

Felippe Leone Maia

# **Simulações de cristais fotônicos no contexto de células solares**

Brasil

2022

Felippe Leone Maia

## **Simulações de cristais fotônicos no contexto de células solares**

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Física do Centro de Ciências Exatas da Universidade Federal do Espírito Santo como requisito parcial para a obtenção do grau de Mestre em Física.

Universidade Federal do Espírito Santo – UFES

Programa de Pós-Graduação em Física

Orientador: Dr. Sergio Vitorino de Borba Gonçalves

Coorientador: Dra. Denise da Costa Assafrão de Lima

Brasil

2022

Ficha catalográfica disponibilizada pelo Sistema Integrado de Bibliotecas - SIBI/UFES e elaborada pelo autor

---

M217s Maia, Felipe Leone, 1994-  
Simulações de cristais fotônicos no contexto de células solares  
/ Felipe Leone Maia. - 2022.  
59 f. : il.

Orientador: Sergio Vitorino de Borba Gonçalves.  
Coorientadora: Denise da Costa Assafrão de Lima.  
Dissertação (Mestrado em Física) - Universidade Federal do Espírito Santo, Centro de Ciências Exatas.

1. Cristais fotônicos. 2. Células solares. 3. Desenvolvimento de software. I. Gonçalves, Sergio Vitorino de Borba. II. Lima, Denise da Costa Assafrão de. III. Universidade Federal do Espírito Santo. Centro de Ciências Exatas. IV. Título.

CDU: 53

---



UNIVERSIDADE FEDERAL DO ESPÍRITO SANTO

CENTRO DE CIÊNCIAS EXATAS  
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA

---

## "Simulações de cristais fotônicos no contexto de células solares"

### Felippe Leone Maia

Dissertação submetida ao Programa de Pós-Graduação em Física da Universidade Federal do Espírito Santo, por videoconferência, como requisito parcial para a obtenção do título de Mestre em Física.  
Aprovada por:

CLEVERSON

FILGUEIRAS:044897

47624

Assinado de forma digital por  
CLEVERSON  
FILGUEIRAS:04489747624  
Dados: 2022.06.29 19:11:12 -03'00'

---

Prof. Dr. Cleverson Filgueiras  
(UFLA)

---

Prof. Dr. Sergio Vitorino de Borba Gonçalves  
(Orientador - PPGFis)

---

Prof. Dr. Wanderlã Luis Scopel  
(PPGFis/UFES)

---

Prof<sup>a</sup>. Dr<sup>a</sup>. Denise da Costa Assafrão de Lima  
(Coorientadora - DFis/UFES)

Vitória-ES, 29 de junho de 2022



UNIVERSIDADE FEDERAL DO ESPÍRITO SANTO

**PROTOCOLO DE ASSINATURA**



O documento acima foi assinado digitalmente com senha eletrônica através do Protocolo Web, conforme Portaria UFES nº 1.269 de 30/08/2018, por  
WANDERLA LUIS SCOPEL - SIAPE 1537668  
Departamento de Física - DF/CCE  
Em 30/06/2022 às 11:46

Para verificar as assinaturas e visualizar o documento original acesse o link:  
<https://api.lepisma.ufes.br/arquivos-assinados/504801?tipoArquivo=O>



UNIVERSIDADE FEDERAL DO ESPÍRITO SANTO

**PROTOCOLO DE ASSINATURA**



O documento acima foi assinado digitalmente com senha eletrônica através do Protocolo Web, conforme Portaria UFES nº 1.269 de 30/08/2018, por  
DENISE DA COSTA ASSAFRAO DE LIMA - SIAPE 1783245  
Departamento de Física - DF/CCE  
Em 01/07/2022 às 12:08

Para verificar as assinaturas e visualizar o documento original acesse o link:  
<https://api.lepisma.ufes.br/arquivos-assinados/505648?tipoArquivo=O>



UNIVERSIDADE FEDERAL DO ESPÍRITO SANTO

**PROTOCOLO DE ASSINATURA**



O documento acima foi assinado digitalmente com senha eletrônica através do Protocolo Web, conforme Portaria UFES nº 1.269 de 30/08/2018, por  
SERGIO VITORINO DE BORBA GONCALVES - SIAPE 3173376  
Departamento de Física - DF/CCE  
Em 01/07/2022 às 12:34

Para verificar as assinaturas e visualizar o documento original acesse o link:  
<https://api.lepisma.ufes.br/arquivos-assinados/505665?tipoArquivo=O>

# Agradecimentos

Agradeço aos professores Dr. Sergio Vitorino de Borba Gonçalves e Dra. Denise da Costa Assafrão de Lima pela paciência, oportunidade e orientação deste trabalho.

Agradeço a minha família, em especial minha mãe e irmãs, por todo apoio dado durante minhas dificuldades pessoais nos últimos tempos.

Agradeço também meus amigos, em especial ao Marcus Vinícius, por me incentivarem a tentar mesmo eu não acreditando em mim mesmo.





# Resumo

Este trabalho é dedicado ao estudo de cristais fotônicos de uma dimensão de periodicidade, com ênfase na aplicação para células solares e no desenvolvimento de um software para simulação dos perfis de reflectância e transmitância desses cristais. A validação do software foi através de comparação dos resultados produzidos com os encontrados na literatura para os mesmos materiais. O software desenvolvido também foi utilizado em um estudo comparativo dos perfis de reflectância e transmitância de um mesmo material sob diferentes estruturas.

**Palavras-chave:** Cristais fotônicos; Células solares; Reflectância; Transmitância; Desenvolvimento de software;

# Abstract

This work is dedicated to the study of one-dimensional periodicity photonic crystals, with emphasis on the application to solar cells and on the development of a software for simulating the reflectance and transmittance profiles of these crystals. The software validation was performed by comparing the results produced with those found in the literature for the same materials. The developed software was also used in a comparative study of the reflectance and transmittance profiles of the same material under different structures.

**Keywords:** Photonic crystals; Solar cells; Reflectance; Transmittance; Software development;

# Sumário

1	INTRODUÇÃO	8
2	REVISÃO TEÓRICA	11
2.1	Eletromagnetismo de meios periódicos como problema de autovalores	11
2.2	Método da matriz de transferência	13
3	NOSSO CÓDIGO	17
4	APLICAÇÕES DO CÓDIGO CF1DSIM EM CRISTAIS FOTÔNICOS	19
4.1	Sistema 1: a-Si:H com a-SiNx:H	19
4.2	Sistema 2: sílica e óxido de ítrio, com defeito de granada de gálio de térbio	20
4.3	Sistema 3: sílica e óxido de titânio com defeito de sulfeto de cádmio	22
5	APLICAÇÃO À CÉLULAS SOLARES CONSTRUÍDAS COM CRISTAIS FOTÔNICOS	30
6	CONCLUSÃO	45
	REFERÊNCIAS	46
A	ARQUITETURA DO CÓDIGO CF1D	47

# 1 Introdução

Quando falamos da questão energética, sabemos que as principais fontes de energia convencionais utilizadas pela sociedade são provenientes de fontes não renováveis. Temos como exemplo o petróleo, o carvão mineral e gás natural.

Para a maioria dessas fontes, a reposição é muito lenta e resultante de um processo de milhões de anos sob condições específicas de pressão e temperatura. A utilização dessas fontes de energia são responsáveis em grande parte pela emissão de gases que contribuem para o efeito estufa da atmosfera se agravar mais rapidamente.

As fontes de energia consideradas renováveis são consideradas inesgotáveis. A geração de energia elétrica através delas pode variar devido a sazonalidades, por exemplo, a energia eólica não pode ser produzida quando não há vento e a energia hidráulica possui déficit de produção em períodos de seca.

Na perspectiva deste trabalho, temos como foco a energia solar, uma fonte de energia considerada inesgotável e comumente associada a uma solução para um consumo consciente e sustentável, [Peters \(2009\)](#). Para a utilizarmos, temos que lidar com várias limitações: a tecnologia atual, a geografia local e as sazonalidades da natureza.

Ao observarmos os efeitos da radiação solar na superfície do planeta, temos a limitação dos períodos do dia devido a rotação do planeta e a limitação do ângulo de incidência da radiação solar devido à latitude local.

A principal forma de converter radiação solar em energia elétrica é com o uso de células solares, também chamadas de células fotovoltaicas. Em um célula fotovoltaica, a radiação solar interage com uma estrutura de duplas de materiais semicondutores dopados, usualmente feitos a partir de sílica e com dopagem utilizando boro e fósforo, e uma fina grade metálica gerando uma corrente elétrica.

Sendo assim, o funcionamento de uma célula fotovoltaica depende diretamente da quantidade de radiação solar que chega até ela, apesar de que nem toda incidência será transformada em energia. Isso acontece porque nem toda a radiação incidente irá possuir cargas de energia o suficiente para liberar os elétrons do semicondutor. Além disso, a radiação solar incidente no semicondutor das células acaba em parte sendo bloqueada em certas arquiteturas de montagem das mesmas, por exemplo pela grade metálica que forma a malha por onde a corrente irá fluir.

Assim sendo, temos a necessidade de maximizar a conversão dessa radiação solar incidente nas placas em energia elétrica. Uma das formas mais promissoras atualmente tem sido o uso de camadas de cristais fotônicos na construção dessas células solares.

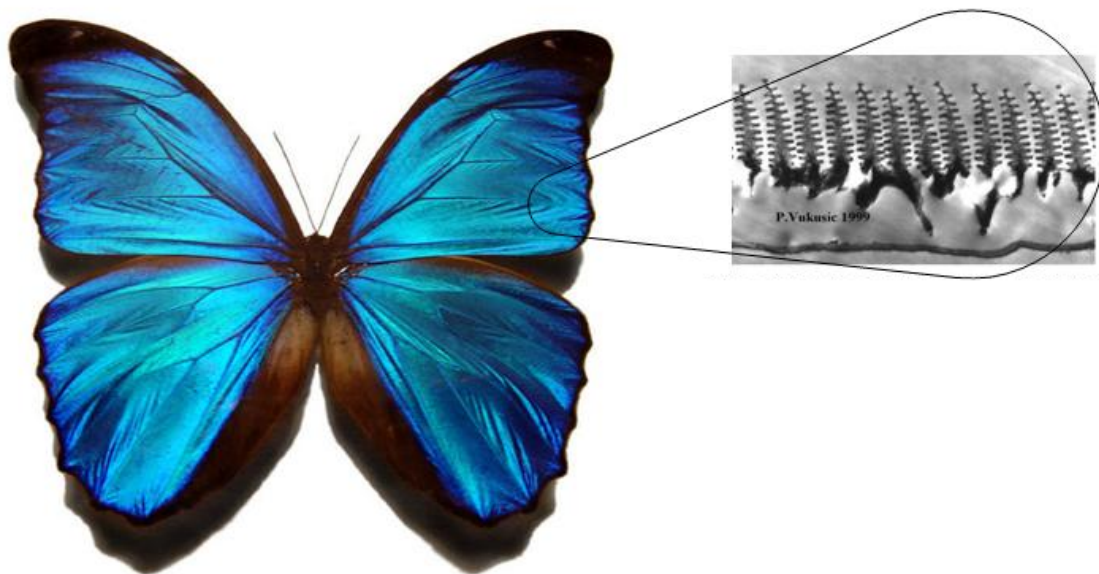


Figura 1 – A borboleta *Morpho rhetenor* é um exemplo de CF na natureza e mostra forte iridescência azul. Ao lado temos um corte transversal feito com um Microscópio eletrônico de transmissão (MET) de uma parte da asa que revela a estrutura em formato de árvore de natal responsável pela iridescência azul. Reproduzido de [Pris et al. \(2012\)](#).

Cristais fotônicos são estruturas ópticas na escala nanométrica com índice de refração alternados periodicamente. Essas estruturas quando atingidas pela luz e produzidas a partir de semicondutores possuem a condutividade de elétrons afetada. Essas estruturas cristalinas podem existir em uma, duas ou três dimensões de periodicidade, figura 2, e ocorrem na natureza principalmente na coloração e reflexão de animais, ver [Kinoshita; Yoshioka \(2005\)](#), conforme figura 1. Quando produzidos artificialmente possuem uma grande variedade de aplicações práticas como células solares, guias de ondas, cavidades ressonantes, espelhos, transistores e fibras de cristais fotônicos.

O objetivo central deste trabalho foi fazer uma revisão teórica sobre cristais fotônicos de uma dimensão de periodicidade e com isso, o estudo do eletromagnetismo de meios periódicos como problema de autovalores e o método da matriz de transferência.

Ao analisarmos o eletromagnetismo na perspectiva dessas estruturas cristalinas estudando o seu comportamento em um ambiente de meios periódicos. Ao desenvolvermos as equações de Maxwell chegamos nas equações de Helmholtz e fazemos uso das soluções matemáticas da equação de Schrodinger visto o isomorfismo entre elas, assim sendo, temos o ponto de vista de um problema de autovalores para o eletromagnetismo de meios periódicos.

Assim, unimos os resultados com os modos normais de propagação de ondas entre meios com índices de refração diferentes fazendo uso do teorema de Bloch [[Leite](#)

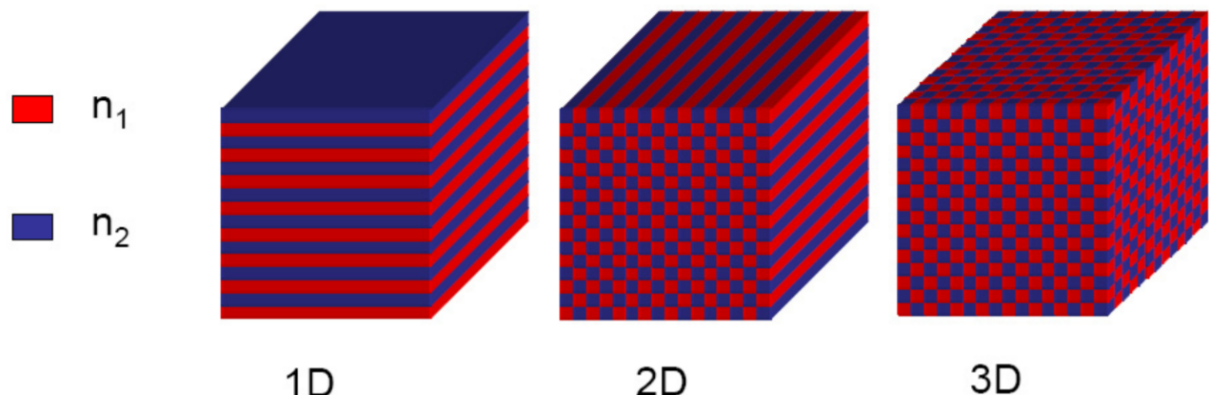


Figura 2 – Ilustração de tipos de CF de uma dimensão (1D), duas dimensões (2D) e três dimensões (3D). As cores diferentes representam materiais com índices de refração distintos. Retirado de Peters (2009).

(2013)], podendo assim descrever eletromagnetismo e sua propagação nesses meios de forma matricial através do chamado método da matriz de transferência (MMT) obtendo por fim os perfis de reflectância e transmitância dos cristais fotônicos estudados.

Como livro texto principal foi utilizado o “Photonic Crystals: Molding the Flow of Light” (sem tradução oficial), de Joannopoulos et al. (2008), com o intuito de guiar os estudos da revisão teórica contemplando os principais pontos, sendo eles: o eletromagnetismo de meios periódicos como problema de autovalores e o método da matriz de transferência.

Juntamente ao estudo, foi planejado o desenvolvimento e programação de uma rotina de cálculos que produzissem os valores de transmissibilidade e refletividade a partir de uma entrada com as características de um cristal. Como resultados dessa segunda parte, conseguimos produzir um programa com interface gráfica de usuário que executa tais cálculos, onde o batizamos de Simulador de cristais fotônicos em uma dimensão (SimCF1D).

Para o desenvolvimento da rotina de cálculos, partimos do estudo do eletromagnetismo usando o método da matriz de transferência como principal ferramenta física. A parte computacional, utilizamos da linguagem de programação Python, para a execução das contas, e algumas de suas bibliotecas como o NumPy e o Pandas para manipulação dos dados, o Matplotlib para gerar os ajustes gráficos e o TKinter para produzir a interface gráfica com o usuário.

Usando os materiais e resultados obtidos nos artigos Krc et al. (2009), Aluicio-Sarduy et al. (2018), Wang et al. (2018) para testagem e calibração do nosso código e por fim, obtivemos alguns resultados próprios a partir estruturas de cristais de material selecionado por nós levando em consideração o contexto da aplicação de cristais fotônicos para construção de células solares.

## 2 Revisão teórica

De acordo com livro-texto principal utilizado [Joannopoulos et al. \(2008\)](#) e outras referências extras estudadas, [Han \(2018\)](#), [Johnson; Joannopoulos \(2000\)](#) e [Vera \(2009\)](#), temos o desenvolvimento das relações físicas nas subseções seguintes.

