UNIVERSIDADE FEDERAL DE ALAGOAS INSTITUTO DE FÍSICA PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA

ANDRESSA MARIA DA SILVA NUNES

Estudo das propriedades de transmissão de canais acoplados através do Método de Contorno de Paredes

 $\begin{array}{c} {\rm Macei\acute{o}-Brasil}\\ 2015 \end{array}$

Estudo das propriedades de transmissão de canais acoplados através do Método de Contorno de Paredes

Dissertação de Mestrado apresentada ao Curso de Pós-Graduação em Física da Matéria Condensada da Universidade Federal de Alagoas como requisito para obtenção do título de Mestre em Física.

Orientador: Prof. Dr. Marcelo Leite Lyra

 $\begin{array}{c} {\rm Macei\acute{o}-Brasil}\\ 2015 \end{array}$

Catalogação na fonte Universidade Federal de Alagoas Biblioteca Central

Bibliotecária Responsável: Janaina Xisto de Barros Lima

N973e	Nunes, Andressa Maria da Silva. Estudo das propriedades de transmissão de canais acoplados através do método de contorno de paredes / Andressa Maria da Silva Nunes. – 2015. 73 f.: il. grafs.
	Orientador: Marcelo Leite Lyra. Dissertação (mestrado em Física da Matéria Condensada) – Universidade Federal de Alagoas. Instituto de Física. Maceió, 2015.
	Bibliografia: f. 70-73
	1. Chaveamento de energia. 2. Acoplador. 3. Método de contorno de paredes (MCV). I. Título.
	CDU: 53:621.372.833



Universidade Federal de Alagoas Instituto de Física

Programa de Pós Graduação em Física

BR 104 km 14. Campus A.C. Simões Cidade Universitária Tabuleiro dos Martins 57072-970 Maceió - AL. Brasil FONE : (82) 3214-1423/FAX 3214-1645

PARECER DA BANCA EXAMINADORA DE DEFESA DE DISSERTAÇÃO DE MESTRADO

"Estudo das propriedades de transmissão de canais acoplados através do método de contorno de paredes"

por

Andressa Maria da Silva Nunes

A Banca Examinadora composta pelos professores Marcelo Leite Lyra, como presidente da banca examinadora e orientador, do Instituto de Física da Universidade Federal de Alagoas, Rodrigo de Paula Almeida Lima, do Instituto de Física da Universidade Federal de Alagoas e Fabio Marcel Zanetti, do Departamento de Física da Universidade Federal do Paraná consideram a candidata aprovada com grau "<u>A</u>".

Maceió, 12 de junho de 2015

Prof. Dr. Marcelo Leite Lyra

Prof. Dr. Rodrigo de Paula Almeida Lima

Frof. Dr. Fabio Marcel Zanetti

Dedico este trabalho aos meus pais, Aldemir e Maria.

AGRADECIMENTOS

A Deus, que me deu saúde e força para finalizar mais uma etapa da minha vida.

Aos meus pais Maria e Aldemir, pelo amor, educação, incentivo e exemplo. Sem eles nada disso seria possível.

À minha irmã Camila, que em nenhum momento deixou de acreditar em mim.

Ao meu orientador Professor Marcelo Leite Lyra, pela confiança, paciência, compreensão e por tudo que me ensinou.

Ao Professor Fabio Marcel Zanetti, que acompanha meu trabalho desde a graduação. Agradeço por toda a paciência, dedicação e incentivo.

Ao meu namorado Jonathas, por toda paciência, incentivo e por nunca me deixar acomodar.

Aos meus amigos de pós-graduação, em especial: Flavia, Jani, Elenilda, Tasso, Djair e Jefferson, que compartilharam comigo muitos momentos de aprendizado.

A todos os meus professores que direta ou indiretamente contribuíram para a minha formação acadêmica.

A Capes, pelo apoio financeiro.

RESUMO

Nas últimas décadas, a engenharia quântica tem experimentado crescente avanço. Tem papel destacado neste panorama a fabricação de dispositivos de tamanho micro e nano estruturados e sua otimização, no sentido de projetá-los corretamente para que possam exibir as características exatas para os quais são destinados. Dentre tais sistemas destacamos os acopladores, que desempenham um papel importante em eletrônica e, em particular, no estudo de chaveamento de energia. Estes sistemas podem ser estudados através da aplicação direta de problemas de valor de contorno no âmbito da mecânica quântica experimental. No presente trabalho, fornecemos o estudo numérico de uma estrutura composta por guias de onda acopladas que direcionam a propagação de ondas e apresentam capacidade de chaveamaneto de pulsos. Estudamos o comportamento do sistema proposto através do Método de Contorno de Paredes (MCP), técnica de espalhamento quântico por barreiras de formato e condições de contorno arbitrárias. O estudo do comportamento do sistema se fez através da análise da matriz T, objeto principal do MCP, que carrega informações sobre a energia e geometria do problema, podendo assim fornecer de maneira simples e direta resultados acerca das variações de energia como função da geometria do sistema espalhador. Determinamos o espectro de transmissão para o casos de alimentação através de um único canal. Verificamos que o comprimento de onda dos modos de transmissão ressonante depende basicamente da largura dos canais de entrada e saída. Por fim, exploramos as propriedades geométricas do acoplador (inclinação e tamanho dos canais). Nós revelamos que o chaveamento dos modos de transmissão ressonante para diferentes canais de saída pode ser controlado pela geometria do acoplador.

Palavras-chave: Chaveamento de energia, acoplador, Método de Contorno de Paredes

ABSTRACT

In the last few decades, quantum engineering has experienced substantial progresses. One of the biggest challenges is not only to fabricate micro and nanosized systems, but also to develop new designs that allow them to perform predefined tasks. Among these systems, the couplers play an important role in electronics, in particular as energy switching devices. In the present work, we provide a numerical study of a structure composed of coupled waveguides, which are structures that direct wave propagation and switch energy pulses. Among the various theoretical methods by which the transmission characterisites of couplers can be investigated, there are those based on the scattering technique. Here, we study the behavior of the proposed system by the boundary wall method (BWM) to calculate the quantum scattering state by barriers with arbitrary boundary conditions. The study of the behavior of the system was carried out by the analysis of the matrix T, the main object of the BWM. It possesses the characteristic of capturing information regarding the energy and geometry of the problem, and thus can provide us with a simple way to probe indirectly the energy distribution as a function of the coupler geometry. We determined the transmission spectrum for the case of input power through a single channel. We found that the transmission resonance wavelengths depend mainly on the width of the input and output channels. Finally, we explore the geometric properties of the coupler (slope and size of the channels). We unveil that the switching of the resonant transmission modes to different output channels can be controlled by tunning the geometry of the coupler.

Keywords: Energy switching, coupler, Boundary Wall Method

Lista de Figuras

1.1	Esquema do processo de chaveamento por mensagem. O emissor ${f A}$ precisa	
	enviar a mensagem para o receptor ${f E}$. O emissor ${f A}$ transmite a mensagem	
	para ${f J},$ por ser o nodo mais próximo ou estar com menos tráfego, que recebe	
	a mensagem e retransmite para ${f B}$ e assim sucessivamente até chegar ao	
	destinatário E	19
1.2	A informação é segmentada nos pacotes 1, 2 e 3, que são transmitidos da	
	origem (emissor) ao destino (destinatário). Os pacotes podem percorrer	
	conexões diferentes	20
1.3	Exemplos de barreiras espalhadoras: a) curva fechada (bilhar), b) ressona-	
	dor aberto, c) curva aberta e d) curva desconexa. $\ldots \ldots \ldots \ldots \ldots$	24
2.1	Regiões interna e externa de um bilhar fechado de forma C . As linhas	
	pontilhadas estão associadas à dinâmica de uma partícula sendo espalhada	
	em cada região.	26
2.2	Representação esquemática de um dos passos do processo de espalhamento	
	$(s_a \in s_b \text{ fixos})$ na região a) interna e b) externa ao bilhar. $\ldots \ldots \ldots$	32
2.3	Discretização da curva C .	33
2.4	(a) Bilhar quadrado, (b) um quarto (totalmente dessimetrizado) do bilhar	
	de estádio	36
2.5	Matriz $T~(1000\times 1000)$ discretizada para um bilhar quadrado. (a) Gráfico	
	de $ T(i,j) $ para $k = 90.2351$ (esquerda) e $k = 90.4720$ (direita). Para	
	i=43 fixo, $ T(i,j) $ é mostrado em função de j para: (b) $k=90.2351$ e (c)	
	k = 90.4720.	37

2.6	(a) Gráfico de densidade de $ \psi(x,y) ^2$ para $k=90.2351$ (esquerda) e $k=$	
	$90.4720~({\rm direita}).$ No caso ressonante, a figura da esquerda mostra o gráfico	
	3D de $ \psi(\vec{r}) ^2$ dentro do bilhar. O gráfico da direita mostra $ \psi(x,y) ^2$ (curva	
	contínua) e o autoestado exato $ \Phi_{27,10}(x,y) ^2$ (curva pontilhada) em função	
	de x para y fixo	38
2.7	(a) $ \psi(\vec{r}) ^2$ para o caso da onda incidente $ \varphi_{\vec{r}} = 2\text{sen}[27\pi x] \cos[10\pi y]$. Um	
	gráfico de densidade é mostrado à direita e dois "cortes" de $ \psi(x,y) ^2$ ao	
	longo de x são exibidos do lado direito	39
2.8	Matriz T (1000 × 1000) discretizada para o bilhar quarto de estádio. (a)	
	Gráfico de $ T(i, j) $ para $k = 59.68, k = 59.90$ em (b) e $k = 59.55$ em (c). A	
	partir das características da matriz T, podemos inferir que apenas o último	
	exemplo não corresponde a um autovalor	40
2.9	Para o bilhar de estádio dessimetrizado, gráficos de densidade (esquerda)	
	e cortes 1D (direita) para um ângulo $\theta=\pi$ de uma onda plana incidente	
	com (a) $k = 59.68$, (b) $k = 59.90$, e (c) $k = 59.55$. As soluções internas	
	foram normalizadas para uma melhor vizualização.	41
2.10	Estrututa 2D com paredes rígidas. Para $h = 0$ (caso fechado) as guias de	
	ondas laterais são eliminadas.	42
2.11	Gráfico de densidade de $ {\cal T}(i,j) ^2$ em função de k e h para a estrutura	
	fechada descrita no texto com (a) $i = j = 150$ (localizado em Q_1) e (b)	
	$i = 150$ (localizado em Q_1) e $j = 450$ (localizado em Q_2).	43
2.12	(a) Detalhes da Figura 2.11 do painel superior, indicando os estados onde	
	as densidades são exibidas em (b) $k = 11.332, h = 0.0$; (c) $k = 11.332$,	
	h = 0.12; (d) $k = 11.232$, $h = 0.25$; (e) $k = 10.745$, $h = 0.5$; (f) $k = 10.535$,	
	h = 1.0; (g) $k = 11.332$, $h = 0.333$; (h) $k = 10.679$, $h = 0.880$; (i) $k = 0.880$; (i) k	
	10.822, $h = 0.31$. A incidente é uma onda plana com $\theta = \arctan[3/2]$ para	
	(b), (c), (g), (h), (i), e $\theta = 0$ para os demais casos	44

- 2.14 Esquema do cristal fotônico bidimensional com uma guia de onda formada por linhas de defeitos tipo ar. A estrutura é constituída por cilindros de raio r com parâmetro de rede $a_0 = 5r$. As distâncias características mostradas são $a = 5a_0$ e $b = 9a_0$ e $c = 14a_0$. Os comprimentos de onda correspondentes a kr = 0.459 e 0.27, também são mostrados para comparação. A origem do plano x - y está no centro da haste inferior esquerdo mais distante. Todas as medidas são dadas em unidades arbitrárias. 47
- 2.15 Gráfico 2D de densidade de $|\psi|^2$ para a onda plana incidente $\varphi(\vec{r}) = exp[ikx]$, com kr = 0.27. Regiões escuras correspondem a baixas intensidades. É mostrado também 'cortes' de $|\psi|^2$ ao longo de y = a e x = b. . . 47

2.19	Gráfico 2D de densidade de $ \psi ^2$, e cortes ao longo $y = a$ (parte inferior do	
	braço) e $y = d$ (braço médio) para o caso onde $kr = 0.459.$	50

- 2.20 Gráficos 2D de densidade de $|\psi|^2$ para kr = 0.459 e três diferentes configurações espaciais para a guia de onda do tipo interferômetro. Ao controlar a diferença no comprimento do caminho óptico, a condição de interferência construtiva pode ser ajustada para produzir um feixe de luz de saída. . . . 51

- 3.5 Diferença entre as médias dos quadrados dos elementos de T do canal inferior e do canal superior versus a inclinação θ , para o modo de transmissão ressonante fundamental, $\lambda_1 = 0.483.....59$
- 3.6 Gráficos de densidade de $|\psi(\vec{r})|^2$ para o acoplador direcional mostrado na Figura 3.1 com h = 0.25, w = 0.75, l = 1 e tendo uma onda plana incidende de comprimento de onda $\lambda_1 = 0.4830$. Em todos os casos o canal superior de entrada foi mantido fechado. Diferentes valores para a inclinação θ são considerados (a)10°, (b) 20°, (c) 30°, (d) 40°, (e) 50°, (f) 60°, (g) 70°, (h)80° e 90°, mostrando diferentes possibilidades de chaveamento de energia. . . 60
- 3.7 Diferença entre as médias dos quadrados dos elementos de T do canal inferior e do canal superior versus a inclinação θ , para $\lambda_2 = 0.2458$ 61

3.8	Gráficos de densidade de $ \psi(\vec{r}) ^2$ para o acoplador direcional mostrado na	
	Figura 3.1 com $h = 0.25, w = 0.75, l = 1$ e tendo uma onda plana incidende	
	de comprimento de onda $\lambda_2 = 0.245$. Em todos os casos o canal superior	
	de entrada foi mantido fechado. Diferentes valores para a inclinação θ são	
	considerados (a)10°, (b) 20°, (c) 30°, (d) 40°, (e) 50°, (f) 60°, (g) 70°, (h)80°	
	e 90°, mostrando diferentes possibilidades de chaveamento de energia. $\ $	62
3.9	Diferença entre as médias dos quadrados dos elementos de T do canal	
	inferior e do canal superior versus a inclinação $ heta$, para $\lambda_3 = 0.165$	63
3.10	Gráficos de densidade de $ \psi(\vec{r}) ^2$ para o acoplador direcional mostrado na	
	Figura 3.1 com $h = 0.25, w = 0.75, l = 1$ e tendo uma onda plana incidende	
	de comprimento de onda $\lambda_3 = 0.1658$. Em todos os casos o canal superior	
	de entrada foi mantido fechado. Diferentes valores para a inclinação θ são	
	considerados (a)20°, (b) 50° e (c) 80°	64
3.11	Diferença entre as médias dos quadrados dos elementos de T do canal infe-	
	rior e do canal superior versus a inclinação θ , para $\lambda_4 = 0.1248$	65
3.12	Gráficos de densidade de $ \psi(\vec{r}) ^2$ para o acoplador direcional mostrado na	
	Figura 3.1 com $h = 0.25, w = 0.75, l = 1$ e tendo uma onda plana incidende	
	de comprimento de onda $\lambda_4 = 0.124$. Em todos os casos o canal superior	
	de entrada foi mantido fechado. Diferentes valores para a inclinação θ são	
	considerados (a) 20° , (b) 50° e (c) 80°	66
3.13	Diferença entre as médias dos quadrados dos elementos de T do canal supe-	
	rior e do canal inferior versus w para a transmissão ressonante fundamental	
	$(\lambda_1 = 0.4830)$	67
3.14	Gráficos de densidade de $ \psi(\vec{r}) ^2$ para o acoplador direcional mostrado na	
	Figura 3.1 com $h = 0.25, \theta = 30^{\circ}, l = 1$ e tendo uma onda plana incidende	
	de comprimento de onda $\lambda_1 = 0.483$. Em todos os casos o canal superior	
	de entrada foi mantido fechado. Diferentes valores para o comprimento da	
	guia que une os canais de entrada aos de saída θ são considerados (a)0.5,	
	(b) 0.75 e (c) 1.0	68

