Universidade Federal do Espírito Santo
Centro de Ciências Exatas - CCE
Departamento de Física - DFIS

Monografia de Final de Curso

Propagação da Luz em Meios Periódicos Unidimensionais: Cristais Fotônicos

Autor: Hamilton Dias Leite

Orientadora: Prof^a. Dr^a. Denise da Costa Assafrão de Lima

Vitória
2013

Hamilton Dias Leite

Propagação da Luz em Meios Periódicos Unidimensionais: Cristais Fotônicos

Monografia apresentada ao Curso de Física Bacharelado do Departamento de Física do Centro de Ciências Exatas da Universidade Federal do Espírito Santo, como parte dos pré-requisitos para a obtenção do título de Bacharel em Física.

Orientadora: Prof^a. Dr^a. Denise da Costa Assafrão de Lima

Vitória
2013

Hamilton Dias Leite

Propagação da Luz em Meios Periódicos Unidimensionais: Cristais Fotônicos

Monografia apresentada ao Curso de Física Bacharelado do Departamento de Física do Centro de Ciências Exatas da Universidade Federal do Espírito Santo, como parte dos pré-requisitos para a obtenção do título de Bacharel em Física.

Aprovada em 29 de abril de 2013

COMISSÃO EXAMINADORA

Prof^a. Dr^a. Denise da Costa Assafrão de Lima
Universidade Federal do Espírito Santo

Prof. Dr. Jorge Luis Gonzalez Alfonso
Universidade Federal do Espírito Santo

Prof. Dr. Valberto Pedruzzi Nascimento
Universidade Federal do Espírito Santo

Agradecimentos

À Deus por me dar força e intelegência suficientes começar e terminar este curso.

À Denise por ter me orientado, me aconselhado e me aturado neste trabalho, bem como nas matérias de quântica e eletromagnetismo. E mesmo grávida se dispôs a resolver muitos problemas.

À minha mãe por me criar sozinha com minhas irmãs (as quais também agradeço por me amarem muito) e por ter me ensinado todos os meus valores.

Ao meu avô por ser a figura paterna mais próxima que já tive e por sempre me apoiar e me dar conselhos, além de sempre ter sido uma influência muito importante.

À Thaís por estar comigo durante estes dois anos e ser a companheira com a qual eu quero passar muito tempo.

À Hanna que está na Espanha e de quem eu sinto saudade. Por sempre ser como uma irmã para mim e por nós dois termos passado muitos ótimos momentos juntos.

Aos meus amigos da faculdade: Ivan, Rodrigo, Álefe, Deivid Wilson, Alisson Ewerton... Estes me acompanharam durante estes quatro anos de curso, na alegria e na tristeza, nas materias fáceis e nos perrengues e por tantas outras coisas que enfrentamos.

Aos meus antigos colegas: Diego que anda meio sumido, mas que sempre vai ser meu amio e Gregório que começou o curso comigo, porém mudou de carreira. Os dois foram muito importantes para a minha escolha de ser Físico.

Ao Valberto e ao pessoal do LEMAG por estes três anos e pouco de iniciação científica e pelo apoio aos meus estudos.

À minha tia Rachel e ao meu tio Fernando dos quais admiro desde pequeno e que sempre me deram bastante apoio nas minhas escolhase investiram no meu futuro.

Ao restante da minha família e aos meus professores até hoje.

"Dê-me uma alavanca e um ponto de apoio e eu moverei o mundo."
Arquimedes de Siracusa

RESUMO

Este trabalho está dividido em duas partes. Na primeira o intuito é construir um Cristal Fotônico (CF) preservando a sua periodicidade e estudar a Reflectância (R), a Transmitância (T) e a estrutura da banda proibida formada quando ondas TE (Transversal Elétrica) e TM (Transversal Magnética) incidem sobre o Cristal Fotônico e o atravessam.

Na segunda parte do trabalho é introduzido um defeito na periodicidade da estrutura, construindo uma cavidade ótica. O objetivo é estudar o comportamento do pico de transmissão que se estabelece quando a periodicidade do cristal é quebrada. Esta quebra de periodicidade pode ocorrer devido a diversos fatores como, por exemplo, a mudança no índice de refração de uma das camadas ou a variação da espessura de uma das camadas. São simuladas diferentes maneiras de se quebrar a periodicidade do cristal e as consequências destas mudanças nos valores de R e de T.

Palavras Chaves: Cristais Fotônicos; Periodicidade; Banda Proibida.

ABSTRACT

This work is divided into two parts. In the first one, the proposal is to build a Photonic Crystal preserving its periodicity to study the Reflectance (R), the Transmittance (T) and the structure of the Band Gap when TE waves (Transversal Electric) and TM waves (Transversal Magnetic) pass through the Photonic Crystal.

In the second part of this project is to introduce a defect in the periodicity of the structure, building an optical cavity. The aim is to study the behavior of the transmission peak that is established when the periodicity of the crystal is broken. This break of periodicity can occur due to various factors such as the change in the refractive index or the thickness of the layers. Different ways to break the periodicity of the crystal are simulated and the correspondent consequences of these changes in the values of R and T.

Keywords: Photonic Crystals; Periodicity; Band Gap.

Sumário

1 Introdução **1**

2 Cristais Fotônicos **4**

2.1 O que são Cristais Fotônicos 4

2.2 Cristais em 1, 2 e 3 Dimensões 7

2.2.1 CF em uma dimensão 7

2.2.2 CF em duas dimensões 8

2.2.3 CF em três dimensões 10

2.3 Aplicações 11

2.3.1 Guias de Onda 11

2.3.2 Cavidades Ressonantes 12

2.3.3 Fibras de Cristais Fotônicos 12

2.3.4 Transistores Ópticos 13

3 Fundamentação Teórica **15**

3.1 Equações de Maxwell e Equação de Helmholtz. 15

3.2 Isomorfismo entre a Equação de Schrödinger e a Equação de Helmholtz. 17

3.3 Teorema de Bloch 18

3.4 Método da Matriz de Transferência. 20

3.5 Estrutura de Bandas 24

3.6 Espelhos de Bragg 27

4 Simulação de Cristais Fotônicos Sem Defeito **28**

4.1 A Banda Proibida 28

4.2 Dispersão 33

5 Simulação de Cristais Fotônicos Com Defeito **39**

5.1 Microcavidades 39

5.2 Inclusão de Dois Defeitos 45

6 Conclusões e Perspectivas **46**

Referências Bibliográficas **47**

A Programa Utilizado **50**

B Teorema de Bloch Quântico **57**

C Meios Anisotrópicos **60**

C.1 Tensor Dielétrico e Equação de Fresnel 60

C.2 Meios Girotrópicos e Efeito Faraday 62

C.3 Matriz de Transferência 64

Lista de Figuras

2.1 Exemplo de CF em uma, duas e três dimensões. As cores diferentes representam materiais com índices de refração diferentes. Imagem adaptada de [2]. 5

2.2 Iridescência na borboleta *Morpho rhetenor*. (a) Imagem real do azul iridescênte de uma asa da borboleta. (b) Imagem de microscopia eletrônica de transmissão (MET) mostrando as seções transversais na asa da *M. rhetenor*. (c) Imagem de MET de uma seção transversal da asa da espécie *M. didius* revela as multicamadas discretamente configuradas. A alta ocupação e o número elevado de camadas na asa da *M. rhetenor* em (b) cria uma refletividade intensa que contrasta com a aparência colorida mais difusa da *M. Didius*, em que as camadas se sobrepõem criando fortes efeitos de difração. Tamanho das escalas: (a) 1 cm; (b) 1,8 μm; (c) 1,3 μm. Imagem adaptada da referência [8]. 6

2.3 Esquerda: Superfície anti-refletiva das córneas do olho de uma espécie de borboleta (*Vanessa kershawi*). A escala representa 2 μm. Direita: Fósseis de uma planta aquática diatomácea que apresentam uma estrutura de fibra de CF nanoporoso. Acredita-se que esta estrutura favorece a captura de luz. A escala representa 10μm. Imagem retirada das referências [9] (esquerda) e [10] (direita). 7

2.4 O índice de refração n(z) na multicamada varia como função de z. Onde as camadas em verde e azul tem índices de refração diferentes com espaçamento periódico a. Imagem adaptada de [2]. 7

2.5 Estruturas com periodicidade em 1D. (a) Um espelho dielétrico com periodicidade em torno de 500 nm. (b) Uma multicamada de silício feita por meio de litografia. O período é em torno de 10 μm. Imagem adaptada das referências [11] (a) e [12] (b). 8

2.6 CF com periodicidade em 2D. A estrutura é formada por colunas de ar em um meio dielétrico. À esquerda é mostrada a rede triangular com parâmetro de rede a. Imagem adaptada de [2]. 9

2.7 Estruturas bidimensionais fabricadas por litografia. (a) Configuração de poros regulares em uma camada de alumina com intervalos de 200 nm. A espessura do filme é de cerca de 3μm. (b) Estrutura bidimensional de silício hexagonal poroso com um parâmetro de rede a = 1.5μm e o raio do poro r = 0.68μm. Figuras retiradas de [13] (a) e [14] (b). 9
2.8 (a) Empacotamento das esferas de silica e latex. (b) 6 camadas de silica empilhadas conforme a rede cristalina do diamante na direção [001]. De (a) para (b) ocorreu a dissolução das esferas de latex. Figura retirada de [15]. 10
2.9 Imagem feita por microscopia de elétrons de um CF no formato de pilha de madeira. O CF é feito de silício e forma uma rede cristalina fcc na direção [001]. Imagem adaptada da referência [16]. 11
2.10 Desenho esquemático de uma guia de onda. A guia consiste de uma camada com espessura d e índice de refração n_2 cercada por um meio de índice de refração n_1. Figura retirada da referência [17]. 11
2.11 Uma configuração bastante utilizada para as fibras de cristal fotônico. Há um padrão triangular de cavidades de ar, onde a cavidade central está faltando. A área cinza é feita de vidro e os circulos brancos são as cavidades que geralmente possuem dimensão de alguns micrômetros. Figura adaptada de [19]. 13
2.12 Um transistor óptico de uma molécula. Imagem retirada da referência [21]. 14

3.1 Arranjo periódico de um CF 1D (acima) comparado com potenciais quânticos (abaixo). As áreas escuras correspondem ao índice de refração n_1 e as áreas claras ao n_2. Imagem adaptada da referência [1]. 18
3.2 Desenho esquemático de um meio periódico dielétrico. 21
3.3 Propagação de ondas s e p por uma interface dielétrica. Os índices i e r refpresentam as ondas incidentes e refletidas. Figura adaptada da referência [18]. 22
3.4 Desenho esquemático de um meio periódico e as amplitudes associadas à n-ésima célula unitária e suas vizinhanças. Imagem adaptada da referência Yeh:1998. 25

4.1 Reflectância simulada para dois filmes sem periodicidade. Em vermelho tem-se a reflectância para o $Al_{0.2}Ga_{0.8}As$ e em preto para o $Al_{0.3}Ga_{0.7}As$. 29

4.2 Reflectância simulada para um filme com 5, 10 e 20 pares de repetição, com índices de refração (a) $n_1 = 3.01$ (camadas de $AlAs$) e $n_2 = 3.57$ (camadas de $Al_{0.2}Ga_{0.8}As$) e (b) $n_1 = 3.01$ (camadas de $AlAs$) e $n_2 = 3.45$ (camadas de $Al_{0.3}Ga_{0.7}As$). O comprimento de onda da ressonância é λo = 800 nm. Os gráficos inseridos mostram a transmitância para as mesmas estruturas. 30
4.3 Largura de linha da banda proibida em função do número de pares periódicos. 31
4.4 Estrutura de bandas para o CF construido com 20 pares alternados de (a) $AlAs$ e $Al_{0.2}Ga_{0.8}As$ e de (b) $AlAs$ e $Al_{0.3}Ga_{0.7}As$. 32
4.5 Leis de dispersão para $GaAs$, $Al_{0.2}Ga_{0.8}As$, $Al_{0.3}Ga_{0.7}As$ e $AlAs$. Os simbolos representam os dados experimentais e as linhas a interpolação. 33
4.6 Reflectância simulada com dispersão para um filme com 5, 10 e 20 pares de repetição de (a) $AlAs$ e $Al_{0.2}Ga_{0.8}As$; (b) $AlAs$ e $Al_{0.3}Ga_{0.7}As$. As espessuras das camadas foram definidas com relação aos índices de refração em λo = 800 nm. 35
4.7 Largura de linha da banda proibida em função do número de pares periódicos incluidos os efeitos de dispersão. 36
4.8 Estrutura de bandas, simulada com dispersão, para o CF construido com 20 pares alternados de (a) $AlAs$ e $Al_{0.2}Ga_{0.8}As$ e de (b) $AlAs$ e $Al_{0.3}Ga_{0.7}As$. 37
4.9 Amplitude quadrada do campo elétrico simulada para um CF com 20 pares de repetição de (a) $AlAs$ e $Al_{0.2}Ga_{0.8}As$ e de (b) $AlAs$ e $Al_{0.3}Ga_{0.7}As$. As linhas pretas refresentam as posições das interfaces entre os dois materiais. 38

5.1 Transmitância simulada para um filme com 5, 10 e 20 pares de repetição com a inclusão de um defeito do tipo (a) $Al_{0.3}Ga_{0.7}As$ e (b) Ar. O comprimento de onda da ressonância é λo = 800 nm. 40
5.2 Largura de linha do pico de transmissão em função do número de pares periódicos para o defeito como $Al_{0.3}Ga_{0.7}As$ e Ar. 41
5.3 Em vermelho a curva de reflectância experimental para um CF de $AlAs$ e $Al_{0.2}Ga_{0.8}As$ retirada de [4]. Em azul a reflectância calculada teoricamente. O comprimento de onda da ressonância é λo = 804.5 nm. O espelho inferior possui 26 pares e o superior 22 pares. 42
5.4 Transmitância simulada para um filme com 20 pares de repetição com a inclusão de um defeito de $Al_{0.3}Ga_{0.7}As$ e com a variação do ângulo de incidência. O comprimento de onda da ressonância é λo = 800 nm. . . 43

5.5 Amplitude quadrada do campo elétrico simulada para um CF com 5 pares de repetição com a inclusão de um defeito do tipo (a) $Al_{0.3}Ga_{0.7}As$ e (b) Ar na 5ª camada. O comprimento de onda da ressonância é λo = 800 nm. As linhas pretas representam as posições das interfaces entre as camadas. 44

5.6 Transmitância simulada para um CF do tipo com 20 pares de repetição de $AlAs$ e $Al_{0.2}Ga_{0.8}As$. O comprimento de onda da ressonância é de λo = 800 nm e os defeito incluidos são uma camada de ar e uma de $Al_{0.3}Ga_{0.7}As$, sendo suas posições especificadas acima. 45

Capítulo 1

Introdução

Um dos tópicos que mais tem chamado a atenção da comunidade científica atualmente é a Nanociência, que se refere ao estudo e à manipulação da natureza na escala nanométrica. A partir disto novas posibilidades com o desenvolvimento da chamada Nanotecnologia são criadas.

Os benefícios da Nanotecnologia são muitos: dispositivos nanotecnológicos como gravadores, sensores ou leitores magnéticos, semicondutores, entre outros. Estes dispositivos permitem a fabricação de microchips, celulares, telas sensíveis ao toque e muitas outras tecnologias que tornam esta ciência essencial para a rápida evolução do mundo moderno.

Um dos campos mais promissores dentro desta área é Nanofotônica, que é uma ciência recente, mas bem definida. O termo fotônica diz respeito à ciência da geração, emissão, absorção e detecção de luz próxima do visível (100nm-2μm). A fotônica tem sua origem na identificação dos fenômenos de interferência da luz por Isaac Newton e na predição das propriedades refletivas de um meio periódico por Lord Rayleigh, por volta de 1880. A Nanofotônica trata dos mesmos fenômenos, porém em escala nanométrica (1nm-100nm) [1]. Tais fenômenos podem ser observados por meio do confinamento de elétrons (no início da escala ~1nm) ou do confinamento de ondas eletromagnéticas (no fim da escala ~100nm). Para estudá-los é necessário construir dispositivos da mesma ordem de grandeza do comprimento de onda que se quer confinar, ou seja, dispositivos nanométricos.

Um exemplo de dispositivo capaz de manipular a luz é o Cristal Fotônico. Cristais fotônicos (CF) são estruturas com arranjos periódicos construídos de forma a permitir o controle sobre a propagação e confinamento das ondas eletromagnéticas em dadas direções e frequências [2]. Em outras palavras, um dispositivo nanofotônico. O arranjo periódico pode ser, por exemplo, uma permutação de camadas com índices de refração diferentes que se estende de maneira periódica em uma dimensão (n_1,n_2,n_1,n_2...). Com estes dispoitivos é possível manipular as propriedades dispersivas e de transmissão usando as chamadas estruturas de bandas [3]. Uma característica interessante é

a presença de uma banda proibida à propagação, o *Band-Gap*. Nesta região tanto a propagação quanto a densidade de estados eletromagnéticos são nulos.

Uma maneira de controlar a propagação da luz e, consequentemente, o seu confinamento é introduzir defeitos na periodicidade do CF (o que implica em inomogeneidades na permissividade dielétrica). Tais defeitos, chamados de microcavidades [4], implicam em uma quebra de periodicidade e uma forma de serem obtidos é mudando o índice de refração de uma das camadas ou ainda, variando a sua espessura.

Existem diversas aplicações para CF, destacando-se entre elas as guias de onda periódicas e as fibras de cristais fotônicos. Contudo, é a fabricação de componentes ópticos para computação que aquece ainda mais este campo, com a produção de fibras ópticas nanométricas e transistores ópticos. Tendo em vista que a transmissão de dados por caminhos ópticos reduz em muito a perda de energia e aumenta a velocidade com que os dados são transmitidos, a utilização destes componentes supera os componentes metálicos ainda em uso. Além disto, os CF também são utilizados na fabricação de lasers, células solares, LED's, etc [2].

A produção de CF em uma ou duas dimensões já é bem dominada e existem métodos para tal como, por exemplo, a Deposição por Pulverização Catódica (*Magnetron Sputtering*) que consiste em retirar átomos de um alvo sólido bombardeando-o com partículas de alta energia (geradas por um plasma) para então depositá-los em um substrato [5]. Mas hoje o grande desafio nesta área é a produção de CF em três dimensões [6].

Neste trabalho, é estudada a propagação em um CF (com e sem defeitos) do tipo **Espelho de Bragg** (DBR - *Distributed Bragg Reflector*). Um espelho de Bragg, é uma estrutura periódica feita de dois materiais semicondutores com índices de refração distintos. As espessuras das camadas são escolhidas de forma que a luz refletida por todas as interfaces interfira construtivamente, resultando em um espelho de alta refletividade [4].

O objetivo principal deste trabalho é estudar a propagação da luz em meios periódicos unidimensionais, com e sem defeitos. O trabalho é dividido em seis capítulos. O segundo é dedicado à uma discussão sobre cristais fotônicos com e sem defeitos, descrevendo em detalhes suas propriedades. O terceiro capítulo se refere à teoria geral: uma revisão sobre as teorias e metodologias empregadas nesta monografia. No capítulo quatro o foco é investigar o CF preservando a sua periodicidade. Para isto é importante examinar os coeficientes de Reflexão (R) e Transmissão (T), e a estrutura do *Band Gap* formado quando ondas TE (Transversal Elétrica) e TM (Transversal Magnética) incidem sobre o CF e o atravessam. O objetivo do quinto capítulo é introduzir um defeito na estrutura dos CF, construindo uma cavidade ótica e após isto, estudar o comportamento do pico de transmissão que se estabelece quando a periodicidade do cristal é quebrada para então observar as consequências destas mudanças nos

coeficientes R e T. Além disto, há uma análise da incidência em diferentes ângulos. Por último, no sexto capítulo estão as conclusões, discussões e perspectivas futuras do trabalho.

Para desenvolver este trabalho foi necessário criar códigos computacionais específicos e para isto optou-se pela linguagem em C e pelo Método da Matriz de Transferência [7]. O método teórico usado deve inicialmente abranger qualquer sistema periódico, com ou sem defeito, em uma dimensão. O Apêndice A mostra o código usado para as simulações computacionais.

Capítulo 2

Cristais Fotônicos

2.1 O que são Cristais Fotônicos

Desde a descoberta de que as partículas de matéria possuem propriedades de onda tem se observado na mecânica quântica muitas propriedades das ondas de matéria que eram semelhantes à óptica. Hoje o processo inverso está acontecendo, as consequências diretas das propriedades de onda dos elétrons estão sendo transferidas para o estudo dos fenômenos de ondas eletromagnéticas clássicas.

Para obter controle sobre propriedades como propagação, emissão ou absorção da luz e dos elétrons deve-se construir um material que siga uma certa periodicidade. Por exemplo, no caso da propagação de elétrons são os potenciais periódicos que interferem nestes fenômenos. Um cristal, que é um arranjo periódico de átomos ou moléculas, representa um potencial deste tipo para a propagação de um elétron através dele. Seus constituintes e sua estrutura cristalina ditam as propriedades de condução do cristal (seja ele isolante, condutor, semicontudor, etc.) [3].

O que diferencia um semicondutor de um condutor, por exemplo, são zonas onde a propagação dos elétrons é proibida, chamadas de *Band Gap*. No semicondutor existe uma zona proibida, entre as bandas de valência e de condução.

O análogo ótico para estas estruturas metálicas é o Cristal Fotônico, onde ao invés de átomos e moléculas, a periodicidade está contida na função dielétrica do material, o que quer dizer que está contida no índice de refração. Tais materiais produzem para os fótons muitos dos mesmos fenômenos que ocorrem quando um elétron passa atravéz de um potencial atômico [1].

Os cristais fotônicos são então materiais de baixa absorção com índices de refração periódicos. Existe periodicidade em uma, duas ou três dimensões (como na figura 2.1) e com a escolha do material apropriado surgem muitas propriedades interessantes. Com o arranjo correto é possível permitir a propagação de certos comprimentos de onda e proibir a propagação de outros, ou seja, criar *Band Gap* específicos para

uma faixa do espectro da luz [7]. Quando se prepara um cristal fotônico com periodicidade em duas ou três dimensões também é possível proibir a propagação em certas direções. Em outras palavras, para se obter o controle total sobre a propagação de luz, basta criar a estrutura conveniente para o que se deseja. Dentre as possibilidades tecnológicas geradas pelos CF em uma dimensão destacam-se [1] os espelhos de Bragg, as guias de onda, as cavidades ressonantes e as fibras de cristal fotônico.

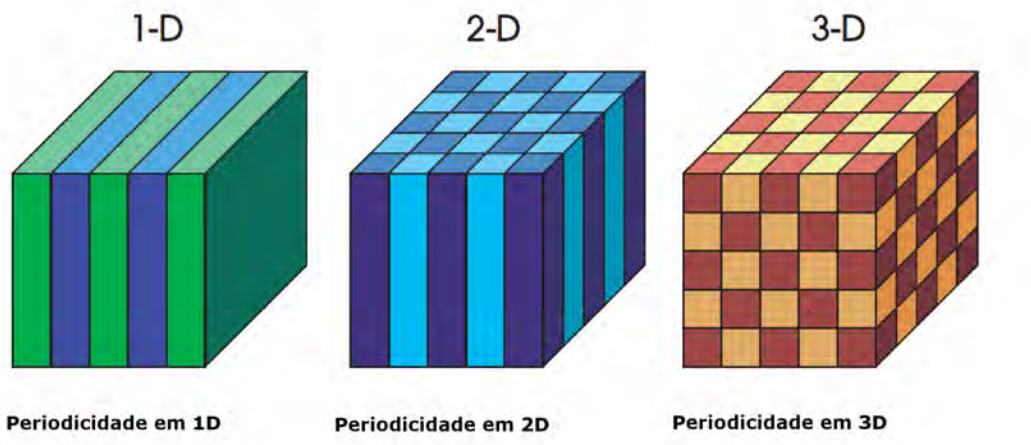

Figura 2.1: Exemplo de CF em uma, duas e três dimensões. As cores diferentes representam materiais com índices de refração diferentes. Imagem adaptada de [2].

