

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

Janaine Maria Sereguetti

EFEITOS DA GEOMETRIA E DA COMPOSIÇÃO NO ESPECTRO DE
CRISTAIS FOTÔNICOS 2D

Bauru
2012

Janaine Maria Sereguetti

EFEITOS DA GEOMETRIA E DA COMPOSIÇÃO NO ESPECTRO DE
CRISTAIS FOTÔNICOS 2D

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
2012

Sereguetti, Janaine Maria.

Efeitos da Geometria e da Composição no Espectro de Cristais Fotônicos 2D / Janaine Maria Sereguetti, 2012
77 f. il.

Orientador: Alexys Bruno Alfonso

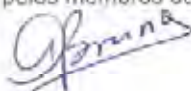
Dissertação (Mestrado)-Universidade Estadual Paulista. Faculdade de Ciências, Bauru, 2012

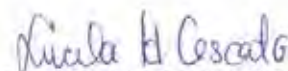
1. Cristal Fotônico. 2. Equações de Maxwell. 3. Equação de onda. 4. Célula unitária. 5. Ondas planas. 6. Gap Fotônico. I. Universidade Estadual Paulista. Faculdade de Ciências. II. Título.

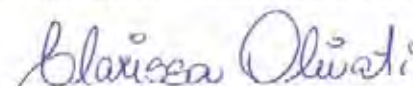
ATA DA DEFESA PÚBLICA DA DISSERTAÇÃO DE MESTRADO DE JANAINE MARIA SEREGUETTI, DISCENTE DO PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM CIÊNCIA E TECNOLOGIA DE MATERIAIS, DO(A) FACULDADE DE CIÊNCIAS DE BAURU.

Aos 29 dias do mês de junho do ano de 2012, às 14:00 horas, no(a) Anfiteatro da Pós-graduação da Faculdade de Ciências de Bauru, reuniu-se a Comissão Examinadora da Defesa Pública, composta pelos seguintes membros: Prof. Dr. ALEXYS BRUNO ALFONSO do(a) Departamento de Matemática / Faculdade de Ciências de Bauru, Profa. Dra. LUCILA HELENA DELIESPOSTE CESCATO do(a) Instituto de Física / Universidade Estadual de Campinas, Profa. Dra. CLARISSA DE ALMEIDA OLIVATI do(a) Departamento de Física, Química e Biologia / Faculdade de Ciências e Tecnologia de Presidente Prudente, sob a presidência do primeiro, a fim de proceder a arguição pública da DISSERTAÇÃO DE MESTRADO de JANAINE MARIA SEREGUETTI, intitulada "EFEITOS DO DESIGN DA CÉLULA UNITÁRIA NO ESPECTRO DE CRISTAIS FOTONICOS 2D". Após a exposição, a discente foi arguida oralmente pelos membros da Comissão Examinadora, tendo recebido o conceito final: aprovada. 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




Profa. Dra. LUCILA HELENA DELIESPOSTE CESCATO


Profa. Dra. CLARISSA DE ALMEIDA OLIVATI

Novo Título:

Efeitos da Geometria e da Composição no Espectro de Cristais Fotônicos 2D.

Dedico ao Deus que é onisciente, onipresente e onipotente. Sem Ele nada seria possível.

Agradecimentos

Agradeço a Deus pela criação de seres tão dotados de capacidades. Agradeço em especial a Jesus, pois é em mim Deus forte, poderoso e consolador.

Agradeço a meus pais Pedro Pereira Sereguetti e Demarisa Mazarotto Sereguetti por me ensinarem que antes das conquistas vêm as lutas e, pelo exemplo de vida e dignidade que sempre representaram à mim e à minha família.

A meus avós, Domingos e Maria, pela preocupação e zelo com a minha vida.

A meus irmãos, Jaqueline e Juliano, pelos momentos de desabafo seguidos de sábios conselhos e de muita descontração, mostrando que pode ser suave viver.

A meus tios Denilson e Mara, e Aparecida e Nadil pelo incentivo e apoio moral. Enfim, a todos da minha família que acreditaram neste sonho.

Meus agradecimentos também são a uma pessoa especial, meu namorado André, que sempre me alertou sobre a importância de “sair da caverna”, em outras palavras, que o conhecimento faz a diferença em nossas vidas. Principalmente sou grata a ele por respeitar as minhas decisões.

Às professoras Lucila Helena Deliesposte Cescato e Clarissa de Almeida Olivati pela participação em meu exame de qualificação e defesa, bem como pelas sugestões importantes e pertinentes que contribuíram para melhoraria do trabalho.

Agradeço de coração ao meu orientador Alexys Bruno Alfonso por tornar possível este sonho. Pelas produtivas e geniais conversas e, sobretudo por acreditar no meu potencial e nunca deixar-me esmorecer ao longo do caminho.

Sereguetti J. M. **Efeitos da Geometria e da Composição no Espectro de Cristais Fotônicos 2D** 2012. 77f. Dissertação (Programa de Pós-graduação em Ciência e Tecnologia de Materiais). UNESP, Bauru, 2012.

RESUMO

Os cristais fotônicos têm recebido grande atenção da comunidade científica nos últimos anos. As suas aplicações incluem a construção de guias de onda, chips ópticos e células solares, o controle de emissão de radiação e o gerenciamento de informações. Neste trabalho são calculados os modos de propagação de ondas eletromagnéticas em cristais fotônicos bidimensionais. Os cristais estudados são arranjos de fios circulares infinitos de um tipo de meio óptico, imersos numa matriz de outro meio óptico. As estruturas cristalinas consideradas são a quadrada simples, hexagonal simples e a honeycomb. É analisada a propagação perpendicular aos fios e, portanto, são consideradas duas polarizações: a transversal elétrica e a transversal magnética.

Os cálculos numéricos são realizados para diferentes combinações dos materiais que compõem o cristal fotônico. Isto permite investigar como o espectro fotônico depende da geometria do cristal e do contraste entre os meios ópticos que o compõem. Para resolver a equação de ondas, o campo eletromagnético é expresso como combinação linear de um conjunto de ondas harmônicas planas. Foi encontrado bom acordo entre as frequências calculadas e resultados disponíveis na literatura do tema, corroborando a existência de gaps fotônicos parciais nas estruturas simples e gaps fotônicos completos na estrutura honeycomb. Além disso, verificou-se que o surgimento de gaps requer menor contraste de índice de refração no caso hexagonal, quando comparado com o quadrado.

Palavras chave: cristal fotônico, equações de Maxwell, equação de ondas, célula unitária, ondas planas, gap fotônico.

Sereguetti J. M. **Effects of Geometry and Composition on the Spectrum of 2D Photonic Crystals** 2012. 77p. Dissertation (Program of Masters Degree in Science and Technology of Materials). UNESP, Bauru, 2012.

ABSTRACT

Photonic crystals have received some attention from the scientific community in the last years. Their applications include the fabrication of waveguides, optical chips and solar cells, control of radiation emission and information management. In this work, the propagation of electromagnetic waves in two-dimensional photonic crystals is theoretically investigated. The structures under study are periodic arrangements of infinite circular wires of a given optical medium, immersed in a matrix of another optical medium. The considered crystalline structures are the simple square, the simple hexagonal and the honeycomb lattices. Only the propagation perpendicular to the wires is analyzed. Hence, we consider two polarizations: transverse electric and transverse magnetic.

The calculations are performed for different combinations of the materials composing the crystal. This allows the investigation of how the photonic spectrum depends on both the crystal geometry and the contrast between the refractive index of the composing materials. The wave equation is solved by expressing the solution as a linear combination of a set of harmonic plane waves. Good agreement between the calculated frequencies and the results available in the literature is found, thus confirming the existence of partial photonic gaps in the simple lattices and complete photonic gaps in the honeycomb lattice. Moreover, it was verified that occurrence of gaps in the hexagonal case requires less refractive-index contrast, when compared with the square one.

Key words: photonic crystal, Maxwell's equations, wave equation, unit cell, plane waves, photonic band gap.

Sumário

Sumário	vi
1 Introdução	8
2 Conceitos básicos	20
2.1 Rede de Bravais bidimensional e célula unitária	20
2.2 Cristais fotônicos unidimensionais, bidimensionais e tridimensionais	21
2.3 Séries de Fourier	22
2.4 Rede recíproca e zona de Brillouin	23
2.5 Equação das ondas eletromagnéticas	24
2.5.1 Equações de Maxwell no vácuo	25
2.5.2 Equações de Maxwell na matéria	26
3 Propagação de ondas em cristais fotônicos bidimensionais	28
3.1 Propagação num meio homogêneo	29
3.2 Método de sobreposição de ondas planas	31
3.3 Coeficientes de Fourier do inverso da permissividade elétrica	33
3.4 Polarizações para incidência no plano da periodicidade	34
3.4.1 Polarização Transversal Elétrica	35
3.4.2 Polarização Transversal Magnética	36
3.4.3 Procedimentos numéricos e computacionais	37
3.5 Conclusões do capítulo	38
4 Resultados numéricos e discussões	39
4.1 A rede quadrada	39
4.1.1 Célula unitária com um fio circular	40

4.1.1.1	Obtenção dos coeficientes de Fourier	40
4.1.1.2	Análise gráfica e numérica das séries de Fourier	41
4.1.1.3	As bandas de frequência	45
4.2	A rede hexagonal	48
4.2.1	Célula unitária com um fio circular	48
4.2.1.1	Obtenção dos coeficientes de Fourier	48
4.2.1.2	As bandas de frequência	51
4.2.2	Célula unitária com dois fios circulares: a estrutura honeycomb . . .	53
4.2.2.1	Obtenção dos coeficientes de Fourier	53
4.2.2.2	As bandas de frequência	55
4.3	Comparação entre diferentes composições e geometrias	57
4.3.1	Análise das frequências em diferentes redes cristalinas	57
4.3.2	Redes cristalinas e o contraste dielétrico	59
4.4	Conclusões do capítulo	63
5	Conclusões	65
A	Funções de Bessel	67
B	Autovalores e autovetores	69
	Referências Bibliográficas	71

Capítulo 1

Introdução

A Idade da Pedra, a Idade do Bronze e a Idade do Ferro foram períodos assim chamados em razão da utilização desses materiais pelo homem. Esse contato despertou na raça humana a necessidade de dominar verdadeiramente os materiais e buscar novos e promissores horizontes. Assim, ao homem coube embarcar numa viagem sem limites, que dá início num mundo macroscópico, passa por um mundo micro e chega em um mundo nanoscópico. Desbravar esses mundos é o papel da Ciência dos Materiais, que através de métodos teóricos e experimentais explica e prediz as propriedades de cada material. Essas ações são, ao mesmo tempo, causa e efeito do desenvolvimento de novas tecnologias. Dentre a gama de materiais estudados nesta ciência, os cristais merecem destaque. Sua estrutura periódica lhes confere propriedades peculiares em relação ao comportamento dos elétrons e às formas de propagação de ondas mecânicas e eletromagnéticas.

As investigações mais esclarecedoras sobre a origem e forma de propagação das ondas eletromagnéticas no vácuo e em meios materiais foram desenvolvidas principalmente no século XIX. A história do eletromagnetismo durante a primeira metade desse século esteve vinculada às ideias de unidade no universo. Em 1820, Hans Christian Oersted fez a primeira verificação experimental da unidade entre a eletricidade e o magnetismo. Os trabalhos de Ampère representaram o segundo mais importante passo para o Eletromagnetismo, permitindo calcular o campo magnético em torno de uma corrente elétrica que passa num fio. Faraday escreveu trabalhos científicos sobre experimentos que permitiram comprovar a interação entre a luz e o magnetismo. Nomes como Gauss, Hertz, Riemann e Weber também são importantes, devido às contribuições para o desenvolvimento da teoria eletromagnética [1]. Na segunda metade do século XIX, Maxwell, unificou as leis previa-

mente propostas por estudiosos do assunto. Assim, quatro leis de origem empírica foram enunciadas; elas dão sustentação ao Eletromagnetismo. A partir dessas leis, Maxwell demonstrou que a velocidade de propagação das ondas eletromagnéticas no vácuo tem valor de 299 792 458 metros por segundo [2, 3]. Analogamente, quando as ondas propagam-se em meios materiais, a propagação depende das propriedades do meio em questão. A frequência pode variar numa ampla faixa, desde as ondas de rádio, 30 kHz - 300 MHz, até os raios gama, com frequência variando de 48 EHz até 48 ZHz [2]. Entretanto, a frequência da onda não depende do meio de propagação, permanecendo constante ao longo da trajetória [4]. Quando o meio apresenta as mesmas propriedades em todas as direções, ou seja, quando em meios isotrópicos, as ondas propagam-se de acordo com a permissividade dielétrica relativa, ϵ , e a permeabilidade magnética relativa, μ , do meio. A velocidade de propagação depende do índice de refração, $n = \sqrt{\epsilon\mu}$, e vale $v = \frac{c}{n}$. Em meios comuns, em que $\mu \approx 1$ e $\epsilon > 1$, comprova-se o esperado, ou seja, que a velocidade das ondas nesses meios é menor que no vácuo, $v < c$ [4]. Experimentalmente, verifica-se que n tem dependência com a frequência e que a sua variação no espaço causa desvio dos feixes de luz. Esse fenômeno, conhecido como refração, ocorre nas lentes. Os raios luminosos que incidem numa lente podem ser desviados, convergirem para o eixo principal ou divergirem dele, dependendo do índice de refração do material e da forma da lente.

Nas estruturas chamadas de cristais fotônicos, o índice de refração pode ser positivo ou negativo, dependendo da frequência das ondas que se propagam na estrutura [5]. A permissividade dielétrica e a permeabilidade magnética apresentam a periodicidade de uma rede de Bravais. Essa periodicidade pode ser em uma, duas ou três dimensões [6]. O cristal unidimensional é um arranjo de camadas com diferentes constantes dielétricas que se alternam periodicamente [7, 8, 9, 10]. Inoue *et al.* estudaram teoricamente as propriedades magneto-ópticas de cristais fotônicos unidimensionais compostos por camadas magnéticas e dielétricas [7]. Guo estudou, usando teoria eletromagnética básica e matriz de transferência, as bandas de cristais fotônicos de plasma, nos quais a incidência das ondas ocorre obliquamente [8]. Romano dissertou sobre o tema funções de Wannier para cristais fotônicos unidimensionais. Nesse trabalho são calculadas as funções de Wannier bem localizadas e investigados os modos eletromagnéticos localizados produzidos por defeitos nos cristais fotônicos [9].

Os cristais fotônicos bidimensionais possuem periodicidade no plano xy e homoge-

neidade na direção perpendicular [11, 12, 13, 14, 15, 16, 17]. Quiñónez, dissertou sobre cristais fotônicos 2D e discutiu os cálculos utilizados para projetar os cristais e o processamento utilizado para fabricá-los [11]. Søndergaard, investigou as propriedades da radiação em cristais bidimensionais com e sem a introdução de microcavidades [12]. Essa investigação foi feita através da densidade de estados, a qual expressa o número de modos de propagação por unidade de frequência.

Os cristais fotônicos tridimensionais, por sua vez, são análogos a um material sólido cristalino, ou seja, são periódicos no espaço xyz [18, 19, 20, 21, 22]. Zakhidov *et al.* produziram amostras de carbono poroso tridimensionalmente periódico na escala de comprimentos de onda ópticos, por uma rota de síntese semelhante à formação geológica da opala natural [18]. Noda *et al.* produziram um cristal fotônico tridimensional que exibe gap fotônico completo numa região próxima do infravermelho [19]. O cristal foi construído pelo empilhamento de listras semicondutoras de período $0.7\ \mu\text{m}$, com precisão de 30 nm, mediante uma técnica de processamento avançado.

Quando trabalhamos com cristais não magnéticos, a permeabilidade magnética é igual a 1 e a permissividade dielétrica é igual ao quadrado do índice de refração do meio. Devido à periodicidade dessas propriedades, as ondas podem ser classificadas pelo vetor de onda $\vec{k}$, de modo que seja satisfeita a condição de Bloch [6, 23]. A frequência de propagação das ondas depende de $\vec{k}$ e o conjunto de frequências permitidas corresponde às bandas. No século XIX, mais precisamente no ano de 1887, Lord Rayleigh já estudava a propagação das ondas em estruturas periódicas [24]. Em 1956, Kaprielian investigou as características de transmissão eletromagnética ao longo de uma rede de cilindros condutores infinitos [25]. Bykov, em 1975, descreveu a possibilidade de usar estruturas periódicas para o controle de emissão espontânea [26]. Em 1985, Bulgakov *et al.* averiguaram estados de superfície que ocorrem devido à propagação de ondas eletromagnéticas em multicamadas periódicas [27].

No ano de 1987, o conceito de gap fotônico, que é uma faixa de frequência sem modo de propagação, foi estabelecido por Yablonovitch. Ele foi o primeiro a dar o nome de cristais de fotônicos a estas estruturas periódicas [28]. No ano de 1990, Ho *et al.* obtiveram a estrutura de bandas para cristais fotônicos com rede cúbica de face centrada (FCC), a opala, consistindo de esferas dielétricas com alto índice de refração imersas em ar [29]. Em 1991, Sajeev John afirmou que microestruturas dielétricas periódicas causam novos efeitos

ópticos na luz, como é o caso dos modos localizados [30]. Dois anos mais tarde, Soziier e Haus calcularam a estrutura de bandas de cristais fotônicos FCC (opala invertida), que consiste em um número de cavidades esféricas separadas por defletores com maior índice de refração [31]. Nasceu assim a área de pesquisa chamada de cristais fotônicos.

Dependendo da geometria e da composição, os cristais fotônicos podem apresentar gaps fotônicos [32]. Os cristais unidimensionais podem exibir gaps, quando a luz incide perpendicularmente às camadas, modos localizados e estados de superfície. Em duas dimensões, os cristais podem apresentar gap fotônico, quando a incidência ocorre no plano da periodicidade, modos localizados por defeitos pontuais, defeitos lineares e estados de superfície. Os cristais em três dimensões, por sua vez, podem apresentar gap fotônico para qualquer direção de incidência da luz, localização em defeitos pontuais, localização em defeitos lineares e estados de superfície. A descoberta desses cristais foi uma das mais importantes na área de fotônica [31, 32]. Quando apresentam gaps, os cristais podem refletir a luz em quaisquer direções, com comprimentos de onda específicos. Essa propriedade confere-lhes a capacidade de confinar e guiar as ondas [20].

Os cristais fotônicos podem ser encontrados na natureza [21, 33, 34]. Fenômenos ópticos do mundo natural têm fascinado pesquisadores desde o início dos estudos da óptica. Newton e Young são exemplos de estudiosos que tentaram compreender a iridescência das penas dos pássaros, asas das borboletas e carapaça dos besouros. Trata-se da propriedade de algumas superfícies que parecem mudar de cor com a variação do ângulo de iluminação. Seago *et al.* relataram sobre a gama de mecanismos de iridescência e dos efeitos ópticos nos besouros. Eles citam os cristais fotônicos tridimensionais como uma das possíveis causas da iridescência e da reflexão de cores vivas [35] (ver Fig. 1.1). Galusha *et al.* investigaram a estrutura dos cristais fotônicos presentes na carapaça do besouro brasileiro *Lamprocyphus Augustus* [21]. Acredita-se que esse material altamente organizado apresenta grande potencial de aplicação como, por exemplo, na produção de computadores ópticos.

As borboletas também são alvos de estudos motivados pelas exuberantes cores produzidas na estrutura microscópica das suas asas. Com uma estrutura regular, periódica e nanoestruturada, os raios de luz que chegam até as asas são espalhados em direções e comprimentos de onda específicos, permitindo que vejamos cores bem definidas [33, 36] (ver Fig. 1.2). A Empresa L'Oréal, inspirada nas pesquisas de Peter Vukusic, especia-

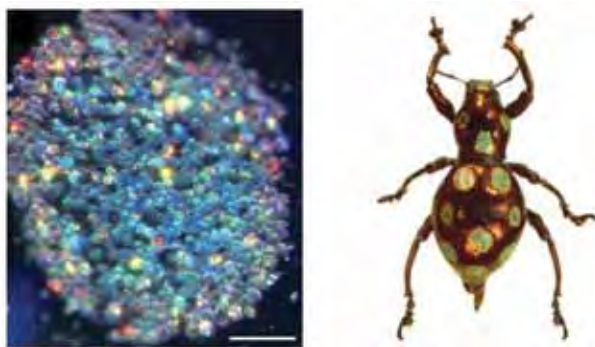


Figura 1.1: Cristais fotônicos tridimensionais no besouro *Pachyrrhynchus gemmatus*. (ver Ref. [35]).



Figura 1.2: Fotografia de quatro espécies de borboletas (a) *Gonepteryx cleopatra*, (b) *Gonepteryx rhamni*, (c) *Hebomoia glaucippe*, (d) *Colotis regina*, e micrografias eletrônicas da estrutura das asas (ver Ref. [36]).

lista nas cores do mundo animal, utiliza essa tecnologia para desenvolver maquiagens e esmaltes. Vukusic estudou métodos físicos para investigar cores das estruturas de sistemas biológicos [34].

Na área de Ciência e Tecnologia de Materiais, os cristais fotônicos sintetizados podem ter uma gama de aplicações. A fabricação dos dispositivos que contêm cristais fotônicos apresenta total dependência com suas aplicações, e a escolha dos materiais a utilizar é um trabalho que não pode ser menosprezado. Os materiais selecionados devem ser transparentes na faixa de frequência em que os cristais irão operar. O processamento ou a síntese dos materiais escolhidos permite produzir guias de ondas, células solares, LEDs (diodos emissores de luz), chips e processadores.

Thomas Krauss *et al.*, em 1999, escreveram sobre as possíveis aplicações dos cristais fotônicos e avaliaram as limitações práticas da utilização dos cristais, levando em consi-

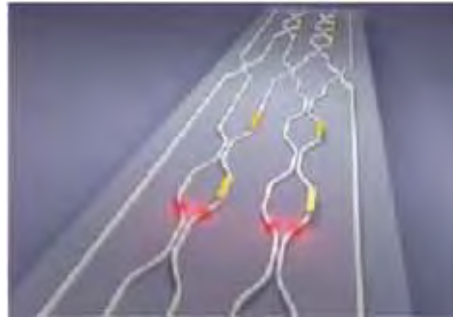


Figura 1.3: Esquema do chip fotônico quântico, mostrando o circuito de guias de onda (branco) e os inversores de fase controlados eletricamente (contatos metálicos). Os pares de fótons tornam-se entrelaçados ao passarem através do circuito [Imagem: University of Bristol] (ver Ref. [40]).

deração a questão da frequência de operação desses dispositivos [37]. Pesquisadores do Canadá, em conjunto com espanhóis, têm sintetizado cristais fotônicos de silício puro que são totalmente compatíveis com a microeletrônica atual. Os novos cristais podem ser utilizados como gerenciadores de informações [38]. Com a mesma finalidade, Vlasov *et al.* têm utilizado uma técnica experimental comum na fabricação de semicondutores para criar cristais fotônicos monocristalinos. Reunindo uma fina camada de esferas coloidais em substrato de silício, os pesquisadores conseguem cristais com baixa densidade de defeitos e com gap fotônico [20]. Nesta linha de pesquisa, Feng e sua equipe desenvolveram um guia de ondas híbrido, usando metais e silício, que canaliza e impede os refluxos da luz. O resultado é o equivalente óptico do diodo eletrônico [39].