### 2.1 Eletromagnetismo de meios periódicos como problema de autovalores

Para caracterizarmos o comportamento da propagação da radiação em cristais fotônicos, precisamos antes descrever os fenômenos eletromagnéticos de modo geral e para a particularidade das estruturas dielétricas periódicas. Para tanto fazemos uso das equações de Maxwell, que descrevem como correntes e cargas elétrica atuam como fontes de campos magnéticos e elétricos assim como descrevem que campos elétricos e magnéticos que mudam ao longo do tempo podem criar campos magnéticos e elétricos, respectivamente, variantes também no tempo. No SI essas equações são:

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{B} = 0, \quad (2.1)$$

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{D} = \rho, \quad (2.2)$$

$$\vec{\nabla} \times \vec{H} - \frac{\partial \vec{D}}{\partial t} = \vec{J}, \quad (2.3)$$

$$\vec{\nabla} \times \vec{E} + \frac{\partial \vec{B}}{\partial t} = 0, \quad (2.4)$$

onde  $\vec{E}$  e  $\vec{H}$  são os campos elétricos e magnéticos macroscópicos;  $\vec{D}$  e  $\vec{B}$  são os campos de deslocamento elétrico e de indução magnética;  $\rho$  e  $\vec{J}$  são a carga e a densidade de corrente.

Ao tratarmos de um meio dielétrico periódico, temos que o mesmo é composto de materiais dielétricos distribuídos em uma região de forma homogênea e pode ser descrito por sua posição no espaço. Possui invariância de sua estrutura no tempo, permite propagação de radiação e não possui fontes de luz, isto é,  $\rho$  e  $\vec{J}$  são nulos.

Para esse tipo de meio linear, macroscópico, anisotrópico e primariamente transparente, os campos se relacionam segundo

$$\vec{D}(\vec{r}) = \epsilon_0 \epsilon(\vec{r}) \vec{E}(\vec{r}), \quad (2.5)$$



$$\vec{B}(\vec{r}) = \mu_0 \mu(\vec{r}) \vec{H}(\vec{r}), \quad (2.6)$$

onde  $\epsilon_0 \approx 8.854 \times 10^{-12}$  Farad/m e  $\mu_0 = 4\pi \times 10^{-7}$  Henry/m. Para a maioria dos materiais dielétricos temos que a permeabilidade magnética  $\mu(\vec{r}) \approx 1$  e assim podemos utilizar como simplificação

$$\vec{B} = \mu_0 \vec{H}. \quad (2.7)$$

Para esse caso, temos que  $\epsilon$  é proporcional ao quadrado do índice de refração do meio e portanto relacionável a lei de Snell, isto é,  $n = \sqrt{\epsilon\mu}$ .

Sendo assim podemos reescrever as equações de Maxwell como

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{H}(\vec{r}, t) = 0, \quad (2.8)$$

$$\vec{\nabla} \cdot [\epsilon(\vec{r}) \vec{E}(\vec{r}, t)] = 0, \quad (2.9)$$

$$\vec{\nabla} \times \vec{H}(\vec{r}, t) - \epsilon_0 \epsilon(\vec{r}) \frac{\partial \vec{E}(\vec{r}, t)}{\partial t} = 0, \quad (2.10)$$

$$\vec{\nabla} \times \vec{E}(\vec{r}, t) + \mu_0 \frac{\partial \vec{H}(\vec{r}, t)}{\partial t} = 0. \quad (2.11)$$

Devido a linearidade dessas equações, podemos separar as dependências espaciais das temporais utilizando das formas de perfil

$$\vec{H}(\vec{r}, t) = \vec{H}(\vec{r}) e^{-i\omega t}, \quad (2.12)$$

$$\vec{E}(\vec{r}, t) = \vec{E}(\vec{r}) e^{-i\omega t}. \quad (2.13)$$

Inserindo os perfis acima nas equações 2.8 e 2.9 obtemos

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{H}(\vec{r}) = 0, \quad (2.14)$$

$$\vec{\nabla} \cdot [\epsilon(\vec{r}) \vec{E}(\vec{r})] = 0. \quad (2.15)$$

Das equações acima, temos que não existem pontos de fontes e sumidouros dos campos elétrico e magnético no meio em questão. De forma análoga, temos uma interpretação de uma onda plana com vetor de onda  $\vec{k}$

$$\vec{H}(\vec{r}) = \vec{a} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}}, \quad (2.16)$$

$$\vec{a} \cdot \vec{k} = 0, \quad (2.17)$$

onde 2.17 é a condição de transversalidade da onda e  $k = \omega/c$ .

Voltamos agora a nossa atenção para as equações 2.10 e 2.11 e fazendo uso dos perfis 2.12 e 2.13 para obtermos a forma espacial

$$\vec{\nabla} \times \vec{E}(\vec{r}) - i\omega\mu_0\vec{H}(\vec{r}) = 0, \quad (2.18)$$

$$\vec{\nabla} \times \vec{H}(\vec{r}) + i\omega\epsilon_0\epsilon(\vec{r})\vec{E}(\vec{r}) = 0. \quad (2.19)$$

Dividindo a equação 2.19 por  $\epsilon(\vec{r})$

$$\frac{1}{\epsilon(\vec{r})}\vec{\nabla} \times \vec{H}(\vec{r}) + i\omega\epsilon_0\vec{E}(\vec{r}) = 0. \quad (2.20)$$

Aplicando um rotacional em 2.20, temos

$$\vec{\nabla} \times \frac{1}{\epsilon(\vec{r})}\vec{\nabla} \times \vec{H}(\vec{r}) + i\omega\epsilon_0\vec{\nabla} \times \vec{E}(\vec{r}) = 0. \quad (2.21)$$

Substituindo 2.18 na equação acima, teremos

$$\vec{\nabla} \times \frac{1}{\epsilon(\vec{r})}\vec{\nabla} \times \vec{H}(\vec{r}) - \omega^2\epsilon_0\mu_0\vec{H}(\vec{r}) = 0. \quad (2.22)$$

Sendo  $c = \frac{1}{\sqrt{\epsilon_0\mu_0}}$ , reescrevemos 2.22 como

$$\vec{\nabla} \times \frac{1}{\epsilon(\vec{r})}\vec{\nabla} \times \vec{H}(\vec{r}) = \frac{\omega^2}{c^2}\vec{H}(\vec{r}). \quad (2.23)$$

Tomando o lado esquerdo da equação 2.23 como sendo um operador  $\Theta$  aplicado em  $\vec{H}(\vec{r})$  obtemos

$$\Theta\vec{H}(\vec{r}) = \left(\frac{\omega}{c}\right)^2\vec{H}(\vec{r}), \quad (2.24)$$

onde então

$$\Theta\vec{H}(\vec{r}) = \vec{\nabla} \times \left(\frac{1}{\epsilon(\vec{r})}\vec{\nabla} \times \vec{H}(\vec{r})\right). \quad (2.25)$$

A partir de 2.24 temos o eletromagnetismo de meios periódicos como um problema de autovalores, onde juntamente com as equações 2.8 e 2.9 e o meio  $\epsilon$  podemos encontrar todas os valores de  $\vec{H}(\vec{r})$ .

## 2.2 Método da matriz de transferência

Ao interpretarmos o eletromagnetismo de meios periódicos como um problema de autovalores, temos que a propagação de ondas eletromagnéticas se reduz a um problema matricial, ver Byrnes (2016). Em especial para as nossas análises temos uma direção espacial de periodicidade dos materiais.

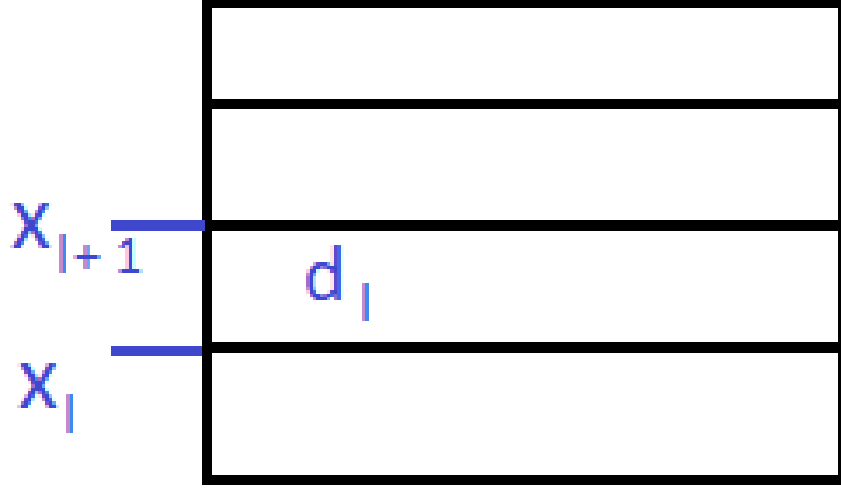


Figura 3 – Ilustração de camadas de um cristal fotônico com uma dimensão de periodicidade, onde  $l$  o índice das camadas (com  $l = 0, 1, 2, \dots, N, s$ ),  $x_l$  a localização da interface entre as camadas de índice  $l$  e  $l + 1$ ,  $d_l$  sendo a espessura das camadas ( $d_l = x_l - x_{l-1}$ ).

Sendo  $l$  o índice das camadas (com  $l = 0, 1, 2, \dots, N, s$ ),  $x_l$  a localização da interface entre as camadas de índice  $l$  e  $l + 1$ ,  $d_l$  sendo a espessura das camadas ( $d_l = x_l - x_{l-1}$ ), como na figura 3,  $n_l$  o índice de refração da camada  $l$ ,  $n_0$  o índice de refração do meio incidente e  $n_s$  o índice de refração do substrato, temos que para  $x < x_0$ :

$$E(x) = a_0 e^{-ik_0 x(x-x_0)} + b_0 e^{ik_0 x(x-x_0)}, \quad (2.26)$$

para  $x_{l-1} < x < x_l$ :

$$E(x) = a_l e^{-ik_l x(x-x_l)} + b_l e^{ik_l x(x-x_l)}, \quad (2.27)$$

e para  $x_N < x$ :

$$E(x) = a_s e^{-ik_s x(x-x_N)} + b_s e^{ik_s x(x-x_N)}. \quad (2.28)$$

Ao analisarmos as regiões de interface temos os coeficientes  $a_l$  e  $b_l$  sendo as amplitudes das ondas e temos o componente  $x$  do vetor de onda  $k_{lx}$ , sendo:

$$k_{lx} = n_l \frac{\omega}{c} \cos \theta_l. \quad (2.29)$$

Ao aplicar as condições de contorno resultantes da continuidade dos campos elétricos  $E_y$  e  $H_z$  para o caso de ondas transversais elétricas (tipo s):

$$E_{ls} + E'_{ls} = E_{(l+1)s} + E'_{(l+1)s}, \quad (2.30)$$

$$\sqrt{\frac{\epsilon_l}{\mu_l}}(E_{ls} - E'_{ls}) \cos \theta_l = \sqrt{\frac{\epsilon_{l+1}}{\mu_{l+1}}}(E_{(l+1)s} - E'_{(l+1)s}) \cos \theta_{l+1}, \quad (2.31)$$

podemos escrever a propagação de uma onda entre duas interfaces na forma matricial chamada de matriz dinâmica ( $D_l$ ):

$$D_l \begin{pmatrix} E_{ls} \\ E'_{ls} \end{pmatrix} = D_{l+1} \begin{pmatrix} E_{(l+1)s} \\ E'_{(l+1)s} \end{pmatrix}, \quad (2.32)$$

onde

$$D_l = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ n_l \cos \theta_l & -n_l \cos \theta_l \end{pmatrix}. \quad (2.33)$$

Da mesma forma, para o caso das ondas transversais magnéticas (tipo p), temos ao aplicar as condições de contorno resultantes da continuidade dos campos  $E_z$  e  $H_y$  :

$$E_{lp} + E'_{lp} = E_{(l+1)p} + E'_{(l+1)p}, \quad (2.34)$$

$$\sqrt{\frac{\epsilon_l}{\mu_l}}(E_{lp} - E'_{lp}) \cos \theta_l = \sqrt{\frac{\epsilon_{l+1}}{\mu_{l+1}}}(E_{(l+1)p} - E'_{(l+1)p}) \cos \theta_{l+1}, \quad (2.35)$$

que reescrevendo na forma matricial fica:

$$D_l \begin{pmatrix} E_{lp} \\ E'_{lp} \end{pmatrix} = D_{l+1} \begin{pmatrix} E_{(l+1)p} \\ E'_{(l+1)p} \end{pmatrix}, \quad (2.36)$$

onde

$$D_l = \begin{pmatrix} \cos \theta_l & \cos \theta_l \\ n_l & -n_l \end{pmatrix}. \quad (2.37)$$

Ao reescrevermos essas equações matriciais dinâmicas em relação aos coeficientes a e b obtemos:

$$\begin{pmatrix} a_0 \\ b_0 \end{pmatrix} = D_0^{-1} D_1 \begin{pmatrix} a'_1 \\ b'_1 \end{pmatrix}, \quad (2.38)$$

$$\begin{pmatrix} a'_1 \\ b'_1 \end{pmatrix} = P_1 \begin{pmatrix} a_1 \\ b_1 \end{pmatrix}, \quad (2.39)$$

$$\begin{pmatrix} a_l \\ b_l \end{pmatrix} = P_l D_l^{-1} D_{l+1} \begin{pmatrix} a_{l+1} \\ b_{l+1} \end{pmatrix}, \quad (2.40)$$

onde P é a matriz de propagação exponencial:

$$P_l = \begin{pmatrix} e^{i\phi_l} & 0 \\ 0 & e^{-i\phi_l} \end{pmatrix}, \quad (2.41)$$

com  $\phi_l = k_{lx}d$  sendo a fase da onda propagada. Assim a relação desde o meio incidente até o substrato fica:

$$\begin{pmatrix} a_0 \\ b_0 \end{pmatrix} = D_0^{-1} \left( \prod_{l=1}^N D_l P_l D_l^{-1} \right) D_s \begin{pmatrix} a_s \\ b_s \end{pmatrix}, \quad (2.42)$$

$$\begin{pmatrix} a_0 \\ b_0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} M_{11} & M_{12} \\ M_{21} & M_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_s \\ b_s \end{pmatrix}, \quad (2.43)$$

$$\begin{pmatrix} a_0 \\ b_0 \end{pmatrix} = M \begin{pmatrix} a_s \\ b_s \end{pmatrix}, \quad (2.44)$$

com M sendo a matriz de transferência, a relação que descreve a propagação do meio incidente até o substrato. Tiramos os coeficiente de transmitância (t) e reflectância (r) a partir de:

$$t = \frac{b_0}{a_0}, \quad (2.45)$$

$$r = \frac{a_s}{a_0}, \quad (2.46)$$

de outra forma

$$t = \left| \frac{1}{M_{11}} \right| \quad (2.47)$$

$$r = \left| \frac{M_{21}}{M_{11}} \right| \quad (2.48)$$

Sendo assim, temos que as probabilidade de trasmitância e reflectância são dadas por:

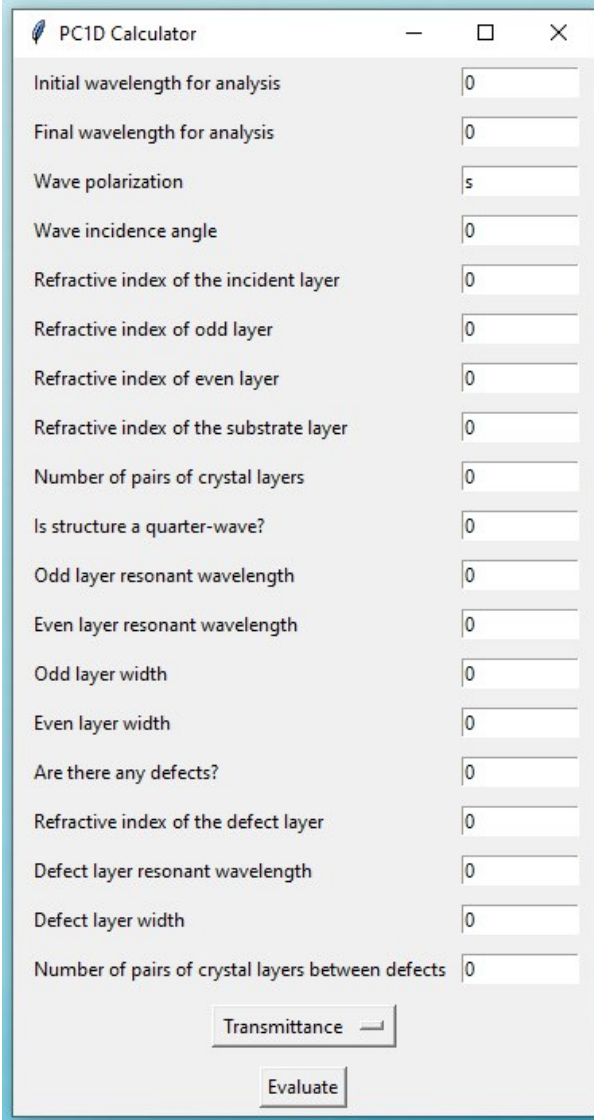
$$T = t^2 = \left| \frac{1}{M_{11}} \right|^2, \quad (2.49)$$

$$R = r^2 = \left| \frac{M_{21}}{M_{11}} \right|^2. \quad (2.50)$$

### 3 Nosso código

O programa nomeado de PC1D (Photonic Crystal in One Dimension), que pode ser encontrado em <https://github.com/fleonemaia/>, podemos dividir em duas partes: a interface gráfica utilizada pelo usuário (*Graphic user interface, GUI*) e a rotina de cálculos geradas pelo código.

