UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO
INSTITUTO DE FÍSICA DE SÃO CARLOS

ANDERSON ROBERTO DE OLIVEIRA

Polarímetro diferencial baseado na reflexão interna

São Carlos

2016

ANDERSON ROBERTO DE OLIVEIRA

Polarímetro diferencial baseado na reflexão interna

Tese apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Física do Instituto de Física de São Carlos da Universidade de São Paulo, para obtenção do título de Doutor em Ciências.

Área de concentração: Física Aplicada
Orientador: Prof. Dr. Sérgio Carlos Zilio

Versão Corrigida

(Versão original disponível na Unidade que aloja o Programa)

São Carlos

2016

AUTORIZO A REPRODUÇÃO E DIVULGAÇÃO TOTAL OU PARCIAL DESTE TRABALHO, POR QUALQUER MEIO CONVENCIONAL OU ELETRÔNICO PARA FINS DE ESTUDO E PESQUISA, DESDE QUE CITADA A FONTE.

Ficha catalográfica revisada pelo Serviço de Biblioteca e Informação do IFSC,
com os dados fornecidos pelo(a) autor(a)

Oliveira, Anderson Roberto de
Polarímetro diferencial baseado na reflexão
interna / Anderson Roberto de Oliveira; orientador
Sérgio Carlos Zilio - versão corrigida -- São
Carlos, 2016.
116 p.

Tese (Doutorado - Programa de Pós-Graduação em
Física Aplicada) -- Instituto de Física de São Carlos,
Universidade de São Paulo, 2016.

1. Polarimetria. 2. Ângulo crítico. 3. Substâncias
opticamente ativas. 4. Reflexão total interna. 5.
Dispositivos ópticos. I. Zilio, Sérgio Carlos,
orient. II. Título.

A Iahweh, antes de tudo e de todos,
simplesmente por ser Deus.

AGRADECIMENTOS

A Deus, pela graça e misericórdia.

Aos meus pais, Claudemir e Rita, e ao meu irmão, Douglas, pelo amor recíproco e apoio incondicional.

À minha namorada, Karen, pelo companheirismo, amor, amizade, sinceridade, cumplicidade, respeito e por ser o amor da minha vida.

Ao Prof. Dr. Sérgio Carlos Zilio pelos nove anos de orientação acadêmico-científica, pela paciência, pela amizade, pelos valores transmitidos e pelo exemplo de seriedade e profissionalismo com relação à carreira acadêmica.

Aos Profs. Drs. Cleber Renato Mendonça, Lino Misoguti e Leonardo De Boni, pela amizade, pelo companheirismo, pelo apoio, pelas discussões e pelos momentos de descontração.

Aos técnicos de laboratório André Romero e Marcos Cardoso.

Aos amigos e companheiros do Grupo de Fotônica do IFSC, Otuka, Vinícius, Chico, Jordan, Renato, Caio, Emerson, Oriana, Franciele, Tiago, P.H., Jonathas, Juliana, Ruben, Nathália, Nó, Velma, Piá e Link.

Aos funcionários do Instituto de Física de São Carlos, do serviço de Pós Graduação e da Biblioteca pelo atendimento sempre cordial e eficiente.

Aos amigos Du, Pops, Valdemar, Flavinho, Patrícia, Talitha, Maria Luiza, Esqueleto, Kaka, Caio, Rebeca, Valdo, Gostosa, Espiãozinho, Pirata, Taffarel, Cora.

À minha segunda família, em Bauru: Dona Sandra, Dona Mara e Seu Oswaldo.

Aos times de Futsal e Futebol do CAASO nas pessoas dos atletas B2, Militar, Matheus, Marco, Gordo, Adam, Gui, Fronha, Calota, Perigo, Furlan, Kelvin, Ricardinho, Edson, Maminha, Cirilo, Salsicha, Cassiano, Mino, Chico, Sikeira, Bodelho, Luiz, Jaca (professor), Aduino, Renato, Flávio, Meia, Deda, Goiaba, Bruno, Zanata, Breno, Clovis e tantos outros com os quais dividi quadras e campos lutando pela vitória e reconhecimento do CAASO na área dos esportes.

À todas as pessoas que não estão listadas aqui mas estiveram presentes em minha vida e, de alguma forma, contribuíram para a realização deste trabalho e para a minha formação moral e intelectual.

À CAPES pelo apoio financeiro.

“A ciência é toda observação, toda exatidão,
toda verificação experimental. Perceber os
fenômenos, discernir as relações, comparar
as analogias e as dessemelhanças, classificar
as realidades, e induzir as leis, eis a ciência;
eis, portanto, o alvo que a educação deve
ter em mira.”

Rui Barbosa

RESUMO

OLIVEIRA, A. R. **Polarímetro diferencial baseado na reflexão interna**. 2016. 116 p. Tese (Doutorado em Ciências) – Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2015.

Neste trabalho apresentamos uma nova técnica para a medida da rotação da polarização da luz por uma substância que possui atividade óptica. O sistema utiliza um LED, dois polarizadores, um prisma de vidro semicilíndrico, uma cubeta, uma CCD e um computador para análise de dados. Luz proveniente do LED passa pelo primeiro polarizador, cujo eixo de transmissão se encontra a 45° , e incide no prisma pelo lado semicilíndrico, ocorrendo reflexão na sua base, num ângulo próximo do ângulo crítico. Devido ao tamanho finito do feixe e o formato curvo da superfície do prisma, vários ângulos de incidência são observados na base da lente semicilíndrica. A luz refletida passa então pela cubeta e depois por um analisador, cujo eixo se encontra paralelo ao primeiro polarizador, e então o sinal é captado pela CCD. De forma alternativa, a cubeta pode ser posicionada após o primeiro polarizador, antes do prisma. Quando a cubeta é preenchida com água, observa-se na CCD uma interferência destrutiva exatamente no ângulo crítico caracterizado por um mínimo de intensidade nesse ângulo. Se uma substância opticamente ativa é utilizada para preencher a cubeta, a posição desse mínimo é alterada dependendo do ângulo de rotação da polarização imposto pela substância. Uma calibração é necessária e pode ser feita utilizando-se soluções de concentração conhecida de sacarose ou frutose, por exemplo. O aparato obtido foi utilizado para medir a rotação causada por uma amostra normal (0,26 g/ml) de soluções de sacarose e frutose e apresenta uma precisão de $0,04^\circ$. Equivalentemente, a precisão em concentração é de 0,001 g/ml ou aproximadamente 0,1% (m/m). Isso corresponde a uma precisão que é uma ordem de grandeza acima dos aparelhos comerciais e técnicas mais comuns utilizadas atualmente. Em contrapartida, o custo da montagem experimental é duas ordens de grandeza menor que os mesmos aparelhos comerciais. A produção de uma gama de ângulos de incidência devido à focalização na superfície cilíndrica do prisma substitui a necessidade de se produzir rotação no eixo de polarização do analisador após a passagem da luz pela amostra opticamente ativa, como ocorre em alguns aparelhos comercializados. Este dispositivo, por ser de baixo custo, compacto e de fácil manuseio, é de grande importância porque pode ser utilizado na indústria sucroalcooleira para a medida da quantidade de sacarose em cana e

também na indústria farmacêutica para a identificação de substâncias opticamente ativas dextrogiras ou levógiras.

Palavras-chave: Polarimetria. Ângulo crítico. Substâncias opticamente ativas. Reflexão total interna. Dispositivos ópticos.

ABSTRACT

OLIVEIRA, A.R. **Differential polarimeter based on internal reflection**. 2016. 116 p. Tese (Doutorado em Ciências) – Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2015.

In this thesis we present a novel technique for measuring light polarization rotation caused by an optically active substance. The system is composed by a LED, two polarizers, a semi cylindrical glass prism, a cuvette, a linear CCD camera and a computer for data analysis. Light from the LED passes through the first polarizer, whose transmission axis is set at 45° . After that, the linear polarized light enters the prism by the semi cylindrical face, occurring reflection in the flat face at critical angle approximately. Several incidence angles are accessed due to the beam's finite size and the shape of the semi cylindrical lens. The reflected light passes through the cuvette and then through the analyzer, whose transmission axis is set parallel to the first polarizer. Finally, the light is detected by the CCD. When the cuvette is filled up with water, a destructive interference at the critical angle is observed, characterized by a narrow valley centered at this angle. If the cuvette is filled up with an optically active substance, the center of this valley is shifted depending on the substance, its concentration and the optical path travelled by the light in the substance. A calibration is needed and is performed using a set of solutions of known concentrations. Our apparatus was used to measure the angle rotation caused by a normal solution (0,26 g/ml) of sucrose and fructose solutions and has a precision of $0,04^\circ$. It corresponds to a precision that is one order of magnitude above most used commercial apparatus and developed techniques. In contrast, the cost of our experimental setup is two orders of magnitude less than the same commercial devices. The production of a range of angles of incidence due to focusing on the cylindrical surface of the prism replaces the need of producing a rotation of the analyzer polarization axis after the light passes through the optically active sample, as it happens in some commercial devices. Since this device has a low cost, is compact and easy to handle, it may be of great importance for applications in the pharmaceutical industry to identify enantiomers, and in the sugar industry for measuring sugar content in sugar cane juice.

Keywords: Polarimetry. Critical angle. Optical active substances. Total internal reflection. Optical devices.

LISTA DE FIGURAS

Figura 1.1 -	Desenho esquemático da montagem experimental desenvolvida.....	24
Figura 2.1 -	(a) Polarização elíptica à direita. A defasagem entre as componentes de polarização s e p está dentro do intervalo $0 < \varphi_p < \pi$. (b) Polarização elíptica à esquerda, para valores de defasagem dentro do intervalo $\pi < \varphi_p < 2\pi$	32
Figura 2.2 -	(a) Polarização circular à direita, com defasagem entre as componentes s e p de $\varphi_p = \frac{\pi}{2}$ e (b) polarização circular à esquerda, cuja defasagem entre as componentes de $\varphi_p = \frac{3\pi}{2}$	33
Figura 2.3 -	Polarização linear. O campo oscila sobre a linha nos quadrantes 1 e 3 do plano da figura quando a defasagem entre as componentes s e p for nula, $\varphi_p = 0$, e sobre a linha nos quadrantes 2 e 4 do plano quando $\varphi_p = \pi$. Nesta figura, o vetor de propagação é perpendicular ao plano da figura, apontando para fora do mesmo.....	34
Figura 2.4 -	Índice de refração em função da frequência. As regiões de dispersão normal se caracterizam pelo crescimento do índice de refração com a frequência. Na dispersão anômala, o índice de refração decresce com o crescimento da frequência.....	38
Figura 2.5 -	Coeficiente de absorção em função da frequência da luz. A frequência em que há o pico de absorção coincide com a frequência ω_0	40
Figura 2.6 -	Volume V , delimitado pela superfície S , sobre a interface entre dois meios 1 e 2.....	41
Figura 2.7 -	Superfície A , delimitada pela curva C , sobre a interface entre os meios 1 e 2.....	43
Figura 2.8 -	Incidência oblíqua de uma onda plana em uma interface entre dois meios dielétricos. Os vetores $\vec{k}_1$, $\vec{k}'_1$ e $\vec{k}_2$ são os vetores de propagação da onda incidente, da refletida na interface de volta ao meio 1 e da transmitida para o meio 2, respectivamente.....	46
Figura 2.9 -	Incidência oblíqua de onda com polarização perpendicular ao plano de incidência em interface entre dois meios. Nessa situação, a convenção escolhida foi tal que os campos elétricos apontam para o mesmo sentido, entrando no plano da figura.....	50
Figura 2.10-	Incidência oblíqua de onda com polarização paralela ao plano de incidência em interface entre dois meios. Nessa situação, a convenção escolhida foi tal que os campos indução magnética apontam para a mesma direção, saindo do plano da figura.....	52

Figura 2.11-	Módulo de r_p e r_s em função do ângulo de incidência para a reflexão da luz na interface entre um vidro SF10 ($n_1 = 1,72$) e o ar ($n_2 \cong 1$). Para esta simulação, o comprimento de onda da luz considerado foi de 589 nm.....	55
Figura 2.12-	Diferença entre as fases ganhas pelas ondas s e p ao serem refletidas em uma interface entre dois meios de índice $n_1 = 1,72$ e $n_2 = 1$. Para esta simulação, o comprimento de onda da luz considerado foi de 589 nm.....	56
Figura 2.13-	Perfil de intensidades em função do ângulo de incidência considerando-se a interferência entre as ondas s e p refletidas em uma interface vidro ($n_1 = 1,72$) e ar. Para esta simulação, o comprimento de onda da luz considerado foi de 589 nm.....	59
Figura 2.14-	Polarização linear deslocada de 45° por um ângulo α	60
Figura 2.15-	Perfis de intensidade da interferência entre as componentes s e p de uma onda linearmente polarizada a $(45^\circ + \alpha)$ após a reflexão em uma interface entre vidro e ar e, em sequência, após a transmissão por um polarizador com eixo de transmissão a 45° em função do ângulo de incidência para $\alpha = -3^\circ, -2^\circ, -1^\circ, 0^\circ, 1^\circ, 2^\circ$ e 3° com $n_2/n_1 = 1/1,727221$. Para esta simulação, o comprimento de onda da luz considerado foi de 589 nm.....	61
Figura 2.16-	Ângulo de reflexão do mínimo de intensidade na reflexão de uma onda linearmente polarizada a $(45^\circ + \alpha)$ em uma interface entre vidro (SF10, Schott) e ar em função de α . Para esta simulação, o comprimento de onda da luz considerado foi de 589 nm.....	62
Figura 2.17-	Espectro típico de um LED amarelo de banda larga.....	63
Figura 2.18-	Índice de refração em função do comprimento de onda do vidro SF10 considerando os coeficientes de Sellmeier da Tabela 2.1.....	64
Figura 2.19-	Perfis de intensidade da luz policromática linearmente polarizada a $(45^\circ + \alpha)$ após a reflexão na interface entre vidro (SF10, Schott) e ar e após o analisador em função do ângulo de incidência para $\alpha = 0, -1, -2$ e -3°	65
Figura 2.20-	Posição do mínimo de intensidades em função de α para fonte de luz de banda larga. O experimento aqui sendo feito consiste da reflexão de uma onda policromática linearmente polarizada a $(45^\circ + \alpha)$ e sequencialmente a transmissão por um polarizador com eixo de transmissão a 45°	65
Figura 2.21-	Comparação do perfil de intensidades após o analisador para luz monocromática de comprimento de onda de 596 nm (linha vermelha) e luz policromática (linha preta).....	66

Figura 3.1 -	Desenho esquemático da montagem experimental com o laser como fonte de luz. Nessa montagem, a cubeta é posicionada após o polarizador e antes do prisma semi cilíndrico.....	75
Figura 3.2 -	(a) Desenho esquemático da montagem experimental com LED como fonte de luz e (b) fotografia da montagem experimental vista de um ponto superior. Nesta montagem, a cubeta é posicionada após o prisma semi cilíndrico e antes do analisador.....	75
Figura 3.3 -	Perfil de intensidades típico obtido na CCD nas proximidades mínimo...	76
Figura 3.4 -	Painel frontal do programa em LabVIEW construído para a observação e análise dos dados captados pela CCD. Cada caixa vermelha desenhada na figura representa um objeto do painel pelo qual é fornecido um parâmetro ao programa ou então é observado um dado captado pela CCD.....	77
Figura 3.5 -	Desenho esquemático da variação lateral Δl da posição do mínimo de intensidades relacionada a uma mudança $\Delta\theta_{min}$ do ângulo de saída do mínimo de intensidades.....	83
Figura 4.1 -	Rotação da polarização da luz imposta pelo polarizador de entrada em função da posição relativa do mínimo de intensidades. A curva vermelha é o ajuste parabólico que fornece os parâmetros da calibração..	86
Figura 4.2 -	Medida da rotação da polarização provocada pelas amostras da Tabela 4.1 em função da concentração. Os triângulos azuis correspondem aos valores da rotação da polarização obtidos para cada amostra considerando-se a calibração feita pela rotação do polarizador de entrada. Os pontos vermelhos são os valores esperados. A montagem experimental é esquematizada na fig. 3.1.....	87
Figura 4.3 -	Campo indução magnética no centro do solenoide em função da corrente aplicada. A reta vermelha representa o ajuste de calibração.....	88
Figura 4.4 -	Rotação da polarização da luz imposta pelo cristal de TGG em função da posição do mínimo de intensidades. A curva vermelha é o ajuste parabólico que fornece os parâmetros da calibração.....	89
Figura 4.5 -	Medida da rotação da polarização provocada pelas amostras da Tabela 4.2 em função da concentração. Os pontos vermelhos correspondem aos valores da rotação da polarização obtidos para cada amostra considerando-se a calibração feita com o cristal de TGG. Os pontos pretos são os valores esperados. A montagem experimental é esquematizada na fig. 3.1 com a adição de um solenoide e um bastão cilíndrico de TGG entre o polarizador de entrada e a cubeta.....	90
Figura 4.6 -	Estudo da posição do mínimo em função do tempo com amostra fixa na configuração com laser como fonte de luz.....	92

- Figura 4.7 - Rotação da polarização da luz imposta pelas soluções de sacarose em função da posição do mínimo de intensidades relativa à situação onde a cubeta de 1 cm de comprimento é preenchida com água destilada. Os pontos pretos numerados de 1 a 7 representam as soluções preparadas nas proporções 0, 5, 10, 15, 20, 25 e 30% (m/m), respectivamente, e são usados para calibrar o sistema. A linha vermelha representa o ajuste linear feito utilizando os pontos pretos e fornece os parâmetros de calibração. O ponto vermelho representa a solução normal ($0,26 \text{ g/cm}^3$) e é usado para testar a precisão e exatidão do sistema..... 94
- Figura 4.8 - Rotação da polarização da luz imposta pelas soluções de frutose como função da posição do mínimo de intensidades relativa à situação em que a cubeta de 1 cm de comprimento é preenchida com água destilada. Os pontos pretos representam as soluções preparadas nas proporções de 0, 5, 10, 15, 20, 25 e 30% (m/m) e são usadas para calibrar o sistema. A linha vermelha representa o ajuste linear feito utilizando os pontos pretos e fornece os parâmetros de calibração. O ponto vermelho representa a solução normal ($0,26 \text{ g/cm}^3$) e é usada para testar a precisão e exatidão das medidas nesse sistema..... 96
- Figura 4.9 - (a) Temperatura obtida por meio do termopar como função do tempo. (b) Posição do mínimo de intensidades obtido pelo programa em LabVIEW como função da temperatura. A linha vermelha representa um ajuste parabólico que serve de guia para a análise da posição média do mínimo de intensidades..... 97
- Figura 4.10- Figura esquemática do efeito do desalinhamento do sistema. Quando o feixe provindo do LED é desalinhado, a posição do mínimo de intensidades é deslocada de uma distância D que depende dos índices de refração do vidro e do ar, da amplitude do desalinhamento e da distância da CCD ao prisma..... 99

SUMÁRIO

1 Introdução.....	19
2 Fundamento teórico	25
2.1 Equações de Maxwell.....	25
2.2 Equação de onda em meio dielétrico linear isotrópico	26
2.3 Ondas planas monocromáticas	27
2.4 Polarização da luz	30
2.4.1 Polarização elíptica	31
2.4.2 Polarização circular	32
2.4.3 Polarização linear	33
2.5 Dispersão cromática da luz	34
2.5.1 Índice de refração.....	37
2.5.2 Absorção.....	39
2.6 Condições de contorno na interface entre dois meios dielétricos	40
2.7 Reflexão e refração na interface entre dois meios dielétricos	45
2.8 Reflexão e coeficientes de Fresnel.....	48
2.8.1 Reflexão para onda <i>s</i>	50
2.8.2 Reflexão para onda <i>p</i>	52
2.9 O ângulo de Brewster e o ângulo crítico	53
2.10 A fase adquirida na reflexão	55
2.11 Interferência entre as polarizações refletidas: onda monocromática com polarização linear a 45°	57
2.12 Interferência entre as polarizações refletidas: onda monocromática com polarização linear levemente deslocada de 45°	59
2.13 Interferência entre as polarizações refletidas: onda policromática com polarização linear levemente deslocada de 45°	62
2.14 Dependência da posição do mínimo com a temperatura.....	67
2.15 Atividade óptica	68
2.16 Efeito Faraday.....	70
3 Materiais e métodos	73
3.1 Montagem experimental.....	73
3.2 O software em LabVIEW.....	76
3.3 Calibração e medida	78

3.3.1 Calibrações e medida utilizando Laser como fonte de luz	79
3.3.2 Calibração e medida utilizando LED como fonte de luz.....	81
3.4 Dependência da posição do mínimo de intensidades com a temperatura	82
4 Resultados e discussões	85
4.1 Medidas na configuração com laser como fonte de luz.....	85
4.1.1 Calibração por rotação do polarizador de entrada e medida de amostras	85
4.1.2 Calibração com cristal de TGG e medida de amostras	87
4.1.3 Problemas e dificuldades.....	91
4.2 Medidas na configuração utilizando LED como fonte de luz.....	92
4.2.1 Calibração e medida utilizando amostras de sacarose	92
4.2.2 Calibração e medida utilizando amostras de frutose	95
4.3 Estudo da dinâmica da posição do mínimo como função da temperatura	97
5 Conclusões	101
Referências	103
APÊNDICE A – As relações vetoriais, a notação de Einstein e o tensor de Levi Civita.....	107
APÊNDICE B – Números complexos	113

1 Introdução

As grandezas físicas primárias associadas ao campo eletromagnético são sua intensidade, comprimento de onda, coerência e polarização. A polarimetria é a parte da óptica responsável pelo estudo desta última. Historicamente, as primeiras observações a respeito da polarização da luz se deram em 1669 com o físico e matemático dinamarquês Erasmus Bartholinus.¹⁻² Nesse ano, Bartholinus descobriu a dupla refração da luz em um cristal de espato da Islândia (uma variedade de calcita), embora ainda não estivesse ciente do fenômeno da polarização. Muitos anos depois, em 1808, Étienne Louis Malus descobriu a polarização da luz por reflexão.²⁻⁴ Ele observou que a luz do sol refletida em uma janela produzia duas imagens ao atravessar um cristal de calcita. A intensidade relativa das imagens variava conforme o cristal era girado em torno do eixo definido pela direção de incidência da luz no cristal. Essa observação foi usada como base para sua conhecida Lei de Malus, que relaciona a intensidade da luz transmitida por um polarizador ao quadrado do cosseno do ângulo entre o eixo de transmissão do polarizador e a direção da polarização da luz linearmente polarizada. Em 1811, Dominique François Jean Arago, um físico e astrônomo francês, observou a possibilidade de produzir rotação no plano de polarização da luz linearmente polarizada (atividade óptica) utilizando um cristal de quartzo.^{2,4} Logo em seguida, em 1815, Jean Baptiste Biot, estudou a atividade óptica de amostras líquidas.⁴⁻⁶ Nesse mesmo ano, David Brewster descobriu a relação entre o índice de refração e o ângulo de incidência para o qual a luz refletida na interface entre dois meios é linearmente polarizada² (alguns anos antes, Malus já havia postulado a existência de tal ângulo para a reflexão da luz na superfície da água). Em 1828, William Nicol inventou o prisma de Nicol, o primeiro filtro polarizador de fácil manuseio¹. Em 1832, Fresnel deduziu as leis que relacionam as frações de luz refletida e transmitida com o ângulo de incidência em uma interface entre dois meios transparentes.³⁻⁴ Curiosamente, Fresnel baseou seu estudo em modelos do mecanismo de vibração do éter (meio no qual se acreditava que a luz se propagava). Em 1845, Michael Faraday descobriu o efeito que leva seu nome e relaciona a rotação da polarização da luz linearmente polarizada à presença de um campo magnético.²⁻³ Em 1850, Ludwig Ferdinand Wilhelmy utilizou a polarimetria para o estudo da inversão do açúcar do caldo de cana.¹ Em 1873, James Clerk Maxwell conjecturou que a luz é uma onda eletromagnética a partir de algumas considerações teóricas.²⁻³ Já em 1928, Edwin Herbert Land construiu os primeiros polarizadores dicroicos do tipo folha.⁶

A instrumentação para a determinação do plano de polarização da luz teve início com a utilização do princípio da polarização por reflexão.¹ Malus desenvolveu um aparato que utilizava dois espelhos. O primeiro era posicionado em um ângulo apropriado para produzir luz linearmente polarizada. O feixe era direcionado ao segundo espelho, que tinha duas possibilidades de configuração: paralela ao primeiro espelho ou girado de 90° no eixo da direção do feixe de luz em relação à configuração paralela. No primeiro caso o segundo espelho não causava efeito algum na luz refletida pelo primeiro espelho. No segundo caso, nenhuma luz era refletida pelo segundo espelho. Em seu estudo, Malus associou as direções do segundo espelho às direções dos pontos cardeais. Embora fosse de fácil construção e determinasse qualitativamente bem o plano de polarização, a polarização da luz por reflexão era ineficiente e a determinação precisa do plano de polarização era quase impossível. Um grande avanço foi obtido quando Biot construiu seu aparato substituindo o segundo espelho da montagem de Malus por um cristal de espato da Islândia para atuar como analisador. O cristal era posicionado de forma que a luz proveniente do espelho polarizador produzisse somente uma imagem após atravessar o espato da Islândia. Quando uma amostra opticamente ativa era posicionada entre o espelho e o cristal, duas imagens eram produzidas após o analisador. Bastava então girar o cristal de forma a produzir novamente uma imagem única. Com isso, o ângulo de rotação causado pela amostra era igual ao ângulo que o espato da Islândia era rodado para que houvesse apenas uma imagem transmitida. O aparato de Biot ainda possuía limitações quanto à exatidão das medidas devido à qualidade da luz linearmente polarizada produzida pelo espelho. A invenção do prisma de Nicol contribuiu para contornar esse problema e, em 1842, Ventzke utilizou dois destes prismas para construir seu aparato, sendo um deles usado como polarizador e o outro como analisador. O modo de funcionamento do instrumento era semelhante ao construído por Biot: os prismas eram posicionados de forma que nenhuma luz era transmitida pelo analisador; quando uma amostra opticamente ativa era posicionada entre os prismas, observava-se uma intensidade transmitida não nula e o analisador era girado para extingui-la. Desde então, o desenvolvimento de aparelhos comerciais tem se dado com poucas variações em relação ao aparato de Ventzke. Os primeiros aparelhos comerciais utilizavam um motor ligado ao analisador para a rotação automatizada do mesmo no intuito de extinguir o feixe transmitido. Mais recentemente foram adicionados componentes para compensação da rotação da polarização causada pelas amostras, como cristais de materiais que apresentam efeito Faraday. Atualmente, são comercializados polarímetros que possuem uma célula de Faraday utilizada para modular a

direção de oscilação da luz que incide na amostra de forma a aumentar a precisão da medida polarimétrica.⁷

A medida da rotação da polarização da luz tem inúmeras aplicações em várias áreas. Na indústria sucroalcooleira, a polarimetria apresenta um papel importantíssimo na determinação da qualidade das amostras de suco da cana de açúcar. De acordo com o Conselho dos Produtores de Cana de Açúcar, Açúcar e Álcool (CONSECANA), a qualidade da cana está relacionada a um fator conhecido como Açúcar Total Recuperável (ATR).⁸ Este, por sua vez, depende de alguns fatores, entre eles duas importantes grandezas: o brix e a pol do caldo. O brix é definido como a porcentagem em massa dos sólidos solúveis dissolvidos em solução. Por exemplo, uma solução preparada com 20 g de sólidos solúveis em 80 g de água destilada possuirá brix igual a 20. No caso do caldo de cana, o principal sólido solúvel é a sacarose, contendo em menores quantidades a frutose e a glicose, entre outros.⁹ A medida do brix é feita utilizando-se um refratômetro: o índice de refração de uma solução aquosa pode ser transformado em brix utilizando-se uma tabela de conversão como, por exemplo, a fornecida pelo ministério de agricultura dos EUA.¹⁰ A pol é o teor de sacarose aparente do caldo. É dado como uma porcentagem em unidades de massa.⁸ Ela é obtida através de uma equação em que estão envolvidos o brix e a leitura sacarimétrica da solução. Esta última é resultado de uma conversão linear envolvendo a medida da rotação da polarização da luz linearmente polarizada causada pela amostra de caldo de cana. Na Escala Internacional de Açúcar (*International Sugar Scale – ISS*), uma leitura sacarimétrica de 100 °Z é definida como a rotação da polarização da luz linearmente polarizada da linha verde do isótopo de mercúrio ¹⁹⁸Hg quando esta atravessa uma célula de 20 cm contendo solução de sacarose em água destilada à concentração de 0,2600 g/ml (conhecida como solução normal), a 20°C. Nessas condições, 100 °Z corresponde a uma rotação de 40,777°.¹¹ Em outros comprimentos de onda, o ponto de 100 °Z corresponde a outras rotações devido à dispersão da rotação específica. Uma leitura de 0 °Z corresponde à rotação causada por água destilada, ou seja, uma rotação nula. No intervalo entre 0 e 100 °Z, a escala é linear com a concentração da amostra. Em geral, para indústria do etanol, quanto maiores o brix e a pol, melhor é a qualidade da cana.