Entretanto, a ciência não é e única a produzir efeitos ópticos interessantes. Muito antes do início do estudo de CF a natureza já era capaz de fabricar estruturas periódicas na escala de comprimentos de onda do visível, dando vida a fenômenos de interferência muito belos. Alguns exemplos são: "*uma certa espécie de estrela do mar usa elementos fotônicos compostos de calcita para coletar a luz, as borboletas Morpho (figura 2.2) que em suas asas há várias camadas da revestimento e ar para produzir suas impressionates cores azuis e alguns insetos que utilizam matrizes de elementos, com periodicidade em duas dimensões, para reduzir a refletividade em seus olhos compostos. Estruturas fotônicas naturais são fonte de inspiração para aplicações tecnológicas*" [8]. Outro exemplo é uma planta diatomácea que apareceu a mais de 500 milhões de anos mostrada na figura 2.3. Pérolas e algumas gemas como a Opala (que tem a periodicidade em três dimensões) também são representantes naturais dos CF.

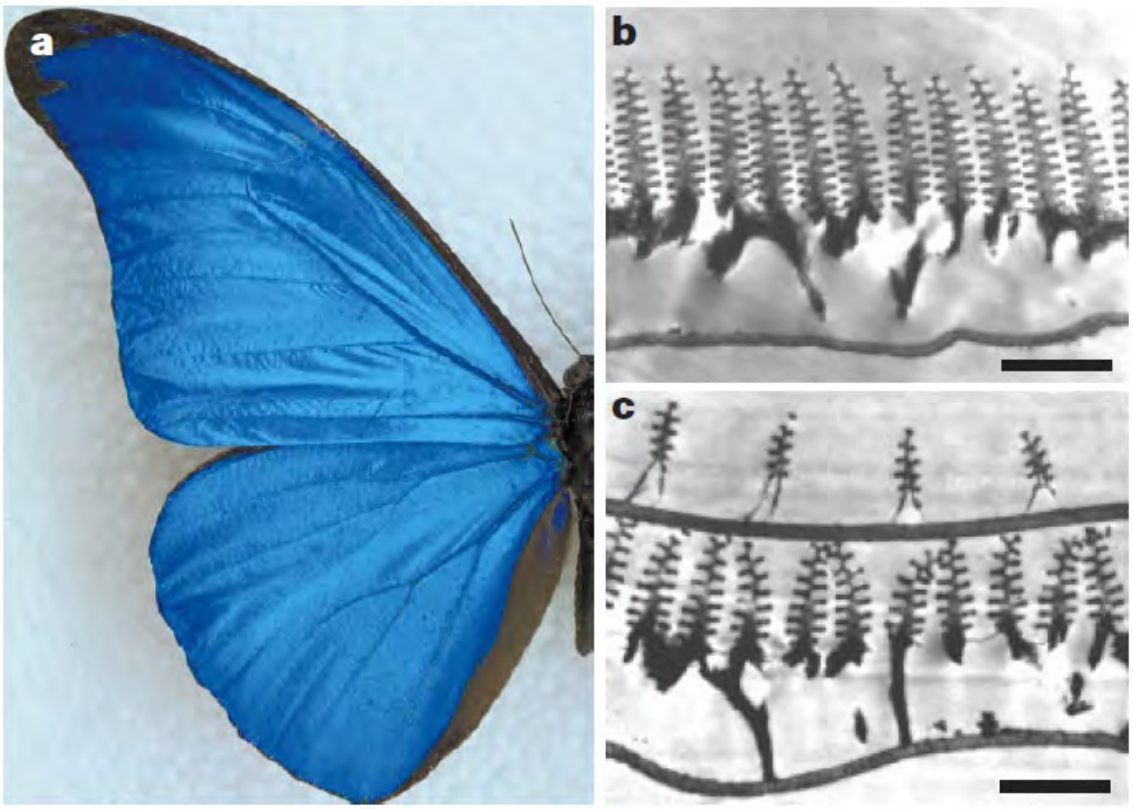

Figura 2.2: Iridescência na borboleta *Morpho rhetenor*. (a) Imagem real do azul iridescênte de uma asa da borboleta. (b) Imagem de microscopia eletrônica de transmissão (MET) mostrando as seções transversais na asa da *M. rhetenor*. (c) Imagem de MET de uma seção transversal da asa da espécie *M. didius* revela as multicamadas discretamente configuradas. A alta ocupação e o número elevado de camadas na asa da *M. rhetenor* em (b) cria uma refletividade intensa que contrasta com a aparência colorida mais difusa da *M. Didius*, em que as camadas se sobrepõem criando fortes efeitos de difração. Tamanho das escalas: (a) 1 cm; (b) 1,8 μm; (c) 1,3 μm. Imagem adaptada da referência [8].

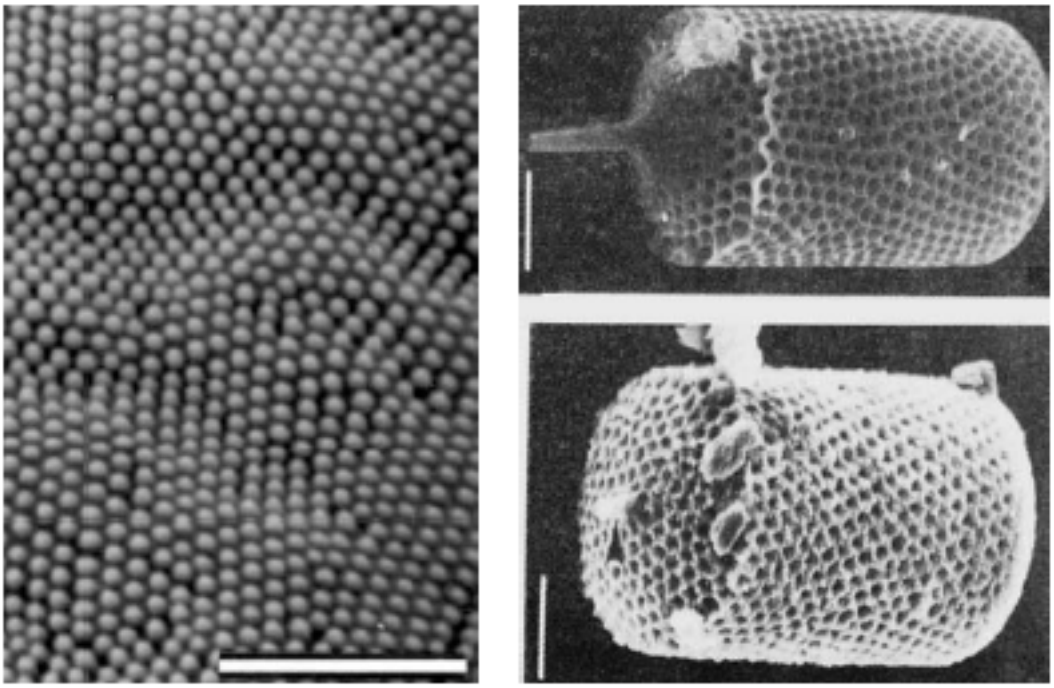

Figura 2.3: Esquerda: Superfície anti-refletiva das córneas do olho de uma espécie de borboleta (*Vanessa kershawi*). A escala representa 2 μm. Direita: Fósseis de uma planta aquática diatomácea que apresentam uma estrutura de fibra de CF nanoporoso. Acredita-se que esta estrutura favorece a captura de luz. A escala representa 10μm. Imagem retirada das referências [9] (esquerda) e [10] (direita).

2.2 Cristais em 1, 2 e 3 Dimensões

2.2.1 CF em uma dimensão

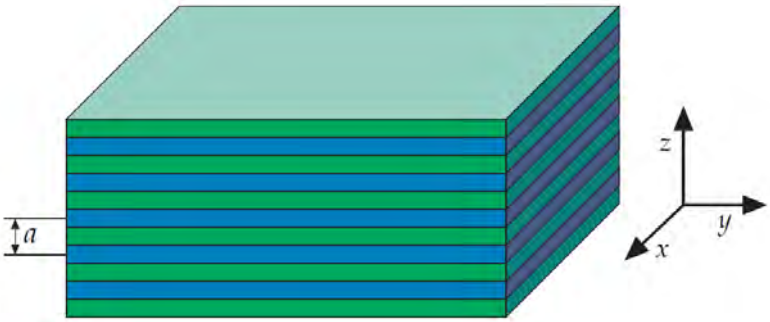

Figura 2.4: O índice de refração n(z) na multicamada varia como função de z. Onde as camadas em verde e azul tem índices de refração diferentes com espaçamento periódico a. Imagem adaptada de [2].

Multicamadas com periodicidade em uma dimensão, como nas figuras 2.4 e2.5, são produzidas para fabricação de dispositivos ópticos como espelhos (espelhos de Bragg) ou filtros para determinados comprimentos de onda e direções. Pode-se analizar este sistema com a propagação de uma onda plana através dele e considerar a soma das multiplas reflexões e refrações que ocorrem em cada interface.

Geralmente estas estruturas são feitas por deposição a vácuo, como a pulverização catódica (*Magnetron Sputtering*) e a epitaxia molecular por feixe de elétrons (*Molecular Beam Epitaxy*). Outro método é baseado na criação de um padrão na superfície do semicondutor e então o "desenho" químico (litografia) sobre este padrão [1].

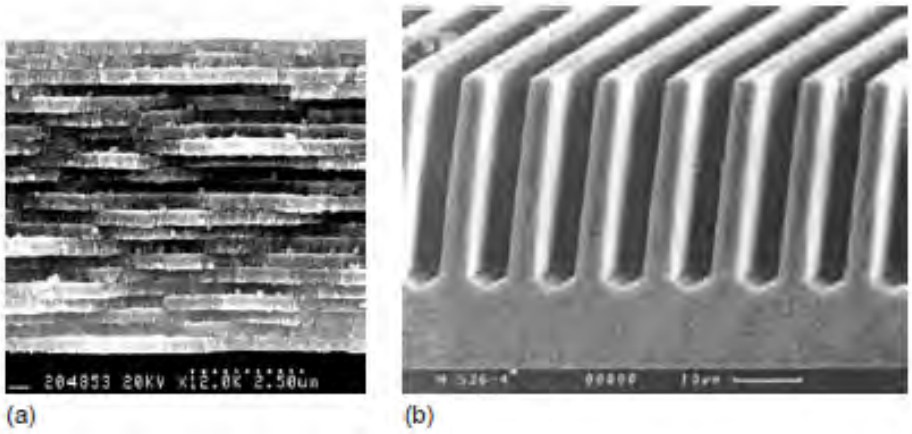

Figura 2.5: Estruturas com periodicidade em 1D. (a) Um espelho dielétrico com periodicidade em torno de 500 nm. (b) Uma multicamada de silício feita por meio de litografia. O período é em torno de 10 μm. Imagem adaptada das referências [11] (a) e [12] (b).

2.2.2 CF em duas dimensões

Um cristal fotônico em duas dimensões apresenta periodicidade em dois de seus eixos e é homogêneo no terceiro. Um meio muito comum de se obter estas estruturas é a formação de poros cilíndricos, que se estendem pela direção homogênea, em um material com índice de refração diferente, como pode ser visto nas figuras 2.6 e 2.7. Desta forma a periodicidade está contida no plano perpendicular a estes cilindros. Ao contrário dos CF em uma dimensão, as estruturas em 2D podem ser desenhadas para formar um *Band Gap* completo. Isso significa que estas estruturas previnem a propagação de certos comprimentos de onda em quaisquer direções e polarizações [2].

A técnica de litografia também é aplicada neste caso. O padrão inicial é feito por feixes de elétrons e então é usado o processo eletroquímico para criar nanoporos na estrutura de acordo com o desenho feito na superfície. Dependendo do tratamento

eletroquímico e da superfície do material os poros tem profundidade de alguns nanometros até centenas de nanometros. Outro método de produzir estruturas com periodicidade bidimensional é a "escrita"na superfície com laser (*Multi-Photon Polymerization*) [1].

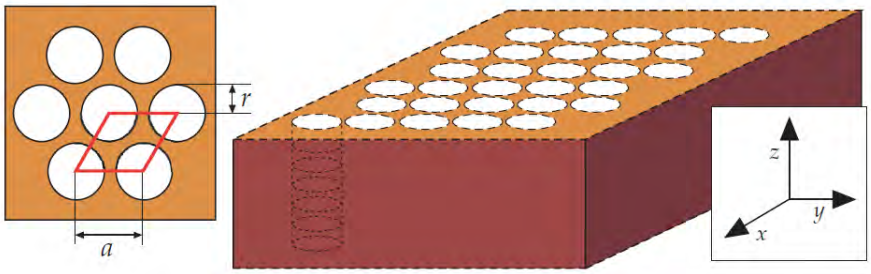

Figura 2.6: CF com periodicidade em 2D. A estrutura é formada por colunas de ar em um meio dielétrico. À esquerda é mostrada a rede triangular com parâmetro de rede a. Imagem adaptada de [2].

Muitos dispositivos podem ser construídos a partir destas estruturas como: microcavidades, fibras de cristais fotônicos, guias de onda, entre outros. Estruturas de alumina com nanoporos, por exemplo, são bastante utilizadas como componente isolante dos microchips semicondutores de silício.

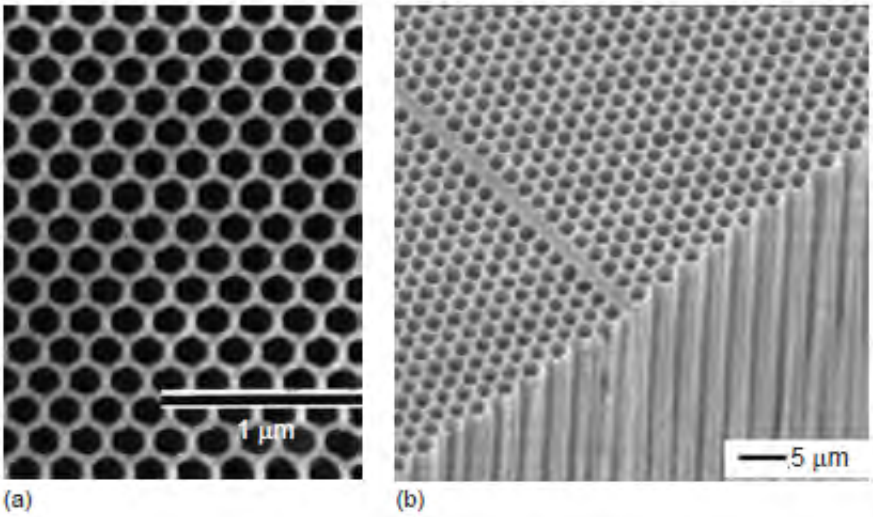

Figura 2.7: Estruturas bidimensionais fabricadas por litografia. (a) Configuração de poros regulares em uma camada de alumina com intervalos de 200 nm. A espessura do filme é de cerca de 3μm. (b) Estrutura bidimensional de silício hexagonal poroso com um parâmetro de rede a = 1.5μm e o raio do poro r = 0.68μm. Figuras retiradas de [13] (a) e [14] (b).

2.2.3 CF em três dimensões

O análogo óptico de uma rede cristalina é um CF em três dimensões. Há um número infinito de geometrias possíveis para um CF com índice de refração que segue uma periodicidade ao longo de seus três eixos, entretanto o interessante é construir estruturas que apresentem *Band Gap*. Geralmente o método é criar redes de tubos ou esferas interligadas, similares às estruturas em 2D, mas agora estendidas às três dimensões. Estas redes, de fato, são análogas às redes cristalinas atômicas. Algumas das simetrias escolhidas para produzir estes CF são a rede cristalina do diamante (cúbica de face centrada (fcc), com dois átomos por célula unitária) e a da opala.

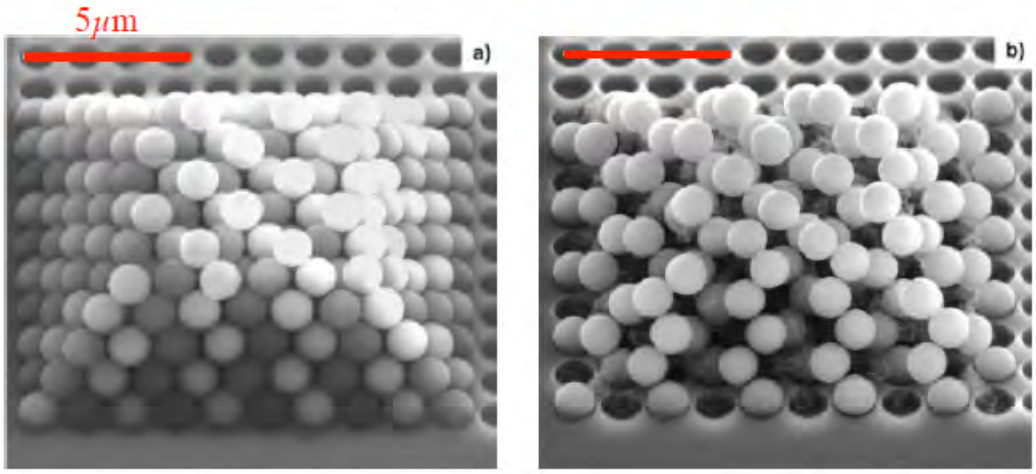

Figura 2.8: (a) Empacotamento das esferas de silica e latex. (b) 6 camadas de silica empilhadas conforme a rede cristalina do diamante na direção [001]. De (a) para (b) ocorreu a dissolução das esferas de latex. Figura retirada de [15].

Um dos processos de fabricação de CF em 3D é primeiro empacotar esferas microscópicas de silica e latex, depois dissolver apenas as esferas de latex e então fazer um tratamento térmico do que restou. Por fim, faz-se um molde inverso da estrutura formada pela sílica, como na figura 2.8. Outro meio de produção é feito com a deposição e litografia camada por camada. Em outras palavras, um padrão em duas dimensões é desenhado para cada camada e então outra é empilhada por cima com um padrão diferente. O padrão é repetido continuamente até que se crie uma periodicidade ao longo dos três eixos. A forma final é semelhante a uma pilha de toras retangulares de madeira (*woodpile*) como mostrado na figura 2.9.

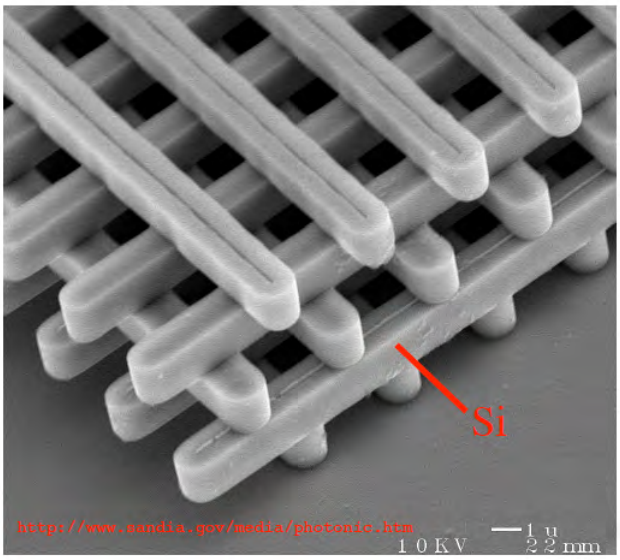

Figura 2.9: Imagem feita por microscopia de elétrons de um CF no formato de pilha de madeira. O CF é feito de silício e forma uma rede cristalina fcc na direção [001]. Imagem adaptada da referência [16].

2.3 Aplicações

2.3.1 Guias de Onda

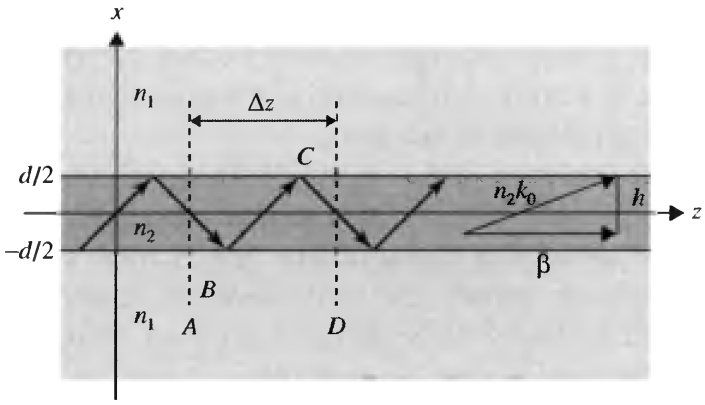

Figura 2.10: Desenho esquemático de uma guia de onda. A guia consiste de uma camada com espessura d e índice de refração n_2 cercada por um meio de índice de refração n_1. Figura retirada da referência [17].

Além dos fenômenos como reflexão e transmissão, um meio periódico também tem a propriedade de conduzir ondas eletromagnéticas confinadas. Tais materiais são chamados guias de onda (figura 2.10). As guias tem a propiedade de, sob condições apropriadas, impedir um feixe de luz, que se propaga através de um meio, de diver-

gir. Este fenômeno ocorre devido às multiplas reflexões internas totais que as ondas planas sofrem nas interfaces dielétricas [17].

Outra propriedade interessante das guias de onda aparece quando é adicionado um defeito linear na periodicidade. No caso dos CF bidimensionais mencionados acima, se um dos poros for construído com um índice de refração diferente, quebrando assim a periodicidade, este defeito permite guiar a luz por uma direção diferente de propagação [2].

2.3.2 Cavidades Ressonantes

Ressonadores ópticos são utilizados principalmente para gerar feixes ópticos monocromáticos com intensidades elevadas (lasers por exemplo). Estes ressonadores, também conhecidos como cavidades ressonantes ou microcavidades, são constituídos na maioria dos casos de CF que simulam efeitos de espelhos para fornecer múltiplas reflexões e reorientação de ondas de luz. A inclusão de um defeito pontual possibilita que a energia de um feixe óptico seja "aprisionada" no interior da cavidade. Neste caso, o feixe torna-se um modo do ressonador.

As dimensões típicas das cavidades são da ordem do comprimento de onda das ondas eletromagnéticas. Para microondas, os comprimentos de onda estão nos intervalos de centímetros e ressonadores nestas dimensões podem ser facilmente obtidos. Em regimes ópticos, as dimensões das cavidades precisam ser da ordem de micrômetros. A fabricação destes dispositivos em três dimensões é hoje um desafio. Uma discussão mais detalhada sobre estas cavidades esta descrita no capítulo 5.

2.3.3 Fibras de Cristais Fotônicos

Este campo é hoje um dos mais pesquisados na área de óptica. O motivo para isto é que estas fibras oferecem muitos graus de liberdade para serem desenhadas que levam a uma ampla variedade de propriedades únicas. As fibras de cristal fotônico são fibras ópticas cujas propriedades de guias de onda não são provenientes da composição tradicional feita de diferentes camadas de vidros, mas sim de um arranjo de cavidades de ar muito finas e pouco espaçadas que passam através de toda a fibra [19].

O arranjo mais simples de fibras de cristal fotônico tem um padrão triangular de cavidades de ar, com uma destas em falta (figura 2.11), ou seja, com um núcleo sólido rodeado por uma matriz de orifícios de ar [2]. A região central tem um índice de refração superior, criando uma região de alta refletividade, e tem propriedades similares ao núcleo de uma fibra convencional. Geralmente as fibras são fabricadas apenas com sílica, entretanto outros materiais são usados como, por exemplo, terras raras no

elemento central para aplicação em lasers.

As aplicações para estas estruturas são lasers e amplificadores, componentes de telecomunicação como controles de dispersão, filtros ou sensores e na óptica quântica com geradores de pares correlacionados, transparência eletromagnética induzida e guias de átomos frios [19].