3.15	Diferença entre as médias dos quadrados dos elementos de T do canal	
	superior e do canal inferior versus w para $\lambda_2 = 0.245$	69
3.16	Gráficos de densidade de $ \psi(\vec{r}) ^2$ para o acoplador direcional mostrado na	
	Figura 3.1 com $h=0.25,\theta=30^\circ,l=1$ e tendo uma onda plana incidende	
	de comprimento de onda $\lambda_2 = 0.245$. Em todos os casos o canal superior	
	de entrada foi mantido fechado. Diferentes valores para o comprimento da	
	guia que une os canais de entrada aos de saída θ são considerados (a)0.5,	
	(b) 0.75 e (c) 1.0	70
3.17	Diferença entre as médias dos quadrados dos elementos de T do canal	
	superior e do canal inferior versus w para $\lambda_3 = 0.165.$	71
3.18	Gráficos de densidade de $ \psi(\vec{r}) ^2$ para o acoplador direcional mostrado na	
	Figura 3.1 com $h = 0.25, w = 0.75, l = 1$ e tendo uma onda plana incidende	
	de comprimento de onda $\lambda_3 = 0.165$. Em todos os casos o canal superior	
	de entrada foi mantido fechado. Diferentes valores para o comprimento da	
	guia que une os canais de entrada aos de saída θ são considerados (a)0.5,	
	(b) 0.75 e (c) 1.0	72
3.19	Diferença entre as médias dos quadrados dos elementos de T do canal	
	superior e do canal inferior versus w para $\lambda_4 = 0.124$	73
3.20	Gráficos de densidade de $ \psi(\vec{r}) ^2$ para o acoplador direcional mostrado na	
	Figura 3.1 com $h = 0.25, w = 0.75, l = 1$ e tendo uma onda plana incidende	
	de comprimento de onda $\lambda_4 = 0.124$. Em todos os casos o canal superior	
	de entrada foi mantido fechado. Diferentes valores para o comprimento da	
	guia que une os canais de entrada aos de saída θ são considerados (a)0.5,	
	(b) 0.75 e (c) 1.0	74
	3.15 3.16 3.17 3.18 3.19 3.20	 3.15 Diferença entre as médias dos quadrados dos elementos de T do canal superior e do canal inferior versus w para λ₂ = 0.245

SUMÁRIO

FICHA	A	2
PARI	\mathbf{ECER}	4
	DEDICATÓRIA	6
	AGRADECIMENTOS	7
	RESUMO	8
	ABSTRACT	9
	SUMÁRIO	17
1	INTRODUÇÃO	18
1.1	Teoria de Espalhamento	20
1.2	Método de Contorno de Paredes	23
1.3	Objetivos e Organização da Dissertação	23
2	O MÉTODO DE CONTORNO DE PAREDES E SUAS APLI-	
	CAÇÕES	25
2.1	Desenvolvimento Analítico do Método	25
2.2	Características da Matriz T	32
2.3	Implementação Numérica do Método	33
2.4	Aplicações do Método de Contorno de Paredes	35
2.4.1	Autoestados e Solução de Espalhamento para Bilhares	36

2.4.2	Bilhares Acoplados por Guias de Onda	42
2.4.3	Cristais Fotônicos	46
3	PROPRIEDADES DE TRANSMISSÃO DE CANAIS ACOPLA-	
	DOS	52
3.1	Determinação das Transmissões Ressonantes	55
3.2	Variação de θ	58
3.3	Variação de ω	63
4	CONCLUSÕES E PERSPECTIVAS	75

1

INTRODUÇÃO

A crescente evolução tecnológica que a indústria tem apresentado nas últimas décadas estendeu-se à engenharia quântica, impulsionando a construção de sistemas nanoscópicos e mesoscópicos, bem como sua otimização, no sentido de projetá-los corretamente para que possam exibir os atributos exatos para os quais são destinados. Exemplos desses avanços estão presentes principalmente na fabricação de equipamentos voltados à área da tecnologia eletrônica (TANENBAUM, 2003; MIDWINTER et al., 1993). Com esse avanço surge a possibilidade da construção de dispositivos com dimensões cada vez menores e que procurem aumentar a velocidade no transporte de sinais.

Dentre a classe de sistemas que possuem uma elevada capacidade de processamento, destacamos os sistemas ópticos de comunicação, cuja principal característica é a transmissão de sinais com baixas perdas e em uma ampla faixa de frequência (POLLOCK, 1995; HECHT, 2002). No entanto, à medida que miniaturizam-se os dispositivos, os efeitos quânticos se sobrepõem aos efeitos ópticos, surgindo então a necessidade de estudá-los no âmbito da mecânica quântica. Exemplos desse tipo de dispositivos são os nanocircuitos, interruptores quânticos (XUE et al., 2005), acopladores (SOMBRA et al., 2012), defasadores, isoladores, multiplexadores de divisão de comprimento de onda, comutadores, e portas lógicas (SCHIMMEL et al., 2004; UTHAYKUMAR et al., 2013), entre outros (ONORATO; BELLUCCI, 2010).

Dentre os dispositivos citados acima podemos destacar os acopladores, que são responsáveis pela troca de energia entre ondas que se propagam em diferentes estruturas que direcionam a propagação de ondas. Existem vários tipos destas estruturas. As mais conhecidas são: as linhas de transmissão, as guias de ondas(SOMENDA; STEGEMAN, 1992) e as fibras ópticas (JHA, 2005). Os acopladores têm atraído um grande interesse da comunidade científica principalmente por oferecerem a possibilidade de chaveamento de energia (BIANCALANA, TRAN; 2012).

O processo de chaveameto é de extrema importância, principalmente na área de

comunicação, tal processo consiste em vincular um emissor (aquele que emite uma informação) à um receptor (aquele que recebe a informação). O chaveamento ocorre através de chaves que usam determinados critérios para a escolha do caminho que a informação deve seguir numa rede. Existem três tipos principais de chaveamento: por circuito, por mensagem e por pacotes (TANENBAUM, 2003; KUROSE, ROSS; 2000). No chaveamento por circuito, antes de qualquer informação ser enviada é estabelecido um caminho entre a origem e o destino dos dados. Feito isso, aquele percurso passa a ser totalmente dedicado para a transferência dos dados entre a origem e o destino, até a finalização da conexão onde o sinal é liberado para que outros usuários possam fazer uso dele. Um exemplo de rede chaveada por circuito é o sistema de telefonia. No chaveamento por mensagem não há um percurso pré-estabelecido entre o emissor e o repector. As informações são transferidas de nodo (ponto de conexão capaz de receber e transmitir informações) em nodo, num processo conhecido como "Store-and-Forward" (KUROSE, ROSS; 2000). As mensagens só seguem para o nodo seguinte após terem sido integralmente recebidas do nodo anterior e assim sucessivamente até chegar ao destino final (ver Figura 1.1). Um exemplo de aplicação desse tipo de chaveamento é o correio eletrônico X.400, que consiste num conjunto de normas que definem serviços e protocolos que visam permitir a todos os sistemas de correio eletrônico, interfuncionar, assegurando que as mensagens sejam encaminhadas desde a caixa postal do emissor até a de seu ou seus destinatários, não importando onde esses estejam ou de que sistema façam parte (CARVALHO, 1994).

Figura 1.1: Esquema do processo de chaveamento por mensagem. O emissor \mathbf{A} precisa enviar a mensagem para o receptor \mathbf{E} . O emissor \mathbf{A} transmite a mensagem para \mathbf{J} , por ser o nodo mais próximo ou estar com menos tráfego, que recebe a mensagem e retransmite para \mathbf{B} e assim sucessivamente até chegar ao destinatário \mathbf{E} .



Fonte: Carvalho, 1994.

Por fim, no processo de chaveamento por pacotes cada mensagem é dividida em mensagens menores, denominadas pacotes. Um pacote é a menor unidade de dados que pode ser transmitido numa rede. Os dados são encaminhados entre nodos da rede através de conexões compartilhadas por outros nodos (ver Figura 1.2). Esse tipo de chaveamento é utilizado principalmente para otimizar a largura de banda da rede, visto que o fato de dividir uma mensagem em pacotes e transmiti-los simultaneamente reduz o atraso de transmissão total da mensagem. Um exemplo de rede chaveada por pacotes é a internet.

Figura 1.2: A informação é segmentada nos pacotes 1, 2 e 3, que são transmitidos da origem (emissor) ao destino (destinatário). Os pacotes podem percorrer conexões diferentes.



Fonte: Kurose, 2010.

Todos esses sistemas, citados acima, podem ser estudados através da aplicação direta de problemas de valor de contorno no âmbito da mecânica quântica experimental, visto que, nesta classe de sistemas a função de onda do problema possui restrições associadas às suas paredes.

Junto à importância experimental, cresceu a necessidade de obtenção de maneiras eficientes de resolução teórica desta classe de sistemas. Dentre os vários métodos pelos quais pode ser tratado o problema de fronteira, destaca-se a utilização de técnicas de cálculo de espalhamento, através de potenciais efetivos. Esse tipo de abordagem procura a solução do problema de uma partícula interagindo com um potencial que satisfaz as condições de contorno requeridas através da comparação entre as duas dinâmicas envolvidas no problema: da partícula livre, que se move pelo espaço sem interação, e do comportamento da partícula quando é afetada por um potencial espalhador.

1.1 Teoria de Espalhamento

Iremos agora analisar os processos de espalhamento usando a teoria de perturbação, abordagem tradicional, presente nos livros-texto de mecânica quântica. Os processos de espalhamento são aqueles nos quais um estado inicial é transformado em um estado final através da ação de um potencial. Trataremos aqui do caso do processo de espalhamento independente do tempo, visto que no presente trabalho nosso problema é descrito por um potencial independente do tempo. Partiremos do pressuposto de que nosso Hamiltoniano pode ser escrito como:

$$H = H_0 + V(\vec{r}), (1.1)$$

onde $H_0 = \frac{\vec{P}^2}{2m}$ representa o operador energa cinética, com autovalores $E_k = \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m}$.

Na ausência de um espalhador, V é zero, e o autoestado de energia é justamente o estado de uma partícula livre. A presença de V faz com que o autoestado de energia seja diferente do estado para uma partícula livre. Contudo, se o processo de espalhamento for elástico, ou seja a enegia não muda ao longo do processo, nós podemos obter a solução do problema a partir da solução para o caso da partícul livre, considerando o potencial de interação como uma perturbação ao problema da partícula livre. Para isso devemos resolver a equação de Schrödinger.

Mais especificamente, seja $|\phi\rangle$ o autoket do operador de energia H_0 , então:

$$H_0 \left| \phi \right\rangle = E \left| \phi \right\rangle. \tag{1.2}$$

A equação de Schrödinger que desejamos resolver é :

$$(H_0 + V) |\psi\rangle = E |\psi\rangle.$$
(1.3)

Ambos $H_0 \in H_0 + V$ exibem um espetro contínuo de energia. Nós procuramos uma solução para (1.3), de modo que quando $V \to 0$, tenhamos $|\psi\rangle \to |\phi\rangle$, onde $|\phi\rangle$ é a solução da equação de Schrödinger para a partícula livre (equação (1.2)). Então, podemos mostrar que a solução desejada é:

$$|\psi\rangle = \frac{1}{E - H_0} V |\psi\rangle + |\phi\rangle.$$
(1.4)

Aqui deixaremos de lado a discussão a respeito das complicações que surgem na natureza singular do operador $\frac{1}{E-H_0}$, que pode ser encontrada em livros-texto especializados (SA-KURAI, 1994). Para comprovar que (1.4) satisfaz os requisitos descritos anteriormente, basta aplicar $E - H_0$ e obtemos imediatamente (1.3). A presença de $|\phi\rangle$ é razoável, pois $|\psi\rangle$ deve se reduzir a $|\phi\rangle$ quando V desaparece. Entretanto, sem uma receita de como lidar com um operador singular, uma equação do tipo (1.4) não possui significado. Não podemos usar a metodologia adotada em teoria de perturbação independente do tempo (SAKURAI, 1994), pois $|\phi\rangle$ e $|\psi\rangle$ possuem autovolores contínuos. Então, usaremos uma técnica diferente, que consiste em fazer com que E seja fracamente complexo:

$$|\psi\rangle = |\phi\rangle + \frac{1}{E - H_0 + i\epsilon} V |\psi\rangle, \qquad (1.5)$$

Essa expressão é conhecida como equação de Lippman-Schwinger (SAKURAI, 1994). A equação de Lippman-Schwinger é uma *equação ket* independe de representaçãoes particulares. Na base das posições, temos:

$$\langle \vec{x} | \psi \rangle = \langle \vec{x} | \phi \rangle + \int d^3 x' \left\langle \vec{x} \left| \frac{1}{E_i - H_0 + i\epsilon} \right| \vec{x'} \right\rangle \langle \vec{x'} | V | \psi \rangle.$$
(1.6)

Esta é a equação integral para espalhamento, pois o ket desconhecido $|\psi\rangle$ aparece no integrando. Para progredirmos, nós devemos primeiramente avaliar o núcleo da equação integral acima, definido por:

$$G(\vec{x}, \vec{x'}) \equiv \frac{\hbar^2}{2m} \left\langle \vec{x} \left| \frac{1}{E_i - H_0 + i\epsilon} \right| \vec{x'} \right\rangle.$$
(1.7)

Podemos escrever $G(\vec{x}, \vec{x'})$ como:

$$G(\vec{x}, \vec{x'}) = -\frac{1}{4\pi} \frac{e^{ik'|\vec{x} - \vec{x'}|}}{|\vec{x} - \vec{x'}|}.$$
(1.8)

Para mais detalhes de como obter a equação (1.8), consultar (SAKURAI, 1994).

Note que $G(\vec{x}, \vec{x'})$ nada mais é que a função de Green para a equação de Helmholtz,

$$(\nabla^2 + k^2)G(\vec{x}, \vec{x'}) = \delta^{(3)}(\vec{x} - \vec{x'}).$$
(1.9)

Isto é, para $\vec{x} \neq \vec{x'}$, $G(\vec{x}, \vec{x'})$ é solução da equação de autovalores $H_0G_0 = EG_0$, sendo G_0 a função de Green da partícula livre.