Na indústria farmacêutica, a polarimetria é utilizada para a caracterização e determinação da pureza de compostos, tais como analgésicos, aminoácidos, cocaína, entre outros.¹²⁻¹⁶ Essas substâncias apresentam isomeria óptica. Isômeros ópticos são dois compostos que apresentam a mesma fórmula molecular, mas suas estruturas espaciais são a imagem especular uma da outra. São chamados de enantiômeros e têm a capacidade de rodar

o plano de polarização da luz para lados diferentes. Podemos usar como exemplo a talidomida. Essa substância apresenta dois isômeros ópticos: a talidomida (S) que é levógira (roda o plano da polarização da luz no sentido anti-horário) e a talidomida (R), que é dextrógira (roda o plano de polarização da luz no sentido horário). Fisiologicamente, o enantiômero (S) da talidomida está associado à má formação de fetos, enquanto o enantiômero (R) tem função analgésica sedativa.¹⁷ Nesse sentido, a polarimetria mostra-se importante para análise estrutural das substâncias e separação de enantiômeros potencialmente prejudiciais em misturas racêmicas.

Na astronomia, a polarimetria é amplamente utilizada como técnica complementar à espectroscopia e fotometria. Tem aplicações no estudo da radiação emitida por corpos celestes,¹⁸⁻¹⁹ no estudo das propriedades do campo magnético interestelar,²⁰ detecção de luz espalhada para a determinação da distribuição de matéria no entorno das estrelas,²¹ determinação da estrutura de blazares,²² entre muitas outras.

Há muito tempo a atividade óptica de compostos em solução tem sido quantificada por meio da medida da rotação do plano de polarização da luz linearmente polarizada transmitida por uma amostra líquida.²³ Durante os anos, várias técnicas polarimétricas foram desenvolvidas. Podemos dividi-las em dois tipos: as por transmissão e as por reflexão. As técnicas por transmissão envolvem a captação da luz após atravessar a amostra. As por reflexão envolvem a análise do sinal luminoso após uma reflexão em alguma superfície de algum componente da montagem experimental, não sendo este componente necessariamente a célula que contém a amostra opticamente ativa. Essa reflexão pode se dar antes ou depois da propagação pela solução. Dentro de cada um desses dois grupos, podemos ainda destacar dois subgrupos baseados no tipo de detecção. São chamadas técnicas por detecção heteródina e por detecção homódina. Polarímetros baseados em detecção heteródina, tanto no modo de transmissão²⁴⁻²⁸ quanto no de reflexão²⁹⁻³⁰ traduzem rotação óptica em diferença de fase, o que os torna mais rápidos²⁵ e driblam a necessidade de um tempo de integração maior para melhoria da precisão.³¹ Isso geralmente é feito por meio de uma modulação da fonte de luz e separação do feixe em duas partes: uma usada como referência e outra usada para provar a amostra. Subsequentemente, provoca-se interferência entre os feixes gerados. A modulação tem a vantagem de ajuda a reduzir efeitos de instabilidade da fonte.³² As técnicas homódinas^{23,33-37} não usam interferência entre feixes. Elas medem diretamente a rotação do plano de polarização da luz. Como exemplo, Zhou *et al.*²³ propuseram uma forma de medir rotações ópticas no modo de reflexão. Luz linearmente polarizada de um LED é colimada por uma lente e direcionada a uma cubeta num determinado ângulo de incidência. A cubeta é

preenchida com glicose. O feixe atravessa a solução opticamente ativa e parte é refletida na última superfície da cubeta. Essa porção de luz atravessa a amostra uma segunda vez. Em seguida, as componentes de polarização paralela (*p*-) e perpendicular (*s*-) ao plano de incidência são separadas por um cubo divisor de feixes polarizados. A razão entre a diferença de intensidades das componentes e a intensidade total da luz incidente é relacionada ao ângulo de rotação imposto pelo meio opticamente ativo. Num outro exemplo, em um trabalho recente, Ribeiro et al.³⁷ desenvolveram um polarímetro no modo de transmissão baseado na detecção das intensidades das componentes *s* e *p* da luz previamente separadas por um prisma de Glan-Taylor ou, alternativamente, um prisma de Wollaston. A luz linearmente polarizada a 45° tem sua polarização rodada ao atravessar uma amostra opticamente ativa. Em seguida, a incidência no prisma separa as componentes e cada uma delas é direcionada a um detector. A razão entre as intensidades medidas em cada detector permite a determinação do ângulo de rotação da polarização. Assim como essa, as demais técnicas, tanto por reflexão quanto por transmissão, por detecção heteródina ou não, também possuem uma boa resolução (geralmente melhor que $2 \cdot 10^{-3}^\circ$). Apesar disso, elas têm em comum a presença de equipamentos de alto custo, elevada complexidade e tamanhos consideráveis, como amplificadores lock-in, retardadores, moduladores acusto ópticos ou eletro ópticos, além de prismas e divisores de feixe.

Juntamente com a polarimetria, a refratometria forneceu os primeiros métodos para a investigação da estrutura de moléculas orgânicas sem causar a destruição da amostra a ser examinada.¹ Muitas são as técnicas refratométricas existentes como, por exemplo, pela medida do ângulo de desvio mínimo,³⁸⁻³⁹ do ângulo de Brewster,⁴⁰⁻⁴¹ interferometria,⁴²⁻⁴³ medida do ângulo crítico,⁴⁴⁻⁴⁷ entre outros. Refratômetros baseados no desvio mínimo em um prisma e nos ângulos crítico e de Brewster, tais como os refratômetros de Abbe e Pulfrich foram discutidos na literatura.⁴⁸ Zilio⁴⁷ propôs um refratômetro simples e barato que se baseia na diferença de fase adquirida pelas componentes da luz paralela e perpendicular ao plano de incidência quando estas sofrem uma reflexão interna. Definindo a luz incidente com polarização a 45° e posicionando após a reflexão um polarizador com seu eixo de transmissão paralelo à polarização inicial da luz, o perfil de intensidades transmitido por esse analisador irá apresentar uma interferência destrutiva exatamente no ângulo crítico. A medida desse ângulo está diretamente ligada ao índice de refração relativo entre os meios envolvidos na reflexão interna.⁴⁹⁻⁵⁰ A técnica apresentada por Zilio tem várias aplicações em sensores ópticos, como sensor de vácuo e umidade, medida do coeficiente de extinção em amostras turvas, análise de pureza de amostras de hidrocarbonetos, entre outros. Entretanto, existem

outras aplicações ainda não exploradas pela técnica e que são de interesse em sensores ópticos. A polarimetria é uma delas.

Neste trabalho apresentamos uma nova técnica não heteródina no modo de reflexão para a medida da rotação do plano de polarização da luz linearmente polarizada causada por amostras opticamente ativas. O aparato experimental é composto por um LED, dois polarizadores, um prisma semicilíndrico, uma cubeta, uma câmera CCD e um computador para análise de dados. A montagem experimental é bastante semelhante à proposta por Zilio⁴⁷ com a adição de uma cubeta a ser preenchida com amostra opticamente ativa, como mostra o esquema da fig. 1.1.

Figura 1.1 - Desenho esquemático da montagem experimental desenvolvida.
Fonte: Elaborada pelo autor.

Luz proveniente do LED atravessa o polarizador, cujo eixo de transmissão se encontra a 45° , e incide na base do prisma, pelo lado cilíndrico, com ângulo próximo ao ângulo crítico. Após a reflexão, a luz atravessa a cubeta que contém solução aquosa de substância opticamente ativa. Um analisador é posicionado após a cubeta com seu eixo de transmissão paralelo ao primeiro polarizador. Alternativamente, a cubeta pode ser posicionada antes do prisma e após o primeiro polarizador sem produzir alteração no perfil de intensidades transmitido. Este é observado na CCD e possuirá um mínimo de fácil detecção cuja posição na câmera dependerá do ângulo de rotação da polarização da luz imposta pela amostra presente na cubeta. Por meio dessa posição, pode-se determinar, por exemplo, a concentração da amostra no caso de uma solução pura conhecida. Uma calibração é necessária e pode ser feita utilizando-se amostras conhecidas de sacarose e frutose, por exemplo. Essa nova técnica pode ser utilizada na indústria sucroalcooleira para a medida sacarimétrica das amostras de caldo de cana para a determinação da qualidade da matéria prima com uma resolução dentro dos limites propostos pela Consecana⁸ e a um custo mais baixo. Aplica-se ainda na indústria farmacêutica na análise de misturas racêmicas para eventual separação de enantiômeros por ser sensível aos diferentes sinais da rotação da polarização imposta por substâncias dextrógiras e levógiras.

2 Fundamento teórico

Neste capítulo apresentamos as bases teóricas que fundamentam o desenvolvimento experimental. Apresentamos as equações de Maxwell às quais as ondas eletromagnéticas devem obedecer. A partir delas, estabelecemos as leis de propagação de ondas monocromáticas e deduzimos o caráter transversal das oscilações do campo eletromagnético. Estudamos o caráter vetorial dos campos eletromagnéticos introduzindo o conceito de polarização da luz. Demonstramos algumas propriedades dos meios dielétricos, tais como o índice de refração e a absorção de luz a partir do modelo do oscilador harmônico amortecido forçado. Através do estudo da interação da luz na interface entre dois meios dielétricos, demonstramos as leis de reflexão e refração (lei de Snell) e os coeficientes de reflexão de Fresnel partindo da aplicação das condições de contorno dos campos elétrico e indução magnética na interface entre dois meios dielétricos não condutores e não magnéticos. A partir desses coeficientes, definimos os ângulos de Brewster e crítico. Apresentamos um método para a determinação da polarização linear da luz em condições especiais de polarização e ângulo de incidência na interface entre os meios. Esse método se baseia na diferença de fase adquirida pelas componentes de polarização paralela e perpendicular ao plano de incidência na reflexão e posterior interferência entre essas componentes após a reflexão. Um perfil de intensidades é produzido e tem como característica a presença de uma região de mínimo de fácil detecção que está relacionada à polarização da luz incidente. Apresentamos um breve estudo da dependência da posição do mínimo no perfil de intensidades em relação à temperatura. Aplicamos esse método para a medida da rotação da polarização da luz causada por soluções de substâncias que apresentam quiralidade. Definimos a origem da atividade óptica pela diferença do índice de refração para as polarizações circulares direita e esquerda. Por fim, apresentamos o efeito Faraday que ocorre em alguns materiais quando sujeitos a um campo magnético: há a indução de atividade óptica no meio.

2.1 Equações de Maxwell

A luz tem natureza eletromagnética. Por esta razão, ela deve obedecer às equações de Maxwell. Estas consistem de generalizações de algumas observações experimentais e são as equações fundamentais dos campos eletromagnéticos.⁵¹⁻⁵² A forma diferencial dessas equações é dada por:

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

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

$$\nabla \times \vec{E} = -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t} \quad (2.3)$$

$$\nabla \times \vec{H} = \vec{J} + \frac{\partial \vec{D}}{\partial t} \quad (2.4)$$

onde $\vec{B}$ é chamado campo indução magnética, $\vec{D}$ é o campo de deslocamento, ρ é a densidade volumétrica de cargas livres, $\vec{E}$ é o campo elétrico, $\vec{H}$ é o campo magnético e $\vec{J}$ é a densidade de corrente. A equação (2.1) é conhecida por representar a inexistência de monopolos magnéticos. A expressão (2.2) é a conhecida Lei de Gauss. Já a equação (2.3) é chamada Lei de Faraday. Por fim, a equação (2.4) é a Lei de Ampère com a adição da corrente de deslocamento feita por Maxwell.

2.2 Equação de onda em meio dielétrico linear isotrópico

As leis de propagação da luz em qualquer meio também devem ser obtidas a partir das equações de Maxwell. Em particular, consideremos um meio dielétrico ideal ($\rho = 0$), não magnético e não condutor ($\vec{J} = 0$). Nessas condições, $\vec{B} = \mu_0 \vec{H}$ e $\vec{D} = \vec{P} + \varepsilon_0 \vec{E} = \varepsilon \vec{E}$ são chamadas as relações constitutivas dos campos no meio em questão, com $\vec{P} = \chi \vec{E}$ sendo a polarização do meio. Formalmente, esta última relação é válida no domínio das frequências e, em particular, no domínio do tempo no caso de uma onda monocromática, sendo esta a situação que consideramos. As constantes μ_0 , ε_0 , ε e χ são, respectivamente, a permeabilidade do vácuo, a permissividade do vácuo, a permissividade do dielétrico e a susceptibilidade do dielétrico. Podemos então obter uma equação de onda para o campo $\vec{E}$ tomando o rotacional da Lei de Faraday:

$$\nabla \times (\nabla \times \vec{E}) = -\frac{\partial}{\partial t} (\nabla \times \vec{B}) \Rightarrow \nabla(\nabla \cdot \vec{E}) - \nabla^2 \vec{E} = -\frac{\partial}{\partial t} \left(\mu_0 \frac{\partial \vec{D}}{\partial t} \right)$$

$$\therefore \nabla^2 \vec{E} - \mu_0 \varepsilon \frac{\partial^2 \vec{E}}{\partial t^2} = 0 \quad (2.5)$$

onde utilizamos a relação vetorial $\nabla \times (\nabla \times \vec{A}) = \nabla(\nabla \cdot \vec{A}) - \nabla^2 \vec{A}$ (ver Apêndice A). Também utilizamos as relações constitutivas, a Lei de Gauss com densidade de cargas livres nula e a lei de Ampère com a densidade de corrente nula.

Da mesma forma, para o campo indução magnética $\vec{B}$, podemos encontrar uma equação de ondas ao tomar o rotacional da Lei de Ampère, utilizar as relações constitutivas e a Lei de Faraday.

$$\nabla^2 \vec{B} - \mu_0 \varepsilon \frac{\partial^2 \vec{B}}{\partial t^2} = 0 \quad (2.6)$$

Uma vez que o dielétrico considerado é não magnético e não condutor, o campo magnético $\vec{H}$ obedece a uma equação de ondas idêntica às equações para os campos $\vec{E}$ e $\vec{B}$. As equações (2.5) e (2.6) mostram que os campos $\vec{E}$ e $\vec{B}$ são ondas que se propagam no espaço tridimensional dentro do meio e cuja velocidade de propagação, v , é dada por:

$$v = \frac{1}{\sqrt{\mu_0 \varepsilon}} \quad (2.7)$$

Se o meio em questão for o vácuo, a velocidade de propagação da onda é a velocidade da luz em tal meio, dada por $c = 1/\sqrt{\mu_0 \varepsilon_0}$. Podemos então definir o índice de refração do meio como sendo a razão entre a velocidade da luz no vácuo e a velocidade da luz no meio:

$$n \equiv \frac{c}{v} = \sqrt{\frac{\varepsilon}{\varepsilon_0}} \quad (2.8)$$

2.3 Ondas planas monocromáticas

Precisamos agora encontrar soluções para as equações (2.5) e (2.6). Essas soluções devem satisfazer primeiramente as equações de Maxwell. Vamos considerar, por simplicidade, somente a equação para o campo elétrico. Uma solução simples da equação de

onda envolve assumir que a luz é monocromática, ou seja, a oscilação temporal possui frequência única, que chamaremos ω . Utilizando o formalismo de variáveis complexas (ver Apêndice B), podemos escrever o campo elétrico real como sendo a parte real de:

$$\vec{E}(\vec{r}, t) = \vec{E}(\vec{r})e^{-i\omega t} \quad (2.9)$$

Consideremos agora que a permissividade do dielétrico possa ser reescrita como $\varepsilon = \kappa\varepsilon_0$. A constante κ é chamada coeficiente dielétrico ou constante dielétrica. O índice de refração, então, pode ser escrito como $n = \sqrt{\kappa}$. As constantes ε , κ e n geralmente são grandezas complexas. Por simplicidade, aqui consideraremos todas elas como escalares reais. Mais adiante, no estudo da dispersão cromática em um dielétrico na seção 2.5, consideramos o índice de refração complexo, cuja notação é $\tilde{n}$, e o índice de refração, n , é a parte real de $\tilde{n}$. Substituindo a (2.9) na (2.5), obtemos uma equação para $\vec{E}(\vec{r})$:

$$\nabla^2 \vec{E}(\vec{r}) + \mu_0 \varepsilon_0 \kappa \omega^2 \vec{E}(\vec{r}) = 0 \quad (2.10)$$

Esta equação é análoga à de um oscilador harmônico cujas soluções linearmente independentes são obtidas escolhendo os diferentes sinais da expressão seguinte:

$$\vec{E}(\vec{r}) = \vec{E}_0 e^{\pm i\vec{k} \cdot \vec{r}} \quad (2.11)$$

sendo que o módulo do vetor $\vec{k}$ é dado por:

$$|\vec{k}| \equiv k = \omega \sqrt{\mu_0 \kappa \varepsilon_0} = n \frac{\omega}{c} \quad (2.12)$$

Podemos definir ainda o comprimento de onda, λ , como sendo:

$$\lambda = \frac{2\pi}{k} \quad (2.13)$$

Portanto, podemos escrever o campo $\vec{E}(\vec{r}, t)$ como:

$$\vec{E}(\vec{r}, t) = \vec{E}_0 e^{-i(\omega t \mp \vec{k} \cdot \vec{r})} \quad (2.14)$$

A expressão (2.14) representa duas ondas planas. Ondas planas são caracterizadas pelo fato de que, em um determinado instante de tempo, a fase da onda é a mesma em todos os pontos de cada plano perpendicular à direção de propagação, definida pelo vetor $\vec{k}$. Se tomarmos o sinal de menos na expressão, obtemos uma onda plana monocromática propagante, no sentido positivo definido por $\vec{k}$. Ao tomar o sinal positivo, a expressão representa uma onda plana monocromática contra-propagante, ou seja, no sentido contrário ao definido pelo vetor $\vec{k}$.

Analogamente, para o campo $\vec{B}$ podemos encontrar uma solução da equação de onda que consiste de uma onda plana monocromática dada por:

$$\vec{B}(\vec{r}, t) = \vec{B}_0 e^{-i(\omega t \mp \vec{k} \cdot \vec{r})} \quad (2.15)$$

O coeficiente $\vec{E}_0$ pode ser considerado arbitrário e depende das condições iniciais. O coeficiente $\vec{B}_0$ é relacionado a $\vec{E}_0$ por meio das equações de Maxwell. A aplicação das equações de Maxwell nas expressões (2.14) e (2.15) resulta nas seguintes condições:

$$\nabla \cdot \vec{B} = 0 \Rightarrow \vec{k} \cdot \vec{B}_0 = 0 \quad (2.16)$$

$$\nabla \cdot \vec{D} = 0 \Rightarrow \vec{k} \cdot \vec{E}_0 = 0 \quad (2.17)$$

$$\nabla \times \vec{E} = -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t} \Rightarrow \vec{k} \times \vec{E}_0 = \omega \vec{B}_0 \quad (2.18)$$

$$\nabla \times \vec{H} = \frac{\partial \vec{D}}{\partial t} \Rightarrow \vec{k} \times \vec{B}_0 = -\omega \mu_0 \epsilon \vec{E}_0 \quad (2.19)$$

Podemos extrair algumas informações importantes das equações acima. As equações (2.16) e (2.17) nos dizem que os campos elétrico e indução magnética não possuem componente na direção do vetor $\vec{k}$, ou seja, são perpendiculares à direção de propagação. Já a expressão (2.18) nos permite concluir que os vetores $\vec{E}_0$ e $\vec{B}_0$ também são perpendiculares

entre si, pois $\vec{B}_0$ pode ser obtido do produto vetorial de $\vec{k}$ e $\vec{E}_0$. Essa mesma informação pode ser obtida da (2.19). Definindo o versor que dá o sentido de propagação da onda como $\hat{u} \equiv \vec{k}/k$, podemos reescrever as duas últimas expressões de uma forma que relaciona os campos elétrico e indução magnética de uma forma mais simples:

$$\vec{B}_0 = \frac{n}{c} \hat{u} \times \vec{E}_0 \quad (2.20)$$

$$\vec{E}_0 = -\frac{c}{n} \hat{u} \times \vec{B}_0 \quad (2.21)$$

onde substituímos a velocidade da luz no vácuo, a definição do índice de refração (2.8), e o módulo do vetor $\vec{k}$ (2.12).

2.4 Polarização da luz

O próximo passo no estudo do campo elétrico da luz é a análise da natureza vetorial dos campos e suas amplitudes. Primeiramente, definimos o plano de polarização da luz como sendo o plano determinado pela direção do campo elétrico e a direção de propagação da luz. Para simplificação, consideraremos somente o campo elétrico $\vec{E}$ de uma onda propagante:

$$\vec{E}(\vec{r}, t) = \vec{E}_0 e^{-i(\omega t - \vec{k} \cdot \vec{r})} = \vec{E}_0 e^{-i(\omega t - k \hat{u} \cdot \vec{r})}$$

Consideremos também três versores ortogonais entre si, $\hat{s}$, $\hat{p}$ e $\hat{u}$. O versor $\hat{u}$ é escolhido por ser o que dá a direção da propagação da onda. A denominação dos demais versores ficará clara mais adiante. De acordo com a equação (2.17), $\vec{E}_0 \cdot \hat{u} = 0$. Portanto, podemos decompor a amplitude $\vec{E}_0$ do campo nas direções de $\hat{s}$ e $\hat{p}$ da seguinte forma:

$$\vec{E}_0 = \hat{s} E_s + \hat{p} E_p$$

Tanto E_s quanto E_p podem ser números complexos. Podemos reescrever essas amplitudes em termos do produto de seus módulos pela exponencial complexa de uma fase:

$$E_s = |E_s|e^{i\varphi_s}$$

$$E_p = |E_p|e^{i\varphi_p}$$

É possível ainda fazer uma mudança na origem dos tempos para escolhermos, por exemplo, $\varphi_s = 0$, de forma que a fase da componente p seja a defasagem entre as componentes. Com isso, reescrevemos o campo elétrico como:

$$\vec{E}(\vec{r}, t) = (\hat{s}|E_s| + \hat{p}|E_p|e^{i\varphi_p})e^{-i(\omega t - k\hat{u}\cdot\vec{r})} = \hat{s}|E_s|e^{-i(\omega t - k\hat{u}\cdot\vec{r})} + \hat{p}|E_p|e^{-i(\omega t - k\hat{u}\cdot\vec{r} - \varphi_p)}$$

Para melhor analisar a polarização, consideremos a parte real da expressão acima. Vale lembrar que a parte real é que representa o campo elétrico real:

$$\vec{E}(\vec{r}, t) = \hat{s}|E_s|\cos(\omega t - \vec{k} \cdot \vec{r}) + \hat{p}|E_p|\cos(\omega t - \vec{k} \cdot \vec{r} - \varphi_p) \quad (2.22)$$

Partindo da expressão (2.22), vamos analisar o comportamento do vetor campo elétrico para os intervalos de valores de φ_p e alguns casos especiais.

2.4.1 Polarização elíptica

Consideremos dois intervalos de valores de φ_p : $0 < \varphi_p < \pi$ e $\pi < \varphi_p < 2\pi$. Para esses valores, a expressão (2.22) representa um campo cuja polarização é chamada elíptica. Para valores de φ_p no hemisfério superior do ciclo trigonométrico, o vetor campo elétrico gira no sentido horário, sendo esta polarização conhecida como elíptica à direita. Quando φ_p assume qualquer valor no hemisfério inferior do ciclo trigonométrico, a polarização é chamada elíptica à esquerda, pois o campo, e consequentemente o plano de polarização, gira no sentido anti-horário. Em ambos os casos, o módulo do campo elétrico nunca se anula. Essas situações são esquematizadas na fig. 2.1. A direção de propagação, $\hat{u}$, é perpendicular ao plano da figura, apontando para fora da mesma.

O tamanho dos semieixos maior, a , e menor, b , e a inclinação, δ , do semieixo maior dependem dos módulos das amplitudes das componentes s e p e da defasagem entre elas, φ_p , por meio das seguintes expressões: ⁵³

$$\tan 2\delta = 2 \frac{|E_s||E_p|}{|E_p|^2 - |E_s|^2} \cos \varphi_p \quad (2.23)$$

$$a^2 + b^2 = |E_p|^2 + |E_s|^2 \quad (2.24)$$

$$ab = |E_s||E_p| \sin \varphi_p \quad (2.25)$$

Figura 2.1 – (a) Polarização elíptica à direita. A defasagem entre as componentes de polarização s e p está dentro do intervalo $0 < \varphi_p < \pi$. (b) Polarização elíptica à esquerda, para valores de defasagem dentro do intervalo $\pi < \varphi_p < 2\pi$.

Fonte: Elaborada pelo autor.

2.4.2 Polarização circular

Este é um caso particular de polarização elíptica. Ocorre quando $|E_s| = |E_p| \equiv E$ e $\varphi_p = \pi/2$ ou $\varphi_p = 3\pi/2$. No primeiro caso, o cosseno da componente p transforma-se em seno. Isso resulta num vetor campo elétrico que tem sempre a mesma amplitude, E , e que gira no sentido horário no plano definido pelos versores $\hat{s}$ e $\hat{p}$, como mostra a fig. 2.2-(a). Neste caso, a polarização é chamada circular à direita. Quando a defasagem entre as componentes é de $3\pi/2$, a componente p ganha um sinal negativo e o cosseno se transforma em seno. O campo $\vec{E}$ passa a ser, então, um vetor de amplitude constante que gira no sentido anti-horário no plano definido pelos versores $\hat{s}$ e $\hat{p}$, como esquematizado na fig. 2.2-(b). Nesta situação, a polarização é chamada circular à esquerda.

Assim, podemos escrever o campo como:

$$\vec{E}(\vec{r}, t) = E[\hat{s} \cos(\omega t - \vec{k} \cdot \vec{r}) \pm \hat{p} \sin(\omega t - \vec{k} \cdot \vec{r})] \quad (2.26)$$

em que o sinal de (+) é escolhido quando a defasagem é de $\pi/2$ e o sinal de (-) aparece quando a defasagem é de $3\pi/2$.

Figura 2.2 – (a) Polarização circular à direita, com defasagem entre as componentes s e p de $\varphi_p = \pi/2$ e (b) polarização circular à esquerda, cuja defasagem entre as componentes de $\varphi_p = 3\pi/2$.

