

UNIVERSIDADE FEDERAL FLUMINENSE

RAFAEL FERREIRA PINTO DO RÊGO BARROS

NON-BRAGG GAPS EM SUPER-REDES FOTÔNICAS UNIDIMENSIONAIS

NITERÓI 2017

UNIVERSIDADE FEDERAL FLUMINENSE

RAFAEL FERREIRA PINTO DO RÊGO BARROS

NON-BRAGG GAPS EM SUPER-REDES FOTÔNICAS UNIDIMENSIONAIS

Dissertação de mestrado apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Física da Universidade Federal Fluminense como requisito parcial para a obtenção do Grau de Mestre em Física.

Orientador: ANDREA BRITO LATGÉ

Co-orientador: LUIZ EDUARDO OLIVEIRA

> NITERÓI 2017

B277 Barros, Rafael Ferreira Pinto do Rêgo. Non-bragg gaps em super-redes fotônicas unidimensionais / Rafael Ferreira Pinto do Rêgo Barros ; orientador: Andrea Brito Latgé ; co-orientador: Luiz Eduardo Oliveira. --Niterói, 2017. 70 p. : il.
Dissertação (Mestrado) - Universidade Federal Fluminense, Instituto de Física, Niterói, 2017. Bibliografia: p. 69-70.
1.FOTÔNICA. 2.METAMATERIAIS. 3.SUPER-REDES. 4.CRISTAIS FOTÔNICOS. I.Latgé, Andrea Brito, orientador. II. Oliveira, Luiz Eduardo. III.Universidade Federal Fluminense. Instituto de Física, Instituição responsável. IV.Título.

RAFAEL FERREIRA PINTO DO RÊGO BARROS

NON-BRAGG GAPS EM SUPER-REDES FOTÔNICAS UNIDIMENSIONAIS

Dissertação de mestrado apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Física da Universidade Federal Fluminense como requisito parcial para a obtenção do Grau de Mestre em Física.

Aprovada em <MES> de <ANO>.

BANCA EXAMINADORA

Profa. ANDREA BRITO LATGÉ - Orientador, UFF

Prof. LUIZ EDUARDO OLIVEIRA - Co-orientador, UNICAMP

Prof. ANTÔNIO ZELAQUETT KHOURY, UFF

Prof. TATIANA GABRIELA RAPPOPORT, UFRJ

NITERÓI

2017

AGRADECIMENTOS

Dedico esta dissertação a todos aqueles que, de uma maneira ou de outra, estiveram ao meu lado ao longo de minha jornada acadêmica. Em particular, devo dizer que certamente não teria conseguido chegar até aqui sem o apoio da minha amada família e dos meus detestáveis amigos, sem os quais os meus objetivos haveriam certamente perecido diante de todas as dificuldades e distrações deste longo caminho.

Especialmente, dedico esta dissertação à minha amada e essencial noiva Nathalia, que acompanhou de perto todos os meus altos e baixos em todo este tempo, que me dá força quando eu mais preciso e que sempre me fala o que eu preciso ouvir para seguir adiante. Agradeço também, imensamente, aos meus recentes amigos e professores Luiz E. Oliveira e Ernesto Reyes-Gómez, que tanto me ajudaram e ensinaram nos últimos dois anos e que foram imprescindíveis para o sucesso deste trabalho.

Por último, mas não menos importante, dedico esta dissertação à minha grande amiga, professora e orientadora Andrea Latgé, que tem sido uma grande companheira durante toda a minha formação. Tenho certeza de que sua constante atenção e vigilância fizeram de mim um físico melhor, e que toda a confiança que depositou em mim fez de mim uma pessoa (um pouco) mais responsável.

Ohana means family. Family means nobody gets left behind, or forgotten. — Lilo & Stitch

RESUMO

Neste trabalho apresentamos um estudo teórico da natureza dos gaps que aparecem nas estruturas de bandas de cristais fotônicos unidimensionais (1D) formados por diferentes materiais dispersivos, incluindo metamateriais ópticos com índice de refração negativo. Usamos o método da matriz transferência para calcular estruturas de bandas fotônicas, espectros de transmissão e perfis de campo elétrico ao longo de super-redes com diferentes estruturas de multi-camadas, mostrando que a inserção de materiais dispersivos neste tipo de sistema torna possível o surgimento dos chamados non-Bragg gaps, que são gaps fotônicos originados a partir de mecanismos físicos diferentes dos processos de interferência que originam os gaps de Bragg. Mostramos que algumas propriedades dos non-Bragg gaps em super-redes fotônicas unidimensionais podem ser previstas a partir da análise de quantidades como as impedâncias generalizadas, o caminho óptico generalizado e a fase efetiva, que são mais convenientes do que as clássicas permissividade elétrica e permeabilidade magnética para o tratamento deste tipo de problema. Propondo este cenário teórico para a análise da propagação da luz em super-redes fotônicas 1D, fornecemos as condições necessárias para a abertura e fechamento dos gaps zero- $\langle n \rangle$, plasmon-polariton e zero- ϕ_{eff} , enfatizando, em cada caso, os mecanismos físicos responsáveis. Para fins de completeza, implementamos, para as camadas de metamateriais, o modelo de dispersão de uma rede de Split Ring Resonators (SRR's), que, embora ingênuo, se aproxima mais dos resultados experimentais que o modelo de Drude-Lorentz. Por fim, apresentamos também cálculos analíticos para o perfil do zero- $\langle n \rangle$ gap, fornecendo bons acordos com os resultados numéricos correspondentes.

Palavras-chave: Fotônica, Metamateriais, Super-redes, Cristais Fotônicos

ABSTRACT

In this work we present a theoretical study of the nature of photonic band gaps of one-dimensional photonic crystals containing dispersive materials. We use the transfermatrix formalism to calculate photonic band structures, transmission spectra and electric field profiles for different multilayered structures constituted by periodic repetition of polaritonic and left-handed layers. This method has been shown very convenient to deal with different physical properties involving layered systems. It is suggested that the prediction of the existence of the $\langle n \rangle = 0$, plasmon-polariton, and ϕ_{eff} non-Bragg gaps, according to the frequency dependence of the permittivity and permeability of both layers, may be made simpler through the definition of more convenient quantities such as the generalized impedance and the optical path length. By proposing this alternative theoretical scenario for the analysis of light propagation in 1D photonic superlattices, we have provided the necessary conditions for the opening and closing up of the $\langle n \rangle = 0$, plasmon-polariton, and ϕ_{eff} non-Bragg gaps, emphasizing, in each case, the responsible physical mechanism. For completeness purposes, we consider the more realistic split-ring resonator (SRR) dispersion model for left-handed layers. Finally, analytical calculations are presented for the $\langle n \rangle = 0$ gap profile providing a good agreement with the corresponding numerical results.

Keywords: Photonics, Metamaterials, Superlattices, Photonic Crystals

CONTEÚDO

1 INTRODUÇÃO

2 CRISTAIS FOTÔNICOS

2.1 O que são cristais fotônicos

1

2.2 Propagação de luz em meios dielétricos periódicos 5

3

9

6

9

- 2.3 Simplificações das equações de Maxwell
- 2.4 Modos harmônicos do campo eletromagnético 8

3

- 2.5 Simetrias dos modos harmônicos
 - 2.5.1 Simetria de inversão
 - 2.5.2 Simetria de Reflexão 10
 - 2.5.3 Simetria de translação contínua 11
 - 2.5.4 Simetria de translação discreta 13
- 2.6 Cristais fotônicos unidimensionais 15

3 MATERIAIS DISPERSIVOS 21

- 3.1 Modelo de Lorentz 22
- 3.2 Materiais iônicos: fônons-polaritons 24
- 3.3 Metamateriais ópticos 26

4 GAPS FOTÔNICOS EM CRISTAIS UNIDIMENSIONAIS 29

- 4.1 Método da matriz de transferência 29
 - 4.1.1 Evolução espacial de Modos Transversais Elétricos (TE) 30
 - 4.1.2 Teorema de Bloch e estrutura de bandas 33
 - 4.1.3 TE vs TM 35
- 4.2 Super-redes dispersivas: non-Bragg gaps <u>36</u>
- 4.3 Características gerais dos non-Bragg gaps 42
- 5 ORIGEM FÍSICA DOS NON-BRAGG GAPS 47
 - 5.1 Impedâncias generalizadas e a função $G(\nu)$ 48
 - 5.2 Caminho óptico generalizado e a condição de Bragg 49

- 5.3 Zero- $\langle n \rangle$ gap e gaps de Bragg 50
- 5.4 Plasmon-polariton gap 52
- 5.5 Zero- ϕ_{eff} gap 53
- 5.6 Resultados 56
 - 5.6.1 Super-rede material polaritônico/metamaterial tipo Drude 56

60

- 5.6.2 Super-rede material polaritônico/metamaterial tipo SRR
- 5.6.3 Dependência do zero- $\langle n \rangle$ gap com o fator de escala 61
- 6 CONCLUSÕES E PERSPECTIVAS 65

APÊNDICES 67

A A.1 Solução analítica para a largura do gap zero- $\langle n \rangle$ 67

Referência Bibliográfica 68

1 INTRODUÇÃO

O desenvolvimento de cristais fotônicos e estruturas ópticas com indices de refração periodicamente modulados tem sido tema de muitos estudos nas últimas décadas[1, 2, 3], principalmente devido ao fato de ser possível manipular as características da propagação de luz nestes sistemas através da engenharia de suas estruturas de bandas. Avanços recentes no estudo de filtros espaciais de feixes de laser em cristais fotônicos, por exemplo, propagando-se em diferentes regimes, foram reportados [4], indicando novas e promissoras possibilidades geométricas e novas montagens experimentais na fabricação de tais estruturas ópticas.

O avanço tecnológico alcançado nos últimos anos foi fundamental para motivar o interesse em estudar e controlar a interação da luz com a matéria. Neste sentido, além dos mencionados cristais fotônicos, destacam-se os chamados metamateriais de Veselago [5] ou "left-handed materials" (LHMs), cuja realização experimental foi obtida apenas recentemente (2004) por Smith et al. [6]. Esses materiais, que podem apresentar índices de refração negativos em determinadas faixas de frequência, estão relacionados à vários fenômenos atuais, tais como o efeito Doppler reverso, a refração negativa e as chamadas lentes perfeitas, que permitem a formação de imagens com resolução além da escala do comprimento de onda. De modo geral, os metamateriais têm sido muito investigados principalmente devido às propriedades excitantes exibidas quando interagem com as ondas eletromagnéticas [5, 6, 7, 8] com comprimento de onda maior que a escala característica de suas estruturas internas, de modo que as ondas "vêem" o metamaterial como um meio efetivo, cujas propriedades podem ser manipuladas através de seus componentes internos.

Nesta dissertação estamos interessados no estudo da propagação da luz em cristais fotônicos 1D contendo LHMs e materiais dispersivos de modo geral. A inserção de materiais com dispersão intrínsica em cristais fotônicos revela gaps fotônicos com origens completamente diferentes daquelas dos gaps causados exclusivamente pela periodicidade do índice de refração do sistema, os conhecidos gaps de Bragg. A

formação dos chamados non-Bragg gaps, bem como suas principais características, têm sido exploradas na literatura para diferentes heteroestruturas fotônicas [9, 10, 11, 12, 13, 14, 15, 16, 17], evidenciando os mecanismos através dos quais os mesmos são gerados. Nota-se, por exemplo, que neste tipo de sistema é importante a interação entre as ondas eletromagnéticas e os graus de liberdade internos das camadas da super-rede [12, 13, 14, 15, 17], tais como os modos de plasmons e fônons longitudinais. Veremos, ainda, que estes sistemas podem permitir a propagação de ondas eletromagnéticas até mesmo em regiões do espectro de frequências nas quais ambas as camadas são opacas [16], de modo análogo à propagação de elétrons fortemente ligados em redes cristalinas.

Ao longo deste trabalho apresentamos resultados de cálculos de estruturas de bandas fotônicas, espectros de transmissão e perfis de campo elétrico através de super-redes 1D, compostas de camadas alternadas contendo diferentes materiais dispersivos, tais como metamateriais e meios iônicos. Com particular ênfase, estudamos a descrição analítica dos diferentes non-Bragg gaps a partir da introdução de quantidades convenientes para esta descrição, como as impedâncias generalizadas e o caminho óptico generalizado. Com este propósito, exploramos tanto analiticamente quanto numericamente os resultados provenientes do Método da Matriz de Transferência [18], mostrando que o uso das quantidades acima mencionadas em vez das usuais permissividade elétrica e permeabilidade magnética favorece um melhor entendimento dos diferentes mecanismos físicos responsáveis pelo surgimento dos non-Bragg gaps.

O texto está organizado da seguinte maneira: no capítulo 2 apresentamos uma introdução aos cristais fotônicos e à física dos sistemas ópticos dielétricos com índice de refração periódico, onde introduzimos os conceitos de modos harmônicos e gaps fotônicos através dos vínculos impostos pelas simetrias dos sistemas às equações de Maxwell. Em seguida, no capítulo 3, passamos a descrever os materiais dispersivos, cujos índices de refração dependem da frequência da onda eletromagnética que se propaga, entre os quais se encontram os mencionados metamateriais ópticos e também os materiais iônicos. No capítulo 4 introduzimos o Método da Matriz de Transferência e a metodologia necessária à exploração das consequências da introdução de materiais dispersivos em cristais fotônicos unidimensionais, como o surgimento dos non-Bragg gaps, por exemplo. No capítulo 5 investigamos os mecanismos físicos responsáveis pelo surgimento destes gaps através de uma série de resultados para estruturas de bandas, espectros de transmissão e perfis de campo elétrico nestes sistemas. Por fim, as conclusões deste trabalho se encontram no sexto e último capítulo.

2 CRISTAIS FOTÔNICOS

2.1 O QUE SÃO CRISTAIS FOTÔNICOS

Um cristal é um arranjo periódico de átomos e moléculas. Entre os muitos exemplos de sólidos cristalinos, podemos citar os metais, o diamante, o grafite, e vários outros. Com isso em mente, podemos nos perguntar como os elétrons podem viajar em metais, por exemplo, evitando o espalhamento nos sítios da rede cristalina. Este foi um dos grandes mistérios da física do estado sólido, e sua solução se encontra na mecânica quântica. Acontece que a dinâmica do elétron é ondulatória, e é possível mostrar que ondas podem se propagar em meios periódicos sem sofrerem espalhamento.

De modo análogo aos cristais de átomos e moléculas, nos quais se propagam elétrons e buracos, é possível construir sistemas periódicos adequados à propagação de outros tipos de ondas. No caso das ondas eletromagnéticas, a periodicidade das propriedades ópticas, como o índice de refração, forma os chamados **cristais fotônicos**. A Fig.2.1 ilustra exemplos de cristais fotônicos periódicos em uma, duas e três dimensões.

Assim como no caso da mecânica quântica, as condições de contorno periódicas impostas pela periodicidade do índice de refração nos cristais fotônicos faz com que a propagação de luz neste tipo de sistema se dê através de **modos harmônicos**, que são



Figura 2.1: Exemplos de cristais fotônicos periódicos em (a) uma, (b) duas e (c) três dimensões.



Figura 2.2: Exemplo de estrutura de bandas de um sistema composto pela disposição de esferas de ar em um meio com alta permissividade elétrica (ϵ = 13) no padrão da rede cristalina do diamante, com parâmetro de rede *a* [3].

modos quantizados do campo eletromagnético, separados de acordo com propriedades de simetria. Estes modos harmônicos, análogos aos **estados de Bloch** da teoria do estado sólido, podem ser representados através de uma **estrutura de bandas**, através da qual é possível conhecer suas diferentes frequências e vetores de onda. A estrutura de bandas de um cristal fotônico possui todas as informações pertinentes à propagação de ondas eletromagnéticas no mesmo, como as velocidades de fase e de grupo e etc. Na Fig.2.2 mostramos um exemplo de estrutura de bandas de um cristal fotônico ($\epsilon = 13$), dispostas no padrão da rede cristalina do diamante.

Assim como a propagação, também de fundamental importância é a possibilidade da completa proibição da propagação de luz num cristal fotônico para determinadas faixas de frequências. A engenharia dos **gaps fotônicos**, como são chamados, pode ser utilizada para proibir que ondas se propaguem no cristal em determinadas direções, para determinadas frequências ou cores, e é o motivo de grande parte do interesse da comunidade científica nestes sistemas [3], uma vez que está relacionada à construção de diferentes dispositivos ópticos.

Neste capítulo, apresentamos a descrição dos cristais fotônicos dielétricos de acordo com as equações de Maxwell do eletromagnetismo. Descrevendo as diferentes propriedades de simetria que um cristal fotônico pode ter, mostramos que algumas características dos modos harmônicos nestes sistemas podem ser inferidas através das restrições que as simetrias impõem às soluções das equações de Maxwell. Exploramos também os fundamentos e conceitos de estuturas de bandas e cristais fotônicos. Por fim, apresentamos em detalhes os cristais fotônicos unidimensionais, também chamados de **super-redes fotônicas**, que são os principais objetos de estudo desta dissertação.

2.2 PROPAGAÇÃO DE LUZ EM MEIOS DIELÉTRICOS PERIÓDICOS

Nesta seção, estudamos a propagação de luz em meios dielétricos não uniformes. No âmbito do eletromagnetismo clássico, as propriedades ópticas deste tipo de sistema são governadas pelas quatro equações de Maxwell. Em sua forma diferencial e em unidades do sistema internacional (S.I.), elas são escritas como

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0 \qquad \nabla \times \mathbf{E} + \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} = 0,$$

$$\nabla \cdot \mathbf{D} = \rho \qquad \nabla \times \mathbf{H} - \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t} = \mathbf{J},$$

(2.1)

onde, respectivamente, **E** e **H** são os campos elétrico e magnético, **D** e **B** são os campos deslocamento elétrico e indução magnética, e ρ e **J** são as densidades de cargas e correntes livres.

