quarta (terceira e sexta) bandas são do tipo $\Gamma_1 - X_1$ ($\Gamma_2 - X_2$). A quinta banda é classificada como $\Gamma_2 - X_1$. É interessante notar que, como mostra a Figura 3.2, a borda inferior da primeira banda pode ser classificada tanto como Γ_1 quanto como Γ_2. Em analogia com o caso eletrônico [5], tomamos inicialmente essa borda como do tipo Γ_1. Então, a primeira banda é classificada como $\Gamma_1 - X_2$. Posteriormente será discutido como essa escolha afeta os resultados.

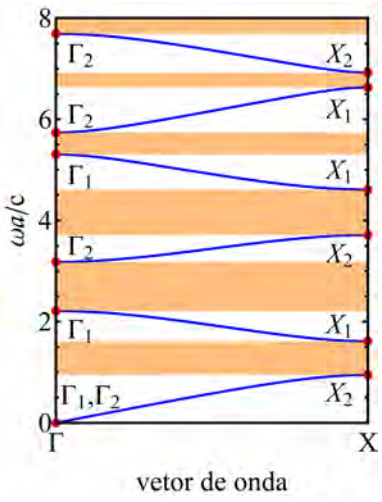


Figura 4.1: A frequência como uma função do vetor de onda. As faixas sombreadas indicam as frequências proibidas (gaps). As bordas das bandas são classificadas de acordo com a simetria das funções de Bloch.

A Figura 4.2 mostra as funções de Wannier magnéticas para as bandas exibidas e classificadas na Figura 4.1. De acordo com a classificação, a Tabela 3.1 nos dá o centro e tipo de simetria de cada função de Wannier. Por exemplo, para a primeira (quinta) banda, $w^{(h)}(z)$ deve ser par (ímpar) em $z = z_B$. As funções de Wannier da segunda e quarta banda (terceira e sexta) devem ser pares (ímpares) em $z = z_A$. A validade dessas últimas afirmações é mostrada na Figura 4.2, onde as regiões sombreadas indicam as camadas do material A e as linhas pontilhadas marcam o centro de cada função de Wannier.

As funções de Wannier elétricas das bandas da Figura 4.1 são mostradas na Figura 4.3. Por comparação com a Figura 4.2, verificamos que as funções de Wannier magnéticas e elétricas são centradas no mesmo ponto, porém têm diferentes tipos de simetria de

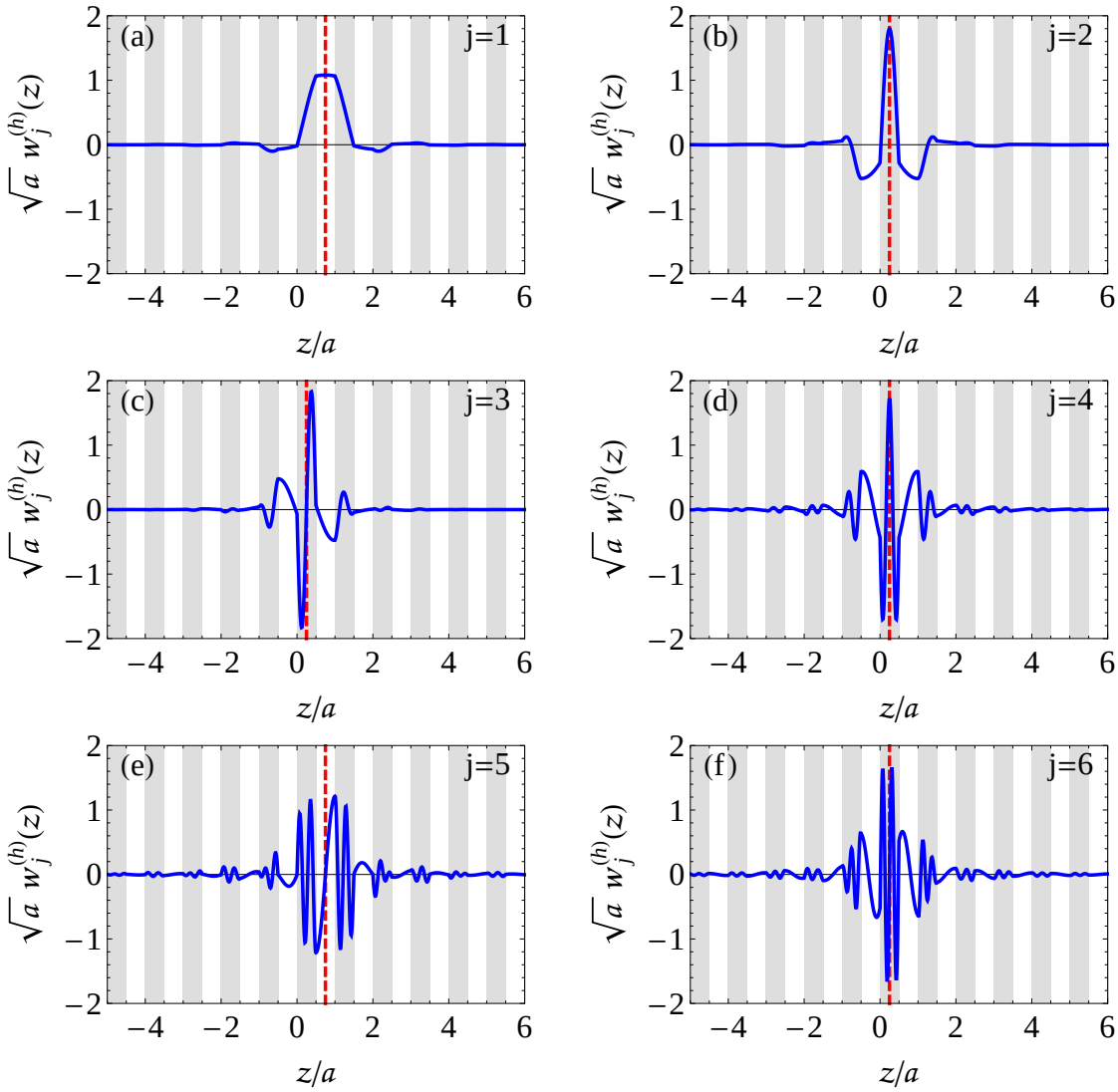


Figura 4.2: As funções de Wannier magnéticas das seis primeiras bandas do cristal fotônico. A borda inferior da primeira banda foi classificada como Γ_1. As regiões sombreadas correspondem ao material A. As linhas pontilhadas indicam o centro das funções.

inversão.

4.3 Comportamento assintótico das funções de Wannier para cristais fotônicos com simetria de inversão

A localização das funções de Wannier da primeira banda merece uma discussão detalhada. Para mostrar os diferentes tipos de decaimento mais claramente, investigamos

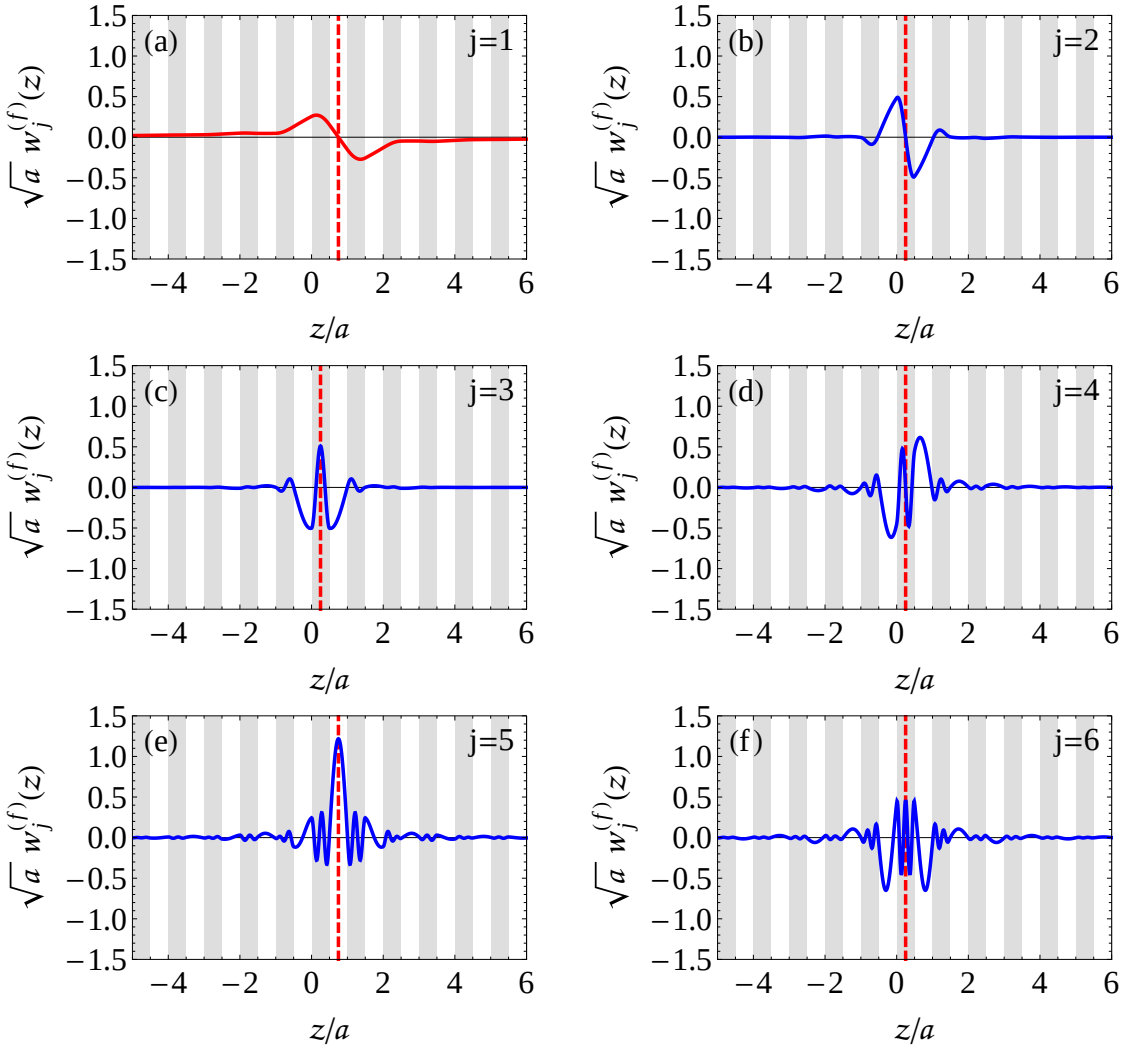


Figura 4.3: As funções de Wannier elétricas das seis primeiras bandas do cristal fotônico. A borda inferior da primeira banda foi classificada como Γ_1. As regiões sombreadas correspondem ao material A. As linhas pontilhadas indicam o centro das funções.

as quantidades de energias magnética e elétrica dentro de cada célula unitária do cristal. Tais quantidades são dadas pelas seguintes expressões:

$$\sigma_{j,n}^{(h)} = \int_{-a/2}^{a/2} |w_j^{(h)}(z_j + na + z)|^2 \, dz \tag{4.1}$$

e

$$\sigma_{j,n}^{(f)} = \int_{-a/2}^{a/2} |w_j^{(f)}(z_j + na + z)|^2 \epsilon(z) \, dz, \tag{4.2}$$

onde z_j é o centro comum de $w_j^{(h)}(z)$ e $w_j^{(f)}(z)$. O comportamento assintótico das funções de Wannier, para valores de n suficientemente grandes, pode ser descrito por [26]

$$w_j(z + na) \approx C_j(z) e^{-\beta_j n} n^{-\alpha_j}. \tag{4.3}$$

Assim, a raiz quadrada da energia na n-ésima célula unitária deve decair da mesma maneira. Isso nos dá a seguinte propriedade assintótica [26, 27]:

$$\ln \sqrt{\sigma_{j,n}/\sigma_{j,n+1}} \approx \beta_j + \alpha_j \ln\left(1 + 1/n\right). \tag{4.4}$$

Tal relação nos permite determinar os coeficientes α_j e β_j, correspondentes ao decaimento como lei de potência e ao decaimento exponencial, respectivamente, das funções de Wannier calculadas numericamente. No caso eletrônico [4, 26], o coeficiente exponencial da primeira banda é $\beta_1 = \operatorname{arccosh}[R(\omega_1)]$, onde ω_1 é a primeira raiz positiva de $R'(\omega)$ (ver Figura 2.3). Além disso, o expoente do decaimento em forma de lei de potência é $\alpha_1 = 3/4$ [26]. Esse tipo de comportamento assintótico também ocorre nos cristais fotônicos aqui estudados, sendo que $\beta_1 \approx 0.865$.