Fonte: Elaborada pelo autor.

2.4.3 Polarização linear

Ocorre quando $\varphi_p = 0$ ou $\varphi_p = \pi$. No primeiro caso, as componentes s e p oscilam em fase. No segundo, a componente p ganha um sinal negativo na equação (2.22). Assim, podemos escrever o campo como:

$$\vec{E}(\vec{r}, t) = (\hat{s}|E_s| \pm \hat{p}|E_p|) \cos(\omega t - \vec{k} \cdot \vec{r}) \quad (2.27)$$

em que o sinal de (+) é escolhido quando a defasagem é nula e o sinal de (-) aparece quando a defasagem é de π . O campo elétrico, portanto, oscilará sobre a linha definida pelo vetor $(\hat{s}|E_s| \pm \hat{p}|E_p|)$ que é um vetor no plano definido pelos versores $\hat{s}$ e $\hat{p}$, formando um ângulo γ com a direção de $\hat{p}$, como esquematiza a fig. 2.3.

A amplitude do campo oscilará entre 0 e o valor máximo dado por $\sqrt{|E_s|^2 + |E_p|^2}$ para ambos os valores de φ_p . A direção de propagação, $\hat{u}$, é perpendicular ao plano da figura, apontando para fora da mesma. O ângulo γ é facilmente obtido observando-se a figura:

Figura 2.3 – Polarização linear. O campo oscila sobre a linha nos quadrantes 1 e 3 do plano da figura quando a defasagem entre as componentes s e p for nula, $\phi_p=0$, e sobre a linha nos quadrantes 2 e 4 do plano quando $\phi_p=\pi$. Nesta figura, o vetor de propagação é perpendicular ao plano da figura, apontando para fora do mesmo.

Fonte: Elaborada pelo autor.

2.5 Dispersão cromática da luz

É de interesse compreender também qualitativamente como é a resposta de um meio dielétrico na presença do campo eletromagnético da luz. Por esta razão, precisamos estudar como a luz interage com esse meio. Para isso, utilizaremos o modelo clássico para o tratamento dos átomos do material. Esse modelo considera o átomo como um núcleo fixo e o elétron preso ao núcleo por uma força restauradora proporcional ao deslocamento x do ponto de equilíbrio. Por simplificação, consideramos o campo elétrico oscilante em uma única direção, equivalente à direção do deslocamento x . Além disso, há uma força dissipativa proporcional à velocidade do elétron e o campo eletromagnético é responsável por uma força externa. Este é o modelo do oscilador harmônico amortecido forçado. Sendo a carga do elétron e , a força eletromagnética exercida pelo campo da luz é dada pela força de Lorentz: ⁵¹

$$\vec{F} = e(\vec{E} + \vec{v} \times \vec{B}) \quad (2.29)$$

De acordo com a relação (2.20), o módulo do campo indução magnética é menor que o módulo do campo elétrico por um fator n/c . Como n é da ordem de 1 e a velocidade da luz é muito maior que as velocidades típicas que o elétron assume nesse modelo clássico, concluímos que a força exercida pelo campo $\vec{B}$ é desprezível frente à força que o elétron

experimenta pela presença do campo $\vec{E}$. Desta forma, podemos escrever a equação diferencial que determina a posição x do elétron por meio da segunda lei de Newton:

$$\frac{d^2x}{dt^2} + \gamma \frac{dx}{dt} + \omega_0^2 x = \frac{e}{m} E \quad (2.30)$$

onde m é a massa do elétron, γ está relacionado à força dissipativa e ω_0 é a frequência natural do oscilador suposto pelo modelo. Um desenvolvimento mais rigoroso leva em conta uma correção do campo local e está disponível em livros-texto de eletromagnetismo.⁵¹⁻⁵² Na expressão acima, o campo elétrico pode ser escrito de acordo com a equação (2.14), $\vec{E}(\vec{r}, t) = \vec{E}_0 e^{-i(\omega t - \vec{k} \cdot \vec{r})}$.

Vamos analisar o argumento da exponencial do campo. Em particular, estamos interessados na variação da fase da luz causada pela propagação em distâncias da ordem do deslocamento do elétron de seu ponto de equilíbrio. O termo a ser analisado, portanto, é $\vec{k} \cdot \vec{r}$. Para um átomo típico, os deslocamentos do elétron são da ordem de $1 \text{ \AA}$. A onda eletromagnética que consideramos aqui tem sua frequência na região visível do espectro. A luz de cor verde, por exemplo, se encontra próximo ao centro dessa região espectral e tem comprimento de onda de cerca de $5000 \text{ \AA}$. Como o módulo do vetor de propagação é inversamente proporcional ao comprimento de onda, seguindo a equação (2.13), concluímos que $\vec{k} \cdot \vec{r} \ll 1$. Portanto, podemos considerar que o campo elétrico não varia espacialmente na região em que se encontra o elétron. Assim, simplificamos o campo $\vec{E}$ de forma que a equação diferencial possa ser reescrita como:

$$\frac{d^2x}{dt^2} + \gamma \frac{dx}{dt} + \omega_0^2 x = \frac{e}{m} E_0 e^{-i\omega t} \quad (2.31)$$

A solução desta equação é obtida supondo um deslocamento $x(t)$ da forma:

$$x(t) = x_0 e^{-i\omega t} \quad (2.32)$$

Substituindo essa solução na (2.31) e manipulando o resultado para possibilitar a separação das partes real e imaginária de forma simples, encontramos:

$$x_0 = \frac{eE_0}{m} \frac{(\omega_0^2 - \omega^2) + i\gamma\omega}{(\omega_0^2 - \omega^2)^2 + \gamma^2\omega^2} \quad (2.33)$$

Considerando então o deslocamento do elétron, podemos calcular o dipolo elétrico induzido no átomo:

$$p \equiv ex = \frac{e^2 E_0}{m} \frac{(\omega_0^2 - \omega^2) + i\gamma\omega}{(\omega_0^2 - \omega^2)^2 + \gamma^2\omega^2} e^{-i\omega t} \quad (2.34)$$

Seja N a densidade volumétrica de átomos no meio. A polarização P do mesmo pode ser expressa da seguinte forma:

$$P \equiv Np = \frac{Ne^2}{m} \frac{(\omega_0^2 - \omega^2) + i\gamma\omega}{(\omega_0^2 - \omega^2)^2 + \gamma^2\omega^2} E_0 e^{-i\omega t} \quad (2.35)$$

Nesta expressão, separamos o termo $E_0 e^{-i\omega t}$ para identificar a proporcionalidade do campo elétrico na expressão da polarização de forma mais fácil. Pelas relações constitutivas, $P = \chi E$. Portanto, a susceptibilidade é expressa por:

$$\chi = \frac{Ne^2}{m} \frac{(\omega_0^2 - \omega^2) + i\gamma\omega}{(\omega_0^2 - \omega^2)^2 + \gamma^2\omega^2} \quad (2.36)$$

Por meio de uma manipulação algébrica simples das relações constitutivas e da fórmula (2.8), podemos relacionar o índice de refração e a susceptibilidade da seguinte forma:

$$\tilde{n} = \sqrt{1 + \frac{\chi}{\epsilon_0}} \quad (2.37)$$

Aqui, expressamos o índice de refração como $\tilde{n}$ para ressaltar o caráter complexo dessa grandeza. Particularizando essa expressão para uma situação em que a razão entre a susceptibilidade e a permissividade do vácuo é muito menor que a unidade, podemos fazer a seguinte aproximação para o índice de refração complexo:

$$\tilde{n} \approx 1 + \frac{\chi}{2\varepsilon_0} \quad (2.38)$$

O índice de refração propriamente dito é a parte real de $\tilde{n}$. A parte imaginária, β , dá origem à absorção de luz pelo meio enquanto há propagação. Assim, podemos escrever:

$$\tilde{n} = n + i\beta \quad (2.39)$$

2.5.1 Índice de refração

Tomando a parte real da expressão (2.38) e considerando a expressão da susceptibilidade (2.36), concluímos que:

$$n = \text{Re}(\tilde{n}) = 1 + \frac{Ne^2}{2m\varepsilon_0} \cdot \frac{(\omega_0^2 - \omega^2)}{(\omega_0^2 - \omega^2)^2 + \gamma^2 \omega^2} \quad (2.40)$$

Características importantes do índice de refração podem ser extraídas dessa expressão. A primeira delas é a dependência com a frequência e, conseqüentemente, com o comprimento de onda. Isso é chamado de dispersão cromática do índice de refração. Frequências diferentes da luz experimentarão índices de refração diferentes. Desta forma, as diferentes cores de luz terão velocidades de propagação diferentes dentro do dielétrico. Portanto, quando um pulso de luz de banda larga se propaga em um meio com dispersão cromática, há um alargamento temporal do pulso devido às diferentes velocidades de propagação.

A segunda característica é mais facilmente analisada ao observarmos a fig. 2.4 que representa um gráfico qualitativo da dependência do índice de refração com a frequência. No gráfico, é possível notar a existência de duas regiões em que o índice de refração cresce com o aumento da frequência (ou diminuição do comprimento de onda) e uma região em que há diminuição de n com o incremento da frequência.

A região no entorno da frequência ω_0 na qual o índice de refração decresce com o aumento da frequência (intervalo destacado em cinza no gráfico) é conhecida como região de dispersão anômala. Para os demais intervalos, o índice de refração cresce com o incremento da frequência, caracterizando a dispersão normal. Em nosso experimento, trabalhamos na região de dispersão normal.

Figura 2.4 – Índice de refração em função da frequência. As regiões de dispersão normal se caracterizam pelo crescimento do índice de refração com a frequência. Na dispersão anômala, o índice de refração decresce com o crescimento da frequência.

Fonte: Elaborada pelo autor.

Outra característica importante está relacionada à frequência ω_0 . Esta, como veremos mais a frente, é a frequência de absorção do material. Geralmente se encontra na região do ultravioleta para os materiais transparentes e representa a frequência de transição atômica. Em meios compostos por moléculas, ω_0 pode ser uma frequência de vibração molecular, tendo comprimentos de onda na região do infravermelho.

Geralmente um material possui mais de uma frequência ω_0 . Isso não é contemplado pelo modelo clássico do oscilador harmônico amortecido forçado. Para fins experimentais, é comum utilizar-se uma relação empírica válida em certas regiões do espectro, em particular a janela do visível, e que leva em conta algumas das frequências de absorção do material. A fórmula em questão é conhecida como equação de Sellmeier e é dada por : ⁵⁰

$$n^2(\lambda) = 1 + \frac{B_1\lambda^2}{\lambda^2 - C_1} + \frac{B_2\lambda^2}{\lambda^2 - C_2} + \frac{B_3\lambda^2}{\lambda^2 - C_3} + \dots \quad (2.41)$$

Os coeficientes B_i e C_i são chamados coeficientes de Sellmeier e são determinados experimentalmente; λ é o comprimento de onda da luz no vácuo. Esta fórmula é válida para frequências longe dos picos de absorção. Estes são dados por $\sqrt{C_i}$. A equação de Sellmeier é utilizada com um número limitado de termos, geralmente até o índice $i = 3$. Os valores dos coeficientes podem ser encontrados em tabelas de catálogos de vidros, como o da Schott. ⁵⁴

2.5.2 Absorção

A parte imaginária do índice de refração complexo na equação (2.38) é dada por:

$$\beta = \text{Im}(\tilde{n}) = \frac{Ne^2}{2m\epsilon_0} \cdot \frac{\gamma\omega}{(\omega_0^2 - \omega^2)^2 + \gamma^2\omega^2} \quad (2.42)$$

A consequência da existência de uma parte imaginária do índice de refração é observada quando analisamos a fase que o campo elétrico adquire ao se propagar. Para simplificar o estudo, consideremos que a luz se propaga em uma determinada direção, por exemplo, a direção $\hat{z}$. Assim, podemos escrever o campo elétrico como:

$$\vec{E}(\vec{r}, t) = \vec{E}_0 e^{-i(\omega t - kz)} = \vec{E}_0 e^{-i\xi}$$

onde k é o módulo do vetor de propagação dado pela equação (2.12). É importante notar que o índice de refração da expressão para k é o índice de refração complexo. Com isso, podemos escrever o argumento da exponencial do campo elétrico como:

$$\xi = \omega t - \tilde{n} \frac{\omega}{c} z = \omega t - (n + i\beta) \frac{\omega}{c} z$$

Portanto, o campo elétrico pode ser escrito da seguinte forma:

$$\vec{E}(\vec{r}, t) = \vec{E}_0 e^{-i(\omega t - n \frac{\omega}{c} z)} e^{-\frac{1}{2}\alpha z} \quad (2.43)$$

sendo que a constante α , chamada de coeficiente de absorção, é dada por:

$$\alpha = 2\beta \frac{\omega}{c} \quad (2.44)$$

Substituindo a expressão para β dada pela (2.42), encontramos:

$$\alpha = \frac{Ne^2}{mc\epsilon_0} \cdot \frac{\gamma\omega^2}{(\omega_0^2 - \omega^2)^2 + \gamma^2\omega^2} \quad (2.45)$$

A primeira informação importante a ser extraída é a atenuação exponencial da amplitude do campo elétrico conforme este se propaga pelo dielétrico. Isso se dá pela absorção da luz pelo meio. Como a intensidade do campo elétrico é proporcional ao quadrado da amplitude do campo, a atenuação da intensidade durante a propagação pode ser escrita de forma a reproduzir a conhecida Lei de Beer:

$$I(z) = I_0 e^{-\alpha z} \quad (2.46)$$

Outras informações podem ser obtidas ao analisarmos o gráfico do coeficiente de absorção em função da frequência da luz, mostrado na fig. 2.5:

Figura 2.5 – Coeficiente de absorção em função da frequência da luz. A frequência em que há o pico de absorção coincide com a frequência ω_0 .

Fonte: Elaborada pelo autor.

A largura do pico de absorção é maior quanto menor for o fator de amortecimento γ . A absorção é maior para frequências na região próxima da frequência natural do oscilador. O formato da curva que representa α é conhecido como Lorentziana.

2.6 Condições de contorno na interface entre dois meios dielétricos

Até aqui analisamos a polarização e a propagação de uma onda eletromagnética plana monocromática em um único meio dielétrico, além da resposta desse meio à presença do campo eletromagnético da luz. A partir de agora vamos estudar o que ocorre quando esta onda incide na interface entre dois meios dielétricos 1 e 2, definidos pelas permissividades ϵ_1 e ϵ_2 , respectivamente. Na interface, os campos elétrico e magnético devem obedecer a certas

condições de contorno que devem ser deduzidas a partir das equações de Maxwell. Para obter essas condições, consideremos a interface, I , esquematizada na fig. 2.6 e o volume V , delimitado pela superfície S , localizado em parte no meio 1 e em parte no meio 2.

Figura 2.6 – Volume V , delimitado pela superfície S , sobre a interface entre dois meios 1 e 2.

Fonte: Elaborada pelo autor.

Consideremos S_1 como sendo a área da tampa do volume V , contida no meio 1; S_2 a área do fundo do volume V , contida no meio 2; Σ a área do volume V que intercepta a interface I ; S_3 a superfície lateral de V , com parte no meio 1 e parte no meio 2; e h a altura do volume. Podemos deduzir duas condições de contorno considerando essa figura. A primeira é obtida ao integrarmos a equação (2.1) no volume V delimitado pela superfície S :

$$\int_V \nabla \cdot \vec{B} dv = 0$$

Utilizando o teorema do divergente (Teorema de Gauss), podemos transformar esta integral de volume em uma integral de superfície fechada:

$$\int_V \nabla \cdot \vec{B} dv = \oint_{S(V)} \vec{B} \cdot \hat{n} da = 0 \Rightarrow \int_{S_1} \vec{B}_1 \cdot \hat{n}_1 da + \int_{S_2} \vec{B}_2 \cdot \hat{n}_2 da + \int_{S_3} \vec{B} \cdot \hat{n}_3 da = 0$$

Nesta expressão, $\hat{n}_i$ é a normal à superfície i (1, 2 ou 3) e $\vec{B}_j$ é o campo indução magnética no meio j (1 ou 2). Para a superfície S_3 , não explicitamos um índice sobrescrito

para o campo $\vec{B}$ pois essa superfície tem partes em ambos os meios. Tomando agora o limite em que a altura h tende a zero, a integral sobre a superfície lateral se anula, pois a área da superfície lateral tende a zero. Além disso, as áreas S_1 e S_2 coincidem geometricamente com Σ . Uma vez que $\hat{n}_1 = -\hat{n}_2 \equiv \hat{n}$, podemos concluir que a componente normal do campo indução magnética nos meios 1 e 2 deve ser contínua na interface entre os meios:

$$\begin{aligned} \int_{\Sigma} (\vec{B}_1 - \vec{B}_2) \cdot \hat{n} da &= \int_{\Sigma} (\vec{B}_1 \cdot \hat{n} - \vec{B}_2 \cdot \hat{n}) da = 0 \\ \therefore B_{1n} &= B_{2n} \end{aligned} \quad (2.47)$$

onde definimos B_{jn} como sendo a componente normal do campo $\vec{B}$ no meio j .

A segunda condição de contorno surge ao se integrar a lei de Gauss, eq. (2.2) no volume V da fig. 2.6:

$$\int_V \nabla \cdot \vec{D} dv = \int_V \rho dv$$

Vale ressaltar aqui que estamos considerando dois meios dielétricos ideais, de forma que a densidade de cargas livres é nula. Novamente utilizando o teorema de Gauss, podemos reescrever a expressão como:

$$\int_V \nabla \cdot \vec{D} dv = \oint_{S(V)} \vec{D} \cdot \hat{n} da = 0 \Rightarrow \int_{S_1} \vec{D}_1 \cdot \hat{n}_1 da + \int_{S_2} \vec{D}_2 \cdot \hat{n}_2 da + \int_{S_3} \vec{D} \cdot \hat{n}_3 da = 0$$

Analogamente à condição estudada para a indução magnética, ao se tomar o limite da altura h tendendo a zero, a integral sobre a superfície lateral do volume V se anula. Como consequência, a componente normal do campo deslocamento elétrico deve ser contínua na interface:

$$\begin{aligned} D_{1n} &= D_{2n} \\ \therefore \varepsilon_1 E_{1n} &= \varepsilon_2 E_{2n} \end{aligned} \quad (2.48)$$

onde utilizamos as relações constitutivas para relacionar o campo deslocamento elétrico com o campo elétrico por meio da permissividade elétrica do meio.

Outras duas condições de contorno podem ser deduzidas ao utilizarmos as leis de Faraday e de Ampère. Precisamos agora considerar a fig. 2.7 que representa a superfície A delimitada pela curva C na interface entre os meios 1 e 2:

Figura 2.7 – Superfície A, delimitada pela curva C, sobre a interface entre os meios 1 e 2.

Fonte: Elaborada pelo autor.

Na figura, l é o comprimento da curva C e h_1 e h_2 são as alturas das porções que estão contidas nos meios 1 e 2, respectivamente. Integrando a lei de Faraday dada pela equação (2.3) na superfície A delimitada pelo caminho C, teremos:

$$\int_A (\nabla \times \vec{E}) \cdot d\vec{a} = - \int_A \frac{\partial \vec{B}}{\partial t} \cdot d\vec{a}$$

Na expressão acima, $d\vec{a}$ é um vetor infinitesimal perpendicular à área A (perpendicular ao plano da figura), de forma que as integrais representam o fluxo do rotacional do campo elétrico por essa área e o fluxo da derivada temporal do campo indução magnética pela mesma área. Por meio do teorema de Stokes, podemos transformar integral que envolve o campo elétrico em uma integral de caminho fechado:

$$\int_A (\nabla \times \vec{E}) \cdot d\vec{a} = \oint_{C(A)} \vec{E} \cdot d\vec{l} = - \int_A \frac{\partial \vec{B}}{\partial t} \cdot d\vec{a}$$

Fazendo agora o limite no qual h_1 e h_2 vão a zero, a integral que envolve o campo $\vec{B}$ se anula, pois a área A tende a zero. Além disso, as partes da integração do campo $\vec{E}$ nos

caminhos de comprimento h_1 e h_2 também vão a zero, restando somente os termos da integral nos trechos de comprimento ℓ totalmente contidos nos meios 1 ou 2:

$$\int_0^\ell \vec{E}_1 \cdot d\vec{l} + \int_\ell^0 \vec{E}_2 \cdot d\vec{l} = 0$$

Devemos notar aqui que o caminho da integração é paralelo à interface, de forma que o produto escalar de $\vec{E}$ com a diferencial de caminho resultará no produto da componente tangencial do campo elétrico com o elemento de caminho. Além disso, o sentido do elemento de caminho vetorial no meio 2 é contrário ao do meio 1. Assim:

$$\begin{aligned} \int_0^\ell (\vec{E}_1 - \vec{E}_2) \cdot d\vec{l} &= 0 \\ \therefore E_{1t} &= E_{2t} \end{aligned} \quad (2.49)$$

Essa expressão nos diz que a componente tangencial do campo elétrico deve ser contínua na interface entre os meios.

A última condição de contorno é demonstrada de forma análoga à anterior, ao integrarmos a lei de Ampère (2.4) sobre a superfície A da fig. 2.7:

$$\int_A (\nabla \times \vec{H}) \cdot d\vec{a} = \int_A \vec{J} \cdot d\vec{a} + \int_A \frac{\partial \vec{D}}{\partial t} \cdot d\vec{a}$$

O fluxo do rotacional do campo magnético pode ser transformado em uma integral de caminho fechado por meio do teorema de Stokes. O fluxo da densidade de corrente é nulo, pois estamos considerando dois meios dielétricos ideais, de forma que $\vec{J} = 0$. Com isso:

$$\int_A (\nabla \times \vec{H}) \cdot d\vec{a} = \oint_{C(A)} \vec{H} \cdot d\vec{l} = - \int_A \frac{\partial \vec{D}}{\partial t} \cdot d\vec{a}$$

Da mesma forma que para a lei de Faraday, ao tomarmos o limite de h_1 e h_2 infinitesimalmente pequenos, o fluxo da derivada temporal do campo deslocamento se anula e

a integral de caminho do campo magnético se reduz aos trechos de comprimento ℓ nos meios 1 ou 2:

$$\int_0^\ell \vec{H}_1 \cdot d\vec{l} + \int_\ell^0 \vec{H}_2 \cdot d\vec{l} = 0$$

Como o caminho da integração acima é paralelo à superfície, o resultado das integrais será o produto da componente tangencial do campo magnético pelo comprimento ℓ . E, uma vez que a permeabilidade para ambos os dielétricos é igual à do vácuo, concluímos que:

$$B_{1t} = B_{2t} \quad (2.50)$$

Portanto, a componente tangencial do campo indução magnética deve ser contínua na interface entre os dielétricos.

2.7 Reflexão e refração na interface entre dois meios dielétricos

Consideremos a incidência oblíqua de uma onda plana num ângulo θ_1 formado entre a direção do vetor $\vec{k}_1$ de propagação e a normal $\hat{n}$ definida como um versor perpendicular à superfície no sentido partindo do meio 2 para o meio 1. Seja $\vec{k}'_1$ o vetor de propagação da onda refletida na interface entre os meios e θ'_1 o ângulo formado entre este vetor e a normal. Vamos definir ainda o vetor $\vec{k}_2$ como sendo o vetor de propagação da onda monocromática que atravessa a interface e se propaga pelo meio 2 e o ângulo θ_2 entre o vetor de propagação $\vec{k}_2$ e o versor $-\hat{n}$. O fenômeno de transmissão de uma onda numa interface entre dois meios é chamado de refração. O plano definido pelos vetores $\hat{n}$ e $\vec{k}_1$ é chamado plano de incidência e corresponde ao plano da fig. 2.8. Podemos escrever os campos elétricos $\vec{E}_1(\vec{r}, t)$, $\vec{E}'_1(\vec{r}, t)$ e $\vec{E}_2(\vec{r}, t)$ dos feixes incidente, refletido na interface e transmitido para o meio 2, respectivamente, da seguinte forma:

$$\begin{aligned} \vec{E}_1(\vec{r}, t) &= \vec{E}_1 e^{i[\vec{k}_1 \cdot \vec{r} - \omega t]} \\ \vec{E}'_1(\vec{r}, t) &= \vec{E}'_1 e^{i[\vec{k}'_1 \cdot \vec{r} - \omega t]} \\ \vec{E}_2(\vec{r}, t) &= \vec{E}_2 e^{i[\vec{k}_2 \cdot \vec{r} - \omega t]} \end{aligned} \quad (2.51)$$

As amplitudes dos campos são grandezas vetoriais complexas, de forma que qualquer defasagem que possa existir entre os campos estará embutida no caráter complexo das mesmas.

Figura 2.8 – Incidência oblíqua de uma onda plana em uma interface entre dois meios dielétricos. Os vetores $\vec{k}_1$, $\vec{k}_1'$ e $\vec{k}_2$ são os vetores de propagação da onda incidente, da refletida na interface de volta ao meio 1 e da transmitida para o meio 2, respectivamente.

Fonte: Elaborada pelo autor.

Devemos agora relacionar esses campos por meio das condições de contorno estudadas no tópico anterior. A continuidade das componentes normal e tangencial dos campos impõe que os argumentos das exponenciais nas expressões (2.51) devem ser iguais para qualquer instante de tempo na interface:

$$\vec{k}_1 \cdot \vec{r} = \vec{k}_1' \cdot \vec{r} = \vec{k}_2 \cdot \vec{r} \quad (2.52)$$

Utilizando a relação $\hat{n} \times (\hat{n} \times \vec{A}) = \hat{n}(\hat{n} \cdot \vec{A}) - \vec{A}(\hat{n} \cdot \hat{n})$, e observando que $\hat{n} \cdot \hat{n} = 1$, podemos reescrever o vetor arbitrário $\vec{A}$:

$$\vec{A} = \hat{n}(\hat{n} \cdot \vec{A}) - \hat{n} \times (\hat{n} \times \vec{A}) \quad (2.53)$$

Vamos reescrever o vetor $\vec{r}$ de acordo com a relação (2.53) e substituí-lo na expressão (2.52). Como $\vec{r}$ é um vetor sobre a interface entre os dois meios, $\hat{n} \cdot \vec{r} = 0$, e a (2.52) fica:

$$\vec{k}_1 \cdot [\hat{n} \times (\hat{n} \times \vec{r})] = \vec{k}_1' \cdot [\hat{n} \times (\hat{n} \times \vec{r})] = \vec{k}_2 \cdot [\hat{n} \times (\hat{n} \times \vec{r})]$$

Utilizando a identidade vetorial $\vec{D} \cdot [\vec{A} \times (\vec{B} \times \vec{C})] = (\vec{D} \times \vec{A}) \cdot (\vec{B} \times \vec{C})$ (ver Apêndice A), simplificamos a expressão acima:

$$(\vec{k}_1 \times \hat{n}) \cdot (\hat{n} \times \vec{r}) = (\vec{k}'_1 \times \hat{n}) \cdot (\hat{n} \times \vec{r}) = (\vec{k}_2 \times \hat{n}) \cdot (\hat{n} \times \vec{r})$$

Como a relação acima deve ser válida para qualquer vetor $\vec{r}$ sobre a superfície, concluímos que:

$$(\vec{k}_1 \times \hat{n}) = (\vec{k}'_1 \times \hat{n}) = (\vec{k}_2 \times \hat{n}) \quad (2.54)$$

Pela definição de produto vetorial, o vetor $(\vec{k}_1 \times \hat{n})$ é perpendicular ao plano de incidência, definido pelos vetores $\vec{k}_1$ e $\hat{n}$. Consequentemente, $(\vec{k}'_1 \times \hat{n})$ e $(\vec{k}_2 \times \hat{n})$ são perpendiculares a esse plano. Portanto, $\vec{k}'_1$ e $\vec{k}_2$ também devem estar contidos no plano de incidência. Concluimos, então, que $\hat{n}$, $\vec{k}_1$, $\vec{k}'_1$ e $\vec{k}_2$ são coplanares, ou seja, os raios incidente, refletido e refratado estão contidos no mesmo plano. É importante notar que esta conclusão não é trivial, apesar de a fig. 2.8 nos induzir a pensar dessa forma.