Construímos uma interface gráfica simples consistente em caixas de entradas de dados (figura 4) e um menu expansível (figura 5) com as possibilidades já codificadas de cálculos e seus devidos resultados apresentados por meio de ajustes gráficos, onde esses resultados por sua vez podem ser vistos ao longo do texto desta dissertação. A arquitetura do código do programa está descrita no anexo A.



The image shows a screenshot of a software window titled "PC1D Calculator". The window contains a list of input fields for various parameters, each with a numerical value of 0 or a letter 's'. At the bottom, there are two buttons: "Transmittance" and "Evaluate".

Parameter	Value
Initial wavelength for analysis	0
Final wavelength for analysis	0
Wave polarization	s
Wave incidence angle	0
Refractive index of the incident layer	0
Refractive index of odd layer	0
Refractive index of even layer	0
Refractive index of the substrate layer	0
Number of pairs of crystal layers	0
Is structure a quarter-wave?	0
Odd layer resonant wavelength	0
Even layer resonant wavelength	0
Odd layer width	0
Even layer width	0
Are there any defects?	0
Refractive index of the defect layer	0
Defect layer resonant wavelength	0
Defect layer width	0
Number of pairs of crystal layers between defects	0

Buttons: Transmittance, Evaluate

Figura 4 – GUI 1.

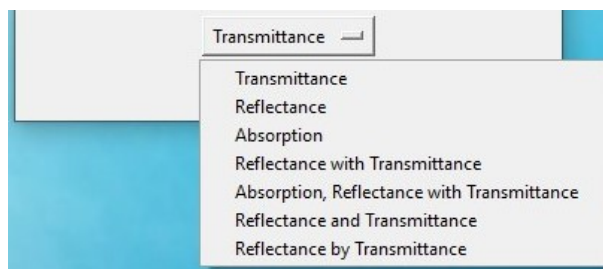


Figura 5 – GUI 3.

## 4 Aplicações do código CF1DSim em cristais fotônicos

Neste capítulo, temos a apresentação de reproduções feitas referentes aos materiais utilizados em [Aluicio-Sarduy et al. \(2018\)](#), [Krc et al. \(2009\)](#) e [Wang et al. \(2018\)](#), tanto para a calibração do programa desenvolvido, quanto para testes de coerência física.

Para todas as reproduções executadas, foram utilizados como valores de índice de refração do meio incidente o ar ( $n_{Inc} = 1,0$ ) e índice de refração do substrato o vidro ( $n_{Subs} = 1,52$ ) devido as referências reproduzidas também utilizarem esses valores.

### 4.1 Sistema 1: a-Si:H com a-SiNx:H

[Krc et al. \(2009\)](#) foi utilizado para uma reprodução dos espectros de reflectância e transmitância de acordo com os resultados encontrados nele. Sendo assim, tivemos como intuito a reprodução dos resultados dessa referência para calibrarmos o programa desenvolvido por nós e verificar se a implementação do código foi executada corretamente.

Como valores para a construção do cristal fotônico, utilizamos:

- Índice de refração do material da camada ímpar sendo a-Si:H ( $n_1 = 3,83$ ) com espessura de 50 e 100 nanômetros.
- Índice de refração do material da camada par sendo a-SiNx:H ( $n_2 = 1,81$ ) com espessura de 70 e 140 nanômetros.
- Utilizamos que o ângulo de incidência da onda eletromagnética no material foi normal a superfície do mesmo (zero graus) e a reprodução dos espectros foi feito para ondas do tipo s.
- Os limites dos espectros reproduzidos foram de 500 a 1500 nanômetros.

Dessa forma, obtemos três configurações de cristais fotônicos unidimensionais utilizando seis pares periódicos de silício amorfo, a-Si:H com a-SiNx:H, onde o primeiro caso é para as espessuras de 50 e 100 nanômetros, o segundo é para espessuras de 70 e 140 nanômetros e o terceiro caso é um acoplamento das duas estruturas anteriores. Ao observar o resultado do último, temos que a estrutura de banda dos dois casos anteriores foi somada, assim temos a indicação de que podemos acoplar diferentes estruturas de cristais fotônicos para obtermos estrutura de bandas maiores, menores e até mesmo picos de transmitância, o que foi testado e será apresentado no capítulo de Simulações.



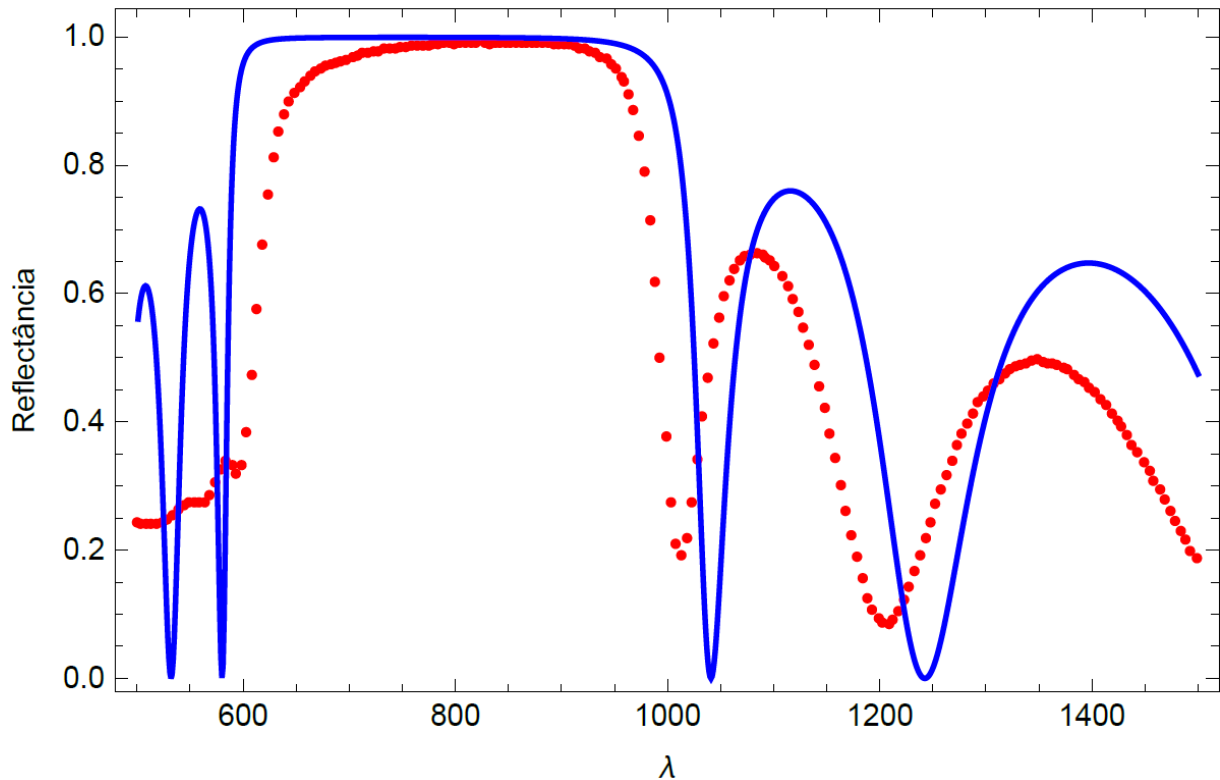


Figura 6 – Simulação das linhas de transmitância (linhas vermelhas) e reflectância (linhas azuis), essas dispostas juntamente com os dados experimentais, conforme [Krc et al. \(2009\)](#). Da esquerda para a direita temos a simulação para 6 pares periódicos de silício amorfo, a-Si:H com a-SiNx:H, com espessuras de 50nm e 100nm.

Os resultados estão representados nas figuras 6, 7 e 8 e através da análise dos mesmos comparando com os espectros de reflectância encontrados em [Krc et al. \(2009\)](#) temos um indício que a implementação da rotina do programa está aproximada dos observado e portanto prosseguimos para a reproduções subsequentes.

## 4.2 Sistema 2: sílica e óxido de ítrio, com defeito de granada de gálio de térbio

Ao analisarmos [Aluicio-Sarduy et al. \(2018\)](#), optamos para uma reprodução adaptada utilizando os materiais discutidos nele, sendo assim, construímos um cristal fotônico de uma dimensão com 16 pares periódicos de sílica ( $SiO_2$ ) e óxido de ítrio ( $Y_2O_3$ ) e com ambos materiais apresentando camadas de 50 nanômetros. Ao tratarmos de cristais fotônicos, quando temos camadas de um material diferente dos materiais que formam o cristal, dizemos que o cristal possui um defeito. Ao tratarmos da construção deste cristal, fizemos uso de defeitos de granada de gálio de térbio (TGG) com a mesma espessura.

Como valores para a construção desses cristais, utilizamos:

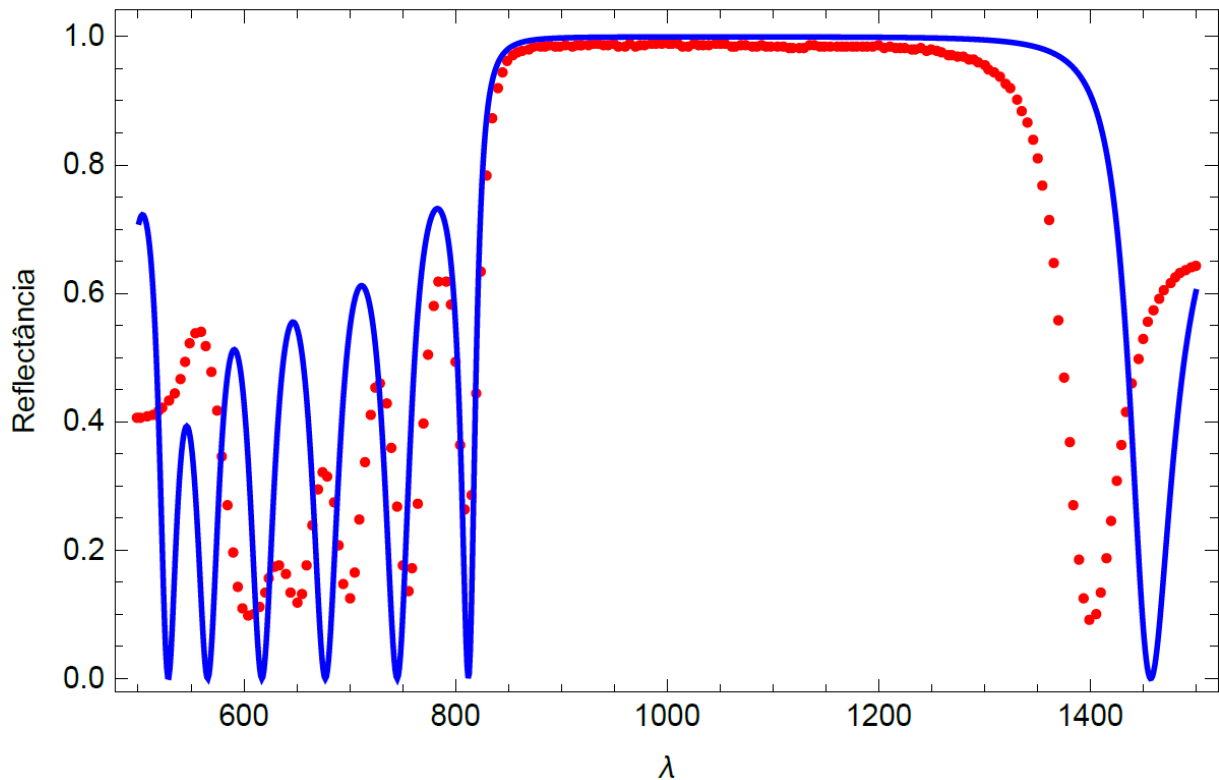


Figura 7 – Simulação das linhas de transmitância (linhas vermelhas) e reflectância (linhas azuis), essas dispostas juntamente com os dados experimentais, conforme [Krc et al. \(2009\)](#). Da esquerda para a direita temos a simulação para 6 pares periódicos de silício amorfo, a-Si:H com a-SiNx:H, com espessuras de 70nm e 140nm

- Índice de refração do material da camada ímpar sendo  $SiO_2$  ( $n_1 = 1,4585$ ) com espessura de 50 nanômetros.
- Índice de refração do material da camada par sendo  $Y_2O_3$  ( $n_2 = 1,9307$ ) com espessura de 50 nanômetros.
- Índice de refração do material do defeito sendo  $TGG$  ( $n_{Def} = 1,95$ ) com espessura de 50 nanômetros.
- Utilizamos que o ângulo de incidência da onda eletromagnética no material foi normal a superfície do mesmo (zero graus) e a reprodução dos espectros foi feito para ondas do tipo s.
- Os limites dos espectros reproduzidos foram de 250 a 450 nanômetros.

As reproduções para esses casos estão dispostas nas figuras 9, 10, 11 e 12. Na figura 9 temos a construção de um cristal simples com esses materiais. Na figura 10 temos esse mesmo cristal porém com a adição de um defeito de TGG no meio da estrutura e com isso vemos um surgimento de um pico de transmitância dentro da estrutura de bandas, ver [Araújo \(2012\)](#). Nas outras duas figuras dessa reprodução temos o uso de dois defeitos de

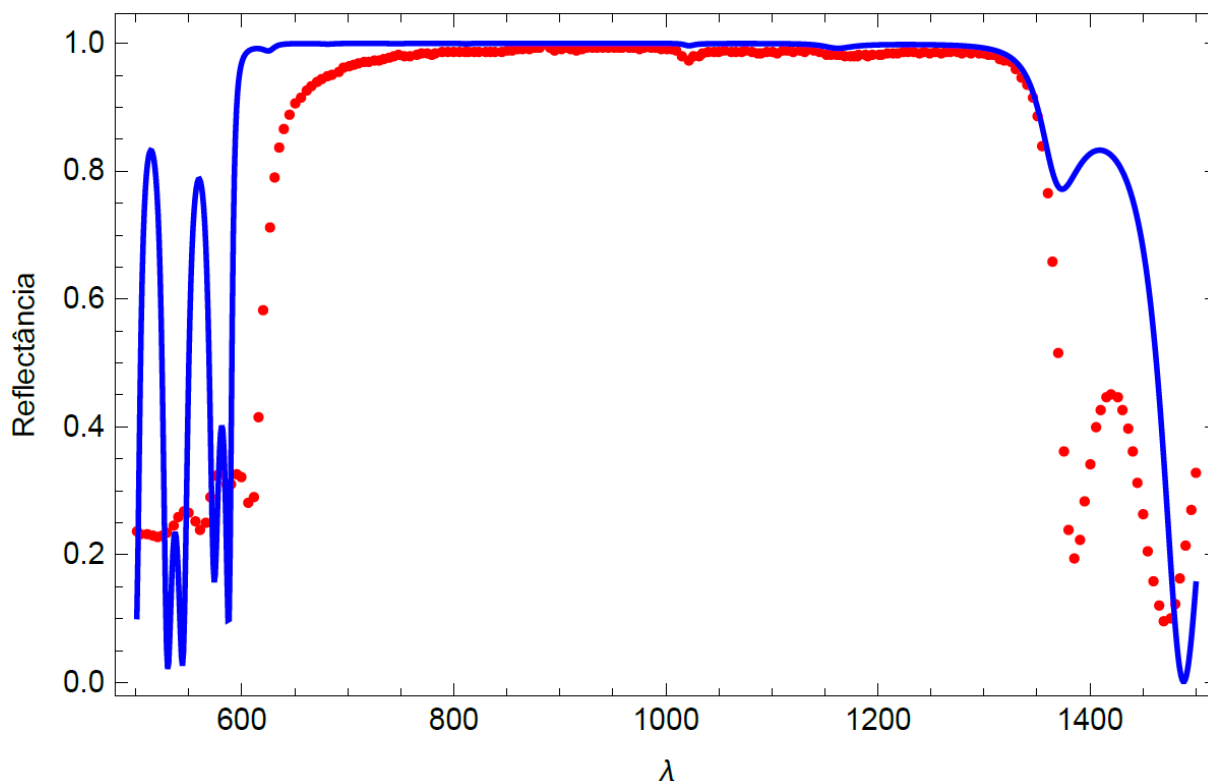


Figura 8 – Simulação das linhas de transmitância (linhas vermelhas) e reflectância (linhas azuis), essas dispostas juntamente com os dados experimentais, conforme [Krc et al. \(2009\)](#). Da esquerda para a direita temos a simulação para 6 pares periódicos de silício amorfo, a-Si:H com a-SiNx:H, com espessuras de 50nm e 100nm juntamente com mais 6 pares periódicos do mesmo material com espessura de 70nm e 140nm.

TGG separados na figura 11 por 4 pares periódicos e na figura 12 por 8 pares periódicos, onde esses pares são do mesmo material do cristal, ou seja, de  $SiO_2 - Y_2O_3$ .