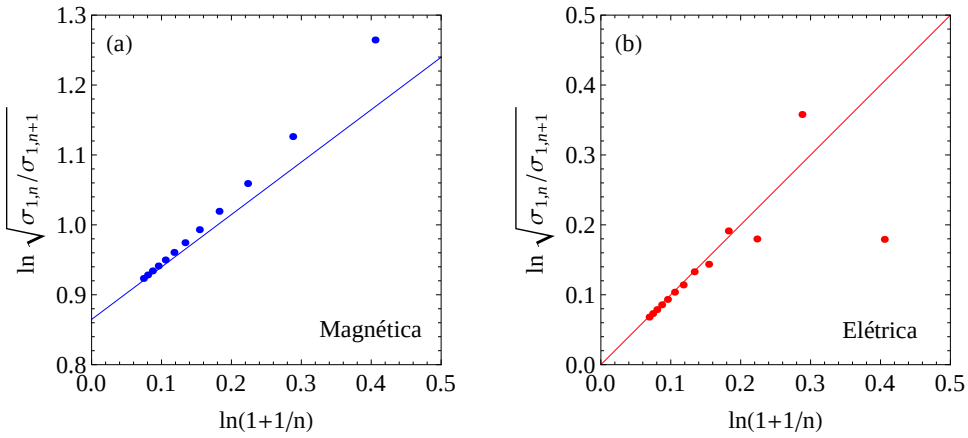


Figura 4.4: Logaritmo da raiz quadrada da razão entre as energias na n-ésima e $(n+1)$-ésima células como uma função de $\ln(1+1/n)$, para as funções de Wannier da primeira banda. Os pontos em (a) e (b) correspondem às Figuras 4.2(a) e 4.3(a), respectivamente. A borda inferior dessa banda foi classificada como Γ_1.

Por um lado, a função de Wannier magnética na Figura 4.2(a) decai exponencialmente. Porém, como sugerido pela Figura 4.3(a), a função de Wannier elétrica da primeira banda decai devagar. De fato, ela não decai exponencialmente, mas como uma lei de potência. Isto ocorre quando a borda inferior da primeira banda é classificada como Γ_1. Os dois tipos de decaimento e os parâmetros correspondentes estão na Figura 4.4. Convém ressaltar que as linhas correspondem à previsão analítica do comportamento assintótico e os pontos, aos resultados do cálculo numérico. A saber, para a função magnética, $\beta_1 \approx 0.865$ e $\alpha_1 = 3/4$ enquanto, para a função elétrica, $\beta_1 = 0$ e $\alpha_1 = 1$ (decai apenas como lei de potência).

Por outro lado, quando a função de Bloch magnética da borda inferior da primeira banda é classificada como Γ_2, ocorre a situação contrária. Isto é, a função de Wannier magnética decai como uma lei de potência [ver Figura 4.5(a)], enquanto a função de Wannier elétrica é exponencialmente localizada [ver Figura 4.5(b)]. Os diferentes tipos de decaimento e os parâmetros associados são mostrados na Figura 4.6. Para a função magnética, $\beta_1 = 0$ e $\alpha_1 = 1$, enquanto que, para a função elétrica, $\beta_1 \approx 0.865$ e $\alpha_1 = 3/4$.

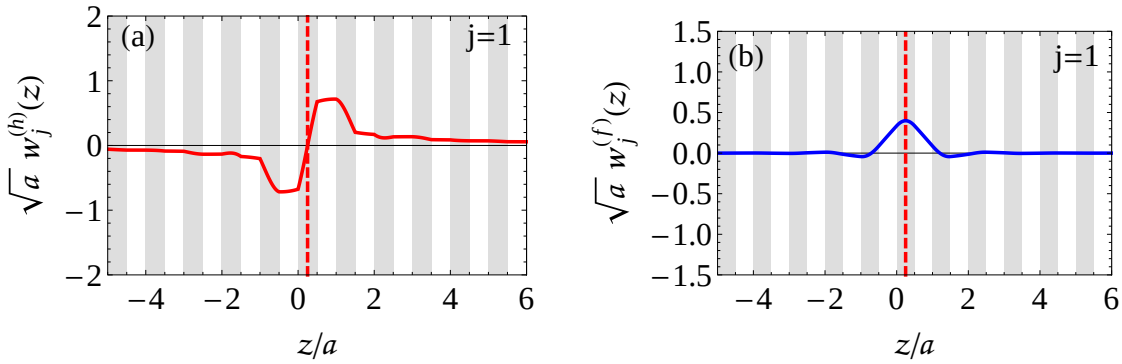


Figura 4.5: As funções de Wannier magnética (a) e elétrica (b) para a primeira banda do cristal fotônico. A borda inferior da primeira banda foi classificada como Γ_2. As regiões sombreadas correspondem ao material A. A linha pontilhada indica o centro da função.

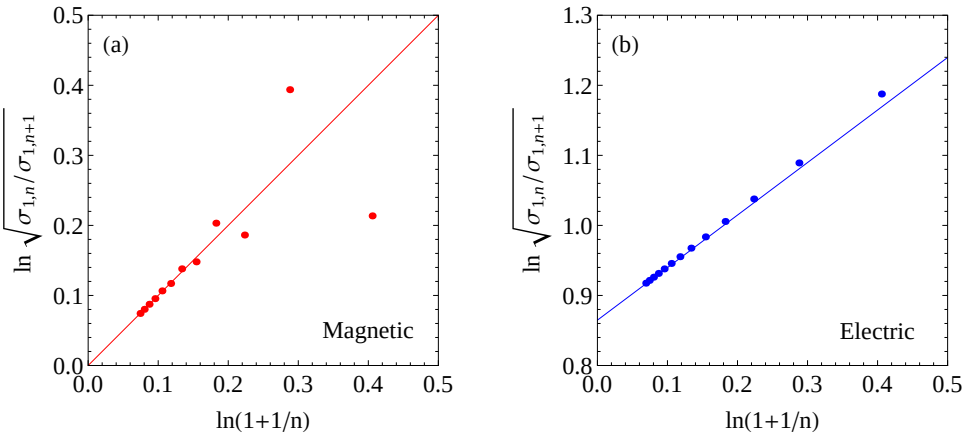


Figura 4.6: Logaritmo da raiz quadrada da razão entre as energias da n-ésima e $(n+1)$-ésima células como uma função de $\ln(1+1/n)$, para as funções de Wannier da primeira banda. Os pontos em (a) e (b) correspondem às Figuras 4.5(a) e 4.5(b), respectivamente. A borda inferior dessa banda foi classificada como Γ_2.

A análise do comportamento assintótico das funções de Wannier calculadas para a primeira banda sugere que quando a função magnética é exponencialmente localizada,

a função elétrica decai como uma potência e se escolhemos a função elétrica para ser exponencialmente localizada, temos a função magnética decaindo sob uma lei de potência. Para aplicações específicas, podemos representar a solução em termos das funções de Wannier magnéticas ou elétricas. As funções de Bloch correspondentes podem ser obtidas pela Tabela 3.1. As bandas mais altas se comportam diferentemente. De fato, para $j \geq 2$, o coeficiente da lei de potência é $\alpha_j = 3/4$ e o coeficiente exponencial, β_j, é [5, 26] o menor valor entre $\text{arccosh}[R(\omega_{j-1})]$ e $\text{arccosh}[R(\omega_j)]$, onde ω_j é a j-ésima raiz de $R'(\omega)$ (ver Figura 2.3). Por exemplo, o coeficiente de decaimento exponencial das funções de Wannier mostradas nos quadros (b) até (f) das Figuras 4.2 e 4.3 são $\beta_2 \approx 0.865, \beta_3 \approx 1.165, \beta_4 \approx 0.568, \beta_5 \approx 0.381$ e $\beta_6 \approx 0.381$, respectivamente. Nossos resultados sugerem que a propriedade única da primeira banda é associada ao comportamento de $\omega \sim |k|$ para $k \approx 0$.

4.4 Conclusões do capítulo

Foram apresentados, neste capítulo, os gráficos das funções de Wannier magnéticas e elétricas para cristais fotônicos. Essas funções se mostraram centradas nos pontos de simetria do cristal.

Observamos que as funções de Wannier elétrica e magnética apresentam simetrias opostas para cada banda. A primeira banda pode ser classificada tanto como Γ_1 quanto como Γ_2. Dependendo da classificação escolhida uma das funções de Wannier (magnética ou elétrica) decai em forma de potência enquanto a outra decai exponencialmente. Para as outras bandas de frequência, o estudo do comportamento assintótico das funções magnética e elétrica permite prever um decaimento exponencial.

Capítulo 5

Cálculo de modos localizados em cristais fotônicos utilizando matriz de transferência

5.1 Introdução

Com a substituição de uma das camadas do cristal perfeito por uma camada de tamanho ou permissividade diferente da camada original, ocorre um defeito nesse cristal. Para calcular os modos localizados causados por esse defeito podemos utilizar matriz de tranferência ou funções de Wannnier. Neste capítulo mostraremos os resultados obtidos a partir do método de matriz de transferência, e compararemos esses resultados com os apresentados na literatura por Miyazaki *et al.* [17]. Também será analisado o comportamento assintótico desses modos localizados.

5.2 Método da matriz de transferência para cristais unidimensionais com defeito

O cristal fotônico perfeito considerado na primeira parte deste trabalho apresentava as seguintes dimensões e características: camadas A e B de igual largura, $\epsilon_A = 13$, $\epsilon_B = 1$ e o plano xy separava uma camada A à direita de uma camada B à esquerda. Agora, para compararmos os cálculos dos modos localizados com os apresentados na literatura

[17], outras dimensões e propriedades são utilizadas para o cristal perfeito de referência: a largura da camada A passa a ser $d_A = 0.0525$ cm, a largura da camada B é de $d_B = 0.1$ cm, $\epsilon_A = 11.4244$ (correspondente à permissividade do Silício) e $\epsilon_B = 1$.

Os modos localizados são produzidos por substituição de uma das camadas A por uma camada C com diferentes valores de largura ou permissividade, o que gera um defeito no cristal. Para conseguirmos simetria em relação ao plano xy deslocamos a origem dos eixos para o centro da camada C do defeito.

