

## 2.2.2 Osciladores Múltiplos<sup>1</sup>

Em geral um meio óptico apresentará muitas frequências ressonantes características. Discutiu-se na seção anterior que esperamos observar ressonâncias diferentes devido a vibrações da rede em contraste às oscilações de elétrons ligados aos átomos. Além disso, um meio particular pode ter muitas ressonâncias de cada tipo. Podemos tratar essas múltiplas ressonâncias sem dificuldade em nosso modelo desde que ocorram em diferentes frequências.

Ao escrever a Eq.2.12 dividimos a polarização do meio em uma parte ressonante e uma não ressonante. Discutiu-se então a parte ressonante em detalhe, sem especificar de forma muito precisa o que se entende pelo termo “não-ressonante”. Simplesmente afirmamos que  $\vec{P}$  é proporcional a  $\vec{E}$  através da susceptibilidade  $\chi$ . Na realidade, a polarização não-ressonante do meio deve originar-se da polarizabilidade dos átomos exatamente da mesma forma que a parte ressonante. A Eq.2.19 nos diz que a constante dielétrica diminui cada vez que passa por uma linha de absorção. As contribuições que entram na susceptibilidade elétrica de fundo  $\chi$  na Eq.2.12 surgem portanto a partir da polarização devida a todos os outros osciladores de frequências mais altas.

Podemos compreender melhor este ponto tornando-o mais quantitativo. A contribuição para a polarização de um determinado oscilador é dada pela Eq.2.10. Em um meio com muitos osciladores eletrônicos de diferentes frequências, a polarização total será portanto dada por

$$\vec{P} = \left( \frac{Ne^2}{m_0} \sum_j \frac{1}{(\omega_j^2 - \omega^2 - i\gamma_j\omega)} \right) \vec{E} \quad (\text{Eq.2.22})$$

onde  $\omega_j$  e  $\gamma_j$  são a frequência angular e o coeficiente de amortecimento de uma determinada linha de ressonância. Quando então substituimos isso na Eq. 2.11, e recordamos a definição de  $\epsilon_r$  dado na Eq.2.13, obtemos

$$\epsilon_r(\omega) = 1 + \frac{Ne^2}{\epsilon_0 m_0} \sum_j \frac{1}{(\omega_j^2 - \omega^2 - i\gamma_j\omega)} \quad (\text{Eq.2.23})$$

Essa equação leva em conta todas as transições no meio e pode ser usada para calcular a dependência em frequência completa da constante dielétrica. O índice de refração e o coeficiente de absorção calculados a partir da Eq.2.23 foram plotados contra a frequência na Fig. 2.6. A figura foi calculada para um sólido hipotético com três ressonâncias bem separadas com  $\omega_j$  igual a  $4 \times 10^{13}$  Hz,  $4 \times 10^{15}$  Hz e  $1 \times 10^{17}$  Hz respectivamente. A largura de cada linha de absorção foi definida como 10 % da frequência central pela escolha adequada do termo de amortecimento. A ressonância no infravermelho foi incluída para representar a absorção vibracional. Em um sólido real, teríamos de adaptar o modelo

---

<sup>1</sup> Traduzido de M. Fox para a disciplina Propriedades Ópticas de Materiais. Prof. Humberto. Unesp maio/2016.

adequadamente para levar em conta as diferentes massas reduzidas e a carga efetiva do oscilador vibracional.

Podemos compreender esta figura começando nas altas frequências e progressivamente descendo para as frequências mais baixas. Nas frequências muito altas os elétrons são incapazes de responder ao campo impulsor. O meio não tem, portanto, qualquer polarização, e a constante dielétrica é igual à unidade. Conforme a frequência vai sendo diminuída, primeiramente atingimos dos raios X e ultravioleta de vácuo, e então as transições dos elétrons mais externos no ultravioleta e visível. Temos então uma região sem transições até que finalmente chegar a frequências vibracionais no infravermelho. Cada vez que o sistema passa por uma dessas ressonâncias, vemos a dependência em frequência característica do oscilador de Lorentz, com um pico no espectro de absorção e uma oscilação no índice de refração. No espaço entre essas ressonâncias o material é transparente: o coeficiente de absorção é zero e o índice de refração é praticamente constante.

