

Dissertação de Mestrado

Universidade Estadual de Campinas

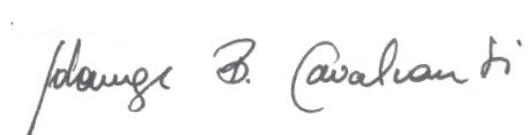
Instituto de Física Gleb Wataghin

Propagação Não Linear de Pulsos em Estruturas 1D com *Band Gap* Fotônico

John Jairo Lozada Vera

Orientador: Profa. Dra. Solange Bessa Cavalcanti

Este exemplar corresponde à redação final da Dissertação de Mestrado defendida pelo aluno John Jairo Lozada e aprovada pela comissão julgadora em 17 de agosto de 2009



Campinas, São Paulo

Outubro de 2009

**FICHA CATALOGRÁFICA ELABORADA PELA
BIBLIOTECA DO IFGW - UNICAMP**

L959p Lozada Vera, John Jairo
 Propagação não linear de pulsos em estruturas 1D com
 band gap fotônico / John Jairo Lozada Vera. –
 Campinas, SP : [s.n.], 2009.

Orientador: Solange Bessa Cavalcanti.
 Dissertação (mestrado) - Universidade Estadual de
 Campinas, Instituto de Física "Gleb Wataghin".

1. Ótica não-linear. 2. Cristais fotônicos. 3. Propagação
 de pulsos. I. Cavalcanti, Solange Bessa. II. Universidade
 Estadual de Campinas. Instituto de Física "Gleb Wataghin".
 III. Título.

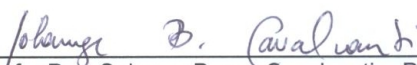
(vsv/ifgw)

- **Título em inglês:** Nonlinear pulse propagation in one-dimensional photonic band gap structures
- **Palavras-chave em inglês (Keywords):**
 - 1. Nonlinear optics
 - 2. Photonic crystals
 - 3. Pulse propagation
- **Área de Concentração:** Ótica
- **Titulação:** Mestre em Física
- **Banca examinadora:**
 - Profª Solange Bessa Cavalcanti
 - Profª Lucila Helena Deliesposte Cescato
 - Prof. Carlos Alberto Aragão de Carvalho Filho
- **Data da Defesa:** 17/08/2009
- **Programa de Pós-Graduação em:** Física

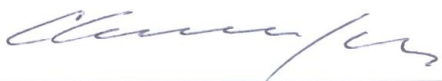


MEMBROS DA COMISSÃO JULGADORA DA TESE DE MESTRADO DE **JHON JAIRO LOZADA VERA – RA 077650** APRESENTADA E APROVADA AO INSTITUTO DE FÍSICA “GLEB WATAGHIN”, DA UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS, EM 17 / 08 / 2009.

COMISSÃO JULGADORA:



Profa. Dra. Solange Bessa Cavalcanti - Presidenta da Comissão Julgadora
IF/UFAL



Prof. Dr. Carlos Alberto Aragão de Carvalho Filho – IF/UFRJ



Profa. Dra. Lucila Helena Deliesposte Cescato - DFMC/IFGW/UNICAMP

Agradecimentos

Aos meus pais, Martha Raquel e Daniel, a minha avó Rosa e a minha tia Esperanza, por todo o seu apoio na minha carreira.

Aos professores Solange Cavalcanti, Luiz de Oliveira, Nelson Porras-Montenegro e Hugo Fragnito, pela sua valiosa orientação e conselho.

A todos os meus estimados amigos e colegas do IFGW que me acompanharam durante esses dois anos aqui no Brasil. Em especial a: Alexis, Ángela, Ed, Harley, Josué, Marie, Sandra e Víctor. Muito obrigado mesmo!

Em geral, aos professores do IFGW pela formação recebida.

A secretaria da Pos-Graduação do IFGW por toda sua atenção, colaboração e amabilidade.

À CAPES pelo apoio financeiro.

Resumo

Estuda-se a interação entre pulsos ópticos ultracurtos e materiais com *band gap* fotônico, considerando-se a propagação de luz através de estruturas unidimensionais, compostas de uma super-rede dielétrica periódica cuja célula unitária consiste em um par de camadas com diferentes índices de refração n_1 e n_2 , respectivamente. Em particular considera-se o caso em que n_2 , por exemplo, é um material com não linearidade $\chi^{(3)}$.

É bem sabido que a largura e a localização dos *band gaps* dependem fundamentalmente do contraste entre os índices de refração $\delta n = |n_1 - n_2|$ e, atribuindo-se a n_2 um índice de refração dependente da intensidade, conseguimos controlar dinamicamente a largura do *band gap* com o pulso de luz incidente. Portanto, a idéia básica é investigar a dinâmica de propagação nas vizinhanças de um *band gap* dependente da intensidade para aplicações importantes no projeto de dispositivos fotônicos, como por exemplo limitadores de luz e *switches* puramente ópticos.

Dentro do formalismo de Maxwell, experimentos computacionais são feitos considerando a propagação de campos ópticos através de super-redes que possuem não linearidades do tipo Kerr, assim como saturável. Esta última é importante para a descrição da interação com pulsos muito intensos já que neste caso a mudança induzida no índice de refração depende de não linearidades de ordem mais alta e, como consequência, alcança uma saturação. Este modelo é apropriado para descrever materiais tais como vidros dopados com semicondutores (e.g. $\text{CdS}_{1-x}\text{Se}_x$) e polímeros orgânicos, que possuem propriedades ópticas altamente não lineares.

A propagação da onda é resolvida usando uma versão modificada no domínio do tempo do método standard *fast Fourier Beam Propagation Method* (FFT-BPM) com um passo adaptativo, que pode manejar transmissão, difração e, especialmente, reflexões das ondas electromagnéticas causadas por descontinuidades no índice de refração, com a vantagem de não requerer a introdução de condições de contorno adicionais.

Abstract

The interaction of ultrashort optical pulses with photonic band gap materials has been studied by considering light propagation through one-dimensional photonic band gap structures, composed of a periodic multilayer stack of dielectric materials whose unitary cell consists of a pair of layers with different refractive indices n_1 and n_2 , respectively. One of these, say n_2 , is doped with a $\chi^{(3)}$ nonlinear material.

It is well known that band gaps widths and locations depend fundamentally on the refractive index contrast $\delta n = |n_1 - n_2|$ and, by assigning to n_2 an intensity dependent refractive index, one is bound to dynamically control the band gap width with the incident light pulse. Therefore, the basic idea here is to investigate the dynamics of propagation in the neighborhood of such an intensity-dependent band gap for important applications in the design of all-optical photonic devices such as limiters and switches.

Within the framework of Maxwell's equations, a numerical investigation is made by considering the propagation of optical fields through multilayers with a Kerr, as well as a saturable, type of nonlinearity. The latter is important for the description of the interaction with high field strength pulses because in this case the field-induced change in the refractive index is influenced by higher-order nonlinearities and, as a consequence, this change becomes saturated. This model is appropriate to describe materials such as semiconductor-doped glasses (e.g. $\text{CdS}_{1-x}\text{Se}_x$) and organic polymers, which have high nonlinear optical properties.

The wave propagation is solved using a time-domain modified version of the standard fast Fourier Beam Propagation Method (FFT-BPM) with an adaptive step size, which can handle transmission, diffraction and, especially, reflection of electromagnetic waves caused by discontinuities on the refractive index, with the advantage of not requiring the introduction of additional boundary conditions.

Sumário

1	Introdução	2
2	Estruturas 1D com <i>Band Gap</i> Fotônico	9
2.1	Electromagnetismo de Estruturas Dielétricas Periódicas	10
2.1.1	Electromagnetismo como um problema de valores próprios	10
2.1.2	Teorema de Floquet-Bloch	12
2.2	Óptica de super-redes dielétricas periódicas	16
2.2.1	Reflexão e refração através de uma interface dielétrica	16
2.2.2	Formulação matricial para meios isotrópicos estratificados	20
2.2.3	Aplicação do formalismo a meios periódicos	24
3	Propagação Não Linear de Pulsos Ópticos	33
3.1	Índice de Refração Dependente da Intensidade	33
3.2	Dinâmica da Propagação de Pulsos	36
3.3	Aplicações	41
3.3.1	Limitador óptico	41
3.3.2	Switch óptico	42
3.3.3	Diodo óptico	45
4	Conclusões e Perspectivas	49
A	Split-Step Beam Propagation Method	51
A.1	SS-BPM standard	51
A.2	SS-BPM modificado: formalismo no domínio do tempo	53
B	Método do Princípio de Incerteza: Passo Adaptativo	56

Capítulo 1

Introdução

Na última década, avanços consideráveis na fabricação, caracterização experimental e entendimento teórico de nanoestruturas fotônicas, têm conduzido à criação de uma ampla variedade de estruturas periódicas uni-, bi- e tri-dimensionais, tanto dielétricas quanto metálico-dielétricas, que exibem propriedades ópticas lineares, não lineares e quântico-ópticas, inovadoras e muito interessantes, que podem proporcionar um controle da propagação da luz e da interação luz-matéria sem precedentes. Durante grande parte do século XX, o foco esteve no controle e aproveitamento das propriedades elétricas dos materiais, que graças aos progressos na física de semicondutores permitiu a revolução da eletrônica, com um impacto na computação e nas telecomunicações que convém ressaltar. Agora, o foco de atenção de muitos cientistas tem se transferido para a luz ao invés dos elétrons, devido às várias vantagens que, em princípio, apresenta seu uso como portadora da informação: esta pode viajar a velocidades muito maiores que os elétrons em um fio metálico, pode carregar ademais uma maior quantidade de informação por segundo (largura de banda), e além disso, os fótons não interagem tão fortemente entre si quanto os elétrons, o que implica em uma redução importante nas perdas por absorção.

Baseados no sucesso dos materiais para a eletrônica, os cristais fotônicos despontam como uma alternativa atraente para o desenho de materiais que possam afetar as propriedades dos fótons da mesma forma como os semicondutores afetam as propriedades dos elétrons. Em um semicondutor, o potencial periódico apresentado pela rede cristalina aos elétrons e a própria geometria da rede, determinam as propriedades de condução do cristal. Em particular, a rede pode fazer com que elétrons com certas energias e em certas direções estejam proibidos de se propagar: os denominados *gaps* na estrutura de bandas de energia de um cristal. Em um cristal fotônico, os átomos e moléculas que compõem a rede são substituídos por meios dielétricos macroscópicos que podem ser descritos através de uma função dielétrica periódica. Portanto, um cristal fotônico pode ser desenhado para que tenha um *band gap*

fotônico, isto é, um intervalo de frequências no qual a luz não pode existir dentro do cristal. Continuando com esta analogia, podemos estender boa parte da terminologia da física do estado sólido ao caso eletromagnético, e identificar conceitos tais como espaço recíproco, zona de Brillouin, relações de dispersão, funções de onda de Bloch, singularidades de van Hove, estados localizados devido a defeitos, etc. Tudo isto fruto da similaridade formal que existe entre a equação de Schrödinger com potenciais periódicos e a equação de onda de Maxwell para meios dielétricos periódicos¹:

$$\nabla \times \nabla \times \mathbf{E}(\mathbf{r}) = \left(\frac{\omega}{c}\right)^2 \epsilon(\mathbf{r}) \mathbf{E}(\mathbf{r}), \quad (1.1)$$

$$\nabla^2 \psi(\mathbf{r}) = -\frac{2m}{\hbar^2} [E - V(\mathbf{r})] \psi(\mathbf{r}). \quad (1.2)$$

A idéia de criar um cristal fotônico provém dos trabalhos seminais de Eli Yablonovitch e Sajeev John em finais dos anos 80, embora, cada um deles tivesse um objetivo diferente. Ambos sugeriram que estruturas com variações periódicas na sua constante dielétrica poderiam influenciar a natureza dos modos fotônicos em um material. Yablonovitch procurava uma forma de controlar o até então ineludível fenômeno da emissão espontânea de luz em óptica quântica, o que teria uma grande importância prática e comercial, “já que a maior parte da corrente elétrica consumida para produzir *lasing* era desperdiçada em emissão espontânea”[1, 2]. John pela sua parte, queria observar o fenômeno fotônico análogo à localização eletrônica de Anderson em sólidos desordenados [3].

É importante destacar também, o desafio experimental que dificulta a fabricação destas estruturas artificiais considerando-se que a constante de rede de um cristal fotônico deve ser comparável ao comprimento de onda da luz que se deseja controlar. Para que os dispositivos baseados em cristais fotônicos sejam úteis na indústria das telecomunicações e da optoeletrônica, a constante de rede deve ser da ordem de $0.5 \mu\text{m}$, já que a frequência usual de operação nestas áreas é de $1.5 \mu\text{m}$, que embora seja mil vezes maior que a constante de rede de sólidos cristalinos, é ainda cem vezes menor que o diâmetro de um fio de cabelo, o que requer estado da arte em técnicas tais como litografia holográfica, *direct laser writing* ou CVD (*chemical vapor deposition*), entre outras.

Evidentemente, a dimensionalidade de um cristal fotônico é crucial para o desenvolvimento de certas aplicações. Estruturas *unidimensionais* constituem o caso mais simples de um cristal fotônico que, embora seja um sistema conhecido desde há mais de um século den-

¹Cabe ressaltar de qualquer forma algumas divergências essenciais como a diferença entre os *spins* de ambas partículas: os fótons são bósons enquanto os elétrons são férmions, o que resulta em estatísticas diferentes, importantes no momento de calcular a densidade de estados em cada caso; e também, a natureza distinta de ambas equações: a equação para os fótons é de caráter vetorial enquanto a equação eletrônica é escalar.

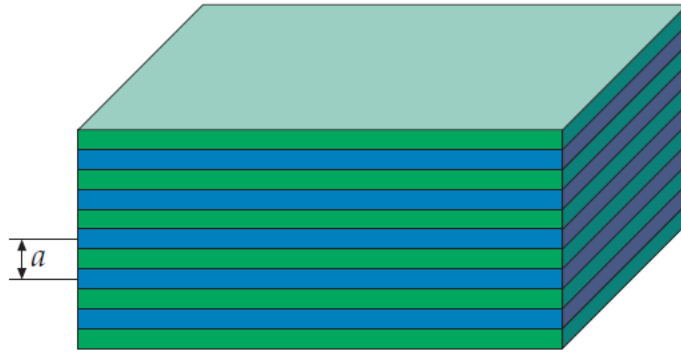


Figura 1.1: A super-rede dielétrica é a geometria mais comum de cristal fotônico 1D, composto de camadas alternadas de materiais com diferentes constantes dielétricas, com um período espacial de a . Fonte: [5].

tro do campo da óptica, apresentam características físicas fundamentais que se mantêm nas estruturas com dimensionalidades maiores: *band gaps* fotônicos, modos localizados, estados superficiais, e inclusive reflexão omnidirecional. De fato, este trabalho está centrado neste tipo de estruturas, destacando a importância dos efeitos não lineares para o desenvolvimento de dispositivos completamente ópticos, como explicar-se-á mais adiante. A geometria arquetípica do caso 1D é o espelho de Bragg, esquematizado na fig. 1.1 (detalhes adicionais serão discutidos no segundo capítulo). Os cristais fotônicos *bidimensionais* seguem em nível de complexidade, e seu interesse principal está nas suas potenciais aplicações dentro de circuitos integrados ópticos como guias de onda. As geometrias emblemáticas neste caso são de dois tipos: uma consiste em um arranjo quadrado ou triangular de cilindros dielétricos não superpostos (fig. 1.2a) enquanto a outra está baseada na estrutura inversa, ou seja, cilindros de ar introduzidos através de perfurações em um molde dielétrico (fig. 1.2b). A idéia básica neste caso é usar defeitos lineares para guiar luz cujas frequências estejam dentro do *band gap* fotônico do cristal ao que está confinada. Este é um mecanismo inovador para guiar luz sem perdas, alternativo às fibras ópticas que estão baseadas na reflexão total interna, e onde a luz pode escapar para ângulos de incidência muito grandes. O cristal fotônico pode, no entanto, confinar a luz ainda através de curvas pronunciadas (ver figura 1.3). O primeiro cristal fotônico *tridimensional* com um *band gap* fotônico completo foi fabricado por Yablonovitch em 1991² no regime de microondas [4], resultando na estrutura mostrada na figura 1.4a, chamada depois de 'Yablonovita'. Desde então vários outros desenhos têm aparecido que oferecem tal característica, tais como a estrutura tipo *woodpile* [6] e a opala inversa (veja as figuras 1.4b e 1.4c respectivamente). Para saber detalhes do progresso das técnicas de

²Quatro anos depois da sua proposta inicial, já que não era nada obvio que geometria de rede proporcionaria um *band gap* fotônico completo.

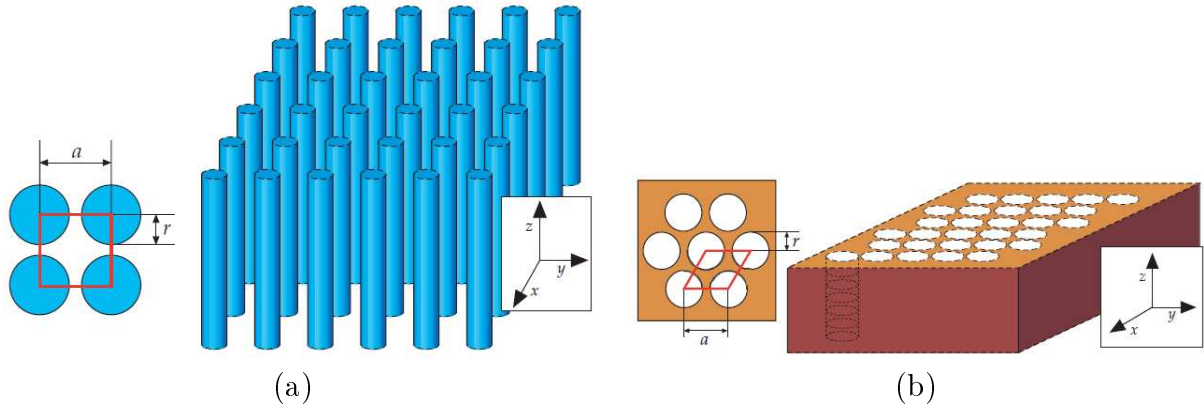


Figura 1.2: Duas geometrias típicas para um cristal fotônico 2D. (a) Uma rede quadrada de cilindros dielétricos de raio r e constante dielétrica ϵ ; o material é homogêneo ao longo da direção z e com periodicidade no plano xy com constante de rede a . O *inset* da esquerda mostra vista superior desta estrutura, com a célula unitária destacada em vermelho. (b) Uma rede triangular de colunas de ar de raio r , dentro de um molde dielétrico que se estende homogeneamente no eixo z . O *inset* esquerdo dá o corte transversal (no plano xy) do cristal fotônico, destacando a célula unitária em vermelho. Fonte: [5].

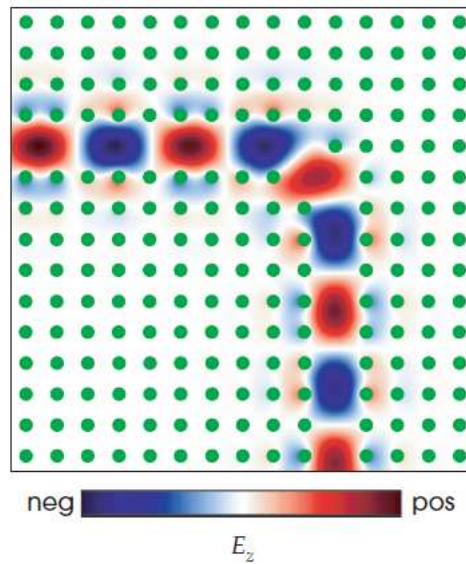


Figura 1.3: Guia de onda formada removendo uma fileira de cilindros da rede perfeita do cristal fotônico 2D da fig. 1.2a, o que permite a aparição de uma banda de modos guiados ou localizados na região de frequências proibidas. Na figura mostra-se uma simulação do campo elétrico da luz propagando-se através de um guia de onda com uma dobra angulosa. Ainda através da dobra em ângulo reto, 98% da potência da luz que entra por um extremo sai do outro lado, o que deve ser contrastado com o 30% de transmitância de uma fibra óptica convencional análoga. Fonte: A. Mekis, Phys. Rev. Lett. **77**, 3787 (1996).

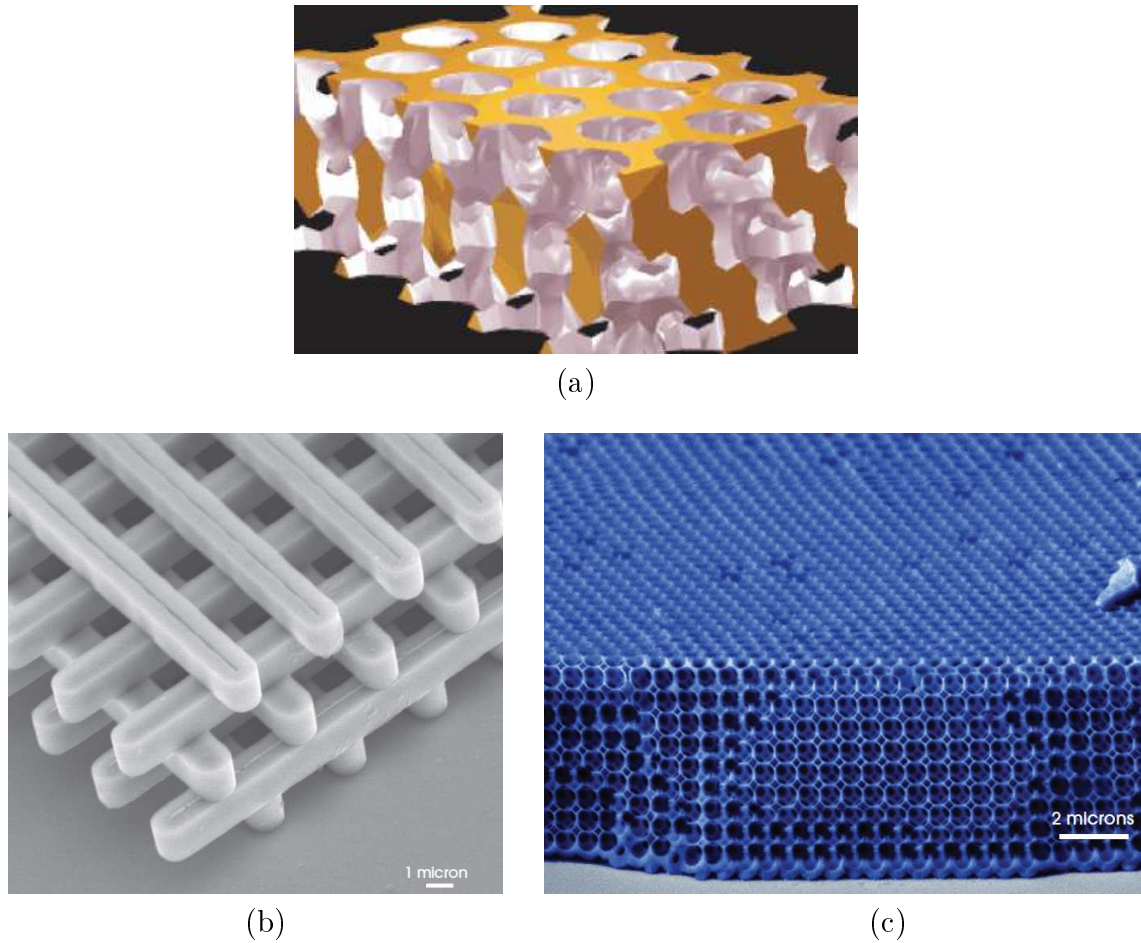


Figura 1.4: Geometrias emblemáticas de cristais fotônicos 3D. (a) Imagem computacional da estrutura conhecida como a Yablonovita. (b) Imagem de microscópio eletrônico de um cristal fotônico tipo *woodpile*. Os lingotes que compõem esta estrutura formam uma rede fcc empilhada na direção [001]. (c) Imagem SEM da estrutura de opala inversa: composta de cascas dielétricas (silício) em uma rede cúbica centra nas cara (fcc). Fonte: [5].

fabricação, além dos vários enfoques tanto teóricos quanto numéricos desenvolvidos para este campo, o leitor interessado é referido ao artigo de revisão de Busch *et al.* [7].