Uma das formas de se calcular os modos localizados é mediante matrizes de transferência. Primeiramente, focamos na transferência dos valores de $h(z)$ e $f(z)$ de $d_C/2$

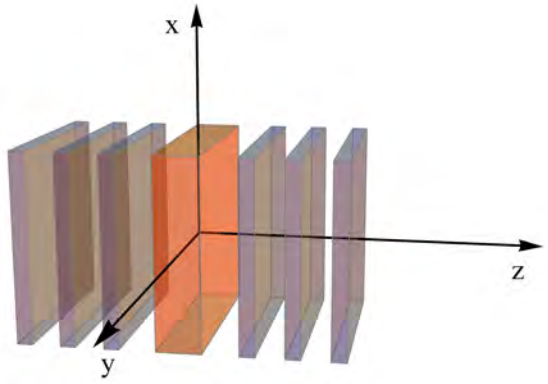


Figura 5.1: Ilustração do cristal fotônico 1D com defeito que consiste na substituição da camada A centrada na origem por uma camada C representada em vermelho.

para $na + d_C/2$, onde n toma valores inteiros positivos (ver Figura 5.2). Em analogia com

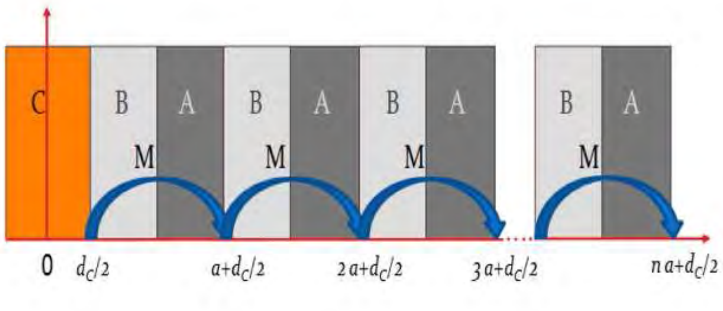


Figura 5.2: Representação esquemática da matriz $\mathbf{M}(\omega)$ que transfere os valores do campo através de n células unitárias à direita do defeito.

(2.19), escrevemos

$$\begin{pmatrix} h(na + d_C/2) \\ f(na + d_C/2) \end{pmatrix} = \mathbf{M}^n(\omega) \begin{pmatrix} h(d_C/2) \\ f(d_C/2) \end{pmatrix}. \tag{5.1}$$

Neste ponto, é útil expressar o vetor $(h(d_C/2), f(d_C/2))$ em termos de autovetores unitários de $\mathbf{M}(\omega)$. Vamos denotar esses vetores como $\vec{v}_1$ e $\vec{v}_2$, de modo que

$$\mathbf{M}(\omega) \cdot \vec{v}_i = \lambda_i \, \vec{v}_i, \tag{5.2}$$

com $i = 1$ ou $i = 2$. Consequentemente, existem dois números complexos α_1 e α_2 que satisfazem $(h(d_C/2), f(d_C/2)) = \alpha_1\vec{v}_1 + \alpha_2\vec{v}_2$ e

$$\begin{pmatrix} h(na + d_C/2) \\ f(na + d_C/2) \end{pmatrix} = \alpha_1\lambda_1^n \, \vec{v}_1 + \alpha_2\lambda_2^n \, \vec{v}_2. \tag{5.3}$$

Desde que $\det(\mathbf{M}(\omega)) = 1$, temos $\lambda_1\lambda_2 = 1$. Agora, sem perder em generalidade, assumimos $|\lambda_2| \geq |\lambda_1|$, e tomamos $|\lambda_2| \geq 1$. Assim, para modos localizados obtemos as seguintes condições: $|\lambda_1| < 1$ e $\alpha_2 = 0$. Portanto, $(h(d_C/2), f(d_C/2))$ deve ser um autovetor de $\mathbf{M}(\omega)$ com autovalor λ_1.

Além disso, temos

$$\begin{pmatrix} h(d_C/2) \\ f(d_C/2) \end{pmatrix} = \mathbf{T}_C(\omega, d_C/2) \begin{pmatrix} h(0) \\ f(0) \end{pmatrix}. \tag{5.4}$$

Onde a matriz $\mathbf{T}_C(\omega)$ tranfere os valores do campo dentro da camada C (ver Figura 5.3).

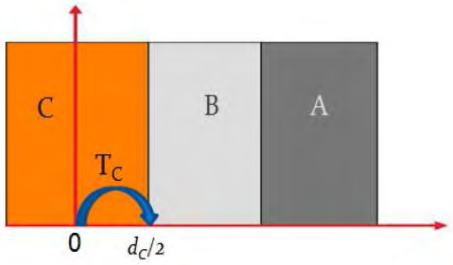


Figura 5.3: Representação esquemática da matriz $\mathbf{T}_C(\omega, d_C/2)$ que transfere os valores do campo entre 0 e $d_C/2$ na camada C do defeito.

Logo chegamos em

$$\mathbf{M}(\omega) \cdot \mathbf{T}_C(\omega, d_C/2) \begin{pmatrix} h(0) \\ f(0) \end{pmatrix} = \lambda_1 \, \mathbf{T}_C(\omega, d_C/2) \begin{pmatrix} h(0) \\ f(0) \end{pmatrix}, \tag{5.5}$$

i.e.,

$$\tilde{\mathbf{M}}(\omega)\begin{pmatrix} h(0) \\ f(0) \end{pmatrix} = \lambda_1 \begin{pmatrix} h(0) \\ f(0) \end{pmatrix}, \tag{5.6}$$

com $\tilde{\mathbf{M}}(\omega) = \mathbf{T}_C^{-1}(\omega, d_C/2) \cdot \mathbf{M}(\omega) \cdot \mathbf{T}_C(\omega, d_C/2)$.

Como o defeito do cristal apresenta simetria de inversão em relação à origem de coordenadas, o campo magnético dos modos localizados é simétrico ou antissimétrico. Quando os modos são simétricos, isto é, $h(z)$ é par, $f(z)$ é ímpar, portanto $f(0) = 0$, então, de (5.6) obtemos

$$\lambda_1 = \tilde{M}_{11}(\omega), \tag{5.7}$$

e

$$\tilde{M}_{21}(\omega) = 0. \tag{5.8}$$

Consequentemente, as frequências dos modos localizados simétricos satisfazem (5.8) e $|\tilde{M}_{11}(\omega)| < 1$. Similarmente, quando os modos são antissimétricos, isto é, $h(z)$ é ímpar, temos $h(0) = 0$, assim,

$$\lambda_1 = \tilde{M}_{22}(\omega), \tag{5.9}$$

e

$$\tilde{M}_{12}(\omega) = 0. \tag{5.10}$$

Logo, as frequências dos modos localizados antissimétricos obedecem (5.10) e $|\tilde{M}_{22}(\omega)| < 1$.

É importante notar que as frequências dos modos localizados estão dentro dos gaps do espectro de frequência do cristal perfeito. De fato, como $\det[\mathbf{M}(\omega)] = 1$ e $\mathbf{M}$ é equivalente a $\tilde{\mathbf{M}}$, verifica-se que o traço de $\tilde{\mathbf{M}}(\omega)$ é igual a $2\,R(\omega)$ (ver Ref. [28]), e temos

$$\lambda_1 + \frac{1}{\lambda_1} = 2\,R(\omega). \tag{5.11}$$

Além disso, de acordo com (5.7) e (5.9), λ_1 é real. Logo, para os modos localizados, temos

$$|R(\omega)| = \frac{1}{2}\left(|\lambda_1| + \frac{1}{|\lambda_1|}\right) > 1. \tag{5.12}$$

Agora, segundo (2.20), as frequências permitidas do cristal perfeito satisfazem $|R(\omega)| = |\cos(ka)| \leq 1$, para um valor real de k. Isto mostra claramente que as frequências dos modos localizados não ocorrem em bandas de frequências permitidas.

O parâmetro λ_1 é muito importante porque é a razão do decaimento dos modos localizados. Isto é, para qualquer $z \geq d_C/2$, temos $h(z+a) = \lambda_1 h(z)$. Logo, $|h(z)|$ decai exponencialmente com coeficiente $\beta = \ln(1/|\lambda_1|) = \operatorname{arccosh}(|R(\omega)|)$.

Os modos localizados calculados aqui são normalizados para que possam ser comparados, no próximo Capítulo, com os cálculos realizados mediante funções de Wannier.

5.3 Frequências e gráficos dos modos localizados em cristais com defeito e simetria de inversão

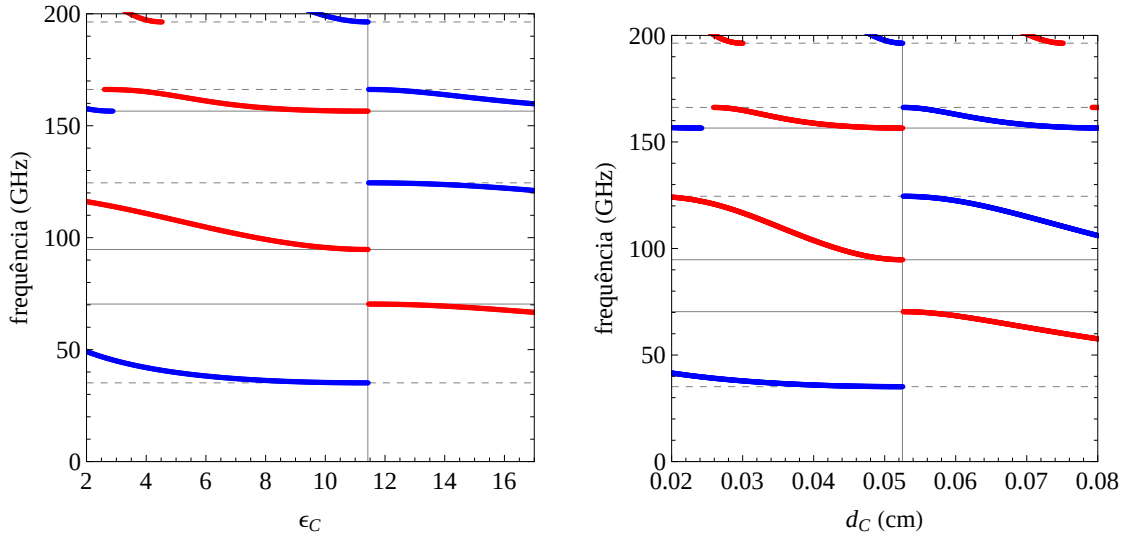


Figura 5.4: A frequência dos modos localizados de um cristal fotônico com célula AB em que uma camada A é substituida por uma camada C: em (a) d_C em função da permissividade ϵ_C com $d_C = d_A$, (b) em função da espessura d_C com $\epsilon_C = \epsilon_A$. Os parâmetros das camadas A e B são $\epsilon_A = 11.4244$, $d_A = 0.0525$ cm, $\epsilon_B = 1$, e $d_B = 0.1$ cm. As curvas em vermelho (azul) correspondem aos modos simétricos (antissimétricos). As linhas horizontais finas indicam os extremos da banda do cristal perfeito. As linhas contínuas (tracejadas) são para os estados de Bloch que são simétricos (antissimétricos) na origem.

A Figura 5.4 mostra as frequências dos modos localizados produzidos pelo defeito substitucional, em função dos parâmetros do defeito. A frequência é dada em gigahertz, em função do valor da permissividade da camada defeito. Na Figura 5.4(b) temos a frequência em função da largura da camada defeito, dada em centímetros. A linha vertical mostra o valor da permissividade do cristal perfeito. As curvas em vermelho (azul) correspondem aos modos simétricos (antissimétricos). As linhas horizontais contínuas (tracejadas)

indicam as frequências nos extremos da banda do cristal perfeito para estados de Bloch simétricos (antissimétricos). Os resultados obtidos estão em acordo com a literatura. De fato, os painéis da Figura 5.4 reproduzem essencialmente aqueles apresentados na Ref. [17]. Convém notar que os valores de frequência obtidos estão na faixa das microondas [6].

