

Propriedades Ópticas de Materiais

Notas de Aula

Bacharelado em Física de Materiais

Unesp-Bauru 2018

1. Introdução¹

Nesta disciplina estudaremos a interação da radiação com a matéria, mais especificamente com os sólidos. O eixo central da disciplina está baseado no texto do M. Fox (Fox 2010). Este capítulo introdutório define algumas grandezas básicas importantes e faz um brevíssimo apanhado geral dos principais pontos a serem tratados no curso. Vamos a ele. Um ótimo e proveitoso estudo a todos!!

1.1 Classificação dos Processos Ópticos [adaptado de (Fox 2010)].

A luz interage com a matéria de muitas maneiras diferentes. Metais são reluzentes enquanto os vidros são transparentes. Vidros coloridos e pedras preciosas transmitem algumas cores mas absorvem outras. Outros materiais tais como o leite e as nuvens parecem brancos por que têm baixa absorção e espalham a radiação incidente em todas as direções.

A vasta variedade de propriedades ópticas observadas em materiais sólidos pode ser classificada em um número pequeno de fenômenos gerais. O grupo mais simples refere-se a **reflexão**, **transmissão** e **propagação**. Durante a propagação pode haver absorção, emissão e espalhamento de luz.

- A **refração** causa a propagação da luz nos materiais com velocidades efetivas do fluxo de energia menores que no espaço livre. Essa redução de velocidade causa mudança de direção de propagação nas interfaces, conforme descrito pela lei de Snell.

- A **absorção** ocorre durante a propagação. Nos pontos de absorção intensa a frequência da radiação entra em ressonância com as frequências de transição dos átomos do meio. O feixe será atenuado enquanto avança no material. A transmitância de um objeto esta claramente relacionada com a absorção do material do qual é constituído: apenas a luz não absorvida será transmitida através do objeto. A absorção seletiva é uma das principais responsáveis pelas coloração dos materiais ópticos.

¹ Notas de aula adaptadas para a disciplina pelo Prof. José Humberto Dias da Silva. A base principal é o livro de M. Fox, Cap.1, mas também serão utilizados outros textos complementares, tais como Alonso e Finn, e Cisneros, e textos e figuras da internet, além de anotações e observações pessoais do professor.

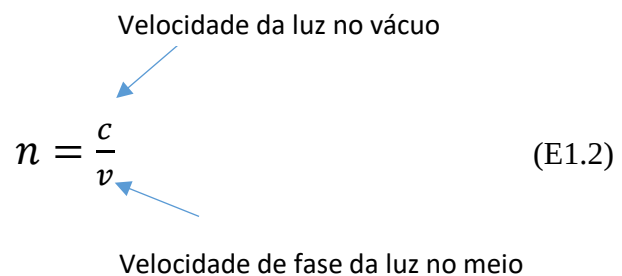
- **Luminescência** é o nome geral dado ao processo de emissão espontânea de luz por átomos excitados em materiais. Uma das maneiras pelas quais os átomos podem ser promovidos aos estados excitados anteriormente à emissão espontânea é por absorção de luz. Portanto, a luminescência pode acompanhar a propagação da luz em um meio absorvente. A luz é geralmente emitida em todas as direções e tem frequência diferente do feixe incidente.

- **Espalhamento** é o fenômeno no qual a luz muda de direção, e algumas vezes também de frequência depois de interagir com o meio. O espalhamento é dito elástico quando a frequência do fóton espalhado permanece a mesma que a do fóton incidente, e inelástico quando a frequência é modificada pelo espalhamento. O número total de fótons não muda só pelo efeito do espalhamento, mas o número de fótons na direção de incidência diminui pois os fótons incidentes espalhados são redirecionados.

- **Efeitos não lineares.** Nos fenômenos mencionados até o presente a intensidade da radiação incidente é baixa, de maneira que a concentração energética da radiação no material praticamente não altera suas propriedades. Fenômenos diferentes ocorrem quando a intensidade da radiação é alta e as propriedades do material são alteradas em consequência da radiação. Esses fenômenos são descritos pela óptica não linear. Nesta disciplina não abordaremos esse tema. Dentro dessa temática estudaremos apenas, de maneira rápida, o efeito Raman.

1.2 Coeficientes Ópticos

Índice de refração

$$n = \frac{c}{v} \quad (\text{E1.2})$$


O índice de refração é a relação entre a velocidade de fase da luz no meio e a velocidade da luz no vácuo.

O índice de refração depende da frequência, e consequentemente do comprimento de onda, da luz incidente. Esse fenômeno é chamado de dispersão cromática. Portanto:

$$n = n(\omega) = n(\lambda)$$

A dispersão cromática produz os efeitos de separação dos comprimentos de onda em um prisma, e o alargamento do pulso quando este se propaga em um meio transparente.

Quando a dispersão é pequena, como em um material amplamente transparente como o vidro, faz sentido falar “o” índice de refração (como se este fosse constante) pois seu valor não varia muito no visível e no infravermelho próximo.

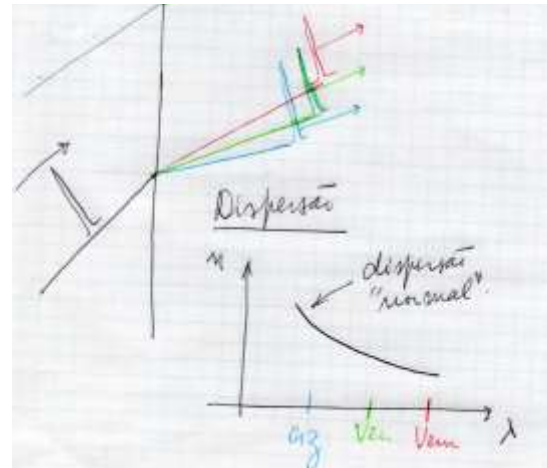
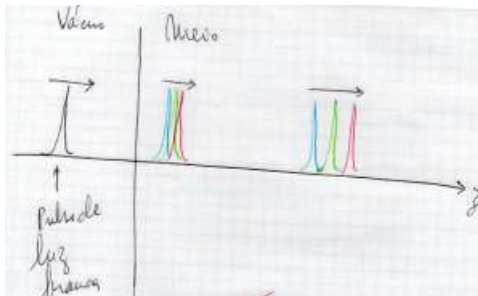


Figura: Representação esquemática da dispersão da luz.

Coefficiente de Absorção (α)



O coeficiente de absorção representa a fração da potência absorvida por unidade de comprimento percorrido no meio

$$\frac{dI}{I} = -\alpha$$

unidades [$l^{-1} (cm^{-1})$]

elemento de comprimento

$$\frac{dI}{I} = -\alpha dz$$

$$\int \frac{dI}{I} = \int (-\alpha) dz$$

$$\ln(I) = -\alpha z + C$$

$$I(z) = e^{-\alpha z} \cdot \underbrace{e^C}_{I_0 = I(0)}$$

$$I(z) = I_0 e^{-\alpha z} \quad (\text{Lei de Beer}) \quad (\text{E1.4})$$

o coeficiente de
absorção depende
fortemente da
frequência



$$\alpha = \alpha(\omega)$$

Materiais ópticos absorvem determinadas cores (frequências) outras não. O coeficiente de absorção é fortemente dependente da frequência.

Portanto, temos que:

$n \rightarrow$ velocidade de propagação

$\alpha \rightarrow$ intensidade da absorção

Pergunta: Será que podemos expressar essas duas coisas (bem distintas) em uma única quantidade ?

R: Sim, o índice de refração complexo $\tilde{n}$.

1.3 Índice de Refração Complexo, Vetor de Propagação Complexo, Função Dielétrica²

O **índice de refração complexo** $\tilde{n}$ é definido como:

$$\tilde{n} = n + i\kappa$$

no qual o índice de refração é a parte real, e o coeficiente de extinção é parte imaginária.

O coeficiente de extinção, κ , e o coeficiente de absorção, α estão diretamente relacionados. O entendimento dessa relação passa pela definição de vetor de propagação complexo. Vejamos como é essa relação.

² Caso você não esteja familiarizado com a notação de números complexos veja a nota ao final deste capítulo.

Suponhamos um campo elétrico (solução das equações de Maxwell para ondas eletromagnéticas propagantes) propagando-se na direção z em forma de onda plana.

$$E(z, t) = E_o e^{i(kz - \omega t)} \quad (\text{E1.15})$$

Em um meio não absorvente, de índice de refração n , o comprimento de onda da luz decresce por um fator n em comparação com o comprimento de onda da luz no espaço vazio λ .

$$k = \frac{2\pi}{\lambda/n} = n \cdot \frac{2\pi}{\lambda}$$

$$c = \lambda f$$

$$k = n \cdot \frac{2\pi f}{c} = n \frac{\omega}{c}$$

onde $\omega = 2\pi f$ é a frequência angular da onda. Essa última expressão, válida para meios transparentes, pode ser generalizada para o caso de meios absorventes, permitindo que o índice de refração seja complexo:

$$\tilde{k} = \tilde{n} \frac{\omega}{c} = (n + i\kappa) \frac{\omega}{c} \quad (\text{E1.17})$$

Nessa expressão $\tilde{k}$ representa o **vetor de propagação complexo**. Com este podemos escrever a onda propagante em um meio absorvente como:

$$E(z, t) = E_o e^{i(\tilde{k}z - \omega t)}$$

Substituindo a E1.17 em E1.15, temos:

$$E(z, t) = E_o e^{i[(n+i\kappa)\frac{\omega}{c}z - \omega t]} = E_o e^{-\kappa\frac{\omega}{c}z} e^{i[n\frac{\omega}{c}z - \omega t]} \quad (\text{E1.18})$$

Essa expressão mostra que um coeficiente de extinção $\kappa \neq 0$ leva a um decaimento exponencial da amplitude da onda no meio. Ao mesmo tempo a parte real de $\tilde{n}$ ainda determina a velocidade de fase da onda (pela definição de n , conforme E1.2). A Fig.2.2 Dressel e Gruner (Dressel et al. 2002) representa de maneira interessante as grandezas envolvidas na propagação da onda.

