

**INÍCIO DE UMA NOVA ÓTICA: LOCALIZAÇÃO DA LUZ COM
DESENVOLVIMENTO DE SIMULAÇÕES NUMÉRICAS
BEGINNING OF A NEW PERSPECTIVE: LOCATION OF LIGHT WITH
DEVELOPMENT OF NUMERICAL SIMULATIONS**

¹SILVA, A.C.,¹ ANJOS, J.F.,¹ FREIRE, M.E.A.,¹ JUSTINO, F.F.S.,¹ XAVIER, M.C.S

¹Universidade Estadual da Paraíba, Paraíba, PB, Brasil

Resumo: Nos últimos anos, tem tido uma melhora no campo da fotônica em meios desordenados por conta das suas diversas aplicações em coletores solares, lasers aleatórios, fotos catalisadores e outros dispositivos fotônicos. Este trabalho visa estudar o fenômeno do transporte da luz em um meio óptico fortemente desordenado composto de uma solução coloidal de nanopartículas núcleo-casca de dióxido de titânio revestido com uma camada de sílica ($TiO_2@Sílica$) suspenso em uma solução de etanol. Foi desenvolvido e adaptado um programa para a realização de simulações utilizando a teoria de matrizes aleatórias, que é executado através do programa de cálculo numérico MATLAB, além de uma portabilidade do mesmo programa para o freeware Scilab. O programa, que conta com uma interface de usuário, funciona como um facilitador para a execução e obtenção dos dados das simulações realizadas. A modificação realizada no programa original permitiu variar novos parâmetros, como o número de canais para os terminais ligados ao ponto quântico estudado, isso acarretou novos resultados que ainda precisam ser estudados e melhor analisados.

Palavras chave: Localização da luz de Anderson. Fotônica. Núcleo-casca. Teoria de Matrizes Aleatórias.

Abstract: In recent years, there has been an improvement in the field of photonics in disordered environments due to its diverse applications in solar collectors, random lasers, catalyst photos and other photonic devices. This work aims to study the phenomenon of light transport in a highly disordered optical medium composed of a colloidal solution of titanium dioxide core-shell nanoparticles coated with a layer of silica ($TiO_2@Silica$) suspended in a solution of ethanol. A program was developed and adapted to carry out simulations using the theory of random matrices, which is executed through the numerical calculation program MATLAB, in addition to the portability of the same program to the Scilab freeware. The program that has a user interface works as a facilitator for the execution and obtaining of data from the simulations performed. The modification carried out in the original program allowed us to vary new parameters, such as the number of channels for the terminals connected to the quantum point studied, this resulted in new results that still need to be studied and better analyzed.

keywords: Anderson localization of light. Photonic. Core-Shell. Random-matrix Theory.

¹acson@outlook.com.br

INTRODUÇÃO:

A procura por meios óticos desordenados vem obtendo relevância nos últimos anos graças a suas diferentes aplicações como, por exemplo, em localização da luz (JOHN, 1984), lasers aleatórios (WETTER et al., 2018), células fotovoltaicas (GENOVESE; LIGHTCAP; KAMAT, 2012), etc. Um dos fenômenos mais interessante na física do estado sólido é a localização de Anderson.

A localização da luz é uma área de pesquisa aberta que, além de ser algo fundamental, tem diversas aplicações. Tendo em vista que a localização é um fenômeno ondulatório, a ideia de estender a localização para o ramo da ótica foi proposta por Sajeev John e Anderson (JOHN, 1984, 1991). Devido à natureza (aparentemente) não interativa dos fótons, a ótica parece um campo perfeito para se estudar a localização e outros fenômenos associados a mesma, pois, vários experimentos que visaram estudar a transmissão de ondas eletromagnéticas em meios altamente desordenados acabaram por reivindicar a localização da luz (WIERSMA; BARTOLINI et al., 1997; SPERLING; BUEHRER et al., 2013), porém, esses trabalhos foram questionados por Sperling, Scheffold, Bartolini, Wiersma e colaboradores (WIERSMA; RIVAS et al., 1999; SPERLING; SCHERTEL et al., 2016).

Processos de espalhamento (ou dispersão) inelástica, ou seja, aquelas onde os estados internos das partículas se alteram, podem acarretar uma redução do comprimento de coerência de um determinado fóton, fazendo com que o efeito de interferência (localização) seja mais difícil de ocorrer. A previsão teórica de Sajeev John e alguns resultados experimentais obtidos por Jimenez Villar e colaboradores (JIMENEZ-VILLAR et al., 2016), onde um aumento na intensidade de absorção é notada quando o sistema beira a

localização, o que torna a localização da luz um tema confuso, talvez por ter sido atacado como um fenômeno interferencial convencional, que se ocorre em cavidades clássicas, o que não é o ideal. Altshuler e colaboradores foram os pioneiros nesse problema estatístico na borda de mobilidade de um sistema 3D em um meio eletrônico desordenado (ALTSHULER; SHKLOVSKII, 1986).

O fenômeno de localização foi detalhadamente revisado e publicado por Mirlin (MIRLIN, 2000). M.C.S. Xavier e colaboradores realizaram simulações teóricas para a constatação do fenômeno de localização da luz. De forma paralela, através da teoria da matriz aleatória e simulação teórica, mostrando, assim, uma concordância com resultados experimentais ao determinar a condutância como uma função da reflexão interna efetiva sentida pelos fótons que foram retroespalhados coerentemente. Por ter sido aplicada em uma variedade de fenômenos físicos, a teoria das matrizes aleatórias tem ressurgindo nas últimas décadas (RODRÍGUEZ et al., 2005; KELLERMANN et al., 2010). Quando a descoberta que relacionava as propriedades universais de grandes matrizes aleatórias com as flutuações da condutância em condutores desordenados, veio à tona, acarretou num desenvolvimento de uma teoria de matriz aleatória para tratar de transporte quântico (ALTSHULER; SHKLOVSKII, 1986; MIRLIN, 1997). Quando se trata da física atômica, Wigner demonstrou que para uma determinada amostra, as propriedades do núcleo atômico eram aparentemente aleatórias, mas apesar dessa aleatoriedade, também foi percebido que em sistemas quânticos genéricos as propriedades estatísticas (média e variância) são universais.