Como podemos ver, ao variarmos a quantidade de camadas entre os defeitos, variamos também a distância entre os picos de transmitância que aparecem dentro da estrutura de bandas podendo, como no caso da figura 12, somar esses picos e formar um único, mais robusto e de maior intensidade.

### 4.3 Sistema 3: sílica e óxido de titânio com defeito de sulfeto de cádmio

Extraindo de [Wang et al. \(2018\)](#), que trata da construção de células solares com o uso de cristais fotônicos em duas dimensões de periodicidade, os materiais tratados no texto, para construirmos simulações de cristais fotônicos com periodicidade em uma dimensão e 10 pares periódicos de sílica e óxido de titânio, com espessuras das camadas obedecendo a estrutura de um quarto de onda e fazendo uso de camadas de defeitos muito

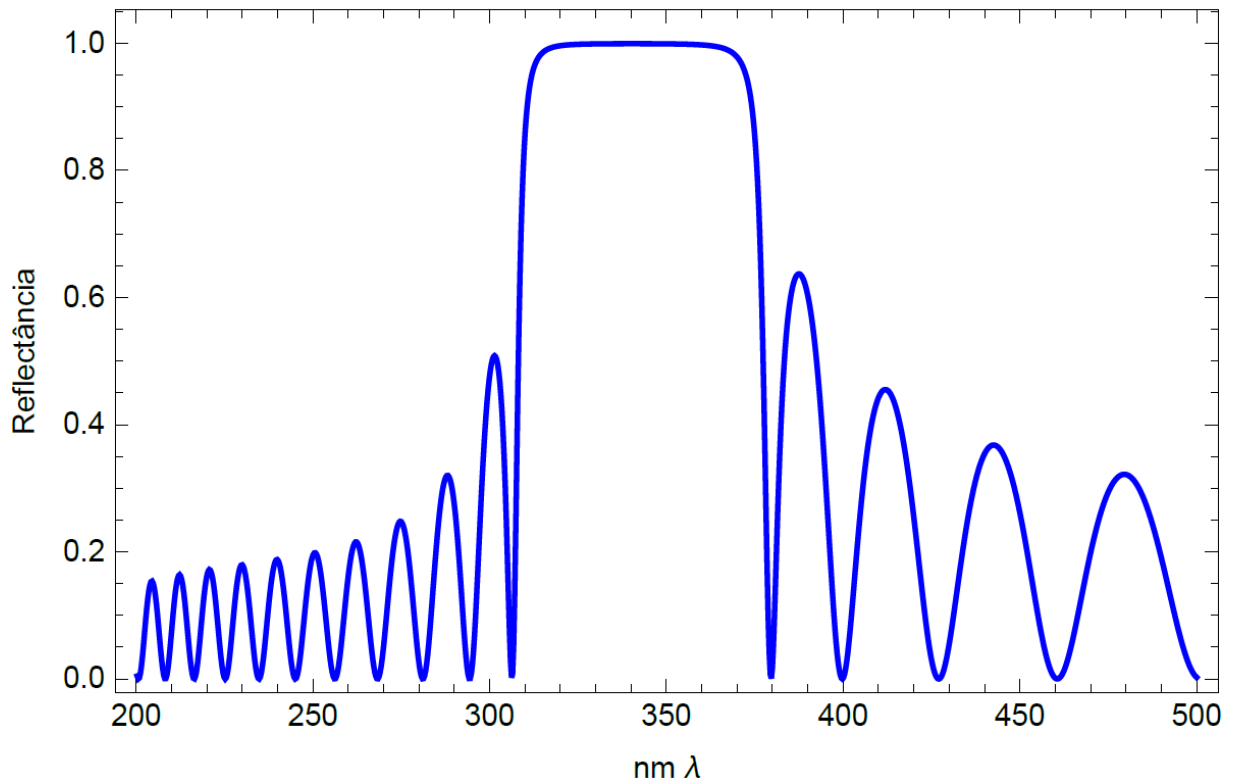


Figura 9 – Simulação das linhas de transmitância (linhas vermelhas) e reflectância (linhas azuis) referente ao material utilizado em [Aluicio-Sarduy et al. \(2018\)](#). A simulação foi feita para 16 pares periódicos de  $SiO_2$  com óxido de ítrio ( $Y_2O_3$ ) com espessuras de 50 nm.

finas.

Como valores para a construção desses cristais, utilizamos:

- Índice de refração do material da camada ímpar sendo  $SiO_2$  ( $n_1 = 1,4585$ ).
- Índice de refração do material da camada par sendo  $TiO_2$  ( $n_2 = 2,6142$ ).
- Índice de refração do material do defeito sendo  $CdS$  ( $n_{Def} = 2,5323$ ), sulfeto de cádmio, com espessura de 30 nanômetros, cerca de um terço da espessura das camadas do cristal.
- Utilizamos que o ângulo de incidência da onda eletromagnética no material foi normal a superfície do mesmo (zero graus) e a reprodução dos espectros foi feito para ondas do tipo s.
- Os limites dos espectros reproduzidos foram de 300 a 900 nanômetros.

Os resultados para esse caso encontram-se nas figuras 13 a 15 onde a figura 15 é a reprodução para um defeito produzido por uma camada muito fina, esse resulta em um

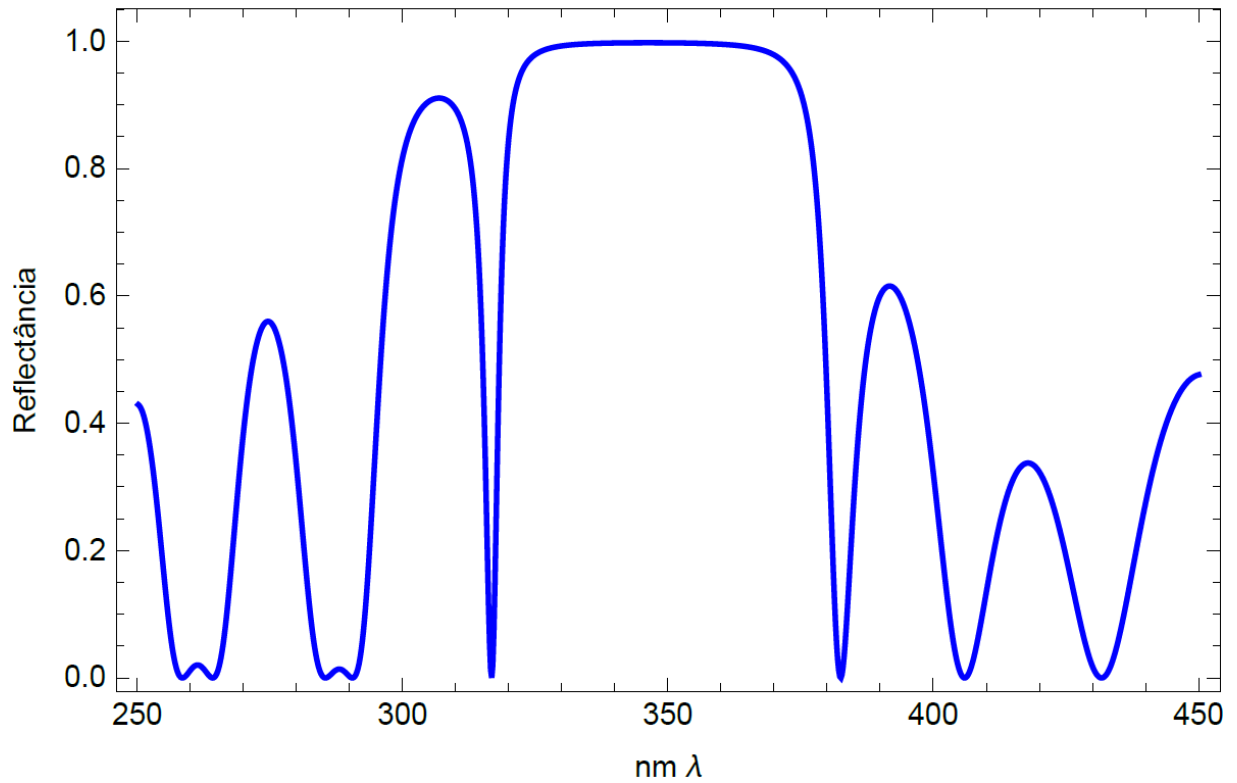


Figura 10 – Simulação das linhas de transmitância (linhas vermelhas) e reflectância (linhas azuis) referente ao material utilizado em [Aluicio-Sarduy et al. \(2018\)](#). A simulação foi feita para 16 pares periódicos de  $SiO_2$  com óxido de ítrio ( $Y_2O_3$ ) com espessuras de 50 nm e com um defeito de granada de gálio de térbio (TGG) com a mesma espessura.

pico de transmitância similar a valores de espessuras de estruturas de quarto de onda dos outros cristais discutidos.

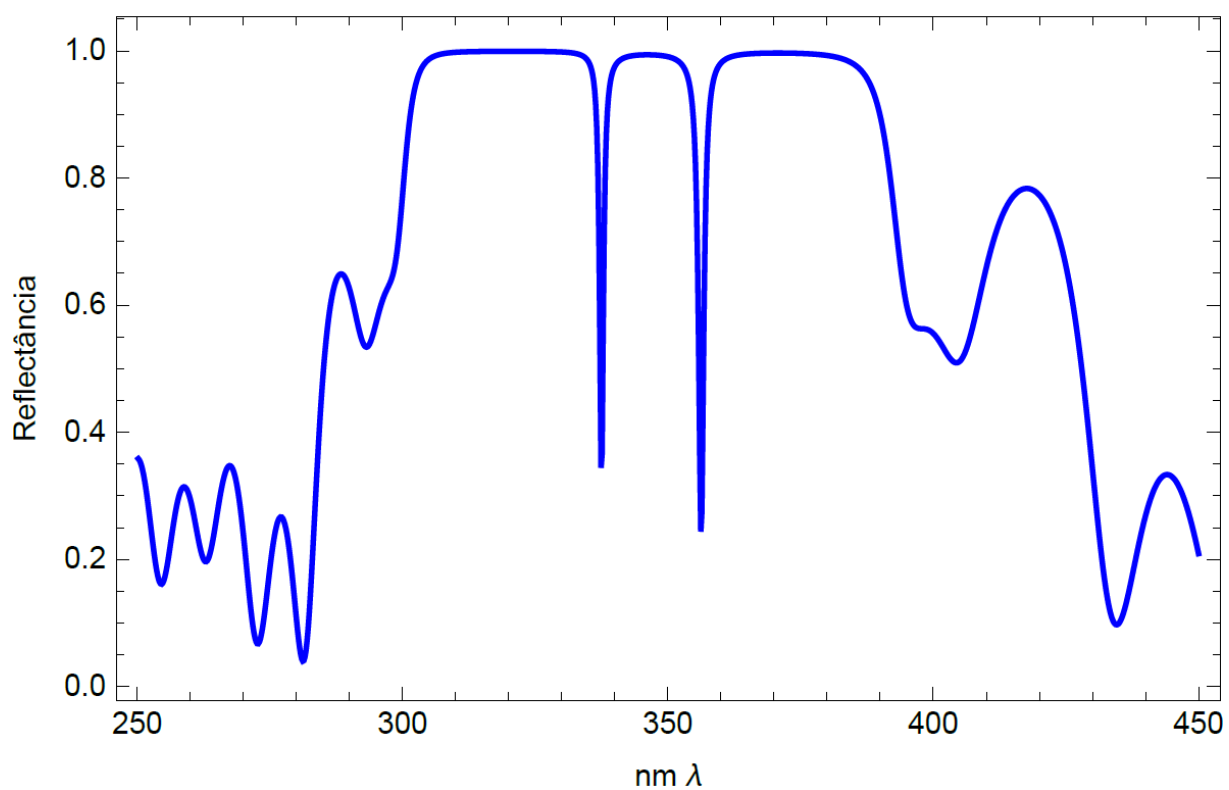


Figura 11 – Simulação das linhas de transmitância (linhas vermelhas) e reflectância (linhas azuis) referente ao material utilizado em [Aluicio-Sarduy et al. \(2018\)](#). A simulação foi feita para 16 pares periódicos de  $SiO_2$  com  $Y_2O_3$  com dois defeitos de TGG, com espessuras de 50 nm e com 4 pares periódicos separando os defeitos.

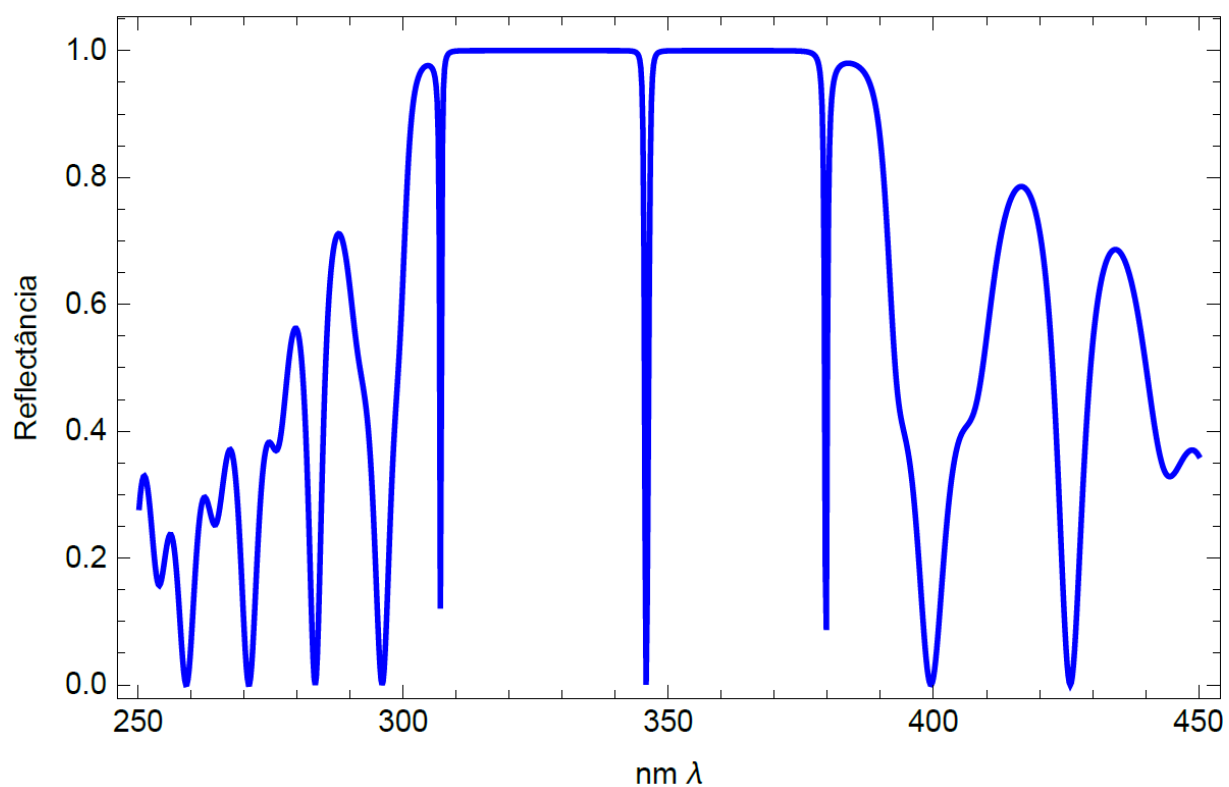


Figura 12 – Simulação das linhas de transmitância (linhas vermelhas) e reflectância (linhas azuis) referente ao material utilizado em [Aluicio-Sarduy et al. \(2018\)](#). A simulação foi feita para 16 pares periódicos de  $SiO_2$  com  $Y_2O_3$  com dois defeitos de TGG, com espessuras de 50 nm e com 8 pares periódicos separando os defeitos.