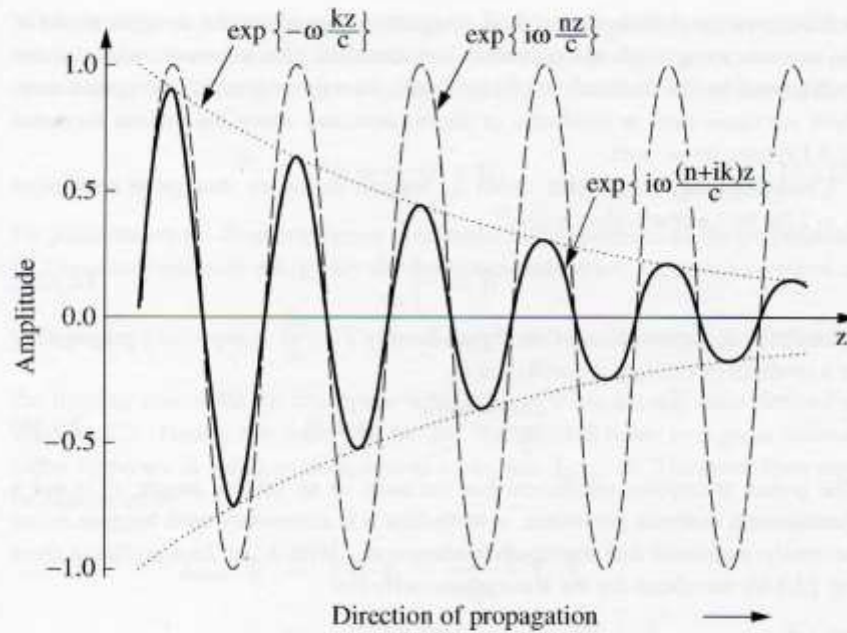


Fig. 2.2. Spatial dependence of the amplitude of a damped wave as described by Eq. (2.3.14) (solid line). The envelope $\exp\{-\frac{\omega k}{c}z\}$ is shown by the dotted lines. The dashed lines represent the undamped harmonic wave $\exp\{i\frac{\omega n}{c}z\}$.

A intensidade óptica de uma onda de luz é proporcional ao quadrado da amplitude do campo elétrico:

$$I \propto E \cdot E^* = |E|^2$$

A intensidade decai exponencialmente no meio, com uma constante de decaimento igual a $2\kappa \omega/c$:

$$I(z) = E_o^2 e^{-2\kappa \frac{\omega}{c}z} = I_o e^{-2\kappa \frac{\omega}{c}z}$$

comparando com a Lei de Beer (E1.4) temos:

$$\alpha = 2\kappa \frac{\omega}{c} = \frac{4\pi\kappa}{\lambda} \quad (\text{E1.19})$$

Isso mostra que o coeficiente de absorção é diretamente proporcional ao coeficiente de extinção. Um e outro podem ser utilizados para representar a atenuação da onda em materiais absorventes. É importante lembrar que ambos são fortemente dependentes da frequência, por isso escrevemos a seguir a mesma expressão explicitando essa dependência:

$$\alpha(\omega) = \frac{4\pi\kappa(\omega)}{\lambda}$$

$\alpha \rightarrow$ decaimento da intensidade da radiação

$\kappa \rightarrow$ decaimento da amplitude do campo elétrico

Unidades: As unidades do coeficiente de absorção são as inversas de comprimento. Geralmente expressa-se α em cm^{-1} ou m^{-1} , enquanto κ é adimensional.

Função Dielétrica Complexa

Podemos relacionar o índice de refração de um meio à sua função dielétrica relativa ϵ_r usando o resultado derivado das equações de Maxwell (Fox, EA.31):

$$n = \sqrt{\epsilon_r} \quad (\text{E1.20})$$

Isso mostra que se n for complexo ϵ_r também será. Define-se portanto a constante dielétrica complexa relativa por:

$$\tilde{\epsilon}_r = \epsilon_1 + i\epsilon_2$$

Por analogia com a E1.20, verificamos que $\tilde{n}$ e $\tilde{\epsilon}_r$ são relacionados por:

$$\tilde{n}^2 = \tilde{\epsilon}_r \quad (\text{E1.22})$$

Pode-se trabalhar explicitamente relações entre a parte real e imaginária e $\tilde{n}$ e $\tilde{\epsilon}_r$:

$$\epsilon_1 = n^2 - \kappa^2$$

$$\epsilon_2 = 2n\kappa$$

Ou inversamente:

$$n = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\epsilon_1 + (\epsilon_1^2 + \epsilon_2^2)^{\frac{1}{2}} \right]^{\frac{1}{2}}$$

$$\kappa = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[-\epsilon_1 + (\epsilon_1^2 + \epsilon_2^2)^{\frac{1}{2}} \right]^{\frac{1}{2}}$$

No caso de fraca absorção, a parte imaginária de $\tilde{n}$ torna-se pequena, e no limite $n \gg \kappa$ temos:

$$n \cong \sqrt{\epsilon_1}$$

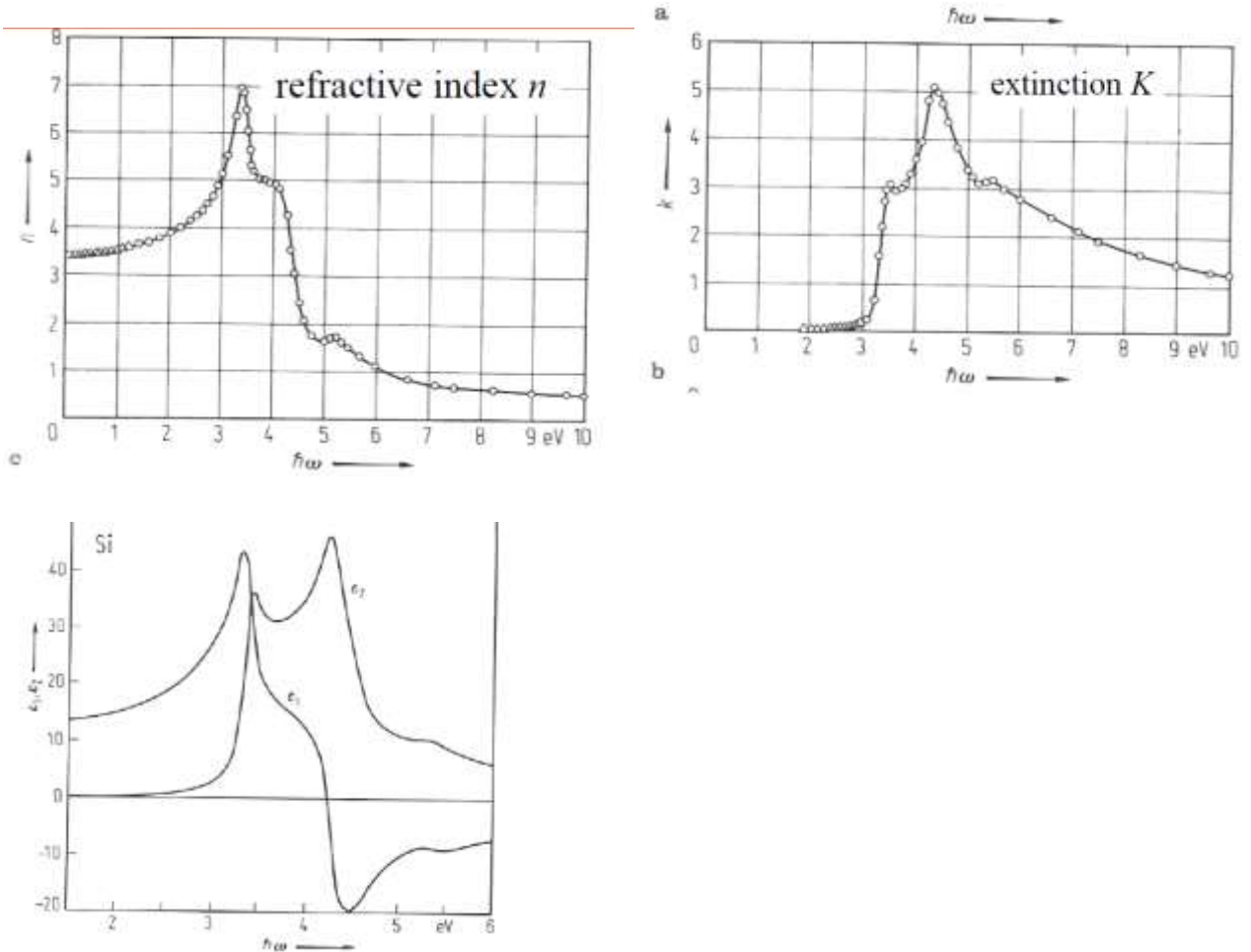
$$\kappa \cong \frac{\epsilon_2}{2n}$$

Ressalta-se que essas grandezas são todas funções da frequência (ou do comprimento de onda):

$$n = n(\omega), \kappa = \kappa(\omega), \varepsilon_1 = \varepsilon_1(\omega), \varepsilon_2 = \varepsilon_2(\omega)$$

O índice de refração e a função dielétrica complexos são importantes por caracterizarem a resposta do material a ondas eletromagnéticas em uma ampla faixa de frequências.