Figura 2.11: Uma configuração bastante utilizada para as fibras de cristal fotônico. Há um padrão triangular de cavidades de ar, onde a cavidade central está faltando. A área cinza é feita de vidro e os circulos brancos são as cavidades que geralmente possuem dimensão de alguns micrômetros. Figura adaptada de [19].

2.3.4 Transistores Ópticos

Esta é com certeza uma das mais importantes aplicações de CF. Apesar de ser um campo ainda em desenvolvimento e de faltar muito para ser explorado e comprovado, a substituição dos componentes de microchips de silício por análogos ópticos pode trazer mudanças significativas para a transmissão de informação, abrindo espaço para o campo da computação quântica [20].

Muitas abordagens diferentes para óptica de transistores têm sido propostas. Em alguns trabalhos foram estudados fenômenos ópticos não-lineares, principalmente em ressoadores. Outros trabalhos recentes exploram moléculas individuais (figura 2.12), pontos quânticos e sistemas atômicos [21].

Como as taxas de dados continuam a subir nas telecomunicações, a comunicação óptica está progredindo de transmissão de dados em longas distâncias para a transmissao em distâncias cadas vez menores. No presente momento esta tecnologia na escala dos microchips ainda está na fase inicial, mas para os próximos anos espera-se

que os transistores ópticos suplantem os transistores eletrônicos usados atualmente [20] principalmente no que diz respeito à velocidade e quantidade de informação processada e transmitida. Outra das vantagens é que toda transmissão feita por caminhos ópticos produz menos calor e, consequentemente reduz a perda de energia, já que ao invés de eletricidade o que se conduz são ondas eletromagnéticas.

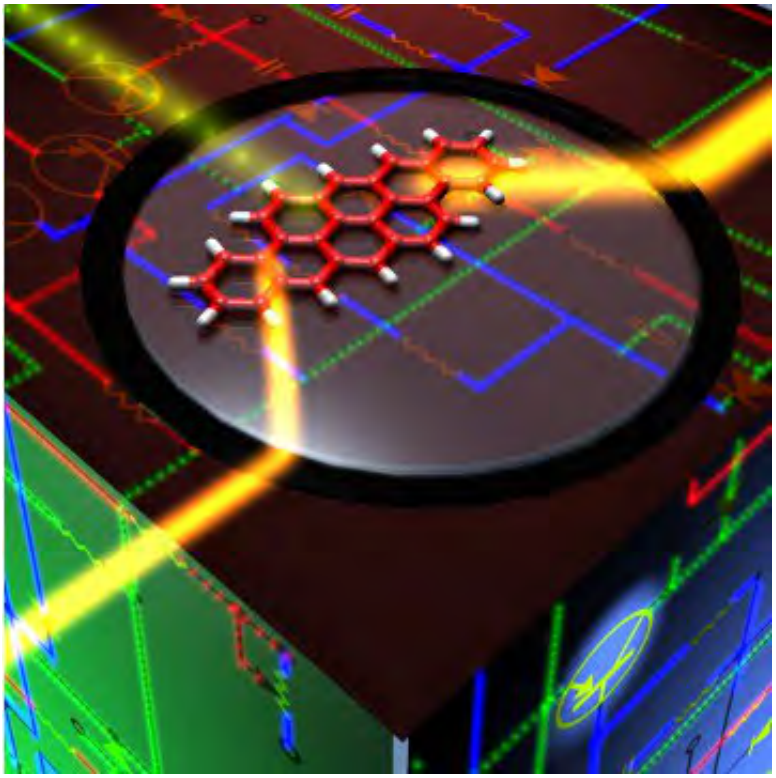

Figura 2.12: Um transistor óptico de uma molécula. Imagem retirada da referência [21].

Capítulo 3

Fundamentação Teórica

3.1 Equações de Maxwell e Equação de Helmholtz.

A metodologia utilizada neste capítulo é baseada principalmente na referência [7]. Para descrever qualquer fenômeno eletromagnético, é necessário partir das Equações de Maxwell. Na matéria elas são escritas da seguinte forma (no S.I.):

$$\begin{aligned} &\vec{\nabla} \cdot \vec{D} = \rho, \\ &\vec{\nabla} \cdot \vec{B} = 0, \\ &\vec{\nabla} \times \vec{E} = -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t}, \\ &\vec{\nabla} \times \vec{H} = -\frac{\partial \vec{D}}{\partial t} + \vec{J}, \end{aligned} \tag{3.1}$$

onde $\vec{E}$ e $\vec{H}$ são os campos elétrico e magnético; $\vec{B}$ e $\vec{D}$ são a indução magnética e o vetor deslocamento; $\vec{J}$ é a densidade de corrente elétrica e ρ é a densidade de carga elétrica.

Estes campos se relacionam, para meios lineares, da seguinte maneira [22]:

$$\begin{aligned} \vec{D} &= \varepsilon_0 \vec{E} + \vec{P} = \varepsilon \vec{E}, \\ \vec{B} &= \mu_0 \vec{H} + \vec{M} = \mu \vec{H}, \end{aligned} \tag{3.2}$$

em que ε_0 e μ_0 são a permissividade elétrica e a permeabilidade magnética do vácuo; ε e μ são a permissividade e a permeabilidade do meio, respectivamente. Em meios isotrópicos estas são grandezas escalares. $\vec{P}$ e $\vec{M}$ são a polarização elétrica e a magnetização, respectivamente.

Considerando um meio livre de cargas e correntes ($\vec{J} = 0$ e ρ = 0), pode-se escrever

as equações para ondas eletromagnéticas:

$$\nabla^2\vec{E} - \mu\varepsilon\frac{\partial^2\vec{E}}{\partial t^2} = 0, \qquad (3.3)$$
$$\nabla^2\vec{B} - \mu\varepsilon\frac{\partial^2\vec{B}}{\partial t^2} = 0.$$

Utilizando a solução já bem conhecida para ondas planas, na forma:

$$\psi(\vec{r},t) = e^{i(wt-\vec{k}\cdot\vec{r})}\hat{e}, \qquad (3.4)$$

com a relação de dispersão sendo:

$$k = \left|\vec{k}\right| = \omega\sqrt{\varepsilon\mu}. \qquad (3.5)$$

A velocidade de fase da onda é então:

$$v = \frac{\omega}{k} = \frac{1}{\sqrt{\varepsilon\mu}}. \qquad (3.6)$$

No vácuo,

$$v_{\text{vácuo}} = c = \frac{\omega}{k} = \frac{1}{\sqrt{\varepsilon_0\mu_0}}. \qquad (3.7)$$

Logo, a relação

$$v = \frac{c}{n}, \qquad (3.8)$$

leva ao índice de refração:

$$n = c\sqrt{\varepsilon\mu}. \qquad (3.9)$$

Desta forma, as equações (3.3) são escritas como:

$$\nabla^2\vec{E} - \frac{n^2}{c^2}\frac{\partial^2\vec{E}}{\partial t^2} = 0, \qquad (3.10)$$
$$\nabla^2\vec{B} - \frac{n^2}{c^2}\frac{\partial^2\vec{B}}{\partial t^2} = 0.$$

Introduzindo os escalares $E(\vec{r})$ e $H(\vec{r})$, usando as relações:

$$\vec{E}(\vec{r},t) = E(\vec{r},t)\hat{e}_1, \qquad (3.11)$$
$$\vec{H}(\vec{r},t) = H(\vec{r},t)\hat{e}_2,$$

onde $\hat{e}_1$ e $\hat{e}_2$ são vetores unitários na direção dos campos. Para uma onda plana monocromática de frequência ω

$$E(\vec{r}, t) = E(\vec{r})e^{iwt}, \tag{3.12}$$

é possível eliminar a dependência no tempo das equações (3.3) e ainda simplificá-las em equações escalares. Assim tem-se as Equações de Helmholtz:

$$\begin{aligned} \nabla^2 E(\vec{r}) + \frac{n^2(\vec{r})}{c^2}\omega^2 E(\vec{r}) = 0, \\ \nabla^2 B(\vec{r}) + \frac{n^2(\vec{r})}{c^2}\omega^2 B(\vec{r}) = 0, \end{aligned} \tag{3.13}$$

em que n é o índice de refração do meio que carrega uma dependência espacial. Usando o vetor de onda k na forma:

$$k = \frac{n(\vec{r})}{c}\omega, \tag{3.14}$$

as equações (3.13) podem ser reescritas como

$$\begin{aligned} \nabla^2 E(\vec{r}) + k^2 E(\vec{r}) = 0, \\ \nabla^2 B(\vec{r}) + k^2 B(\vec{r}) = 0. \end{aligned} \tag{3.15}$$

Estas equações descrevem a distribuição espacial dos campos elétrico e magnético quando uma onda eletromagnética com frequência w se propaga em um meio com índice de refração $n(\vec{r})$.

3.2 Isomorfismo entre a Equação de Schrödinger e a Equação de Helmholtz.

Na Mecânica Quântica, o estado de uma partícula, ou um sistema de partículas, é descrito por uma função de onda Ψ, tal que $|\Psi|^2$ e a densidade de probabilidade e dá a probabilidade de encontrar a partícula (ou o sistema de partículas) em uma região do espaço entre $\vec{r}$ e $\vec{r} + d\vec{r}$ [23]. Para conhecer Ψ é preciso resolver a Equação de Schrödinger que, já eliminada a dependência temporal, assume a forma:

$$\nabla^2 \psi(\vec{r}) + k^2 \psi(\vec{r}) = 0, \tag{3.16}$$

$$\tag{3.17}$$

com

$$k^2 = \frac{2m(E - V_o)}{\hbar^2}. \tag{3.18}$$

As equações (3.15) e (3.16) são ditas isomorfas e embora possuam significados físicos distintos elas apresentam as mesmas soluções matemáticas. Comparando as expressões (3.14) e (3.18), obtem-se a relação:

$$\frac{n(\vec{r})}{c}\omega = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2m[E - V(\vec{r})]} \tag{3.19}$$

o que significa que os problemas de propagação de ondas eletromagnéticas em meios cujo índice de refração variam espacialmente são resolvidos de maneira análoga aos problemas em Mecânica Quântica de uma partícula sujeita a um potencial. Em outras palavras, a Equação de Maxwell é resolvida como uma equação de autovalor. A figura 3.1 mostra esta analogia.

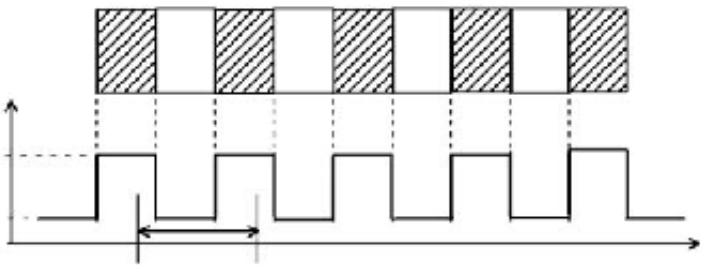

Figura 3.1: Arranjo periódico de um CF 1D (acima) comparado com potenciais quânticos (abaixo). As áreas escuras correspondem ao índice de refração n_1 e as áreas claras ao n_2. Imagem adaptada da referência [1].

3.3 Teorema de Bloch

No cenário da propagação de ondas eletromagnéticas as propriedade ópticas de um meio periódico são descritas pelos tensores permissividade e permeabilidade [24]. Considerando um meio em que não há contribuição magnética, a periodicidade é descrita pelo tensor ε que assume a forma:

$$\varepsilon(\vec{r}) = \varepsilon(\vec{r} + \vec{R}). \tag{3.20}$$

O vetor $\vec{R}$ representa a periodicidade da estrutura. Tomando as propriedades dos rotacionais e divergentes:

$$\nabla \times (\nabla \times \vec{E}) = \nabla(\nabla \cdot \vec{E}) - \nabla^2\vec{E}, \tag{3.21}$$

e sabendo que em um meio livre de cargas e correntes,

$$\nabla \cdot \vec{E} = \nabla \cdot \vec{B} = 0, \tag{3.22}$$

a equação (3.13) é escrita como:

$$\nabla \times (\nabla \times \vec{E}) - \omega^2 \mu \varepsilon \vec{E} = 0. \tag{3.23}$$

Tendo em vista que o meio é periódico, é possível expandir ε em uma série de Fourier:

$$\varepsilon(\vec{r}) = \sum_G \varepsilon_G e^{-i\vec{G}\cdot\vec{r}}, \tag{3.24}$$

onde $\vec{G}$ percorre todos os vetores da rede recíproca $\vec{g}$, incluindo $\vec{G} = \vec{0}$. A rede recíproca destas estruturas é definida a partir da relação: $\vec{G} \cdot \vec{R} = 2\pi$. No caso unidimensional, com periodicidade em x e período Λ, tem-se

$$\vec{G} = l\vec{g} = l\frac{2\pi}{\Lambda}\hat{x}, \qquad l = 0, \pm 1, \pm 2, ... \tag{3.25}$$

O campo elétrico neste meio periódico pode ser expresso, em geral, como uma integral de Fourier.

$$\vec{E} = \int \vec{A}(\vec{k}) e^{-\vec{k}\cdot\vec{r}} d^3k. \tag{3.26}$$

Substituindo (3.26) e (3.24) em (3.23)

$$\int d^3k \vec{k} \times (\vec{k} \times \vec{A}(\vec{k})) e^{-\vec{k}\cdot\vec{r}} + \omega^2 \mu \sum_G \int d^3k \varepsilon_G \vec{A}(\vec{k} - \vec{G}) e^{-\vec{k}\cdot\vec{r}} = 0. \tag{3.27}$$

As exponenciais são iguais e se cancelam, logo, esta equação é satisfeita apenas quando os coeficientes das integrais são iguais a zero. Sendo assim, para todos os valores de $\vec{k}$, tem-se a equação central.

$$\vec{k} \times (\vec{k} \times \vec{A}(\vec{k})) + \omega^2 \mu \sum_G \varepsilon_G \vec{A}(\vec{k} - \vec{G}) = 0. \tag{3.28}$$

A soma é feita sobre todos os vetores da rede recíproca, então a princípio esta equação deveria ser resolvida para todos os valores de $\vec{k}$, mas nota-se que apenas os termos do tipo $\vec{A}(\vec{k} - \vec{G})$ são acoplados, então a equação pode ser resolvida separadamente em equações que envolvem os termos $\vec{A}(\vec{K})$ e $\vec{A}(\vec{K} - \vec{G})$ para um dado vetor $\vec{K}$ (chamado de vetor de onda de Bloch) e para todos os possíveis vetores $\vec{G}$. Para cada $\vec{K}$ (tambem pertencente a rede recíproca) a solução para os campos também é

escrita como uma série de Fourier expandida para os coeficientes $\vec{A}(\vec{K}-\vec{G})$ [17]

$$\begin{aligned}\vec{E}_{\vec{K}} &= \sum_G \vec{A}(\vec{K}-\vec{G})e^{-i(\vec{K}-\vec{G})\cdot\vec{r}} \\ &= e^{-i\vec{K}\cdot\vec{r}}\sum_G \vec{A}(\vec{K}-\vec{G})e^{-i\vec{G}\cdot\vec{r}} \\ &= e^{-i\vec{K}\cdot\vec{r}}\vec{E}_{\vec{K}}(\vec{r}),\end{aligned} \tag{3.29}$$

com

$$\vec{E}_{\vec{K}}(\vec{r}) = \sum_G \vec{A}(\vec{K}-\vec{G})e^{-i\vec{G}\cdot\vec{r}}. \tag{3.30}$$

Desta forma, como $e^{i\vec{K}\cdot\vec{R}} = 1$, $\vec{E}_{\vec{K}}$ também é uma função periódica tal que:

$$\vec{E}_{\vec{K}}(\vec{r}) = \vec{E}_{\vec{K}}(\vec{r}+\vec{R}). \tag{3.31}$$

A equação (3.29) é conhecida como o Teorema de Bloch e fornece um modo normal de propagação. A solução mais geral em (3.26) é uma superposição linear de todos os modos normais.

No caso específico unidimensional, a equação

$$\vec{E}_{\vec{K}}(x) = \sum_l \vec{A}(\vec{K}-l\vec{g})e^{-il\frac{2\pi}{\Lambda}x}, \tag{3.32}$$

leva a:

$$E = E_K(x)e^{-i(k_z z+k_y y}e^{-iK_x x}. \tag{3.33}$$

3.4 Método da Matriz de Transferência.

Uma vez entendendo as Equações de Maxwell como equações de autovalor, o problema da propagação de ondas eletromagnéticas em meios com índices de refração diferentes se torna um problema matricial [7, 17].

Para um sistema com múltiplas camadas,

$$n(x) = \begin{cases} n_0 & \text{se } x < x_0 \\ n_1 & \text{se } x_0 < x < x_1 \\ n_2 & \text{se } x_1 < x < x_2 \\ \ldots & \\ n_N & \text{se } x_{N-1} < x < x_N \\ n_s & \text{se } x_N < x \end{cases}$$

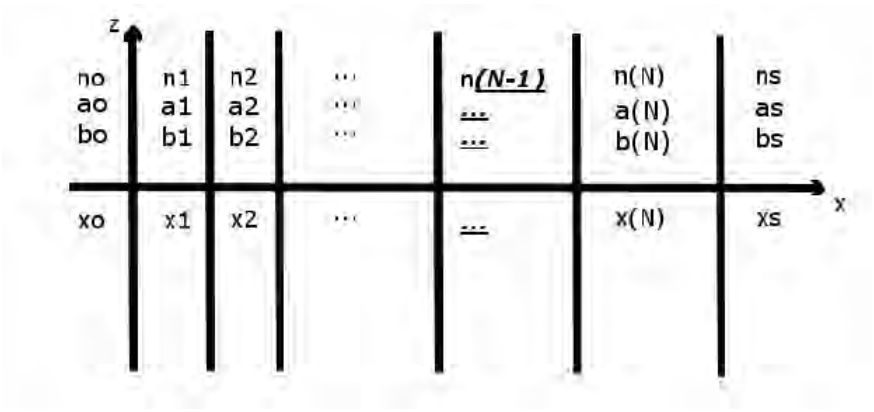

Figura 3.2: Desenho esquemático de um meio periódico dielétrico.

tal que n_l é o índice de refração da camada l, x_l é a posição da interface entre as camadas l e $l+1$, n_s é o índice de refração do substrato e n_0 é o índice de refração do meio incidente. A espessura d_l das camadas está relacionada à posição x_l da forma $d_l = x_l - x_{l-1}$. Considerando a solução para um meio homogêneo, na direção x como:

$$E = E(x)e^{i(\omega t - \beta z)}, \tag{3.34}$$

em que β é a componente z do vetor de onda e ω é a frequência angular. A distribuição $E(x)$ é escrita na forma:

$$E(x) = \begin{cases} a_0 e^{-ik_{0x}(x-x_0)} + b_0 e^{ik_{0x}(x-x_0)} & \text{se } x < x_0 \\ a_l e^{-ik_{lx}(x-x_l)} + b_l e^{ik_{lx}(x-x_l)} & \text{se } x_{l-1} < x < x_l \\ a_S e^{-ik_{Sx}(x-x_N)} + b_S e^{ik_{Sx}(x-x_N)} & \text{se } x_N < x \end{cases}$$

onde k_{lx} é a componente x do vetor de onda que, para $l = 0, 1, 2, ...N, s$, e para um dado ângulo de incidência θ_l, é escrito como

$$k_{lx} = [(n_l \frac{w}{c})^2 - \beta^2]^{1/2} = n_l \frac{w}{c} cos\theta_l. \tag{3.35}$$

Nas equações acima, a_l e b_l representam a amplitudes das ondas planas na interface $x = x_l$. A partir da Lei de Faraday (3.1) e dos campos acima, obtem-se a seguinte relação:

$$\vec{H} = \frac{i}{\omega\mu} \nabla \times \vec{E}. \tag{3.36}$$

Na figura 3.3 vê-se a propagação entre dois meios das ondas do tipo s, onde o campo elétrico é transverso ao plato de incidência (transversais elétricas), e do tipo p, onde o campo magnético é transverso ao plano de incidência (transversais magnéticas). Então, aplicando as condições de contorno adequadas, a transimissão de uma onda em uma interface entre dois meios é dada pela matriz D, chamada Matriz

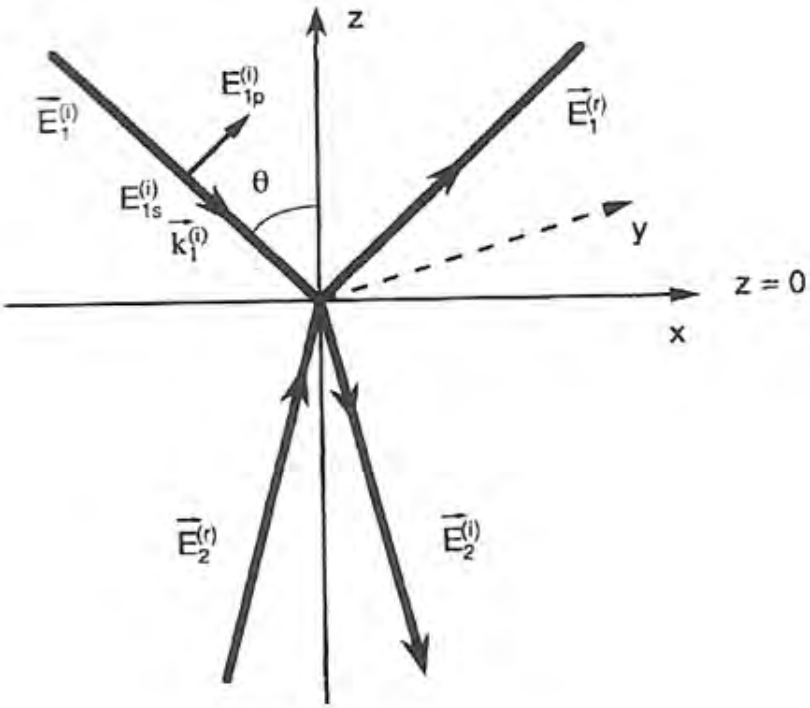

Figura 3.3: Propagação de ondas s e p por uma interface dielétrica. Os índices i e r refpresentam as ondas incidentes e refletidas. Figura adaptada da referência [18].

Dinâmica.