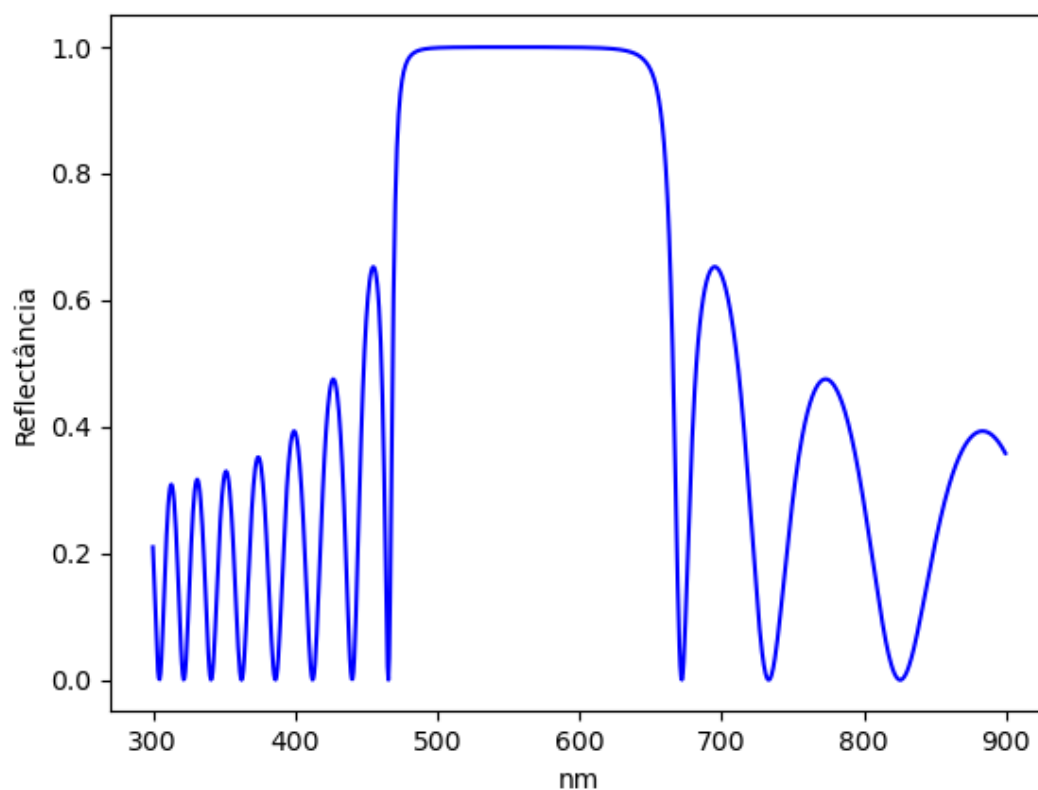


Figura 13 – Simulação do espectro de reflectância referente ao material utilizado em Wang et al. (2018). A simulação foi feita para 10 pares periódicos de sílica ( $SiO_2$ ) com óxido de titânio ( $TiO_2$ ) com espessuras das camadas seguindo a estrutura de um quarto de onda.



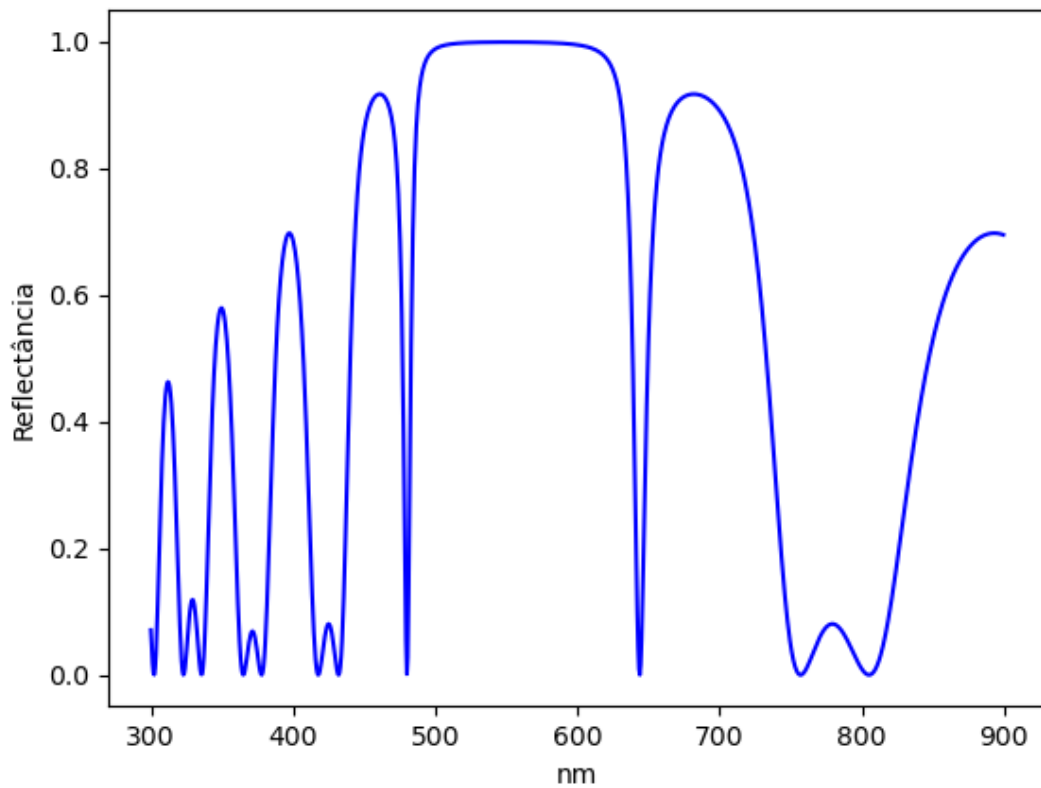


Figura 14 – Simulação do espectro de reflectância referente ao material utilizado em Wang et al. (2018). A simulação foi feita para 10 pares periódicos de sílica ( $SiO_2$ ) com óxido de titânio ( $TiO_2$ ) com espessuras das camadas seguindo a estrutura de um quarto de onda e um defeito de sulfeto de cádmio (CdS) com a espessura obedecendo o mesmo tipo de estrutura.

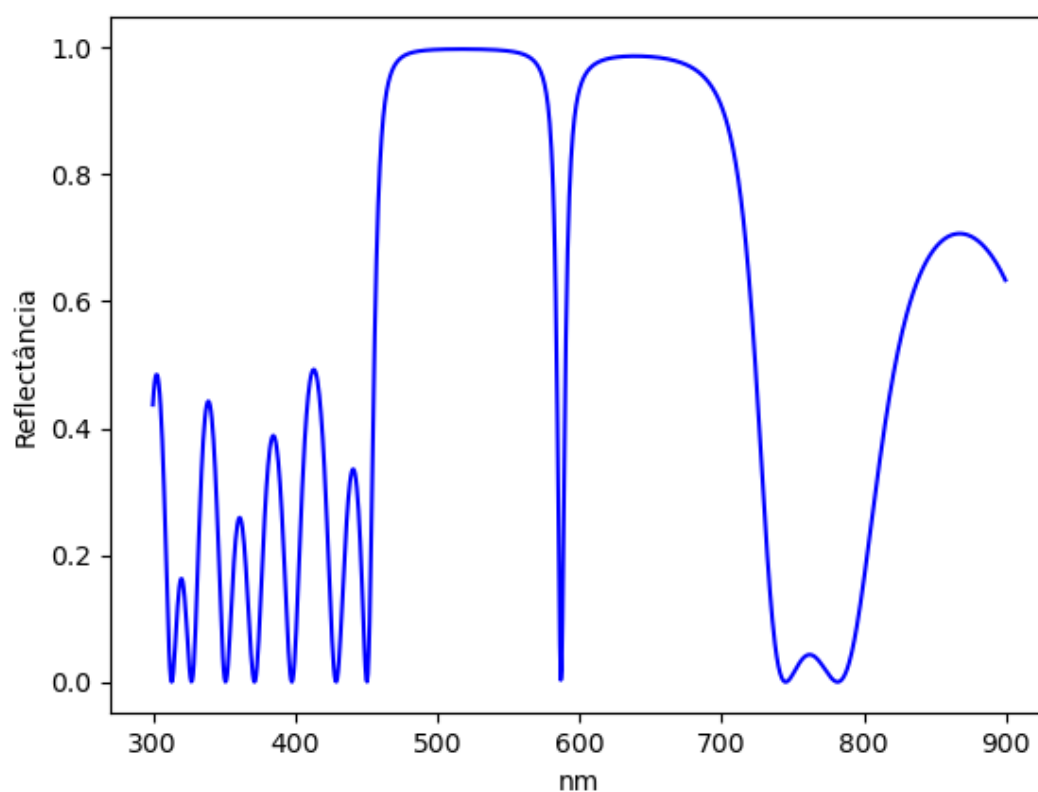


Figura 15 – Simulação do espectro de reflectância referente ao material utilizado em Wang et al. (2018). A simulação foi feita para 10 pares periódicos de sílica ( $SiO_2$ ) com óxido de titânio ( $TiO_2$ ) com espessuras das camadas seguindo a estrutura de um quarto de onda e um defeito de sulfeto de cádmio (CdS) com um terço da espessura das outras camadas.

## 5 Aplicação à células solares construídas com cristais fotônicos

A partir das observações feitas através das reproduções dos artigos [Krc et al. \(2009\)](#), [Aluicio-Sarduy et al. \(2018\)](#), [Wang et al. \(2018\)](#), testamos algumas outras características de cristais fotônicos utilizando uma construção de um cristal sob a estrutura de um quarto de onda com 10 pares periódicos e com os materiais de sílica e óxido de titânio para a construção das camadas, ar para o meio incidente e vidro para o substrato.

Das figuras [16](#) à [20](#), simulamos para o mesmo cristal a entrada da luz incidente através de diferentes ângulos e observamos que no que tange a forma pouco ter mudado no padrão dos espectros, a intensidade mudou consideravelmente.

Das figuras [21](#) à [25](#), simulamos para o mesmo cristal a entrada da luz incidente a zero graus mas com diferentes comprimentos de onda determinando a estrutura de um quarto de onda. Ao analisarmos, podemos perceber que a região da estrutura de bandas segue o comprimento de onda utilizado para determinar a espessura das camadas.

Na figura [26](#) mostramos que ao acoplarmos mais de uma dessas estruturas feitas seguindo diferentes comprimentos de ondas temos a soma da estrutura de bandas e dependendo de quais são utilizados, podemos ter como na figura [27](#) o surgimento de um pico de transmitância de forma muito parecida com a utilização de um defeito.

Como pode ser visto na figura [28](#), não encontramos uma relação direta entre a espessura da estrutura de bandas principais dos espectros formados com o comprimento de onda relacionados às camadas utilizadas para produzi-los, porém ao compararmos com o número de pares periódicos utilizados para construir os mesmos vemos que com poucos pares periódicos podemos obter uma estrutura de bandas de mesmo tamanho do que com maiores quantidades dos mesmos, conforme visto na figura [29](#).

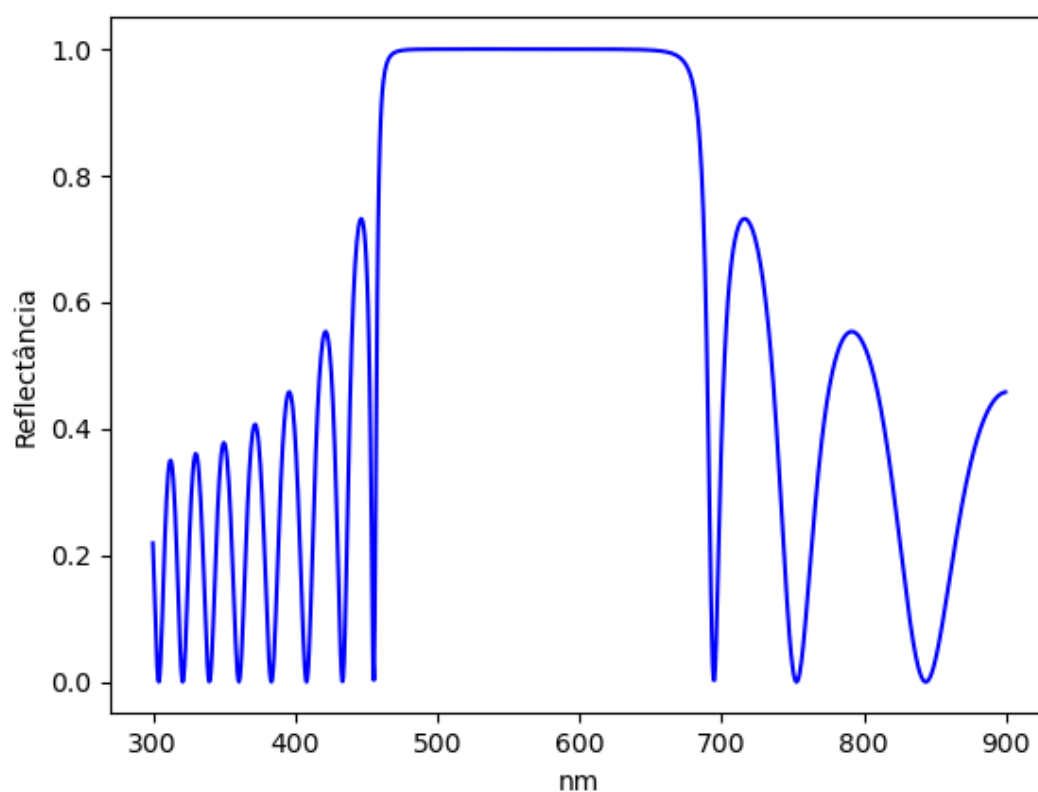


Figura 16 – Simulação do espectro de reflectância feita para 10 pares periódicos de sílica ( $SiO_2$ ) com óxido de titânio ( $TiO_2$ ) com espessuras das camadas seguindo a estrutura de um quarto de onda com o ângulo de entrada da onda incidente no material a zero graus.

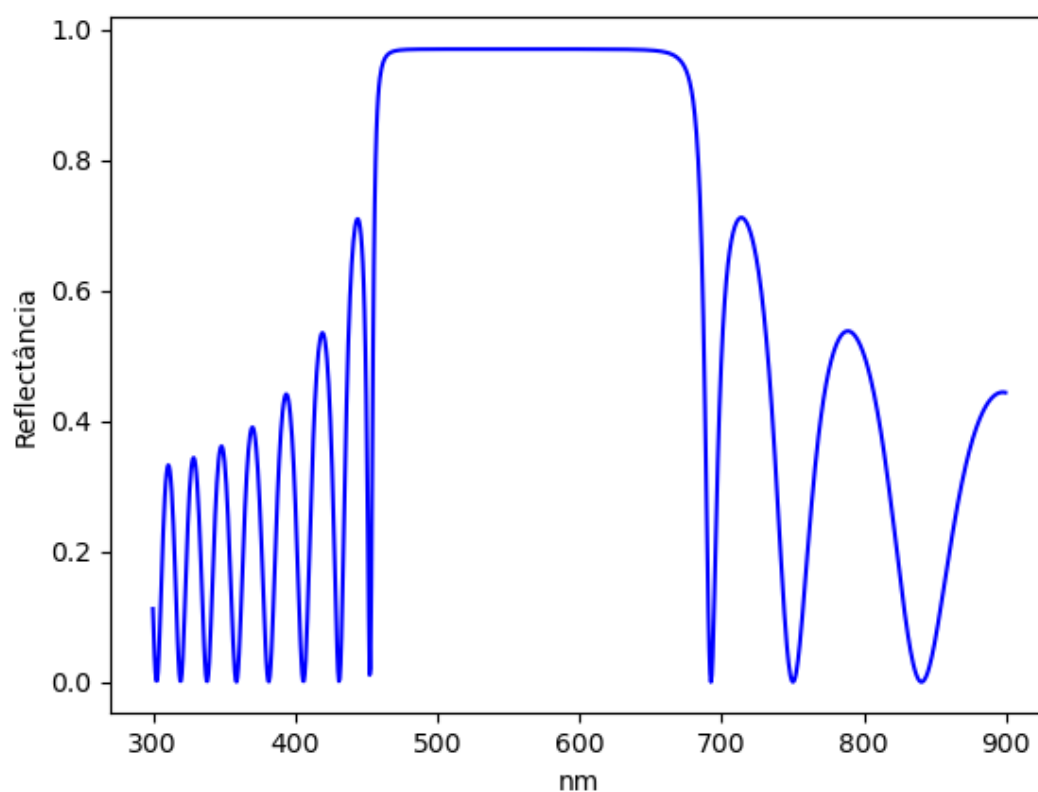


Figura 17 – Simulação do espectro de reflectância feita para 10 pares periódicos de sílica ( $SiO_2$ ) com óxido de titânio ( $TiO_2$ ) com espessuras das camadas seguindo a estrutura de um quarto de onda de 550 nanômetros com o ângulo de entrada da onda incidente no material a dez graus.

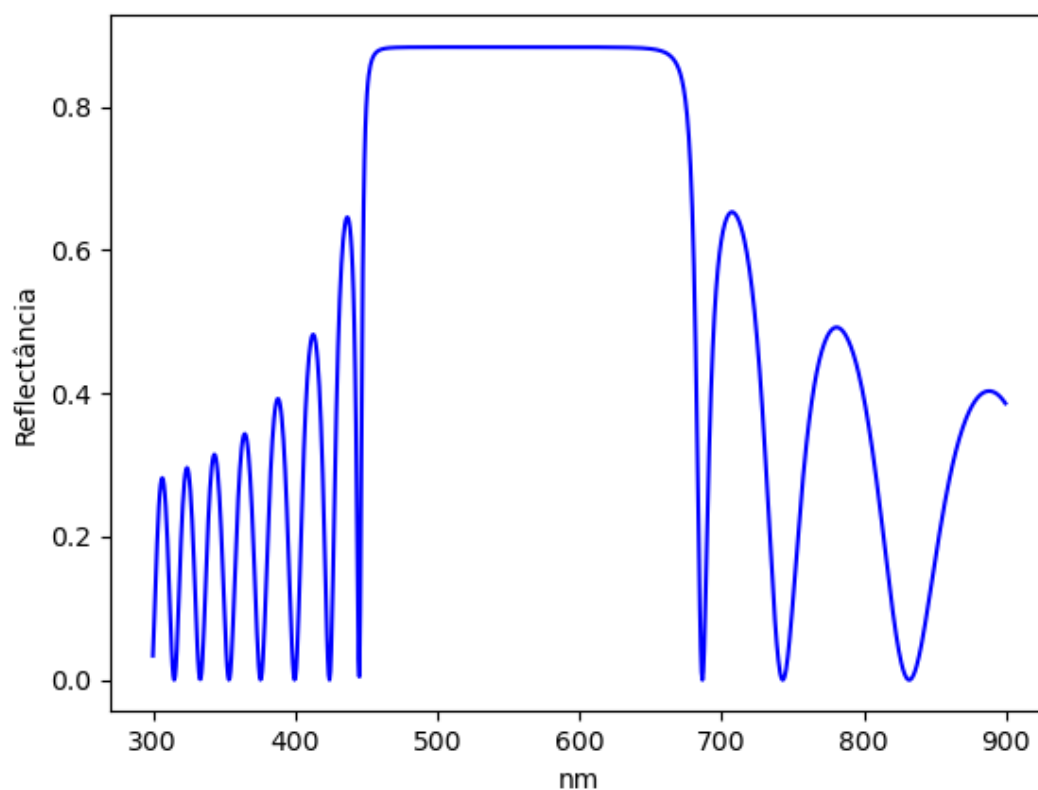


Figura 18 – Simulação do espectro de reflectância feita para 10 pares periódicos de sílica ( $SiO_2$ ) com óxido de titânio ( $TiO_2$ ) com espessuras das camadas seguindo a estrutura de um quarto de onda de 550 nanômetros com o ângulo de entrada da onda incidente no material a vinte graus.