As simulações teóricas realizadas por Xavier trouxe resultados que concordaram com experimentos realizados, porém, devido

à limitação do script, as simulações levavam bastante tempo para serem executadas, além disso, não era possível fazer alteração no número de canais ligado aos pontos quânticos. Por conta dessas limitações este trabalho visou desenvolver uma interface gráfica para o script utilizado no trabalho de Xavier, para que fosse melhorado a interação do usuário, além disso, também foi realizada uma otimização, que permitiu que as simulações fossem realizadas em um tempo consideravelmente menor, através de laços de repetição, obtendo os mesmos resultados conseguidos por Xavier. Visando a coleta de mais dados, também foi alterado o script para que se pudesse realizar uma generalização no número de canais por terminal ligado ao ponto quântico, relacionando todas as matrizes que continha no programa com o número de canais, com isso foi obtido novos resultados que ainda necessita de análises para serem melhores explicados.

LASERS CONVENCIONAIS E ALEATÓRIOS:

Os lasers são uns dos dispositivos óticos mais importantes que foram desenvolvidos nos últimos anos, este é, essencialmente, um amplificador ótico. A palavra LASER se origina do inglês "Light Amplification by Stimulated Emission of Radiation", em tradução literal "amplificação da luz por emissão estimulada de radiação". Então os lasers são dispositivos de amplificação da luz através de emissão estimulada de radiação. O funcionamento deste se dá por três componentes: um meio ativo, um mecanismo de bombeio e um sistema de realimentação (SIEGMAN, 1986). Esse meio ativo pode ser sólido, líquido ou gasoso, onde estes devem possuir um grande número de átomos, moléculas ou íons para que tenham seus níveis de energia excitados acima do nível fundamental. Um

dos primeiros lasers, desenvolvido por Maiman (MAIMAN, 1960), utilizava rubi, após isso foi desenvolvido em 1961, por Javan, Herriott e Bennett (JAVAN; BENNETT JR; HERRIOTT, 1961), um laser a gás de He-Ne. O mecanismo de bombeio tem como principal função excitar os átomos, moléculas ou íons, além disso, tem que ser capaz de produzir inversão de população entre dois níveis de energia de tal forma que os níveis de energia acima do estado fundamental seja os mais populosos. O sistema de realimentação, ou ressonador, tem a função de fazer com que os fótons que saem do meio ativo retornem a ele, produzindo mais emissão estimulada, esses ressonadores são constituídos de dois espelhos, onde um deles é parcialmente refletor, ou seja, reflete apenas uma parte da luz, permitindo a passagem da outra parte.

Então, basicamente, o laser convencional aprisiona um feixe de luz entre dois espelhos, esses feixes aprisionados atravessam constantemente o meio ativo, e esses vácuos estimulam os átomos do material que está no meio ativo, emitindo assim ainda mais luz. Quando a luz escapa pelo espelho que é parcialmente refletor, essa luz sai com grande intensidade, além disso, suas ondas eletromagnéticas oscilam em sincronia, dessa forma temos uma luz estreita, intensa, coerente e direcional.

Um laser aleatório se utiliza de um meio de ganho, normalmente um coloide, por conta disso não utiliza espelhos. Coloides, ou sistemas coloidais, são misturas com partículas dispersas, essas partículas podem ser átomos, moléculas ou íons, e devem ter um diâmetro entre 1 micrometro e 1 nanômetro. As partículas espalhadoras funcionam como uma pseudo-cavidade, onde absorve, emite e espalha a luz de maneira desordenada, mantendo-a assim confinada em uma região de amplificação. Uma das proprie-

dades dos lasers aleatórios é justamente sua aleatoriedade na intensidade da luz, quando disparado um pulso luminoso sobre ele.

PONTOS QUÂNTICOS E CORE/SHELL:

A partir da ideia de manipulação e organização de átomos, ou pelo menos partículas minúsculas, funda-se duas áreas de estudo, essas são a nanociência e a nanotecnologia. Como o nome sugere, esses dois campos se baseiam nas propriedades de materiais quando estruturados em escalas nanométricas, ou seja, se trata do estudo de nanomateriais. Esses campos englobam diversas áreas do conhecimento, como química, física, engenharia, medicina, biologia, etc. Quando se tem uma estrutura em uma escala nanométrica, ou seja, entre 1 e 100 nanômetros de diâmetro, suas propriedades físicas e químicas se alteram em relação à escala macroscópica, obtendo uma melhora nas propriedades já existente, ou ainda na obtenção de uma nova.

Diante de diversos nanomateriais e suas diversas aplicações na indústria há uma que se destaca, estes são os nanocristais coloidais de semicondutores, também denominados de pontos quânticos (quantum dots). Pontos quânticos são semicondutores nanocristalinos que possuem portadores de cargas em um estado de forte confinamento, denominado de confinamento quântico. Quando esses pontos quânticos são suficientemente pequenos, os níveis de energia do mesmo tornam-se limitado, e como há uma relação entre a energia e o comprimento de onda, as propriedades óticas de um ponto quântico podem ser ajustadas variando seu tamanho.

Quando o tamanho físico do semicondutor é reduzido a um diâmetro abaixo do raio de Bohr do éxciton, que é, em média, a distância entre o elétron e o buraco, ocorre o

fenômeno de confinamento quântico, pois, as propriedades quânticas do éxciton estão relacionadas com o tamanho da nanopartícula (SANTOS et al., 2020). De certa forma, o confinamento quântico altera as propriedades da nanopartículas fazendo com que haja níveis discretos entre a banda de valência e a banda de condução do material, semelhantes a átomos isolados, por conta disso, pontos quânticos são também chamados de átomos artificiais. Quando confinado o éxciton (o par do elétron com o buraco) nas três dimensões, ocorre um aumento da banda proibida (*bandgap*) da nanopartícula. Com isso podemos observar que, quanto menor é a nanopartícula, maior o confinamento dos portadores de carga e consequentemente maior é a banda proibida. Dessa forma, como as absorções e emissões óticas do material é dependente do tamanho do *bandgap*, tenderá para a região azul do espectro eletromagnético a medida que as nanopartículas vão se tornando cada vez menores, e tenderá para o vermelho, a medida que ficam maiores.

Os pontos quânticos são classificados de acordo com os diferentes grupos da tabela periódica que seus constituintes pertencem, por exemplo, III-V (fosfeto de gálio), II-VI (telureto de cádmio) e IV-VI (sulfeto de chumbo)(NONG et al., 2019). No caso da síntese que será demonstrada nesse trabalho foi utilizado nanopartículas de Ti (titânio) e O (oxigênio), tendo assim uma nanopartícula TiO_2 pertencente a família IV-VI. Ainda assim, durante o processo de síntese, nosso ponto quântico receberá uma camada externa de sílica, formando $TiO_2@Sílica$.