Impondo a continuidade dos campos E_y e H_z na interface entre as camadas l e $l+1$,

$$E_{ls} + E'_{ls} = E_{(l+1)s} + E'_{(l+1)s}, \tag{3.37}$$

$$\sqrt{\frac{\varepsilon_l}{\mu_l}}(E_{ls} - E'_{ls})cos\theta_l = \sqrt{\frac{\varepsilon_{l+1}}{\mu_{l+1}}}(E_{(l+1)s} - E'_{(l+1)s})cos\theta_{l+1}, \tag{3.38}$$

a propagação para as ondas s é escrita na forma matricial:

$$D_l \begin{pmatrix} E_{ls} \\ E'_{ls} \end{pmatrix} = D_{l+1} \begin{pmatrix} E_{(l+1)s} \\ E'_{(l+1)s} \end{pmatrix} \tag{3.39}$$

onde

$$D_l = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ n_l cos\theta_l & -n_l cos\theta_l \end{pmatrix}. \tag{3.40}$$

Impondo a continuidade dos campos E_z e H_y na interface entre as camadas l e l+1,

$$E_{lp} + E'_{lp} = E_{(l+1)p} + E'_{(l+1)p}, \tag{3.41}$$

$$\sqrt{\frac{\varepsilon_l}{\mu_l}}(E_{lp} - E'_{lp})cos\theta_l = \sqrt{\frac{\varepsilon_{l+1}}{\mu_{l+1}}}(E_{(l+1)p} - E'_{(l+1)p})cos\theta_{l+1}, \tag{3.42}$$

a propagação para as ondas p é escrita na forma matricial:

$$D_l \begin{pmatrix} E_{lp} \\ E'_{lp} \end{pmatrix} = D_{l+1} \begin{pmatrix} E_{(l+1)p} \\ E'_{(l+1)p} \end{pmatrix} \tag{3.43}$$

onde

$$D_l = \begin{pmatrix} cos\theta_l & cos\theta_l \\ n_l & -n_l \end{pmatrix}. \tag{3.44}$$

Escrevendo estas equações, em função dos coeficientes a e b do campo elétrico, para uma multicamada

$$\begin{pmatrix} a_0 \\ b_0 \end{pmatrix} = D_0^{-1} D_1 \begin{pmatrix} a'_1 \\ b'_1 \end{pmatrix}, \tag{3.45}$$

$$\begin{pmatrix} a'_1 \\ b'_1 \end{pmatrix} = P_1 \begin{pmatrix} a_1 \\ b_1 \end{pmatrix},$$

$$\begin{pmatrix} a_l \\ b_l \end{pmatrix} = P_l D_l^{-1} D_{l+1} \begin{pmatrix} a_{l+1} \\ b_{l+1} \end{pmatrix}.$$

Sendo P a Matriz de Propagação, que descreve como as ondas se propagam dentro dos meios, da forma:

$$P_l = \begin{pmatrix} e^{i\phi_l} & 0 \\ 0 & e^{-i\phi_l} \end{pmatrix}, \tag{3.46}$$

em que $\phi_l = k_{lx}d$ é a fase da onda. A matriz P é exponencial devido a solução das ondas planas. Assim a relação entre as amplitudes dos campos incidentes a_0, b_0 e as amplitudes transmitidas a_s é b_s da forma:

$$\begin{pmatrix} a_0 \\ b_0 \end{pmatrix} = D_0^{-1} \left(\prod_{l=1}^{N} D_l P_l D_l^{-1} \right) D_s \begin{pmatrix} a_s \\ b_s \end{pmatrix}, \tag{3.47}$$

$$\begin{pmatrix} a_0 \\ b_0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} M_{11} & M_{12} \\ M_{21} & M_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_s \\ b_s \end{pmatrix},$$

onde $\hat{\mathrm{M}}$ é a chamada Matriz de Transferência que descreve a propagação da onda eletromagnética da primeira à última camada.

Para encontrar a Transmitância (T) e a Reflectância (R), é necessário simular estas matrizes de transferência para meios com índices de refração periódicos, e então obter, a partir destas, os coeficientes de transmissão (t) e de reflexão (r).

$$t = \left(\frac{b_0}{a_0}\right)_{b_s=0} \quad ; \quad r = \left(\frac{a_s}{a_0}\right)_{b_s=0}, \tag{3.48}$$

$$\Rightarrow \quad t = \left|\frac{1}{M_{11}}\right| \quad ; \quad r = \left|\frac{M_{21}}{M_{11}}\right|, \tag{3.49}$$

e a partir daí, obter T e R, que descrevem as probabilidades de transmissão e reflexão.

$$T = t^2; \quad R = r^2. \tag{3.50}$$

Este é método utilizado nos cálculos deste trabalho. O método para se obter a Matriz de Transferência e os coeficientes de reflexão e transmissão para meios anisotrópicos está descrito no apêndice C.

3.5 Estrutura de Bandas

Alguns dos conceitos físicos usados na física do estado sólido como vetor de onda de Bloch, zonas de Brillouin [25] e bandas proibidas são também usados para a propagação de radiação eletromagnética em um meio periódico. Uma multicamada, por exemplo, é similar a uma estrutura cristalina em uma dimensão que é invariante sobre uma operação de translação. Ou seja,

$$n^2(x + \Lambda) = n^2(x). \tag{3.51}$$

onde Λ é o período. De acordo com o teorema de Bloch,(3.29) e (3.33), as soluções para as equações de onda (campos), para uma propagação na direção x, são

$$E(x, z) = E_K(x)e^{-i\beta z}e^{-iKx}, \tag{3.52}$$

tal que $E_K(x)$ tem período Λ, da forma:

$$E_K(x + \Lambda) = E_K(x), \tag{3.53}$$

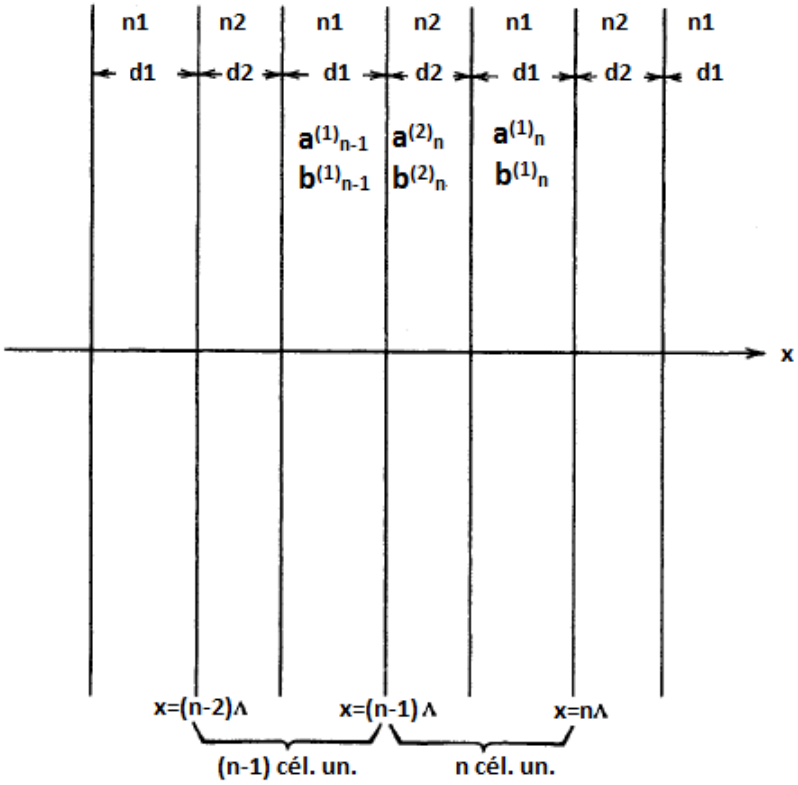

Figura 3.4: Desenho esquemático de um meio periódico e as amplitudes associadas à n-ésima célula unitária e suas vizinhanças. Imagem adaptada da referência Yeh:1998.

sendo K o vetor de onda de Bloch. Para determinar K e $E_K(x)$ é necessário escrever a equação para os campos, usando a condição periódica (3.53), na forma matricial:

$$\begin{pmatrix} a_n \\ b_n \end{pmatrix} = e^{-iK\Lambda} \begin{pmatrix} a_{n-1} \\ b_{n-1} \end{pmatrix}, \tag{3.54}$$

onde

$$\begin{pmatrix} a_{n-1} \\ b_{n-1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A & B \\ C & D \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_n \\ b_n \end{pmatrix}. \tag{3.55}$$

O que significa que o vetor coluna dos campos satisfaz a equação de autovalor:

$$\begin{pmatrix} A & B \\ C & D \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_n \\ b_n \end{pmatrix} = e^{-iK\Lambda} \begin{pmatrix} a_n \\ b_n \end{pmatrix}. \tag{3.56}$$

em que a matriz $\hat{\mathcal{T}} = (A\,B, C\,D)$ é a matriz de translação, com determinante igual a 1,

e tem como autovalor o fator de fase $e^{\pm iK\Lambda}$ dado por

$$e^{\pm iK\Lambda} = \frac{1}{2}(A+D) \pm \left\{ \left[\frac{1}{2}(A+D)\right]^2 - 1 \right\}^{1/2}. \tag{3.57}$$

Os autovetores correspondentes são

$$\begin{pmatrix} a_0 \\ b_0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} B \\ e^{-iK\Lambda} - A \end{pmatrix}, \tag{3.58}$$

vezes uma constante arbitrária. A equação (3.57) da a relação de dispersão entre ω, β e K para a função de onda de Bloch

$$K(\beta,\omega) = \frac{1}{\Lambda} cos^{-1}\left[\frac{1}{2}(A+D)\right]. \tag{3.59}$$

Se $\left|\frac{1}{2}(A+D)\right| < 1$, os valores de K são reais e a propagação das ondas de Bloch é permitida. Quando $\left|\frac{1}{2}(A+D)\right| > 1$, $K = m\pi/\Lambda + iK_i$ e então a onda é evanescente. Esta é a chamada banda proibida. O limite das bandas é quando $\left|\frac{1}{2}(A+D)\right| = 1$, este limite coincide com as Zonas de Brillouin.

De acordo com as equações (3.52) e (3.56), e de posse dos coeficientes a_0 e b_0, a solução completa para as ondas de Bloch para a camada n_1 da n-ésima célula unitária é dada por:

$$E_K(x)e^{-iKx} = [(a_0 e^{-ik_{1x}(x-n\Lambda)} + b_0 e^{ik_{1x}(x-n\Lambda)})e^{iK(x-n\Lambda)}]e^{-iKx}, \tag{3.60}$$

com a_0 e b_0 fornecidos pela equação (3.58).

Para o caso específico da incidência normal ($\beta = 0$) a relação de dispersão entre ω e K, obtida a partir dos coeficientes A, B, C e D provenientes da solução da equação de autovalor, é escrita como:

$$cosK\Lambda = cosk_1d_1\, cosk_2d_2 - \frac{1}{2}\left(\frac{n_1}{n_2} + \frac{n_2}{n_1}\right) senk_1d_1\, senk_2d_2, \tag{3.61}$$

em que $k_1 = (\omega/c)n_1$ e $k_2 = (\omega/c)n_2$. O primeiro gap ocorre em $Re(K) = \pi/\Lambda$ (Primeira Zona de Brillouin), então:

$$K\Lambda = \pi \pm ix. \tag{3.62}$$

3.6 Espelhos de Bragg

Os espelhos de Bragg são os exemplos mais comuns de cristais fotônicos em uma dimensão [26]. Estes espelhos são construídos alternando as camadas com dois materiais semicondutores ou dielétricos com índices de refração distintos. Neste trabalho, são utilizados os espelhos do tipo quarto de onda (*Quarter Wave Stack*) que são estruturas com camadas periódicas cujo espaçamento óptico (ou seja, a espessura de cada camada vezes o seu índice de refração) corresponde a um quarto do comprimento de onda da onda eletromagnética incidente. O quarto de onda é um caso especial, em que as camadas de revestimento tem uma espessura óptica igual a um quarto do comprimento de onda no qual se deseja máxima refletividade [4].

$$d = \frac{\lambda_o}{4n(\vec{r})}. \tag{3.63}$$

Esta construção permite produzir espelhos com alta refletividade, sendo esta proporcional ao número de pares de camadas periódicos e à diferênça entre os índices de refração das camadas. Isto ocorre pois as reflexões de cada camada interferem construtivamente para este comprimento de onda específico.

Se ω_0 é a frequência do centro da banda proibida, tal que:

$$k_1 a = k_2 b = \frac{\pi}{2}. \tag{3.64}$$

A partir da condição do quarto de onda, nesta frequência, a equação de dispersão (3.61) se torna:

$$cosK\Lambda = -\frac{1}{2}\left(\frac{n_1}{n_2} + \frac{n_2}{n_1}\right). \tag{3.65}$$

Tal fenômeno tem proporcionado maior funcionalidade de dispositivos fotônicos, por exemplo, em aceleradores de elétrons, filtros polarizadores, sensores ópticos, e na propagação de sólitons.

Com este tópico se encerra o capítulo sobre a fundamentação teórica. Nos próximos dois capítulos estão apresentados os resultados obtidos para os CF simulados com e sem defeito.

Capítulo 4

Simulação de Cristais Fotônicos Sem Defeito

4.1 A Banda Proibida

O objetivo deste tópico é estudar o CF do tipo espelho de Bragg constituido de camadas alternadas de derivados do $GaAs$ (Arseneto de Gálio) e do $Al_xGa_{1-x}As$ (Arseneto de Gálio Alumínio) [4, 27, 28]. A escolha destes materias é devido à sua grande aplicação em óptica de semicondutores, além, é claro, do grande número de dados experimentais disponíveis na literatura. As espessuras das camadas do CF são escolhidas de forma que $d = \frac{\lambda_o}{4n(\vec{r})}$, em que λ_o é o comprimento de onda em que se deseja alta refletividade. Já o substrato utilizado para as simulações foi o $GaAs$ que, para um comprimento de onda fixo de 800 nm, tem índice de refração $n = 3.67$. Os detalhes sobre o código computacional usado para todas os cálculos neste e no proximo capítulo estão descritos no apêndice A.

Uma importante propriedade destes cristais é o aparecimento de uma região de comprimentos de onda onde não há transmissão da luz que se propaga através do meio. Para exemplificar, considere uma estrutura constituída de apenas uma camada, ou seja, o cristal é construído com um material com índice de refração constante. A figura 4.1 mostra o comportamento da reflectância em função do comprimento de onda incidente para dois tipos de estruturas. Uma com uma monocamada de $Al_{0.3}Ga_{0.7}As$ (Arseneto de Gálio Alumínio-30$\%$) e a outra com uma monocamada de $Al_{0.2}Ga_{0.8}As$ (Arseneto de Gálio Alumínio-20$\%$). Como pode se observar, a Reflectância se comporta periodicamente alternando entre máximos e mínimos de reflexão sendo que nenhuma região é proibida à propagação da onda para os dois casos.

No entanto, se for incluida uma periodicidade entre os pares de camadas, ou seja, construindo a estrutura com camadas alternadas de $AlAs$ e $Al_xGa_{1-x}As$ (com x= 20 e 30$\%$), o que se observa é uma estrutura completamente diferente para a Reflectância.

Agora surge uma região proibida à propagação da luz (o *Band Gap*) onde a reflectância é máxima e a transmissão é mínima como pode ser visto na figura 4.2, onde (a) é o CF com a camada de $Al_xGa_{1-x}As$ com 20% de Al e (b) com 30%. A região de máxima reflectância ocorre para um dado comprimento de onda onde as ondas refletidas nas camadas se interferem construtivamente. O comprimento de onda onde há ressonância no CF estudado é λo = 800 nm.

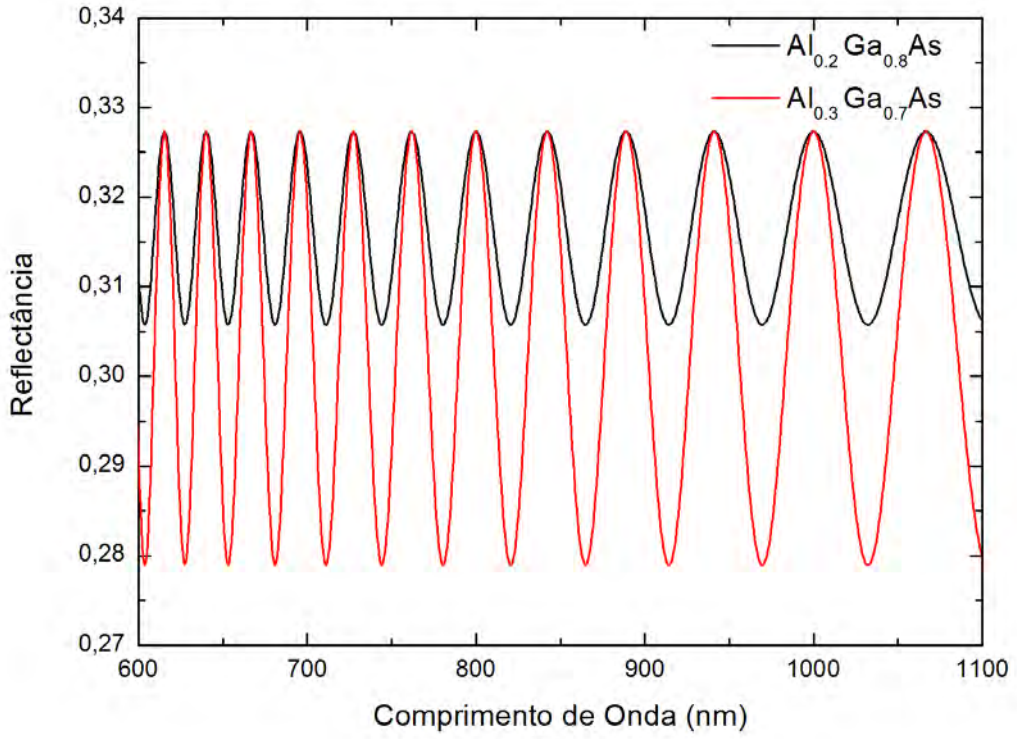

Figura 4.1: Reflectância simulada para dois filmes sem periodicidade. Em vermelho tem-se a reflectância para o $Al_{0.2}Ga_{0.8}As$ e em preto para o $Al_{0.3}Ga_{0.7}As$.

Como é possível ver na figura 4.2, a eficiência dos espelhos está diretamente ligada ao valor da reflectância, então quanto maior o espelho, mais eficiente ele é. Fica claro então que para 5 e 10 pares os espelhos não apresentam reflectância máxima (100%) e por este motivo não são tão eficientes quanto o espelho com 20 pares.

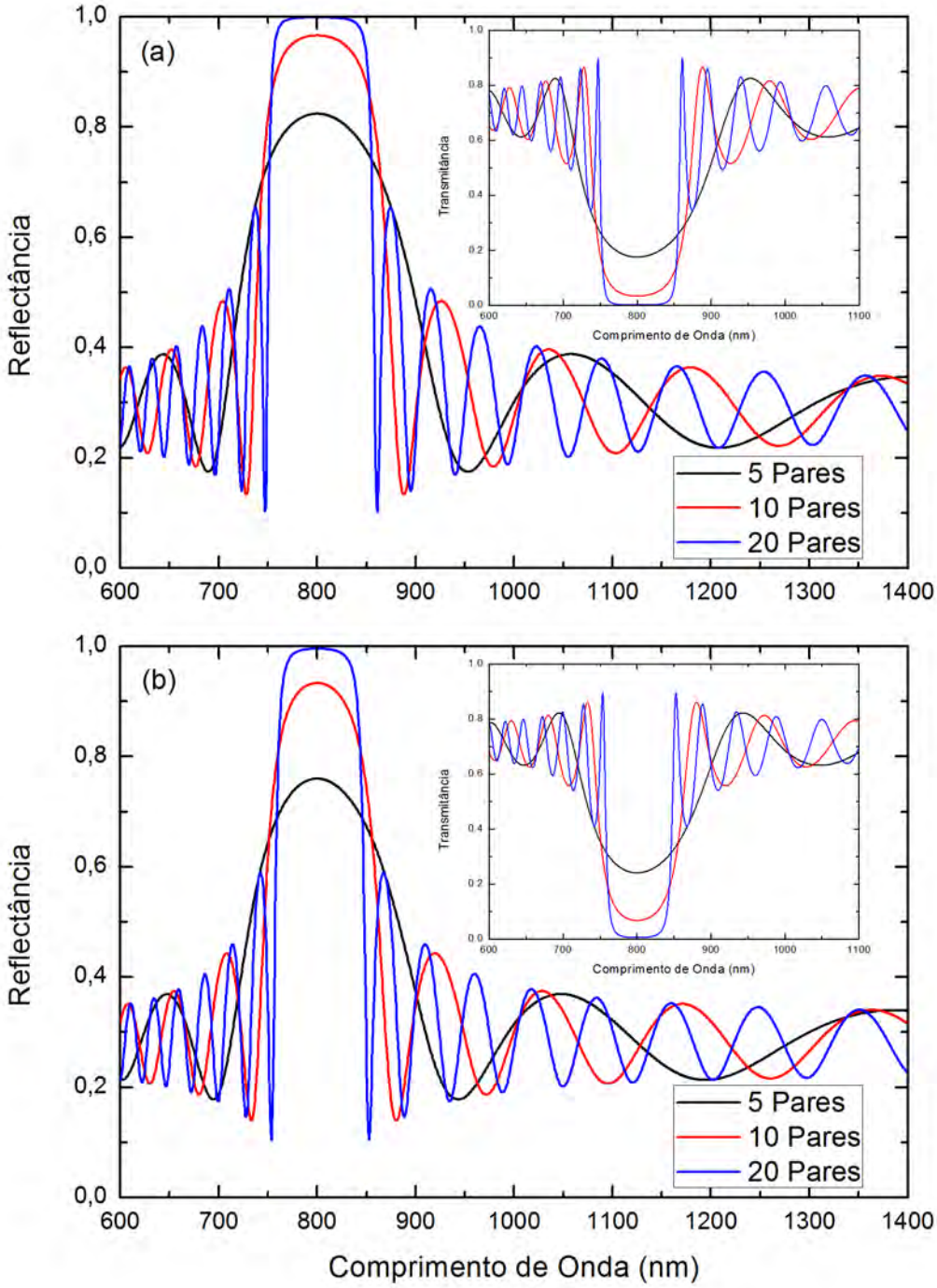

Figura 4.2: Reflectância simulada para um filme com 5, 10 e 20 pares de repetição, com índices de refração (a) $n_1 = 3.01$ (camadas de $AlAs$) e $n_2 = 3.57$ (camadas de $Al_{0.2}Ga_{0.8}As$) e (b) $n_1 = 3.01$ (camadas de $AlAs$) e $n_2 = 3.45$ (camadas de $Al_{0.3}Ga_{0.7}As$). O comprimento de onda da ressonância é λo = 800 nm. Os gráficos inseridos mostram a transmitância para as mesmas estruturas.

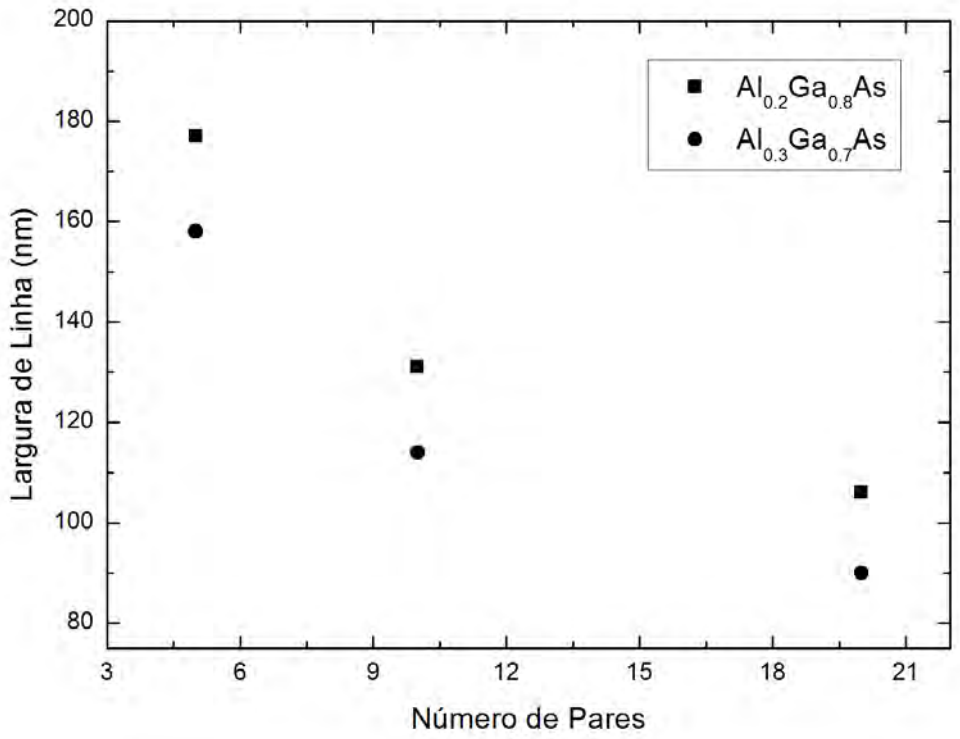

Figura 4.3: Largura de linha da banda proibida em função do número de pares periódicos.

