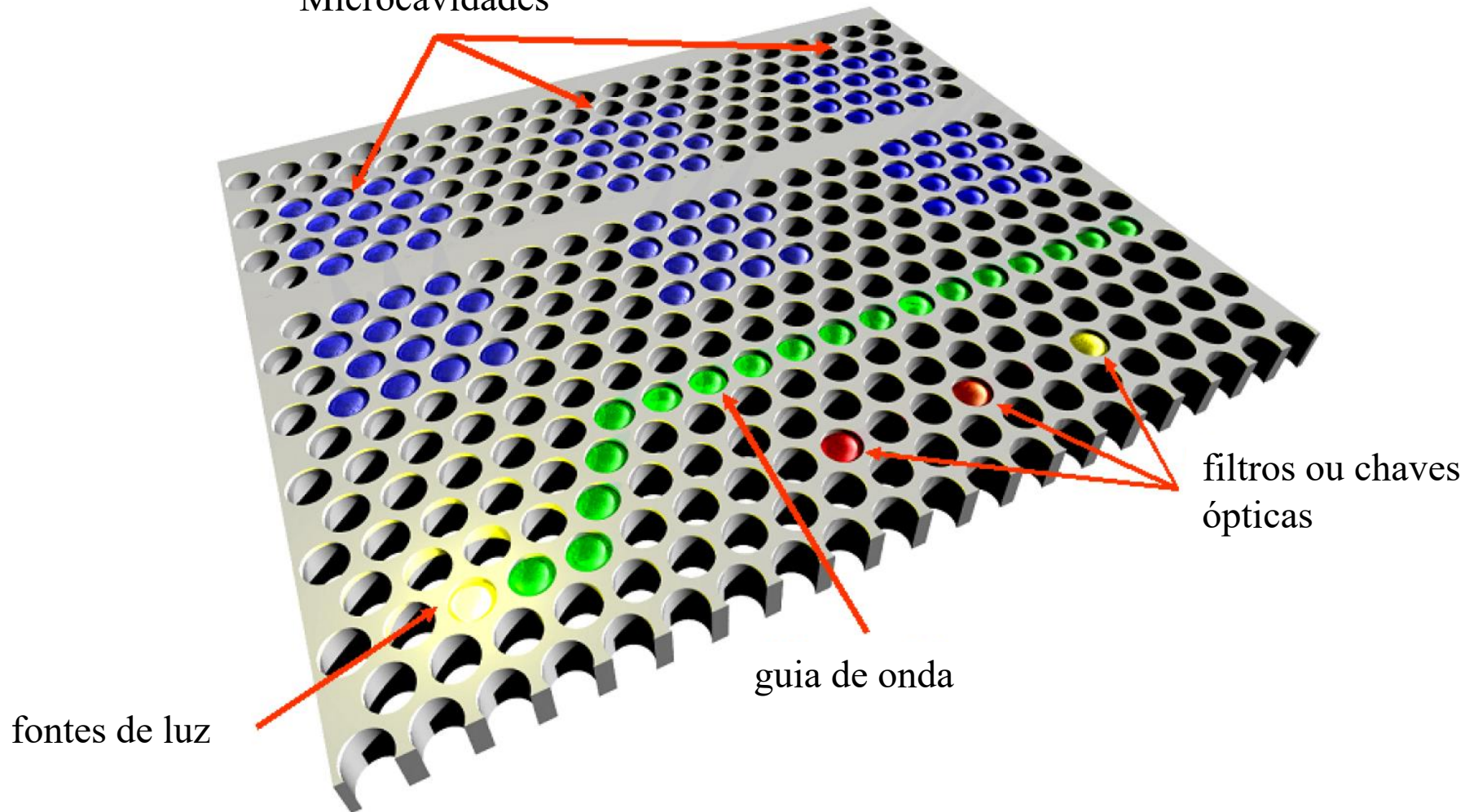
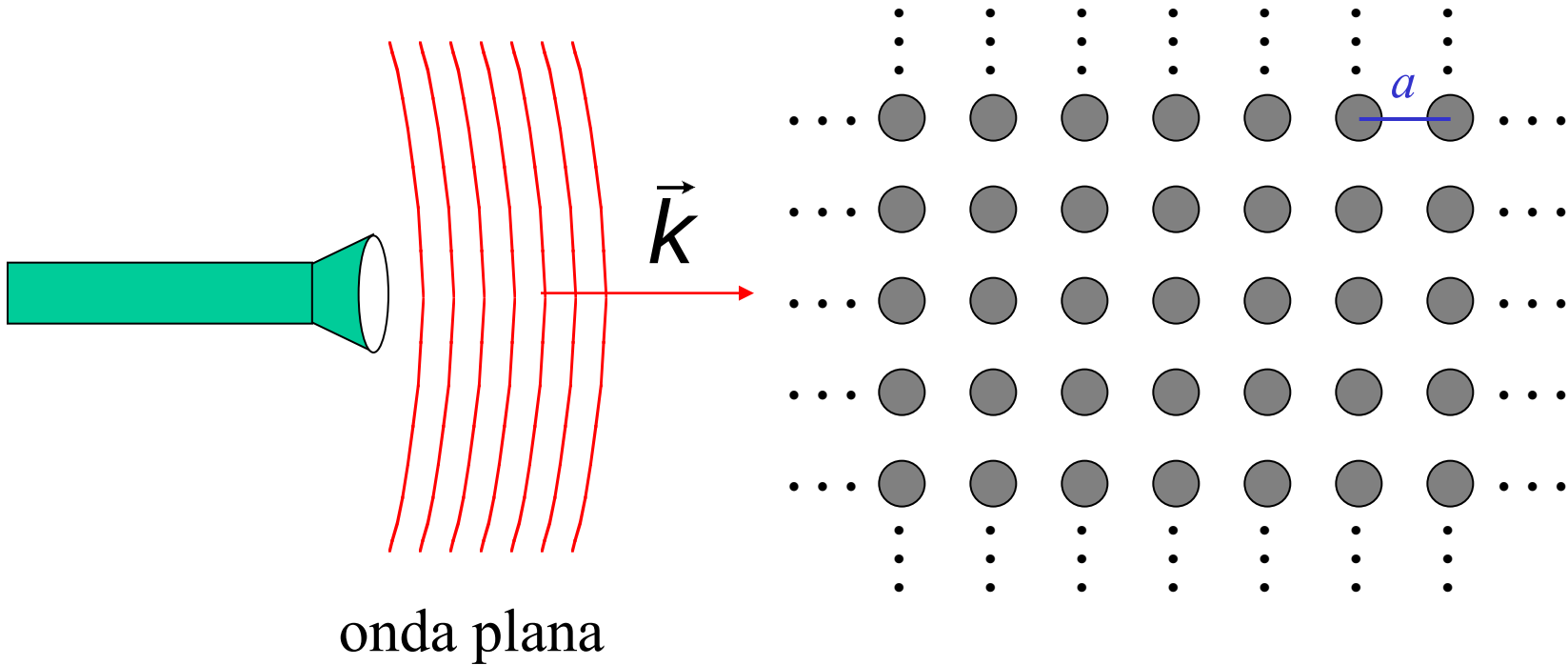


Cristais Fotônicos

Microcavidades



Para analisar o sistema



$$\vec{E}, \vec{H} \sim e^{i(\vec{k} \cdot \vec{x} - \omega t)}$$

$$|\vec{k}| = \omega / c = \frac{2\pi}{\lambda}$$

Equações de Maxwell

Equações de Maxwell's

Gauss: $\nabla \cdot \mathbf{B} = 0$

$$\nabla \cdot \mathbf{D} = \rho$$

relações constitutivas:

