

UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO
INSTITUTO DE FÍSICA DE SÃO CARLOS

Davi Bessa de Sousa

**O azul do céu, o vermelho do ouro e muito mais:
Uma análise do espalhamento eletromagnético no limite mesoscópico**

Trabalho de conclusão de curso apresentado ao
Programa de Graduação em Física do Instituto
de Física de São Carlos da Universidade de São
Paulo, para obtenção do título de Bacharel em
Física.

Orientador: Prof. Dr. Sérgio Ricardo Muniz –
IFSC-USP.

São Carlos
Novembro 2021

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.

Bessa de Sousa, Davi

O Azul do céu, o vermelho do Ouro e Muito mais: uma análise do espalhamento eletromagnético no limite mesoscópico. 27p / Davi Bessa de Sousa; orientador Sérgio Ricardo Muniz -- São Carlos, 2021.
25 p.

Trabalho de Conclusão de Curso (Bacharel em Física) -- Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, 2021.

1. Espalhamento Eletromagnético. 2. Teoria de Mie. 3. Matriz T. I. Ricardo Muniz, Sérgio, orient. II. Título.

Resumo

Sousa, D.B. O Azul do céu, o vermelho do Ouro e Muito mais: uma análise do espalhamento eletromagnético no limite mesoscópico. 2021. 24p. Trabalho de conclusão de Curso (Bacharelado em Física) - Instituto de física de São Carlos, Universidade de São Paulo, 2021.

Neste trabalho estudamos as soluções exatas para o problema do espalhamento eletromagnético por corpos de qualquer tamanho para duas geometrias simples: a esfera e o cilindro reto infinito. Para isso, utilizamos a expansão do campo eletromagnético em funções de onda vetoriais. Discutimos também a teoria de seções de choque para o caso geral, e critérios de truncamento adequados em alguns casos particulares, mostrando como a Teoria de Mie consegue explicar desde a coloração de dispersões metálicas coloidais até o azul do céu, reproduzindo o espalhamento de Rayleigh para partículas muito pequenas. Por fim, comentamos como é possível estender o método utilizado aqui para solucionar problemas em casos mais gerais, mostrando como a expansão em funções de onda vetoriais pode facilitar a computação de forças ópticas, transformando integrais em somatórios.

Palavras Chave: Espalhamento Eletromagnético. Teoria de Mie. Matriz T.

Sumário

1	Introdução	3
2	Um pouco de teoria	5
2.1	Equações de Maxwell e a equação de Helmholtz	5
2.2	Soluções para a Equação de Helmholtz	6
2.2.1	Uma solução cilíndrica	6
2.2.2	Uma solução esférica	8
3	O problema do espalhamento	11
3.1	Seções de choque	12
3.2	O espalhamento Mie	12
3.3	O cilindro infinito	17
3.4	Outras geometrias	19
3.5	Forças ópticas	20
4	Conclusão	23
	Referências	24

1 Introdução

Efeitos ópticos como reflexão e refração da luz são consequências famosas do problema de espalhamento de ondas eletromagnéticas. Esses são fenômenos observados numa escala macroscópica, quando se considera um meio espalhador que seja muito maior que o comprimento de onda da luz incidente, no chamado limite geométrico. Num caso geral, a forma das ondas refletidas e transmitidas dependem das características da onda incidente e do material responsável pelo espalhamento. Essa dependência leva a fenômenos interessantes, como o espalhamento ser mais intenso para determinados comprimentos de onda, o que consegue explicar a coloração de diversos meios, desde o azul do céu até o vermelho de suspensões coloidais de ouro. Para partículas muito pequenas, a solução de Rayleigh [1] mostra que a intensidade da luz espalhada é da forma $I_s \propto \frac{1+\cos^2 \theta}{\lambda^4}$, com λ o comprimento de onda da luz incidente e θ o ângulo de espalhamento, o que explica o porquê de comprimentos de onda menores (como o do azul) serem mais espalhados no céu. Além disso, o surgimento de campos espalhados e transmitidos pode gerar a transferência de momento linear entre os campos e os corpos espalhadores, gerando as chamadas forças de espalhamento.

A dependência nas características do meio não está só em características ópticas como índice de refração e de absorção, mas também da geometria e do tamanho do corpo espalhador. No limite mesoscópico, em que o tamanho característico do corpo espalhador é da ordem do comprimento de onda da luz incidente, não há solução analítica para casos de geometrias gerais e é necessário resolver computacionalmente as equações de Maxwell de forma aproximada. Em primeira ordem, todavia, é possível aproximar essas partículas para esferas ou cilindros muito grandes, de forma que faz sentido estudar esses casos que têm solução analítica conhecida. A relação das ondas espalhada e transmitida com a onda monocromática incidente, para uma esfera homogênea, foi encontrada analiticamente por Mie em 1908 [2]. Por conta disso teorias de espalhamento no limite mesoscópico são chamadas grosseiramente de *Teorias de Mie*.