Restringindo-nos ao tratamento de sistemas compostos por materiais dielétricos, podemos considerar, independentemente das características geométricas dos sistemas em questão, que $\rho = 0$ e **J** = 0. Além disso, supomos que as intensidades envolvidas são pequenas o suficiente para que possamos desprezar efeitos não-lineares, e também que os dielétricos envolvidos são **isotrópicos**. Deste modo, as relações entre **E** e **D** e entre **H** e **B**, as chamadas **relações constitutivas**, podem ser escritas como

$$\mathbf{D} = \varepsilon_0 \varepsilon(\mathbf{r}) \mathbf{E} \qquad e \qquad \mathbf{B} = \mu_0 \mu(\mathbf{r}) \mathbf{H}, \tag{2.2}$$

onde $\varepsilon_0 \approx 8.854 \times 10^{-12} Farad/m$ e $\mu_0 = 4\pi \times 10^{-7} Henry/m$ são a permissividade e a permeabilidade do vácuo, respectivamente. As funções espaciais adimensionais $\varepsilon(\mathbf{r})$ e

 μ (**r**) são as chamadas permissividade elétrica e permeabilidades magnética relativas, que são funções da coordenada espacial **r** e dependem do material no ponto analizado. Cada dielétrico (desprezando efeitos dispersivos) possui uma permissividade e uma permeabilidade relativas. As do vácuo, por exemplo, são $\varepsilon = \mu = 1$, enquanto que para o vidro comum $\varepsilon \approx 5$ e $\mu \approx 1$.

É importante notar que para a maioria dos materiais não magnéticos, a permeabilidade magnética relativa é próxima da unidade, e portanto, consideramos $\mu(\mathbf{r}) = 1$ para todos os materiais dielétricos estudados. O mesmo não é verdade para metais e materiais magnéticos em geral, que geralmente são dispersivos e possuem permeabilidades magnéticas que podem inclusive assumir valores negativos ou divergirem.

Outra quantidade bastante usual no estudo das propriedades ópticas dos materiais é o **índice de refração**, definido como

$$n = \sqrt{\varepsilon(\mathbf{r})}\sqrt{\mu(\mathbf{r})},\tag{2.3}$$

e presente em múltiplos contextos no âmbito da óptica clássica, como na lei de Snell, por exemplo. Como nesta seção consideramos $\mu = 1$, o índice de refração é dado simplesmente pela raíz quadrada da permissividade elétrica, que é a quantidade da qual as propriedades ópticas de todos os materiais dielétricos, no presente contexto, dependem.

2.3 SIMPLIFICAÇÕES DAS EQUAÇÕES DE MAXWELL

De modo geral, os campos elétrico e magnético são funções não triviais do espaço e do tempo. No entanto, o fato de as equações de Maxwell (2.1) serem **lineares** nos permite fazer considerações sobre os campos que simplificam o seu tratamento, mas que não restringem a sua aplicabilidade. Primeiro, consideramos que os campos são harmônicos no tempo, isto é,

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

$$\mathbf{E}(\mathbf{r},t) = \mathbf{E}(\mathbf{r})e^{-i\omega t}.$$
(2.4)

Note que a consideração de dependência harmônica no tempo não traz grandes limitações, uma vez que é possível descrever campos que são funções quaisquer do tempo usando (2.4) em uma composição de Fourier. Usando (2.2) e (2.4), podemos reescrever (2.1) como:

(*i*)
$$\nabla \cdot \mathbf{H}(\mathbf{r}) = 0$$
 (*ii*) $\nabla \times \mathbf{E}(\mathbf{r}) - i\omega\mu_0\mathbf{H}(\mathbf{r}) = 0$,
(*iii*) $\nabla \cdot [\varepsilon(\mathbf{r})\mathbf{E}(\mathbf{r})] = 0$ (*iv*) $\nabla \times \mathbf{H}(\mathbf{r}) + i\omega\varepsilon_0\varepsilon(\mathbf{r})\mathbf{E}(\mathbf{r}) = 0$.
(2.5)

As equações (2.5i) e (2.5iii) são também chamadas de condições de transversalidade. Este significado pode ser melhor entendido se considerarmos que os campos **H** (**r**) e **E** (**r**) são os de uma onda plana em um meio homogêneo, isto é,

$$\mathbf{H}(\mathbf{r}) = \mathbf{H}_0 e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}},$$

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}) = \mathbf{E}_0 e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}},$$

(2.6)

para algum vetor de onda **k** e permissividade fixa ε (**r**) = ε . Neste caso, as equações (2.5i) e (2.5iii) implicam:

$$\mathbf{H}_0 \cdot \mathbf{k} = 0 \qquad e \qquad \mathbf{E}_0 \cdot \mathbf{k} = 0, \tag{2.7}$$

mostrando que os campos apontam em direções ortogonais à direção de propagação dos mesmos, ou seja, que a onda eletromagnética em questão é transversal.

As equações (2.5ii) e (2.5iv), por sua vez, podem ser usadas para desacoplar os campos elétrico e magnético, nos deixando com equações independentes para cada um. Para isso, primeiro dividimos (2.5iv) por ε (**r**), e então tomamos o rotacional, obtendo

$$\nabla \times \left[\frac{1}{\varepsilon(\mathbf{r})}(\nabla \times \mathbf{H}(\mathbf{r}) + i\omega\varepsilon_0\varepsilon(\mathbf{r})\mathbf{E}(\mathbf{r}))\right] = 0, \qquad (2.8)$$

ou, equivalentemente,

$$\nabla \times \left[\frac{1}{\varepsilon(\mathbf{r})}\nabla \times \mathbf{H}\right] + i\omega\varepsilon_0\nabla \times \mathbf{E}(\mathbf{r}) = 0.$$
(2.9)

Usando agora a equação (2.5ii), podemos eliminar o campo elétrico de (2.9), ficando com

$$\nabla \times \left[\frac{1}{\varepsilon(\mathbf{r})} \nabla \times \mathbf{H}(\mathbf{r})\right] = \left(\frac{\omega}{c}\right)^2 \mathbf{H}(\mathbf{r}), \qquad (2.10)$$

onde $c = \frac{1}{\sqrt{\epsilon_0 \mu_0}}$ é a **velocidade da luz** no vácuo. A equação (2.10) é também chamada de **equação mestra**, no sentido que é a partir dela que podemos, dados ϵ (**r**) e ω , definir completamente o campo magnético **H**(**r**). Note que, de posse de **H**(**r**), é possível obter **E**(**r**) a partir da equação (2.5iv), i.e.,

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}) = \frac{i}{\omega\varepsilon_0\varepsilon(\mathbf{r})} \nabla \times \mathbf{H}(\mathbf{r}).$$
(2.11)

2.4 MODOS HARMÔNICOS DO CAMPO ELETROMAG-NÉTICO

As soluções das equações (2.10) e (2.11) caracterizam os chamados **modos harmônicos** do campo electromagnético. De posse de ε (**r**), a solução de (2.10), sujeita à condição de transversalidade (2.7), fornece os modos **H**(**r**) e suas respectivas frequências. Como veremos mais adiante, a determinação das frequências dos modos harmônicos é de fundamental importância no estudo da luz em cristais fotônicos, uma vez que dela depende a **estrutura de bandas fotônicas** dos mesmos.

Nesta seção, porém, nos restringimos às consequências diretas da equação mestra sobre o perfil espacial dos modos harmônicos. Primeiramente, podemos reescrever (2.10) como

$$\hat{\Theta}\mathbf{H}(\mathbf{r}) = \left(\frac{\omega}{c}\right)^2 \mathbf{H}(\mathbf{r}), \qquad (2.12)$$

onde

$$\hat{\Theta} = \nabla \times \frac{1}{\varepsilon(\mathbf{r})} \nabla \times$$
(2.13)

é um operador diferencial que toma o rotacional, depois divide por $\varepsilon(\mathbf{r})$ e então toma o rotacional novamente. Com a equação mestra reescrita na forma (2.12), é possível notar que o problema da determinação dos modos harmônicos e meios não uniformes pode ser visto como um problema de autovalores, de modo análogo à determinação de funções de onda e energias de estados estacionários na mecânica quântica. No problema fotônico, porém, os modos $\mathbf{H}(\mathbf{r})$ são as autofunções ou autovetores enquanto que os autovalores são dados por $\left(\frac{\omega}{c}\right)^2$.

É possível demonstrar [3] que o operador diferencial $\hat{\Theta}$ é **linear** e, além disso, **hermitiano**. Deste modo, propriedades características de problemas de autovalores hermitianos são válidas também para a equação (2.12). Isto é, os autovalores $\left(\frac{\omega}{c}\right)^2$ são reais; dois modos **H**₁(**r**) e **H**₂(**r**) com frequências ω_1 e ω_2 diferentes são **ortogonais**; se dois modos **H**₁(**r**) e **H**₂(**r**) são soluções de (2.12) com a mesma frequência ω , então qualquer combinação linear α **H**₁(**r**) + β **H**₂(**r**) também é solução de (2.12) com frequência ω , o que significa, entre outras coisas, que a frequência de um modo não depende de sua intensidade.

2.5 SIMETRIAS DOS MODOS HARMÔNICOS

Nesta seção nos dedicamos ao estudo das simetrias dos modos harmônicos do campo eletromagnético. O fato de podermos associar a determinação dos modos H(r) à solução de um problema de autovalores hermitiano, nos permite utilizar as noções de **operações de simetria** e características deste tipo de problema. Entre outras coisas, as simetrias de um modo harmônico podem ser utilizadas para classificar os diferentes modos de acordo com seus comportamentos diante de cada operação de simetria.

Entre as muitas operações de simetrias existentes, destacam-se, no presente contexto, as simetrias de **inversão espacial**, **espelhamento** e **translação espacial**, sobre as quais apresentamos um breve resumo nas próximas subseções.

2.5.1 Simetria de inversão

Um sistema é dito simétrico sobre inversão espacial se permanecer inalterado ao mudar-se **r** por $-\mathbf{r}$. Um exemplo de figura geométrica bidimensional simétrica sobre inversão espacial é um disco. Note que, tomando o centro do círculo como referência, é impossível diferenciar um ponto **r** do ponto $-\mathbf{r}$. É razoável pensar, portanto, que um modo harmônico confinado neste sistema deva compartilhar desta mesma característica.



(a) modo par

(b) modo ímpar

Figura 2.3: Exemplos de modos de vibração de uma membrana circular. O fato de a membrana circular possuir simetria de inversão espacial com relação ao seu centro faz com que os modos se dividam entre pares e ímpares

Para exemplificar o efeito da simetria de inversão em problemas de autovalores hermitiano, mostramos na figura 2.3 dois modos de vibração de uma membrana circular com bordas fixadas. É possível notar dois comportamentos distintos do deslocamento com relação à inversão espacial. No painel (a), vemos que ao trocar pontos opostos com relação ao centro eles possuem o mesmo deslocamento, enquanto que no painel (b) os deslocamentos são inversos, correspondendo, respectivamente, aos exemplos de modos **pares** e **ímpares**.

No contexto da propagação da luz em meios dielétricos, a simetria de inversão espacial é representada pela condição

$$\varepsilon(\mathbf{r}) = \varepsilon(-\mathbf{r}), \tag{2.14}$$

e possui como consequência a separação dos modos harmônicos em pares e ímpares

$$\mathbf{H}(-\mathbf{r}) = \pm \mathbf{H}(\mathbf{r}),\tag{2.15}$$

onde os sinais de mais e menos representam os modos par e ímpar, respectivamente. Este é um exemplo de como se pode classificar modos harmônicos baseado na resposta dos mesmos a uma operação de simetria.

2.5.2 Simetria de Reflexão

Dizemos que um sistema é simétrico por reflexão em um determinado plano quando o mesmo permanecer inalterado sob inversão na direção transversal a este plano. Um exemplo pode ser visto na figura 2.4, que mostra uma montanha e sua imagem refletida na superfície espelhada da água. Neste caso, vemos que a figura é simétrica por reflexão no plano da água, que portanto é chamado de um **plano de simetria** do sistema.



Figura 2.4: Exemplo de simetria por reflexão. O sistema é simétrico por reflexão no plano da água, que é um plano de simetria do sistema.

A simetria de reflexão tem uma consequência importante no contexto da fotônica, devido à natureza física dos campos elétrico e magnético. Se um meio dielétrico é simétrico por reflexão em um determinado plano, uma onda eletromagnética se propagando neste plano possui um dos dois campos (elétrico ou magnético) apontando na direção transversal a este plano. Modos que possuem o campo elétrico na direção transversal ao plano de simetria são chamados de **transversais elétricos** (TE), enquanto os que possuem o campo magnético na direção transversal ao plano de simetria são chamados de **transversais elétricos** (TE), enquanto chamados de **transversais magnéticos** (TM).

Além de uma consequência das simetrias do sistema, a separação de modos entre TE e TM também introduz simplificações fundamentais no estudo analítico dos modos harmônicos em cristais fotônicos. Uma demonstração lúcida e simples das propriedades enunciadas nesta subseção podem ser encontradas em [3].

2.5.3 Simetria de translação contínua

Quando um sistema é homogêneo em uma determinada direção, diz-se que o mesmo possui simetria de translação contínua ao longo desta direção. No contexto da fotônica, um meio homogêneo é definido pela relação

$$\varepsilon(\mathbf{r}) = \varepsilon \qquad \forall \mathbf{r}$$
 (2.16)

É possível mostrar que os modos compatíveis com uma permissividade constante no espaço são da forma

$$\mathbf{H}(\mathbf{r})_{\mathbf{k}} = \mathbf{H}_0 e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}},\tag{2.17}$$

para algum vetor de onda **k**. Em outras palavras, são ondas planas. De maneira mais geral, se um sistema for homogêneo, por exemplo, no plano xy, então a dependência de $\mathbf{H}(\mathbf{r})$ em x e y também deve ser em uma exponencial complexa:

$$\mathbf{H}(\mathbf{r}) = e^{\mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\rho}} \mathbf{h}(z), \tag{2.18}$$

onde $\rho = x\hat{x} + y\hat{y}$ é um vetor no plano xy e **h**(z) é uma função apenas da coordenada z.

O fato de a solução para os modos do campo eletromagnético em meios dielétricos homogêneos ser da forma (2.17) também pode ser obtida diretamente de (2.12). Para isto, basta observar que , para uma permissividade constante, a equação (2.12) se torna

$$\nabla^2 \mathbf{H}(\mathbf{r}) = -\left(\frac{\omega}{c}\right)^2,\tag{2.19}$$

que é a equação de onda usual nos livros-textos de eletrodinâmica [19]. Substituindo (2.17) em (2.19), obtem-se facilmente a **relação de dispersão** do sistema

$$\omega = c |\mathbf{k}| / \sqrt{\varepsilon} \,. \tag{2.20}$$

Note que, neste caso, o vetor de onda \mathbf{k} é a quantidade que define como o modo $\mathbf{H}_{\mathbf{k}}$ se comporta diante de translações espaciais.

A relação de dispersão define muitas propriedades importantes da propagação de luz em meios materiais, tais como a **velocidade de fase** e a **velocidade de grupo**, por exemplo, definidas como

$$\mathbf{v}_f = \omega \mathbf{k} / |\mathbf{k}|^2 \tag{2.21}$$

e

$$\mathbf{v}_g = \nabla_{\mathbf{k}} \omega, \qquad (2.22)$$

respectivamente, onde $\nabla_{\mathbf{k}}$ é o gradiente com relação a **k**. Enquanto a velocidade de fase denota a velocidade com a qual as superfícies de fase constante se movimentam, a velocidade de grupo determina a velocidade do fluxo de energia eletromagnética no sistema.¹

¹ A relação entre velocidade de grupo e velocidade do transporte de energia em um sistema óptico só é válida quando o sistema não apresenta perdas e não é dispersivo.

² Uma derivação formal da relação entre fluxo de energia e velocidade de grupo pode ser encontrada em [19]



Figura 2.5: Exemplo de estrutura periódica na direção y. O sistema é formado pela repetição da região delimitada pela caixa de largura *a*. Figura extraída de [3]

2.5.4 Simetria de translação discreta

Como definido previamente, um cristal fotônico é um meio óptico cujo índice de refração é periódico no espaço. A figura 2.5 mostra um exemplo de um dielétrico que possui periodicidade na direção y. Note que neste sistema

$$\varepsilon(\mathbf{r} + na\hat{y}) = \varepsilon(\mathbf{r}), \qquad n = 1, 2...$$
(2.23)

e que o mesmo é homogêneo apenas na direção *x*. Mais uma vez, é de se esperar que os modos harmônicos do campo eletromagnético neste sistema herdem características provenientes destas simetrias.