Ampere: $\nabla \times \mathbf{H} = \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t} + \mathbf{J}$

$$\mathbf{D} = \epsilon_0 \mathbf{E} + \mathbf{P}$$

$$\mathbf{H} = \mathbf{B}/\mu_0 - \mathbf{M}$$

Faraday: $\nabla \times \mathbf{E} = - \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t}$

fontes : $\mathbf{J}$ = densidade de corrente
 ρ = densidade de carga

$$c^2 = 1/\mu_0 \epsilon_0$$

algumas simplificações

- *meio livre de cargas e correntes* : $\mathbf{J} = 0$, $\rho = 0$

- *Meio linear, sem dispersão*:

$$\begin{array}{ll} \mathbf{P} = \varepsilon_0 \chi_e \mathbf{E} & \Rightarrow \quad \mathbf{D} = \varepsilon_0 \mathbf{E} + \mathbf{P} = \varepsilon_0 (1 + \chi_e) \mathbf{E} = \varepsilon \mathbf{E} \\ \mathbf{M} = \chi_m \mathbf{H} & \mathbf{B} = \mu_0 (1 + \chi_m) \mathbf{H} = \mu \mathbf{H} \end{array}$$

ainda

$$K = \varepsilon / \varepsilon_0 = 1 + \chi_e \quad \rightarrow \quad \text{constante dielétrica}$$

$$K_m = \mu / \mu_0 = 1 + \chi_m \quad \rightarrow \quad \text{constante magnética}$$

$$n^2 = K K_m \quad \rightarrow \quad \text{índice de refração}$$

algumas simplificações

- materiais isotrópicos: ϵ , μ são escalares
- materiais não magnéticos: $K_m = 1$
- meios *transparentes*; ϵ real

Eqs. Maxwell Simplificadas

$$\nabla \cdot \mathbf{H} = 0$$

$$\nabla \cdot \mathbf{E} = 0$$

$$\nabla \times \mathbf{H} = \varepsilon_0 K(\mathbf{x}) \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t}$$

$$\nabla \times \mathbf{E} = -\mu_0 K_m \frac{\partial \mathbf{H}}{\partial t} = -\mu_0 \frac{\partial \mathbf{H}}{\partial t}$$

$\Rightarrow$ para soluções do tipo onda plana

$$\vec{E}, \vec{H} \sim e^{j(\vec{k} \cdot \vec{x} - \omega t)}$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \vec{H} = -i \omega \vec{H}$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \vec{E} = -i \omega \vec{E}$$

Calcolando

$$\vec{\nabla} \times \vec{E} = -\mu_0 \frac{\partial}{\partial t} \vec{H} = i \omega \mu_0 \vec{H}$$

$$\vec{\nabla} \times \vec{E} = i \omega \mu_0 \vec{H} \quad (\text{I})$$

$$\vec{\nabla} \times \vec{H} = \text{K} \varepsilon_0 \frac{\partial}{\partial t} \vec{E} = -i \omega \text{K} \varepsilon_0 \vec{E}$$

$$\vec{\nabla} \times \vec{H} = -i \omega \text{K} \varepsilon_0 \vec{E} \quad \Rightarrow \quad \vec{E} = \frac{i}{\omega \text{K} \varepsilon_0} \vec{\nabla} \times \vec{H} \quad (\text{II})$$

Calculando

Substituindo (I) em (II), temos

$$\nabla \times \frac{1}{K} \nabla \times \vec{H} = \left(\frac{W}{C} \right)^2 \vec{H}$$

auto-operador

auto-valor

auto-estado

Lembrar que $K(\mathbf{x}) = n^2(\mathbf{x})$. Logo ele não pode sair para fora do rotacional

Problema de Auto-valores

$$\nabla \times \frac{1}{K} \nabla \times \vec{H} = \left(\frac{W}{C} \right)^2 \vec{H}$$

auto-operador

auto-valor

auto-estado

➔ Sabe-se das propriedades da algebra linear que:

ω é real (sem absorção)

Auto-estados ortogonais

Auto-estados são completos (dão todas as soluções)

Problema de autovalores sistemas Periódicos

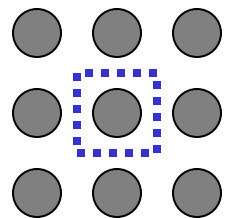
Se auto-operador é periódico,
o **teorema de Bloch-Floquet theorem** se aplica:

$$\vec{H}(\vec{X}, t) = e^{i(\vec{k} \cdot \vec{X} - \omega t)} \vec{H}_{\vec{k}}(\vec{X})$$

onda plana “envelope” periódico

Corolário 1: **k** é conservado, *i.e.* **não há espalhamento** da onda de Bloch

Corolário 2: $\vec{H}_{\vec{k}}$ é dado pela **célula unitária**
então ω são **discretos** $\omega_n(\mathbf{k})$



Problema de autovalores - sistemas Periódicos

Corolário 2: $\vec{H}_{\vec{k}}$ é dado pela **célula unitária**
então ω são **discretos** $\omega_n(\mathbf{k})$

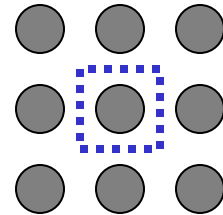
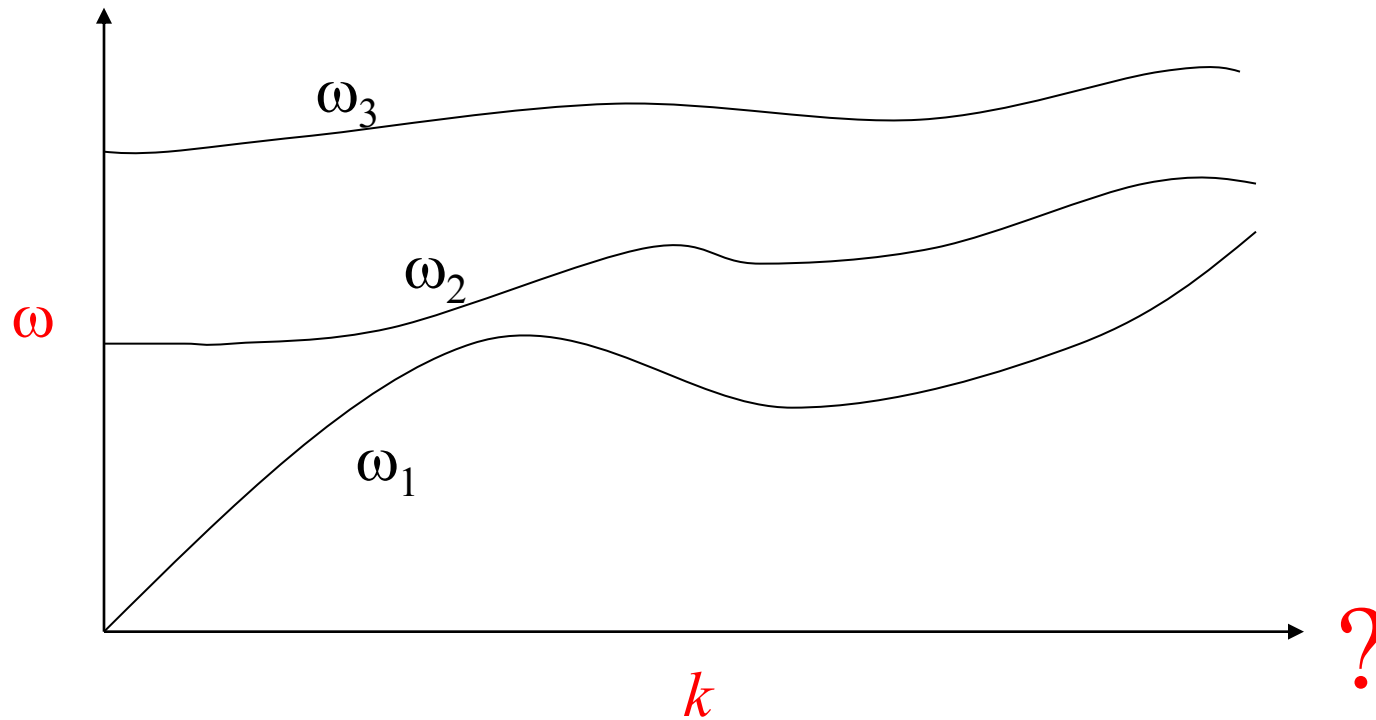


diagrama de banda (relação de dispersão)