Expandindo o campo elétrico e o magnético em termos de multipolo para a onda incidente e espalhada, é possível utilizar o *ansatz* de que os coeficientes dessa expansão, para os dois campos, são relacionados por uma relação linear, denominados por uma matriz de transferência \mathbb{T} . O problema é resolvido uma vez que os termos dessa matriz são encontrados. Pode-se, com isso, encontrar as seções de choque de espalhamento e de extinção desse processo, além de encontrar o momento linear e angular dos campos espalhados e transmitidos, de forma a quantificar forças e torques que o objeto espalhador chega a sentir.

Este trabalho tem como objetivo derivar soluções analíticas para o problema dos espalhamento em dois casos canônicos: na esfera e o cilindro infinito. Objetiva-se também estudar como essas soluções podem explicar fenômenos como a coloração do céu e de suspensões coloidais metálicas.

2 Um pouco de teoria

2.1 Equações de Maxwell e a equação de Helmholtz

Para um campo elétrico propagante e separável $\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{E}_r(\mathbf{r})e^{-i\omega t}$ (com $\omega = 2\pi f$ a frequência angular da onda, f a frequência) monocromático que satisfaça às leis de Maxwell, equações (1)-(4), pode-se mostrar que a sua parte espacial satisfaz a equação (5), chamada de equação de Helmholtz.

$$\nabla \cdot \mathbf{E} = \frac{\rho}{\epsilon_0} \quad (1) \qquad \nabla \cdot \mathbf{B} = 0 \quad (2)$$

$$\nabla \times \mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} \quad (3) \qquad \nabla \times \mathbf{B} = \mu_0(\mathbf{J} + \epsilon_0 \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t}) \quad (4)$$

\mathbf{B} é o campo magnético, ρ é a densidade de carga elétrica, ϵ_0 a permissividade elétrica do vácuo, μ_0 a permeabilidade magnética do vácuo e \mathbf{J} a densidade de corrente. ∇ é o operador diferencial (Del) e t é o tempo.

$$(\nabla^2 + k^2)\mathbf{E}_r(\mathbf{r}) = 0 \quad (5)$$

Onde ∇^2 é o operador Laplaciano, e k é o número de onda do campo elétrico propagante no meio.

Na matéria, e para efeitos macroscópicos, é possível ainda se definir campos auxiliares para adequar a efeitos de polarização e magnetização que levam a cargas e correntes “ligadas”. Define-se assim o campo deslocamento elétrico $\mathbf{D} := \epsilon_0 \mathbf{E} + \mathbf{P}$, onde \mathbf{P} é o vetor polarização do meio, e o *vetor auxiliar H* $\mathbf{H} = \frac{\mathbf{B}}{\mu_0} - \mathbf{M}$, onde \mathbf{M} é o vetor magnetização do meio. Nesses casos, pode ser mais conveniente trabalhar com a equação (6) ao invés de (1), e com a equação (7) ao invés de (4), apesar de serem equivalentes.

$$\nabla \cdot \mathbf{D} = \rho_f \quad (6) \qquad \nabla \times \mathbf{H} = \mathbf{J}_f + \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t} \quad (7)$$

Onde ρ_f é a densidade de cargas livres e \mathbf{J}_f é a densidade de correntes livres.

Para determinados meios em que $\mathbf{M} \propto \mathbf{B}$ e $\mathbf{P} \propto \mathbf{E}$ (meios *lineares* e isotrópicos), pode se definir ainda uma permissividade elétrica (ϵ) e uma permeabilidade magnética (μ), da forma que, nesses meios, ficaria válido $\mathbf{D} = \epsilon \mathbf{E}$ e $\mathbf{B} = \mu \mathbf{H}$. Para meios anisotrópicos essas relações são válidas com ϵ e μ representando respectivamente a permissividade absoluta e a permeabilidade absoluta do meio, operadores tensoriais cujas entradas são as permissividades e as permeabilidades em cada uma das direções da base. Quando aplicados nos campos elétrico e magnético, retornam campos \mathbf{H} e \mathbf{D} não obrigatoriamente paralelos a \mathbf{H} e \mathbf{D} , mas ainda assim linearmente dependentes. Para meios não lineares é necessária a expansão com termos tensoriais de acoplamento de ordens superiores.

Definindo então o índice de refração do meio como sendo $n = \sqrt{\frac{\epsilon \mu}{\epsilon_0 \mu_0}}$ a equação de Helmholtz toma a forma:

$$(\nabla^2 + n^2 k^2)\mathbf{E} = 0 \quad (8)$$

2.2 Soluções para a Equação de Helmholtz

Tomemos uma função escalar $\psi(\mathbf{r})$ que satisfaça a equação (9). A partir dela e de um vetor \mathbf{c} que seja constante na base de escolha, podemos escrever um vetor \mathbf{M} que satisfaça a equação de Helmholtz vetorial. Do vetor \mathbf{M} , podemos ainda derivar um segundo vetor \mathbf{N} que também satisfaz a equações de Helmholtz.

$$(\nabla^2 + n^2 k^2)\psi = 0 \quad (9) \qquad \mathbf{M} := \nabla \times (\psi \mathbf{c}) \quad (10) \qquad \mathbf{N} := \frac{\nabla \times \mathbf{M}}{k} \quad (11)$$

Se um conjunto de funções $\psi_{lm}(\mathbf{r})$ satisfizerem a equação (9) e formarem uma relação de compleza no espaço das funções, é possível escrever qualquer campo vetorial que satisfaça a equação de Helmholtz como sendo uma combinação linear dos vetores \mathbf{M}_{lm} e \mathbf{N}_{lm} . \mathbf{M}_{lm} e \mathbf{N}_{lm} são chamados de funções vetoriais de onda e as funções ψ_{lm} são chamadas de *geratrizes* desses vetores.