Tendo em vista que o tamanho da nanopartícula tem um grande impacto em suas propriedades, é importante se ter o controle do tamanho do ponto quântico. Por conta disso, com o intuito de obter um maior controle do tamanho e ganho de estabilidade dos

nanocristais, são utilizados ligantes de superfície (STROYUK et al., 2019). Ligantes de superfície podem melhorar as propriedades relacionadas a defeitos de superfície, acarretando um aumento do rendimento quântico de fluorescência do material, já que a presença de defeitos na superfície causa uma perda da parte de energia emitida por meio de decaimentos não radioativos.

Um desses ligantes de superfície utilizado em semicondutores é feito de outro material semiconductor que cobre o ponto quântico como uma casca (*shell*), formando assim estruturas core/shell, ou núcleo/casca. Essas estruturas podem ser classificadas em tipo I ou II. No primeiro tipo, o semiconductor utilizado na casca possui um maior bandgap, enquanto o núcleo possui um bandgap menor, deste modo os buracos e elétrons ficam localizados no núcleo do ponto quântico, fazendo com que o material apresente um maior rendimento quântico devido a menor probabilidade de perdas por decaimentos não radioativos. Já no segundo tipo, os buracos e elétrons ficam separados, os elétrons ficam na casca e os buracos no núcleo, dessa forma apresenta uma melhor separação dos portadores de carga (SILVA et al., 2010; DANEK et al., 1996). Uma das vantagens de sistemas do tipo II é a alteração nas propriedades óticas do nanocristal através da variação da espessura da casca, algo que é pouco visto em sistemas core/shell do tipo I (SMITH; MOHS; NIE, 2009).

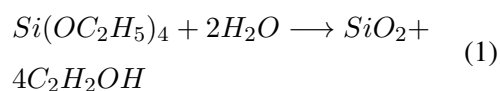
SINTETIZAÇÃO DAS NANOPARTÍCULAS DE TiO₂@Sílica:

Todo processo de sintetização das nanopartículas de TiO₂@Sílica foi realizado no laboratório de química analítica da UFPB, coordenado pelo Prof. Dr. Mário César Uguilino de Araújo. O processo de sintetização foi realizado por Jansen Félix dos An-

jos, onde foi descrito com uma maior quantidade de detalhes em sua monografia "A localização da luz: Um caminho para o desenvolvimento de dispositivos fotônicos avançados"(ANJOS, 2019).

O revestimento das nanopartículas foi realizado utilizando o método de Stöber, um processo para a síntese de nanopartículas por meio da hidrólise e condensação do TEOS (Ortossilicato de tetraetil, Si(OC₂H₅)₄) em etanol e água, utilizando amônia como catalisador.

O TEOS é um líquido incolor que se degrada na água e por conta disso é utilizado principalmente como um agente de reticulação em polímeros de silicone, ele é considerado como o precursor do dióxido de silício, que é bastante utilizado na indústria de semicondutores, além disso, o TEOS também é utilizado na produção de aerogel (ANJOS, 2019). O TEOS se converte facilmente em dióxido de silício quando reage com moléculas de água:

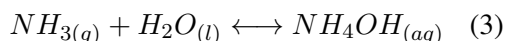


Esse processo se trata de uma hidrólise, e é um exemplo de processo sol-gel, onde é produzido materiais sólidos a partir de pequenas moléculas. O produto secundário dessa reação é o etanol. A reação segue com uma série de reações de condensação nas quais convertem a molécula de TEOS em um sólido como um mineral. Em temperaturas elevadas, acima de 600°C, o TEOS se converte em dióxido de silício, onde seu coproduto volátil é o éter dietílico:



O hidróxido de amônio, ou amoníaco, é uma monobase fraca, volátil, incolor, que libera gás amônia (NH₃) em temperaturas superior-

res a 50°C e se decompõe em nitrogênio e hidrogênio com temperaturas acima de 450°C (ATKINS; JONES; LAVERMAN, 2018). A escolha do uso de hidróxido de amônio durante a síntese foi devido a rápida reação com o meio.



Podemos observar que a substância NH_4OH é, na verdade, NH_3 solubilizada em água, então quando falamos de amônio, estamos nos referindo ao gás amônia dissolvida em água. Essa porção de água se desloca para as proximidades da superfície das nanopartículas devido ao potencial elétrico gerado por elas. Essas moléculas irão reagir com o TEOS, formando a camada de sílica em torno das nanopartículas de TiO_2 (ANJOS, 2019).

A mistura foi realizada dentro de um Erlenmeyer, onde o óxido de titânio foi misturado com etanol, e após vinte minutos em banho ultrassônico foi adicionado hidróxido de amônia. Após a adição do hidróxido de amônia foi adicionado alíquotas de amônia e TEOS simultaneamente, e novamente a mistura ficou em banho ultrassônico por pelo menos 5 horas, sendo que, quanto mais tempo no banho ultrassônico, maior dispersão da amostra, resultando em uma menor precipitação. Ao término desse processo, as nanopartículas de TiO_2 já estavam cobertas por uma camada de sílica. O processo de secagem da mistura foi realizado em um roto-evaporador, este processo é necessário para que se remova o etanol e o gás amônia da mistura. O equipamento foi ligado com uma temperatura de 60°C e uma rotação de 115 rpm. Após o processo foi obtido as nanopartículas em pó. Encerrado o procedimento de separação do gás amônia e etanol das nanopartículas, o pó obtido foi posto em uma

estufa com uma temperatura aproximada de 100°C por um período de 24 horas, esse processo é necessário para que se remova toda a umidade das nanopartículas. O resultado foi 10 gramas de nanopartículas prontas para as análises.

Figura 1: Nanopartículas de $TiO_2@Sílica$.



Fonte: Anjos, 2019

LOCALIZAÇÃO DE ANDERSON:

Entre as propriedades de transporte incomuns previstas para materiais desordenados está o fenômeno de localização de Anderson (ANDERSON, 1958). Esta é uma transição de fase induzida por distúrbio no comportamento de transporte de elétrons do regime de difusão clássico, no qual a conhecida lei de Ohm se mantém, para um estado localizado no qual o material se comporta como um isolante. O efeito encontra sua origem na interferência de elétrons que sofreram espalhamento múltiplo por defeitos no sólido (BERGMANN, 1982; SHENG, 1995). Um fenômeno semelhante é antecipado para o espalhamento múltiplo de ondas eletromagnéticas, mas com uma importante simplificação: ao contrário dos elétrons, os fótons não interagem uns com os outros. Isso torna o transporte de fótons em materiais desordenados um sistema de modelo ideal para estudar a localização de Anderson (SHENG, 1995; SOUKOULIS et al., 1989).