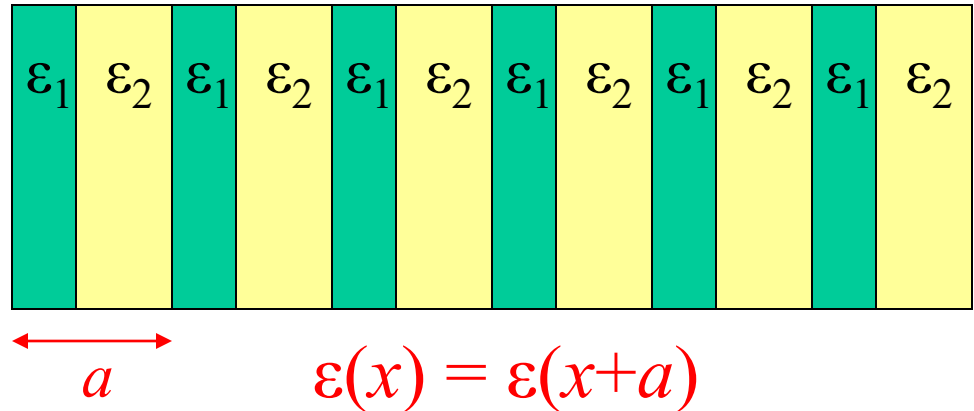


mapa de
quais estados
existem

range de k ?

Problema de auto-valores periódico - 1d

$$H(x) = e^{ikx} H_k(x)$$



Considerando

$k+2\pi/a$:

$$e^{i(k+\frac{2\pi}{a})x} H_{k+\frac{2\pi}{a}}(x) = e^{ikx} \left[e^{i\frac{2\pi}{a}x} H_{k+\frac{2\pi}{a}}(x) \right]$$

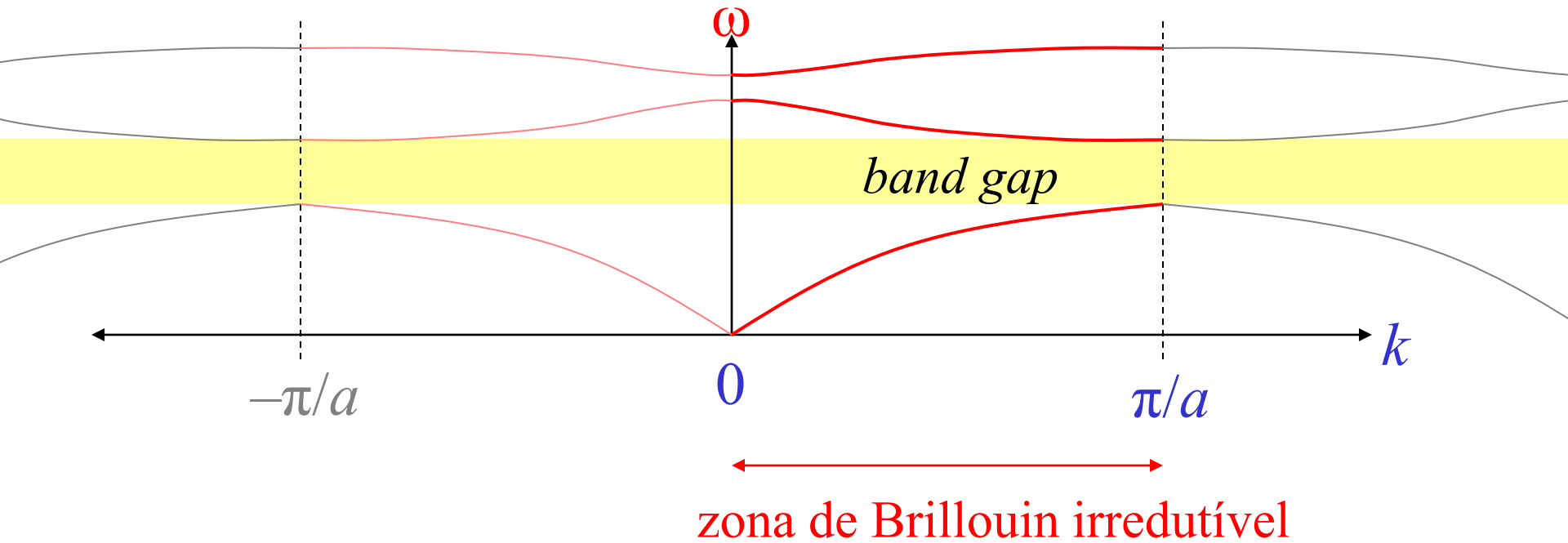
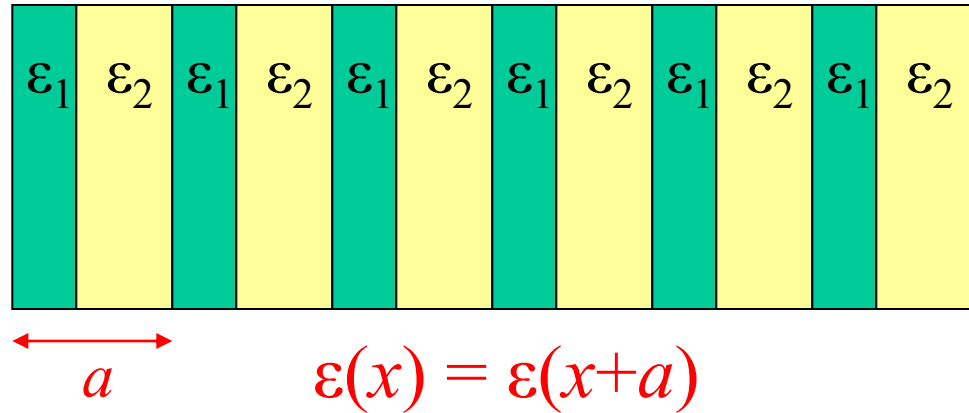
k é periódico:
 $k + 2\pi/a$ equivale a k

periódico!