Analisemos agora os módulos dos produtos vetoriais da equação (2.54):

$$\begin{aligned} |\vec{k}_1 \times \hat{n}| &= |\vec{k}_1| \sin \theta_1 = \frac{\omega n_1}{c} \sin \theta_1 \\ |\vec{k}'_1 \times \hat{n}| &= |\vec{k}'_1| \sin \theta'_1 = \frac{\omega n_1}{c} \sin \theta'_1 \\ |\vec{k}_2 \times \hat{n}| &= |\vec{k}_2| \sin \theta_2 = \frac{\omega n_2}{c} \sin \theta_2 \end{aligned} \quad (2.55)$$

onde utilizamos as equações (2.12) e (2.8) para substituir o módulo dos vetores de propagação. O índice de refração para os vetores $\vec{k}_1$ e $\vec{k}'_1$ é o mesmo, n_1 , pois os feixes correspondentes se encontram no mesmo meio. Comparando então os termos que envolvem esses dois vetores de propagação, encontramos:

$$\begin{aligned} \frac{\omega n_1}{c} \sin \theta_1 &= \frac{\omega n_1}{c} \sin \theta'_1 \\ \therefore \theta_1 &= \theta'_1 \end{aligned} \quad (2.56)$$

Isto significa que o ângulo de incidência (ângulo entre o feixe incidente e o versor normal) é igual ao de reflexão (ângulo entre o feixe refletido e o versor normal): esta é a Lei da Reflexão. Considerando agora a onda transmitida:

$$\begin{aligned}\frac{\omega n_1}{c} \sin \theta_1 &= \frac{\omega n_2}{c} \sin \theta_2 \\ \therefore n_1 \sin \theta_1 &= n_2 \sin \theta_2\end{aligned}\tag{2.57}$$

A relação (2.57) é a famosa Lei de Snell da refração.

2.8 Reflexão e coeficientes de Fresnel

Para definir completamente a onda refletida, precisamos determinar a fração refletida do campo elétrico, isto é, determinar a razão entre as amplitudes dos campos das ondas refletida e incidente. Para isso, devemos utilizar as condições de contorno novamente. Faremos uso da continuidade das componentes tangenciais. Primeiramente, consideremos a equação (2.49), que aqui nomearemos eq. (2.58):

$$E_{1t} = E_{2t}\tag{2.58}$$

Para definir a forma vetorial dessa relação, vamos reescrever o campo elétrico por meio da expressão (2.53):

$$\vec{E} = \hat{n}(\hat{n} \cdot \vec{E}) - \hat{n} \times (\hat{n} \times \vec{E})$$

Note que o primeiro termo à direita da igualdade representa a projeção do campo elétrico na direção normal à superfície. Portanto, o termo que envolve o produto vetorial duplo deve ser a componente tangencial à interface:

$$\vec{E}_t = -\hat{n} \times (\hat{n} \times \vec{E})\tag{2.59}$$

No meio 1, o campo é dado pela soma das ondas incidente e refletida. No meio 2, há somente a onda refratada. Desta forma, a condição de contorno pode ser expressa da seguinte forma:

$$\begin{aligned}\hat{n} \times [\hat{n} \times (\vec{E}_1 + \vec{E}_1')] &= \hat{n} \times (\hat{n} \times \vec{E}_2) \\ \therefore \hat{n} \times (\vec{E}_1 + \vec{E}_1') &= \hat{n} \times \vec{E}_2\end{aligned}\quad (2.60)$$

Note que nosso objetivo é escrever $\vec{E}_1'$ em termos de $\vec{E}_1$ e a relação (2.60) envolve uma segunda incógnita, $\vec{E}_2$. Portanto, necessitamos de outra equação que envolva as mesmas variáveis de forma a termos um sistema de equações solucionável. A outra equação é obtida da continuidade do campo indução magnética dada pela expressão (2.50), que aqui nomearemos eq. 2.61:

$$B_{1t} = B_{2t} \quad (2.61)$$

Analogamente ao exposto no caso do campo elétrico, podemos reescrever essa condição de contorno da seguinte forma:

$$\hat{n} \times (\vec{B}_1 + \vec{B}_1') = \hat{n} \times \vec{B}_2 \quad (2.62)$$

Substituindo o campo indução magnética pelo campo elétrico de acordo com a expressão (2.20), obtemos:

$$\frac{n_1}{c} \hat{n} \times [(\hat{u}_1 \times \vec{E}_1) + (\hat{u}_1' \times \vec{E}_1')] = \frac{n_2}{c} \hat{n} \times (\hat{u}_2 \times \vec{E}_2)$$

Manipulando a expressão acima ao substituírmos o produto vetorial duplo pela relação $\vec{A} \times (\vec{B} \times \vec{C}) = \vec{B}(\vec{A} \cdot \vec{C}) - \vec{C}(\vec{A} \cdot \vec{B})$ (ver Apêndice A), concluímos que:

$$\begin{aligned}n_1[\hat{u}_1(\hat{n} \cdot \vec{E}_1) - \vec{E}_1(\hat{n} \cdot \hat{u}_1) + \hat{u}_1'(\hat{n} \cdot \vec{E}_1') - \vec{E}_1'(\hat{n} \cdot \hat{u}_1')] &= \\ &= n_2[\hat{u}_2(\hat{n} \cdot \vec{E}_2) - \vec{E}_1(\hat{n} \cdot \hat{u}_2)]\end{aligned}\quad (2.63)$$

As equações (2.60) e (2.63) formam um sistema com duas incógnitas, $\vec{E}'_1$ e $\vec{E}_2$, em termos do campo elétrico incidente, $\vec{E}_1$. Estamos interessados aqui somente no campo $\vec{E}'_1$. Para determiná-lo, devemos considerar duas situações de polarização dos campos: polarização perpendicular ao plano de incidência, chamada de onda *s*, e polarização paralela ao mesmo plano, chamada de onda *p*. A reflexão de uma onda cuja polarização é arbitrária poderá ser escrita como a reflexão de um campo cuja polarização é a combinação das duas polarizações. Para efeito de simplicidade, vamos definir as amplitudes escalares dos campos elétricos como E_1 , E'_1 e E_2 .

2.8.1 Reflexão para a onda *s*

Essa situação pode ser esquematizada de acordo com a fig. 2.9. Por convenção, os campos elétricos foram escolhidos no mesmo sentido, entrando no plano da figura (plano de incidência). A direção e sentido dos campos indução magnética ficam definidos pelo produto vetorial dos versores de propagação e dos campos elétricos, de acordo com a equação (2.20).

Figura 2.9 – Incidência oblíqua de onda com polarização perpendicular ao plano de incidência em interface entre dois meios. Nessa situação, a convenção escolhida foi tal que os campos elétricos apontam para o mesmo sentido, entrando no plano da figura.

Fonte: Elaborada pelo autor.

Como o campo elétrico é perpendicular ao plano de incidência, a amplitude do vetor resultante do produto vetorial da equação (2.60) fornece:

$$E_1 + E'_1 = E_2 \quad (2.64)$$

Além disso, os produtos escalares dos campos elétricos pelo versor normal se anulam na equação (2.63), simplificando alguns termos. Observando a fig. 2.9, é fácil notar que os produtos escalares dos versores de propagação com o versor normal resultam em:

$$\hat{u}_1 \cdot \hat{n} = \cos(\pi - \theta_1) = -\cos \theta_1 \quad (2.65a)$$

$$\hat{u}'_1 \cdot \hat{n} = \cos \theta_1 \quad (2.65b)$$

$$\hat{u}_2 \cdot \hat{n} = \cos(\pi - \theta_2) = -\cos \theta_2 \quad (2.65c)$$

Portanto, a (2.63) nos fornece:

$$n_1 \cos \theta_1 (E_1 - E'_1) = n_2 \cos \theta_2 E_2 \quad (2.66)$$

Substituindo E_2 da equação (2.64) na expressão acima e resolvendo para E'_1 em termos de E_1 , obtemos:

$$E'_1 = \frac{n_1 \cos \theta_1 - n_2 \cos \theta_2}{n_1 \cos \theta_1 + n_2 \cos \theta_2} E_1 \quad (2.67)$$

Definindo o índice de refração relativo $n = n_2/n_1$, utilizando a Lei de Snell (2.57) e a relação fundamental da trigonometria ($\sin^2 \theta + \cos^2 \theta = 1$), é fácil mostrar que:

$$\cos \theta_2 = \sqrt{1 - \frac{\sin^2 \theta_1}{n^2}} \quad (2.68)$$

Com isso, podemos manipular a (2.67) de forma que:

$$\frac{E'_1}{E_1} \equiv r_s = \frac{\cos \theta_1 - \sqrt{n^2 - \sin^2 \theta_1}}{\cos \theta_1 + \sqrt{n^2 - \sin^2 \theta_1}} \quad (2.69)$$

O fator r_s é conhecido como coeficiente de reflexão de Fresnel para a onda s .

2.8.2 Reflexão para a onda p

Consideremos a condição de polarização esquematizada pela fig. 2.10. Os campos indução magnética foram escolhidos no mesmo sentido, saindo do plano da figura, por convenção. A direção e sentido dos campos elétricos ficam então definidos pela equação (2.21).

Figura 2.10 - Incidência oblíqua de onda com polarização paralela ao plano de incidência em interface entre dois meios. Nessa situação, a convenção escolhida foi tal que os campos indução magnética apontam para a mesma direção, saindo do plano da figura.

Fonte: Elaborada pelo autor.

Neste caso, não ocorrem as simplificações causadas pela perpendicularidade do campo elétrico com o plano de incidência que ocorriam no caso anterior. Nota-se que os campos $\vec{E}_1$, $\vec{E}_1'$ e $\vec{E}_2$ formam os ângulos $(\pi/2 - \theta_1)$, $(\pi/2 - \theta_1)$ e $(\pi/2 - \theta_2)$ em relação à normal, respectivamente. Por esta razão, a amplitude do vetor resultante da equação (2.60) nos dá:

$$E_1 \cos \theta_1 - E_1' \cos \theta_1 = E_2 \cos \theta_2 \quad (2.70)$$

Esta mesma expressão pode ser obtida geometricamente por meio da fig. 2.10 ao projetarmos as componentes dos campos elétricos na direção perpendicular ao versor normal e impormos a continuidade dessas componentes tangenciais à interface entre os meios.

A relação (2.63) nos fornece a segunda equação do sistema para determinar E_1' . Utilizando as expressões (2.65) e observando a fig. 2.10 para determinar as projeções dos campos na direção do versor normal, encontramos a seguinte igualdade vetorial:

$$n_1[\hat{u}_1 E_1 \sin\theta_1 + \vec{E}_1 \cos\theta_1 + \hat{u}_1' E_1' \sin\theta_1 - \vec{E}_1' \cos\theta_1] = n_2[\hat{u}_2 E_2 \sin\theta_2 + \vec{E}_2 \cos\theta_2] \quad (2.71)$$

Essa igualdade deve ser satisfeita em todas as direções. Em particular, também deve ser satisfeita na direção perpendicular à normal, ou seja, tangencialmente à superfície. Fazendo a projeção dos vetores nessa direção, obtemos:

$$n_1[E_1 \sin^2\theta_1 + E_1 \cos^2\theta_1 + E_1' \sin^2\theta_1 + E_1' \cos^2\theta_1] = n_2[E_2 \sin^2\theta_2 + E_2 \cos^2\theta_2]$$

Utilizando a definição do índice de refração relativo, é fácil manipular a relação acima para obter:

$$E_2 = \frac{1}{n} (E_1 + E_1') \quad (2.72)$$

Podemos então substituir o campo E_2 da relação acima na expressão (2.70). Definindo o fator r_p como a razão entre as amplitudes E_1' e E_1 , segue que:

$$\begin{aligned} \cos\theta_1 (E_1 - E_1') &= \frac{\cos\theta_2}{n} (E_1 + E_1') \\ \therefore \frac{E_1'}{E_1} \equiv r_p &= -\frac{n \cos\theta_1 - \cos\theta_2}{n \cos\theta_1 + \cos\theta_2} \end{aligned} \quad (2.73)$$

Substituindo $\cos\theta_2$ por meio da (2.68), derivamos uma relação que depende somente do ângulo de incidência e do índice de refração relativo:

$$r_p = \frac{-n^2 \cos\theta_1 + \sqrt{n^2 - \sin^2\theta_1}}{n^2 \cos\theta_1 + \sqrt{n^2 - \sin^2\theta_1}} \quad (2.74)$$

O coeficiente r_p é conhecido como coeficiente de reflexão de Fresnel para a onda p .

2.9 O ângulo de Brewster e o ângulo crítico

Consideremos a partir de agora a reflexão interna da luz na interface entre dois meios, ou seja, a reflexão numa interface tal que $n_1 > n_2$. Algumas observações importantes podem

ser feitas a partir das eqs. (2.69) e (2.74). A primeira delas é que o coeficiente r_s nunca pode ser nulo exceto quando $n_1 = n_2$. Isso implicaria em dois meios com o mesmo índice de refração ou então a ausência de interface. Consequentemente, r_p também seria nulo.

A segunda observação é que r_p pode ser nulo em duas situações. Uma delas ocorre quando $n_1 = n_2$, como dito anteriormente. A outra condição ocorre quando $n_1 \neq n_2$ mas o ângulo θ_1 é tal que o numerador da expressão para r_p é nulo. Isso permite determinar esse ângulo específico, $\theta_1 = \theta_B$:

$$\begin{aligned} -n^2 \cos \theta_B + \sqrt{n^2 - \sin^2 \theta_B} &= 0 \\ \therefore \tan \theta_B &= n \end{aligned} \quad (2.75)$$

θ_B é conhecido como ângulo de Brewster. Uma das consequências da existência desse ângulo é que se pode obter luz linearmente polarizada (polarização s) por reflexão ao se incidir luz monocromática com $\theta_1 = \theta_B$ na interface entre dois meios. Devemos notar também que, se $n_1 > n_2$, r_p passa a ser negativo para ângulos acima de θ_B .

A terceira observação importante a ser feita das eqs. (2.69) e (2.74) é em relação ao termo representado pela raiz quadrada em ambas as expressões. É fácil observar que, acima de um determinado ângulo, $\theta_1 = \theta_C$, os coeficientes de Fresnel tornam-se complexos devido à troca de sinal do argumento da raiz. Esse ângulo é conhecido como ângulo crítico e pode ser facilmente determinado:

$$\sin \theta_C = n \quad (2.76)$$

O ângulo crítico existe somente na reflexão interna, já que o índice de refração relativo é maior que 1 na reflexão externa (onde $n_1 < n_2$). Sua medida é, portanto, diretamente relacionada ao índice de refração dos meios 1 e 2. Com isso, conhecendo-se o índice de refração do meio 2, pode-se obter o índice de refração do meio 1, por exemplo. Essa é uma informação importante uma vez que o índice pode depender de vários fatores como, por exemplo, a umidade relativa, a temperatura, a pressão, a composição do material, entre outros. Portanto, a medida do índice de refração por meio da medida do ângulo crítico pode ser utilizada para o desenvolvimento de sensores ópticos.

2.10 A fase adquirida na reflexão

Um estudo mais aprofundado dos coeficientes de Fresnel revela outras características interessantes da reflexão. Vamos analisar os valores que r_p e r_s podem assumir. A fig. 2.11 mostra um gráfico do módulo desses coeficientes em função do ângulo θ_1 de incidência considerando um valor típico de $n = 1/1,72$ para a interface entre um vidro do tipo *flint* (SF10, Schott) e o ar.

Figura 2.11 – Módulo de r_p e r_s em função do ângulo de incidência para a reflexão interna da luz na interface entre um vidro SF10 ($n_1=1,72$) e o ar ($n_2\cong 1$). Para esta simulação, o comprimento de onda da luz considerado foi de 589 nm.

Fonte: Elaborada pelo autor.

Como podemos ver pela figura, $|r_s|$ é uma função crescente até o ângulo crítico, onde seu valor é 1. Já $|r_p|$ é decrescente até o ângulo de Brewster, onde assume o valor zero, e cresce rapidamente até o ângulo crítico, onde tem seu valor igual a 1. Acima do ângulo crítico, ocorre a reflexão total interna (RTI), na qual ambos os coeficientes tornam-se complexos de módulo igual a 1. Isso é facilmente observável notando-se que, acima do ângulo crítico, o numerador da expressão de r_s é o complexo conjugado do denominador. O mesmo ocorre para r_p , a menos de um sinal.

Outra característica a se observar na reflexão é a fase imposta à luz. Ela também pode ser obtida diretamente dos coeficientes de Fresnel. Comparativamente, podemos analisar a diferença da fase ganha pelas ondas p e s ao serem refletidas. Partindo da incidência normal até o ângulo θ_B , r_p e r_s são reais positivos e, portanto, a reflexão não adiciona nenhuma fase à

onda. Entre θ_B e θ_C , r_s é real positivo e r_p é real negativo. Portanto, a onda s não sofre adição em sua fase enquanto a onda p tem uma defasagem de π devido à reflexão. Acima do ângulo crítico, r_p e r_s tornam-se complexos e ambos dão origem a uma fase às ondas p e s . Para determinar essa fase, devemos escrever esses coeficientes na forma polar de um número complexo:

$$r_p = |r_p|e^{i\varphi_p} \text{ e } r_s = |r_s|e^{i\varphi_s} \quad (2.77)$$

onde φ_p e φ_s são as fases dos números complexos. Acima de θ_C os módulos dos coeficientes são $|r_s| = |r_p| = 1$ e as fases impostas às ondas p e s podem ser escritas como:

$$\varphi_p = \pi - 2\tan^{-1}\left(\frac{\sqrt{\sin^2\theta_1 - n^2}}{n^2\cos\theta_1}\right) \quad (2.78)$$

$$\varphi_s = -2\tan^{-1}\left(\frac{\sqrt{\sin^2\theta_1 - n^2}}{\cos\theta_1}\right) \quad (2.79)$$

Portanto, a defasagem $\varphi = \varphi_p - \varphi_s$ adicionada entre as componentes p e s após a reflexão com ângulo de incidência acima do ângulo crítico é:

$$\varphi = \pi - 2\left[\tan^{-1}\left(\frac{\sqrt{\sin^2\theta_1 - n^2}}{n^2\cos\theta_1}\right) - \tan^{-1}\left(\frac{\sqrt{\sin^2\theta_1 - n^2}}{\cos\theta_1}\right)\right] \quad (2.80)$$

Figura 2.12 – Diferença entre as fases ganhas pelas ondas s e p ao serem refletidas em uma interface entre dois meios de índice $n_1=1,72$ e $n_2=1$. Para esta simulação, o comprimento de onda da luz considerado foi de 589 nm.

Fonte: Elaborada pelo autor

A fig. 2.12 mostra um gráfico dessa diferença em função do ângulo de incidência. Observamos nesse gráfico uma descontinuidade na defasagem imposta às componentes exatamente no ângulo de Brewster associada à mudança de sinal de r_p nesse ângulo para uma reflexão interna ($n_1 > n_2$). Observamos também uma descontinuidade da derivada da defasagem exatamente no ângulo crítico.

2.11 Interferência entre as polarizações refletidas: onda monocromática com polarização linear a 45°

Vamos imaginar agora que a incidência na interface entre os meios seja de uma onda monocromática, cujo campo é E_0 , linearmente polarizada a 45° , ou seja, com amplitude igual para as ondas p e s e sem defasagem entre elas. As amplitudes E_{rs} e E_{rp} do campo elétrico das componentes p e s após a reflexão pode ser escrito como:

$$E_{rs} = \frac{\sqrt{2}}{2} E_0 r_s$$

$$E_{rp} = \frac{\sqrt{2}}{2} E_0 r_p$$

A defasagem imposta na reflexão está contida nos coeficientes de Fresnel. $\frac{\sqrt{2}}{2} E_0$ é a amplitude de cada componente antes da reflexão. Imaginemos também que haja uma forma de interferirmos essas duas ondas, que são ortogonais, após a reflexão. Isso pode ser feito adicionando-se um polarizador com seu eixo de transmissão também a 45° após a reflexão, projetando as componentes das ondas s e p nessa direção. A intensidade da onda resultante da interferência será dada por:

$$I = \frac{1}{4} I_0 \left(|r_p|^2 + |r_s|^2 + 2|r_p||r_s|\cos\varphi \right) \quad (2.81)$$

onde I_0 é a intensidade da onda linearmente polarizada antes da reflexão ($I_0 \propto E_0^2$), φ a diferença de fase entre as duas polarizações e o fator $1/4$ aparece devido à projeção dos campos na direção do eixo de transmissão do polarizador. A defasagem surge devido à

reflexão da onda, como dito anteriormente, e podemos escrevê-la em função do ângulo de incidência:

$$\varphi = \begin{cases} 0 & , 0 \leq \theta_1 < \theta_B \\ \pi & , \theta_B \leq \theta_1 \leq \theta_C \\ \pi - 2 \left[\tan^{-1} \left(\frac{\sqrt{\sin^2 \theta_1 - n^2}}{n^2 \cos \theta_1} \right) - \tan^{-1} \left(\frac{\sqrt{\sin^2 \theta_1 - n^2}}{\cos \theta_1} \right) \right] & , \theta_1 > \theta_C \end{cases} \quad (2.82)$$

Com isso, podemos reescrever a intensidade resultante da interferência agora considerando os regimes do ângulo de incidência, levando em conta a fase φ dada pela eq. (2.82):

$$I = \begin{cases} I_0 (|r_p| + |r_s|)^2 & , 0 \leq \theta_1 < \theta_B \\ I_0 (|r_p| - |r_s|)^2 & , \theta_B \leq \theta_1 \leq \theta_C \\ I_0 (|r_p|^2 + |r_s|^2 + 2|r_p||r_s|\cos\varphi) & , \theta_1 > \theta_C \end{cases} \quad (2.83)$$

onde a fase φ acima do ângulo crítico é dada na eq. (2.82). As figs. 2.11 e 2.12 podem nos auxiliar a compreender o perfil de intensidades em função do ângulo de incidência representado pela eq. (2.83). Entre a incidência normal e a incidência com ângulo igual ao ângulo de Brewster, a intensidade depende do quadrado da soma dos módulos de r_s e r_p . Entre a incidência com θ_B e a incidência no ângulo crítico, a intensidade depende do quadrado da diferença entre os módulos dos coeficientes de Fresnel. Acima do ângulo crítico, a expressão não pode ser reescrita de uma forma mais simples.

A grande informação que a eq. (2.83) nos mostra é que, quando a onda incide na interface com um ângulo próximo ao ângulo crítico, há uma interferência destrutiva entre as ondas s e p . Isso porque em θ_C os módulos dos coeficientes de Fresnel são iguais a 1 e a intensidade torna-se nula. A fig. 2.13 mostra o perfil de intensidades em função do ângulo de incidência após a interferência entre as ondas, dado pela eq. (2.83):

Como podemos observar, a intensidade é praticamente constante a partir da incidência normal, ocorrendo uma queda mais brusca a partir do ângulo de Brewster, pois a partir daí a intensidade depende da diferença dos módulos de r_p e r_s . Exatamente no ângulo crítico a intensidade é nula com um vale de largura bastante estreita. Acima do ângulo crítico, a intensidade é não nula até a incidência rasante.

Figura 2.13 – Perfil de intensidades em função do ângulo de incidência considerando-se a interferência entre as ondas s e p refletidas em uma interface vidro ($n_1=1,72$) e ar. Para esta simulação, o comprimento de onda da luz considerado foi de 589 nm.

Fonte: Elaborado pelo autor.

Com esse embasamento teórico, é possível o desenvolvimento de uma técnica para medir de forma precisa o ângulo crítico.⁴⁷ Utilizando um material conhecido de índice de refração n_1 , pode-se colocá-lo em contato direto com outro material (um gás ou líquido, por exemplo) de índice de refração $n_2 < n_1$, fazer com que haja incidência de luz linearmente polarizada a 45° na interface. Depois, pode-se colocar um polarizador também a 45° após a reflexão e procurar pelo ângulo crítico que será evidenciado pela extinção da luz quando refletida nesse ângulo. Com esse ângulo, pode-se determinar o índice de refração n_2 por meio da eq. (2.76).

2.12 Interferência entre as polarizações refletidas: onda monocromática com polarização linear levemente deslocada de 45°

Consideremos uma onda monocromática linearmente polarizada incidindo na interface entre dois meios, nas mesmas condições da seção anterior. Suponhamos que a polarização da onda incidente seja levemente deslocada de um ângulo α a partir dos 45° da polarização original. A fig. 2.14 esquematiza esse caso.

Figura 2.14 – Polarização linear deslocada de 45° por um ângulo α .
Fonte: Elaborada pelo autor.

Nessa situação, as amplitudes das ondas s e p serão diferentes dependendo desse ângulo α . Após a reflexão, podemos escrever os campos E_{rs} e E_{rp} como:

$$E_{rs} = E_0 r_s \cos\left(\frac{\pi}{4} - \alpha\right)$$

$$E_{rp} = E_0 r_p \cos\left(\frac{\pi}{4} + \alpha\right)$$

Podemos então produzir interferência entre as duas componentes ao adicionarmos um polarizador a 45° após a reflexão na interface. Neste caso, uma expressão análoga à eq. (2.81) deve ser obtida a fim de levar em conta o novo ângulo da polarização da luz incidente:

$$\frac{I}{I_0} = \frac{1}{2} \left[\cos^2\left(\frac{\pi}{4} + \alpha\right) |r_p|^2 + \cos^2\left(\frac{\pi}{4} - \alpha\right) |r_s|^2 + 2|r_p||r_s| \cos\left(\frac{\pi}{4} + \alpha\right) \cos\left(\frac{\pi}{4} - \alpha\right) \cos\varphi \right] \quad (2.84)$$

onde α é o deslocamento da polarização da onda em relação a 45° e I_0 é a intensidade da onda linearmente polarizada antes da reflexão ($I_0 \propto E_0^2$). Se utilizarmos as relações trigonométricas $\cos(a \pm b) = \cos(a)\cos(b) \mp \sin(a)\sin(b)$ e $\sin(2a) = 2\sin(a)\cos(a)$, podemos manipular a expressão (2.84) e reescrevê-la de uma forma mais simples:

$$I_\lambda(\theta_1, \alpha) = \frac{1}{4} I_0 \left[(1 - \sin 2\alpha) |r_p|^2 + (1 + \sin 2\alpha) |r_s|^2 + 2|r_p||r_s| \cos(2\alpha) \cos\varphi \right] \quad (2.85)$$

onde o subscrito λ é agora explicitado para associar essa expressão ao comprimento de onda específico da onda monocromática. A dependência da intensidade com o comprimento de onda e com o ângulo de incidência se dá por meio dos coeficientes de Fresnel, que contém diretamente o ângulo θ_1 e o índice de refração relativo n . Este último depende do comprimento de onda por causa da dispersão cromática. Como agora o perfil de intensidades depende de α , o mesmo será distorcido em comparação ao perfil com $\alpha = 0$. A fig. 2.15 mostra alguns desses perfis em função do ângulo de incidência, nas proximidades do ângulo crítico, para diferentes valores do deslocamento da polarização da luz incidente.