As Figuras de 5.5 à 5.8 mostram os gráficos para os modos localizados com permissividade igual à da camada A do cristal perfeito e diferentes larguras da camada defeito. As Figuras de 5.9 à 5.12 mostram os modos localizados para defeito com largura da camada igual à da camada A do cristal perfeito e diferentes valores para a permissividade na camada do defeito. Nessas figuras observamos que os modos localizados são simétricos ou antissimétricos e, ao mesmo tempo, exponencialmente localizados. Por exemplo, na Figura 5.5(a) o modo localizado é antissimétrico, enquanto nas Figuras 5.5(b) e 5.5(c), ele é simétrico em relação ao centro de simetria do cristal.

Também podemos observar que o decaimento dos modos localizados pode variar de acordo com os parâmetros do defeito. A Figura 5.10 apresenta decaimentos visivelmente mais lentos que os da Figura 5.12.

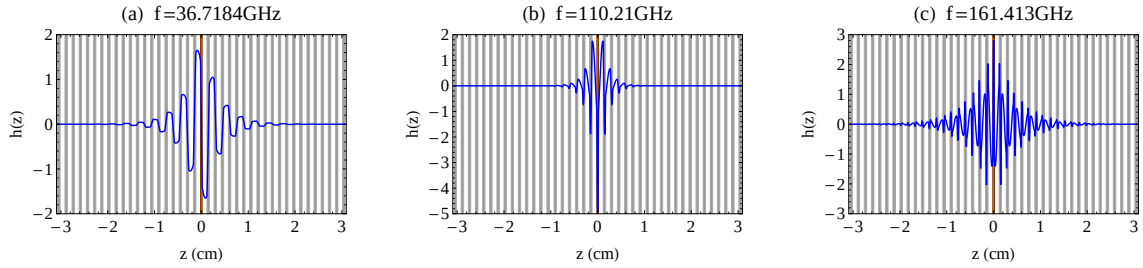


Figura 5.5: Modos localizados de menor frequência devido à substituição de uma camada A por uma camada C em um cristal fotônico com célula unitária AB. Os painéis de (a) até (c) estão dispostos em ordem crescente da frequência. Os parâmetros da camada do defeito são $\epsilon_C = \epsilon_A$ e $d_C = 0.035$ cm.

5.4 Comportamento assintótico dos modos localizados

A Figura 5.13 mostra os valores assumidos por λ_1 em dependência do defeito presente no cristal. A partir desses valores podemos calcular o coeficiente de decaimento exponencial, β. Os valores de β em função dos parâmetros do defeito estão mostrados na

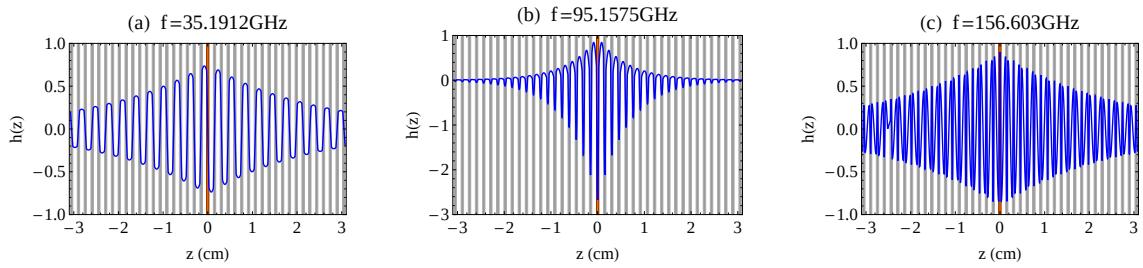


Figura 5.6: Modos localizados de menor frequência devido à substituição de uma camada A por uma camada C em um cristal fotônico com célula unitária AB. Os painéis de (a) até (c) estão dispostos em ordem crescente da frequência. Os parâmetros da camada do defeito são $\epsilon_C = \epsilon_A$ e $d_C = 0.05$ cm

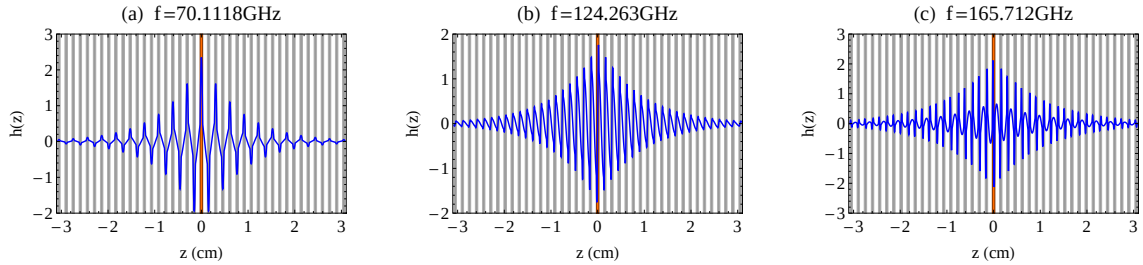


Figura 5.7: Modos localizados de menor frequência devido à substituição de uma camada A por uma camada C em um cristal fotônico com célula unitária AB. Os painéis de (a) até (c) estão dispostos em ordem crescente da frequência. Os parâmetros da camada do defeito são $\epsilon_C = \epsilon_A$ e $d_C = 0.055$ cm

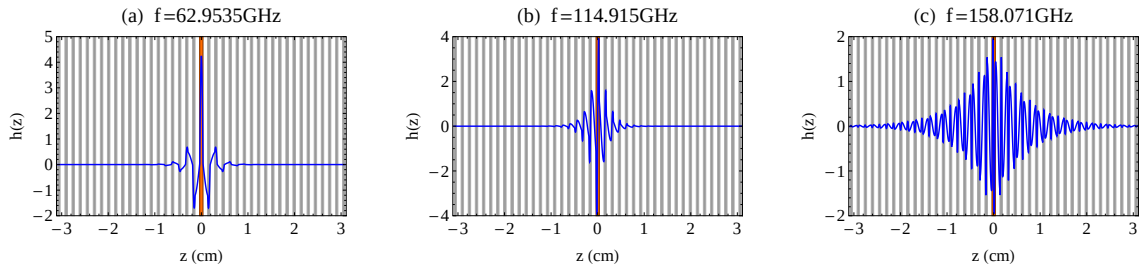


Figura 5.8: Modos localizados de menor frequência devido à substituição de uma camada A por uma camada C em um cristal fotônico com célula unitária AB. Os painéis de (a) até (c) estão dispostos em ordem crescente da frequência. Os parâmetros da camada do defeito são $\epsilon_C = \epsilon_A$ e $d_C = 0.07$ cm

Figura 5.14. Para defeitos fracos ($\epsilon_C \approx \epsilon_A$ ou $d_C \approx d_A$) os valores de $|\lambda_1|$ estão próximos de 1, isso faz com que os valores de β se aproximem de zero, isto é, o decaimento dos modos localizados para cristais quase perfeitos é lento. Isso pode ser observado quando, por exemplo, consideramos $\epsilon_C = 10$ e $\epsilon_C = 16$ (ver Figura 5.10 e 5.12). Para $\epsilon_C = 16$ os valores de $|\lambda_1|$ são mais próximos de zero (ver Figura 5.13), e valores de β distantes de zero (ver Figura 5.14). Isso significa que o decaimento dos modos localizados é mais

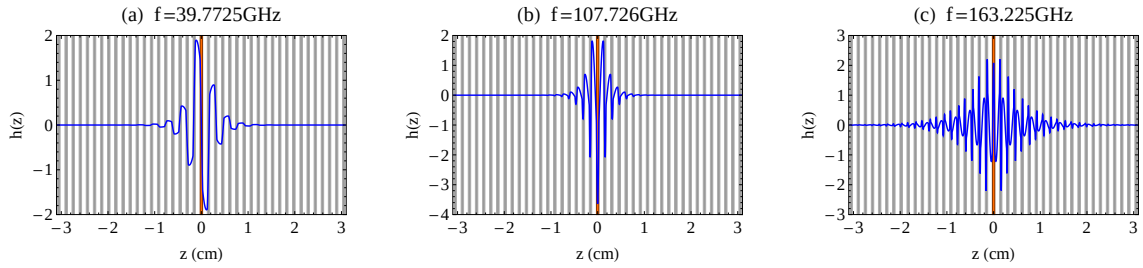


Figura 5.9: Modos localizados de menor frequência devido à substituição de uma camada A por uma camada C em um cristal fotônico com célula unitária AB. Os painéis de (a) até (c) estão dispostos em ordem crescente da frequência. Os parâmetros da camada do defeito são $\epsilon_C = 5$ e $d_C = d_A$

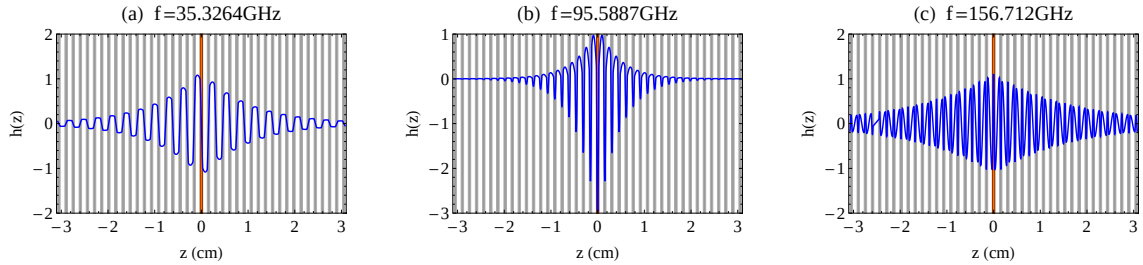


Figura 5.10: Modos localizados de menor frequência devido à substituição de uma camada A por uma camada C em um cristal fotônico com célula unitária AB. Os painéis de (a) até (c) estão dispostos em ordem crescente da frequência. Os parâmetros da camada do defeito são $\epsilon_C = 10$ e $d_C = d_A$

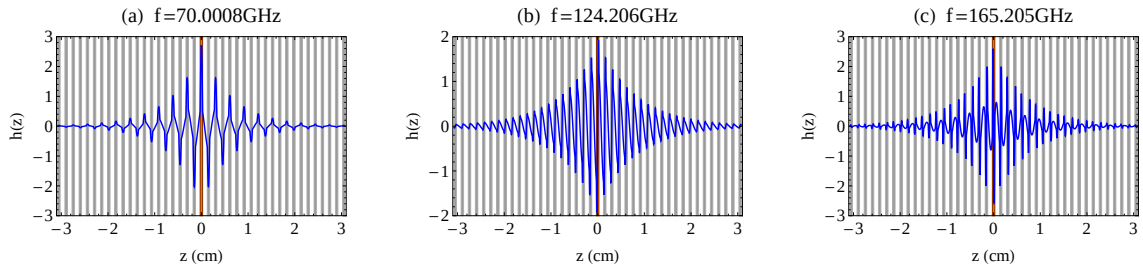


Figura 5.11: Modos localizados de menor frequência devido à substituição de uma camada A por uma camada C em um cristal fotônico com célula unitária AB. Os painéis de (a) até (c) estão dispostos em ordem crescente da frequência. Os parâmetros da camada do defeito são $\epsilon_C = 13$ e $d_C = d_A$

rápido para $\epsilon_C = 16$.