Podemos então reescrever (1.6) de uma maneira mais explícita, usando (1.8)

$$\langle \vec{x} | \psi \rangle = \langle \vec{x} | \phi \rangle - \frac{2m}{\hbar^2} \int d^3 x' \frac{e^{ik' |\vec{x} - \vec{x'}|}}{4\pi |\vec{x} - \vec{x'}|} \langle \vec{x'} | V | \psi \rangle.$$
(1.10)

Observe que a função de onda $\langle \vec{x} | \psi \rangle$ é escrita como a soma da função de onda da onde incidente $\langle \vec{x} | \phi \rangle$ e um termo que representa o efeito do espalhamento.

Esses sistemas são modelados através do formalismo de bilhares e são resolvidos através de técnicas de espalhamento. Bilhares são modelos matemáticos onde uma ou mais partículas se movem livremente em uma região delimitada, sofrendo colisões em sua fronteira e/ou com as outras partículas (STÖCKMANN, 1999), em outras palavras, eles representam o potencial espalhador. São de grande relevância por possuir uma gama de aplicabilidade no modelamento de sistemas físicos. Muitos sistemas dinâmicos que envolvem choques podem ser reduzidos ao estudo de bilhares. Bilhares são bastante úteis também na análise do caos determinístico e caos quântico, e, além disso, eles têm sido utilizados em teorias matemáticas, como geometria, probabilidade e teoria ergódica (SAA; TELES; 2013). Dentre essas técnicas, as mais importantes e mais usados são:

• Boundary Integral Method (BIM): É uma formulação da equação de Helmholtz, onde as funções de onda podem ser expressas em termos de integrais de linha e de sua derivada normal ao longo do domínio da barreira espalhadora, os autovalores de energia são obtidos através das raízes dos determinantes de Fredholm (LI; ROBNIK, 1995; KOSZTIN; SCHULTEN, 1997).

- Decomposição por Ondas Planas: utiliza uma superposição de ondas planas como abordagem para a solução da equação de Helmholtz (LI, 1998).
- Boundary Element Method: é um método númerico com abordagem semelhante ao BIM, onde o determinante de Fredholm é obtido a partir da discretização da equação integral envolvida (TASAKI, 1997).
- Scaling Method: método utilizado para curvas fechadas que calcula diretamente os autovalores e autofunções de bilhares bi-dimenionais resolvendo uma equação de autovalores generalizada em termos dos parâmetros relacionados à barreira (VER-GINI; SARACENO, 1998). É muito eficiente na busca de autoestados de energias mais elevadas do sistema.

1.2 Método de Contorno de Paredes

No presente trabalho usaremos como método de solução o Método de Contorno de Paredes (MCP) (LUZ et al., 1997), técnica de espalhamento quântico onde as barreiras podem ser abertas ou fechadas, conexas ou desconexas, com variados tipos de condições de contorno (ver Figura 1.3). Uma característica muito importante do MCP é que ele proporciona num único cálculo as soluções corretas para a região externa e interna do bilhar, além de ser relativamente simples e de fácil implementação numérica.

O objeto matemático principal do método é a chamada matriz T. Sua característica mais importante reside no fato de que ela carrega informações sobre a energia e geometria do problema. Dessa forma, a matriz T pode fornecer resultados acerca das variações do espectro de energia como função da forma do potencial espalhador. Tais características, aliadas a sua fácil implementação numérica, conferem simplicidade e eficácia ao MCP.

1.3 Objetivos e Organização da Dissertação

No presente trabalho estudaremos as prpriedades de trransmissão de ondas através de um acoplador direcional, composto por dois canais de entrada, uma guia de ligação e dois canais de saída, através da versão numérica do MCP. No segundo capítulo será mostrado o desenvolvimento analítico do Método de Contorno de Paredes, sua implementação numérica e será realizada ainda uma discussão sobre as características principais do

Figura 1.3: Exemplos de barreiras espalhadoras: a) curva fechada (bilhar), b) ressonador aberto, c) curva aberta e d) curva desconexa.



Fonte: Autor, 2015.

MCP e das propriedades da matriz T. Em seguida serão mostradas algumas aplicações do Método de Contorno de Paredes em problemas diversos. No terceiro capítulo será analisado o comportamento do acoplador proposto por meio da análise dos elementos da matriz T. Determinaremos o o espectro de transmissão para o caso de alimentação através de um único canal. Será estudado ainda a influência do tamanho da guia de ligação e da inclinação dos canais de entrada e saída do fenômeno de chaveamento de energia. Por fim será realizada uma conclusão geral deste trabalho, ressaltando seus pontos mais importantes.

O MÉTODO DE CONTORNO DE PAREDES E SUAS APLICAÇÕES

2.1 Desenvolvimento Analítico do Método

Em problemas de espalhamento, onde o espalhador é descrito por um potencial do tipo parede, supomos que a partícula (onda) comporta-se como uma partícula livre em todo o espaço e interage com o potencial apenas sob os pontos que pertencem à barreira espalhadora, onde a função de onda pode ou não anular-se. Dessa forma, para usarmos o formalismo da teoria de espalhamento temos que simular um potencial em que a função de onda satisfaça esse comportamento, bem como as condições de contorno desejadas. Para isso usaremos um potencial do tipo parede, "parede - δ ", dado pela equação a seguir:

$$V(\vec{r}) = \int_C ds \gamma(s) \delta(\vec{r} - \vec{r}(s)).$$
(2.1)

Onde a curva C (ver Figura 2.1) descreve a geometria da barreira espalhadora, o termo $\gamma(s)$ controla a permeabilidade e as condições de contorno da barreira e $\vec{r}(s)$ é o vetor posição que vai da origem do sistema de coordenadas até o ponto s pertencente à curva C.

Quando $\gamma \to \infty$, na equação (2.1), a função de onda da partícula anula-se sobre os pontos que pertencem ao espalhador, pois para esses pontos o potencial possui um valor infinito e para a função de onda obedecer a condição de continuidade, esta deve ser necessariamente nula, fornecendo o efeito de uma parede impenetrável. Temos ainda que para valores finitos de $\gamma(s)$ a barreira simula o comportamento de uma parede permeável. As características citadas acima para o potencial, são necessárias e suficientes para utilizarmos a abordagem de espalhamento para solucionar problemas de valor de fronteira. Figura 2.1: Regiões interna e externa de um bilhar fechado de forma C. As linhas pontilhadas estão associadas à dinâmica de uma partícula sendo espalhada em cada região.



Fonte: Autor, 2015.

Para a solução analítica do nosso problema consideraremos um sistema *n*-dimen sional e usaremos da equação de Schrödinger independente do tempo (soluções estacionárias),

$$H(\vec{r})\psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r}),\tag{2.2}$$

 $H(\vec{r})$ é o Hamiltoniano da partícula, que é dado por $H(\vec{r}) = H_o(\vec{r}) + V(\vec{r})$, onde $H_o(\vec{r}) = \frac{-\hbar^2}{2m} \nabla^2$ é o Hamiltoniano da partícula livre. Usando o fato de que $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ e fazendo $V(\vec{r}) = \frac{\hbar^2}{2m} U(\vec{r})$ na equação acima, depois de alguma manipulação matemática, obtemos:

$$(\nabla^2 + k^2)\psi(\vec{r}) = U(\vec{r})\psi(\vec{r}),$$
 (2.3)

que é a equação de espalhamento na forma diferencial para um potencial $U(\vec{r})$ qualquer. Para solucionarmos tal equação usaremos o método da função de Green, que consiste em transformar uma equação diferencial numa equação integral, para isso assumimos que para a equação (2.3) existe uma função $G_0(\vec{r})$ de modo que

$$(\nabla^2 + k^2)G_0(\vec{r};k) = \delta(\vec{r}).$$
 (2.4)

Qualquer função de onda $\psi(\vec{r})$ que satisfaça

$$\psi(\vec{r}) = \varphi(\vec{r}) + \int d\vec{r'} G_0(\vec{r}, \vec{r'}; k) U(\vec{r'}) \psi(\vec{r'}), \qquad (2.5)$$

com $\varphi(\vec{r})$ sendo a função de onda da onda incidente, $(\nabla^2 + k^2)\varphi(\vec{r}) = 0$ e G_0 a função de Green da partícula livre, satisfaz também a equação (2.4).

Para simular o comportamento de uma parede rígida no bilhar, usaremos o potencial tipo-parede, dado pela equação (2.1), o que garante que o bilhar obedecerá a condição

de contorno de Dirichlet, tipo de condição de contorno que quando aplicada sobre uma equação diferencial ordinária ou parcial, especifica os valores que uma solução necessita satisfazer sobre o conforno do domínio. Logo:

$$U(\vec{r}) = \int_C ds \gamma(s) \delta(\vec{r} - \vec{r}(s)).$$
(2.6)

A delta garante que o potencial será $U(\vec{r}) = 0$ em todos os pontos que não pertencerem à barreira, garantindo assim, a ação de um potencial do tipo parede.

Introduzindo o potencial (2.6) na equação (2.5), obtemos:

$$\psi(\vec{r}) = \varphi(\vec{r}) + \int d\vec{r}' G_0(\vec{r}, \vec{r}'; k) \left[\int_C ds \gamma(s) \delta(\vec{r}' - \vec{r}(s)) \right] \psi(\vec{r}').$$
(2.7)

Resolvendo a integral de volume em termos de \vec{r}' , obtemos

$$\psi(\vec{r}) = \varphi(\vec{r}) + \int ds' \gamma(s') G_0(\vec{r}, \vec{r}(s'); k) \psi(\vec{r}(s')).$$
(2.8)

Esta equação pode ser interpretada como a equação integral de espalhamento para a barreira permeável de forma C, caracterizada por $\gamma(s)$, onde $\varphi(\vec{r})$ corresponde à onda incidente. Qualquer onda plana de número de onda k que incida perpendicularmente a C no ponto s tem probabilidade $\Im = 4k^2/(4k^2 + \gamma(s)^2)$ de ser transmitida através de C, e probabilidade $\Re = \gamma(s)^2/(4k^2 + \gamma(s)^2)$ de ser refletida (LUZ et al., 1997). No limite $\gamma \to \infty$, verifica-se que a probabilidade de transmissão \Im tende a zero, o que leva $\psi(\vec{r})$ a anular-se sobre a barreira, satisfazendo assim (2.6), condição de contorno de Dirichlet.

Analisando a equação (2.8) sobre um determinado ponto s_b percencente à curva C e considerando, por simplicidade, $\gamma(s)$ constante, a fim de facilitar a compreensão do método, temos que $\varphi(\vec{r})$ pode ser escrito como:

$$\varphi(\vec{r}(s_b)) = \int_C ds_a T_{\gamma}^{-1}(s_b, s_a) \psi(\vec{r}(s_a)), \qquad (2.9)$$

onde, por definição, $T_{\gamma}^{-1}(s_b, s_a) \equiv \delta(s_b - s_a) - \gamma G_0(\vec{r}(s_b), \vec{r}(s_a); k)$ para satisfazer a equação (2.8). A função $T_{\gamma}(s_b, s_a)$ é associada à probabilidade da onda incidir no ponto s_b e ser espalhada no ponto s_a . Dessa forma reescrevendo a equação (2.9), usando a definição de T_{γ}^{-1} e as propriedades da delta, obtemos:

$$\psi(\vec{r}(s_b)) = \varphi(\vec{r}(s_b)) + \int_C ds_a \gamma G_0(\vec{r}(s_b), \vec{r}(s_a); k) \psi(\vec{r}(s_a)), \qquad (2.10)$$

Pela definição de T_{γ}^{-1} , notamos que ela é simétrica perante a troca $s_b \leftrightarrow s_a$, visto que $G_0(\vec{r}(s_b), \vec{r}(s_a)) = G_0(\vec{r}(s_a), \vec{r}(s_b))$ e $\delta(s_b - s_a) = \delta(s_a - s_b)$, para qualquer condição de contorno (BUTKOV, 1988).

Podemos determinar T_{γ} pela exigência de que ela deve possuir inversa, o que pode ser expresso como:

$$\delta(s_a, s_b) = \int_C ds_c T_{\gamma}(s_b, s_c) T_{\gamma}^{-1}(s_c, s_a), \qquad (2.11)$$

como a função T_{γ}^{-1} é simétrica, por conseguinte, T_{γ} também é. Logo, a seguinte relação também é válida para a obtenção de T_{γ} :

$$\delta(s_a, s_b) = \int_C ds_c T_{\gamma}^{-1}(s_b, s_c) T_{\gamma}(s_c, s_a).$$
(2.12)

A partir das relações acima, podemos escrever a função de onda $\psi(\vec{r})$ em termos de $T_{\gamma}(s_b, s_a)$ em vez de $T_{\gamma}^{-1}(s_b, s_a)$. Para tanto basta aplicar $T_{\gamma}(s_c, s_b)$ na equação (2.9)

$$T_{\gamma}(s_c, s_b)\varphi(\vec{r}(s_b)) = \int_C ds_a T_{\gamma}(s_c, s_b) T_{\gamma}^{-1}(s_b, s_a)\psi(\vec{r}(s_a)).$$
(2.13)

Integrando ambos os lados da equação acima em ds_b sobre a curva C e utilizando a relação (2.11)

$$\int_{C} ds_{b} T_{\gamma}(s_{c}, s_{b}) \varphi(\vec{r}(s_{b})) = \int_{C} \int_{C} ds_{b} ds_{a} T_{\gamma}(s_{c}, s_{b}) T_{\gamma}^{-1}(s_{b}, s_{a}) \psi(\vec{r}(s_{a}))$$

$$= \int_{C} ds_{a} \delta(s_{c} - s_{a}) \psi(\vec{r}(s_{a})), \qquad (2.14)$$

e integrando o lado direito da igualdade, pela ação da δ , teremos

$$\psi(\vec{r}(s_c)) = \int_C ds_b T_\gamma(s_c, s_b) \varphi(\vec{r}(s_b)).$$
(2.15)

Usando esta equação no integrando de (2.10), temos:

$$\psi(\vec{r}) = \varphi(\vec{r}) + \int_C \int_C ds_b ds_a \gamma G_0(\vec{r}, \vec{r}(s_b); k) T_\gamma(s_b, s_a) \varphi(\vec{r}(s_a)).$$
(2.16)

Esta equação representa um resultado muito importante, visto que ela fornece a solução da função de onda $\psi(\vec{r})$ de uma partícula interagindo com uma barreira de forma C e permeabilidade γ **para todo o espaço**. Esta é uma das grandes vantagens fornecidas pelo Método de Contorno de Paredes, uma vez que através dele é possível obter em um único cálculo, mesmo para curvas fechadas, a solução correta de espalhamento para a parte externa ao bilhar e os estados do problema interno (ZANETTI et al., 2008), ao contrário dos demais métodos onde as duas soluções precisam ser obtidas separadamente para cada região estudada. Outra vantagem oferecida pelo MCP é que a função de onda $\psi(\vec{r})$ depende apenas da função de Green da partícula livre (G_0), a função de onda da onda incidente (φ) e da permeabilidade do espalhador (γ), que são todos parâmetros conhecidos, o que torna a equação acima de fácil solução, outro aspecto importante a ser ressaltado consiste no fato de que as integrais da equação (2.16) percorrem apenas a fronteira C e não todo o espaço, como no caso da equação (1.10).