Como explicitado na subseção anterior, a simetria de translação contínua de um meio em uma dada direção faz com que a dependência de **H**(**r**) com a respectiva componente do vetor posição seja uma exponencial complexa, como sugerido pela equação (2.18). Usemos agora o sistema da figura 2.5 como exemplo. A **simetria de tranlação discreta** do sistema ao longo da direção *y*, consequência da periodicidade ao longo da mesma, implica que os modos harmônicos do campo eletromagnético neste sistema sejam da forma



Figura 2.6: Exemplo de estrutura de bandas de um cristal fotônico unidimensional de período *a*, constituído por camadas alternadas com permissividades $\varepsilon_1 = 13$ e $\varepsilon_2 = 1$ e larguras 0.2*a* e 0.8*a*, respectivamente [3]

$$\mathbf{H}(\mathbf{r})_{k_x,k_y} = e^{ik_x x} e^{ik_y y} \mathbf{u}_{k_y}(y,z), \qquad (2.24)$$

com

$$\mathbf{u}_{k_{y}}(y+na,z) = \mathbf{u}_{k_{y}}(y,z), \qquad n = 1, 2...$$
 (2.25)

e onde k_x e k_y são as componentes do vetor de onda nas direções x e y, respectivamente. Em outras palavras, na direção da periodicidade, os modos são precisamente o que seriam caso o meio fosse homogêneo nesta direção, mas multiplicados por uma **envoltória** periódica.

Os resultados (2.24) e (2.25) são conhecidos como o **teorema de Bloch**, muito importante no estudo dos sólidos cristalinos. Uma consequência de (2.24) e (2.25) é que:

$$\mathbf{H}(\mathbf{r} + na\hat{y})_{k_x,k_y} = e^{nik_y a} \mathbf{H}(\mathbf{r})_{k_x,k_y}, \qquad n = 1, 2...$$
(2.26)

onde vemos que entre pontos distantes de um número inteiro de períodos, um modo harmônico só pode diferir por uma fase.

Outro detalhe importante atrelado ao teorema de Bloch diz respeito ao vetor de onda k_y . Veja que, como uma consequência de (2.26), os vetores de onda k_y e k_y + mb, onde

 $b = 2\pi/a$, são equivalentes do ponto de vista físico, uma vez que a troca de um pelo outro não altera (2.26). Isto significa que apenas vetores de onda dentro do intervalo:

$$-\frac{\pi}{a} \le k_y \le \frac{\pi}{a} \tag{2.27}$$

representam estados físicos diferentes. Qualquer vetor fora desta região, também conhecida como **1ª zona de Brillouin**, é equivalente a algum vetor dentro da mesma. O vetor **b** = $b\hat{y}$ é chamado de **vetor da rede recíprica** e está associado à periodicidade do **espaço recíproco**, gerado pelos diferentes vetores de onda k_y .

Na figura 2.6, mostramos um exemplo de relação de dispersão de um cristal fotônico unidimensional. Note que a periodicidade traz consigo a complexidade da relação de dispersão, também conhecida como a **estrutura de bandas** do cristal fotônico. Há regiões de frequência nas quais não há modos harmônicos para nenhum vetor de onda. Estas regiões são conhecidas como **gaps fotônicos**, e determinam regiões de frequência nas quais a propagação de luz é "proibida". O estudo dos gaps fotônicos será desenvolvido em detalhes nas próximas seções, e é de fundamental importância no estudo e desenvolvimento de aplicações envolvendo a manipulação da luz em cristais fotônicos. Por fim, enfatizamos que as considerações feitas acima sobre o teorema de Bloch e sua influência sobre os modos harmônicos do campo eletromagnético podem ser facilmente generalizadas para duas e três dimensões. Uma abordagem didática e completa sobre redes cristalinas e o teorema de Bloch no contexto da física do estado sólido pode ser encontrada na Ref. [20]. Para uma leitura mais resumida e focada no contexto da fotônica, veja a Ref. [2].

2.6 CRISTAIS FOTÔNICOS UNIDIMENSIONAIS

Os cristais fotônicos unidimensionais são os exemplos mais simples de cristais fotônicos. Neles, o índice de refração é periódio em apenas uma direção, enquanto é homogêneo em todas as outras. A figura 2.7 mostra um exemplo de cristal fotônico unidimensional periódico na direção \hat{z} , onde vemos que o mesmo é composto por camadas alternadas A e B de tamanho e composição diferentes. É importante ressaltar que a figura representa apenas uma parte do cristal, uma vez que consideramos o sistema infinito em todas as direções, de modo a preservar as simetrias de translação contínua (no plano xy) e discreta (na direção z), mencionadas na subseção anterior.



Figura 2.7: Exemplo de cristal fotônico unidimensional periódico na direção z. As diferentes cores representam os diferentes materiais das camadas A e B do cristal.

Consideremos que as camadas A e B têm larguras *a* e *b* e permissividades ε_a e ε_b , respectivamente. O período do cristal é dado por *d* = *a* + *b*, e esta periodicidade é descrita matematicamente como

$$\varepsilon(x, y, z) = \varepsilon(x', y', z + jd), \qquad j = 0, 1, 2...$$
 (2.28)

onde *j* é um número inteiro e x' e y' representam valores arbitrariamente diferentes de x e y, respectivamente.

Os modos harmônicos deste sistema, de acordo com os argumentos de simetria desenvolvidos na seção anterior, podem ser escritos como

$$\mathbf{H}(\mathbf{r})_{n,\boldsymbol{k}_{\parallel},\boldsymbol{k}_{z}} = e^{i\boldsymbol{k}_{\parallel}\cdot\boldsymbol{\rho}} e^{i\boldsymbol{k}_{z}\boldsymbol{z}} \mathbf{u}_{n,\boldsymbol{k}_{\parallel},\boldsymbol{k}_{z}}(\boldsymbol{z}), \qquad (2.29)$$

onde

$$\mathbf{u}_{n,k_{\parallel},k_{z}}(z) = \mathbf{u}_{n,k_{\parallel},k_{z}}(z+jd) \qquad j = 0, 1, 2...$$
 (2.30)

Como em (2.18), $\rho = x\hat{x} + y\hat{y}$ representa um vetor no plano xy. Então, \mathbf{k}_{\parallel} é o vetor de onda paralelo ao plano xy, que está relacionado ao comportamento dos modos diante de translações no plano xy. Já o vetor de onda k_z está relacionado com as translações ao longo da direção z, estando portanto sujeito às consequências da simetria de translação discreta, como por exemplo a periodicidade do espaço recíproco e a propriedade (2.26), bem como a consequente restrição de seus valores não ambíguos à primeira zona de Brillouin $(-\frac{\pi}{d} \le k_z \le \frac{\pi}{d})$.

Nesta seção, voltamos a atenção ao estudo da estrutura de bandas dos cristais fotônicos unidimensionais. Vimos na figura 2.6 que a estrutura de bandas ou relação de dispersão de um cristal fotônico unidimensional é bastante diferente da de um meio dielétrico homogêneo. Este fato fica evidente diante do surgimento dos gaps fotônicos, que, como mencionado anteriormente, são regiões de frequência nas quais ondas elétromagnéticas não podem se propagar dentro do cristal. Para ilustrar esta diferença, mostramos na figura 2.8 a relação de dispersão, para propagação ao longo do eixo *z*, para o arseneto de Galio (GaAs) e para dois cristais fotônicos diferentes, um composto por camadas alternadas de arseneto de Gálio e de arseneto de Gálio e da r.

No painel esquerdo da figura, que se refere ao GaAs homogêneo, a relação de dispersão é aquela da equação (2.20), isto é, a frequência depende linearmente do vetor de onda. No painel central, introduzimos o efeito da periodicidade "fraca" na estrutura, causada por um baixo contraste no índice de refração (ε alterna entre 13 e 12). Note que mesmo com o referido baixo contraste, a abertura dos gaps fotônicos é observada. No painel direito mostramos um cristal com maior contraste de índice de refração (ε varia entre 1 e 13), onde observamos o aumento da largura do gap fotônico com relação ao cristal GaAs/GaAlAs. Concluímos, portanto, que a abertura dos gaps fotônicos é uma consequência intrínseca à periodicidade do índice de refração, não sendo a existência dos mesmos vinculada à características dos materiais de cada camada. Basta que sejam diferentes para que haja o referido gap.

Há algumas maneiras de se entender fisicamente o surgimento dos gaps fotônicos. Formalmente, não se pode dizer que não há modos harmônicos no interior de um gap, mas sim que não existem modos propagantes nesta região de frequência. As frequências dentro de um gap fotônico continuam sendo soluções legítimas da equação mestra (2.10), mas associadas a valores **imaginários** do vetor de onda k_z . De acordo com (2.29), isto faz com que os modos harmônicos sejam **evanescentes** ao longo da direção *z*, significando que a amplitude dos modos harmônicos decai exponencialmente ao longo da direção de propagação. A situação é semelhante à incidência de ondas eletromagnéticas em condutores perfeitos, onde a onda decai exponencialmente conforme penetra no metal, significando que ondas incidentes na superfície do mesmo são refletidas. Neste sentido, o cristal funciona como um espelho para ondas com frequências dentro do gap fotônico.



Figura 2.8: Estruturas de bandas fotônicas para propagação ao longo do eixo z referentes a três sistemas diferentes: (a) Arseneto de Gálio (GaAs, $\varepsilon = 13$) homogêneo (b) cristal fotônico com camadas de Arseneto de Gálio e de Arseneto de Gálio e Alumínio (GaAlAs, $\varepsilon = 12$) e (c) cristal fotônico com camadas de Arseneto de gálio e de ar ($\varepsilon = 1$). Em todos os casos a largura de cada camada é considerada igual a 0.5*a*, onde a é a largura do período do cristal [3].

O fato de sistemas dielétricos multicamadas poderem ser utilizados como espelhos não é novidade [21], e é a base da construção de dispositivos como filtros ópticos e espelhos dielétricos, ou **espelhos de Bragg**. No contexto da óptica clássica, este comportamento pode ser entendido com a análise da interferência entre as ondas refletidas nas sucessivas interfaces do cristal. Quando a diferença de caminho óptico entre raios refletidos em períodos vizinhos é um múltiplo inteiro do comprimento de onda da luz incidente, a chamada **condição de Bragg**, os mesmos interferem construtivamente, amplificando a onda refletida em detrimento da onda transmitida, como sugerido pela figura 2.9. Por esses motivos, os gaps fotônicos que surgem em cristais fotônicos puramente dielétricos são também chamados de **Gaps de Bragg**.

Há ainda uma outra maneira de interpretar o surgimento dos gaps de Bragg, e está relacionada ao princípio variacional do eletromagnetismo [3]. De acordo com este princípio, modos de maior (menor) frequência concentram mais a densidade de energia³ nas regiões de baixo (alto) índice de refração. É possível mostrar que, no sistema da

³ A densidade de energia do campo eletromagnético, em meios não dispersivos, é proporcional ao quadrado do módulo do campo elétrico |E|². Uma derivação formal desta propriedade pode ser encontrada em [19].



Figura 2.9: Ilustração esquemática do fenômeno da interferência construtiva entre raios refletidos em períodos vizinhos de um espelho de Bragg.

figura 2.8(b), por exemplo, os modos das bordas inferior e superior apresentam a maior parte da densidade de energia concentrada nas regiões de maior e menor índice de refração, respectivamente. Essa diferença entre as áreas de concentração da densidade de energia requer, de acordo com o princípio variacional, que estes modos tenham frequências distintas, explicando assim o motivo da abertura do gap fotônico.

Embora não seja abordado em detalhes nesta dissertação, o conceito de espelhos de Bragg também é importante no que diz respeito à localização de luz em defeitos em cristais fotônicos [2]. A existência de defeitos permite a existência de modos localizados com frequências dentro de um gap fotônico, de forma equivalente ao que ocorre no caso de dopagem dos materiais semicondutores. É possível mostrar também [3] que um defeito funciona como uma **cavidade ressonante**, já que para frequências dentro de um gap os sistemas à direita e à esquerda do defeito são espelhos perfeitos e refletem toda a luz de volta para a cavidade. Veremos nos próximos capítulos que nem todo gap fotônico é um gap de Bragg. A substituição dos dielétricos por materiais dispersivos nos cristais fotônicos faz com que a existência de outros tipos de gap seja possível, gaps que não se relacionam com a periodicidade do cristal, sendo robustos a variações geométricas e até mesmo a desordem nos comprimentos das camadas.
3 MATERIAIS DISPERSIVOS

Nos capítulos anteriores, vimos que as características da propagação de luz em meios materiais são determinadas pela permissividade elétrica ε e a permeabilidade magnética μ , que relacionam os campos **D** e **E** e os campos **B** e **H**, respectivamente, através das chamadas *relações constitutivas*, que são

$$\mathbf{D} = \varepsilon_0 \varepsilon \mathbf{E} \tag{3.1}$$

e

$$\mathbf{B} = \mu_0 \mu \mathbf{H}.\tag{3.2}$$

Até aqui, consideramos ε e μ constantes que dependem exclusivamente do meio material. Na realidade, porém, para todos os materiais estas quantidades apresentam alguma **dispersão** [19], o que significa que elas dependem também da frequência da onda eletromagnética que se propaga no meio, ou seja,

$$\varepsilon = \varepsilon(\omega),$$
 (3.3)

$$\mu = \mu(\omega). \tag{3.4}$$

Apesar de essas equações indicarem apenas relações matemáticas, as consequências da dispersão vão muito além do formalismo. É possível mostrar, por exemplo, que a dispersão em frequência está relacionada com uma conexão temporalmente não-local entre **E** (**H**) e **D** (**B**) [19]. Além disso, o requerimento de causalidade nesta conexão implica em uma correlação entre as partes real e imaginária da permissividade e da permeabilidade, através das importantes **relações de Kramers-Kronig** da teoria de resposta linear.

Neste capítulo não temos a proposta de explorar com profundidade o formalismo envolvido na dispersão em frequência. Em vez disso, apresentamos alguns dos modelos físicos mais frequentemente utilizados para tratar o fenômeno da dispersão. Também neste capítulo apresentamos uma introdução aos chamados **metamateriais ópticos** cujos índices de refração podem ser negativos para determinadas frequências, trazendo à tona uma física bastante diferente daquela dos materiais dielétricos convencionais.

3.1 MODELO DE LORENTZ

Como mencionado anteriormente, o efeito de um campo elétrico E em um dielétrico é polarizar o mesmo. No nível atômico, esta polarização consiste na separação entre as cargas positivas (núcleos) e as cargas negativas (elétrons). Nesta seção, estudamos a polarização de um dielétrico partindo da dinâmica dos elétrons em seus átomos, de acordo com o **modelo de Lorentz**.

A equação de movimento para um elétron de massa *m* e carga -e sujeito a uma força harmônica de ligação e atuado por um campo elétrico $E(\mathbf{r}, t)$ pode ser escrita como [19]

$$m[\ddot{\mathbf{r}} + \gamma \dot{\mathbf{r}} + \omega_0^2 \mathbf{r}] = -e\mathbf{E}(\mathbf{r}, t), \qquad (3.5)$$

onde γ é uma constante fenomenológica de amortecimento que representa a **absorção** no sistema e ω_0 é a frequência natural de oscilação do conjunto. Considerando que o campo elétrico oscila harmônicamente no tempo com uma frequência ω (**E** \propto $e^{-i\omega t}$) e que a amplitude das oscilações do elétron são pequenas o suficiente para permitir a avaliação do campo alétrico apenas na posição média do mesmo, é possível mostrar que a solução de (3.5) é dada por

$$\mathbf{r} = \frac{-e}{m} (\omega_0^2 - \omega^2 - i\omega\gamma)^{-1} \mathbf{E}, \qquad (3.6)$$

de modo que o momento de dipolo do elétron é expresso como

$$\mathbf{p} = -e\mathbf{r} = \frac{e^2}{m} (\omega_0^2 - \omega^2 - i\omega\gamma)^{-1} \mathbf{E}.$$
(3.7)

Supomos agora que há *N* moléculas por unidade de volume com *Z* elétrons por molécula, e f_j elétrons por molécula com frequência natural ω_j e constante de amortecimento γ_j^{1} . Neste caso o momento de dipolo por unidade de volume ou polarização **P** é dada por

$$\mathbf{P} = \frac{Ne^2}{m} \sum_j f_j (\omega_j^2 - \omega^2 - i\omega\gamma_j)^{-1} \mathbf{E}, \qquad (3.8)$$

1 Note que é válida a seguinte relação:

$$Z = \sum_{j} f_{j}$$

de onde obtemos a susceptibilidade elétrica²

$$\chi_e(\omega) = \frac{Ne^2}{\epsilon_0 m} \sum_j f_j (\omega_j^2 - \omega^2 - i\omega\gamma_j)^{-1}, \qquad (3.9)$$

que nos leva a uma permissividade elétrica da forma

$$\varepsilon(\omega) = 1 + \frac{Ne^2}{\epsilon_0 m} \sum_j f_j (\omega_j^2 - \omega^2 - i\omega\gamma_j)^{-1}.$$
(3.10)

Esta equação descreve muitos dos fenômenos associados à dispersão, como por exemplo a **dispersão anômala**, que se refere ao comportamento decrescente de $Re[\varepsilon(\omega)]$ para frequências próximas das ressonâncias e o consequente aumento de $Im[\varepsilon(\omega)]$ e da absorção. Também é possível chegar a uma expressão para a condutividade elétrica do material através da inserção de (3.10) nas equações de Maxwell, resgatando o resultado do modelo de Drude para a condutividade elétrica dos metais.