5.5 Conclusões do capítulo

Neste capítulo foi apresentado o cálculo de modos localizados mediante de matriz de transferência. Foram mostrados resultados obtidos com esse método e o comporta-

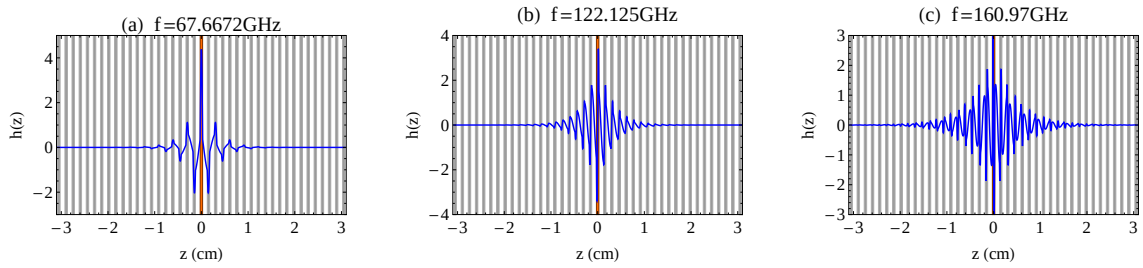


Figura 5.12: Modos localizados de menor frequência devido à substituição de uma camada A por uma camada C em um cristal fotônico com célula unitária AB. Os painéis de (a) até (c) estão dispostos em ordem crescente da frequência. Os parâmetros da camada do defeito são $\epsilon_C = 16$ e $d_C = d_A$

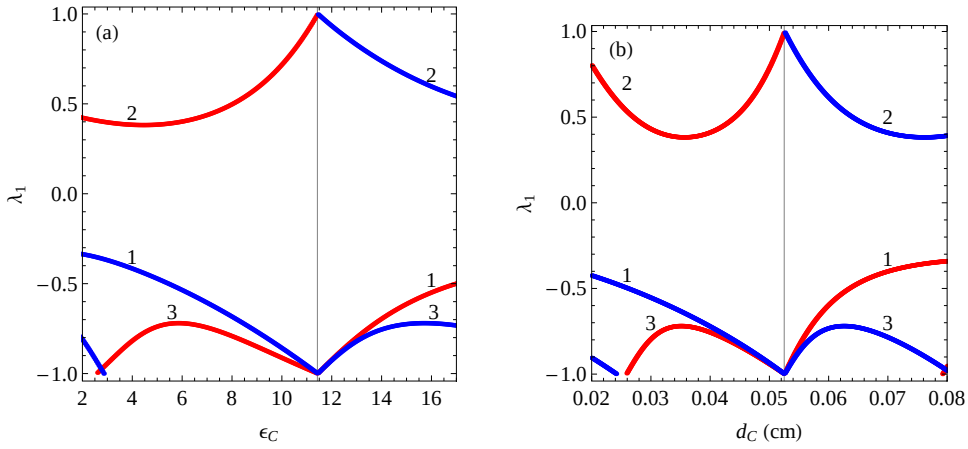


Figura 5.13: O autovalor λ_1 para os modos localizados de um cristal fotônico com célula AB em que uma camada A é substituída por uma camada C: (a) em função da permissividade ϵ_C com $d_C = d_A$, (b) em função da espessura d_C com $\epsilon_C = \epsilon_A$. Os parâmetros das camadas são os mesmos da Figura 5.4. Os índices 1, 2 e 3 identificam as curvas em ordem crescente da frequência do modo localizado.

mento assintótico dos modos localizados. Os modos localizados apresentam decaimento exponencial. Percebemos que, se o cristal defeituoso está próximo da perfeição, então o decaimento dos modos localizados é muito lento.

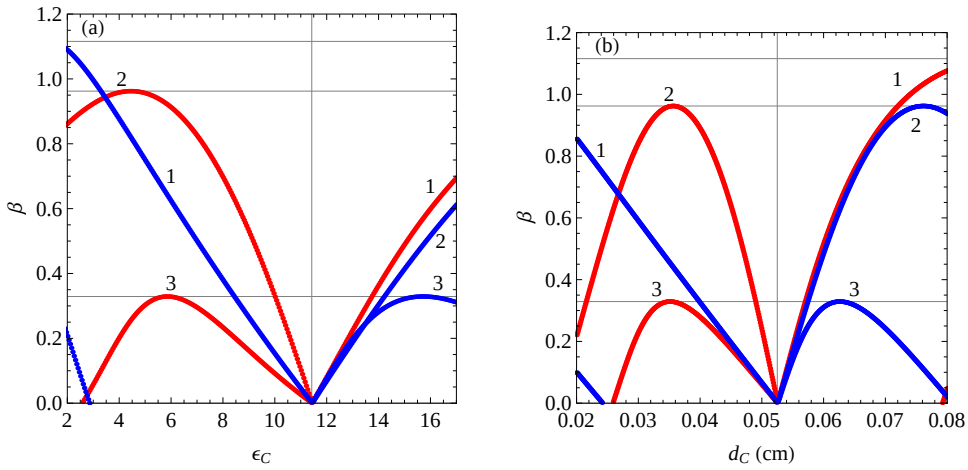


Figura 5.14: Coeficiente de decaimento β dos modos localizados de um cristal fotônico com célula AB em que uma camada A é substituida por uma camada C: (a) em função da permissividade ϵ_C com $d_C = d_A$, (b) em função da espessura d_C com $\epsilon_C = \epsilon_A$. Os parâmetros das camadas são os mesmos da Figura 5.4. As linhas horizontais indicam os valores máximos dos coeficientes de decaimento.

Capítulo 6

Cálculo de modos localizados em cristais fotônicos utilizando funções de Wannier

6.1 Introdução

Para calcular os modos localizados podemos utilizar uma combinação linear das funções de Wannier. Nesse capítulo mostramos os cálculos baseados nesse método e fazemos a comparação dos resultados com aqueles obtidos utilizando matriz de transferência.

6.2 Gráficos das funções de Wannier magnéticas para cristais fotônicos unidimensionais

Os gráficos apresentados na Figura 6.1 são das funções de Wannier magnéticas do cristal perfeito de parâmetros $d_A = 0.0525$ cm, $d_B = 0.1$ cm, $\epsilon_A = 11.4244$ e $\epsilon_B = 1$.

As funções de Wannier magnéticas calculadas apresentam localização máxima com a escolha da borda inferior da primeira banda como Γ_1 e, de acordo com a Tabela 3.1, podem ter suas simetrias previstas.

O painel 6.1(a), por exemplo, mostra a função de Wannier para a primeira banda. Vemos que a função em questão é par em relação ao centro da camada B. Já o painel 6.1(b), apresenta a função de Wannier para a segunda banda, e essa é par em relação ao

centro da camada A.

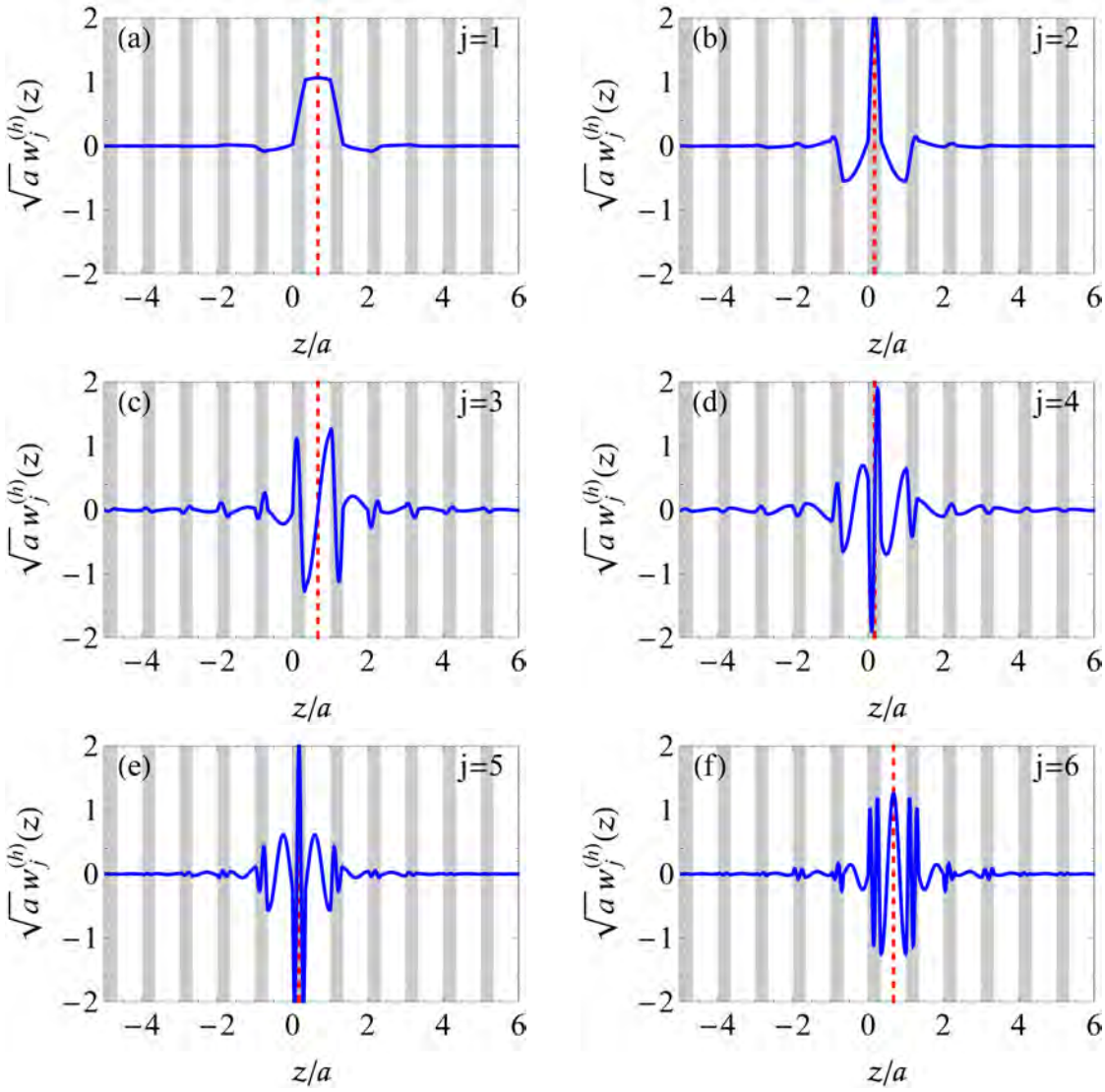


Figura 6.1: As funções de Wannier magnéticas das seis primeiras bandas do cristal fotônico. A borda inferior da primeira banda foi classificada como Γ_1. As regiões sombreadas correspondem ao material A. As linhas pontilhadas indicam o centro de simetria das respectivas funções de Wannier.