A dispersão múltipla da luz é um fenômeno comum na vida diária, ocorrendo, por exemplo, em açúcar, névoa, tinta branca e

nuvens. A propagação da luz nesses meios pode, em geral, ser descrita por um processo normal de difusão. Para difusão de luz através de um material desordenado, a mesma lei de Ohm se aplica à difusão de elétrons através de qualquer resistor comum: a transmissão, ou condutância, diminui linearmente com o comprimento do sistema (espessura).

A localização de Anderson interrompe completamente a difusão clássica, ou seja, ao aumentar a quantidade de espalhamento além de um valor crítico, o material faz uma transição para um estado localizado. Essa transição pode ser melhor observada nas propriedades de transmissão do sistema. No estado localizado, o coeficiente de transmissão diminui exponencialmente em vez de linearmente com a espessura de uma amostra.

A localização de ondas de Anderson em sistemas desordenados se origina da interferência no espalhamento elástico múltiplo. Aqui, consideramos uma fonte de luz (como um átomo excitado emitindo um fóton) em um meio desordenado na posição A . A fonte de luz é indicada por um símbolo de estrela e as esferas indicam os elementos de dispersão. Um caminho de luz aleatório que retorna à fonte de luz pode ser seguido em duas direções opostas. Às duas ondas que se propagam em direções opostas ao longo deste loop irão adquirir a mesma fase e, portanto, interferir construtivamente em A . Isso leva a uma maior probabilidade de a onda voltar a A e, conseqüentemente, a uma menor probabilidade de se propagar para longe de A . Ao diminuir a média do caminho livre l , a probabilidade de tais caminhos em loop aumenta e em um espalhamento forte o suficiente, o sistema faz uma transição de fase do estado de condução normal para um estado localizado, devido à interferência. No regime localizado, o sistema se comporta como um isolante não absorvente. A luz que incide so-

bre, por exemplo, uma laje seria quase completamente refletida e a transmissão restante diminuiria exponencialmente com a espessura da laje.

TEORIA DE MATRIZES ALEATÓRIAS E TRANSPORTE QUÂN- TICO:

A teoria de matrizes aleatórias foi originalmente proposto por Wigner no século XX, por conta de resultados experimentais dos espectros de ressonância de nêutrons lentos espalhados por núcleos pesados. Por conta disso Wigner propôs que o comportamento estatístico local de uma sequência de níveis de energia de um núcleo pesado é igual aos autovalores de uma matriz aleatória. Dado a complexidade do Hamiltoniano, Wigner sugeriu que os detalhes da interação não são relevantes, e este pode ser descrito como uma matriz H onde seus elementos são escolhidos de forma aleatória, desde que a matriz H seja hermitiana, já que seus autovalores devem ser reais (PASSOS; SOUZA, 2005; STÖCKMANN, 2000). Quando se trata de um sistema real, a matriz H é infinita, portanto, devemos realizar uma simplificação, limitando a ordem da matriz para N . Os elementos dessa matriz H são totalmente aleatórios, mas ainda assim deve obedecer às restrições das classes de universalidade que estão relacionadas com as simetrias do sistema. Quando o sistema não tem simetria de reversão temporal (campo magnético aplicado) a matriz H é unitária e seus elementos são complexos. Em sistemas que possuem simetria de reversão temporal temos dois casos possíveis: se a interação spin-órbita é desprezada, a matriz H é ortogonal com seus autovalores reais e simétricos, caso contrário, é simplética e seus elementos quaternions reais. No transporte quântico, o ponto quântico é ligado a reservatórios doadores

e receptores de elétrons utilizando guias de onda semi-infinitas. Cada guia é caracterizada por possuir modos transversais devido à largura finita da guia e a impenetrabilidade das paredes destas, no caso de 4 guias temos: A matriz de espalhamento de um ponto quântico é definida pela fórmula de Mahaux-Weidenmüller (SOUZA; MACÊDO, 2004):

$$S = 2i\pi W(E - H - i\pi W^\dagger W)^{-1} W^\dagger \quad (4)$$

Onde S é chamado de matriz espalhamento (ou matriz de dispersão) e vincula os canais de entrada e saída, por esse motivo tem uma dimensão igual ao número total de canais. A matriz H é aleatória com dimensões iguais ao número de ressonâncias na região de dispersão, sendo que o número de ressonâncias está diretamente relacionado ao tamanho da região de espalhamento. A matriz W liga os canais abertos com as ressonâncias, assim está revela o acoplamento ou as taxas de tunelamento entre duas regiões no espaço de coordenadas. A matriz de espalhamento pode ser escrita como sub-blocos de transmissão e reflexão.

$$S = \begin{bmatrix} r & t' \\ t & r' \end{bmatrix} \quad (5)$$

Com r e r' sendo matrizes de reflexão, t e t' sendo matrizes de transmissão. As três simetrias fundamentais que estão incorporadas no hamiltoniano, que são: sistemas com inversão temporal (conjunto ortogonal gaussiano), sistemas sem inversão temporal (conjunto unitário gaussiano) e sistemas sem rotação de spin (ensemble simplético gaussiano). Na teoria de espalhamento, os autovalores de transmissão podem ser utilizados para calcular as variáveis de transporte. Com isso, a condutância g é definida por:

$$g = \text{tr}(tt^\dagger) \quad (6)$$

Neste trabalho, utilizamos um conjunto com diversas realizações do hamiltoniano H , mostrando que a simulação teórica condiz muito bem com os resultados obtidos experimentalmente, demonstrando que os sistemas óticos desordenados também são universais.