satisfaz a mesma
 equação que H_k
 $= H_k$

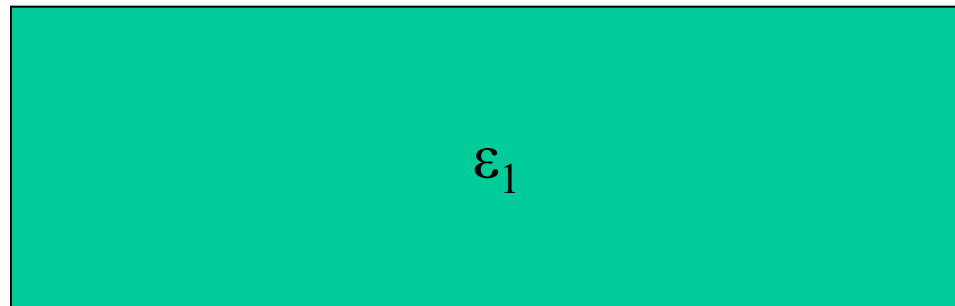
Problema de auto-valores periódico - 1d

k é periódico:
 $k + 2\pi/a$ equivale a k

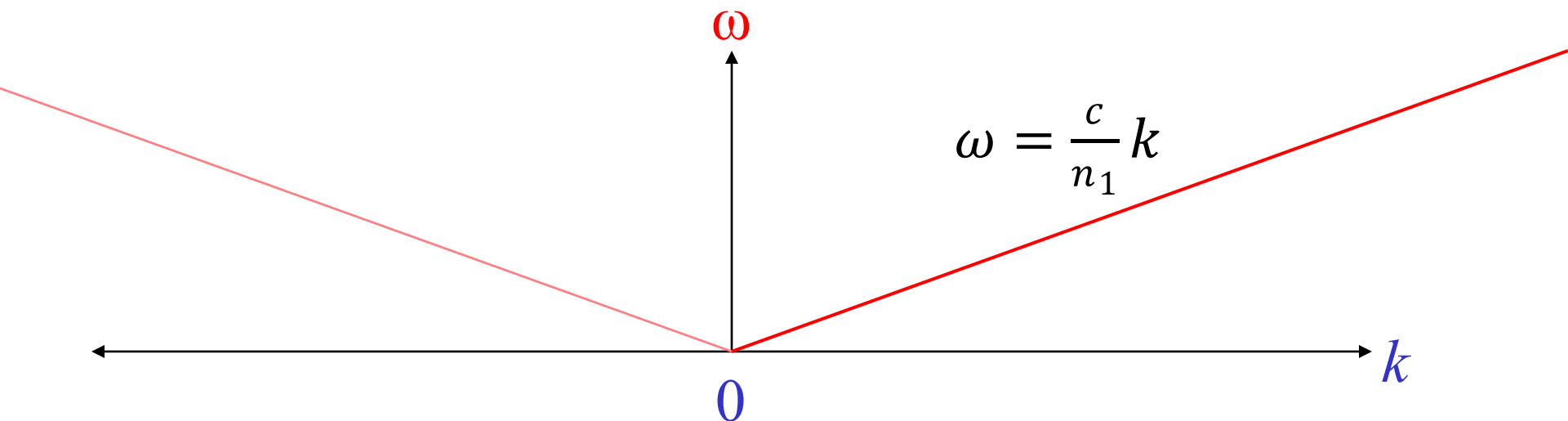


*Qualquer sistema periodico **1d** tem um Gap*

Comecemos com um meio
uniforme (1d):



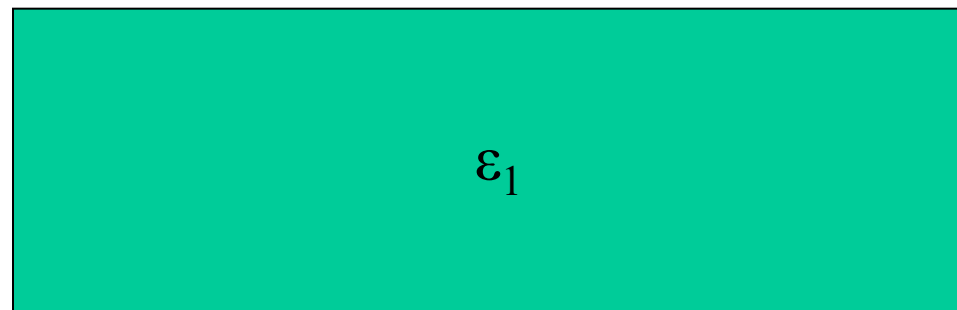
$$n_1 = \sqrt{\epsilon_1 / \epsilon_0}$$



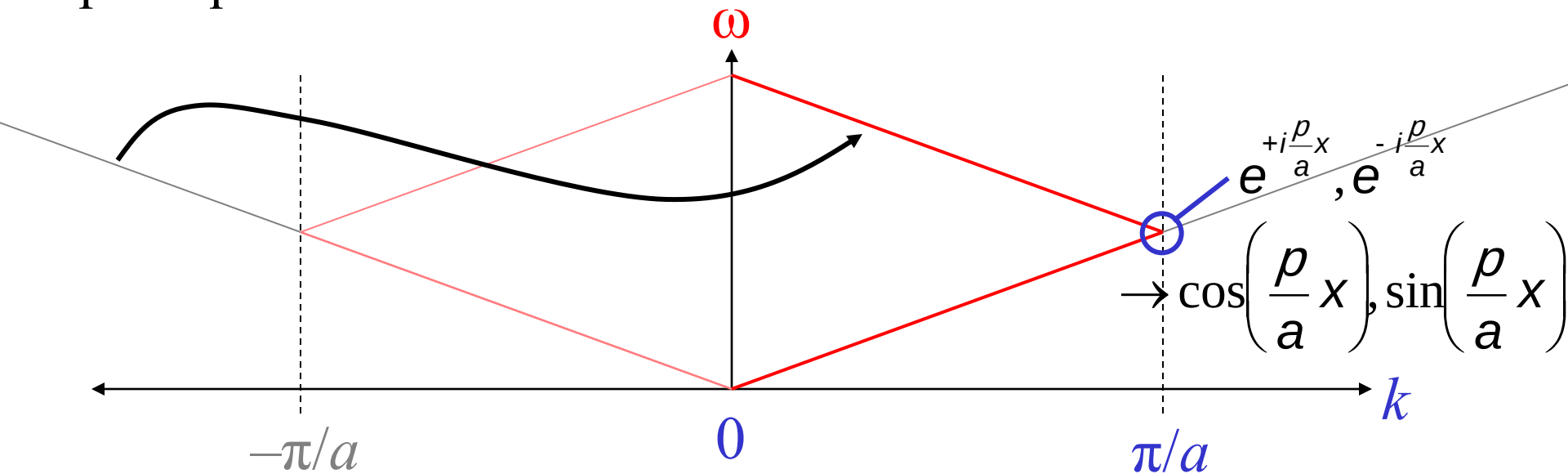
Qualquer sistema periodico **1d** tem um Gap

Tratando como um sistema
periódico “artificial”