A princípio dos anos 80, uma nova área de pesquisa nasceu da interseção e crescimento dos campos da óptica não linear e dos cristais fotônicos. A disponibilidade de fontes intensas de laser junto com a possibilidade de confinar a luz a regiões espaciais pequenas dentro dos cristais fotônicos permitiram gerar campos ópticos que ocasionam mudanças consideráveis na função dielétrica dos materiais que compõem a estrutura periódica. Este fato implica que podemos 'confeccionar' a estrutura de bandas dos cristais fotônicos usando a própria intensidade da luz incidente. Alguns dos primeiros trabalhos que descrevem as propriedades não lineares de estruturas dielétricas periódicas são os de Winful *et al.* [8], nos que se destacam um conjunto de novos fenômenos que poderiam aparecer em estruturas periódicas

unidimensionais com não linearidades do tipo Kerr, incluindo biestabilidade, chaveamento (*switching*) e limitação óptica. Por outro lado, luz de comprimento de onda da ordem do período da estrutura sofre uma forte dispersão ocasionada pelas múltiplas reflexões entre as camadas da estrutura periódica; se combinarmos este efeito com a mudança não linear na constante dielétrica devido às fortes intensidades, podemos encontrar uma nova classe de sólitons: pulsos que retêm sua forma na propagação embora a tendência a se alargar devida à dispersão. Este novo passo no estudo dos efeitos não lineares em cristais fotônicos foi dado por Chen e Mills [9] que encontraram soluções solitônicas estacionárias para estas estruturas. Estes sólitons podem ser caracterizados pela sua frequência com relação ao *band gap* fotônico: *gap solitons*, aqueles cuja frequência cai dentro do *band gap* fotônico e *Bragg solitons*, cujas frequências estão perto do *band gap* mas predominantemente fora dele; e têm propriedades únicas como por exemplo poder viajar a qualquer velocidade, desde a velocidade da luz no meio até inclusive zero. Todos estes resultados têm sido analisados por um certo número de pesquisadores usando formalismos de função envolvente, que podem ser encontrados no artigo de revisão de deSterke & Sipe [10].

Estes novos fenômenos físicos descobertos em cristais fotônicos não lineares certamente vão conduzir a avanços em dispositivos ópticos e podem tornar realidade a construção de microcircuitos fotônicos, análogos aos circuitos integrados fotônicos de hoje em dia, que podem realizar tarefas em sistemas de comunicação e processamento ópticos. Alguns exemplos incluem: formação, compressão e regeneração de pulsos, *buffers* ópticos para armazenagem da luz por períodos estendidos, que podem substituir as atuais memórias eletrônicas, chaveadores ópticos, limitadores ópticos, diodos ópticos, amplificadores paramétricos ópticos etc. O estudo de algumas destas aplicações em potencial é o tema central deste trabalho.

A organização desta dissertação é a seguinte. No capítulo 2 estabelece-se o formalismo teórico no regime linear para a análise da propagação de ondas eletromagnéticas através de meios dielétricos estratificados, em especial, meios periódicos [20]. Usa-se com este fim o método de matriz de transferência. O teorema de Floquet-Bloch é combinado com dito formalismo para derivar relações de dispersão, estrutura de bandas, transmitância e reflectância das super-redes dielétricas. No capítulo 3, apresenta-se a idéia central da dissertação, isto é, o índice de refração dependente da intensidade para o controle dinâmico da largura do *band gap* usando pulsos ópticos. Baseados nesta idéia simulações numéricas da propagação de pulsos obtidas a partir da solução da equação de onda de Maxwell na matéria para o regime não linear são apresentadas. A equação de propagação é resolvida usando o método de *split-step* modificado [35], variante do método tradicional, comum na análise da propagação de pulsos ópticos em fibras ópticas, mas neste caso com a propagação no domínio temporal. Este tem a importante vantagem de não precisar do uso de condições de contorno subsidiárias devidas

à descontinuidades no índice de refração já que estão implicitamente contidas na evolução dinâmica das equações.

Em particular neste trabalho, analisa-se a propagação de pulsos ópticos gaussianos através de super-redes dielétricas compostas de camadas alternadas de material dielétrico e sem perdas, com índices de refração n_1 e n_2 , onde se considera que um desses materiais possui uma não linearidade do tipo Kerr ou Kerr saturável. Baseados nas idéias de Scalora *et al.* [25, 26], algumas aplicações potenciais tais como a de um limitador, um chaveador (*switch*) e um diodo ópticos, são demonstradas. Finalmente, no capítulo 4, temos as conclusões desta dissertação e algumas possíveis perspectivas de trabalho para o futuro. Nos apêndices explicita-se em que consiste o método *split-step* modificado e como pode ser implementado (Apêndice A), além de apresentar o critério usado para a escolha do passo de propagação, crucial no desempenho e na eficiência do mesmo (Apêndice B).

Capítulo 2

Estruturas 1D com *Band Gap* Fotônico

O exemplo mais simples de um cristal fotônico é a chamada super-rede dielétrica¹ que consiste de camadas de materiais alternados, com diferentes larguras e constantes dielétricas, se repetindo indefinidamente (fig. 2.1). Estas estruturas (que não são uma novidade: a idéia de um *band gap* fotônico unidimensional era conhecida desde 1887 com o trabalho de Lord Rayleigh [11]) têm sido usadas principalmente como espelhos (Bragg *mirrors*) para refletir luz incidente em uma certa direção, com frequências dentro de um intervalo específico, e seu estudo têm sido estimulado pelas suas desejáveis características tais como, perdas extremadamente baixas para frequências ópticas ou no IR, baixo custo e, facilidade de fabricação. Embora seja um sistema estudado há mais de um século, ainda recentemente, diversas notáveis invenções baseadas em cristais fotônicos 1D têm sido desenvolvidas: um refletor dielétrico omnidirecional [12, 13], um guia de onda coaxial completamente dielétrico [14] e uma fibra de espelho dielétrico omnidirecional [15], são algumas das mais destacadas, tudo isto sem mencionar as múltiplas possibilidades que se abrem ao considerar materiais não lineares. O objetivo deste capítulo é, portanto, estabelecer o marco teórico necessário para o estudo da propagação de ondas electromagnéticas em meios periódicos dielétricos e introduzir alguns conceitos e propriedades importantes que aparecem neste tipo de sistemas, dando especial atenção ao caso unidimensional. Por enquanto o tratamento será feito no regime linear deixando a inclusão de alguns efeitos não lineares para o capítulo 3.

¹em inglês *dielectric superlattice or multilayer stack*

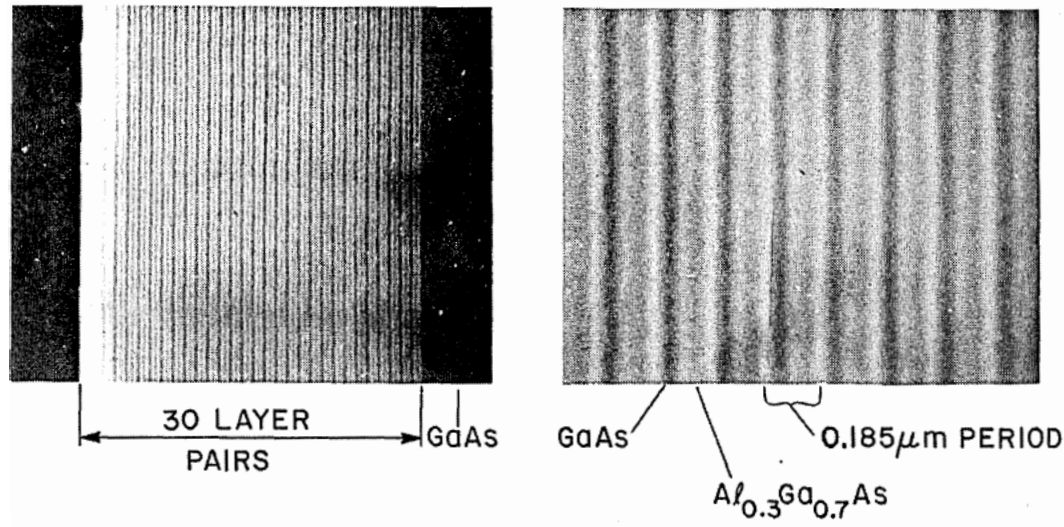


Figura 2.1: (a) SEM (11000 $\times$) de 30 pares de camadas alternadas de GaAs (cor escura) e $\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As}$ (cor clara) crescidos sobre um substrato de GaAs. (b) Fotografia a 55000 $\times$ mostrando o período de 0.185 μm . Fonte: J. P. van der Ziel & M. Llegems, Appl. Opt. 14, 2627 (1975).

2.1 Electromagnetismo de Estruturas Dielétricas Periódicas

2.1.1 Electromagnetismo como um problema de valores próprios

A partir de um ponto de vista teórico, a descrição da luz em cristais fotônicos envolve a solução das equações de Maxwell em um meio dielétrico periódico, e como já se mencionou na introdução, encontra-se analogias diretas com propagação de ondas de matéria em potenciais periódicos. Um aspecto interessante destas equações é que, a diferença do problema complexo de muitos corpos fortemente interagentes dos elétrons dentro de um sólido, estas podem ser resolvidas “exatamente”, enquanto estivermos considerando materiais lineares e não haja interação entre os fótons. Isto significa que os cálculos teóricos podem proporcionar descrições e previsões bem precisas das propriedades dos fótons e portanto ser muito úteis e complementares às pesquisas experimentais.

No nosso caso consideramos materiais isotrópicos (a função dielétrica é uma função escalar), não dispersivos (a função dielétrica não depende da frequência ou é praticamente constante dentro do intervalo de interesse, há uma resposta instantânea do meio) e transparentes (a função dielétrica é real e positiva, não há perdas). Em ausência de cargas e correntes livres ($\rho = 0$ e $\mathbf{J} = 0$), as equações de Maxwell em um meio contínuo podem ser escritas (em unidades do SI):

$$\nabla \times \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = -\frac{\partial}{\partial t} \mathbf{B}(\mathbf{r}, t), \quad \nabla \cdot \mathbf{D}(\mathbf{r}, t) = 0, \quad (2.1)$$

$$\nabla \times \mathbf{H}(\mathbf{r}, t) = +\frac{\partial}{\partial t} \mathbf{D}(\mathbf{r}, t), \quad \nabla \cdot \mathbf{B}(\mathbf{r}, t) = 0. \quad (2.2)$$

Também, relacionamos, $\mathbf{D}$ com $\mathbf{E}$, e $\mathbf{B}$ com $\mathbf{H}$, através das relações constitutivas:

$$\mathbf{D}(\mathbf{r}, t) = \epsilon_0 \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) + \mathbf{P}(\mathbf{r}, t), \quad (2.3)$$

$$\mathbf{B}(\mathbf{r}, t) = \mu_0 \mathbf{H}(\mathbf{r}, t) + \mathbf{M}(\mathbf{r}, t), \quad (2.4)$$

com $\mathbf{P}$ e $\mathbf{M}$ sendo a polarização elétrica e magnetização magnética, e ϵ_0 e μ_0 são a permissividade elétrica e susceptibilidade magnética do vácuo, respectivamente.

Na maioria dos casos, podemos relacionar o campo elétrico, $\mathbf{E}$, e a polarização, $\mathbf{P}$, mediante uma serie de potencias em $\mathbf{E}$, da seguinte forma [16]:

$$P_i/\epsilon_0 = \sum_j \chi_{ij}^{(1)} E_j + \sum_{j,k} \chi_{ijk}^{(2)} E_j E_k + \sum_{j,k,l} \chi_{ijkl}^{(3)} E_j E_k E_l + \dots \quad (2.5)$$

onde os tensores, $\chi_{ij}^{(1)}$, $\chi_{ijk}^{(2)}$, $\chi_{ijkl}^{(3)}$, são as susceptibilidades ópticas de primeira, segunda, e terceira ordem respectivamente. Por enquanto vamos limitar a análise ao regime linear, negligenciando então os termos de $\mathcal{O}(E^2)$, ou em outras palavras, admitindo intensidades de campo elétrico pequenas. No capítulo seguinte voltaremos a este ponto para incluir alguns efeitos de terceira ordem.

Dentro das aproximações mencionadas, as equações constitutivas são reescritas assim²

$$\mathbf{D}(\mathbf{r}, t) = \epsilon_0 \epsilon(\mathbf{r}) \mathbf{E}(\mathbf{r}, t), \quad (2.6)$$

e

$$\mathbf{B}(\mathbf{r}, t) = \mu_0 \mu(\mathbf{r}) \mathbf{H}(\mathbf{r}, t) \cong \mu_0 \mathbf{H}(\mathbf{r}, t), \quad (2.7)$$

onde substituímos $\mu(\mathbf{r}) \cong 1$ já que consideraremos materiais não magnéticos, e neste caso, ϵ é o quadrado do índice de refração, que em geral está definido como $n = \sqrt{\epsilon(\mathbf{r}) \mu(\mathbf{r})}$. As equações de Maxwell ficam

$$\nabla \times \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = -\mu_0 \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{H}(\mathbf{r}, t), \quad \nabla \cdot [\epsilon(\mathbf{r}) \mathbf{E}(\mathbf{r}, t)] = 0, \quad (2.8)$$

²Alguns autores usam ϵ_r para a permissividade relativa e ϵ para a permissividade $\epsilon_0 \epsilon_r$. Aqui adotamos a convenção sem o subíndice r , já que trabalhamos somente com a quantidade adimensional ϵ_r .

$$\nabla \times \mathbf{H}(\mathbf{r}, t) = +\epsilon_0 \epsilon(\mathbf{r}) \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{E}(\mathbf{r}, t), \quad \nabla \cdot \mathbf{H}(\mathbf{r}, t) = 0. \quad (2.9)$$

A linearidade das eqs. 2.8-2.9 nos permite construir soluções que são superposição de modos harmônicos dos campos elétrico e magnético,

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{E}(\mathbf{r}) \exp(-i\omega t) + \text{c.c.} \quad (2.10)$$

e

$$\mathbf{H}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{H}(\mathbf{r}) \exp(-i\omega t) + \text{c.c.}, \quad (2.11)$$

e onde $\mathbf{E}(\mathbf{r})$ e $\mathbf{H}(\mathbf{r})$ são os chamados perfis dos modos ou simplesmente modos electro-magnéticos, que são funções da frequência além da posição. Usando as soluções 2.10-2.11 podemos combinar as equações do rotacional para obter as equações de onda para o campo elétrico e magnético no domínio da frequência:

$$\left[\nabla \times \left(\frac{1}{\epsilon(\mathbf{r})} \nabla \times \right) \right] \mathbf{H}(\mathbf{r}) = \left(\frac{\omega}{c} \right)^2 \mathbf{H}(\mathbf{r}), \quad (2.12)$$

$$\left[\frac{1}{\epsilon(\mathbf{r})} \nabla \times \nabla \times \right] \mathbf{E}(\mathbf{r}) = \left(\frac{\omega}{c} \right)^2 \mathbf{E}(\mathbf{r}) \quad (2.13)$$

com $c = 1/\sqrt{\epsilon_0 \mu_0} = 2.9979 \times 10^8 \text{m/s}$, a velocidade da luz no vácuo. Estas equações de onda sujeitas às restrições estabelecidas pelas equações da divergência, $\nabla \cdot [\epsilon(\mathbf{r}) \mathbf{E}(\mathbf{r}, t)] = 0$ e $\nabla \cdot \mathbf{H}(\mathbf{r}, t) = 0$ (condições de transversalidade), nos dão toda a informação possível para encontrar os modos $\mathbf{H}(\mathbf{r})$ e $\mathbf{E}(\mathbf{r})$. Temos formuladas então as equações diferenciais para achar os modos electromagnéticos como problemas de autovalores. No caso da eq. 2.12, por exemplo, $\mathbf{H}(\mathbf{r})$ são as autofunções correspondentes ao operador hermitiano $\hat{\Theta}$:

$$\hat{\Theta} \equiv \left[\nabla \times \left(\frac{1}{\epsilon(\mathbf{r})} \nabla \times \right) \right] \quad (2.14)$$

e cujos autovalores são proporcionais ao quadrado das frequências de ditos modos: $(\omega/c)^2$. Todas as propriedades, familiares da mecânica quântica, para operadores hermitianos são então válidas: combinação linear de soluções é também solução, autovalores reais, ortogonalidade e completeza das autofunções, estas podem ser obtidas de um principio variacional, etc [17].

2.1.2 Teorema de Floquet-Bloch

Esta analogia com o caso quântico é aproveitada ao máximo no estudo de cristais fotônicos, reconhecendo estes como um arranjo espacialmente periódico de material dielétrico, cuja

função dielétrica $\epsilon(\mathbf{r})$ (que faz as vezes do potencial periódico apresentado pela rede cristalina aos elétrons), exhibe simetrias translacionais, tanto contínuas quanto discretas. Usando a terminologia da física do estado sólido [18], o cristal fotônico pode ser descrito através de uma rede de Bravais d -dimensional (uni-, bi- ou tridimensional) subjacente $\mathbf{R}$, que consiste de todos os pontos com vetor posição $\mathbf{R}$ da forma $\mathbf{R} = \sum_{i=1}^d l_i \mathbf{a}_i$, onde os $l_i \in \mathbb{Z}$ e $\mathbf{a}_i$ são os vetores primitivos que formam um conjunto de vetores linearmente independentes que geram a rede. Portanto podemos escrever

$$\epsilon(\mathbf{r}) = \epsilon(\mathbf{r} + \mathbf{R}) \quad (2.15)$$

para todo $\mathbf{r} \in \mathbf{R}$. Assim mesmo, a análise de Fourier de funções com a periodicidade de uma rede de Bravais, tal como a permissividade $\epsilon(\mathbf{r})$, conduz à noção de rede recíproca, $\mathbf{G}$, associada a uma dada rede de Bravais, cujos vetores de rede $\mathbf{G} \in \mathbf{G}$, satisfazem $\mathbf{G} \cdot \mathbf{R} = 2\pi m$ (com m inteiro) para todo $\mathbf{R} \in \mathbf{R}$. Associado à rede de Bravais temos a noção de célula de Wigner-Seitz, que é um volume d -dimensional que quando transladado através de todos os vetores de uma correspondente rede de Bravais, cobre exatamente todo o espaço. A célula de Wigner-Seitz da rede recíproca é a chamada primeira zona de Brillouin.

Por causa das simetrias destes sistemas, o grupo de simetria de uma rede de Bravais inclui em geral rotações, reflexões e inversões que mapeiam a rede sobre si mesma. Matematicamente, que um sistema tenha certa simetria se traduz em que o operador $\hat{\Theta}$ comuta com o operador de simetria correspondente $\hat{S}$: $[\hat{\Theta}, \hat{S}] = 0$, o qual é conveniente já que as autofunções dos operadores de simetria são determinadas facilmente (enquanto às do operador $\hat{\Theta}$ não) e podemos construir e catalogar as autofunções de acordo às propriedades de $\hat{S}$. A título de exemplo examinemos o caso de uma simetria translacional contínua, onde o sistema não muda ao realizar uma translação através de um deslocamento $\mathbf{d} = d\hat{\mathbf{z}}$. Para cada $\mathbf{d}$ temos um operador de translação associado $\hat{T}_{\mathbf{d}}$, tal que $\hat{T}_{\mathbf{d}}\epsilon(\mathbf{r}) = \epsilon(\mathbf{r} + \mathbf{d}) = \epsilon(\mathbf{r})$, e portanto $[\hat{\Theta}, \hat{T}_{\mathbf{d}}] = 0$. É fácil mostrar que as autofunções deste operador são da forma e^{ikz} com autovalor e^{ikd} com certo k . As autofunções do nosso sistema podem ser escolhidas de forma que sejam autofunções dos diferentes $\hat{T}_{\mathbf{d}}$, de maneira que podemos classificá-las pelos valores particulares do vetor de onda k . No caso de um meio homogêneo (simetria translacional nas três direções ou $\epsilon(\mathbf{r})$ constante) por exemplo, os modos são ondas planas,

$$\mathbf{H}_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \mathbf{H}_0 e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \quad (2.16)$$

com $\mathbf{H}_0$ sendo qualquer vetor constante na direção de polarização. Os autovalores correspondentes são $(\omega/c)^2 = k^2/\epsilon$, de onde obtemos a relação de dispersão: $\omega = ck/\sqrt{\epsilon}$. No caso de uma simetria translacional discreta, isto é, o sistema é invariante sob translações múltiplas de

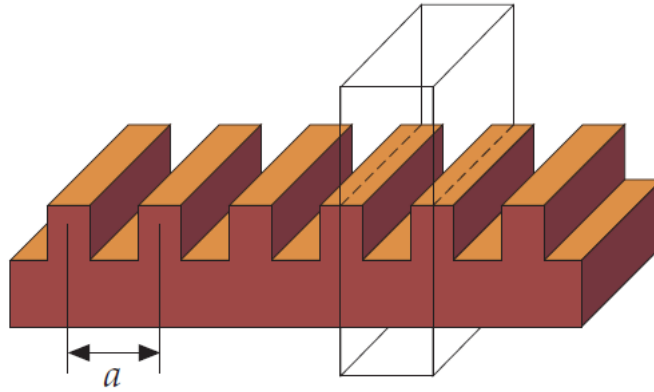


Figura 2.2: Exemplo de uma configuração dielétrica com simetria translacional discreta em uma direção. Deslocando o sistema por um múltiplo inteiro de a na direção de simetria deixa este invariável. Destacada dentro de uma caixa está uma célula unitária. Fonte: [5]

uma distancia fixa, como é o nosso caso de super-redes dielétricas (veja fig. 2.2), podemos, usando os argumentos expostos acima, construir os modos correspondentes à eq. 2.12 da forma

$$\mathbf{H}_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \mathbf{u}_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \quad (2.17)$$

onde $\mathbf{u}_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \mathbf{u}_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r} + \mathbf{R})$, com $\mathbf{R} \in \mathbf{R}$. Os modos têm a forma de uma onda plana multiplicados por uma função vetorial periódica com a periodicidade da rede de Bravais. Aqui o vetor de onda $\mathbf{k}$ está restrito à zona de Brillouin da correspondente rede recíproca e o índice n aparece porque para cada valor de $\mathbf{k}$ teremos muitos modos independentes. Este resultado é o famoso teorema de Floquet-Bloch do estado sólido, e têm importantes consequências:

- Os modos da forma 2.17 são chamados funções de Bloch, são ondas planas caracterizadas por um vetor de onda $\mathbf{k}$, moduladas espacialmente para ter a periodicidade do cristal. Estas podem ser consideradas uma generalização das ondas planas do caso do meio homogêneo ao caso de simetria translacional discreta. O índice n aparece porque para cada $\mathbf{k}$ existem muitas soluções da eq. 2.12. Isto se pode apreciar substituindo as

funções de Bloch na equação de onda para $\mathbf{H}$ obtendo

$$\begin{aligned}
\hat{\Theta} \mathbf{H}_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) &= \left(\frac{\omega_n(\mathbf{k})}{c} \right)^2 \mathbf{H}_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \\
\left[\nabla \times \left(\frac{1}{\epsilon(\mathbf{r})} \nabla \times \right) \right] \mathbf{u}_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} &= \left(\frac{\omega_n(\mathbf{k})}{c} \right)^2 \mathbf{u}_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \\
(\mathbf{i}\mathbf{k} + \nabla) \times \frac{1}{\epsilon(\mathbf{r})} (\mathbf{i}\mathbf{k} + \nabla) \times \mathbf{u}_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) &= \left(\frac{\omega_n(\mathbf{k})}{c} \right)^2 \mathbf{u}_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \\
\hat{\Theta}_{\mathbf{k}} \mathbf{u}_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) &= \left(\frac{\omega_n(\mathbf{k})}{c} \right)^2 \mathbf{u}_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}),
\end{aligned} \tag{2.18}$$

onde se definiu

$$\hat{\Theta}_{\mathbf{k}} \equiv (\mathbf{i}\mathbf{k} + \nabla) \times \frac{1}{\epsilon(\mathbf{r})} (\mathbf{i}\mathbf{k} + \nabla) \times . \tag{2.19}$$

Transformamos o problema anterior de autovalores em outro para funções com a periodicidade da rede, $\mathbf{u}_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$, sujeito a condições de contorno periódicas sobre a célula de Wigner-Seitz. Portanto esperamos encontrar um conjunto infinito e discreto de autovalores (frequências $\omega_n(\mathbf{k})$) que etiquetamos com o índice n , para cada valor dado de $\mathbf{k}$.