RESULTADOS E DISCUSSÕES:

Desenvolvimento do programa de simulação:

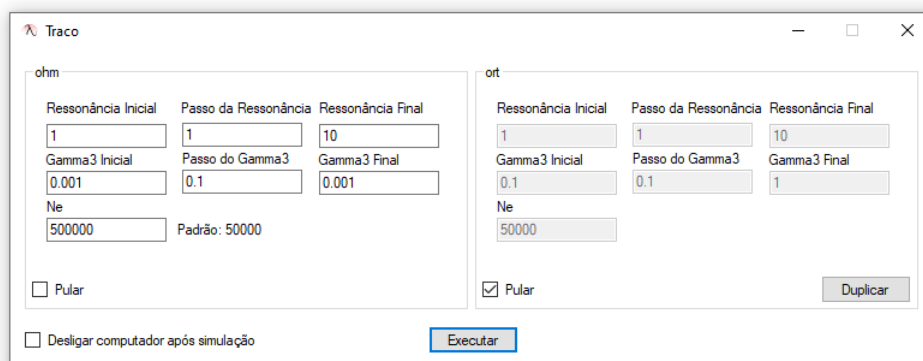
Para se calcular as médias da condutância ortogonal ($\langle g \rangle_{EOG}$) e a média da condutância unitária ($\langle g \rangle_{EGU}$) foi utilizado scripts. Esses scripts possuem uma sequência de procedimentos que relacionam os canais de entrada, saída, retroespalhamento com a média da condutância através da teoria de matrizes aleatórias com a utilização da equação 4 e equação 6. Os mesmos scripts foram utilizados para realização de simulações na tese "Localização de Anderson da Luz: Forte Dependência com ângulo de Incidência" (XAVIER et al., 2018). A princípio, foi utilizado o programa voltado para cálculos numéricos, chamado MATLAB, desenvolvida pela MathWorks Inc. Inicialmente, os scripts rodavam de forma independente os conjuntos ortogonais e unitário, era necessário fazer uma alteração no arquivo para se adicionar os valores dos ensembles do hamiltoniano, da ressonância e dos valores das guias ligadas ao ponto quântico, além disso, a simulação de cada ressonância era independente, ou seja, era necessário rodar o programa para cada ressonância. Nas primeiras simulações foi utilizado para os ensembles do hamiltoniano o valor $N = 5 \times 10^5$, já para os terminais de entrada (N_1) e terminal de transmissão (N_2) foi atribuído o valor 1, para o terminal de retroespalhamento (N_3) foi variado o valor entre 0,82 e 1, e por fim, o quarto terminal (N_4) foi desprezado, sendo atribuído o valor de 0,001 (Figura 4). As primeiras modificações feitas em ambos scripts

foi a adição de um laço de repetição, no qual a ressonância variava junto ao laço, após isso foi implementado no script a função de escrever as médias da condutância diretamente em um arquivo de texto, assim o usuário não tinha necessidade de anotar os valores presentes no terminal de saída do MATLAB, ainda nas modificações do script foi adicionado outro laço de repetição, mas com o canal N_3 de retroespalhamento variando, e por fim, foi aglutinado o script unitário junto ao ortogonal, formando um script único, chamado **traco**.

Devido à dificuldade dos demais usuários do traco para a atribuição dos valores necessários para a simulação, além de diver-

sas simulações realizadas com variáveis erradas por conta da falta de intuitividade do script, foi desenvolvido um programa a partir da linguagem de programação *Visual Basic*, com a intenção de auxiliar, com uma interface, facilitando assim a interação do usuário com o programa. Visual Basic é uma linguagem de alto nível, desenvolvido para fins didáticos pelos professores John George, Thomas Eugene e Mary Kenneth em 1964. O intuito inicial do programa era apenas facilitador, sendo que não houve mudanças profundas no script, ou seja, fora as alterações em relação aos laços de repetição e aglutinação, o script era essencialmente o mesmo.

Figura 2: Primeira versão do programa Traco.exe



Fonte: Próprio autor

A interface do programa conta com sete entradas de dados para as simulações com a presença de simetria de reversão temporal (ort) e sete entradas para simulações com ausência de simetria de reversão temporal (ohm). Além disso, o usuário ainda contava com a opção de pular alguma simulação e ainda desligar o computador após a realização de todo processo de cálculo e escrita dos dados. Neste, o usuário pode inserir a ressonância inicial e final, e o quanto ela varia, o mesmo pode ser feito para o Gamma3, que

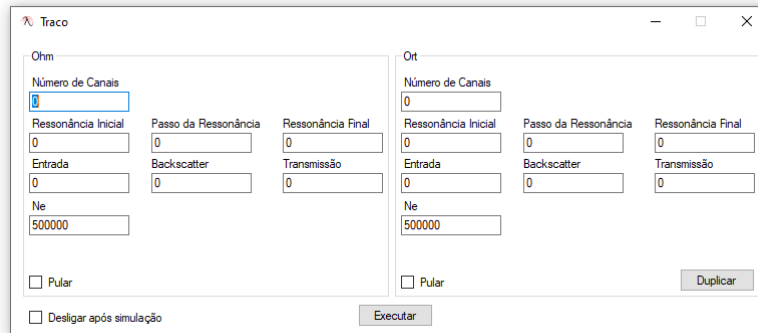
representa o terminal de retroespalhamento, já "Ne" se refere ao número de ensemble de hamiltoniano (N). O botão de duplicar tinha a função de repetir todas as entradas do ohm no ort, por fim, ao clicar em executar o MATLAB era executado e automaticamente já se iniciava a simulação.

Após a realização de todas as simulação com variações no terminal de retroespalhamento, foi proposto a ideia de aumentar o número de canais, a princípio, o script teve de ser estudado e compreendido para que ana-

lissasse a possibilidade de se adicionar canais extras. A escolha foi que se utilizasse seis canais, pois, deve se ter um número múltiplo de três, para que se possa dividir uma mesma quantidade de canais para cada terminal de entrada (N_1 , N_2 e N_3). O processo foi concluído após se compreender como os canais se relacionava com a matriz W , e como esta se relacionava com H e S (Matriz de Espalhamento), e após o sucesso da modificação do script, o mesmo foi reestruturado novamente, mas agora para que se fosse possível se adicionar n canais. A reestruturação do

arquivo se passou com diversos empecilhos devido a problemas com dimensionamento das matrizes, já que generalização no número de canais acarretava matrizes com dimensões dinâmicas e, por conta disso, foi necessário que as demais matrizes ficasse em função do número n de canais. Com o término da reformulação do script, onde agora suportava uma generalização no número de canais, também se modificou o programa com a interface de usuário, adicionando a entrada para a modificação do número de canais (Figura 3).

Figura 3: Segunda versão Traco.exe, agora com a possibilidade de modificar o número de canais



Fonte: Próprio autor

Semelhante ao anterior, a interface contém entrada de texto, para que se adicione as variáveis, onde nessa segunda versão foi adicionado a caixa de texto para a escolha do número de canal n , no qual só aceita números múltiplos de três, devido à divisão para os terminais. Foi removido a variação do Γ_3 , pois, já não havia interesse na variação do mesmo e foi adicionado a possibilidade de variar os terminais de entrada N_1 , de transmissão N_2 e o de retroespalhamento N_3 (chamado de Backscatter na imagem).