bands são “rebatidas”
por equivalência de $2\pi/a$

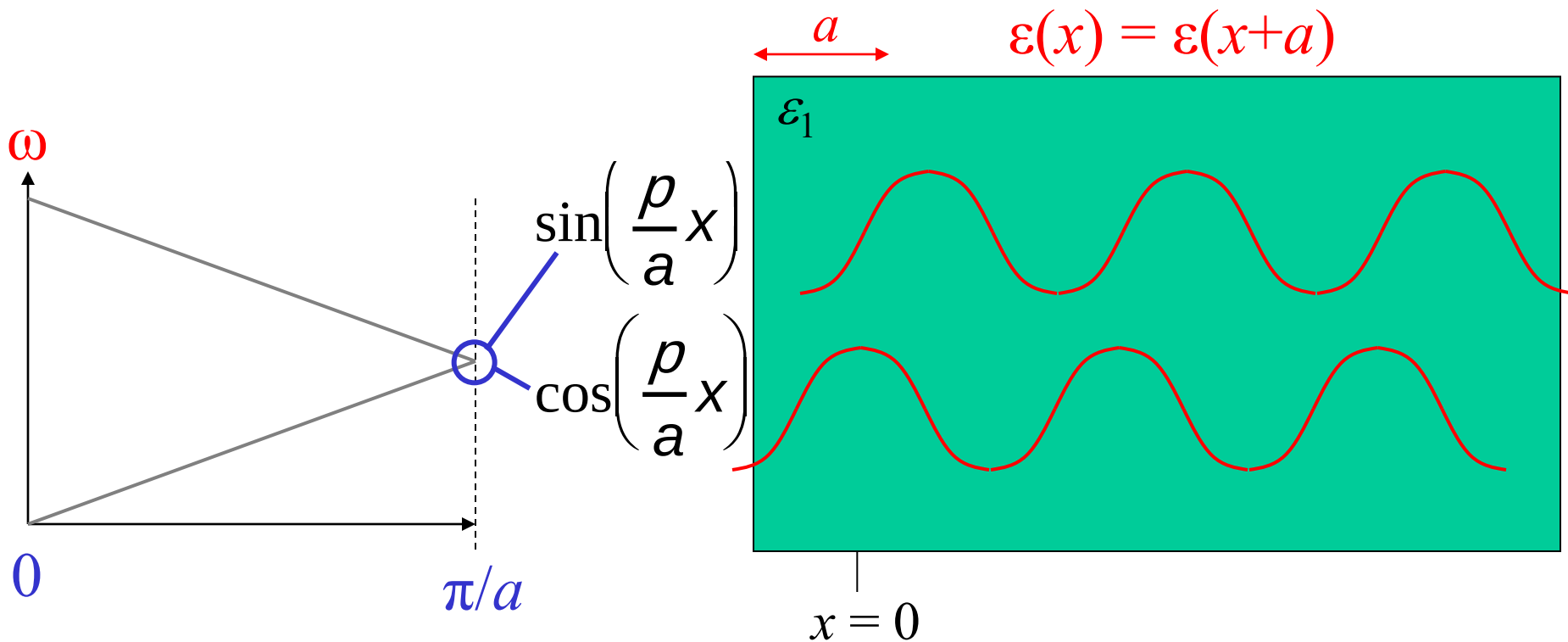


$$\epsilon(x) = \epsilon(x+a)$$



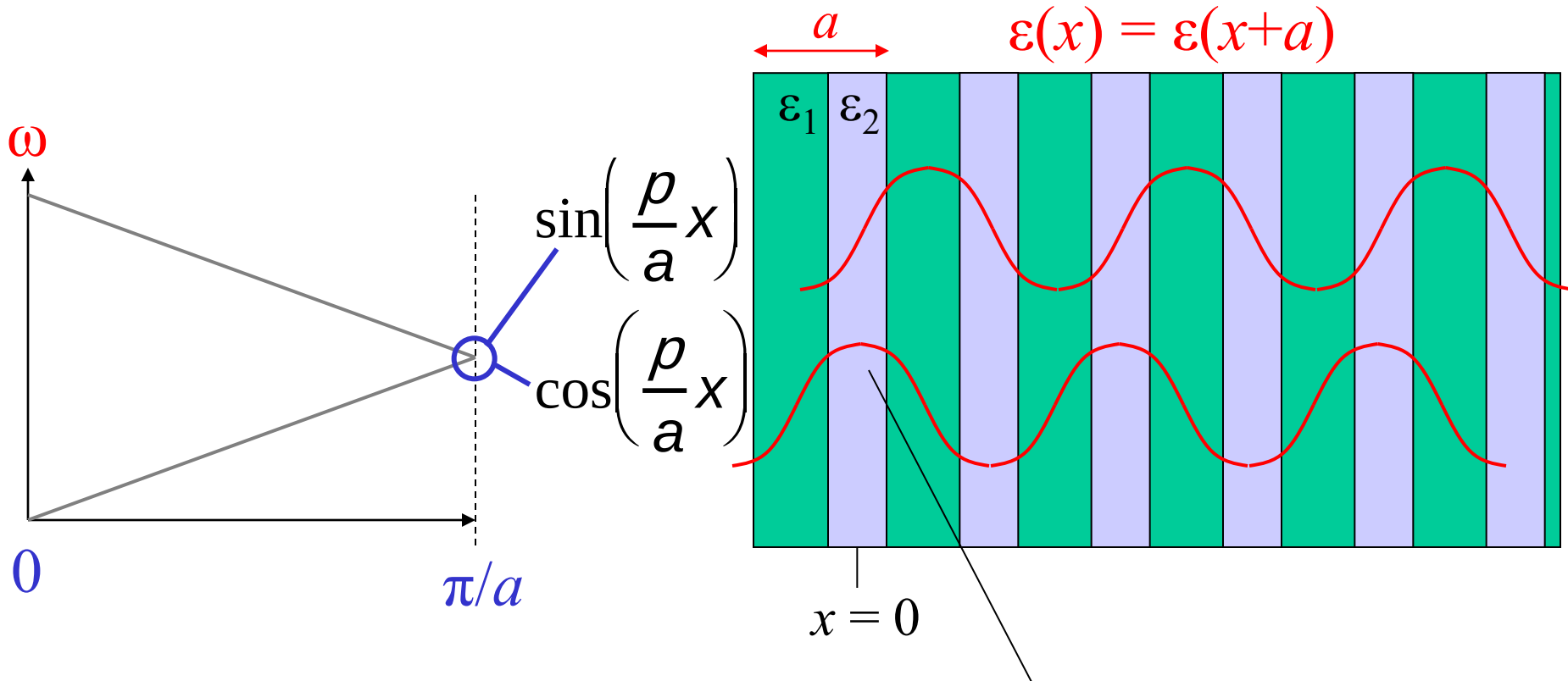
Qualquer sistema periódico **1d** tem um Gap

Tratando como um sistema periódico “artificial”



Qualquer sistema periódico **1d** tem um Gap

Adicione uma pequena periodicidade “real” $\epsilon_2 = \epsilon_1 + \Delta\epsilon$



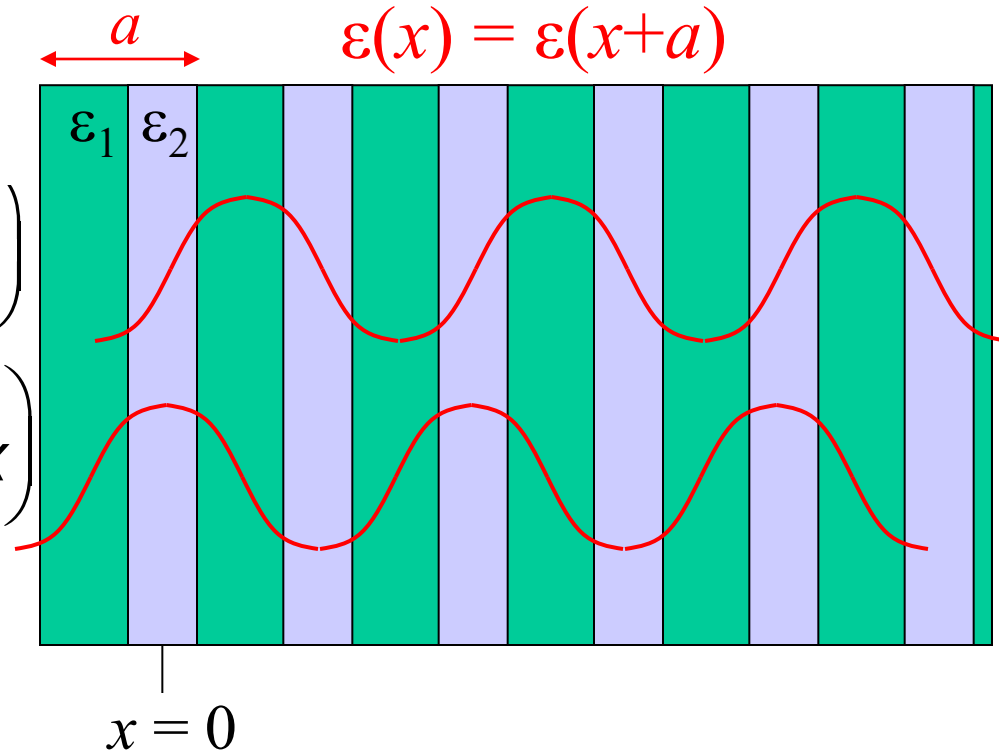
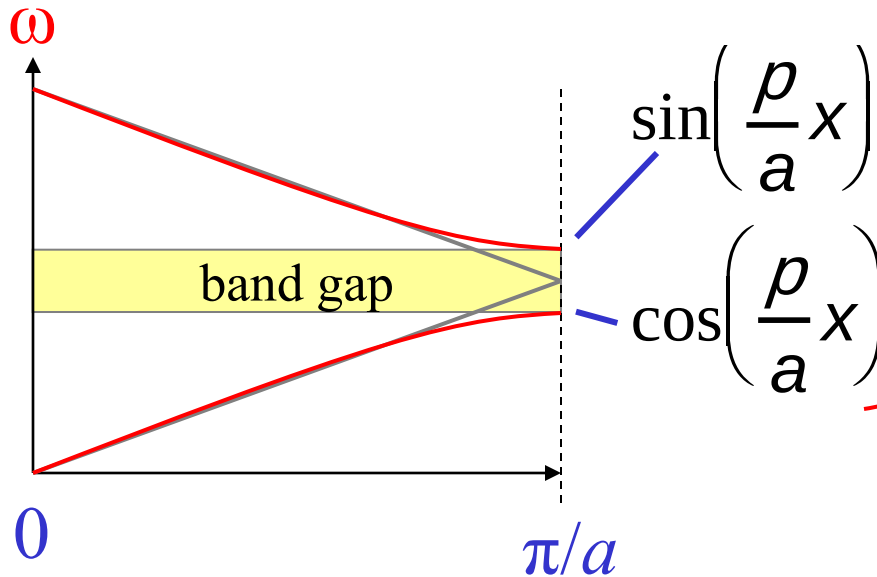
Cos vê ϵ maior, logo sua frequência é menor e a banda abre