6.3 Modos localizados como combinação linear das funções de Wannier

Os modos localizados também podem ser calculados por uma combinação linear de funções de Wannier. Desta maneira, as funções de Wannier magnéticas formam uma base

apropriada para representar o campo magnético dos modos localizados:

$$h(z) = \sum_{j,n} c_{j,n}\, w_j(z - na), \tag{6.1}$$

onde $j = 1, 2, \ldots$ e n toma todos os valores inteiros. No entanto, nos cálculos numéricos, seus volores podem ser restritos a um certo conjunto de bandas e células cristalinas relevantes. O operador hermitiano do cristal com defeito, $\hat{L}^{(d)}$, pode ser obtido substituindo em (2.23) a função $\epsilon(z)$ do cristal perfeito pela função $\epsilon^{(d)}(z)$ do cristal com defeito:

$$\hat{L}^{(d)} = -\frac{d}{dz}\,\frac{1}{\epsilon^{(d)}(z)}\,\frac{d}{dz}. \tag{6.2}$$

A diferença entre os operadores do cristal com defeito e do cristal perfeito pode ser escrita como:

$$\hat{W} = \hat{L}^{(d)} - \hat{L} = -\frac{d}{dz}\left[\frac{1}{\epsilon^{(d)}(z)} - \frac{1}{\epsilon(z)}\right]\frac{d}{dz}, \tag{6.3}$$

logo,

$$\hat{L}^{(d)} = \hat{L} + \hat{W}. \tag{6.4}$$

Então, para o cristal com defeito temos:

$$\hat{L}^{(d)}\, h(z) = \frac{\omega^2}{c^2}\, h(z). \tag{6.5}$$

Consequentemente, de (6.1) e (6.5), obtemos o seguinte problema de autovalores:

$$\sum_{j',n'} L^{(d)}_{(j,n),(j',n')}\, c_{j',n'} = \frac{\omega^2}{c^2}\, c_{j,n}, \tag{6.6}$$

com

$$\begin{aligned} L^{(d)}_{(j,n),(j',n')} &= \int_{-\infty}^{+\infty} w^*_{j,n}(z)\, \hat{L}^{(d)}\, w_{j',n'}(z)\, dz \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} w^*_{j,n}(z)\, \hat{L}\, w_{j',n'}(z)\, dz \,+\, \int_{-\infty}^{+\infty} w^*_{j,n}(z)\, \hat{W}\, w_{j',n'}(z)\, dz. \end{aligned} \tag{6.7}$$

O primeiro termo do lado direito da expressão (6.7) é o coeficiente $L_{(j,n),(j',n')}$ do cristal perfeito e pode ser deduzido da seguinte maneira:

$$\begin{aligned} L_{(j,n),(j',n')} &= \int_{-\infty}^{+\infty} w^*_{j,n}(z)\, \hat{L}\, w_{j',n'}(z)\, dz \\ &= \left(\frac{a}{2\pi}\right)^2 \int_{-\frac{\pi}{a}}^{\frac{\pi}{a}} \int_{-\frac{\pi}{a}}^{\frac{\pi}{a}} e^{ia(kn - k'n')} \int_{-\infty}^{+\infty} h_{j,k}(z)\, \hat{L}\, h_{j',k'}(z)\, dz\, dk'\, dk. \end{aligned} \tag{6.8}$$

Então, de (2.23) e (2.24) chegamos em

$$\begin{aligned} L_{(j,n),(j',n')} &= \frac{a}{2\pi}\delta_{j,j'}\int_{-\frac{\pi}{a}}^{\frac{\pi}{a}} e^{iak(n-n')}\left(\frac{\omega_{j,k}}{c}\right)^2 dk \\ &= \delta_{j,j'}\Lambda_j(n-n'), \end{aligned} \tag{6.9}$$

onde

$$\Lambda_j(\Delta n) = \frac{a}{2\pi}\int_{-\frac{\pi}{a}}^{\frac{\pi}{a}} e^{iak(\Delta n)}\left(\frac{\omega_{j,k}}{c}\right)^2 dk. \tag{6.10}$$

No caso da substituição de uma camada A do cristal perfeito por uma camada C de igual espessura e com permissividade ϵ_C, o último termo da expressão (6.7) pode ser simplificado da seguinte maneira:

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{+\infty} w^*_{j,n}(z)\,\hat{W}\,w_{j',n'}(z)\,dz &= \int_{-\infty}^{+\infty}[w'_{j,n}(z)]^*\,w'_{j',n'}(z)\left[\frac{1}{\epsilon^{(d)}(z)}-\frac{1}{\epsilon(z)}\right]dz \\ &= \left(\frac{1}{\epsilon_C}-\frac{1}{\epsilon_A}\right)V_{(j,n),(j',n')}, \end{aligned} \tag{6.11}$$

com

$$V_{(j,n),(j',n')} = \int_{-\frac{d_C}{2}}^{\frac{d_C}{2}}[w'_{j,n}(z)]^*\,w'_{j',n'}(z)\,dz. \tag{6.12}$$

Podemos observar que a matriz $L^{(d)}_{(j,n),(j',n')}$ do cristal com defeito é a soma da matriz $L_{(j,n),(j',n')}$ do cristal perfeito e uma matriz calculada mediante integração apenas na camada do defeito e multiplicação pela diferença dos inversos das permissividades da camada defeito e da camada do cristal perfeito, isto é,

$$L^{(d)}_{(j,n),(j',n')} = \delta_{j,j'}\Lambda_j(n-n') + \left(\frac{1}{\epsilon_C}-\frac{1}{\epsilon_A}\right)V_{(j,n),(j',n')}. \tag{6.13}$$

Isso nos permite simplificar os cálculos para os modos localizados. A partir dos cálculos dos termos $\Lambda_j(n-n')$ e $V_{(j,n),(j',n')}$ basta alterar o valor da permissividade ϵ_C do defeito.

Quando $w_j(z)$ e $w_{j'}(z)$ são centradas na origem, os elementos da matriz correspondente obedecem

$$L^{(d)}_{(j,n),(j',n')} = \pm L^{(d)}_{(j,n'),(j',n)}. \tag{6.14}$$

Aqui, o sinal de mais (menos) é utilizado se a simetria de inversão de $w_j(z)$ e $w_{j'}(z)$ são iguais (diferentes). Em particular, quando as simetrias são diferentes, temos $L^{(d)}_{(j,n),(j',n)} = 0$. Isto permite reduzir ainda mais o esforço computacional.

Os modos localizados gerados pelo método das funções de Wannier já são normalizados, pois os autovetores formados pelos coeficientes $c_{j,n}$ são normalizados.

A Figura 6.2 mostra em linhas contínuas as frequências obtidas mediante a diagonalização da matriz do operador $\hat{L}^{(d)}$, usando as seis bandas inferiores ($j = 1, \ldots, 6$) e quarenta e uma células unitárias em torno do defeito ($n = -20, -19, \ldots, 20$). Os resultados correspondem ao cristal fotônico com defeito com os parâmetros da Figura 5.12, que são $d_C = d_A$ e $\epsilon_C = 16$. Esses parâmetros foram escolhidos por se tratar de um perfil de modo localizado para o qual não são necessárias muitas células para se observar um decaimento razoável. As linhas azuis definem as bordas das bandas de frequência do cristal perfeito. Os modos cálculados são representados pelas linhas alaranjadas. Observamos que a maior parte desses modos está imersa nas bandas do cristal perfeito e correspondem a modos estendidos. Ao mesmo tempo, algumas linhas ficam nos gaps do cristal perfeito, essas são as frequências dos modos localizados produzidos pelo defeito. Para o defeito analizado, os valores das cinco primeiras frequências para os modos loclizados são: 67.75, 122.21, 161.09, 216.74 e 279.27 GHz, aproximadamente. Os perfis do campo magnético correspondentes a essas frequências são mostrados na Figura 6.3, e apresentam um bom decaimento. O perfil do primeiro modo é par em relação ao centro de simetria do cristal, enquanto o segundo e terceiro modos são ímpares em relação ao mesmo centro de simetria.

Na próxima seção, esses perfis serão comparados com aqueles obtidos mediante matrizes de transferência.

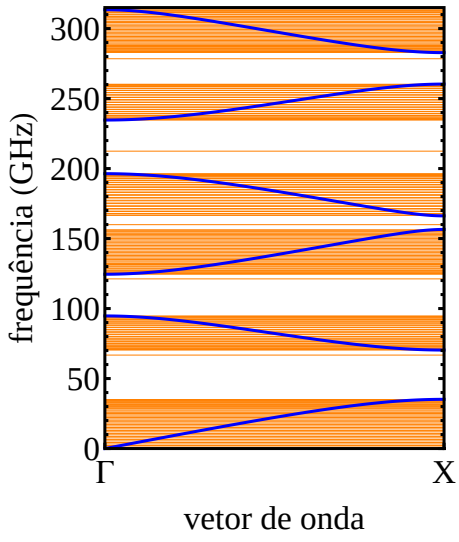


Figura 6.2: Comparação das frequências obtidas para o cristal perfeito e as obtidas para o cristal com defeito com os parâmetros da Figura 5.12, $d_C = d_A$ e $\epsilon_C = 16$.

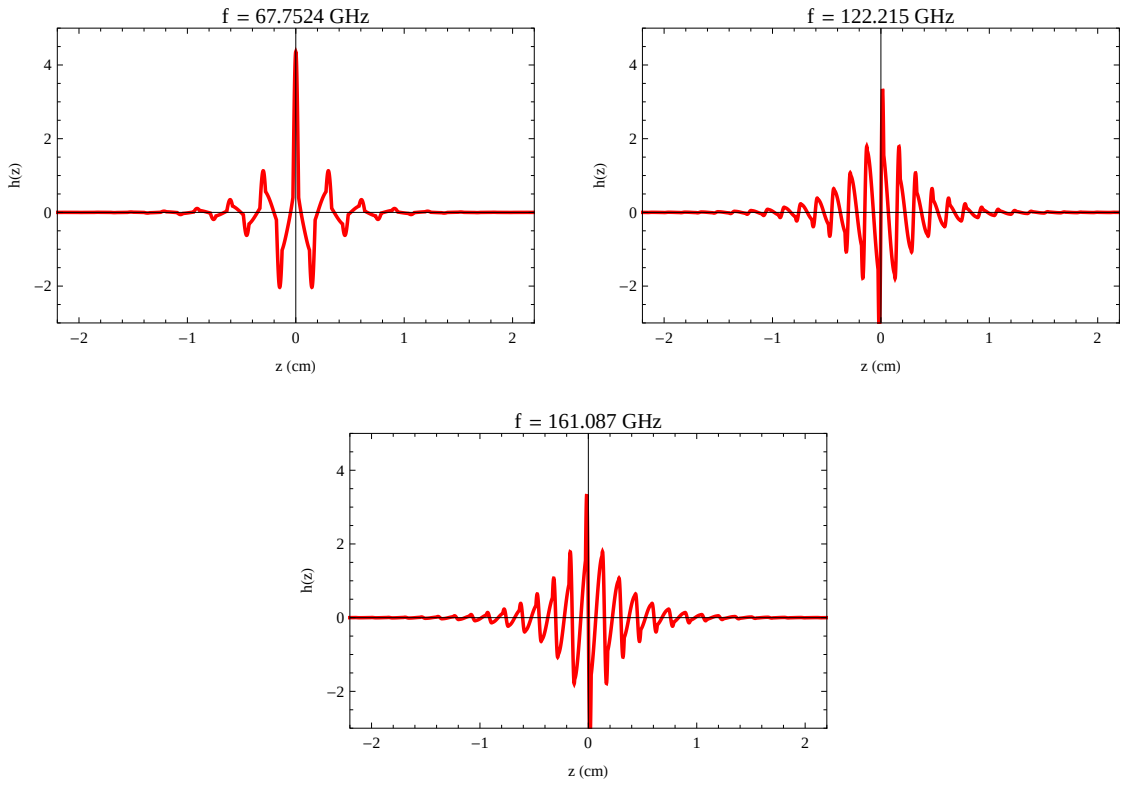


Figura 6.3: Modos localizados calculados mediante funções de Wannier. As configurações são as mesmas da Figura 5.12, $d_C = d_A$ e $\epsilon_C = 16$. Para estes modos foram usadas seis bandas e as células de índice $n = -20, -19, \ldots, 20$.