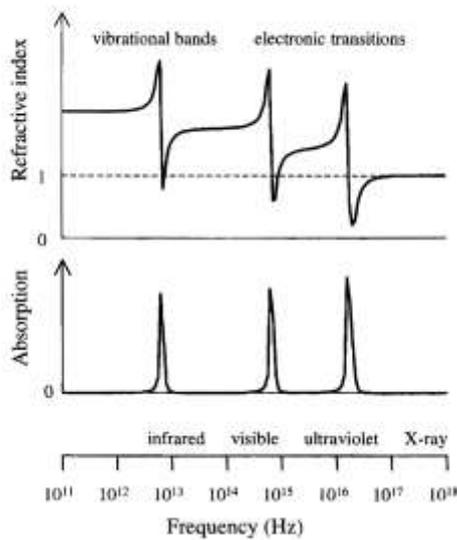


Fig. 2.6. Diagrama esquemático da dependência em frequência do índice de refração e absorção de um sólido hipotético da região do infravermelho até os raios X. Assume-se que o sólido tem três frequências de ressonância com  $\omega_1 = 4 \times 10^{13} \text{ Hz}$ ,  $\omega_2 = 4 \times 10^{15} \text{ Hz}$  e  $\omega_3 = 1 \times 10^{17} \text{ Hz}$ . A largura espectral e cada linha de absorção foi fixada em 10% de frequência central pela escolha apropriada dos  $\gamma_j$ . Um observador atento verá que os picos no coeficiente de absorção para as três linhas mostradas na figura decrescem levemente com a diminuição da frequência. Isso ocorre por que o índice de refração é maior nas frequências menores. As

transições têm todas o mesmo pico em  $\epsilon_2$ , e portanto  $\kappa$  deve ser levemente menor quando  $n$  for maior.

Ao decrescer a frequência, o valor do índice de refração nas regiões transparentes gradualmente cresce quando passamos mais e mais linhas de ressonância. Esse acréscimo do índice de refração é causado pelo fato de que  $\epsilon_{st} > \epsilon_\infty$  (cf. Eq.2.19), o que implica que  $n$  é maior em frequências menores que uma ressonância que acima dela. Observando a Fig.2.6 podemos agora ver o que entendemos por estático (st) e infinita ( $\infty$ ) em relação a uma ressonância particular. A variação de  $n$  com a frequência devida às ressonâncias é a origem da dispersão encontrada em materiais ópticos, mesmo quando esses são transparentes.

O modelo de osciladores dipolares prevê que cada oscilador contribui com um termo semelhante ao de oscilador simples (Eq.2.10) nas equações Eq.2.22 e Eq.2.23. Isso leva a uma série de absorções da mesma intensidade, porém em frequências diferentes. Entretanto os dados experimentais mostram que a intensidade da absorção varia consideravelmente quando consideramos uma transição atômica ou outra. Utilizando conhecimentos de mecânica quântica, a exemplo do abordado no Apêndice B, podemos

afirmar que isso é causado pela variação das probabilidades de transição quânticas. Na física clássica entretanto não há explicação, e para corrigir a situação atribuímos arbitrariamente uma força do oscilador  $f_i$  para cada transição, de maneira que podemos rescrever a Eq.2.23 como:

$$\varepsilon_r(\omega) = 1 + \frac{Ne^2}{\varepsilon_0 m_0} \sum_j \frac{f_j}{(\omega_j^2 - \omega^2 - i\gamma_j \omega)} \quad (\text{Eq.2.24})$$

A mecânica quântica mostra que, para um sistema no estado fundamental, devemos ter  $\sum_j f_j = 1$  para cada elétron. Como o sistema clássico prevê que  $f_i = 1$  para cada oscilador, podemos interpretar a diferença dizendo que um elétron em particular é envolvido em várias transições ao mesmo tempo, e que a força do oscilador é dividida entre essas transições.

### 2.2.3 Comparação com Dados Experimentais

O comportamento esquemático mostrado na Fig.2.6 pode ser comparado com os dados experimentais em materiais ópticos típicos. A Fig.2.7 mostra a dependência em frequência do índice de refração e do coeficiente de extinção da sílica vítrea fundida ( $\text{SiO}_2$ ) da região espectral do infravermelho até os raios X. As características gerais mostradas na Fig.2.6 são claramente observadas na Fig.2.7, com fortes absorções no infravermelho e ultravioleta, e uma região larga de baixa absorção entre estas. Os dados confirmam que  $n \gg \kappa$  exceto nas proximidades dos picos de absorção. Isso significa que a aproximação de associar a dependência em frequência de  $n$  com a de  $\varepsilon_1$  e a  $\kappa$  com  $\varepsilon_2$ , são válidas na maioria das frequências.