Figura 2.15 – Perfis de intensidade da interferência entre as componentes s e p de uma onda linearmente polarizada a $(45^\circ + \alpha)$ após a reflexão em uma interface entre vidro e ar e, em sequência, após a transmissão por um polarizador com eixo de transmissão a 45° em função do ângulo de incidência para $\alpha = -3^\circ, -2^\circ, -1^\circ, 0^\circ, 1^\circ, 2^\circ$ e 3° com $n_2/n_1 = 1/1,727221$. Para esta simulação, o comprimento de onda da luz considerado foi de 589 nm.

Fonte: Elaborada pelo autor.

Como podemos perceber a partir da figura, para valores de α mais negativos há um alargamento da região do mínimo de intensidades próximo ao ângulo crítico (que, nesse caso, é de cerca de $35,375^\circ$) e, conseqüentemente, uma suavização desses perfis. Além disso, há um deslocamento na posição do mínimo em direção a ângulos menores que θ_C . Para $\alpha > 0$, a posição do mínimo não se desloca e sua intensidade tem um incremento maior quanto maior for $|\alpha|$. Para ângulos de incidência maiores que o ângulo crítico, a intensidade da luz independe do sinal de α , ou seja, para incidência acima de θ_C os perfis de intensidade para α positivos e negativos se sobrepõem. A fig. 2.16 mostra o ângulo de reflexão do mínimo de intensidades em função de α . Este gráfico é obtido a partir de um cálculo numérico da

derivada do gráfico anterior: o mínimo de intensidade é um ponto cuja derivada numérica calculada nele é nula.

Figura 2.16 – Ângulo de reflexão do mínimo de intensidade na reflexão de uma onda linearmente polarizada a $(45^\circ + \alpha)$ em uma interface entre vidro (SF10, Schott) e ar em função de α . Para esta simulação, o comprimento de onda da luz considerado foi de 589 nm.

Fonte: Elaborada pelo autor.

O ângulo de saída do mínimo é uma função não linear de α . O módulo do desvio da posição do mínimo em relação ao ângulo crítico cresce conforme $|\alpha|$ cresce no lado negativo, mas é desprezível para luz polarizada em ângulo maior que 45° . Isso ocorre porque acima do ângulo crítico os coeficientes de Fresnel têm módulo igual a 1 e a defasagem nunca é igual a π . Em contrapartida, abaixo do ângulo crítico os coeficientes de Fresnel não são iguais, apesar de a defasagem das componentes s e p ser de π . Isso possibilita uma intensidade mínima somente em ângulos de incidência abaixo do ângulo crítico e para valores de α negativos.

Caso a polarização inicial seja a 45° e uma rotação de α seja produzida após a reflexão e antes do analisador, a expressão para o perfil de intensidades permanece igual à (2.85).

2.13 Interferência entre as polarizações refletidas: onda policromática com polarização linear levemente deslocada de 45°

Imaginemos a mesma situação da seção anterior. Suponhamos que agora utilizamos uma fonte de luz que emite um espectro largo de cores. A fig. 2.17 mostra um espectro típico de um LED amarelo de banda de aproximadamente 20 nm.

Nessas condições, o perfil de intensidades após o analisador pode ser escrito da seguinte forma:

$$I \propto \int I(\lambda) I_{\lambda}(\theta_1, \alpha) d\lambda \quad (2.86)$$

onde $I(\lambda)$ é o espectro de intensidades normalizado do LED e $I_{\lambda}(\theta_1, \alpha)$ o perfil de intensidades em função do ângulo de incidência e da polarização da luz, dado pela eq. (2.85). $I_{\lambda}(\theta_1, \alpha)$ será diferente para cada comprimento de onda devido à dispersão cromática. Para $\alpha = 0$, os perfis $I_{\lambda}(\theta_1, \alpha)$ são semelhantes aos mostrados na fig. 2.13 mas com um deslocamento na posição do mínimo devido à diferença do índice de refração para cada comprimento de onda.

Figura 2.17 – Espectro típico de um LED amarelo de banda larga.
Fonte: Elaborada pelo autor.

A integral (2.86) pode ser interpretada como uma soma de cada perfil de intensidade gerado separadamente por cada λ da fonte de luz, sendo estes perfis multiplicados pela intensidade normalizada de seus respectivos comprimentos de onda. Para determinar $I_{\lambda}(\theta_1, \alpha)$, o índice de refração foi modelado de acordo com a equação de Sellmeier (2.41), sendo os coeficientes de Sellmeier do vidro considerado (SF10, Schott) dados na tabela 2.1.⁵⁵ A equação de Sellmeier para o SF10 com os coeficientes da tabela acima leva em consideração três frequências de absorção. São elas: 110,56 nm, 244,08 nm e 12143 nm (12,143 μ m). As duas primeiras frequências localizam-se no ultravioleta e a terceira pertence à janela do infravermelho médio. Como podemos notar, as frequências que compõem a fonte de luz (centrada em cerca de 595 nm) estão suficientemente longe da frequência de absorção mais próxima, em 244,08 nm. Isso indica que a equação de Sellmeier pode ser utilizada para o SF10 nas frequências da banda da fonte.

Tabela 2.1 – Coeficientes de Sellmeier do vidro SF10

Coeficiente	Valor
B_1	1,62153902
B_2	0,256287842
B_3	1,64447552
$C_1(\mu m^2)$	0,0122241457
$C_2(\mu m^2)$	0,0595736775
$C_3(\mu m^2)$	147,468793

Fonte: OPTICAL....⁶⁰

A fig. 2.18 mostra o gráfico da dispersão do índice de refração do SF10 para a região de comprimentos de onda entre 540 e 650 nm.

Figura 2.18 – Índice de refração em função do comprimento de onda do vidro SF10 considerando os coeficientes de Sellmeier da Tabela 2.1.

Fonte: Elaborada pelo autor.

A fig. 2.19 mostra perfis de intensidade dados pela eq. (2.86) para alguns valores de α , considerando um espectro da fonte de luz como o da fig. 2.17. Como podemos observar a partir da figura, o perfil de intensidades possui um vale mais alargado em comparação com o da fig. 2.15. O mínimo ainda é facilmente determinado e sua posição é alterada conforme α muda. A intensidade do mínimo agora não é nula. Isso ocorre porque o ângulo crítico é diferente para cada comprimento de onda, devido à dispersão do índice de refração. Para valores de $\alpha > 0$ (não mostrado na figura), a posição do mínimo tem uma alteração significativa, diferentemente do caso monocromático.

Figura 2.19 – Perfis de intensidade da luz policromática linearmente polarizada a $(45^\circ + \alpha)$ após a reflexão na interface entre vidro (SF10, Schott) e ar e após o analisador em função do ângulo de incidência para $\alpha = 0, -1, -2$ e -3° .

Fonte: Elaborada pelo autor.

A fig. 2.20 mostra a posição do mínimo em função de α para uma fonte de banda larga, considerando-se a expressão (2.86).

Figura 2.20 – Posição do mínimo de intensidades em função de α para fonte de luz de banda larga. O experimento aqui sendo feito consiste da reflexão de uma onda policromática linearmente polarizada a $(45^\circ + \alpha)$ e sequencialmente a transmissão por um polarizador com eixo de transmissão a 45° .

Fonte: Elaborada pelo autor.

Neste gráfico observa-se mais uma vez o deslocamento da posição do mínimo conforme α é alterado. Percebe-se um comportamento não linear semelhante ao observado na seção 2.12, com o ângulo de saída do mínimo diminuindo para α negativo, mas agora aumentando de forma perceptível para valores positivos de α . Novamente nota-se que a

posição do mínimo pode ser utilizada para a determinação do deslocamento da polarização da luz com relação a 45° ao se medir o ângulo de saída do mínimo e relacioná-lo com α . A conclusão importante que podemos extrair dessa análise é que é possível construir um aparato para medir a polarização da luz linearmente polarizada medindo-se a posição do mínimo de intensidades para incidência próxima ao ângulo crítico. Esse aparato deve ser constituído de dois meios de índices de refração n_1 e n_2 , sendo $n_1 > n_2$, como os da fig. 2.1, e um polarizador (chamado analisador) com seu eixo a 45° após a reflexão da luz na interface entre os dois meios. Outra aplicação possível é exemplificada pela medida da rotação da polarização da luz por algum meio opticamente ativo. Neste caso, basta adicionar um polarizador de entrada com seu eixo a 45° e posicionar a amostra entre o polarizador e a interface entre os meios ou entre a interface e o segundo polarizador. A rotação da polarização da luz linearmente polarizada será observada no deslocamento da posição do mínimo de intensidades do perfil transmitido pelo analisador. Essa posição relaciona-se diretamente com o ângulo de rotação da polarização imposto pela amostra opticamente ativa.

Para efeito de comparação, podemos analisar dois perfis de intensidade obtidos após o analisador para incidência nas vizinhanças do ângulo crítico com valor de α nulo, sendo um deles para luz monocromática em 596 nm e outro para luz policromática de espectro semelhante ao apresentado na fig. 2.17. A fig. 2.21 mostra esses dois perfis:

Figura 2.21 – Comparação do perfil de intensidades após o analisador para luz monocromática de comprimento de onda de 596 nm (linha vermelha) e luz policromática (linha preta).

Fonte: Elaborada pelo autor.

Como podemos observar da figura acima, o mínimo de intensidades para fonte de luz monocromática é mais pronunciado enquanto o mínimo para luz policromática é mais suave. A derivada do perfil de intensidades em relação ao ângulo de incidência para luz

policromática é contínua enquanto a derivada para o perfil gerado a partir de luz monocromática tem uma mudança brusca no ponto de mínimo. Teoricamente, isso faz com que a precisão na medida da posição do mínimo seja melhor quando utilizamos uma fonte de luz monocromática em comparação com a medida feita quando utilizamos luz policromática.

2.14 Dependência da posição do mínimo com a temperatura

Para simplificar este estudo da dependência da posição do mínimo de intensidades do perfil obtido após o analisador em relação à temperatura, consideremos a situação na qual a luz incidente é monocromática. Consideremos ainda que o índice de refração do meio 1 varie com a temperatura mas o índice de refração do meio 2 seja constante. O perfil de intensidades é dado pela expressão (2.85). O ângulo de incidência que resulta no mínimo de intensidades depende do valor de α , que consideraremos fixo igual a zero, e dos índices de refração n_2 e n_1 . Este último, por sua vez, depende da temperatura por meio do coeficiente termo-óptico, $\frac{\partial n_1}{\partial T}$. Seja θ_{min} o ângulo de incidência que resulta no mínimo de intensidades. Podemos determinar uma expressão aproximada para a variação $\Delta\theta_m$ desse ângulo devido a uma variação ΔT da temperatura da seguinte forma:

$$\Delta\theta_m \cong \frac{\partial\theta_{min}}{\partial n_1} \frac{\partial n_1}{\partial T} \Delta T \quad (2.87)$$

onde $\frac{\partial\theta_{min}}{\partial n_1}$ é o coeficiente que caracteriza a variação de θ_{min} devido à variação de n_1 . Determinar este coeficiente de forma analítica pode se tornar uma tarefa complicada, pois ele envolve a derivada da expressão do perfil de intensidades em relação ao ângulo de incidência e subsequente derivada em relação ao índice de refração n_1 . Torna-se conveniente, neste caso, efetuar um cálculo numérico para a determinação de $\frac{\partial\theta_{min}}{\partial n_1}$. Por exemplo, para um vidro do tipo *flint*, como o SF10 (Schott), cujo índice de refração é de aproximadamente 1,72 para o comprimento de onda de 589 nm, é possível encontrar numericamente, a partir da eq. (2.85), $\frac{\partial\theta_{min}}{\partial n_1} \cong 0,417 \text{ rad}$. Já o coeficiente termo-óptico deste mesmo vidro é fornecido nos catálogos de propriedades dos vidros da Schott ⁵⁴ e é menor que $\frac{\partial n_1}{\partial T} \cong 6,6 \cdot 10^{-6}/K$, referente à linha *e* do mercúrio ($\lambda_e \cong 546 \text{ nm}$) para temperaturas entre 20°C e 40°C. Desta forma, para uma variação de temperatura da ordem de 1°C (variação de temperatura típica em

laboratório), podemos estimar $\Delta\theta_m \cong 2,75 \times 10^{-6} \text{ rad}$. Mais adiante, na seção 3.4, apresentamos uma estimativa da variação da posição, em distância, do mínimo de intensidade em função da variação de temperatura baseado na variação angular que obtivemos aqui e nas dimensões do nosso experimento.

2.15 Atividade óptica

A atividade óptica é uma característica de substâncias que apresentam certa helicidade em sua estrutura molecular.⁵⁶ Caracteriza-se pelo poder de produzir uma rotação na polarização de uma onda quando essa atravessa uma solução de substância opticamente ativa. As moléculas orgânicas opticamente ativas geralmente apresentam ao menos um carbono quiral, ligado a quatro radicais diferentes. Substâncias que produzem rotação do plano de polarização para a direita são chamadas dextrógiras, como a sacarose e a glicose. Já as levógiras são as substâncias que causam rotação da polarização da luz para a esquerda, como a frutose.

A origem da atividade óptica provém da diferença de índice de refração experimentado por ondas circularmente polarizadas esquerda e direita. Essa diferença de índice gera uma diferença de fase devido à propagação através da substância. Decompondo a luz linearmente polarizada em uma soma de duas ondas circularmente polarizadas esquerda e direita, é possível mostrar que a propagação dessa luz pela substância acarretará em uma defasagem entre as componentes de polarização circular. Essa defasagem resultará em rotação da polarização.

Para compreender como isso ocorre, suponhamos uma onda plana linearmente polarizada a um ângulo δ com relação ao eixo $\hat{x}$ propagando-se na direção $\hat{z}$. O campo elétrico pode ser escrito como uma composição de ondas linearmente polarizadas nas direções $\hat{x}$ e $\hat{y}$ da seguinte forma:

$$\vec{E} = |\vec{E}|(\hat{y}\sin\delta + \hat{x}\cos\delta)e^{ikz} \quad (2.88)$$

onde $k = \frac{2\pi}{\lambda}n$ é o módulo do vetor de propagação da onda, λ é o comprimento de onda e n é o índice de refração para o comprimento de onda λ .

Podemos reescrever esse campo como a soma de duas ondas circularmente polarizadas. Para isso, devemos utilizar os versores $\hat{e}_+$ e $\hat{e}_-$ de rotação circular direita e esquerda, respectivamente, definidos como:

$$\hat{e}_+ = \hat{x} + i\hat{y} \quad (2.89)$$

$$\hat{e}_- = \hat{x} - i\hat{y} \quad (2.90)$$

onde $i = \sqrt{-1}$ representa a unidade imaginária. Com essa definição, podemos substituir os versores $\hat{x}$ e $\hat{y}$ por $\hat{e}_+$ e $\hat{e}_-$, obtidos das eqs. (2.89) e (2.90):

$$\hat{x} = \frac{\hat{e}_+ + \hat{e}_-}{2} \quad (2.91)$$

$$\hat{y} = \frac{\hat{e}_+ - \hat{e}_-}{2i} \quad (2.92)$$

A substituição das eqs. (2.91) e (2.92) na eq. (2.88) resulta em:

$$\vec{E} = |\vec{E}| \left[\frac{\hat{e}_+}{2} e^{ik_+z} (\cos\delta - i\sin\delta) + \frac{\hat{e}_-}{2} e^{ik_-z} (\cos\delta + i\sin\delta) \right] \quad (2.93)$$

Nesta expressão, o módulo do vetor de propagação $\vec{k}$ é diferente para cada polarização porque, em um meio opticamente ativo, o índice de refração é diferente para cada uma das componentes de polarização circular, como dito anteriormente. Utilizando a fórmula de Euler para reescrever $\sin\delta \pm i\cos\delta = e^{\pm i\delta}$, a eq. (2.93) resulta em:

$$\vec{E} = \frac{1}{2} |\vec{E}| e^{-i\delta} [\hat{e}_+ e^{ik_+z} + \hat{e}_- e^{ik_-z} e^{i2\delta}] \quad (2.94)$$

A informação importante obtida da eq. (2.94) é que quando a luz linearmente polarizada a um ângulo δ é analisada em termos das componentes de polarização circular, observa-se que há uma defasagem de 2δ entre as ondas circularmente polarizadas que compõem a onda total. Portanto, se surgir uma defasagem adicional 2ψ entre as polarizações circulares devido à propagação, o resultado será uma rotação na polarização linear da luz de um ângulo ψ .

Suponhamos então que a luz de comprimento de onda λ linearmente polarizada em um ângulo δ com relação ao eixo $\hat{x}$ se propague por um meio opticamente ativo de comprimento L , com índices de refração n_+ e n_- para ondas circularmente polarizadas direita e esquerda, respectivamente. Seja $\Delta n = n_+ - n_-$ a diferença entre esses índices. Após atravessar esse meio, haverá uma defasagem 2ψ entre as polarizações circulares dada por:

$$2\psi = (k_+ - k_-)L = 2\frac{\pi}{\lambda}L\Delta n \quad (2.95)$$

De acordo com o estudo que fizemos, isso resulta em uma rotação da polarização da luz por um ângulo $\psi = \frac{\pi}{\lambda}L\Delta n$.

Empiricamente, é possível determinar o grau de rotação da polarização da luz causado por uma solução aquosa de concentração $[C]$ por meio de uma grandeza conhecida como rotação específica $[\alpha]_\lambda^T$.⁵⁷ Ela depende da substância opticamente ativa, do comprimento de onda da luz utilizada e da temperatura. Seu valor geralmente é dado considerando-se um caminho óptico de 1 dm. O ângulo rodado ψ pode ser escrito:

$$\psi = [\alpha]_\lambda^T [C] L \quad (2.96)$$

onde L é o comprimento percorrido pela luz através da solução.

2.16 Efeito Faraday

O efeito Faraday é o nome dado à indução da atividade óptica em certos materiais isotrópicos devido à presença de um campo magnético. Na ausência do campo, os índices de refração para as polarizações circulares direita e esquerda são iguais. Na presença de campo magnético na direção da propagação, há uma quebra da simetria e as polarizações circulares ficam sujeitas a índices de refração diferentes.⁴⁷ Isto gera atividade óptica, como vimos na seção anterior.

Vamos supor que uma luz monocromática linearmente polarizada se propague através de um meio no qual existe um campo indução magnética de módulo B na direção da incidência da luz. Se a luz se propaga por uma distância L , o efeito Faraday irá produzir uma rotação ψ da direção da polarização da luz linearmente polarizada dada por:

$$\psi = BVL \quad (2.97)$$

onde V é chamada de constante de Verdet do material e depende do comprimento de onda da luz. Para que o efeito Faraday não seja desprezível, é necessário que o material tenha uma constante de Verdet de valor elevado. Isso ocorre em alguns semicondutores, vidros tipo *flint* e também alguns cristais como o TGG (*Terbium Gallium Garnet*).

3 Materiais e métodos

Neste capítulo, são apresentados de forma mais detalhada os materiais utilizados na montagem experimental, o método de montagem para a produção do perfil de intensidades a ser medido e algumas figuras esquemáticas para a visualização do aparato. Apresentamos também o painel frontal do programa construído em plataforma LabVIEW para a detecção e análise dos dados obtidos. Neste painel, os objetos para controle de parâmetros e obtenção de informações e dados são apresentados e explicados de forma sucinta. Discutimos também o método de determinação subpixel da posição do mínimo de intensidades. São descritos o método de calibração e as substâncias utilizadas para a produção de soluções para a calibração bem como as soluções para medidas de precisão e exatidão. Por fim, explicitamos a metodologia para o estudo da dependência com a temperatura da posição do mínimo no perfil de intensidades.

3.1 Montagem experimental

Para a montagem do aparato para medir a rotação da polarização gerada por uma amostra, podemos utilizar um laser ou um diodo emissor de luz (LED – *light-emitting diode*) como fonte de luz; um polarizador por absorção do tipo folha com seu eixo de transmissão a 45° para gerar polarização linear no ângulo desejado; uma cubeta de vidro, de 10 mm de caminho óptico, que pode ser preenchida com a amostra opticamente ativa para produzir rotação na polarização da luz; um prisma semicilíndrico de vidro para atuar como meio de índice de refração n_1 e o próprio ar como meio de índice de refração n_2 ; um polarizador igual ao primeiro para ser usado como analisador, com eixo de transmissão paralelo ao primeiro polarizador, a 45° ; uma câmera CCD linear (128 pixels, $40\ \mu\text{m}$ de separação entre pixels) para captar o perfil de intensidades após o analisador; e um computador com software em LabVIEW para análise do sinal obtido pela CCD. Em nosso experimento, utilizamos polarizadores comuns de plástico. O prisma semicilíndrico feito de vidro *flint* (SF10, Schott), de raio 10 mm e altura 7 mm, foi produzido na Oficina de Óptica do Instituto de Física de São Carlos. A cubeta utilizada é feita de vidro comum (caminho óptico 10 mm, volume 3,5 ml).

Na montagem utilizando o laser como fonte de luz, o polarizador é posicionado em um suporte na saída do laser. Em seguida, coloca-se a cubeta em um suporte com sua face transparente perpendicular à direção do feixe de luz. Na sequência, o prisma é posicionado em uma base giratória de forma a possibilitar o controle do ângulo de incidência em sua

superfície plana. O analisador então é fixado em um suporte na direção da luz refletida e o perfil transmitido é captado na CCD linear. As distâncias entre o polarizador de entrada e a cubeta e entre a cubeta e a lente semicilíndrica, nessa situação, não possuem restrições consideráveis uma vez que a divergência do feixe laser é muito pequena quando comparada com a divergência da luz proveniente de um LED. Já as distâncias entre a lente semicilíndrica e o analisador e entre o analisador e a CCD ficam limitadas pela divergência da luz imposta pelas interfaces de entrada e saída da lente semicilíndrica.

Na montagem com o LED como fonte de luz, utilizam-se duas placas de alumínio em forma de L como suporte auxiliar aos componentes. Na placa vertical, fixa-se o prisma por pressão utilizando-se uma peça semicilíndrica de alumínio de núcleo oco, com o eixo do cilindro na vertical. Essa peça é furada na direção radial em um ângulo próximo ao ângulo crítico. Ainda na placa vertical, um furo cilíndrico passante de 4 mm de diâmetro é feito com seu centro coincidindo com o centro da base plana do prisma, de forma que a interface nessa base consista de vidro e ar. Um tubo cilíndrico de 3 cm de comprimento e 8 mm de diâmetro tem uma de suas extremidades fixada ao LED e, em seu interior, próximo à outra extremidade, é colada uma lente de distância focal de 16 mm. Um polarizador é colado após a lente. O conjunto LED/lente/polarizador gera um feixe de luz aproximadamente colimado linearmente polarizado. Esse conjunto é encaixado no furo da peça de alumínio que prende o prisma. Outro buraco é feito para captar a luz refletida na base do prisma. Na direção da reflexão, é feito um rebaixamento quadrado na placa de alumínio horizontal nas dimensões de 12 mm x 12 mm para o encaixe da cubeta. Após o espaço para a cubeta, são feitos outros dois furos na placa de alumínio horizontal. O primeiro é usado para a fixação do suporte no qual será preso o analisador e o segundo para o suporte da CCD linear. Nessa situação, posicionamos os componentes muito próximos uns dos outros devido à divergência da luz proveniente do LED.

A luz do LED atravessa o primeiro polarizador, produzindo uma onda linearmente polarizada a 45° . Em seguida, é direcionada ao centro da base plana do prisma, penetrando-o pelo lado cilíndrico. O ângulo da incidência na base do prisma deve ser escolhido próximo ao ângulo crítico. A incidência pelo lado cilíndrico, por construção, será próxima à incidência normal. Devido ao tamanho finito do feixe e à curvatura da superfície do prisma, vários ângulos de incidência são gerados em torno do ângulo crítico na base do prisma. A cubeta é posicionada na direção da luz refletida, após o prisma. Ao atravessar a cubeta com amostra de substância opticamente ativa, a luz tem sua polarização rodada por um ângulo α que depende do tipo de substância, da concentração da mesma e do tamanho da cubeta. Em seguida, o feixe

passa pelo analisador, que projeta as componentes p e s da polarização da luz na direção do eixo de transmissão desse polarizador, ou seja, a 45° . Alternativamente, a cubeta pode ser posicionada após o primeiro polarizador e antes do prisma ao invés de ser alocada após o prisma e antes do analisador. Isso é feito na montagem utilizando o laser como fonte de luz. Essa alteração produz um perfil de intensidades que também pode ser escrito de acordo com a eq. (2.85), como vimos nas seções 2.5 e 2.6.

É importante notar que existe uma ambiguidade a respeito do ajuste do eixo de transmissão do primeiro polarizador a 45° . O eixo pode ser posicionado 45° com relação à vertical (ou horizontal) no sentido horário ou anti-horário. A diferença entre essas duas condições se dá no sinal de α . Isso implica que uma substância opticamente ativa deslocará o mínimo de intensidade em uma direção para o caso em que o eixo do polarizador (e do analisador) é fixado a 45° no sentido horário e na direção oposta se o polarizador for fixado a 45° no sentido anti-horário. A fig. 3.1 mostra um desenho esquemático do aparato experimental utilizando um laser como fonte de luz. A fig. 3.2 (a) é um desenho esquemático da montagem usando um LED como fonte e a 3.2 (b) é uma fotografia da montagem experimental com a mesma fonte de luz.

Figura 3.1 - Desenho esquemático da montagem experimental com o laser como fonte de luz. Nessa montagem, a cubeta é posicionada após o polarizador e antes do prisma semi cilíndrico.

Fonte: Elaborada pelo autor.

Figura 3.2 – (a) Desenho esquemático da montagem experimental com LED como fonte de luz e (b) fotografia da montagem experimental vista de um ponto superior. Nesta montagem, a cubeta é posicionada após o prisma semi cilíndrico e antes do analisador.

Fonte:Elaborada pelo autor.

A fig. 3.3 mostra um exemplo de perfil de intensidades que é obtido após o analisador e é observado no computador utilizando um software de análise de dados (OriginLab, por exemplo).

Figura 3.3 – Perfil de intensidades típico obtido na CCD nas proximidades mínimo.
Fonte: Elaborado pelo autor.

3.2 O software em LabVIEW

Um programa na plataforma do software LabVIEW foi construído para a observação do perfil de intensidades transmitido pelo analisador e para a análise deste perfil. O programa é constituído de um painel frontal e um diagrama de blocos. Este último contém toda a parte lógica da programação. Nele são adicionados os comandos de obtenção do sinal da CCD (interação entre a câmera e o computador), manipulação de dados em vetores, funções de análise do sinal, como o *pick peaks* (detector de máximos/mínimos), cálculo de médias, além das funções comuns, como *loops for* e *while*. Não convém aqui explicarmos detalhadamente o código do programa produzido.

O painel frontal é a interface de interação do usuário. Ele contém campos destinados à determinação, pelo usuário, de parâmetros importantes da medida que se deseja realizar, além de outros campos que fornecem informações relevantes ao usuário, como o perfil de intensidades obtido pela CCD e a posição do píxel da CCD no qual se encontra o mínimo de intensidades desse perfil. A fig. 3.4 mostra o painel frontal do programa. Na figura, as partes do painel frontal estão destacadas por caixas vermelhas indexadas por uma letra maiúscula em vermelho.

Figura 3.4 – Painel frontal do programa em LabVIEW construído para a observação e análise dos dados captados pela CCD. Cada caixa vermelha desenhada na figura representa um objeto do painel pelo qual é fornecido um parâmetro ao programa ou então é observado um dado captado pela CCD.

Fonte: Elaborada pelo autor.

A caixa representada pela letra “A” mostra o objeto por meio do qual é selecionada a porta USB do computador ao qual a CCD é conectada.