Particularmente interessante no contexto dos cristais fotônicos dispersivos é o comportamento de $\varepsilon(\omega)$ em sistemas com elétrons livres, como metais e plasmas, por exemplo. Se uma fração f_0 dos elétrons é livre, o que significa que $\omega_0 = 0$, então a equação (3.10) pode ser escrita como [19]

$$\varepsilon(\omega) = \varepsilon_b(\omega) + i \frac{Ne^2 f_0}{m\omega\varepsilon_0(\gamma_0 - i\omega)}, \qquad (3.11)$$

onde $\varepsilon_b(\omega)$ representa a contribuição de todos os outros dipolos para a permissividade elétrica. Para altas frequências ($\omega >> \gamma_0$), (3.11) se reduz a

$$\varepsilon(\omega) \approx \varepsilon_b(\omega) - \frac{\omega_p^2}{\omega^2},$$
(3.12)

onde

$$\omega_p = \left(\frac{Ne^2}{\epsilon_0 m^*}\right)^{\frac{1}{2}} \tag{3.13}$$

é a chamada **frequência de plasma** do meio e *m** é a massa efetiva dos elétrons livres, que inclui parcialmente os efeitos das ligações. Note que para $\omega << \omega_p$, temos $\varepsilon(\omega) < 0$ e portanto o índice de refração ($\approx \sqrt{\varepsilon(\omega)}$) é imaginário, levando, de acordo com (2.20), a um vetor de onda imaginário e à consequente atenuação da onda dentro do metal. A

² A susceptibilidade elétrica é a constante de proporcionalidade entre a polarização e o campo elétrico em meios lineares $\mathbf{P} = \varepsilon_0 \chi_e \mathbf{E}$. A permissividade elétrica é obtida da susceptibilidade elétrica através da relação $\varepsilon = 1 + \chi_e$.

luz penetra apenas em uma curta distância no metal e é majoritariamente refletida pela superfície, explicando, por exemplo, a alta refletividade dos metais para frequências ópticas. A situação se torna diferente, porém, quando a frequência atinge o regime no qual $\varepsilon(\omega) > 0$, quando o metal passa também a transmitir luz. Isto ocorre usualmente para frequências na faixa do ultravioleta, levando à descrição deste fenômeno como a transparência ultravioleta dos metais, do inglês "ultraviolet transparency of metals".

Por fim, existe também o modelo de Lorentz para a permeabilidade magnética, que leva em conta a interação entre os dipolos magnéticos do material e o campo magnético aplicado. É possível mostrar que $\mu(\omega)$ pode ser escrito como [22]

$$\mu(\omega) = \mu_b - \frac{\omega_m^2}{\omega^2},\tag{3.14}$$

onde ω_m é a frequência de plasma magnético. Vale ressaltar que perdas foram consideradas desprezíveis em (3.14) e que o limite de altas frequências foi novamente adotado.

3.2 MATERIAIS IÔNICOS: FÔNONS-POLARITONS

Na seção anterior estudamos a contribuição eletrônica para a polarização dos meios materiais de acordo com o modelo de Lorentz. Agora passamos a estudar os materiais iônicos, nos quais os pares de íons com cargas opostas também contribuem para a resposta do meio a campos eletromagnéticos. O movimento de átomos e íons é usualmente descrito em termos dos **fônons** da rede cristalina, que são quasi-partículas quânticas associadas aos modos de vibração da rede, de maneira análoga à quantização do campo eletromagnético em fótons.

Quando ondas eletromagnéticas que se propagam em meios iônicos estão em **ressonância** com os modos de fônons da rede cristalina, as características da propagação podem ser consideravelmente afetadas [22]. Na ressonância, situação na qual ambas as ondas possuem mesma frequência e mesmo vetor de onda, o forte acoplamento fóton-fônon origina novas quasi-partículas chamadas de **fônons-polaritons**. Em outras palavras, na ressonância, fóton e fônon se tornam indistinguíveis, e a configuração conjunta da vibração da rede e do campo eletromagnético pode ser vista como uma nova excitação excitação elementar chamada fônon-polariton. Vale ressaltar que o termo polariton é geralmente utilizado para denotar fenômenos nos quais ondas eletromagné-



Figura 3.1: Energias ($\hbar\omega$) e vetores de onda de polaritons e fônons ópticos longitudinais observados no Fosforeto de Gálio. As curvas de dispersão teóricas de polaritons e fônons ópticos longitudinais estão representadas pelas linhas sólidas, enquanto que as curvas de dispersão de fótons e fônons transversais desacoplados são mostradas pelas linhas tracejadas [23].

ticas interagem fortemente com graus de liberdade do meio material, como é o caso dos plasmon-polaritons e exciton-polaritons, que se referem à interação de fótons com plasmons e excitons, respectivamente.

É possível demonstrar que, para pequenos vetores de onda, a permissividade elétrica dos meios iônicos pode ser descrita como [22]

$$\varepsilon(\omega) = \varepsilon_{\infty} \left(\frac{\omega^2 - \omega_L^2}{\omega^2 - \omega_T^2} \right)$$
(3.15)

onde ω_L e ω_T são as frequências de fônon longitudinal e transversal, respectivamente, que são consideradas como independentes do vetor de onda, e ε_{∞} é a permeabilidade para $\omega \to \infty$. A Fig.3.1 mostra as energias e vetores de onda de polaritons e de fônons ópticos longitudinais medidos no Fosforeto de Gálio (GaP), juntamente com as curvas de dispersão teóricas ($\hbar\omega(k)$) obtidas pela substituição de (3.15) em (2.20).

Note que há um conjunto de frequências que não estão associadas a modos de polaritons, consequência do fato de que $\varepsilon(\omega) < 0$ para $\omega_T < \omega < \omega_L$, levando a um

índice de refração imaginário e à consequente opacidade do material. Além disso, é possível observar na Fig.3.1 que este gap é aberto em torno de frequências para as quais os fótons e fônons desacoplados estão em ressonância (mesmo vetor de onda), evidenciando a importância da interação previamente mencionada.

3.3 METAMATERIAIS ÓPTICOS

Nas últimas décadas, avanços consideráveis foram obtidos no estudo, na elaboração e na fabricação de materiais microestruturados e nanoestruturados. Uma classe especial de materiais microestruturados é a dos chamados **metamateriais ópticos**. Resumidamente, podemos dizer que metamateriais ópticos são materiais artificiais cujas estruturas internas pertencem a uma escala de tamanho menor que a da luz incidente no mesmo. Deste modo, a luz não consegue "provar" esta estrutura interna, e o metamaterial se comporta como um meio efetivo.

O grande interesse da comunidade científica nos metamateriais ópticos deve-se, em parte, à possibilidade de manipular as propriedades ópticas dos mesmos (permissividade e permeabilidade, por exemplo) através da elaboração adequada de suas microestruturas. Nesta seção apresentamos com particular ênfase os metamateriais que possuem índice de refração negativo, que estão associados a uma vasta gama de fenômenos interessantes e não convencionais.

Em 1968, Viktor Veselago [5] apresentou um estudo detalhado da eletrodinâmica de substâncias com ε e μ simultaneamente negativos, onde demonstra que o índice de refração, usualmente definido como $n = \sqrt{\varepsilon \mu}$, deve ser definido como

$$n = \sqrt{\varepsilon}\sqrt{\mu},\tag{3.16}$$

para levar em conta que a velocidade de fase de ondas eletromagnéticas nestes materiais aponta em sentido oposto ao do **vetor de Poyinting**, que indica a direção do fluxo de energia eletromagnética. Note que o índice de refração definido em (3.16) é negativo para materiais com ε e μ simultaneamente negativos, razão pela qual eles também são chamados de **NIMs**, do inglês "negative index materials".

Entre os vários fenômenos associados à propagação de luz em NIMs, destaca-se a **refração negativa** [7]. Por exemplo, se um feixe de luz incide de um meio com n > 0 em um material com n < 0, o feixe é refratado para o mesmo lado do feixe incidente,



Figura 3.2: Exemplos de refração de luz em lentes com índice de refração negativo embebidas em um meio com índice de refração positivo [5].

com respeito à reta normal à interface entre os meios. A Fig.3.2 mostra dois exemplos de como a refração negativa pode modificar o funcionamento de lentes. Vemos que a substituição do material de uma lente de um dielétrico convencional por um NIM transforma a lente de divergente em convergente e vice-versa. Outros efeitos também importantes são o **efeito Doppler** e o **efeito Cherenkov** reversos, por exemplo, que não serão discutidos aqui.

Até agora vimos que a dispersão em frequência torna possível a obtenção de valores negativos para a permissividade elétrica, como é o caso dos metais, plasmas e materiais iônicos. No entanto, como é possível $\mu < 0$ para alcançar o índice de refração negativo? A resposta para esta pergunta foi dada por Pendry et al. [6], que demonstrou que a permeabilidade negativa pode ser obtida através da excitação de ressonâncias em micro-circuitos metálicos chamados de "**split-ring resonators**" ou **SRRs**. Na Fig.3.3, apresentamos uma ilustração de um metamaterial composto pela superposição de SRRs e uma rede de fios metálicos, conhecida como **Wire-Mesh** [6].



Figura 3.3: Ilustração de um metamaterial composto pela superposição de SRRs e fios metálicos (Wire-Mesh) embebidos em uma matriz dielétrica.

É possível mostrar, a partir do formalismo de linhas de transmissão [6], que a permissividade elétrica e a permeabilidade magnética deste tipo de metamaterial são dadas por

e

$$\varepsilon(\omega) = \varepsilon_0 - \frac{\omega_e^2}{\omega^2 + i\gamma_e\omega}$$
(3.17)

$$\mu(\omega) = \mu_0 - \frac{F\omega^2}{\omega^2 - \omega_m^2 + i\gamma_m\omega},$$
(3.18)

onde ω_e é a frequência de plasma da wire-mesh e ω_m é a frequência de ressonância dos SRRs. O fator F é chamado de **fator de preenchimento**, e é característico da geometria dos split-rings. Vale ressaltar que a importância da presença da rede de fios metálicos deve-se ao fato de a mesma possuir uma frequência de plasma reduzida, se comparada com o metal que a compõe. Isto se faz necessário para que ε e μ sejam negativos no mesmo regime de frequências, levando à desejada condição n < 0.

Muitos são os trabalhos publicados que exploram as possíveis aplicações dos metamateriais [24], como filtros de alta precisão [25] e até mesmo a camuflagem de objetos com espécies de capas de invisibilidade [26]. Neste trabalho, no entanto, nos limitamos às consequências da introdução dos metamateriais em super-redes fotônicas, com o objetivo de investigar os efeitos da refração negativa neste tipo de sistema.

4 GAPS FOTÔNICOS EM CRISTAIS UNIDIMENSIONAIS

Passamos agora para uma análise mais detalhada da propagação de luz em cristais fotônicos unidimensionais, também chamados de **super-redes fotônicas**. Para tanto, apresentamos, neste capítulo, uma introdução ao **método da matriz de transferência**, com o qual é possível desenvolver cálculos de coeficientes de transmissão e reflexão, bem como da estrutura de bandas do cristal, independentemente dos detalhes de sua composição.

Em seguida, mostramos que a inserção de materiais dispersivos, como os descritos no capítulo anterior, em super-redes fotônicas pode dar origem a novos tipos de gaps fotônicos, conhecidos como **Non-Bragg gaps**. Estes, em sua maioria, não são advindos de fenômenos de interferência característicos de sistemas periódicos. Vemos, inclusive, que alguns dos mencionados gaps sequer precisam de periodicidade para existir. Mostramos que neste tipo de sistema, a interação entre a luz que se propaga e os graus de liberdade internos dos materiais possuem um papel importante, onde a excitação de plasmon-polaritons e/ou fônon-polaritons podem modificar completamente a óptica da super-rede.

Por fim, apresentamos um estudo detalhado da dependência dos non-Bragg gaps com os parâmetros ajustáveis das super-redes em questão, onde mostramos que a engenharia adequada destes gaps pode fazer com que a manipulação da propagação de luz nas referidas super-redes seja possível.

4.1 MÉTODO DA MATRIZ DE TRANSFERÊNCIA

No primeiro capítulo, vimos como os modos harmônicos de cristais fotônicos podem ser descritos em termos do comportamento do sistema sob operações de simetria. No entanto, encontrar a estrutura de bandas, isto é, as frequências dos modos em função de seus vetores de onda, nem sempre é tarefa simples de resolver com o formalismo diferencial desenvolvido no referido capítulo. Nesta seção, apresentamos o **método da matriz de transferência**, que é uma maneira de utilizar as condições de contorno dos campos elétrico e magnético de maneira recursiva, sem ter que recorrer, para tanto, à resolução das equações de Maxwell em todo o sistema.

4.1.1 Evolução espacial de Modos Transversais Elétricos (TE)

Consideremos inicialmente a propagação de modos TE na super-rede da Fig.4.1. Note que apesar de o sistema como um todo ser inomogêneo, cada camada é constituída de um material homogêneo. Com isso, de acordo com a seção sobre simetria de translação contínua, o campo elétrico pode ser escrito como

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}) = E(z)e^{i\mathbf{q}\cdot\boldsymbol{\rho}}\hat{\boldsymbol{y}},\tag{4.1}$$

que é polarizado na direção y e cuja dependência com a coordenada z é dada por¹

$$E(z) = A\cos[Q(z-z_0)] + \frac{\mu}{Q}Bsen[Q(z-z_0)],$$
(4.2)

onde \mathbf{q} e Q são as componentes do vetor de onda no plano xy e na direção *z*, respectivamente, obedecendo à relação

$$Q^{2} + \mathbf{q}^{2} = \mathbf{k}^{2} = \left(\frac{n\omega}{c}\right)^{2}, \qquad (4.3)$$

estabelecida na equação (2.20). Veja também que A e B, em (4.2), foram escolhidos de modo que

$$A = E(z_0)$$
 e $B = \frac{1}{\mu} \left. \frac{dE}{dz} \right|_{z_0}$, (4.4)

e que B, definido desta maneira, é proporcional à componente do campo magnético na direção *x*, isto é, paralela às interfaces entre as diferentes camadas.

Desta forma é possível descrever a evolução espacial dos campos ao longo da direção *z*, ficando com

$$\boldsymbol{\psi}(z) = M(z - z_0)\boldsymbol{\psi}(z_0), \tag{4.5}$$

onde o vetor $\psi(z)$ é definido como

$$\boldsymbol{\psi} = \begin{bmatrix} E(z) \\ \frac{1}{\mu} \frac{dE}{dz} \end{bmatrix}, \qquad (4.6)$$

¹ A equação 4.2 pode ser entendida como a representação do campo elétrico como a superposição de ondas se propagando nos sentidos positivo e negativo da direção *z*



Figura 4.1: Ilustração da propagação de um modo transversal elétrico (TE) em uma super-rede unidimensional. O tamanho da camada A (B) é dado por d_a (d_b), enquanto que θ representa o ângulo de propagação da onda.

e a matriz $M(z - z_0)$ é a chamada **matriz de transferência**, definida como

$$M(z - z_0) = \begin{bmatrix} \cos[Q(z - z_0)] & \frac{\mu}{Q} \operatorname{sen}[Q(z - z_0)] \\ -\frac{Q}{\mu} \operatorname{sen}[Q(z - z_0)] & \cos[Q(z - z_0)] \end{bmatrix}.$$
 (4.7)

Note que a matriz de transferência possui informações sobre o meio no qual a onda se propaga, o que está implícito na presença do índice de refração na componente longitudinal Q do vetor de onda **k**, que pode ser escrita, de acordo com (4.3), como

$$Q = \sqrt{\left(\frac{n\omega}{c}\right)^2 - \mathbf{q}^2}.$$
(4.8)

Alternativamente, é possível usar a lei de Snell para definir um **ângulo de incidência** θ com relação ao vácuo ², de modo que a componente do vetor de onda paralela ao plano xy pode ser escrita como

$$q = \frac{n\omega}{c}\operatorname{sen}(\theta_n) = \frac{\omega}{c}\operatorname{sen}(\theta), \qquad (4.9)$$

onde θ_n é o ângulo com o qual a onda se propaga dentro do material. Com isso, podemos finalmente reescrever (4.8) como

$$Q = \frac{n\omega}{c}\sqrt{1 - \frac{\operatorname{sen}^2(\theta)}{n^2}}.$$
(4.10)

Esta maneira de descrever a propagação em termos do ângulo em relação ao vácuo é particularmente interessante no estudo de super-redes compostas por materiais

² Note que θ é o ângulo a partir do qual um feixe deveria incidir, do vácuo para o meio de índice *n*, para que o feixe se propague na direção especificada por θ_n

dispersivos. Isto ocorre pelo fato de não ser possível fixar um ângulo de propagação no material para o qual a lei de Snell seja válida em qualquer frequência, uma vez que dela dependem os índices de refração de ambas as camadas.

Até agora tratamos apenas da evolução espacial dos campos de modos TE em meios homogêneos, mas precisamos generalizar o formalismo da matriz de transferência para estudar a propagação em meios inomogêneos, como a super-rede da Fig. 4.1. Para isso, é necessário saber o que acontece com os campos de uma onda quando esta passa por cada interface do sistema, o que pode ser entendido de acordo com as **condições de contorno** das equações de Maxwell. Considerando interfaces na ausência de cargas e correntes livres, estas são [27]

$$\mathbf{E}_{\parallel} \quad e \quad \mathbf{H}_{\parallel} \rightarrow contínuas,$$
 (4.11)

e também

$$\mathbf{D}_{\perp} \quad e \quad \mathbf{B}_{\perp} \quad
ightarrow \quad contínuas,$$
 (4.12)

onde os subscritos \parallel e \perp indicam componentes paralelas e perpendiculares à interface em questão, respectivamente. Note que (4.11) estabelece a continuidade das componentes de ψ através das diferentes interfaces, isto é

$$\boldsymbol{\psi}(z_{int} + dz) = \boldsymbol{\psi}(z_{int} - dz), \qquad (4.13)$$

onde z_{int} denota a coordenada z de uma interface arbitrária da super-rede. A partir de (4.13) podemos estudar a evolução espacial dos campos ao longo das diferentes camadas, conforme apresentamos a seguir.