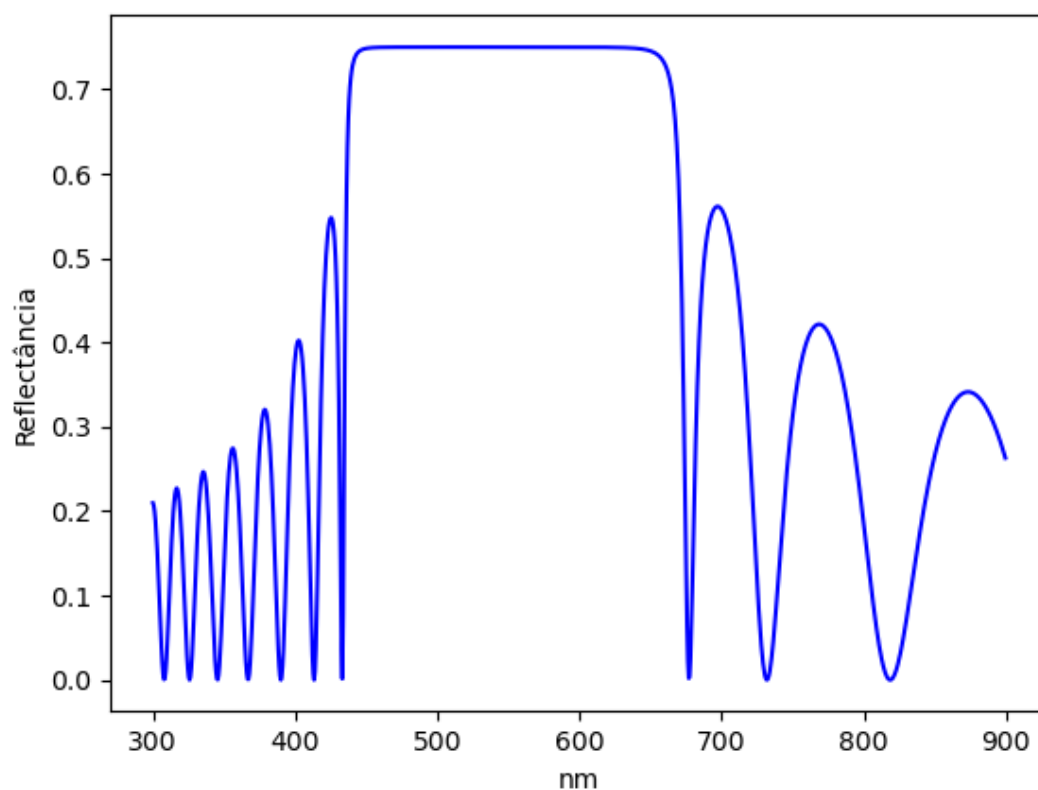


Figura 19 – Simulação do espectro de reflectância feita para 10 pares periódicos de sílica ( $SiO_2$ ) com óxido de titânio ( $TiO_2$ ) com espessuras das camadas seguindo a estrutura de um quarto de onda de 550 nanômetros com o ângulo de entrada da onda incidente no material a trinta graus.

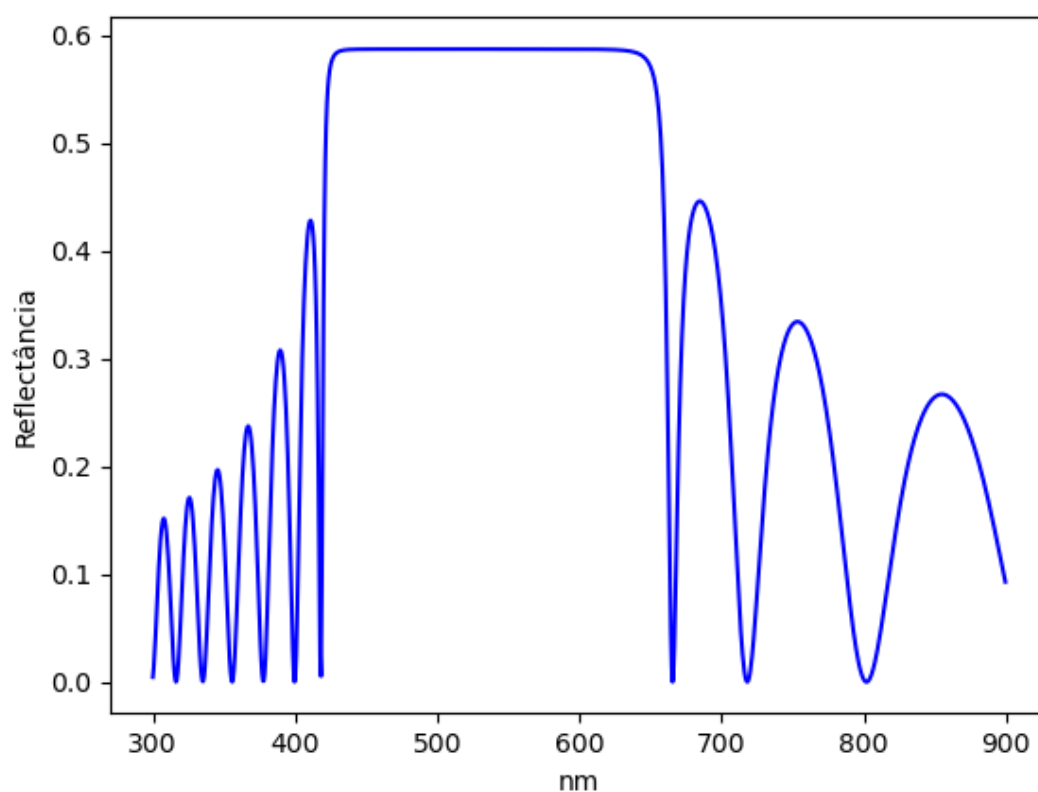


Figura 20 – Simulação do espectro de reflectância feita para 10 pares periódicos de sílica ( $SiO_2$ ) com óxido de titânio ( $TiO_2$ ) com espessuras das camadas seguindo a estrutura de um quarto de onda de 550 nanômetros com o ângulo de entrada da onda incidente no material a quarenta graus.



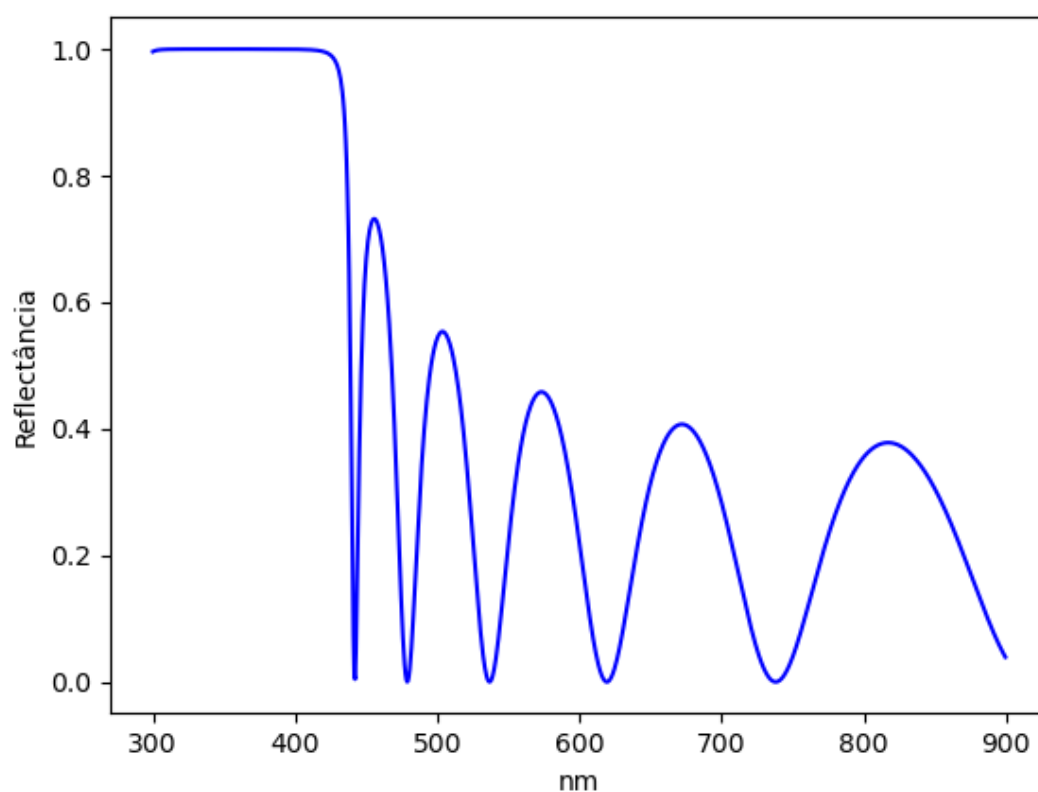


Figura 21 – Simulação do espectro de reflectância feita para 10 pares periódicos de sílica ( $SiO_2$ ) com óxido de titânio ( $TiO_2$ ) com espessuras das camadas seguindo a estrutura de um quarto de onda de 350 nanômetros com o ângulo de entrada da onda incidente no material a zero graus.

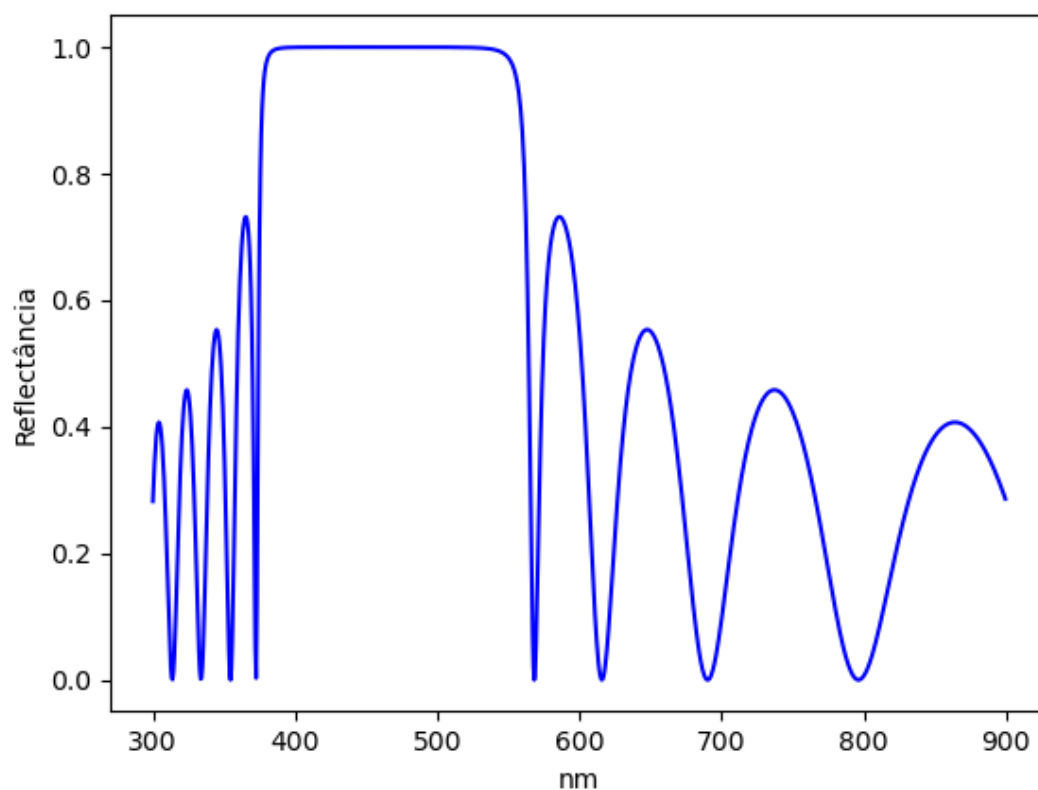


Figura 22 – Simulação do espectro de reflectância feita para 10 pares periódicos de sílica ( $SiO_2$ ) com óxido de titânio ( $TiO_2$ ) com espessuras das camadas seguindo a estrutura de um quarto de onda de 450 nanômetros com o ângulo de entrada da onda incidente no material a zero graus.

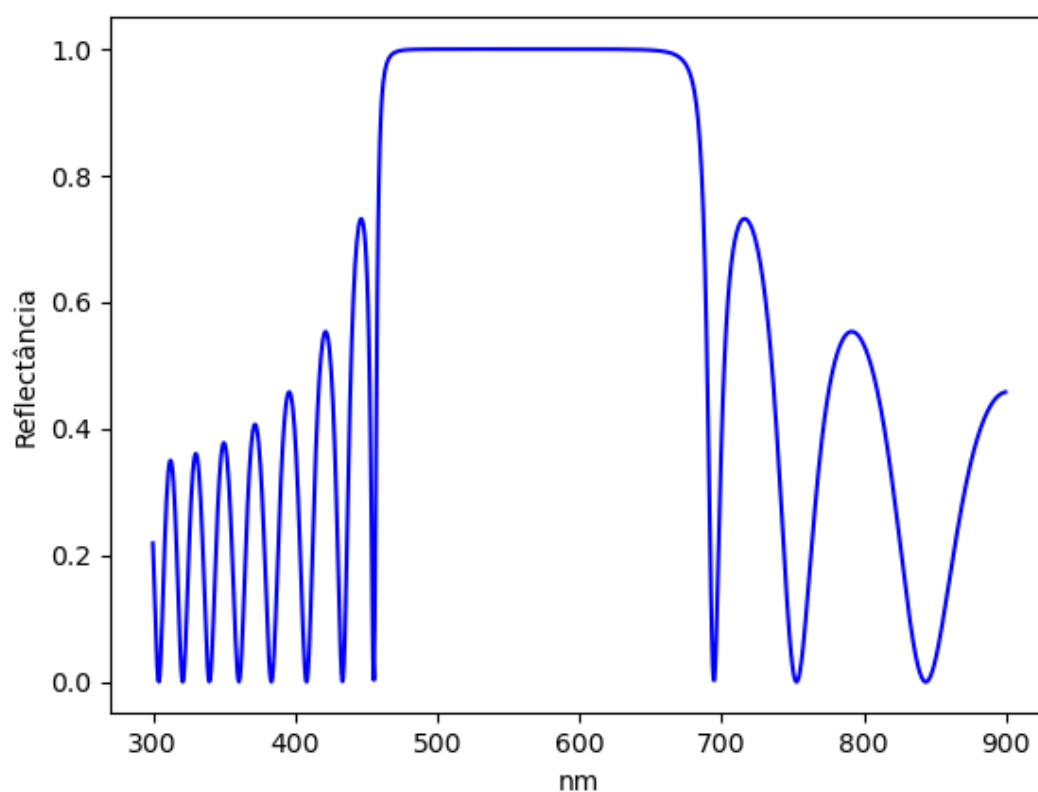


Figura 23 – Simulação do espectro de reflectância feita para 10 pares periódicos de sílica ( $SiO_2$ ) com óxido de titânio ( $TiO_2$ ) com espessuras das camadas seguindo a estrutura de um quarto de onda de 550 nanômetros com o ângulo de entrada da onda incidente no material a zero graus.