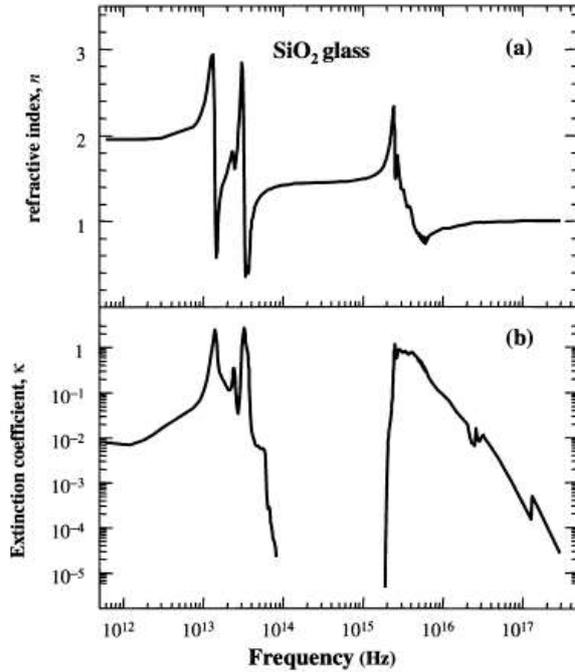
O comportamento geral mostrado na Fig.2.7 é típico de materiais ópticos que são transparentes na região visível. Já foi mencionado (Seções 1.4.1 e 1.4.2) que a região de transmissão de materiais não coloridos é determinada pela absorção eletrônica no ultravioleta e pelas absorções vibracionais no infravermelho. Isso é demonstrado pelos dados de transmissão da safira (Fig.1.4.a).

A sílica fundida é um vidro, portanto não tem uma rede cristalina regular. A absorção infravermelha portanto é causada pela excitação de quanta vibracionais nas moléculas de  $\text{SiO}_2$ . Dois picos distintos são observados em  $1.4 \times 10^{13} \text{ Hz}$  ( $21 \mu\text{m}$ ) e  $3,3 \times 10^{13} \text{ Hz}$  ( $9,1 \mu\text{m}$ ) respectivamente. Esses correspondem a diferentes modos vibracionais da molécula. Mais detalhes a respeito dos modos vibracionais moleculares ocorrerão quando tratarmos dos fônons (Cap.10).

A absorção ultravioleta da sílica é causada por transições eletrônicas interbandas. O  $\text{SiO}_2$  tem um bandgap fundamental próximo de 10 eV e transições interbandas são possíveis quando a energia do fóton excede esse valor. Por isso observamos um limiar de absorção no ultravioleta em  $2 \times 10^{15} \text{ Hz}$  ( $150 \text{ nm}$ ). Os picos de transições interbandas encontram-se em torno de  $3 \times 10^{15} \text{ Hz}$  onde apresentam um coeficiente de absorção extremamente alto  $\sim 10^8 \text{ m}^{-1}$ , e depois cai gradualmente em frequências maiores. Picos auxiliares são observados em  $\sim 3 \times 10^{16} \text{ Hz}$  e  $1,3 \times 10^{17} \text{ Hz}$ . Estes são

causados pelos elétrons internos centrais dos átomos de silício e oxigênio. O fato de que a absorção eletrônica consiste de uma banda contínua em vez de linhas discretas torna difícil modelar com precisão a partir de osciladores de Lorentz. Discutiremos a teoria quântica de absorção interbandas no Cap.3.

Na região do infravermelho, em frequências menores que a ressonância, o índice de refração da sílica é  $\sim 2$ , enquanto no ultravioleta “duro” e região de raios X (acima de  $10^{17} \text{ Hz}$ )  $n$  aproxima-se da unidade. Na região entre as absorções vibracionais e interbandas o índice de refração é  $\sim 1,5$ . Uma inspeção mais cuidadosa da Fig.2.7 mostra



que o índice de refração, na verdade, cresce com a frequência nessa região transparente, mudando de 1,4 em  $8 \times 10^{13} \text{ Hz}$  ( $3,5 \mu\text{m}$ ) para 1,55 em  $1,5 \times 10^{15} \text{ Hz}$  ( $200 \text{ nm}$ ). Essa dispersão origina-se do ombro de baixa frequência da absorção do ultravioleta e do ombro de alta frequência da absorção no infravermelho.

Fig. 2.7

(a) Índice de refração e (b) coeficiente de extinção da sílica fundida  $a\text{-SiO}_2$ . Os espectros iniciam no infravermelho e estendem-se até os raios X.