- A restrição do vetor de onda $\mathbf{k}$ à primeira zona de Brillouin significa que podemos estender a relação de dispersão $\omega_n(\mathbf{k})$ e as funções de Bloch $\mathbf{H}_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ a vetores de onda fora desta zona. Por isso podemos concluir que autofunções com vetores de onda que diferem só por um vetor da rede recíproca $\mathbf{G}$ têm autofunções idênticas:

$$\begin{aligned}
\mathbf{H}_{n\mathbf{k}+\mathbf{G}}(\mathbf{r}) &= \mathbf{H}_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}), \\
\omega_n(\mathbf{k} + \mathbf{G}) &= \omega_n(\mathbf{k}).
\end{aligned} \tag{2.20}$$

A família de funções contínuas em $\mathbf{k}$, $\omega_n(\mathbf{k})$, constitui a relação de dispersão do cristal fotônico correspondente, comumente chamada *estrutura de bandas fotônica*.

Para fins ilustrativos, mostraremos dois exemplos de estruturas de bandas fotônicas calculadas por Busch *et al.* [7] para dois diferentes cristais fotônicos 2D compostos de buracos de ar dentro de um material dielétrico anfitrião, admitindo que a luz se propaga em um plano normal as buracos (figuras 2.3 e 2.4). Os modos são separados em duas classes correspondentes ao tipo de polarização: polarização tipo E correspondente ao caso em que o campo elétrico é paralelo ao eixo dos buracos, e polarização tipo H na qual o campo magnético é paralelo ao eixo dos buracos. Se assume implicitamente que a estrutura de bandas é apresen-

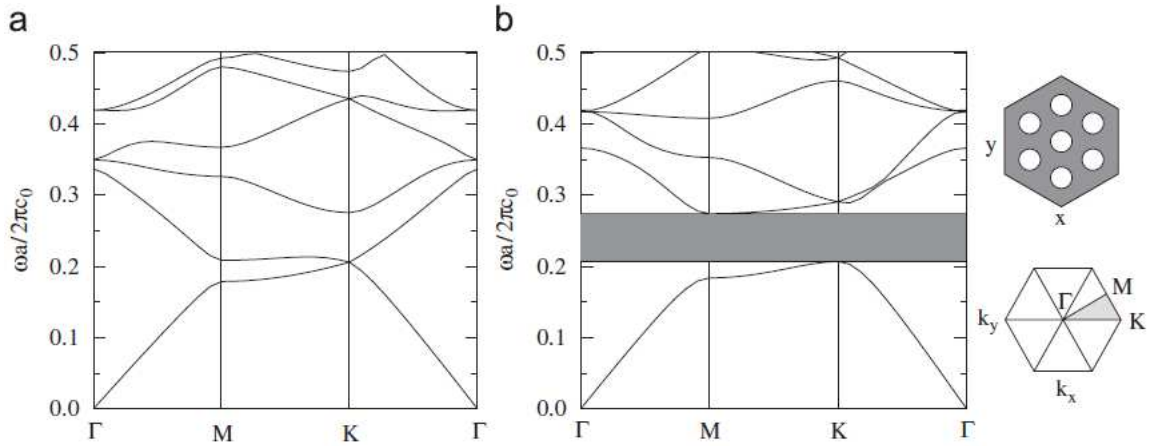


Figura 2.3: Estrutura de bandas fotônica para luz polarizada do (a) tipo E e (b) tipo H , em um cristal fotônico 2D com rede triangular formada por buracos de ar ($\epsilon_1 = 1$) com raio $r_0 = 0.3a$ (a o período da rede) em um dielétrico com permissividade $\epsilon_2 = 12$; os *band gaps* aparecem sombreados. O *inset* superior mostra uma vista transversal do cristal fotônico 2D. O *inset* inferior, a zona de Brillouin correspondente, com a zona irreduzível sombreada. Fonte: [7]

tada sobre as direções de maior simetria da primeira zona de Brillouin (a zona irreduzível), incluída no *inset* da parte inferior direita das figuras.

2.2 Óptica de super-redes dielétricas periódicas

2.2.1 Reflexão e refração através de uma interface dielétrica

Começamos por estabelecer a matriz dinâmica que relaciona as amplitudes das ondas refletida e transmitida em termos da amplitude da onda incidente, impondo condições de contorno em uma interface entre dois meios dielétricos homogêneos (veja fig. 2.5). Já sabemos que os modos que são solução da equação de onda 2.13 são ondas planas que podem ser escritas como uma superposição de ondas incidentes e refletidas em cada meio assim:

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}) = \begin{cases} \mathbf{E}_1 e^{-i\mathbf{k}_1 \cdot \mathbf{r}} + \mathbf{E}'_1 e^{-i\mathbf{k}'_1 \cdot \mathbf{r}}, & z < 0 \\ \mathbf{E}_2 e^{-i\mathbf{k}_2 \cdot \mathbf{r}} + \mathbf{E}'_2 e^{-i\mathbf{k}'_2 \cdot \mathbf{r}}, & z > 0 \end{cases} \quad (2.21)$$

$\mathbf{k}_1$ é o vetor de onda incidente, $\mathbf{k}_2$ é o vetor de onda transmitido, e $\mathbf{k}'_1$ e $\mathbf{k}'_2$ são imagens especulares dos vetores $\mathbf{k}_1$, $\mathbf{k}_2$, respectivamente, devido à lei de Snell. Os vetores de onda têm magnitudes $k_i = n_i \omega / c$. O campo magnético $\mathbf{H}(\mathbf{r})$ pode ser obtido usando a relação do

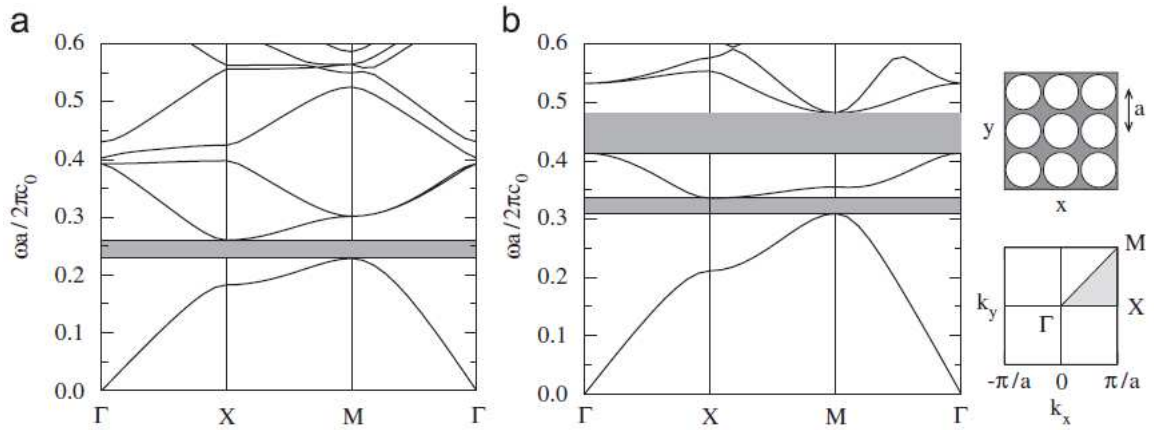


Figura 2.4: Estrutura de bandas fotônica para luz polarizada do (a) tipo E e (b) tipo H , em um cristal fotônico 2D com rede triangular formada por buracos de ar ($\epsilon_1 = 1$) com raio $r_0 = 0.45a$ (a o período da rede) em um dielétrico com permissividade $\epsilon_2 = 12$; os *band gaps* aparecem sombreados. O *inset* superior mostra uma vista transversal do cristal fotônico 2D. O *inset* inferior, a zona de Brillouin correspondente, com a zona irreduzível sombreada. Fonte: [7]

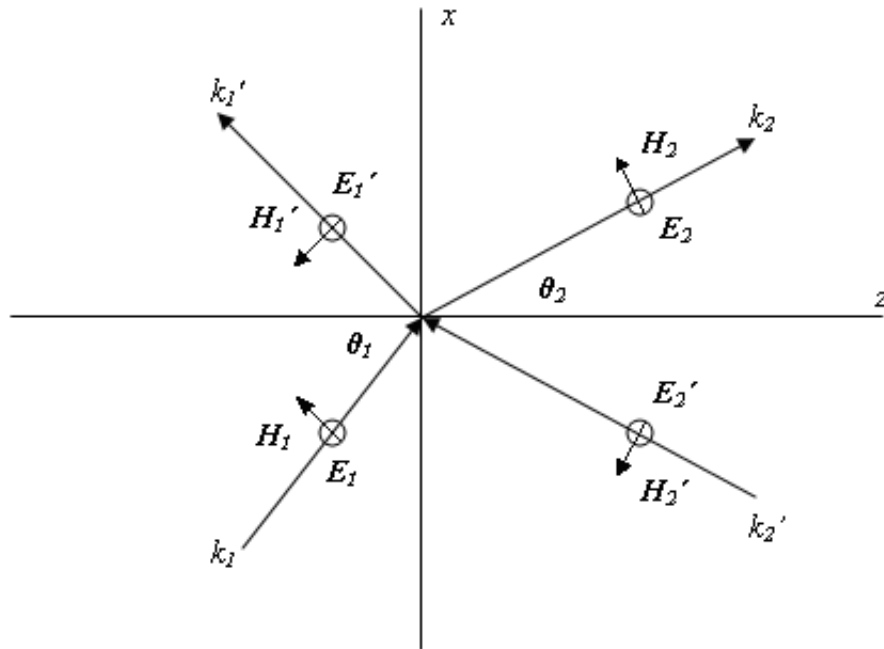


Figura 2.5: Reflexão e refração de uma onda tipo s ou TE. Na configuração para uma onda tipo p ou TM, o campo elétrico fica no plano de incidência.

rotacional para o campo elétrico 2.8 e 2.21,

$$\mathbf{H}(\mathbf{r}) = \frac{i}{\omega} \nabla \times \mathbf{E}(\mathbf{r}). \quad (2.22)$$

Incluimos o termo $\mathbf{E}'_2$ para generalizar o resultado para o tratamento de meios estratificados.

As condições de contorno para meios 1 e 2 homogêneos e isotrópicos requerem que as componentes tangenciais dos campos sejam contínuas na interface [19]. Por isso se acostuma resolver os vetores de campo nas componentes paralela (onda p) e perpendicular (onda s) ao plano de incidência xz . Para a onda s também conhecida como transversal elétrica (TE), todos os vetores de campo elétrico são perpendiculares ao plano de incidência, e a continuidade na interface $z = 0$ conduz a

$$\begin{aligned} E_1^s + E_1^{s'} &= E_2^s + E_2^{s'} \\ \sqrt{\epsilon_1} (E_1^s - E_1^{s'}) \cos \theta_1 &= \sqrt{\epsilon_2} (E_2^s - E_2^{s'}) \cos \theta_2, \end{aligned} \quad (2.23)$$

que pode ser re-escrita em forma matricial,

$$\hat{D}_1^s \begin{bmatrix} E_1^s \\ E_1^{s'} \end{bmatrix} = \hat{D}_2^s \begin{bmatrix} E_2^s \\ E_2^{s'} \end{bmatrix}, \quad (2.24)$$

onde

$$\hat{D}_i^s \equiv \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ \sqrt{\epsilon_i} \cos \theta_i & -\sqrt{\epsilon_i} \cos \theta_i \end{bmatrix}, \quad (2.25)$$

com $i = 1, 2$. A matriz $\hat{D}_i^s$ é chamada a matriz dinâmica da onda s para o meio i .

De forma similar obtemos para a onda p ou transversal magnética (TM), as condições de continuidade na interface,

$$\begin{aligned} (E_1^p - E_1^{p'}) \cos \theta_1 &= (E_2^p - E_2^{p'}) \cos \theta_2 \\ \sqrt{\epsilon_1} (E_1^p + E_1^{p'}) &= \sqrt{\epsilon_2} (E_2^p + E_2^{p'}), \end{aligned} \quad (2.26)$$

de novo compactadas em uma equação matricial:

$$\hat{D}_1^p \begin{bmatrix} E_1^p \\ E_1^{p'} \end{bmatrix} = \hat{D}_2^p \begin{bmatrix} E_2^p \\ E_2^{p'} \end{bmatrix}, \quad (2.27)$$

onde

$$\hat{D}_i^p \equiv \begin{bmatrix} \cos \theta_i & \cos \theta_i \\ \sqrt{\epsilon_i} & -\sqrt{\epsilon_i} \end{bmatrix}. \quad (2.28)$$

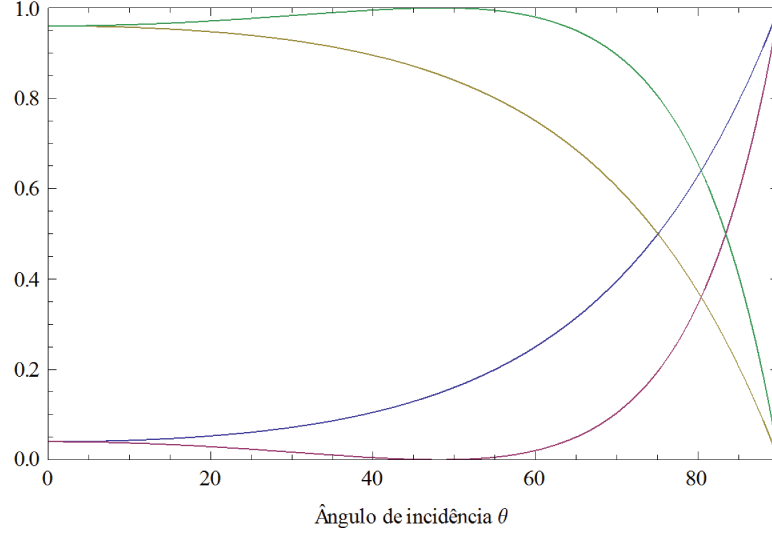


Figura 2.6: Reflectâncias: R^s (azul) e R^p (vermelho), e transmitâncias: T^s (amarelo) e T^p (verde), em função do ângulo de incidência θ_1 para o caso $n_1 = 1.0$ e $n_2 = 1.5$.

Definindo os coeficientes de transmissão e reflexão para uma interface com índices de refração n_1 e n_2 , para a onda s como

$$r^s = \left(\frac{E_1^{st}}{E_1^s} \right), \quad t^s = \left(\frac{E_2^s}{E_1^s} \right), \quad (2.29)$$

e para a onda p como

$$r^p = \left(\frac{E_1^{pt}}{E_1^p} \right), \quad t^p = \left(\frac{E_2^p}{E_1^p} \right), \quad (2.30)$$

e usando as condições de contorno 2.23 e 2.26 respectivamente, obtemos as *formulas de Fresnel* que nos dão os coeficientes de reflexão e transmissão:

$$r^s = \frac{n_1 \cos \theta_1 - n_2 \cos \theta_2}{n_1 \cos \theta_1 + n_2 \cos \theta_2}, \quad t^s = \frac{2n_1 \cos \theta_1}{n_1 \cos \theta_1 + n_2 \cos \theta_2}, \quad (\text{onda } s) \quad (2.31)$$

$$r^p = \frac{n_1 \cos \theta_2 - n_2 \cos \theta_1}{n_1 \cos \theta_2 + n_2 \cos \theta_1}, \quad t^p = \frac{2n_1 \cos \theta_1}{n_1 \cos \theta_2 + n_2 \cos \theta_1}. \quad (\text{onda } p) \quad (2.32)$$

Para encontrar quanta energia é refletida da interface e quanta é transmitida no segundo meio, precisamos calcular as razões entre os vetores de Poynting das ondas refletidas e transmitidas com o vetor de Poynting da onda incidente. A media temporal do vetor de Poynting ($\mathbf{S} = \mathbf{E} \times \mathbf{H}$) fornece o fluxo de energia de uma onda electromagnética se propagando na direção de $\mathbf{k}$; para uma onda plana está dado por $\mathbf{S} = (\mathbf{k}/2\omega) |\mathbf{E}|^2$. Já que o fluxo paralelo à interface é constante, consideramos somente a componente normal dos vetores de Poynting incidente, refletido e transmitido, para definir as reflectâncias e transmitâncias para as ondas

com diferente polarização assim

$$R^s = \left| \frac{\mathbf{S}_1^{s'} \cdot \hat{\mathbf{z}}}{\mathbf{S}_1^s \cdot \hat{\mathbf{z}}} \right|, \quad R^p = \left| \frac{\mathbf{S}_1^{p'} \cdot \hat{\mathbf{z}}}{\mathbf{S}_1^p \cdot \hat{\mathbf{z}}} \right|, \quad (2.33)$$

$$T^s = \left| \frac{\mathbf{S}_2^{s'} \cdot \hat{\mathbf{z}}}{\mathbf{S}_1^s \cdot \hat{\mathbf{z}}} \right|, \quad T^p = \left| \frac{\mathbf{S}_1^p \cdot \hat{\mathbf{z}}}{\mathbf{S}_1^p \cdot \hat{\mathbf{z}}} \right|, \quad (2.34)$$

Então, de acordo a estas definições, a reflectância e a transmitância estão relacionadas aos coeficientes de Fresnel assim,

$$R^s = |r^s|^2, \quad R^p = |r^p|^2, \quad (2.35)$$

$$T^s = \frac{n_2 \cos \theta_2 |t^s|^2}{n_1 \cos \theta_1}, \quad T^p = \frac{n_2 \cos \theta_2 |t^p|^2}{n_1 \cos \theta_1}. \quad (2.36)$$

Como estamos em meios sem perdas a conservação da energia estabelece que $R + T = 1$. Na figura 2.6 mostra-se a variação das reflectâncias R^s e R^p em função do ângulo de incidência para o caso particular $n_1 = 1.0$ e $n_2 = 1.5$.

2.2.2 Formulação matricial para meios isotrópicos estratificados

Usando as fórmulas da seção anterior, continuamos apresentando um enfoque sistemático matricial para tratar o problema de propagação de ondas electromagnéticas em meios com um número arbitrário de camadas de diferentes materiais, método este que é facilmente adaptável para estudar meios periódicos [20].

A estrutura dielétrica é descrita por (veja fig. 2.7) :

$$n(z) = \begin{cases} n_0, & z < z_0, \\ n_1, & z_0 < z < z_1, \\ n_2, & z_1 < z < z_2, \\ \vdots & \vdots \\ n_N, & z_{N-1} < z < z_N, \\ n_S, & z_N < z, \end{cases} \quad (2.37)$$

onde n_l é o índice de refração da l -sima camada, z_l é a posição da interface entre a l -sima camada e a $(l+1)$ -sima, n_S é o índice de refração do substrato e n_0 é esse do meio incidente.

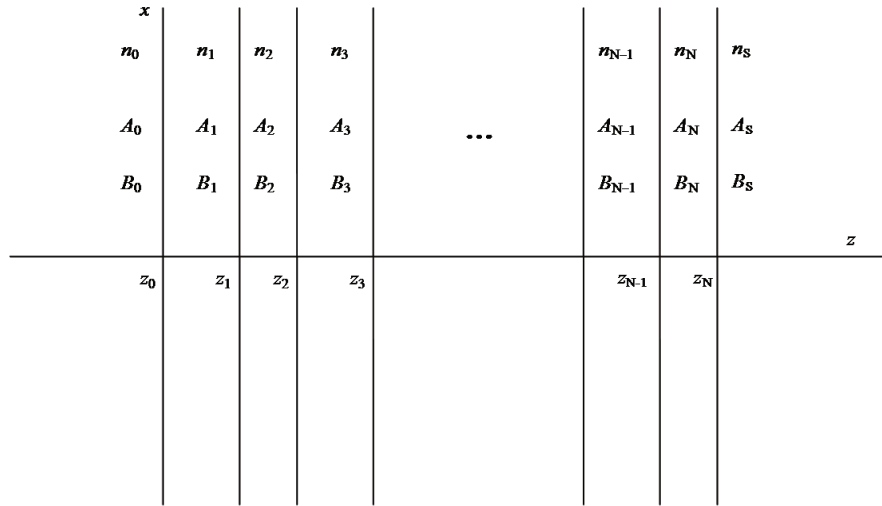


Figura 2.7: Esquema de um meio dielétrico estratificado.