A empresa StarSolar, que está licenciando tecnologia desenvolvida pelo MIT (*Massachusetts Institute of Technology*), tem utilizado cristais fotônicos na fabricação de células solares. O resultado das pesquisas pode trazer benefícios como o aumento da eficiência das células em até 37% e, principalmente, a diminuição da utilização de silício, acarretando menores custos de fabricação e, consequentemente, a garantia da competitividade no mercado [41]. Visando a melhoria da capacidade das células solares em captar os fótons, um grupo de pesquisadores do Instituto de Tecnologia da Califórnia (Caltech), nos Estados Unidos, também construiu o primeiro metamaterial que apresenta índice de refração negativo para a luz visível [5, 42] (ver Fig. 1.3). Os metamateriais são materiais ópticos artificiais tridimensionais, formados por pequenas estruturas menores do que o comprimento de onda da luz visível (700 nm a 400 nm), o que lhes confere propriedades e comportamentos que não são encontrados em materiais naturais. Nestes materiais, a luz

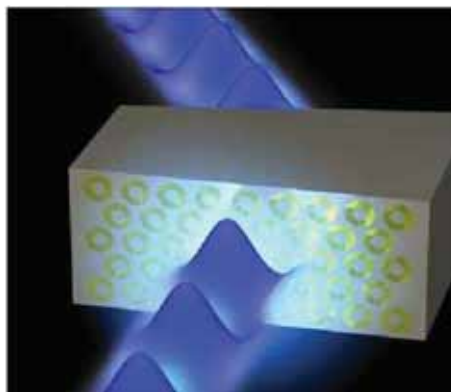


Figura 1.4: Guias de ondas plasmônicas, em que há oscilações coletivas de polarização, oferecem uma nova abordagem óptica dado que percebem o índice de refração negativo (ver Ref. [42]).

se refrata do lado oposto da normal, em relação à direção do raio de luz que é refratado nos materiais comuns. Um metamaterial com índice de refração negativo também tem aplicabilidade em dispositivos de invisibilidade, e nas chamadas superlentes, que permitem a geração de imagens além do limite de difração [5, 43].

Na área de dispositivos, estudiosos da Universidade de Illinois em Urbana-Champaign fizeram um cristal fotônico tridimensional de alta qualidade e utilizaram na fabricação de LEDs. A Companhia Luminus também têm trabalhado neste sentido e tem utilizado os cristais fotônicos, dado que estes ajudam a melhorar a saída de luz, fazendo com que estes dispositivos brilhem mais e tenham maior eficiência energética [44].

Na Universidade de Bristol, situada na Inglaterra, estudiosos construíram um pequeno chip fotônico que é capaz de gerar, manipular e medir o estranho fenômeno do entrelaçamento quântico. Esse fenômeno físico ocorre quando duas partículas interagem uma com a outra de tal forma que seus estados quânticos se tornam interdependentes. Um professor dessa universidade, Jeremy O'Brien, afirma: "Para construirmos um computador quântico precisamos não apenas controlar fenômenos complexos, como o entrelaçamento e a mistura quântica, mas precisamos fazer isto num chip" [40] (ver Fig. 1.3). No ano de 2008, Dang investigou a possibilidade de utilizar materiais orgânicos como base de cristais fotônicos em 2D. Diferentes aspectos da formação de gaps fotônicos absolutos são examinados em cristais com poros de ar nos filmes orgânicos. Para uma dada orientação da luz, o cristal com rede hexagonal mostrou-se ser um bom inibidor da luz para frequências do visível [45].

Pesquisas importantes sobre cristais fotônicos realizam-se em vários institutos espalha-

dos pelo mundo. Dos Estados Unidos de América, podemos citar: *The College of Optics and Photonics*, na Flórida, *California Institute of Technology* (Caltech), na Califórnia, e *Massachusetts Institute of Technology* (MIT), em Massachusetts. Na Europa, destacamos: *Institute of Photonics*, em Glasgow, UK; *Institut de Ciències Fotòniques* (ICFO), em Barcelona, Espanha; *Institute of Photonic Technology* (IPHT), em Jena, Alemanha. Também há centros relevantes em outras regiões, tais como: *Photonics Advanced Research Center*, em Osaka, Japão e *Institute of Photonics and Optical Science*, em Sidney, Austrália.

No Brasil, as pesquisas na área de cristais fotônicos acontecem tanto na área teórica, como na experimental. Pesquisadores da Universidade Estadual de Campinas (Unicamp), em conjunto com um pesquisador italiano, desenvolveram um método teórico eficiente para calcular bandas de frequência de estruturas periódicas 2D, anisotrópicas e com formas curvas [14]. Vasconcelos *et al.* investigaram gaps fotônicos em estruturas quase-periódicas compostas de materiais com índice de refração positivo (SiO_2) e negativo. O problema foi investigado usando o método teórico da matriz de transferência [46]. Na Universidade de Federal de Fortaleza, pesquisadores propuseram uma memória óptica embebida em um cristal fotônico não-linear, cujo sistema de escrita e leitura de dados é controlado por um sinal de comando externo [47]. Novamente na Unicamp, Nalin *et al.*, em 2007, demonstraram com sucesso um método de fabricação de cristais fotônicos 2D através da combinação de gravação holográfica e evaporação, em vidros baseados em antimônio [15]. Mais recentemente, Menezes *et al.*, desenvolveram dispositivos plasmônicos que consistem de filmes de ouro cobertos homogeneamente por nanoburacos [48]. Seu potencial de aplicação em biosensoriamento e em energia fotovoltaica é demonstrado. Cerqueira, também da Unicamp, relatou sobre fibras de cristais fotônicos (PCFs) criadas em 1995. A PCF é um novo tipo de fibra óptica, que aprisiona a luz dentro de uma matriz microscópica e periódica de buracos de ar por meio das variações do índice de refração. Essa inovadora tecnologia tem trazido avanços principalmente na área das telecomunicações [13].

Das contribuições brasileiras nesta área de pesquisa, merecem destaque as publicações teóricas feitas pelo grupo de pesquisadores liderado pelo Professor Luiz E. Oliveira, da Unicamp, sobre a propagação de ondas eletromagnéticas em estruturas compostas por camadas alternadas de ar e metamateriais [49, 50, 51]. Foram atividades desse grupo aquelas que mais motivaram e serviram de base para a realização do presente trabalho.

As comunicações sobre cristais fotônicos ocorrem em conhecidas revistas como *Nature*

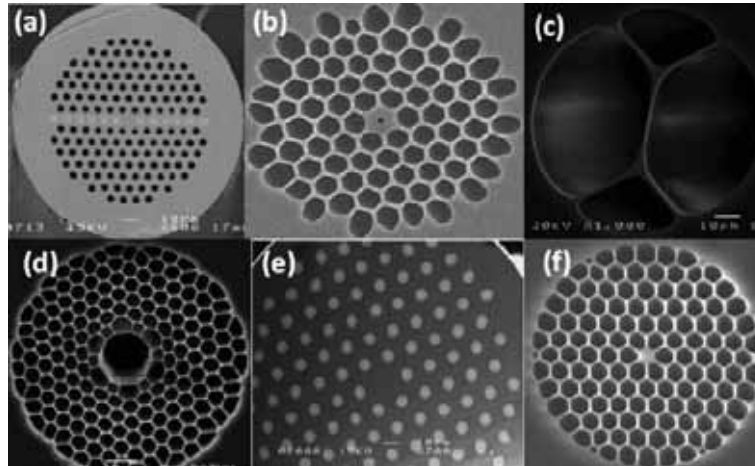


Figura 1.5: Imagens de Fibras de Cristal Fotônico (ver Ref. [13]).

Photonics, Science, Nanoscale Research Letters, Physical Review Letters, Optics Express e Nature Materials. Uma bibliografia consagrada na área é o livro “*Photonic Crystals: Molding the Flow of Light*”, publicado por pesquisadores do MIT, que é utilizado no mundo todo [6]. Outros livros relevantes são: “*Optical Properties of Photonic Structures: Interplay of Order and Disorder*”, por M. F. Limonov e R. M. de la Rue; “*Fundamentals of Photonic Crystal Guiding*”, por M. Skorobogatiy e J. Yang; “*Optical Properties of Photonic Crystals*”, por K. Sakoda e “*Photonic Crystals, Theory, Applications and Fabrication*”, por D. Prather, A. Sharkawy, S. Shi e J. Murakowski.

Toda inovação requer muitas investigações, sejam teóricas ou experimentais. Na área de cristais fotônicos, assim como as demais áreas da Ciência dos Materiais, uma gama de estudos podem ser realizados. Essas investigações dão sustentação à criação de novas tecnologias. Em 2001, Wang *et al.* estudaram numericamente o espectro fotônico de cristais bidimensionais com redes de diferentes simetrias e de várias formas, orientações e tamanhos. Especificamente, foram estudadas as seguintes redes: triangular, hexagonal, quadrada e retangular. A seção transversal dos fios variou entre circular, quadrada, hexagonal, retangular e elíptica, e foram considerados fios de ar em dielétrico ou fios de dielétrico no ar. Observou-se que a mudança da geometria e composição dos cristais afetam a largura dos gaps fotônicos [52] (ver Fig. 1.6). No ano de 2002, Romanato *et al.* fabricaram, por meio de litografia de raios X, cristais fotônicos bidimensionais de GaAs/AlGaAs com célula unitária não convencional. A célula unitária tem sido variada pela exploração dos efeitos de difração de raios X. Os resultados obtidos foram comparados com cálculos teóricos [53] (ver Fig. 1.7).

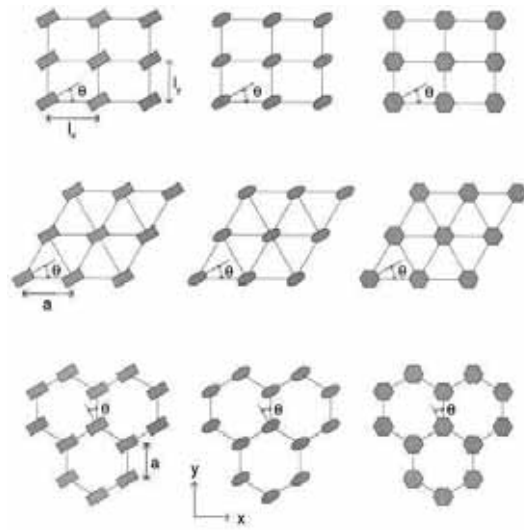


Figura 1.6: Diagramas de cristais fotônicos bidimensionais com redes de diferentes simetrias e elementos de várias formas, orientações e tamanhos (ver Ref. [52]).

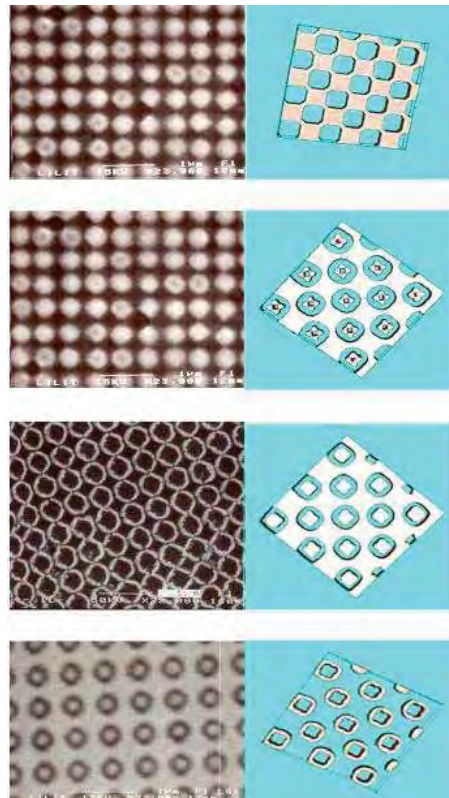


Figura 1.7: Imagens de cristais fotônicos bidimensionais de GaAs/AlGaAs com célula unitária não convencional (ver Ref. [53]).

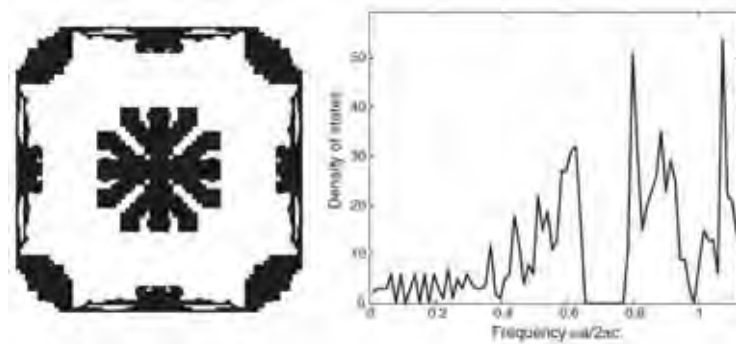


Figura 1.8: Imagens da geometria de um cristal fotônico bidimensional e o respectivo gráfico da densidade de estados. (ver Ref. [58]).

Num dos trabalhos realizados em 2004, Bekker *et al.* investigaram como as ondas eletromagnéticas comportam-se quando nas células unitárias estão presentes fios com diferentes formas geométricas, inclusive são analisados os resultados a partir de rotações dos fios [54]. Nesse mesmo ano, Bekker e colaboradores também calcularam e avaliaram os coeficientes de Fourier para fibras com buracos de formas poligonais arbitrárias, sendo elas convexas e não-convexas [55]. Pesquisadores da Índia, Kalra e Sinha, estudaram cristais fotônicos binários com fios elípticos. Em suas pesquisas, eles buscaram determinar como as propriedades dependem da geometria e composição do cristal fotônico [56]. Em 2009, Florescu *et al.* apresentaram designs em duas dimensões, isotrópicos, desordenados, com cristais fotônicos de tamanhos variados e gap fotônico completo (com bloqueio em todas as direções e polarizações). Esses designs são obtidos por um método de otimização que inicia com um padrão desordenado de pontos [57]. No ano de 2011, Hart *et al.* discutiram estratégias computacionais de otimização do design de cristais fotônicos, objetivando obter cristais com gap completo [58] (ver Fig. 1.8).

Moghimini *et al.*, em 2011, projetaram cristais fotônicos com rede hexagonal, constituídos de buracos circulares e elípticos numa matriz de ar. Para obter o cristal com o melhor gap completo, otimizaram a geometria, variando o tamanho dos círculos e o ângulo de rotação das elipses [59]. Ainda nesse ano, He *et al.* realizaram um estudo com cristais fotônicos com rede quadrada em duas dimensões, com fios dielétricos na forma de Taiji [60]. Para investigar as frequências desse design utilizaram o Método de Expansão em Ondas Planas, o mesmo que é usado no presente trabalho. Ao compararem algumas formas simétricas com a nova forma observaram que a largura dos gaps fotônicos aumenta significativamente com a quebra da simetria da célula unitária.

Nesta Dissertação é calculado e analisado o espectro de cristais fotônicos bidimensionais a base de fios cilíndricos, considerando diferentes geometrias e composições, isto é, variando a rede cristalina, os materiais constituintes e o raio dos fios. No Capítulo 2, conceitos básicos do tema da pesquisa são apresentados, como por exemplo, rede de Bravais, séries de Fourier, rede recíproca e zona de Brillouin. No Capítulo 3, assuntos concernentes à propagação das ondas eletromagnéticas são tratados. Analisamos a propagação em meios homogêneos e nos cristais fotônicos, que são meios não-homogêneos. A equação de ondas é obtida a partir das equações de Maxwell. No Capítulo 4, apresentamos e discutimos os resultados da investigação feita para os diferentes cristais com diferentes formas geométricas e composições. Finalmente, o Capítulo 5 é dedicado às conclusões do trabalho e às perspectivas da pesquisa.

Capítulo 2

Conceitos básicos

A matéria se agrega nos estados sólido, líquido, gasoso e plasma. Os sólidos podem exibir dois tipos de ordenação, o amorfo e o cristalino. É comum ouvirmos falar das requintadas taças de cristal e das joias adornadas pelos mesmos. Para leigos, um cristal é um vidro transparente que apresenta brilho e cortes bem marcados. Porém, esse não é o significado estabelecido na Ciência e Tecnologia de Materiais. Cristais são materiais que apresentam um conjunto idêntico de átomos arranjados regular e repetidamente. Esses átomos repetem-se segundo um conjunto infinito e discreto de pontos que denominamos de rede cristalina ou rede de Bravais. Por exemplo, a estrutura da wurtzita (ZnS) é constituída da rede de Bravais hexagonal com repetição de quatro átomos a cada ponto da rede cristalina. Essa mesma rede, com trinta átomos repetidos, forma a estrutura tipo coríndon (Al_2O_3) [61]. Neste capítulo, trataremos de conceitos básicos necessários para investigar como as ondas propagam-se em materiais cristalinos.

2.1 Rede de Bravais bidimensional e célula unitária

A rede de Bravais, conforme a definição acima, é um arranjo de pontos que determina como que os átomos irão repetir-se. Uma outra definição equivalente pode ser feita utilizando vetores. Assim, no caso bidimensional, podemos definir uma rede de Bravais como uma rede constituída por todos os vetores $\vec{R}$ com a forma

$$\vec{R} = n_1 \vec{a}_1 + n_2 \vec{a}_2, \quad (2.1)$$

onde $\vec{a}_1$ e $\vec{a}_2$ são denominados vetores primitivos e possuem distância mínima nas suas respectivas direções em relação à origem. Os fatores n_1 e n_2 tomam valores inteiros. Dessa forma, qualquer ponto da rede é combinação dos vetores $\vec{a}_1$ e $\vec{a}_2$, com coeficientes inteiros [23].

À rede cristalina está associada uma região do plano que, ao ser transladada segundo os vetores da rede, produz o cristal todo sem deixar sobreposições ou vazios. A essa região denominamos célula unitária primitiva. Para uma determinada rede de Bravais não existe apenas uma célula unitária, contudo, a mais utilizada é a célula unitária de Wigner-Seitz. Tomando um ponto da rede como referência, a região do plano formada pelos pontos mais próximos daquele ponto de referência do que qualquer outro ponto da rede de Bravais, é a célula unitária de Wigner-Seitz. Essa célula apresenta as simetrias de rotação, reflexão e inversão da rede cristalina [23].

2.2 Cristais fotônicos unidimensionais, bidimensionais e tridimensionais

Um arranjo regular e repetido pode ocorrer em uma, duas ou três dimensões. Em uma dimensão o cristal consiste de camadas alternadas de materiais com diferentes constantes dielétricas. Dentre as propriedades desse tipo de cristal a principal delas é o gap fotônico, que pode ocorrer quando as ondas eletromagnéticas incidem perpendicularmente às interfaces entre as camadas.

No caso bidimensional consideramos que a periodicidade ocorre no plano xy , enquanto há homogeneidade na direção do eixo z . Os cristais fotônicos bidimensionais, como o próprio nome sugere, são estruturas organizadas, com periodicidade da permissividade elétrica (ϵ) e da permeabilidade magnética (μ) no plano xy . Pode apresentar gap fotônico quando as ondas incidem no plano da periodicidade.

Um cristal fotônico tridimensional é o análogo óptico dos materiais sólidos cristalinos usualmente investigados na Física do Estado Sólido [23]. Apresenta periodicidade nas três dimensões e não há restrições quanto à direção de incidência das ondas eletromagnéticas. Pode apresentar gap fotônico para quaisquer direções de incidência.

A respeito do surgimento dos gaps é importante ressaltar que, para o caso unidimensional, qualquer contraste dielétrico entre as camadas gera o gap fotônico [6]. Entretanto,

quando os cristais são bidimensionais ou tridimensionais, existe um contraste mínimo para a existência de gaps. Nas próximas seções, trataremos do assunto com maiores detalhes.

No presente trabalho, investigamos somente um tipo simples de cristal fotônico que é chamado de cristal binário. Nesse tipo de sistema, o espaço é dividido em regiões homogêneas, e cada região é ocupada por um de dois meios ópticos usualmente denotados A e B . Assim, quando $\vec{r}$ é o vetor de posição de um ponto no meio A (B), convém escrever $\vec{r} \in A$ ($\vec{r} \in B$). Além disso, ao descrever matematicamente a propagação das ondas eletromagnéticas no cristal, é útil considerar a seguinte função binária:

$$\beta(\vec{r}) = \begin{cases} 1, & \text{se } \vec{r} \in A \\ 0, & \text{se } \vec{r} \in B. \end{cases} \quad (2.2)$$

2.3 Séries de Fourier

Um cristal fotônico é um meio heterogêneo em que se propagam ondas eletromagnéticas, sendo que a permissividade elétrica e a permeabilidade magnética apresentam a periodicidade espacial de uma rede de Bravais. Toda função com periodicidade de uma rede de Bravais pode ser escrita como uma série de Fourier. Assim, cada uma das funções $\epsilon(\vec{r})$ e $\mu(\vec{r})$ que descrevem cada cristal fotônico bidimensional pode ser representada por uma série de Fourier [62].

Para introduzir as ideias básicas sobre séries de Fourier, consideremos uma função $f : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{C}$, periódica com a periodicidade de uma rede de Bravais da forma

$$\vec{R}_{n_1, n_2} = n_1 \vec{a}_1 + n_2 \vec{a}_2, \quad (2.3)$$

onde $(n_1, n_2) \in \mathbb{Z}^2$ (aqui $\mathbb{Z}$ e $\mathbb{R}$ denotam os conjuntos numéricos dos inteiros e reais, respectivamente). Isso quer dizer que $f(\vec{r} + \vec{a}_j) = f(\vec{r})$ para quaisquer $\vec{r} \in \mathbb{R}^2$ e $j = 1, 2$. Essa função pode ser expressa como combinação linear de funções da forma $\exp(i\vec{k} \cdot \vec{r})$ que tenham a mesma periodicidade da função $f(\vec{r})$. Tais funções exponenciais devem apresentar a mesma periodicidade da rede cristalina. Portanto, o vetor $\vec{k}$ de cada uma delas deve satisfazer

$$\exp(i\vec{k} \cdot \vec{a}_j) = 1, \quad (2.4)$$

tanto para $j = 1$, quanto para $j = 2$.