A caixa “B” mostra os parâmetros de seleção da região da CCD a ser observada e o tempo de integração (tempo de exposição). O parâmetro “index” seleciona o primeiro pixel da CCD a ser observado (entre os 128 pixels da mesma) e a caixa “length” define o número de pixels que serão observados. Dependendo do tamanho do perfil de intensidades na CCD e da região do vale de intensidades, é conveniente a otimização desses parâmetros para melhor visualização do perfil. O parâmetro “Integração (ms)” define o tempo de exposição à luz e é usado para controlar a intensidade por pixel mostrada no programa. O parâmetro “média” fixa o número de leituras das intensidades nos pixels da CCD que o programa utiliza para fazer a média da intensidade por pixel. Quanto maiores os valores da “Integração (ms)” e “média”, maior o tempo necessário para o programa completar a medida.

A caixa “C” mostra o gráfico do perfil de intensidades da luz que é detectado pela CCD e transmitido para o computador. Este gráfico é limitado ao número de pontos definidos pelos parâmetros da caixa “B”. Um gráfico típico visto no programa é mostrado na fig. 3.3.

A caixa “D” apresenta o botão “PLAY” que dá início ao programa. Ao ser iniciado, o programa mostra o perfil de intensidades no gráfico da caixa “C”. Esse perfil possui um

mínimo pronunciado. A sua posição, em pixel, é determinada por meio de uma rotina de detecção de mínimos ou máximos pertencente ao pacote de ferramentas do software LabVIEW. A ferramenta ajusta (faz um “*fitting*” de) uma parábola aos pontos da região de vale do perfil. Essa curva é utilizada para a determinação da intensidade da luz nesse pixel e da posição do mínimo com precisão de centésimos de pixel. Os parâmetros da ferramenta de detecção são escolhidos por meio do objeto representado na caixa “E” da fig. 3.4. O parâmetro “peaks/valleys” determina se a detecção será de um ponto de mínimo (“Valleys”) ou máximo (“Peaks”). A caixa “width” define o número de pontos nas proximidades do mínimo que serão utilizados para o ajuste parabólico da curva do perfil. A caixa “# found” é apenas um indicador do número de pontos de mínimo encontrados pelo programa.

A caixa “F” é um indicador do estágio em que se encontra a medida. Se os parâmetros “Integração (ms)” e “média”, da caixa B são elevados, a duração de uma medida pode ser relativamente longa. A barra presente na caixa “F” é dinamicamente preenchida conforme a medida é realizada. Quando o preenchimento é completo, a medida é finalizada e uma nova é iniciada imediatamente.

A caixa “G” é um gráfico da dinâmica da posição do mínimo conforme cada medida é realizada. O eixo vertical indica o pixel da posição do mínimo determinado pelo programa. O eixo horizontal representa um índice associado a cada medida. À primeira posição do mínimo é associado o índice “0”, à segunda o índice “1” e assim por diante. A caixa “H” é um gráfico da dinâmica da intensidade do mínimo. O eixo vertical mostra a intensidade enquanto o eixo horizontal é o índice associado à medida, da mesma forma como ocorre com o gráfico da caixa “G”.

A caixa “I” representa o botão que permite a parada do programa. Quando este botão é acionado, a última medida é realizada e os dados da posição e da intensidade do mínimo são salvos em local escolhido pelo usuário.

Durante a medida é possível observar a existência de ruídos de ordem elétrica dos circuitos da CCD. Para eliminar estes ruídos, o programa conta com um filtro matemático de suavização do perfil de intensidades, mostrado na caixa “J”. Este filtro possui parâmetros que podem ser escolhidos para eliminar oscilações de frequência muito rápidas e muito baixas.

3.3 Calibração e medida

A calibração do sistema foi feita de maneiras distintas, dependendo da fonte de luz utilizada. Primeiramente utilizamos um laser amarelo como fonte de luz. Nessa condição, a

calibração foi feita de duas formas: a primeira diretamente rodando um goniômetro preso ao polarizador de entrada; a segunda provocando rotação da polarização através da aplicação de um campo magnético em um cristal de TGG. Em ambos os casos, associamos o pixel da posição do mínimo de intensidades ao ângulo rodado. Posteriormente, substituímos a fonte de luz por um LED amarelo. Nessa condição, a calibração é feita de forma indireta, utilizando amostras preparadas, de concentrações conhecidas. As amostras são utilizadas para preencher a cubeta e o mínimo de intensidades detectado na CCD é associado ao ângulo de rotação imposto por cada amostra. Esse ângulo é teoricamente calculado por meio da eq. (2.96).

3.3.1 Calibrações e medida utilizando Laser como fonte de luz

Utilizamos primeiramente um laser de He-Ne em 594 nm como fonte de luz, como na montagem esquematizada na fig. 3.1. A cubeta foi posicionada antes do prisma e após o primeiro polarizador. Calibramos o sistema de duas formas: a primeira simulando a rotação da polarização pela rotação do primeiro polarizador por ângulos conhecidos; a segunda utilizando um solenoide e um bastão cilíndrico de TGG (do inglês, *Terbium Gallium Garnet*) e explorando o efeito Faraday.

- Calibração com goniômetro no suporte do polarizador:

A montagem utilizada foi aquela esquematizada na fig. 3.1. O polarizador foi posicionado na situação inicial com seu eixo de transmissão a 45° em um suporte contendo um goniômetro cuja precisão era de $5'$ ($1/12^\circ$). Preenchemos a cubeta com água destilada e determinamos a posição do mínimo de intensidades. O goniômetro foi rodado gradativamente em intervalos de $15'$ ($1/4^\circ$), nos sentidos horário e anti-horário, e a posição do mínimo de intensidades foi obtida após uma série de medidas para a obtenção de uma média e um desvio padrão. Determinamos a posição do mínimo em relação à situação inicial fazendo a diferença entre os valores de posição do mínimo encontrados para cada ângulo rodado no goniômetro e o valor encontrado para a situação inicial. Cada posição relativa do mínimo foi associada a um ângulo de rotação da polarização da luz, α , correspondente ao ângulo de rotação imposto pelo goniômetro ao eixo do polarizador de entrada. Uma curva de calibração é obtida a partir do ajuste dos pontos em um gráfico de ângulo por posição do mínimo, em pixel, no software OriginLab.

- *Calibração com bastão de TGG:*

Inicialmente, fizemos a calibração de um solenoide determinando a relação entre a corrente elétrica aplicada e o campo indução magnética B no centro do mesmo. Para medir esse campo, utilizamos uma sonda Hall fornecida pelo Laboratório de Ensino do Instituto de Física de São Carlos. Posicionamos o solenoide entre o polarizador e a cubeta da montagem da fig. 3.1. No centro do solenoide, inserimos um bastão cilíndrico de cristal de TGG, de 2,005 cm de comprimento e 0,5 cm de diâmetro, com seu eixo na direção de propagação da luz. Mantivemos o primeiro polarizador com seu eixo de transmissão a 45° e preenchemos a cubeta com água destilada. Aplicamos diferentes amplitudes de campo indução magnética no bastão de TGG. Para cada campo aplicado, determinamos a posição do mínimo de intensidades na CCD. Determinamos a rotação da polarização da luz para cada valor de B através da eq. (2.97). A constante de Verdet do TGG no comprimento de onda do laser é de $0,2 \text{ min/G.cm}$. Com isso, obtivemos uma curva de calibração que relaciona a rotação da polarização da luz e a posição do mínimo de intensidades por meio de um ajuste dos pontos em um software apropriado (OriginLab, por exemplo).

- *Medidas:*

Feitas as calibrações, realizamos a medida de soluções de sacarose. A montagem experimental foi alternada conforme a calibração utilizada: no caso da calibração pela rotação do polarizador, a montagem é idêntica à da fig. 3.1; se a calibração é feita com o cristal de TGG, a montagem acrescenta um solenoide entre o polarizador e a cubeta. O eixo do polarizador de entrada foi mantido a 45° em ambos os casos. Duas amostras iniciais de brix 50 foram produzidas utilizando-se 50 g de sacarose P.A.-A.C.S., da Sigma-Aldrich, e 50 g de água destilada, medidos em uma balança de precisão. A diluição é feita com o auxílio de um agitador magnético. Posteriormente diluímos essas soluções para dar origem a dois conjuntos de oito amostras cada, com os brix aproximados de 5, 10, 15, 20, 25, 30, 40 e 50. Água destilada foi usada como a nona amostra, de brix igual a 0. A cubeta foi preenchida com cada uma das amostras e a posição do mínimo de intensidades foi obtida para cada uma delas. A partir desses dados, determinamos a posição relativa desses mínimos em relação à situação em que a cubeta é preenchida com água destilada. A essas posições foi associado um valor de ângulo de rotação da polarização da luz de acordo com as calibrações feitas. Para efeito de comparação, consideramos o valor esperado do ângulo de rotação para cada amostra dado

pela eq. (2.96). É importante lembrar que esta equação leva em conta o caminho percorrido pela luz dentro da cubeta, a concentração da amostra e a rotação específica da sacarose para o comprimento de onda empregado. Nesta expressão, devemos observar que ψ corresponde ao α da eq. (2.85).

3.3.2 Calibração e medida utilizando LED como fonte de luz

O terceiro método de calibração foi feito na configuração apresentada na fig. 3.2, utilizando o LED como fonte de luz e a cubeta após o prisma e antes do analisador. Produzimos uma amostra inicial de sacarose e outra de frutose de Brix aproximado por 50 utilizando 50 g de sacarose P.A.-A.C.S. ou frutose P.A.-A.C.S. (Sigma-Aldrich) diluída em 50 g de água destilada utilizando um agitador magnético. As massas foram medidas em uma balança de precisão. Posteriormente, diluímos as soluções em água destilada para originar outras seis amostras de brix aproximado 5, 10, 15, 20, 25 e 30. Utilizamos também água destilada como amostra de brix 0. Para efeito de comparação, medimos os brix das amostras em um refratômetro comercial (ATAGO RX-5000 α , precisão de medição do índice de refração (n_D) de $\pm 0,00003$ e de brix de $\pm 0,03\%$). A concentração das amostras é obtida da seguinte forma: medimos a densidade por meio da massa de um determinado volume de cada solução; com a densidade e o brix, utilizamos a seguinte relação entre a concentração C , o brix $^{\circ}B$ e a densidade ρ :

$$C = \frac{m_{sac}}{V_{sol}} = \frac{m_{sac}}{m_{sol}} \frac{m_{sol}}{V_{sol}}$$

$$\therefore C = \frac{^{\circ}B}{100} \rho \quad (3.1)$$

onde m_{sac} , V_{sol} e m_{sol} são a massa de sacarose em solução, o volume da solução, e a massa da solução, respectivamente. Note que a razão entre m_{sac} e m_{sol} só é igual ao brix dividido por 100 porque o único sólido solúvel presente nas amostras é a sacarose.

As amostras são guardadas por um tempo mínimo de duas horas para o desaparecimento de eventuais bolhas de ar e para permitir o equilíbrio mutarrotacional das conformações α e β da frutose.³⁷ Uma a uma, as amostras são colocadas na cubeta e o mínimo é detectado pelo software, sendo mostrado no computador. A rotação da polarização da luz para cada amostra é calculada teoricamente a partir da eq. (2.96) e esse ângulo é

associado à posição do mínimo correspondente. Neste procedimento, podemos fazer um ajuste de uma curva relacionando o ângulo rodado da polarização linear da luz e o pixel da CCD em um software apropriado (por exemplo, o OriginLab). Duas curvas são obtidas: uma para calibração com soluções de frutose e outra para as amostras de sacarose.

Para testar a exatidão do experimento na configuração com LED, produzimos amostras de frutose e sacarose com concentração aproximada de 0,26 g/ml (amostra normal). A cubeta é preenchida com essas amostras e o pixel que indica o mínimo na CCD é associado a cada uma delas. Esse pixel é então convertido em ângulo utilizando a calibração previamente feita. O valor obtido é então comparado com o valor esperado, dado pela eq. (2.96).

A precisão do experimento é obtida por meio de várias medidas subsequentes de uma mesma amostra e posterior análise de desvio padrão dos valores obtidos. Isso é feito tanto na calibração quanto na medida das amostras de teste de exatidão.

3.4 Dependência da posição do mínimo de intensidades com a temperatura

Para o estudo da dependência da posição do mínimo de intensidades com a temperatura, utilizamos a montagem experimental que contém o LED como fonte de luz. Além disso, um termopar foi fixado junto à lente semi-cilíndrica para a aferição da temperatura. A cubeta foi preenchida com água destilada e a posição do mínimo foi obtida na câmera CCD linear, sendo este dado apresentado no computador. Por meio do gráfico presente na caixa “G” do programa em LabVIEW da fig. 3.4, observamos a dinâmica da posição do mínimo ao realizar essa medida durante intervalos de tempo longos (superiores a 4 horas). Ao mesmo tempo, a dinâmica da temperatura foi observada por meio de um gráfico que apresenta os dados captados pelo termopar e transmitidos ao computador por um conversor A/D. Este gráfico foi adicionado ao painel frontal do programa em LabVIEW para este estudo específico (não mostrado na fig. 3.4).

Uma vez que a medida da posição do mínimo de intensidades é dada como um índice que indica o pixel do array linear do detector, é conveniente estimar a variação, em pixel, da posição do mínimo em função da temperatura. Uma CCD posicionada depois do analisador a aproximadamente $d = 10 \text{ cm}$ de distância da superfície plana da lente captará uma variação lateral na posição do mínimo, $\Delta l_{min} \cong d\Delta\theta_m$. Esse deslocamento lateral é esquematizado na fig. 3.5. A variação da posição do mínimo em ângulo, $\Delta\theta_m$, foi estimado na seção 2.14. Se,

por exemplo, o detector escolhido for constituído de um array linear de pixels separados por uma distância típica de $\Delta p = 40 \mu m$, podemos estimar uma variação em pixel da posição do mínimo de intensidades devido à variação da temperatura de $\frac{\Delta l_{min}}{\Delta p} \cong 7.10^{-3} pixel$. Note que esta é uma estimativa teórica. As medidas da dinâmica da posição do mínimo com a variação da temperatura são apresentadas na seção 4.3.

Figura 3.5 – Desenho esquemático da variação lateral Δl da posição do mínimo de intensidades relacionada a uma mudança $\Delta\theta_{min}$ do ângulo de saída do mínimo de intensidades.

Fonte: Elaborada pelo autor.

4 Resultados e discussões

Neste capítulo apresentamos os resultados das medidas nas diferentes montagens propostas. Apresentamos os parâmetros obtidos nas calibrações, bem como as amostras produzidas e utilizadas para calibração, e a medida na configuração com laser como fonte de luz. Discutimos a discrepância dos resultados em comparação ao que era esperado e indicamos as dificuldades encontradas nas medidas com fontes de luz coerente. Justificamos a troca da fonte de luz por um LED (banda larga). Apresentamos os parâmetros das amostras produzidas para calibração e medida com a nova fonte de luz. Mostramos os resultados das calibrações e das medidas feitas com amostras de solução de sacarose e frutose como exemplo de aplicação da técnica. Discutimos os resultados e, por fim, indicamos as dificuldades presentes no experimento causadas pela variação da temperatura ambiente, a saber, a mudança no índice de refração relativo da reflexão interna na base do prisma devido ao coeficiente termo óptico do mesmo e o desalinhamento do sistema devido à diferença na dilatação térmica dos materiais utilizados no experimento.

4.1 Medidas na configuração com laser como fonte de luz

Primeiramente fizemos a calibração e as medidas utilizando a configuração com o laser como fonte de luz.

4.1.1 Calibração por rotação do polarizador de entrada e medida de amostras

A calibração foi feita de acordo com o explicitado na seção 3.3.1. A rotação da polarização linear da luz incidente foi provocada pela rotação do eixo de transmissão do polarizador. Por conveniência, determinamos a posição do mínimo preenchendo a cubeta com água destilada. A fig. 4.1 mostra o gráfico da calibração que relaciona o ângulo de rotação da polarização, α , à posição relativa do mínimo, em pixel, em relação à posição do mínimo quando utilizamos água destilada para preencher a cubeta ($\alpha = 0$). O ajuste aos pontos do gráfico é representado pela curva vermelha.

Figura 4.1 – Rotação da polarização da luz imposta pelo polarizador de entrada em função da posição relativa do mínimo de intensidades. A curva vermelha é o ajuste parabólico que fornece os parâmetros da calibração.

Fonte: Elaborada pelo autor.

Como podemos perceber, a curva de calibração tem um comportamento não linear e o eixo de transmissão dos polarizadores foi escolhido tal que o incremento no valor de α ocasiona uma diminuição no pixel que indica o mínimo de intensidades na CCD. A curva de calibração, identificada pela linha vermelha no gráfico, pode ser representada matematicamente pela expressão $\alpha (^{\circ}) = (0,13 \pm 0,05) + (-0,37 \pm 0,01)P + (-0,008 \pm 0,001)P^2$. Nessa equação, P é o deslocamento, em pixels, do mínimo de intensidades em relação à posição do mesmo quando $\alpha = 0$. R^2 resultou em 0,99448.

As medidas para comprovar a confiabilidade do experimento nessa configuração foram feitas de acordo com o apresentado na seção 3.3.1. Os brix e as concentrações das amostras produzidas para medida encontram-se na tabela 4.1. A última coluna desta tabela contém os Brix das soluções medidos num refratômetro comercial (ATAGO RX-5000 α).

Ao preencher a cubeta com as amostras da tabela 4.1, a posição do mínimo de intensidade foi armazenada e convertida em ângulo de rotação da polarização utilizando a calibração da fig. 4.1. Para efeito de comparação, consideramos o ângulo de rotação na polarização esperado que é fornecido pela eq. (2.96). A fig. 4.2 é um gráfico representando o α obtido para cada uma das amostras por meio da calibração da fig. 4.1 (triângulos azuis). Os pontos vermelhos são os valores esperados.

Tabela 4.1 – Brix e concentração das amostras de sacarose produzidas para medida na configuração experimental com laser como fonte de luz e calibração pela rotação do polarizador de entrada.

Amostra	Concentração (g/ml)	Brix	Brix Refratômetro
1	0	0	0
2	0,0517	5,08	4,94
3	0,1048	10,08	9,95
4	0,1606	15,06	14,93
5	0,2174	20,09	19,98
6	0,2765	25,02	24,88
7	0,3377	30,06	28,94
8	0,4697	39,97	39,80
9	0,6104	50,00	49,86

Fonte: Elaborada pelo autor.

Figura 4.2 – Medida da rotação da polarização provocada pelas amostras da Tabela 4.1 em função da concentração. Os triângulos azuis correspondem aos valores da rotação da polarização obtidos para cada amostra considerando-se a calibração feita pela rotação do polarizador de entrada. Os pontos vermelhos são os valores esperados. A montagem experimental é esquematizada na fig. 3.1.

Fonte: Elaborada pelo autor.

Esse resultado é discutido na subseção 4.1.3 em conjunto ao resultado obtido na subseção seguinte.

4.1.2 Calibração com cristal de TGG e medida de amostras

Primeiramente calibramos o solenoide utilizado para a geração do campo indução magnética a ser aplicado no bastão cilíndrico de TGG. Aplicamos alguns valores de corrente

elétrica e medimos o campo B com o auxílio de uma sonda Hall. A fig. 4.3 representa a calibração do solenoide por meio de um gráfico do campo indução magnética no centro do mesmo em função da corrente elétrica aplicada.

Figura 4.3 – Campo indução magnética no centro do solenoide em função da corrente aplicada. A reta vermelha representa o ajuste de calibração.

Fonte: Elaborada pelo autor.

A reta vermelha contém os parâmetros da calibração e pode ser representada pela equação $B = (31 \pm 6) + (1800 \pm 40)I$, com B em Gauss e a corrente elétrica I em Ampère. R^2 resultou em 0,99648.

Feita a calibração do solenoide, posicionamos o mesmo entre o polarizador e a cubeta apresentados na fig. 3.1. No centro do solenoide, inserimos o bastão cilíndrico de cristal de TGG. Aplicamos alguns valores de corrente no solenoide de forma que o campo B atuando sobre o cristal induzisse a atividade óptica. Os valores de B utilizados foram convertidos em rotação da polarização por meio da eq. (2.97), utilizando a constante de Verdet do TGG, de $0,2 \text{ min/G.cm}$ e o comprimento do bastão, de 2,005 cm. Para cada valor dessa rotação, determinamos o pixel da posição do mínimo de intensidades. A fig. 4.4 representa a relação entre o ângulo de rotação da polarização e a posição do mínimo de intensidade nesta calibração em que nos aproveitamos do efeito Faraday do TGG.

Na fig. 4.4, a curva vermelha é o ajuste que contém os parâmetros de calibração. Ela pode ser expressa pela equação $\alpha (^{\circ}) = (-4 \pm 2) + (0,45 \pm 0,08)P + (-0,0062 \pm 0,0007)P^2$, onde P é o pixel do mínimo e α é o ângulo de rotação da polarização. R^2 resultou em 0,99786.

Podemos comparar essa curva de calibração com a obtida na fig. 4.1. Inicialmente, podemos comparar diretamente as curvaturas das calibrações obtidas, ou seja, os coeficientes

que multiplicam P^2 . Observamos que os coeficientes tem a mesma ordem de grandeza mas a razão entre os mesmos é de cerca de 0,75. Para poder comparar o coeficiente linear das expressões de calibração, devemos notar que a coordenada da fig. 4.1 expressa a posição relativa do mínimo em relação à situação em que a cubeta é preenchida com água destilada, enquanto que a posição do mínimo na fig. 4.4 é a posição absoluta obtida no array de CCDs do nosso detector. Precisamos, portanto, fazer uma transformação que desloque a posição zero do eixo coordenado da fig. 4.4 de forma que este coincida com o zero das abscissas. Para isto, basta substituir P por $(P - 62,21)$ na expressão de calibração da curva vermelha da fig. 4.4. Com isso, o coeficiente linear nessa expressão fica igual a -0,32 que podemos comparar com o coeficiente linear da calibração da fig. 4.1, de -0,37. Novamente, observamos coeficientes de mesma ordem de grandeza, porém ligeiramente diferentes. Essas diferenças podem ser explicadas por pequenas alterações na montagem experimental, em particular as distâncias da CCD ao prisma semicilíndrico. O deslocamento em pixel da posição do mínimo depende diretamente dessa distância e da variação angular do mínimo de intensidades, como é discutido na seção 3.4.

Figura 4.4 – Rotação da polarização da luz imposta pelo cristal de TGG em função da posição do mínimo de intensidades. A curva vermelha é o ajuste parabólico que fornece os parâmetros da calibração.

Fonte: Elaborada pelo autor.

Os parâmetros das amostras produzidas para realizar as medidas se encontram na tabela 4.2. Novamente, medimos o brix em um refratômetro comercial para evitar erros de produção das amostras.

Tabela 4.2 - Brix e concentração das amostras de sacarose produzidas para medida na configuração experimental com laser como fonte de luz e cuja calibração é feita pela aplicação de campo indução magnética em um cristal de TGG.

Amostra	Concentração (g/ml)	Brix	Brix Refratômetro
1	0	0	0
2	0.0514	5.04	4.95
3	0.1046	10.06	9.87
4	0.1592	15.01	14.86
5	0.2162	19.99	19.75
6	0.2565	23.37	23.18
7	0.3390	30.04	29.85
8	0.4698	40.01	39.10
9	0.6166	50.01	50.15

Fonte: Elaborada pelo autor.

Preenchemos a cubeta com as amostras apresentadas na tabela 4.2 e armazenamos a posição do mínimo de intensidades. Esse valor foi convertido em ângulo de rotação da polarização de acordo com a calibração da fig. 4.4. Comparativamente, determinamos o valor esperado para a rotação da polarização de cada amostra considerando a equação (2.96). O gráfico apresentado na fig. 4.5 mostra a comparação entre os resultados encontrados e os previstos em teoria.

Figura 4.5 – Medida da rotação da polarização provocada pelas amostras da Tabela 4.2 em função da concentração. Os pontos vermelhos correspondem aos valores da rotação da polarização obtidos para cada amostra considerando-se a calibração feita com o cristal de TGG. Os pontos pretos são os valores esperados. A montagem experimental é esquematizada na fig. 3.1 com a adição de um solenoide e um bastão cilíndrico de TGG entre o polarizador de entrada e a cubeta.

Fonte: Elaborada pelo autor.

Esse resultado é discutido na seção seguinte.

4.1.3 Problemas e dificuldades

Nota-se claramente uma diferença nos valores medidos em relação aos valores esperados quando observamos os resultados apresentados nas figs. 4.2 e 4.5. Durante o desenvolvimento do projeto, um tempo considerável foi gasto obtendo resultados semelhantes aos dessas figuras. Outro tempo razoável foi utilizado no estudo e na busca das razões da discrepância das medidas quando comparadas ao valor esperado. Inicialmente alteramos o comprimento de onda da fonte utilizada. Fizemos as mudanças necessárias para comparação dos resultados obtidos com os valores esperados devido ao novo comprimento de onda utilizado. Ainda assim as discrepâncias se mantiveram. Fizemos vários ensaios sobre a estabilidade da posição do pixel do mínimo de intensidades. Preenchemos a cubeta com alguma das amostras (mais frequentemente com água destilada) e acompanhamos a dinâmica da posição do mínimo na CCD por tempos longos (da ordem de 4 horas). A fig. 4.6 é um gráfico da posição desse mínimo em função do tempo, exemplificando um desses estudos feitos.

Nesse gráfico, cada ponto leva em torno de 5 segundos para ser adquirido. Observamos que a posição do mínimo não se manteve constante. Em alguns momentos, essa posição apresentou um caráter oscilatório, como pode ser observado para tempos superiores a duas horas na fig. 4.6. Isso nos sugeriu que as discrepâncias nas medidas estivessem relacionadas a algum tipo de interferência. De fato, a olho nu era possível observar na CCD franjas de interferência no perfil de intensidades. Elas se originam das múltiplas reflexões nas paredes da cubeta e/ou do bastão de TGG. Isso se torna um problema porque as franjas de interferência alteram o perfil de intensidades, podendo causar mudanças na posição do mínimo na CCD. Essa mudança ocorre porque o programa desenvolvido em LabVIEW detecta a posição desse mínimo por meio de um ajuste polinomial dos pontos nas redondezas do valor de intensidade mais baixo. Uma alteração no perfil de intensidades causa uma alteração no ajuste polinomial, o que pode acarretar em uma mudança no valor detectado.

Outro fator ligado à alteração do perfil de intensidades na CCD está relacionado à luz refletida de volta à cavidade do laser. Essa retroalimentação pode causar uma alteração na dinâmica da emissão estimulada, resultando em uma alteração no perfil do feixe laser emitido. Novamente, isso pode acarretar em uma instabilidade na posição do mínimo de intensidades detectado na CCD. A partir dessas considerações, decidimos mudar a fonte de luz.

Figura 4.6 – Estudo da posição do mínimo em função do tempo com amostra fixa na configuração com laser como fonte de luz.

Fonte: Elaborada pelo autor.

4.2 Medidas na configuração utilizando LED como fonte de luz

Passamos então a utilizar um LED amarelo como fonte de luz. Sua luz não é coerente e, portanto, não apresenta efeitos de interferência dentro das dimensões do nosso experimento. Também alteramos a posição da cubeta para depois da reflexão na base do prisma por conveniência na construção de um aparato de dimensões reduzidas. Como visto no capítulo 2 deste texto, essa alteração não modifica a expressão do perfil de intensidades transmitido pelo analisador. Utilizando agora a configuração esquematizada na fig. 3.2, fizemos a calibração do experimento e a medida da amostra padrão utilizando soluções de sacarose e frutose.