Para uma completa solução de $\psi(\vec{r})$, resta-nos apenas obter uma maneira de resolver

 T_{γ} . Para isso, substituiremos a definição de T_{γ}^{-1} na identidade (2.11), com isso obtemos

$$\delta(s_{b} - s_{a}) = \int_{C} T_{\gamma}(s_{c}, s_{a}) [\delta(s_{c} - s_{a}) - \gamma G_{0}(\vec{r}(s_{c}), \vec{r}(s_{a}); k)] ds_{c}$$

$$= \int_{C} T_{\gamma}(s_{c}, s_{a}) [\delta(s_{c} - s_{a}) - \int_{C} T_{\gamma}(s_{c}, s_{a}) \gamma G_{0}(\vec{r}(s_{c}), \vec{r}(s_{a}); k)] ds_{c}$$

$$= T_{\gamma}(s_{b}, s_{a}) - \int_{C} T_{\gamma}(s_{c}, s_{a}) \gamma G_{0}(\vec{r}(s_{c}), \vec{r}(s_{a}); k) ds_{c}$$

$$T_{\gamma}(s_{b}, s_{a}) = \delta(s_{b} - s_{a}) + \int_{C} T_{\gamma}(s_{c}, s_{a}) \gamma G_{0}(\vec{r}(s_{c}), \vec{r}(s_{a}); k) ds_{c}.$$
(2.17)

Para resolvermos a equação integral acima, conhecida como equação do tipo Fredholm, usaremos o método de Séries de Neumann (ARFKEN, 1970). Para tanto, consideraremos o caso em que $\delta(s_b - s_a) \neq 0$ e usaremos como primeira aproximação aproximação:

$$T_{\gamma}(s_b, s_a) \approx T_{0\gamma}(s_0, s_c) = \delta(s_0 - s_c).$$
 (2.18)

Para melhorar essa primeira aproximação, recolocamos $T_{0\gamma}(s_0, s_c)$ na nossa equação integral e obtemos:

$$T_{1\gamma}(s_b, s_a) = \delta(s_b - s_a) + \gamma \int_C G_0(\vec{r}(s_c), \vec{r}(s_a)) \delta(s_0 - s_c) ds_c$$

= $\delta(s_b - s_a) + \gamma G_0(\vec{r}(s_a), \vec{r}(s_0)).$ (2.19)

Repetindo o processo de substituir a nova função $T_{n\gamma}(s_b, s_{,a})$ de volta na equação (2.17), desenvolvemos a sequência para n = 2

$$T_{2\gamma}(s_b, s_a) = \delta(s_b - s_a) + \gamma \int_C G_0(\vec{r}(s_a), \vec{r}(s_1); k) ds_c + \gamma^2 \int_C G_0(\vec{r}(s_a), \vec{r}(s_1); k) \\ \times G_0(\vec{r}(s_1), \vec{r}(s_2); k) ds_1 ds_2.$$
(2.20)

Logo, para um n qualquer:

$$T_{n\gamma}(s_b, s_a) = \sum_{i=0}^{n} \gamma^i u_i(s_b, s_a),$$
(2.21)

onde:

$$u_{0}(s_{b}, s_{a}) = \delta(s_{b} - s_{a});$$

$$u_{1}(s_{b}, s_{a}) = G_{0}(\vec{r}(s_{a}), \vec{r}(s_{1}); k);$$

$$u_{2}(s_{b}, s_{a}) = \int_{C} G_{0}(\vec{r}(s_{a}), \vec{r}(s_{1}); k) G_{0}(\vec{r}(s_{1}), \vec{r}(s_{2}); k) ds_{1};$$

$$\vdots$$

$$u_{n}(s_{b}, s_{a}) = \int_{C} G_{0}(\vec{r}(s_{a}), \vec{r}(s_{1}); k) G_{0}(\vec{r}(s_{1}), \vec{r}(s_{2}); k) ds_{1} \dots$$

$$\times \dots G_{0}(\vec{r}(s_{n-1}), \vec{r}(s_{b}); k) ds_{1} ds_{2} \dots ds_{n-1}.$$
(2.22)

Instituto de Física - UFAL

Como o núcleo da função $T_{\gamma}(s_b, s_a)$ é separável, podemos usar a técnica de substituir nossa equação integral por equações algébricas simultâneas (ARFKEN, 1970), dessa forma podemos escrever $T_{\gamma}(s_b, s_a)$ como:

$$T_{\gamma}(s_b, s_a) = \delta(s_b - s_a) + \sum_{n=1}^{\infty} T_{n\gamma}(s_b, s_a), \qquad (2.23)$$

onde, da equação (2.21), temos que

$$T_{n\gamma}(s_b, s_a) = \gamma^i \int_C G_0(\vec{r}(s_a), \vec{r}(s_1); k) G_0(\vec{r}(s_1), \vec{r}(s_2); k) \dots \\ \times \dots G_0(\vec{r}(s_{n-1}), \vec{r}(s_b); k) ds_1 ds_2 \dots ds_{n-1}.$$
(2.24)

Até agora discutimos apenas o caso em que γ é constante e finito. No entanto, podemos encontrar também a função de onda $\psi(\vec{r})$ para o caso em que $\gamma \to \infty$, este é o caso que nos interessa, pois no nosso sistema só utilizamos paredes impermeáveis. Para isso usaremos mais uma vez a identidade (2.11) e a definição de T_{γ}^{-1}

$$\delta(s_b - s_a) = \int_C T_{\gamma}(s_b, s_c) [\delta(s_c - s_a) - \gamma G_0(\vec{r}(s_c), \vec{r}(s_a); k] ds_c.$$
(2.25)

Resolvendo o primeiro termo, temos

$$\delta(s_b - s_a) = T_{\gamma}(s_b, s_a) - \int_C T_{\gamma}(s_b, s_c) \gamma G_0(\vec{r}(s_c), \vec{r}(s_a); k) ds_c.$$
(2.26)

Multiplicando e dividindo o primeiro termo do lado direito da equação por $-\gamma$, obtemos

$$\delta(s_b - s_a) = -\frac{1}{\gamma} \left[-\gamma T_{\gamma}(s_b, s_a) \right] + \int_C ds_c \left[-\gamma T_{\gamma}(s_b, s_c) \right] G_0(\vec{r}(s_c), \vec{r}(s_a); k).$$
(2.27)

Tomando o limite que $\gamma \rightarrow \infty$ na equação acima chegamos a

$$\delta(s_b - s_a) = \lim_{\gamma \to \infty} \left\{ -\frac{1}{\gamma} [-\gamma T_\gamma(s_b, s_a)] \right\} + \int_C ds_c \lim_{\gamma \to \infty} [-\gamma T_\gamma(s_b, s_c)] G_0(\vec{r}(s_c), \vec{r}(s_a); k).$$
(2.28)

Notemos que, exceto para o caso de $s_b = s_a$, no limite $\gamma \to \infty$ a quantidade $\gamma T_{\gamma}(s_b, s_a)(s_b \neq s_a)$ não pode divergir pois, multiplicando a equação (2.15) por γ temos

$$\gamma\psi(\vec{r}(s_b)) = \int_C ds_a \left[\gamma T_\gamma(s_b, s_c)\right] \varphi(\vec{r}(s_a); k).$$
(2.29)

No limite de $\gamma \to \infty$ o primeiro termo da equação (2.28) deve ser finito para que a equação (2.8) possua solução. Logo, o termo $\gamma T_{\gamma}(s_b, s_c)$ deve, necessariamente, também ser finito em tal limite.

Então, definindo $T(s_b, s_a) \equiv -\lim_{\gamma \to \infty} \gamma T_{\gamma}(s_b, s_a)$, teremos

$$\delta(s_b - s_a) = \int_C ds_c T(s_b, s_c) G_0(\vec{r}(s_c), \vec{r}(s_a); k).$$
(2.30)

O cálculo é semelhante para (2.12). Logo,

$$\delta(s_b - s_a) = \int_C ds_c T(s_b, s_c) G_0(\vec{r}(s_c), \vec{r}(s_a); k) = \int_C ds_c G_0(\vec{r}(s_b), \vec{r}(s_c); k) T(s_c, s_a),$$
(2.31)

pois G_0 é simétrica.

Usando a equação (2.16) para encontrar a forma de $\psi(\vec{r})$ quando $\gamma \to \infty$ temos

$$\psi(\vec{r}) = \varphi(\vec{r}) + \lim_{\gamma \to \infty} \int_C \int_C ds_b ds_a \gamma T_\gamma(s_b, s_a) G_0(\vec{r}, \vec{r}(s_b); k) \varphi(\vec{r}(s_a))$$

$$= \varphi(\vec{r}) + \int_C \int_C ds_b ds_a \lim_{\gamma \to \infty} \left[\gamma T_\gamma(s_b, s_a)\right] G_0(\vec{r}, \vec{r}(s_b); k) \varphi(\vec{r}(s_a)), \quad (2.32)$$

visto que $G_0(\vec{r}, \vec{r}(s_b); k)$ e $\varphi(\vec{r}(s_a))$ não dependem de γ . Usando a definição de $T(s_b, s_a)$, podemos escrever a equação acima como

$$\psi(\vec{r}) = \varphi(\vec{r}) - \varphi^T(\vec{r}). \tag{2.33}$$

onde

$$\varphi^{T}(\vec{r}) = \int_{C} \int_{C} ds_{b} ds_{a} G_{0}(\vec{r}, \vec{r}(s_{b}); k) T(s_{b}, s_{a}) \varphi(\vec{r}(s_{a})).$$
(2.34)

Podemos verificar que a equação (2.33) satisfaz a equação de fronteira de Dirichlet sob o a curva C, como proposto no início deste capítulo. Para isso, faremos $\vec{r} = \vec{r}(s)$ em (2.33)

$$\psi(\vec{r}(s)) = \varphi(\vec{r}(s)) - \int_C \int_C ds_b ds_a T(s_b, s_a) G_0(\vec{r}(s), \vec{r}(s_b); k) \varphi(\vec{r}(s_a)), \qquad (2.35)$$

e, usando (2.31), obtemos

$$\psi(\vec{r}(s)) = \varphi(\vec{r}(s)) - \int_C ds_a \delta(s - s_a) \varphi(\vec{r}(s_a))$$

= $\varphi(\vec{r}(s)) - \varphi(\vec{r}(s))$
= 0. (2.36)

A equação (2.35) fornece a função de onda de uma partícula interagindo com uma barreira impermeável de forma C em todos os pontos do espaço. No caso de paredes fechadas obtemos a solução externa de espalhamento e autoestados.

Podemos interpretar a equação (2.34) da seguinte maneira: uma fonte pontual inicialmente em s_b sofre propagação livre, mediada por G_0 , até o ponto \vec{r} . Por sua vez, cada fonte pontual em s_b é originária de uma onda incidente φ , que foi espalhada por toda a fronteira. Para um certo s_a , a matriz T propaga $\varphi(\vec{r}(s_a))$ ao ponto s_b . Assim, a soma sobre todos os $s'_a s$ leva à construção da fonte pontual s_b . Na figura 2.2, é mostrado o esquema de um dos passos deste processo para $s_a \in s_b$ fixos. Figura 2.2: Representação esquemática de um dos passos do processo de espalhamento $(s_a \in s_b \text{ fixos})$ na região a) interna e b) externa ao bilhar.



Fonte: Zanetti, 2008.

2.2 Características da Matriz T

Diante dos resultados obtidos nas seções anteriores, podemos afirmar que o ponto crucial do Método de Contorno de Paredes é a obtenção da matriz T pois, se soubermos qual é a sua forma, as equações (2.16) e (2.34) tornam-se relativamente fáceis de serem resolvidas. Como discutido em (ZANETTI; LUZ, 2012), suas principais características consistem no fato de que ela carrega informações sobre a energia e geometria do problema, podendo assim nos fornecer de maneira simples e direta resultados acerca das variações do espectro de energia como função da forma do sistema. Ela também possui um mecanismo de "filtro", agindo no sentido de extrair qualquer parte da onda incidente que anule-se na fronteira C, obtendo assim os estados ressonantes e autoestados do problema (ver seção 2.4.1).

Para melhor compreensão acerca da importância da matriz T, descreveremos a seguir as propriedades dos seus elementos, $T(s_b, s_a)$:

- $|T(s_b, s_a)|$ está associado à probabilidade da onda incidir em um elemento s_a e ser espalhada em s_b ;
- Se a energia da onda incidente não corresponde a um estado ressonante do sistema (um autoestado no caso fechado ou um estado ligado ao contínuo (NEUMANN; WIGNER, 1929; CHABANOV et al., 2000) no caso aberto), $\psi(\vec{r}) = 0$ na região interna e $|T(s_b, s_a)|$ só terá valores apreciáveis para $s_b \approx s_a$;
- Se a energia da onda incidente for ressonante, $|T(s_b, s_a)|$ possuirá uma rica estrutura, com elementos da matriz T fora da diagonal principal apresentando um grande aumento em relação ao caso não-ressontante;

Supondo duas regiões distintas de C (A e B), delimitadas pelos segmentos C_A e C_B, então, na ressonância |T(s" ∈ C_B, s' ∈ C_A)| é apreciável apenas se o estado interno associado à energia da onda incidente estende-se até a região espacial A e B (ZANETTI; LUZ, 2012).

Assim, guiados pelas características de T citadas acima, podemos identificar e classificar os estados de um dado sistema. Tal análise pode ser feita através da variação da energia da onda incidente e de parâmetros associados à geometria do sistema em estudo (como por exemplo: o tamanho de uma guia de onda, o comprimento de um lado cavidade, etc.). Isso provocará uma variação no módulo dos elementos da matriz T ($|T(s_b, s_a)|$), o que nos permitirá identificar os diferentes padrões e tendências dos estados correspondentes, bem como as ressonâncias do sistema.

2.3 Implementação Numérica do Método

Embora o Método de Contorno de Paredes seja relativamente simples, como mostrado na seção anterior, são poucos os casos que apresentam solução analítica, pela dificuldade em solucionar as equações (2.16) e (2.35), que cresce com a complexidade da geometria. Para os casos de difícil solução analítica, devemos usar a versão númerica do MCP. Para isso é necessário discretizar a barreira espalhadora.



Fonte: Zanetti, 2008.