Na próxima seção verificaremos que esses vetores formam uma rede cristalina no espaço recíproco, pois são da forma:

$$\vec{G}_{\nu_1, \nu_2} = \nu_1 \vec{b}_1 + \nu_2 \vec{b}_2, \quad (2.5)$$

em que $(\nu_1, \nu_2) \in \mathbb{Z}^2$. O conjunto formado pelos vetores $\vec{G}_{\nu_1, \nu_2}$ é a rede recíproca da rede cristalina considerada. Nessa seção também será exposto um método para obter os vetores $\vec{b}_1$ e $\vec{b}_2$, que são primitivos da rede recíproca.

Expressando $f(\vec{r})$ em termos das exponenciais periódicas, temos:

$$f(\vec{r}) = \sum_{\vec{G}} f_{\vec{G}} \exp(i\vec{G} \cdot \vec{r}), \quad (2.6)$$

em que, $\vec{G}$ toma os valores $\vec{G}_{\nu_1, \nu_2}$ da rede recíproca e

$$f_{\vec{G}} = \frac{1}{A_{\text{WS}}} \iint_{\text{WS}} \exp(-i\vec{G} \cdot \vec{r}) f(\vec{r}) dA, \quad (2.7)$$

onde o índice WS se refere à célula unitária de Wigner Seitz e A_{WS} é a área dessa célula unitária.

O membro direito da equação (2.6) é a série de Fourier de $f(\vec{r})$. Os coeficientes da série de Fourier são dados na equação (2.7). Devemos integrar na célula de Wigner-Seitz, porém, pela periodicidade de $\exp(-i\vec{G} \cdot \vec{r}) f(\vec{r})$, poderíamos integrar em qualquer célula unitária primitiva.

2.4 Rede recíproca e zona de Brillouin

A toda rede cristalina associa-se uma rede recíproca. Esta rede é abstrata, todavia, muito útil no estudo de estruturas periódicas. Por exemplo, na Física do Estado Sólido, o cálculo de bandas de energia eletrônicas de materiais cristalinos faz uso dessa rede.

Consideremos uma rede de Bravais constituída por pontos $\vec{R}$ num determinado meio e uma onda plana que depende da posição segundo a expressão $e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}}$, em que $\vec{k}$ é o vetor de onda. Há valores de $\vec{k}$ tais que a onda não tem a periodicidade da rede de Bravais. Contudo, para alguns valores específicos de $\vec{k}$, a onda terá a periodicidade da rede de Bravais.

Como vimos na seção anterior, ao conjunto de todos os vetores $\vec{G}_{(\nu_1, \nu_2)} = \nu_1 \vec{b}_1 + \nu_2 \vec{b}_2$ que produzem ondas planas com a mesmo período da rede de Bravais considerada, chamamos de rede recíproca. Os vetores que geram a rede, $\vec{b}_1$ e $\vec{b}_2$, têm coordenadas que

são as filas da matriz $\mathbb{B} = 2\pi(\mathbb{A}^T)^{-1}$, onde $(\mathbb{A}^T)^{-1}$ é a inversa da transposta de $\mathbb{A}$ [63]. Por sua vez, $\mathbb{A}$ é a matriz cujas filas são as coordenadas cartesianas dos vetores $\vec{a}_1$ e $\vec{a}_2$ da rede de Bravais. A área da célula unitária primitiva, A_{ws} , pode ser expressa pelo valor absoluto do determinante da matriz $\mathbb{A}$, ou seja,

$$A_{\text{ws}} = |\det(\mathbb{A})|. \quad (2.8)$$

A rede recíproca é considerada uma rede de Bravais no espaço dos vetores de onda. Assim, a rede recíproca da recíproca devolve a rede de Bravais original [23]. Na rede recíproca e na rede de Bravais existem células unitárias primitivas. Dessa maneira, a célula unitária do espaço recíproco análoga à célula unitária de Wigner-Seitz é denominada de primeira zona de Brillouin (ZB). Ela consiste dos pontos do espaço recíproco que estão mais próximos da origem do que de qualquer outro ponto da rede. Essa região, ao ser transladada segundo a rede recíproca, cobre todo o plano [23]. A esta zona associam-se pontos notáveis. Geralmente, nesses pontos, as bandas de frequência têm comportamentos que determinam propriedades do material em estudo. Eles podem ser os de simetria da rede recíproca e são denotados de acordo com os seguintes critérios: (1) o ponto $\vec{k} = \vec{0}$, que pertence à rede recíproca e é o centro da primeira zona de Brillouin, denotamos por Γ , (2) pontos interiores da primeira ZB são denotados por letras gregas e pontos de fronteira por letras romanas.

Por exemplo, percorrendo trajetórias que passam nos pontos Γ, X, M, Γ na zona de Brillouin, podemos investigar quais são as frequências de propagação das ondas nos cristais fotônicos bidimensionais com rede quadrada [6]. É possível demonstrar que as bandas de frequência são funções periódicas do vetor de onda $\vec{k}$, com periodicidade da rede recíproca. Assim, trabalha-se com a primeira zona de Brillouin, uma vez que nela resumem-se todas as informações dinâmicas do cristal.

2.5 Equação das ondas eletromagnéticas

Para compreendermos a propagação das ondas eletromagnéticas nos cristais fotônicos, usaremos as equações de Maxwell. Assim, apresentaremos as equações de Maxwell, válidas para o vácuo e, posteriormente, especificaremos a forma das equações na matéria. No cálculo das frequências das ondas que se propagam nos cristais, resolveremos as equações de Maxwell levando em consideração as especificidades geométricas do problema.

2.5.1 Equações de Maxwell no vácuo

Durante muitos anos questionou-se: o que é a luz? A resposta veio à tona com a unificação da eletricidade e do magnetismo, que provou que a luz é uma onda eletromagnética. Essa teoria recebeu o nome de teoria eletromagnética e passou a explicar fenômenos que envolvem as ondas eletromagnéticas. Seu embasamento teórico deu-se através das equações de Maxwell. Elas expressam a inter-relação entre o campo elétrico, o campo magnético e as fontes desses campos.

As equações de Maxwell podem ser escritas na forma integral ou na forma diferencial. A primeira forma é a mais popular e apresenta-se em detalhes nos cursos de Física Básica. No estudo de ondas, a segunda é a mais usada. Trata-se das seguintes quatro equações diferenciais:

$$\vec{\nabla} \times \vec{E} = -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t}, \quad (2.9)$$

$$\vec{\nabla} \times \vec{B} = \mu_0 \vec{j} + \frac{1}{c^2} \frac{\partial \vec{E}}{\partial t}, \quad (2.10)$$

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{E} = \frac{\rho}{\epsilon_0}, \quad (2.11)$$

e

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{B} = 0, \quad (2.12)$$

em que $\vec{E}$ é o vetor intensidade do campo elétrico e $\vec{B}$ é o vetor indução do campo magnético. Além disso, ρ e $\vec{j}$ são as densidades volumétricas de carga e corrente, respectivamente. As constantes ϵ_0 e μ_0 são respectivamente a permissividade elétrica e a permeabilidade magnética do vácuo. O valor da permissividade no vácuo é $8.8541878176 \cdot 10^{-12}$ F/m. A permeabilidade magnética do vácuo vale $4\pi \cdot 10^{-7}$ N·A⁻² (ver Referência [3]).

Quando os campos não variam com o tempo, podemos analisar o campo elétrico e o campo magnético separadamente. Contudo, quando existem variações de campo em relação ao tempo, eles deixam de ser independentes. A equação (2.9), conhecida como lei de Faraday, quantifica a indução eletromagnética. A indução é o efeito da produção de corrente elétrica em um circuito colocado sob efeito de um campo magnético variável. Esse fenômeno constitui a base teórica de transformadores. A equação (2.10), denominada lei de Ampère-Maxwell, por sua vez, mostra que correntes elétricas e campos elétricos variáveis no tempo produzem circulação do campo magnético. As equações (2.11) e (2.12) são

similares. A primeira delas é válida para campos elétricos e a segunda, para campos magnéticos. A equação (2.11) estabelece a relação entre o fluxo elétrico que passa por uma superfície fechada e a quantidade de carga envolvida. A equação (2.12), trata da não existência de monopolo magnético.

2.5.2 Equações de Maxwell na matéria

Quando consideramos as equações de Maxwell num material, como é o caso dos cristais fotônicos, temos que a propagação das ondas eletromagnéticas depende da permissividade dielétrica e da permeabilidade magnética do mesmo. Nos cristais fotônicos 2D temos periodicidade dessas grandezas num plano e homogeneidade na terceira dimensão. Consideramos ainda, para este caso, que não existem cargas nem correntes livres, isto é, $\rho = 0$ e $\vec{j} = 0$. Assim, as equações (2.9) e (2.12) podem ser reescritas como:

$$\vec{\nabla} \times \vec{H} = \frac{\partial \vec{D}}{\partial t}, \quad (2.13)$$

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{D} = 0, \quad (2.14)$$

em que $\vec{H}$ é o vetor intensidade do campo magnético, $\vec{D}$ é o vetor indução do campo elétrico. As relações entre os vetores de indução e intensidade do campo elétrico e magnético, respectivamente, são $\vec{D} = \epsilon \epsilon_0 \vec{E}$ e $\vec{B} = \mu \mu_0 \vec{H}$, em que ϵ é a permissividade elétrica e μ é a permeabilidade magnética relativas do meio.

Para ondas harmônicas de frequência ω , a dependência temporal das intensidades dos campos elétricos e magnéticos são dadas por $\vec{E}(\vec{r}, t) = e^{-i\omega t} \vec{E}(\vec{r})$ e $\vec{H}(\vec{r}, t) = e^{-i\omega t} \vec{H}(\vec{r})$. Substituindo os vetores de indução e intensidade dos campos, a equação (2.9) toma a forma:

$$\vec{\nabla} \times \left[e^{-i\omega t} \vec{E}(\vec{r}) \right] = - \frac{\partial \left[\mu(\vec{r}) \mu_0 e^{-i\omega t} \vec{H}(\vec{r}) \right]}{\partial t}. \quad (2.15)$$

Simplificando-a, obtemos:

$$\vec{\nabla} \times \vec{E}(\vec{r}) = i \omega \mu_0 \mu(\vec{r}) \vec{H}(\vec{r}). \quad (2.16)$$

A equação (2.13), por sua vez, transforma-se em:

$$\vec{\nabla} \times \left[e^{-i\omega t} \vec{H}(\vec{r}) \right] = \frac{\partial \left[\epsilon(\vec{r}) \epsilon_0 e^{-i\omega t} \vec{E}(\vec{r}) \right]}{\partial t}, \quad (2.17)$$

cuja simplificação resulta em:

$$\vec{E}(\vec{r}) = \frac{i \vec{\nabla} \times \vec{H}(\vec{r})}{\omega \epsilon(\vec{r}) \epsilon_0}. \quad (2.18)$$

Neste trabalho consideramos que o meio é não magnético, ou seja, $\mu(\vec{r}) \equiv 1$. Ao substituir a equação (2.18) na equação (2.16), encontramos a seguinte equação de ondas:

$$\vec{\nabla} \times \left(\frac{1}{\epsilon(\vec{r})} \vec{\nabla} \times \vec{H} \right) = \left(\frac{\omega}{c} \right)^2 \vec{H}. \quad (2.19)$$

A equação de ondas contém duas incógnitas, a frequência e o campo eletromagnético, e é escrita em termos do campo magnético $\vec{H}$. Assim, os modos do sistema são determinados por uma equação de autovalores cujo operador é Hermitiano, o que não ocorre utilizando-se o campo elétrico [6]. Neste trabalho resolveremos a equação para diferentes escolhas da função $\epsilon(\vec{r})$, sendo que encontraremos apenas os valores da frequência que satisfazem a equação. Embora o foco esteja nas frequências, o processo de cálculo das mesmas permite encontrar os coeficientes de Fourier da equação (3.10). Dessa maneira as equações (3.11) e (3.31) permitem calcular os valores do campo elétrico $\vec{E}$ e do campo magnético $\vec{B}$ em cada ponto do espaço.

Capítulo 3

Propagação de ondas em cristais fotônicos bidimensionais

Durante muito tempo existiu uma polêmica quanto à natureza da luz. Isaac Newton defendia a ideia de que a luz tinha natureza corpuscular e foi apoiado por Pierre Simon de Laplace. Huygens, por sua vez, acreditava que a luz tinha características de uma onda, e essa ideia foi apoiada por Fresnel [64]. Em 1864, Maxwell conclui que a luz não passava de campos eletromagnéticos oscilantes no meio, dado que demonstra matematicamente a igualdade da velocidade de propagação da luz e de qualquer onda eletromagnética no vácuo. Essa velocidade de propagação tem valor igual a 299 792 458 metros por segundo [65].

Quando uma onda eletromagnética propaga-se em meios como o ar, a água, o vidro, sua velocidade depende das propriedades do meio, ou seja, da permissividade elétrica e da permeabilidade magnética deste. Dizemos, então, que cada meio é caracterizado pelo parâmetro chamado índice de refração $n = \sqrt{\epsilon\mu}$. Em 1850, os físicos franceses Jean-Bernard-Léon Foucault (1819-1868) e Armand-Hippolyte-Louis Fizeau (1819- 1896) comprovaram a dependência da velocidade com o índice de refração, apesar deste não ser o principal objetivo do experimento. Mediram a velocidade da luz na água e no ar, e concluíram que na água a velocidade da luz é menor do que no ar, uma vez que o índice de refração da água é maior [64].

Nesse capítulo serão encontradas as equações das ondas eletromagnéticas para meios homogêneos e para cristais com variação periódica na permissividade dielétrica. Para este último caso, serão encontradas as equações correspondentes a duas polarizações: a

Meio	Índice
vácuo	1
ar (CNTP)	1.00029
água (20 °C)	1.33
quartzo fundido	1.46
vidro de baixa dispersão	1.52
cloreto de sódio	1.54
safira	1.762 - 1.778
zircônia	2.15 - 2.18
diamante	2.42
silício	3.96

Tabela 3.1: Índice de refração de alguns meios.

transversal elétrica e a transversal magnética.

3.1 Propagação num meio homogêneo

As ondas eletromagnéticas podem propagar-se nos mais diversos meios, seja em meios materiais, seja no vácuo. Certas combinações meio-onda podem nos proporcionar os mais fascinantes fenômenos ópticos, como é o caso do arco-íris, das miragens, entre outros. Existem os meios que são homogêneos, como por exemplo, a água num pequeno recipiente e o vácuo. Nesses meios a luz propaga-se sem sofrer mudanças nas suas características. Assim, o índice de refração, n , independe da posição. Nesse caso $\epsilon(\vec{r}) = \epsilon$, onde ϵ é constante e $n = \sqrt{\epsilon}$. A Tabela 3.1 mostra valores do índice de refração para alguns meios. Há também meios que denominamos de heterogêneos, como é o caso da atmosfera, cujas propriedades, como índice de refração, variam gradativamente com a posição devido às variações de temperatura e densidade. Quando a luz propaga-se nesses meios, suas características intrínsecas sofrem variação ao longo da trajetória percorrida. Além desses meios comuns, existem aqueles que são periódicos. O cristal fotônico binário é um exemplo desse último tipo de meio.

Considerando inicialmente um meio homogêneo com índice de refração n , a equação de ondas (2.19) deduzida no capítulo anterior, pode ser escrita como:

$$\vec{\nabla} \times [\vec{\nabla} \times \vec{H}(\vec{r})] = \left(\frac{\omega n}{c}\right)^2 \vec{H}(\vec{r}). \quad (3.1)$$

Utilizando a seguinte identidade [66],

$$\vec{\nabla} \times [\vec{\nabla} \times \vec{H}(\vec{r})] = \vec{\nabla} [\vec{\nabla} \cdot \vec{H}(\vec{r})] - \nabla^2 \vec{H}(\vec{r}), \quad (3.2)$$

e o fato de que $\vec{\nabla} \cdot \vec{H}(\vec{r}) = 0$, equivalente à equação (2.12), a equação de ondas para o meio homogêneo pode ser simplificada, tomando a forma:

$$\nabla^2 \vec{H} + \left(\frac{\omega}{v}\right)^2 \vec{H} = \vec{0}, \quad (3.3)$$

em que $v = \frac{c}{n}$.

Se $\vec{H}$ corresponde a uma onda plana, ou seja, $\vec{H}(\vec{r}) = e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} \vec{H}_0$, então o Laplaciano na equação (3.3) é igual a $\vec{H}_0 \nabla^2 [e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}}] = -k^2 \vec{H}(\vec{r})$. Assim, a forma com que a frequência de propagação da onda varia com o vetor de onda $\vec{k}$ é:

$$\omega = v \|\vec{k}\|, \quad (3.4)$$

ou seja,

$$\omega = v \sqrt{k_x^2 + k_y^2}. \quad (3.5)$$

Como $\omega = 2\pi f$, em que f é o número de ciclos por unidade de tempo, o vetor de onda $|\vec{k}|$ deve assumir valor igual a $\frac{2\pi}{\lambda}$, em que λ é o comprimento de onda. Observamos que a equação (3.4) define a folha superior de um cone no espaço (k_x, k_y, ω) , que é de revolução em torno do eixo ω e tem o vértice em $\omega = 0$.

Para permitir a comparação com os espectros de frequência de cristais fotônicos, é conveniente considerar que o meio homogêneo apresenta a periodicidade de uma rede de Bravais. Nessas condições, $\vec{k}$ passa a denotar o vetor de onda de Bloch e o campo satisfaz $\vec{H}_{\vec{k}}(\vec{r} + \vec{R}) = e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}} \vec{H}_{\vec{k}}(\vec{r})$.

Portanto, os valores de frequência para $\vec{k}$ e $\vec{k} + \vec{G}$ coincidem para qualquer vetor $\vec{G}$ da rede recíproca. Considerando simultaneamente a equação (3.4) e a periodicidade da frequência, pode-se fixar $\vec{k}$ e ordenar as frequências correspondentes segundo um vetor da rede recíproca:

$$\omega_{\vec{G}}(\vec{k}) = v \|\vec{k} + \vec{G}\|. \quad (3.6)$$

No espaço (k_x, k_y, ω) , essa equação representa a folha superior de um cone de revolução em torno da reta $\vec{k} = -\vec{G}$ e vértice em $\omega = 0$. O campo magnético correspondente é dado por:

$$\vec{H}_{\vec{G}, \vec{k}}(\vec{r}) = \vec{H}_{\vec{G}}(\vec{k}) e^{i(\vec{k} + \vec{G}) \cdot \vec{r}}. \quad (3.7)$$

A periodicidade das frequências fica explícita quando as ordenarmos em ordem crescente mediante o índice $n = 1, 2, \dots$. Isto, por sua vez, equivale a ordenar os vetores $-\vec{G}$ segundo a sua distância ao ponto $\vec{k}$, produzindo a sequência $\vec{G}_1(\vec{k}), \vec{G}_2(\vec{k}), \dots$ e assim sucessivamente. Então obtemos,

$$\omega_n(\vec{k}) = \omega_{G_n(\vec{k})}(\vec{k}) = v \|\vec{k} + \vec{G}_n(\vec{k})\|. \quad (3.8)$$

Nestas condições, basta considerar os vetores $\vec{k}$ na primeira zona de Brillouin para gerar todas as possíveis frequências.

No próximo capítulo serão apresentados gráficos para o meio homogêneo das redes de Bravais quadrada e hexagonal a as discussões acerca deles.

3.2 Método de sobreposição de ondas planas

Os cristais fotônicos são meios heterogêneos. Quando são compostos de substâncias não-magnéticas, basta considerar a variação periódica da permissividade dielétrica. Nessas condições, existe um conjunto completo de soluções da forma

$$\vec{H}(\vec{r}) = e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} \vec{u}(\vec{r}), \quad (3.9)$$

em que $\vec{u}(\vec{r})$ tem a mesma periodicidade de $\epsilon(\vec{r})$. Essas soluções são chamadas de funções de Bloch. Assim, $\vec{u}(\vec{r})$ pode ser escrita como uma série de Fourier,

$$\vec{u}(\vec{r}) = \sum_{\vec{G}} \vec{u}_{\vec{G}} e^{i\vec{G} \cdot \vec{r}}, \quad (3.10)$$

e o campo magnético $\vec{H}(\vec{r})$ pode ser escrito em termos das exponenciais:

$$\vec{H}(\vec{r}) = \sum_{\vec{G}} \vec{u}_{\vec{G}} e^{i(\vec{k} + \vec{G}) \cdot \vec{r}}. \quad (3.11)$$

Utilizando a identidade

$$\vec{\nabla} \times (f \vec{g}) = f \vec{\nabla} \times \vec{g} + \vec{\nabla} f \times \vec{g}, \quad (3.12)$$

é possível simplificar o rotacional da equação (2.19), isto é,

$$\vec{\nabla} \times \vec{H} = \sum_{\vec{G}} \left(\vec{\nabla} e^{i(\vec{k}+\vec{G})\cdot\vec{r}} \right) \times \vec{u}_{\vec{G}}. \quad (3.13)$$

Como o gradiente de $e^{i(\vec{k}+\vec{G})\cdot\vec{r}}$ tem valor igual a $i(\vec{k} + \vec{G}) e^{i(\vec{k}+\vec{G})\cdot\vec{r}}$, temos:

$$\vec{\nabla} \times \vec{H} = i \sum_{\vec{G}} \left[(\vec{k} + \vec{G}) \times \vec{u}_{\vec{G}} \right] e^{i(\vec{k}+\vec{G})\cdot\vec{r}}. \quad (3.14)$$

Substituindo a equação (3.14) na equação (2.19), obtemos:

$$\vec{\nabla} \times \left(\frac{i}{\epsilon(\vec{r})} \sum_{\vec{G}} \left[(\vec{k} + \vec{G}) \times \vec{u}_{\vec{G}} e^{i(\vec{k}+\vec{G})\cdot\vec{r}} \right] \right) = \left(\frac{\omega}{c} \right)^2 \vec{H}. \quad (3.15)$$

A função $\frac{1}{\epsilon(\vec{r})}$ é periódica, devido à periodicidade de $\epsilon(\vec{r})$, e pode ser representada pela seguinte série de Fourier:

$$\frac{1}{\epsilon(\vec{r})} = \sum_{\vec{G}''} \epsilon_{\vec{G}''}^{-1} e^{i\vec{G}''\cdot\vec{r}}. \quad (3.16)$$

Substituindo o valor de $\frac{1}{\epsilon(\vec{r})}$ na equação (3.15), fica:

$$\vec{\nabla} \times \left(i \sum_{\vec{G}} \sum_{\vec{G}'} \epsilon_{\vec{G}'-\vec{G}}^{-1} \left[(\vec{k} + \vec{G}) \times \vec{u}_{\vec{G}} \right] e^{i(\vec{k}+\vec{G}')\cdot\vec{r}} \right) = \left(\frac{\omega}{c} \right)^2 \vec{H}, \quad (3.17)$$

em que $\vec{G}' = \vec{G} + \vec{G}''$ (a soma de vetores da rede também está na rede). Podemos aplicar novamente a identidade (3.12), que resulta em:

$$i \sum_{\vec{G}} \sum_{\vec{G}'} \left(\epsilon_{\vec{G}'-\vec{G}}^{-1} \left[\vec{\nabla} e^{i(\vec{k}+\vec{G}')\cdot\vec{r}} \right] \times [\vec{k} + \vec{G}) \times \vec{u}_{\vec{G}}] \right) = \left(\frac{\omega}{c} \right)^2 \vec{H}, \quad (3.18)$$

ou seja,

$$\sum_{\vec{G}} \sum_{\vec{G}'} -\epsilon_{\vec{G}'-\vec{G}}^{-1} (\vec{k} + \vec{G}') \times \left[(\vec{k} + \vec{G}) \times \vec{u}_{\vec{G}} \right] e^{i(\vec{k}+\vec{G}')\cdot\vec{r}} = \left(\frac{\omega}{c} \right)^2 \vec{H}. \quad (3.19)$$

Finalmente, levando em conta que $\vec{H}(\vec{r}) = \sum_{\vec{G}'} \vec{u}_{\vec{G}'} e^{i(\vec{k}+\vec{G}')\cdot\vec{r}}$, chegamos à equação de ondas para o cristal fotônico [6]:

$$\sum_{\vec{G}} -\epsilon_{\vec{G}'-\vec{G}}^{-1} (\vec{k} + \vec{G}') \times \left[(\vec{k} + \vec{G}) \times \vec{u}_{\vec{G}} \right] = \left(\frac{\omega}{c} \right)^2 \vec{u}_{\vec{G}'}. \quad (3.20)$$

Resolvendo esse sistema para cada valor de $\vec{k}$, obtemos um conjunto infinito de valores de frequência e os correspondentes coeficientes de Fourier da função de Bloch na equação (3.10). Ao ordenar as frequências obtidas em ordem crescente, obtemos a formação das bandas.