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}) = \sum_l \sum_m A_{lm}^{(1)} \mathbf{M}_{lm}(\mathbf{r}) + A_{lm}^{(2)} \mathbf{N}_{lm}(\mathbf{r}) \quad (12)$$

Essas expansões são muito úteis para comparar como campos diferentes se somam, ou como campos se comparam em diferentes regiões, e dependendo da escolha das funções geratrizes é possível ainda ter funções cujas contribuições decrescem rapidamente com a ordem da expansão, tornando truncamento uma alternativa possível e facilitando a computação dos termos para comparar resultados analíticos e numéricos. Mas que funções geratrizes são escolhas boas?

2.2.1 Uma solução cilíndrica

Em coordenadas cilíndricas, a equação de Helmholtz tem o formato da equação (13), onde r é a coordenada radial cilíndrica, φ a azimutal e z a retangular do eixo cilíndrico. A priori não é tão simples resolver essa equação diferencial parcial para um ψ qualquer. Assumindo uma solução separável para ψ , ou seja, assumindo que $\psi = R(r)\Phi(\varphi)Z(z)$ obtém-se a equação (14). Dividindo tudo por $R\Phi Z$, chega-se na equação (15).

$$(\nabla^2 + k^2)\psi = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r \frac{\partial}{\partial r} \psi) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \psi + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \psi + k^2 \psi = 0 \quad (13)$$

$$\Theta Z \left[\frac{d^2}{dr^2} R + \frac{1}{r} \frac{d}{dr} R \right] + R Z \frac{1}{r^2} \frac{d^2}{d\varphi^2} \Phi + R \Theta \frac{d^2}{dz^2} Z + k^2 R \Theta Z = 0 \quad (14)$$

$$\frac{1}{R} \left[\frac{d^2}{dr^2} R + \frac{1}{r} \frac{d}{dr} R \right] + k^2 + \frac{1}{\Phi} \frac{1}{r^2} \frac{d^2}{d\varphi^2} \Phi + \frac{1}{Z} \frac{d^2}{dz^2} Z = 0 \quad (15)$$

O que faz sentido nesse momento então é isolar partes que dependem apenas de uma função das outras. Se os dois lados da igualdade devem ser iguais para todos os valores de r , φ e z , torna-se claro que essa igualdade deve ser constante. É isso que pode ser visto nas equações (16) e (17), onde as chamadas constantes de separação foram escolhidas de tais formas que Φ fosse periódica e Z regular para pontos muito distantes da origem por alguma das duas direções. Substituindo (16) e (17) na

equação (15) e multiplicando tudo por R, obtém-se por fim a equação (18), que pode ser reconhecida como uma equação de Bessel.

$$\frac{1}{R} \left[\frac{d^2}{dr^2} R + \frac{1}{r} \frac{d}{dr} R \right] + k^2 + \frac{1}{\Phi} \frac{1}{r^2} \frac{d^2}{d\varphi^2} \Phi = -\frac{1}{Z} \frac{d^2}{dz^2} Z = -l^2 \quad (16)$$

$$\frac{1}{R} \left[\frac{d^2}{dr^2} R + \frac{1}{r} \frac{d}{dr} R \right] + k^2 + \frac{1}{Z} \frac{d^2}{dz^2} Z = -\frac{1}{\Phi} \frac{1}{r^2} \frac{d^2}{d\varphi^2} \Phi = m^2 \quad (17)$$

$$\frac{d^2}{dr^2} R + \frac{1}{r} \frac{d}{dr} R + (l^2 + k^2 - \frac{m^2}{r^2}) R = 0 \quad (18)$$

Com isso, as soluções de Φ e Z ficam diretas, e podem ser encontradas respectivamente nas equações (19) e (20), para $m \in \mathbb{Z}$. A solução de (18) não é tão direta, mas felizmente ela é conhecida na literatura e retorna como solução uma combinação linear das chamadas funções de Bessel de primeira espécie (J_m), regular na origem, e de segunda espécie (N_m), regular em pontos distantes da origem. Todavia, para o caso eletromagnético é conveniente definir as funções de Bessel de terceira espécie, ou funções de Hankel, como sendo $H_m = J_m + iN_m$, com i a constante imaginária, de forma que ainda é possível escrever as funções desejadas como sendo combinações lineares de J_m e H_m . Assim, toda função ψ pode ser escrita como na equação (22).

$$\Phi_m(\varphi) = a_m e^{im\varphi} \quad (19) \qquad \qquad Z_l(z) = b_l e^{lz} \quad (20)$$

$$R_{lm}(r) = A_{lm} J_m(r\sqrt{k^2 + l^2}) + B_{lm} H_m(r\sqrt{k^2 + l^2}) \quad (21)$$

$$\psi(k, \mathbf{r}) = \sum_l \sum_{m=-\infty}^{\infty} [A_{lm} J_m(r\sqrt{k^2 + l^2}) + B_{lm} H_m(r\sqrt{k^2 + l^2})] e^{im\varphi} e^{lz} \quad (22)$$

