



**UNIVERSIDADE ESTADUAL DA PARAÍBA
CAMPUS VIII
CENTRO DE CIÊNCIAS, TECNOLOGIA E SAÚDE - CCTS
DEPARTAMENTO DE FÍSICA
CURSO DE LICENCIATURA EM FÍSICA**

JOHNNATHAN SPERANDIO FAREL

LOCALIZAÇÃO DA LUZ: ANÁLISE DE SIMULAÇÕES TEÓRICAS

**ARARUNA
2021**

JOHNNATHAN SPERANDIO FAREL

LOCALIZAÇÃO DA LUZ: ANÁLISE DE SIMULAÇÕES TEÓRICAS

Trabalho de Conclusão de Curso apresentada ao Curso de Graduação em Física da Universidade Estadual da Paraíba, como requisito parcial à obtenção do título de Licenciado em Física

Área de concentração: Física
Orientador: Prof. Dr. Mário César Soares Xavier

**ARARUNA
2021**

É expressamente proibido a comercialização deste documento, tanto na forma impressa como eletrônica. Sua reprodução total ou parcial é permitida exclusivamente para fins acadêmicos e científicos, desde que na reprodução figure a identificação do autor, título, instituição e ano do trabalho.

F2221 Farel, Johnnathan Sperandio.
Localização da luz: análise de simulações teóricas [manuscrito] / Johnnathan Sperandio Farel. - 2021.
37 p. : il. colorido.

Digitado.
Trabalho de Conclusão de Curso (Graduação em Física) - Universidade Estadual da Paraíba, Centro de Ciências, Tecnologia e Saúde, 2021.
"Orientação : Prof. Dr. Mário César Soares Xavier , Coordenação do Curso de Licenciatura em Física - CCTS."

1. Luz. 2. Física. 3. Nanopartículas. I. Título

21. ed. CDD 535

JOHNNATHAN SPERANDIO FAREL

LOCALIZAÇÃO DA LUZ: ANÁLISE DE SIMULAÇÕES TEÓRICAS

Trabalho de Conclusão de Curso apresentada ao Curso de Graduação em Física da Universidade Estadual da Paraíba, como requisito parcial à obtenção do título de Licenciado em Física

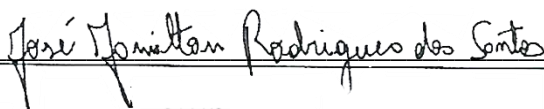
Área de concentração: Física

Aprovado em: 14/10/2021.

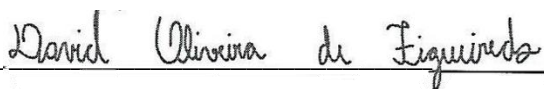
BANCA EXAMINADORA



Prof. Dr. Mário César Soares Xavier
Universidade Estadual da Paraíba (UEPB)



Prof. Dr. José Jamilton Rodrigues dos Santos
Universidade Estadual da Paraíba (UEPB)



Prof. Dr. David Oliveira de Figueiredo
Universidade Estadual da Paraíba (UEPB)

AGRADECIMENTOS

Ao meu orientador, Dr. Mário César Soares Xavier, pela orientação prestada e a oportunidade de participar do grupo Fotônica, pelo apoio, paciência e incentivo.

A minha mãe e meu pai, que mesmo a distância me deram suporte e motivação para desenvolver academicamente.

Aos meus colegas de turma, que apesar de ter seguidos caminhos diferentes, ficaram na minha torcida até o final.

Aos meus amigos, em especial Juscelino Amarante, Acson Clementino da Silva, David de Lima, Aldair Soares de Souza, que proporcionaram momentos de amizade em casa e acompanharam esse caminho de estudo das disciplinas do curso.

Ao grupo Fotônica e seus membros, em especial Jansen, Maria Eduarda, Eduarda Feliciano, Francielho Fernandes, Cassia Canuto, Geisse Kelly e Mônica Paulino, pelo apoio, surpresas e bons momentos.

Ao técnico de laboratório e amigo, Fagne Fernandes, pela ajuda durante o desenvolvimento desse trabalho, além das conversas esclarecedoras.

A todos meus professores, que me proporcionaram uma base de conhecimento para que pudesse chegar até aqui.

RESUMO

A localização da luz abrange uma fronteira de várias pesquisas, que além de ser um tema essencial para a formação dos físicos na área de estado sólido, também pode ser aplicável em empresas e na indústria. A localização da luz no sistema 3D só ocorre principalmente em um meio espalhador extremadamente opaco, ainda mais quando as partículas pesquisadas estão em uma suspensão coloidal, devido a sua estrutura refletora. A localização de Anderson é uma ferramenta bastante útil para a análise dos mecanismos de espalhamento presentes em um sistema e de grande utilidade em fenômenos óticos da luz. Este fenômeno ocorre por causa do produto da interferência de muitos espalhamentos das funções de onda do elétron, um exemplo desse são os LASERS aleatórios. Vários trabalhos desenvolvidos no Brasil por autores como Ernesto Jiménez Villar e Mário César Soares Xavier apresentaram as nanopartículas núcleo casca de $\text{TiO}_2@$ Silica, são uma alternativa para o melhor estudo dessas produções óticas, devido a uma diminuição da condutância ótica e um aumento de absorção perto da borda de entrada são observados quando o ângulo de incidência foi aumentado. Dentre esses estudos temos a formação dessas nanopartículas, experimentação desses compostos e análise dos valores registrados em simulações teóricas. Este trabalho apresenta participação da produção de nano partículas de $\text{TiO}_2@$ Silica no laboratório da UFPB e um estudo mais amplo de simulações teóricas a partir da localização da luz. Também foi feito um estudo sobre as matrizes aleatórias e utilização de scripts chamado “TRACO” implantado dentro do programa de cálculo numérico MATLAB. O script é utilizado para organizar e agilizar o processamento do cálculo de matriz aleatória, com o uso do computador. Nesse trabalho falaremos sobre a avanço da fabricação de LASER e trataremos de explicar conceitos do estudo quântico de nanopartículas e os cálculos de simulação teórica de matrizes aleatórias.

Palavras Chave: Fotônica em meio desordenados. Localização de Anderson da luz. Meios óticos fortemente desordenados. Espalhamento múltiplo. Nanopartículas de núcleo casca.

ABSTRACT

The location of light covers a frontier of several researches, which besides being an essential theme for the formation of physicists in the solid state area, can also be applicable in companies and in industry. The location of light in the 3D system only occurs mainly in an extremely opaque scattering medium, even more when the studied particles are in a colloidal suspension, due to its reflective structure. Anderson localization is a very useful tool for analyzing the scattering mechanisms present in a system and very useful in optical phenomena of light. This phenomenon occurs because of the interference product of many scattering of electron wave functions, an example of which is random LASERS. Several works developed in Brazil by authors such as Ernesto Jiménez Villar and Mário César Soares Xavier presented the core shell nanoparticles of TiO₂@Silica, which are an alternative for the better study of these optical productions, due to a decrease in optical conductance and an increase in near absorption leading edge are observed when the clearance angle has been increased. Among these studies we have the formation of these nanoparticles, experimentation of these compounds and analysis of values recorded in theoretical simulations. This work presents the participation of the production of TiO₂@Silica nanoparticles in the UFPB laboratory and a broader study of theoretical simulations from the location of light. A study was also carried out on random matrices and the use of scripts called "TRACO" implemented within the numerical calculation program MATLAB. The script is used to organize and streamline the processing of the random matrix calculation, using the computer. In this work we will talk about the advancement of LASER fabrication and will try to explain concepts of the quantum study of nanoparticles and theoretical simulation calculations of random matrices.

KeyWords: Photonics in ordered media. Anderson localization of light. Strongly disordered optical media. Multiple scattering. Shell core nanoparticles.