De acordo com a figura 4.3 quanto maior o tamanho dos espelhos, ou seja, quanto maior o número de pares, menor será a largura de linha da banda proibída. É importante ressaltar que a variação de índices de refração que ocorre de uma estrutura para a outra também influencia na largura da banda proibida: quanto maior a diferença de índice de refração, maior a largura da banda (neste caso a diferença é $\Delta n = 0.56$ para o cristal de $AlAs$ e $Al_{0.3}Ga_{0.7}As$ com 20% de Al e $\Delta n = 0.44$ para o cristal com 30% de Al). A largura de linha aqui é definida como a largura da banda proibida a meia altura.

Com o intuito de entender melhor como se comporta as bandas de reflexão realizou-se um estudo sobre as estruturas de bandas, mostrado abaixo, onde nota-se que a zona proibida sempre ocorre para o valor de KΛ (Λ é o período de repetição d1+d2) igual a π (1ª Zona de Brillouin) conforme a equação (3.62). Para simular estas curvas utilizou-se a expressão (3.61).

Nos dois casos a estrutura de bandas dos CF foi comparada com a reflectância simulada em relação à frequência angular. É possível ver na figura 4.4 que os picos onde a reflectância é máxima aparecem justamente na posição dos *Band Gaps*. Nenhum efeito de dispersão foi incluído nestes cálculos.

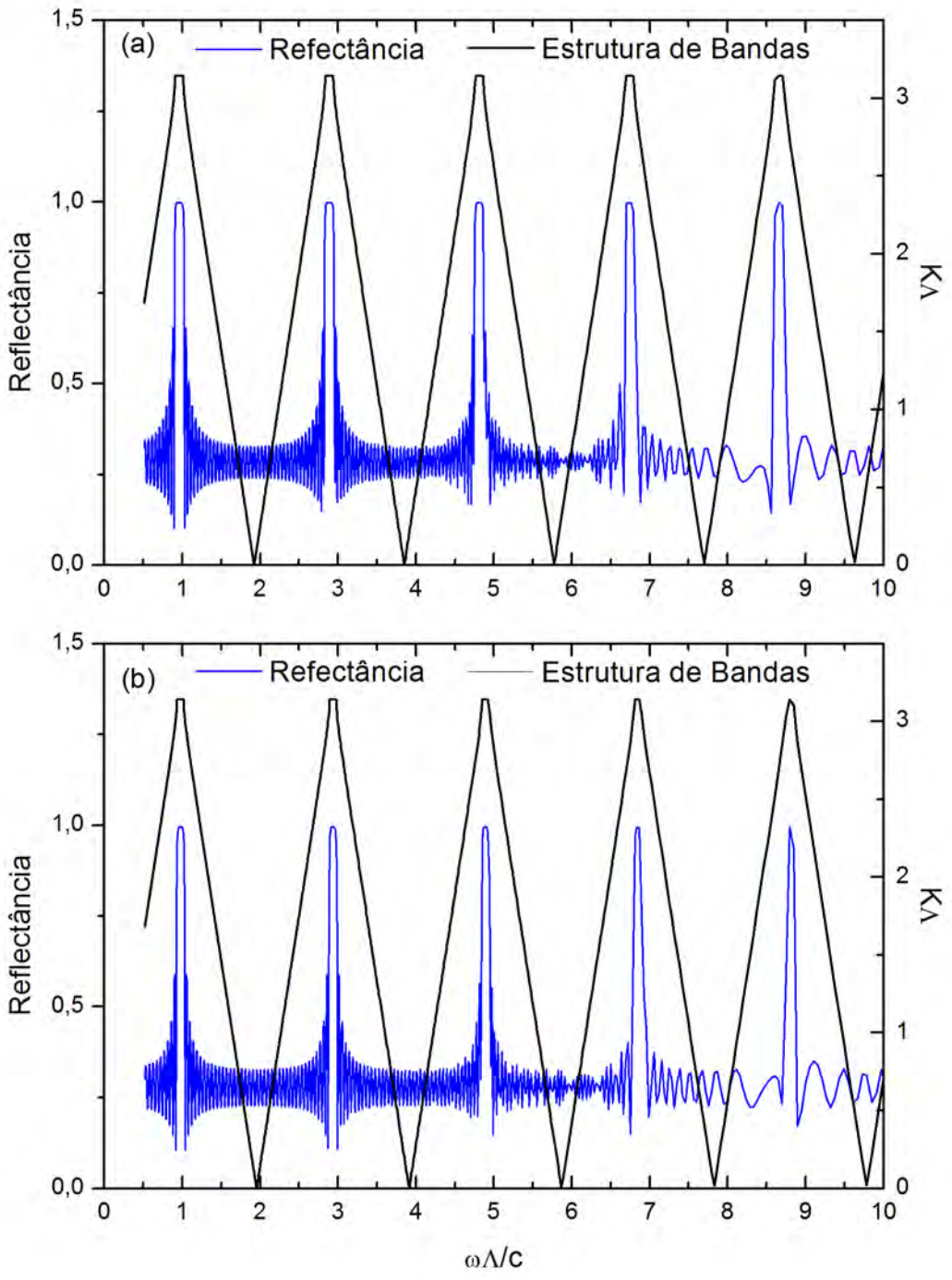

Figura 4.4: Estrutura de bandas para o CF construido com 20 pares alternados de (a) $AlAs$ e $Al_{0.2}Ga_{0.8}As$ e de (b) $AlAs$ e $Al_{0.3}Ga_{0.7}As$.

4.2 Dispersão

Os resultados até este ponto foram simulados utilizando, como índices de refração fixos, seus respectivos valores no centro da banda proibida. No entando, os efeitos de dispersão, ou seja, a variação destes índices com o comprimento de onda incidente, em muitos casos não podem ser neglicenciados. Para obter as curvas de dispersão de cada camada foram utilizados os dados experimentais que constam nas referências [29, 30] que foram interpolados com o auxílio das fórmulas de dispersão citadas em [31]. Escolheu-se especificamente a equação da forma $n^2 = A + \frac{B\lambda^2}{\lambda^2 - C} + \frac{D\lambda^2}{\lambda^2 - E}$ (chamada de Sellmeier 2 na referência [31]). Esta equação foi escolhida pois a curva reproduzida por ela se aproximou bastante dos dados experimentais na faixa de comprimentos de onda que ela foi utilizada, como é possível ver na figura 4.5.

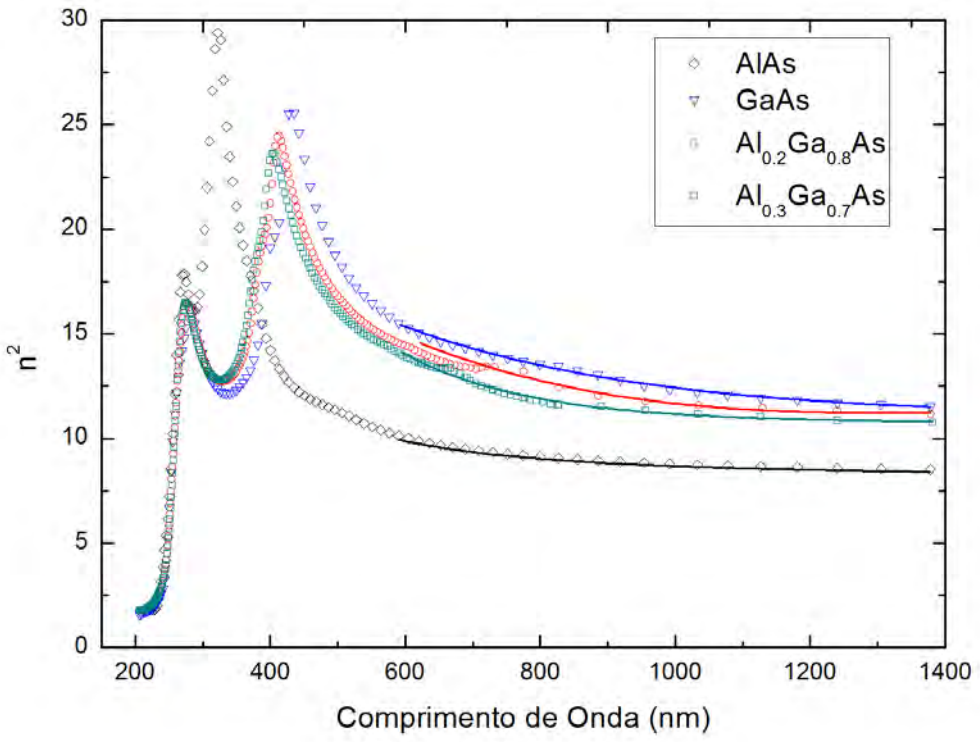

Figura 4.5: Leis de dispersão para $GaAs$, $Al_{0.2}Ga_{0.8}As$, $Al_{0.3}Ga_{0.7}As$ e $AlAs$. Os simbolos representam os dados experimentais e as linhas a interpolação.

As mesmas condições anteriores foram reproduzidas, entretanto a partir das curvas de dispersão pode-se obter novos resultados. A dispersão para o substrato foi negligenciada, pois apenas influencia no comportamento das regiões externas à zona de máxima reflexão e nada interfere na banda proibída.

Vale lembrar que a interpolação feita na figura 4.5 leva em conta apenas os índices de refração para comprimentos de onda acima de 600 nm, pois abaixo disto há um pico nas curvas de dispersão dos materiais utilizados indicando alta absorção. Sendo assim a equação citada não vale nesta região.

Nas figuras 4.6 e 4.7 se observa que quando são levados em conta os efeitos de dispersão, a largura da banda proibida diminui. Sem dispersão as larguras eram, para 5, 10 e 20 pares: 177, 131 e 106 nm para os filmes com camadas de $Al_{0.2}Ga_{0.8}As$ e 159, 114 e 90 nm para os filmes com camadas de $Al_{0.3}Ga_{0.7}As$, respectivamente. Os valores incluindo a dispersão são, para 5, 10 e 20 pares de repetição, nesta ordem: 140, 102 e 83 nm para os filmes com camadas de $Al_{0.2}Ga_{0.8}As$ e 131, 93 e 75 nm para os filmes com camadas de $Al_{0.3}Ga_{0.7}As$, respectivamente. Contudo, ainda vale que quanto maior a diferença de índice de refração, maior a largura da banda e quanto maior o tamanho dos espelhos, ou seja, quanto maior o número de pares, menor é a banda proibída e maior é a reflectância, e desta forma mais efetivo é o espelho. Se o número de pares continuasse aumentando a largura de linha cada vez mais se estreitaria.

A estrutura de bandas apresentada na figura 4.8 não mais apresenta concordância de todos os picos de refração com os *Band Gaps*. Isto é devido ao fato de que antes os índices de refração eram constantes, mas agora abaixo dos 600 nm a fórmula de dispersão usada para interpolar as curvas não representa o índice de refração real dos materiais, sendo assim apenas a primeira banda pode ser entendida como correta (lembrando que $\omega = \frac{2\pi c}{\lambda}$).

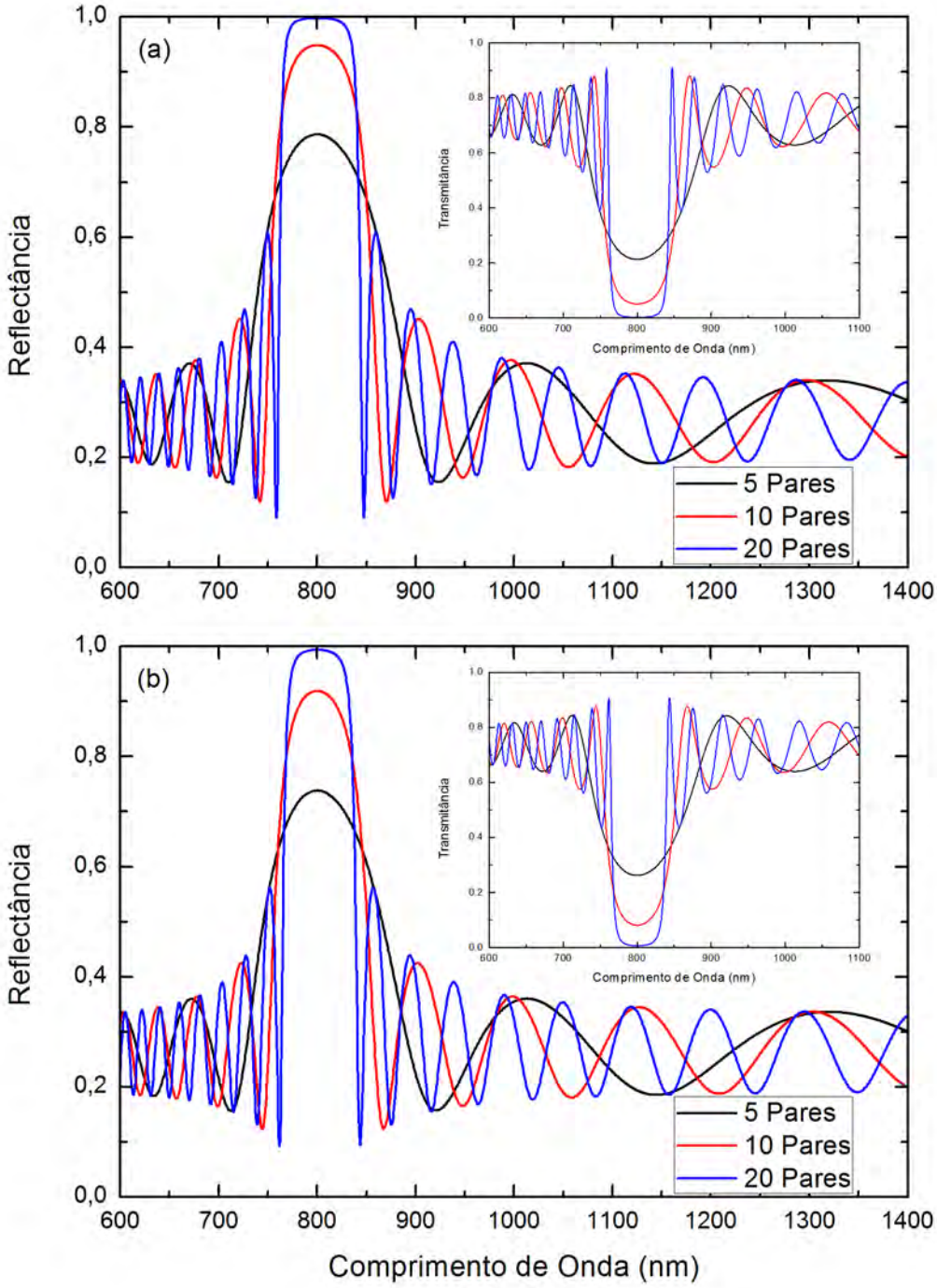

Figura 4.6: Reflectância simulada com dispersão para um filme com 5, 10 e 20 pares de repetição de (a) $AlAs$ e $Al_{0.2}Ga_{0.8}As$; (b) $AlAs$ e $Al_{0.3}Ga_{0.7}As$. As espessuras das camadas foram definidas com relação aos índices de refração em λo = 800 nm.

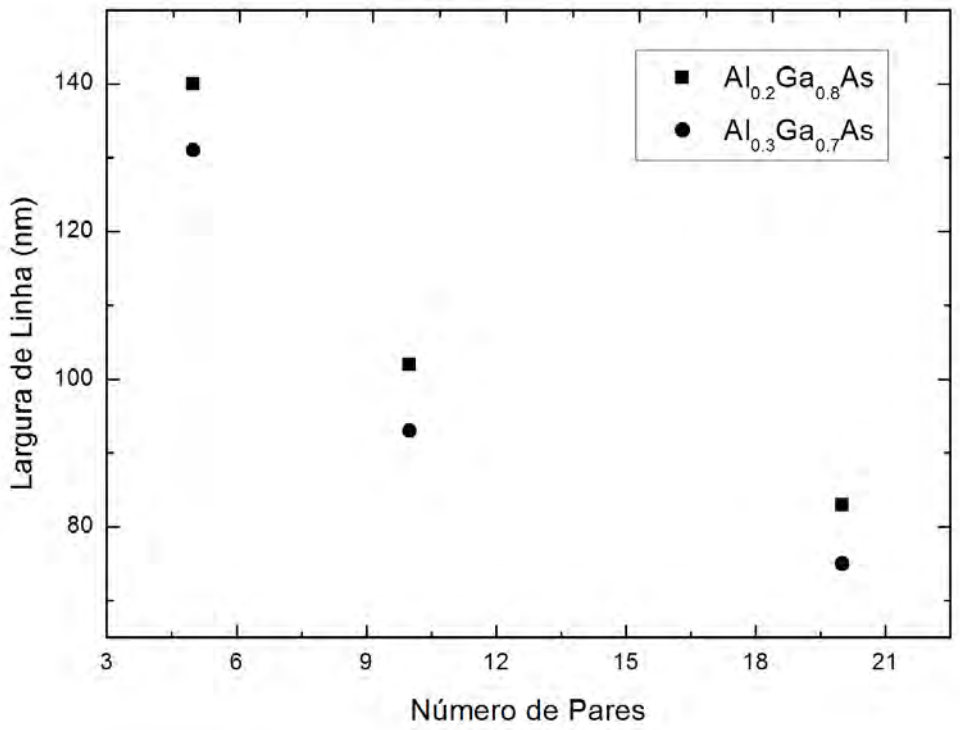

Figura 4.7: Largura de linha da banda proibida em função do número de pares periódicos incluidos os efeitos de dispersão.

Realizou-se tambem a simulação das amplitudes quadradas dos campos elétricos (para o comprimento de onda λ = 800 nm) conforme a onda penetra nos CF. Na figura 4.9 fica claro que os campos continuam com uma forma de onda dentro dos filmes, entretanto esta onda decai rapidamente conforme caminha pelas camadas sendo praticamente zero pouco depois da metade do percurso. No caso do CF com camadas de $AlAs$ e $Al_{0.2}Ga_{0.8}As$ o campo cai a valores próximos de zero perto da 25ª camada, enquanto que para o CF com camadas de $AlAs$ e $Al_{0.3}Ga_{0.7}As$, o campo é praticamente desprezível a partir da 30ª camada. Isto ocorre devido à alta reflectância neste comprimento de onda, onde para o espelho com 20 pares de repetição foi mostrado que a reflectância é máxima neste caso, portanto as ondas são totalmente refletidas pelo espelho.

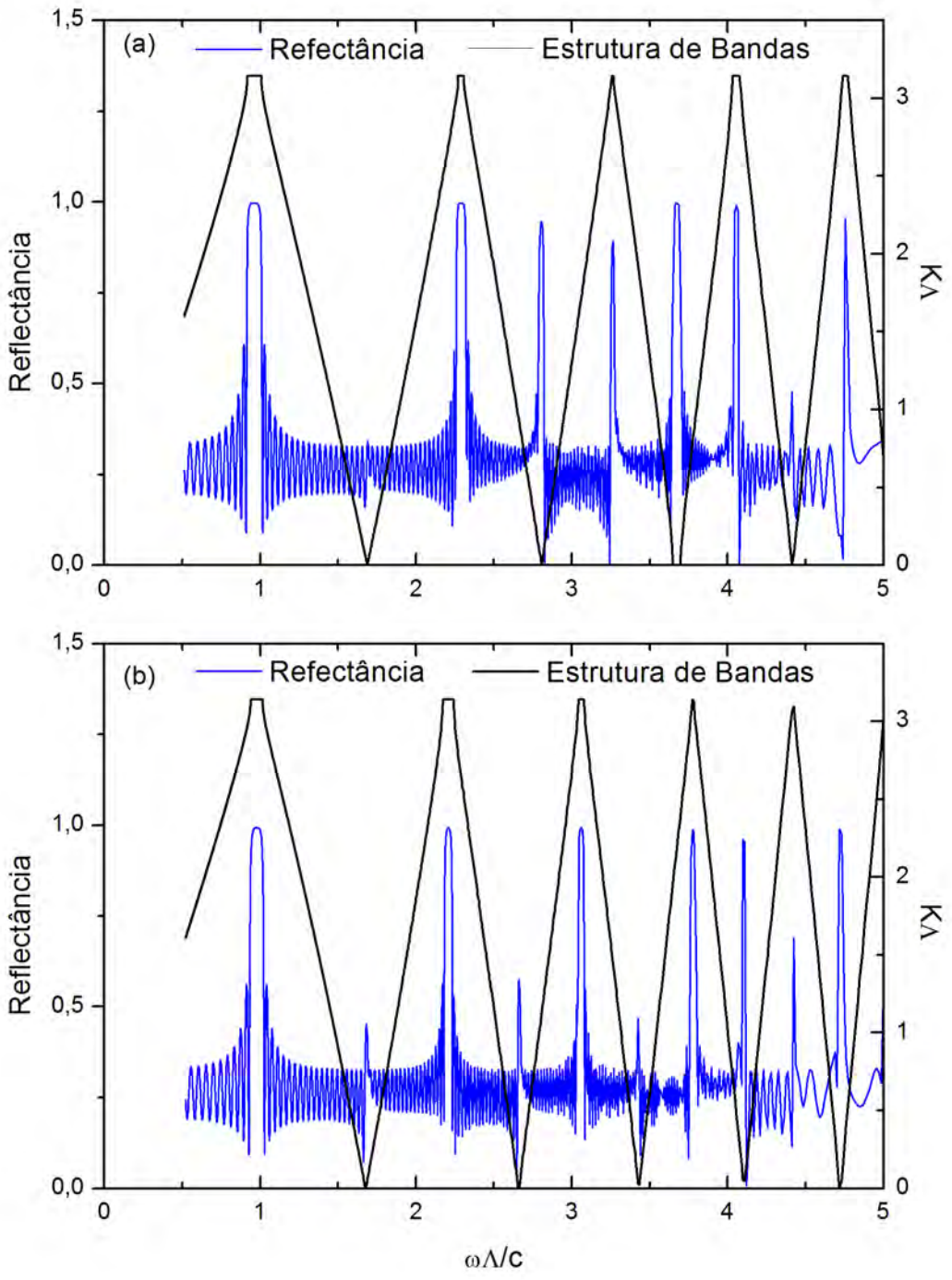

Figura 4.8: Estrutura de bandas, simulada com dispersão, para o CF construido com 20 pares alternados de (a) $AlAs$ e $Al_{0.2}Ga_{0.8}As$ e de (b) $AlAs$ e $Al_{0.3}Ga_{0.7}As$.