3.3 Coeficientes de Fourier do inverso da permissividade elétrica

A equação (3.20) contém os coeficientes de Fourier do inverso da permissividade. De acordo com as equações (2.7) e (3.16), temos:

$$\epsilon_{\vec{G}}^{-1} = \frac{1}{A_{\text{WS}}} \iint_{\text{WS}} \frac{e^{-i\vec{G}\cdot\vec{r}}}{\epsilon(\vec{r})} dA. \quad (3.21)$$

Portanto, para cada $\vec{G}$, basta calcular uma integral dupla para obter o coeficiente de Fourier correspondente.

Em muitos casos o cristal fotônico consiste de dois meios homogêneos que denotaremos por A e B , que cobrem alternadamente o espaço. Desta forma, a permissividade pode ser descrita pela função

$$\epsilon(\vec{r}) = \begin{cases} \epsilon_A, & \text{se } \vec{r} \in A \\ \epsilon_B, & \text{se } \vec{r} \in B, \end{cases} \quad (3.22)$$

ou seja,

$$\epsilon(\vec{r}) = \epsilon_B + (\epsilon_A - \epsilon_B) \beta(\vec{r}), \quad (3.23)$$

em que $\beta(\vec{r})$ é a função binária definida pela equação (2.2).

Analogamente,

$$\frac{1}{\epsilon(\vec{r})} = \frac{1}{\epsilon_B} + \left(\frac{1}{\epsilon_A} - \frac{1}{\epsilon_B} \right) \beta(\vec{r}), \quad (3.24)$$

e

$$\epsilon_{\vec{G}}^{-1} = \frac{1}{A_{\text{WS}}} \frac{1}{\epsilon_B} \iint_{\text{WS}} e^{-i\vec{G}\cdot\vec{r}} dA + \left(\frac{1}{\epsilon_A} - \frac{1}{\epsilon_B} \right) \beta_{\vec{G}}, \quad (3.25)$$

onde $\beta_{\vec{G}}$ é o coeficiente de Fourier da função binária $\beta(\vec{r})$, dado por:

$$\beta_{\vec{G}} = \frac{1}{A_{\text{WS}}} \iint_{\text{WS}} \beta(\vec{r}) e^{-i\vec{G}\cdot\vec{r}} dA. \quad (3.26)$$

Simplificando a equação (3.25), temos:

$$\epsilon_{\vec{G}}^{-1} = \frac{\delta_{\vec{G},\vec{0}}}{\epsilon_B} + \left(\frac{1}{\epsilon_A} - \frac{1}{\epsilon_B} \right) \beta_{\vec{G}}, \quad (3.27)$$

em que

$$\beta_{\vec{G}} = \frac{1}{A_{\text{WS}}} \iint_{\text{WS} \cap A} e^{-i\vec{G}\cdot\vec{r}} dA, \quad (3.28)$$

e

$$\delta_{\vec{G},\vec{0}} = \begin{cases} 1, & \text{se } \vec{G} = \vec{0} \\ 0, & \text{se } \vec{G} \neq \vec{0}. \end{cases} \quad (3.29)$$

3.4 Polarizações para incidência no plano da periodicidade

Quando as ondas propagam-se num cristal fotônico bidimensional em direções do plano da periodicidade, o vetor de onda de Bloch, $\vec{k}$, é coplanar com os vetores $\vec{G}$ da rede recíproca. Nessas condições é conveniente fazer a decomposição de $\vec{u} = \vec{u}_{\parallel} + \vec{u}_{\perp}$, em que $\vec{u}_{\parallel}$ ($\vec{u}_{\perp}$) é a componente de $\vec{u}$ paralela (perpendicular) à direção dos fios.

Ao substituir na equação (3.20), obtemos

$$\begin{aligned} & \sum_{\vec{G}} -\epsilon_{\vec{G}'-\vec{G}}^{-1} (\vec{k} + \vec{G}') \times \left[(\vec{k} + \vec{G}) \times \vec{u}_{\parallel, \vec{G}} \right] + \sum_{\vec{G}} -\epsilon_{\vec{G}'-\vec{G}}^{-1} (\vec{k} + \vec{G}') \times \left[(\vec{k} + \vec{G}) \times \vec{u}_{\perp, \vec{G}} \right] \\ &= \left(\frac{\omega}{c} \right)^2 \vec{u}_{\parallel, \vec{G}'} + \left(\frac{\omega}{c} \right)^2 \vec{u}_{\perp, \vec{G}'}. \end{aligned} \quad (3.30)$$

Como o produto vetorial é perpendicular ao plano dos fatores, é possível concluir que o primeiro (segundo) termo do membro esquerdo é um vetor paralelo (perpendicular) à direção dos fios. Isso significa que as componentes paralela e perpendicular do campo magnético ficam desacopladas e cada uma satisfaz uma equação da forma (3.20).

Ao mesmo tempo, as equações (2.18), (3.11) e (3.12) levam em

$$\vec{E}(\vec{r}) = -\frac{1}{\omega \epsilon(\vec{r}) \epsilon_0} \sum_{\vec{G}} \left[(\vec{k} + \vec{G}) \times \vec{u}_{\vec{G}} \right] e^{i(\vec{k} + \vec{G}) \cdot \vec{r}}. \quad (3.31)$$

De um lado, quando o campo magnético é paralelo aos fios, o campo elétrico está numa direção transversal. Esse tipo de polarização é chamada de Transversal Elétrica (TE), e a configuração é ilustrada na Figura 3.1. Do outro lado, quando o campo magnético está orientado transversalmente aos fios, o campo elétrico fica paralelo aos mesmos. Essa segunda polarização é a Transversal Magnética (TM), e sua configuração está ilustrada na Figura 3.2.

A seguir, são obtidas equações diferenciais específicas para cada tipo de polarização. É importante salientar que para cada valor de frequência, ω , que for solução de ambas as equações, a solução geral para o campo magnético será uma sobreposição dos campos que satisfazem cada equação.

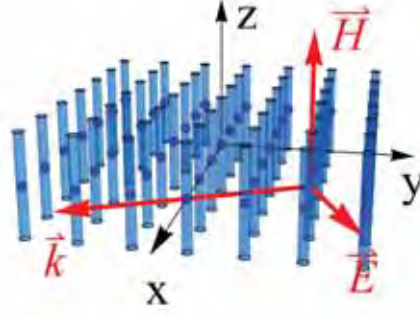


Figura 3.1: Polarização Transversal Elétrica.

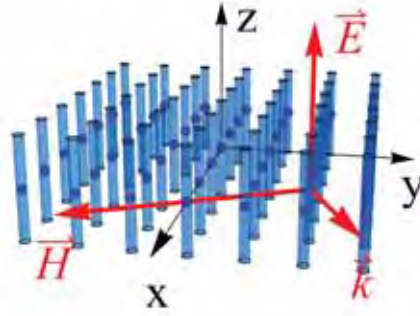


Figura 3.2: Polarização Transversal Magnética.

3.4.1 Polarização Transversal Elétrica

Neste caso o campo magnético é paralelo ao eixo z e pode-se escrever $\vec{u}_{\vec{G}} = u_{\vec{G}} \vec{e}_z$. Então, de acordo com a identidade

$$\vec{a} \times (\vec{b} \times \vec{c}) = (\vec{a} \cdot \vec{c})\vec{b} - (\vec{a} \cdot \vec{b})\vec{c}, \quad (3.32)$$

obtemos

$$\begin{aligned} & (\vec{k} + \vec{G}') \times \left[(\vec{k} + \vec{G}) \times \vec{u}_{\vec{G}} \right] (\vec{k} + \vec{G}) \\ &= \left[(\vec{k} + \vec{G}') \cdot (u_{\vec{G}} \vec{e}_z) \right] (\vec{k} + \vec{G}) - \left[(\vec{k} + \vec{G}') \cdot (\vec{k} + \vec{G}) \right] u_{\vec{G}} \vec{e}_z \\ &= -u_{\vec{G}} \left[(\vec{k} + \vec{G}') \cdot (\vec{k} + \vec{G}) \right] \vec{e}_z, \end{aligned} \quad (3.33)$$

pois $(\vec{k} + \vec{G}') \cdot \vec{e}_z = 0$.

Dessa maneira, a equação (3.20) toma a seguinte forma:

$$\sum_{\vec{G}} \epsilon_{\vec{G}' - \vec{G}}^{-1} \left[(\vec{k} + \vec{G}') \cdot (\vec{k} + \vec{G}) \right] u_{\vec{G}} \vec{e}_z = \left(\frac{\omega}{c} \right)^2 u_{\vec{G}'} \vec{e}_z, \quad (3.34)$$

que equivale a

$$\mathbb{M}^{\text{TE}} \vec{u} = \left(\frac{\omega}{c}\right)^2 \vec{u}, \quad (3.35)$$

sendo $\vec{u}$ a lista de valores $u_{\vec{G}}$, e

$$M_{\vec{G}', \vec{G}}^{\text{TE}} = \epsilon_{\vec{G}' - \vec{G}}^{-1} \left[(\vec{k} + \vec{G}') \cdot (\vec{k} + \vec{G}) \right]. \quad (3.36)$$

Portanto, os possíveis valores de $\left(\frac{\omega}{c}\right)^2$ são os autovalores da matriz $\mathbb{M}^{\text{TE}}$. Isso determina as frequências permitidas para o sistema em estudo, na polarização TE. É válido ressaltar que a matriz $\mathbb{M}^{\text{TE}}$ é Hermitiana, portanto, seus valores são reais.

3.4.2 Polarização Transversal Magnética

Neste segundo caso, o campo magnético é perpendicular ao eixo z , enquanto o elétrico é paralelo. Além disso, de acordo com a equação (3.20), os valores $\vec{u}_{\vec{G}'}$ e $(\vec{k} + \vec{G}')$ são perpendiculares. Então, como $\vec{u}_{\vec{G}}$ é simultaneamente perpendicular a $\vec{e}_z$ e $(\vec{k} + \vec{G})$, existe um escalar $u_{\vec{G}}$, tal que

$$\vec{u}_{\vec{G}} = u_{\vec{G}} \frac{\vec{e}_z \times (\vec{k} + \vec{G})}{|\vec{k} + \vec{G}|}. \quad (3.37)$$

Substituindo a equação (3.37) na equação (3.20), obtemos:

$$\begin{aligned} \sum_{\vec{G}} -\epsilon_{\vec{G}' - \vec{G}}^{-1} (\vec{k} + \vec{G}') \times \left[(\vec{k} + \vec{G}) \times u_{\vec{G}} \frac{\vec{e}_z \times (\vec{k} + \vec{G})}{|\vec{k} + \vec{G}|} \right] \\ = \left(\frac{\omega}{c}\right)^2 u_{\vec{G}'} \frac{\vec{e}_z \times (\vec{k} + \vec{G}')}{|\vec{k} + \vec{G}'|}. \end{aligned} \quad (3.38)$$

Aplicando a identidade vetorial (3.32), o produto vetorial entre colchetes na equação (3.38) fica:

$$(\vec{k} + \vec{G}) \times [\vec{e}_z \times (\vec{k} + \vec{G}')] = |\vec{k} + \vec{G}|^2 \vec{e}_z. \quad (3.39)$$

Portanto,

$$\sum_{\vec{G}} \epsilon_{\vec{G}' - \vec{G}}^{-1} |\vec{k} + \vec{G}| u_{\vec{G}} [\vec{e}_z \times (\vec{k} + \vec{G}')] = \left(\frac{\omega}{c}\right)^2 \frac{u_{\vec{G}'}}{|\vec{k} + \vec{G}'|} [\vec{e}_z \times (\vec{k} + \vec{G}').] \quad (3.40)$$

Simplificando, obtemos:

$$\sum_{\vec{G}} \epsilon_{\vec{G}' - \vec{G}}^{-1} |\vec{k} + \vec{G}| |\vec{k} + \vec{G}'| u_{\vec{G}} = \left(\frac{\omega}{c}\right)^2 u_{\vec{G}'}, \quad (3.41)$$

ou seja,

$$\mathbb{M}^{\text{TM}} \vec{u} = \left(\frac{\omega}{c}\right)^2 \vec{u}, \quad (3.42)$$

em que $\vec{u}$ é a lista de valores $u_{\vec{G}}$ e

$$\mathbb{M}_{\vec{G}', \vec{G}}^{\text{TM}} = \epsilon_{\vec{G}' - \vec{G}}^{-1} |\vec{k} + \vec{G}'| |\vec{k} + \vec{G}|. \quad (3.43)$$

Os valores permitidos de $\left(\frac{\omega}{c}\right)^2$ são os autovalores da matriz $\mathbb{M}^{\text{TM}}$, ou seja, ao diagonalizarmos a matriz encontramos as possíveis frequências de propagação das ondas eletromagnéticas para a polarização TM.

3.4.3 Procedimentos numéricos e computacionais

Os resultados numéricos foram obtidos mediante recursos de programação computacional. Essa programação foi realizada utilizando o software *Mathematica*, que é um sistema algébrico computacional muito potente. Seu lançamento ocorreu no ano de 1988 e muitos dizem que marcou o início da computação moderna. Sua estrutura conta com pacotes numéricos, algébricos e gráficos unificados. É uma ferramenta importante para vários campos da Ciência, tais como Matemática, Física, Química e Biologia, e também em Engenharia.

O algoritmo desenvolvido para o cálculo das frequências de propagação permitidas dos cristais fotônicos, de maneira simplista, consiste numa parte que se refere à definição dos parâmetros do cristal bidimensional e uma outra formada por comandos que visam calcular e diagonalizar as matrizes correspondentes às polarizações TE e TM. Mais detalhadamente os passos são os seguintes:

- os vetores primitivos da rede de Bravais são declarados;
- os vetores primitivos da rede recíproca são gerados a partir dos vetores da rede de Bravais, mediante equação de transformação;
- o caminho na zona de Brillouin onde as frequências são calculadas é definido. Esse caminho varia de rede para rede, e consiste de três segmentos retilíneos. Em cada segmento são escolhidos 21 pontos uniformemente espaçados.
- o primeiro resultado é encontrado para o meio homogêneo. Para isso, a matriz é declarada e diagonalizada numericamente, de modo que possam ser encontradas as frequências;
- são calculados os coeficientes de Fourier da função binária do cristal;

- para as duas polarizações, as frequências são encontradas quando se resolve um problema de autovalores e autovetores, sendo que cada autovalor é o quadrado do quociente entre a frequência angular e a velocidade da luz [ver equações (3.35) e (3.42)]. Os autovetores fornecem os coeficientes da expansão do campo eletromagnético em ondas planas. A matriz a diagonalizar é construída e os autovalores da mesma são obtidos mediante o comando Eigenvalues. As frequências ordenadas em ordem crescente dão lugar às bandas de frequência;
- através do comando ListPlot são gerados os gráficos das bandas, em que as frequências ficam no eixo vertical, enquanto o comprimento do caminho percorrido no espaço recíproco, no eixo horizontal.

Os resultados foram gerados em um notebook modelo Positivo Premium, com processador Dual-Core, 2.10 GHz de frequência e 3GB de RAM. O tempo de cálculo foi de aproximadamente 40 minutos para cada design.

3.5 Conclusões do capítulo

A análise das equações (3.36) e (3.43) sugere que os espectros de frequência para as polarizações TE e TM devem ser diferentes. De um lado, a equação (3.36) mostra que os elementos da matriz $\mathbb{M}^{\text{TE}}$ dependem dos comprimentos dos vetores $\vec{k} + \vec{G}$ e $\vec{k} + \vec{G}'$, e do ângulo entre eles. Por outro lado, de acordo com a equação (3.43), os elementos de $\mathbb{M}^{\text{TM}}$ dependem somente dos comprimentos dos vetores. Uma breve descrição da programação foi apresentada. No capítulo seguinte, os espectros de ambas as polarizações são calculados numericamente para vários designs do cristal fotônico bidimensional.

Capítulo 4

Resultados numéricos e discussões

Este capítulo é dedicado à apresentação e discussão dos resultados numéricos. Para rede a de Bravais quadrada, são calculadas as frequências de propagação das ondas eletromagnéticas nos cristais fotônicos com um fio circular por célula. Cristais com rede hexagonal também são estudados. Para este caso, são investigados os cristais com célula unitária contendo um e dois fios circulares. Parte dos resultados obtidos é comparada com aqueles reportados por autores reconhecidos na área de cristais fotônicos. A Tabela 4.1 contém os valores dos raios e das permissividades dielétricas utilizadas em cada cálculo.

4.1 A rede quadrada

A rede quadrada é uma das redes mais simples que um cristal fotônico bidimensional pode ter. Os vetores que geram a rede quadrada são $\vec{a}_1 = (a, 0)$ e $\vec{a}_2 = (0, a)$. A rede recíproca é gerada pelos vetores $\vec{b}_1 = \frac{2\pi}{a}(1, 0)$ e $\vec{b}_2 = \frac{2\pi}{a}(0, 1)$, demonstrando que a recíproca da rede direta também é quadrada. A Figura 4.1 ilustra tal afirmação. No painel (a) são mostradas as intersecções dos fios com o plano xy . Dessa forma, pode ser observada a

rede	raio	ϵ_A	ϵ_B
quadrada	$0.2 a$	8.9	1
hexagonal	$0.3 a$	1	12
honeycomb	$0.2 a$	13.6	1

Tabela 4.1: Tabela com parâmetros dos cálculos iniciais realizados.

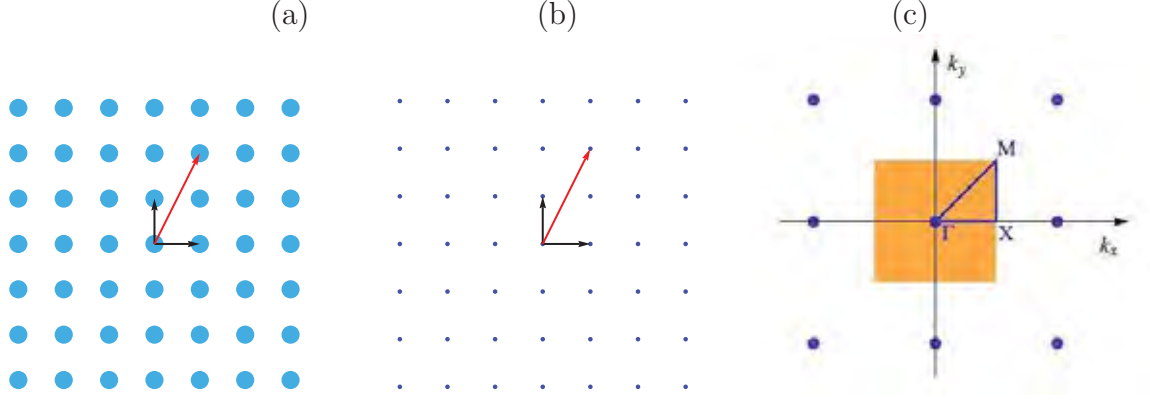


Figura 4.1: (a) Arranjo de fios idênticos segundo a rede de Bravais quadrada. (b) Rede recíproca da rede de Bravais quadrada do painel (a). (c) Zona de Brillouin da rede quadrada.

dependência da permissividade dielétrica com as coordenadas x e y . Esse parâmetro vale ϵ_A nos discos e ϵ_B no restante do plano. No painel (b) está representada a rede recíproca, comprovando que a rede recíproca é quadrada. Em (c) temos a representação da zona de Brillouin da rede quadrada, que posteriormente será muito útil no cálculo das bandas de frequência.

4.1.1 Célula unitária com um fio circular

A unidade de repetição do cristal fotônico binário com rede quadrada e um fio circular pode ser descrita por uma função $\beta(\vec{r})$, que vale 1 nos fios e zero fora deles. Essa célula, quando repetida periodicamente, forma o cristal. Nesta seção são apresentadas a equação dos coeficientes de Fourier e as bandas de energia do cristal com rede quadrada, para determinados parâmetros e permissividades.