Dessa forma, na equação (2.8) dividimos a curva C em N partes iguais, $\{C_j\}_j = 1, 2, ..., N$ (ver figura 2.3), onde agora a integral de volume é feita em cada elemento j

$$\psi(\vec{r}) = \varphi(\vec{r}) + \sum_{j=1}^{N} \int_{C_j} ds \gamma G_0(\vec{r}, \vec{r}(s)) \psi(\vec{r}(s); k).$$
(2.37)

Instituto de Física - UFAL

Por simplicidade faremos γ constante ao longo da barreira C. Observando $\psi(\vec{r})$ sobre a barreira, como feito na equação (2.10), temos

$$\psi(\vec{r_{i}}) = \varphi(\vec{r_{i}}) + \sum_{j=1}^{N} \int_{C_{j}} ds \gamma G_{0}(\vec{r_{i}}, \vec{r_{j}}) \psi(\vec{r_{j}}; k)$$

$$= \varphi(\vec{r_{i}}) + \sum_{j=1}^{N} \gamma M_{ij} \left(\psi(\vec{r_{j}}; k) \right), \qquad (2.38)$$

onde

$$M_{ij} = \int_{C_j} ds G_0(\vec{r_i}, \vec{r_j}).$$
(2.39)

Se $\Psi = (\psi(\vec{r_1}), ..., \psi(\vec{r_N}))$ e $\Phi = (\varphi(\vec{r_1}), ..., \varphi(\vec{r_N}))$, podemos então escrever a equação (2.38) na forma matricial, pois Ψ e Φ podem ser representados por uma matriz linha. Então:

$$\Psi = \Phi + \gamma \mathbb{M}\Psi. \tag{2.40}$$

Isolando Ψ na equação anterior temos

$$\Psi = \Phi \left[\mathbb{I} - \gamma \mathbb{M} \right]^{-1}, \qquad (2.41)$$

onde \mathbbm{I} é a matriz identidade. Multiplicando ambos os lados por γ obtemos

$$\gamma \Psi = \mathbb{T}\Phi, \tag{2.42}$$

na qual $\mathbb{T} = \gamma [\mathbb{I} - \gamma \mathbb{M}]^{-1}$, que é a forma discretizada da matriz T_{γ} .

Tomando o *i*-ésimo elemento da matriz coluna Ψ na equação (2.43), temos

$$\gamma \Psi_i = (\mathbb{T}\Phi)_i = \gamma \sum_{j=1}^N \left[\mathbb{I} - \gamma \mathbb{M}^{-1} \right]_{ij} \Phi_j, \qquad (2.43)$$

onde $\Psi_i = \psi(\vec{r_i}) \in \Phi_j = \varphi(\vec{r_j})$. Dessa forma, $\gamma \psi(\vec{r}(s_j)) = \gamma \psi(\vec{r_i}) = \gamma \Psi_j$. Substituindo $\gamma \Psi_j = (\mathbb{T}\Phi)_j$ na equação (2.38), obtemos

$$\psi(\vec{r}) = \varphi(\vec{r}) + \sum_{j=1}^{N} \int_{C_j} ds G_0(\vec{r}, \vec{r_j}) (\mathbb{T}\Phi)_j.$$
(2.44)

Aproximando o resultado da integral na equação acima por seu valor no ponto médio do segmento C_j e definindo Δ_j como seu volume, obtemos a forma discretizada da equação (2.16)

$$\psi(\vec{r}) \approx \varphi(\vec{r}) + \sum_{j=1}^{N} G_0(\vec{r}, \vec{r_j}) \Delta_j(\mathbb{T}\Phi)_j.$$
(2.45)

Esta é a forma aproximada da função de onda $\psi(\vec{r})$ em todo o espaço, para γ constante e finito ao longo da barreira. Para resolver a matriz M (equação 2.39), usamos o teorema do valor médio, assim como fizemos para ψ . Dessa forma obtemos que

$$M_{ij} \approx G_0(\vec{r_i}, \vec{r_j}) \Delta_j. \tag{2.46}$$

A aproximação acima trará problemas, para o caso do espalhamento em duas dimensões quando i = j, pois a função de Green da partícula livre é proporcional a função de Neumann N(kr) que diverge quando $r = 0(r = |r_i - r_j|)$. Então para os elementos da diagonal da M devemos calcular explicitamente a integral (2.39).

Considerando agora o caso em que $\gamma \to \infty$ (a barreira é impenetrável), descrito pela equação (2.34). Como $\mathbb{T} = \gamma [\mathbb{I} - \gamma \mathbb{M}]^{-1}$ quando $\gamma \to \infty$, temos que $\mathbb{T} \to -\mathbb{M}^{-1}$. Dessa forma podemos escrever a equação (2.45) como

$$\psi(\vec{r}) \approx \varphi(\vec{r}) - \sum_{j=1}^{N} G_0(\vec{r}, \vec{r_j}) \Delta_j (\mathbb{M}^{-1} \Phi)_j.$$
(2.47)

A equação acima representa a função de onda de uma partícula espalhada por uma barreira impermeável de forma C.

No limite em que $N \to \infty$, (2.37) aproxima-se da solução exata, pois a distretização de C torna-se cada vez mais próxima da forma exata. No entanto, a medida que Naumenta, cresce também o tamanho das matrizes envolvidas no cálculo numérico. Então devemos escolher um valor para N o qual leve a um tempo computacional razoável e seja suficientemente grande para a validação dos resultados. A maneira mais simples de determinar o valor de N é observando se o método traz bons resultados para (ZANETTI et al, 2007)

$$\frac{ds}{\lambda} < 10^{-1} \tag{2.48}$$

onde ds = P/N (perímetro (P) de C dividido por N) e $\lambda = 2\pi/k$ é o comprimento de onda da onda incidente. Portanto, temos que λ deve ser maior que o tamanho dos elementos da discretização, para que a onda considere o espalhador como uma parede.

2.4 Aplicações do Método de Contorno de Paredes

Nesta seção mostraremos algumas aplicações no Método de Contorno de Paredes em diferentes problemas físicos. Serão apresentados alguns resultados para bilhares fechados (bilhar quadrado e bilhar quarto de estádio), para bilhares (aberto e fechado) acoplados por meio de guias de ondas e para cristais fotônicos (do tipo-ar e interferômetro). Tais resultados foram escolhidos por possuírem características em comum com o nosso trabalho, como por exemplo: a determinação de ressonâncias, transmissão em guias e estruturas mais complexas.

2.4.1 Autoestados e Solução de Espalhamento para Bilhares

Aqui serão apresentados e discutidos alguns resultados numéricos de (ZANETII et al; 2008) para dois bilhares conhecidos da literatura: o bilhar quadrado (integrável) e o quarto de estádio (caótico), mostrados na Figura 2.4. Nosso objetivo é mostrar explicitamente o funcionamento do MCP e as características da matriz T.

Figura 2.4: (a) Bilhar quadrado, (b) um quarto (totalmente dessimetrizado) do bilhar de estádio.



Fonte: Autor, 2015.

Bilhar Quadrado

Será analisado, inicialmente, o bilhar quadrado (de lado unitário). Na Figura 2.5 é mostrado o gráfico da matriz T(i, j) de tamanho 1000 × 1000 para dois diferentes valores do número de onda k. O primeiro, 90.2351, está a meia distância entre dois números de onda ressonantes $k_{14,25} = \pi\sqrt{14^2 + 25^2} = 90.0164$ e $k_{27,10} = \pi\sqrt{27^2 + 10^2} = 90.4539$. O segundo, 90.4720, corresponde a uma ressonância de T e difere de $k_{27,10}$ apenas por 0.02%.

Na Figura 2.5a, são exemplificadas as estruturas gerais globais da matriz T através dos gráficos de densidade para os dois valores k. Tais gráficos, no entanto, não dão uma ideia correta das intensidades relativas dos elementos da matriz. Assim, é exibido na Figura 2.5b e cT(i, j) em função de j para i = 43 fixo. Note que neste caso a origem (ou seja, um elemento da diagonal principal $s_i = s_j$) corresponde a i = j = 43. Aqui, pode-se observar claramente as características da matriz T citadas na seção 2.2. Para um k não ressonante, T é altamente concentrada numa faixa em torno da diagonal principal. Pra kressonante, os outros elementos também possuem valores apreciáveis. Figura 2.5: Matriz T (1000 × 1000) discretizada para um bilhar quadrado. (a) Gráfico de |T(i, j)| para k = 90.2351 (esquerda) e k = 90.4720 (direita). Para i = 43 fixo, |T(i, j)| é mostrado em função de j para: (b) k = 90.2351 e (c) k = 90.4720.



Fonte: Zanetti et al, 2009.

Instituto de Física - UFAL
Assumindo os valores de k acima, a Figura 2.6 mostra $|\psi(\vec{r})|^2$ para a onda incidente $\varphi(\vec{r};k) = exp[i(k_xx + k_yy)]$, com $k_x = k\cos[\theta]$, $k_y = k\sin[\theta]$ e $\arctan[\theta] = 10/27$. O gráfico de densidade na Figura 2.6a mostra, para os dois valores de k, a solução externa correta de espalhamento para o bilhar. No entanto, apenas no segundo caso o estado é observado, mostrado na Figura 2.6b (direita). Na Fig. 2.6 (b) (direita) também é comparado $|\psi(x,y)|^2$ com o autoestado exato $|\Phi_{27,10}(x,y)|^2 = |2\sin[27\pi x] \sin[10\pi y]|^2$ plotando ambas como funções x para y = 0.05. Nota-se que o valor particular escolhido para o ângulo θ de incidência resulta no autoestado $\Phi_{27,10}$ (mas não em $\Phi_{10,27}$).

Figura 2.6: (a) Gráfico de densidade de $|\psi(x,y)|^2$ para k = 90.2351 (esquerda) e k = 90.4720 (direita). No caso ressonante, a figura da esquerda mostra o gráfico 3D de $|\psi(\vec{r})|^2$ dentro do bilhar. O gráfico da direita mostra $|\psi(x,y)|^2$ (curva contínua) e o autoestado exato $|\Phi_{27,10}(x,y)|^2$ (curva pontilhada) em função de x para y fixo.





A ressonância é baseada em outra característica de T, o mecanismo de filtro, que tem uma relação direta com as características da onda incidente. Na Figura 2.7a é mostrado

Instituto de Física - UFAL

 $|\psi(x,y)|^2$ para $|\varphi(\vec{r};k=k_{27,10})=2\text{sen}[27\pi x]\cos[10\pi y]$. Na região externa tem-se o estado de espalhamento adequado, mas na região interna $\psi=0$. Isso deve-se ao fato de que φ escolhido é ortogonal a qualquer autoestado do bilhar quadrado. Este é um exemplo da atuação do mecanismo de filtro da matriz T.

Figura 2.7: (a) $|\psi(\vec{r})|^2$ para o caso da onda incidente $|\varphi_{\vec{r}} = 2 \operatorname{sen}[27\pi x] \cos[10\pi y]$. Um gráfico de densidade é mostrado à direita e dois "cortes" de $|\psi(x,y)|^2$ ao longo de x são exibidos do lado direito.



Fonte: Zanetti et al, 2008.

Bilhar Quarto de Estádio

Mostraremos agora resultados para o bilhar de estádio, que vem a ser um dos primeiros casos de bilhar quântico caótico (Zanetti et al, 2012). Com a finalidade de evitar correlações entre estados com as mesmas simetrias, trabalharemos com o estádio dessimetrizado (Figura 2.4b). Para o bilhar de estádio dessimetrizado (com laterais de tamanho unitário), é mostrado na Figura 2.8 os |T(i, j)|'s para três valores de k: 59.68, 59.90 e 59.55. Pela análise dos gráficos, pode-se afirmar que os dois primeiros correspondem a ressonâncias. Isso é confirmado na Figura 2.9, a qual mostra $|\psi(\vec{r})|^2$ associado a cada k para uma onda plana incidente $\varphi(\vec{r}) = exp[-ikx]$. Figura 2.8: Matriz T (1000 × 1000) discretizada para o bilhar quarto de estádio. (a) Gráfico de |T(i, j)| para k = 59.68, k = 59.90 em (b) e k = 59.55 em (c). A partir das características da matriz T, podemos inferir que apenas o último exemplo não corresponde a um autovalor.



Fonte: Zanetti et al, 2008.

Instituto de Física - UFAL

Figura 2.9: Para o bilhar de estádio dessimetrizado, gráficos de densidade (esquerda) e cortes 1D (direita) para um ângulo $\theta = \pi$ de uma onda plana incidente com (a) k = 59.68, (b) k = 59.90, e (c) k = 59.55. As soluções internas foram normalizadas para uma melhor vizualização.



Fonte: Zanetti et al, 2008. Instituto de Física - UFAL

2.4.2 Bilhares Acoplados por Guias de Onda

Em (Zanetti et al, 2012) é apresentado o problema de um bilhar composto por duas cavidades retangulares acopladas através de guias de ondas. O estudo de sistemas físicos deste tipo é de extrema importância, visto que, o grande avanço sofrido pela engenharia quântica provocou um interesse ainda maior pelos fenômenos envolvendo estruturas compostas.

Figura 2.10: Estrututa 2D com paredes rígidas. Para h = 0 (caso fechado) as guias de ondas laterais são eliminadas.



Fonte: Zanetti et al, 2012.

O objetivo principal do trabalho aqui mostrado é analisar a distribuição da função de onda na geometria quando esta é modificada.

A figura 2.10 mostra o bilhar proposto, quando h = 0 temos o caso fechado e consequentemente as guias laterais são eliminadas.

Foi analisado inicialmente o caso para a estrutura fechada com cavidades quadradas iguais L = L' = 1 e com o comprimento da guia de onda que une as cavidades sendo w = L/2 = 1/2. Em todos os casos que serão mostrados a seguir, foi usado uma onda plana como onda incidente.

Em ambos os painéis da Figura 2.11 é mostrado $|T(i, j)|^2$ (*i* e *j* fixos, *i* em Q_1) em função do número de onda da onda incidente $k \in h$. Os picos indicam a existência de autoestos associados aos respectivos valores de $k \in h$. Sequência de picos formam curvas correpondendo a famílias de estados. No painel superior (inferior) *j* está em Q_1 (Q_2). Logo, picos no painel inferior representam estados que extendem-se ao longo de toda a estrutura. Considerando o painel superior, para h = 0 os picos correspondem exatamente aos autoestados de um quadrado de dimensão LxL, como esperado. A medida que *h* aumenta, os autoestados se mantêm praticamente constantes em sua autoenergia até *h* valer aproximadamente $\lambda/4 = \pi/2k$. A partir deste valor, elas começam a "migrar" para valores menores de *k*.

Figura 2.11: Gráfico de densidade de $|T(i, j)|^2$ em função de k e h para a estrutura fechada descrita no texto com (a)i = j = 150 (localizado em Q_1) e (b) i = 150 (localizado em Q_1) e j = 450 (localizado em Q_2).



Fonte: Zanetti et al, 2012.

Assim, $\lambda/4$ é o limite para a manutenção das ressonâncias originais do quadrado. O deslocamento dos autoestados para valores menores de k deve-se ao aumento da área do bilhar, provocado pelo crescimento da largura da guia de onda (AKIS et al., 2002).