4.2.1 Calibração e medida utilizando amostras de sacarose

A produção das amostras, a calibração e a medida foram feitas de acordo com o explicitado na seção 3.3.2. Os brix e as concentrações das amostras de sacarose produzidas encontram-se na tabela 4.3, bem como o brix das amostras medido no refratômetro comercial. A última coluna mostra o valor esperado para a rotação da polarização imposta pelas amostras à luz linearmente polarizada considerando o valor da rotação específica da sacarose como $[\alpha]_D^{20} = +66,37^\circ$ ⁵⁸ e um caminho óptico de 10 mm.

Tabela 4.3 – Brix e concentração das amostras de sacarose produzidas para a calibração e medida na montagem experimental que utiliza um LED como fonte de luz.

Amostra	Concentração (g/ml)	Brix	Brix Refratômetro	Ângulo de rotação esperado (°)
1	0	0	0	0
2	0,0512	5,04	5,02	0,34
3	0,1034	9,98	10,07	0,69
4	0,1505	14,98	14,93	1,05
5	0,2151	19,99	19,97	1,43
6	0,2742	25,01	24,96	1,80
7	0,3354	29,99	29,95	2,22
NORMAL	0,2596	23,67	23,63	1,71

Fonte: Elaborada pelo autor.

A fig. 4.7 mostra o gráfico da rotação da polarização da luz linearmente polarizada, em graus, em função da posição relativa do mínimo de intensidades, em pixel. A calibração é feita utilizando o ângulo de rotação esperado para as amostras numeradas de 1 a 7 e os testes de precisão e exatidão são feitos utilizando a amostra normal. Nesta figura, os pontos pretos representam as amostras utilizadas para a calibração. A reta vermelha representa o ajuste utilizado como calibração. O ponto vermelho representa a amostra normal. Este ponto é posicionado no gráfico da seguinte forma: a cubeta é preenchida com a amostra normal e a posição relativa do mínimo, P , é detectada; o ângulo de rotação da polarização esperado para a amostra normal, α , é relacionado a essa posição e o ponto vermelho de coordenadas (P, α) é posicionado no gráfico. Desta forma, quanto maior a coincidência do ponto vermelho com a reta de calibração, mais exata é a medida.

Neste gráfico podemos observar que a curva de calibração é representada por uma reta crescente do ângulo de rotação da polarização (ou da concentração das amostras) em função do pixel do mínimo de intensidades. A natureza crescente pode ser explicada pela escolha do eixo de transmissão dos polarizadores. Essa escolha possibilitou um deslocamento positivo em pixel para soluções de substâncias dextróginas, como a sacarose. Isso significa que a rotação da polarização gerada pelas amostras de sacarose corresponde a um α positivo, como pode ser observado na fig. 2.20. O caráter linear pode ser explicado pelas distâncias reduzidas entre os componentes na montagem experimental e pela colimação imperfeita da luz da fonte. Uma vez que o deslocamento do mínimo em ângulo é reduzido, o deslocamento em distância (ou em pixel) pode ser aproximado por uma reta.

Figura 4.7 – Rotação da polarização da luz imposta pelas soluções de sacarose em função da posição do mínimo de intensidades relativa à situação onde a cubeta de 1 cm de comprimento é preenchida com água destilada. Os pontos pretos numerados de 1 a 7 representam as soluções preparadas nas proporções 0, 5, 10, 15, 20, 25 e 30% (m/m), respectivamente, e são usados para calibrar o sistema. A linha vermelha representa o ajuste linear feito utilizando os pontos pretos e fornece os parâmetros de calibração. O ponto vermelho representa a solução normal (0,26 g/cm³) e é usado para testar a precisão e exatidão do sistema.

Fonte: Elaborada pelo autor.

O ajuste da calibração nos permite obter uma reta relacionando o ângulo de rotação da polarização em graus, Y , com o pixel do mínimo de intensidades, X . Essa reta pode ser representada pela expressão $Y = (0,01 \pm 0,02) + (0,624 \pm 0,009)X$, com $R^2=0,9984$. Por meio dessa calibração, utilizando o pixel associado à amostra normal no gráfico, obtém-se uma rotação da polarização causada por esta amostra de 1,71°, que concorda com o valor esperado, mostrado na tabela 4.3. A precisão do experimento é de 0,04° e é obtida calculando-se o desvio padrão de medidas sucessivas utilizando a amostra normal.

É importante salientar que, em nosso experimento, observamos uma limitação nos valores de α . Como é possível observar pela fig. 2.19, um incremento no valor de α produz um alargamento no vale do mínimo de intensidades. Para valores suficientemente grandes de α (acima de 5°), observamos que a distorção da região do mínimo fazia com que a posição do mínimo não pudesse ser determinada em nosso experimento. Contornamos este problema naturalmente ao utilizar uma cubeta de comprimento reduzido, pois a rotação do plano de polarização da luz linearmente polarizada é diretamente proporcional à distância percorrida pela luz no interior da amostra opticamente ativa.

4.2.2 Calibração e medida utilizando amostras de frutose

De forma análoga, produzimos amostras de solução de frutose. Os brix, concentrações das amostras e os brix medidos no refratômetro comercial são apresentados na tabela 4.4. A última coluna mostra o valor esperado para a rotação da polarização imposta pelas amostras à luz linearmente polarizada considerando o valor da rotação específica da frutose como $[\alpha]_D^{20^\circ} = -92,4^\circ$ ⁵⁹ e um caminho óptico de 10 mm.

Tabela 4.4 - Brix e concentração das amostras de frutose produzidas para a calibração e medida na montagem experimental que utiliza um LED como fonte de luz.

Amostra	Concentração (g/ml)	Brix	Brix Refratômetro	Ângulo de rotação esperado (°)
1	0	0	0	0
2	0,0515	5,03	4,99	-0,47
3	0,1043	10,02	9,98	-0,95
4	0,1603	15,03	15,01	-1,46
5	0,2169	20,04	20,01	-1,97
6	0,2772	25,01	24,99	-2,51
7	0,3387	30,04	29,99	-3,08
NORMAL	0,2609	23,69	23,67	-2,38

Fonte: Elaborada pelo autor.

Novamente, como podemos observar, os brix medidos no refratômetro comercial condizem com os obtidos no processo de produção das amostras.

Por meio do processo de calibração e medida, obtivemos o pixel relativo do mínimo de intensidades para cada uma das amostras. A fig. 4.8 representa o gráfico da calibração e medida da amostra teste, relacionando o ângulo de rotação da polarização linear com o pixel relativo do mínimo detectado na CCD. Os pontos pretos são as amostras de 1 a 7, o ponto vermelho representa a amostra normal e a linha vermelha é a curva de calibração ajustada a partir dos pontos pretos.

Observamos nesse gráfico que a rotação da polarização é uma função crescente do pixel do mínimo do perfil de intensidades. Já a concentração das amostras de frutose é uma função decrescente da posição relativa do mínimo. Isso pode ser explicado pelo fato de a frutose possuir uma rotação específica negativa, ou seja, por ser levógira. Desta forma, o deslocamento do mínimo em função da concentração se dará para o lado oposto ao que se observa para a sacarose, uma vez que os eixos de transmissão dos polarizadores foram

mantidos iguais nas duas situações. É importante notar que, em nossa configuração, a frutose causa uma rotação na polarização da luz que corresponde a um α negativo, ou seja, para o lado de maior deslocamento do mínimo de intensidades, como vemos na fig. 2.20. Além disso, o módulo da rotação específica da frutose é maior que o da sacarose. Esta possui rotação específica $[\alpha]_D^{20} = +66,37^\circ$ enquanto aquela apresenta $[\alpha]_D^{20} = -92,4^\circ$ ⁵⁸⁻⁵⁹ o que resulta em valores maiores de $|\alpha|$ para uma amostra de frutose em comparação com uma de sacarose de mesma concentração. Como consequência disso, observamos um maior módulo do deslocamento relativo do mínimo para a solução levógira em relação à dextrógira. O caráter linear da calibração pode ser explicado novamente pelas dimensões reduzidas do experimento e pela colimação imperfeita da luz proveniente do LED.

Figura 4.8 – Rotação da polarização da luz imposta pelas soluções de frutose como função da posição do mínimo de intensidades relativa à situação em que a cubeta de 1 cm de comprimento é preenchida com água destilada. Os pontos pretos representam as soluções preparadas nas proporções de 0, 5, 10, 15, 20, 25 e 30% (m/m) e são usadas para calibrar o sistema. A linha vermelha representa o ajuste linear feito utilizando os pontos pretos e fornece os parâmetros de calibração. O ponto vermelho representa a solução normal (0,26 g/cm³) e é usada para testar a precisão e exatidão das medidas nesse sistema.

Fonte: Elaborada pelo autor.

A curva vermelha obtida na fig. 4.8 relaciona a rotação da polarização, Y , e a posição relativa do pixel do mínimo de intensidades, X , por meio de uma reta dada pela expressão $Y = (0,04 \pm 0,02) + (0,689 \pm 0,009)X$, com $R^2 = 0,999$. Usando essa reta como calibração, as medidas sucessivas da posição relativa do mínimo quando a cubeta é preenchida com a amostra normal revelam um ângulo de rotação médio de $-2,37^\circ$, confirmando a previsão da tabela 4.4. A precisão do experimento é de $0,04^\circ$. A mesma limitação para os valores de α observada na subseção 4.2.1 foi constatada no experimento utilizando amostras de frutose.

4.3 Estudo da dinâmica da posição do mínimo como função da temperatura

Para o estudo da dinâmica da posição do mínimo de intensidades como função da temperatura, procedemos conforme explicitado na seção 3.4. Mantivemos a montagem experimental que utiliza o LED como fonte de luz. Preenchemos a cubeta com água destilada de forma a não produzir rotação da polarização da luz incidente. Acoplamos um termopar à lente semicilíndrica e observamos o comportamento da temperatura em função do tempo, além da posição do mínimo de intensidades. Um par de gráficos típicos da posição do mínimo e da temperatura em função do tempo é apresentado na fig. 4.9.

Figura 4.9 – (a) Temperatura obtida por meio do termopar como função do tempo. (b) Posição do mínimo de intensidades obtido pelo programa em LabVIEW como função da temperatura. A linha vermelha representa um ajuste parabólico que serve de guia para a análise da posição média do mínimo de intensidades.

Fonte: Elaborada pelo autor.

Como podemos observar nos gráficos, há uma oscilação da ordem de $0,3^{\circ}\text{C}$ na temperatura em intervalos de aproximadamente 40 minutos. Essa oscilação pode ser atribuída ao sistema de refrigeração do laboratório. O aparelho de ar condicionado é ligado e, quando o ambiente alcança certa temperatura, o mesmo é desligado automaticamente e fica em modo de espera. Quando a temperatura sobe e alcança um determinado valor, o aparelho volta a ligar para fazer com que a temperatura abaixe novamente para o valor pré-estabelecido.

Observamos também que a posição do mínimo em pixel possui um comportamento oscilatório, com variações na posição da ordem de 2×10^{-2} pixels, apresentando picos cujos instantes coincidem com os da temperatura. Isso é um forte indício de que de fato há uma dependência da posição do mínimo de intensidades com a temperatura em nossa montagem experimental. Além de apresentar picos, a dinâmica temporal da posição do mínimo de intensidades também apresenta um deslocamento da posição média do mínimo, como mostra a linha vermelha no gráfico da fig. 4.9 - (b).

Na seção 3.4 estimamos uma variação em pixel da posição do mínimo devido à variação da temperatura considerando somente o efeito do coeficiente termo-óptico do vidro. Vimos que, para uma variação de temperatura da ordem de 1°C , o deslocamento do mínimo é da ordem de 7×10^{-3} pixels. Portanto, para uma variação de $0,3^{\circ}\text{C}$ na temperatura, o deslocamento do mínimo é de aproximadamente 2×10^{-3} pixels, ou seja, uma ordem de grandeza menor que a oscilação obtida experimentalmente. Além disso, o deslocamento da posição média do mínimo de intensidades não era previsto em nossas estimativas. Concluimos então que o efeito da mudança do índice de refração do vidro devido à variação da temperatura não é suficiente para explicar as mudanças vistas na posição do mínimo.

Oscilações mecânicas e a expansão térmica dos materiais utilizados na montagem podem explicar as discrepâncias entre os dados obtidos e a dinâmica da posição do mínimo esperada. Essas instabilidades provocam um desalinhamento do sistema fazendo com que a luz proveniente do LED incida na superfície de entrada da lente semicilíndrica em uma posição e ângulo diferente da incidência normal. Essa situação é esquematizada na fig. 4.10. Nela, são representados a lente semicilíndrica, a CCD e dois raios de luz (omitimos os polarizadores e a cubeta).

Figura 4.10 – Figura esquemática do efeito do desalinhamento do sistema. Quando o feixe provindo do LED é desalinhado, a posição do mínimo de intensidades é deslocada de uma distância D que depende dos índices de refração do vidro e do ar, da amplitude do desalinhamento e da distância da CCD ao prisma.

Fonte: Elaborada pelo autor.

O raio verde representa a luz que atravessa a superfície cilíndrica da lente num ângulo reto com a mesma e incide na superfície plana formando um ângulo igual ao ângulo crítico. Esse raio é captado pela CCD no ponto de mínimo de intensidades. Quando o feixe proveniente do LED é deslocado de uma distância y da posição original, somente um raio que incide num certo ângulo θ_2 com a superfície cilíndrica da lente irá atingir a face plana com um ângulo θ_c e, portanto, terá intensidade nula após a reflexão e subsequente transmissão pelo analisador. Esse feixe é representado em amarelo na fig. 4.10 e é detectado na CCD a uma distância D da posição em que o feixe verde é detectado. Não é difícil mostrar que D depende da distância, d , entre a CCD e o prisma, do deslocamento y e dos índices de refração do vidro, n_1 , e do ar, n_2 , da seguinte forma:

$$D = y - d \tan(\theta_2 - \theta_1) \quad (4.1)$$

Nessa expressão, os ângulos θ_1 e θ_2 são tais que:

$$\sin \theta_1 = \frac{y}{R} \quad (4.2)$$

$$\sin \theta_2 = \frac{y}{nR} \quad (4.3)$$

onde R é o raio do prisma semicilíndrico e $n = n_2/n_1$ é o índice de refração relativo, definido na subseção 2.8.1. A equação (4.3) é obtida utilizando-se a lei de Snell, eq. (2.57), para a refração que ocorre na interface de entrada do prisma semicilíndrico. Se o desalinhamento é pequeno, podemos fazer algumas aproximações na eq. (4.1) pela expansão em série de potências até a primeira ordem da tangente e do seno para ângulos pequenos:

$$\tan \theta \approx \sin \theta \approx \theta \quad (4.4)$$

Utilizando essa aproximação e substituindo as equações (4.2) e (4.3) na (4.1), encontramos uma expressão aproximada para D :

$$D \approx y - d \frac{y}{R} \left(\frac{1-n}{n} \right) \quad (4.5)$$

Para os valores típicos de nosso experimento ($d \cong 10 \text{ cm}$, $R = 10 \text{ mm}$, $n \cong 1/1,72$), obtemos uma distância D em função de y que, em módulo, é dado por $|D| \cong 10y$. Uma vez que a distância entre os pixels da CCD é da ordem de $40 \mu\text{m}$, basta um desalinhamento y de aproximadamente $0,2 \mu\text{m}$ para provocar o desvio total da posição média do mínimo de intensidades observado na fig. 4.9-(b). Utilizando o coeficiente de expansão térmica linear do alumínio, $\alpha = 22,2 \times 10^{-6}/^\circ\text{C}$,⁵⁸ uma variação da temperatura de $0,3^\circ\text{C}$ causa uma dilatação de aproximadamente $0,1 \mu\text{m}$ no raio do suporte que prende o prisma. Como o coeficiente de expansão térmica do SF10 é menor que o do alumínio, $\alpha = 7,6 \times 10^{-6}/^\circ\text{C}$,⁵⁴ a diferença nas expansões do vidro e do alumínio pode causar um desalinhamento da ordem do observado no experimento.

5 Conclusões

Neste trabalho apresentamos uma nova técnica para a medida da rotação da polarização da luz provocada por uma solução de substância opticamente ativa aplicada para a medida da concentração dessa substância. Desenvolvemos os fundamentos teóricos baseando-se em conceitos simples e bem estabelecidos do eletromagnetismo. Propusemos duas montagens experimentais utilizando um laser como fonte de luz. Essas montagens tinham em comum um polarizador, uma cubeta de 1 cm, uma lente semicilíndrica, um analisador e um detector. Adicionamos um solenoide e um bastão cilíndrico de TGG em uma das montagens para efetuar uma calibração aproveitando-se do efeito Faraday. Essas montagens não apresentaram resultados satisfatórios devido à coerência da luz laser que causou interferências devido às múltiplas reflexões nas paredes da cubeta e/ou do cristal de TGG.

Propusemos e demonstramos um experimento para a utilização da técnica com uma fonte de luz de banda larga. A montagem experimental anterior foi aproveitada (sem o solenoide e o bastão cilíndrico) e substituímos a fonte de luz por um LED. Realizamos a calibração com amostras de sacarose e frutose. Escolhemos os eixos de transmissão dos polarizadores de entrada e saída tais que as amostras de sacarose produzem rotação do plano de polarização com sinal positivo nas eqs. (2.85) e (2.86). Já as de frutose causam α negativos. Observamos que as calibrações resultaram em funções lineares do ângulo de rotação em função da posição do mínimo. O resultado esperado seriam curvas não lineares, de acordo com a fig. 2.20. Acreditamos que a divergência no feixe de luz proveniente do LED devido à colimação não perfeita e as dimensões reduzidas do experimento são suficientes para explicar essa discrepância. Podemos justificar a diferença nos coeficientes angulares das retas de calibração obtidas (figs. 4.4 e 4.5) analisando a fig. 2.20 aliada à diferença na rotação específica da sacarose e da frutose: a região de α negativo possui maior deslocamento da posição do mínimo que o intervalo para α positivo. Efetuamos a medida da concentração de uma amostra de 0,26 g/ml, utilizando a montagem desenvolvida. Os resultados foram satisfatórios e a precisão obtida foi de $0,04^\circ$, que é uma ordem de grandeza inferior comparada a alguns aparelhos comerciais. Se convertida em concentração de sacarose, de acordo com a eq. (2.96), essa precisão corresponde a 0,001 g/ml. Apesar disso, essa resolução é suficiente para as aplicações usuais na indústria sucroalcooleira e exigências do Conselho de Produtores de Cana-de-açúcar (Consecana).⁸ Ademais, o custo dos componentes é bastante inferior ao dos aparelhos comerciais e sua montagem é mais simples, não necessitando de componentes caros e de maior complexidade, como lock-ins, retardadores, moduladores e outros prismas

para separação de componentes s e p da luz. Para efeito de comparação, o custo máximo da montagem experimental produzida é de cerca de R\$ 300,00 enquanto que um aparelho comercial de alta precisão e resolução, com controles de temperatura e opções de comprimento de onda tem custo de aproximadamente R\$ 50.000,00. Devido à distorção do perfil de intensidades com o incremento de $|\alpha|$, como podemos observar na fig. 2.19, a técnica permite a medida de valores de α menores que 5° . Contornamos essa limitação utilizando uma cubeta de caminho óptico menor (1 cm) quando comparada às células utilizadas em aparelhos comerciais (10 cm ou 20 cm). Isso contribui para a redução no tamanho de um possível aparelho a ser construído. Apesar da precisão intrínseca do método utilizando Laser ser maior (pois o mínimo de intensidades é melhor definido com luz monocromática), devido a problemas experimentais os resultados obtidos com LED foram melhores. Esta técnica ainda pode ser usada para a identificação e separação de amostras opticamente ativas dextrógiras e levógiras em outras áreas como, por exemplo, na indústria farmacêutica.

Observamos algumas dificuldades experimentais devido à dependência da posição do mínimo de intensidade com a temperatura, tanto devido ao coeficiente termo óptico da lente semicilíndrica quanto à dilatação térmica dos componentes. Alguns procedimentos podem ser realizados para a melhoria da precisão das medidas da montagem proposta. Entre elas encontram-se a utilização de materiais com coeficientes de expansão térmica aproximadamente iguais para evitar o desalinhamento do sistema; a melhoria da colimação da luz da fonte de banda larga; a substituição dos polarizadores comuns de plástico por polarizadores de melhor qualidade. Podemos ainda realizar medidas comparativas entre nossa montagem e um aparelho comercial e submeter a técnica ao processo de validação pelos órgãos de medição responsáveis da área.

Referências

- 1 LYLE, R. E.; LYLE, G. G. A brief history of polarimetry. **Journal of Chemical Education**, v. 41, n. 6, p. 308, 1964.
- 2 CLARKE, David. **Stellar polarimetry**. New York: John Wiley & Sons, 2009.
- 3 WHITTAKER, E. T. **A history of the theories of aether and electricity from the age of Descartes to the close of the nineteenth century**. New York: Longmans, Green and Company, 1910.
- 4 BUCHWALD, J. Z. **The rise of the wave theory of light: optical theory and experiment in the early nineteenth century**. Chicago: Chicago University Press, 1989.
- 5 MASON, S. F. Optical rotatory power. **Quarterly Reviews Chemical Society**, v. 17, n. 1, p. 20-66, 1963.
- 6 LAND, E. H. Some aspects of the development of sheet polarizers. **Journal of the Optical Society of America**, v. 41, n. 12, p. 957-963, 1951.
- 7 JASCO. Digital polarimeter. Disponível em: <http://www.jascoinc.com/spectroscopy/digital-polarimeter>. Acesso em: 25 ago.2016.
- 8 CONSELHO DOS PRODUTORES DE CANA-DE-AÇÚCAR, AÇÚCAR E ÁLCOOL DO ESTADO DE SÃO PAULO – CONSECANA. **Manual de instruções**. 5. ed. Piracicaba: CONSECANA, 2006. Disponível em: <http://www.orplana.com.br/manual_2006.pdf>. Acesso em: 23 jan. 2015.
- 9 ALVES, F. V. **Interferência do amido e da dextrana nas análises tecnológicas do caldo de cana-de-açúcar**. 2012. 107 p. Dissertação (Mestrado em Ciência e Tecnologia de Alimentos) – Escola Superior de Agricultura Luiz de Queiroz, Universidade de São Paulo, Piracicaba, 2012.
- 10 UNITED STATES DEPARTMENT OF AGRICULTURE – USDA. **Technical procedures manual**. 2013. 169 p. Disponível em: <<https://www.ams.usda.gov/sites/default/files/media/TechnicalProceduresManual%5B1%5D.pdf>>. Acesso em: 23 jan. 2015.
- 11 MATHLOUTHI, M.; REISER, P. **Sucrose: properties and applications**. London : Blackie Academic & Professional, 1995.
- 12 BOWEN, J. M.; PURDIE, N. Determination of cocaine by circular dichroism spectropolarimetry. **Analytical Chemistry**, v. 53, n. 14, p. 2237-2239, 1981.
- 13 YANG, S. K. Racemization and stereoselective alcoholysis of temazepam. **Chirality**, v. 11, n. 3, p. 179-186, 1999.

- 14 JOHNSTON, M J.; NEMR, K.; HEFFORD, M. A. Influence of bovine serum albumin on the secondary structure of interferon alpha 2b as determined by far UV circular dichroism spectropolarimetry. **Biologicals**, v. 38, n. 2, p. 314-320, 2010.
- 15 ROSSI, S. et al. Specific anion effects on the optical rotation of α -amino acids. **Journal of Physical Chemistry B**, v. 111, n. 35, p. 10510-10519, 2007.
- 16 PECUL, M. et al. Conformational effects on the optical rotation of alanine and proline. **Journal of Physical Chemistry A**, v. 108, n. 19, p. 4269-4276, 2004.
- 17 WNENDT, S.; ZWINGENBERGER, K. Thalidomide's chirality. **Nature**, v. 385, p. 303-304, 1997. doi:10.1038/385303b0.
- 18 REES, M. J. Expected polarization properties of binary X-ray sources. **Monthly Notices of the Royal Astronomical Society**, v. 171, n. 3, p. 457-465, 1975.
- 19 LIGHTMAN, A. P.; SHAPIRO, S. L. Spectrum and polarization of x-rays from accretion disks around black holes. **Astrophysical Journal**, v. 198, pt. 2, p. L73-L75, 1975. doi: 10.1086/181815.
- 20 PEREYRA, A.; MAGALHÃES, A. M. Polarimetry toward the IRAS Vela shell. II. Extinction and magnetic fields. **Astrophysical Journal**, v. 662, n. 2, p. 1014, 2007.
- 21 RODRIGUES, C. V. et al. Optical polarization and near-infrared photometry of the proto-planetary nebula henize 3-1475 based on observations made at Laboratório Nacional de Astrofísica/MCT, Brazil. **Astrophysical Journal**, v. 587, n. 1, p. 312, 2003.
- 22 DOMINICI, T. P.; ABRAHAM, Z.; GALO, A. L. Optical and near-infrared simultaneous observations of the BL Lacs PKS 2005-489 and PKS 2155-304. **Astronomy & Astrophysics**, v. 460, n. 3, p. 665-672, 2006.
- 23 ZHOU, G. X.; SCHMITT, J. M.; ELLICOTT, C. E. Sensitive detection of optical rotation in liquids by reflection polarimetry. **Review of Scientific Instruments**, v. 64, n. 10, p. 2801-2807, 1993.
- 24 BOBBITT, D. R.; YEUNG, E. S. Improvements in detectabilities in polarimeters using high-frequency modulation. **Applied Spectroscopy**, v. 40, n. 3, p. 407-410, 1986.
- 25 STEINBACHER, A. et al. Precise and rapid detection of optical activity for accumulative femtosecond spectroscopy. **Optics Express**, v. 20, n. 11, p. 11838-11854, 2012.
- 26 FENG, C-M. et al. A true phase sensitive optical heterodyne polarimeter on glucose concentration measurement. **Optics Communications**, v. 141, n. 5, p. 314-321, 1997.
- 27 LIN, J-Y.; CHEN, K-H.; SU, D-C. Improved method for measuring small optical rotation angle of chiral medium. **Optics Communications**, v. 238, n. 1, p. 113-118, 2004.
- 28 CHOU, C. et al. A phase sensitive optical rotation measurement in a scattered chiral medium using a Zeeman laser. **Optics Communications**, v. 230, n. 4, p. 259-266, 2004.