As larguras d_l de cada camada estão relacionadas com os z_l 's através de $d_l = z_l - z_{l-1}$.

Já que os meios são homogêneos no plano xy , os modos do campo elétrico têm a forma

$$E = E(z) e^{i\beta x} \quad (2.38)$$

onde admitimos que a onda se propaga no plano de incidência xz , e β é a componente em x (transversal) do vetor de onda $\mathbf{k}$. Ademais, usamos de novo a decomposição do vetor de campo nas duas polarizações, s ($\mathbf{E} \parallel \hat{\mathbf{y}}$) e p ($\mathbf{H} \parallel \hat{\mathbf{y}}$). A distribuição do campo elétrico $E(z)$ pode ser escrita, de forma análoga à eq. 2.21 como

$$E(z) = \begin{cases} A_0 e^{-ik_0(z-z_0)} + B_0 e^{ik_0(z-z_0)}, & z < z_0, \\ A_l e^{-ik_l(z-z_l)} + B_l e^{ik_l(z-z_l)}, & z_{l-1} < z < z_l, \quad l = 1, 2, \dots, N \\ A_S e^{-ik_S(z-z_S)} + B_S e^{ik_S(z-z_S)}, & z_S < z, \end{cases} \quad (2.39)$$

sendo A_l e B_l representam as amplitudes das ondas à direita e à esquerda, e onde cada k_l é a componente em z do vetor de onda do meio l -simo

$$k_l = \sqrt{\left(\frac{n_l \omega}{c}\right)^2 - \beta^2}, \quad l = 0, 1, 2, \dots, N, S \quad (2.40)$$

relacionados aos ângulos da seção anterior por $k_l = (n_l \omega / c) \cos \theta_l$.

Usando as matrizes dinâmicas $\hat{D}_l$ (eqs. 2.25, 2.28) podemos escrever as seguintes relações

entre as amplitudes do campo eléctrico em cada camada como

$$\begin{aligned} \begin{bmatrix} A_0 \\ B_0 \end{bmatrix} &= \hat{D}_0^{-1} \hat{D}_1 \begin{bmatrix} A_1 \\ B_1 \end{bmatrix}, \\ \begin{bmatrix} A_l \\ B_l \end{bmatrix} &= \hat{P}_l \hat{D}_0^{-1} \hat{D}_1 \begin{bmatrix} A_1 \\ B_1 \end{bmatrix}, \quad l = 1, 2, \dots, N, \end{aligned} \quad (2.41)$$

com $N + 1 \equiv S$, e identificando as distintas $\hat{D}_l$ como

$$\hat{D}_l \equiv \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ n_l \cos \theta_l & -n_l \cos \theta_l \end{bmatrix}, \quad \text{para a onda } s, \quad (2.42)$$

e

$$\hat{D}_l \equiv \begin{bmatrix} \cos \theta_l & \cos \theta_l \\ n_l & -n_l \end{bmatrix}, \quad \text{para a onda } p, \quad (2.43)$$

e ademais onde introduzimos a matriz $\hat{P}_l$ que dá a propagação da onda (*i. e.* a mudança na fase) através do volume da camada, definida por

$$\hat{P}_l \equiv \begin{bmatrix} e^{i\phi_l} & 0 \\ 0 & e^{-i\phi_l} \end{bmatrix}, \quad (2.44)$$

com $\phi_l = k_l d_l$. Em seguida, relacionamos as amplitudes da onda incidente, A_0 e B_0 , com as amplitudes no meio que serve de substrato, A_S e B_S ,

$$\begin{bmatrix} A_0 \\ B_0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} M_{11} & M_{12} \\ M_{21} & M_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A_S \\ B_S \end{bmatrix} = \hat{M} \begin{bmatrix} A_S \\ B_S \end{bmatrix} \quad (2.45)$$

através da matriz $\hat{M}$ definida por

$$\hat{M} \equiv \hat{D}_0^{-1} \left[\prod_{l=1}^N \hat{D}_l \hat{P}_l \hat{D}_l^{-1} \right] \hat{D}_S. \quad (2.46)$$

Por último redefinimos os coeficientes de reflexão e transmissão, r e t da seção anterior, admitindo que a luz é incidente desde o meio 0 (e por tanto devemos fazer $B_S = 0$), assim:

$$r = \frac{B_0}{A_0}, \quad (2.47)$$

e

$$t = \frac{A_S}{A_0}, \quad (2.48)$$

que podemos avaliar usando eq. 2.45, obtendo

$$r = \frac{M_{21}}{M_{11}}, \quad (2.49)$$

e

$$t = \frac{1}{M_{11}}. \quad (2.50)$$

Portanto a reflectância estará dada por

$$R = |r|^2 = \left| \frac{M_{21}}{M_{11}} \right|^2, \quad (2.51)$$

e a transmitância por

$$T = \frac{n_S \cos \theta_S}{n_0 \cos \theta_0} |t|^2 = \frac{n_S \cos \theta_S}{n_0 \cos \theta_0} \left| \frac{1}{M_{11}} \right|^2, \quad (2.52)$$

onde, lembramos, consideramos meios sem perdas.

A maneira de exemplo, aplicamos o método anterior para o cálculo da reflectância e transmitância de luz incidindo *normalmente* sobre uma estrutura multicamada periódica conhecida como *quarter-wave stack*, que consiste de N pares de camadas alternadas com índices de refração n_1 e n_2 , tais que se cumpre a seguinte relação:

$$n_1 d_1 = n_2 d_2 = \frac{\lambda_0}{4}, \quad (2.53)$$

com λ_0 o comprimento de onda da onda incidente. Este tipo particular de super-rede vai ser usado frequentemente ao longo deste trabalho, devido às várias propriedades que apresenta.

De acordo com a eq. 2.46 a matriz $\hat{M}$ estará dada neste caso por

$$\hat{M} = \hat{D}_0^{-1} \left[\hat{D}_1 \hat{P}_1 \hat{D}_1^{-1} \hat{D}_2 \hat{P}_2 \hat{D}_2^{-1} \right]^N \hat{D}_S, \quad (2.54)$$

com matriz de propagação

$$\hat{P}_{1,2} = \begin{bmatrix} i & 0 \\ 0 & -i \end{bmatrix}, \quad (2.55)$$

já que para as camadas de quarto de onda $\phi_l = \pi/2$. Após certa manipulação matricial e usando as eqs. 2.54, 2.55 e a definição 2.51, podemos calcular a reflectância,

$$R = \left(\frac{1 - (n_S/n_0) (n_1/n_2)^{2N}}{1 + (n_S/n_0) (n_1/n_2)^{2N}} \right)^2, \quad (2.56)$$

N	R
1	0.15
2	0.44
3	0.70
4	0.85
5	0.93
6	0.96

Tabela 2.1: Reflectância para o *quarter wave stack*, para luz com $\lambda = 1\mu\text{m}$ a incidência normal e com índices de refração $n_1 = 1.0$ e $n_2 = 1.5$, em função do número de pares de camadas N .

que também pode ser escrita como

$$R = \tanh^2 N\Gamma, \quad (2.57)$$

sendo

$$\Gamma = \ln \frac{n_1}{n_2} + \frac{1}{2N} \ln \frac{n_S}{n_0}. \quad (2.58)$$

Para o caso, $n_0 = n_1 = n_S = 1.0$ e $n_2 = 1.5$, na tabela 2.1 apresenta-se a reflectância de acordo com o número de pares de camadas da estrutura.

2.2.3 Aplicação do formalismo a meios periódicos

Por fim, vamos tratar o caso de importância neste trabalho, um arranjo periódico de interfaces dielétricas que exibem descontinuidades no seu índice refractivo. A característica mais destacada de este tipo de estrutura é a possibilidade de uma grande reflectância, devido ao grande número de reflexões com as múltiplas interfaces. Assumimos que a estrutura é periódica ao longo do eixo z e que o índice de refração tem o seguinte perfil:

$$n(z) = \begin{cases} n_1, & 0 < z < d_1; \\ n_2, & d_1 < z < a; \end{cases} \quad (2.59)$$

com

$$n(z) = n(z + a), \quad (2.60)$$

onde $a = d_1 + d_2$ é o período da estrutura ou tamanho da célula unitária composta de duas camadas dielétricas de larguras d_1 e d_2 . Um esquema da estrutura é apresentado na fig. 2.8.

Novamente o campo elétrico vai ter a forma da eq. 2.38 devido às simetrias do sistema, e expressamos $E(z)$ em cada camada homogênea como a soma de uma onda plana incidente

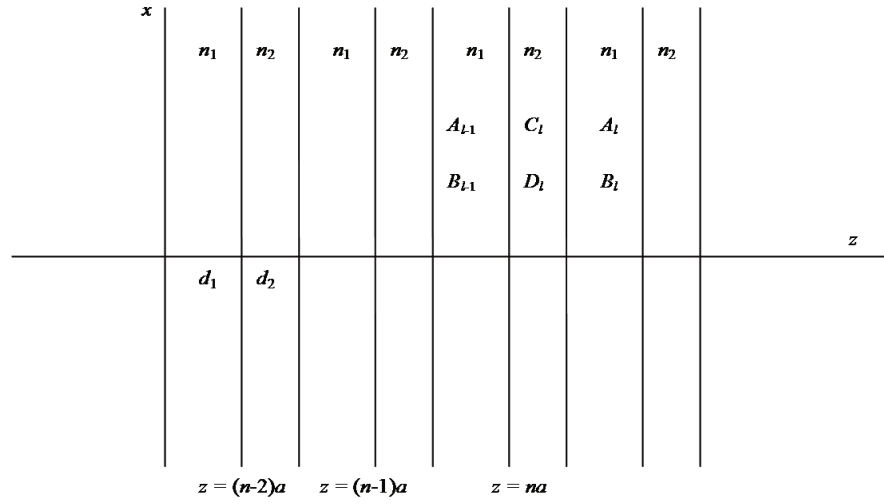


Figura 2.8: Esquema de uma super-rede periódica; se mostram também as amplitudes do campo em cada camada para a n -sima célula unitária.

e uma onda refletida; assim, para a l -sima camada teremos:

$$E(z) = \begin{cases} A_l e^{-ik_1(z-la)} + B_l e^{ik_1(z-la)}, & la - d_1 < z < la; \\ C_l e^{-ik_2(z-la+d_1)} + D_l e^{ik_2(z-la+d_1)}, & (l-1)a < z < la - d_1; \end{cases} \quad (2.61)$$

com

$$\begin{aligned} k_1 &= \sqrt{\left(\frac{n_1\omega}{c}\right)^2 - \beta^2} = \frac{n_1\omega}{c} \cos \theta_1, \\ k_2 &= \sqrt{\left(\frac{n_2\omega}{c}\right)^2 - \beta^2} = \frac{n_2\omega}{c} \cos \theta_2, \end{aligned} \quad (2.62)$$

usando as definições já apresentadas. Usando a formulação matricial podemos relacionar as amplitudes A_l , B_l , C_l e D_l por meio das matrizes $\hat{D}$ e $\hat{P}$:

$$\begin{aligned} \begin{bmatrix} A_{l-1} \\ B_{l-1} \end{bmatrix} &= \hat{D}_1^{-1} \hat{D}_2 \hat{P}_2 \begin{bmatrix} C_l \\ D_l \end{bmatrix}, \\ \begin{bmatrix} C_l \\ D_l \end{bmatrix} &= \hat{D}_2^{-1} \hat{D}_1 \hat{P}_1 \begin{bmatrix} A_l \\ B_l \end{bmatrix}, \end{aligned} \quad (2.63)$$

onde

$$\begin{aligned} P_1 &= \begin{bmatrix} e^{ik_1 d_1} & 0 \\ 0 & e^{-ik_1 d_1} \end{bmatrix}, \\ P_2 &= \begin{bmatrix} e^{ik_2 d_2} & 0 \\ 0 & e^{-ik_2 d_2} \end{bmatrix}. \end{aligned} \quad (2.64)$$

Substituindo as eqs. 2.42-2.43 das matrizes dinâmicas e eqs. 2.64 das matrizes de propagação na eq. 2.63 obtemos, para ondas TE:

$$\begin{bmatrix} A_{l-1} \\ B_{l-1} \end{bmatrix} = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} e^{ik_2 d_2} \left(1 + \frac{k_2}{k_1}\right) & e^{-ik_2 d_2} \left(1 - \frac{k_2}{k_1}\right) \\ e^{ik_2 d_2} \left(1 - \frac{k_2}{k_1}\right) & e^{-ik_2 d_2} \left(1 + \frac{k_2}{k_1}\right) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} C_l \\ D_l \end{bmatrix}, \quad (2.65)$$

e

$$\begin{bmatrix} C_l \\ D_l \end{bmatrix} = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} e^{ik_1 d_1} \left(1 + \frac{k_1}{k_2}\right) & e^{-ik_1 d_1} \left(1 - \frac{k_1}{k_2}\right) \\ e^{ik_1 d_1} \left(1 - \frac{k_1}{k_2}\right) & e^{-ik_1 d_1} \left(1 + \frac{k_1}{k_2}\right) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A_l \\ B_l \end{bmatrix}, \quad (2.66)$$

que ao eliminarmos $\begin{bmatrix} C_l \\ D_l \end{bmatrix}$ fica a equação matricial

$$\begin{bmatrix} A_{l-1} \\ B_{l-1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} M_{11}^{\text{TE}} & M_{12}^{\text{TE}} \\ M_{21}^{\text{TE}} & M_{22}^{\text{TE}} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A_l \\ B_l \end{bmatrix}, \quad (2.67)$$

cujos elementos de matriz são

$$\begin{aligned} M_{11}^{\text{TE}} &= e^{ik_1 d_1} \left[\cos k_2 d_2 + \frac{1}{2}i \left(\frac{k_2}{k_1} + \frac{k_1}{k_2} \right) \sin k_2 d_2 \right], \\ M_{12}^{\text{TE}} &= e^{-ik_1 d_1} \left[\frac{1}{2}i \left(\frac{k_2}{k_1} - \frac{k_1}{k_2} \right) \sin k_2 d_2 \right], \\ M_{21}^{\text{TE}} &= e^{ik_1 d_1} \left[-\frac{1}{2}i \left(\frac{k_2}{k_1} - \frac{k_1}{k_2} \right) \sin k_2 d_2 \right], \\ M_{22}^{\text{TE}} &= e^{-ik_1 d_1} \left[\cos k_2 d_2 - \frac{1}{2}i \left(\frac{k_2}{k_1} + \frac{k_1}{k_2} \right) \sin k_2 d_2 \right], \end{aligned} \quad (2.68)$$

que são funções de β , o vetor de onda na direção transversal. A eq. matricial 2.67 relaciona as amplitudes da onda incidente e refletida da $(l-1)$ -sima camada com as suas equivalentes uma célula unitária adiante. Similarmente obtemos para a polarização TM as seguintes

formulas:

$$\begin{aligned}
M_{11}^{\text{TM}} &= e^{ik_1 d_1} \left[\cos k_2 d_2 + \frac{1}{2}i \left(\frac{n_2^2 k_1}{n_1^2 k_2} + \frac{n_1^2 k_2}{n_2^2 k_1} \right) \sin k_2 d_2 \right], \\
M_{12}^{\text{TM}} &= e^{-ik_1 d_1} \left[\frac{1}{2}i \left(\frac{n_2^2 k_1}{n_1^2 k_2} - \frac{n_1^2 k_2}{n_2^2 k_1} \right) \sin k_2 d_2 \right], \\
M_{21}^{\text{TM}} &= e^{ik_1 d_1} \left[-\frac{1}{2}i \left(\frac{n_2^2 k_1}{n_1^2 k_2} - \frac{n_1^2 k_2}{n_2^2 k_1} \right) \sin k_2 d_2 \right], \\
M_{22}^{\text{TM}} &= e^{-ik_1 d_1} \left[\cos k_2 d_2 - \frac{1}{2}i \left(\frac{n_2^2 k_1}{n_1^2 k_2} + \frac{n_1^2 k_2}{n_2^2 k_1} \right) \sin k_2 d_2 \right].
\end{aligned} \tag{2.69}$$

Usando as fórmulas anteriores podemos relacionar o vetor coluna da camada zero (incidente) com o vetor coluna da camada l -sima assim:

$$\begin{bmatrix} A_l \\ B_l \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} M_{11} & M_{12} \\ M_{21} & M_{22} \end{bmatrix}^{-l} \begin{bmatrix} A_0 \\ B_0 \end{bmatrix}. \tag{2.70}$$

Pode-se mostrar que as componentes da matriz $\hat{M}$ de *transferência* cumprem [20], $M_{11}M_{22} - M_{12}M_{21} = 1$, ou seja $\hat{M}$ é unimodular, e portanto podemos simplificar a equação precedente a

$$\begin{bmatrix} A_l \\ B_l \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} M_{22} & -M_{12} \\ -M_{21} & M_{11} \end{bmatrix}^l \begin{bmatrix} A_0 \\ B_0 \end{bmatrix}. \tag{2.71}$$

De acordo ao teorema de Floquet-Bloch, os modos que são solução à equação de onda para um meio periódico são da forma

$$E_K(x, z) = E_K(z) e^{-i\beta x} e^{-iKz}, \tag{2.72}$$

onde $E_K(z)$ têm a periodicidade da super-rede

$$E_K(z + a) = E_K(z), \tag{2.73}$$

e K é o vetor de onda de Bloch que não deve ser confundido com os vetores de onda em cada meio, k_1 e k_2 . Devido à simetria translacional discreta do sistema na direção z , os valores que pode tomar K estão restritos à zona de Brillouin, $-\pi/a < K \leq \pi/a$. Usando a condição de periodicidade 2.73 em termos dos vetores coluna para o campo em cada camada, segundo nosso formalismo matricial, esta fica

$$\begin{bmatrix} A_l \\ B_l \end{bmatrix} = e^{-iKa} \begin{bmatrix} A_{l-1} \\ B_{l-1} \end{bmatrix}. \tag{2.74}$$

Portanto se segue da eq. 2.67 que o vetor coluna da onda de Bloch satisfaz o seguinte problema de autovalores:

$$\begin{bmatrix} M_{11} & M_{12} \\ M_{21} & M_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A_l \\ B_l \end{bmatrix} = e^{iKa} \begin{bmatrix} A_l \\ B_l \end{bmatrix}, \quad (2.75)$$

onde reconhecemos o fator e^{iKa} como o autovalor da matriz de transferencia $\hat{M}$, e está dado por

$$e^{iKa} = \frac{1}{2} (M_{11} + M_{22}) \pm \sqrt{\left[\frac{1}{2} (M_{11} + M_{22})^2 - 1 \right]}. \quad (2.76)$$

Os autovetores correspondentes aos anteriores autovalores são obtidos a partir de 2.75 e são

$$\begin{bmatrix} A_0 \\ B_0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} M_{12} \\ e^{iKa} - M_{11} \end{bmatrix}, \quad (2.77)$$

salvo uma constante arbitrária.

A equação 2.76 da a relação de dispersão entre ω , β e K para o estado de Bloch 2.72:

$$K(\beta, \omega) = \frac{1}{a} \arccos \left[\frac{1}{2} (M_{11} + M_{22}) \right]. \quad (2.78)$$

Analisando a relação de dispersão podemos identificar dois tipos de estados de Bloch. Quando se cumpre que $\left| \frac{1}{2} (M_{11} + M_{22}) \right| < 1$, K toma valores reais e portanto as ondas de Bloch são propagantes ou, equivalentemente, temos estados *estendidos*. Ao contrário, quando $\left| \frac{1}{2} (M_{11} + M_{22}) \right| > 1$, K se torna complexo e pode ser escrito como $K = m\pi/a + i\kappa$, onde a componente imaginária provoca um decaimento da ordem de $1/\kappa$ e é por isso que estes modos são chamados *evanescentes*. m é um inteiro que dá a ordem da banda. Embora estes modos evanescentes sejam soluções válidas do problema de autovalores, divergem no limite $z \rightarrow \pm\infty$ (dependendo do sinal de κ) e, conseqüentemente, não podem ser excitados dentro de um cristal ideal de extensão infinita. Mas, ao considerar um cristal finito ou um defeito, no que seria de qualquer outra forma um cristal perfeito, pode-se terminar com este crescimento exponencial e portanto admitir um modo evanescente; falamos então que podemos excitar um modo localizado dentro do *band gap* fotônico, fenômeno este análogo aos estados localizados que aparecem na estrutura de bandas de um semiconductor ao introduzir imperfeições na rede cristalina perfeita: impurezas. Por último, a condição $\left| \frac{1}{2} (M_{11} + M_{22}) \right| = 1$ nos dá as bordas do *band gap*.

Para o caso especial de incidência normal, $\beta = 0$, e a relação de dispersão pode ser escrita como

$$\cos Ka = \cos k_1 d_1 \cos k_2 d_2 - \frac{1}{2} \left(\frac{n_1^2 + n_2^2}{n_1 n_2} \right) \sin k_1 d_1 \sin k_2 d_2, \quad (2.79)$$

onde $k_1 = (\omega/c) n_1$ e $k_2 = (\omega/c) n_2$. A figura 2.9 mostra a relação de dispersão o estrutura de bandas fotônica para uma super-rede com $d_1 = d_2 = 0.5a$, com índices de refração $n_1 = 1.0$, $n_2 = 1.5$, respectivamente.

As bandas acima e abaixo do *gap* podem ser identificadas de acordo com a distribuição da energia dos seus modos usando o princípio variacional. O menor autovalor ω^2/c^2 , e portanto o modo de menor frequência, corresponde ao perfil que minimiza o funcional

$$U(\mathbf{H}) \equiv \frac{\int d\mathbf{r} \mathbf{H} \cdot (\hat{\epsilon} \mathbf{H})}{\int d\mathbf{r} |\mathbf{H}|^2} = \frac{\int d\mathbf{r} |\nabla \times \mathbf{E}|^2}{\int d\mathbf{r} \epsilon(\mathbf{r}) |\mathbf{E}|^2}$$

onde $U(\mathbf{H})$ é um funcional (as vezes chamado quociente de Rayleigh) que aparece em um teorema variacional similar para qualquer operador hermitiano. Da expressão anterior podemos deduzir que a forma de minimizar o funcional é concentrando o campo elétrico em regiões com alta constante dielétrica (maximizando o denominador) e minimizando o número de oscilações espaciais (minimizando o numerador) cumprindo a restrição de se manter ortogonal aos modos com frequências menores. Portanto, como regra geral os modos com frequências baixas tendem a concentrar-se em regiões com valores maiores de ϵ e vice-versa. Amiúde, especialmente quando tratamos cristais fotônicos de mais de uma dimensão, as regiões com ϵ baixo são regiões de ar, ocas, e é por esta razão que é comum se referir à banda acima do *gap* (maior frequência) como a *banda de ar*, e à banda abaixo do *gap* (frequências menores) como a *banda dielétrica*, em direta analogia com as bandas de condução e valência dos semicondutores.