Os campos de interesse para o eletromagnetismo são de dois tipos: regulares na origem, e com comportamento de radiação (campos que para pontos muito distantes da origem funcionem como ondas esféricas saindo da origem). Para tal, utiliza-se J_m e H_m respectivamente em cada um dos casos. Assim, pode ser interessante escrever uma função geral $\alpha_m(r)$, que pode ser igual a J_m ou a H_m , dependendo do caso de interesse. Funções do tipo $\psi_{lm} = \alpha_m(r\sqrt{k^2 + l^2}) e^{im\varphi} e^{lz}$ são chamadas de *harmônicos cilíndricos*. Com isso, e escolhendo o vetor constante definido na equação (10) nos sistema de coordenadas $\mathbf{c} = \hat{\mathbf{z}}$, e definindo o *parâmetro de tamanho* $\rho_l := r\sqrt{k^2 + l^2}$, os *vetores harmônicos cilíndricos* (VHCil) podem ser escrito como nas equações (23) e (24).

$$\mathbf{M}_{lm}(k, \mathbf{r}) = \sqrt{k^2 + l^2} \left[im \frac{\alpha_m(\rho_l)}{\rho_l} \hat{\mathbf{r}} - \alpha'_m(\rho_l) \hat{\boldsymbol{\varphi}} \right] e^{im\varphi} e^{lz} \quad (23)$$

$$\mathbf{N}_{lm}(k, \mathbf{r}) = \sqrt{k^2 + l^2} \left[l\alpha'_m(\rho_l) \hat{\mathbf{r}} - ilm \frac{\alpha_m(\rho_l)}{\rho_l} \hat{\boldsymbol{\varphi}} + \sqrt{k^2 + l^2} \alpha_m(\rho_l) \hat{\mathbf{z}} \right] e^{im\varphi} e^{lz} \quad (24)$$

2.2.2 Uma solução esférica

Em coordenadas esféricas, a equação de Helmholtz tem o formato da equação (25) onde r é a coordenada radial, θ a polar e φ a azimutal. Usando o mesmo truque da seção anterior e assumindo uma solução separável para ψ , ou seja, assumindo que $\psi = R(r)\Theta(\theta)\Phi(\varphi)$ é possível separar a equação (25) em três equações diferenciais ordinárias para as funções R , Θ e Φ , respectivamente nas equações (26), (27) e (28). As constantes l e m são apenas as constantes de separação, que são inteiras já que Φ é 2π -periódica e Θ deve ser regular para $\theta = 0, \pi$.

$$(\nabla^2 + k^2)\psi = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} (r^2 \frac{\partial}{\partial r} \psi) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} (\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \psi) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \psi + k^2 \psi = 0 \quad (25)$$

$$\frac{d}{dr} (r^2 \frac{d}{dr} R) + [k^2 r^2 - l(l+1)]R = 0 \quad (26)$$

$$\frac{1}{\sin \theta} \frac{d}{d\theta} (\sin \theta \frac{d}{d\theta} \Theta) + [l(l+1) - \frac{m^2}{\sin^2 \theta}] \Theta = 0 \quad (27) \qquad \qquad \frac{d^2}{d\varphi^2} \Phi + m^2 \Phi \quad (28)$$

As equações (26) e (27) não tem soluções tão diretas como a (28). Para a equação (26), é possível fazer a substituição de variável $\rho = kr$ e procurar soluções do tipo $R = \alpha \rho^{-1/2}$, e substituindo isso na própria equação se chega na equação (29), que tem um formato muito parecido com a equação (18)! Assim, R tem como solução funções do tipo da equação (30), onde j_l e h_l são as funções esféricas de Bessel e Hankel, definidas em (31) e (32).

$$\rho^2 \frac{d^2}{d\rho^2} \alpha + \rho \frac{d}{d\rho} \alpha + (\rho^2 - (l + \frac{1}{2}))\alpha = 0 \quad (29) \qquad \qquad R(\rho) = A_l j_l(\rho) + B_l h_l(\rho) \quad (30)$$

$$j_l(\rho) = \sqrt{\frac{\pi}{2}} \frac{J_{l+1/2}(\rho)}{\rho^{1/2}} \quad (31) \qquad h_l(\rho) = \sqrt{\frac{\pi}{2}} \frac{J_{l+1/2}(\rho) + iN_{l+1/2}(\rho)}{\rho^{1/2}} \quad (32)$$

A solução de (27) também não é nada trivial, mas já é conhecida na literatura. A sua solução é $P_{lm}(\cos \theta)$, onde P_{lm} são os chamados polinômios associados de Legendre. Interessante notar que para $|m| > l$ esses polinômios zeram, e isso está relacionado ao fato de querermos soluções regulares em 0 e π . O mais interessante ainda é que o produto de P_{lm} por $e^{im\varphi}$, a solução da equação (28), resultam nos chamados *harmônicos esféricos* a menos de uma constante de normalização n_{lm} . Como podemos inserir essa constante de normalização nos coeficientes da série, de forma que:

$$n_{lm} \Theta_{lm}(\theta) \Phi_m(\varphi) = Y_{lm}(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l-m)!}{(l+m)!}} P_{lm}(\cos \theta) e^{im\varphi} \quad (33)$$