LISTA DE ILUSTRAÇÕES

Figura 1:	Representação de um laser convencional.....	12
Figura 2:	Representação de um LASER aleatório.....	13
Figura 3:	Estrutura núcleo casca.....	14
Figura 4:	Representação do efeito de variação da energia de banda proibida em função do tamanho da nanopartículas:	15
Figura 5:	Erlenmeyer mergulhados no Ultrassônico	17
Figura 6:	Processo de rotaevaporação da amostra, obtendo somente as nanopartículas de TiO ₂ . 17	17
Figura 7:	Nanopartículas de TiO ₂ @Silica.....	18
Figura 8:	Demonstração de guias para uma simulação com 4 guias distintas	20
Figura 9:	Fórmula de Mahaux-Weidenmüller dentro do script.....	23
Figura 10:	Formatação do Script TRACO	23
Figura 11:	Scripts utilizado na simulação denominado “traco”	24
Figura 12:	Segunda versão Traco.exe, com modificações no número de canais e a interface 25	25
Figura 13:	Atualização do script Traco.exe, implementação de início, passo e final do Retroespalhamento.....	25
Figura 14:	Média da condutância x Ressonância com variação do terminal de retroespalhamento	26
Figura 15:	Diferencia entre as médias da condutância ortogonal e unitária para 3 e 300 canais 27	27
Figura 16:	Média da Condutância Unitária e média ortogonal de 300 canais, 700 ressonâncias e 500 mil repetições	28
Figura 17:	Média da condutância Unitária e média Ortogonal de 300 canais, 400 ressonâncias e 500 mil repetições	29
Figura 18:	Média da Condutância Unitária e Média Ortogonal de 3 canais, 1000 ressonâncias e 50 mil repetições.....	30
Figura 19:	Média da Condutância Unitária e Média Ortogonal de 3 canais, 100 ressonâncias e 5 milhões de repetições	31
Figura 20:	Média da Condutância Unitária e Média Ortogonal de 6 canais, 10 ressonâncias e 5 milhões de repetições	32

SUMÁRIO

1. INTRODUÇÃO.....	10
2. LASER	11
2.1 Laser Aleatórios	12
3. PONTOS QUÂNTICO	13
4. SINTETIZACAO DAS NANOPARTICULAS DE TiO ₂ @Silica	15
5. LOCALIZAÇÃO DE ANDERSON	18
6. MATRIZES ALEATÓRIAS	19
7. SIMULAÇÕES TEÓRICAS	21
7.1 Matrizes aleatórias.....	21
7.2 Utilização de scripts em simulações.....	22
8. RESULTADOS E DISCUSSÕES.....	26
9. CONCLUSÃO.....	33
REFERÊNCIAS.....	34

1. INTRODUÇÃO

O fenômeno da localização de Anderson baseia-se num fenômeno quântico que considera um modelo de ligação forte de elétrons em materiais sólidos e cristalinos, com níveis de energia em cada ponto distribuídos aleatoriamente; por consequência não são perceptíveis facilmente. Ainda mais se a absorção residual ou em fenômenos não lineares, já que provocam a diminuição do comprimento de fótons. “O acoplamento e campo próximo pode dificultar a localização da luz” (SKIPETROV E SOKOLOV. 2018, p. 4). Subsequentemente a esse trabalho, Escalante e Skipetrox demonstraram que uma estrutura núcleo-casca poderia ser uma estratégia promissória para alcançar a localização da luz em 3D. Trabalhos recentes demonstraram um efeito de intensificação da absorção quando o sistema se aproxima a localização. Provoca uma intensificação da localização e absorção perto da borda de entrada da amostra (nanopartículas), observado que à medida em que o ângulo de incidência é aumentado. “A reflexão especular, foi consideravelmente menor que a reflexão interna efetiva sofrida pelos fótons coerentemente retroespalhados exatamente na direção oposta, indicando uma propagação não recíproca da luz (quebra da simetria de espelho)” (SOARES, 2018, p. 36).

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” (ALTSCHULER; SHKLOVSKII, 1986; MIRLIN, 1997, p. 10). Um dos físicos da área de física atômica, Wigner demonstrou que para uma determinada amostra, as 11 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.

Neste trabalho, primeiramente teremos apresentação das nanopartículas feitas no laboratório de química na UFPB, esses resultados poderiam abrir novos caminhos para o desenho e fabricação de dispositivos fotônicos avançados baseados em meios óticos altamente desordenados. Por exemplo, a texturização da superfície de entrada, a qual aumentaria o ângulo de incidência médio da luz, aumentaria notavelmente a interação luz-matéria (absorção, índice de refração) perto da borda de entrada. Também foi realizado simulações de matrizes aleatórias utilizando o programa MATLAB e um scripts nomeado de “TRACO”.

Comparando as simulações teóricas realizadas na tese de doutorado “Início de uma nova ótica: Localização da luz com desenvolvimento de simulações numéricas”, (SILVA, 2020) e

“Localização de Anderson da Luz: Forte Dependência com o Ângulo de Incidência” (SOARES, 2018).

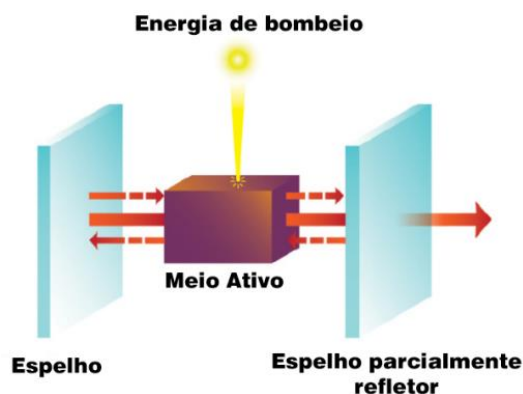
2. LASER

O LASER (abreviação para Light Amplified by Stimulated Emission Radiation) é um dos inventos com mais destaque nos científicos modernos, instrumento que é usado em aplicações de altíssima precisão, como exemplo temos laser em cirurgias de correção de vista que tratam o deslocamento da retina para corrigir a miopia, medição de altíssima precisão, na estética usada para tratamentos de pele onde são corrigidos manchas causadas pelo sol, remoção de tatuagens, etc. esse artefato é tão importante que até agora tem estudos relacionado a LASERS como Uso do laser de baixa intensidade no tratamento de indivíduos com disfunção temporomandibular: revisão sistemática (CF ALBUQUERQUE, 2021), Uso do laser de baixa potência na promoção da fotobiomodulação: prevenção de alterações cicatriciais decorrentes do pós-operatório de câncer de mama (CADIMA, 2020) e High-power portable terahertz laser systems (KHALATPOUR, 2020).

Como vemos esse artefato da era moderna tem aplicações importantes principalmente na área da saúde, conseqüentemente as pesquisas nessa área ainda seguem ativas e está longe de acabar. O funcionamento deste se dá por três componentes: um meio ativo, um mecanismo de bombeio e um sistema de realimentação (SIEGMAN, 1986, p. 12).

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; “utilizava rubi, após isso foi desenvolvido em 1961, por Javan, Herriott e Bennett” (JAVAN; BENNETT JR; HERRIOTT, 1961, p. 565), um laser a gás de He-Ne. Na figura 1 apresenta-se um modelo de laser convencional utilizados em trabalhos óticos, a composição de dois espelhos e um material a emitir fótons.

Figura 1: Representação de um laser convencional



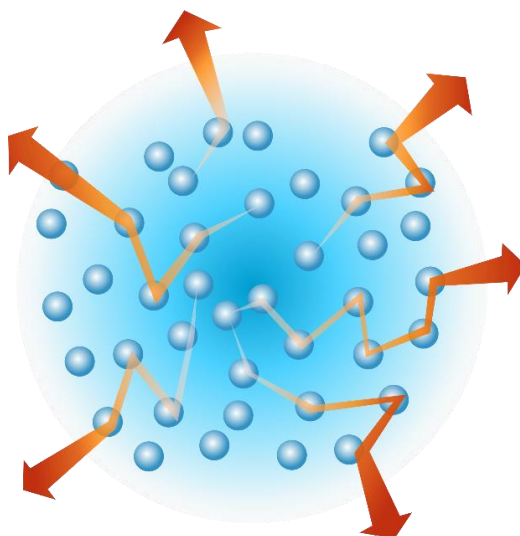
Fonte: CID ARAÚJO/ UFPE (2016, com adaptações)

Observa-se que o laser convencional aprisiona um feixe de luz entre dois espelhos, a luz fica aprisionada constantemente no meio ativo, fazendo com que estimulem os átomos do material que está no meio, emitindo assim ainda mais luz. Dessa forma a luz é estreita, coerente direcional e intensa, devido a que as ondas eletromagnéticas oscilam em harmonia.

2.1 Laser Aleatórios

O LASER aleatório vem sendo estudado no começo da década de 60 com os primeiros pioneiros Letokhov (1967) e Sorokin et al (1968), as pesquisas conseguiram modificar os LASERS convencionais, utilizando um meio ganho, normalmente um corante, e partículas espalhadoras que funcionam como uma pseudo-cavidade, confinando a luz dentro da região de amplificação, geralmente são de forma colóide, ao ter uma própria estrutura refletiva. Sistemas coloidais, apresentam partículas dispersas, geralmente micro a manométricas. Para a construção deve-se ter relevância a espessura ótica da amostra maior que o comprimento das partículas no meio de ganho. “O livre caminho médio de espalhamento pretende-se ser de menor do que a espessura da amostra L , pois caso contrário, a amostra torna-se transparente, e não deve haver ganho suficiente para atingir o limiar LASER” (SOARES, 2018, p. 12). Na figura 2, apresenta-se como são originadas as partículas dentro do laser aleatório, a formação desse tipo não utiliza espelhos, é formado por uma cavidade ótica, uma fonte de energia e um meio ganho.