Consideremos a evolução dos campos ao longo de um período da super-rede, como no intervalo 0 < z < d, por exemplo. De acordo com (4.5), temos, em $z = d_a$

$$\boldsymbol{\psi}(d_a) = M_A(d_a)\boldsymbol{\psi}(0), \tag{4.14}$$

onde M_A é a matriz de transferência na camada A. Porém, como $\psi(z)$ é contínuo através da interface A-B, temos

$$\boldsymbol{\psi}(d) = M_B(d_b)\boldsymbol{\psi}(d_a) = M_B(d_b)M_A(d_a)\boldsymbol{\psi}(0), \tag{4.15}$$

onde M_b é a matriz de transferência na camada B, ou, alternativamente,

$$\boldsymbol{\psi}(d) = M(d)\boldsymbol{\psi}(0), \tag{4.16}$$

onde $d = d_a + d_b$ e $M(d) = M_B(d_b)M_A(d_a)$ é a matriz de transferência por um período da super-rede, que é dada por [18]

$$M(d) = \begin{bmatrix} p & q \\ r & s \end{bmatrix}, \tag{4.17}$$

onde

$$p = \cos(Q_A d_a) \cos(Q_B d_b) - \frac{\mu_B}{\mu_A} \frac{Q_A}{Q_B} \operatorname{sen}(Q_A d_a) \operatorname{sen}(Q_B d_b)$$
(4.18)

$$q = \frac{\mu_A}{Q_A} \operatorname{sen}(Q_A d_a) \cos(Q_B d_b) + \frac{\mu_B}{Q_B} \cos(Q_A d_a) \operatorname{sen}(Q_B d_b)$$
(4.19)

$$r = -\frac{Q_A}{\mu_A}\operatorname{sen}(Q_A d_a)\cos(Q_B d_b) - \frac{Q_B}{\mu_B}\cos(Q_A d_a)\operatorname{sen}(Q_B d_b)$$
(4.20)

$$s = \cos(Q_A d_a) \cos(Q_B d_b) - \frac{\mu_A}{\mu_B} \frac{Q_B}{Q_A} \operatorname{sen}(Q_A d_a) \operatorname{sen}(Q_B d_b),$$
(4.21)

e onde Q_A e μ_a (Q_B e μ_B) são a componente z do vetor de onda e a permeabilidade magnética na camada A (B). Note que uma vez estabelecida a evolução espacial de ψ através de um período, a evolução em *j* períodos pode ser obtida pela aplicação sucessiva de (4.16), isto é

$$\boldsymbol{\psi}(jd) = M^{j}(d)\boldsymbol{\psi}(0), \qquad (4.22)$$

determinando, assim, o perfil espacial dos campos em toda a super-rede.

4.1.2 Teorema de Bloch e estrutura de bandas

Na subseção anterior, vimos como é possível obter, através do método da matriz de transferência, para modos TE, o perfil espacial das componentes dos campos elétrico e magnético paralelas às interfaces da super-rede. Agora nos voltamos à questão da estrutura de bandas, de como é possível obter a estrutura de bandas [$\omega(k)xk$] através do método da matriz de transferência.

De acordo com a seção sobre simetria de translação discreta, os campos elétrico e magnético em uma super-rede como a da Fig.4.1, devido à periodicidade da mesma na direção *z*, devem obedecer ao teorema de Bloch. Sendo assim, podemos escrever

$$\boldsymbol{\psi}(z+d) = e^{ikd} \boldsymbol{\psi}(z), \qquad (4.23)$$

onde k é o vetor de onda de Bloch, que está associado ao comportamento dos modos harmônicos diante de transformações de simetria. Requerendo, portanto, que (4.16) e



Figura 4.2: Exemplos de estruturas de bandas obtidas numericamente a partir de (4.25) para superredes constituídas de camadas A e B compostas por ar ($n_A = 1$) e GaAs ($n_B = \sqrt{\varepsilon_B} \approx 3.6$), respectivamente. São mostradas as bandas correspondentes a super-redes com (a) $d_a = d_b =$ 0.5 mm (b) $d_a = d_b = 1 mm$ e (c) $d_a = d_b = 2 mm$ [28].

(4.23) descrevam a evolução espacial de ψ de maneira equivalente, obtemos a equação de auto-valores

$$M(d)\boldsymbol{\psi}(0) = e^{ikd}\boldsymbol{\psi}(0), \qquad (4.24)$$

que fornece a solução para os possíveis valores de k através da equação transcendental

$$\cos(kd) = \cos(Q_A d_a) \cos(Q_B d_b) - \frac{1}{2} \left(\frac{\mu_B Q_A}{\mu_A Q_B} + \frac{\mu_A Q_B}{\mu_B Q_A} \right) \operatorname{sen}(Q_A d_a) \operatorname{sen}(Q_B d_b).$$
(4.25)

Note que (4.25) define a estrutura de bandas $\omega(k)$ implicitamente, uma vez que os Q's dependem de ω através de (4.10) e os $\mu's$ podem também depender de ω em função da dispersão intrínseca dos materiais em questão, conforme discutido no capítulo anterior.

A Fig.4.2 mostra exemplos de estruturas de bandas obtidas através da solução numérica de (4.25) para super-redes dielétricas compostas por camadas alternadas de ar e GaAs [28], onde se pode notar, entre outras coisas, a presença dos já mencionados gaps de Bragg. Ainda na Fig.4.2, é possível observar a forte dependência dos gaps com a escala do sistema, o que, como veremos mais adiante, é característica dos gaps de Bragg. Vale ressaltar também, que o formalismo acima desenvolvido se aplica mesmo para sistemas com materiais dispersivos, muito embora na Fig.4.2 apenas cristais dielétricos e não dispersivos tenham sido analisados. Exemplos de super-redes contendo metais, materiais iônicos e metamateriais ópticos são apresentados ao longo das próximas seções.

4.1.3 TE vs TM

Antes de prosseguirmos para o estudo das super-redes dispersivas e dos mencionados non-Bragg gaps, é importante discutirmos as principais diferenças no tratamento de modos TE e TM no formalismo da matriz de transferência. Para tanto, não é necessário refazer todos os cálculos da subseção anterior para modos TM. Em vez disso, podemos usar a simetria nas equações diferenciais que determinam os campos transversais ao plano de incidência nos casos TE e TM, que podem ser obtidas diretamente das equações de Maxwell, e que são

$$\frac{d}{dz}\frac{1}{\mu(z)}\frac{d}{dz}E(z) - \frac{q^2}{\mu(z)}E(z) = -\varepsilon(z)\left(\frac{\omega}{c}\right)^2 E(z)$$
(TE) (4.26)

e

$$\frac{d}{dz}\frac{1}{\varepsilon(z)}\frac{d}{dz}H(z) - \frac{q^2}{\varepsilon(z)}H(z) = -\mu(z)\left(\frac{\omega}{c}\right)^2 H(z)$$
(TM), (4.27)

onde q é dado por (4.9) e H(z) fornece a dependência do campo magnético com a coordenada z no caso de modos TM:

$$\mathbf{H}(\mathbf{r}) = H(z)e^{i\mathbf{q}\cdot\boldsymbol{\rho}}\hat{\mathbf{y}}.$$
(4.28)

Note que a equação (4.27), referente aos modos TM, pode ser obtida de (4.26) a partir das substituições $E(z) \rightarrow H(z)$ e $\mu(z) \rightarrow \varepsilon(z)$. Esta simetria nos permite inferir que todo resultado referente aos modos TE, incluindo a equação (4.25) para a estrutura de bandas, pode ser reescrito para os modos TM através das mencionadas substituições. Sendo assim, temos que a estrutura de bandas de modos TM em super-redes 1D são obtidas através da equação

$$\cos(kd) = \cos(Q_A d_a) \cos(Q_B d_b) - \frac{1}{2} \left(\frac{\varepsilon_B Q_A}{\varepsilon_A Q_B} + \frac{\varepsilon_A Q_B}{\varepsilon_B Q_A} \right) \operatorname{sen}(Q_A d_a) \operatorname{sen}(Q_B d_b).$$
(4.29)

Uma importante característica da relação entre modos TE e TM é a dependência da mesma com o ângulo θ . Note que tanto (4.25) quanto (4.29) dependem de θ implicitamente através de Q_A e Q_B e que no caso em que a incidência é normal, isto é, $\theta = 0$ estas equações se tornam iguais, fazendo com que as bandas TE e TM sejam **degeneradas**. Para $\theta \neq 0$, porém, as bandas TE e TM podem ser completamente diferentes. Esta diferença é particularmente importante no contexto das super-redes dispersivas, onde a incidência oblíqua faz com que modos TE e TM se acoplem com diferentes graus de liberdade internos das camadas, como plasmons elétricos e magnéticos, por exemplo.



Figura 4.3: Mapeamento das diferentes possibilidades de combinações de sinais para ε e μ e dos materiais conhecidos por apresentar cada combinação [7].

4.2 SUPER-REDES DISPERSIVAS: NON-BRAGG GAPS

No capítulo sobre modelos de dispersão, vimos que a permissividade elétrica ε e a permeabilidade magnética μ de materiais dispersivos podem assumir valores tanto positivos como negativos, dependendo da frequência da onda que se propaga no meio. As diferentes possibilidades de combinações de sinais para ε e μ , bem como os materiais que podem apresentar cada combinação, estão resumidas na Fig. 4.2. Materiais pertencentes às regiões II e IV também são chamados de SNE e SNM, do inglês *single negative electric* e *single negative magnetic*, respectivamente, ambos classificados como SNG (*single negative*). Além disso, dielétricos convencionais (região I) são também chamados de DPS (*double positive*), enquanto que os metamateriais ópticos (região III), cujos índices de refração são negativos, são também chamados de DNG (*double* negative).

Até aqui, estudamos apenas super-redes compostas por camadas dielétricas alternadas (DPS-DPS), nas quais vimos que a estrutura de bandas apresenta gaps fotônicos que são gerados pela periodicidade do índice de refração do sistema, os chamados gaps de Bragg. Com a inserção de materiais dispersivos, porém, podemos passar à análise de

Camada	Material	ε е μ	Parâmetros
А	Ar	$\varepsilon_A = 1$ $\mu_A = 1$	$d_a = 12 mm$
В	Metamaterial tipo Drude-Lorentz	$\varepsilon_B = \varepsilon_0 - \frac{v_e^2}{v^2}$ $\mu_B = \mu_0 - \frac{v_m^2}{v^2}$	$d_b = 12 mm$ $\epsilon_0 = 1.21$ $\mu_0 = 1.00$ $\nu_e = 3.00 \text{ GHz}$ $\nu_m = 3.00 \text{ GHz}$

Tabela 4.1: Conjunto de parâmetros utilizados no cálculo das estruturas de bandas apresentadas na Fig.4.4.

outros tipos de super-redes, como as DNG-DPS, SNG-SNG e etc., que podem apresentar outros tipos de gaps fotônicos, geralmente chamados de non-Bragg gaps [13]. Nesta seção, estudamos as estruturas de bandas de super-redes compostas de diferentes combinações de materiais dispersivos, explorando, assim, os diferentes non-Bragg gaps que podem surgir neste contexto.

Comecemos por estudar super-redes que podem se comportar como DPS-DPS ou DPS-DNG, dependendo da região analisada do espectro de frequências. Mostramos na Fig.4.4 a estrutura de bandas TE de uma super-rede unidimensional com camadas A e B constituídas de ar e metamaterial tipo Drude-Lorentz, respectivamente. A permissividade e a permeabilidade de cada material são apresentadas no painel esquerdo da Fig.4.4 como uma função da frequência, e o conjunto de parâmetros utilizado está descrito na tabela 4.1.

É possível identificar, na Fig.4.4, três tipos diferentes de gap fotônico. Em ordem decrescente de frequência, temos primeiro um gap que surge em uma região do espectro na qual os ε 's e μ 's de ambas as camadas são positivos. Como isso implica que os índices de refração n_a e n_b sejam positivos nesta região, podemos identificar o referido gap como um gap de Bragg.

Em seguida, vemos um gap (n=2) que surge apenas quando a luz se propaga obliquamente às interfaces ($\theta = \pi/6$ neste exemplo). É possível perceber, além disso, que este gap é aberto em torno da frequência que satisfaz $\mu_B(\nu) = 0$, que de acordo com a tabela 4.1, é a frequência de plasma magnético $\nu_{m,p} = \frac{\nu_m}{\sqrt{\mu_0}}$ do material das camadas B. Este gap, portanto, pode ser associado ao acoplamento entre a onda eletromagnética que se propaga no sistema e os modos de plasmons longitudinais das camadas B



Figura 4.4: Estrutura de bandas TE de uma super-rede com camadas alternadas A e B compostas de ar e metamaterial tipo Drude-Lorentz, respectivamente, para incidência normal (painel central) e incidência oblíqua, com $\theta = \pi/6$ (painel direito). No painel esquerdo são mostrados ε_a e μ_a (linha sólida), assim como ε_b (linha tracejada) e μ_b (linha pontilhada) em função a frequência $\nu = \omega/2\pi$.

[14]. Em outras palavras, o gap surge em função da excitação de plasmon-polaritons longitudinais, e é chamado, portanto, de plasmon-polariton gap.

O fato de o plasmon-polariton gap surgir apenas quando a propagação é oblíqua pode ser entendido em termos da direcionalidade do campo magnético da onda incidente. No caso de modos TE, como pode ser visualizado na Fig.4.1, apenas com $\theta \neq 0$ é possível ter uma componente longitudinal do campo magnético não nula, e portanto apenas nesta condição é possível haver o acoplamento da onda incidente com os modos de plasmons longitudinais [12]. No caso de modos TM, semelhantemente, o plasmon-polariton gap abre em torno de $v_{e,p} = \frac{v_e}{\sqrt{\varepsilon_0}}$, a frequência que satisfaz $\varepsilon_B(v) = 0$, e a necessidade de incidência oblíqua para a abertura do gap está relacionada com o fato de que apenas sob esta condição a onda apresenta uma componente longitudinais das camadas B.

Na região do espectro abaixo do plasmon-polariton gap, a super-rede passa a ser do tipo DPS-DNG, isto é, ε_B e μ_B se tornam simultaneamente negativos, enquanto ε_A e μ_A continuam positivos, fazendo com que tenhamos $n_B < 0$ e $n_A > 0$. Dentro desta região, portanto, é possível que a média volumétrica do índice de refração da super-rede, definida como

$$\langle n \rangle = \frac{n_A d_a + n_B d_b}{d},\tag{4.30}$$

se anule para alguma frequência, condição satisfeita quando

$$n_A = -n_B \frac{d_b}{d_a}.\tag{4.31}$$

No caso da super-rede da Fig.4.4, por exemplo, esta frequência é dada por $\nu \approx 2.1 \, GHz$, frequência esta que, curiosamente, aparenta ser a frequência central de um gap fotônico.

Este gap, nomeado com o índice n=1, é também chamado $\langle n \rangle$ =0 gap ou zero- $\langle n \rangle$ gap [29], pelos motivos acima expostos. Um ponto importante a ser notado diz respeito à equação (4.31). Note que, de acordo com a mesma, a frequência que satisfaz $\langle n \rangle = 0$ depende apenas da razão d_b/d_a , e não do tamanho de cada camada especificamente. Veremos mais adiante que esta insensibilidade a certas variações na geometria da super-rede é característica dos non-Bragg gaps de maneira geral.

Em resumo, vimos que, no sistema da Fig.4.4, há regiões do espectro nas quais os períodos A-B são do tipo DPS-DPS e também do tipo DPS-DNG, nas quais se manifestam os gaps de Bragg, o plasmon-polariton gap e também o zero- $\langle n \rangle$ gap. Para analisarmos as características da propagação de ondas eletromagnéticas em sistemas



Figura 4.5: Estrutura de bandas TE de uma super-rede com camadas alternadas A e B compostas de material polaritônico e metamaterial tipo Drude-Lorentz, respectivamente, para incidência normal (painel central) e incidência oblíqua com $\theta = \pi/6$ (painel direito). No painel da esquerda são mostradas as permissividades e permeabilidades de ambas as camadas, ε_a e μ_a com linhas tracejada e sólida, respectivamente, enquanto que ε_b está representada pela linha pontilhada, e μ_b pela linha dot-dashed (traço e ponto).

tipo SNG-SNG, apresentamos, na Fig.4.5, a estrutura de bandas de uma super-rede com camadas alternadas A e B compostas, respectivamente, por material polaritônico e metamaterial tipo Drude-Lorentz. Os parâmetros utilizados no cálculo da Fig.4.5 estão descritos na tabela 4.2 [17].

Note que, como anteriormente, há uma região na qual a super-rede é do tipo DPS-DNG, onde vemos o zero- $\langle n \rangle$ gap (n=1). Nota-se também a abertura do plasmon polariton gap (n=3) no entorno da frequência que satisfaz $\mu_b = 0$. No entanto, neste exemplo há também uma pequena região próxima de $\nu = 2.5 THz$ na qual as camadas B são do tipo SNM enquanto as camadas A são tipo SNE, onde é possível observar

Camada	Material	ε e μ	Parâmetros
А	Material Polaritônico	$\varepsilon_A = \varepsilon_{\infty} \left(\frac{\nu^2 - \nu_L^2}{\nu^2 - \nu_T^2} \right)$ $\mu_A = 1$	$d_a = 12 \mu m$
			$\varepsilon_{\infty} = 3.00$
			$\nu_L = 2.55THz$
			$\nu_T = 1.91 THz$
В	Metamaterial tipo Drude-Lorentz	$\varepsilon_B = \varepsilon_0 - \frac{v_e^2}{v^2}$ $\mu_B = \mu_0 - \frac{v_m^2}{v^2}$	$d_b = 12 \mu m$
			$\epsilon_0 = 1.21$
			$\mu_0 = 1.00$
			$\nu_e = 2.30 \text{ THz}$
			$v_m = 3.50 \text{ THz}$

Tabela 4.2: Conjunto de parâmetros utilizados no cálculo das estruturas de bandas apresentadas na Fig.4.5.

também a abertura de um terceiro non-Bragg gap (n=2), mostrado em detalhes nos insets da Fig.4.5 nos paineis central e direito.