Dessa forma, $Y_{lm}^* = Y_{l-m}$, onde $*$ indica conjugação complexa. Por fim, campos que satisfaçam a equação de Helmholtz satisfazem então a equação (34).

$$\psi(k, \mathbf{r}) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l [A_{lm} j_l(kr) + B_{lm} h_l(kr)] Y_{lm}(\hat{\mathbf{r}}) \quad (34)$$

Dessa forma, com $\mathbf{c} = \mathbf{r}$, os *vetores harmônicos esféricos* (VHEsf) ficam como nas equações (35) e (36), e pela relação de completeza das funções escolhidas pode-se escrever qualquer campo vetorial que satisfaça a equação de Helmholtz como na equação (12).

$$\mathbf{M}_{lm} = im e^{im\varphi} \frac{P_{lm}(\cos \theta)}{\sin \theta} \alpha_l(\rho) \hat{\boldsymbol{\theta}} - e^{im\varphi} \frac{dP_{lm}(\cos \theta)}{d\theta} \alpha_l(\rho) \hat{\boldsymbol{\varphi}} \quad (35)$$

$$\mathbf{N}_{lm} = l(l+1) \frac{\alpha_l(\rho)}{\rho} e^{im\varphi} P_{lm}(\cos \theta) \hat{\mathbf{r}} + e^{im\varphi} \frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} [\rho \alpha_l(\rho)] \left\{ \frac{dP_{lm}(\cos \theta)}{d\theta} \hat{\boldsymbol{\theta}} + im \frac{P_{lm}(\cos \theta)}{\sin \theta} \hat{\boldsymbol{\varphi}} \right\} \quad (36)$$

Para o caso de uma onda plana polarizada no eixo x e com vetor de onda na direção de z , o que é totalmente razoável de se escolher uma vez que $\mathbf{k} \perp \hat{\mathbf{e}}_i$ ($\hat{\mathbf{e}}_i$ o vetor de direção da polarização) e os eixos cartesianos num sistema de coordenadas esféricos podem ser escolhidos de forma arbitrária, encontra-se a expansão vista na equação (37), com $E_l = i^l E_0 \frac{2l+1}{l(l+1)}$.

$$\mathbf{E}(k, \mathbf{r}) = \sum_{l=1}^{\infty} -i \frac{E_l}{2} [\mathbf{M}_{l1}^{(j)}(k, \mathbf{r}) - \mathbf{M}_{l-1}^{(j)}(k, \mathbf{r}) + \mathbf{N}_{l1}^{(j)}(k, \mathbf{r}) + \mathbf{N}_{l-1}^{(j)}(k, \mathbf{r})] \quad (37)$$

A soma só aparece em l pois todos os coeficientes de A_{lm} tal que $|m| \neq 1$ zeram. O super-índice j indica que α é a função de Bessel j , e analogamente o super-índice h indicaria que a função α na construção dos VHEsf seria a função de Hankel h .

3 O problema do espalhamento

Os campos \mathbf{E} , \mathbf{B} , \mathbf{D} e \mathbf{H} não são necessariamente contínuos numa interface entre dois meios (1 e 2) com índice de refração diferentes. Todavia, a descontinuidade deles é bem definida, e depende apenas das densidades superficiais de cargas e correntes, o que pode ser visto nas equações (38)-(41).

$$\mathbf{E}_1^{\parallel} = \mathbf{E}_2^{\parallel} \quad (38) \qquad (D_1^{\perp} - D_2^{\perp}) = \sigma_f \quad (39)$$

$$\mathbf{H}_1^{\parallel} - \mathbf{H}_2^{\parallel} = \mathbf{K}_f \times \hat{\mathbf{n}} \quad (40) \qquad \mathbf{B}_1^{\perp} = \mathbf{B}_2^{\perp} \quad (41)$$

Onde o subíndice 1 ou 2 denota em qual meio o campo está contido, σ_f é a densidade superficial de cargas livres, \mathbf{K}_f é a densidade superficial de correntes livres, o superíndice \perp indica a direção do vetor $\hat{\mathbf{n}}$ e \parallel a direção perpendicular ao vetor $\hat{\mathbf{n}}$. O vetor $\hat{\mathbf{n}}$ por sua vez indica a direção perpendicular à interface, esquematizada na figura 1.

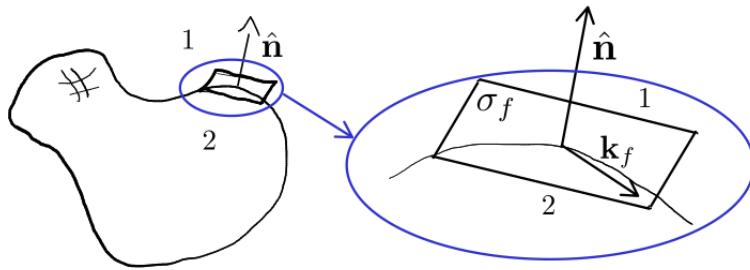


Figura 1: Esquema de uma interface entre dois meios. No esquema é possível ver uma representação do vetor diretor da superfície $\hat{\mathbf{n}}$, da densidade de correntes livres \mathbf{K}_f e da carga livre σ_f .
Fonte: elaborada pelo autor.