Até então, as simulações ocorriam muito bem com a utilização da MATLAB, porém, mesmo com a alta otimização do programa, a limitação no número de computadores fa-

zia com que o processo de obtenção de dados demorassem dias, já que, para cem ressonâncias com três canais, levava cerca de vinte e quatro horas para simular o ohm, e mais vinte e quatro horas para o ort. O laboratório de ótica e física moderna da UEPB-VIII possui diversos computadores que poderiam ser utilizado para a simulação, porém estes computadores rodam sistemas operacionais baseados no Linux, além disso, o MATLAB é um programa pago. Apesar disso, os computadores contavam com o programa científico para computação numérica, semelhante ao MATLAB, chamado Scilab. Apesar de não contar com uma boa otimização como MATLAB para as simulações, rodar o traco

nos computadores da universidade poderia nos dar vantagem no tempo, devido ao número de computadores que seriam utilizados. O Scilab é uma linguagem de alto nível, semelhante ao MATLAB, por conta disso, não foi necessário reescrever totalmente o script para que se pudesse utiliza-lo no Scilab, com apenas algumas mudanças em linhas de código específicos já foi suficiente para que tivéssemos um script funcional. Foi rodado algumas simulações no Scilab que já tinham sido executadas no MATLAB, a fim de comparar os resultados e verificar se, de fato, os dois scripts eram equivalentes, e obtemos um resultado positivo.

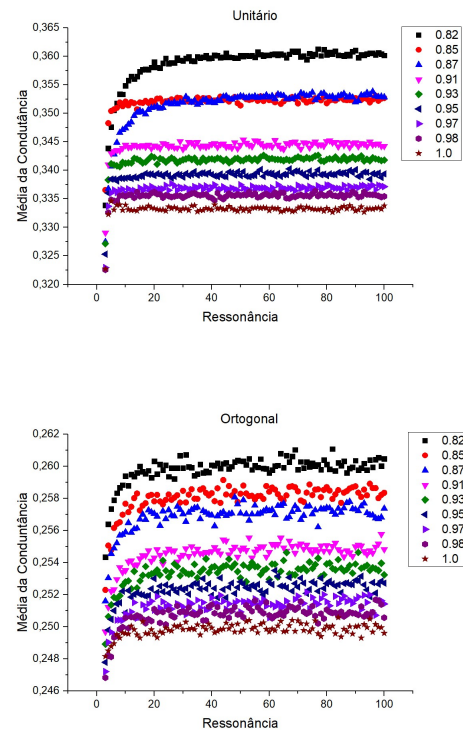
Simulações: Para a realização das simulações foi utilizado a geometria de "ponto quântico" com três contatos pontuais que estão conectados a reservatórios de fótons: o primeiro reservatório é o terminal de entrada (N_1), o segundo (N_2), terminal de transmissão, e por fim, o terminal (N_3) de retroespalhamento. Também foi considerado que a reflexão interna (IR) nos contatos do ponto de entrada (IR_1) e transmissão (IR_2) são iguais a zero ($IR_1 = IR_2 = 0$), ou seja, não há reflexão significativa nas interfaces de entrada e saída. Já no terminal de retroespalhamento (N_3) foi suposta duas diferentes reflexões internas efetivas: a primeira se trata de uma reflexão interna efetiva para os fótons retroespalhados de forma coerente, ou seja, fótons previamente localizados (IR_{3L}), já a segunda é uma reflexão interna (IR_{3D}) para os fótons espalhados incoerentemente (fótons não localizados), para este último, a reflexão interna na interface amostra-sílica não é apreciável, dessa forma pode ser negligenciado ($IR_{3D} \approx 0$), devido ao baixo contraste entre os índices de refração (1.45 - 1.53). Para cada reflexão interna efetiva IR_{3D} (terminal de retroespalhamento coerente), foi calculada a condutân-

cia desde N_1 para N_2 ($\langle g \rangle_{1-2}(IR_{3L})$) como sendo função do número de ressonância utilizando a equação 7. Foi tomado em consideração a presença (ensemble ortogonal gaussiano (EOG)) ou ausência (ensemble gaussiano unitário (EGU)) de simetria de reversão temporal (SRT).

$$\langle g \rangle_{1-2}(IR_{3L}) = \langle g \rangle_{EOG}(IR_{3L}) - \langle g \rangle_{EGU}(IR_{3L}) + \langle g \rangle_{EGU}(IR_{3D} = 0) \quad (7)$$

Onde $\langle g \rangle_{EOG}(IR_{3L})$, $\langle g \rangle_{EGU}(IR_{3L})$, e $\langle g \rangle_{EGU}(IR_{3D} = 0)$ representam a condutância desde N_1 para N_2 tendo em conta a presença de SRT (IR_{3L}), ausência de SRT (IR_{3L}) e ausência de SRT com $IR_{3D} = 0$, respectivamente. A primeira parte da equação 7 ($\langle g \rangle_{EOG}(IR_{3L}) - \langle g \rangle_{EGU}(IR_{3L})$) representa o termo associado à interferência para uma reflexão interna efetiva IR_{3L} .

Figura 4: Média da condutância x Ressonância com variação do terminal de retroespalhamento.