Qualquer sistema periódico **1d** tem um Gap

Adicione uma pequena periodicidade “real”

$$\varepsilon_2 = \varepsilon_1 + \Delta\varepsilon$$

Abre a degenerescência:
estado concentrado no **n** alto (ε_2)
tem **menor** frequência

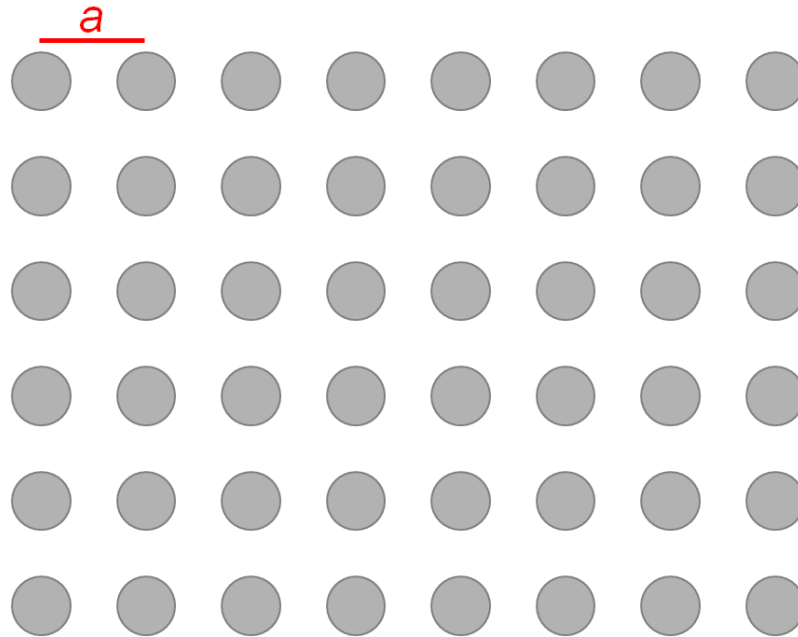


Sistemas 2d e 3d

O problema ainda é soluvel mas se torna mais complexo.
Em alguns casos haverá gap.

Sistema 2d Modelo

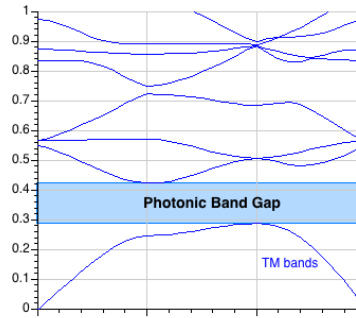
rede quadrada de bastões dielétricos (ϵ) no ar ($\epsilon = 1$)



Resolvendo o problema de autovalores

Célula finita $\rightarrow$ auto-valores discretos ω_n

Queremos resolver para $\omega_n(\mathbf{k})$, e plotar vs. “todos” $\mathbf{k}$ para “todos” n ,

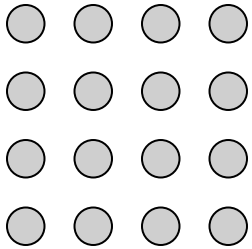


Sistemática

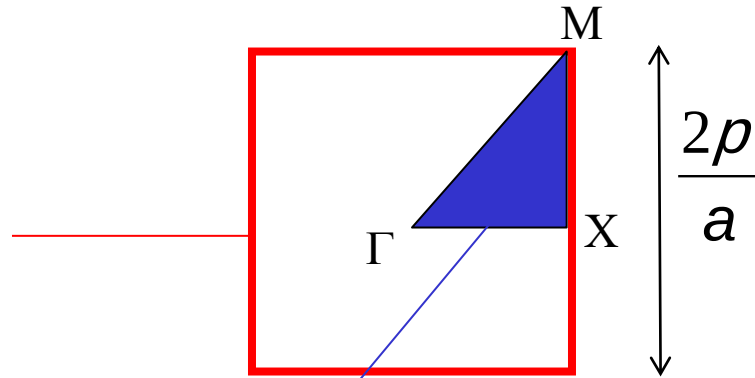
- 1 Limitar range de $\mathbf{k}$: zona de Brillouin irreductível
- 2 Limitar graus de liberdade: expandir $\mathbf{H}$ em base finita
- 3 Resolver o problema de autovalores: método iterativo

1 Limitar range de $\mathbf{k}$: zona de Brillouin irreductível

— Teorema de Bloch's: soluções **periódicas em $\mathbf{k}$**



1ª zona de Brillouin
= “célula primitiva”



Zone de Brillouin irreductível:
reduzida por simetria

(sistema 2d $\rightarrow$ Z. Brillouin 2d)

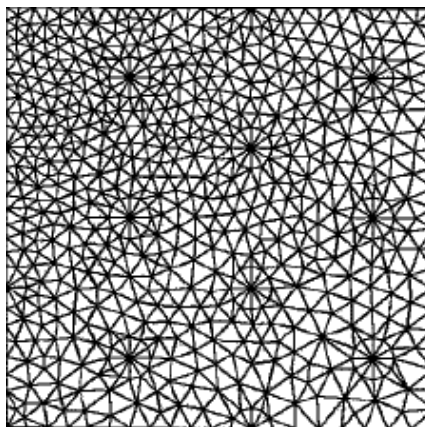
2 Limitar graus de liberdade: expandir $\mathbf{H}$ em base finita

Base de ondas plana (FFT)

$$\mathbf{H}(\mathbf{x}_t) = \sum_{\mathbf{G}} \mathbf{H}_{\mathbf{G}} e^{i\mathbf{G} \cdot \mathbf{x}_t}$$

“grid” **uniform**, contornos **periódicos**,
código **simples**, processamento **custoso**

Base de elementos finitos



[figure: Peyrilloux *et al.*,
J. Lightwave Tech.
21, 536 (2003)]

vínculos, condições de contorno:

Elementos de Nédélec

[Nédélec, *Numerische Math.*
35, 315 (1980)]

malha **não uniforme**,
contornos mais arbitrários,
código & malha **complexos**,
processamento **menos custoso**