Quando um feixe de luz passa de um meio para outro e sofre mudança nas suas características de forma a manter as equações de continuidade, ocorre o chamado fenômeno do espalhamento. O campo externo ao objeto espalhador então é dado pela soma do campo incidente (\mathbf{E}_i) com o espalhado (\mathbf{E}_s), enquanto o campo interno ao objeto é chamado de campo transmitido (\mathbf{E}_t). Encontrar uma relação entre os campos espalhado e transmitido com o campo incidente requer uma solução exata das equações de contorno ao longo de toda superfície do objeto. Dada a linearidade das equações de Maxwell e das de contorno, uma forma de sintetizar o problema, é introduzir um operador multilinear \mathbb{T} de transição que relate \mathbf{E}_s e \mathbf{E}_i . Uma vez que se obtenha os coeficientes de \mathbb{T} em uma determinada base, o problema está resolvido. Esse operador é chamado de matriz T e sua representação pode ser vista na equação (42).

$$\mathbf{E}_s = \mathbb{T}\mathbf{E}_i \quad (42)$$

Uma vez que a Matriz T é encontrada, seja por métodos numéricos ou analíticos, ela independe do tipo de feixe incidindo sobre o corpo espalhador. A matriz T depende apenas da origem do sistema de coordenadas, da geometria do objeto, do comprimento de onda incidente e da direção de propagação [23]. Translações e rotações podem ser calculadas por transformações lineares bem definidas [5].

Encontrar uma solução analítica para o caso geral pode não ser tão fácil, mas podemos nos aproveitar de situações com simetrias esféricas e cilíndricas para utilizar a teoria reproduzida neste texto.

3.1 Seções de choque

Algumas quantidades que podem ser interessantes para quantificar o fenômeno envolvem as chamadas Seções de Choque, inclusive são o que comumente quantificam o espalhamento de diversas substâncias. Mas o que exatamente são essas seções de choque?

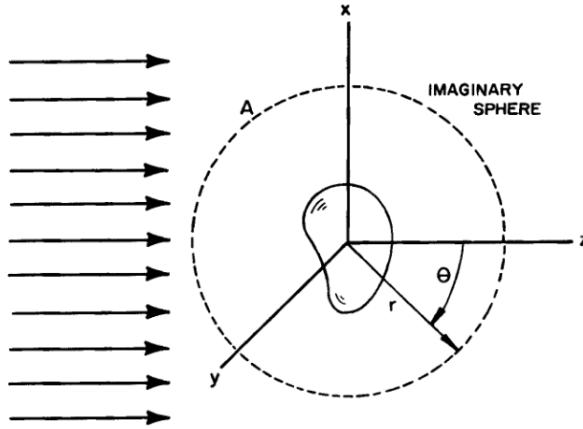


Figura 2: Representação de uma partícula espalhadora arbitrária, um feixe incidente de onda plana e uma superfície de integração esférica imaginária A .

Fonte: Craig, F.; Bohren, F.; Huffman, D. R. [3].

Considere que um feixe de luz num meio não absorvente ($Im(n) = 0$) está indicando uma intensidade I_0 em um detector. Após isso uma ou mais partículas são colocadas entre a fonte do feixe e o detector, fazendo que o detector indique uma intensidade $I < I_0$. Essa diminuição na intensidade é a chamada *extinção*, que é a combinação dos efeitos de absorção e de espalhamento por conta dos corpos colocados. Uma forma de quantificar a absorção, é considerar o fluxo eletromagnético da dos campos envolvidos em uma superfície A que engloba as partículas espalhadoras. Definindo o *vetor de Poynting* como $\mathbf{S} := \mathbf{E} \times \mathbf{H}$ (com $\mathbf{S}_{ext} = \frac{1}{2}(\mathbf{E}_i \times \mathbf{H}_s + \mathbf{E}_s \times \mathbf{H}_i)$), as potências de absorção (P_a), espalhamento (P_s) e extinção (P_{ext}) ficam da forma:

$$P_a = - \int_A \mathbf{S} \cdot \hat{\mathbf{r}} dA \quad (43) \quad P_s = \int_A \mathbf{S}_s \cdot \hat{\mathbf{r}} dA \quad (44) \quad P_{ext} = - \int_A \mathbf{S}_{ext} \cdot \hat{\mathbf{r}} dA \quad (45)$$

Dessas quantidades, fica interessante definir as chamadas *seções de choque* (C), que relacionam as potências com a intensidade I_0 do feixe ($P = CI_0$). Mais ainda, pode ser interessante definir os coeficientes (ou as *eficiências*) de espalhamento $\sigma = \frac{C}{C_g}$, onde C_g é a seção transversal geométrica da partícula. Para uma esfera de raio a , por exemplo $C_g = \pi a^2$.