Figura 2: Representação de um LASER aleatório



Fonte: CID ARAUJO /UFPE (2016, com adaptações)

Ao não ter espelhos aproveitasse de propriedades óticas especiais, por causa da formação coloidal das nanoparticulas capazes de absorver, emitir e espalhar luz de maneira desordenada que refletem entre elas provocando um aumento na energia do fóton emitido.

3. PONTOS QUÂNTICO

Também conhecidos como semicondutores nanocristalinos (NCs), já que as escalas são nanométricas, quer dizer, entre 1 a 100 nanômetros de diâmetro. Quando eles sofrem excitação por radiação eletromagnética produzem um par elétron-buraco conhecido como éxciton. Esse fenômeno provoca um forte confinamento quântico em três dimensões do espaço (3D), o que confere aos pontos quânticos (PQs) algumas propriedades óticas interessantes tais como a forte dependência de emissão em função do tamanho das partículas. “Uma das propriedades mais importantes dos pontos quânticos é a sua fotoluminescência” (MACHADO, C. E, et al 2015, p. 1309).

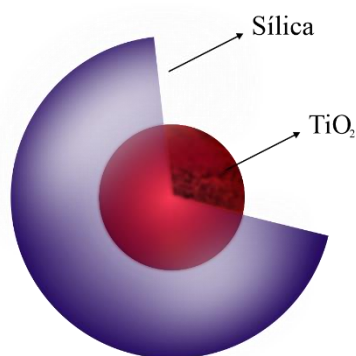
No presente momento, a maioria das pesquisas relacionadas a pontos quânticos tem se voltado para o estudo sobre os métodos de síntese, fabricação em laboratórios de materiais semicondutores nanométricas. Dentro dessas pesquisas os métodos que se destacam à tona são o de top-down e bottom-up. “Resumidamente os métodos top-down são preparados a partir de precursores de carbono maiores tais como diamante, grafite, nanotubos de carbono e óxido de grafite” (MACHADO, C. E, et al 2015, p. 1310).

“Já o método bottom-up são sintetizados a partir de precursores moleculares, como ácido cítrico, glicose e resina, que podem adicionalmente ser purificados por meio de centrifugação, diálise, eletroforese, ou outra técnica de separação” (MACHADO, C. E, et al 2015, p. 1311).

Nesse trabalho foi utilizado o método bottom-up sintetizando nanopartículas de titânio (Ti) e oxigênio (O), tendo assim uma nanopartículas de TiO_2 . Durante esse processo também será aplicado uma camada externa de Sílica. Tendo em vista que o tamanho das nanopartículas 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, p. 5707).

A definição de pontos quânticos vem do inglês quantum dots (QDs), a estrutura dessas matérias no caso binários, formado por um núcleo (core) de um semicondutor com nível gap de energia e recoberto por uma casca (Shell) do outro semicondutor de outro nível gap de energia, como ilustra a figura 3:

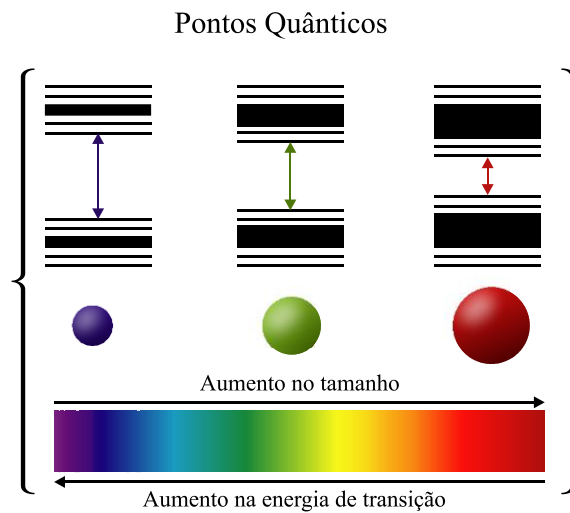
Figura 3: Estrutura núcleo casca



Fonte: SILVA, 2020 (COM ADAPTAÇÕES)

Quanto menor a nanopartículas, mais eficiente será o confinamento dos portadores de carga e conseqüentemente maior é a banda proibida. Resulta em largas bandas no espectro de absorção. À medida que as partículas diminuem de tamanho, a banda proibida aumenta, alterando as propriedades optoeletrônicas do material. “As dimensões reduzidas dessas nanoestruturas (comparáveis com as distancias interatômicas)” (RIBEIRO,2011, p. 23). Assim, com as absorções e emissões óticas do material é dependente do tamanho da banda, tendendo para o vermelho, à medida que as nanopartículas vão se tornando cada vez maiores, caso contrário, ficara perto da região azul do espectro eletromagnético, como ilustra a figura 4.

Figura 4: Representação do efeito de variação da energia de banda proibida em função do tamanho da nanopartículas:



Fonte: CALINK ET AL, 2020 (COM ADAPTAÇÕES)

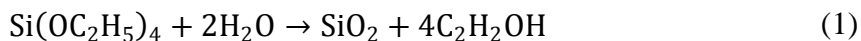
4. SINTETIZACAO DAS NANOPARTICULAS DE TiO_2 @Silica

O trabalho divide-se em duas partes, uma é da fabricação das nanopartículas de Sílica tendo participação do Programa Institucional de Bolsas de Iniciação Científica (PIBIC) do aluno Jansen Felix dos Anjos. A experiência ajudou a entender o processo de criação das nanopartículas, a formação desses pontos quânticos que produziram inúmeros trabalhos aprovados em revistas e defesa de tese de doutorados. Todo processo de síntetização das nanopartículas de TiO_2 @Silica foi realizado no laboratório de química analítica da UFPB, coordenado pelo Prof. Dr. Mário César Ugulino de Araújo. O processo de síntetização foi realizado por Jansen Félix dos Anjos, 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), também temos Novel TiO_2 @Silica Nanoparticles for random laser (MESTRE, 2014).

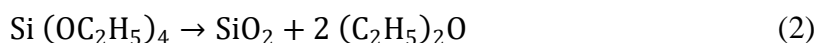
O revestimento das nanopartículas foi realizado utilizando o método de Stöber, um processo para a síntese de nanopartículas por meio da hidrólise e condensação do TEOS (Ortossilicato de tetraetil, $\text{Si}(\text{OC}_2\text{H}_5)_4$) em etanol e água, utilizando amônia como catalisador.

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 (VILLAR, 2017, p. 16765).

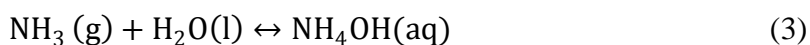
O TEOS se converte facilmente em dióxido de silício quando reage com moléculas de água:



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 di-etílico” (VILLAR, 2017, p. 16766):



“O hidróxido de amônio, ou amoníaco, é uma monobase fraca, volátil, incolor, que libera gás amônia (NH_3) em temperaturas superiores a 50°C e se decompõe em nitrogênio e hidrogênio com temperaturas acima de 450°C” (ATKINS; JONES; LAVERMAN, 2018, p. 397). 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 ” (MESTRE, 2014, p. 6).

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 (Figura 5). 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” (ANJOS, 2020, p. 22).

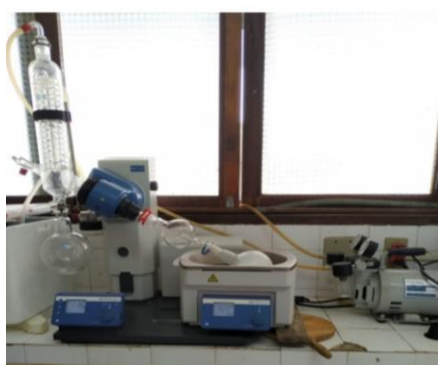
Figura 5: Erlenmeyer mergulhados no Ultrassônico



Fonte: ANJOS, 2019

O processo de secagem da mistura foi realizado em um rotoevaporador, 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.

Figura 6: Processo de rotaevaporação da amostra, obtendo somente as nanopartículas de TiO_2 .



Fonte: ANJOS, 2019

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 7: Nanopartículas de TiO₂@Silica



Fonte: ANJOS, 2019

5. LOCALIZAÇÃO DE ANDERSON

“A localização de Anderson é um fenômeno amplamente estudado desde sua descoberta por P.W. Anderson e consiste em ideias apresentadas no contexto do estudo de funções de onda eletrônicas em potenciais de rede desordenados, aleatórios” (MAE, KOKUBUN, 2008, p. 3). Esta é uma transição de fase induzida por distúrbio no comportamento de transporte de elétrons do regime de difusão clássica, 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, p. 3). 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, p. 10). O modelo de Anderson é amplamente utilizado para investigar o fenômeno de localização de estados eletrônicos em materiais desordenados e propriedades de transporte eletrônico em dispositivos mesoscópicos. Já que a difusão de luz através de um material desordenado, é a mesma lei de Ohm que se aplica à difusão de elétrons através de qualquer resistor comum, a transmissão ou condutância, diminui linearmente com o comprimento do sistema (espessura). Essa difusão de luz provoca uma quebra da difusão clássica, ao aumentar a quantidade de espalhamento além de um valor crítico. O material uma transição para um estado localizado

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 (Figura 8). 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.