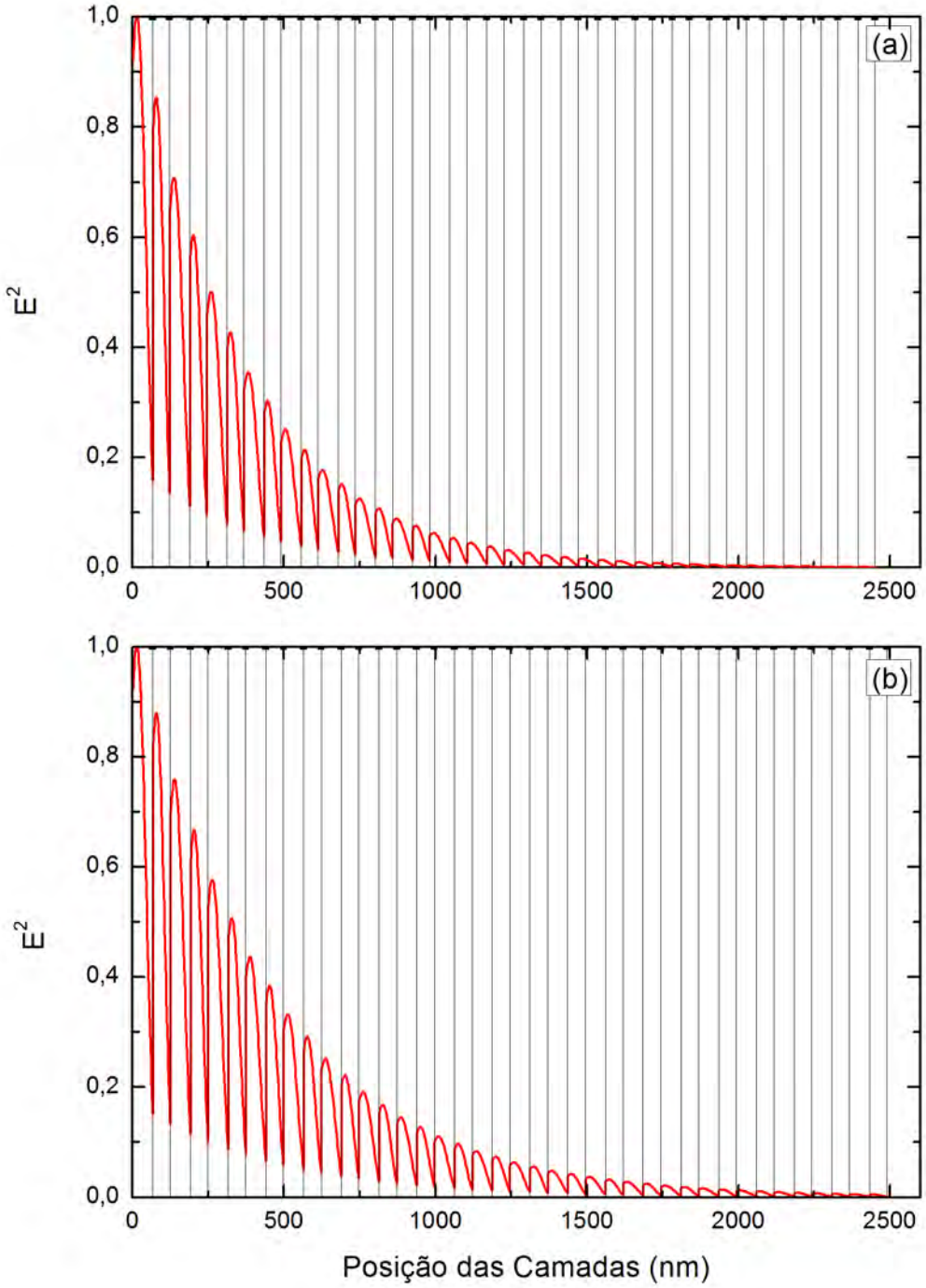

Figura 4.9: Amplitude quadrada normalizada do campo elétrico simulada para um CF com 20 pares de repetição de (a) $AlAs$ e $Al_{0.2}Ga_{0.8}As$ e de (b) $AlAs$ e $Al_{0.3}Ga_{0.7}As$. As linhas pretas refresentam as posições das interfaces entre os dois materiais.

Capítulo 5

Simulação de Cristais Fotônicos Com Defeito

5.1 Microcavidades

No capítulo anterior foi descrito o *Band Gap* que aparece quando uma multicamada peculiar é construida obedecendo uma periodicidade com as espessuras determinadas pela condição do quarto de onda. Neste capítulo são estudados os efeitos sobre esta mesma estrutura quando introduzido um defeito específico em uma das camadas, quebrando assim sua periodicidade. Estes defeitos são chamados de cavidades ressonantes.

A inclusão de um defeito no CF faz surgir um pico de transmissão bem no centro da banda onde a reflectância é máxima. Este pico está associado ao confinamento dos fótons dentro da cavidade. A cavidade então compõe uma região espaçadora entre dois espelhos de alta refletividade. O defeito deve ser feito de um material, ou de espessura, diferente dos que constituem o CF, podendo ser apenas uma camada de ar. De forma a aumentar o confinamento das ondas eletromagnéticas nesta cavidade, o produto da espessura pelo índice de refação deve ser um múltiplo inteiro de um quarto do comprimento de onda, $d = m\frac{\lambda_o}{4n(\vec{r})}$, ou melhor, a espessura deve ser a mesma de um dos modos de ressonância do comprimento de onda que se deseja a alta reflectância dos espelhos.

A figura 5.1 mostra Cristais Fotônicos contituídos de 5, 10 e 20 pares de repetição de $AlAs$ e $Al_{0.2}Ga_{0.8}As$. O defeito citado acima é a troca de uma camada de $AlAs$ por outra de $Al_{0.3}Ga_{0.7}As$ ou de Ar, neste caso são trocadas as 5ª, 11ª e 21ª camadas, respectivamente. A espessura utilizada para o defeito foi de $d = \frac{\lambda_o}{2n(\vec{r})}$, onde o comprimento de onda central da ressonância é λo = 800 nm.

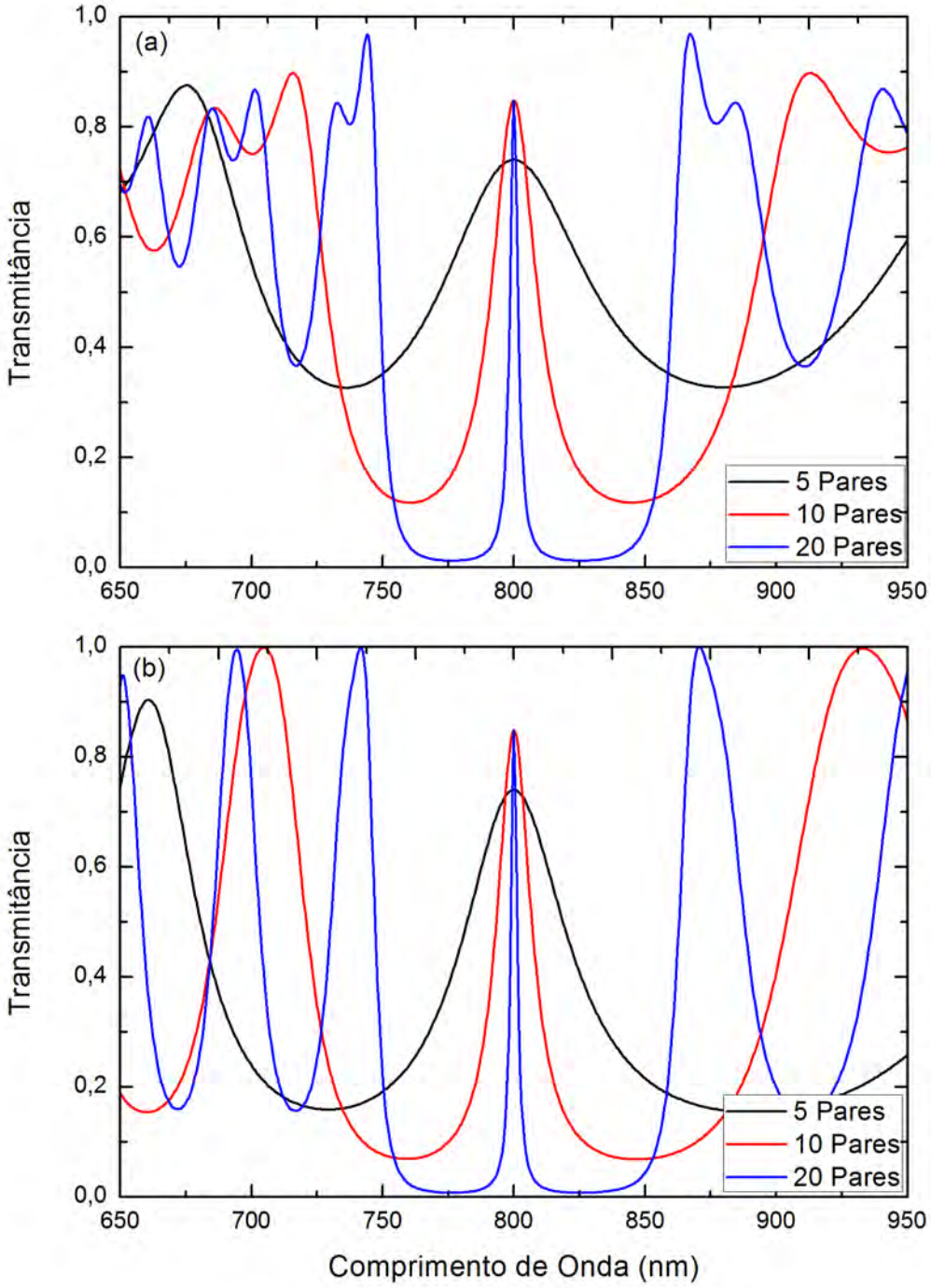

Figura 5.1: Transmitância simulada para um filme com 5, 10 e 20 pares de repetição com a inclusão de um defeito do tipo (a) $Al_{0.3}Ga_{0.7}As$ e (b) Ar. O comprimento de onda da ressonância é λo = 800 nm.

Como se pode observar na figura 5.1, o defeito, além de proporcionar efeitos de confinamento, também pode ser utilizado para selecionar comprimentos de onda. Como surge um pico de transmissão bem no centro da banda proibída, o CF deixa apenas serem transmitidos os comprimentos de onda na faixa deste, enquanto as ondas com outros comprimentos de onda dentro da banda são refletidas. Desta maneira, quanto mais fino for o pico, mais precisa será a seleção (este efeito é chamado de *finesse*). Isto determina sua qualidade.

A figura 5.2 descreve bem como o aumento de qualidade do pico de transmissão conforme o acréscimo no número de pares de repetição, e consequentemente no tamanho dos espelhos. Ocorre que aumentando o tamanho dos espelhos, o confinamento dentro do defeito se torna mais eficiente. A diferença de índices de refração também contribui para este fator: a largura de linha claramente diminui quando a camada espaçadora é feita de ar, ou seja, quanto maior a diferença de índice de refração do defeito para as camadas, maior será a qualidade o pico de transmissão.

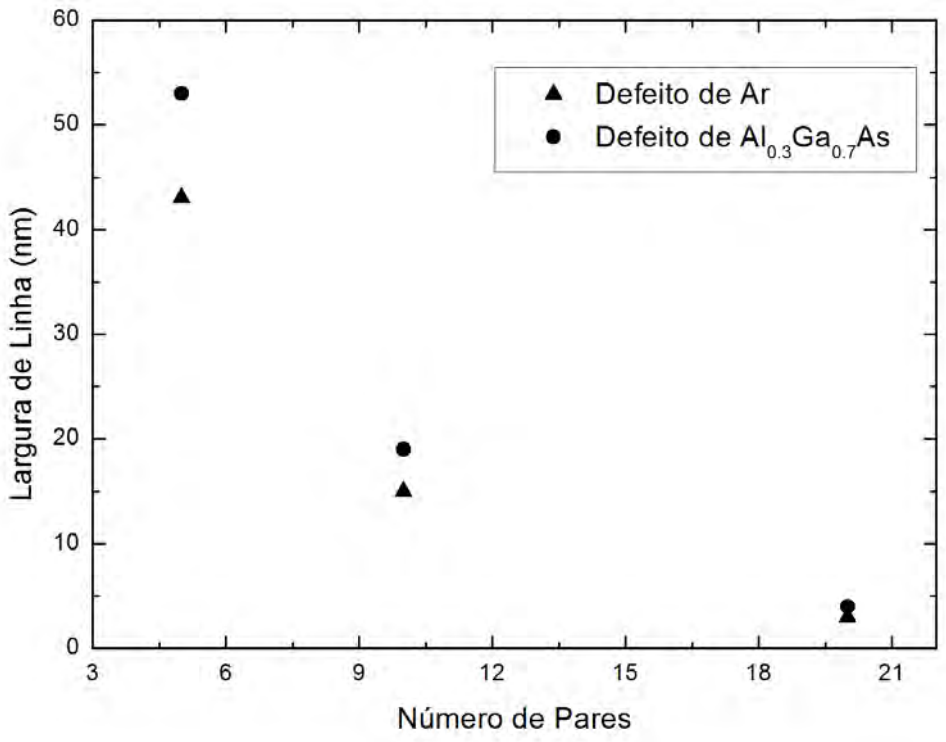

Figura 5.2: Largura de linha do pico de transmissão em função do número de pares periódicos para o defeito como $Al_{0.3}Ga_{0.7}As$ e Ar.

A figura 5.3 mostra a reflectância do CF constituido de dois espelhos de Bragg de $AlAs$ e $Al_{0.2}Ga_{0.8}As$, com 22 e 26 pares, separados por um espaçador de $Al_{0.3}Ga_{0.7}As$, em comparação com o dado experimental [4]. A simulação utilizou os mesmos parâmetros dos dados experimentais, sendo que o comprimento de onda da ressonância é 804.5 nm. Como pode se observar ocorre um pico inverso no centro da banda proibída cuja posição concorda com o dado experimental. Este pico representa o confinamento das ondas eletromagnéticas para este comprimento de onda, que na simulação tem uma largura de linha muito pequena, enquanto que no dado experimental é um pouco maior. De acordo com a referência isto é devido as perdas que ocorrem na cavidade e que não sao incluídas no cálculo computacional. Além disto o tamanho da banda proibida na simulação se aproxima do valor experimental.

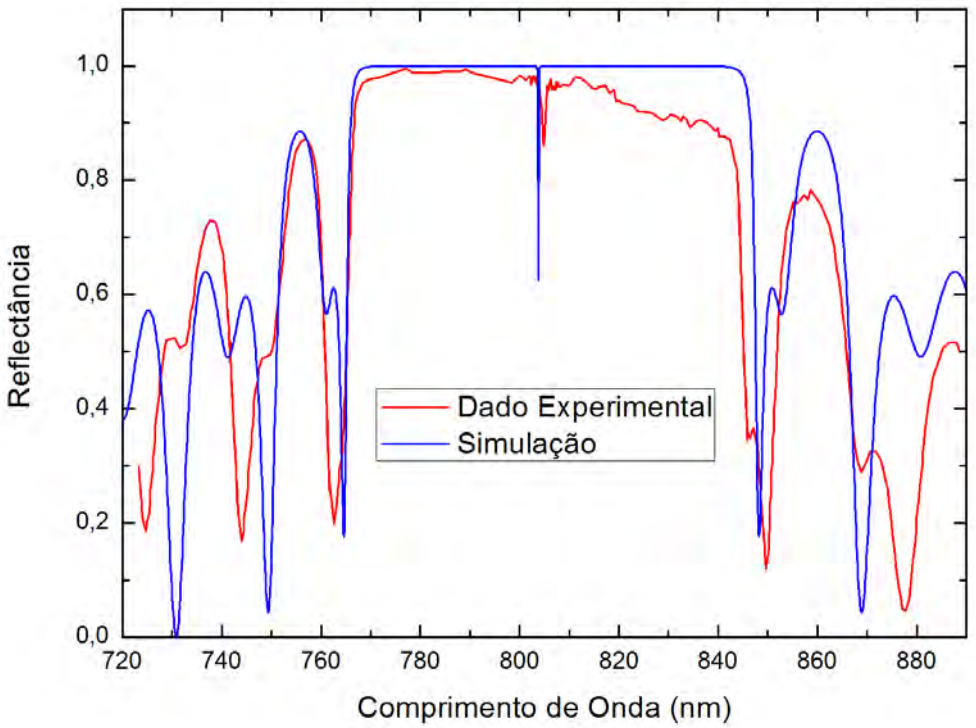

Figura 5.3: Em vermelho a curva de reflectância experimental para um CF de $AlAs$ e $Al_{0.2}Ga_{0.8}As$ retirada de [4]. Em azul a reflectância calculada teoricamente. O comprimento de onda da ressonância é λo = 804.5 nm. O espelho inferior possui 26 pares e o superior 22 pares.

Outro ponto interessante está no efeito que a variação do ângulo de incidência provoca na banda de reflexão e no pico de transmissão. O gráfico 5.4 mostra como fica a transmitância para o CF discutido até aqui com diferentes ângulos de incidência. Fica claro que o efeito ocasionado pelo ângulo é deslocar tanto o pico quando a banda proibida para a esquerda. Além disto a intensidade da onda transmitida diminui para ângulos maiores, indicando que os dois espelhos ficam cada vez mais refletivos, ate que em 89º a transmitância é praticamente zero para toda a região de comprimentos

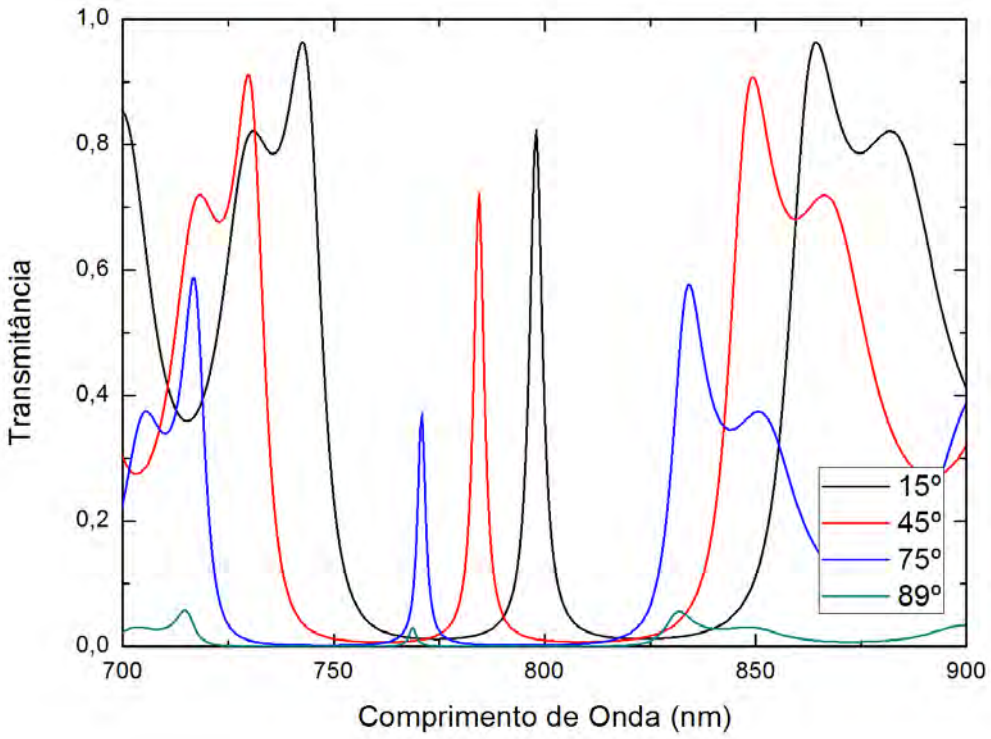

Figura 5.4: Transmitância simulada para um filme com 20 pares de repetição com a inclusão de um defeito de $Al_{0.3}Ga_{0.7}As$ e com a variação do ângulo de incidência. O comprimento de onda da ressonância é λo = 800 nm.

A simulação em 5.5 mostra as amplitudes quadradas dos campos elétricos (para o comprimento de onda λ = 800 nm) conforme a onda penetra nos CF. Como no capítulo anterior, os campos continuam com uma forma de onda dentro dos filmes, entretanto a amplitude da onda decai conforme esta caminha pelas camadas. Contudo, há um resultado novo neste estudo: os campos são confinados dentro do defeito e isto pode ser observado pela forma da onda neste ponto, que devido à escolha da espessura desta camada representa o segundo modo normal de ressonância $d = \frac{\lambda_o}{2n(\vec{r})}$. Este efeito de confinamento contribui para a amplificação das ondas eletromagnéticas dentro da cavidade.

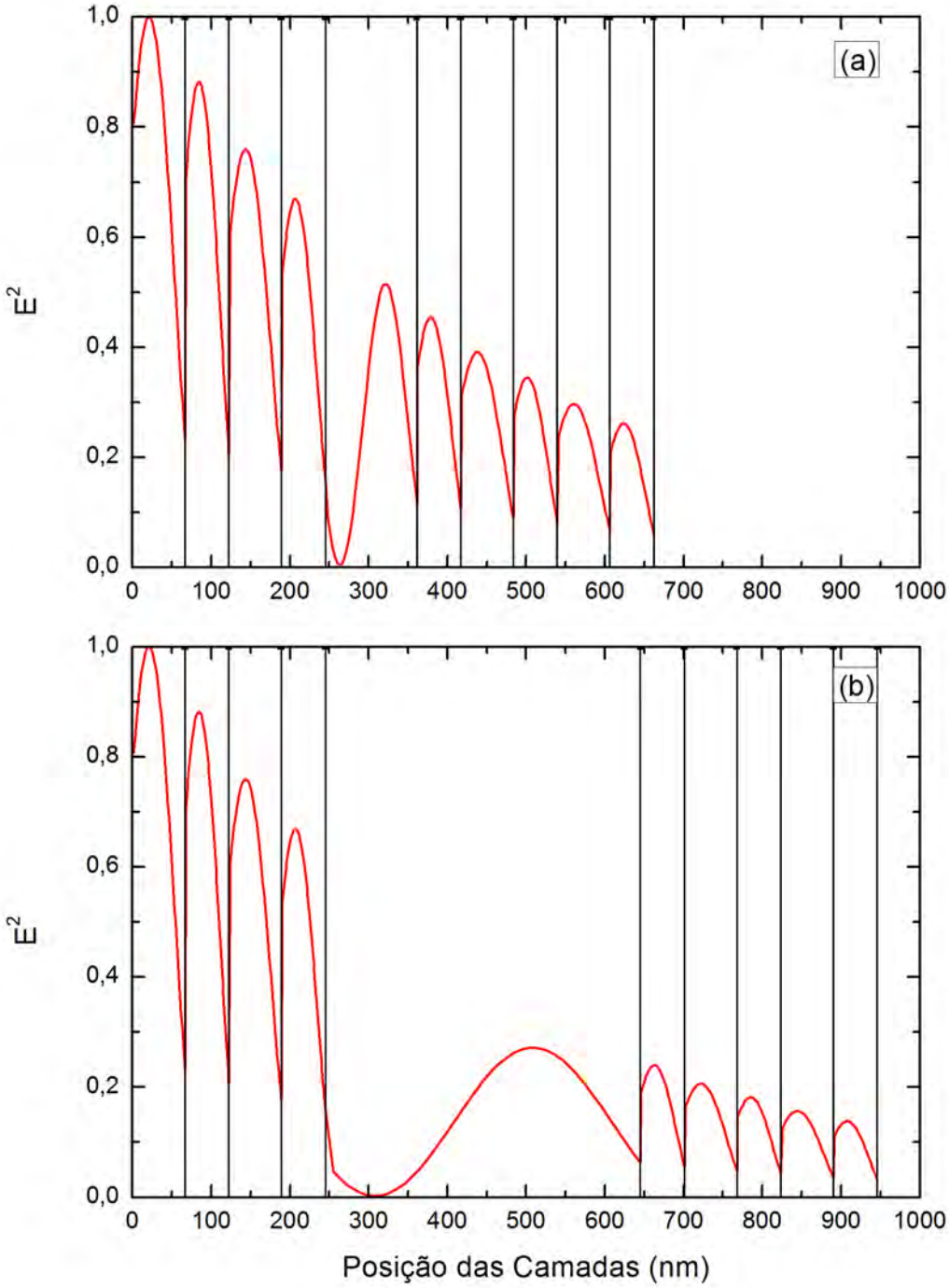

Figura 5.5: Amplitude quadrada normalizada do campo elétrico simulada para um CF com 5 pares de repetição com a inclusão de um defeito do tipo (a) $Al_{0.3}Ga_{0.7}As$ e (b) Ar na 5ª camada. O comprimento de onda da ressonância é λo = 800 nm. As linhas pretas representam as posições das interfaces entre as camadas.

5.2 Inclusão de Dois Defeitos

Neste topico é mostrado o que acontece quando ao invés de um, dois efeitos são incluídos no CF. A primeira suposição antes mesmo de fazer os cálculos é que devem aparecer agora dois picos de transmissão na banda proibída, e esta suposição se confirma. O interessante é então ver como se comportam estes dois picos e se eles podem estar correlacionados de alguma maneira. A análise feita aqui, entretanto, é bastante superficial e esta monografia já se estendeu mais do que o previsto, logo a discussão com mais detalhes fica para próximos trabalhos.