Caminhando no sentido positivo do eixo k, nota-se que λ decresce e consequentemente o limite para o qual a solução do bilhar isolado se mantém também diminui. Tal região é representada pela linha tracejada inferior na figura. Analisando agora a variação dos elementos na matriz T no eixo de h (vertical), percebe-se que quando a largura se aproxima do valor $\lambda/2$ (linha tracejada superior) os autoestados apresentam dois comportamentos distintos: alguns bifurcam-se, como o primeiro autoestado; e outros diminuem até sumirem. Há também a criação de novas famílias de autoestados nessa região.

Para uma análise mais detalhada das curvas de autoestados (famílias) da Figura 2.11, é mostrada na Figura 2.12a a região do painel superior da Figura 2.11 onde $10.2 \leq k \leq 11.4$. Na Figura 2.12b-2.12i é exibido os estados para os valores de $k \in h$ pertencentes a essa região, indicados. Para a Figura 2.12a, a família b - c - e - f começa em h = 0 e corresponde ao estado 2 : 3 de um quadrado com dimensões 1×1 , mostrado na Figura 2.12b, e termina em h = 1 como o estado 8:1 de um retângulo com dimensões 2.5×1 , mostrado na Figura 2.12f. Nas proximidades do estado d (Fig. 2.12d), nota-se uma bifurcação, cujo ramo d-i apresenta uma grande variação de k para pequenas mudanças no valor de h.

A família g - h origina-se em torno de $h = \lambda/2$ (ver Fig. 2.11), por isso é formada

pelos estados completamente estendidos. Semelhante ao estado *i*, os $\psi'_k s$ têm um máximo no centro da guia de onda (comparar Figs. 2.12g e 2.12h com 2.12i). A família termina quando $h \to \infty$, correspondendo ao estado 3:3 de um retângulo com dimensões 2.5×1 .

Figura 2.12: (a) Detalhes da Figura 2.11 do painel superior, indicando os estados onde as densidades são exibidas em (b)k = 11.332, h = 0.0; (c) k = 11.332, h = 0.12; (d) k = 11.232, h = 0.25; (e) k = 10.745, h = 0.5; (f) k = 10.535, h = 1.0; (g) k = 11.332, h = 0.333; (h)k = 10.679, h = 0.880; (i)k = 10.822, h = 0.31. A incidente é uma onda plana com $\theta = \arctan[3/2]$ para (b), (c), (g), (h), (i), e $\theta = 0$ para os demais casos.



Fonte: Zanetti et al, 2012.

Agora será mostrada uma análise semelhante à mostrada acima, no entanto com a presença das guias laterais (estrutura aberta). Na figura 2.10 tem-se que L = L = d = 1, w = 1/2 e h = 1/3. O parâmetro geométrico a ser variado neste caso é h' (ver Figura 2.4). Na Figura 2.13a é mostrado o gráfico de densidade de $|T(i, j)|^2$ para $i \in j$ nas guias de onda direita e esquerda, e na Figura 2.13b para $i \in j$ pertencentes às cavidades $Q_1 \in Q_2$. Os estados c-i indicados, são exibidos na Figura 2.13c-2.13i. Observa-se, na Figura 2.13b, que as ressonâncias h = 0 (caso fechado) e k em torno de 10.5, 11.1 e 11.4 correspondem exatamente àqueles da Figura 2.11a para h = 1/3 e mesmos valores de k. Para h > 1/3as figuras 2.13a e 2.13b são muito semelhantes. Figura 2.13: Gráfico de densidade de $|T(i, j)|^2$ em função de k e h para i e j de modo que eles correspondam sempre ao meio de, respectivamente, (a) parte superior esquerda e inferior direita das guias de onda, e (b) parede inferior das cavidades Q_1 e Q_2 . Gráfico de densidade $|\psi|^2$ dos estados indicados em (a) e (b), para: (c) k = 10.600 e h = 0.322; (d) k = 11.288 e h = 0.150; (e) k = 11.309 e h = 0.150; (f) k = 11.284 e h = 0.208; (g) k = 11.251 e h = 0.250; (h) k = 11.277 e h = 0.250; (i) k = 11.042 e h = 0.800. As soluções de espalhamento de fora foram minimizadas para melhor visualização. A onda plana φ de entrada foi escolhida com $\theta = \arctan[3/2]$ para todos os casos, com excessão de (c), onde $\theta = 0$.



Fonte: Zanetti et al, 2012.

Estados ligados ao contínuo (ELC) são, como a prória terminologia indica, estados ligados, mas que são ligados ao contínuo (NEUMANN; WINGNER, 1929). Para estruturas abertas, como é o caso da Figura 2.10 (quando h' > 0), os ELC costumam decair ao longo das guias de onda (CATTAPAN; LOTTI; 2008). Um exemplo disso é mostrado na Figura 2.13i. A Figura 2.13b mostra também o cruzamento de duas famílias: d - f - h e e - f - g. Os estados ao longo de d - f - h têm os nós em torno das aberturas h' (por exemplo, as figuras 2.13d e 2.13h), de forma que conseguem sobreviver para guias de onda mais largas. O inverso ocorre para aos estados ao longo de e - f - g, exibindo picos nas aberturas, (ver figuras 2.13e e 2.13g), e desaparecendo para h' acima de um certo limiar.

Podemos afirmar então que a variação da largura da guia de onda de acoplamento age no sentido de selecionar os autoestados que participam da formação da função de onda

Instituto de Física - UFAL

dos sistemas acoplados. Isto é observado na transmissão em bilhares abertos (AKIS et al., 2002; SADREEV, 2004; SADREEV et al., 2005). Aqui foi mostrado que isso também ocorre em bilhares fechados.

2.4.3 Cristais Fotônicos

Cristais fotônicos (CF) são estruturas com arranjos periódicos de espalhadores dielétricos, construídos de forma a permitir o controle sobre a propagação e confinamento das ondas eletromagnéticas em determinadas direções e frequências (JOANNOPOULOS et al., 1997).

O método mais usado solução teórica dos cristais fotônicos é utilizar a analogia existente entre ondas eletromagnéticas e elétrons propagando-se em meios periódicos. Para tanto, as Equações de Maxwell que resolvem essas estruturas, para uma frequência fixa ω , devem ser obtidas em forma de equações de autovalores de um operador hermitiano (JOANNOPOULOS et al., 1997; JOHNSON; JOANNOPOULOS, 2003). Fazendo isso, teremos ao fim que resolver uma equação muito similar à Equação de Schrödinger.

Tratamentos através de técnicas de espalhamento vêm se tornando alternativas comuns na resolução CF (MELLO; TOMSOVIC, 1992; LI; ZHANG, 1998; KWAN et al., 2003; BOTTEN et al., 2004). Este fato, juntamente com a análise acerca das similaridades dos problemas de espalhamento de elétrons e fótons, são grandes incentivos para a utilização do MCP na solução de estruturas que assemelhem-se a cristais fotônicos e guias óticas.

Será mostrado a seguir o estudo realizado por Zanetti et. al para os CF através do Método de contorno de parede para o caso de paredes impenetráveis, ou seja, $\gamma \to \infty$. A onda incidente utilizada em todas as simulaçõess tem a forma $\varphi(\vec{r};k) = exp[-ikx]$. Todos os gráficos mostrados são normalizados por seu respectivo máximo e as matrizes M(i,j), $\psi(\vec{r}_{i,j})$ têm tamanho 2500 × 2500.

Inicialmente, será apresentado o resultado para um cristal fotônico, de extensão finita, com uma curva de defeitos de forma $\pi/2$ do tipo ar, isto é , alguns dos cilindros são retirados formando uma guia de onda através da estrutura, ver Figura 2.14.

A seguir dois exemplos representativos, para kr = 0.459 e kr = 0.27 serão analisados, cujos comprimentos de onda correspondente $\lambda = 2\pi/k$ estão representados na Figura 2.14.

A Figura 2.15 mostra o gráfico de densidade 2D de $|\psi|^2$ para kr = 0.27. Nota-se que dentro do cristal fotônico o campo é praticamente nulo. Além disso, a intensidade é cada vez menor ao longo do guia de ondas, como verificado nos "cortes" unidimensionais de $|\psi|^2$, feitos ao longo do seu comprimento.

Figura 2.14: Esquema do cristal fotônico bidimensional com uma guia de onda formada por linhas de defeitos tipo ar. A estrutura é constituída por cilindros de raio r com parâmetro de rede $a_0 = 5r$. As distâncias características mostradas são $a = 5a_0$ e $b = 9a_0$ e $c = 14a_0$. Os comprimentos de onda correspondentes a kr = 0.459 e 0.27, também são mostrados para comparação. A origem do plano x - y está no centro da haste inferior esquerdo mais distante. Todas as medidas são dadas em unidades arbitrárias.



Fonte: Zanetti et al, 2009.

Figura 2.15: Gráfico 2D de densidade de $|\psi|^2$ para a onda plana incidente $\varphi(\vec{r}) = exp[ikx]$, com kr = 0.27. Regiões escuras correspondem a baixas intensidades. É mostrado também 'cortes' de $|\psi|^2$ ao longo de y = a e x = b.



Fonte: Zanetti et al, 2009.

A Figura 2.16 mostra o caso de kr = 0.459, onde transmissão ressonante ocorre. Esse resultado é consistente com um estudo anterior (MEKIS et al, 2005) de uma estrutura semelhante. É observado que a intensidade do campo $|\psi|^2$ é crescente ao longo do braço vertical (melhor visualizado no gráfico 3D), um tipo de "efeito de chama de vela" (*candle flame effect*). Este comportamento deve-se ao fato de que, chegando no fim da estrutura, o número de espalhadores à frente da onda transmitida diminui até anular-se, diminuindo assim o espalhamento no sentido contrário a sua propagação, aumentando a amplitude na saída da guia.

Figura 2.16: Mesmo que a Figura 2.9, mas para kr = 0.459. Aqui a transmissão ressonante é claramente vizualiza. O gráfico 3D mostra uma visão mais detalhada de $|\psi|^2$ na região do cristal fotônico.





Em seguida foi analisado o caso do cristal fotônico com uma guia de onda do tipo interferômetro, mostrado na Figura 2.17. A estrutura é formada por duas guias de onda horizontais de comprimento d, começando em x = 0, essas são ligadas por uma linha de

defeitos vertical, de onde sai outra guia horizontal na posição y = b, indo até o final da estrutura.

Figura 2.17: Esquema do cristal fotônico com um guia de onda do tipo interferômetro formado por linhas de defeitos, cujos tamanhos característicos são $a = 3a_0, b = 10a_0, c = 16a_0 e d = 8a_0$. São mostrados os comprimentos de onda correspondentes a kr = 0.459e kr = 0.333, respectivamente.



Fonte: Zanetti et al, 2009.

Foram estudados também os perfis do campo no interior da guia de onda. Como exemplos, foi tomado kr = 0.333 e kr = 0.459, cujo correspondente comprimentos de onda são representados na figura 2.17. É exibido nas figuras 2.18 e 2.19, os gráficos de densidade de $|\psi|^2$ para cada caso. É mostrado também os "cortes" de $|\psi|^2$. Devido à simetria do problema, o campo nos braços inferior e superior é exatamente o mesmo.

Para kr = 0,333 (Figura 2.18), $|\psi|^2$ tem seu máximo nas entradas dos dois braços esquerdos, decaindo para cerca de 37% deste valor em suas extremidades (em x = b). Ao longo do braço do meio, o campo é baixo, mas não nulo, com picos para $|\psi|^2$ de cerca de 10% do valor do máximo global. Por outro lado, na Figura 2.13, nota-se uma perfeita interferência construtiva para kr = 0.459. Os braços perpendiculaar e paralelos apresentam estruturas idênticas de máximos e mínimos para $|\psi|^2$. Neste caso, favorece a transmissão ressonante no braço do meio. Aqui, novamente, observa-se o efeito 'chama de vela'.

Figura 2.18: Gráfico 2D de densidade de $|\psi|^2$, e cortes ao longo y = a (parte inferior do braço) e y = d (braço médio) para o caso onde kr = 0.333.



Fonte: Zanetti et al, 2009.

Figura 2.19: Gráfico 2D de densidade de $|\psi|^2$, e cortes ao longo y = a (parte inferior do braço) e y = d (braço médio) para o caso onde kr = 0.459.



Fonte: Zanetti et al, 2009.

Por fim, é analisado como modifica-se o perfil do campo propagante quando é variado o caminho óptico da guia de onda no cristal. Os resultados para kr = 0.459 são apresentados na Figura 2.19, onde é mostrado o gráfico 2D de densidade 2D de $|\psi|^2$ para três diferentes situações: a perna de baixo do braço perpendicular é uma, duas ou três fileiras de hastes mais longas do que a parte superior da perna. Vê-se claramente que as diferentes configurações espaciais dos defeitos levam a padrões diferentes para o campo dentro da guia de onda. Figura 2.20: Gráficos 2D de densidade de $|\psi|^2$ para kr = 0.459 e três diferentes configurações espaciais para a guia de onda do tipo interferômetro. Ao controlar a diferença no comprimento do caminho óptico, a condição de interferência construtiva pode ser ajustada para produzir um feixe de luz de saída.



Fonte: Zanetti et al, 2009.

Em resumo, foi demonstrado a potencialidade do MCP para obter os autoestados de espalhamento e modos ressonantes de diferentes nano-struturas. Este método será utilizado no próximo capítulo para analisar o fenômeno de chaveamento de energia entre canais acoplados, correspondendo à contribuição inédita desta dissertação.

3

PROPRIEDADES DE TRANSMISSÃO DE CANAIS ACOPLADOS

Nas últimas décadas, a engenharia quântica tem experimentado grandes avanços. No entanto, um dos maiores desafios enfrentado pela mesma não é apenas a fabricação de sistemas de tamanho micro e nano, mas também projetá-los corretamente para que, possam exibir as características exatas para os quais são destinados. Tal fato tem provocado um interesse ainda maior no estudo de fenômenos envolvendo estruturas compostas de unidades básicas (como por exemplo: cavidades, guias de onda e etc) submetidas a algum tipo de variação.





Fonte: Autor, 2015

Instituto de Física - UFAL

No âmbito da física teórica essa classe de sistemas é bastante importante devido à sua influência no estudo de transmissão e transporte (ISHIO et al., 2001). Entre estes sistemas destacamos os acopladores, que desempenham um papel importante em eletrônica, e em particular no estudo de chaveamento de energia.

Neste capítulo mostraremos os resultados obtidos para o acoplador direcional, mostrado na Figura 3.1, este será modelado através do formalismo desenvolvido para bilhares. O enfoque principal do trabalho aqui proposto é o estudo das transmissões ressonantes à medida que sua estrutura é modificada, podendo assim apresentar o capacidade de chaveamento de energia. Tais resultados foram adquiridos através do Método de Contorno de Paredes, para paredes impenetráveis, em sua versão númerica. Para tanto, dividimos o perímetro total, P, do acoplador em N segmentos ds_1, \ldots, ds_N de comprimento igual a ds = P/N. Então, nós denotamos por T(i, j) a forma discretizada da matriz T calculada nos pontos médios dos segmentos ds_i e ds_j . Em todos os casos que mostraremos a seguir fixamos s = 0.005 e N, consequentemente, depende do valor de P.