4.1.1.1 Obtenção dos coeficientes de Fourier

Seja uma célula unitária primitiva que contenha o disco D , de raio R , centrado na origem de coordenadas. É possível encontrar os coeficientes de Fourier para a rede quadrada, resolvendo a integral na equação (3.28) sobre a parte da célula unitária que é ocupada pelo meio A , isto é, $WS \cap A$. O resultado é:

$$\beta_{\vec{G}} = \frac{1}{A_{WS}} \iint_D e^{-i\vec{G} \cdot \vec{r}} dA. \quad (4.1)$$

A integração pode ser feita através de coordenadas polares. Para simplificar, o ângulo é medido em sentido anti-horário, a partir do vetor $\vec{G}$. Dessa forma, temos:

$$\vec{G} \cdot \vec{r} = |\vec{G}| |\vec{r}| \cos(\theta) = G r \cos(\theta) \quad (4.2)$$

e

$$\beta_{\vec{G}} = \frac{1}{A_{\text{WS}}} \int_0^R \left[\int_0^{2\pi} e^{-iG \cdot r \cos \theta} d\theta \right] r dr. \quad (4.3)$$

A integral em θ é igual a $2\pi J_0(Gr)$, onde $J_0(x)$ é função de Bessel de ordem zero [62] (ver Apêndice A). Nestas condições, os coeficientes de Fourier são dados pela expressão:

$$\beta_{\vec{G}} = \frac{2\pi}{A_{\text{WS}}} \int_0^R J_0(Gr) r dr. \quad (4.4)$$

A integral em r também pode ser calculada analiticamente:

$$\int_0^R J_0(Gr) r dr = \begin{cases} \frac{R^2}{2}, & \text{se } G = 0, \\ \frac{R}{G} J_1(GR), & \text{se } G > 0, \end{cases} \quad (4.5)$$

onde $R > 0$, $G \geq 0$ e $J_1(x)$ é a função de Bessel de primeira ordem [62] (ver Apêndice A). Finalmente, o coeficiente de Fourier é:

$$\beta_{\vec{G}} = \begin{cases} \frac{\pi R^2}{A_{\text{WS}}}, & \text{se } \vec{G} = \vec{0}, \\ \frac{2\pi R}{a^2 G} J_1(GR), & \text{se } \vec{G} \neq \vec{0}, \end{cases} \quad (4.6)$$

pois $A_{\text{WS}} = a^2$.

A equação (4.6) mostra que o valor do coeficiente de Fourier depende somente do módulo de $\vec{G}$, mas não depende da sua direção ou sentido. Isso significa que todos os pontos da rede recíproca que equidistam da origem $\vec{G} = \vec{0}$ têm o mesmo peso na soma da equação (2.6).

4.1.1.2 Análise gráfica e numérica das séries de Fourier

Uma forma de verificar que os coeficientes calculados têm valores razoáveis é a reconstrução da função através de uma soma do tipo indicado na equação (2.6). Computacionalmente, somamos apenas uma quantidade finita de termos, ou seja, utilizamos o método de truncamento. O método usado consiste em agrupar os pontos da rede recíproca segundo a sua distância à origem. $\vec{G} = \vec{0}$ é o vizinho de ordem zero, enquanto os seguintes pontos $\vec{G}$ mais próximos da origem são chamados de primeiros vizinhos. Seguindo este raciocínio, os pontos $\vec{G}$ da N -ésima circunferência centrada na origem são denominados vizinhos de

ordem N . A Figura 4.2 ilustra como o número de termos na soma depende da ordem de truncamento. Por exemplo, para ordem de truncamento 50, o número de termos somados é 373. Para calcular as frequências, na seção 4.1.1.3, usamos a ordem de truncamento igual a 20, com número de termos igual a 129.

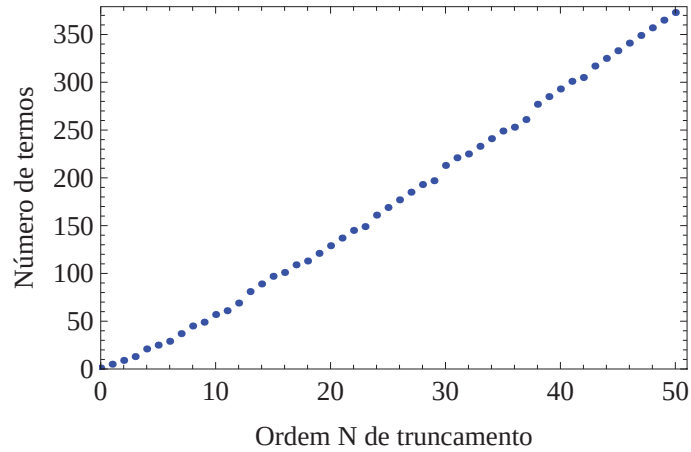


Figura 4.2: Gráfico da relação entre o número de termos somados e a ordem N de truncamento.

Para a rede em estudo, com objetivo de comparar a série truncada com a função $\beta(\vec{r})$, os coeficientes de Fourier foram somados até a ordem de truncamento 10, totalizando 85 termos. A Figura 4.3 mostra os gráficos da série de Fourier gerada e da função binária $\beta(\vec{r})$. Observamos que a soma é similar à função $\beta(\vec{r})$.

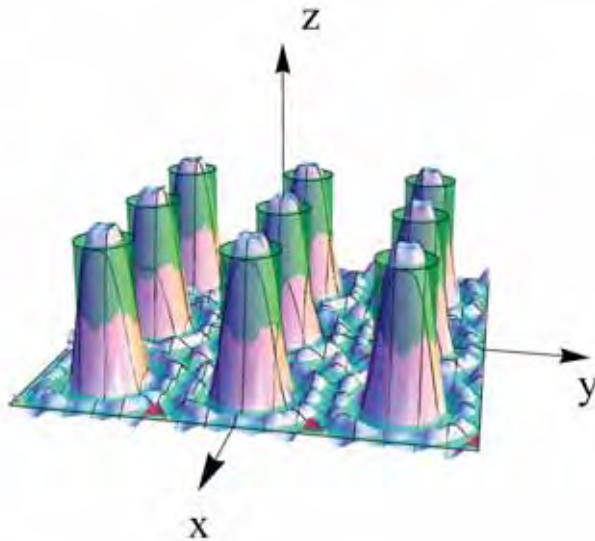


Figura 4.3: Comparação entre o gráfico de $\beta(\vec{r})$ e o gráfico da série de Fourier truncada até os vizinhos de ordem 10.

Também é possível analisar a semelhança entre duas funções, através do cálculo do

cosseño do ângulo entre elas. Para isso, consideramos as funções como elementos de um espaço vetorial com produto escalar. Portanto, a semelhança entre duas funções $\beta(\vec{r})$ e $g(\vec{r})$ é calculada mediante a expressão:

$$S_{\beta,g} = \frac{\langle \beta | g \rangle}{\|\beta\| \|\mathbf{g}\|}, \quad (4.7)$$

em que $\langle \beta | g \rangle$ é o produto escalar das funções e $\|\beta\| = \sqrt{\langle \beta | \beta \rangle}$ é a norma de $\beta(\vec{r})$. Para funções com a periodicidade de uma rede de Bravais, o produto escalar é:

$$\langle \beta | g \rangle = \iint_{\text{WS}} \beta(\vec{r}) g(\vec{r}) dA. \quad (4.8)$$

Essa expressão serve para determinar a semelhança, S_N , entre a função $\beta(\vec{r})$ e a série de Fourier truncada até ordem N . Nesse caso, a região de integração é a célula unitária primitiva da rede de Bravais,

$$S_N = \sqrt{\frac{A_{\text{WS}} \sum_{\vec{G} \in V_N} |\beta_{\vec{G}}|^2}{\pi R^2}}, \quad (4.9)$$

onde A_{WS} é a área da célula unitária primitiva, R é o raio dos discos, V_N é o conjunto dos pontos da rede recíproca que são vizinhos da origem até ordem N .

A Figura 4.4 mostra o gráfico da semelhança entre a função original $\beta(\vec{r})$ e a série truncada, em função da ordem de truncamento. Essa figura sugere que a semelhança aumenta à medida que são acrescentados termos ao somatório, e que o limite de S_N , quando $N \rightarrow \infty$, é 1, indicando que a série de Fourier converge para a função $\beta(\vec{r})$.

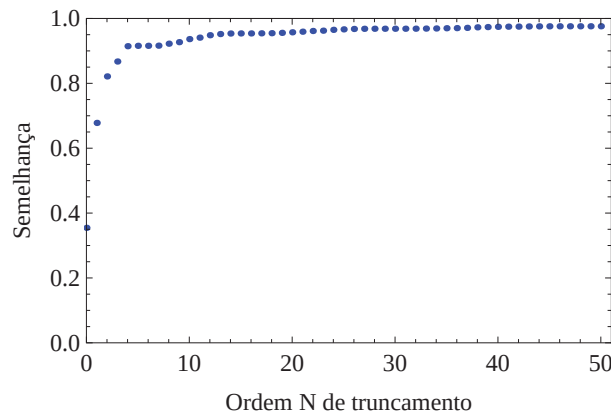


Figura 4.4: Semelhança entre a função original e a série truncada versus a ordem de truncamento, para o arranjo quadrado.

Como complemento, a Tabela 4.2 contém algumas ordens de truncamento e suas respectivas correlações percentuais. O valor da semelhança pode ser compreendido pela

Ordem de truncamento	Semelhança (%)
0	35.44
1	67.80
2	82.13
4	91.45
8	92.22
16	95.38
32	96.84
48	97.58
50	97.59

Tabela 4.2: Ordem de truncamento e semelhança (em porcentagem).

representação gráfica das funções comparadas. Na Figura 4.4, são mostrados os gráficos da função original e da série truncada para várias ordens de truncamento. A posição, $\vec{r}$, varia dentro de uma célula unitária primitiva. Algumas das ordens de truncamento consideradas nessa figura estão contempladas na Tabela 4.2. O painel (a) mostra a série truncada na ordem um, cuja semelhança é 77%. Os painéis de (b) a (e) correspondem às ordens de truncamento que são as potências de 2, de 2 a 16, respectivamente. Ao incluirmos mais vizinhos na soma, reproduzimos mais detalhadamente o comportamento de $\beta(\vec{r})$. Segundo a Tabela 4.2, a semelhança entre as superfícies aumenta em 7%. Após o truncamento de ordem 16, a semelhança continua a aumentar, todavia lentamente. Se tomarmos como referência as ordens de truncamento 32 e 50, observamos este fato. Na ordem 32 são somados 313 termos e na ordem 50, são usados 535. Portanto, mesmo tomando um número superior a 200 termos na série de Fourier, constata-se que a convergência da série de Fourier é relativamente lenta. Isso se deve ao fato de $\beta(\vec{r})$ ser uma função descontínua [6, 67]. Nessas condições, a série de Fourier converge, porém a convergência não é uniforme [67].

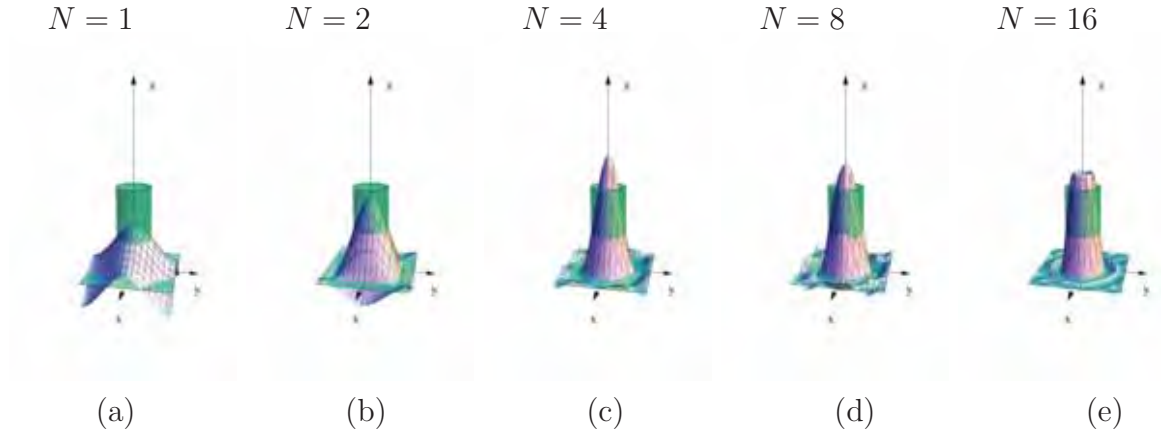


Figura 4.5: Comparação entre o gráfico de $\beta(\vec{r})$ e os das séries de Fourier truncadas até os vizinhos de ordem N .

4.1.1.3 As bandas de frequência

As frequências de propagação das ondas eletromagnéticas nos cristais fotônicos são calculadas sobre a primeira zona de Brillouin. Nessa zona é percorrido um caminho poligonal consistente de três segmentos: de Γ até X , de X até M e de M até Γ . Cada trecho retilíneo da trajetória é dividido uniformemente. Em cada ponto da partição é resolvida a equação de ondas, para obter as frequências permitidas. Essas, por sua vez, são ordenadas da menor frequência para a maior. Dessa forma, é possível gerar o gráfico das bandas de frequência, sendo que nas ordenadas temos frequência e nas abscissas o vetor de onda k . Devemos salientar que a frequência é reportada na forma $\frac{\omega a}{(2\pi c)}$, ou seja, a frequência cíclica $\frac{\omega}{2\pi}$ é dada em unidades de $\frac{c}{a}$. Essa atitude dá universalidade aos cálculos: a escala de frequência depende do valor do parâmetro a da rede cristalina.

Na Figura 4.6 estão representadas as bandas de frequências para o meio homogêneo, como se ele tivesse a periodicidade de uma rede quadrada de parâmetro a . Fica explícito que todas as frequências de propagação são permitidas. A equação de ondas para o meio homogêneo gera cones em cada ponto da rede recíproca. As bandas são intersecções de planos verticais com os cones. Se o plano contém o vértice do cone, as bandas são segmentos de reta; em caso contrário, são arcos de hipérbole.

Agora consideramos um cristal fotônico formado por uma rede quadrada de fios dielétricos circulares, com parâmetro de rede a . O cristal consiste de fios de alumina (material A), com raio $0.2a$ e permissividade dielétrica igual a 8.9. A alumina ou óxido de alumínio é um material cerâmico, excelente isolante térmico e elétrico, porém com condutividade

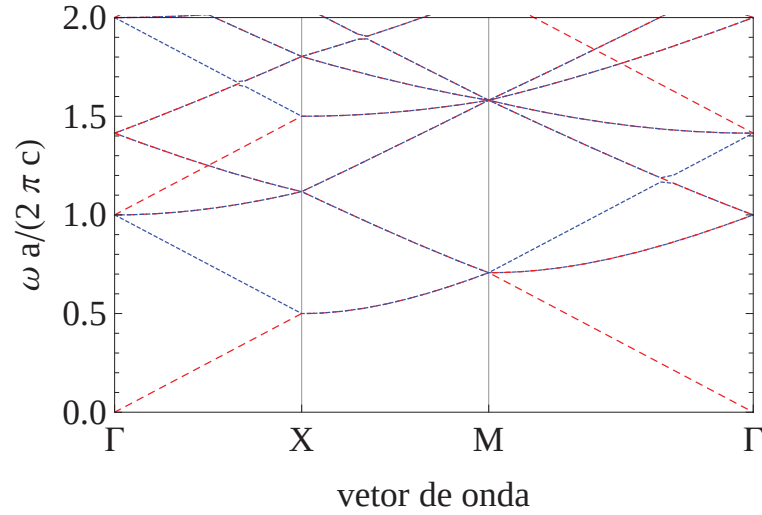


Figura 4.6: Bandas de frequência para o meio homogêneo, quando considera-se que possui a periodicidade de uma rede quadrada.

térmica relativamente alta. Além disso, tem resistência à corrosão, alta dureza e excelentes propriedades dielétricas [61]. Esses fios de alumina estão imersos em ar (material B), cuja permissividade é 1.

Usando 129 termos de Fourier, são obtidos os resultados mostrados na Figura 4.7. No painel 4.7(a) está apresentado o gráfico das frequências da polarização TE. No painel 4.7(b) temos as bandas de frequência da polarização TM. Para o modo TM, este cristal fotônico tem um gap entre a primeira e segunda banda, entre 0.33 e 0.45. Em contraste, para os modos TE não há gap. Portanto, não há faixa de frequência que seja proibida para as duas polarizações simultaneamente, isto é, não há gap completo. Os parâmetros escolhidos permitem a comparação com resultados reportados na Figura 2 do Capítulo 5, página 68, do livro “*Photonic Crystals: molding the flow of light*”, de Joannopoulos *et al.* [6]. Ela está mostrada na Figura 4.8(b) e apresenta os mesmos parâmetros utilizados para gerar os gráficos contidos na Figura 4.7. Para possibilitar a comparação dos resultados obtidos com os reportados por Joannopoulos *et al.*, as curvas para ambas as polarizações estão reunidas num mesmo gráfico, na Figura 4.8(a). As linhas tracejadas referem-se à polarização TE e as linhas contínuas às bandas da polarização TM. Na Figura 4.8(a) é possível apreciar diferenças em relação ao painel 4.8(b), especialmente na região de alta frequência. Esses desvios podem ser associados ao truncamento da série de Fourier até 129 termos.

A existência de gap em apenas uma das polarizações, como é o caso na Figura 4.7,

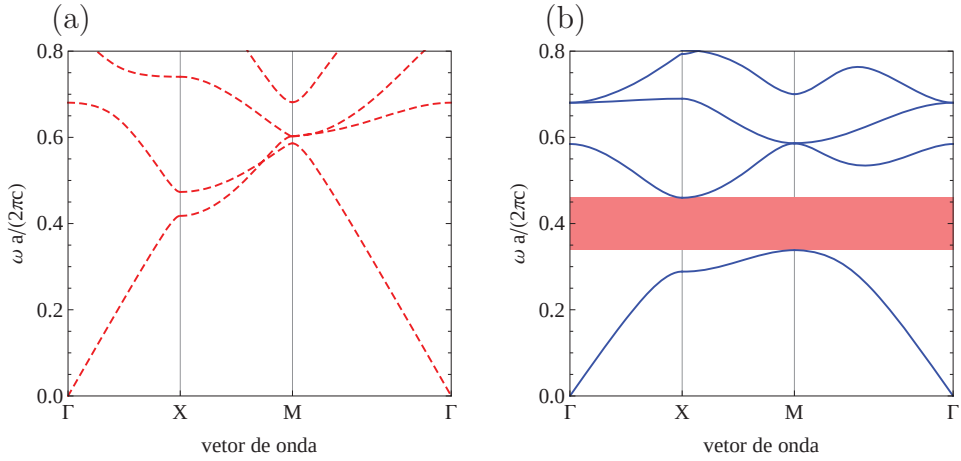


Figura 4.7: (a) Resultados para a polarização TE num arranjo quadrado de fios circulares de raio $0.2a$. (b) Resultados para a polarização TM para o mesmo arranjo da polarização TE.

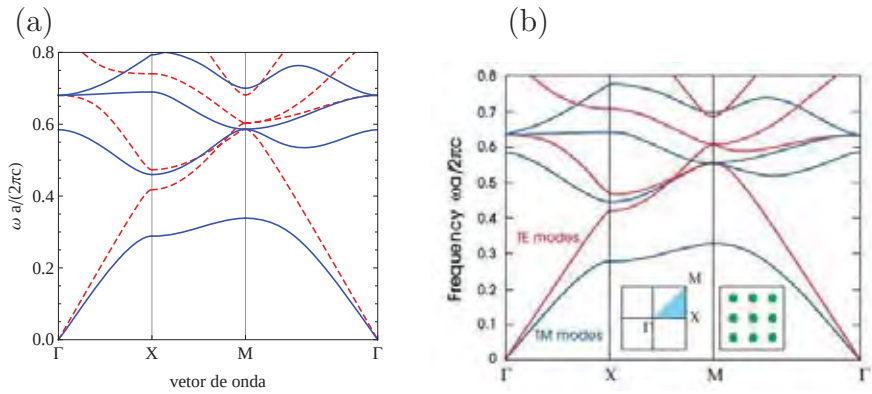


Figura 4.8: (a) Resultados para os modos TE e TM num arranjo quadrado de fios circulares de raio $0.2a$, com série truncada até vizinhos de ordem 20. (b) Resultados de Joannopoulos [6] para os mesmos parâmetros.

indica a possibilidade de aplicação desse cristal na fabricação de polarizadores, nos quais é importante que ocorra gap em apenas uma polarização. Por exemplo, Cui *et al.* relatam sobre um nanocristal fotônico, baseado em silício, que consiste de um polarizador transversal magnético (TM), uma vez que a propagação transversal elétrica (TE) é bloqueada na faixa do comprimento de onda das telecomunicações [68].

Para o cristal considerado, caso exista interesse em que haja um gap centrado na frequência de 4 THz, o cristal fotônico deverá apresentar parâmetro de rede de $27 \mu\text{m}$ e o raio dos discos deve ser $5.4 \mu\text{m}$. A escolha da frequência na ordem do terahertz, nesta análise, ampara-se no fato de que nos últimos anos essa faixa têm recebido bastante atenção. Existem muitas aplicações com essas ondas eletromagnéticas, entre elas: radioastronomia,

estudos atmosféricos, sensoriamento remoto, comunicações de banda larga, espectroscopia e diagnóstico de plasma. Por exemplo, um modulador de ondas na faixa do terahertz, que é um cristal fotônico baseado em um óxido de silício/polianilina foi proposto por Jiusheng, em 2007. O mecanismo de modulação baseia-se na mudança dinâmica do gap fotônico, em razão da aplicação do campo elétrico externo [69].

4.2 A rede hexagonal

A rede cristalina hexagonal será abordada de duas formas. Primeiro trataremos da estrutura que possui um fio por célula unitária primitiva e, posteriormente, de uma estrutura que possui dois fios de material A em cada célula. A segunda é denominada estrutura honeycomb. Ambas as estruturas possuem a mesma rede, gerada pelos vetores, $\vec{a}_1 = (a, 0)$ e $\vec{a}_2 = (\frac{a}{2}, \frac{a\sqrt{3}}{2})$. A rede recíproca tem como vetores geradores $\vec{b}_1 = \frac{2\pi}{a}(1, \frac{-1}{\sqrt{3}})$ e $\vec{b}_2 = \frac{2\pi}{a}(0, \frac{2}{\sqrt{3}})$. Com esses vetores é possível encontrar a área da célula unitária primitiva A_{ws} , que em momento oportuno será substituída na equação para o cálculo dos coeficientes de Fourier. A área vale:

$$A_{ws} = \frac{a^2\sqrt{3}}{2}. \quad (4.10)$$

As estruturas investigadas estão ilustradas nas Figuras 4.9 e 4.10, sendo a primeira delas a rede com um único fio por célula unitária e a segunda com dois fios em cada célula. Na Figura 4.9(b) constata-se que a rede recíproca é hexagonal. No painel (c) da Figura está representada a zona de Brillouin para ambas as estruturas.

4.2.1 Célula unitária com um fio circular

O cristal fotônico com rede hexagonal contendo um fio circular por célula unitária pode ser descrito por uma função binária $\beta(\vec{r})$. Nos fios de material A a função vale 1 e fora deles, no material B , vale 0. Nesta seção, estão apresentados a equação dos coeficientes de Fourier e o gráfico das bandas de frequência do cristal com rede hexagonal.