Atendo-se ao que foi feito, a figura 5.6 mostra um CF simulado com dois defeitos, sendo o primeiro uma camada de ar e o segundo uma camada de $Al_{0.3}Ga_{0.7}As$. Vê-se que o acoplamento entre os dois picos de transmimissão está diretamente relacionado com a distância entre eles, chegando a um ponto extremo onde eles se sobrepõe formando apenas um pico. Isto ocorre pois, como visto no capítulo anterior, os campos elétricos se tornam praticamente zero perto da 30ª camada, logo a onda é refletida antes de chegar ao segundo defeito. Futuramente pretende-se estudar com detalhes estes acoplamentos e a probabilidade de um fóton iniciamente confinado em uma das

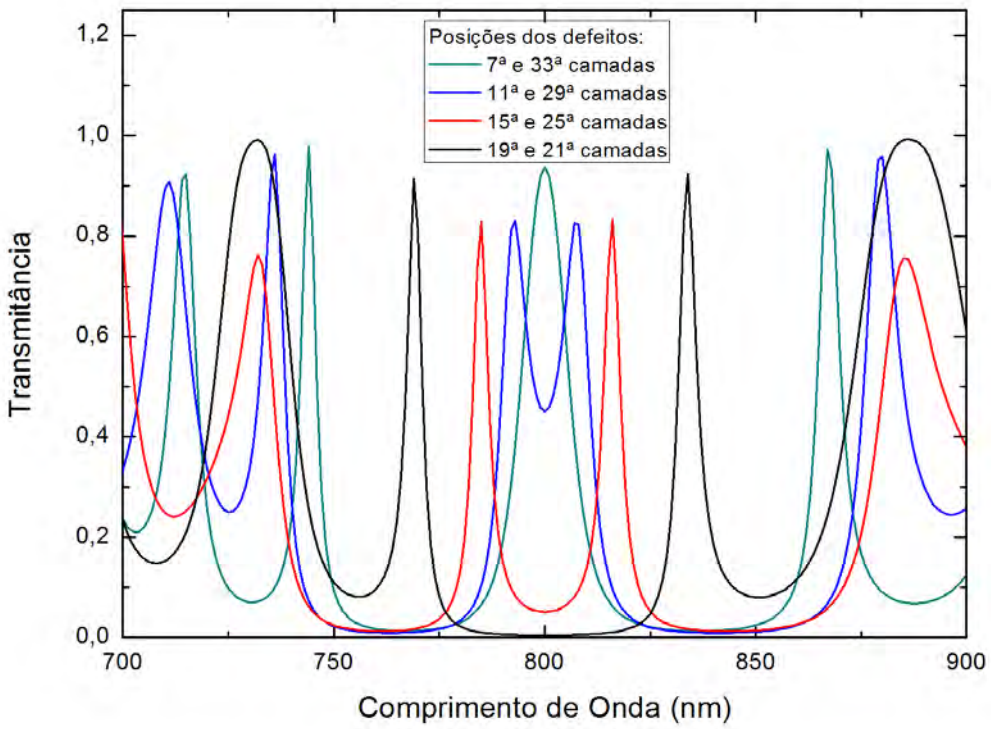

Figura 5.6: Transmitância simulada para um CF do tipo com 20 pares de repetição de $AlAs$ e $Al_{0.2}Ga_{0.8}As$. O comprimento de onda da ressonância é de λo = 800 nm e os defeito incluidos são uma camada de ar e uma de $Al_{0.3}Ga_{0.7}As$, sendo suas posições especificadas acima.

Capítulo 6

Conclusões e Perspectivas

Nesta monografia foi descrita uma metodologia teórica para o estudo de Cristais Fotônicos unidimensionais constituídos de espelhos de Bragg do tipo quarto de onda. O método conhecido como da Matriz de Transferência forneceu os dados necessários para estudar o comportamento destes cristais por meio da propagação de ondas eletromagnéticas.

Os resultados obtidos foram as Reflectâncias e Transmitâncias, bem como a análise da estrutura de bandas e do comportamento dos campos dentro dos CF. Ficou bem entendido que este tipo de estrutura tem propriedades de um espelho de alta reflectância para a região de comprimentos de onda próxima do visível, que é justamente onde há uma banda proibida à propagação da luz. Os gráficos das amplitudes dos campos elétricos mostraram que estes campos tem um comportamento oscilatório e ao mesmo tempo decrescente dentro dos CF.

Outro estudo interessante foi sobre os efeitos da inclusão de um defeito para quebrar a periodicidade dos CF. As consequências disto foram o aparecimento de um pico de transmissão no centro da banda proibida. Realizou-se uma análise qualitativa sobre o fator de qualidade destes picos. Também foi feita uma comparação com um dado experimental para comprovar a validade das simulações computacionais. Por último foi observado o confinamento dos campos elétricos dentro do defeito como um dos modos de ressonância do comprimento de onda central do *Band Gap*.

Para trabalhos futuros pretende-se continuar com estes estudos. Um dos pontos de interesse é estudar a propagação das ondas eletromagnéticas em meios anisotrópicos utilizando as Matrizes de Transferência, cuja metodologia é discutida no apêndice C. Contudo, o principal tópico de interesse é a investigação dos acoplamentos entre os dois picos de transmissão quando são introduzidos dois defeitos aos CF.

A fotônica é uma área de destaque das ciências no momento, as perspectivas nesta área são muitas e espera-se que deem banteante frutos em um futuro próximo pois ainda há muito o que desenvolver no estudo dos Cristais Fotônicos.

Referências Bibliográficas

[1] GAPONENKO, S. V. **Introduction to Nanophotonics.** Nova Iorque: Cambridge University Press, 2010.

[2] JOANNOPOULOS, J. D.; JOHNSON, S. G.; WINN, J. N.; MEADE, R. D. **Photonic Crystals:** Molding the Flow of Light. 2.ed. Princeton: Princeton University Press, 2008.

[3] ASCHCROFT, N. W.; MERMIN, N. D. **Física do Estado Sólido.** São Paulo: Cengage Learning, 2011.

[4] COTTA, E. **Estudos de Efeitos Eletrodinâmicos Numa Microcavidade Semicondutora com um Poço Quântico de GaAs.** 2004. Dissertação (Mestrado em Física) - Universidade Federal de Minas Gerais, Belo Horizonte, 2004.

[5] NASCIMENTO, V. P. **Estudo das Interfaces Nas Multicamadas NiFe/FeMn/NiFe Nanocristalinas.** 2005. Tese (Doutorado em Física) - Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas, Rio de Janeiro, 2005.

[6] JOHNSON, S. G. Photonic Crystals: Periodic Surprises in Electromagnetism. Disponível em: <http://ab-initio.mit.edu/photons/3d-crystal.html>. Acesso em: 31 de Outubro de 2012.

[7] YEH, P. **Optical Waves in Layered Media.** Nova Iorque: John Wiley and Sons, 1998.

[8] VURSIK, P.; SAMBLES, J. Photonic structures in biology. **Nature**, v. 424, p. 852-855. 2003.

[9] PARKER, A. R. 515 million years of structural color. **J. Opt. A**, v. 2, n. 6, p. 15-28. 2000.

[10] NIKOLAEV, V. A.; HARWOOD, D. M.; SAMSONOV, N. I. **Early Cretaceous Diatoms.** St-Petersburg: Nauka, 2001.

[11] VOITOVICH, A. P. Spectral properties of films. In: B. Di Bartolo and O. Forte (eds.), **Advances in Spectroscopy for Lasers and Sensing**. Dordrecht: Springer, 2006, p. 351-353.

[12] TOLMACHEV, V. A.; GRANITSYNA, L. S.; VLASOVA, E.N.; VOLCHEK, V. Z.; NASCHEKIN, A.V.; REMNYUK, A.D.; ASTROVA, E.V. One-dimensional photonic crystal fabricated by means of vertical anisotropic etching of silicon. **Semiconductors**, v. 36, p. 998-1002. 2002.

[13] MASUDA, H.; YAMADA, H.; SATOH, M.; ASOH, H. Highly ordered nanochannel-array architecture in anodic alumina. **Appl. Phys. Lett.**, v. 71, p. 2770-2772. 1997.

[14] BIRNER, A.; WEHRSPOHN,R. B.; GÖSELE, U. M.; BUSCH, K. Silicon-based photonic crystals. **Adv. Mater.**, v. 13, p. 377-382. 2001.

[15] GARCIA-SANTAMARIA, F.; MIYAZAKI, H.T.; URQUÍA, A.; IBISATE, M.; BELMONTE, M.; SHINYA, N.; MESEGUER , F.; LÓPEZ, C. Nanorobotic Manipulation of Microspheres for On-Chip Diamond Architectures. **Adv. Mater.**, v. 14, n. 16, p. 1144-1147. 2002.

[16] ALBUQUERQUE, N. M. Lincoln Log-like structure to improve infrared and optical communications, optical computers. Disponível em: <http://www.sandia.gov/media/photonic.htm>. Acesso em: 15 de Fevereiro de 2013.

[17] YARIV, A.; YEH, P. **Optical Waves in Crystals: Propagation and Control of Laser Radiation.** New York: John Wiley and Sons, 1984.

[18] ZAK, J.; MOGG, E.R.; LIU, C.; BADER, D. Magneto-optics of multilayers with arbitrary magnetization directions. **Physical Review B**, v. 43, n. 8, p. 6423-6429. 1991.

[19] PASCHOTTA, R. **Encyclopedia of Laser Physics and Technology.** Berlin: Wiley-VCH, 2008.

[20] MILLER, D. A. B. Are optical transistors the logical next step?. **Nat. Photon**, v. 4, p. 3-5. 2010.

[21] HWANG, J.; POTOTSCHNIG, M.; LETTOW, R.; ZUMOFEN, G.; RENN, A.; GÖTZINGER, S.; SANDOGHDAR, V. A single-molecule optical transistor. **Nature**, v. 460, p. 76-80. 2009.

[22] GRIFFITHS, D. J. **Introduction to Electrodynamics.** 3. ed. Nova Jersey: Prentice Hall, Inc., 1999.

[23] COHEN-TANNOUDJI, C.; DIU, B.; LALÖE, F. **Quantum Mechanics.** Nova Iorque: John Wiley and Sons, 1991. v. 1.

[24] DA SILVA, F. M. C. E. P. **Cristais Fotônicos Unidimensionais com Materiais DNG.** Dissertação (Mestrado em Engenharia Electrotécnica e de Computadores) - Instituto Superior Técnico, Universidade Técnica de Lisboa. Lisboa (2008).

[25] KITTEL, C. **Introduction to Solid State Physics.** Nova Iorque: John Wiley and Sons, 2005.

[26] WEST,B. R.; HELMY, A. S. Properties of the quarter-wave Bragg reflection waveguide: theory. **J. Opt. Soc. Am. B**, v. 23, n. 6, p. 1207-1220. 2006.

[27] YEH, P.; YARIV, A.; CHO, A. Y. **Appl. Phys. Lett.** v. 32, p. 104-105. 1978.

[28] VAN DER ZIEL, J. P.; ILEGEMS, M. **Appl. Optics** v.14, n. 11, p. 2627-2630. 1975.

[29] SADAO, A. **Properties of Aluminium Gallium Arsenide.** Data Review, No. 7. Londres: Inspec, 1993.

[30] Refractive Index Database. Disponível em: <http://refractiveindex.info/>. Acesso em: 5 de Novembro de 2012.

[31] Disponível em: <http://www.sspectra.com/focus_index.html>. Acesso em: 09 de Abril de 2013.

Apêndice A

Programa Utilizado

Neste apêndice são mostradas as linhas de comando do programa criado para simular as estruturas neste trabalho.

As linhas abaixo representam o *input* do programa. O significado de cada termo está especificado na linha.

$N1 =;$ (*Índice de refração da camada 1 no comprimento de onda do centro da banda de reflexão*)

$N2 =;$ (*Índice de refração da camada 2 no comprimento de onda do centro da banda de reflexão*)

$no =;$ (*Índice de refração do meio incidente*)

$ns =;$ (*Índice de refração do substrato*)

$Np =;$ (*Números de pares periódicos*)

$Nc =;$ (*Números de camadas*)

$\theta o = Degree;$ (*Ângulo de incidência em graus*)

$d1 =;$ (*Espessura da camada 1 em nm*)

$d2 =;$ (*Espessura da camada 2 em nm*)

$\Lambda = d1 + d2;$ (*Período de repetição*)

$\lambda i =; \quad \lambda f =;$ (*Intervalo de comprimentos de onda em nm*)

$m =; \quad a = (\lambda f - \lambda i)/m;$ (*Passo*)

$Id = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix};$ (*Matriz Identidade*)

$A = no * Sin[\theta o];$ (*Parâmetro utilizado no cálculo da lei de Snell*)

À partir deste termo as linhas são os cálculos que o programa deve efetuar.

$For[l = 0, \quad l \leq m, \quad l++,$

$\lambda_l = \lambda i + l * a;$

(*Para incluir a dispersão deve-se acrescentar estas duas linhas*)

$n1_l =$(*fórmula da dispersão para a camada 1*);

$n2_l =$ (*fórmula da dispersão para a camada 1*);

$M_l = Id;$

$For[j = 1, \quad j \geq Nc, \quad j++, \quad FullSimplify[j];$

$If[OddQ[j], \quad n_{j,l} = n1_l; \quad d_j = d1, \quad n_{j,l} = n2_l; \quad d_j = d2];$

(*Para incluir um defeito deve-se adicionar esta linha ao programa*)

$If[j =, \quad n_j =; \quad d_j = 2Pi/(4.0 * n_j * \Omega)];$

(*Lei de Snell*)

$\theta_j = ArcSin[A/n_j];$

$A = n_j * Sin[\theta_j];$

(*Vetor de onda*)

$k_{j,l} = Cos[\theta_j] * n_j * 2.0 * Pi/\lambda_l;$

$\phi_{j,l} = k_{j,l} * d_j;$

$f1_{j,l} = Exp[i\phi_{j,l}];$

$f2_{j,l} = Exp[-i\phi_{j,l}];$

(*Matriz de Propagação*)

$P_{j,l} = \begin{pmatrix} f1_{j,l} & 0 \\ 0 & f2_{j,l} \end{pmatrix};$

(*Matriz Dinâmica nas camadas*)

$\delta_j = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ n_j * Cos[\theta_j] & -n_j * Cos[\theta_j] \end{pmatrix}$; (*Ondas s*)

$\delta_j = \begin{pmatrix} Cos[\theta_j] & Cos[\theta_j] \\ n_j & -n_j \end{pmatrix}$; (*Ondas p*)

(*Termo de iteração para a lei de Snell*)

$\Theta = \theta_j; \quad \eta = n_j; \qquad]]$

(*Ângulo de refração em radianos*)

$\theta s = ArcSin[\eta * Sin[\Theta]/ns];$

(*Matriz Dinâmica incidente*)

$\delta_j = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ no * Cos[\theta o] & -no * Cos[\theta o] \end{pmatrix}$; (*Ondas s*)

$\delta_j = \begin{pmatrix} Cos[\theta o] & Cos[\theta o] \\ no & -no \end{pmatrix}$; (*Ondas p*)

(*Matriz Dinâmica do substrato*)

$\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ ns * Cos[\theta s] & -ns * Cos[\theta s] \end{pmatrix}$; (*Ondas s*)

$\delta_j = \begin{pmatrix} Cos[\theta s] & Cos[\theta s] \\ ns & -ns \end{pmatrix}$; (*Ondas p*)

$For[l = 0, \quad l \geq m, \quad l++,$

$For[j = 1, \quad j \geq Nc, \quad j++,$

$\Delta o = Inverse[\delta o];$

$\Delta s = Inverse[\delta s];$

$\Delta_j = Inverse[\delta_j],$

$X_{l,j} = \delta_j \cdot P_{l,j} \cdot \Delta_j;$

$M_l = X_{l,j} \cdot M_l;$

(*Matriz de Transferência*)

$M_l = \Delta o \cdot M_l \cdot \delta s;$

(*Estrutura de Bandas*)

$K_l = Re[ArcCos[Cos[\phi_{1,l}] * Cos[\phi_{2,l}] - Sen[\phi_{1,l}] * Sen[\phi_{2,l}] * ((n2/n1) + (n1/n2))/2]];$

$\omega_l = \Lambda * 2.0 * Pi/\lambda_l;$

$K_l = ArcCos[-((n2/n1) + (n1/n2))/2];$

$\lambda o = \lambda_l;$

(*Amplitude Inicial do Campo Elétrico*)

$J_l = (Mt_l)^{(-1/Np)};$

$ao = J_l[[1, 2]];$

$bo = Exp[i * K_l] - J_l[[1, 1]]; \qquad]; \qquad]]$

$For[l = 0, l <= m, l++,$

(*Coeficiente de transmissão*)

$t_l = 1/(Abs[Mt_l[[1, 1]]]);$

(*Coeficiente de reflexão*)

$r_l = (Abs[Mt_l[[2, 1]]])/(Abs[Mt_l[[1, 1]]]);$

(*Transmitância*)

$T_l = [t_l]^2 * ((Cos[\theta s] * ns)/(Cos[\theta o] * no));$

(*Reflectância*)

$R_l = r_l^2;$

$table = Table[\{\lambda_l, T_l\}, \{l, m\}];$

$table2 = Table[\{\lambda_l, Rl\}, \{l, m\}];$

$table3 = Table[\{K_l, \omega_l\},\ \{l, m\}];$

$table4 = Table[\{\omega_l, T_l\},\ \{l, m\}];$

$table5 = Table[\{\omega_l, Rl\},\ \{l, m\}];\qquad]$

$\kappa b = ArcCos[-((n2/n1) + (n1/n2))/2]/\Lambda;$

$For[j = 1, \quad j <= Nc, \quad j++,$

$\kappa_j = Cos[\theta_j] * n_j * 2.0 * \pi\lambda o;$

$x_0 = 0;$

(*Posição das interfaces*)

$x_j = \sum_{j=1}^{j} d_j;$

$p =;$ (*número de interações*)

$For[u = 0, \quad u <= p, \quad u++,$

$U = p * (j - 1) + u;$

(*Intervalo entre as camadas *)

$xi = x_{j-1}; \quad xf = x_j;$

(*Passo*)

$b = (xf - xi)/p;$

$z_U = x_{j-1} + b * u;$

(*Amplitude do Campo Elétrico*)

$E_U = (ao * Exp[-(I * \kappa_j * (z_U - x_j))] + bo * Exp[I * \kappa_j * (z_U - x_j) * Exp[I * \kappa b * (z_U - x_j)] * Exp[-I * \kappa b * z_U];$

$E_U^* = Conjugate[E_U];$

$\Gamma_U = E_U^* E_U;$

$table6 = Table[\{z_U, \Gamma_U\}, \{U, Nc * p\}];$]]

Os elementos *table* nas linhas do programa são as grades numéricas que fornecem o *output*. Eles são a Transmitância e Reflectância em função dos comprimentos de onda e das frequências angulares; o vetor de onda em função da frequência angular (estrutura de bandas) e o campo elétrico em função do tamanho do filme.

Os comandos abaixo são utilizados para plotar os gráficos referidos e exportar suas respectivas grades numéricas para um arquivo *.dat*.

```
ListPlot[table, PlotJoined -> True]
ListPlot[table2, PlotJoined -> True]
ListPlot[table3, PlotJoined -> True]
ListPlot[table4, PlotJoined -> True]
ListPlot[table5, PlotJoined -> True]
ListPlot[table6, PlotJoined -> True]

Export["quartodeondaT.dat", table, "Table"];
Export["quartodeondaR.dat", table2, "Table"];
Export["quartodeondabandas.dat", table3, "Table"];
Export["quartodeondacampos.dat", table6, "Table"];
```

Apêndice B

Teorema de Bloch Quântico

Aqui será apresentada a demonstração do Teorema de Bloch para o cenário quântico. Primeiro é necessário definir o operador hamiltoniano $\hat{\mathcal{H}}$ em mecânica quântica.

$$\hat{\mathcal{H}} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + U(\vec{r}), \tag{B.1}$$

sendo que sua aplicação é dada por:

$$\hat{\mathcal{H}}\Psi_{\vec{K}}(\vec{r}) = \epsilon_{\vec{K}}\Psi_{\vec{K}}(\vec{r}), \tag{B.2}$$

onde o índice $\vec{K}$ significa que a função de onda Ψ depende do vetor de onda.

Se o potencial U for periódico, de forma que

$$U(\vec{r} + \vec{R}) = U(\vec{r}), \tag{B.3}$$

os autoestados deste problema são escolhidos como:

$$\Psi_{\vec{K}}(\vec{r}) = e^{i\vec{K}\cdot\vec{r}}U_{\vec{K}}(\vec{r}), \tag{B.4}$$

com

$$U_{\vec{K}}(\vec{r} + \vec{R}) = U_{\vec{K}}(\vec{r}). \tag{B.5}$$

Agora o vetor de onda $\vec{K}$ é chamado de *vetor de onda de Bloch*. Definindo o operador translação

$$\hat{\mathcal{T}}\Psi_{\vec{K}}(\vec{r}) = \Psi_{\vec{K}}(\vec{r} + \vec{R}), \tag{B.6}$$

tal que:

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{T}}\hat{\mathcal{H}}\Psi_{\vec{K}}(\vec{r}) &= \hat{\mathcal{H}}(\vec{r}+\vec{R})\Psi_{\vec{K}}(\vec{r}+\vec{R}) \\ &= \hat{\mathcal{H}}(\vec{r})\Psi_{\vec{K}}(\vec{r}+\vec{R}) \\ &= \hat{\mathcal{H}}\hat{\mathcal{T}}\Psi_{\vec{K}}(\vec{r}). \end{aligned} \tag{B.7}$$

Encontra-se que os operadores $\hat{\mathcal{H}}$ e $\hat{\mathcal{T}}$ comutam,

$$[\hat{\mathcal{T}}, \hat{\mathcal{H}}] = 0, \tag{B.8}$$

ou seja, eles possuem as mesmas autofunções. Desta forma:

$$\begin{aligned} & \hat{\mathcal{T}}\Psi_{\vec{K}}(\vec{r}) = \Psi_{\vec{K}}(\vec{r}+\vec{R}) \\ \Rightarrow \quad & \hat{\mathcal{T}}\hat{\mathcal{T}}\Psi_{\vec{K}}(\vec{r}) = \Psi_{\vec{K}}(\vec{r}+2\vec{R}) \\ \Rightarrow \quad & \hat{\mathcal{T}}^N\Psi_{\vec{K}}(\vec{r}) = \Psi_{\vec{K}}(\vec{r}+N\vec{R}). \end{aligned} \tag{B.9}$$

Se for definido um contorno $\vec{L} = N\vec{R}$ de forma que:

$$\Psi_{\vec{K}}(\vec{r}+\vec{L}) = \Psi_{\vec{K}}(\vec{r}), \tag{B.10}$$

e o operador translação atue como

$$\begin{aligned} & \hat{\mathcal{T}}\Psi_{\vec{K}}(\vec{r}) = Cte\Psi_{\vec{K}}(\vec{r}) \\ \Rightarrow \quad & \hat{\mathcal{T}}\Psi_{\vec{K}}(\vec{r}) = Cte^N\Psi_{\vec{K}}(\vec{r}). \end{aligned} \tag{B.11}$$

Isso implicará em:

$$\begin{aligned} \Psi_{\vec{K}}(\vec{r}+\vec{L}) &= \Psi_{\vec{K}}(\vec{r}+N\vec{R}) = \Psi_{\vec{K}}(\vec{r}) \\ \Rightarrow \quad \Psi_{\vec{K}}(\vec{r}) &= Cte^N\Psi_{\vec{K}}(\vec{r}) \\ \Rightarrow \quad Cte^N &= 1 = e^{2\pi i}. \end{aligned} \tag{B.12}$$

Todavia, a condição de periodicidade diz que $e^{i\vec{K}\cdot\vec{R}} = e^{2\pi i}$, o que leva a:

$$\Psi_{\vec{K}}(\vec{r}+\vec{R}) = e^{i\vec{K}\cdot\vec{R}}\Psi_{\vec{K}}(\vec{r}). \tag{B.13}$$

Se a função de onda escolhida em (B.4) implica em:

$$\begin{aligned} & \Psi_{\vec{K}}(\vec{r}+\vec{R}) = e^{i\vec{K}\cdot(\vec{r}+\vec{R})}U_{\vec{K}}(\vec{r}+\vec{R}) \\ \Rightarrow \quad & \Psi_{\vec{K}}(\vec{r}+\vec{R}) = e^{i\vec{K}\cdot\vec{R}}e^{i\vec{K}\cdot\vec{r}}U_{\vec{K}}(\vec{r}) \\ \Rightarrow \quad & \Psi_{\vec{K}}(\vec{r}+\vec{R}) = e^{i\vec{K}\cdot\vec{R}}\Psi_{\vec{K}}(\vec{r}). \end{aligned} \tag{B.14}$$

As equações (B.4) e (B.14) são iguais, então a partir dai se afirma o Teorema de Bloch, onde o $\vec{K}$ de Bloch representa a simetria translacional de um meio periódico.