Vejamos, como exemplo, o comportamento do índice de refração, do coeficiente de extinção, e da função dielétrica do silício em função das energias dos fótons incidentes ($\hbar\omega$):



Pergunta: A partir desses dados, como posso deduzir qual será a intensidade transmitida, refletida e absorvida em uma lâmina de material, em uma determinada frequência de radiação?

Relação dos Parâmetros Ópticos com Grandezas Mensuráveis.

Entretanto, para termos uma relação prática direta entre essas grandezas e quantidades mensuráveis do material (tais como refletância (R) e transmitância (T) de uma lâmina), precisamos verificar como os coeficientes de transmissão e reflexão se relacionam com esses parâmetros ópticos. Passamos então a esse ponto.

Primeiramente veremos quais são as condições de contorno para uma eletromagnética na interface entre dois meios, e a partir dessas, quais são as relações de amplitude dos campos nas interfaces, dados pelos coeficientes de Fresnel.

Condições de Contorno de Ondas Eletromagnéticas em Interfaces (Alonso et al. 1967, Nussenzveig 1998)

Os coeficientes de Fresnel mostram como são as modificações dos campos elétricos em ondas que se propagam nas proximidades das fronteiras entre dois materiais. Para deduzi-los precisamos saber como se comportam os campos elétricos e magnéticos em interfaces, ou seja quais são as condições de contorno para os campos nas interfaces.

As relações entre os campos na interface são deduzidas a partir das equações de Maxwell na forma integral (já que não se pode aplicar os operadores diferenciais em regiões de descontinuidade dos campos) (Nussenzveig 1998). Utiliza-se também os teoremas da divergência e de Stokes, e as propriedades conhecidas dos campos $\mathbf{E}$ e $\mathbf{B}$. Considerando a geometria dos feixes incidente, refletido e refratado (veja por ex. Nussenzveig, 1998, Vol.4, Cap. 5.5), tem-se:

$$\hat{n}_{12} \times (\vec{E}_1 - \vec{E}_2) = \vec{0}$$

$$\hat{n}_{12} \cdot (\vec{B}_1 - \vec{B}_2) = 0$$

Onde $\hat{n}_{12}$ é o versor normal à interface.

A partir disso conclui-se que:



A componente tangencial de $\vec{E}$, e a componente normal $\vec{B}$ **são sempre contínuas** na interface entre dois meios diferentes.

Em meios dielétricos, sem carga livre ($\vec{j} = \vec{0}$) e sem carga espacial ($\rho = 0$), além das condições principais, tem-se também que: a componente tangencial de $\vec{B}$ e a componente normal de $\vec{D}$ ($\vec{D} = \epsilon_0 \epsilon_r \vec{E}$), também são contínuas.

Coeficientes de Fresnel (Alonso et al. 1967, Nussenzveig 1998)

Os coeficientes de Fresnel relacionam os vetores campo elétrico incidente, refletido e refratado na interface entre dois meios materiais.

A partir das condições de contorno, vistas na seção anterior, pode-se determinar os coeficientes de Fresnel de reflexão (r) e de transmissão (t) para as componentes paralelas ao plano de incidência (componente p) e para as ondas perpendiculares ao plano de incidência (componente s). Em interfaces entre meios transparentes ($\tilde{n}_1 = n_1$, $\tilde{n}_2 = n_2$) tem-se:

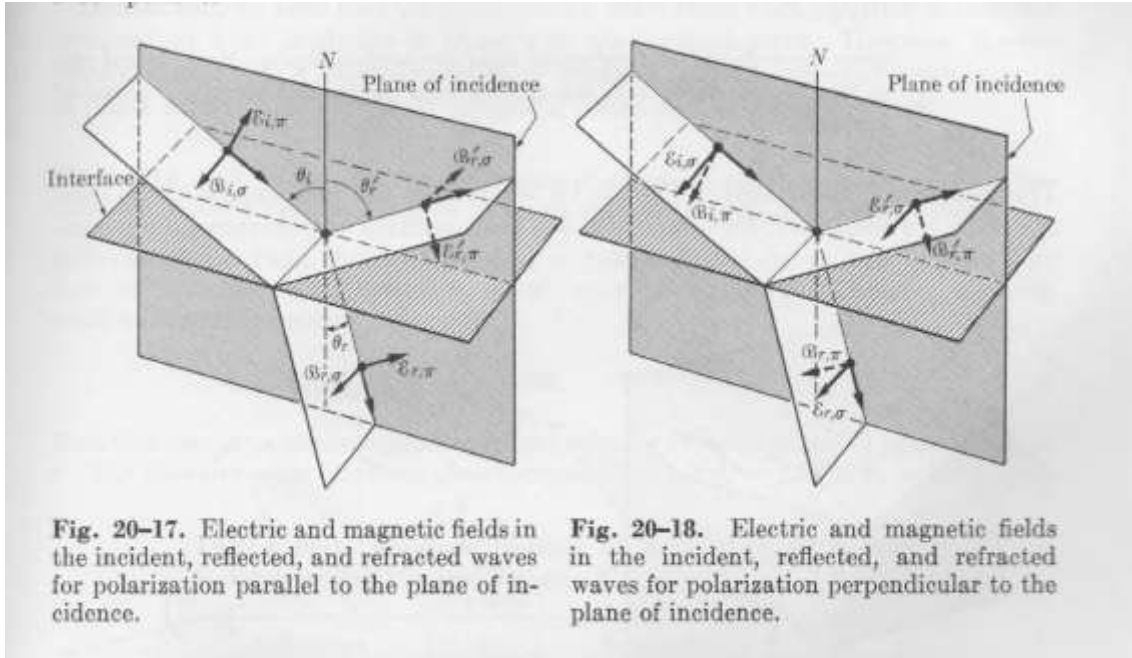
$$r_p = \frac{\varepsilon_{r,p}}{\varepsilon_{i,p}} = \frac{n_1 \cos \theta_t - n_2 \cos \theta_i}{n_1 \cos \theta_t + n_2 \cos \theta_i}$$

$$r_s = \frac{\varepsilon_{r,s}}{\varepsilon_{i,s}} = \frac{n_1 \cos \theta_i - n_2 \cos \theta_t}{n_1 \cos \theta_i + n_2 \cos \theta_t}$$

$$t_p = \frac{\varepsilon_{t,p}}{\varepsilon_{i,p}} = \frac{2n_1 \cos \theta_i}{n_1 \cos \theta_t + n_2 \cos \theta_i}$$

$$t_s = \frac{\varepsilon_{t,s}}{\varepsilon_{i,s}} = \frac{2n_1 \cos \theta_i}{n_1 \cos \theta_i + n_2 \cos \theta_t}$$

Que são os coeficientes de Fresnel para polarizações paralela (p) e perpendicular (s) ao plano de incidência. Nessas expressões $\varepsilon_{i,p}$, $\varepsilon_{r,p}$, $\varepsilon_{t,p}$ são as componentes no plano (sub-índice p ou π (figura)) das amplitudes dos campos incidente, refletido e transmitido na interface. Grandezas similares para as componentes perpendiculares ao plano (sub-índice s ou σ (figura)). θ_i e θ_t são os ângulos de incidência e refração respectivamente.



(Alonso et al. 1967) [cap. 20.7]

Onde r_p e t_p são os coeficientes de reflexão e transmissão para a polarização paralela ao plano de incidência (π na figura 20-17 Alonso), enquanto r_s e t_s correspondem aos coeficientes para a polarização perpendicular ao plano de incidência (σ na figura 20-18 Alonso).

Quando o meio é absorvente, os coeficientes de Fresnel podem ser calculados da mesma maneira, substituindo n_1 e n_2 por $\tilde{n}_1$ e $\tilde{n}_2$. Assim $\tilde{r}$ e $\tilde{t}$ também serão complexos.

Consideremos um caso particular que acontece muitas vezes na prática:

$$\tilde{n}_1 = 1,0 \quad ; \quad \tilde{n}_2 = n + i\kappa \quad ; \quad \textbf{incidência normal}$$

$$\tilde{r}_p = \tilde{r}_s = \tilde{r} = \frac{1 - (n + i\kappa)}{1 + (n + i\kappa)} = \frac{(1 - n) - i\kappa}{(1 + n) + i\kappa}$$

$$\tilde{t}_p = \tilde{t}_s = \tilde{t} = \frac{2 \times 1,0}{1 + (n + i\kappa)}$$

Refletividade (ρ) e transmissividade (τ) de uma interface

A partir dos coeficientes de Fresnel, podemos calcular as intensidades refletida (refletividade, $\rho = \frac{I_r}{I_i}$) e transmitida (transmissividade, $\tau = I_t/I_i$).

$$\rho = \frac{\text{intensidade refletida na interface}}{\text{intensidade incidente na interface}}$$

$$\tau = \frac{\text{intensidade transmitida pela interface}}{\text{intensidade incidente na interface}}$$

(essa notação que usaremos aqui é diferente do Fox, deixaremos R e T para reflexão/refletância e transmissão/transmitância de uma lâmina ou filme).