4.2.1.1 Obtenção dos coeficientes de Fourier

Os coeficientes de Fourier, $\beta_{\vec{G}}$, para a rede em estudo, são calculados através da equação (4.6). No ponto $\vec{G} = 0$, o coeficiente de Fourier é calculado de forma especial em relação aos

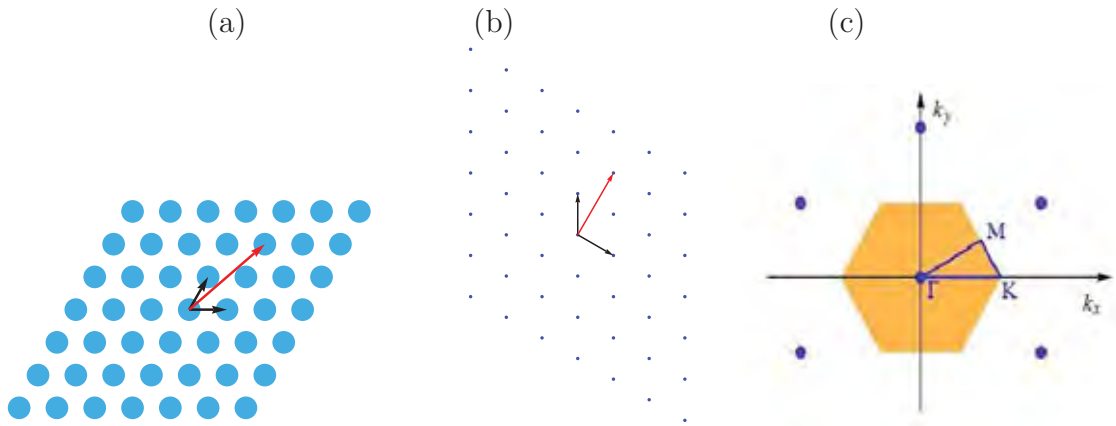


Figura 4.9: (a) Arranjo de fios idênticos, segundo a rede de Bravais hexagonal gerada pelos vetores primitivos. (b) Rede recíproca da rede de Bravais hexagonal do item (a). (c) Zona de Brillouin.

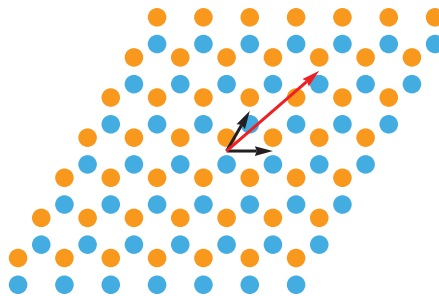


Figura 4.10: Arranjo de fios segundo à estrutura honeycomb gerada pelos vetores da rede hexagonal. As diferentes cores correspondem às posições não equivalentes dos fios.

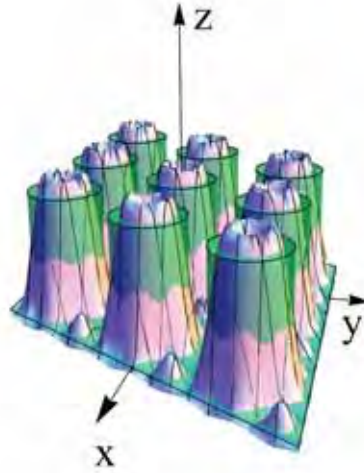


Figura 4.11: Comparação entre o gráfico de $\beta(\vec{r})$ (verde) e o gráfico da série de Fourier truncada até o vizinhos de ordem 4 (rosa).

outros pontos da rede recíproca. Essa atitude é explicada pela indeterminação matemática que aparece no cálculo. Para os demais pontos da rede mantém-se a integração dentro de uma célula unitária que contenha o disco D , de raio R , centrado na origem de coordenadas. Substituindo a área de uma célula unitária primitiva na equação (4.6), a qual é dada pelo determinante dos vetores $\vec{a}_1$ e $\vec{a}_2$ que geram a rede, temos que os coeficientes de Fourier são dados por:

$$\beta_{\vec{G}} = \begin{cases} \frac{\pi R^2}{A_{ws}}, & \text{se } \vec{G} = \vec{0}, \\ \frac{4\pi R}{a^2 \sqrt{3} G} J_1(G R), & \text{se } \vec{G} \neq \vec{0}. \end{cases} \quad (4.11)$$

Esta equação mostra que os coeficientes de Fourier com a mesma distância à origem têm igual importância na soma da equação (2.6).

Para verificar que esses são realmente os coeficientes de Fourier da função, a Figura 4.11 mostra a comparação entre a função $\beta(\vec{r})$ e a série de Fourier truncada até os vizinhos de ordem 4. Dessa forma é possível verificar que ambas as funções têm a mesma periodicidade e que a série truncada reproduz as principais variações de $\beta(\vec{r})$, assim como ocorrido na rede quadrada.

4.2.1.2 As bandas de frequência

As bandas de frequência para o cristal fotônico foram investigadas no caminho Γ , M , K , Γ da zona de Brillouin. O cristal consiste de fios de ar em silício. Dentre os materiais contidos na natureza o silício é o segundo mais abundante na crosta terrestre. É utilizado, na produção de ligas metálicas, na preparação de silicones, na indústria cerâmica, e tem um interesse muito especial na indústria eletrônica e microeletrônica [61]. A permissividade elétrica do silício (material B) é 12 e do ar (material A) é 1. Dessa forma, é possível observar uma discrepância dos valores da permissividade utilizados na rede hexagonal e na quadrada. Dando enfoque aos fios, temos permissividade elétrica muito maior na rede quadrada do que na rede hexagonal. Esse fato pode causar influências na forma das bandas de frequência do material. Os cálculos foram realizados utilizando 187 coeficientes de Fourier, o que corresponde ao truncamento de ordem 20. O raio dos fios de ar corresponde a 30% do parâmetro de rede.

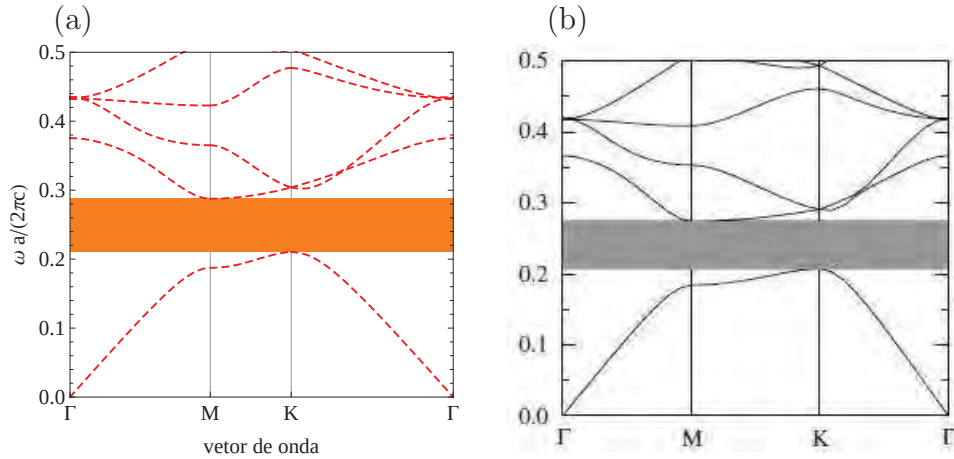


Figura 4.12: (a) Resultados para os modos TE numa estrutura hexagonal com um fio circular, de raio $0.3a$ por célula unitária. (b) Resultados de Busch *et al.* para os mesmos parâmetros [16].

As figuras 4.12(a) e 4.13(a) mostram os ramos de frequências obtidos para as polarizações TE e TM, respectivamente. As bandas da polarização TE, estão representadas por linhas tracejadas, e para a polarização TM por linhas contínuas.

Na Figura 4.12(a) é possível visualizar uma faixa de propagação proibida. Essa faixa, no eixo das ordenadas, está entre os valores de 0.21 e 0.28. Para confirmar a ocorrência do gap, as frequências foram calculadas em pontos de alta simetria da primeira zona de Brillouin e em pontos internos à zona. O cálculo realizado por dois métodos ratifica que o mais simplificado deles é válido para células unitárias suficientemente simétricas e que,

nesse caso, não é necessário fazer o cálculo da densidade de estados [16]. A mesma ideia aplica-se ao caso da rede quadrada.

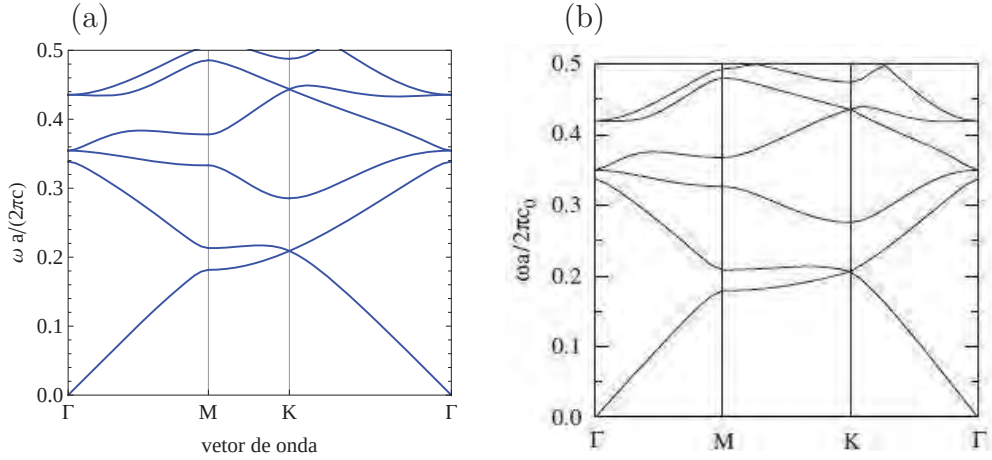


Figura 4.13: Como na Figura 4.12, mas para polarização TM.

No gráfico 4.13(a) observa-se que todos os valores de frequência são permitidos. O gráfico 4.12(a) é comparado com o gráfico 4.12(b). Para a polarização TM, o gráfico 4.13(a) é comparado com 4.13(b). Os resultados nos painéis (b) foram reportados por Busch *et al.* [16]. O acordo qualitativo entre os gráficos é excelente. Existem pequenas diferenças quantitativas na região de alta frequência. Essas divergências estão associadas à convergência relativamente lenta das séries de Fourier que utilizamos, nas quais o truncamento é feito até os vizinhos de ordem 20.

Para o cristal com rede quadrada houve surgimento de um gap para a polarização TM. No caso da rede hexagonal, o contrário ocorreu, ou seja, na polarização TE é que surgiram frequências proibidas. Diante desses resultados, dois pontos podem ser ressaltados. O primeiro é em relação à mudança da rede cristalina do cristal, ou seja, na mudança da geometria. O segundo fato importante é em relação à constituição do cristal. Na rede quadrada, o cristal é constituído de fios de alumina em ar e, na rede hexagonal fios de ar estão imersos em silício. Essa mudança brusca na constante dielétrica nas fronteiras dos discos pode causar efeitos físicos sobre a frequência de propagação das ondas eletromagnéticas.

A Figura 4.14 contém o gráfico para um meio homogêneo como se tivesse rede hexagonal. É possível constatar um comportamento similar ao ocorrido para a rede quadrada. Além da peculiaridade de todas as frequências serem permitidas, é possível perceber que as bandas se sobrepõem, sendo umas encobertas por outras.

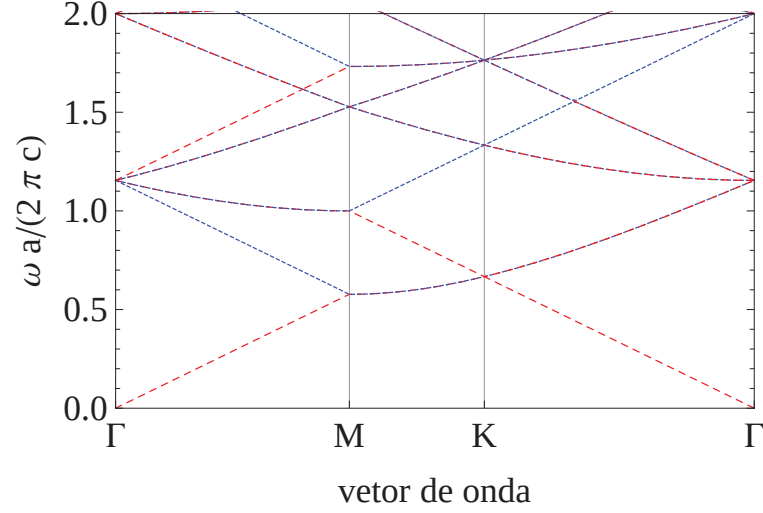


Figura 4.14: Bandas de frequência para o meio homogêneo, quando considera-se que possui a periodicidade de uma rede hexagonal.

4.2.2 Célula unitária com dois fios circulares: a estrutura honeycomb

A estrutura honeycomb ocorre no grafeno, que tem dois átomos de carbono por célula unitária [61]. Em nosso caso, ao invés de átomos consideramos fios circulares. A função $\beta(\vec{r})$ que descreve o cristal vale 1 nos discos e, zero fora deles.

4.2.2.1 Obtenção dos coeficientes de Fourier

Os coeficientes de Fourier são calculados através da equação (3.28) para fios idênticos de raio R . Escolhemos os centros dos discos correspondentes, D_1 e D_2 , nas posições $\vec{\rho}_1 = \left(0, \frac{-a}{2\sqrt{3}}\right)$ e $\vec{\rho}_2 = \left(0, \frac{a}{2\sqrt{3}}\right)$. Assim,

$$\beta_{\vec{G}} = \frac{1}{A_{\text{WS}}} \left[\iint_{D_1} e^{-i\vec{G} \cdot \vec{r}} dA + \iint_{D_2} e^{-i\vec{G} \cdot \vec{r}} dA \right]. \quad (4.12)$$

É conveniente usarmos translações que convertam os discos D_1 e D_2 no disco D , de raio R , centrado na origem.

Para o disco 1:

$$\iint_{D_1} e^{-i\vec{G} \cdot \vec{r}} dA = \iint_D e^{-i\vec{G} \cdot (\vec{r} + \vec{\rho}_1)} dA = e^{-i\vec{G} \cdot \vec{\rho}_1} \iint_D e^{-i\vec{G} \cdot \vec{r}} dA, \quad (4.13)$$

e para o disco 2:

$$\iint_{D_2} e^{-i\vec{G} \cdot \vec{r}} dA = \iint_D e^{-i\vec{G} \cdot (\vec{r} + \vec{\rho}_2)} dA = e^{-i\vec{G} \cdot \vec{\rho}_2} \iint_D e^{-i\vec{G} \cdot \vec{r}} dA. \quad (4.14)$$

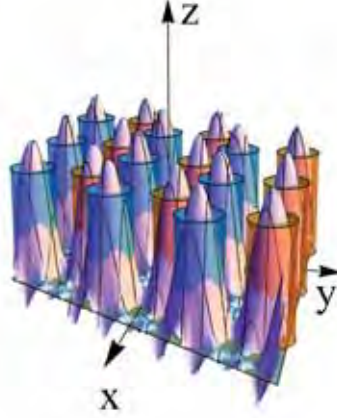


Figura 4.15: Comparação entre o gráfico de $\beta(\vec{r})$ e o gráfico da série de Fourier truncada até os vizinhos de ordem 5 (em rosa). Os cilindros de diferentes cores correspondem às posições não equivalentes dos fios na estrutura honeycomb.

Como $\vec{\rho}_1 = -\vec{\rho}_2$, obtemos

$$\begin{aligned}\beta_{\vec{G}} &= \frac{1}{A_{\text{WS}}} \left[e^{i\vec{G} \cdot \vec{\rho}_2} + e^{-i\vec{G} \cdot \vec{\rho}_2} \right] \iint_D e^{-i\vec{G} \cdot \vec{r}} dA \\ &= 2 \cos(\vec{G} \cdot \vec{\rho}_2) \frac{1}{A_{\text{WS}}} \iint_D e^{-i\vec{G} \cdot \vec{r}} dA.\end{aligned}\quad (4.15)$$

A integral dupla pode ser expressa de duas formas. Diferenciando o ponto $\vec{G} = \vec{0}$ dos demais pontos da rede recíproca, vale a seguinte condicional:

$$\beta_{\vec{G}} = \begin{cases} \frac{2\pi R^2}{A_{\text{WS}}}, & \text{se } \vec{G} = \vec{0}, \\ \cos\left(\frac{aG_y}{2\sqrt{3}}\right) \frac{8\pi R}{a^2\sqrt{3}G} J_1(GR), & \text{se } \vec{G} \neq \vec{0}. \end{cases}\quad (4.16)$$

Portanto $\beta_{\vec{G}}$ depende do módulo e da direção de $\vec{G}$.

Para ilustrar a relação entre a série de Fourier e a função $\beta(\vec{r})$, apresentamos a Figura 4.15. Ela mostra o comportamento da série de Fourier truncada até ordem 5 e o gráfico da função original. Apesar da pouca quantidade de termos da série, é possível apreciar que a série está associada à função $\beta(\vec{r})$.

4.2.2.2 As bandas de frequência

Na estrutura honeycomb trabalhamos com novos parâmetros. As permissividades escolhidas foram: 13.6 para o material A e 1 para o material B . Sendo assim, os fios podem ser de arseneto de gálio em ar. O arseneto de gálio é um composto químico, de fórmula GaAs. É um material semiconductor de interesse da indústria optoeletrônica [61]. O raio dos fios de arseneto de gálio utilizado nesta análise é $R = 0.2a$, e o número de termos permanece igual ao da rede hexagonal, sendo ele 187. A Figura 4.16 contém os resultados obtidos para a rede hexagonal com dois fios por célula unitária. No painel 4.16(a) estão apresentadas as bandas de frequência para a polarização TE, com linhas tracejadas. Este gráfico contém dois gaps. O primeiro deles ocorre de 0.6 até 0.68 e o segundo de 0.74 até 0.82.

Na Figura 4.16(b) temos as bandas do caso TM, representadas por linhas contínuas. Este gráfico contém três gaps. O primeiro ocorre de 0.35 até 0.45, o segundo de 0.62 até 0.73 e o último ocorre de 0.8 até 0.84. Portanto, para ambas as polarizações ocorrem gaps, sendo que para este cristal ocorrem gaps completos. Na Figura 4.17(a), estão apresentados os ramos TE e TM. As faixas na cor laranja indicam os intervalos de frequências proibidas do modo TE. Analogamente, as faixas em verde correspondem aos do modo TM. Analisando conjuntamente os gráficos podemos constatar duas sobreposições dessas faixas. Elas correspondem aos gaps completos. Nessas faixas a onda não propaga em nenhuma frequência e em nenhuma polarização. A primeira delas está entre a sexta banda da polarização TM e a quarta banda da polarização TE. A segunda, entre o sétimo ramo TM e o quinto ramo TE. O surgimento desses gaps mostra que fios dielétricos em estrutura de grafeno formam um bom candidato para estrutura com gap fotônico completo. Em outras palavras, a estrutura honeycomb produz a abertura de gaps em ambas as polarizações, e a sobreposição dos mesmos.

A Figura 4.17(b) mostra resultados reportados por Cassagne *et al.* [17]. Para que seja possível compará-la com o gráfico 4.17(a), é necessário esclarecer que os símbolos dos pontos do caminho percorrido na zona de Brillouin para o cálculo das frequências são diferentes. No gráfico 4.17(b), esses autores denotam os pontos M e K do gráfico 4.17(a) como Q e P , respectivamente. Além disso, o parâmetro de rede a desses autores é, na realidade, a distância, d , entre os centros de fios que são vizinhos imediatos. É relativamente fácil verificar que $d = a/\sqrt{3}$. Isso explica por que, apesar de usarmos

uma escala de frequência diferente, é possível afirmar que o gráfico 4.17(a) apresenta as principais características do gráfico 4.17(b). Os gaps totais indicados pela sobreposição laranja+verde no gráfico 4.17(a) estão de acordo com as faixas proibidas totais, em negro, no gráfico 4.17(b). Em relação aos espectros, também observamos grande semelhança, o que sugere que os cálculos feitos estão corretos. As diferenças, assim como comentamos nos casos anteriores, podem ser atribuídas ao truncamento das séries de Fourier que usamos neste trabalho. Aqui usamos os pontos da rede recíproca que são vizinhos da origem até ordem 20.

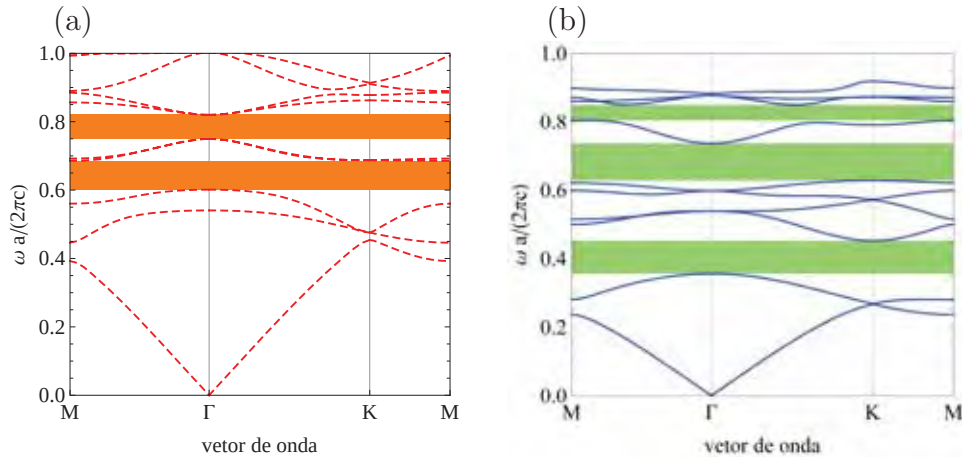


Figura 4.16: (a) Resultados para os modos TE numa estrutura honeycomb de fios de raio $0.2a$. As séries são truncadas até vizinhos de ordem 20. (b) Resultados para a polarização TM.

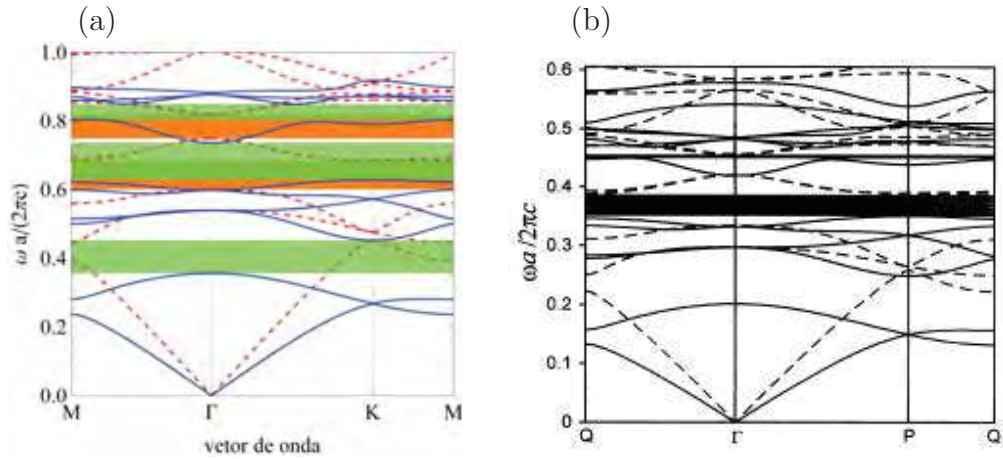


Figura 4.17: (a) Sobreposição dos painéis da Figura 4.16. (b) Resultados de Cassagne *et al.* para os mesmos parâmetros [17]

Podemos novamente ressaltar a notável influência da mudança do design do cristal. Para a rede hexagonal com uma nova estrutura, os gaps surgiram para ambas as pola-

rizações. Diferentemente do ocorrido em outros designs, é relevante o aparecimento de gaps totais. Neles não há propagação para nenhuma polarização [17]. Portanto, os gaps totais são muito importantes: eles permitem confinar a luz numa região de propagação permitida, o que pode ser usado na fabricação de dispositivos como guia de ondas e LEDs.