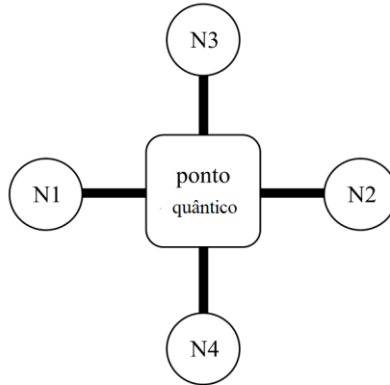
6. MATRIZES ALEATÓRIAS

No ano 1950, a teoria de matrizes aleatórias começou a ganhar destaque graças aos trabalhos do físico Eugene Wigner. “Wigner pretendeu descrever as propriedades dos níveis de energia de núcleos pesados, quando estes eram excitados” (BOTTEGA,2014, p. 60). Este sistema nuclear pode ser representado por H , um operador hermitiano num espaço de Hilbert, chamado de Hamiltoniano. Na mecânica quântica os níveis de energia são representados por autovalores de H , de modo que os espaços entre os níveis de energia dos núcleos sejam dados pelos espaços entre autovalores consecutivos de H . O problema é que geralmente H não é conhecido. Mesmo que seja determinado, provavelmente será intratável, tanto do ponto de vista matemático, quanto do computacional. Tentar computar seus autovalores diretamente não é a melhor opção. Wigner propôs que seria melhor considerar H como uma matriz aleatória, que estaria dentro de uma classe de matrizes aleatórias, chamada de ensemble.

“A matriz H tem uma dimensão igual ao número de ressonâncias na região de dispersão. O número de ressonâncias está diretamente relacionado ao tamanho da região de espalhamento” (SOARES, 2018, p.59). Utilizando dessas matrizes aleatórias numa simulação teórica, determinamos a condutância como função da reflexão interna efetiva sentida pelos fótons retroespalhados coerentemente, mostrando uma concordância satisfatória com os resultados experimentais

Isso nos leva a um estudo teórico das nanopartículas suspensas na TiO_2 @Silica, interligando o estudo da Localização de Anderson com as matrizes aleatórias de Wigner, pois com esses resultados computacionais conseguimos determinar os valores teóricos. Neste processo, 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:

Figura 8: Demonstração de guias para uma simulação com 4 guias distintas



Fonte: SILVA, 2020 (com adaptações)

A matriz de espalhamento de um ponto quântico é definida pela fórmula de MahauxWeidenmüller (SOUZA; MACÊDO, 2004, p. 20):

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

Analisando a equação vemos que S é chamado de matriz de dispersão que vincula os canais de entrada e saída, percebemos que o total de número de canais será igual a uma dimensão. O número de ressonâncias está ligado ao tamanho do espalhamento, a matriz W liga canais abertos as ressonâncias. Essa matriz W revela o acoplamento e as taxas de tunelamento nas duas regiões. 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, esta 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. As três simetrias que estão incorporadas no hamiltoniano, são: sistemas com inversão temporal (conjunto ortogonal gaussiano), sistemas sem inversão temporal (conjunto unitário gaussiano) e sistemas sem rotação de spin (ensemble simplectico gaussiano):

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

“As propriedades de transporte podem ser obtidas através do bloco de transmissão t da matriz S , de modo que a condutância seja escrita como” (SOUZA,2018, p. 21):

$$g = tr(tt^\dagger) \quad (5)$$

No momento em que a condutância pertence a um dos conjuntos de Wigner-Dyson. Podemos realizar conjuntos com vários hamiltonianos H , para demonstrar que a simulação teórica concordara com os resultados feitos no laboratório.

7. SIMULAÇÕES TEÓRICAS

7.1 Matrizes aleatórias

Consideramos a geometria chamada "ponto quântico" com três contatos pontuais que o conectam três reservatórios de fótons: primeiro (N_1), terminal de entrada; segundo (N_2), terminal de transmissão e terceiro (N_3), terminal de retroespalhamento. Para simular o tamanho da região de dispersão, usamos uma série de ressonâncias, que é proporcional a esse tamanho.

Consideramos que a reflexão nos contatos do ponto de entrada (IR_1) e transmissão (IR_2) são iguais zero ($IR_1 = IR_2 = 0$), isto é, não há reflexão apreciável na interface de entrada e saída. Supomos duas diferentes reflexões internas efetivas no terminal de retroespalhamento (N_3); uma reflexão interna efetiva para os fótons retroespalhados de forma coerente (fótons previamente localizados), IR_{3L} e outra reflexão interna para fótons retroespalhados incoerentemente (fótons não localizados), IR_{3D} . (SOARES, 2018, p. 61)

Para os fótons retroespalhados incoerentemente, a reflexão interna na interface amostrada pode ser negligenciada ($IR_{3D} \approx 0$), devido ao baixo contraste entre os índices de refração (1.53 - 1.46) (SOARES, 2018, p. 62). Para cada reflexão interna efetiva IR_{3L} (terminal de retroespalhamento), calculamos a condutância desde N_1 para N_2 como função do número de ressonâncias através da (equação 2). Para esse fim, tomamos em consideração a presença (ensemble ortogonal de Gauss (EOG)) ou ausência (ensemble gaussiano unitário (EGU)) de simetria de reversão temporal (SRT):

$$\langle g \rangle_{1-2} (IR_{3L}) = \langle g \rangle_{EOG} (IR_{3L}) - \langle g \rangle_{EGU} (IR_{3L}) + \langle g \rangle_{EGU} (IR_{3D} = 0) \quad (6)$$

A equação acima $\langle g \rangle_{\text{EOG}}(\text{IR}_{3\text{L}})$, $\langle g \rangle_{\text{EGU}}(\text{IR}_{3\text{L}})$ e $\langle g \rangle_{\text{EGU}}(\text{IR}_{3\text{D}} = 0)$ representam a condutância desde N_1 para N_2 tendo em conta: a presença de SRT ($\text{IR}_{3\text{L}}$), ausência de SRT ($\text{IR}_{3\text{L}}$) e ausência de SRT com $\text{IR}_{3\text{D}} = 0$, respectivamente.

O símbolo $\langle \cdot \rangle$ indica a média dos ensembles universais. A primeira parte da equação ($\text{EOG}(\text{IR}_{3\text{L}}) - \langle g \rangle_{\text{EGU}}(\text{IR}_{3\text{L}})$) representa o termo associado à interferência para uma reflexão interna efetiva $\text{IR}_{3\text{L}}$. (SOARES,2018. 61) Por isso, $\langle g \rangle_{1-2}(\text{IR}_{3\text{L}})$ é calculado pela adição do termo unitário $\langle g \rangle_{\text{EGU}}(\text{IR}_{3\text{D}} = 1)$, considerando uma reflexão interna efetiva em N_3 igual a zero, mais o termo interferencial, calculado pela expressão $\langle g \rangle_{\text{EOG}}(\text{IR}_{3\text{L}}) - \langle g \rangle_{\text{EGU}}(\text{IR}_{3\text{L}})$ considerando uma reflexão interna efetiva $\text{IR}_{3\text{L}}$. Em resumo, assumimos que os fótons retroespalhados coerentemente (anteriormente localizados) sentem uma reflexão interna efetiva igual a $\text{IR}_{3\text{L}}$, enquanto os fótons incoerentemente retrodispersos (não localizados) sentem uma reflexão interna efetiva $\text{IR}_{3\text{D}} = 0$. Para calcular a condutância em incidência normal, consideramos $\text{IR}_{3\text{L}} = 3\%$. Portanto, os valores assintóticos (para grande número de ressonâncias) de condutância relativa para cada reflexão interna efetiva $\text{IR}_{3\text{L}}$ ($G_{\text{IRR}}(\infty; \text{IR}_{3\text{L}})$) podem ser calculados pela equação (3), considerando uma reflexão interna de referência (IR_{R}) na incidência normal de $\text{IR}_{\text{R}} = 3\%$ (SOARES, 2018, p. 62).

$$(\infty, \text{IR}_{3\text{L}}) = \frac{\langle g \rangle_{\text{EOG}}(\text{IR}_{\text{R}} = 3\%) - \langle g \rangle_{\text{EGU}}(\text{IR}_{\text{R}} = 3\%) + \langle g \rangle_{\text{EOG}}(\text{IR}_{3\text{D}} = 0)}{\langle g \rangle_{\text{EOG}}(\text{IR}_{3\text{D}}) - \langle g \rangle_{\text{EGU}}(\text{IR}_{3\text{D}}) + \langle g \rangle_{\text{EGU}}(\text{IR}_{3\text{D}} = 0)} \quad (7)$$

A notação $\langle g \rangle$ representa os valores assintóticos da condutância calculados para um grande número de ressonâncias. O Ensemble Ortogonal Gaussiano (EOG), cuja intensidade da repulsão entre os níveis é dada pelo elemento químico estudado e do bilhar de Sinai, respectivamente (WOLCHOVER, 2018, p. 438) O Ensemble Unitário Gaussiano (EGU), descreve o espectro os zeros da função Zeta de Riemann.