A Figura 3.1 mostra a geometria do bilhar utilizada nas simulações, onde l corresponde ao comprimento dos canais de entrada e saída, w o comprimento da guia de onda que une os canais de entrada aos de saída, h largura dos canais e θ corresponde à inclinação dos canais intermediários.

Estruturas abertas, como a que estamos trabalhando, possuem um espectro de ressonâncias como no caso fechado, no entanto aqui cada ressonância possui uma certa largura devido ao acoplamento da estrutura ao contínuo de energia, pois esse acoplamento não permite a formação de autoestados com níveis discretos de energia na sua região interior. No entanto, quando a energia da onda transmitida através dos canais de entrada aproxima-se da energia correta de algum autoestado do sistema fechado, a forma da função de onda na estrutura é muito similar àquela referente a ressonância. Esta é a chamada transmissão ressonante (SADREEV, 2004), que será vista nas simulações mostradas a seguir.

Começaremos ilustrando a distribuição espacial de alguns modos que são soluções para o problema de espalhamento na estrutura proposta. Consideramos h = 0.25 a largura dos canais, w = 0.75 o comprimento da guia de ligação que une os canais de entrada aos de saída, l = 1.0 o comprimento dos canais e $\theta = 30^{\circ}$ representa a inclinação dos canais. Para calcularmos a função de onda $\psi(\vec{r})$ foi considerado, aqui e em todos os demais casos mostrados posteriormente, a onda incidente, na equação (2.47) uma onda plana propagando-se ao longo do eixo x positivo, ou seja, $\varphi_k(\vec{r}) = exp[ikx]$, com $k = 2\pi/\lambda$, consideramos ainda $\hbar = 2m$. Figura 3.2: Gráficos de densidade de $|\psi(\vec{r})|^2$ para o acoplador direcional mostrado na Figura 3.1 com h = 0.25, w = 0.75, l = 1 e $\theta = 30^{\circ}$ tendo uma onda plana incidende de comprimento de onda λ . Em todos os casos o canal superior de entrada foi mantido fechado. Diferentes comprimentos de onda são considerados (a) $\lambda = 0.483$; (b) $\lambda = 0.124$; (c) $\lambda = 0.141$; e (d) $\lambda = 0.290$ mostrando diferentes possibilidades de chaveamento de energia.



Fonte: Autor, 2015

Na Figura 3.2 mostramos alguns gráficos de densidade de $|\psi(\vec{r})|^2$ para o acoplador proposto, em todos os casos mantemos o canal superior de entrada fechado, ou seja, alimentamos o sistema apenas pelo canal inferior. Esta situação permite uma melhor análise da capacidade de chaveamento de pulso da estrutura. Na Figura 3.2a o comprimento de onda da onda incidente (λ) vale 0.483, pode-se observar claramente que, depois de passar através da região de acoplamento, este modo tem uma amplitude predominantemente maior transmitida ao canal inferior de saída. Em contraste, a Figura 3.2b mostra o gráfico de densidade da função de onda para uma onda plana incidente com $\lambda = 0.124$. Neste caso, a função de onda é transmitida através do canal de saída superior. Estes resultados mostram que a estrutura proposta pode realmente funcionar como um dispositivo de chaveamento de pulsos, com o canal de saída sendo controlado pelo comprimento de onda da onda incidente. A Figura 3.2c ilustra um caso para o qual o modo é distribuído em ambos os canais de saída ($\lambda = 0.141$), agindo assim como um divisor de pulso. Finalmente, na Figura 3.2d é mostrado o caso em que $\lambda = 0.290$, para o qual a amplitude transmitida é muito baixa em ambos os canais de saída, que sinaliza que a onda incidente é refletida pela estrutura. Portanto, a estrutura proposta pode agir como chaveador, um divisor de feixe ou um dispositivo refletor, dependendo do comprimento de onda incidente. Exploraremos mais a diante a capacidade de chaveamento do sistema.

3.1 Determinação das Transmissões Ressonantes

A seguir, vamos explorar as propriedades de transmissão da estrutura proposta através do MCP. No capítulo anterior foi discutido que os modos de ressonância de espalhamento podem ser identificados analisando o módulo dos elementos da matriz T. Na verdade, as ressonâncias levam à elevados valores da intensidade da função de onda transmitida, então podemos também determinar as ressonâncias através do que chamamos de fluxo da função de onda, definido como:

$$F = \int_{A} |\psi(\vec{r})|^2 dA, \qquad (3.1)$$

cuja forma discretizada é

$$F = \sum_{i=1}^{N_x} \sum_{j=1}^{N_y} |\psi(\vec{r})|^2 dx_i dy_j, \qquad (3.2)$$

onde na qual $\vec{r_{i,j}}$ é o vetor posição do centro do elemento de área $dA_{ij} = dx_i dy_j$. Os índices $i \in j$ variam de 1 a $N_x \in 1$ a N_y , respectivamente, sendo $N_x \in N_y$ o número de células $\Delta x \in \Delta y$ da área A. Análise semelhante é realizada em problemas que pretendem medir a seção de choque de espalhadores (SAKURAI, 1994).

Figura 3.3: Gráfico de $\langle |T(i,j)| \rangle^2$ e F versus o comprimento de onda λ da onda incidente para (a) o canal superior e (b) canal inferior.



Fonte: Autor, 2015

Instituto de Física - UFAL

Na Figura 3.3a e 3.3b mostramos o gráfico para o F (curva vermelha), quando variamos o comprimento de onda da onda incidente de 0.1 a 0.55, para as regiões A_1 (canal superior de saída) e A_2 (canal inferior de saída), mostradas na Figura 3.1, e o gráfico da média sobre todos os elementos de T (curva preta) presentes nas mesmas regiões, para o caso em que os dois canais de entrada estão abertos. Os parâmetros geométricos do sistema são os mesmo descritos anteriormente.

Em primeiro lugar, percebe-se que ambas as quantidades retratam um comportamento semelhante, como esperado, sinalizando os modos de transmissão ressonante através dos picos vizualizados. Dentro do conjunto de comprimentos de onda exibidos, notamos a presença de quatro transmissões ressonantes. O modo para $\lambda \simeq 0.483$ é o modo de tranmissão ressonante fundamental e corresponde à função de onda com menor energia que pode ser transmitida através do acoplador. A segunda ($\lambda \simeq 0.245$), a terceira ($\lambda \simeq 0.165$) e a quarta ($\lambda \simeq 0.124$) transmissões ressonantes correspondem à harmônicos do modo da transmissão ressonante fundamental. A posição de tais picos pode ser obtida também através de $\lambda_n = 2h/n$, basta lembrarmos do caso de uma onda estacionária que obedece à condições de contorno do tipo Dirichlet. Os valores obtidos usando $\lambda_n = 2h/n$ são aproximadamente iguais aos valores mostrados na Figura 3.3.

Devido ao menor custo computacional para o cálculo do valor médio dos elementos da matriz T, vamos usá-lo para quantificar as transmissões ressonantes em uma sequência de uma análises visando estudar o desempenho da estrutura para a capacidade de chaveamento.

Na Figura 3.4 plotamos a diferença entre as transmissões nos canais de saída inferior e superior, ou seja, $\langle |T_{A_2}|^2 \rangle - \langle |T_{A_2}|^2 \rangle$, onde $\langle |T_{A_i}|^2 \rangle$ é a média dos quadrados de todos os elementos da matriz T pertencentes à região A_i mostrada na Figura 3.1. Os parâmetros associados à geometria do acoplador neste caso são os mesmo usados até então e o canal superior de entrada é mantido fechado. Os valores positivos (negativos) sinalizam uma transmissão predominantemente através do canal inferior (superior) de saída. Esta medida quantifica o desempenho de chaveamento da estrutura. Mostramos seu comportamento como uma função do comprimento de onda λ , onde $0.1 < \lambda < 0.55$, conjunto que inclue as quatro primeiras transmissões ressonantes. Note que as duas primeiras transmissões ressonantes (com comprimentos de onda maiores) são transmitidas através do canal de saída inferior, enquanto que a terceira e quarta são transferidas principalmente para o canal superior. As oscilações presentes entre as transmissões ressonantes estão associadas ao processo de interferência na guia que liga os canais de entrada aos de saída.



Fonte: Autor, 2015

3.2 Variação de θ

Iremos agora analisar como se comporta as transmissões ressonantes quando modificamos a estrutura do acoplador. Inicialmente iremos variar a inclinação θ , desde $\theta = 0^{\circ}$ até $\theta = 90^{\circ}$, mantendo o canal superior de entrada fechado, l = 1.0, h = 0.25 e w = 0.75.

A Figura 3.5 mostra o gráfico da diferença entre as médias dos quadrados de todos os elementos da matriz T pertencentes à região A_2 e A_1 (mostradas na Figura 3.1) em função da inclinação θ , para a transmissão ressontante fundamental, ou seja, o comprimento de onda da onda incidente é $\lambda_1 = 0.483$. Nota-se que para a inclinação entre 0° e 45° o modo é predominantemente transmitido para o canal inferior de saída, por volta de $\theta = 50^{\circ}$ o modo é distribuído igualmente em ambos os canais de saída, já para valores maiores que 50° o modo de transmissão é chaveado para o canal superior. Isso também pode ser verificado através da análise distribuição da função de onda na estrutura à medida que a inclinação do acoplador é modificada. Na Figura 3.6 mostramos os gráficos de densidade de $|\psi(\vec{r})|^2$ para uma onda plana incidente com comprimento de onda de 0.4830, para inclinações de 10°, 20°, 30°, 40°, 50°, 60°, 70°, 80° e 90°, respectivamente.

Figura 3.5: Diferença entre as médias dos quadrados dos elementos de T do canal inferior e do canal superior versus a inclinação θ , para o modo de transmissão ressonante fundamental, $\lambda_1 = 0.483$.



Fonte: Autor, 2015

Uma análise indêntica à descrita acima mostrada é na Figura 3.7 para o segundo modo de transmissão ressonante ($\lambda_2 = 0.245$). Verificamos que para inclinação até por volta de 30° ocorre o processo de chaveamento do modo para o canal superior e para inclinações maiores que $\theta = 38^\circ$ o modo passa a ser transmitido para o canal inferior de saída (ver também Figura 3.8). Figura 3.6: Gráficos de densidade de $|\psi(\vec{r})|^2$ para o acoplador direcional mostrado na Figura 3.1 com h = 0.25, w = 0.75, l = 1 e tendo uma onda plana incidende de comprimento de onda $\lambda_1 = 0.4830$. Em todos os casos o canal superior de entrada foi mantido fechado. Diferentes valores para a inclinação θ são considerados (a)10°, (b) 20°, (c) 30°, (d) 40°, (e) 50°, (f) 60°, (g) 70°, (h)80° e 90°, mostrando diferentes possibilidades de chaveamento de energia.



Fonte: Autor, 2015

Figura 3.7: Diferença entre as médias dos quadrados dos elementos de T do canal inferior e do canal superior versus a inclinação θ , para $\lambda_2 = 0.2458$.



Fonte: Autor, 2015

Na Figura 3.9 apresentamos o gráfico da diferença entre as médias dos quadrados de todos os elementos da matriz T pertencentes à região A_2 e A_1 me função da inclinação do acoplador, para o caso em que a onda incidente possue um comprimento de onda $\lambda_3 = 0.165$, correspondente à terceira transmissão ressonante.

Notamos que para esta transmissão ressonante o sistema torna-se mais sensível à variações que nos casos anteriores. Para ângulos muito pequenos o chaveamento ocorre para o canal inferior de saída, já para ângulos entre $\theta = 30^{\circ}$ e $\theta = 50^{\circ}$ o modo de transmissão ressonante é distribuído ao longo do canal superior de saída, entre $\theta = 60^{\circ}$ e $\theta = 70^{\circ}$ o modo é transmitido para o canal inferior de saída, para $\theta = 80^{\circ}$ é chaveado para o canal superior e $\theta = 80^{\circ}$ para novamente para o canal inferior, como mostrado também na Figura 3.10, através dos gráficos de $|\psi(\vec{r})|^2$.

Figura 3.8: Gráficos de densidade de $|\psi(\vec{r})|^2$ para o acoplador direcional mostrado na Figura 3.1 com h = 0.25, w = 0.75, l = 1 e tendo uma onda plana incidende de comprimento de onda $\lambda_2 = 0.245$. Em todos os casos o canal superior de entrada foi mantido fechado. Diferentes valores para a inclinação θ são considerados (a)10°, (b) 20°, (c) 30°, (d) 40°, (e) 50°, (f) 60°, (g) 70°, (h)80° e 90°, mostrando diferentes possibilidades de chaveamento de energia.





Analisando a Figura 3.11 notamos que para a quarta transmissão ressonante ($\lambda_4 = 0.124$), o sistema é ainda mais sensível à variações estruturais. Percebemos que para pequenas mudanças nos valores da inclinação do acoplador provocam a mudança da distribuição do modo de um canal de saída para outro. Isso pode ser vizualizado também através do gráfico de $|\psi(\vec{r})|^2$ (Figura 3.12).

Figura 3.9: Diferença entre as médias dos quadrados dos elementos de T do canal inferior e do canal superior versus a inclinação θ , para $\lambda_3 = 0.165$.



Fonte: Autor, 2015

3.3 Variação de ω

Outra maneira de controlar o fenômeno de chaveamento de energia no acoplador direcional da Figura 3.1 é através da variação do comprimento w da guia de onda que liga os canais de entrada aos de saída. Nas figuras 3.13, 3.15, 3.17 e 3.19 mostramos os gráficos da diferença entre as médias dos quadrados dos elementos da matriz T do canal inferior de saída e do canal superior, para o modo de transmissão ressonante fundamental (λ_1) , para a segunda (λ_2) , terceira (λ_3) e quarta (λ_4) transmissão ressonante, respectivamente, em função de w. Consideramos h = 0.25, l = 1 e θ fixo igual a $\theta = 30^{\circ}$ e matemos o canal superior de entrada fechado. Para o primeiro e o segundo modo de transmissão ressonante (ver figuras 3.13, 3.14, 3.15 e 3.16) observamos que para valores de w próximos a 0.5 a diferença entre as médias dos quadrados dos elementos da matriz T das regiões A_2 e A_1 é próxima de zero, logo, a função de onda é transmitida igualmente aos canais de saída.

Figura 3.10: Gráficos de densidade de $|\psi(\vec{r})|^2$ para o acoplador direcional mostrado na Figura 3.1 com h = 0.25, w = 0.75, l = 1 e tendo uma onda plana incidende de comprimento de onda $\lambda_3 = 0.1658$. Em todos os casos o canal superior de entrada foi mantido fechado. Diferentes valores para a inclinação θ são considerados (a)20°, (b) 50° e (c) 80°.