4.3 Comparação entre diferentes composições e geometrias

Esta seção é dedicada à apresentação de cálculos adicionais, no intuito de verificar como o arranjo (rede cristalina), a forma e o índice de refração dos fios e da matriz afetam o espectro fotônico.

4.3.1 Análise das frequências em diferentes redes cristalinas

Motivados a analisar a influência que a mudança da rede cristalina causa nas frequências de propagação das ondas eletromagnéticas, calculamos as frequências de propagação para a rede quadrada e para a rede hexagonal com um fio por célula unitária. Neste cálculo, ambos os cristais consistem de fios de ar em silício. Dessa maneira, na região A , a permissividade dielétrica vale 1, e em B , vale 12. Além disso, outro parâmetro mantido constante é a fração de ar na célula unitária, que é a razão entre a área ocupada pelo material A e a área da célula unitária. Os cálculos foram realizados com raio dos fios de $0.3a$ para rede hexagonal e de $\sqrt[4]{\frac{4}{3}}a \approx 0.322a$ para a rede quadrada, dado que esses valores correspondem à mesma porcentagem de ar nas células unitárias das respectivas redes.

A Figura 4.18 mostra os resultados obtidos para a polarização TE da rede quadrada e da rede hexagonal, respectivamente. No painel 4.18(a) existem dois gaps. O primeiro ocorre entre as bandas 1 e 2, no intervalo de 0.23 a 0.24, e o segundo entre as bandas 2 e 3, no intervalo de 0.33 a 0.34. No painel 4.18(b) é possível observar um gap entre as bandas 1 e 2, no intervalo de 0.21 e 0.28.

A Figura 4.19, por sua vez, mostra os resultados obtidos para a polarização TM. No painel 4.19(a), que refere-se à rede quadrada, ocorreu um pequeno gap entre as bandas 6 e 7, no intervalo 0.4774 a 0.4775, com largura da ordem de 0.0001. No painel 4.19 (b), o gráfico da rede hexagonal não traz gap algum.

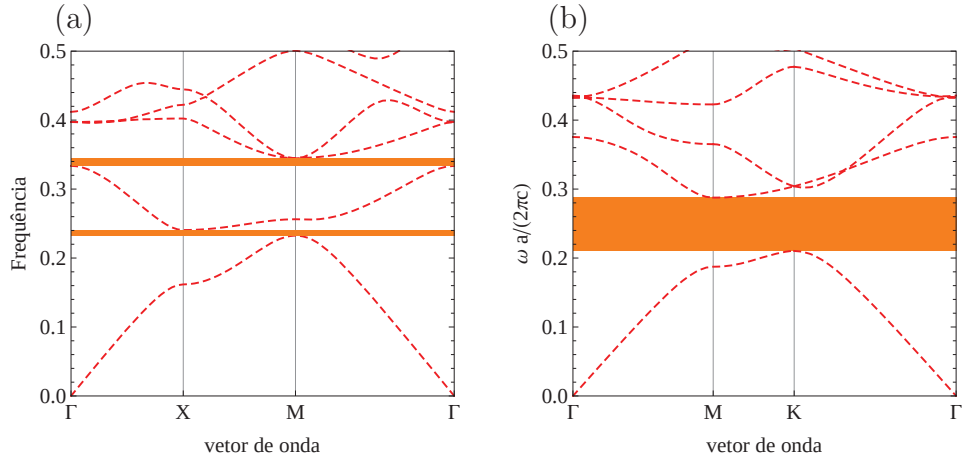


Figura 4.18: (a) Resultados para o modo TE numa rede quadrada de fios de ar de raio $0.322a$ em silício ($\epsilon_B = 12$). (b) Resultados para a rede hexagonal correspondente.

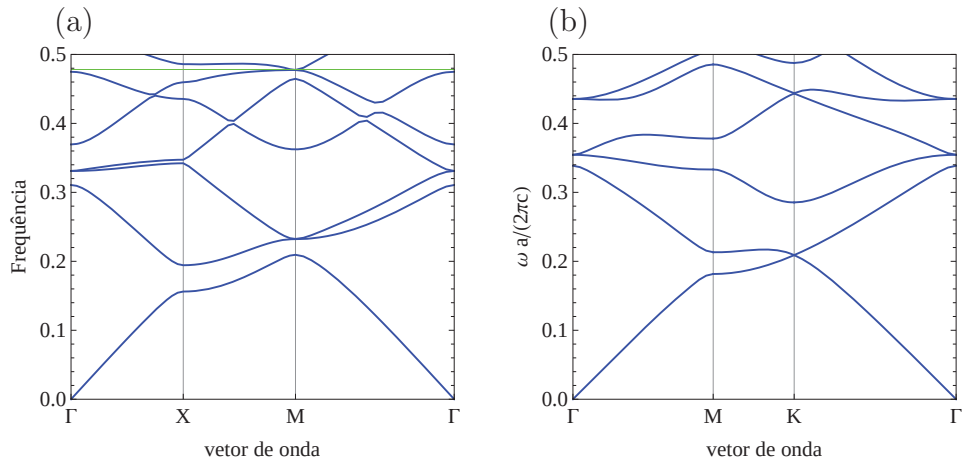


Figura 4.19: Como na Figura 4.18, mas para a polarização TM.

Comparando os resultados obtidos podemos observar o aparecimento de maior gap na rede hexagonal em relação à rede quadrada, para um mesmo contraste e polarização (TE). A possibilidade de surgirem gaps na rede hexagonal com menor contraste de índice de refração em comparação com rede quadrada é previsto por alguns autores como Villeneuve [70], em 1992, e Wang [71], em 2005.

Para a polarização TM, praticamente não ocorreu gap fotônico para nenhuma das duas redes. O pequeno gap da rede quadrada ocorreu devido à mudança do valor da frequência na quarta casa após a vírgula. Na prática, pequenos intervalos proibidos de frequência não possuem pouca relevância. Além disso, o gap ocorre na região de alta frequência, local onde os valores de frequência apresentados não são tão precisos, devido à convergência lenta dos coeficientes de Fourier.

4.3.2 Redes cristalinas e o contraste dielétrico

Esta seção é dedicada à análise das redes quadrada e hexagonal, com relação ao contraste mínimo da permissividade dielétrica necessário para o aparecimento de gaps fotônicos. Para tal, faz-se o cálculo das frequências em cristais com um fio circular por célula unitária. O parâmetro de preenchimento da célula unitária foi mantido constante, ou seja, o raio dos fios é $0.3a$ para rede hexagonal e de $0.322a$ para a rede quadrada. Para alcançar o objetivo, o método utilizado para análise foi manter a permissividade dielétrica do material A constante e igual a 1 e, varrer a permissividade dielétrica do material B , em múltiplos de 3. Assim, para cada rede foram calculadas as bandas de frequência com $\epsilon_A = 1$ e $\epsilon_B = 12, 9, 6, 3$, nas polarizações TE e TM. No total isto produz oito gráficos, sendo que eles são comparados dois a dois. Especificamente, são comparados daqueles para a mesma polarização e com os mesmos valores de ϵ_B , mas com redes cristalinas diferentes.

Os resultados serão apresentados em ordem decrescente da permissividade do material B . Os primeiros resultados, ou seja, aqueles para $\epsilon_B = 12$, podem ser observados na Figura 4.18, para a polarização TE e na Figura 4.19, para a polarização TM. Por questão de organização, ressaltamos que os painéis da esquerda referem-se à rede quadrada e, conseqüentemente, os da direita são da rede hexagonal.

Para $\epsilon_B = 9$, os resultados estão contidos na Figura 4.20, sendo que nos painéis (a) e (b), contamos com as bandas de frequência da polarização TE. Os painéis (c) e (d) da mesma figura referem-se à polarização TM. A Figura 4.21, por sua vez, mostra os gráficos das bandas de frequência calculadas para $\epsilon_B = 6$. Os espectros contidos em (a) e (b) são para a polarização TE, enquanto (c) e (d) correspondem às bandas para a polarização TM. As bandas calculadas para a última permissividade considerada $\epsilon_B = 3$, são mostradas na Figura 4.22 para ambos os tipos de polarização.

A partir dos gráficos, alguns pontos podem ser ressaltados. O primeiro é que a ocorrência de gap para a rede quadrada exige um contraste maior nas permissividades dos materiais A e B , em relação à rede hexagonal. Para a rede quadrada surgiu um gap pequeno a partir para $\epsilon_B/\epsilon_A = 9$, sendo que para a rede hexagonal, há um gap de largura razoável para $\epsilon_B/\epsilon_A = 3$. O segundo é que, para a polarização TM, praticamente não surgiram gaps em nenhuma das redes. A exceção está na Figura 4.19(a), em que um gap desprezível ocorre para a rede quadrada.

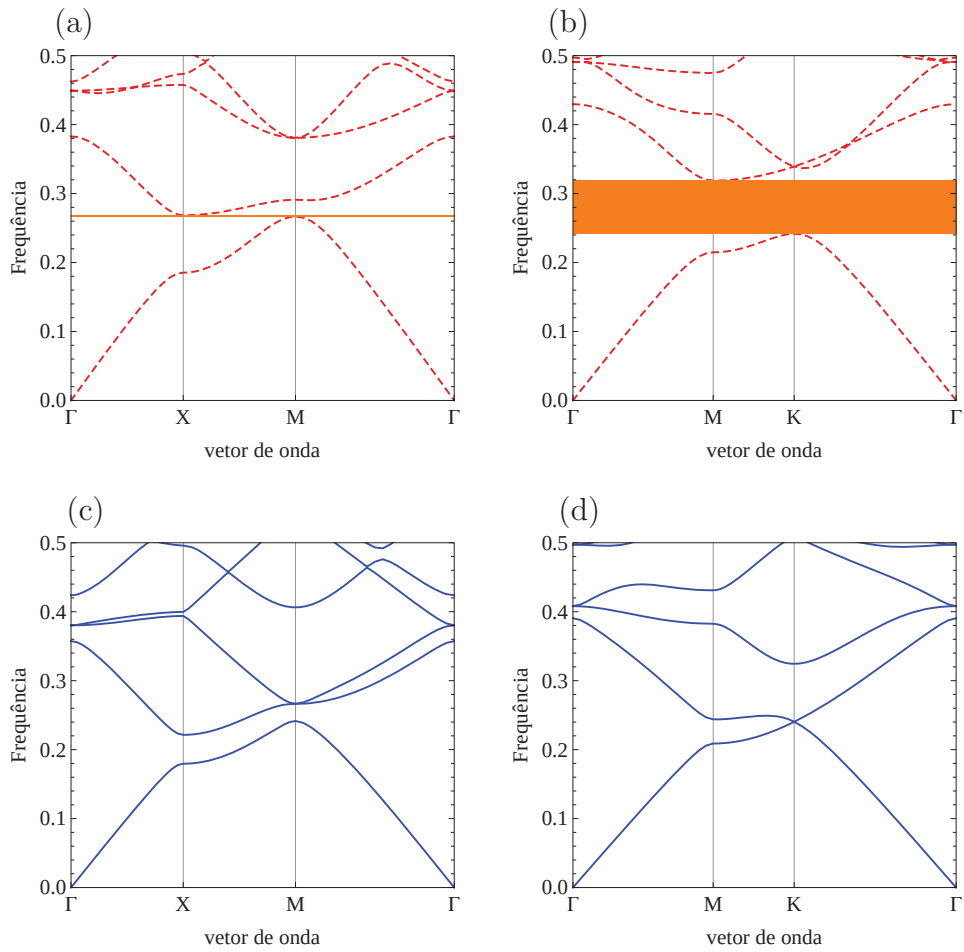


Figura 4.20: (a) Resultados para o modo TE numa estrutura quadrada com fios de ar de raio $0.322a$ e com $\epsilon_B = 9$. (b) Resultados para estrutura hexagonal correspondente. (c) e (d) Como nos painéis (a) e (b), mas para a polarização TM.

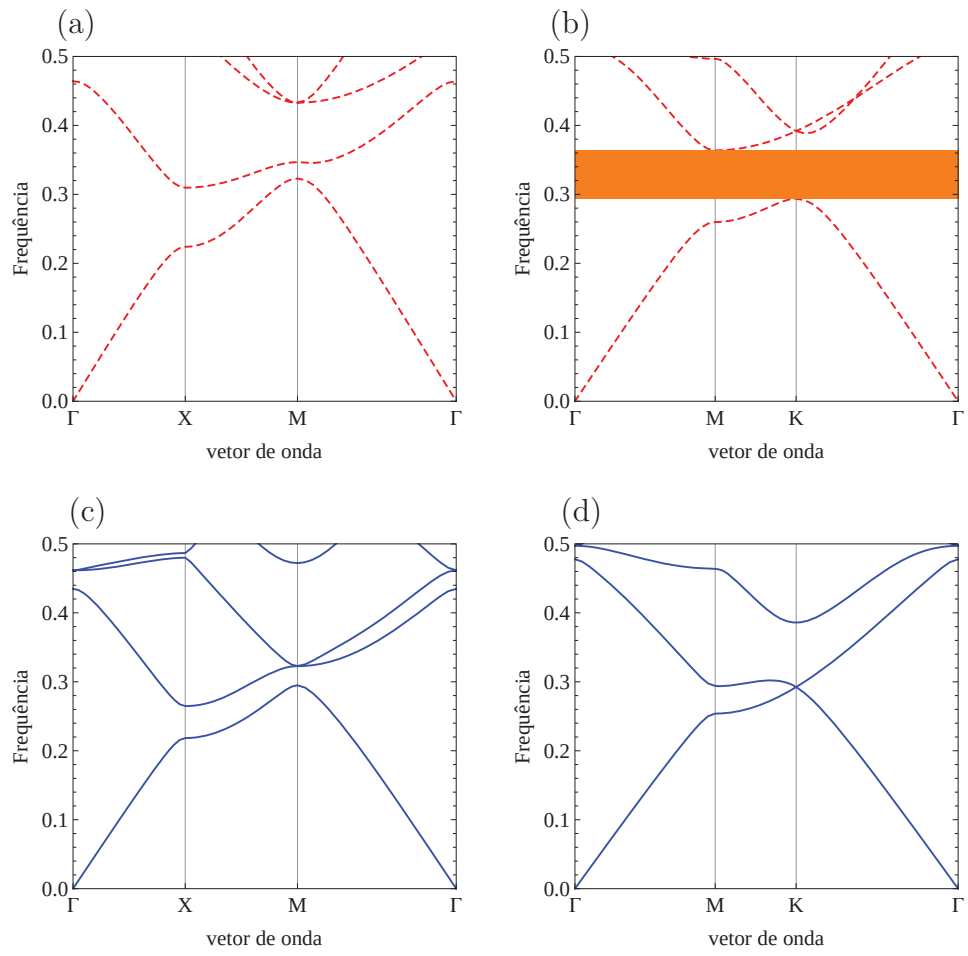


Figura 4.21: Como na Figura 4.20, mas para $\epsilon_B = 6$.

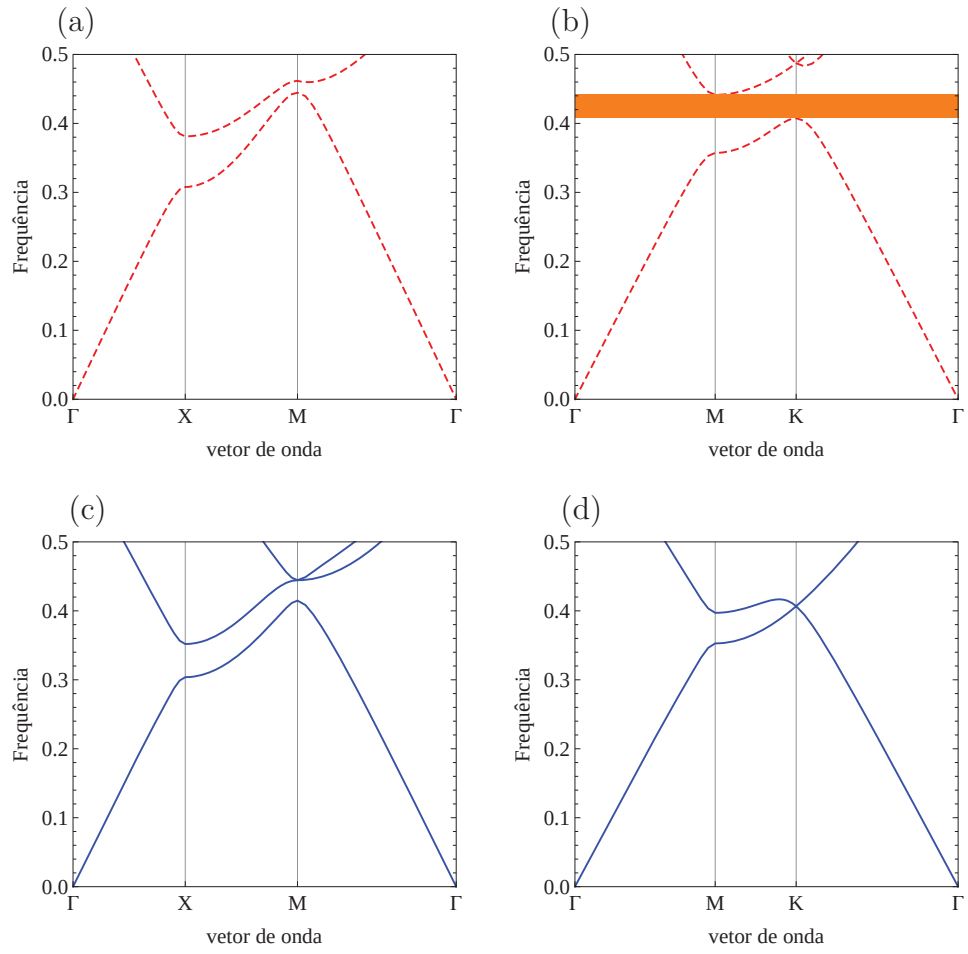


Figura 4.22: Como na Figura 4.20, mas para $\epsilon_B = 3$.

Diante do exposto é inevitável afirmar que o surgimento de gap tem dependência com a rede do cristal fotônico e que, assim como reportado por Wang e Villeneuve, a facilidade de surgirem gaps é intrínseca da rede hexagonal [71, 70]. Essa questão havia sido levantada na seção anterior, contudo os novos cálculos confirmam o fato.

Uma outra questão a ser analisada é em relação às consequências da inversão de contraste que ocorre nas Figuras 4.7 e 4.20 (a) e (c). Na primeira delas temos as bandas de frequência para rede quadrada, modo TE e TM, com permissividade igual a 8.9 no material A e 1 no material B . Na segunda Figura, em (a) temos as bandas para a rede quadrada, modo TE, e em (c), o modo TM para este mesmo caso. Nesse cálculo diferem as permissividades dos materiais A e B , que agora estão praticamente invertidas ($\epsilon_A = 1$ e $\epsilon_B = 9$). O resultado dessa inversão é também uma inversão no surgimento de gaps das polarizações TE e TM. Enquanto no primeiro caso temos gap na polarização TM, no segundo, o gap aparece na polarização TE e desaparece da TM.

4.4 Conclusões do capítulo

A comparação dos resultados obtidos com os reportados num livro-texto e em artigos especializados sugerem que a metodologia adotada e sua implementação são apropriadas. De fato, os gráficos das bandas de frequência são muito parecidos; somente pequenas diferenças quantitativas são observadas na região de alta frequência. É importante ressaltar que as bandas foram obtidas percorrendo caminhos da zona de Brillouin. Muitas vezes, é suficiente a análise desses pontos no cálculo, dado que a probabilidade das informações principais, ou seja, as frequências máximas e mínimas das bandas, estarem contidas nesses trajetos é grande. Contudo, para uma conclusão definitiva sobre os gaps é necessário que todos os pontos da zona de Brillouin sejam levados em consideração, no cálculo das bandas [16]. Portanto, levando em conta as simetrias de rotação e reflexão da zona, foram calculados os valores de frequência para 231 pontos numa região triangular da mesma, tanto para a estrutura quadrada quanto para a hexagonal. Dessa forma foram reproduzidos os gaps obtidos através dos caminhos. A explicação para esse acordo está no fato de que a célula unitária das redes investigadas possuem alta simetria [16].

Notamos que as frequências de propagação das ondas eletromagnéticas bem como suas faixas proibidas são peculiaridades de cada forma geométrica e composição. A mudança

da rede de Bravais e a alternância de materiais com maior constante dielétrica dentro e fora do cristal binário são as principais razões para a ocorrência ou não de gaps parciais e totais. Foi comprovado que a rede hexagonal precisa de menor contraste de índice de refração para produzir gaps fotônicos.

Capítulo 5

Conclusões

Neste trabalho de Mestrado foram calculadas as frequências de propagação das ondas eletromagnéticas em cristais fotônicos bidimensionais com diferentes formas geométricas e composições, e foi analisada a sua influência nos gaps fotônicos. Para isso, foram encontradas as séries de Fourier dos cristais representados por uma função binária descontínua, que vale 1 nos fios cilíndricos e, zero nas demais regiões. As séries de Fourier foram calculadas em acordo com os livros-texto e artigos estudados. A convergência das séries mostrou-se relativamente lenta, devido o número de pontos da rede recíproca somados.

Com base nas equações de Maxwell, a equação de ondas foi obtida. Ela foi resolvida para incidência no plano perpendicular aos fios e considerando as polarizações transversal elétrica e transversal magnética. A resolução da equação de ondas foi feita através da diagonalização de matrizes. Os autovalores dessa matriz fornecem os quadrados das frequências permitidas.

Os resultados numéricos obtidos foram comparados com os cálculos reportados num livro-texto e em dois artigos científicos. Foi encontrado bom acordo e conclui-se que o melhoramento do acordo quantitativo requer o aumento do número de termos usado nas séries de Fourier. Confirmou-se que os espectros ópticos de cristais fotônicos bidimensionais podem apresentar faixas de frequências proibidas e que esses gaps dependem da geometria e composição do cristal.