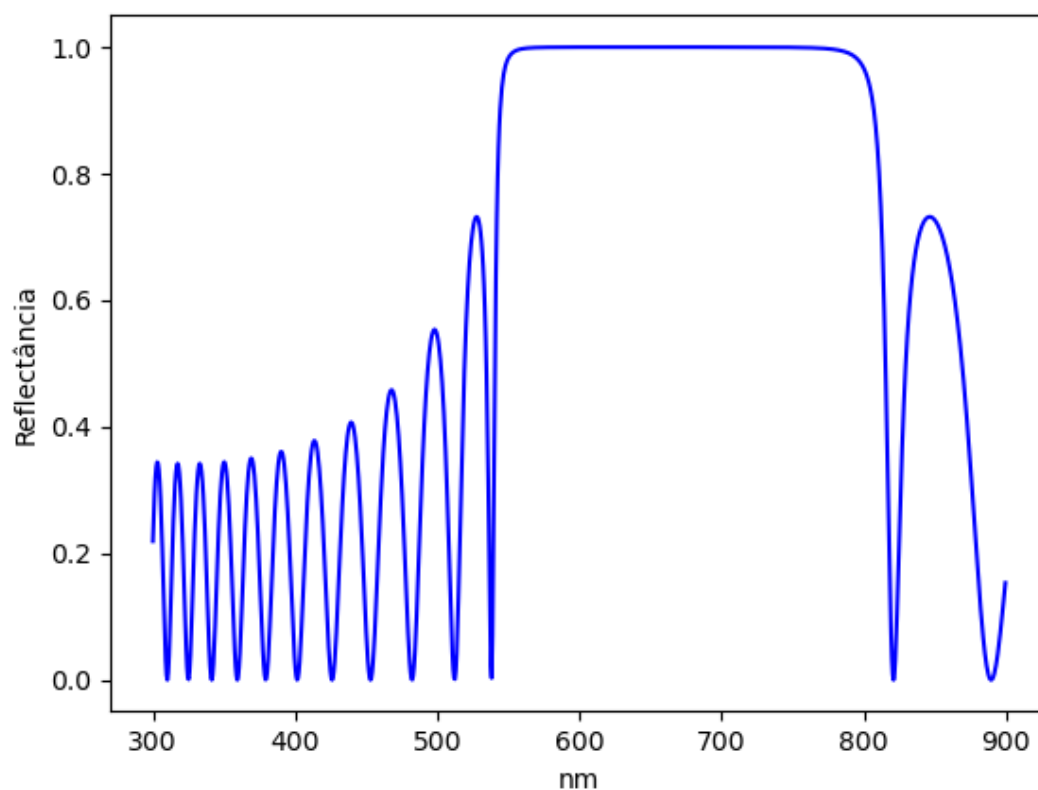


Figura 24 – Simulação do espectro de reflectância feita para 10 pares periódicos de sílica ( $SiO_2$ ) com óxido de titânio ( $TiO_2$ ) com espessuras das camadas seguindo a estrutura de um quarto de onda de 650 nanômetros com o ângulo de entrada da onda incidente no material a zero graus.

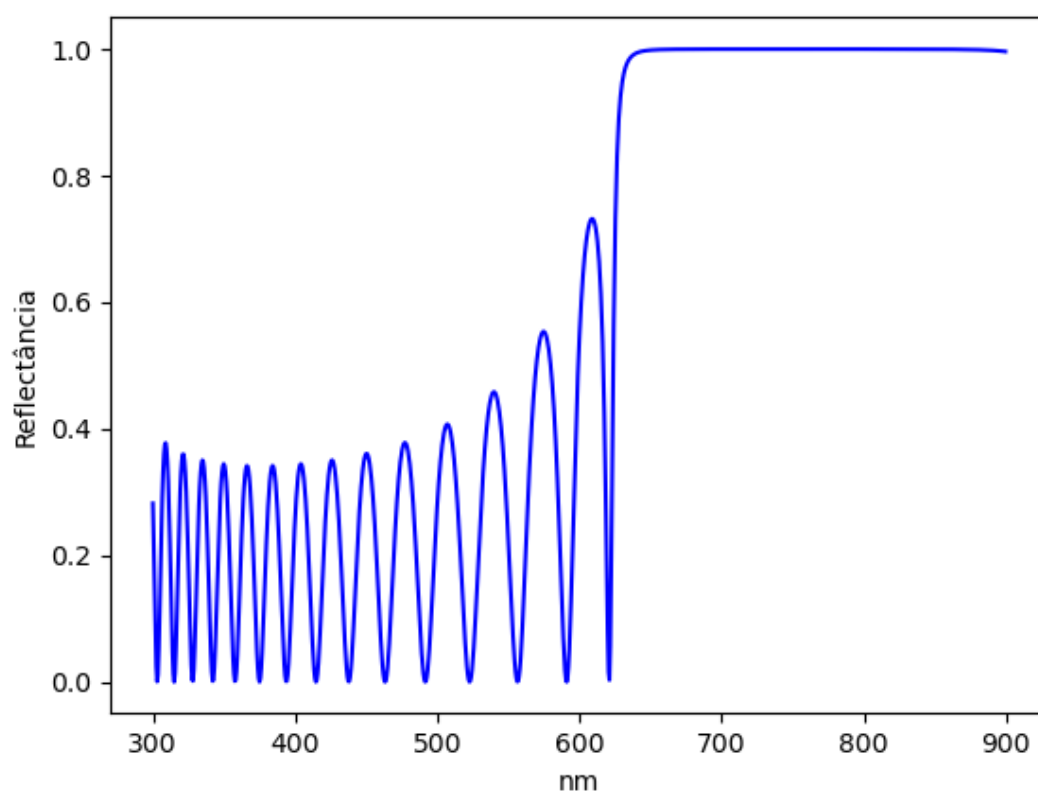


Figura 25 – Simulação do espectro de reflectância feita para 10 pares periódicos de sílica ( $SiO_2$ ) com óxido de titânio ( $TiO_2$ ) com espessuras das camadas seguindo a estrutura de um quarto de onda de 750 nanômetros com o ângulo de entrada da onda incidente no material a zero graus.

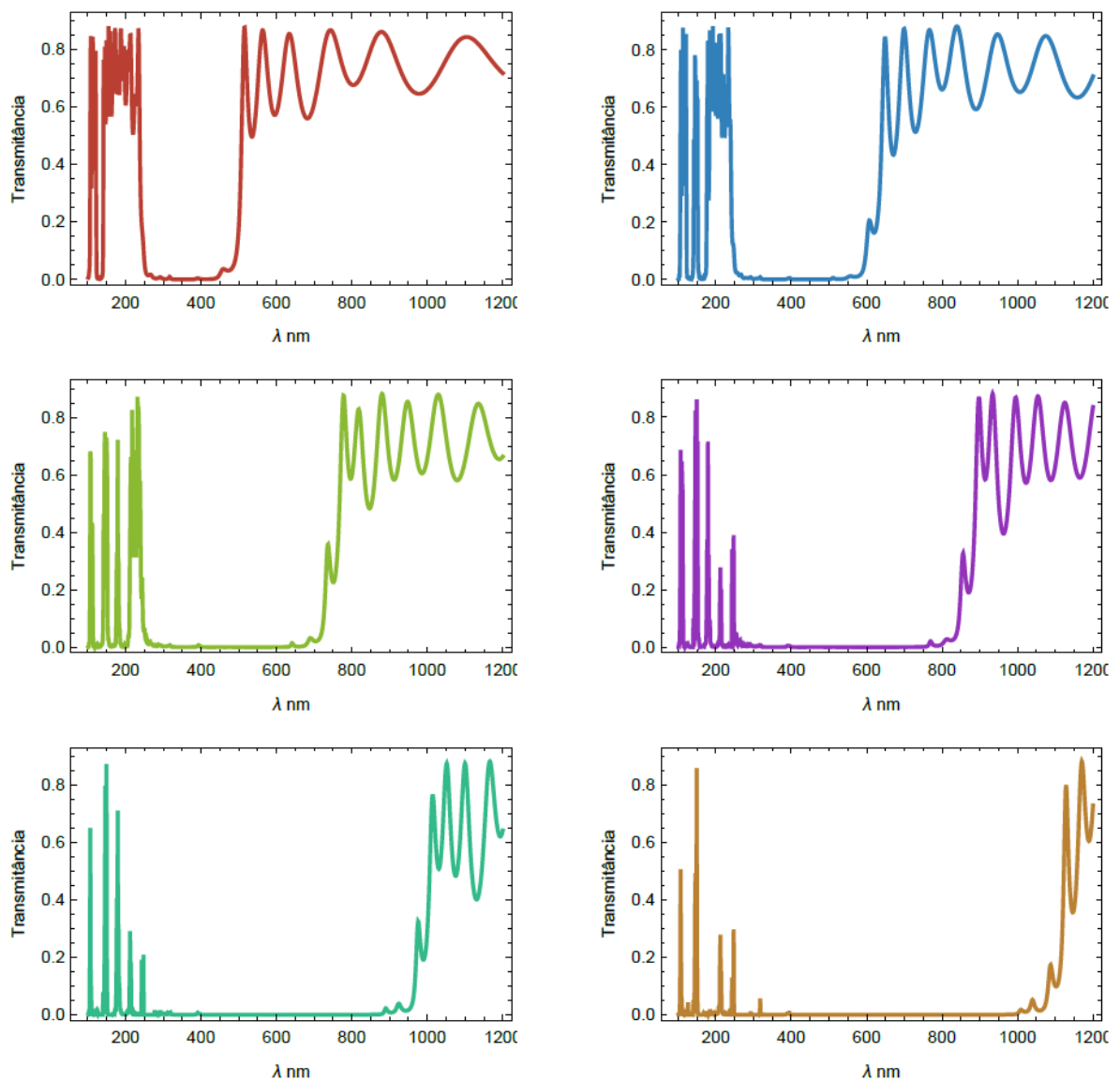


Figura 26 – Simulação do espectro de transmitância com materiais de sílica ( $SiO_2$ ) com óxido de titânio ( $TiO_2$ ) com espessuras das camadas seguindo a estrutura de um quarto de onda com o ângulo de entrada da onda incidente no material a zero graus para diferentes acoplamentos de estruturas de 10 pares periódicos, onde cada uma obedece ao quarto de onda para diferentes intervalos.

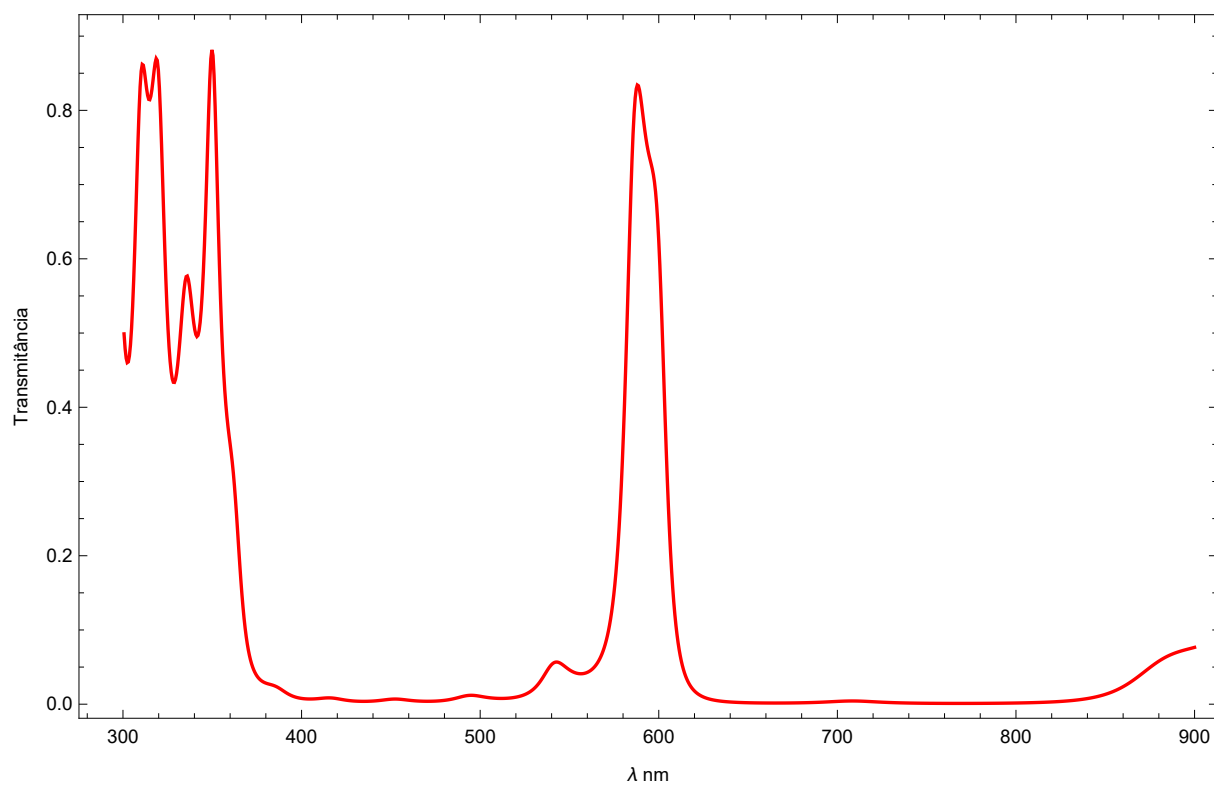


Figura 27 – Simulação do espectro de transmitância feita para duas estruturas acopladas (colocadas em sequência) de 10 pares periódicos de sílica ( $SiO_2$ ) com óxido de titânio ( $TiO_2$ ) com espessuras das camadas relativas ao um quarto de onda, uma para 450 e outra com 750 nanômetros, com o ângulo de entrada da onda incidente no material a zero graus.

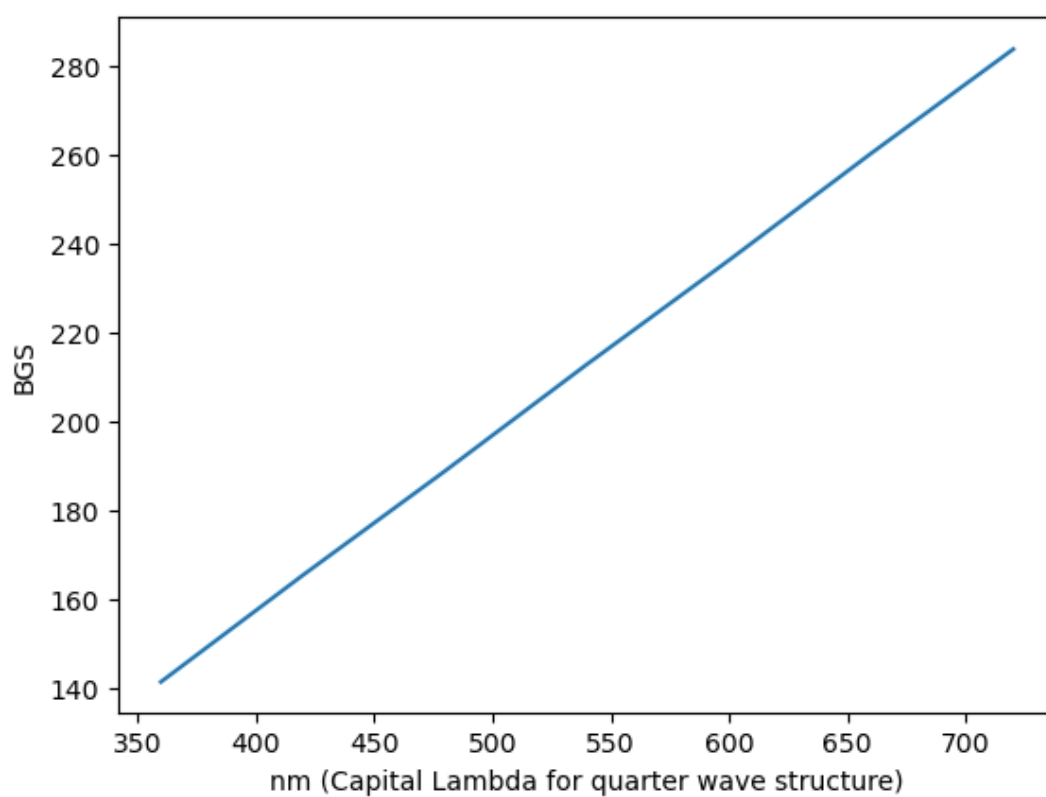


Figura 28 – Simulação da relação entre a espessura da estrutura de bandas principal do espectro de reflectância de cristais fotônicos com tamanho das camadas definidas pela estrutura de um quarto de onda, com o comprimento da onda incidente que define os mesmos.