Algumas fórmulas úteis podem ser deduzidas para o caso particular de um *quarter-wave stack*. A eq. 2.79 pode ser resolvida de forma aproximada para K na região “proibida” já que para o primeiro band gap podemos escrever

$$Ka = \pi \pm ix. \quad (2.80)$$

É possível mostrar que quando a estrutura é um *quarter-wave stack*, a largura do *gap* (na incidência normal) é maximizada [20]; já sabemos que nesse caso se cumpre que $k_1 d_1 = k_2 d_2 = \pi/2$, ou em termos da frequência correspondente: $\omega_0 = \frac{n_1 + n_2}{4n_1 n_2} \frac{2\pi c}{a}$ (frequência central

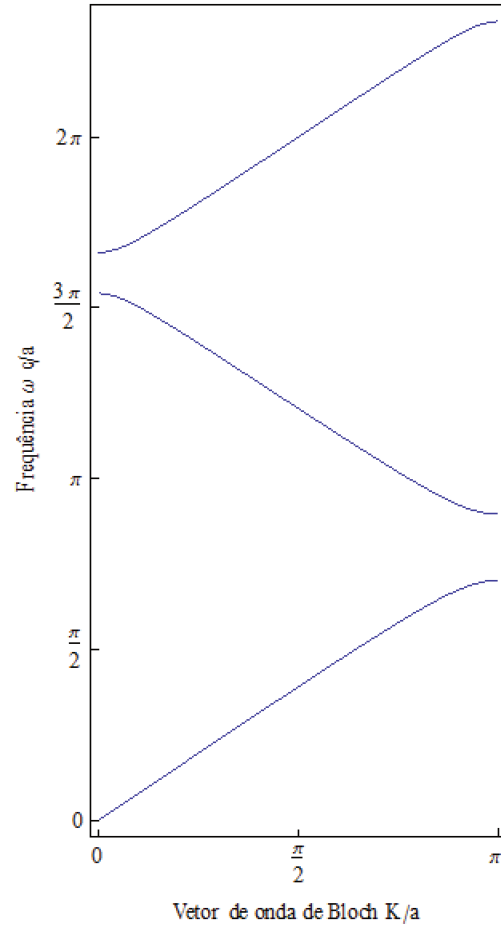


Figura 2.9: Relação de dispersão entre K e ω com $\beta = 0$ (incidência normal) ou estrutura de bandas fotônica para uma super-rede de período a . A largura da camada com $n_1 = 1.0$ é $0.5a$, e a da camada com $n_1 = 1.5$ é $0.5a$.

do *gap*); as larguras das camadas têm, então, um quarto de onda exatamente,

$$\frac{\lambda_0}{n_1} = 4d_1, \quad \text{e} \quad \frac{\lambda_0}{n_2} = 4d_2. \quad (2.81)$$

Nesta frequência a relação de dispersão 2.79 fica

$$\cos Ka = -\frac{1}{2} \left(\frac{n_1^2 + n_2^2}{n_1 n_2} \right), \quad (2.82)$$

que usando 2.80 e resolvendo para x , se converte em

$$x = \ln \left| \frac{n_2}{n_1} \right|; \quad (2.83)$$

dentro do *band gap* a parte imaginária de Ka varia desde zero nas bordas até este valor máximo 2.83 à frequência ω_0 . Definamos agora a desvio $\delta\omega \equiv \omega - \omega_0$ a partir do centro do *gap*. Substituindo na eq. 2.79 em função de $\delta\omega$ e x obtemos

$$\cosh x = \frac{1}{2} \left(\frac{n_1^2 + n_2^2}{n_1 n_2} \right) \cos^2 \left(\delta\omega \frac{n_1 n_2}{n_1 + n_2} \frac{a}{c} \right) - \sin^2 \left(\delta\omega \frac{n_1 n_2}{n_1 + n_2} \frac{a}{c} \right), \quad (2.84)$$

que nos dá uma expressão para a parte imaginária de Ka em função da frequência. As bordas do *band gap* são obtidas fazendo $x = 0$, com o resultado:

$$2\delta\omega_{\text{borda}} = \Delta\omega = \frac{4}{\pi} \omega_0 \arcsin \frac{|n_1 - n_2|}{n_1 + n_2}, \quad (2.85)$$

onde $\Delta\omega$ é a largura do *band gap*. É importante destacar a proporcionalidade direta entre o contraste do índice de refração, $\delta n \equiv |n_1 - n_2|$ e a largura $\Delta\omega$, este fato vai ser aproveitado quando considerarmos os efeitos da dependência do índice de refração com a intensidade no estudio dos materiais não lineares. Na fig. 2.10(a) mostra-se para os mesmos parâmetros da fig. 2.9, a estrutura de bandas calculada neste caso para um *quarter-wave stack*. A fig. 2.10(b) destaca como o aumento do contraste no índice de refração faz aumentar o tamanho do *gap*.

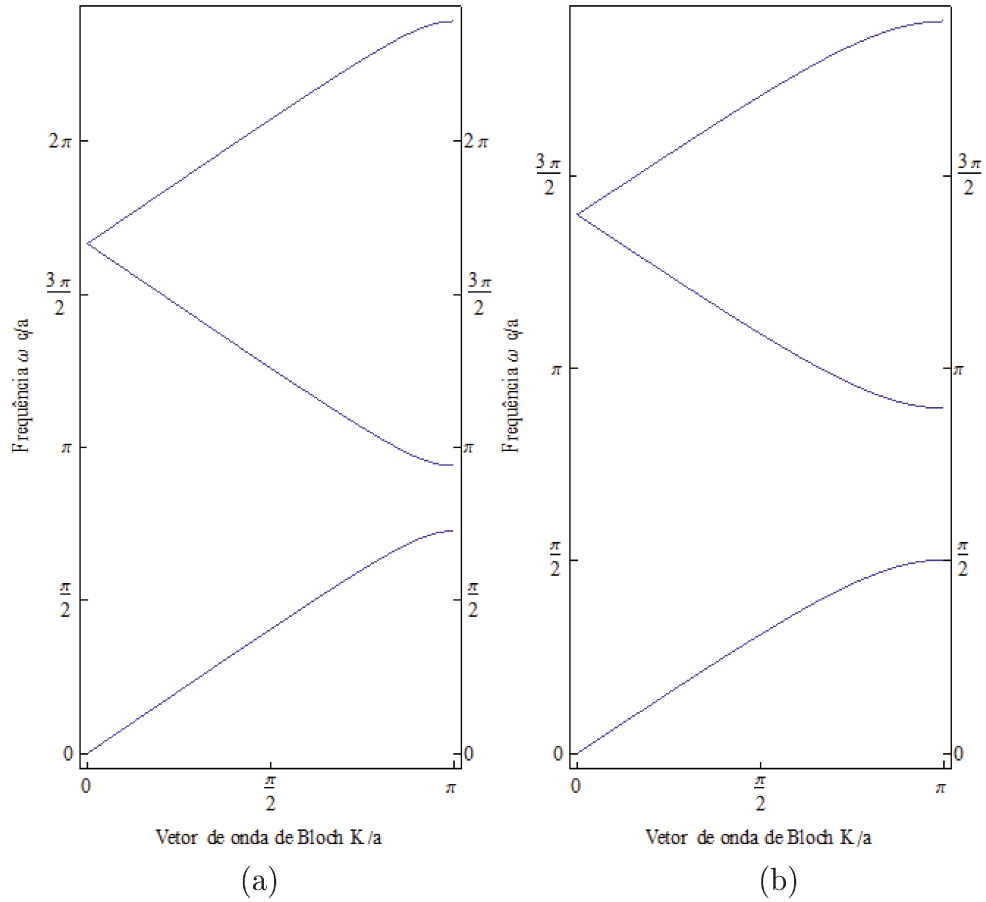


Figura 2.10: Estrutura de bandas fotônica para um *quarter-wave stack* de período a com contrastes de (a) $\delta n = 0.5$ e (b) $\delta n = 1.0$. Note-se o alargamento do *gap* ao aumentar o contraste. Adicionalmente, vemos que para este caso particular não temos um *gap* entre a segunda e terceira banda, o que é uma característica desta configuração.

Capítulo 3

Propagação Não Linear de Pulsos Ópticos

Discutimos no capítulo 2 algumas propriedades básicas da propagação de ondas monocromáticas planas em meios estratificados periódicos, não dispersivos e sem perdas. A radiação laser em CW (*continuous wave*) pode ser considerada quasimonocromática e frequentemente é representada por uma onda plana. No entanto, muitas aplicações importantes dos lasers envolvem lasers de pulsos. Nesse modo de operação, a energia do bombeio pode ser concentrada em períodos extremadamente pequenos, aumentando portanto a potência de pico do pulso. Isto é de importância chave em numerosas aplicações científicas, já que nos permite sonda fenômenos transientes de pouca duração ($<10^{-12}$ s). Esse fato combinado com as propriedades de confinamento da luz a pequenas regiões espaciais em cristais fotônicos nos permite gerar campos ópticos que produzem mudanças dramáticas na função dielétrica do material, com o que podemos sintonizar a estrutura de bandas do cristal fotônico simplesmente variando a intensidade da luz incidente.

Neste capítulo apresentamos um modelo numérico para simular a propagação de pulsos em super-redes dielétricas, procurando entender como evolui temporalmente a dinâmica de um pulso interagindo com uma estrutura com *band gap* fotônico 1D e como as não linearidades incluídas dentro da composição da estrutura podem ser aproveitadas para o desenho e fabricação de dispositivos fotônicos úteis.

3.1 Índice de Refração Dependente da Intensidade¹

A resposta não linear de meios isotrópicos, não dispersivos e sem perdas, é introduzida

¹Neste capítulo usaremos o sistema Gaussiano de unidades para escrever todas as equações.

no formalismo de Maxwell através da equação constitutiva 2.3:

$$\mathbf{D}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) + 4\pi\mathbf{P}(\mathbf{r}, t), \quad (3.1)$$

onde como vimos, $\mathbf{P}$ pode ser expresso como uma série de potências no campo elétrico, eq. 2.5:

$$P_i = P_i^{(1)} + P_i^{(2)} + P_i^{(3)} + \dots = \sum_j \chi_{ij}^{(1)} E_j + \sum_{j,k} \chi_{ijk}^{(2)} E_j E_k + \sum_{j,k,l} \chi_{ijkl}^{(3)} E_j E_k E_l + \dots \quad (3.2)$$

onde $P_i^{(j)}$ são as componentes do vetor polarização de ordem j , e os diferentes χ são as susceptibilidades ópticas que são tensores de ordem $j + 1$.

No caso não linear não podemos fazer a separação entre as coordenadas espaciais e temporal através dos modos harmônicos, assim que partimos das equações de Maxwell, ainda em regiões sem cargas nem correntes livres,

$$\nabla \times \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = -\frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{B}(\mathbf{r}, t), \quad \nabla \cdot \mathbf{D}(\mathbf{r}, t) = 0, \quad (3.3)$$

$$\nabla \times \mathbf{H}(\mathbf{r}, t) = +\frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{D}(\mathbf{r}, t), \quad \nabla \cdot \mathbf{B}(\mathbf{r}, t) = 0, \quad (3.4)$$

para obter a equação de onda óptica:

$$\nabla \times \nabla \times \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) + \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \mathbf{D}(\mathbf{r}, t) = 0, \quad (3.5)$$

que usando a eq. 3.1 se converte em

$$\nabla \times \nabla \times \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) + \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = -\frac{4\pi}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \mathbf{P}(\mathbf{r}, t). \quad (3.6)$$

Podemos simplificar esta equação usando a identidade vetorial $\nabla \times \nabla \times \equiv \nabla(\nabla \cdot) - \nabla^2$, que em muitos casos em óptica não linear pode ser aproximada negligenciando o primeiro termo da direita ficando só com o operador laplaciano; especialmente quando usamos a aproximação de envolvente lentamente variável e temos campos cujos vetores de onda fazem um ângulo pequeno com o eixo original de propagação. Esta é a chamada *aproximação paraxial*, que é exata para ondas planas.

O segundo termo da eq. 3.2 é responsável pelos efeitos não lineares de segunda ordem tais como geração de segundo harmônico ou soma-diferença de frequências. No entanto, se as ondas que interagem por meio dessa não linearidade não estão em fase ou se o mate-

Material	n_0	$\chi^{(3)}(\text{m}^2/\text{V}^2)$	$n_{NL}(\text{cm}^2/\text{W})$
Al_2O_3	1.8	3.1×10^{-22}	2.9×10^{-16}
CdS	2.34	9.8×10^{-20}	5.1×10^{-14}
GaAs	3.47	1.4×10^{-18}	3.3×10^{-13}
LiF	1.4	6.2×10^{-23}	9.0×10^{-17}
Si	3.4	2.8×10^{-18}	2.7×10^{-14}
TiO_2	2.48	2.1×10^{-20}	9.4×10^{-15}
Fused Silica	1.47	2.5×10^{-22}	3.2×10^{-16}
Nanopartículas $\text{CdS}_x\text{Se}_{1-x}$ em vidro	1.5	1.4×10^{-20}	1.8×10^{-14}
Polímero orgânico PTS	-	8.4×10^{-18}	3.0×10^{-12}
Polímero orgânico 4BCMU	1.56	-1.3×10^{-19}	-1.5×10^{-13}

Tabela 3.1: Coeficientes não lineares de terceira ordem de alguns materiais. Fonte: [16]

rial que compõe as nanoestruturas é centrosimétrico, como por exemplo um sólido amorfo (como vidro), a susceptibilidade de segunda ordem pode ser ignorada. Este vai ser o nosso caso neste trabalho. O termo de terceira ordem na polarização produz, além da possível geração de terceiros harmônicos e outras componentes de frequência mais complicadas, uma contribuição à polarização na frequência do campo incidente; portanto, esse termo conduz a uma contribuição não linear para o índice de refração experimentado por uma onda com essa frequência. Para muitos materiais este índice de refração pode ser descrito através da relação

$$n = n_0 + n_{NL}I, \quad (3.7)$$

onde n_0 é o índice refrativo linear e n_{NL} é o chamado índice de refração não linear ou segundo índice de refração, que dá a taxa à que o índice de refração aumenta (ou diminui no caso dele ser negativo, o que acontece para alguns materiais) ao aumentar a intensidade. Este é o chamado *efeito Kerr óptico*. I , representa a media temporal da intensidade, dada por

$$I = \frac{n_0 c}{2\pi} |E|^2, \quad (3.8)$$

e o índice de refração não linear n_{NL} está relacionado à susceptibilidade óptica de terceira ordem $\chi^{(3)}$ por

$$n_{NL} = \frac{12\pi^2}{n_0 c} \chi^{(3)} \quad (3.9)$$

Como exemplo, mostramos na tabela 3.1 alguns índices de refração medidos experimentalmente para vários materiais.

Alguns materiais que possuem coeficientes não lineares altos, como é o caso de vidros dopados com semicondutores ($\text{CdS}_x\text{Se}_{1-x}$ por exemplo), e polímeros orgânicos (PTS ou 4BCMU), a mudança induzida pelo campo no índice de refração não pode ser descrita por uma não

linearidade do tipo Kerr, já que esta é influenciada por não linearidades de ordem maior. Como consequência, a mudança no índice de refração se satura para amplitudes de campo altas. Além disso, todo material real possui um limite no câmbio do índice de refração que pode ser induzido opticamente (a eq. 3.7 sugere um crescimento indefinido de n com I). Com o objetivo de ter em conta este comportamento de saturação, descrevemos a mudança no índice de refração através de [21, 22, 23]

$$\Delta n_{\text{NL}} = \frac{n_{\text{NL}} I}{1 + I/I_{\text{sat}}} \quad (3.10)$$

onde I_{sat} está relacionado ao máximo valor Δn_{sat} por $I_{\text{sat}} = \Delta n_{\text{sat}}/n_{\text{NL}}$. Valores típicos de Δn_{sat} podem variar desde 0.1 a 10^{-6} em vidros, vidros dopados com semicondutores e orgânicos [24]. Quando a intensidade do campo dada por I é muito menor que a intensidade de saturação I_{sat} , o sistema opera dentro do regime Kerr e temos $\Delta n \propto |E|^2$. No outro limite, para $|E|^2 \gg I_{\text{sat}}$, a mudança no índice de refração decresce prevenindo o aumento indefinido de n .

A idéia principal deste trabalho é apresentar de forma qualitativa alguma das múltiplas possibilidades que se abrem ao usar materiais cujo índice de refração possa ser controlado através da intensidade de um campo óptico. Já vimos no final do capítulo 3, que a largura do *band gap* é proporcional ao contraste dos índice de refração (eq. 2.85). Imediatamente podemos ver que dopando ao menos um dos materiais que compõem a super-rede com um meio que tenha uma resposta não linear do tipo $\chi^{(3)}$ podemos, através do efeito Kerr com ou sem saturação, mudar a largura do *gap* dinamicamente por uma quantidade proporcional à intensidade local. Discutiremos em seguida como descrevemos a propagação de pulsos electromagnéticos tendo em conta materiais do tipo Kerr e algumas aplicações concretas deste efeito que têm se obtido através de experimentos numéricos.

3.2 Dinâmica da Propagação de Pulsos

A duração finita de um pulso laser implica em uma composição espectral dentro de certo intervalo finito de frequências ou equivalentemente, comprimentos de onda. Podemos representar matematicamente este pulso como a soma de muitas ondas planas que são soluções da equação de onda de Maxwell linear, assim

$$E(z, t) = \int_{-\infty}^{\infty} E(k) e^{i(\omega t - kz)} dk, \quad (3.11)$$

onde $E(k)$ representa a amplitude da componente de onda plana com número de onda k . Ou seja, $E(k)$ é a transformada de Fourier em algum instante de tempo t do pulso $E(z, t)$, e

$|E(k)|^2$ é o chamado espectro de Fourier do pulso. Um pulso laser é usualmente caracterizado pela sua frequência central ω_0 (ou seu correspondente vetor de onda k_0), usualmente chamada *carrier wave frequency*, e pela sua largura espectral $\Delta\omega$ ao redor de ω_0 (ou a correspondente Δk). Ou seja, $E(k)$ está concentrada ao redor de k_0 . Para estudar a evolução deste pulso no tempo expandimos a relação de dispersão $\omega(k)$ em série de Taylor ao redor de k_0 :

$$\omega(k) = \omega_0 + \left(\frac{\partial\omega}{\partial k} \right)_{k_0} (k - k_0) + \dots \quad (3.12)$$

e a substituímos na eq. 3.11, obtendo

$$E(z, t) \simeq e^{i(\omega_0 t - k_0 z)} \int_{-\infty}^{\infty} E(k) e^{i[(\partial\omega/\partial k)_{k_0} t - z](k - k_0)} dk, \quad (3.13)$$

onde supõe-se que os termos de ordem maior em $(k - k_0)$ são nulos ou desprezíveis. A integral dentro da eq. 3.13 é uma função da variável composta $(\partial\omega/\partial k)_{k_0} t - z$ somente, e é chamada de função envolvente do pulso $A(z, t)$, e desta forma podemos escrever a amplitude do pulso como

$$E(z, t) = A(z, t) e^{i(\omega_0 t - k_0 z)}. \quad (3.14)$$

Para descrever a propagação de pulsos ópticos através de um meio periódico usamos a equação de onda para materiais não lineares, dentro da aproximação paraxial,

$$\nabla^2 \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = \frac{4\pi}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \mathbf{P}(\mathbf{r}, t) \quad (3.15)$$

escrevendo os campos elétrico e de polarização em termos de funções envolventes E e P , e ondas planas (*carrier waves*) assim:

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{2} [\hat{\mathbf{e}} E(\mathbf{r}_T, z, t) e^{i(kz - \omega t)} + \text{c.c.}] \quad (3.16)$$

e

$$\mathbf{P}(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{2} [\hat{\mathbf{e}} P(\mathbf{r}_T, z, t) e^{i(kz - \omega t)} + \text{c.c.}] \quad (3.17)$$

onde $\omega = kc$ e $k = 2\pi/\lambda$, e admitimos que a propagação acontece na direção do eixo z e $\mathbf{r}_T$ é a coordenada transversal. Substituição direta das eqs. 3.16 e 3.17 na eq. 3.15 conduz a uma equação de onda escalar para a envolvente:

$$\frac{\partial^2 E}{\partial z^2} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 E}{\partial t^2} + 2ik \frac{\partial E}{\partial z} + \frac{2i\omega}{c^2} \frac{\partial E}{\partial t} + \nabla_T^2 E = \frac{4\pi}{c^2} \left(\frac{\partial^2 P}{\partial t^2} - 2i\omega \frac{\partial P}{\partial t} - \omega^2 P \right), \quad (3.18)$$

com ∇_T^2 , o laplaciano transversal.