3 Resolver o problema de autovalores: método iterativo

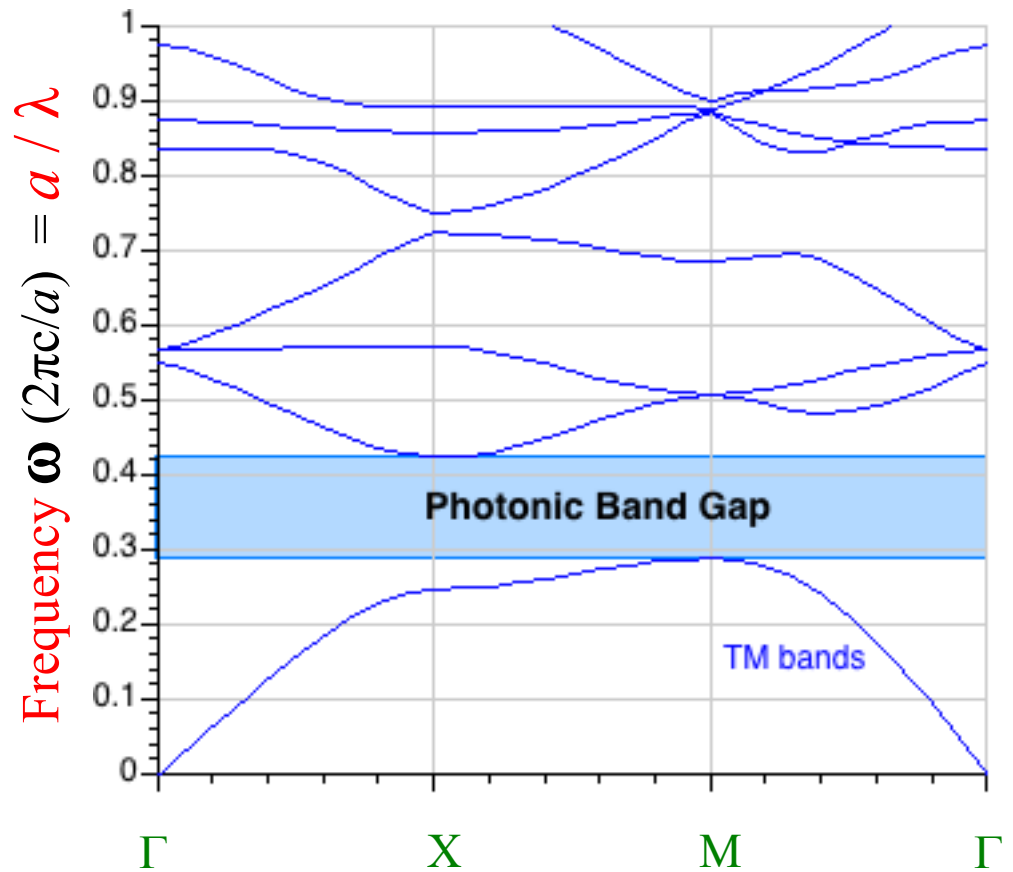
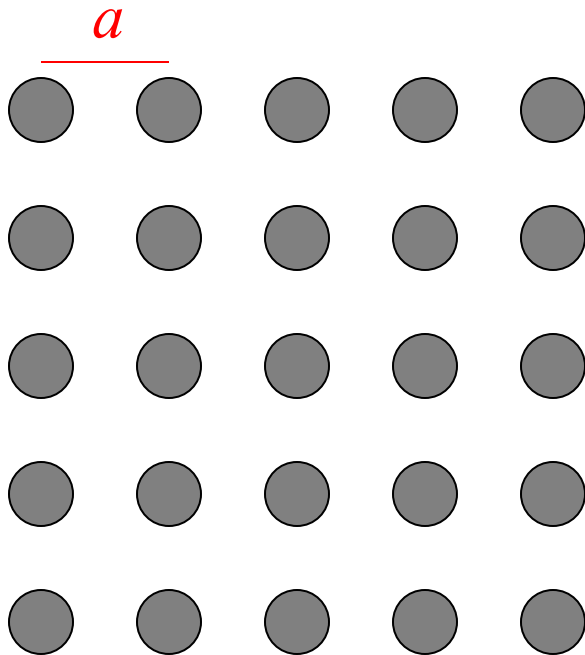
Resolver de modo eficiente (computacionalmente) o problema de autovalores através de métodos iterativos

$$Ah = w^2 Bh$$

Existem vários métodos iterativos :

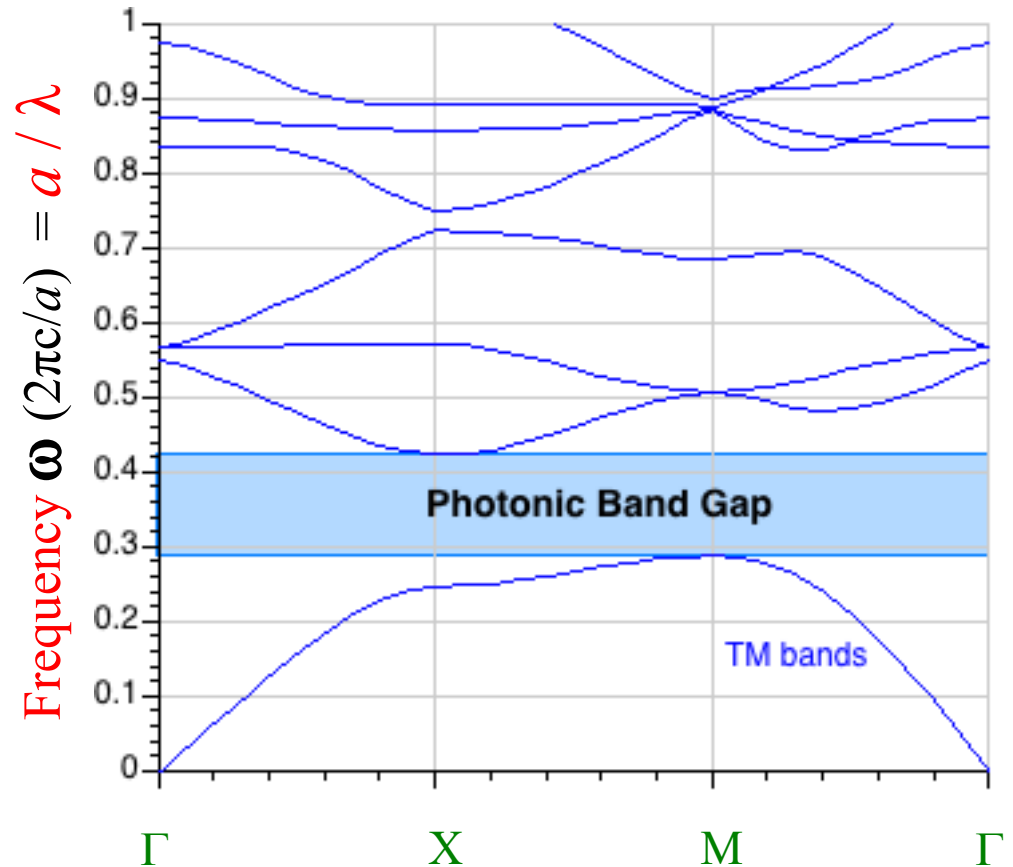
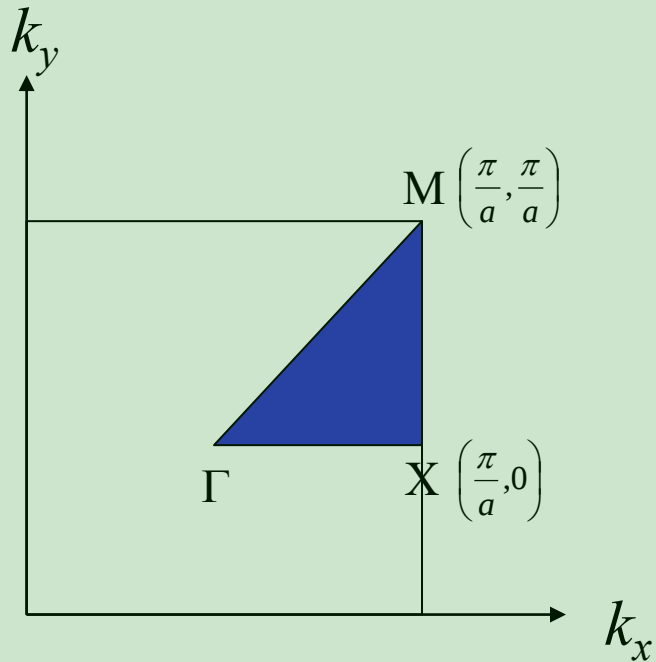
— Arnoldi, Lanczos, Davidson, Jacobi-Davidson, ...,
Rayleigh-quotient minimization