7.2 Utilização de scripts em simulações

Os scripts são comandos de instruções em que a máquina executa determinadas tarefas segundo o programa e sua configuração; para realizar essas tarefas é preciso de uma linguagem de programação. Aproveitando essa ferramenta computacional utilizou-se um script para calcular as médias da condutância ortogonal ($\langle g \rangle_{\text{EOG}}$) e a média da condutância unitária ($\langle g \rangle_{\text{EGU}}$), utilizando a linguagem de programação Visual Basic. Com essa linguagem

adicionou-se a formatação para a interface e foi utilizado a equação 4 e no programa para executar os cálculos de matrizes, como ilustrado na figura 9.

Figura 9: Fórmula de Mahaux-Weidenmüller dentro do script

The image shows a snippet of MATLAB code. At the top, the Mahaux-Weidenmüller formula is displayed in a large font:
$$S = 2i\pi W(E - H - i\pi W^\dagger W)^{-1} W^\dagger$$
. Below the formula, the code defines the matrix S using the formula, initializes Ws, and then uses nested for loops to calculate H(v,v) and H(v,w) for v and w ranging from 1.0 to res.

```

S=eye(n)-2.0*pi*1i*(W')*(((e1*eye(res)-Q1+1i*pi*(W)*(W')))\(W));
Ws{i}(j,k{i})=y{i}*(sqrt(((2.0*lambda))/(pi*(ress+1.0))))*sin(j*(k{i}+(ff{i}))*pi/(ress+1.0));

for v=1.0:ress;
    H(v,v)=A(v,v)*sqrt(V/(2.0));

    for w=v+1:ress;
        H(v,w)=A(v,w)*sqrt(V);
    end
end
end

```

Fonte: Próprio Autor

Figura 10: Formatação do Script TRACO

The image shows a screenshot of a SciNotes window titled 'TracoScilab.sce'. The window contains a script with various parameters and comments. The script starts with a 'function main()' and includes several commented-out lines for parameters like 'canaisohm', 'ressinicialohm', 'resspassoohm', etc. The script is formatted with line numbers and color-coded comments.

```

1 function main()
2
3 .....//UNITARIO//.....
4 ... canaishm = 3 .....//Numeros de canais
5 ... ressinicialohm = 10 .....//Ressonancia Inicial
6 ... resspassoohm = 10 .....//Passo da Ressonancia
7 ... ressfinalohm = 100 .....//Ressonancia Final
8 ... entradaohm = 1 .....//Valores de Entrada
9 ... bsohm = 1 .....//Valores Backscatter
10 ... tohm = 1 .....//Valores Transmissão
11 ... Neohm = 5000 .....//Numero de Repetições Ne
12 ... pohm = 0 .....//Deixe em 1 para pular função Unitario
13
14
15 .....//ORTOGONAL//.....
16 ... canaisort = 0
17 ... ressinicialort = 0
18 ... resspassoort = 0
19 ... ressfinalort = 0
20 ... entradaort = 0
21 ... bsort = 0
22 ... tort = 0
23 ... Neort = 0
24 ... port = 1
25 ... //desligarf = -0

```

Fonte: Próprio Autor

Esse script foi utilizado para as simulações teóricas, utilizando como suporte de cálculo de matriz aleatória o software MATLAB, desenvolvida pela MathWorks Inc. A interface do programa conta com oito entradas para as simulações com a presença de simetria de reserva temporal (ort), simetricamente temos oito para ausência de simetria de reserva temporal (ohm).

Nas entradas temos como colocar o número de canais de múltiplos de três devido ao terminal de entrada, a ressonância inicial, o passo e o final, para assim conseguirmos controlar a quantidade de dados analisados e caso ocorra algum problema poder reiniciar a simulação, sem perder as matrizes já salvas. Também temos a entrada, transmissão e retroespalhamento que representam o N_1 , N_2 e N_3 respectivamente.

Figura 11: Scripts utilizado na simulação denominado “traco”

The image shows a software window titled "Traco" with two main configuration panels, "ohm" and "ort".

ohm panel:

Ressonância Inicial	Passo da Ressonância	Ressonância Final
1	1	10
Gamma3 Inicial	Passo do Gamma3	Gamma3 Final
0.001	0.1	0.001
Ne	Padrão: 50000	
500000		

Pular

Desligar computador após simulação

ort panel:

Ressonância Inicial	Passo da Ressonância	Ressonância Final
1	1	10
Gamma3 Inicial	Passo do Gamma3	Gamma3 Final
0.1	0.1	1
Ne		
50000		

Pular

Fonte: Próprio Autor

Inicialmente o script TRACO, foi implementado para melhor a interface e conseguir configurar os números de repetições N_e , que representava o número de ensemble de hamiltoniano denominado “ N_e ” na interface. Já O “Gama 3” representava o terminal de retroespalhamento.

Após ter adicionado esse novo script a nosso trabalho, foram feitas atualizações, como adicionado o número de 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 ficassem em função do número n de canais” (SILVA, 2020, p. 25).

Figura 12: Segunda versão Traco.exe, com modificações no número de canais e a interface

The screenshot shows the Traco.exe application window with two main configuration panels: 'Ohm' and 'Ort'. Each panel contains several input fields and checkboxes. The 'Ohm' panel has 'Número de Canais' set to 0, 'Ressonância Inicial' at 0, 'Passo da Ressonância' at 0, 'Ressonância Final' at 0, 'Entrada' at 0, 'Backscatter' at 0, 'Transmissão' at 0, and 'Ne' at 500000. The 'Ort' panel has 'Número de Canais' set to 0, 'Ressonância Inicial' at 0, 'Passo da Ressonância' at 0, 'Ressonância Final' at 0, 'Entrada' at 0, 'Backscatter' at 0, 'Transmissão' at 0, and 'Ne' at 500000. Both panels have a 'Pular' checkbox. At the bottom, there is a 'Desligar após simulação' checkbox, an 'Executar' button, and a 'Duplicar' button.

Fonte: Próprio Autor

Como podemos observar o script ficou bem apresentado, prático de utilizar e configurar as simulações teóricas isso nos possibilitou fazer um estudo aprofundado das médias de condutância ortogonais e unitárias, assim como examinar as entradas, retroespalhamento e transmissão das matrizes aleatórias.

Recentemente foi elaborado outra atualização no script que foram adicionados, três sessões onde consegue programar o início, passo e final das medidas em relação a entrada e retroespalhamento, já que futuros trabalhos apresentaram um estudo sobre variações da entrada e transmissão dentro das simulações teóricas.

Figura 13: Atualização do script Traco.exe, implementação de início, passo e final do Retroespalhamento

The screenshot shows the updated Traco.exe application window. The 'Ohm' panel now has 'Número de Canais' set to 3. The 'Ressonância' section has three sub-fields: 'Inicial' (1), 'Passo' (1), and 'Final' (100). The 'Entrada e Backscatter' section also has three sub-fields: 'Inicial' (1), 'Passo' (1), and 'Final' (10). The 'Ne' field is 500000 and 'Transmissão' is 1. The 'Ort' panel has 'Número de Canais' set to 3, 'Ressonância' (Inicial: 1, Passo: 1, Final: 100), and 'Entrada e Backscatter' (Inicial: 1, Passo: 1, Final: 10). The 'Ne' field is 500000 and 'Transmissão' is 1. Both panels have a 'Pular' checkbox. At the bottom, there is a 'Desligar após simulação' checkbox, an 'Executar' button, and a 'Duplicar' button. The bottom right corner shows the email 'acson@outlook.com.br' and the date '13/09/2021'.