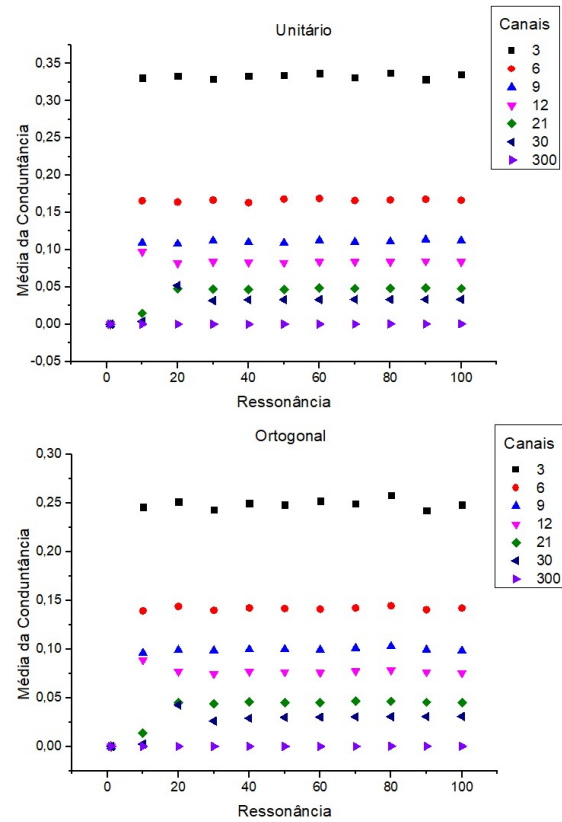
Fonte: Próprio autor

Nas primeiras simulações foi utilizado para os ensembles do hamiltoniano o valor $N = 5 \times 10^5$, já para os terminais de entrada (N_1) e terminal de transmissão (N_2) foi atribuído o valor 1, para o terminal de retroespalhamento (N_3) foi variado o valor entre 0,82 e 1, e por fim, o quarto terminal (N_4) foi desprezado, sendo atribuído o valor de 0,001. A ressonância variou entre 2 e 100, a fim de mostrar um gráfico mais detalhado neste intervalo (Figura 4). Podemos observar nos gráficos que há uma saturação na média da condutância a medida que a ressonância aumenta, e ainda, que ao aumentar valor associado ao terminal de retroespalhamento (Gamma3), a média da condutância satura em valores cada vez menor. Em geral, os valores da média da condutância são maiores para as simulações que possui ausência de simetria de reversão temporal, ou seja, unitário.

Ao término das simulações com variações no Gamma3, se iniciou a série de simulações para se observar como a média da condutância se comportava ao aumentar o número de canais para cada guia. Como dito na seção anterior, o programa traco foi adaptado para que fosse possível realizar tais simulações. A metodologia aplicada foi semelhante a anterior, mantendo os ensembles do hamiltoniano em $N = 5 \times 10^5$ e variando a ressonância de 1 a 100 (com exceção da simulação realizada com 300 canais, onde foi necessário variar a ressonância de 1 a 400 para observar o comportamento do gráfico), com o passo 10. Com os canais múltiplos de três, foi possível dividir o mesmo número de canais para cada terminal, dessa forma foi mantido o valor 1 para os três terminais, de entrada, transmissão e retroespalhamento ($N_1 = N_2 = N_3 = 1$). Foram realizadas simulações com 3, 6, 9, 12, 21, 30 e 300 canais, tanto com SRT (ort), como na ausência

de SRT (ohm).

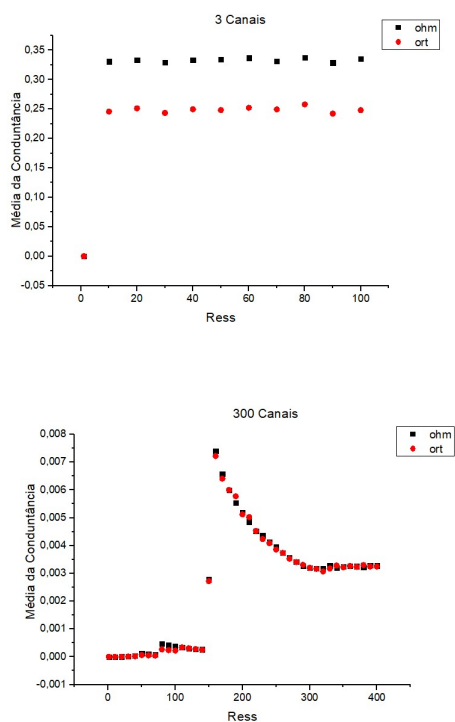
Figura 5: Média da condutância x Ressonância para diversos número de canais.



Fonte: Próprio autor

O gráfico deixa notório que, a medida que se aumenta o número de canais por terminal, tem-se uma queda na média da condutância, onde essa vai tendendo para zero. Na Figura 4, é visível uma maior média da condutância para a simulação sem simetria de reversão temporal, e o mesmo se repete na Figura 5, porém, percebe-se que, ao aumentar o número de canais, essa diferença entre as médias da condutância em ohm e ort diminui, isso devido aos fótons de um terminal não interferir com os fótons dos demais terminais, dessa forma há uma diminuição na localização, por conta disso há um aumento na condutância ortogonal, de forma a se aproximar dos valores da média da condutância unitária. Essa diferença é perceptível na Figura 6 abaixo:

Figura 6: Diferencia entre as médias da condutância ortogonal e unitária para 3 canais e 300 canais.



Fonte: Próprio autor

CONSIDERAÇÕES FINAIS

Todo processo desenvolvido até aqui, da síntese das nanopartículas, desenvolvimento do programa, otimizações no script, simulações realizadas e comparação dos resultados nos levou a alguns resultados peculiares como, por exemplo, a queda da média da condutância a medida que o número de canais por terminais aumenta, algo que tem que ser estudado mais a fundo para se obter a certeza dessa associação.

Ainda assim, as simulações realizadas no trabalho "Localização de Anderson da Luz: Forte Dependência com ângulo de Incidência"(XAVIER et al., 2018), com a utilização do mesmo script, concordam satisfatoriamente com os resultados experimentais, ao menos para as simulações realizadas com três canais, mostrando que esta abordagem para se tratar os fenômenos de transporte, que estuda os transportes de luz em um

meio óptico fortemente desordenado composto por nanopartículas de núcleo-casca ($TiO_2@Silica$) suspenso em solução de etanol é válida. Ainda foi obtido resultados significativos, sendo que neste trabalho foi desenvolvido uma interface que facilita a interação do usuário com o script de simulação usado no MATLAB, foi modificado o script para que se desse suporte a uma generalização no número de canais, tornando o número de canais variáveis, e ainda a portabilidade do script em MATLAB, para o Scilab, um programa gratuito, aumentando a quantidade de pessoas com acesso a este tipo de simulação.

77

Referências

- ALTSHULER, BL; SHKLOVSKII, BI. Repulsion of energy levels and conductivity of small metal samples. **Sov. Phys. JETP**, v. 64, n. 1, p. 127–135, 1986.
- ANDERSON, Philip W. Absence of diffusion in certain random lattices. **Physical review**, APS, v. 109, n. 5, p. 1492, 1958.
- ANJOS, JANSEN FELIX DOS. A LOCALIZAÇÃO DA LUZ: UM CAMINHO PARA O DESENVOLVIMENTO DE DISPOSITIVOS FOTÔNICOS AVANÇADOS. v. 1, p. 1–35, 2019.
- ATKINS, Peter; JONES, Loretta; LAVERMAN, Leroy. **Princípios de Química: Questionando a Vida Moderna e o Meio Ambiente**. [S.l.]: Bookman Editora, 2018.
- BERGMANN, Gerd. Quantitative analysis of weak localization in thin Mg films by magnetoresistance measurements. **Physical Review B**, APS, v. 25, n. 4, p. 2937, 1982.