Os dados da Fig.2.7 mostram que o índice de refração cai abaixo de 1 em várias frequências. Isso implica que a velocidade de fase da luz é maior que  $c$ , o que parece implicar uma contradição com os princípios da relatividade. Entretanto, esse modo de pensar é incorreto, pois não leva em conta que um sinal é transmitido por um pacote de ondas, em vez de uma onda puramente monocromática. Em um meio dispersivo, um pacote de onda propaga-se com uma **velocidade de grupo**  $v_g$  dada por:

$$v_g = \frac{d\omega}{dk} \quad (\text{Eq.2.25})$$

Em vez da velocidade de fase  $v = \omega/k = c/n$ . A relação entre  $v_g$  e  $v$  é:

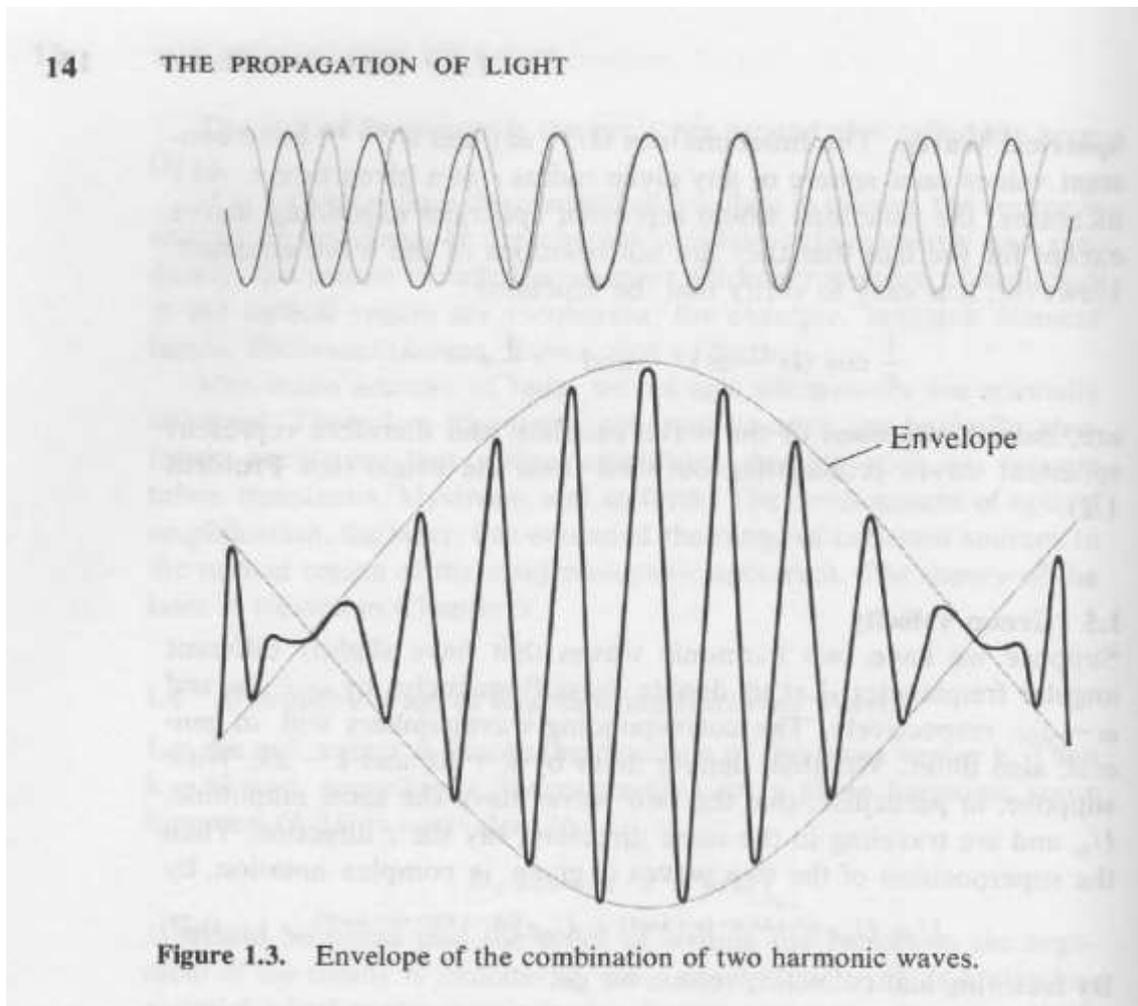
$$v_g = v \left( 1 + \frac{\omega}{n} \frac{dn}{d\omega} \right)^{-1} = v \left( 1 - \frac{\lambda}{n} \frac{dn}{d\lambda} \right)^{-1} \quad (\text{Eq.2.26})$$

onde  $\lambda$  é o comprimento de onda da luz no vácuo. A derivação desse resultado foi deixada para um exercício (Ex.2.7). Observa-se que  $\frac{dn}{d\omega}$  é positivo para a maioria dos materiais em frequências ópticas. Isso implica que  $v_g$  é menor que  $v$  nessas

frequências, e se tentamos transmitir um sinal na região em que  $v > c$ , encontramos sempre que  $v_g < c$ . Pode-se provar isso para um oscilador de Lorentz, de maneira relativamente simples (Ex.2.8).

Material complementar:

Figura ilustrando a construção de um pacote de ondas (Fowles 1975).



Fowles, G. R. (1975). Introduction to Modern Optics. New York, Dover.