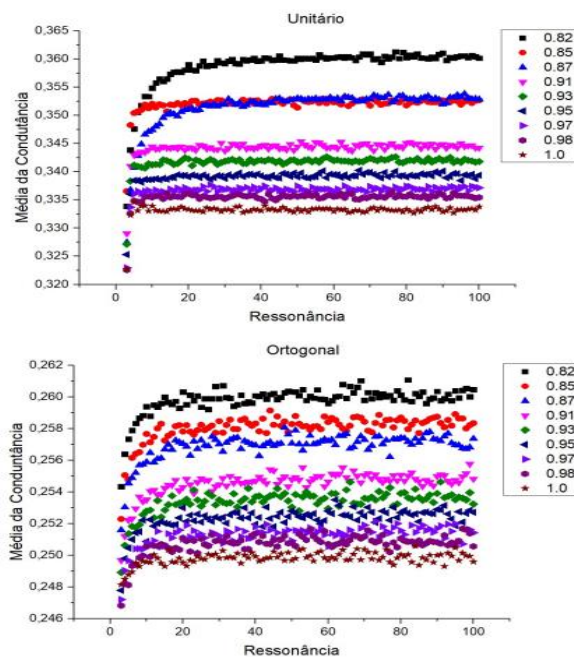
Fonte: Próprio Autor

8. RESULTADOS E DISCUSSÕES

O trabalho foi desenvolvido nos computadores da Universidade Estadual da Paraíba, Campus Araruna, no laboratório de Fotônica, orientado pelo Professor doutor Mario Cesar Soares Xavier, que vem desenvolvendo vários trabalhos de pesquisa na área da física experimental; esse trabalho levou entorno de 1 a 4 meses, devido a pandemia. Tendo em vista que o script “TRACO”, consegue agilizar os cálculos de simulações de matrizes no programa MATLAB, podemos obter as médias da condutância ortogonal ($\langle g \rangle_{\text{EOG}}$) e a média da condutância unitária ($\langle g \rangle_{\text{EUG}}$), já que as equações 4 e 6 estão implantadas no script e é calculado de forma paralela já que o TRACO funciona calculando essas duas médias aglutinadas em um script unitário, quer dizer que podemos programar para ele calcular as duas sem ter que configurar novamente

Além de a interface ser bastante flexível com a modificação dos canais de entrada, saída, retroespalhamento e número de repetições. A pesquisa deste trabalho de conclusão de curso foi constatar que o programa “traco”, consiga extrapolar valores já estudados. As simulações rodavam com valores fixos dos números de repetições (N_e) $5 \cdot 10^5$, com ressonâncias de 0 a 100, só variando os números de canais como ilustrados na figura 14.

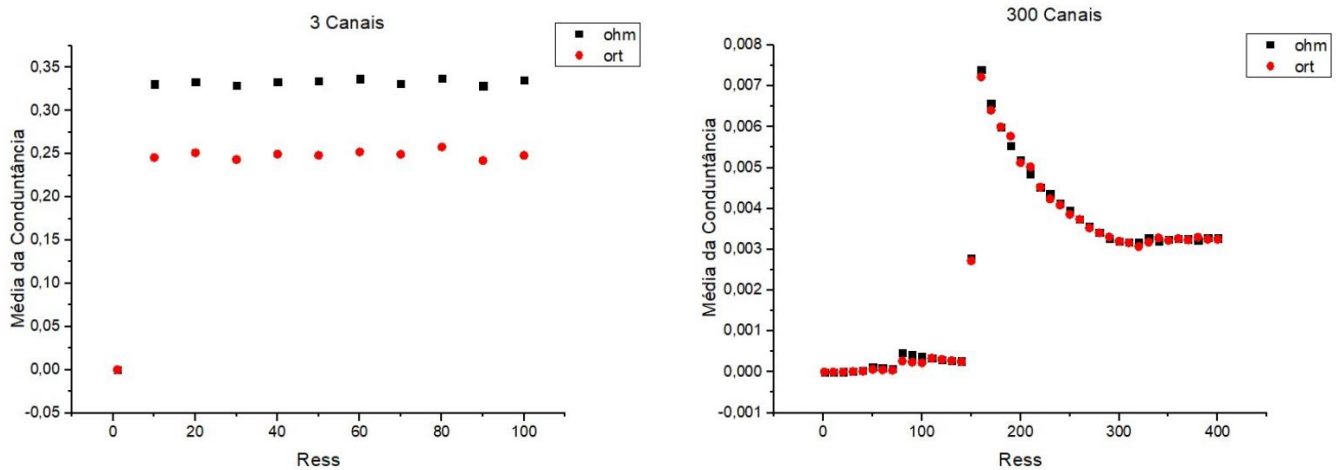
Figura 14: Média da condutância x Ressonância com variação do terminal de retroespalhamento



Fonte: SILVA, 2020

Porém, percebe-se que, ao aumentar o número de canais, essa deferência entre as médias da condutância em ohm e ort diminui, 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 (Silva, 2020). Na figura 15 observe as médias da condutância ortogonal e unitária analisando o comportamento dos dois gráficos ouve uma saturação em 300 canais, talvez porque foram atribuídos valores da ressonância entre 0 a 400, variando de 1 em 1, já com 3 canais o intervalo das amostras é de 10 em 10.

Figura 15: Diferencia entre as médias da condutância ortogonal e unitária para 3 e 300 canais

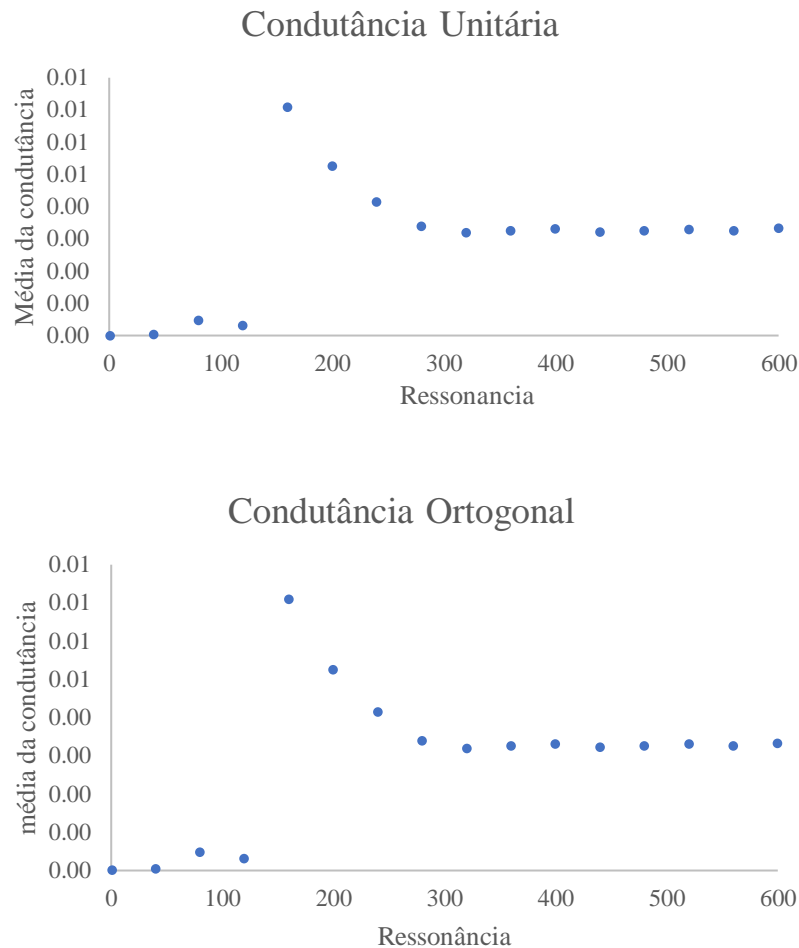


Fonte: SILVA, 2020

Partindo desse estudo e com auxílio do script “TRACO” e do MATLAB, mudamos os valores de ressonâncias, canais e repetições para interpretar e comprovar que o script está em bom funcionamento e para perceber o comportamento dos gráficos em diferentes situações. Para isso atribuímos valores as ressonâncias iniciais de 100, 400, 700 e até 1000 e também mudamos os valores das repetições (Ne) de 5 milhões, 500 mil e 50 mil repetições. Deixamos desenvolvendo no computador do laboratório de ótica, da Universidade Estadual da Paraíba com o script TRACO, os dados obtidos ficavam num bloco de notas, até as simulações pararem, ao acabar o script fechava o bloco e transformava-o em um arquivo de planilha no Excel. Caso acontecesse algum erro, ele detectava e interrompia a simulação, notificava em que número de ressonância tinha parado, programávamos de onde parou e o ciclo continuava.

O primeiro estudo das simulações, atribuímos valores acima de 100 ressonâncias, também foram aumentados o número de canais já estudados.