6.4 Comparação dos resultados obtidos mediante matriz de transferência com os resultados obtidos mediante funções de Wannier

Os resultados obtidos mediante funções de Wannier, podem ser comparados com aqueles obtidos mediante matriz de transferência no Capítulo 5. Para isso utilizamos o cristal cujo defeito consiste em substituir uma camada A por uma camada C de igual espessura e permissividade $\epsilon_C = 16$. A Figura 6.4 mostra a sobreposição dos painéis das Figuras 5.12 e 6.3. Podemos observar que os perfis dos modos localizados apresentam grande semelhança.

A Tabela 6.1 permite comparar as frequências obtidas por matriz de transferência e por funções de Wannier. Calculando o erro apresentado pelos valores obtidos pelas funções de Wannier, vemos que para o sistema e parâmetros considerados esse erro é menor que 0.5% quando são usadas as funções das seis primeiras bandas. Podemos observar que o

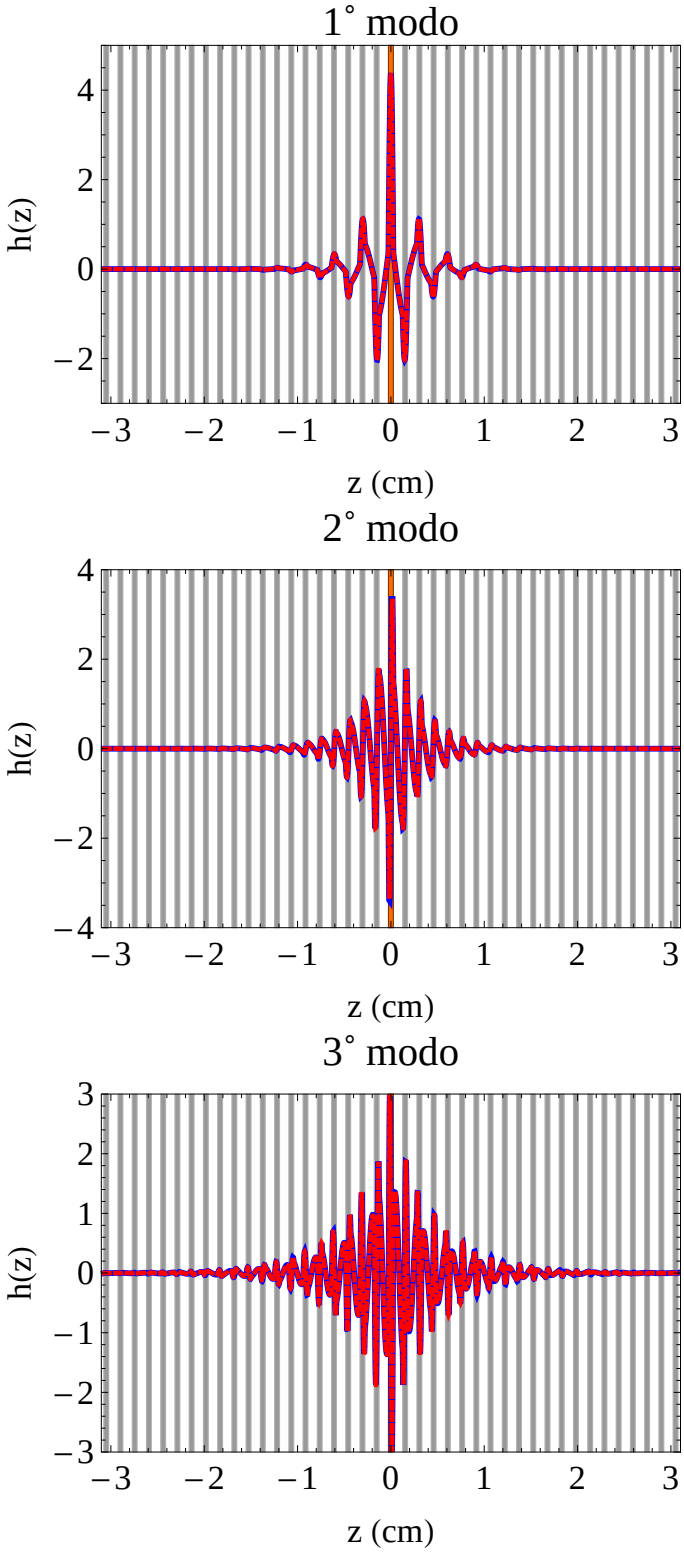


Figura 6.4: Comparação entre a forma dos modos calculados mediante matriz de transferência (azul) e através de funções de Wannier (vermelho tracejado). O defeito consiste na substituição de uma camada A por uma camada C com $\epsilon_C = 16$ e $d_C = d_A$. Os painéis são a sobreposição das Figuras 6.3 e 5.12.

número de células necessárias para uma boa aproximação não precisa ser tão alto, pois a convergência do erro se dá muito rapidamente. Isso também permite concluir que é necessário incluir mais bandas para diminuir o erro.

Matriz de Transferência	Funções de Wannier			
	n de -4 a 4	n de -6 a 6	n de -10 a 10	n de -20 a 20
67.6672009	67.7726817	67.7542609	67.7523869	67.7523691
Erro	0.16%	0.13%	0.13%	0.13%
122.1247608	122.2695862	122.2216533	122.2148343	122.2147118
Erro	0.12%	0.08%	0.07%	0.07%
160.9695569	161.1234911	161.0931919	161.0875530	161.0874046
Erro	0.10%	0.08%	0.07%	0.07%
215.8539950	216.7401862	216.7402502	216.7402922	216.7402940
Erro	0.41%	0.41%	0.41%	0.41%

Tabela 6.1: Comparação das frequências (em GHz) obtidas por matriz de transferência e funções de Wannier utilizando 9, 13, 21 e 41 células e as seis primeiras bandas. O erro relativo é referido ao cálculo por matriz de transferência, considerado como exato.

A Tabela 6.2 também compara as frequências dos modos localizados obtidas das duas maneiras, porém agora utilizamos um número fixo de células ($n = -20, -19, \ldots, 20$) e variamos o número de bandas, partindo do uso apenas das duas primeiras bandas, até o uso das seis primeiras bandas. Vemos que em alguns casos o erro pode ser maior do que 1% e que esse erro cai drasticamente com o aumento do número de bandas. Isso nos faz concluir que o número de bandas utilizadas para o cálculo dos modos localizados tem uma importância maior para a convergência dos resultados do que o número de células.

Matriz de Transferência	Funções de Wannier				
	$j = 1, 2$	$j = 1, 2, 3$	$j = 1, \ldots, 4$	$j = 1, \ldots, 5$	$j = 1, \ldots, 6$
67.6672009	68.1907650	67.8710555	67.8031658	67.7845735	67.7523691
Erro	0.77%	0.30%	0.20%	0.17%	0.13%
122.1247608		123.2802189	122.2997776	122.2630861	122.2147118
Erro		0.94%	0.14%	0.11%	0.07%
160.9695569			161.4100712	161.2962571	161.0874046
Erro			0.27%	0.20%	0.07%
215.8539950				219.5469288	216.7402940
Erro				1.68%	0.41%

Tabela 6.2: Comparação das frequências (em GHz) obtidas por matriz de transferência e funções de Wannier utilizando 41 células e 2, 3, 4, 5 e 6 bandas. O erro relativo é referido ao cálculo por matriz de transferência, considerado como exato.

6.5 Conclusões do capítulo

Neste capítulo apresentamos modos localizados calculados a partir da combinação linear das funções de Wannier. Os resultados obtidos estão em excelente acordo com os resultados do capítulo anterior, que utiliza matrizes de transferência. A precisão do método das funções de Wannier pode ser aumentada mediante a inclusão de mais termos (bandas e células) na combinação linear. Ao mesmo tempo, o uso de funções de Wannier tem a vantagem de que é possível lidar com uma ampla gama de defeitos, pois os cálculos numéricos dependem apenas de integrais simples que envolvem as funções de Wannier e a mudança do inverso da permissividade dielétrica devida ao defeito.

Capítulo 7

Conclusões

Neste trabalho de Mestrado foram calculadas a frequências permitidas para a propagação de ondas eletromagnéticas num cristal fotônico unidimensional. Juntamente com as frequências, foram obtidas as funções de Bloch, que são funções periódicas do vetor de onda cristalino. As funções de Wannier são os coeficientes de Fourier dessas funções de Bloch.

Os cálculos foram restritos ao caso de cristais fotônicos com simetria de inversão, permitindo a adaptação da teoria disponível para o movimento de elétrons em cristais unidimensionais [5]. Dessa maneira, as funções de Wannier têm máxima localização e é possível prever a posição do centro e o tipo de simetria dessas funções. O decaimento espacial das funções de Wannier magnéticas e elétricas foi estudado, tomando dois diferentes tipos de classificação para a primeira banda.

Posteriormente à investigação das funções de Wannier, foi abordado o cálculo de modos localizados em cristais fotônicos. Esses modos podem ocorrer quando uma das camadas do cristal perfeito é substituída por uma camada com tamanho ou permissividade diferente. Dessa forma, ocorre um defeito no cristal. Os modos localizados foram calculados por dois métodos distintos. O primeiro método utiliza a matriz de transferência e o segundo, combinações lineares das funções de Wannier do cristal perfeito. Ao final, os resultados dos dois métodos foram comparados.

Os resultados apresentados permitem concluir que as ideias da teoria disponível para elétrons podem ser estendidas de maneira simples ao caso fotônico e que, num cristal fotônico com simetria de inversão, as funções de Wannier são centradas em pontos de simetria do cristal e são simétricas ou antissimétricas em relação a esse centro. Vimos

também que as simetrias das funções de Wannier elétricas e magnéticas de cada banda são opostas.

Sobre a localização das funções de Wannier elétricas e magnéticas das bandas superiores à primeira concluímos que essas são exponencialmente localizadas, enquanto que o caso da primeira banda pode ser tratado de duas formas: numa delas, a função de Wannier magnética é exponencialmente localizada, enquanto a elétrica decai como uma potência da distância; na outra forma, o tipo de localização é trocado.

Concluímos que os cálculos dos modos localizados devidos a defeitos que consistem na substituição de uma camada do cristal perfeito podem ser feitos de forma direta mediante a matriz de transferência. Esse método inclui a resolução da equação de onda em cada uma das camadas. Esses cálculos também podem ser feitos utilizando as funções de Wannier, o que permite obter as frequências e perfis dos modos localizados mediante a resolução de integrais que envolvem as derivadas das funções de Wannier e a variação do inverso da permissividade devida à introdução do defeito. Como as integrais podem ser calculadas numericamente, este segundo método é muito flexível. Os resultados se mostram em excelente acordo com aqueles do primeiro método, e, para um número razoável de células, quanto maior o número de bandas utilizadas para o cálculo, maior é a concordância entre os dois métodos. Dessa maneira, podemos ver que as funções de Wannier são ferramentas eficientes para o cálculo de modos localizados em cristais fotônicos.