A abertura deste gap pode ser entendida de acordo com a eq. (2.3), i.e.,

$$n = \sqrt{\varepsilon}\sqrt{\mu}.\tag{4.32}$$

No caso em que ε e μ têm sinais diferentes, o índice de refração se torna imaginário, fazendo com que o vetor de onda também o seja, levando, portanto, ao decaimento exponencial de ondas eletromagnéticas que se propagam no meio. Sendo assim, se em uma dada região do espectro de frequências ambas as camadas são SNG, então o índice de refração é imaginário em toda a super-rede, levando à não-existência de modos propagantes e à consequente abertura de um gap nesta região.

Vale ressaltar, porém, que é possível haver propagação na região SNG-SNG [16], mas apenas em circunstâncias específicas. É possível mostrar que muito embora as ondas eletromagnéticas sejam evanescentes em super-redes deste tipo, pode haver o acoplamento dos campos localizados em interfaces vizinhas, gerando a periodicidade necessária para a geração de estados de Bloch na super-rede e o consequente fechamento do gap n=2. Como veremos mais adiante, este fenômeno está relacionado à anulação de uma fase, chamada de **fase efetiva** ϕ_{eff} , adquirida pela onda ao se propagar em um período do cristal, e por isso o gap n=2 é comumente chamado de **zero-\phi_{eff} gap** [16, 15].



Figura 4.6: Dependência dos perfis dos gaps fotônicos da estrutura de bandas TE apresentada na Fig.4.4 com o ângulo θ . O zero- $\langle n \rangle$ gap, o plasmon polariton gap e o gap de Bragg estão nomeados com os índices n=1, n=2 e n=3, respectivamente. A linha tracejada horizontal representa a frequência de plasma magnético, $v_{m,p} = \frac{v_m}{\sqrt{\mu_0}}$ [12].

4.3 CARACTERÍSTICAS GERAIS DOS NON-BRAGG GAPS

Os três non-Bragg gaps apresentados na seção anterior, o zero- $\langle n \rangle$ gap, zero- ϕ_{eff} gap e plasmon polariton gap têm sido estudados extensivamente na literatura, e um considerável número de aplicações podem ser relacionadas à exploração de suas propriedades. Ao longo desta seção, exploramos as principais características de cada um destes gaps, como as variações dos mesmos diante de mudanças de escala e/ou das larguras d_a e d_b e até mesmo do ângulo de incidência θ . Como mencionamos anteriormente, o comportamento dos non-Bragg gaps diante destes tipos de mudanças na geometria do sistema são fatores chave para a diferenciação entre os mesmos e os gaps de Bragg.

Na Fig. 4.6 mostramos como os gaps que aparecem na Fig.4.4 [12] variam com o ângulo θ , por exemplo. Note que, diante da variação do ângulo θ , o gap de Bragg muda tanto de posição (em frequência) quanto de largura, como foi também observado com relação à variação da escala do sistema na Fig.4.2. Já o plasmon-polariton gap, apesar de aumentar juntamente com o ângulo de incidência, tem seu limite inferior limitado à frequência de plasma magnético $v_{m,p} = \frac{v_m}{\sqrt{\mu_0}}$. O comportamento crescente da



Figura 4.7: Dependência dos perfis dos gaps fotônicos das estruturas de bandas (a) TM e (b) TE da super-rede analisada na Fig. 4.5, considerando $d_a = 24 \,\mu m$ e $d_b = 12 \,\mu m$ [17].

largura deste gap com o crescimento de θ pode ser entendido como uma consequência do inerente aumento da componente longitudinal do campo magnético e portanto de sua interação com os modos de plasmons magnéticos longitudinais na super-rede.

Além disso, note que o zero- $\langle n \rangle$ é aproximadamente independente do ângulo θ , o que evidencia a diferença na origem física dos mencionados gaps. Ainda nesta direção, podemos repetir a análise da dependência dos gaps com θ para a super-rede da Fig. 4.5, como mostra a Fig. 4.7 [12]. Nela, vemos que novamente o zero- $\langle n \rangle$ gap é praticamente independente do ângulo, para ambas as polarizações, e que o plasmon-polariton gap, nas bandas TE, tem sua posição limitada aos entornos de $\nu = \nu_{m,p}$ e sua largura aumentada à medida que o ângulo cresce. Por outro lado, nas bandas TM observa-se o aparecimento **phonon-polariton gap**, assim denominado pelo fato de estar relacionado com o acoplamento entre o campo elétrico longitudinal e os modos de phonons longitudinais da super-rede. Veja que o phonon-polariton gap, de modo semelhante ao plasmon-polariton gap nas bandas TE, aumenta conforme o ângulo cresce, mas com sua posição delimitada aos entornos da frequência que satisfaz $\varepsilon(\nu) = 0$, que no caso é $\nu = \nu_L$. Quanto ao zero- ϕ_{eff} gap, de modo semelhante ao zero- $\langle n \rangle$, observa-se que sua dependência com o ângulo de incidência é sutil quando comparada com os gaps de Bragg e plasmon-polariton.



Figura 4.8: Comportamento dos gaps zero- $\langle n \rangle$ e zero- ϕ_{eff} da super-rede estudada na Fig.4.5 em função (a) do fator de escala *s* e (b) da razão $\frac{d_a}{d_b}$ [17].

Em se tratando da geometria da super-rede, há pelo menos duas quantidades em relação às quais a análise da dependência dos gaps fotônicos é importante, a **razão** $\frac{d_a}{d_b}$ entre as larguras das camadas A e B, respectivamente, e o **fator de escala** *s*. A definição do fator de escala consiste em uma constante multiplicativa comum a d_a e d_b . Dados $d_{a,0}$ e $d_{b,0}$ iniciais, por exemplo, as larguras d_a e d_b após o aumento da escala por um fator *s* são dadas por

$$d_a = s d_{a,0}$$
 $e \quad d_b = s d_{b,0}.$ (4.33)

Note que a alteração da escala do sistema não altera a razão $\frac{d_a}{d_b}$, uma vez que esta é determinada pelas larguras iniciais $d_{a,0}$ e $d_{b,0}$

$$\frac{d_a}{d_b} = \frac{s \, d_{a,0}}{s \, d_{b,0}} = \frac{d_{a,0}}{d_{b,0}}.\tag{4.34}$$

A Fig.4.2 mostra um exemplo de como os gaps de Bragg se comportam diante de uma variação da escala do sistema, onde se pode observar que as frequências dos modos harmônicos são inversamente proporcionais ao fator de escala. Em geral, é possível mostrar que, para sistemas dielétricos e não dispersivos, vale a relação [2]

$$d_{a(b)} \to s \, d_{a(b)} \implies \omega(k) \to \frac{\omega(k)}{s}.$$
 (4.35)



Figura 4.9: Perfis dos gaps de Bragg da super-rede analisada na Fig.4.2 em função da razão de d_b para d_a fixo e igual a 5 mm [28].

Embora o efeito da variação de escala seja simples para os gaps de Bragg, o mesmo não é verdade para os non-Bragg gaps. Na Fig. 4.8, apresentamos o comportamento dos gaps zero- $\langle n \rangle$ e zero- ϕ_{eff} da estrutura de bandas da super-rede estudada na Fig. 4.5 em função do fator de escala e da razão $\frac{d_a}{d_b}$. Note que, de maneira bastante diferente dos gaps de Bragg, o zero- ϕ_{eff} é aproximadamente independente do fator de escala, e que o zero- $\langle n \rangle$, apesar de ter sua largura inversamente proporcional ao fator de escala, oscila em função do mesmo, chegando a ser nulo para alguns valores de *s*.

Com relação à razão d_A/d_b , note que mais uma vez os gaps zero- $\langle n \rangle$ e zero- ϕ_{eff} diferem consideravelmente dos gaps de Bragg, como sugerem as Figs. 4.8 e 4.9, referentes às super-redes das Figs. 4.5 e 4.2, respectivamente. Além disso, observe na Fig. 4.8(b) há o fechamento do zero- ϕ_{eff} gap em $\nu \approx 2.5 THz$, o que, como mencionado na seção anterior, indica a existência de um modo harmônico na região do especro de frequências na qual ondas eletromagnéticas são evanescentes em ambas as camadas da super-rede.

5 ORIGEM FÍSICA DOS NON-BRAGG GAPS

Vimos nos capítulos anteriores que a introdução de materiais dispersivos em superredes fotônicas unidimensionais torna possível o surgimento de variados gaps fotônicos, como os gaps de Bragg e também os gaps zero- $\langle n \rangle$, zero- ϕ_{eff} e plasmon-polariton, sendo os três últimos conhecidos genericamente como non-Bragg gaps. Estudamos as condições necessárias para o surgimento de cada non-Bragg gap e também algumas de suas peculiaridades, tais como a dependência de seus perfis com o ângulo de incidência, o fator de escala e a razão entre as larguras das camadas A e B. Até agora, porém, não entramos nos detalhes dos mecanismos físicos responsáveis pelos diferentes gaps fotônicos citados

Neste capítulo, buscamos justamente uma melhor compreensão dos fenômenos dos non-Bragg gaps. Para isso, exploramos em mais detalhes as estruturas de bandas obtidas através do Método da Matriz de Transferência, reescrevendo os resultados dos capítulos anteriores em função de variáveis mais convenientes ao tratamento analítico deste tipo de problema, tais como as **impedâncias generalizadas** e o **caminho óptico generalizado**, por exemplo. Visando entender melhor os resultados obtidos, calculamos também a distribuição espacial dos campos elétricos e magnéticos para diferentes modos harmônicos das super-redes e comparamos com as informações contidas em seus **espectros de transmissão e reflexão**.

Nesta nova análise vemos que é possível separar os non-Bragg gaps em duas classes: aqueles cujas origens estão relacionadas à geometria e/ou simetria da super-rede, e os que surgem devido exclusivamente às características da dispersão em frequência dos materiais que a compõem. Por fim, apresentamos também a reformulação dos principais pontos desta análise para super-redes contendo Split-Ring Resonators (SRRs), com a finalidade de localizar os resultados obtidos em um contexto mais próximo da realidade.

5.1 IMPEDÂNCIAS GENERALIZADAS E A FUNÇÃO G (ν)

Sabemos que de acordo com o Método da Matriz de Transferência a estrutura de bandas de uma super-rede fotônica genérica pode ser obtida pela solução da equação (4.29), a saber

$$\cos(kd) = \cos(Q_A d_a)\cos(Q_B d_b) - \frac{1}{2}\left(\frac{\mu_B Q_A}{\mu_A Q_B} + \frac{\mu_A Q_B}{\mu_B Q_A}\right)\sin(Q_A d_a)\sin(Q_B d_b).$$

Observe que o termo entre parênteses pode ser reescrito como

$$\left(\frac{\mu_B Q_A}{\mu_A Q_B} + \frac{\mu_A Q_B}{\mu_B Q_A}\right) = \left(\frac{\frac{\mu_B}{Q_B}}{\frac{\mu_A}{Q_A}} + \frac{\frac{\mu_A}{Q_A}}{\frac{\mu_B}{Q_B}}\right),$$
(5.1)

e que a razão μ/Q pode ser identificada como uma **impedândia generalizada**

$$Z = \frac{\mu}{Q} = \frac{\sqrt{\mu}}{\sqrt{\epsilon}\sqrt{1 - \frac{\mathrm{sen}^2\theta}{n^2}}},\tag{5.2}$$

que se reduz à definição usual de impedância $Z = \sqrt{\mu}/\sqrt{\varepsilon}$ para $\theta = 0$. Assim sendo, podemos reescrever (4.29) como

$$\cos(kd) = \cos(Q_A d_a) \cos(Q_B d_b) - \frac{1}{2} \left(\frac{Z_A}{Z_B} + \frac{Z_B}{Z_A}\right) \sin(Q_A d_a) \sin(Q_B d_b), \quad (5.3)$$

onde Z_A e Z_B são as impedâncias generalizadas das camadas A e B, respectivamente.

Podemos seguir mais adiante observando que os produtos de senos e cossenos em (4.29) podem ser reescritos de acordo com as identidades

$$\cos(a).\cos(b) = \frac{1}{2}.\left[\cos(a+b) + \cos(a-b)\right]$$
 (5.4)

e

$$sen(a).sen(b) = \frac{1}{2}.[cos(a+b) - cos(a-b)],$$
 (5.5)

de modo que (5.3) pode ser reescrita como

$$\cos(kd) = \cos(Q_A d_a + Q_B d_b)[1 + G(\nu)] - G(\nu)\cos(Q_A d_a - Q_B d_b),$$
(5.6)

onde definimos a função G(v), tampém conhecida como "impedance mismatching function", como

$$G(\nu) = \frac{1}{4} \left(\frac{Z_A}{Z_B} + \frac{Z_B}{Z_A} - 2 \right).$$
 (5.7)

Notamos que $G(\nu) = 0$ quando ocorre o casamento entre impedâncias $Z_A = Z_B$.

Observamos ainda que as impedâncias generalizadas e a função G(v) são independentes da geometria da super-rede, uma vez que d_a e d_b não aparecem em suas definições. Como veremos a seguir, estas quantidades contém informações sobre a interação entre as ondas eletromagnéticas e as propriedades intrínsecas dos materiais de cada camada da super-rede em questão.

5.2 CAMINHO ÓPTICO GENERALIZADO E A CONDI-ÇÃO DE BRAGG

Lembramos primeiramente que o caminho óptico de uma onda que se propaga por uma distância L em um meio homogêneo de índice de refração *n* é dado por

$$\Delta S = n L, \tag{5.8}$$

e representa a evoluçao espacial da fase da onda conforme esta se propaga, isto é, o campo elétrico da mesma evolui da forma

$$\mathbf{E}(\mathbf{r} + L\,\hat{\mathbf{L}}) = e^{i\frac{\omega}{c}\,n\,L}\mathbf{E}(\mathbf{r}) = e^{ikL},\tag{5.9}$$

onde $k = \frac{\omega}{c}n$ é o vetor de onda da onda em questão.

De modo semelhante, notamos que a evolução da fase de uma onda eletromagnética através de um período da super-rede é dada por

$$\frac{\omega}{c}\frac{\Delta S}{2} = Q_A d_a + Q_B d_b \tag{5.10}$$

e que portanto a diferença de caminho óptico entre as ondas refletidas no começo de períodos vizinhos é dada por ¹

$$\Delta S = \frac{2c}{\omega} (Q_A d_a + Q_B d_b), \tag{5.11}$$

que de acordo com (4.10) pode ser reescrita como

$$\Delta S = 2\left(n_A d_a \sqrt{1 - \frac{\operatorname{sen}^2 \theta}{n_A^2}} + n_B d_b \sqrt{1 - \frac{\operatorname{sen}^2 \theta}{n_B^2}}\right).$$
(5.12)

¹ Nesta conclusão, leva-se em conta que ondas eletromagnéticas sofrem inversão de fase ao passarem de um meio para outro com índice de refração maior [19]

O ΔS assim definido é também chamado de **caminho óptico generalizado**, e como mencionado anteriormente, representa a diferença de caminho óptico entre ondas refletidas nas interfaces de períodos vizinhos. Note que de modo semelhante à impedância generalizada, o caminho óptico generalizado se reduz ao caminho óptico convencionalmente definido como (5.8) quando θ = 0. Usando (5.10), a equação (5.6) pode ser reescrita em termos de ΔS como

$$\cos(kd) = \cos(\frac{\omega}{c}\frac{\Delta S}{2})[1 + G(\nu)] - G(\nu)\cos(Q_A d_a - Q_B d_b).$$
(5.13)

5.3 ZERO- $\langle n \rangle$ GAP E GAPS DE BRAGG

Com a estrutura de bandas sendo determinada indiretamente pela solução de (5.13), podemos inferir a relação entre o caminho óptico generalizado e o surgimento de gaps fotônicos. Para tanto, note primeiramente que a condição de não-existência de modos harmônicos para uma dada frequência e a consequente localização desta frequência dentro de um gap pode ser escrita como

$$|\cos(kd)| > 1, \tag{5.14}$$

situação na qual o vetor de onda *k* assume valores imaginários e as ondas eletromagnéticas na super-rede são evanescentes. Suponha agora que o argumento do primeiro cosseno no lado direito de (5.13) seja um múltiplo inteiro de π

$$\frac{\omega}{c}\Delta S = 2m\pi \qquad m = 1, 2... \tag{5.15}$$

Neste caso, (5.13) se torna

$$\cos(kd) = \pm \{1 + G(\nu)[1 - \cos(2Q_A d_a)]\}, \qquad (5.16)$$

que satisfaz a condição (5.14) dado que $G(\nu) > 0$.

Há pelo menos duas situações importantes nas quais as equações (5.15) e (5.16) fornecem informações sobre a origem física de gaps fotônicos. Uma delas é quando na frequência ν analisada a super-rede é DPS-DPS ou DNG-DNG. Neste caso, temos, de acordo com (5.2) e (5.7), que $G(\nu) > 0$ e que, consequentemente, o cumprimento de (5.15) implica no surgimento de um gap fotônico. Para identificar o referido gap, vamos analisar o significado da condição (5.15). Vimos que a quantidade no lado

direito da equação (5.15) representa a diferença de fase entre ondas refletidas no início de períodos vizinhos. Neste sentido, a condição (5.15) é uma maneira de escrever a **condição de Bragg** para interferência construtiva entre ondas de mesma frequência. Podemos interpretar este gap, portanto, como um gap de Bragg, sendo este gerado a partir de um mecanismo de interferência que amplifica as ondas refletidas nas interfaces em detrimento das transmitidas pelas mesmas.