Resolvemos esta equação usando o método de *split-step beam propagation* no domínio do tempo, como é descrito no apêndice A, onde, de acordo com a definição A.10

$$\begin{aligned}\hat{D} &= \frac{i}{4\pi} \frac{\lambda_0}{a} \frac{\partial^2}{\partial \xi^2} - \frac{i}{4\pi} \frac{\lambda_0}{a} \frac{\partial^2}{\partial \tau^2} - \frac{\partial}{\partial \xi} + \frac{i}{4\pi} \frac{\lambda_0}{a} \nabla_{\perp}^2 \\ \hat{N}E &= -i \left(\frac{\lambda_0}{a} \frac{\partial^2}{\partial \tau^2} - 4\pi i \frac{\partial}{\partial \tau} - 4\pi^2 \frac{a}{\lambda_0} \right) P.\end{aligned}$$

Aqui temos introduzido as variáveis adimensionais: $\tau = ct/a$ e $\xi = z/a$, e $\nabla_{\perp}^2 = a^2 \nabla_{\text{T}}^2$. Podemos escrever então a equação de onda na forma compacta A.9

$$\frac{\partial E}{\partial \tau} = (\hat{D} + \hat{N}) E,$$

e propagar o campo $E(\mathbf{r}_{\text{T}}, z, t)$ um pequeno passo no tempo, $\delta\tau$, usando a receita dada pela equação A.12:

$$E(\mathbf{r}_{\perp}, \xi, \tau + \delta\tau) = \exp\left(\frac{1}{2}\delta\tau\hat{D}\right) \exp\left(\delta\tau\hat{N}\right) \exp\left(\frac{1}{2}\delta\tau\hat{D}\right) E(\mathbf{r}_{\perp}, \xi, \tau) + \mathcal{O}(\delta\tau)^3.$$

Nesse trabalho, consideramos que o pulso incide perpendicularmente sobre a super-rede pelo que podemos descartar a coordenada transversal $\mathbf{r}_{\perp}$, e também vamos admitir que os pulsos são ultracurtos, da ordem de 100 ciclos ópticos de comprimento (ao redor de 300 fs para $\lambda = 1\mu\text{m}$) mas suficientemente largos comparados com o tamanho do passo de propagação temporal $\delta\tau$. Por isto, podemos usar a *aproximação de envoltura lentamente variável no tempo* e, portanto, desprezar as derivadas temporais de alta ordem e reter só os termos de menor ordem dos nossos operadores de propagação, simplificando-os para

$$\begin{aligned}\hat{D} &= \frac{i}{4\pi} \frac{\lambda_0}{a} \frac{\partial^2}{\partial \xi^2} - \frac{\partial}{\partial \xi}, \\ \hat{N}E &= i4\pi^2 \frac{a}{\lambda_0} P = i\pi [n^2(\xi, |E|) - 1] E,\end{aligned}\tag{3.19}$$

onde usamos o fato de que a polarização e o campo elétrico estão relacionados por

$$P = \frac{[n^2(\xi, |E|) - 1]}{4\pi} E.\tag{3.20}$$

$n(\xi, |E|) = n_0 + \Delta n_{\text{NL}}$, é o índice de refração efetivo do meio, e contém a informação tanto do perfil da super-rede quanto da informação da resposta, linear e não linear, da estrutura, dado pelas equações 3.7 (não linearidade Kerr) ou 3.10 (não linearidade saturável). Por último,

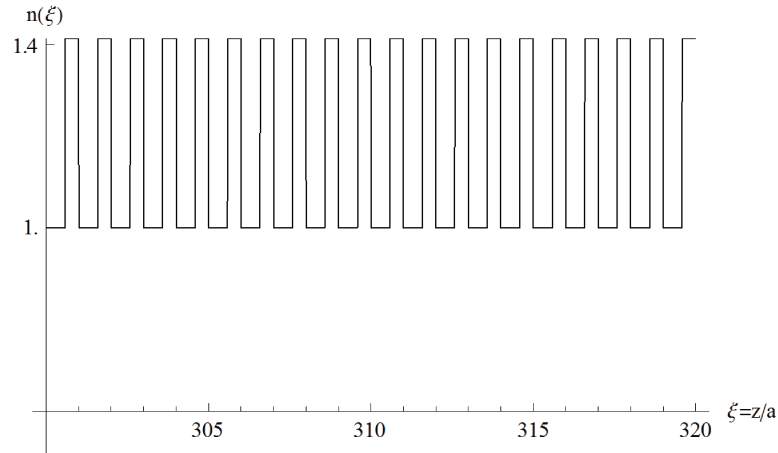


Figura 3.1: Índice de refração $n(\xi)$ de um *quarter-wave stack* com 20 períodos e $n_1 = 1.0$ e $n_2 = 1.4$.

admitimos por simplicidade que o pulso tem inicialmente um perfil gaussiano

$$E(\xi, \tau = 0) = E_0 \exp \left[-\frac{(\xi - \xi_0)^2}{2\Delta\xi^2} \right], \quad (3.21)$$

onde E_0 é a amplitude máxima do pulso, ξ_0 é a posição inicial do centro do pulso e $\Delta\xi$ é um parâmetro relacionado com a largura à metade da amplitude máxima.

Como um primeiro exemplo, consideramos um *quarter-wave stack* com 20 períodos, cujos índices de refração são $n_1 = 1.0$ e $n_2 = 1.4$ (veja fig. 3.1), e encontra-se localizado a partir de $\xi = 300$ dentro da janela de simulação de 700 períodos de comprimento. Um pulso gaussiano inicialmente fora da estrutura centrado em $\xi_0 = 200$, e com frequência ω de acordo com a eq. 3.16, incide sobre esta: fig. 3.2. A transmitância dessa estrutura foi estimada incidindo um pulso muito delgado espacialmente, de forma que esteja composto de muitas frequências, e fazendo a razão entre a amplitude da onda transmitida e a amplitude da onda refletida (no espaço de Fourier) e tomando o valor absoluto quadrado. O resultado deste cálculo é mostrado na figura 3.3. Com ajuda desta última gráfica, podemos sintonizar a frequência central do nosso pulso de maneira que ela esteja fora, dentro ou na borda do *band gap* assim como for conveniente. Por exemplo, na figura 3.4, mostramos o resultado da interação de um pulso gaussiano inicialmente ubicado em $\xi = 200$, com frequência central localizada na borda do *band gap* tal que a transmitância seja aproximadamente de 50%, isto é, mais ou menos a metade das frequências estão dentro da zona proibida e são impedidas de se propagar através da estrutura. Com esta informação presente, vamos passar então a fazer a apresentação dos principais resultados. Baseados nos trabalhos de Scalora *et al.* [25, 26] exploramos algumas possíveis aplicações aproveitando os efeitos dispersivos para frequências perto da borda do *band gap* fotônico junto com a modulação dinâmica do tamanho do gap através do índice de

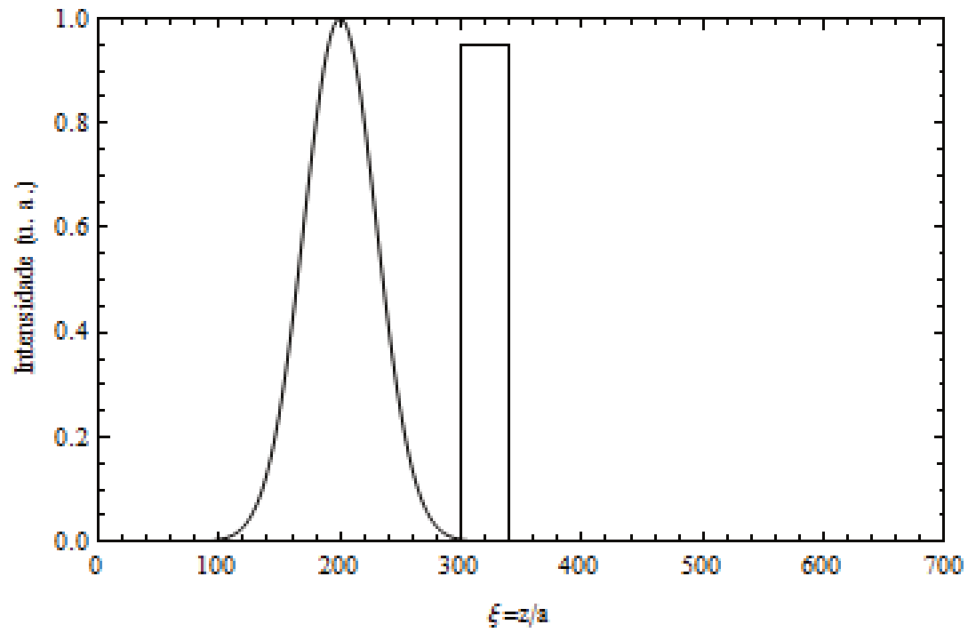


Figura 3.2: Pulso gaussiano incidente. Mostra-se esquematicamente a posição da super-rede a partir de $\xi = 300$.

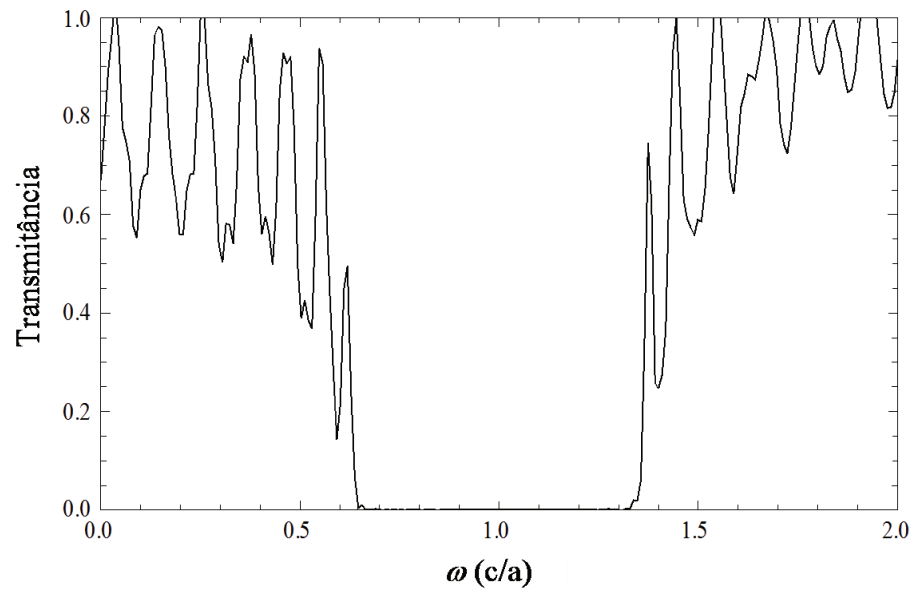


Figura 3.3: Transmitância de um *quarter-wave stack* de 20 períodos, a frequência ω está dada em unidades de c/a . Observa-se claramente a região de frequências proibida (*band gap*) onde a transmitância é nula.

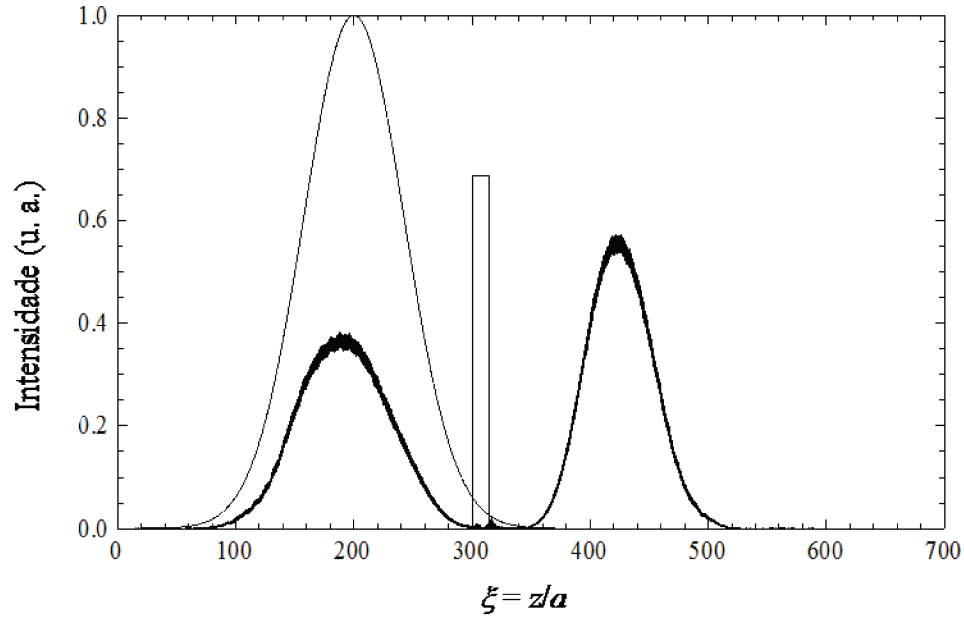


Figura 3.4: Pulsos transmitido e refletido (direita e esquerda da estrutura, respectivamente) por um *quarter-wave stack* com contraste $\delta n = 0.4$ a partir de um pulso gaussiano incidente (cor clara) inicialmente centrado em $\xi = 200$ e com *carrier frequency* sintonizada perto da borda do *gap* de forma que a transmitância é aproximadamente a metade.

refração dependente da intensidade.

3.3 Aplicações

3.3.1 Limitador óptico

A primeira aplicação a ser apresentada é a de um limitador óptico. Consideramos um pulso que esteja centrado ao redor de uma frequência perto, mas fora, da borda da banda proibida, de forma que inicialmente temos uma alta transmitância. Vamos considerar que o meio com índice de refração linear n_2 possui uma não linearidade saturável, com um índice de refração não linear tal que produz uma mudança da ordem de 10^{-2} , para uma intensidade de $I/I_0 = 1$, sendo I_0 a intensidade máxima do pulso, e com um coeficiente de saturação $\Delta n_{\text{sat}} = 10^{-3}$. Admitiremos também que $n_2 > 0$ e portanto teremos um aumento no contraste δn proporcional à intensidade local, a medida em que o pulso entra na estrutura, causando um deslocamento e um alargamento dinâmico do *gap*.

Devido a este deslocamento o intervalo espectral do pulso que antes estava na sua maioria fora do *gap* pode cair dentro do mesmo, e pode incluir, inclusive, a frequência central ω do pulso. O efeito de limitação óptica é ilustrado na figura 3.5(a)-(d). Vemos como o efeito de limitação se torna mais pronunciado ao ir aumentando a intensidade incidente,

fazendo com que o *gap* exclua cada vez um intervalo maior de frequências de propagar-se através da estrutura e portanto, como se mostra na sequência de figuras, aumentando a onda refletida gradativamente. Pode-se notar ademais, como a dinâmica de interação do pulso é diferente para cada valor da intensidade de entrada, enquanto a forma e número dos pulsos gerados, dependendo basicamente da largura do pulso, a intensidade inicial e a sintonização da frequência central do pulso com respeito à borda do *gap*. Para regiões próximas à borda do *band gap*, a velocidade de grupo vai tendendo a zero [27], fazendo com que a interação com a estrutura seja mais prolongada, e os efeitos de interferência sejam mais apreciáveis. Por exemplo vemos na fig. 3.5(b), como ainda uma parte do campo elétrico permanece dentro da estrutura sofrendo múltiplas reflexões, e na parte (c) dessa mesma figura notamos como esse efeito é ainda más notável, ocasionando uma forte interferência entre as diferentes componentes espectrais.

3.3.2 Switch óptico

Levando em conta as idéias anteriores podemos aplicar este mesmo efeito ao *switching* óptico de pulsos com apenas algumas variantes. Examinemos para isto o caso onde dois feixes com frequências levemente diferentes incidem sobre a estrutura com *band gap* fotônico 1D não linear descrita acima. Suponhamos que I é a intensidade de um dos feixes, que vai fazer as vezes de um pulso de bombeio, suficientemente intenso como para produzir uma mudança apreciável no índice de refração do meio com não linearidade $\chi^{(3)}$, e cuja frequência está dada por ω . O outro feixe vai ser o nosso pulso de sondagem, com uma intensidade I_0 , tal que $I_0 \ll I$, e cuja *carrier frequency* vem dada por ω_0 . Adicionalmente admitimos que ω e ω_0 estejam sintonizadas pouco antes da borda do *gap*, mas com a condição de que ω se encontre relativamente mais afastado da borda do que ω_0 . Ambos feixes são transmitidos portanto inicialmente.

Mas, ao começar a interagir o pulso de bombeio com a estrutura, a sua forte intensidade ocasiona uma mudança no índice de refração que conduz a um alargamento do *band gap* fotônico. Este alargamento pode ser tal que inclua a frequência central ω_0 do nosso pulso de sondagem, fazendo com que este seja refletido da estrutura. Assim, ligando e desligando o pulso de bombeio podemos chavear de forma totalmente óptica, usando um outro pulso óptico, sinais de certas frequências. O anterior constitui a dinâmica de operação de um *switch* óptico como se encontra esquematizado na fig. 3.6.

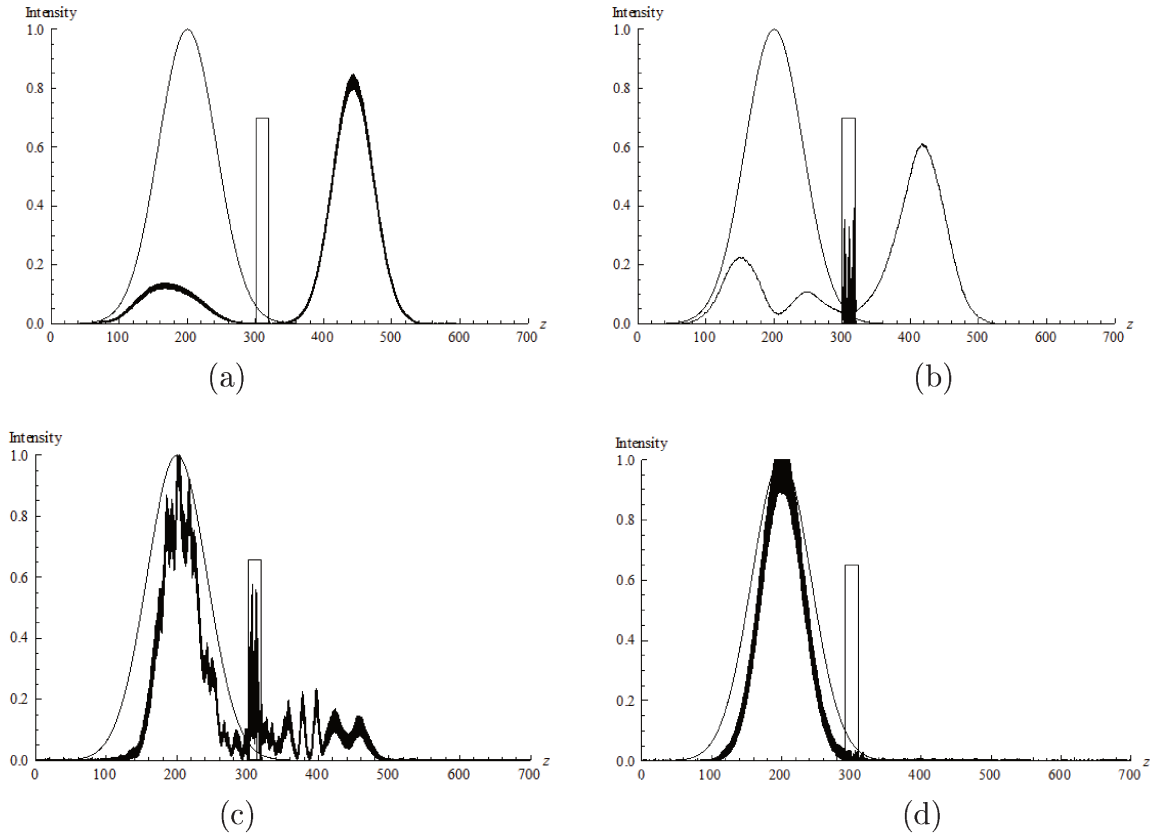


Figura 3.5: Pulsos incidente (cor clara), transmitido (à direita da estrutura) e refletido (a esquerda da estrutura) para a super-rede dielétrica mostrada na figura 3.1, onde as regiões com maior índice de refração estão compostas de um material com índice de refração dependente da intensidade. A estrutura está localizada em $\xi = 200$ como se mostra na fig. 3.2, com camadas cujas larguras são de um quarto de onda no respectivo meio (*quarter-wave stack*). A intensidade máxima do pulso incidente vai desde 0.1 u. a. em (a), 1.0 u. a. em (b), 10 u. a. em (c), até o valor máximo de 100 a. u. em (d). As unidades de intensidade estão normalizadas de acordo com o valor de n_{NL} , de tal forma que 1 u.a. de intensidade produz uma mudança no índice de refração de uma centésima.

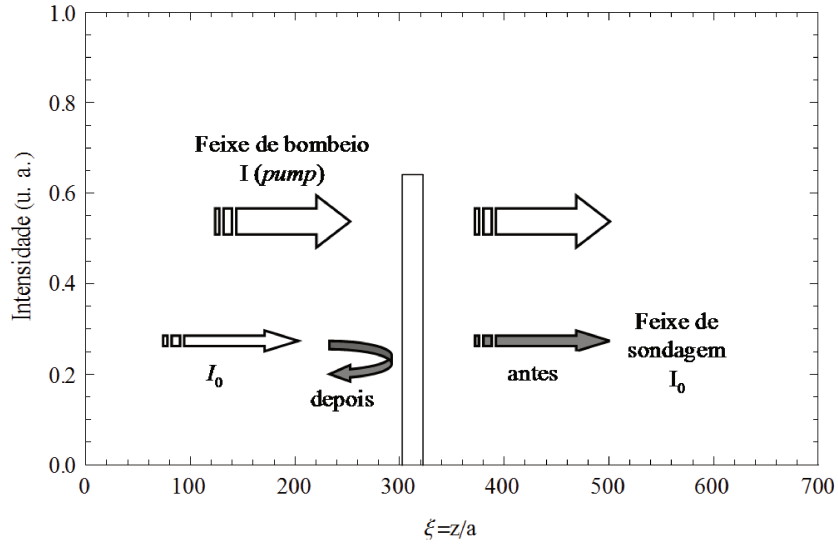


Figura 3.6: Esquema da operação de um switch óptico baseado no efeito limitador de uma super-rede dielétrica 1D, onde uma das camadas está composta por um meio com resposta não linear $\chi^{(3)}$. A transmissividade é praticamente total para ambos os feixes inicialmente já que ambos estão sintonizados na banda permitida fora do *gap*. Porém, após o *pump* I ser aplicado, a largura do *gap* muda, e o intervalo de frequências proibidas pode incluir ω_0 , a frequência do feixe de sondagem, o que resulta na reflexão do mesmo.

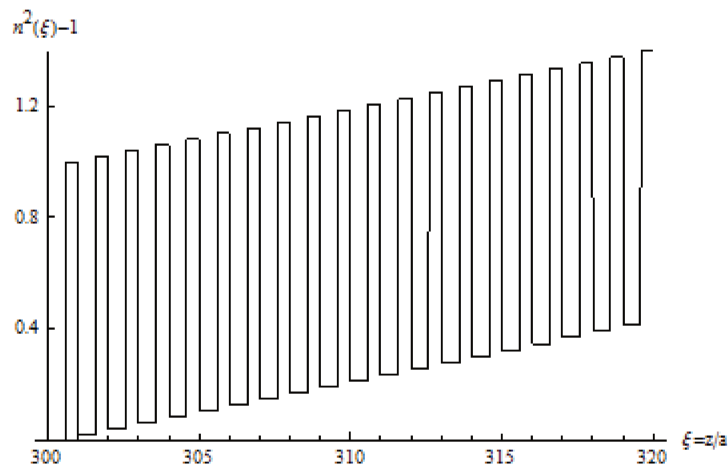


Figura 3.7: Perfil do índice de refração para a estrutura com *band gap* fotônico 1D de um diodo. Usamos neste caso como se explica no texto um perfil assimétrico com um gradiente na constante dielétrica de $\delta\epsilon = 0.01$.

3.3.3 Diodo óptico

Um outro exemplo de dispositivo que pode ser implementado usando este tipo de não linearidades é um diodo [26]. Para isso, estudamos uma geometria levemente diferente da anterior, onde nesse caso, os valores máximo (n_2) e mínimo (n_1) dos índices de refração de cada camada, aumentam gradativamente com a distância por ocalizadosuma pequena quantidade $\delta\epsilon$, como é mostrado na fig. 3.7 O número total de camadas continua sendo 40 (20 períodos) e consideramos um gradiente para a constante dielétrica de $\delta\epsilon = 0.01$. Ademais, vamos admitir que o material não linear do que está composta a camada com índice n_2 possui um coeficiente não linear de terceira ordem $\chi^{(3)} < 0$, o que faz com que o *band gap* fotônico se estreite proporcionalmente com a intensidade do pulso incidente como já foi mostrado. Sob estas condições, o pulso óptico “vê” um *band gap* fotônico que se desloca e muda de tamanho ao ele ir avançando através da estrutura. Esta anisotropia na geometria da super-rede vai ser explorada para obter um comportamento dinâmico que depende da direção de incidência do pulso respeito da estrutura.