Em projetos futuros, poderemos dar continuidade a este trabalho de pesquisa com a investigação de:

- Modos localizados em cristais fotônicos unidimensionais com permissividade variável na camada do defeito.
- Funções de Wannier de máxima localização para cristais fotônicos unidimensionais sem simetria de inversão.
- Modos localizados em cristais fotônicos unidimensionais sem simetria de inversão.
- Funções de Wannier em cristais fotônicos unidimensionais com permeabilidade magnética variável, podendo incluir materiais com valores negativos da permissividade dielétrica e/ou permeabilidade magnética.
- Funções de Wannier em cristais bidimensionais e tridimensionais.

Apêndice A

Equações Maxwell

Como complemento do Capítulo 2, este anexo contém uma breve exposição sobre as equações de Maxwell [29].

James Clerck Maxwell formulou os resultados de Faraday em termos dos operadores diferenciais da divergência e o rotacional. Ele observou que, assim como as cargas de polarização num dielétrico produzem um campo elétrico, a corrente de magnetização deve produzir um campo magnético.

O sistema das equações de Maxwell se dá pelas quatro leis abaixo.

Lei de Gauss da eletricidade: $\vec{\nabla} \cdot \vec{D} = \rho$.

Lei de Gauss do magnetismo: $\vec{\nabla} \cdot \vec{B} = 0$.

Lei de Faraday: $\vec{\nabla} \times \vec{E} = -\partial \vec{B}/\partial t$.

Lei de Ampère estendida: $\vec{\nabla} \times \vec{H} = \vec{j} + \partial \vec{D}/\partial t$.

Nestas equações, ρ é a densidade volumétrica de carga elétrica e $\vec{j}$ é a densidade de corrente elétrica. Essas magnitudes satisfazem a equação de continuidade:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot \vec{j} = 0.$$

Além disso, $\vec{B}$ é a densidade de fluxo magnético, $\vec{D}$ é a densidade de fluxo elétrico, $\vec{E}$ é a intensidade de campo elétrico, $\vec{H}$ é a intensidade de campo magnético. As relações entre esses campos vetoriais dependem das propriedades do meio.

Na ausência de cargas e correntes, as equações de Maxwell num meio contínuo podem ser escritas como:

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{D} = 0, \tag{A.1}$$

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{B} = 0, \tag{A.2}$$

$$\vec{\nabla} \times \vec{E} = -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t} \tag{A.3}$$

e

$$\vec{\nabla} \times \vec{H} = \frac{\partial \vec{D}}{\partial t}. \tag{A.4}$$

Apêndice B

Matriz de Transferência

Como complemento do Capítulo 2, este anexo apresenta a obtenção da matriz de transferência entre dois pontos z e $z + \Delta z$, dentro de uma região L com permissividade ϵ_L.

De (2.12) e (2.13), com $\epsilon(z) = \epsilon_L$, temos

$$h''(z) + \left(\frac{\omega}{c}\right)^2 \epsilon_L \, h(z) = 0. \tag{B.1}$$

A solução geral dessa equação diferencial pode ser escrita como

$$h(z) = C_1 \cos(\alpha z) + C_2 \operatorname{sen}(\alpha z), \tag{B.2}$$

com

$$\alpha = \left(\frac{\omega}{c}\right) \sqrt{\epsilon_L} \tag{B.3}$$

Então, por (2.12), em (B.3),

$$f(z) = \frac{1}{\sqrt{\epsilon_L}}[-C_1 \operatorname{sen}(\alpha z) + C_2 \cos(\alpha z)]. \tag{B.4}$$

As equações (B.2) e (B.4) podem ser escritas simultaneamente na seguinte forma matricial

$$\begin{pmatrix} h(z) \\ f(z) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos(\alpha z) & \operatorname{sen}(\alpha z) \\ -\frac{\operatorname{sen}(\alpha z)}{\sqrt{\epsilon_L}} & \frac{\cos(\alpha z)}{\sqrt{\epsilon_L}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C_1 \\ C_2 \end{pmatrix}. \tag{B.5}$$

Consequentemente,

$$\begin{pmatrix} C_1 \\ C_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\cos(\alpha z)}{\sqrt{\epsilon_L}} & -\operatorname{sen}(\alpha z) \\ \frac{\operatorname{sen}(\alpha z)}{\sqrt{\epsilon_L}} & \cos(\alpha z) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} h(z) \\ f(z) \end{pmatrix}, \tag{B.6}$$

e

$$\begin{pmatrix} h(z+\Delta z) \\ f(z+\Delta z) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos(\alpha(z+\Delta z)) & \operatorname{sen}(\alpha(z+\Delta z)) \\ -\frac{\operatorname{sen}(\alpha(z+\Delta z))}{\sqrt{\epsilon_L}} & \frac{\cos(\alpha(z+\Delta z))}{\sqrt{\epsilon_L}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C_1 \\ C_2 \end{pmatrix}. \tag{B.7}$$

Logo, de (B.6) e (B.7), substituindo o valor de α, temos

$$\begin{pmatrix} h(z+\Delta z) \\ f(z+\Delta z) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos(\frac{\omega\sqrt{\epsilon_L}\Delta z}{c}) & \sqrt{\epsilon_L}\operatorname{sen}(\frac{\omega\sqrt{\epsilon_L}\Delta z}{c}) \\ -\frac{1}{\sqrt{\epsilon_L}}\operatorname{sen}(\frac{\omega\sqrt{\epsilon_L}\Delta z}{c}) & \cos(\frac{\omega\sqrt{\epsilon_L}\Delta z}{c}) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} h(z) \\ f(z) \end{pmatrix}, \tag{B.8}$$

onde

$$\mathbf{T}_L(\omega, \Delta z) = \begin{pmatrix} \cos(\frac{\omega\sqrt{\epsilon_L}\Delta z}{c}) & \sqrt{\epsilon_L}\operatorname{sen}(\frac{\omega\sqrt{\epsilon_L}\Delta z}{c}) \\ -\frac{1}{\sqrt{\epsilon_L}}\operatorname{sen}(\frac{\omega\sqrt{\epsilon_L}\Delta z}{c}) & \cos(\frac{\omega\sqrt{\epsilon_L}\Delta z}{c}) \end{pmatrix} \tag{B.9}$$

é a matriz de transferência entre dois pontos dentro de uma região de permissividade constante.

Referências Bibliográficas

[1] ASHCROFT, N. W.; MERMIN, N. D. ***Solid State Physics***. Fort Worth: Harcourt Brace College Publishers, 1976.

[2] WANNIER, G. H. **The Structure of Electronic Excitation Levels in Insulating Crystals**. *Physical Review*, v. 52, p. 191–197, 1937.

[3] MARZARI, N.; VANDERBILT, D. **Maximally localized generalized Wannier functions for composite energy bands**. *Physical Review B*, v. 56, n. 20, p. 12847–12865, 1997.

[4] KOHN, W. **Analytic Properties of Bloch Waves and Wannier Functions**. *Physical Review*, v. 115, n. 4, p. 809–821, 1959.

[5] BRUNO-ALFONSO, A.; HAI, G. Q. **Bloch-Kohn and Wannier-Kohn functions in one dimension**. *J. Phys.: Condens. Matter*, v. 15, p. 6701–6714, 2003.

[6] BUTCHER, G. `http://missionscience.nasa.gov/ems/TourOfEMS_Booklet_web.pdf`.

[7] HALLIDAY, D.; RESNICK, R.; WALKER, J. ***Fundamentos de Física - vol. 4***. Rio de Janeiro: Editora LTC, 2009.

[8] JOANNOPOULOS, J. D. et al. ***Photonic Crystals: molding the flow of light***. New Jersey: Princeton University Press, 2008.

[9] PAQUET, C.; KUMACHEVA, E. **Nanostructured polymers for photonics**. *Materials Today*, v. 11, p. 48–56, 2008.

[10] YABLONOVITCH, E. **Inhibited Spontaneous Emission in Solid-State Physics and Eletronics**. *Physical Review Letters*, v. 58, p. 2059–2062, 1987.

[11] GALUSHA, J. W. et al. **Discovery of a diamond-based photonic crystal structure in beetle scales**. *Physical Review E*, v. 77, p. 050409, 2008.

[12] LEUNG, K. M. **Defect modes in photonic band structures: a Green's function approach using vector Wannier functions**. *J. Opt. Soc. Am. B*, v. 10, n. 2, p. 303–306, 1993.

[13] WHITTAKER, D. M.; CROUCHER, M. P. **Maximally localized Wannier functions for photonic lattices**. *Physical Review B*, v. 67, n. 8, p. 085204, 2003.

[14] SOTIRELIS, P.; ALBRECHT, J. D. **Numerical simulation of photonic crystal defect modes using unstructured grids and Wannier functions**. *Physical Review B*, v. 76, p. 075123, 2007.

[15] TALANINA, I.; STERKE, C. M. de. **Bloch waves and Wannier functions in periodic superstructure Bragg gratings**. *Physical Review A*, v. 62, n. 4, p. 043802, 2000.

[16] MURADOGLU, M. S.; BAGHAI-WADJI, A. R.; NG, T. W. **Prospects of Wannier functions in investigating photonic crystal all-optical devices for signal processing**. *J. Opt. Soc. Am. A*, v. 27, n. 4, 2010.

[17] MIYAZAKI, H. et al. **Defects and Photonic Wells in One-Dimensional Photonic Lattices**. *Journal of the Physical Society of Japan*, v. 65, n. 12, p. 3842–3852, 1996.

[18] ARMELLINI, C. et al. Er^{3+} **activated nanocomposite photonic glasses and confined structures**. *Optical Materials*, v. 31, p. 1071–1074, 2009.

[19] ROMANO, M. C.; NACBAR, D. R.; BRUNO-ALFONSO, A. **Wannier functions of a one-dimensional photonic crystal with inversion symmetry**. *Journal of Physics B: At. Mol. Opt.Pphys.*, v. 43, p. 215403, 2010.

[20] SHELYKH, I. A.; IVANOV, V. K. **Differential Equation for the Transfer Matrix**. *International Journal of Theorical Physics*, v. 43, p. 477–482, 2004.

[21] NUSSENZVEIG, H. M. ***Curso de Física Básica - vol. 4***. São Paulo: Editora Blücher, 1998.

[22] PIZA, A. F. R. de T. ***Mecânica Quântica***. SÃ£o Paulo: Editora da Universidade de SÃ£o Paulo, 2003.

[23] NACBAR, D. R. **Cálculo de Funções de Wannier Eletrônicas para Aplicações em Ciência dos Materiais**. Dissertação (Mestrado) - Universidade Estadual Paulista - Unesp, 2007.

[24] TAKEDA, H.; CHUTINAN, A.; JOHN, S. **Localized light orbitals: Basis states for three-dimensional photonic crystal microscale circuits**. *Physical Review B*, v. 74, n. 19, p. 195116, 2006.

[25] CAVALCANTI, S. B. et al. **Photonic band structure and symmetry properties of electromagnetic modes in photonic crystals**. *Physical Review E*, v. 75, p. 026607, 2007.

[26] HE, L.; VANDERBILT, D. **Exponential Decay Properties of Wannier Functions and Related Quantities**. *Physical Review Letters*, v. 86, n. 23, p. 5341–5344, 2001.

[27] BRUNO-ALFONSO, A.; NACBAR, D. R. **Wannier functions of isolated bands in one-dimensional crystals**. *Physical Review B*, v. 75, p. 115428, 2007.

[28] CALLIOLI, C. A.; DOMINGUES, H. H.; COSTA, R. C. F. ***Álgebra Linear e Aplicações***. São Paulo: Atual Editora, 1990.

[29] NUSSENZVEIG, H. M. ***Curso de Física Básica - vol. 3***. São Paulo: Editora Blücher, 1997.