Mesmo que os materiais da interface sejam absorventes, a interface é muito fina e não promove absorção de energia. Portanto, na interface:

$$\rho + \tau = 1$$

sendo esta uma consequência da conservação da energia na interface.

No caso particular no qual um feixe de luz incide perpendicularmente a uma interface podemos usar as expressões anteriores para escrever:

$$\begin{aligned} \rho = |\tilde{r}|^2 = \tilde{r} \cdot \tilde{r}^* &= \frac{(1 - n) - i\kappa}{(1 + n) + i\kappa} \times \frac{(1 - n) + i\kappa}{(1 + n) - i\kappa} \\ \rho &= \frac{(1-n)^2 + \kappa^2}{(1+n)^2 + \kappa^2} \end{aligned} \quad (\text{E1.29})$$

(refletividade de uma interface, incidência normal)

$$\tau = \frac{n_2}{n_1} |\tilde{t}|^2 = \frac{n_2}{n_1} \tilde{t} \cdot \tilde{t}^* = \frac{n}{1,0} \frac{2 \times 1,0}{(1 + n) + i\kappa} \times \frac{2 \times 1,0}{(1 + n) - i\kappa}$$

$$\tau = \frac{4n}{(1+n)^2 + \kappa^2} = 1 - \rho \quad (\text{E1.29b})$$

(transmissividade de uma interface, incidência normal)

O tratamento mais geral, para incidência sob um ângulo qualquer, pode ser encontrado em Cisneros (Cisneros 2001).

Transmitância e Refletância de Uma Lâmina Grossa (Reflexões Múltiplas Incoerentes)

A razão entre as intensidades transmitida e incidente a incidência normal, $T = I_t/I_i$, denominada transmitância T, e entre as intensidades refletida e incidente a incidência normal, $R = I_r/I_i$, denominada refletância R de uma lâmina grossa absorvente de faces planas e paralelas, podem ser obtidas somando as intensidades devidas a reflexões múltiplas incoerentes dentro da lâmina:

$$T_{\text{lâmina}, \text{normal}} = \frac{(1-\rho)^2 e^{-\alpha h}}{1-\rho^2 e^{-2\alpha h}} \quad (\text{E1.6})$$

$$R_{\text{lâmina}, \text{normal}} = \rho \left[1 + \frac{(1-\rho)^2 e^{-\alpha h}}{1-\rho^2 e^{-2\alpha h}} \right] \quad (\text{E1.6.a})$$

(incidência normal)

Dessa maneira, quando conhecemos as partes real (n) e imaginária (κ) do índice de refração de um material, podemos calcular a transmitância e a refletância de uma lâmina grossa.

Podemos aplicar essas expressões ao caso simples da lâmina transparente (obtida colocando $\kappa = 0$ e $\alpha = 0$ nas expressões):

$$T_{\text{lâmina}, \text{transp}} = \frac{(1-\rho)^2}{1-\rho^2} \quad (\text{E1.6.b})$$

$$\rho = \frac{(1-n)^2}{(1+n)^2} \quad (\text{E1.6.c})$$

A expressão de T pode ser simplificada para:

$$T_{\text{lâmina}, \text{transp}} = \frac{2n}{1+n^2} \quad (\text{E1.6.d})$$

Quando conhecemos T, a expressão pode ser invertida para calcularmos o índice de refração do material da lâmina:

$$n = \frac{1}{T_{l\grave{a}m,transp}} \pm \sqrt{\frac{1}{T_{l\grave{a}m,transp}^2} - 1} \quad (E1.6.e)$$

Para obter a reflet\ancia R e o \ndice de refra\c\ao correspondente, podemos usar a express\ao de $R_{l\grave{a}mina,normal}$ mostrada acima com $\kappa = 0$:

$$R_{l\grave{a}m,transp} = \frac{(1-n)^2}{1+n^2} \quad (E1.6.f)$$

De maneira equivalente, podemos tamb\em usar a rela\c\ao:

$$T_{l\grave{a}mina,transp} + R_{l\grave{a}mina,transp} = 1 \quad (E1.6.g)$$

para obter o mesmo resultado. Al\em disso esta equa\c\ao ajuda a calcular o \ndice de refra\c\ao a partir da medida de reflet\ancia na regi\ao transparente:

$$n = \frac{1}{(1-R_{l\grave{a}m,transp})} \pm \sqrt{\frac{1}{(1-R_{l\grave{a}m,transp})^2} - 1} \quad (E1.6.h)$$

Transmit\ancia e Reflet\ancia de Um Filme Fino Homog\eneo (Reflex\oes M\ultiplas Coerentes)

No caso de um filme fino homog\eneo as reflex\oes m\ultiplas s\ao coerentes (uma diferen\ca de fase fixa \e mantida entre os raios) e o fen\meno de interfer\encia est\ presente, fazendo com que haja modula\c\ao da transmit\ancia com o comprimento de onda (/frequ\encia). A express\ao da transmit\ancia para incid\encia normal de um filme inserido em ar/v\cuo \e:

$$T_{filme,normal} = \frac{(1-\rho)^2 e^{-\alpha h}}{1-2\rho e^{-\alpha h} \cos \Phi + \rho^2 e^{-2\alpha h}} \quad (E1.7)$$

$$\Phi = \frac{4\pi n h}{\lambda} \quad (E1.7.a)$$

onde Φ \e a diferen\ca de fase total entre o primeiro feixe transmitido (que n\ao sofre reflex\ao) e o primeiro feixe transmitido ap\os as reflex\oes internas no filme³.

Pode-se mostrar tamb\em (Fox, problema 1.9) que a reflet\ancia do filme \e dada por:

$$R_{filme,normal} = \rho \frac{(1-2e^{-\alpha h} \cos \Phi + e^{-2\alpha h})}{1-2\rho e^{-\alpha h} \cos \Phi + \rho^2 e^{-2\alpha h}} \quad (E1.7.b)$$

Densidade \u00d3ptica⁴

³ Sendo ar o meio circundante, e $n_{filme} > 1$, n\ao h\ diferen\ca de fase devida \as reflex\oes na interface filme-ar (que ocorrem duas vezes). Ent\ao, Φ refere-se apenas \a diferen\ca de caminho ($2h$) no filme a incid\encia normal. Lembrando que $\Phi = (2\pi/\lambda_{meio}) \times dif. caminho$, ent\ao $\Phi = 2\pi n h / \lambda_{v\acute{a}cuo}$.

⁴ A defini\c\ao dada aqui \e a mais comum, e est\ diferente da do Fox. Veja por exemplo o site do fabricante de filtros \u00d3pticos SEMROCK (<https://www.semrock.com/technical-faq.aspx>).

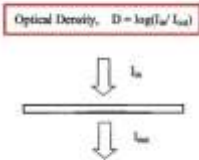
A densidade óptica (OD), algumas vezes chamada também de absorbância, é uma grandeza conveniente para descrever a atenuação de luz através de um filtro óptico altamente bloqueador (quando a transmitância é pequena). A OD é definida como o negativo do logaritmo na base 10 da razão entre a intensidade do feixe transmitido e a intensidade do feixe incidente, ou seja, da transmitância⁵.

$$OD = -\log_{10} T$$

$$T = 10^{-OD}$$

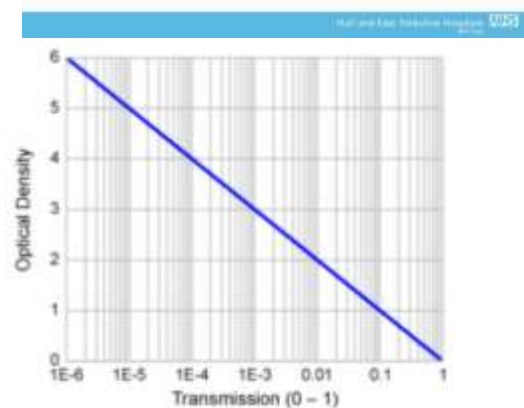
Optical Density

- **Optical Density:** the amount of blackening in the film
- Defined as the **log** of the ratio of the intensities of the incident and transmitted light
 - log is used as the eyes response is logarithmic



Transmission	OD
1	0
0.5	0.3
0.2	0.7
0.1	1
0.05	1.3
0.02	1.7
0.01	2
0.005	2.3
0.002	2.7
0.001	3

The "1" Rule
$T = 1 \rightarrow OD = 0$
The "x2" Rule
$T \times 2 \rightarrow OD - 0.3$
The "÷2" Rule
$T \div 2 \rightarrow OD + 0.3$
The "x 10" Rule
$T \times 10 \rightarrow OD - 1$
The "÷10" Rule
$T \div 10 \rightarrow OD + 1$



Essa definição de absorbância é a mais usada, e diferente da proposta pelo Fox⁶. A diferença é que aqui estamos considerando a transmitância externa da lâmina (intensidade transmitida externa pela intensidade incidente externa) enquanto o Fox define a partir da atenuação interna da lâmina (veja exercício 1.10 da lista).