Para w = 0.75 ocorre o chaveamento de para o canal inferior, já para w = 1.0 a onda é transmitida para o canal superior. Percebemos ainda que à medida que o comprimento de onda diminui o sistema torna-se mais sensível à variações, assim, para λ_3 (Figura 3.7) e λ_4 (Figura 3.19), pequenas mudanças nos valores de w provocam a mudança do chaveamento de um canal para outro. Na Figura 3.17, por exemplo, temos que $\lambda_3 = 0.165$,



Fonte: Autor, 2015

e para valores de w entre 0.5 a 0.7 e 0.8 a 0.9 ocorre o chaveamento para o canal inferior de saída e para w entre 0.7 a 0.8 e 0.9 a 1.0 a onda é transmitida ao canal superior de saída. Para a última transmissão ressonante por nós analisada (λ_4), notamos que o sistema é ainda mais sensível à variações, causando uma oscilação do chaveamento entre o canal superior de saída e o inferior á medida que o valor de w muda. Figura 3.12: Gráficos de densidade de $|\psi(\vec{r})|^2$ para o acoplador direcional mostrado na Figura 3.1 com h = 0.25, w = 0.75, l = 1 e tendo uma onda plana incidende de comprimento de onda $\lambda_4 = 0.124$. Em todos os casos o canal superior de entrada foi mantido fechado. Diferentes valores para a inclinação θ são considerados (a)20°, (b) 50° e (c) 80°.



Fonte: Autor, 2015

Figura 3.13: Diferença entre as médias dos quadrados dos elementos de T do canal superior e do canal inferior versus w para a transmissão ressonante fundamental ($\lambda_1 = 0.4830$).



Fonte: Autor, 2015

Figura 3.14: Gráficos de densidade de $|\psi(\vec{r})|^2$ para o acoplador direcional mostrado na Figura 3.1 com h = 0.25, $\theta = 30^\circ$, l = 1 e tendo uma onda plana incidende de comprimento de onda $\lambda_1 = 0.483$. Em todos os casos o canal superior de entrada foi mantido fechado. Diferentes valores para o comprimento da guia que une os canais de entrada aos de saída θ são considerados (a)0.5, (b) 0.75 e (c) 1.0.



Fonte: Autor, 2015

Analisando as figuras 3.13, 3.15, 3.17 e 3.19 percebemos que quanto maior a energia da onda incidente (λ pequeno), maior o número de diferentes possibilidades de rearranjos dos modos dentro da estrutura e, consequentemente, mais denso seu espectro de autovalores. Ou seja, para pequenas variações de energia e tamanho do canal de ligação w, a forma da função de onda pode ter grande variação. Isso pode ser explicado pelo fato de que à medida que mudamos o valor do comprimento (w) da guia que une os canais de entrada aos de saída a onda plana chega com diferentes fases aos canais de saída, provocando então diferentes configurações de transmissão nos canais de saída. Isso também

Figura 3.15: Diferença entre as médias dos quadrados dos elementos de T do canal superior e do canal inferior versus w para $\lambda_2 = 0.245$.



Fonte: Autor, 2015

vale para a variação de θ No entanto, para comprimentos de onda grandes, como $\lambda_1 \in \lambda_2$, pequenas variações ocasionam uma pequena diferença de fase, já para comprimentos de onda pequenos, verificamos que mesmo pequenas variações de w produzem diferenças de fase significativas.

Estas tendências mostram que diferentes cenários podem ser alcançados por meio do ajuste da geometria acoplador, abrindo várias possibilidades para a manipulação da transmissão de energia. Figura 3.16: Gráficos de densidade de $|\psi(\vec{r})|^2$ para o acoplador direcional mostrado na Figura 3.1 com h = 0.25, $\theta = 30^{\circ}$, l = 1 e tendo uma onda plana incidende de comprimento de onda $\lambda_2 = 0.245$. Em todos os casos o canal superior de entrada foi mantido fechado. Diferentes valores para o comprimento da guia que une os canais de entrada aos de saída θ são considerados (a)0.5, (b) 0.75 e (c) 1.0.



Fonte: Autor, 2015

 $\omega = 1.0$

Figura 3.17: Diferença entre as médias dos quadrados dos elementos de T do canal superior e do canal inferior versus w para $\lambda_3 = 0.165$.



Fonte: Autor, 2015

Figura 3.18: Gráficos de densidade de $|\psi(\vec{r})|^2$ para o acoplador direcional mostrado na Figura 3.1 com h = 0.25, w = 0.75, l = 1 e tendo uma onda plana incidende de comprimento de onda $\lambda_3 = 0.165$. Em todos os casos o canal superior de entrada foi mantido fechado. Diferentes valores para o comprimento da guia que une os canais de entrada aos de saída θ são considerados (a)0.5, (b) 0.75 e (c) 1.0.





Fonte: Autor, 2015

Figura 3.19: Diferença entre as médias dos quadrados dos elementos de T do canal superior e do canal inferior versus w para $\lambda_4 = 0.124$.



Fonte: Autor, 2015
Figura 3.20: Gráficos de densidade de $|\psi(\vec{r})|^2$ para o acoplador direcional mostrado na Figura 3.1 com h = 0.25, w = 0.75, l = 1 e tendo uma onda plana incidende de comprimento de onda $\lambda_4 = 0.124$. Em todos os casos o canal superior de entrada foi mantido fechado. Diferentes valores para o comprimento da guia que une os canais de entrada aos de saída θ são considerados (a)0.5, (b) 0.75 e (c) 1.0.





Fonte: Autor, 2015

4

CONCLUSÕES E PERSPECTIVAS

O objetivo principal do presente trabalho foi estudar o comportamento de um acoplador direcional, composto por dois canais de entrada, uma guia de ligação e dois canais de saída, através da versão numérica do MCP.

No capítulo 2 foi apresentado o desenvolvimento analítico do Método de Contorno de Paredes. Inicialmente, na seção 2.1, foi mostrado seu equacionamento básico e, vimos que a partir das equações (2.16), parede permeável, e (2.35), parede rígida, podemos encontrar a solução de espalhamento e os autoestados corretos para um bilhar. Vimos ainda que o elemento principal do MCP é a matriz T, através das suas propriedades podemos fornecer de maneira simples e direta os resultados acerca das variações do espectro de energia como função da geometria do sistema. Na seção 2.3 obtivemos uma versão númerica do MCP, versão esta que foi usada durante todo o trabalho. Por fim, mostramos algumas aplicações importantes do MCP: para o caso de bilhares conhecidos na literatura (bilhar quadrado e quarto de estádio), para bilhares acoplados por meio de guias de ondas e para o estudo de cristais fotônicos.

No terceiro capítulo aplicamos o MCP em sua versão númerica para acoplador direcional, composto por dois canais de entrada, uma guia de ligação e dois canais de saída com uma onda planda de entrada. O sistema foi estudado por da análise dos elementos da matriz T. Determinamos o o espectro de transmissão para o caso de alimentação através de um único canal. Analisamos ainda a influência do tamanho da guia de ligação e da inclinação dos canais de entrada e saída no fenômeno de chaveamento de energia. Dentre os resultados obtidos podemos destacar o fato de que o sistema estudado possui várias possibilidades para a manipulação da transmissão de energia, que dependem do comprimento de onda da onda incidente, podendo assim funcionar como um chaveador, um divisor de feixe ou um dispositivo refletor. Exploramos com mais detalhes a capacidade de chaveamento de energia e verificamos que tal capacidade pode ser controlada através dos parâmetros geométricos (tamanho do canal de ligação w e inclinação θ) do acoplador. Tal controle do modo de divisão e de comutação é fundamental para atingir várias funções de manipulação de energia, como por exemplo, as operações em portas lógicas.

Verificamos, portanto, que o MCP apresenta-se como um formalismo de fácil implementação computacional que permite uma análise sistemática das propriedades de transmissão de ondas em estruturas envolvendo canais acoplados. Os modos de transmissão ressonantes podem ser obtidos para diferentes configurações do acoplador o que permite manipular a geometria da estrutura em consideração para otimizar a operação de funções específicas. Em particular, o método pode ser aplicado ao estudo de versões mais elaboradas de acopladores direcionais. Dentre as possíveis extensões do presente trabalho, podemos citar o estudo das propriedades de transmissão de estruturas com multi-canais e/ou com aneis de retro-alimentação. Esperamos que futuros estudos ao longo desta direção possam contribuir para difundir e consolidar o MCP como um formalismo importante para o estudo de problemas complexos de espalhamento.

Referências Bibliográficas

- [1] AKIS, R. et al. Eigenstate selection in open quantum dot systems: using the landauer formalist as a spectroscopic probe. Microeletronic Engineering, v. 63, p. 241, 2002.
- [2] ARFKEN, G. Mathematical Methods for Physicists. [S.l.]: Academic, 1970.
- [3] BELLUCCI, S. e ONORATO, P. Quantum Hall Fabry-Perot interferometer: Logic gate responses. Journal of Applied Physics 108, 033710, 2010.
- [4] BUTKOV, E. Física Matemática. [S.l.]: Editora Guanabara Koogan S.A., 1988.
- [5] CASATI, G. e PROSEN, T. Quantum chaos and the double-slit experiment. Phys. Rev. A 72, 032111, 2005.
- [6] CATTAPAN, G. e P.LOTTI. Bound states in the continuum in twodimensional serial structures. Eur. Phys. J. B, 66, 517-523, 2008.
 CARVALHO, T. Arquitetura de Redes de Computadores. Makron Books, 1994.
- [7] CHABANOV et al. Toward the quantum design of multichannel systems -The inverse problem approach. Ann. Phys. 285, 1, 2000.
- [8] COHEN, T. C., DIU B. e LALOë F Quantum Mechanics, John Wiley and Sons, 1977.
- [9] CUSTÓDIO, M. S. e BEIMS, M. W. Edge effects in billiards: stickiness and long-lived states. J. Phys.: Conf. Ser. 246 012004, 2010.
- [10] CUSTODIO, M. S. e BEIMS, M. W. Intrinsic stickiness in open integrable billiards: tiny border effects. Phys. Class. arXiv:1005.0175, 2010.
- [11] DIETZ, B.; PILLET, C. A.; ECKMANN, J. P.; SMILANSKY, U. e USSISHKIN, I. Inside-outside duality for planar billiards: A numerical study. Phys. Rev. E 15, 4222, 1995.
- [12] GUTZWILLER, M. C. Chaos in Classical and Quantum. Springer-Verlag, 1991.

- [13] HACKENBROICH, G. et al. Quantum Perturbation Theory for the Level-Splitting in Billiards. Phys. Rev. E, v. 57, p. R5, 1998.
- [14] ISHIO, H. et al. Wave function statistics for ballistic quantum transport through chaotic open billiards: Statistical crossover and coexistence of regular and chaotic waves. Phys. Rev. E, v. 64, p. 056208, 2001.
- [15] JHA, A. R. Fiber Optic Technology: Applications to Commercial, Industry, Military, and Space Optical Systems. SciTech Publishing, 2005.
- [16] JOANNOPOULOS, J. D. et al. Photonic crystal: Putting a new twist on light. Nature, v. 386, p. 143, 1997.
- [17] JOHNSON, S. G. e JOANNOPOULOS, J. D. Designing synthetic optical media: photonic crystals. Acta Materialia, v. 51, p. 5823, 2003.
- [18] KWAN, K. C. et al. Effects due to disorder on photonic crystal-based waveguides. Appl. Phys. Lett., v. 82, p. 4414, 2003.
- [19] KOSZTIN, I.; SCHULTEN, K. Boundary Integral method for stationary states of two-dimensional quantum systems. J. Mod. Phys., C8, p. 293, 1997.
- [20] KUROSE, J. F.; ROSS, K. W.Redes de Computadores e a Internet: uma nova abordagem. São Paulo: Addison Wesley, 2010.
- [21] LI, B.; ROBNIK, M. Boundary integral method applied in chaotic quantum billiards. J. Phys. A; Math. Gen, 1995.
- [22] LI, B. et al. Relevance of chaos in numerical solutions of quantum billiards. Phys. Rev. E, v. 57, p. 4095, 1998.
- [23] LI, B. e ZHANG, Z. Q. Multiple-scattering approach to finite-sized photonic band-gap materials. Phys. Rev. B, v. 58, p. 9587, 1998.
- [24] LUZ, M. G. E. da et al. Quantum scattering from arbitrary boundaries. Phys. Rev. E, v. 56, n. 3, p. 2496, 1997.
- [25] MELLO, P. A.; TOMSOVIC, S. Scattering approach to quantum eletronic transport. Phys. Rev. B, v. 46, p. 15 963, 1992.
- [26] MIDWINTER et al. Photonics in Switching. Background and Components. Academic Press, 1993.
- [27] NEUMANN, J. V. WIGNER, E. Uber das Verhalter von Eigenwerter bei adiabatishen Prozesses. Phys. Z. 30, 465, 1929.

- [28] OTT, E. Chaos in dynamical systems (Cambridge University Press), 1993.
- [29] SADREEV, A. F. Current statistics for transport through rectangular and circular billiards. Phys. Rev. E, v. 70, p. 016208, 2004.
- [30] SADREEV, A. F. et al. S-matrix formalism of transmission through two quantum billiards coupled by a waveguide. J. Phys. A, v. 38, p. 10647, 2005.
- [31] SAKURAI, J. J. Modern Quantum Mechanics (Revised Edition). [S.l.]: Addison-Wesley Publishing Company, 1994.
- [32] SCHIMMEL et al.Gate-Controlled Atomic Quantum Switch, Phys. Rev. Letters, v. 93, 128303, 2004.
- [33] SOMBRA et al. Analysis of the nonlinear optical switching in a Sagnac interferometer with non-instantaneous Kerr. Opt. Commun. 249, 1408, 2012.
- [34] SOMENDA, C.G. e STEGEMAN, G. Anisotropic and Nonlinear Optical Waveguides. Elsevier Science Publishers, 1992.
- [35] STÖCKMANN, H. J. Quantum Chaos: An introduction. [S.l.]: Cambridge University Press, 1999.
- [36] TANENBAUM, A. S. Sistemas Operacionais Modernos, 2a. ed. São Paulo: Pearson, 2003.
- [37] TASAKI, S. et al. Interior Dirichlet eigenvalue problem, exterior Neumann scattering problem, and Boundary Element Method for quantum billiards. Phys. Rev. E, v. 56, p. R13, 1997.
- [38] TRAN, X.T e BIANCALANA, F. Nonreciprocal behavior and switching in optical couplers with longitudinally varying coupling coefficient. Optics Letters, v. 37, n. 10, 2012.
- [39] UTHAYKUMAR et al.Realization of all-optical logic gates through three core photonic crystal fiber. Opt. Commun. 296, 194, 2013.
- [40] VERGINI, E.; SARACENO, M. Calculation by scaling of highly excited states of billiards. Phys. Rev. E, v. 52, p. 2204, 1998
- [41] XUE et al. Photon switch in a quantum well by quantum interference in interband transitions. Opt. Commun. 249, 2005.
- [42] ZANETTI, F. M.; VICENTINI, E. e LUZ, M. G. E. 2008. Eigenstates and scattering solutions for billiard problems: a boundary wall approach. Ann. Phys. 323 1644, 2008.

- [43] ZANETTI, F. M. e LUZ, M. G. E. Determining and characterizing families of electronic resonance states in open and closed coupled cavities. Eur. Phys. J. B, 85:202, 2012.
- [44] ZORAN, L. e POZEN, T. Chaos 20 043118, 2010.