Apêndice C

Meios Anisotrópicos

C.1 Tensor Dielétrico e Equação de Fresnel

No capítulo 3 foi descrito o método da matriz de transferência para meios lineares e isotrópicos, que teve como resultados os coeficientes de transmissão e reflexão quando uma onda se propagava em um meio periódico. Aqui o objetivo é chegar a estes mesmo coeficientes, mas agora para um meio anisotrópico. Esta metodologia está muito bem escrita nos livros [7] e [17].

Primeiro deve-se calcular o vetor descolamento para tais meios. Partindo da suposição de um meio linear, tal que a polarização dependa das componentes do campo elétrico, a susceptibilidade elétrica neste caso é escrita não como um escalar, porem como um tensor. Desta forma obtem-se a relação entre os vetores $\vec{P}$ e $\vec{E}$

$$\begin{aligned} P_x &= \varepsilon_0(\chi_{11}E_x + \chi_{12}E_y + \chi_{13}E_z), \\ P_y &= \varepsilon_0(\chi_{21}E_x + \chi_{22}E_y + \chi_{23}E_z), \\ P_z &= \varepsilon_0(\chi_{31}E_x + \chi_{32}E_y + \chi_{33}E_z). \end{aligned} \tag{C.1}$$

Usando a relação para meios lineares

$$\vec{D} = \varepsilon_0\vec{E} + \vec{P}, \tag{C.2}$$

e escrevendo a permissividade do meio também como um tensor, chamado tensor dielétrico:

$$\varepsilon_{ij} = \varepsilon_0(1 + \chi_{ij}), \tag{C.3}$$

obtem-se a relação entre as componentes do campo elétrico e as componentes do

vetor deslocamento

$$\begin{aligned} D_x &= (\varepsilon_{11}E_x + \varepsilon_{12}E_y + \varepsilon_{13}E_z), \\ D_y &= (\varepsilon_{21}E_x + \varepsilon_{22}E_y + \varepsilon_{23}E_z), \\ D_z &= (\varepsilon_{31}E_x + \varepsilon_{32}E_y + \varepsilon_{33}E_z). \end{aligned} \tag{C.4}$$

A equação acima também pode ser escrita na notação indicial

$$\vec{D}_i = \sum_j \varepsilon_{ij}\vec{E}_j. \tag{C.5}$$

Assumindo um meio homogênio, não magnético e não absorvente, o tensor dielétrico se torna real e simétrico

$$\varepsilon_{ij} = \varepsilon_{ji}, \tag{C.6}$$

de forma que é sempre possível, a partir da escolha apropriada dos eixos, encontrar uma matriz de três componentes diagonais ortogonais com os elementos fora da diagonal iguais a zero:

$$\varepsilon = \begin{pmatrix} \varepsilon_x & 0 & 0 \\ 0 & \varepsilon_y & 0 \\ 0 & 0 & \varepsilon_z \end{pmatrix} = \varepsilon_0 \begin{pmatrix} n_x^2 & 0 & 0 \\ 0 & n_y^2 & 0 \\ 0 & 0 & n_z^2 \end{pmatrix} \tag{C.7}$$

sendo n_x, n_y e n_z os índices de refração em seus respectivos eixos.

Partindo da equação (3.23) obtida no capítulo 3 na seção a respeito do Teorema de Bloch:

$$\nabla \times (\nabla \times \vec{E}) - \omega^2\mu\varepsilon\vec{E} = 0. \tag{C.8}$$

Sabendo que para uma onda plana monocromática de frequência ω, os campos elétrico e magnético são escritos na forma:

$$\begin{aligned} \vec{E}(\vec{r},t) &= \vec{E}(\vec{r})e^{iwt-\vec{k}\cdot\vec{r}}, \\ \vec{H}(\vec{r},t) &= \vec{H}(\vec{r})e^{iwt-\vec{k}\cdot\vec{r}}. \end{aligned} \tag{C.9}$$

E definindo o vetor de onda como:

$$\vec{k} = \frac{\omega}{c}n\hat{e}, \tag{C.10}$$

onde $\hat{e}$ é o vetor unitário na direção da propagação da onda. Obtem-se a equação de autovalores para os autovetores $\vec{E}$

$$\vec{k} \times (\vec{k} \times \vec{E}) + \omega^2\mu\varepsilon\vec{E} = 0, \tag{C.11}$$

que escrita na forma matricial:

$$\begin{pmatrix} \omega^2\mu\varepsilon_x - k_y^2 - k_z^2 & k_xk_y & k_xk_z \\ k_yk_x & \omega^2\mu\varepsilon_y - k_x^2 - k_z^2 & k_yk_z \\ k_zk_x & k_zk_y & \omega^2\mu\varepsilon_z - k_x^2 - k_y^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_x \\ E_y \\ E_z \end{pmatrix} = 0, \tag{C.12}$$

retorna os autovalores à partir do determinante

$$det \begin{vmatrix} \omega^2\mu\varepsilon_x - k_y^2 - k_z^2 & k_xk_y & k_xk_z \\ k_yk_x & \omega^2\mu\varepsilon_y - k_x^2 - k_z^2 & k_yk_z \\ k_zk_x & k_zk_y & \omega^2\mu\varepsilon_z - k_x^2 - k_y^2 \end{vmatrix} = 0. \tag{C.13}$$

Onde a solução fornece a*Equação de Fresnel*:

$$\frac{e_x^2}{n^2 - n_x^2} + \frac{e_y^2}{n^2 - n_y^2} + \frac{e_z^2}{n^2 - n_z^2} = \frac{1}{n^2}. \tag{C.14}$$

Desta forma a matriz que representa os autovetores é

$$\begin{pmatrix} E_x \\ E_y \\ E_z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{k_x}{k^2 - \omega^2\mu\varepsilon_x} \\ \frac{k_y}{k^2 - \omega^2\mu\varepsilon_y} \\ \frac{k_z}{k^2 - \omega^2\mu\varepsilon_z} \end{pmatrix}, \tag{C.15}$$

que pode ser escrita a partir dos índices de refração e das componentes do vetor $\hat{e}$ na forma

$$\begin{pmatrix} E_x \\ E_y \\ E_z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{e_x}{n^2 - n_x^2} \\ \frac{e_y}{n^2 - n_y^2} \\ \frac{e_z}{n^2 - n_z^2} \end{pmatrix}. \tag{C.16}$$

C.2 Meios Girotrópicos e Efeito Faraday

Em alguns meios existe uma rotação óptica natural (mudança da direção da onda linearmente polarizada passando atravéz do meio), onde o tensor dielétrico que inclui essa rotação não é mais simétrico.

Para a propagação de uma onda plana em um meio homogênio:

$$\vec{D} = \varepsilon_a\vec{E} + i\varepsilon_0\vec{G} \times \vec{E}, \tag{C.17}$$

onde ε_a é o tensor dielétrico do meio sem atividade óptica e $\vec{G}$ é u vetor paralelo à direção de propagação, chamado vetor de rotação.

O produto $\vec{G} \times \vec{E}$ pode ser representado como um produto de $\vec{E}$ com um tensor

antisimétrico [G], onde seus elementos de matriz são:

$$\begin{aligned}[G]_{23} &= -[G]_{32} = G_x, \\ [G]_{31} &= -[G]_{13} = G_y, \\ [G]_{12} &= -[G]_{21} = G_z.\end{aligned} \tag{C.18}$$

Desta maneira:

$$\vec{D} = (\varepsilon_a \vec{E} + i\varepsilon_{a0}[G])\vec{E}, \tag{C.19}$$

Agora define-se um novo tensor dielétrico

$$\varepsilon = \varepsilon_a \vec{E} + i\varepsilon_0[G], \tag{C.20}$$

que é hermitiano, ou seja

$$\varepsilon_{ij} = \varepsilon^*_{ji}. \tag{C.21}$$

Escrevendo o vetor G em função do vetor unitário da direção de propagação:

$$\vec{G} = G\hat{e}, \tag{C.22}$$

a equação de Fresnel para este caso resulta em:

$$\frac{e_x^2}{n^2 - n_x^2} + \frac{e_y^2}{n^2 - n_y^2} + \frac{e_z^2}{n^2 - n_z^2} - \frac{1}{n^2} = G^2 \frac{e_x^2 n_x^2 + e_y^2 n_y^2 + e_z^2 n_z^2}{n^2(n^2 - n_x^2)(n^2 - n_y^2)(n^2 - n_z^2)}. \tag{C.23}$$

Se n_1 e n_2 são as raízes da equação para G=0, é possível reescrever a equação de Fresnel como:

$$\begin{aligned} & (n^2 - n_1^2)(n^2 - n_2^2) = G^2 \\ \Rightarrow \quad & n^2 = \bar{n}^2 \pm G, \quad n_1 = n_2 = \bar{n}. \end{aligned} \tag{C.24}$$

Se G é muito pequeno:

$$n = \bar{n} \pm \frac{G}{2\bar{n}}. \tag{C.25}$$

O ângulo de rotação por unidade de comprimento é definido como:

$$\varrho = \frac{\pi G}{\lambda}(n_l - n_r) \tag{C.26}$$

onde $n_l e n_r$ são os índices de refração para ondas circularmente polarizadas à esquerda e à direita, respectivamente. Isto leva a

$$\varrho = \frac{\pi G}{\lambda \bar{n}} \tag{C.27}$$

Na presença de um campo magnético alguns materiais também apresentam rotação óptica. Neste caso o efeito é chamado de *efeito Faraday*. Aqui a rotação é proporcional à componente do campo magnético ao longo da direção de propagação da luz, on seja, o vetor rotação é proporcional ao campo magnético externo, da forma:

$$\vec{G} = \gamma \vec{B}, \tag{C.28}$$

sendo γ o coeficiente de rotação magnética do meio. Sendo assim, o ângulo de rotação por unidade de comprimento é

$$\varrho = \frac{\pi\gamma}{\lambda\bar{n}} B = VB, \tag{C.29}$$

em que V é a constante de Verdet. A equação para o vetor deslocamento é então;

$$\vec{D} = \varepsilon\vec{E} + i\varepsilon_{a0}\gamma\vec{B} \times \vec{E}. \tag{C.30}$$

C.3 Matriz de Transferência

Desta vez utiliza-se um tensor dielétrico genérico

$$\varepsilon = \begin{pmatrix} \varepsilon_{xx} & \varepsilon_{xy} & \varepsilon_{xz} \\ \varepsilon_{yx} & \varepsilon_{yy} & \varepsilon_{yz} \\ \varepsilon_{zx} & \varepsilon_{zy} & \varepsilon_{zz} \end{pmatrix}. \tag{C.31}$$

Sabendo que para uma onda plana monocromática de frequência ω, os campos elétrico podem ser escritos na forma;

$$\vec{E} = \vec{E}(z)e^{i(\omega t - \alpha x - \beta y)}, \tag{C.32}$$

em que α é a componente x, β é a componente y e $\gamma_j(l)$ é a componente z do vetor de onda e ω é a frequência angular. Definindo o vetor de onda como:

$$\vec{k}_j = \alpha\hat{x} + \beta\hat{y} + \gamma_j\hat{z}, \tag{C.33}$$

onde $\hat{z}$ é o vetor unitário na direção da propagação da onda. Obtem-se a equação de autovalores para os autovetores $\vec{E}$

$$\vec{k} \times (\vec{k} \times \vec{E}) + \omega^2\mu\varepsilon\vec{E} = 0, \tag{C.34}$$

que escrita na forma matricial:

$$\begin{pmatrix} \omega^2\mu\varepsilon_{xx} - \beta^2 - \gamma^2 & \omega^2\mu\varepsilon_{xy} + \alpha\beta & \omega^2\mu\varepsilon_{xz} + \alpha\gamma \\ \omega^2\mu\varepsilon_{yx} + \alpha\beta & \omega^2\mu\varepsilon_{yy} - \alpha^2 - \gamma^2 & \omega^2\mu\varepsilon_{yz} + \beta\gamma \\ \omega^2\mu\varepsilon_{zx} + \alpha\gamma & \omega^2\mu\varepsilon_{zy} + \beta\gamma & \omega^2\mu\varepsilon_{zz} - \alpha^2 - \beta^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_x \\ E_y \\ E_z \end{pmatrix} = 0. \tag{C.35}$$

Utilizando o mesmo método da seção anterior, onde para obter soluções não triviais o determinante da matriz acima deve ser zero e dados os fatores α e β, encontram-se quatro raízes para a equação de γ_j , onde j = 1,2,3,4.

A polarização destas ondas é dada por:

$$\vec{p}_j = N_j \begin{pmatrix} (\omega^2\mu\varepsilon_{yy} - \alpha^2 - \gamma_j^2)(\omega^2\mu\varepsilon_{zz} - \alpha^2 - \beta^2) - (\omega^2\mu\varepsilon_{yz} + \beta\gamma_j)^2 \\ (\omega^2\mu\varepsilon_{yz} + \beta\gamma_j)(\omega^2\mu\varepsilon_{zx} + \alpha\gamma_j) - (\omega^2\mu\varepsilon_{xy} + \alpha\beta)(\omega^2\mu\varepsilon_{zz} - \alpha^2 - \beta^2) \\ (\omega^2\mu\varepsilon_{xy} + \alpha\beta)(\omega^2\mu\varepsilon_{yz} + \beta\gamma_j) - (\omega^2\mu\varepsilon_{xz} + \alpha\gamma_j)(\omega^2\mu\varepsilon_{yy} - \alpha^2 - \gamma_j^2) \end{pmatrix} = 0, \tag{C.36}$$

onde N_j é uma constante de normalização.

Desta maneira a distribuição $E(x)$ é escrita como:

$$\vec{E}(z) = \sum_j A_j \vec{p}_j e^{-i\gamma_j z}. \tag{C.37}$$

Agora assumindo que para um sistema com múltiplas camadas não magnéticas o tensor dielétrico é dado por:

$$\varepsilon(z) = \begin{cases} \varepsilon_0 & \text{se } z < z_0 \\ \varepsilon_1 & \text{se } z_0 < z < z_1 \\ \varepsilon_2 & \text{se } z_1 < z < z_2 \\ ... & \\ \varepsilon_N & \text{se } z_{N-1} < z < z_N \\ \varepsilon_s & \text{se } z_N < z \end{cases}$$

tal que ε_l é a permissividade da camada l; z_l é a posição da interface entre as camadas l e $l+1$, ε_s é a permissividade do substrato e ε_0 é a permissividade do meio incidente. A espessura d_l das camadas estão relacionadas à posição z_l da forma $d_l = z_l - z_{l-1}$.

O campo elétrico $E(z)$ é então escrito na forma:

$$\vec{E}_l = \sum_j A_{j,l} \vec{p}_{j,l} e^{i[\omega t - \alpha x - \beta y - \gamma_{j,l}(z - z_l)]}, \tag{C.38}$$

onde $l = 0, 1, 2, ...N, s$

A partir da Lei de Faraday (3.1) e dos campos acima obtem-se a seguinte relação

para os campos magnéticos:

$$\vec{H}_l = \sum_j A_{j,l}\vec{q}_{j,l}e^{i[\omega t-\alpha x-\beta y-\gamma_{j,l}(z-z_l)]}, \tag{C.39}$$

sendo

$$\vec{q}_{j,l} = \frac{c\vec{k}_{j,l}}{\omega\mu} \times \vec{p}_{j,l}. \tag{C.40}$$

Nas equações acima, $A_{j,l}$ representam a amplitudes das ondas planas na interface $z = z_l$.

Então, aplicando as condições de contorno adequadas:

$$\begin{aligned}
\sum_j A_{j,l-1}\vec{p}_{j,l-1}\cdot\vec{x} &= \sum_j A_{j,l}\vec{p}_{j,l}\cdot\vec{x}e^{i\gamma_{j,l}d_l}, \\
\sum_j A_{j,l-1}\vec{p}_{j,l-1}\cdot\vec{y} &= \sum_j A_{j,l}\vec{p}_{j,l}\cdot\vec{y}e^{i\gamma_{j,l}d_l}, \\
\sum_j A_{j,l-1}\vec{q}_{j,l-1}\cdot\vec{x} &= \sum_j A_{j,l}\vec{q}_{j,l}\cdot\vec{x}e^{i\gamma_{j,l}d_l}, \\
\sum_j A_{j,l-1}\vec{q}_{j,l-1}\cdot\vec{y} &= \sum_j A_{j,l}\vec{q}_{j,l}\cdot\vec{y}e^{i\gamma_{j,l}d_l}.
\end{aligned} \tag{C.41}$$

Estas equações fornecem a transimissão de uma onda em uma interface entre dois meios e podem ser reescritas como a matriz D, chamada Matriz Dinâmica, que é mostrada abaixo:

$$D_l = \begin{pmatrix} \vec{x}\cdot\vec{p}_{1,l} & \vec{x}\cdot\vec{p}_{2,l} & \vec{x}\cdot\vec{p}_{3,l} & \vec{x}\cdot\vec{p}_{4,l} \\ \vec{y}\cdot\vec{q}_{1,l} & \vec{y}\cdot\vec{q}_{2,l} & \vec{y}\cdot\vec{q}_{3,l} & \vec{y}\cdot\vec{q}_{4,l} \\ \vec{y}\cdot\vec{p}_{1,l} & \vec{y}\cdot\vec{p}_{2,l} & \vec{y}\cdot\vec{p}_{3,l} & \vec{y}\cdot\vec{p}_{4,l} \\ \vec{x}\cdot\vec{q}_{1,l} & \vec{x}\cdot\vec{q}_{2,l} & \vec{x}\cdot\vec{q}_{3,l} & \vec{x}\cdot\vec{q}_{4,l} \end{pmatrix}. \tag{C.42}$$

No caso de um tensor dielétrico diagonal, por exemplo, esta matriz é escrita como:

$$D_l = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & cos\theta_l & 0 & -cos\theta_l \\ 0 & -n & 0 & -n \\ n_l cos\theta_l & 0 & -n_l cos\theta_l & 0 \end{pmatrix}, \tag{C.43}$$

sendo $l = 0, 1, 2, ..., N, ...$ Escrevendo a propagação para uma multicamada:

$$\begin{pmatrix} A_{1,0} \\ A_{2,0} \\ A_{3,0} \\ A_{4,0} \end{pmatrix} = D_0^{-1} D_1 \begin{pmatrix} A'_{1,0} \\ A'_{2,1} \\ A'_{3,1} \\ A'_{4,1} \end{pmatrix}, \tag{C.44}$$

$$\begin{pmatrix} A'_{1,1} \\ A'_{2,1} \\ A'_{3,1} \\ A'_{4,1} \end{pmatrix} = P_1 \begin{pmatrix} A_{1,1} \\ A_{2,1} \\ A_{3,1} \\ A_{4,1} \end{pmatrix},$$

$$\begin{pmatrix} A_{1,l} \\ A_{2,l} \\ A_{3,l} \\ A_{4,l} \end{pmatrix} = P_l D_l^{-1} D_{l+1} \begin{pmatrix} A_{1,l+1} \\ A_{2,,l+1} \\ A_{3,,l+1} \\ A_{4,,l+1} \end{pmatrix}.$$

Onde a Matriz de Propagação é da forma:

$$P_l = \begin{pmatrix} e^{i\phi_{1,l}} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & e^{-i\phi_{2,l}} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & e^{-i\phi_{3,l}} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & e^{-i\phi_{4,l}} \end{pmatrix}, \tag{C.45}$$

em que $\phi_{j,l} = \gamma_{j,l} d_l$ é a fase da onda. Assim a relação entre as amplitudes dos campos incidentes $A_{j,0}$ e as amplitudes transmitidas $A_{j,s}$, da forma:

$$\begin{pmatrix} A_{1,0} \\ A_{2,0} \\ A_{3,0} \\ A_{4,0} \end{pmatrix} = D_0^{-1} \left(\prod_{l=1}^{N} D_l P_l D_l^{-1} \right) D_s \begin{pmatrix} A_{1,s} \\ A_{2,s} \\ A_{3,s} \\ A_{4,s} \end{pmatrix}, \tag{C.46}$$

$$\begin{pmatrix} A_{1,0} \\ A_{2,0} \\ A_{3,0} \\ A_{4,0} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} M_{11} & M_{12} & M_{13} & M_{14} \\ M_{21} & M_{22} & M_{23} & M_{24} \\ M_{31} & M_{32} & M_{33} & M_{34} \\ M_{41} & M_{42} & M_{43} & M_{44} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_{1,s} \\ A_{2,s} \\ A_{3,s} \\ A_{4,s} \end{pmatrix},$$

onde $\hat{\mathbf{M}}$ é a chamada Matriz de Transferência que descreve a propagação da onda eletromagnética da primeira à última camada.

Para encontrar os coeficientes de transmissão (t) e de reflexão (r) é necessário simular estas matrizes de transferência. Um método para simplificar a obtenção destes

coeficientes é separar a matriz $\hat{M}$ em 4 outras matrizes T, V, R e S 2x2:

$$\hat{M} \equiv \begin{pmatrix} T & V \\ R & S \end{pmatrix}. \tag{C.47}$$

Os coeficientes são definidos à partir das amplitudes dos campos incidentes, refletidos e transmitidos tanto para ondas s quanto para ondas p: $E_s^{(i)}$, $E_p^{(i)}$, $E_s^{(r)}$, $E_p^{(r)}$, $E_s^{(t)}$, $E_p^{(t)}$. As amplitudes são escritas de forma que:

$$\begin{pmatrix} E_s^{(i)} \\ E_p^{(i)} \\ E_s^{(r)} \\ E_p^{(r)} \end{pmatrix} = \hat{M} \begin{pmatrix} E_s^{(t)} \\ E_p^{(t)} \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}. \tag{C.48}$$

E os coeficientes de transmissão e reflexão são:

$$\begin{aligned} r_{ps} &= \frac{E_p^{(r)}}{E_s^{(i)}},\ r_{ss} = \frac{E_s^{(r)}}{E_s^{(i)}},\ t_{ss} = \frac{E_s^{(t)}}{E_s^{(i)}},\ t_{ps} = \frac{E_p^{(t)}}{E_s^{(i)}}, \quad com\ E_p^{(i)} = 0, \\ t_{pp} &= \frac{E_p^{(t)}}{E_p^{(i)}},\ t_{sp} = \frac{E_s^{(t)}}{E_p^{(i)}},\ r_{pp} = \frac{E_p^{(r)}}{E_p^{(i)}},\ r_{sp} = \frac{E_s^{(r)}}{E_p^{(i)}}, \quad com\ E_s^{(i)} = 0. \end{aligned} \tag{C.49}$$

Assim pode-se obter estes coeficientes à partir das matrizes T e R:

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} t_{ss} & t_{sp} \\ t_{ps} & t_{pp} \end{pmatrix} &= T^{-1}, \\ \begin{pmatrix} r_{ss} & r_{sp} \\ r_{ps} & r_{pp} \end{pmatrix} &= RT^{-1}. \end{aligned} \tag{C.50}$$

A escolha de simular matrizes 2x2 para encontrar estes coeficientes ao invés de utilizar suas expressões diretas é devida a simplificação de notação e de número de cálculos [18].