1.4 Materiais Ópticos

Os materiais ópticos podem ser classificados como:

- * Isolantes e semicondutores cristalinos
- * Vidros
- * Metais
- * Materiais moleculares

⁵ Neste caso, portanto, a transmitância deve variar entre 0 e 1, e assim deve ser usada nas equações seguintes, em oposição aos valores em porcentagem.

⁶ Acredito que o Fox tenha se equivocado nessa definição. As equações 1.10 e 1.11 não estão corretas – só ficam parecidas com o valor correto quando a transmitância for muito pequena. Isso ocorre por que as equações mencionadas não consideram as perdas produzidas por refletância.

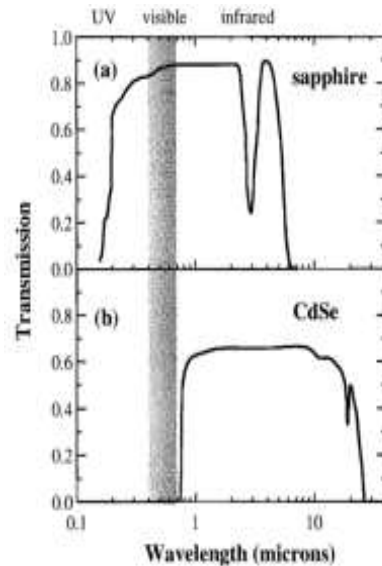
* Vidros e isolantes dopados

Antes de entrar nos detalhes, vejamos um resumo das principais propriedades desses materiais:

Cristais isolantes e semicondutores:

A fig. 1.4 mostra o espectro de transmissão de uma lâmina de safira cristalina (Al_2O_3) do infravermelho até o ultra-violeta. O espectro da safira mostra as características principais observadas em todos os isolantes, sendo que os detalhes mudam de material para material. As principais propriedades podem ser resumidas em:

Fig.1.4 (a) Espectro de transmissão de um cristal de safira de 3 mm de espessura. (b) Espectro de transmissão de um cristal de CdSe de espessura 1,67 mm.



- (i) A safira tem uma alta transmitância na faixa de comprimentos de onda entre 0,2 e 6,0 μm . Isso define a região de transparência do cristal. A região de transparência da safira inclui todo espectro visível, o que explica por que ela é incolor para a visão humana.
- (ii) Dentro da região de transparência o coeficiente de absorção é bem pequeno, e o índice de refração pode ser tomado como real ($n = 1,77$), sem componente imaginária.
- (iii) O coeficiente de na região transparente é determinado pela refletividade das superfícies por intermédio da E1.6. Usando $n=1.77$, $\rho = 0,077$, $T = 0,85$, $R = 0,15$.
- (iv) As quedas na transmissão no infravermelho, correspondentes ao vale em torno de 3 μm , e a queda rápida para $\lambda > 6 \mu\text{m}$, são causadas por absorção vibracional dos átomos. O mecanismo de absorção é análogo à vibração de moléculas polares. No cristal esses modos de vibração nos cristais são chamados de fônons, ou absorção da rede.
- (v) No ultra-violeta a transmissão cai rapidamente na região para $\lambda < 0,2 \mu\text{m}$ devido à absorção por elétrons ligados. O início da absorção nesta região é chamado de borda de absorção fundamental. O comprimento de onda correspondente está relacionado ao bandgap (região de energias proibidas) do isolante. A explicação do espectro de absorção devida a elétrons ligados necessita da teoria de bandas, baseada na descrição quântica dos sólidos.

O ponto (i) é talvez o aspecto mais óbvio das propriedades ópticas de isolantes: eles todos tendem a ser transparentes na região do visível. Se forem coloridos, provavelmente o efeito é causado pela presença de impurezas. As regiões de transparência de isolantes cristalinos comuns são listadas na Tabela 1.1.

A cristalinidade dos materiais dá origem a várias propriedades relacionadas com as propriedades de simetria da rede. Uma consequência direta é que alguns materiais listados na Tabela 1.1 são birrefringentes. As propriedades são anisotrópicas e o valor do índice de refração depende da direção de propagação da luz em relação aos eixos cristalográficos do material.

As propriedades ópticas dos semicondutores são conceitualmente similares às dos isolantes, exceto pelo fato de que as transições eletrônicas e vibracionais ocorrem para comprimentos de onda maiores. Por exemplo, a Fig. 1.4(b) mostra o espectro de transmissão do CdSe (seleneto de cádmio). Da mesma maneira que na safira há uma região de transparência limitada pela absorção eletrônica em comprimentos de onda curtos e absorção da rede em comprimentos de onda longos. Na região transparente, a transmissão máxima (60%) é também limitada pela refletividade das interfaces. A borda de absorção ocorre em 700 nm, o que significa que a região transparente encontra-se fora do espectro visível. Portanto nenhuma luz visível é transmitida através do cristal, o qual tem uma aparência metálica escura para os olhos. A Tabela 1.2 mostra a faixa aproximada de transparência de um conjunto de semicondutores comuns.

Table 1.1 Approximate transparency range and refractive index n of a number of crystalline insulators. n is measured at 546 nm. Values of n are given both for the o-ray and e-ray of birefringent materials. After [1] and [2].

Crystal	Transparency range (μm)	n
Al_2O_3 (sapphire)	0.2–6	1.771 (o) 1.763 (e)
BaF_2	0.2–12	1.476
Diamond	0.25–> 80	2.424
KBr	0.3–30	1.564
KCl	0.21–25	1.493
KI	0.3–40	1.673
MgF_2	0.12–8	1.379 (o) 1.390 (e)
NaCl	0.21–20	1.55
NaF	0.19–15	1.326
SiO_2 (quartz)	0.2–3	1.546 (o) 1.555 (e)
TiO_2 (rutile)	0.45–5	2.652 (o) 2.958 (e)

Table 1.2 Approximate transparency range, band gap wavelength λ_g , and refractive index n of a number of common semiconductors. n is measured at 10 μm . After [1], [2] and [3].

Crystal	Transparency range (μm)	λ_g (μm)	n
Ge	1.8–23	1.8	4.00
Si	1.2–15	1.1	3.42
GaAs	1.0–20	0.87	3.16
CdTe	0.9–14	0.83	2.67
CdSe	0.75–24	0.71	2.50
ZnSe	0.45–20	0.44	2.41
ZnS	0.4–14	0.33	2.20

Vidros:

Os vidros têm sido usados há séculos em prismas, lentes e instrumentos ópticos, além de seu uso comum em janelas e utensílios domésticos tais como copos e garrafas. Em tempos mais recentes encontraram novas aplicações como nas tecnologias de fibras ópticas. Eles não são cristalinos e não apresentam anisotropia óptica como alguns cristais.

A maior parte dos vidros é fabricada fundindo areia (sílica: SiO₂) juntamente com outros produtos químicos. A sílica fundida pura é um isolante, e mostra as propriedades características dessa categoria de materiais mencionadas na seção anterior.

Os vidros coloridos e os filtros coloridos são feitos adicionando semicondutores com gaps entre bandas no visível durante o processo de fusão.

Table 1.4 Composition, refractive index and ultraviolet transmission of common glasses. The letters after the names give the abbreviations used to identify the glass type. The composition figures are the percentage by mass. The refractive index is measured at 546.1 nm, and the transmission is for a 1 cm plate at 310 nm. After [1], [4].

Name	SiO ₂	B ₂ O ₃	Al ₂ O ₃	Na ₂ O	K ₂ O	CaO	BaO	PbO	P ₂ O ₅	<i>n</i>	<i>T</i>
Fused silica	100									1.460	0.91
Crown (K)	74			9	11	6				1.513	0.4
Borosilicate crown (BK)	70	10		8	8	1	3			1.519	0.35
Phosphate crown (PK)		3	10		12	5			70	1.527	0.46
Light flint (LF)	53			5	8			34		1.585	0.008
Flint (F)	47			2	7			44		1.607	–
Dense flint (SF)	33				5			62		1.746	–

Vidros dopados:

As cores dos filtros de vidro colorido podem ser controlados de duas maneiras distintas:

- Variando a composição do dopante.
- Os tamanhos dos cristalitos semicondutores no vidro podem ser bem pequenos e isso também tem um efeito na cor produzida. O ‘efeito quântico de tamanho’ aumenta a energia dos elétrons e portanto desloca a separação entre bandas para energias maiores.
- O princípio de incluir átomos opticamente ativos em vidros descolorados é extensivamente empregado em cristais usados para lasers de estado sólido. Um exemplo típico são os cristais de rubi.

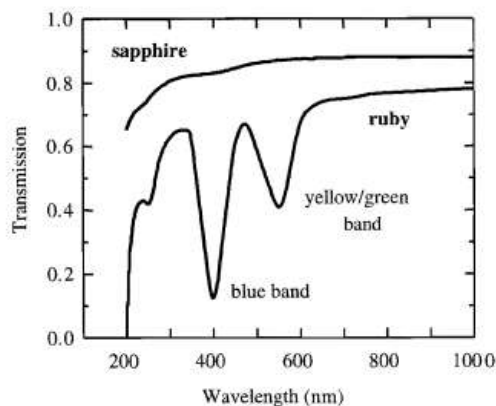


Fig. 1.7 Transmission spectrum of ruby (Al₂O₃ with 0.05 % Cr³⁺) compared to sapphire (pure Al₂O₃). The thicknesses of the two crystals were 6.1 mm and 3.0 mm respectively. After [6], reprinted with permission.