Figura 16: Média da Condutância Unitária e média ortogonal de 300 canais, 700 ressonâncias e 500 mil repetições



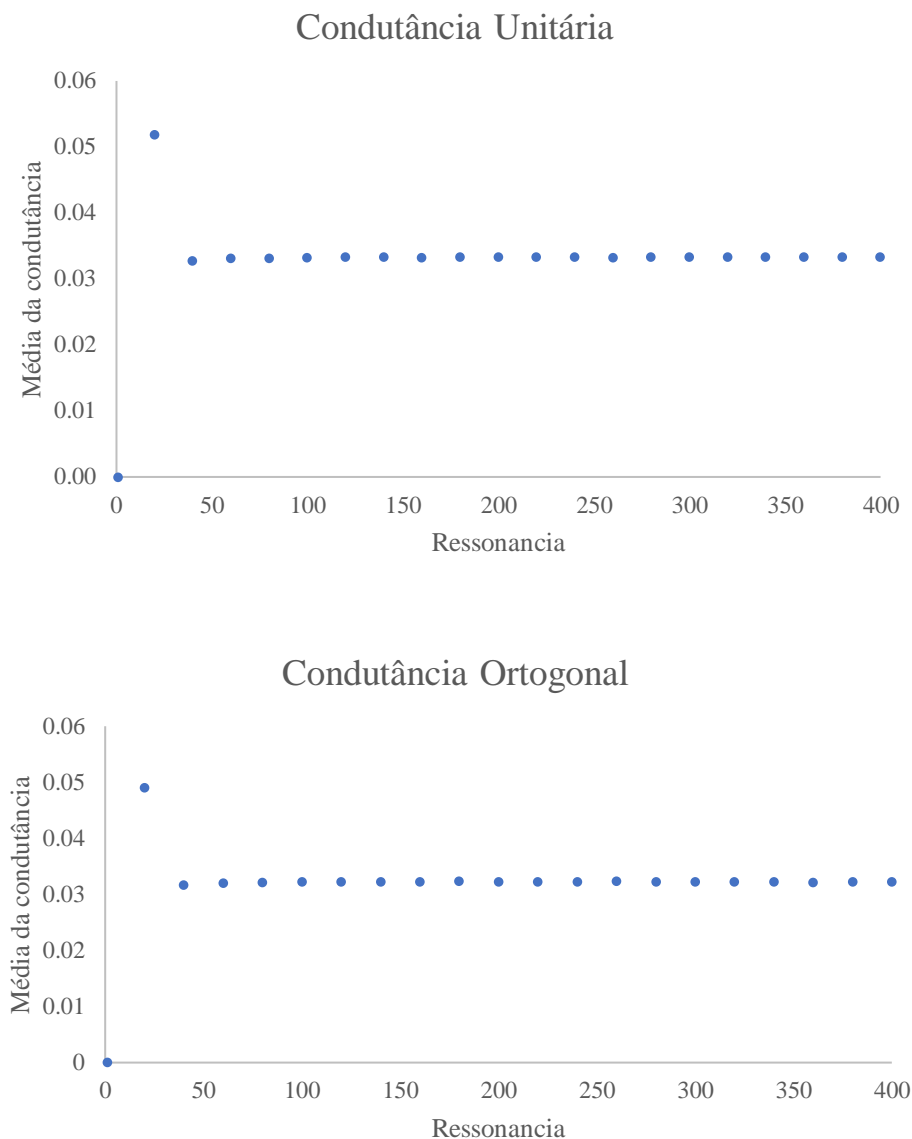
Fonte: Próprio Autor

A simulação foi aplicada no script TRACO, programando 300 canais, 700 ressonâncias, 500 mil repetições e a entrada foi de 40 ressonâncias com intervalos de 40 em 40 até 700, Vemos que o comportamento das matrizes aleatórias sempre tem uma saturação em um ponto, isso se deve ao espaçamento entre autovalores que nesse caso ocorreu próximo de 160 ressonância e a média de $7,09 \cdot 10^{-3}$ o tempo realizado para executar essa simulação foi de uma semana.

No nosso segundo gráfico mudamos só o número de repetições e a ressonância final, aplicando valores de 300 canais e 400 ressonâncias a 500 mil repetições, com um intervalo de

20 em 20. Tentamos experimentar se aconteceria com valores aproximados, os canais e as ressonâncias afetavam a média da condutância ou na ortogonal, observando o gráfico 17 vemos que houve saturação, levou um tempo de 2 semanas para efetuar as simulações.

Figura 17: Média da condutância Unitária e média Ortogonal de 300 canais, 400 ressonâncias e 500 mil repetições

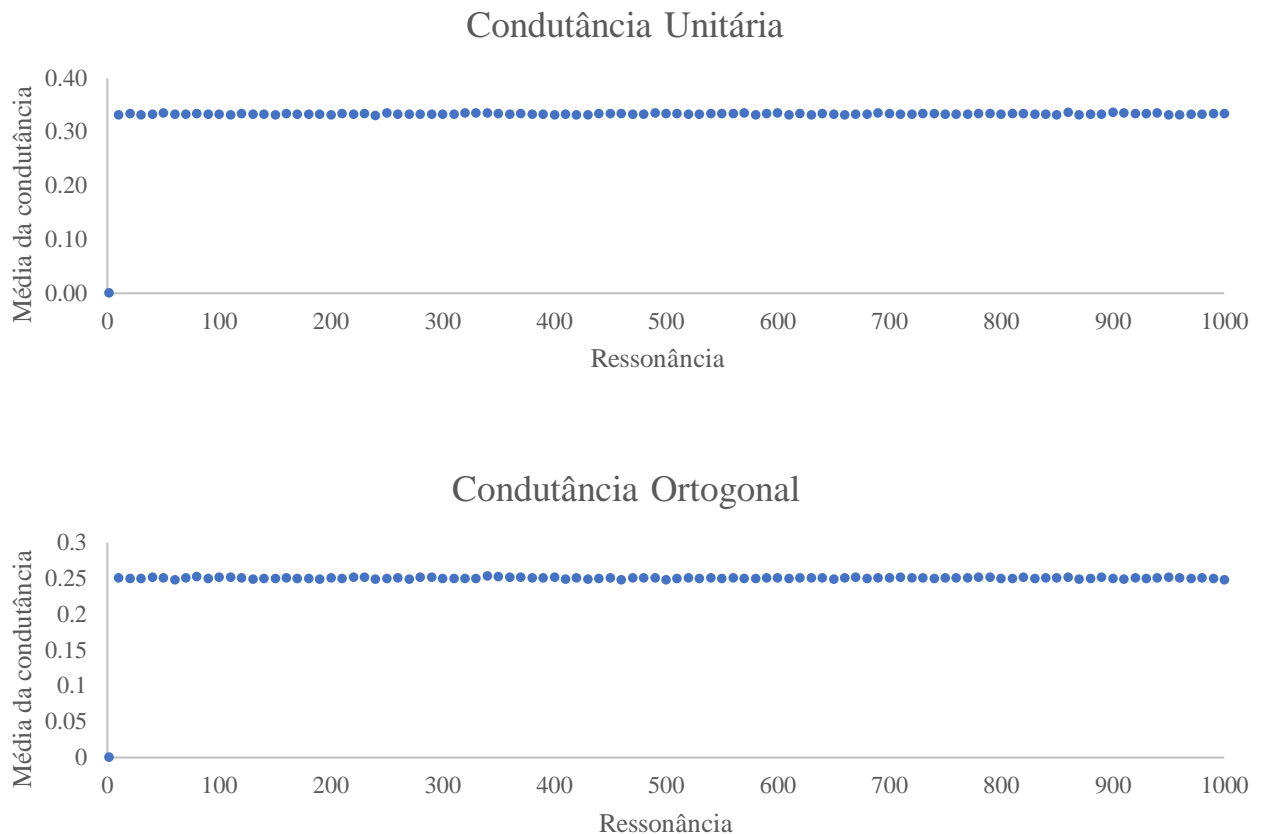


Fonte: Próprio Autor

Continuando o estudo da pesquisa utilizamos as mil ressonâncias, diminuimos os valores das repetições para 50 mil e calculamos uma dimensão em só três canais. Como podemos observar na figura 18, o comportamento do gráfico não apresenta a maior quantidade

dos valores analisados no computador. Isso contradiz a suposição de Wigner já que ele estabelece o agrupamento das energias provocando um pico da distribuição de Tracy-Widom.

Figura 18: Média da Condutância Unitária e Média Ortogonal de 3 canais, 1000 ressonâncias e 50 mil repetições