Começamos o análise dessa situação, examinando o regime linear com $\chi^{(3)} = 0$. Para isso sintonizamos a frequência central do nosso pulso de tal forma que inicialmente, ao incidir pelo lado esquerdo da estrutura, ela esteja localizada próxima da borda do *band gap* local correspondente a um *quarter-wave stack* com $n_1 = 1.0$ e $n_2 = 1.4$, resultando numa refletividade de aproximadamente 50%, se não existisse o gradiente. Isto significa que a metade das frequências que compõem o pulso encontram-se fora da zona proibida. Mas ao existir um gradiente nos índices de refração, o *band gap* fotônico local vai se deslocando a frequências cada vez menores de maneira que, eventualmente, a frequência central do pulso estará dentro do gap e o pulso começará a ser refletido. Este mesmo comportamento é esperado para um pulso que incide do lado contrário (direito) da estrutura. Essas suposições são corroboradas pelas nossas simulações. Na figura 3.8, vemos o resultado da interação de pulsos incidentes dasde os dois lados da estrutura. A resposta obtida em ambos casos é a mesma: os pulsos são totalmente refletidos. Mas, embora este comportamento seja aparentemente parecido, a dinâmica de interação dos pulsos com a estrutura é diferente. Para observar isto melhor, vejamos uma gráfica do perfil de intensidade do campo eléctrico dentro da estrutura no momento em que o pulso está atravessando-la, fig. 3.9.

Notamos como a distribuição da intensidade do campo é diferente para os pulsos incidentes em diferentes lados da estrutura. O pulso que se desloca de esquerda para direita, consegue penetrar muito mais adentro da estrutura do que o pulso que viaja de direita para esquerda, atingindo portanto intensidades muito maiores. Isto pode ser explicado da seguinte forma: o pulso que se desloca de esquerda para direita, encontra-se, por construção, perto mas fora do *band gap* local. A medida que o pulso vai penetrando na estrutura, o índice de refração

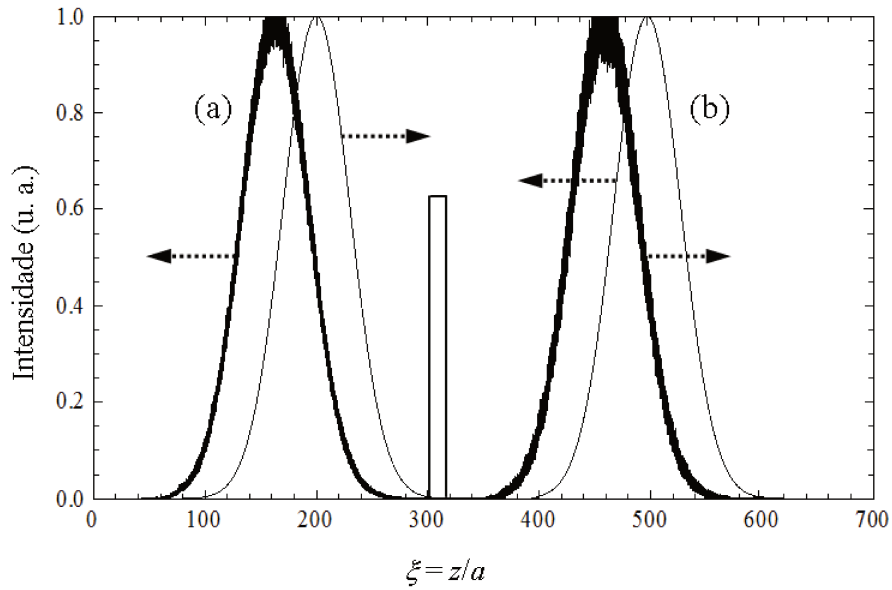


Figura 3.8: Resultado da interação de de pulsos ópticos gaussianos incidentes desde ambos lados da estrutura anisotrópica da figura 3.7 no regime linear com $\chi^{(3)} = 0$. Tanto para o caso (a): pulso incidindo de esquerda para direita, quanto para o caso (b): pulso incidindo de direita para esquerda, obtemos uma alta refletividade por parte da estrutura. Embora este comportamento aparentemente similar, a dinâmica de interação dos pulsos com a estrutura é bem diferente nos dois casos.

gradativo da mesma desloca a borda da banda local até que, eventualmente, a frequência central do pulso cai dentro do *gap* e a reflexão começa a ocorrer. Por outra parte, o pulso que se desloca de direita para esquerda, encontra-se imediatamente no *gap* fotônico local da estrutura à direita, as componentes espectrais correspondentes a frequências dentro do *gap* formam modos evanescentes que decaem muito rapidamente sem conseguir penetrar muito na estrutura e, conseqüentemente, fazem com que o pulso seja refletido mais rapidamente.

Levando em conta os comentários anteriores, discutimos em seguida o regime não linear, onde escolhemos uma susceptibilidade *negativa* tal que produza uma mudança de um centésimo no índice de refração para uma intensidade normalizada a um^2 . Neste caso a susceptibilidade elétrica negativa de terceira ordem junto com o gradiente no perfil do índice refractivo produzem, além de um deslocamento do *gap*, um estreitamento do mesmo proporcional à intensidade local. Os resultados das simulações são apresentados na figura 3.10, para o pulso que incide de esquerda para direita (a), e para o pulso que incide de direita para esquerda (b). Imediatamente vemos que nesse caso obtemos resultados distintos dependendo da direção de incidência. O pulso que incide sobre a estrutura de esquerda para direita, encontra-se, como já se mencionou, numa região de transmissividade alta. Por tanto começa

²Vale mencionar para fins ilustrativos que a intensidade necessária para produzir uma mudança de -0.035 no índice de refração de GaAs em *bulk* é de 30 kW/cm² a 1.40eV, segundo as medições de Lee *et al.* [42].

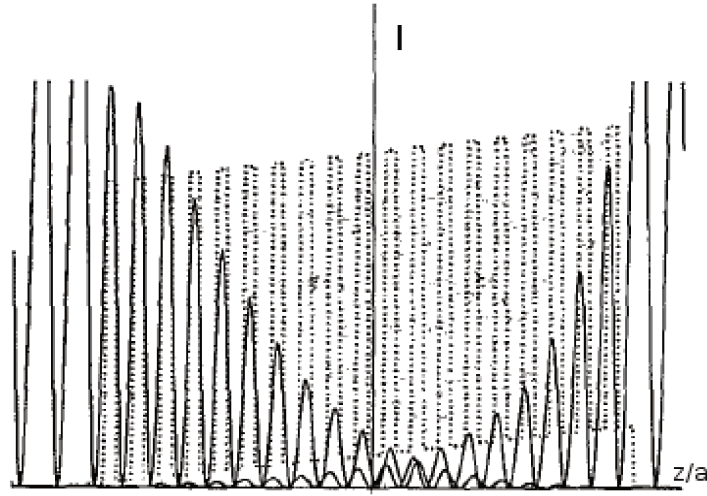


Figura 3.9: Perfil de intensidade do campo elétrico no momento que dois pulsos ópticos incidem desde ambos lados de uma estrutura com índice de refração em forma de rampa. Aprecia-se uma acumulação maior de energia para o pulso que incide de esquerda para direita, devido a ele encontrar-se ao chegar na estrutura, dentro de uma região de alta transmissividade. O pulso que incide do lado contrário, é refletido mais rapidamente já que a sua frequência central cai imediatamente dentro do *band gap* fotônico local da estrutura no lado direito.

a penetrar imediatamente dentro da estrutura. Como a velocidade de grupo para frequências perto da borda do *gap* tende a zero [27], este pulso consegue acumular energia suficiente como para ativar a resposta não linear do meio e “empurrar” o *gap* local, afastando-o da frequência central do pulso, de forma que algumas componentes espectrais conseguem perfurar a estrutura, com o resultado de que uma porção do pulso inicial chega a ser transmitida. Por outra parte, o pulso que incide de direita para esquerda, encontra-se imediatamente dentro do *band gap* local da estrutura, a maior parte das frequências formam modos evanescentes que não penetram muito na estrutura e, portanto, o pulso não consegue acumular a intensidade suficiente como para ativar a resposta não linear do meio e fazer com que o *gap* local se desloque. Este pulso é, novamente, refletido de forma imediata. Este comportamento anisotrópico na direção de propagação apresentado por esta configuração da super-rede, constitui o princípio operacional de um diodo óptico, e é uma consequência direta do gradiente do índice refrativo.

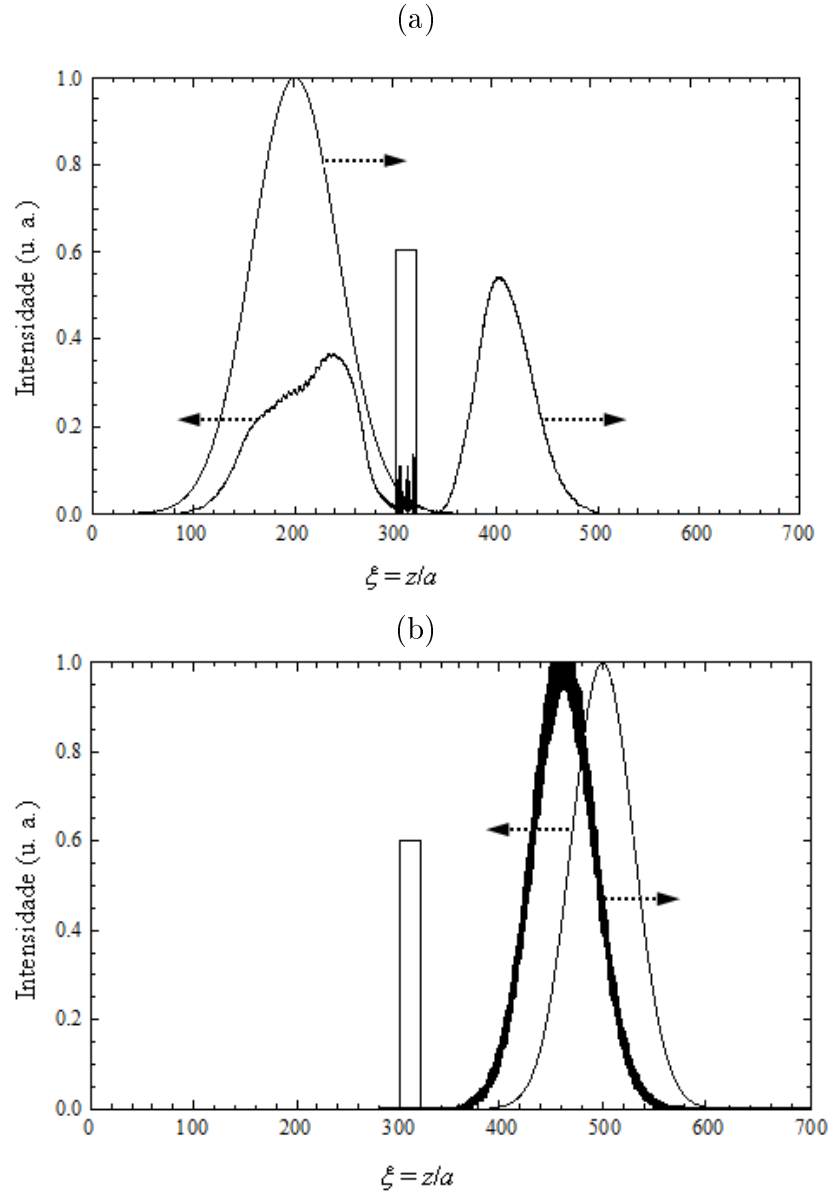


Figura 3.10: De novo os mesmos dois pulsos da fig. 3.8 mas neste caso considerando uma super-rede cujo índice de refração maior n_2 está dopado com um material com $\chi^{(3)} < 0$. Neste caso o pulso que entra à direita continua sendo refletido, enquanto o pulso que índice à esquerda é parcialmente transmitido. Isto acontece devido a que o pulso que viaja da esquerda para a direita consegue penetrar o suficiente dentro da estrutura para ativar a resposta não linear do meio e ir deslocando o *band gap* local a medida em que avança pela super-rede. O pulso que viaja da direita para a esquerda encontra-se imediatamente em um *gap* local e os níveis de intensidade são muito baixos para excitar a resposta não linear.

Capítulo 4

Conclusões e Perspectivas

Estudou-se a propagação não linear de pulsos gaussianos através de estruturas com *band gap* fotônico 1D usando um algoritmo modificado do método conhecido como *split-step beam propagation method*. Este método é uma ferramenta poderosa para a análise da interação de pulsos com meios que tenham mudanças arbitrariamente grandes no índice de refração, incluindo portanto, reflexões de todas as ordens, sem requerer a introdução de condições de contorno explícitas para o campo elétrico nas interfaces. Só é necessário a especificação de uma função de onda inicial, o perfil espacial do índice de refração, e as equações constitutivas do material. As condições de contorno estão implicitamente incluídas na evolução dinâmica das equações.

Foram consideradas em particular super-redes compostas de camadas alternadas de materiais dielétricos e sem perdas, com índices de refração n_1 e n_2 , com larguras de um quarto de onda (*quarter-wave stack*) cada uma, configuração que produz a máxima largura do *gap* para um valor do contraste dado. Uma característica fundamental dessas estruturas é a proporcionalidade direta que existe entre a largura do *band gap* fotônico e o contraste dos índices de refração. Usando este fato, pode-se controlar a largura do *band gap* fotônico com a intensidade de um pulso óptico externo propagando-se através da estrutura, se considermos que uma das camadas está composta de um material com resposta óptica não linear de terceira ordem $\chi^{(3)}$. Com isto conseguimos deslocar e alargar (ou diminuir, no caso de uma susceptibilidade negativa) dinamicamente o *band gap* fotônico.

Óptica não linear em estruturas com *band gap* fotônico tem despontado como uma área promissora para o desenvolvimento de dispositivos fotônicos compactos e eficientes. Muitas aplicações têm sido imaginadas em sistemas 1D. Nessa dissertação apresentamos algumas destas potenciais aplicações, mostrando-se o funcionamento de alguns dispositivos ópticos, sugeridos na literatura, factíveis a partir da análise da dinâmica de propagação nas vizinhanças do *band gap* fotônico. Em particular, um limitador óptico e um chaveador óptico,

usando uma não linearidade $\chi^{(3)}$ positiva e pulsos gaussianos ultracurtos (de aproximadamente 100 ciclos ópticos) cujas frequências centrais estão sintonizadas na borda do *gap* na banda de transmissão. Adicionalmente, apresentamos uma estrutura similar à usada nas aplicações anteriores, mas com uma assimetria com relação à direção de incidência, considerando neste caso um perfil do índice de refração que aumenta gradativamente ao longo da estrutura. Com isto conseguimos uma mudança do *band gap* fotônico local que o pulso “vê” ao propagar-se. Mostra-se como esta configuração pode ser usada como um possível diodo óptico.

Levando-se em consideração o caráter não linear e ultracurto da interação pulso-estrutura a operação dos dispositivos sugeridos pode ser ultra-rápida, e a velocidade final de cada um deles dependerá somente da velocidade com que a resposta não linear do meio possa ser excitada. Vale a pena ressaltar aqui que por causa dos efeitos de interferência que aparecem dentro da super-rede, as intensidades locais podem ser várias vezes maiores que a intensidade máxima do pulso de entrada, de tal maneira que os pulsos não precisam ser tão intensos como poder-se-ia pensar, conhecimento essencial no momento de desenhar dispositivos reais ao considerar parâmetros tais como limitações energéticas (de potência) ou destruição do material.

Além dos materiais do tipo Kerr, é possível modelar materiais com não linearidade saturável, a qual é adequada para descrever propagação de pulsos ópticos com intensidades de campo altas e materiais com coeficientes não lineares grandes (como vidros dopados com semicondutores ou polímeros orgânicos). De fato, para qualquer material real há um limite superior para a mudança no índice de refração que pode ser induzido opticamente. A intensidade à que ocorre tal saturação dependerá finalmente dos processos físicos particulares que causam a variação não linear.

Finalmente, a consideração de outros efeitos como absorção, dispersão da velocidade de grupo, dispersão Raman estimulada, dispersão de Brillouin estimulada, ou a inclusão de meios ativos ou com ganhos, podem ser incorporadas facilmente na dinâmica, usando este algoritmo de *split-step* modificado, assim como uma extensão do método para estruturas com dimensionalidades maiores ou com outras geometrias de interesse.

Apêndice A

Split-Step Beam Propagation Method

O chamado *fast Fourier beam propagation method* (FFT-BPM) ou *split-step beam propagation method* (SS-BPM), tem sido o método preferido para descrever a difração de ondas eletromagnéticas em diversas áreas da óptica tais como biestabilidade óptica [28], espalhamento Raman estimulado [29] e propagação de pulsos em meios dispersivos não lineares [30, 31]. Também tem sido usado extensivamente no contexto da equação de Schrödinger não linear, que aparece no estudo da propagação de pulsos em fibras ópticas [33]. Embora seja possível estudar estes efeitos usando métodos de diferenças finitas, pode se mostrar que, em geral, os métodos pseudoespectrais (e o SS-BPM pertence a essa categoria) são mais rápidos no mínimo, por uma ordem de grandeza, atingindo a mesma precisão [32]. A velocidade relativa do SS-BPM comparado com a maioria dos métodos de diferenças finitas pode se atribuir principalmente ao uso do algoritmo da transformada rápida de Fourier.

A.1 SS-BPM standard

Neste trabalho a equação de interesse é a eq. 3.18, apresentada e deduzida no capítulo 3:

$$\frac{\partial^2 E}{\partial z^2} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 E}{\partial t^2} + 2ik_0 \frac{\partial E}{\partial z} + \frac{2i\omega_0}{c^2} \frac{\partial E}{\partial t} + \nabla_T^2 E = \frac{4\pi}{c^2} \left(\frac{\partial^2 P}{\partial t^2} - 2i\omega_0 \frac{\partial P}{\partial t} - \omega_0^2 P \right). \quad (\text{A.1})$$

onde $E = E(\mathbf{r}_T, z, t)$ é a função envolvente ou amplitude do campo e, k_0 e ω_0 , são respectivamente o vetor de onda e frequência centrais do pulso, relacionadas através de $k_0 = \omega_0/c$.

A formulação padrão incorpora a aproximação de envolvente lentamente variável (SVEA)¹ que implica em

¹SVEA por seu acrônimo em inglês: *slowly-varying envelope approximation*.

$$\frac{\partial^2 E}{\partial z^2} \ll k_0 \frac{\partial E}{\partial z}, \quad \frac{\partial^2 E}{\partial t^2} \ll \omega_0 \frac{\partial E}{\partial t}, \quad \frac{\partial^2 P}{\partial t^2} \ll \omega_0 \frac{\partial P}{\partial t} \ll \omega_0^2 P,$$

e portanto, retemos os termos de ordem menor nas derivadas da equação A.1: tanto o campo elétrico quanto a polarização são funções que variam lentamente no espaço e no tempo. Ademais, fazendo uso da transformação de coordenadas ao chamado referencial co-propagante, $z' = z$, $t' = t - z/c$, a equação converte-se em

$$\frac{\partial E}{\partial z} - \frac{i}{2k_0} \nabla_T^2 E = 2\pi i k_0 P = 2\pi i k_0 \chi E, \quad (\text{A.2})$$

onde admitimos que podemos relacionar P e E através de $P = \chi E$, sendo χ a susceptibilidade efetiva do meio, que pode ser em geral uma função da posição e, possivelmente da intensidade do campo elétrico, no caso não linear. A solução formal da eq. A.2 pode ser escrita então como

$$E(\mathbf{r}_T, z) = \exp \left(\int_0^z (\hat{D} + \hat{N}) dz \right) E(\mathbf{r}_T, 0), \quad (\text{A.3})$$

com $\hat{D} = \frac{i}{2k_0} \nabla_T^2$ sendo o operador que descreve a difração no espaço livre, e $\hat{N} = 2\pi i k_0 \chi$ o operador que descreve a interação do campo com o meio (refração). Deixamos a letra 'N' para este operador para lembrar que pode incluir termos não lineares. Usando estas definições, a eq. A.2 pode ser escrita na forma compacta

$$\frac{\partial E}{\partial z} = (\hat{D} + \hat{N}) E. \quad (\text{A.4})$$

O SS-BPM está inspirado na solução A.3: se logarmos separar a ação de cada operador podemos escrever, para pequenos passos da propagação:

$$E(\mathbf{r}_T, z + \delta z) \simeq \exp(\delta z \hat{D}) \exp(\delta z \hat{N}) E(\mathbf{r}_T, z). \quad (\text{A.5})$$

Podemos imaginar que a propagação é dividida em duas partes, a primeira, que dá a mudança de fase devida à refração na primeira metade do intervalo, e a segunda, que envolve a propagação do pulso no espaço livre na segunda metade do intervalo. Esta fórmula é aproximada já que, em geral, $\hat{D}$ e $\hat{N}$ não comutam; exatamente, a solução formal da eq. A.4 é

$$E(\mathbf{r}_T, z + \delta z) = \exp \left[\delta z (\hat{D} + \hat{N}) \right] E(\mathbf{r}_T, z), \quad (\text{A.6})$$

e se usarmos a fórmula de Baker-Hausdorff para dois operadores que não comutam $\hat{A}$ e $\hat{B}$

$$\exp(\hat{A}) \exp(\hat{B}) = \exp\left(\hat{A} + \hat{B} + \frac{1}{2!} [\hat{A}, \hat{B}] + \frac{1}{3!} [\hat{A} - \hat{B}, [\hat{A}, \hat{B}]] + \dots\right), \quad (\text{A.7})$$

para comparar as eqs. A.5 e A.6, achamos que na menor ordem em δz , o erro cometido em cada passo é igual a $-1/2 (\delta z)^2 [\hat{A}, \hat{B}] E(\mathbf{r}_T, z)$. Isto é, um erro de segunda ordem no tamanho do passo.

A precisão do SS-BPM pode ser melhorada ainda mais, adotando um procedimento diferente para propagar o pulso através do segmento entre z e $z + \delta z$. Neste procedimento a eq. A.5 é substituída por

$$E(\mathbf{r}_T, z + \delta z) = \exp\left(\frac{1}{2} \delta z \hat{D}\right) \exp(\delta z \hat{N}) \exp\left(\frac{1}{2} \delta z \hat{D}\right) E(\mathbf{r}_T, z) + \mathcal{O}(\delta z)^3, \quad (\text{A.8})$$

onde a principal diferença está em que o efeito da não linearidade está incluído na metade do intervalo de propagação. Devido a que os operadores exponenciais ficam ordenados de forma simétrica, esta versão do *split-step* é chamada de SS-BPM simetrizado [34]. A principal vantagem de usar a forma simetrizada é que o erro de ordem maior resulta do comutador duplo em A.7 e é, então, de terceira ordem no intervalo de propagação.