- DANEK, Michal et al. Synthesis of luminescent thin-film CdSe/ZnSe quantum dot composites using CdSe quantum dots passivated with an overlayer of ZnSe. **Chemistry of Materials**, ACS Publications, v. 8, n. 1, p. 173–180, 1996.
- GENOVESE, Matthew P; LIGHTCAP, Ian V; KAMAT, Prashant V. Sun-believable solar paint. A transformative one-step approach for designing nanocrystalline solar cells. **ACS nano**, ACS Publications, v. 6, n. 1, p. 865–872, 2012.
- JAVAN, Ali; BENNETT JR, William R; HERRIOTT, Donald R. Population inversion and continuous optical maser oscillation in a gas discharge containing a He-Ne mixture. **Physical Review Letters**, APS, v. 6, n. 3, p. 106, 1961.
- JIMENEZ-VILLAR, Ernesto et al. Anderson localization of light in a colloidal suspension (TiO₂@ silica). **Nanoscale**, Royal Society of Chemistry, v. 8, n. 21, p. 10938–10946, 2016.
- JOHN, Sajeew. Electromagnetic absorption in a disordered medium near a photon mobility edge. **Physical Review Letters**, APS, v. 53, n. 22, p. 2169, 1984.
- _____. Localization of light. **Phys. Today**, v. 44, n. 5, p. 32–40, 1991.
- KELLERMANN, Guinther et al. Structure of PbTe (SiO₂)/SiO₂ multilayers deposited on Si (111). **Journal of Applied Crystallography**, International Union of Crystallography, v. 43, n. 3, p. 385–393, 2010.
- MAIMAN, Theodore H. Stimulated optical radiation in ruby. **nature**, Springer, v. 187, n. 4736, p. 493–494, 1960.
- MIRLIN, Alexander D. Spatial structure of anomalously localized states in disordered conductors. **Journal of Mathematical Physics**, American Institute of Physics, v. 38, n. 4, p. 1888–1917, 1997.
- _____. Statistics of energy levels and eigenfunctions in disordered systems. **Physics Reports**, Elsevier, v. 326, n. 5-6, p. 259–382, 2000.
- NONG, Jinpeng et al. Eco-friendly and high-performance photoelectrochemical anode based on AgInS₂ quantum dots embedded in 3D graphene nanowalls. **Journal of Materials Chemistry C**, Royal Society of Chemistry, v. 7, n. 32, p. 9830–9839, 2019.
- PASSOS, André L; SOUZA, André MC. Distribuições de Probabilidade da Condutância em Pontos Quânticos com Contatos não Ideais. **Scientia Plena**, v. 1, n. 5, 2005.
- RODRÍGUEZ, E et al. SiO₂/PbTe quantum-dot multilayer production and characterization. **Applied Physics Letters**, American Institute of Physics, v. 86, n. 11, p. 113117, 2005.
- SANTOS, Calink IL et al. SÍNTESE E CARACTERIZAÇÃO DE PONTOS QUÂNTICOS AMBIENTALMENTE AMIGÁVEIS, UM MEIO SIMPLES DE EXEMPLIFICAR E EXPLORAR ASPECTOS DA NANOCIÊNCIA E NANOTECNOLOGIA EM CURSOS DE GRADUAÇÃO. **Química Nova**, SciELO Brasil, v. 43, n. 6, p. 813–822, 2020.
- SHENG, P. **3-Wave Scattering and the Effective Medium**. [S.l.]: Academic Press: San Diego, 1995. p. 49–113.
- SIEGMAN, Anthony E. Lasers university science books. **Mill Valley, CA**, v. 37, n. 208, p. 169, 1986.
- SILVA, Fernanda Oliveira et al. O estado da arte da síntese de semicondutores nanocristalinos coloidais. **Química nova**,

SciELO Brasil, v. 33, n. 9, p. 1933–1939, 2010.

SMITH, Andrew M; MOHS, Aaron M; NIE, Shuming. Tuning the optical and electronic properties of colloidal nanocrystals by lattice strain. **Nature nanotechnology**, Nature Publishing Group, v. 4, n. 1, p. 56–63, 2009.

SOUKOULIS, CM et al. Existence of Anderson localization of classical waves in a random two-component medium. **Physical review letters**, APS, v. 62, n. 5, p. 575, 1989.

SOUZA, AMC; MACÊDO, AMS. Probability distributions of transport observables in quantum dots: crossover between universal ensembles. **Physica A: Statistical Mechanics and its Applications**, Elsevier, v. 344, n. 3-4, p. 677–684, 2004.

SPERLING, Tilo; BUEHRER, Wolfgang et al. Direct determination of the transition to localization of light in three dimensions. **Nature Photonics**, Nature Publishing Group, v. 7, n. 1, p. 48–52, 2013.

SPERLING, Tilo; SCHERTEL, Lukas et al. Can 3D light localization be reached in 'white paint'? **New Journal of Physics**, IOP Publishing, v. 18, n. 1, p. 013039, 2016.

STÖCKMANN, Hans-Jürgen. **Quantum chaos: an introduction**. [S.l.]: American Association of Physics Teachers, 2000.

STROYUK, O et al. Inherently broadband photoluminescence in Ag–In–S/ZnS quantum dots observed in ensemble and single-particle studies. **The Journal of Physical Chemistry C**, ACS Publications, v. 123, n. 4, p. 2632–2641, 2019.

WETTER, Niklaus U et al. Polydispersed powders (Nd³⁺: YVO₄) for ultra efficient random lasers. **Particle & Particle Systems Characterization**, Wiley Online Library, v. 35, n. 4, p. 1700335, 2018.

WIERSMA, Diederik S; BARTOLINI, Paolo et al. Localization of light in a disordered medium. **Nature**, Nature Publishing Group, v. 390, n. 6661, p. 671–673, 1997.

WIERSMA, Diederik S; RIVAS, Jaime Gómez et al. Localization or classical diffusion of light? **Nature**, Nature Publishing Group, v. 398, n. 6724, p. 207–207, 1999.

XAVIER, Mário César Soares et al. Localização de Anderson da Luz: forte dependência com ângulo de incidência. Universidade Federal da Paraíba, 2018.