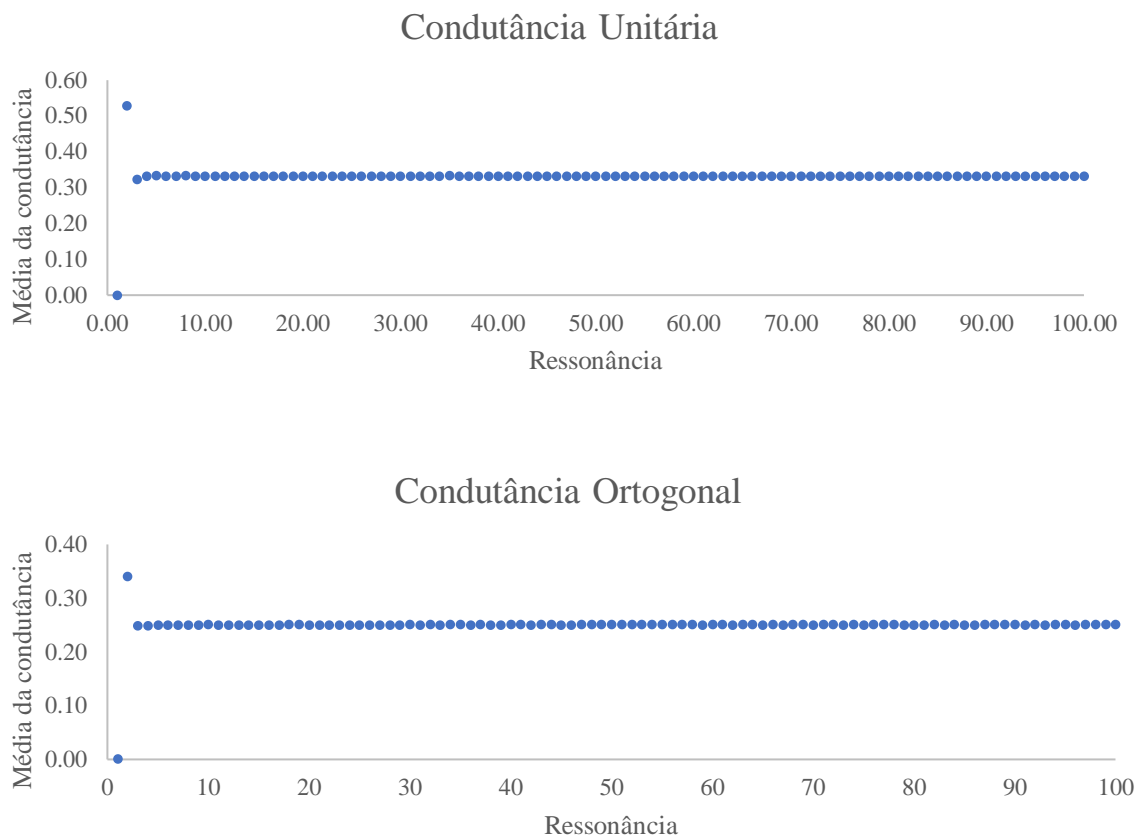


Fonte: Próprio Autor

Ao deixar executando percebemos que as simulações apresentaram problemas ao contabilizar os valores e foi marcado nas ressonâncias 690,780 e 950; mas com o script TRACO, conseguimos ajustar sem perder os dados e configurávamos para iniciar de onde parou, como deixávamos a simulação rodar a semana toda, suspeitamos que os problemas ocorridos poderiam ser por um sobre carregamento do computador ou falta de energia, já que quando chegávamos de manhã o computador estava desligado. No entanto conseguíamos salvar no bloco de notas os dados estudados e além disso conseguíamos continuar da onde tinha parado. O curioso desse gráfico foi que não foi encontrado o ponto de saturação, pelo que nos chamo a atenção e supomos que fosse por causa do número de repetições abaixo da média ou

talvez como adicionamos um intervalo de 10 em 10 poderia ser um número entre 1 a 9 e a simulação não o cálculo. Assim que atribuímos o maior número de repetições já feito de 5 milhões com o passo 1 em 1 até 100. Durante a simulação nesse caso as simulações travaram em 85 na condutância unitária e 9 na condutância ortogonal.

Figura 19: Média da Condutância Unitária e Média Ortogonal de 3 canais, 100 ressonâncias e 5 milhões de repetições

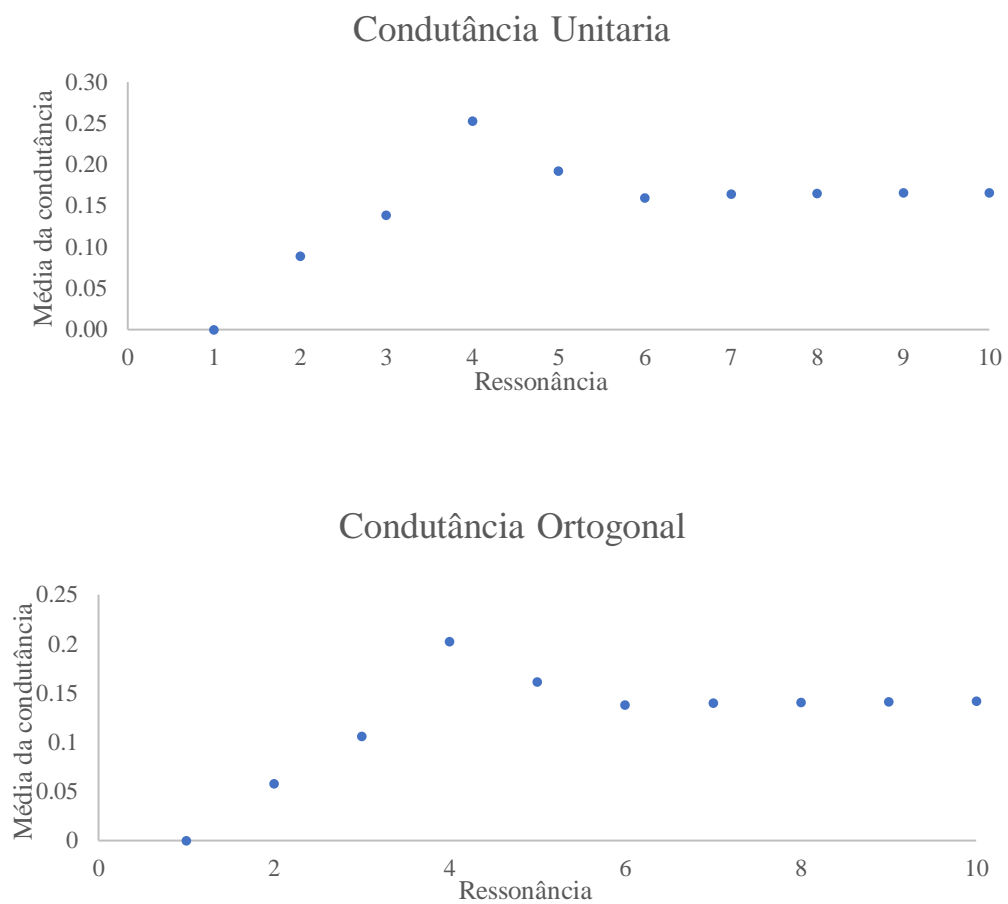


Fonte: Próprio Autor

Como podemos observar no gráfico nesse caso houve saturação na ressonância 2, conseqüentemente os valores de repetições se estabilizaram. Isso se deve a suposição de Wigner, descreve um fenômeno chamado “repulsão de nível”. As partículas em um sistema espacialmente limitado podem ter apenas quantidades discretas de energia, chamadas de “níveis de energia”. Esses níveis de energia tendem a se agrupar em um sentido geral, mas também se repelem.

Ao calcularmos repetições e valores de ressonâncias muito altas não conseguimos observar o comportamento do gráfico, para isso utilizamos valores menores, mas com repetições de 5 milhões na figura 20 utilizamos 6 canais, variando de 1 em 1 até 10 ressonâncias.

Figura 20: Média da Condutância Unitária e Média Ortogonal de 6 canais, 10 ressonâncias e 5 milhões de repetições



Fonte: Próprio Autor

Nesse último gráfico podemos observar o comportamento da melhor forma possível já que vemos um aumento gradativo das médias de condutância, tanto unitária como ortogonal, como também podemos ver a saturação tendo uma constância entre os valores de 0,15 e 0,1.

9. CONCLUSÃO

As nanopartículas de TiO_2 @Silica e núcleo casca expandiram as pesquisas envolvendo pontos quânticos, sistemas desordenados como os lasers aleatórios, abrangendo um número significativo de estudos na área Fotônica. Trabalhos do Dr. Cesar Soares "Localização de Anderson da Luz: Forte Dependência com ângulo de Incidência"(XAVIER et al., 2018), mostraram que realmente ocorreu uma diminuição da condutância e um aumento de absorção são realizadas as bordas de entrada à medida que o ângulo de incidência é aumentado. Em paralelo trabalhos do grupo fotônica em Araruna, mostraram que é possível reproduzir as nanopartículas de núcleo casca de TiO_2 @Silica, dando sucessão a esses estudos, fomos introduzidos na área de simulação computacional, onde aprendemos a utilizar software como o MATLAB. Observamos uma dificuldade com base ao tempo de realização das matrizes aleatórias e mais uma vez superamos nossas expectativas ao criar um script que conseguisse agilizar esses cálculos e também de praticidade a esse estudo profundo, favorecendo a não perder os dados estudados e ajudando a ter uma interface com visual simples, mas prático. Em base a este trabalho conseguimos provar que o script "TRACO" funciona satisfatória, percebemos que quanto maior o número de repetições das ressonâncias obtemos maior precisão nos dados, já que à medida que N_e , a dimensão da matriz, aumenta, também aumenta o tamanho "geral" dos autovalores, também obtivemos um modelo de gráfico que assemelhasse a da teoria Wigner nas duas médias, tendo um pico de saturação representando o maior autovalor do sistema e logo após estabilizando o sistema.

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.
- 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.
- DA SILVA, Acson: **Início de uma nova ótica: localização da luz com desenvolvimento de simulações numéricas.** V. 1, p. 1-31, 2020.
- 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, Sajeev. **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, 2005.32

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.