

## Otimização de funções de Wannier em cristais fotônicos sem simetria de inversão

Helena Borlina Tanaue<sup>1</sup>

Curso de Engenharia Elétrica - Faculdade de Engenharia - Unesp, Bauru (FEB - Unesp, Bauru)

Alexys Bruno-Alfonso<sup>2</sup>

Departamento de Matemática - Faculdade de Ciências - Unesp, Bauru (FC - Unesp, Bauru)

### 1 Introdução

Os cristais fotônicos são meios ópticos cujas propriedades dependem periodicamente das coordenadas espaciais. As funções de Bloch representam modos de propagação de ondas monocromáticas no cristal e dependem da posição e, periodicamente, do vetor de onda. Seus coeficientes de Fourier dependem das coordenadas e são as funções de Wannier. Estas formam uma base de funções ortogonais localizadas para o espaço vetorial das funções de Bloch. As melhores funções de Wannier apresentam variância mínima. A otimização para cristais com simetria de inversão foi reportada por Romano *et al.* [3]. O objetivo deste trabalho é estender os métodos para tratar cristais sem simetria de inversão.

### 2 Conceitos, Métodos e Resultados

O cristal fotônico sem simetria de inversão investigado neste trabalho tem célula unitária  $ABC$ , como mostra a Figura 1(a). Ele possui parâmetros definidos na Figura 2(a) da referência [4], com período  $a = 235$  nm. Desenvolvemos a teoria sobre funções de Wannier sem simetria de inversão com base na referência [1].

As funções de Wannier são os coeficientes de Fourier das funções de Bloch:

$$h_k(z) = \sum_{n \in Z} w_n(z) e^{ikna}. \quad (1)$$

Sendo que  $w_n(z) = w_0(z - na)$ , basta minimizar a variância  $\sigma^2$  de  $w(z) = w_0(z)$ .

O método tem duas etapas: **(1)** calcular  $h_k(z)$  para obter  $w(z)$  [para que  $w(z)$  seja melhor localizada,  $h_k(z)$  dever ser tão suave quanto possível], **(2)** achar  $\phi(k)$  real, com  $\phi(k + 2\pi/a) = \phi(k) = \phi(-k)$ , que minimize a variância  $\tilde{\sigma}^2$  de  $\tilde{w}(z)$ . Esta última corresponde a  $\tilde{h}_k(z) = \exp[i\phi(k)]h_k(z)$ . A otimização do funcional  $\tilde{\sigma}^2[\phi]$  é um problema do

---

<sup>1</sup>helena.tanaue@unesp.br

<sup>2</sup>alexys.bruno-alfonso@unesp.br

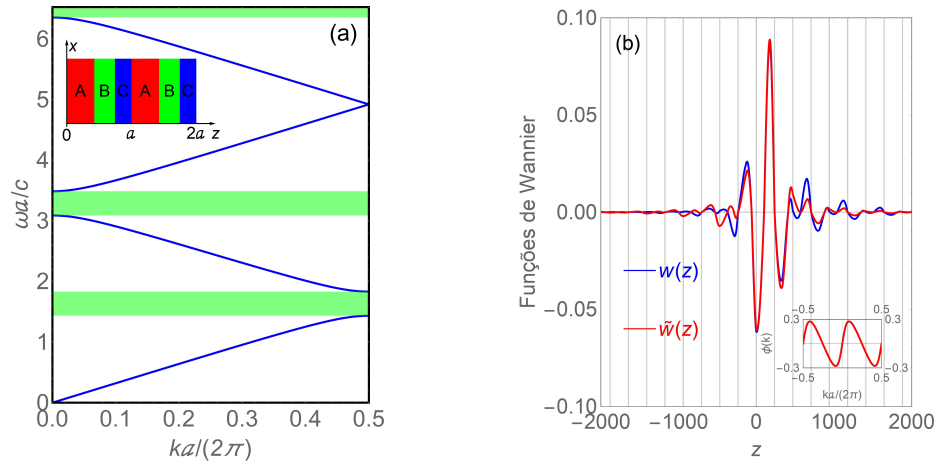


Figura 1: (a) Bandas de frequência  $\omega$  (curvas em azul) e *gaps* (faixas verdes). O *inset* ilustra duas células unitárias do cristal. (b) Função de Wannier da segunda banda, na etapa (1) (azul), e função de Wannier com máxima localização, na etapa (2) (vermelho). O *inset* mostra a forma otimizada da função  $\phi(k)$ .

Cálculo Variacional [1, 2] e leva à EDO linear de segunda ordem  $\phi''(k) = X'(k)$ , sendo  $X(k)$  real, com  $X(k + 2\pi/a) = X(k) = X(-k)$ , obtida mediante integral contendo  $h_k(z)$ .

As funções de Wannier calculadas são mostradas na Figura 1(b). Numericamente, obtivemos o desvio padrão  $\sigma \approx 168.43$  nm, na etapa (1), e  $\tilde{\sigma} \approx 136.024$  nm, na etapa (2). O resultado para  $\tilde{\sigma}$  está em bom acordo com a previsão teórica  $\min(\sigma) \approx 135.619$  nm.

## Agradecimentos

À FAPESP, pelo apoio financeiro à Iniciação Científica (Processo 2018/11550-5).

## Referências

- [1] A. Bruno-Alfonso, and D. R. Nacbar. Wannier functions of isolated bands in one-dimensional crystals, *Physical Review B*, 75:115428, 2007. DOI: 10.1103/PhysRevB.75.115428.
- [2] I. M. Gelfand and S. V. Fomin. *Calculus of Variations*, Prentice-Hall, Englewood Cliffs, 1963.
- [3] M. C. Romano and D. R. Nacbar, and A. Bruno-Alfonso. Wannier functions of a one-dimensional photonic crystal with inversion symmetry, *Journal of Physics B*, 43:215403, 2010. DOI: 10.1088/0953-4075/43/21/215403.
- [4] R. Tang, and J. Wu, and B. Nakarmi. Investigation of band-gap properties in one-dimensional ternary photonic crystals with a single defect layer, *Quantum Electronics*, 46:640–643, 2016. DOI: 10.1070/QEL15939.