Fica explícito que diferentes designs de cristal afetam a propagação das ondas eletromagnéticas. Cada design pode produzir gap na polarização TE, como é o caso da rede hexagonal, com fios de ar em silício; ou gap na polarização TM, como é o caso da rede quadrada, com fios de alumina em ar; ou ainda, gap nas polarizações TE e TM, como ocor-

rido na estrutura honeycomb, em que temos fios de arseneto de gálio em ar. A presença desses gaps dá aos cristais fotônicos grande potencial para aplicações tecnológicas. Os dois primeiros podem servir na fabricação de polarizadores e o último pode ser utilizado na construção de guia de ondas e fibra de cristal fotônico. Os estudos foram realizados com cristais infinitos, os quais estão fora dos padrões da realidade e das possibilidades de processamento. Portanto, ao comparar com resultados experimentais, pode ser importante levar em conta novos efeitos de superfície.

A partir dos resultados obtidos, também atentamos para a dependência que o surgimento de gaps tem com a rede do cristal. Segundo essa visão, verificamos que a rede hexagonal necessita de menor contraste de índice de refração para produzir gaps fotônicos. Ressaltamos ainda que, num cristal binário, quando a permissividade é maior na região que compreende os fios o gap ocorre para a polarização TM, em caso contrário, há facilidade do gap aparecer na polarização TE.

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

- bidimensionais com propagação não perpendicular à direção dos fios;
- em três dimensões;
- com novos designs, como por exemplo, cristais com variação gradativa da permissividade;
- com defeitos na rede, e;
- contendo metais e/ou metamateriais, em que efeitos de absorção e de variações da permissividade e da permeabilidade com a frequência precisam ser considerados.

Em cálculos futuros também precisamos lidar com o problema da convergência lenta das séries de Fourier, e elaborar métodos que possam acelerar a mesma.

Apêndice A

Funções de Bessel

Cada função de Bessel é solução de uma equação diferencial da forma

$$x^2 \frac{d^2 y}{dx^2} + x \frac{dy}{dx} + (x^2 - \alpha^2)y = 0, \quad (\text{A.1})$$

para um número α qualquer, real ou complexo. Este número é referido como a ordem da função de Bessel [62]. Essas funções devem seu nome ao matemático e astrônomo alemão Friedrich Wilhelm Bessel (1784-1846). As funções de Bessel são importantes na resolução de problemas sobre propagação de ondas e potenciais estáticos em configurações circulares.

A função de Bessel de primeira espécie pode ser representada por uma série de Taylor, para um número inteiro α :

$$J_\alpha(x) = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(-1)^m}{m! \Gamma(m + \alpha + 1)} \left(\frac{x}{2}\right)^{2m+\alpha}. \quad (\text{A.2})$$

A função de Bessel de segunda espécie é representada por

$$Y_\alpha(x) = \frac{J_\alpha(x) \cos(\alpha\pi) - J_{-\alpha}(x)}{\sin(\alpha\pi)}. \quad (\text{A.3})$$

Neste trabalho somente interessam as funções de primeira espécie.

A figura A.1 mostra os gráficos das funções de Bessel de ordem zero $J_0(x)$ e da função de Bessel de primeira ordem $J_1(x)$. Observamos que as funções são oscilantes com amplitude decrescente. Também se verifica que $J_0(0) = 1$, $J'_0(0) = 0$, $J_1(0) = 0$ e $J'_1(0) = 0.5$, e a relação entre $J_0(x)$ e $J_1(x)$ é dada por $J'_0(x) = -J_1(x)$.

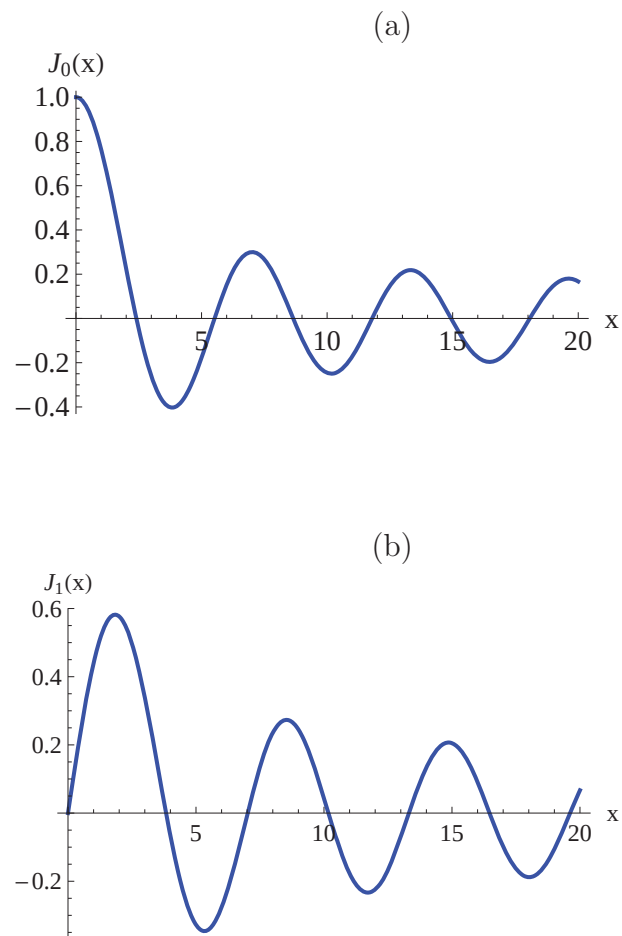


Figura A.1: (a) Gráfico da função de Bessel de ordem zero. (b) Gráfico da função de Bessel de primeira ordem.

Apêndice B

Autovalores e autovetores

Sejam V um espaço vetorial, K o corpo de escalares associado e $T : V \rightarrow V$ um operador linear definido nesse espaço. Para cada $\vec{v} \in V$ não nulo, a imagem $T\vec{v}$ pode ser paralelo ou não a $\vec{v}$. No primeiro caso, diz-se que $\vec{v}$ é autovetor de T . Nessa condição, existe $\alpha \in K$ tal que $T\vec{v} = \alpha\vec{v}$ e α é chamado de autovalor de T para o autovetor $\vec{v}$. Vejamos como é possível encontrar os autovalores e autovetores [72].

Exemplo: Seja $T(x, y) = (x + 2y, 3x + 2y)$. Determinar os autovalores e os autovetores.

Resolução:

$$\vec{v} = (x, y) \tag{B.1}$$

$$T(v) = \alpha v \tag{B.2}$$

$$T(x, y) = \alpha(x, y). \tag{B.3}$$

Como $T(x, y) = (x + 2y, 3x + 2y)$, podemos escrever:

$$(x + 2y, 3x + 2y) = \alpha(x, y). \tag{B.4}$$

Da igualdade acima são válidas duas equações:

$$x + 2y = \alpha x \tag{B.5}$$

$$3x + 2y = \alpha y \tag{B.6}$$

Das equações (B.5) em (B.6), temos que $\vec{v}_1 = (2, 3)$ e $\vec{v}_2 = (-1, 1)$ são autovetores para os autovalores $\alpha_1 = 4$ e $\alpha_2 = -1$, respectivamente. Esse fato é ilustrado na Figura B.1.

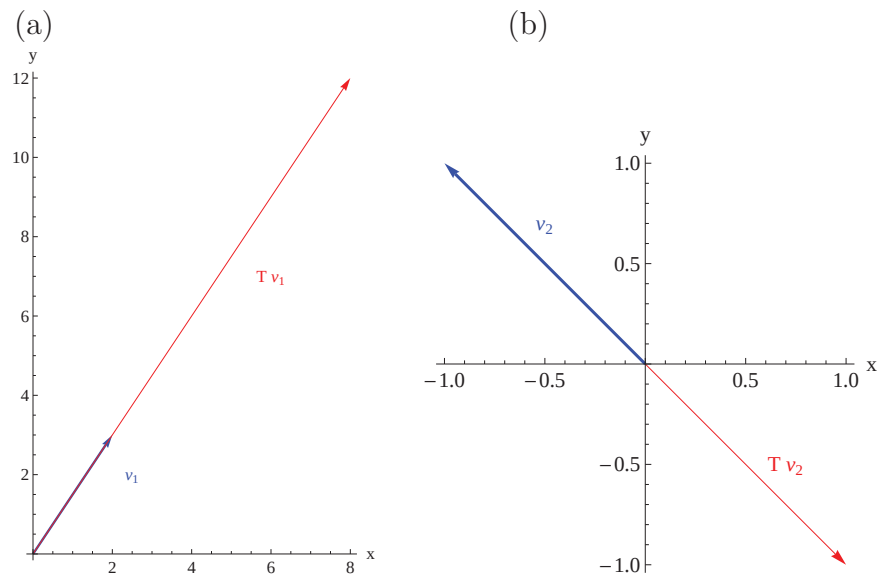


Figura B.1: Representação dos vetores $\vec{v}_1 = (2, 3)$ e $\vec{v}_2 = (-1, 1)$ e suas imagens pela transformação $T(x, y) = (x + 2y, 3x + 2y)$.

Referências Bibliográficas

- [1] MAGALHÃES, G. *Ciências e filosofia da natureza no século XIX: eletromagnetismo, evolução e ideias*.
- [2] BUTCHER, G. *Tour of The Eletromagnetic Spectrum*.
http://missionscience.nasa.gov/ems/TourOfEMS_Booklet_web.pdf.
- [3] HALLIDAY, D.; RESNICK, R.; WALKER, J. *Fundamentos de Física - vol. 3*. Rio de Janeiro: LTC - Livros Técnicos e Científicos Editora S.A., 2009.
- [4] HALLIDAY, D.; RESNICK, R.; WALKER, J. *Fundamentos de Física - vol. 4*. Rio de Janeiro: LTC - Livros Técnicos e Científicos Editora S.A., 2009.
- [5] BURGOS, S. P. et al. **A single-layer wide-angle negative-index metamaterial at visible frequencies**. *Nature Materials*, v. 9, p. 407–412, 2010.
- [6] JOANNOPOULOS, J. D. et al. *Photonic Crystals: molding the flow of light*. New Jersey: Princeton University Press, 2008.
- [7] INOUE, M. et al. **Magneto-optical properties of one-dimensional photonic crystals composed of magnetic and dielectric layers**. *Journal of Applied Physics*, v. 83, p. 6768–6770, 1998.
- [8] GUO, B. **Photonic band gap structures of obliquely incident electromagnetic wave propagation in a one-dimension absorptive plasma photonic crystal**. *Physics of plasmas*, v. 16, p. 043508–043514, 2009.
- [9] ROMANO, M. C. *Funções de Wannier para cristais fotônicos unidimensionais*. Dissertação (Mestrado) — Universidade Estadual Paulista, Brasil, 2011.
- [10] BENEDICTO, J. et al. **Comment on “Negative refraction in 1D photonic crystals”**. *Solid State Communications*, v. 147, p. 157–160, 2008.

- [11] QUINÓNEZ, F. A. *Cristais Fotônicos 2D: Projeto e Fabricação*. Dissertação (Mestrado) — Universidade Estadual de Campinas - Instituto de Física “Gleb Wataghin”, Brasil, 2006.
- [12] SØNDERGAARD, T. **Spontaneous Emission in Two-Dimensional Photonic Crystal Microcavities**. *IEEE Journal of Quantum Electronics*, v. 36, p. 450–458, 2000.
- [13] CERQUEIRA Jr., A. **Recent progress and novel applications of photonic crystal fibers**. *Rep. Prog. Phys.*, v. 73, p. 024401, 2010.
- [14] MARRONE, M.; RODRÍGUEZ-ESQUERRE, V. F.; HERNÁNDEZ-FIGUEROA, H. E. **A Novel Numerical Method for the Analysis of 2D Photonic Crystals: The Cell Method**. *Optics Express*, v. 10, p. 1299–1304, 2002.
- [15] NALIN, M. et al. **Two-dimensional photonic crystals in antimony-based films fabricated by holography**. *Journal of Applied Physics*, v. 103, p. 106101, 2007.
- [16] BUSCH, K. et al. **Periodic nanostructures for photonics**. *Physics Reports*, v. 444, p. 101–102, 2007.
- [17] CASSAGNE, D.; JOUANIN, C.; BERTHO, D. **Photonic band gaps in a two-dimensional graphite structure**. *Phys. Rev. B*, v. 52, p. R2217–R2220, 1995.
- [18] ZAKHIDOV, A. A. et al. **Carbon Structures with Three-Dimensional Periodicity at Optical Wavelengths**. *Science*, v. 282, p. 897–901, 1998.
- [19] NODA, S. et al. **Wavelengths Full Three-Dimensional Photonic Bandgap Crystals at Near-Infrared**. *Science*, v. 289, p. 604–608, 2000.
- [20] SLASOV, Y. et al. **On-chip natural assembly of silicon photonic bandgap crystals**. *Nature*, v. 414, p. 116–117, 2001.
- [21] GALUSHA, J. W. et al. **Discovery of a diamond-based photonic crystal structure in beetle scales**. *Physical Review E*, v. 77, p. 050904R, 2008.
- [22] GUO, B. et al. **Photonic band structures of 1-D plasma photonic crystal with time-variation plasma density**. *Physics of Plasmas*, v. 19, p. 044505–044510, 2012.

- [23] ASHCROFT, N. W.; MERMIN, N. D. ***Solid State Physics***. Fort Worth: Harcourt Brace College Publishers, 1976.
- [24] RAYLEIGH, L. **On the maintenance of vibrations by forces of double frequency, and on the propagation of waves through a medium endowed with a periodic structure**. *Philosophical Magazine and Journal of Science*, v. 24, p. 145–159, 1887.
- [25] KAPRIELIAN, Z. A. **Electromagnetic Transmission Characteristics of a Lattice of Infinitely Long Conducting Cylinders**. *Journal of Applied Physics*, v. 27, p. 1491 – 1502, 1956.
- [26] BYKOV, V. P. **Spontaneous emission from a medium with a band spectrum**. *Soviet Journal of Quantum Electronics*, v. 4, p. 861–871, 1975.
- [27] BULGAKOV, A. A.; KOVTUN, V. R. **Study of surface optical oscillations in periodical multi-layer media**. *Solid State Communications*, v. 56, p. 781–785, 1985.
- [28] YABLONOVITCH, E. **Inhibited Spontaneous Emission in Solid-State Physics and Electronics**. *Physical Review Letters*, v. 58, p. 2059–2062, 1987.
- [29] HO, K. M.; CHAN, C. T.; SOUKOULIS, C. M. **Existence of a photonic gap in periodic dielectric structures**. *Phys. Rev. Lett.*, v. 65, p. 3152–3155, 1990.
- [30] JOHN, S. **Localization of light**. *Phys. Today*, v. 44, p. 32–40, 1991.
- [31] SÖZÜER, H. S.; HAUS, J. W. **Photonic bands: simple-cubic lattice**. *J. Opt. Soc. Am.*, v. 10, p. 296–302, 1993.
- [32] JOANNOPOULOS, J. D.; VILLENEUVE, P. R.; FAN, S. **Photonic crystals: putting a new twist on light**. *Nature*, v. 386, p. 143, 1997.
- [33] VUKUSIC, P.; SAMBLES, J. R. **Photonic structures in Biology**. *Nature*, v. 424, p. 853–855, 2004.
- [34] VUKUSIC, P.; STAVENGA, D. G. **Physical methods for investigating structural colours in biological systems**. *Journal of The Royal Society Interface*, v. 6, n. Suppl 2, p. S133–S148, 2009.

- [35] SEAGO, A. E. et al. **Gold bugs and beyond: a review of iridescence and structural colour mechanisms in beetles (Coleoptera)**. *J. R. Soc. Interface*, v. 6, p. S165–S184, 2009.
- [36] WILTS, B. D.; PIRIH, P.; STAVENGA, D. G. **Spectral reflectance properties of iridescent pierid butterfly wings**. *J. Comp. Physiol. A*, v. 197, p. 693–702, 2011.
- [37] KRAUSS, T. F.; RUE, R. M. D. L. **Photonic crystals in the optical regime - past, present and future**. *Progress in Quantum Electronics*, v. 23, p. 51–96, 1999.
- [38] BLANCO, A. et al. **Large-scale synthesis of a silicon photonic crystal with a complete three-dimensional bandgap near 1.5 micrometres**. *Nature*, v. 405, p. 437–440, 2000.
- [39] FENG, L. et al. **Non-reciprocal light propagation in a silicon photonic circuit**. *Science*, v. 333, p. 729–733, 2011.
- [40] SHADBOLT, P. J. et al. **Generating, manipulating and measuring entanglement and mixture with a reconfigurable photonic circuit**. *Nature Photonics*, Published online, p. 45–49, 2011.
- [41] MIT. *Cheaper, More Efficient Solar Cells*. março 2007. <http://www.technologyreview.com/Energy/18415/>. Acessado em 09/01/2012.
- [42] CALTECH. *Novel negative-index metamaterial bends light wrong direction*. Abril 2010. <http://www.sciencedaily.com-/releases/2010/04/100422153939.htm>. Acessado em 06/01/2012.
- [43] CUBUKCU, E. et al. **Negative refraction by photonic crystals**. *Nature*, v. 423, p. 133–143, 2003.
- [44] MIT. *Three-Dimensional Photonic Crystals Shine*. julho 2011. <http://www.technologyreview.com/computing/38157/?mod=related>. Acessado em 09/01/2012.
- [45] DANG, S. **Analysis and simulation of optical properties in 2D photonic crystals using organic (NPB) films**. *Journal of Physics D: Applied Physics*, v. 41, p. 1–6, 2008.

- [46] VASCONCELOS, M. S. et al. **Photonic band gaps in quasiperiodic photonic crystals with negative refractive index.** *Phys. Rev. B*, v. 76, p. 165117, 2007.
- [47] LIMA, A.; SOMBRA, A. **Photonic crystal optical memory.** *Applied Physics A: Materials Science & Processing*, v. 103, p. 521–524, 2011.
- [48] MENEZES, J. W. et al. **Large-Area Fabrication of Periodic Arrays of Nanoholes in Metal Films and Their Application in Biosensing and Plasmonic-Enhanced Photovoltaics.** *Adv. Funct. Matter*, v. 20, p. 3918–3924, 2010.
- [49] MOGILEVTSEV, D. et al. **Plasmon polaritons in photonic metamaterial superlattices: Absorption effects.** *Phys. Rev. E*, v. 81, p. 047601, 2010.
- [50] REYES-GÓMEZ, E. et al. **Plasmon polaritons in photonic superlattices containing a left-handed material.** *EPL (Europhysics Letters)*, v. 88, n. 2, p. 24002, 2009.
- [51] BRUNO-ALFONSO, A. et al. **Unfolding of plasmon-polariton modes in one-dimensional layered systems containing anisotropic left-handed materials.** *Phys. Rev. B*, v. 84, p. 113101, 2011.
- [52] WANG, F. et al. **Reduction of refractive index contrast threshold for photonic band-gap in square lattices.** *Chinese Physical Society*, v. 22, p. 3094–3097, 2005.
- [53] ROMANATO, F. et al. **Fabrication by means of X-ray lithography of two-dimensional GaAs/AlGaAs photonic crystals with an unconventional unit cell.** *Nanotechnology*, v. 13, p. 644–652, 2002.
- [54] BEKKER, E. V.; THAM, T.; BENSON, T. **Band gap engineering in 2D photonic crystals: the influence of element shape and rotational angle.** In: *Proceedings of the 6th International Conference on Transparent Optical Networks*. [S.l.: s.n.], 2004. v. 1, p. 113–117.
- [55] BEKKER, E. V. et al. **Modal analysis of holey fibres with convex and non-convex polygon-shaped holes.** *Optical and Quantum Electronics*, v. 36, p. 733–744, 2004.

- [56] KALRA, Y.; SINHA, R. K. **Photonic band gap engineering in 2D photonic crystals**. *PRAMANA - Journal of Physics*, v. 67, p. 1155–1164, 2006.
- [57] FLORESCU, M.; TORQUATO, S.; STEINHARDT, P. **Designer disordered materials with large, complete photonic band gaps**. *PNAS*, v. 106, p. 20658–20663, 2009.
- [58] HART, E. et al. **A geometry optimization framework for photonic crystal design**. *Photonics and Nanostructures*, v. 10, p. 25–35, 2012.
- [59] MOGHIMI, M. et al. **Design and optimization of 2D photonic crystals for the best absolute band gap**. *Journal of Theoretical and Applied Physics*, v. 5-1, p. 5–10, 2011.
- [60] HE, X.-D. et al. **Absolute photonic band gaps of two-dimensional square-lattice photonic crystals with Taiji-shaped dielectric rods**. *Optics Communications*, v. 46, p. 3491–3496, 2011.
- [61] SHACKELFORD, J. F. ***Ciência dos Materiais***. São Paulo: Pearson Education do Brasil, 2008.
- [62] BUTKOV, E. ***Física Matemática***. Rio de Janeiro: LTC - Livros Técnicos e Científicos Editora S.A., 1968.
- [63] MARTIN, R. M. ***Electronic Structure - Basic Theory and Practical Methods***. Cambridge: Cambridge Univ. Press, 2004.
- [64] BASSALO, J. M. F. **Fresnel: O formulador matemático da teoria ondulatória da luz**. *Caderno Brasileiro de Ensino de Física*, v. 5, p. 79–87, 1988.
- [65] Instituto Nacional de Metrologia, Normalização e Qualidade Industrial. ***Sistema Internacional de Unidades***. Rio de Janeiro: Bureau International des Poids et Mesures - BIPM, 2007.
- [66] RILEY, K. F.; HOBSON, M. P. ***Essential Mathematical Methods for the Physical Sciences***. New York: Cambridge University Press, 2011.

- [67] SÖZÜER, H. S.; HAUS, J. W.; INGUVA, R. **Photonic bands: Convergence problems with the plane-wave method.** *Phys. Rev. B*, v. 45, p. 13962–13972, 1992.
- [68] CUI, Y. et al. **Silicon-based 2D slab nano photonic crystal TM polarizer in telecommunication wavelength.** In: *Proceedings of the 7th IEEE International Conference on Nanotechnology*. Hong Kong: [s.n.], 2007. v. 1, p. 1093 – 1096.
- [69] LI, J. **Terahertz modulator using photonic crystals.** *Optics Communications*, v. 269, n. 1, p. 98–101, 2007.
- [70] VILLENEUVE, P. R.; PICHÉ, M. **Photonic band gaps in two-dimensional square and hexagonal lattices.** *Physical Review B*, v. 46, p. 4969–4972, 1992.
- [71] WANG, R. et al. **Effects of shapes and orientations of scatterers and lattice symmetries on the photonic band gap in two-dimensional photonic crystals.** *Journal of Applied Physics*, v. 90, p. 4306–4313, 2001.
- [72] ANTON, H.; RORRES, C. *Álgebra Linear com Aplicações*. Porto Alegre: Editora Bookman, 2001.