3.2 O espalhamento Mie

O primeiro caso a ser trabalhado é o de uma esfera dielétrica linear e homogênea de raio R e índice de refração n_s referente ao do meio de índice de refração n na qual está imersa, num esquema

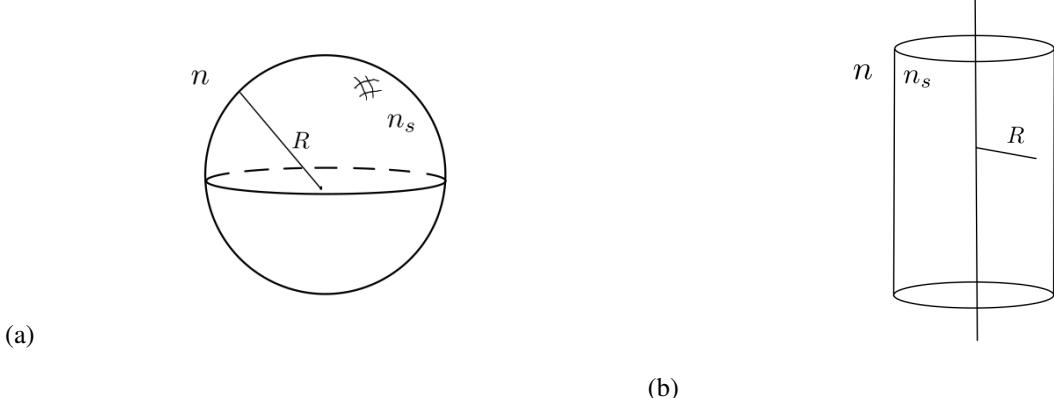


Figura 3: Representação esquemática de uma esfera homogênea e de um cilindro reto homogêneo infinito, ambos de Raio R e índice de refração relativo ao meio n_s .

Fonte: elaboradas pelo autor.

como apresentado na figura 3a. A esfera não apresenta cargas nem correntes livres. Esse é o chamado problema de Mie, em homenagem ao alemão Gustav Mie que em seu artigo de 1908 [2] resolveu analiticamente esse problema motivado pelo espectro do espalhamento (i.e. a cor) de suspensões coloidais metálicas. A origem do sistema de coordenadas é colocada no centro da esfera.

Note que da equação (3), temos que $\nabla \times \mathbf{E} = i\omega \mathbf{B}$. Daí, o campo magnético associado à onda incidente pode ser determinado.

O campo espalhado E_s e o campo transmitido E_t devem ter o formato visto nas equações (47) e (48). Com isso e aplicando as condições de contorno entre (38) e (41), além da definição dos VHEsf em (35) e (36) e a ortogonalidade dos VHEsf para diferentes l e m , chega-se no sistema de equações em (49).

$$\mathbf{E}_i(k, \mathbf{r}) = E_0 \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l W_{i,lm}^{(1)} \mathbf{M}_{lm}^{(j)}(k, \mathbf{r}) + W_{lm}^{(2)} \mathbf{N}_{i,lm}^{(j)}(k, \mathbf{r}) \quad (46)$$

$$\mathbf{E}_s(k, \mathbf{r}) = E_0 \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l A_{lm}^{(1)} \mathbf{M}_{lm}^{(h)}(k, \mathbf{r}) + A_{lm}^{(2)} \mathbf{N}_{lm}^{(h)}(k, \mathbf{r}) \quad (47)$$

$$\mathbf{E}_t(k_s, \mathbf{r}) = E_0 \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l W_{t,lm}^{(1)} \mathbf{M}_{lm}^{(j)}(k_s, \mathbf{r}) + W_{t,lm}^{(2)} \mathbf{N}_{lm}^{(j)}(k_s, \mathbf{r}) \quad (48)$$

$$\begin{cases} j_l(\rho_s)W_{t,lm}^{(1)} = j_l(\rho)W_{i,lm}^{(1)} + h_l(\rho)A_{s,lm}^{(1)} \\ n_s j_l(\rho_s)W_{t,lm}^{(2)} = [j_l(\rho)W_{i,lm}^{(2)} + h_l(\rho)A_{s,lm}^{(2)}] \\ \frac{n_s}{\rho_s} u'_l(\rho_s)W_{t,lm}^{(1)} = \frac{1}{\rho}[u'_l(\rho)W_{i,lm}^{(1)} + w'_l(\rho_s)A_{s,lm}^{(1)}] \\ \frac{1}{\rho_s} u'_l(\rho_s)W_{t,lm}^{(2)} = \frac{1}{\rho}[u'_l(\rho)W_{i,lm}^{(2)} + w'_l(\rho)A_{s,lm}^{(2)}] \end{cases} \quad (49)$$

Resolvendo esse sistema de equações para um material não magnético (de forma que $\mu = \mu_s$), obtemos os chamados coeficientes de Mie $a_l := -\frac{A_{lm}^{(2)}}{W_{i,lm}^{(2)}}$ e $b_l := --\frac{A_{lm}^{(1)}}{W_{i,lm}^{(1)}}$.

$$a_l(\rho) = \frac{u'_l(\rho_s)u_l(\rho) - n_s u_l(\rho_s)u'_l(\rho)}{u'_l(\rho_s)w_l(\rho) - n_s u_l(\rho_s)w'_l(\rho)} \quad (50) \quad b_l(\rho) = \frac{n_s u'_l(\rho_s)u_l(\rho) - u_l(\rho_s)u'_l(\rho)}{n_s u'_l(\rho_s)w_l(\rho) - u_l(\rho_s)w'_l(\rho)} \quad (51)$$

Com $u_l(z) = zj_l(z)$ e $w_l(z) = zh_l(z)$ as chamadas função de Riccati-Bessel e de Riccati-Hankel.