Exemplo: periodicidade 2d, $\varepsilon = 12:1$



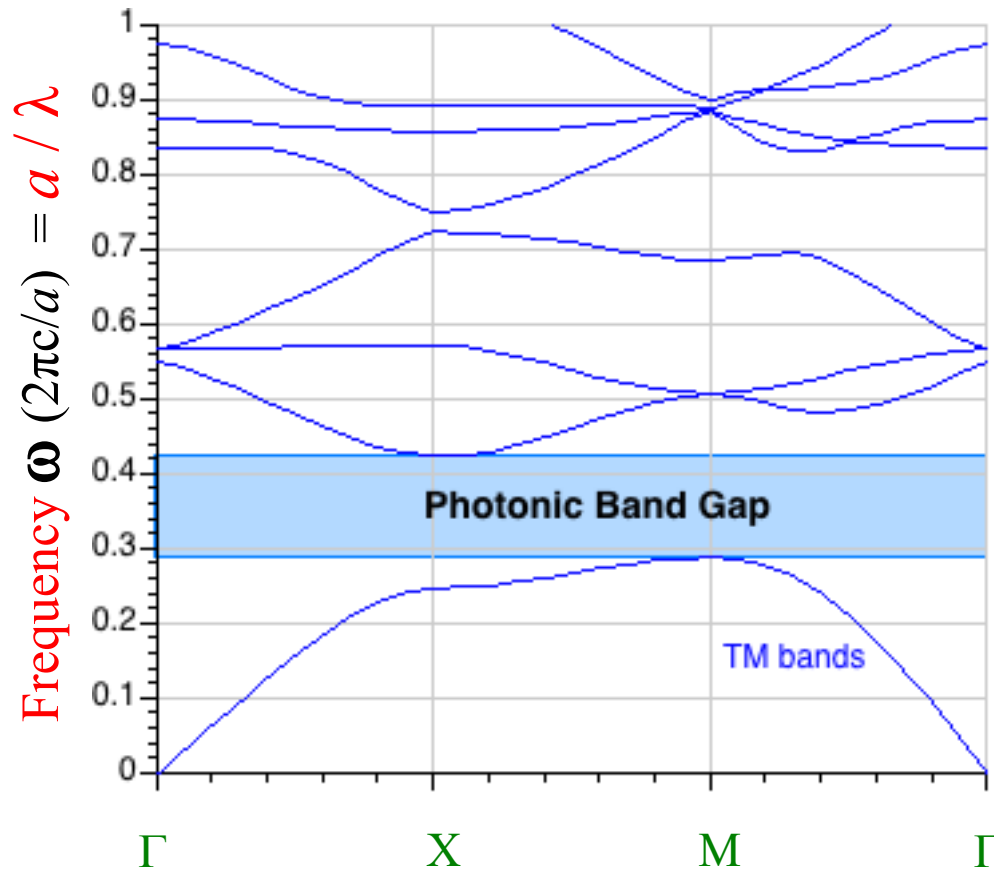
Exemplo: periodicidade 2d, $\varepsilon = 12:1$

zone de Brillouin irredutível



Usualmente os *gaps* estão nas bordas da Z. de Brillouin, por isso se gráfica o diagrama $\Gamma X M$

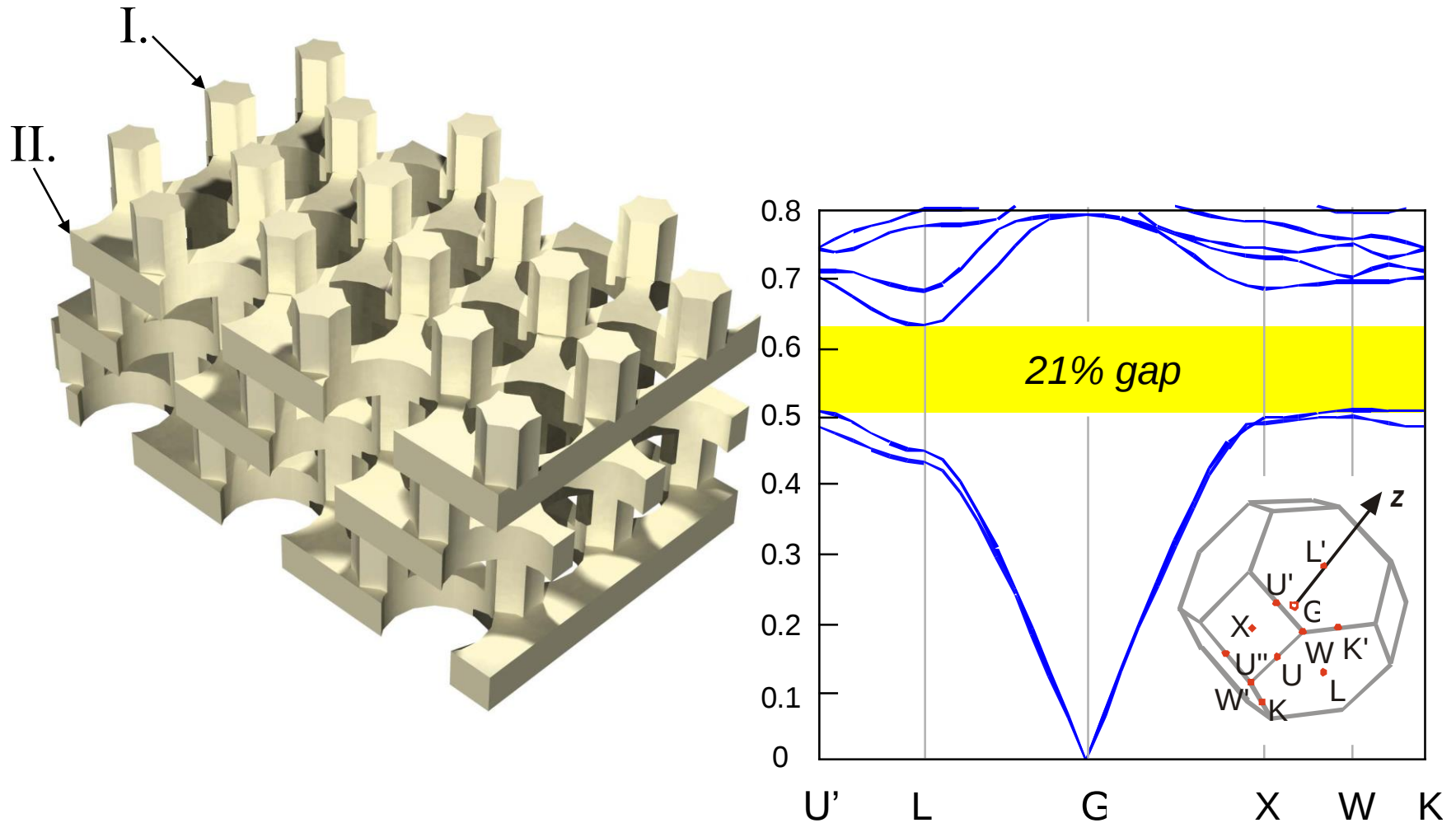
Exemplo: periodicidade 2d, $\varepsilon = 12:1$



$$\leftarrow 0.35 = \frac{a}{\lambda} = \frac{a}{1.5 \mu m}$$

$$a \approx 400 \text{ nm}$$

cristal fotônico 3d : gap completo, $\varepsilon=12:1$



Para calcular autoestados de
cristais fotônicos, voce pode usar

MIT Photonic-Bands (MPB) package:

<http://ab-initio.mit.edu/mpb>

Fim