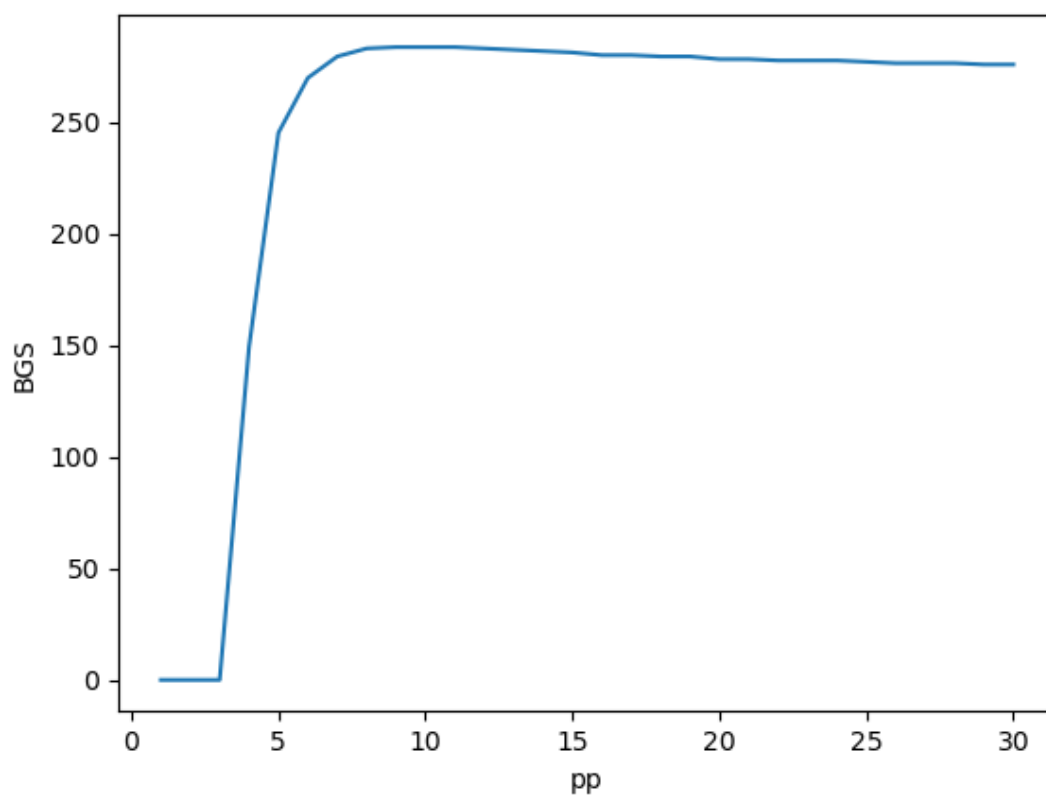


Figura 29 – Simulação da relação entre a espessura da estrutura de bandas principal do espectro de reflectância de cristais fotônicos com tamanho das camadas definidas pela estrutura de um quarto de onda, com o número de pares periódicos utilizados para construção dos mesmos. A onda incidente foi usada a zero graus e com o comprimento de 550 nanômetros.

## 6 Conclusão

Ao trazermos os resultados encontrados ao contexto dos cristais fotônicos aplicados a células solares, podemos utilizar materiais favoráveis a determinados ângulos de incidência da luz, modificando a necessidade de se inclinar placas solares a depender da latitude de instalação dessas.

Vemos também que a estrutura de bandas possui uma relação ao tamanho de suas camadas que, por sua vez, se definida por uma estrutura de um quarto de onda, cria bandas ao redor do comprimento de onda gerador da mesma estrutura.

Vemos também que com poucos pares periódicos conseguimos obter um máximo nas estruturas de bandas e vemos que mais de um cristal pode ser acoplado para se somar as estruturas de bandas.

Sendo assim, temos a possibilidade de escolhermos materiais que apresentam estruturas de bandas voltadas para o espectro de radiação do sol na terra para construir cristais que possuem poucos pares periódicos (cristais finos), com cada camada construída no formato de um quarto de onda a fim de obter estrutura de bandas bem definidas ao redor dos principais picos de radiação incidente, e por fim podemos combinar mais de uma desses cristais para maximizar a estrutura de bandas sob todo o espectro de radiação solar.

# Referências

- Aluicio-Sarduy, E. et al. Structural color tuning in 1D photonic crystals with electric field and magnetic field. *Society of Photo-Optical Instrumentation Engineers (SPIE)*, v. 10683, 2018. Citado 8 vezes nas páginas 10, 19, 20, 23, 24, 25, 26 e 30.
- Araújo, C. A. A. *Excitações em cristais fotônicos unidimensionais*. 2012. Citado na página 21.
- Byrnes, S. J. *Multilayer optical calculations*. arXiv, 2016. Disponível em: <<https://arxiv.org/abs/1603.02720>>. Citado na página 13.
- Han, L. *1D Photonic Crystals: Principles and Applications in Silicon Photonics*. 1. ed. [S.l.]: Inbook, 2018. ISBN 9789535139614. Citado na página 11.
- Joannopoulos, J. D. et al. *Photonic Crystals: Molding the Flow of Light*. 2. ed. [S.l.]: Princeton University Press, 2008. ISBN 0691124566. Citado 2 vezes nas páginas 10 e 11.
- Johnson, S.; Joannopoulos, J. Three-dimensionally periodic dielectric layered structure with omnidirectional photonic band gap. *Applied Physics Letters*, v. 77, p. 3490–3492, 2000. Citado na página 11.
- Kinoshita, S.; Yoshioka, S. Structural colors in nature: The role of regularity and irregularity in the structure. *Chemphyschem : a European journal of chemical physics and physical chemistry*, v. 6, p. 1442–1459, 2005. Citado na página 9.
- Krc, J. et al. Modulated photonic-crystal structures as broadband back reflectors in thin-film solar cells. *Applied Physics Letters*, v. 94, 2009. Citado 6 vezes nas páginas 10, 19, 20, 21, 22 e 30.
- Leite, H. D. *Propagação da luz em meios periódicos unidimensionais: cristais fotônicos*. 2013. Citado 2 vezes nas páginas 9 e 10.
- Peters, I. M. *Photonic concepts for solar cells*. Tese (Doutorado) — Faculty of Mathematics and Physics Albert-Ludwigs-University Freiburg im Breisgau, prepared at Fraunhofer Institute for Solar Energy Systems, 2009. Citado 2 vezes nas páginas 8 e 10.
- Pris, A. et al. Towards high-speed imaging of infrared photons with bio-inspired nanoarchitectures. *Nature Photonics*, v. 6, p. 195–200, 2012. Citado na página 9.
- Vera, J. J. L. *Propagação não linear de pulsos em estruturas 1D com Band Gap fotônico*. Tese (Doutorado) — Universidade Estadual de Campinas - Instituto de Física Gleb Wataghin, 2009. Citado na página 11.
- Wang, Y. et al. Dual-bandgap effect of photonic crystals on tio2 photocatalytic activity in ultraviolet and visible light regions. *Catalysis Surveys from Asia*, v. 23, p. 23–32, 2018. Citado 7 vezes nas páginas 10, 19, 22, 27, 28, 29 e 30.

# A Arquitetura do código CF1D

Neste primeiro seguimento de código, importamos as bibliotecas da linguagem python que nos fornecem ferramentas extras para a produção dos cálculos.

```

from tkinter import *
import pandas as pd
import matplotlib.pyplot as plt
from math import sin, cos, asin, pi
from cmath import exp
from numpy import ones, reshape, identity
from numpy.linalg import pinv

```

Aqui definimos definimos a estrutura da função principal:

```

def app():
    window_root = Tk()
    window_root.title("PCID Calculator")
    crystal_name = "Default"
    entry = make_form(window_root, crystal_name)
    make_evaluation(window_root, entry)
    window_root.mainloop()

```

Nessa etapa ajustamos a estrutura visual que a interface gráfica terá:

```

def make_form(window_root, crystal_name):
    entries = {}
    for element in list(range(19)):
        row = Frame(window_root)
        lab = Label(row, width=38,
                    text=data.index.values[element], anchor='w')
        entry = Entry(row, width=5)
        entry.insert(0, str(data[crystal_name][element]))
        row.pack(side=TOP, padx=10, pady=5)
        lab.pack(side=LEFT)
        entry.pack(side=RIGHT, ipadx=20)
        entries[data.index.values[element]] = entry
    return entries

```

Criamos a ação que o botão terá ao ser clicado, produzindo a chamada aos cálculos:

```

def make_evaluation(window_root, entry):

```

```

click_action = StringVar()
click_action.set(options_action[0])
menu_action = OptionMenu(window_root,
    click_action, *options_action)
menu_action.pack(side=TOP, padx=10, pady=5)
b = Button(window_root, text='Evaluate', command=(lambda:
    func_evaluate(entry, click_action.get())))
b.pack(side=TOP, padx=10, pady=5)

```

Definimos aqui a chamada principal do arquivo a ser executado e as possibilidades existentes de cálculos do programa:

```

if __name__ == '__main__':
    dataCSV = pd.read_csv("data.csv")
    data = pd.DataFrame(dataCSV).set_index("Index")
        .rename_axis("Crystals_name", axis=1)
    options_action =
    [
        "Transmittance",
        "Reflectance",
        "Absorption",
        "Reflectance_with_Transmittance",
        "Absorption, Reflectance_with_Transmittance",
        "Reflectance_and_Transmittance",
        "Reflectance_by_Transmittance"
    ]
    app()

```

Ajustamos a produção dos gráficos para cada tipo de análise de cristais:

```

def func_evaluate(entry, action):
    x, y_ref, y_trans = pold(entry)
    if action == "Transmittance":
        plt.plot(x, y_trans, 'red')
        plt.xlabel('Nanometros')
        plt.ylabel('Transmitancia')
        plt.show()
    elif action == "Reflectance":
        plt.plot(x, y_ref, 'blue')
        plt.xlabel('Nanometros')
        plt.ylabel('Reflectancia')
        plt.show()

```

```

elif action == "Absorption":
    plt.plot(x, ones(len(x)) - y_ref - y_trans, 'purple')
    plt.xlabel('Nanometros')
    plt.ylabel('Absorcao')
    plt.show()
elif action == "Reflectance_with_Transmittance":
    plt.plot(x, y_ref, 'blue')
    plt.plot(x, y_trans, 'red')
    plt.xlabel('Nanometros')
    plt.ylabel('Intensidade')
    plt.show()

elif action == "Absorption , Reflectance_with_Transmittance":
    plt.plot(x, y_ref, 'blue')
    plt.plot(x, y_trans, 'red')
    plt.plot(x, ones(len(x)) - y_ref - y_trans, 'purple')
    plt.xlabel('Nanometros')
    plt.ylabel('Intensidade')
    plt.show()
elif action == "Reflectance_and_Transmittance":
    plt.subplot(2, 1, 1)
    plt.plot(x, y_ref, 'blue')
    plt.ylabel('Reflectancia')
    plt.subplot(2, 1, 2)
    plt.plot(x, y_trans, 'red')
    plt.ylabel('Transmitancia')
    plt.xlabel('Nanometros')
    plt.show()
elif action == "Reflectance_by_Transmittance":
    plt.plot(y_ref, y_trans, 'orange')
    plt.xlabel('Reflectancia')
    plt.ylabel('Transmitancia')
    plt.show()

```

Aqui definimos a função principal do nosso programa que executa e analisa os cristais:

```
def pc1d(data):
```

Na primeira parte da função principal requisitamos os dados que foram inseridos na interface gráfica:

```

# INPUT
initial_wavelength = float(
    data[ 'Initial_wavelength_for_analysis' ].get() )
final_wavelength = float(
    data[ 'Final_wavelength_for_analysis' ].get() )
# polarization = str(
    data[ 'Wave_polarization' ].get() )
angle_of_incidence = float(
    data[ 'Wave_incidence_angle' ].get() )
number_of_pairs = int(
    data[ 'Number_of_pairs_of_crystal_layers' ].get() )
is_quarter_wave = int(
    data[ 'Is_structure_a_quarter-wave?' ].get() )
lam_vac1 = float(
    data[ 'Odd_layer_resonant_wavelength' ].get() )
lam_vac2 = float(
    data[ 'Odd_layer_resonant_wavelength' ].get() )
w_n_1 = float( data[ 'Odd_layer_width' ].get() )
w_n_2 = float( data[ 'Even_layer_width' ].get() )
number_of_defects = int(
    data[ 'Are_there_any_defects?' ].get() )
lam_vac_def = float(
    data[ 'Defect_layer_resonant_wavelength' ].get() )
w_n_defects = float(
    data[ 'Defect_layer_width' ].get() )
inter_pairs = int( data[
    'Number_of_pairs_of_crystal_layers_between_defects' ].get() )
n_inc = float( data[
    'Refractive_index_of_the_incident_layer' ].get() )
n_1 = float( data[ 'Refractive_index_of_odd_layer' ].get() )
n_2 = float( data[ 'Refractive_index_of_even_layer' ].get() )
n_subs = float( data[
    'Refractive_index_of_the_substrate_layer' ].get() )
n_defects = float( data[
    'Refractive_index_of_the_defect_layer' ].get() )

```

Analizamos, de acordo com as entradas, quantos defeitos teremos na construção da estrutura dos cristais e sob qual tipo de estrutura os mesmos devem ser montados:

```
# Barriers
```

```

number_of_materials = 2
if number_of_defects == 1 or number_of_defects == 2:
    number_of_materials = 3
elif number_of_defects != 0:
    messagebox.showwarning("Warning", "The answer for
    'Are there any defects?' must be 0, 1 or 2.")
    return
if is_quarter_wave == 1:
    w_n_1 = lam_vac1 / (4.0 * n_1)
    w_n_2 = lam_vac2 / (4.0 * n_2)
    if number_of_defects == 1 or number_of_defects == 2:
        w_n_defects = lam_vac_def / (4.0 * n_defects)

```

Criamos as listas onde os dados camada a camada serão depositados para depois serem ajustados graficamente:

```

# VARIABLES
data_wavelength = []
data_reflectance_by_wavelength = []
data_transmittance_by_wavelength = []
steps = 1000
matrix_layer_1 = identity(2)
matrix_layer_2 = identity(2)
matrix_layer_defect = identity(2)

```

Avaliamos as condições de contorno do nosso problema de método da matriz de transferência:

```

# EVALUATION
numbers_of_layers = 2 * (number_of_pairs + inter_pairs)
    + number_of_defects
theta_inc = angle_of_incidence * (pi / 180)
snell = n_inc * sin(theta_inc)
delta_inc = reshape([1.0, 1.0, n_inc * cos(theta_inc),
    - n_inc * cos(theta_inc)], (2, 2))
if numbers_of_layers % 2 != 0:
    capital_theta = asin(snell / n_1)
    capital_eta = n_1
else:
    capital_theta = asin(snell / n_2)
    capital_eta = n_2
theta_subs = asin((capital_eta * sin(capital_theta)) / n_subs)

```



```

delta_subs = reshape([1, 1, n_subs * cos(theta_subs),
                    - n_subs * cos(theta_subs)], (2, 2))
capital_delta_subs = pinv(delta_subs)

```

Para cada interação entre camadas, calculamos os parâmetros de propagação da radiação:

```

for step in range(steps):

    step_wavelength = initial_wavelength + (step *
        (final_wavelength - initial_wavelength)) / float(steps)
    # Matrix layers construction
    n = 0.0
    w = 0.0
    for i in range(number_of_materials):
        if i == 0:
            n = n_1
            w = w_n_1
        elif i == 1:
            n = n_2
            w = w_n_2
        elif i == 2:
            n = n_defects
            w = w_n_defects
    theta = asin(snell / n)
    const_k = cos(theta) * n
        * ((2.0 * pi) / step_wavelength)
    const_phi = const_k * w
    propagation_matrix = reshape([exp(1j * const_phi), 0,
        0, exp(-1j * const_phi)], (2, 2))
    delta_layer = reshape([1, 1, n * cos(theta),
        -n * cos(theta)], (2, 2))
    capital_delta_layer = pinv(delta_layer)
    if i == 0:
        matrix_layer_1 = delta_layer
            .dot(propagation_matrix)
            .dot(capital_delta_layer)
    elif i == 1:
        matrix_layer_2 = delta_layer
            .dot(propagation_matrix)
            .dot(capital_delta_layer)

```

```

elif i == 2:
    matrix_layer_defect = delta_layer
        .dot(propagation_matrix)
        .dot(capital_delta_layer)

```

Executamos aqui o método da matriz de transferência:

```

# MMT
matrix = identity(2)
for layer in range(numbers_of_layers):
    if number_of_defects == 0:
        if (layer + 1) % 2 != 0:
            matrix = matrix_layer_1.dot(matrix)
        else:
            matrix = matrix_layer_2.dot(matrix)
    elif number_of_defects == 1:
        if (layer + 1) == number_of_pairs + 1:
            matrix = matrix_layer_defect.dot(matrix)
        elif (layer + 1) % 2 != 0:
            matrix = matrix_layer_1.dot(matrix)
        else:
            matrix = matrix_layer_2.dot(matrix)
    elif number_of_defects == 2:
        if (layer + 1) == number_of_pairs + 1:
            matrix = matrix_layer_defect.dot(matrix)
        elif (layer + 1) == number_of_pairs + 1
            + (inter_pairs * 2) + 1:
            matrix = matrix_layer_defect.dot(matrix)
        elif (layer + 1) % 2 != 0:
            matrix = matrix_layer_1.dot(matrix)
        else:
            matrix = matrix_layer_2.dot(matrix)
matrix = delta_inc.dot(matrix).dot(capital_delta_subs)

```

Por fim, temos o código onde adicionamos os resultados do MMT nas listas para apresentação futura:

```

data_wavelength.append(step_wavelength)
data_reflectance_by_wavelength
    .append(((abs(matrix[1][0]) / abs(matrix[0][0])) ** 2))
data_transmittance_by_wavelength
    .append((((1 / abs(matrix[0][0])) ** 2))

```

---

```
    * (cos(theta_subs) / cos(theta_inc))  
    # .real  
    )  
  
    return data_wavelength, data_reflectance_by_wavelength,  
           data_transmittance_by_wavelength
```