O rubi é a versão dopada da safira. Enquanto a safira é transparente no visível e incolor o rubi é vermelho. A dopagem corresponde a uma quantidade de 0.05% de Cr³⁺. Na Fig. 1.7 pode-se ver como a modificação das propriedades ópticas é forte, apesar da quantidade relativamente pequena de dopante.

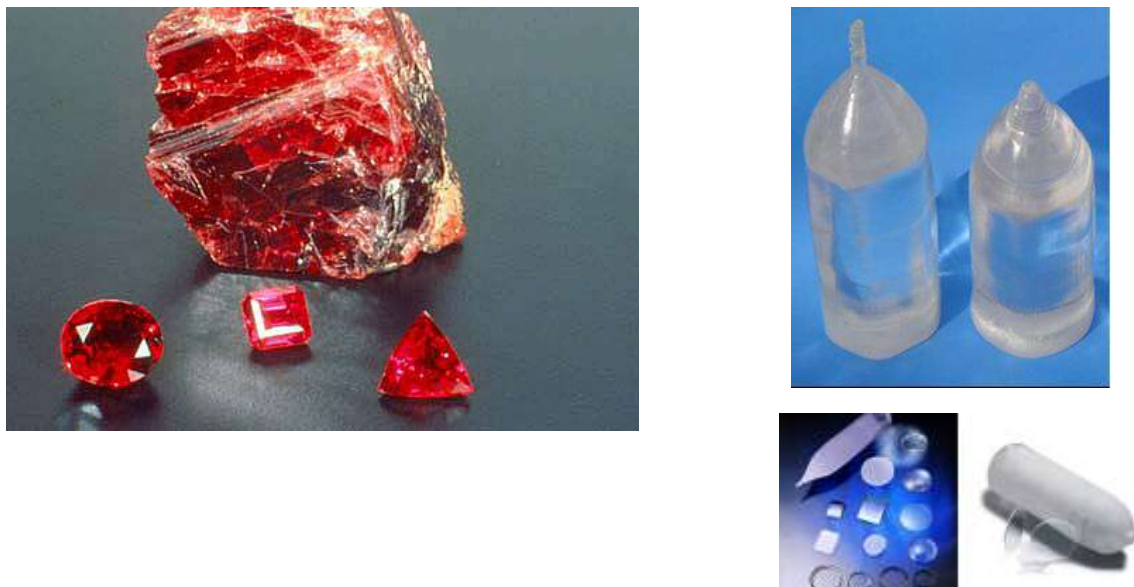
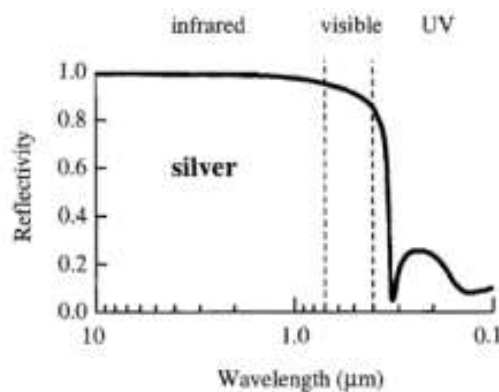


Figura: (a) Cristais de rubi (vermelho). (b e c) Cristais de safira não dopada (incolor transparente).

Metais:

A característica óptica mais marcante dos metais é que eles são reluzentes. Por isso metais como prata e alumínio têm sido usados por séculos para fazer espelhos. A aparência reluzente é consequência de seus altos coeficientes de reflexão. Veremos que a alta refletividade é decorrente da interação da luz com os elétrons livres presentes nos metais. A Fig. 1.5 mostra a refletividade da prata. Verifica-se que a refletividade no infravermelho é próxima de 100%, e fica acima de 80% em todo visível. A refletividade cai bruscamente no ultravioleta. Esse tipo de comportamento é observado em todos os metais. Há uma forte reflexão para todas as frequências mais baixas que uma frequência de corte característica, chamada de frequência de plasma.



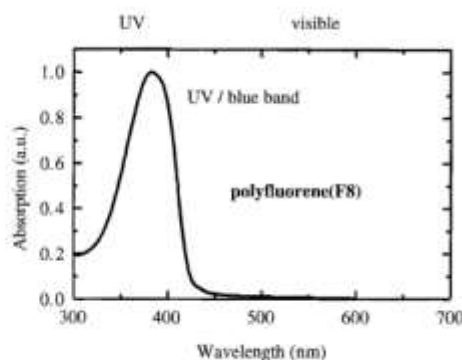
Materiais moleculares / polímeros:

Sob este tema vamos restringir a atenção a moléculas orgânicas grandes. Alguns compostos orgânicos formam cristais na fase condensada, mas há muitos condensados amorfos. Os sólidos são mantidos coesos por interações de van der Waals, as quais são relativamente fracas em comparação com as ligações covalentes que mantêm as moléculas. As propriedades ópticas dos sólidos ficam portanto muito similares àquelas das moléculas individuais.

Os compostos orgânicos podem geralmente ser classificados em saturados ou conjugados. Nos compostos saturados os elétrons de valência são incorporados em ligações fortes localizadas entre átomos vizinhos. Isso significa que todos os elétrons são fortemente ligados entre ligações

vizinhas, e respondem apenas em frequências altas na faixa ultravioleta. Os compostos saturados geralmente são incolores e não absorvem na região visível. Suas propriedades são geralmente similares às dos vidros. Plásticos como poli-metil-metacrilato (plexiglass) ou poli-etileno são exemplos típicos.

Fig. 1.6 Absorption spectrum of the polyfluorene-based polymer F8 [poly(9,9-dioctylfluorene)]. After [5], copyright 2001 Excerpta Medica Inc., reprinted with permission.



Em contraste, moléculas conjugadas têm propriedades ópticas mais interessantes. Os elétrons dos estados atômicos tipo-p dos átomos de carbono formam orbitais delocalizados⁷ chamados orbitais π que espalham-se através da molécula toda. O exemplo padrão nesse caso é a molécula de benzeno C_6H_6 , na qual os elétrons π formam um orbital do tipo anel acima e abaixo do plano de carbonos e hidrogênios. Outros exemplos desse tipo são os outros hidrocarbonetos aromáticos, as moléculas de corantes, e os polímeros conjugados.

Os elétrons π são mais fracamente ligados que os elétrons em moléculas saturadas, e são opticamente ativos a frequências mais baixas. No benzeno a borda de absorção é no ultravioleta em 260 nm, mas com outras moléculas a energia de transição é deslocada para frequências visíveis. Moléculas com absorção no visível tendem a emitir fortemente em frequências visíveis. Isso os torna de alto interesse tecnológico para aplicações como diodos emissores. Estas são as contrapartidas sólidas dos corantes orgânicos que tem sido usados em lasers líquidos por várias décadas. A Fig.1.6 mostra o espectro de absorção do polímero F8, o qual é baseado no polifluoreno. Polímeros como o F8 luminescem fortemente quando os elétrons são promovidos para os estados excitados da molécula. A luminescência apresenta um deslocamento Stokes, ou seja, a energia de emissão, que ocorre tipicamente no meio do visível, é menor que a energia da absorção.

Um aspecto atrativo desses materiais orgânicos é que o comprimento de onda de emissão pode ser 'sintonizado' por pequenas alterações na estrutura química das unidades moleculares constituintes desses polímeros. Essa propriedade tem sido usada para desenvolver dispositivos emissores que cobrem a totalidade do espectro visível (Fox, seção 8.6).

⁷ N.T. O termo 'delocalized' foi traduzido como *delocalizado*. O sentido é de não localizado, de espalhado, de estendido numa ampla região do espaço.

1.5 Características Ópticas do Estado Sólido

Quando tratamos das propriedades ópticas dos materiais, conforme abordado na seção anterior, é natural perguntar se as propriedades observadas são exclusivas do estado sólido. Em outras palavras, como as propriedades ópticas dos sólidos diferem daquelas dos seus átomos ou moléculas constituintes? A resposta depende do tipo de material que estamos considerando. Em alguns materiais haverá um conjunto de novos efeitos associados ao estado sólido, enquanto com outros, as diferenças podem não ser tão grandes. Materiais moleculares são exemplos do segundo tipo. Entretanto há muitos outros materiais nos quais há muitas e significativas diferenças entre a fase condensada e a fase gasosa e o estado líquido. Na sequência trataremos os principais aspectos que fazem da física do estado sólido um tema interessante e diferente:

- * simetria cristalina
- * bandas eletrônicas
- * bandas vibracionais
- * densidade de estados
- * estados delocalizados (estendidos) e oscilações coletivas.

- Simetria Cristalina

A maioria dos materiais que vamos estudar apresentam-se cristalinos. Os cristais têm ordem translacional de longo alcance e podem ser categorizados em 32 classes, de acordo com a simetria de grupo pontual. A simetria de grupos pontuais refere-se a um grupo de operações de simetria que deixa o cristal invariante. Como exemplos dessas operações podemos citar rotações em torno de eixos particulares, reflexões em relação a planos, e inversão em relação a pontos da célula unitária. Algumas classes de cristais tais como os cúbicos possuem um alto grau de simetria. Outros tem simetria mais baixa.