A segunda situação é quando (5.15) é satisfeita para uma frequência na qual a superrede é DNG-DPS. Neste caso, temos novamente que $G(\nu) > 0$ e que portanto a condição (5.14) é cumprida, indicando que a frequência analisada pertence a um gap fotônico. Com isso, temos também que a interpretação do gap em termos da condição de Bragg é válida, sendo este, portanto, causado pelo mecanismo da interferência. Muito embora a física dos gaps nesta região do espectro aparente ser semelhante àquela descrita anteriormente, é possível mostrar que há uma diferença importante, e ela diz respeito ao valor do inteiro *m* na equação (5.15).

Para as super-redes DPS-DPS e DNG-DNG, de acordo com (5.12), não é possível satisfazer (5.15) com m = 0, uma vez que n_A e n_B têm sinais iguais. Isto deixa de ser verdade para super-redes DPS-DNG, uma vez que estas apresentam n_A e n_B com sinais diferentes neste caso. Sendo assim, é exclusivo da região DNG-DPS do espectro de super-redes fotônicas, o gap que surge em função da condição

$$\Delta S = 0, \tag{5.17}$$

isto é, que surge em função de um caminho óptico generalizado nulo. No caso de incidência normal isto significa que obtemos a seguinte equação, após substituirmos (5.17) em (5.12):

$$n_A d_a + n_b d_b = 0. (5.18)$$

Em outras palavras, o gap que está associado ao valor nulo do caminho óptico generalizado é o zero- $\langle n \rangle$ gap!

Podemos, entretanto, tentar entender com mais profundidade o significado de um caminho óptico nulo. Para entendermos o significado do zero- $\langle n \rangle$ gap e a origem da diferença entre ele e os gaps de Bragg, precisamos analisar a evolução espacial dos campos em cada camada separadamente. Primeiramente, devemos lembrar de que em um material DPS, um dielétrico convencional, o vetor de onda aponta na direção de propagação da onda, de modo que sua fase aumenta conforme a onda se propaga. Em um material DNG, no entanto, a situação é oposta, no sentido de que o vetor de onda

aponta no sentido contrário ao da propagação, sendo a sua fase diminuída conforme a onda se propaga. Quando combinamos uma camada DPS com uma camada DNG, é possível que o ganho de fase na camada DPS seja compensado pela perda da mesma na camada DNG, fazendo com que a fase da onda não mude quando a mesma se propaga por um número inteiro de períodos. Em outras palavras, este "travamento" da fase na frequência que satisfaz (5.18) faz com que o caminho óptico seja nulo, muito embora o caminho físico percorrido pela frente de onda não o seja.

5.4 PLASMON-POLARITON GAP

Até aqui, exploramos os gaps que estão relacionados com o caminho óptico generalizado ΔS , que depende tanto das características intrínsecas dos materiais da super-rede quanto dos parâmetros geométricos da mesma. Nesta seção, passamos a analisar os gaps fotônicos cuja origem física não está relacionada com a geometria da super-rede, mas apenas com os graus de liberdade internos das camadas, que estão descritos indiretamente pela função $G(\nu)$. Começamos por reescrever (5.6) de uma maneira mais conveniente para os propósitos desta seção, ou seja,

$$\cos(kd) = \cos(Q_A d_a + Q_B d_b) + G(\nu)[\cos(Q_A d_a + Q_B d_b) - \cos(Q_A d_a - Q_B d_b)].$$
(5.19)

Como mencionado anteriormente, é esperado que surja um gap fotônico para frequências nas quais o lado direito de (5.19) satisfaz a condição (5.14). Este é o caso, por exemplo, quando há uma divergência na função $G(\nu)$

$$G(\nu) \to \infty$$
, (5.20)

uma vez que neste caso o lado direito de (5.19) diverge, excetuando-se a situação na qual também é satisfeita a condição

$$\cos(Q_A d_a + Q_B d_b) = \cos(Q_A d_a - Q_B d_b). \tag{5.21}$$

Note que, de acordo com (5.7) e (5.2), para que (5.20) seja satisfeita é necessário que

$$\mu_i = 0 \tag{5.22}$$

ou, em caso de incidência normal,

$$\varepsilon_i = 0 \tag{5.23}$$

para i=A,B, uma vez que nestes casos a impedância Z_i se anula ou diverge, respectivamente. No entanto, veja que, de acordo com (4.10), se (5.22) ou (5.23) são satisfeitas para a camada *i*, então, a menos que $\theta \neq 0$, temos

$$Q_i = 0 \tag{5.24}$$

e portanto a condição (5.21) também é satisfeita, indicando que um gap fotônico não é aberto nesta frequência. Para $\theta \neq 0$, porém, a condição (5.21) não é satisfeita quando (5.22) também o é, e portanto um gap fotônico deve surgir nesta frequência. Note também que para $\theta \neq 0$ a condição (5.23) não implica na divergência de $G(\nu)$, e consequentemente não está relacionada com a abertura de um gap.

Vemos, portanto, que o gap acima mencionado é aberto na frequência para a qual $\mu_i = 0$, mas apenas quando a incidência é oblíqua. Assim sendo, podemos identifica-lo como o plasmon-polariton gap. Vale ressaltar que as considerações acima são válidas exclusivamente para modos TE. Lembre-se de que, para modos TM, o plasmon-polariton gap abre na frequência que satisfaz $\varepsilon_i = 0$, condição esta que pode também ser deduzida de acordo com os passos utilizados neste capítulo, mas a partir da equação (4.29) em vez da (4.25).

5.5 ZERO- ϕ_{eff} GAP

Analisemos agora a região do espectro na qual a super-rede em questão é SNG-SNG. Por simplicidade, consideraremos θ = 0 nesta seção. De acordo com a equação (4.10) para θ = 0

$$Q=\frac{\omega}{c}\sqrt{\varepsilon}\sqrt{\mu},$$

quando μ e ε possuem sinais diferentes, o vetor de onda Q é puramente imaginário

$$Q = i|Q| = i\frac{\omega}{c}\sqrt{|\varepsilon\mu|}.$$
(5.25)

Com isso, podemos reescrever (4.25) como

$$\cos(kd) = \cosh(|Q_A|d_a + |Q_B|d_b)[1 + G(\nu)] - G(\nu)\cosh(|Q_A|d_a - |Q_B|d_b),$$
(5.26)

onde usamos a propriedade

$$\cos(i|x|) = \cosh(|x|). \tag{5.27}$$

Note que é possível reescrever (5.26) como

$$\cos(kd) = \cosh(|Q_A|d_a + |Q_B|d_b) + \delta G(\nu), \qquad (5.28)$$

onde

$$\delta = \cosh(|Q_A|d_a + |Q_B|d_b) - \cosh(|Q_A|d_a - |Q_B|d_b)$$
(5.29)

é uma quantidade sempre não-negativa. De (5.28), vemos que não há solução real para k em frequências para as quais G(v) > 0, uma vez que o lado direito desta mesma equação é sempre maior do que 1. Para levarmos em consideração os valores negativos de G(v), precisamos estabelecer primeiro quais são os possíveis valores que esta função pode assumir, o que pode ser feito se olharmos para a definição (5.7)

Primeiramente, note que na região do espectro que estamos considerando nesta seção, as impedâncias generalizadas podem ser escritas como

$$Z_i = \pm i \frac{\sqrt{|\mu|}}{\sqrt{|\varepsilon|}} , \qquad (5.30)$$

onde o sinal positivo (negativo) é referente ao caso em que $\mu_i(\varepsilon_i)$ é negativo. Assim sendo, é possível notar que a condição necessária para que $G(\nu)$ seja negativa é que Z_A e Z_B tenham sinais diferentes, ou, equivalentemente

$$\varepsilon_A \cdot \varepsilon_b < 0 \qquad e \qquad \mu_A \cdot \mu_B < 0 \ . \tag{5.31}$$

Neste caso, podemos re-escrever (5.7) como

$$G(\nu) = -\frac{1}{4} \left(\frac{|Z_A|}{|Z_B|} + \frac{|Z_B|}{|Z_A|} + 2 \right) , \qquad (5.32)$$

de onde se pode ver que $G(\nu) \le -1$ dado que (5.31) é satisfeita. Com isso, podemos ver, a partir de (5.28), que existe apenas uma possibilidade de *k* real na região SNG-SNG do espectro, que é descrita pelas condições

$$G(\nu) = -1$$
 (5.33)

e

$$|Q_A|d_a - |Q_B|d_b = 0, (5.34)$$

que, se satisfeitas, fazem com que (5.28) se torne

$$\cos(kd) = 1, \tag{5.35}$$

indicando a existência de um modo harmônico no centro da zona de Brillouin.

Veja ainda que, no presente contexto, a condição (5.33) pode ser entendida de acordo com as impedâncias, uma vez que

$$G(\nu) = -1 \Rightarrow Z_A = Z_B^* , \qquad (5.36)$$

onde Z_B^* é o complexo conjugado de Z_B . Em outras palavras, uma das condições para o fechamento do gap na região SNG-SNG é o **casamento de impedâncias**, como apresentado em (5.36). A segunda condição, dada por (5.34), também pode ser entendida de maneira mais intuitiva. Para isso, note que a quantidade $|Q_i|d_i$ (*i*=A,B) denota o decaimento exponencial ($e^{-i|Q_i|d_i}$) da amplitude da onda eletromagnética que se propaga ao longo de uma camada *i*. Assim, podemos entender (5.34) como a condição de que o decaimento da amplitude da onda a partir de uma interface seja igual em ambas as camadas, fazendo com que a amplitude seja a mesma nas extremidades dos diferentes períodos, satisfazendo portanto o teorema de Bloch, requerido pela simetria da superrede.

Podemos ainda definir

$$\phi_{eff} = |Q_A|d_a - |Q_B|d_b \tag{5.37}$$

como a **fase efetiva** adquirida pela onda ao atravessar um período da super-rede, de modo que (5.34) se torna

$$\phi_{eff} = 0. \tag{5.38}$$

Em resumo, podemos dizer que existe um gap na região SNG-SNG do espectro, devido ao fato de as camadas A e B serem opacas nesta região. Pode haver, no entanto, o fechamento deste gap em função da existência de um modo harmônico nesta região de frequência, o que só pode acontecer diante do casamento de impedâncias (5.36) e do anulamento da fase efetiva (5.38), condições estas que são necessárias para que os campos na super-rede, apesar de evanescentes, satisfaçam o teorema de Bloch para *k* real. Podemos, portanto, identificar este gap como o zero- ϕ_{eff} gap.

Um detalhe importante sobre a existência de um modo harmônico na região do espectro em que ambas as camadas são opacas, é que este fenômeno é análogo ao transporte de elétrons fortemente ligados em sólidos cristalinos [16]. Neste último caso, porém, é a função de onda eletrônica que decai exponencialmente a partir das posições dos diferentes sítios, mas a superposição entre os orbitais localizados em sítios vizinhos torna possível a passagem do elétron de um sítio a outro.



Figura 5.1: (a) Partes real e imaginária da função $G(\nu)$, (b) caminho óptico generalizado e fase efetiva da super-rede analisada na Fig.4.5. Estrutura de bandas TE para (c) incidência normal e (d) incidência oblíqua, com $\theta = \pi/6$.

5.6 RESULTADOS

Nesta seção, apresentamos uma série de resultados que consistem na reinterpretação das estruturas de bandas fotônicas das diferentes super-redes estudadas ao longo deste trabalho, mas referenciadas às novas quantidades introduzidas neste capítulo, como a função $G(\nu)$, o caminho óptico generalizado ΔS e a fase efetiva ϕ_{eff} .

5.6.1 Super-rede material polaritônico/metamaterial tipo Drude

Como primeiro exemplo, mostramos na Fig. 5.1 a estrutura de bandas da super-rede analisada na Fig. 4.5, cujos parâmetros estão listados na tabela 4.2. Na Fig. 5.1 podemos identificar alguns dos argumentos explorados nas seções anteriores, comparando os resultados para $G(\nu)$, $\Delta S = \phi_{eff}$ com a estrutura de bandas TE do sistema. Primeiramente, note que, como esperado, o zero- $\langle n \rangle$ gap (n=1) é aberto no entorno da frequência que


Figura 5.2: Variação da largura do zero- ϕ_{eff} gap na Fig.5.1 em função da mudança das larguras das camadas da super-rede em questão. A linha pontilhada horizontal indica a frequência de casamento de impedâncias ($Z_A = Z_B^*$), enquanto que o triângulo em cada painel indica a frequência na qual a fase efetiva é anulada ($\phi_{eff} = 0$).

satisfaz $\Delta S = 0$. Em seguida, veja que o gap n=2, que identificamos no capítulo anterior como o zero- ϕ_{eff} gap, é aberto na região do espectro de frequências na qual a parte imaginária de G(v) é nula, enquanto sua parte real satisfaz $Re[G(v)] \leq -1$, como previsto na seção anterior. Os insets nos paineis (c) e (d) da Fig.5.1 mostram que este gap de fato existe, apesar de ser bastante estreito se comparado com os demais gaps.

Conforme discutimos na seção anterior, o fato de o zero- ϕ_{eff} gap existir na estrutura de bandas indica que as condições de casamento de impedâncias (5.36) e de anulamento da fase efetiva (5.38) não são satisfeitas *simultaneamente*. A Fig. 5.2 ilustra o mecanismo de fechamento do zero- ϕ_{eff} gap em função da variação das larguras das camadas. Note que, em todos os casos, o gap é aberto em torno da frequência de casamento de impedâncias, indicada pela linha tracejada na figura. O fechamento do gap, porém, ocorre apenas quando o anulamento da fase efetiva, que ocorre nas frequências indicadas pelos



Figura 5.3: Espectro de transmissão referente à super-rede finita composta por 200 dos períodos do sistema analisado na Fig.5.2.

triângulos azuis, acontece precisamente na frequência de casamento de impedâncias, como pode ser visto no exemplo descrito no painel (c) desta figura.

Este mecanismo também está ilustrado na Fig. 5.3, que mostra o espectro de transmissão de uma super-rede com 200 períodos iguais aos do sistema analisado nas figuras 5.1 e 5.2. É possível observar a assinatura do zero- ϕ_{eff} gap em todos os painéis, que se manifesta como um mínimo na transmissividade, exceto no painel (c), que corresponde à situação representada pelo painel (c) da Fig. 5.2.

Estes resultados também são corroborados pelos resultados ilustrados na Fig. 5.4, onde é mostrado o perfil espacial do campo elétrico [30], na frequência de casamento de impedâncias, ao longo de uma super-rede finita composta por 16 dos períodos que compõem os sistemas analisados nos paineis (a) e (c) das figuras 5.2 e 5.3. Note que, como previsto na seção anterior, o campo elétrico na região SNG-SNG do espectro de frequências é majoritariamente localizado nas interfaces da super-rede, decaindo exponencialmente a partir das mesmas. Note, porém, que na Fig. 5.4(b), caso no qual a condição (5.38) é satisfeita, o decaimento exponencial da amplitude do campo é igual



Figura 5.4: Perfil espacial do campo elétrico na frequência de casamento de impedâncias ν ≈ 2.489 *THz* para a super-rede compostas por 16 períodos iguas àqueles analisados nas figuras (a) 5.2(a) e (b) 5.3(c).

nas duas camadas, fazendo com que o campo seja periódico na super-rede, formando o modo harmônico ao qual nos referimos na seção anterior.

Por fim, também é possível observar, na Fig. 5.1, que o plasmon-polariton gap (n=3) é aberto em torno de uma frequência para a qual a função G(v) diverge, como esperado de acordo com os argumentos da seção anterior. Note também que, como esperado, a divergência de G(v) em $v = v_L = 2.55 THz$, frequência na qual $\varepsilon_A = 0$, não implica no aparecimento de um gap fotônico na estrutura de bandas TE, tanto para incidência normal quanto para incidência oblíqua.



Figura 5.5: Estrutura de bandas TE de uma super-rede composta por camadas alternadas de material polaritônico e de metamaterial tipo SRR, com os parâmetros listados na tabela 5.1, para (c) indicência normal e (d) indidência oblíqua a $\theta = \pi/6$. No painel (a) mostramos as partes real e imaginária da função $G(\nu)$, enquanto no painel (b) mostramos o módulo normalizado do caminho óptico generalizado $|\Delta S|$ e a fase efetiva ϕ_{eff} .

5.6.2 Super-rede material polaritônico/metamaterial tipo SRR

Levando em conta a necessidade da contextualização dos resultados aqui apresentados para situações mais próximas da realidade, consideramos também uma super-rede composta por camadas alternadas de material polaritônico (camadas A) e de um metamaterial tipo SRR (camadas B), que possui uma dispersão em frequência mais realista que a fornecida pelo modelo de Drude-Lorentz. Na Fig. 5.5 apresentamos a estrutura de bandas TE desta super-rede, utilizando os parâmetros listados na tabela 5.1.

Assim como no exemplo anterior, é possível, na Fig. 5.5, identificar os diferente non-Bragg gaps em função do comportamento de $G(\nu)$, $\Delta S \in \phi_{eff}$. Por exemplo, vemos que o gap n=3, que só é aberto para incidência oblíqua, ocorre em torno de uma frequência na qual $G(\nu)$ diverge, de modo que podemos identificá-lo como o plasmon-polariton gap. O gap n=2, por sua vez, é aberto em torno da frequência na qual $\Delta S = 0$, sendo este, portanto, identificado como o zero- $\langle n \rangle$ gap.