- 29 LIN, J-Y. Determination of the refractive index and the chiral parameter of a chiral solution based on chiral reflection equations and heterodyne interferometry. **Applied optics**, v. 47, n. 21, p. 3828-3834, 2008.
- 30 LIN, J-Y.; CHEN, K-H.; CHEN, J-H. Optical method for measuring optical rotation angle and refractive index of chiral solution. **Applied optics**, v. 46, n. 33, p. 8134-8139, 2007.
- 31 RICE, P. D. et al. Specific rotation measurements from peak height data, with a Gaussian peak model. **Talanta**, v. 36, n. 4, p. 473-478, 1989.
- 32 KING, T. W. et al. Multispectral polarimetric glucose detection using a single Pockels cell. **Optical Engineering**, v. 33, n. 8, p. 2746-2753, 1994.
- 33 GILLHAM, E. J. A high precision photoelectric polarimeter. **Journal of Scientific Instruments**, v. 34, n. 11, p. 435-439, 1957.
- 34 BORNHOP, D. J.; HANKINS, J. Polarimetry in capillary dimensions. **Analytical Chemistry**, v. 68, n.10, p. 1677-1684, 1996.
- 35 CALLEJA-AMADOR, C. et al. Novel spectropolarimeter employing fixed polarizers for the determination of optically active samples. **Applied Spectroscopy**, v. 62, n. 4, p. 402-413, 2008.
- 36 KRAFTMAKHER, Y. Measurement of small optical polarization rotations. **European Journal of Physics**, v. 30, n. 2, p. 271-276, 2009.
- 37 RIBEIRO, L. P. D.; ROHWEDDER, J. J. R.; PASQUINI, C. A new approach to polarimetric measurements based on birefringent crystals and diode lasers. **Analytica Chimica Acta**, v. 771, p. 1-6, 2013. doi: 10.1016/j.aca.2013.02.015.
- 38 BURNETT, J. H.; GUPTA, R.; GRIESMANN, U. Absolute refractive indices and thermal coefficients of CaF₂, SrF₂, BaF₂, and LiF near 157 nm. **Applied Optics**, v. 41, n. 13, p. 2508-2513, 2002.
- 39 GUPTA, R. et al. Absolute refractive indices and thermal coefficients of fused silica and calcium fluoride near 193 nm. **Applied Optics**, v. 37, n. 25, p. 5964-5968, 1998.
- 40 LUNA-MORENO, D. et al. Refractive index measurement of pure and Er³⁺-doped ZrO₂-SiO₂ sol-gel film by using the Brewster angle technique. **Optical Materials**, v. 19, n. 2, p. 275-281, 2002.
- 41 SCHUTZMANN, S. et al. Refractive index measurements of thin films using both Brewster and m-line technique: a combined experimental setup. **Journal of Non-Crystalline Solids**, v. 351, n. 21-23, p. 1814-1818, 2005.
- 42 HORI, Y. et al. High-accuracy interferometer with a prism pair for measurement of the absolute refractive index of glass. **Applied Optics**, v. 48, n. 11, p. 2045-2050, 2009.
- 43 ALBERT Abraham Michelson. Disponível em: <<http://www.aip.org/history/gap/Michelson/Michelson.html>>. Acesso em: 01 set. 2016.

- 44 LI, H.; XIE, S. Measurement method of the refractive index of biotissue by total internal reflection. **Applied Optics**, v. 35, n. 10, p. 1793-1795, 1996.
- 45 MEETEN, G. H.; NORTH, A. N. Refractive index measurement of absorbing and turbid fluids by reflection near the critical angle. **Measurement Science and Technology**, v. 6, n. 2, p. 214, 1995.
- 46 SONG, Q. W. et al. Modified critical angle method for measuring the refractive index of bio-optical materials and its application to bacteriorhodopsin. **Journal of the Optical Society of America B**, v. 12, n. 5, p. 797-803, 1995.
- 47 ZILIO, S. C. A simple method to measure critical angles for high-sensitivity differential refractometry. **Optics Express**, v. 20, n. 2, p. 1862-1867, 2012.
- 48 A. J. Werner. Methods in high precision refractometry of optical glasses. **Applied Optics**, v. 7, n. 5, p. 837-844, 1968.
- 49 FOWLES, G. R. **Introduction to modern optics**. New York: Dover Publications, 2012.
- 50 BORN, M.; WOLF, E. **Principles of optics**. Cambridge: Oxford University Press, 1964.
- 51 REITZ, J. R.; MILFORD, F. J.; CHRISTY, R. W. **Foundations of electromagnetic theory**. Minnesota: Addison-Wesley Inc., 1979.
- 52 WANGSNESS, R. K. **Electromagnetic fields**. Michigan: Wiley, 1986.
- 53 ZILIO, S. C. **Óptica moderna**. São Carlos: Instituto de Física de São Carlos, 2009.
- 54 SCHOTT. Optical glass data sheets. Disponível em: <http://www.schott.com/advanced_optics/english/download/schott-optical-glass-collection-datasheets-july-2015-eng.pdf>. Acesso em: 01 set. 2016.
- 55 OPTICAL constants of SF10. Disponível em: <<http://refractiveindex.info/>>. Acesso em: 18 nov. 2015.
- 56 MOFFITT, W. et al. Structure and the optical rotatory dispersion of saturated ketones. **Journal of the American Chemical Society**, v. 83, n. 19, p. 4013-4018, 1961.
- 57 NUSSENZVEIG, H. M. **Curso de física básica: ótica, relatividade, física quântica**. Rio de Janeiro: Edgar Blücher, 1998.
- 58 LIDE, D.R., **CRC handbook of chemistry and physics**. Florida: CRC Press, 2005.
- 59 TSUZUKI, Y.; YAMAZAKI, J.; KAGAMI, K. The specific rotation of fructose. **Journal of the American Chemical Society**, v. 72, n. 3, p. 1071-1073, 1950.
- 60 OPTICAL constants of SF10. Disponível em: <<http://refractiveindex.info/>>. Acesso em: 18 nov. 2015.

APÊNDICE A – As relações vetoriais, a notação de Einstein e o tensor de Levi Civita

A.1 Definições básicas

Para facilitar a demonstração de relações vetoriais utilizadas no presente texto, é conveniente definirmos as operações em termos de somatórias. Uma simplificação a ser feita consiste em utilizarmos a Notação de Einstein. Por essa notação, a somatória fica implícita pela existência de duas grandezas com índice repetido. Com isso omite-se o símbolo de somatória em todas as operações. Outra simplificação que pode ser feita está relacionada à nomenclatura das variáveis espaciais (x,y,z) que substituiremos pelos algarismos (1,2,3). Desta forma, por exemplo, o produto escalar entre dois vetores $\vec{A}$ e $\vec{B}$ pode ser escrito como:

$$\vec{A} \cdot \vec{B} = A_1 B_1 + A_2 B_2 + A_3 B_3 = \sum_{i=1}^3 A_i B_i = A_i B_i \quad (\text{A.1})$$

Nessa expressão, o último termo representa o produto escalar dos dois vetores ao utilizarmos as simplificações da Notação de Einstein e a nova nomenclatura das variáveis espaciais.

Para definir o produto vetorial em termos das componentes e de somatórias, primeiramente vamos definir o Tensor de Levi Civita, ε_{ijk} :

$$\varepsilon_{ijk} = \begin{cases} 1, & \text{se } (i, j, k) = (1, 2, 3) \text{ ou } (2, 3, 1) \text{ ou } (3, 1, 2) \\ -1, & \text{se } (i, j, k) = (3, 2, 1) \text{ ou } (2, 1, 3) \text{ ou } (1, 3, 2) \\ 0, & \text{se } i = j \text{ ou } j = k \text{ ou } i = k \end{cases} \quad (\text{A.2})$$

Duas propriedades importantes desse tensor são expressas por:

$$\varepsilon_{ijk} = \varepsilon_{jki} = \varepsilon_{kij} = -\varepsilon_{ikj} = -\varepsilon_{kji} = -\varepsilon_{jik} \quad (\text{A.3})$$

$$\varepsilon_{ijk} \varepsilon_{kmn} = \delta_{im} \delta_{jn} - \delta_{in} \delta_{jm} \quad (\text{A.4})$$

Na (A.4), δ_{ab} é chamada Delta de Kronecker e vale 1 quando $a = b$ ou 0 quando $a \neq b$. Ou seja, para uma grandeza arbitrária que expressaremos por F_a , a somatória do produto da Delta de Kronecker por F_a resulta em:

$$F_a \delta_{ab} = F_b \quad (\text{A.5})$$

Vamos agora recordar a definição do produto vetorial entre dois vetores $\vec{A}$ e $\vec{B}$:

$$\vec{A} \times \vec{B} = \hat{x}(A_2 B_3 - A_3 B_2) + \hat{y}(A_3 B_1 - A_1 B_3) + \hat{z}(A_1 B_2 - A_2 B_1) \quad (\text{A.6})$$

Utilizando o Tensor de Levi Civita, não é difícil notar que podemos escrever o produto vetorial $\vec{A} \times \vec{B}$ como:

$$\vec{A} \times \vec{B} = \sum_{i=1}^3 \sum_{j=1}^3 \sum_{k=1}^3 \hat{x}_i \varepsilon_{ijk} A_j B_k = \hat{x}_i \varepsilon_{ijk} A_j B_k \quad (\text{A.7})$$

em que $\hat{x}_i$ é o versor que dá a direção da coordenada espacial i , ou seja, $\hat{x}_1 = \hat{x}$, $\hat{x}_2 = \hat{y}$, $\hat{x}_3 = \hat{z}$. O último termo é escrito considerando-se a Notação de Einstein. Para demonstrar algumas propriedades, convém trabalhar somente com a componente i do produto vetorial. Esta pode ser escrita da seguinte forma:

$$(\vec{A} \times \vec{B})_i = \varepsilon_{ijk} A_j B_k \quad (\text{A.8})$$

Por fim, vamos definir as operações vetoriais que envolvem diferenciação, tais como o gradiente de um escalar f , o divergente e o rotacional de um vetor $\vec{A}$. Simplificaremos aqui o símbolo da derivação em relação à variável espacial x_i fazendo a substituição $\frac{\partial}{\partial x_i} = \partial_i$. Desta forma, as operações podem ser escritas como:

$$(\nabla f)_i = \partial_i f \quad (\text{A.9})$$

$$\nabla \cdot \vec{A} = \partial_i A_i \quad (\text{A.10})$$

$$(\nabla \times \vec{A})_i = \varepsilon_{ijk} \partial_j A_k \quad (\text{A.11})$$

Assim como para o produto vetorial, nos casos em que seja necessário o cálculo do gradiente de alguma função escalar, consideraremos somente uma das componentes do gradiente. Nas expressões acima, já consideramos a Notação de Einstein. O mesmo vale para as demonstrações a seguir.

A.2 Demonstração de algumas relações vetoriais

Em todas as demonstrações que se seguem, utilizamos as definições das seções anteriores e as propriedades do Tensor de Levi Civita e da Delta de Kronecker.

$$(i) \vec{A} \times (\vec{B} \times \vec{C})$$

$$\begin{aligned} [\vec{A} \times (\vec{B} \times \vec{C})]_i &= \varepsilon_{ijk} A_j (\vec{B} \times \vec{C})_k = \varepsilon_{ijk} A_j \varepsilon_{kmn} B_m C_n = \varepsilon_{ijk} \varepsilon_{kmn} A_j B_m C_n \\ &= (\delta_{im} \delta_{jn} - \delta_{in} \delta_{jm}) A_j B_m C_n = \delta_{im} \delta_{jn} A_j B_m C_n - \delta_{in} \delta_{jm} A_j B_m C_n \\ &= B_i A_j C_j - C_i A_j B_j = B_i (\vec{A} \cdot \vec{C}) - C_i (\vec{A} \cdot \vec{B}) \end{aligned}$$

Portanto:

$$\vec{A} \times (\vec{B} \times \vec{C}) = \vec{B} (\vec{A} \cdot \vec{C}) - \vec{C} (\vec{A} \cdot \vec{B}) \quad (\text{A.12})$$

$$(ii) \vec{D} \cdot [\vec{A} \times (\vec{B} \times \vec{C})]$$

$$\begin{aligned} \vec{D} \cdot [\vec{A} \times (\vec{B} \times \vec{C})] &= D_i \cdot [\vec{A} \times (\vec{B} \times \vec{C})]_i = D_i \varepsilon_{ijk} A_j \varepsilon_{kmn} B_m C_n = \varepsilon_{ijk} D_i A_j \varepsilon_{kmn} B_m C_n \\ &= \varepsilon_{kij} D_i A_j \varepsilon_{kmn} B_m C_n = (\vec{D} \times \vec{A})_k (\vec{B} \times \vec{C})_k \\ &\therefore \vec{D} \cdot [\vec{A} \times (\vec{B} \times \vec{C})] = (\vec{D} \times \vec{A}) \cdot (\vec{B} \times \vec{C}) \end{aligned} \quad (\text{A.13})$$

$$(iii) \vec{A} \cdot (\vec{B} \times \vec{C})$$

$$\vec{A} \cdot (\vec{B} \times \vec{C}) = A_i (\vec{B} \times \vec{C})_i = A_i \varepsilon_{ijk} B_j C_k = \varepsilon_{ijk} A_i B_j C_k = B_j \varepsilon_{jki} C_k A_i = C_k \varepsilon_{kij} A_i B_j$$

As duas últimas igualdades podem ser reconhecidas para resultar em:

$$\vec{A} \cdot (\vec{B} \times \vec{C}) = \vec{B} \cdot (\vec{C} \times \vec{A}) = \vec{C} \cdot (\vec{A} \times \vec{B}) \quad (\text{A.14})$$

(iv) $\nabla \times (\nabla \times \vec{A})$

$$\begin{aligned} [\nabla \times (\nabla \times \vec{A})]_i &= \varepsilon_{ijk} \partial_j (\nabla \times \vec{A})_k = \varepsilon_{ijk} \partial_j \varepsilon_{kmn} \partial_m A_n = \varepsilon_{ijk} \varepsilon_{kmn} \partial_j \partial_m A_n \\ &= (\delta_{im} \delta_{jn} - \delta_{in} \delta_{jm}) \partial_j \partial_m A_n = \delta_{im} \delta_{jn} \partial_j \partial_m A_n - \delta_{in} \delta_{jm} \partial_j \partial_m A_n \\ &= \partial_j \partial_i A_j - \partial_j \partial_j A_i = \partial_i (\partial_j A_j) - \partial_j \partial_j A_i = [\nabla(\nabla \cdot \vec{A})]_i - \nabla^2 A_i \\ \therefore \nabla \times (\nabla \times \vec{A}) &= \nabla(\nabla \cdot \vec{A}) - \nabla^2 \vec{A} \end{aligned} \quad (\text{A.15})$$

(v) $\nabla \cdot (\vec{A} \times \vec{B})$

$$\begin{aligned} \nabla \cdot (\vec{A} \times \vec{B}) &= \partial_i (\vec{A} \times \vec{B})_i = \partial_i \varepsilon_{ijk} A_j B_k = \varepsilon_{ijk} \partial_i (A_j B_k) = B_k \varepsilon_{ijk} (\partial_i A_j) + A_j \varepsilon_{ijk} (\partial_i B_k) \\ &= B_k \varepsilon_{kij} (\partial_i A_j) + A_j (-\varepsilon_{jik}) (\partial_i B_k) = B_k \varepsilon_{kij} (\partial_i A_j) - A_j \varepsilon_{jik} (\partial_i B_k) \\ &= B_k (\nabla \times \vec{A})_k - A_j (\nabla \times \vec{B})_j \\ \therefore \nabla \cdot (\vec{A} \times \vec{B}) &= \vec{B} \cdot (\nabla \times \vec{A}) - \vec{A} \cdot (\nabla \times \vec{B}) \end{aligned} \quad (\text{A.16})$$

(vi) $\nabla \times (\vec{A} \times \vec{B})$

$$\begin{aligned} [\nabla \times (\vec{A} \times \vec{B})]_i &= \varepsilon_{ijk} \partial_j (\vec{A} \times \vec{B})_k = \varepsilon_{ijk} \partial_j \varepsilon_{kmn} A_m B_n = \varepsilon_{ijk} \varepsilon_{kmn} \partial_j (A_m B_n) \\ &= \varepsilon_{ijk} \varepsilon_{kmn} [(\partial_j A_m) B_n + A_m (\partial_j B_n)] \\ &= (\delta_{im} \delta_{jn} - \delta_{in} \delta_{jm}) [(\partial_j A_m) B_n + A_m (\partial_j B_n)] = \\ &= \delta_{im} \delta_{jn} (\partial_j A_m) B_n + \delta_{im} \delta_{jn} A_m (\partial_j B_n) - \delta_{in} \delta_{jm} (\partial_j A_m) B_n \\ &\quad - \delta_{in} \delta_{jm} A_m (\partial_j B_n) = (\partial_j A_i) B_j + A_i (\partial_j B_j) - (\partial_j A_j) B_i - A_j (\partial_j B_i) \\ &= (B_j \partial_j) A_i + (\partial_j B_j) A_i - (\partial_j A_j) B_i - (A_j \partial_j) B_i \\ \therefore \nabla \times (\vec{A} \times \vec{B}) &= (\vec{B} \cdot \nabla) \vec{A} + \vec{A} (\nabla \cdot \vec{B}) - \vec{B} (\nabla \cdot \vec{A}) - (\vec{A} \cdot \nabla) \vec{B} \end{aligned} \quad (\text{A.17})$$

A utilização da notação de Einstein nessa demonstração facilita a compreensão do significado de $(\vec{A} \cdot \nabla)$ aplicado a um vetor $\vec{B}$. Como podemos notar, o significado consiste na aplicação de cada termo do produto escalar a cada componente do vetor $\vec{B}$.

$$(vii) \nabla \cdot (\nabla \times \vec{A})$$

$$\begin{aligned} \nabla \cdot (\nabla \times \vec{A}) &= \partial_i (\nabla \times \vec{A})_i = \partial_i \varepsilon_{ijk} \partial_j A_k = \varepsilon_{ijk} \partial_i \partial_j A_k = \varepsilon_{ijk} \partial_j \partial_i A_k = \partial_j \varepsilon_{ijk} \partial_i A_k \\ &= \partial_j (-\varepsilon_{jik}) \partial_i A_k = -\partial_j \varepsilon_{jik} \partial_i A_k = -\partial_j (\nabla \times \vec{A})_j = -\nabla \cdot (\nabla \times \vec{A}) \\ &\therefore \nabla \cdot (\nabla \times \vec{A}) = 0 \end{aligned} \quad (A.18)$$

$$(viii) \nabla \times (\nabla \varphi)$$

$$\begin{aligned} [\nabla \times (\nabla \varphi)]_i &= \varepsilon_{ijk} \partial_j (\nabla \varphi)_k = \varepsilon_{ijk} \partial_j (\partial_k \varphi) = \varepsilon_{ijk} \partial_k (\partial_j \varphi) = -\varepsilon_{ikj} \partial_k (\nabla \varphi)_j = -[\nabla \times (\nabla \varphi)]_i \\ &\therefore \nabla \times (\nabla \varphi) = 0 \end{aligned} \quad (A.19)$$

$$(ix) \nabla(\vec{A} \cdot \vec{B})$$

$$[\nabla(\vec{A} \cdot \vec{B})]_i = \partial_i (A_j B_j) = A_j (\partial_i B_j) + B_j (\partial_i A_j)$$

Note que não há uma relação vetorial simples à qual podemos identificar os dois termos depois da última igualdade. Para resolver esse problema, precisamos de outras expressões que contenham esses termos. São elas: $\vec{A} \times (\nabla \times \vec{B})$ e $\vec{B} \times (\nabla \times \vec{A})$. Vamos analisá-las:

$$\begin{aligned} [\vec{A} \times (\nabla \times \vec{B})]_i &= \varepsilon_{ijk} A_j (\nabla \times \vec{B})_k = \varepsilon_{ijk} A_j \varepsilon_{kmn} \partial_m B_n = \varepsilon_{ijk} \varepsilon_{kmn} A_j \partial_m B_n \\ &= (\delta_{im} \delta_{jn} - \delta_{in} \delta_{jm}) A_j \partial_m B_n = \delta_{im} \delta_{jn} A_j \partial_m B_n - \delta_{in} \delta_{jm} A_j \partial_m B_n \\ &= A_j \partial_i B_j - A_j \partial_j B_i = A_j (\partial_i B_j) - (\vec{A} \cdot \nabla) B_i \\ &\therefore A_j (\partial_i B_j) = [\vec{A} \times (\nabla \times \vec{B})]_i + (\vec{A} \cdot \nabla) B_i \end{aligned} \quad (A.20)$$

Para determinar $\vec{B} \times (\nabla \times \vec{A})$, basta trocar A por B na expressão de $\vec{A} \times (\nabla \times \vec{B})$:

$$\begin{aligned}
[\vec{B} \times (\nabla \times \vec{A})]_i &= B_j(\partial_i A_j) - (\vec{B} \cdot \nabla) A_i \\
\therefore B_j(\partial_i A_j) &= [\vec{B} \times (\nabla \times \vec{A})]_i + (\vec{B} \cdot \nabla) A_i
\end{aligned} \tag{A.21}$$

Somando-se as expressões (A.20) e (A.21), reproduzimos os termos de $\nabla(\vec{A} \cdot \vec{B})$:

$$\begin{aligned}
[\nabla(\vec{A} \cdot \vec{B})]_i &= A_j(\partial_i B_j) + B_j(\partial_i A_j) \\
&= [\vec{A} \times (\nabla \times \vec{B})]_i + (\vec{A} \cdot \nabla) B_i + [\vec{B} \times (\nabla \times \vec{A})]_i + (\vec{B} \cdot \nabla) A_i \\
\therefore \nabla(\vec{A} \cdot \vec{B}) &= \vec{A} \times (\nabla \times \vec{B}) + (\vec{A} \cdot \nabla) \vec{B} + \vec{B} \times (\nabla \times \vec{A}) + (\vec{B} \cdot \nabla) \vec{A}
\end{aligned} \tag{A.22}$$

(x) $\nabla \cdot (\varphi \vec{A})$

$$\begin{aligned}
\nabla \cdot (\varphi \vec{A}) &= \partial_i (\varphi \vec{A})_i = \partial_i (\varphi A_i) = (\partial_i \varphi) A_i + \varphi \partial_i A_i = (\nabla \varphi)_i A_i + \varphi \partial_i A_i \\
\therefore \nabla \cdot (\varphi \vec{A}) &= (\nabla \varphi) \cdot \vec{A} + \varphi (\nabla \cdot \vec{A})
\end{aligned} \tag{A.23}$$

(xi) $\nabla \times (\varphi \vec{A})$

$$\begin{aligned}
[\nabla \times (\varphi \vec{A})]_i &= \varepsilon_{ijk} \partial_j (\varphi \vec{A})_k = \varepsilon_{ijk} \partial_j (\varphi A_k) = \varepsilon_{ijk} (\partial_j \varphi) A_k + \varepsilon_{ijk} \varphi (\partial_j A_k) \\
&= \varepsilon_{ijk} (\nabla \varphi)_j A_k + \varphi \varepsilon_{ijk} (\partial_j A_k) \\
\therefore \nabla \times (\varphi \vec{A}) &= (\nabla \varphi) \times \vec{A} + \varphi \nabla \times \vec{A}
\end{aligned} \tag{A.24}$$

APÊNDICE B – Números complexos

Dentro do conjunto dos números reais existe uma limitação relacionada à operação de radiciação. Neste contexto, tomar a raiz quadrada de um número só tem sentido quando esse número é não negativo, ou seja, pertencente ao intervalo $[0, +\infty[$. Números que contêm a raiz quadrada de um número negativo não estão contidos no conjunto dos reais. Encontram-se em um conjunto maior, chamado conjunto dos números complexos.

Um número complexo z é definido como:

$$z = a + ib \quad (\text{B.1})$$

onde a e b são números reais. O número representado por a é chamado parte real de z , $Re[z]$, e b é chamado parte imaginária, $Im[z]$. O símbolo i representa a unidade imaginária e equivale à raiz quadrada de menos um, $i = \sqrt{-1}$, de forma que $i^2 = -1$. Podemos representar um número complexo em um plano, chamado plano complexo. Nesse caso, z é um ponto no plano, cuja coordenada é a parte real e a abscissa é a parte imaginária, como mostra a figura B.1:

Figura B.1 – Representação do número complexo z no plano complexo. O eixo horizontal representa a parte real e o eixo vertical dá a parte imaginária.

Fonte: Elaborada pelo autor.

As propriedades de soma e multiplicação são intuitivas dentro do conjunto dos números complexos. Define-se a soma e a multiplicação de dois números $z_1 = a_1 + ib_1$ e $z_2 = a_2 + ib_2$ como:

$$z_1 + z_2 = (a_1 + a_2) + i(b_1 + b_2) \quad (\text{B.2})$$

$$z_1 z_2 = (a_1 a_2 - b_1 b_2) + i(a_1 b_2 + a_2 b_1) \quad (\text{B.3})$$

Define-se também o complexo conjugado de z , representado por z^* , o número complexo que é obtido ao substituir i por $-i$ em z .

$$z^* = a - ib \quad (\text{B.4})$$

Manipulando as expressões (B.1) e (B.4) é possível determinar as partes real e imaginária de um número complexo em termos de si mesmo e de seu complexo conjugado:

$$a = \text{Re}(z) = \frac{z + z^*}{2} \quad (\text{B.5})$$

$$b = \text{Im}(z) = \frac{z - z^*}{2i} \quad (\text{B.6})$$

Podemos definir também o módulo de z , simbolizado por $|z|$, como o produto zz^* :

$$|z|^2 = zz^* = a^2 + b^2 \quad (\text{B.7})$$

Como podemos notar na figura B.1, $|z|$ corresponde à distância da origem ao ponto que representa z . Essa definição do módulo nos ajuda a determinar agora a divisão entre dois números complexos z_1 e z_2 :

$$\frac{z_1}{z_2} = \frac{z_1 z_2^*}{z_2 z_2^*} = \frac{(a_1 + ib_1)(a_2 - ib_2)}{|z_2|^2} = \left(\frac{a_1 a_2 + b_1 b_2}{a_2^2 + b_2^2} \right) + i \left(\frac{a_2 b_1 - a_1 b_2}{a_2^2 + b_2^2} \right) \quad (\text{B.8})$$

Existe ainda outra forma de representar um número complexo de forma bastante intuitiva se levarmos em consideração a figura B.1. Essa forma é chamada forma polar de um número complexo e leva em consideração o módulo de z e o ângulo θ formado entre o eixo real e a reta que liga a origem ao ponto que representa o referido número. Podemos escrever z da seguinte forma:

$$z = |z|(\cos \theta + i \sin \theta) \quad (\text{B.9})$$

As partes real e imaginária, então, podem ser escritas como:

$$\text{Re}(z) = a = |z| \cos \theta \quad (\text{B.10})$$

$$\text{Im}(z) = b = |z| \sin \theta \quad (\text{B.11})$$

Vamos analisar, em particular, o termo entre parêntesis na expressão B.9. Chamemos aqui esse termo de $\tilde{z}$. Portanto, $\tilde{z} = \cos \theta + i \sin \theta$. Derivando essa expressão em relação à θ , obtemos:

$$\begin{aligned} \frac{d\tilde{z}}{d\theta} &= -\sin \theta + i \cos \theta = i(\cos \theta + i \sin \theta) \\ \therefore \frac{d\tilde{z}}{d\theta} &= i\tilde{z} \end{aligned} \quad (\text{B.12})$$

Devemos notar que a relação (B.12) é uma equação diferencial ordinária de primeira ordem de fácil solução. Basta utilizarmos o método do ansatz e “chutar” que $\tilde{z} = e^{\alpha\theta}$. Ao substituir essa solução na (B.12), encontramos:

$$\alpha e^{\alpha\theta} = i e^{\alpha\theta} \Rightarrow \alpha = i$$

Portanto $\tilde{z} = e^{i\theta}$ e, como consequência disso:

$$e^{i\theta} = \cos \theta + i \sin \theta \quad (\text{B.13})$$

Essa é a conhecida Fórmula de Euler. Um caso particular interessante é dado quando o ângulo $\theta = \pi$. Nesse caso, temos:

$$e^{i\pi} = -1 \quad (\text{B.14})$$

Esse caso particular é conhecido como Relação de Euler. É interessante notar que essa expressão relaciona o número π e o número de Neper, e . Originalmente, esses números foram

determinados independentemente. O primeiro como a razão entre o comprimento de uma circunferência e seu diâmetro e o segundo como o limite da sequência $(1 + 1/n)^n$ quando n tende a infinito.

Tomando o complexo conjugado da Fórmula de Euler, obtemos:

$$e^{-i\theta} = \cos\theta - i\sin\theta \quad (\text{B.15})$$

Utilizando as expressões (B.13) e (B.15), podemos relacionar as funções trigonométricas seno e cosseno com as exponenciais complexas:

$$\cos\theta = \frac{e^{i\theta} + e^{-i\theta}}{2} \quad (\text{B.16})$$

$$\sin\theta = \frac{e^{i\theta} - e^{-i\theta}}{2i} \quad (\text{B.17})$$