A ligação entre as propriedades mensuráveis e a simetria de grupo pontual de um cristal pode ser feita através do princípio de Neumann:

Qualquer propriedade física macroscópica têm que ter pelo menos a simetria da estrutura cristalina.

Por exemplo, se um cristal tem simetria rotacional de grau quatro em torno de um determinado eixo, então temos que ter o mesmo resultado em qualquer experimento que realizemos nas quatro direções equivalentes.

É instrutivo comparar as propriedades dos cristais com aquelas dos átomos a partir dos quais os cristais são formados. Um gás de átomos não tem ordem translacional, e os átomos estão longe o suficiente uns dos outros para que não haja nem um tipo de interação entre átomos, ao contrário do que ocorre em um sólido. Portanto esperamos encontrar novos efeitos no estado sólido que refletem a simetria translacional. Ao mesmo tempo a simetria de grupo pontual de um cristal é mais baixa que a do átomo individual, o qual por sua vez tem a maior simetria possível devido à sua invariância esférica. Portanto nós esperamos encontrar outros efeitos no estado sólido que relacionam a queda de simetria quando vamos de átomos livres para cristais pertencentes a determinados grupos pontuais.

Dois exemplos específicos são a anisotropia óptica e o levantamento de degenerescências.

Um cristal é dito anisotrópico se suas propriedades não são as mesmas em todas as direções. A anisotropia é encontrada apenas no estado sólido, por que gases e líquidos não têm orientações preferenciais. O grau de anisotropia encontrado em um cristal depende fortemente da simetria de grupo pontual ao qual pertence. Em cristais cúbicos por exemplo as propriedades devem ser as mesmas ao longo dos eixos x , y e z por que são fisicamente indistinguíveis. Por outro lado, em cristais uniaxiais as propriedades ao longo do eixo óptico serão diferentes em relação a eixos perpendiculares ao longo dele. A anisotropia óptica manifesta-se pela propriedade de birrefringência, discutida em maior detalhe no próximo capítulo.

O processo de levantar as degenerescências⁸ por redução de simetria é um efeito bem conhecido em física atômica. Átomos livres são esfericamente simétricos e não têm direção preferencial. A simetria pode ser quebrada aplicando um campo elétrico magnético ou elétrico que cria um eixo preferencial ao longo da direção do campo. Isso pode levar ao levantamento de certos níveis de degenerescência que estão presentes em átomos livres. O efeito Zeeman, por exemplo, descreve a separação de níveis magnéticos degenerados quando um campo magnético é aplicado. Se o mesmo átomo for introduzido em um cristal, ele irá encontrar-se em um ambiente no qual a simetria de grupo pontual determinada pela rede. Essa simetria é mais baixa que a do átomo, e portanto algum nível de degenerescência pode ser levantado.

Esse ponto é ilustrado esquematicamente na Fig. 1.8, a qual mostra como os níveis magnéticos de um átomo livre podem ser separados pelo efeito de campo cristalino. A separação é causada pela interação dos orbitais dos átomos com os campos elétricos do ambiente cristalino. Não entraremos nos detalhes desse efeito. O ponto importante é que as separações entre níveis são determinadas pela classe de simetria do

⁸ Diz-se que um sistema, um estado ou valor de energia é degenerado quando há várias configurações de um sistema com um mesmo valor de energia. Esse termo aparece muitas vezes na mecânica quântica. Levantar degenerescência significa reduzir o número de configurações para uma mesma energia.

cristal e não requer um campo externo. As transições ópticas entre esses níveis com separação de campo cristalino frequentemente ocorrem na região espectral do visível, e produzem no material propriedades que não são encontradas em átomos livres.

Em contraste, a aplicação de campo magnético externo causa separações diferentes e proporcionais à intensidade do campo aplicado, e a separação resultante é conhecida como efeito Zeeman.

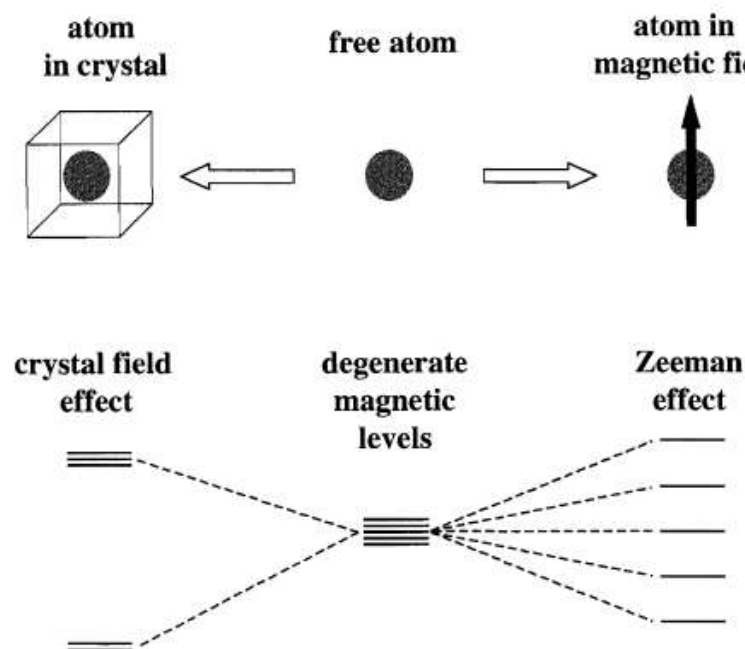


Fig. 1.8 (Fox) Separação dos níveis magnéticos de um átomo livre pelo efeito de campo cristalino. Nos átomos livres os níveis magnéticos são degenerados (vários níveis com a mesma energia). É necessário aplicar um campo magnético para separá-los pelo efeito Zeeman. Entretanto, os níveis magnéticos podem ser separados mesmo sem aplicar um campo magnético externo quando o átomo encontra-se em um cristal. Os detalhes da maneira como os níveis são separados são determinados pela simetria do cristal.

- Bandas Eletrônicas

Átomos em um sólido são empacotados bem próximos uns dos outros, com separação interatômica aproximadamente igual ao tamanho dos átomos. Portanto os orbitais externos dos átomos interagem fortemente entre si. Isso alarga os níveis atômicos discretos em bandas, conforme ilustrado esquematicamente na Fig. 1.9. Os elétrons dentro dessas bandas são completamente espalhados pelo espaço (delocalizados) e

possuem a invariância translacional do cristal. O **teorema de Bloch** afirma que as funções de onda podem ser escritas na forma:

$$\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = u_{\vec{k}}(\vec{r})e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \quad (\text{E1.27})$$

Onde $u_{\vec{k}}(\vec{r})$ é uma função que tem a mesma periodicidade que a rede. As **funções de Bloch**, descritas pela E1.27, são portanto funções de onda plana moduladas. Cada banda eletrônica tem uma função envelope $u_{\vec{k}}(\vec{r})$ diferente, a qual retém parte do caráter atômico dos estados a partir da qual a banda é derivada.

Transições ópticas podem ocorrer entre as bandas, desde que sejam permitidas pelas regras de seleção⁹. Essa absorção interbandas é possível sobre uma faixa contínua de energias de fóton, determinada pelos limites superior e inferior de energias das bandas. Isso contrasta com o espectro de absorção dos átomos livres, o qual consiste em um conjunto discreto de linhas. A observação de absorção em bandas largas em vez de linhas discretas é uma das características do estado sólido. As transições interbandas serão amplamente discutidas durante a disciplina, em especial nos Caps.3 e 5 do Fox. A absorção é geralmente muito intensa por causa da alta densidade de átomos absorvedores nos sólidos. Isso significa que podemos produzir efeitos ópticos notáveis em amostras muito finas, possibilitando a construção de dispositivos ópticos compactos que formam a base da moderna indústria optoeletrônica.

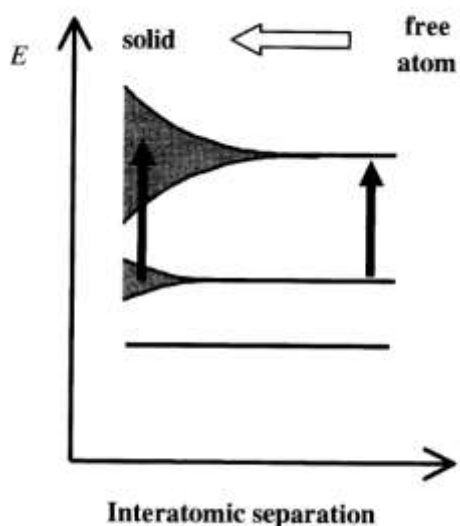


Fig.1.9 Diagrama esquemático da formação de bandas eletrônicas a partir da aproximação de átomos livres. Quando os átomos são trazidos bem próximos para formar um sólido seus orbitais externos começam a se sobrepor. Esses orbitais sobrepostos interagem fortemente e bandas largas são formadas. Os orbitais internos não se sobrepõem, e portanto mantêm-se praticamente discretos (valores individuais de energia) mesmo no estado sólido. Transições ópticas entre as bandas podem ocorrer, e isso causa forte absorção em uma faixa contínua de frequências em vez de linhas discretas.