Camada	Material	ε e μ	Parâmetros
А	Material Polaritônico	$\varepsilon_A = \varepsilon_\infty \left(\frac{\nu^2 - \nu_L^2}{\nu^2 - \nu_T^2} \right)$	$d_a = 6 \mu m$
			$\varepsilon_{\infty} = 3.00$
		$\mu_A = 1$	$\nu_L = 2.55THz$
			$\nu_T = 1.91 THz$
В	Metamaterial tipo SRR	$\varepsilon_B = \varepsilon_0 - \frac{v_e^2}{v(v+i\gamma_e)}$ $\mu_B = \mu_0 - \frac{Fv^2}{v^2 - v_m^2 + i\gamma_m v}$	$d_b = 12 \mu m$
			$\epsilon_0 = 1.21$
			$\mu_0 = 1.00$
			$\nu_e = 4.0 \text{ THz}$
			$v_m = 3.0 \text{ THz}$
			F = 0.25
			$\gamma_e = \gamma_m = 0$

Tabela 5.1: Conjunto de parâmetros utilizados no cálculo das estruturas de bandas apresentadas na Fig. 5.5.

Uma diferença entre este exemplo e o anterior diz respeito ao zero- ϕ_{eff} gap (n=1). Observe na Fig. 5.5(a) que não há casamento de impedâncias ($G(\omega) = -1$) na região SNG-SNG do espectro, onde se localiza o zero- ϕ_{eff} gap. Assim sendo, não é possível alcançar a condição de gap nulo para o zero- ϕ_{eff} gap para alguma combinação específica de d_a e d_b , uma vez que isto requer que (5.36) e (5.38) sejam satisfeitas simultaneamente. A Fig. 5.6 mostra a variação do gap n=1 com a razão d_a/d_b , ilustrando o fato de não haver o fechamento deste gap no atual contexto.

Mostramos também na Fig. 5.7, o espectro de transmissão em função de θ para uma super-rede composta por 100 períodos de camadas A e B iguais àquelas consideradas no sistema da Fig. 5.5. Note que a largura do plasmon-polariton gap é evidentemente crescente em função do ângulo, o que está de acordo com os resultados apresentados no capítulo anterior

5.6.3 Dependência do zero- $\langle n \rangle$ gap com o fator de escala

Um outro resultado que pode ser obtido a partir do formalismo desenvolvido neste capítulo é a dependência do zero- $\langle n \rangle$ gap com o fator de escala (4.33), que já foi brevemente apresentada no capítulo anterior. Nesta subseção, apresentamos, para



Figura 5.6: Perfil do gap n=1 apresentado na Fig. 5.5 para $\theta = 0$ e $\theta = \pi/6$, representadas pela região sombreada e pela região delimitada pelas linhas tracejadas, respectivamente.



Figura 5.7: Transmissividade em função da frequência para uma super-rede composta de 100 períodos iguais àqueles do sistema da Fig. 5.5, para (a) $\theta = 0$, (b) $\theta = \pi/12$, (c) $\theta = \pi/6$ e (d) $\theta = \pi/3$. As áreas sombreadas mostram o aumento da largura do plasmon-polariton gap (n=3) com o crescimento do ângulo de incidência.



Figura 5.8: Perfil do zero- $\langle n \rangle$ gap em função do fator de escala *s* para as super-redes analisadas nas figuras (a) 5.1 e (b) 5.5 com θ = 0. Em cada painel, o resultado numérico é denotado pela região sombreada, enquanto que o resultado analítico está representado pelas linhas tracejadas.

incidência normal, a comparação entre os resultados numéricos para esta dependência e os resultados analíticos correspondentes, sendo estes baseados em uma expansão de (5.13) até segunda ordem em torno da frequência ν_0 que satisfaz (5.17).

De acordo com a expansão mencionada, que está detalhada no apêndice A.1, é possível mostrar que a largura do zero- $\langle n \rangle$ gap em uma super-rede DNG-DPS genérica é dada por

$$\Delta \nu = \alpha \frac{\sqrt{1 - \cos(\gamma s)}}{2\pi s},\tag{5.39}$$

onde

$$\gamma = (2Q_A d_{a,0})_{\nu = \nu_0} = (2Q_B d_{b,0})_{\nu = \nu_0}$$
(5.40)

e

$$\alpha = \left[\frac{c\sqrt{2}(Z_A - Z_B)/(Z_A + Z_B)}{\pi \nu d\langle n \rangle / d\nu}\right]_{\nu = \nu_0}$$
(5.41)

são quantidades independentes do fator de escala. Apresentamos na Fig. 5.8 os resultados numéricos e analíticos do perfil do zero- $\langle n \rangle$ gap como função do fator de escala para as duas super-redes analisadas nas figuras 5.1 e 5.5. É possível observar que os resultados analíticos, obtidos diretamente de (5.39), estão em bom acordo com os resultados numéricos para ambas as super-redes. Em particular, note que os valores de *s* para os quais o zero- $\langle n \rangle$ gap é nulo são previstos com excelente precisão a partir de (5.39). Isto se deve ao fato de a condição de gap nulo em (5.39), i.e.,

$$\cos(\gamma s) = \cos[(2Q_A d_a)_{\nu = \nu_0}] = 1, \tag{5.42}$$

ser precisamente a condição necessária para que (5.16) não satisfaça (5.14), situação na qual a condição (5.15) não implica no surgimento de um gap fotônico.

6 CONCLUSÕES E PERSPECTIVAS

Neste trabalho, apresentamos uma análise teórica da propagação de ondas eletromagnéticas em super-redes fotônicas unidimensionais compostas de camadas de materiais dispersivos. Diferentes modelos de dispersão foram considerados para as camadas, tais como o modelo de Drude-Lorentz para os metamateriais ópticos e o modelo clássico para materiais iônicos, que leva em conta o acoplamento entre a luz incidente e os modos de fônon da rede cristalina. Além destes, também consideramos o modelo de SRRs de Pendry [6], que representa um modelo mais realístico para os metamateriais ópticos.

Utilizando o Método da Matriz de Transferência, calculamos as estruturas de bandas, espectros de transmissão e perfis de campo elétrico referentes a super-redes com diferentes geometrias e composições. Vimos que a inserção de materiais dispersivos em cristais fotônicos da origem aos chamados non-Bragg gaps, que são gaps fotônicos provenientes de mecanismos físicos diferentes dos processos de interferência que originam os conhecidos gaps de Bragg. Mostramos, ainda, que são três os tipos de non-Bragg gaps, o zero- $\langle n \rangle$, o plasmon-polariton e o zero- ϕ_{eff} , e que cada um está relacionado a uma região específica do espectro de frequências, levando-se em conta os sinais das permissividades e permeabilidades das diferentes camadas nesta região.

Com a finalidade de entendermos melhor as origens físicas dos diferentes non-Bragg gaps, definimos novas quantidades, tais como as impedâncias generalizadas e o caminho óptico generalizado, que são mais convenientes que as convencionais permissividade elétrica e permeabilidade magnética para o tratamento analítico deste tipo de problema. Mostramos, por exemplo, que é possível definir a função $G(\omega)$, que depende apenas das impedâncias generalizadas dos materiais que constituem a super-rede e cujo comportamento permite prever as frequências em torno das quais os gaps zero- ϕ_{eff} e plasmon-polariton são abertos. O gap zero- $\langle n \rangle$, por sua vez, é apresentado como uma consequência do anulamento do caminho óptico generalizado e analisado em termos da condição de Bragg para interferência construtiva, de modo similar aos gaps de Bragg.

Com isso, concluímos que o gap plasmon-polariton ocorre devido ao acoplamento entre a componente longitudinal do campo magnético da onda que se propaga e os modos de plasmons longitudinais na super-rede, enquanto que os gaps de Bragg e o gap zero- $\langle n \rangle$ são causados pela interferência construtiva entre ondas refletidas em interfaces separadas por um período *d* da super-rede, favorecendo a reflexão em detrimento da transmissão através da mesma. Concluímos, ainda, que o gap zero- ϕ_{eff} consiste em uma região do espectro de frequências na qual ambas as camadas da super-rede, separadamente, são opacas, e que, portanto, modos com frequência nesta região são evanescentes. Além disso, mostramos que o fechamento do gap zero- ϕ_{eff} e a consequente existência de um modo de Bloch constituído pela superposição de ondas evanescentes são possíveis, mas apenas sob a condição específica de casamento de impedâncias entre as diferentes camadas.

É importante notar que os cristais fotônicos unidimensionais, principais objetos de estudo deste texto, representam o tipo mais simples possível de cristal fotônico. No entanto, os métodos utilizados neste trabalho podem ser generalizados para sistemas mais complicados, tais como as fibras de Bragg ("Bragg Fibers") [3], que são fibras ópticas periódicas na diração radial, compostas por camadas concêntricas alternadas de diferentes materiais. Por fim, vale ressaltar que a generalização para super-redes unidimensionais desordenadas [16] e/ou anisotrópicas [17] também é possível, muito embora as principais características dos non-Bragg gaps sejam mantidas em ambos os casos.

APÊNDICES

A A.1 SOLUÇÃO ANALÍTICA PARA A LARGURA DO GAP ZERO- $\langle n \rangle$

Para alcançarmos o resultado da equação (5.39), expandimos até segunda ordem o primeiro cosseno no lado direito de (5.13) em torno da frequência ν_0 que satisfaz (5.17). Deste modo, obtemos

$$\cos(kd) = \left[1 - \frac{1}{2} \frac{dN(\nu_0)^2}{d\nu} (\nu_0)(\nu - \nu_0)^2)\right] (1 + G(\nu_0)) - G(\nu_0)\cos(\phi(\nu_0)), \quad (A.1)$$

onde, por conveniência, definimos

$$N(\nu) = \frac{2\pi\nu}{c} \frac{\Delta S}{2} \tag{A.2}$$

e

$$\phi(\nu) = Q_A(\nu)d_a - Q_B(\nu)d_b. \tag{A.3}$$

Note que embora tenhamos expandido o primeiro cosseno à direita de (5.13), para os demais termos consideramos uma expansão de ordem zero, isto é, $\nu = \nu_0$. Seguindo mais adiante, podemos rearranjar os termos de (A.1), ficando com

$$\cos(kd) = 1 - \left\{ \frac{(1+G(\nu_0))}{2} \frac{dN(\nu_0)^2}{d\nu} (\nu - \nu_0)^2 - G(\nu_0)(1 - \cos(2Q_A d_a)) \right\} , \qquad (A.4)$$

de modo que a região do espectro correspondente ao zero- $\langle n \rangle$ gap fica determinada pela inequação

$$\frac{(1+G(\nu_0))}{2}\frac{dN(\nu_0)^2}{d\nu}(\nu-\nu_0)^2 < G(\nu_0)(1-\cos(2Q_A d_a)).$$
(A.5)

Vale ressaltar que nas duas últimas equações foi utilizado o fato de que $Q_A(\nu_0)d_a = Q_B(\nu_0)d_b$, proveniente de (5.18).

Sendo assim, de acordo com (A.5), o tamanho da região delimitada pelo zero- $\langle n \rangle$ gap é dada por

$$\Delta \nu = \left(\frac{2G(\nu_0)(1 - \cos(2Q_A(\nu_0)d_a))}{(1 + G(\nu_0))\pi^2 \frac{dN(\nu_0)^2}{d\nu}}\right)^{\frac{1}{2}}.$$
(A.6)

Além disso, de acordo com (5.18) temos que

$$N(\nu) = \frac{2\pi\nu}{c} \langle n \rangle d, \qquad (A.7)$$

donde obtemos

$$\frac{dN(\nu_0)}{d\nu} = 2\pi \left(\frac{\langle n \rangle d}{c} + \frac{\nu_0}{c} \frac{d\langle n \rangle}{d\nu} d \right)_{\nu = \nu_0}$$

$$= 2\pi \frac{\nu_0}{c} \frac{d\langle n \rangle}{d\nu} d \Big|_{\nu = \nu_0}.$$
(A.8)

Levando em conta que, de acordo com (5.7),

$$\frac{G(\nu)}{1+G(\nu)} = \frac{(Z_A + Z_B)^2}{(Z_A - Z_B)^2},$$
 (A.9)

podemos reescrever (A.6) como

$$\Delta \nu = \left. \frac{[Z_A + Z_B] / [Z_A - Z_B]}{2\pi^2 \frac{\nu}{c} \frac{d\langle n \rangle}{d\nu} d} \sqrt{2} (1 - \cos(2Q_A d_a))^{\frac{1}{2}} \right|_{\nu = \nu_0} . \tag{A.10}$$

Descrevendo agora as larguras das camadas em termos do fator de escala s, como em (4.33), podemos finalmente escrever (A.10) como

$$\Delta \nu = \alpha \frac{\sqrt{1 - \cos(\gamma s)}}{2\pi s},\tag{A.11}$$

onde

$$\gamma = (2Q_A d_{a,0})_{\nu = \nu_0} = (2Q_B d_{b,0})_{\nu = \nu_0}$$
(A.12)

e

$$\alpha = \left[\frac{c\sqrt{2}(Z_A - Z_B)/(Z_A + Z_B)}{\pi \nu d\langle n \rangle / d\nu}\right]_{\nu = \nu_0},$$
(A.13)

como queríamos demonstrar.

BIBLIOGRAFIA

- [1] E. Yablonovitch, Phys. Rev. Lett. 58, 2059 (1987).
- [2] S. John, Phys. Rev. Lett. 58, 2486 (1987).
- [3] J. D. Joannopoulos, S. G. Johnson, J. N. Winn e R. D. Meade, Photonic Crystals, Molding the Flow of Light, Second Edition, Princeton University Press (2008).
- [4] L. Maigyte e K. Staliunas, Appl. Phys. Rev. 2, 11102 (2015).
- [5] V. G. Veselago, Sov. Phys. Usp.10, 509 (1968).
- [6] D. R. Smith, J. B. Pendry, e M. C. K. Wiltshire, Science 305,788 (2004); J. B. Pendry e D. R. Smith, Phys. Today 57, 37 (2004).
- [7] Y. Liu e X. Zhang, Chem. Soc. Rev. 40, 2494 (2011).
- [8] J. Yen,W. J. Padilha, N. Fang, D. C. Vier, D. R. Smith, J. B. Pendry, D. N. Basov e X. Zhang, Science 303, 1494 (2004).
- [9] J. Li, L. Zhou, C. T. Chan e P. Sheng, Phys. Rev. Lett 90, 083901 (2003).
- [10] S. B. Cavalcanti, M. de Dios-Leyva, E. Reyes-Gómez e L. E. Oliveira, Phys. Rev. E 75, 026607 (2007).
- [11] Y. Weng, Z.-G. Wang e H. Chen, Phys. Rev. E 75, 046601 (2007).
- [12] E. Reyes-Gómez, D. Mogilevitsev, S. B. Cavalcanti, C. A. A. de Carvalho e L. E. Oliveira, Europhys. Lett. 88, 24002 (2009).
- [13] C. A. A. de Carvalho, S. B. Cavalcanti, E. Reyes-Gómez e L. E. Oliveira, Phys. Rev. B 83, 081408(R) (2011).
- [14] E. Reyes-Gómez, S. B. Cavalcanti e L. E. Oliveira, Sup. and Microstructures 64, 590 (2013).
- [15] E. Reyes-Gómez, S. B. Cavalcanti e L. E. Oliveira, Physica E 83, 461 (2016).

- [16] H. Jiang, H. Chen, H. Li, Y. Zhang, J. Zi e S. Zhu, Phys. Rev. E 69, 066607 (2004).
- [17] E. Moncada-Villa, J. R. Mejía-Salazar e J. C. Granada, Opt. Lett. 40, 2345 (2015).
- [18] M. Born, E. Wolf, Principles of optics: Electromagnetic Theory of Propagation, Interference and Diffraction of Light, Oxford, Pergamon Press (1964).
- [19] J. D. Jackson, Classical Electrodynamics, Wiley, 2th edition (1975).
- [20] N. W. Ashcroft e N. D. Mermin, Solid State Physics, Brooks Cole Edition (1976).
- [21] E. Hetch, Optics, Pearson, Education Limited Edition (2014).
- [22] C. Kittel, Introduction to Solid State Physics, John Willey and Sons, 8th Edition (2005).
- [23] C. H. Henry e J. J. Hopfield, Phys. Rev. Lett. 15, 964 (1965).
- [24] C. M. Soukoulis, S. Linden e M. Wegener, Science 315, 47 (2007).
- [25] H. Tao, N. I. Landy, C. M. Bingham, X. Zhang, R. D. Averitt, e W. J. Padilla, Optics Express 16 (10): 7181–8, (2013).
- [26] W. Cai, U. K. Chettiar e A. V. Kildishev, Nature Photonics 1, 224 227 (2007).
- [27] D. Griffiths, Introduction to Electrodynamics, Pearson Education Ed. (2014).
- [28] S. B. Cavalcanti, M. de Dios-Leyva, E. Reyes-Gómez e L. E. Oliveira, Phys. Rev. B 74, 153102 (2006).
- [29] L. Zhou, Z. Song, X. Huang e C. T. Chan, Nanophotonics 1, 181 (2012).
- [30] A. Bruno-Alfonso, E. Reyéz-Gómez, S. B. Cavalcanti e L. E. Oliveira, J. Phys.: Cond. Matt. 24, 45302 (2012).