A implementação do SS-BPM é relativamente direta. O pulso óptico é propagado de segmento a segmento usando a receita da eq. A.8. A aplicação do operador $\exp\left(\frac{1}{2} \delta z \hat{D}\right)$ sobre o pulso $E(\mathbf{r}_T, z)$ é um pouco problemática dada a existência das derivadas espaciais, mas no espaço de Fourier, resulta simples de avaliar já que os operadores diferenciais do tipo $\partial^n / \partial x_j^n$ são substituídos por termos do tipo $(ik)^n$, e nesse caso, o operador $\hat{D}$ é só um número no domínio dos vetores de onda. A transformada da amplitude do campo é avaliada usando o algoritmo de FFT, o que faz que o método de *split-step* seja até duas ordens de grandeza mais rápido que a maioria dos algoritmos baseados em diferenças finitas [32].

A.2 SS-BPM modificado: formalismo no domínio do tempo

O SS-BPM assim como foi apresentado na seção anterior não pode ser aplicado de forma eficiente a sistemas onde aconteçam câmbios significativos no índice de refração, já que neste caso a SVEA não é válida e, portanto, é necessário incluir condições de contorno suplementares em cada interface, o que faz com que o problema se torne pesado e difícil de manejar ao irem aumentando dito número de interfaces. É claro que as super-redes dielétricas são um bom exemplo de um sistema que possui descontinuidades no índice de refração. Em seguida

apresentaremos uma modificação do método de *split-step* devida a Scalora *et al.* [35], a qual consegue descrever mudanças arbitrárias no índice de refração, além dos efeitos difratantes, com o mesmo grau de dificuldade do método padrão. Esta versão foi a usada finalmente neste trabalho.

O primeiro que devemos fazer é eliminar a restrição causada pela SVEA. Isto significa que temos de trabalhar diretamente com a eq. A.1, sem desprezar nenhuma das derivadas temporais nem espaciais e, também, sem passar ao sistema do referencial do feixe. Apesar de tudo podemos reescrever nossa equação de onda da forma compacta apta para a aplicação do método *split-step*:

$$\frac{\partial E}{\partial \tau} = (\hat{D} + \hat{N}) E, \quad (\text{A.9})$$

com as definições

$$\begin{aligned} \hat{D} &= \frac{i}{4\pi} \frac{\lambda_0}{a} \frac{\partial^2}{\partial \xi^2} - \frac{i}{4\pi} \frac{\lambda_0}{a} \frac{\partial^2}{\partial \tau^2} - \frac{\partial}{\partial \xi} + \frac{i}{4\pi} \frac{\lambda_0}{a} \nabla_{\perp}^2 \\ \hat{N}E &= -i \left(\frac{\lambda_0}{a} \frac{\partial^2}{\partial \tau^2} - 4\pi i \frac{\partial}{\partial \tau} - 4\pi^2 \frac{a}{\lambda_0} \right) P, \end{aligned} \quad (\text{A.10})$$

e onde foram usadas as unidades adimensionais: $\tau = ct/a$ e $\xi = z/a$, escaladas ao período da estrutura, a , e sendo P a polarização do meio, que em geral é uma função do campo elétrico.

A solução da eq. A.9 é complicada já que os operadores podem ter dependência explícita do tempo. Mas, se usarmos a formula de Magnus²[36], na sua primeira aproximação, a solução é idêntica à eq. A.3, mas com a diferença da propagação ser neste caso no tempo:

$$E(\mathbf{r}_{\perp}, \xi, \tau) = \exp \left(\int_0^{\tau} (\hat{D} + \hat{N}) d\tau \right) E(\mathbf{r}_{\perp}, \xi, 0), \quad (\text{A.11})$$

e portanto, poderemos usar a expressão usada no método de *split-step* simetrizado, com os operadores de difração e refração atuando separadamente,

$$E(\mathbf{r}_{\perp}, \xi, \tau + \delta\tau) = \exp \left(\frac{1}{2} \delta\tau \hat{D} \right) \exp \left(\delta\tau \hat{N} \right) \exp \left(\frac{1}{2} \delta\tau \hat{D} \right) E(\mathbf{r}_{\perp}, \xi, \tau) + \mathcal{O}(\delta\tau)^3. \quad (\text{A.12})$$

A parte difrativa é, então, descrita através da seguinte equação diferencial (fazendo $\hat{N} = 0$)

²Esta formula foi derivada por primeira vez por W. Magnus em 1954 [37], mas era relativamente pouco conhecida entre os físicos e foi derivada subsequente e independentemente por Robinson [38] e Pechukas e Light [36], no contexto de operadores de deslocamento temporal para solucionar a eq. de Schrödinger.

$$\frac{\partial E(\xi, \tau)}{\partial \tau} = \left[\frac{i}{4\pi} \frac{\lambda_0}{a} \frac{\partial^2}{\partial \xi^2} - \frac{i}{4\pi} \frac{\lambda_0}{a} \frac{\partial^2}{\partial \tau^2} - \frac{\partial}{\partial \xi} \right] E(\xi, \tau), \quad (\text{A.13})$$

onde ignoramos os efeitos transversais que podem ser incluídos facilmente. Esta pode ser resolvida no espaço de Fourier resultando na equação diferencial ordinária de segunda ordem

$$\left[\frac{\partial^2}{\partial \tau^2} - 4\pi i \frac{a}{\lambda_0} \frac{\partial}{\partial \tau} + \left(k^2 + 4\pi \frac{a}{\lambda_0} k \right) \right] \tilde{E}(k, \tau) = 0, \quad (\text{A.14})$$

onde

$$\tilde{E}(k, \tau) = \int_{-\infty}^{\infty} E(\xi, \tau) \exp(-ik\xi) d\xi,$$

é a transformada de Fourier inversa da envolvente do campo elétrico. Eq. A.14 pode ser solucionada numericamente para um certo intervalo de propagação $\delta\tau$ por qualquer método numérico apropriado. De forma similar, a refração sobre esse mesmo intervalo pode ser obtida por integração direta da equação diferencial

$$\frac{\partial E(\xi, \tau)}{\partial \tau} = \left[-i \frac{\lambda_0}{a} \frac{\partial^2}{\partial \tau^2} - 4\pi \frac{\partial}{\partial \tau} + 4\pi^2 i \frac{a}{\lambda_0} \right] P(\xi, \tau), \quad (\text{A.15})$$

onde a solução desta equação vai depender da forma explícita de P , que neste trabalho se toma como $P = \chi_{\text{eff}}(\xi) E$.

Esta versão do método apresenta algumas vantagens importantes sobre o tradicional. A principal, quiçá, é que o método não requer a especificação explícita de condições de contorno para o campo nas interfaces. Ao não usar a SVEA, as funções da coordenada longitudinal não precisam variar lentamente, e podemos descrever variações arbitrárias do índice de refração: ao campo ser avançado no tempo, as variações longitudinais e transversais evoluem de acordo com a forma funcional de $\chi_{\text{eff}}(\xi)$, o que significa, em outras palavras, que este método pode dar conta das reflexões além dos efeitos transversais. Ademais, podemos descrever propagação de pulsos de comprimento arbitrário, já que todas as derivadas temporais que aparecem na eq. de onda de Maxwell são retidas. Em particular, inclui a possibilidade de descrever pulsos ultracurtos. Por último, quero apontar que de um ponto de vista matemático, a escolha dos operadores $\hat{D}$ e $\hat{N}$ é arbitrária enquanto continuem satisfazendo a equação diferencial correspondente. No nosso caso, a definição destes operadores foi feita para ressaltar a separação entre o efeito difrativo e o refrativo.

Apêndice B

Método do Principio de Incerteza: Passo Adaptativo

Embora o SS-BPM seja uma ferramenta poderosa e relativamente fácil de implementar, requer de certos cuidados para assegurar que seja usado apropriadamente. Por exemplo, é importante monitorar a precisão calculando quantidades conservadas como a energia total do pulso (em ausência de absorção), usar uma janela de simulação suficientemente larga para que a energia do pulso fique confinada dentro dela (já que o algoritmo de FFT usa implicitamente condições periódicas, e a energia que atinge um extremo automaticamente entra de novo pelo outro extremo) e, principalmente, escolher de forma adequada o passo da propagação.

Um bom critério de seleção para o passo é muito importante para a otimização do SS-BPM. Tanto a precisão quanto o tempo de execução dependem da escolha dos passos temporal e espacial, $\delta\tau$ e $\delta\xi$, respectivamente. Como é mostrado por Sinkin *et al.* [39], o passo de propagação ($\delta\tau$ no nosso caso) é pouco sensível às mudanças em $\delta\xi$, e é por isso que nos concentramos na escolha de $\delta\tau$. Ademais, nesse mesmo trabalho observa-se que na maioria dos casos, a opção simples de manter o tamanho do passo constante é o menos eficiente dos métodos.

Já sabemos que o erro do SS-BMP é causado pelo fato dos operadores $\hat{D}$ e $\hat{N}$ não comutarem. Na menor ordem em $\delta\tau$ o erro do método pode ser obtido para cada ponto da coordenada longitudinal por:

$$-1/2 (\delta\tau)^2 [\hat{D}, \hat{N}] E(\xi, \tau), \quad (\text{B.1})$$

usando a eq. A.7. De um ponto de vista prático, não estamos interessados no erro em cada ponto mas em um número que nos proporcione suficiente informação para escolher o passo temporal de acordo com a precisão desejada. A ref. [39] define e usa como um bom parâmetro

o erro local relativo calculado através da seguinte definição:

$$\eta \equiv \frac{\|E_n - E_a\|}{\|E_a\|}, \quad (\text{B.2})$$

onde E_n é o resultado numérico após um passo de propagação, E_a é o resultado analítico que se supõe conhecido ou estimado de alguma maneira, e $\|E\| \equiv \sqrt{\int |E(\xi, \tau)|^2 d\xi}$. Usando as equações A.5, A.6 e A.7, podemos mostrar que

$$\eta = (1/2) (\delta\tau)^2 \sqrt{\frac{\int \left| [\hat{D}, \hat{N}] E(\xi, \tau) \right|^2 d\xi}{\int |E(\xi, \tau)|^2 d\xi}}. \quad (\text{B.3})$$

Com esta fórmula podemos determinar o tamanho do passo de propagação, $\delta\tau$, para uma precisão específica, η .

Inspirados na definição B.3 para o erro local relativo, Rieznik *et al.* [40] usam um outro parâmetro para o controle adaptativo do tamanho do passo, baseado no erro médio dado por

$$\varepsilon \equiv (1/2) (\delta\tau)^2 \left| \left\langle [\hat{D}, \hat{N}] \right\rangle \right| \equiv (1/2) (\delta\tau)^2 \frac{\left| \int E^*(\xi, \tau) [\hat{D}, \hat{N}] E(\xi, \tau) d\xi \right|}{\int |E(\xi, \tau)|^2 d\xi}, \quad (\text{B.4})$$

onde usamos a definição do valor médio do comutador $[\hat{D}, \hat{N}]$ no estado $E(\xi, \tau)$ como é usada no contexto da mecânica quântica. Eles mostram como este erro ε é também um bom parâmetro para determinar a discrepância entre o valor exato e o numérico. É precisamente através de um conceito muito útil da mecânica quântica, a saber: o princípio de incerteza entre um par de observáveis, que conseguem estabelecer um limite superior ao valor de ε , fazendo uma escolha correta de $\delta\tau$.

O princípio de incerteza é obtido a partir da desigualdade de Schwarz [41] que é aplicável a qualquer par de operadores hermitianos, e em particular aos operadores $\hat{D}$ e $\hat{N}$, dado que o são¹, e tem a forma

$$\left| \left\langle [\hat{D}, \hat{N}] \right\rangle \right| \leq 2\Delta\hat{D}\Delta\hat{N}, \quad (\text{B.5})$$

onde $\Delta\hat{D}$ e $\Delta\hat{N}$ são os desvios padrão, novamente definidos como na mecânica quântica, através de:

$$\Delta\hat{A} = \sqrt{\left\langle \left(\hat{A} - \langle \hat{A} \rangle \right)^2 \right\rangle}, \quad (\text{B.6})$$

¹Embora $\hat{N}$ seja um operador não linear, envolve somente uma multiplicação por uma função da posição e portanto pode ser considerado constante em cada intervalo de propagação temporal.

sendo

$$\langle \hat{A} \rangle = \frac{\int E^*(\xi, \tau) \hat{A} E(\xi, \tau) d\xi}{\int |E(\xi, \tau)|^2 d\xi}. \quad (\text{B.7})$$

Portanto, combinando as eqs. B.4 e B.5 pode-se escrever

$$\varepsilon = (1/2) (\delta\tau)^2 \left| \left\langle \left[\hat{D}, \hat{N} \right] \right\rangle \right| \leq (\delta\tau)^2 \Delta\hat{D}\Delta\hat{N}, \quad (\text{B.8})$$

e daí, escolher o tamanho do passo de acordo com

$$\delta\tau = \sqrt{\frac{\varepsilon}{\Delta\hat{D}\Delta\hat{N}}}, \quad (\text{B.9})$$

acotando assim o erro para qualquer valor desejado que se substituirá na eq. B.9. Este é o critério chamado de método do princípio de incerteza [40] devido a estar baseado na desigualdade matemática que dá lugar ao princípio de Heisenberg na mecânica quântica e também por serem calculados os valores médios da mesma forma que nesse formalismo.

A implementação prática do método do princípio de incerteza é simples, basta adicionar uma subrotina que avalie a média mecânico-quântica, e com esta, calcular as desviações padrão dos operadores envolvidos, $\Delta\hat{D}$ e $\Delta\hat{N}$, que são usados na eq. B.9. Como no caso da implementação do *split-step*, avaliar estas médias quânticas no espaço direto pode ser computacionalmente ineficiente para o operador de dispersão, já que inclui derivadas espaciais, mas, podemos ir ao espaço de Fourier e obter de forma muito mais fácil o mesmo resultado:

$$\langle \hat{A} \rangle = \frac{\int \tilde{E}^*(\kappa, \tau) \hat{A} \tilde{E}(\kappa, \tau) d\kappa}{\int |\tilde{E}(\kappa, \tau)|^2 d\kappa} \quad (\text{B.10})$$

com $\tilde{E}(k, \tau) = \mathcal{F}[E(\xi, \tau)] = \int_{-\infty}^{\infty} E(\xi, \tau) \exp(-i\kappa\xi) d\xi$, já que a média não depende da representação que estejamos utilizando. Por último, vale mencionar que não é necessário recalculá-lo a cada passo da propagação, normalmente é suficiente chamar esta subrotina a cada 10-20 passos.

Referências Bibliográficas

- [1] E. Yablonovitch, “Inhibited spontaneous emission in solid-state physics and electronics”, *Phys. Rev. Lett.* **58**, 2059 (1987).
- [2] E. Yablonovitch, “Photonic crystals: semiconductors of light”, *Sci. Am.* **285**, 47 (2001).
- [3] S. John, “Strong localization of photons in certain disordered dielectric superlattices”, *Phys. Rev. Lett.* **58**, 2486 (1987).
- [4] E. Yablonovitch, T. Gmitter, & K. Leung, “Photonic band structure: the face-centered-cubic case employing nonspherical atoms”, *Phys. Rev. Lett.* **67**, 2295 (1991).
- [5] J. D. Joannopoulos, S. G. Johnson, J. N. Winn, R. D. Meade, *Photonic Crystals: Molding the flow of light*, 2nd ed. (Princeton University Press, Princeton NJ, 2008).
- [6] H. Sözüer, & J. Dowling, “Photonic band calculations for woodpile structures”, *J. Mod. Opt.* **41**, 231 (1994); K. M. Ho, C. T. Chan, C. M. Soukoulis, R. Biswas, & M. Sigalas, “Photonic band gaps in three dimensions: New layer-by-layer periodic structures”, *Solid State Comm.* **89**, 413 (1994).
- [7] K. Busch, G. von Freymann, S. Linden, S. F. Mingaleev, L. Tkeshelashvili, M. Wegener, “Periodic nanostructures for photonics”, *Phys. Rep.* **444**, 101 (2007).
- [8] H. G. Winful, J. H. Marburger, E. Garmire, “Theory of bistability in nonlinear distributed feedback structures”, *Appl. Phys. Lett.* **35**, 379 (1979); H. G. Winful, G. D. Cooperman, “Self-pulsing and chaos in distributed feedback bistable optical devices”, *Appl. Phys. Lett.* **40**, 298 (1982).
- [9] W. Chen & D. L. Mills, “Gap solitons and the nonlinear optical response of superlattices”, *Phys. Rev. Lett.* **58**, 160 (1987); D. L. Mills & S. E. Trullinger, “Gap solitons in nonlinear periodic structures”, *Phys. Rev. B* **36**, 947 (1987).
- [10] C. M. de Sterke & J. E. Sipe, “Gap solitons”, *Progress in Optics* **33**, 203 (1994).

- [11] Lord Rayleigh, *Phil. Mag. S. 5*, **24**(147), 145-159 (1887); Lord Rayleigh, *Phil. Mag. S. 5*, **26**(160), 256-265 (1888).
- [12] Y. Fink, J. N. Winn, S. Fan, C. Chen, J. Michel, J. D. Joannopoulos, & E. L. Thomas, “A dielectric omnidirectional reflector,” *Science* **282**, 1679–1682 (1998).
- [13] J. N. Winn, Y. Fink, S. Fan, & J. D. Joannopoulos, “Omnidirectional reflection from a one-dimensional photonic crystal,” *Opt. Lett.* **23**, 1573–1575 (1998).
- [14] M. Ibanescu, Y. Fink, S. Fan, E. L. Thomas, & J. D. Joannopoulos, “An all-dielectric coaxial waveguide,” *Science* **289**, 415–419 (2000).
- [15] S. D. Hart, G. R. Maskaly, B. Temelkuran, P. H. Pridaux, J. D. Joannopoulos, & Y. Fink, “External reflection from omnidirectional dielectric mirror fibers,” *Science* **296**, 510– 513 (2002).
- [16] R. Boyd, *Nonlinear Optics*, 3rd ed. (Academic Press, Burlington, MA, 2008).
- [17] Uma tabela comparativa entre o formalismo da propagação de onda em meios diéletricos periódicos e a mecânica quântica em potenciais periódicos se encontra no livro de Joannopoulos [5], apêndice A.
- [18] N. W. Ashcroft, N. D. Mermin, *Solid State Physics*, (Holt, Rinehart and Winston, NY, 1976).
- [19] D. J. Griffiths, *Introduction to Electrodynamics*, 3rd ed. (Prentice Hall, New Jersey, 1999).
- [20] P. Yeh, *Optical Waves in Layered Media* (John Wiley & Sons, New Jersey, 2005).
- [21] J. Hermann, “Propagation of ultrashort light pulses in fibers with saturable nonlinearity in the normal-dispersion region”, *J. Opt. Soc. Am. B* **8**, 1507 (1991).
- [22] S. Gatz & J. Hermann, “Soliton propagation in materials with saturable nonlinearity”, *J. Opt. Soc. Am. B* **8**, 2296 (1991).
- [23] J. M. Hickmann, S. B. Cavalcanti, N. M. Borges, E. A. Gouveia, A. S. Gouveia-Neto, “Modulational instabilities in semiconductor-doped glass fibers with saturable nonlinearity”, *Opt. Lett.* **18**, 182 (1993).
- [24] G. S. Stegeman & R. H. Stolen, “Waveguides and fibers for nonlinear optics”, *J. Opt. Soc. Am. B* **6**, 652 (1989).

- [25] M. Scalora, J. P. Dowling, C. M. Bowden, & M. J. Bloemer, “Optical limiting and switching of ultrashort pulses in nonlinear photonic band gap materials”, *Phys. Rev. Lett.* **73**, 1368 (1994).
- [26] M. Scalora, J. P. Dowling, M. J. Bloemer, & C. M. Bowden, “The photonic band edge optical diode”, *J. Appl. Phys.* **76**, 2023 (1994).
- [27] J. P. Dowling & C. M. Bowden, “Anomalous index of refraction in photonic band gap materials”, *J. Mod. Opt.* **41**, 345 (1994).
- [28] J. V. Moloney, M. R. Belic, & H. M. Gibbs, “Calculation of transverse effects in optical bistability using fast Fourier transform techniques”, *Optics Comm.* **41**, 379 (1982).
- [29] M. Scalora & J. W. Haus, “Stimulated Raman scattering: diffractive coupling in transient and steady-state regimes”, *J. Opt. Soc. Am. B* **8**, 1003 (1991).
- [30] R. A. Fisher & W. K. Bischel, “The role of linear dispersion in plane-wave self-phase modulation”, *Appl. Phys. Lett.* **23**, 661 (1973).
- [31] R. A. Fisher & W. K. Bischel, “Numerical studies of the interplay between self-phase modulation and dispersion for intense plane-wave laser pulses”, *J. Appl. Phys.* **46**, 4921 (1975).
- [32] T. R. Taha & M. J. Ablowitz, “Analytical and numerical aspects of certain nonlinear evolution equations. II. Numerical, nonlinear Schrodinger equation”, *J. Comp. Phys.* **55**, 203 (1984).
- [33] G. P. Agrawal, *Nonlinear Fiber Optics*, 4th ed. (Academic Press, Burlington, MA, 2007).
- [34] J. A. Fleck, J. R. Morris, & M. D. Feit, “Time-dependent propagation of high-energy laser-beams through atmosphere”, *Appl. Phys.* **10**, 129 (1976).
- [35] M. Scalora & M. E. Crenshaw, “A beam propagation method that handles reflections”, *Optics Comm.* **108**, 191 (1994).
- [36] P. Pechukas & J. C. Light, “On the exponential form of time-displacement operators in quantum mechanics”, *J. Chem. Phys.* **44**, 3897 (1966).
- [37] W. Magnus, “On the exponential solution of differential equations for a linear operator”, *Commun. Pure Appl. Math.* **7**, 649 (1954).

- [38] D. W. Robinson, “Multiple Coulomb excitations of deformed nuclei”, *Helv. Phys. Acta*, **36**, 140 (1963).
- [39] O. V. Sinkin, R. Holzlöhner, J. Zweck, & C. Menyuk, “Optimization of the split-step Fourier method in modeling optical-fiber communications systems”, *J. Lightwave Technol.* **21**, 61 (2003).
- [40] A. A. Rieznik, T. Tolisano, F. A. Calligari, D. F. Grosz, & H. L. Fragnito, “Uncertainty relation for the optimization of optical-fiber transmission systems simulations”, *Optics Express*, **13**, 3822 (2005).
- [41] E. Merzbacher, *Quantum Mechanics*, 3rd ed. (John Wiley & Sons, NY, 1998).
- [42] Y. H. Lee, A. Chavez-Pirson, S. W. Koch, H. M. Gibbs, S. H. Park, J. Morhange, A. Jeffery, N. Peyghambarian, L. Banyai, A. C. Gossard, & W. Wiegmann, “Room-temperature optical nonlinearities in GaAs”, *Phys. Rev. Lett.* **57**, 2446 (1986).