- densidade de estados

⁹ As regras de seleção são um conjunto de regras da mecânica quântica que determinam se a probabilidade de transição entre estados será alta ou baixa. Veremos melhor nos capítulos seguintes.

O conceito de densidade de estados é um corolário inevitável da formação de bandas nos sólidos. Os estados eletrônicos e vibracionais de moléculas livres e átomos possuem energias discretas, mas este não é o caso em um sólido: tanto os estados eletrônicos como os modos vibracionais (fônons) têm uma faixa contínua de energias. Esse contínuo de estados leva a absorção e emissão em bandas contínuas, como já foi salientado.

O número de estados dentro de uma determinada banda é convenientemente expresso em termos da função densidade de estados $g(E)$. Este é definido como:

$$\text{número de estados na faixa } E \rightarrow E + dE = g(E)dE \quad (\text{E.1.28})$$

$g(E)$ é trabalhado na prática calculando primeiro a densidade de estados no espaço de momento $g(k)$, e então usando a relação entre $g(E)$ e $g(k)$, a saber:

$$g(E) = g(k) \frac{dk}{dE}$$

Esta pode ser avaliada a partir do conhecimento da relação $E-k$ para os elétrons ou fônons. Conhecimento do $g(E)$ é crucial para o cálculo dos espectros de absorção e emissão devido a transições interbandas e também para calcular a forma de bandas vibrônicas.

- Estados delocalizados e excitações coletivas

O fato de que os átomos em um sólido são muito próximos entre si significa que é possível para os estados eletrônicos se estenderem sobre muitos átomos. As funções de onda desses estados descentralizados possuem a simetria translacional do cristal subjacente. As ondas de Bloch ondas descritas por E1.27 são um exemplo típico. As ondas de elétrons delocalizados movem-se livremente ao longo de todo o cristal e interagem entre si de uma forma que não é possível nos átomos. A delocalização também possibilita excitações coletivas do cristal como um todo em vez de átomos individuais. Dois exemplos que iremos considerar são os éxcitons formados a partir de elétrons e buracos delocalizados em um semicondutor, e os plásmons formados a partir de elétrons livres em metais e semicondutores dopados. Estas excitações coletivas podem ser observadas nos espectros ópticos, e não têm contrapartida óbvia nos espectros de átomos livres. Estes efeitos excitônicos serão discutidos no Capítulo 4, enquanto plásmons são abordados na secção 7.5.

Outras excitações tipo onda dos cristais são delocalizadas da mesma forma que os elétrons. No caso de vibrações da rede, as excitações delocalizadas são descritas pelos modos de fônons. Já mencionamos que as frequências de fônons são contínuas, o que contrasta com as frequências vibracionais discretas das moléculas. Alguns efeitos ópticos relacionados com fônons têm analogias diretas com fenômenos vibracionais observados

em moléculas isoladas mas outros são peculiares para o estado sólido. Exemplos da primeira são o espalhamento Raman e a absorção no infravermelho. Exemplos dos últimos incluem as transições interbandas assistidas por fônon em semicondutores com separação indireta entre bandas (Seção 3.4), e o alargamento dos níveis discretos de impureza átomos em bandas vibrônicas¹⁰ contínuas pelas interações com os fônons (Cap. 9).

Os estados delocalizados de um cristal são descritos por números quânticos tais como $\mathbf{k}$ e $\mathbf{q}$, que têm as dimensões de inverso de comprimento. Estes números quânticos seguem a partir da invariância translacional, e são portanto uma manifestação fundamental da simetria do cristal. Para todos os efeitos, os números quânticos como $\mathbf{k}$ e $\mathbf{q}$ se comportam como vetores de onda de excitações, e eles serão tratados como tal sempre que os encontrarmos nas derivações. No entanto, convém ter em mente que esta é realmente uma consequência da profunda simetria subjacente que é exclusiva para o estado sólido.

1.6 Modelos Microscópicos

Nos capítulos a seguir iremos desenvolver muitos modelos microscópicos para explicar os fenômenos ópticos que são observados no estado sólido. Os tipos de modelos variarão consideravelmente, mas todos eles podem ser classificados em uma das seguintes três categorias gerais:

*clássico

Radiação e matéria descritos pela eletrodinâmica clássica

*semi-clássico

Radiação descrita pela eletrod. clássica e matéria descrita pela mec. quântica.

* completamente quântico

Uso da eletrodinâmica quântica para descrever interação entre fótons e elétrons.

Estas abordagens tornam-se progressivamente mais difíceis, e é por isso que geralmente as aplicamos na ordem listada acima.

¹⁰ (N.T. nota do tradutor:) As bandas vibrônicas originam-se de combinações entre níveis eletrônicos e vibracionais acoplados.

Na abordagem clássica tratamos o meio e a luz de acordo com a física clássica. O modelo de oscilador dipolar descrito no Cap.2 é um exemplo típico. Este modelo é o ponto de partida para a compreensão das propriedades ópticas de um meio, e em especial para descrever os principais efeitos devidos a elétrons (cap.7) e fônons (cap.10).

Também pode-se utilizar a descrição clássica como um ponto de partida para a discussão de óptica não linear (cap. 11). Seria um erro subestimar a abordagem clássica no presente. O valor de modelos mais sofisticados só podem ser apreciados completamente quando a física clássica foi propriamente entendida.

Em modelos semiclássicos aplicamos mecânica quântica aos átomos, mas tratar a luz como uma onda eletromagnética clássica. O tratamento de absorção interbandas do Cap.3 é um exemplo típico. O coeficiente de absorção é calculado usando a regra de ouro de Fermi, que exige conhecimento das funções de onda dos níveis quantizados dos átomos, mas trata a questão da interação luz-matéria como a interação entre um átomo quantizado e uma onda clássica de campo elétrico. Esta abordagem semiclássica é amplamente utilizada em todo o livro. O Apêndice B resume os principais resultados que serão necessários.

A aproximação final é o pleno tratamento quântico. Esse é o domínio da **óptica quântica**, onde tanto os átomos quanto a luz são tratados quanticamente. Usaremos esta abordagem implicitamente sempre que nos referirmos à luz como um feixe de fótons e desenharmos diagramas de Feynman para representar os processos de interação que estão ocorrendo. Isso pode dar a impressão de que as explicações que estamos dando são totalmente quânticas porque falamos em termos de fótons interagindo com os átomos. No entanto, nas equações utilizadas para descrever o processo quantitativamente, a luz é tratada de forma clássica e apenas os átomos são quantizados. A descrição quantitativa é portanto apenas semiclássica. A utilização da abordagem quântica total está além dos objetivos da presente disciplina.

Notas complementares:

Números complexos

Um número complexo é um número que pode ser expresso na forma $a+ib$, onde a e b são números reais e i é a unidade imaginária, que satisfaz a equação $i^2 = -1$. Nessa notação, a é a parte real, e b é a parte imaginária do número complexo.

$$\tilde{z} = a + ib$$

$$Re(\tilde{z}) = a$$

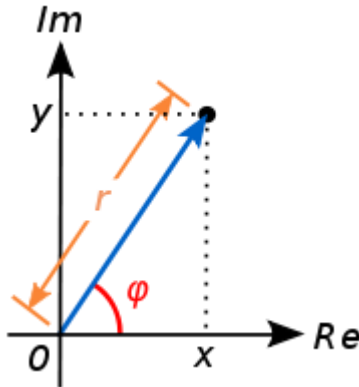
$$Im(\tilde{z}) = b$$

Fórmula de Euler

Para qualquer número real θ :

$$e^{i\theta} = \cos\theta + i\sin\theta$$

Forma Polar:



$$\tilde{z} = r e^{i\varphi} = r(\cos\varphi + i\sin\varphi)$$

$$r = \sqrt{x^2 + y^2}$$

$$\varphi = \arctg\left(\frac{y}{x}\right)$$

Na física e na engenharia os números complexos são utilizados como forma de representar grandezas múltiplas de maneira compacta, ou para abreviar a notação de grandezas únicas. Exemplo:

$$E(x) = E_o \cos(kx - \omega t) = E_o e^{i(kx - \omega t)}$$

Nessa expressão simplesmente desprezou-se a parte imaginária. Uma das vantagens ocorre quando temos uma multiplicação de duas funções desse tipo, nesse caso podemos simplesmente somar os argumentos.

Na análise de circuitos de corrente alternada a notação é particularmente útil. Fica natural a inclusão de um ângulo de fase entre duas grandezas. Para que o imaginário i não seja confundido com as correntes elétricas, muitas vezes i é substituído por j em livros texto e artigos da área.

Referências

- Alonso, M. and E. J. Finn (1967). Fundamental University Physics, Vol 2. Fields and Waves. Reading MA, USA., Addison-Wesley.
- Cisneros, J. I. (2001). Ondas Eletromagnéticas, Fundamentos e Aplicações. Campinas SP, Editora da Unicamp.
- Dressel, M. and G. Grüner (2002). Electrodynamics of Solids. Cambridge UK, Cambridge University Press.
- Fox, M. (2010). Optical Properties of Solids. Oxford RU, Oxford University Press.
- Nussenzveig, H. M. (1998). Física Básica, Vol.4. Ótica, Relatividade, Física Quântica. São Paulo, Edgard Blücher.