Na base de vetores harmônicos esféricos, então, a Matriz T para o problema de Mie fica da forma:

$$\mathbb{T} = \begin{pmatrix} -b_1 & 0 & \cdots & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & -b_2 & \cdots & 0 & 0 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \cdots \\ 0 & 0 & \cdots & -a_1 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & -a_2 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \quad (52)$$

O problema está resolvido, mas não quer dizer que ele está numa forma interessante de se trabalhar. Os feixes incidentes de interesse geralmente são ondas planas ou composições de ondas planas: qual a vantagem de se expandir algo exponencial em termos supercomplicados como vetores harmônicos esféricos? Uma ideia seria falar que a computação do problema com valores numéricos seria mais fácil, mas como exatamente uma soma infinita é de mais fácil computação? Talvez, se não precisarem ser calculados infinitos termos. Mas que truncamento é realmente bom? O que é um bom critério de convergência?

Dave [6] sugeriu que um critério que garantiria a convergência até a sexta casa decimal seria parar os cálculos dos coeficientes de Mie até o primeiro valor de l tal que a equação $|a_l|^2 + |b_l|^2 < 10^{-14}$ fosse satisfeita. Esse critério foi muito utilizado, mas poderia diferir na precisão de computador para computador na época. Assim, a estabilidade dos cálculos dos vetores de multipolo poderia ser prejudicada e os campos calculados poderiam facilmente ser diferentes dos que se queriam calcular.

Para fugir desses problemas, pode ser interessante assumir um valor de l_{max} a priori. Uma forma é assumir que l_{max} é uma função do parâmetro de tamanho do objeto $\rho = nkR$. Khare [7] utilizou bases teóricas para sugerir que $l_{max}(\rho)$ deveria ser uma função da soma de um termo linear, mais uma raiz cúbica do parâmetro de tamanho. Com isso, Wiscombe [8] fez certas modificações, testou diversas vezes e encontrou os parâmetros que podem ser encontrado na equação (53).

$$l_{max}(\rho) = \begin{cases} \lfloor \rho + 4\rho^{1/3} + 1 \rfloor, & \text{se } 0.02 \leq \rho \leq 8 \\ \lfloor \rho + 4.05\rho^{1/3} + 2 \rfloor, & \text{se } 8 < \rho < 4200 \\ \lfloor \rho + 4\rho^{1/3} + 2 \rfloor, & \text{se } \rho \geq 4200 \end{cases} \quad (53)$$

Então para uma gota de água ($n_s = 1,33$) de $R = 100\text{ nm}$ iluminada por uma luz monocromática de $\lambda = 500\text{ nm}$, uma aproximação muito razoável pode ser feita truncando as séries até a ordem $l_{max} = 6$. É interessante notar a especificação para $\rho > 0.02$. Por que na primeira condição não

simplesmente colocar $\rho \leq 8$? Isso acontece porque para partículas muito menores que o comprimento de onda, apenas o primeiro termo terá relevância significativa. Nesse limite, o espalhamento de Mie cai na dispersão de Rayleigh [9], mostrando que essa dispersão é apenas um caso particular da explicada pela teoria de Mie.

O que é vantagem para partículas pequenas, também é limitação para corpos grandes. Uma esfera de sílica $n = 1,46$ de raio 1 mm iluminada por uma luz de 500 nm , precisaria de um $l_{max} = 18500$. Uma esfera de vidro ($n = 1,52$) de 1 cm iluminada pela mesma luz precisa de cerca de 200000 termos para a obtenção de resultados razoáveis! Computadores são cada vez mais potentes, mas levando em consideração todas as recorrências que devem ser calculadas para se obter j_l e h_l , o tempo de cálculo pode ser oneroso demais. Para corpos que tem como tamanho característico milhares de vezes o comprimento de onda da luz incidente, a teoria da óptica geométrica pode ser utilizada de forma satisfatória¹ e menos onerosa.

Os vetores harmônicos esféricos também podem fornecer uma bela visão de como os campos são espalhados dependendo do ângulo de observação. É possível se definir as chamadas funções de dependência angular $\pi_{lm}(\theta) := \frac{P_{lm}(\cos \theta)}{\sin \theta}$ e $\tau_{lm}(\theta) := \frac{dP_{lm}(\cos \theta)}{d\theta}$, $\pi_l := \pi_{l1}$ e $\tau_l := \tau_{l1}$, com $\theta = 0$ a direção de incidência, de forma a simplificar a aparência da dependência polar dos VHEsf. As representações polar dessas funções para os 5 primeiros valores de l podem ser vistas na figura 4. Com ela é possível perceber que para valores ímpares de l , π_l tem simetria especular em quaisquer um dos eixos x ou y , enquanto τ_l só apresenta simetria especular no eixo x, com $\tau_l(\pi) = 0$ e $\tau_l(0) = \max(\tau_l)$. Para l par, o recíproco acontece.

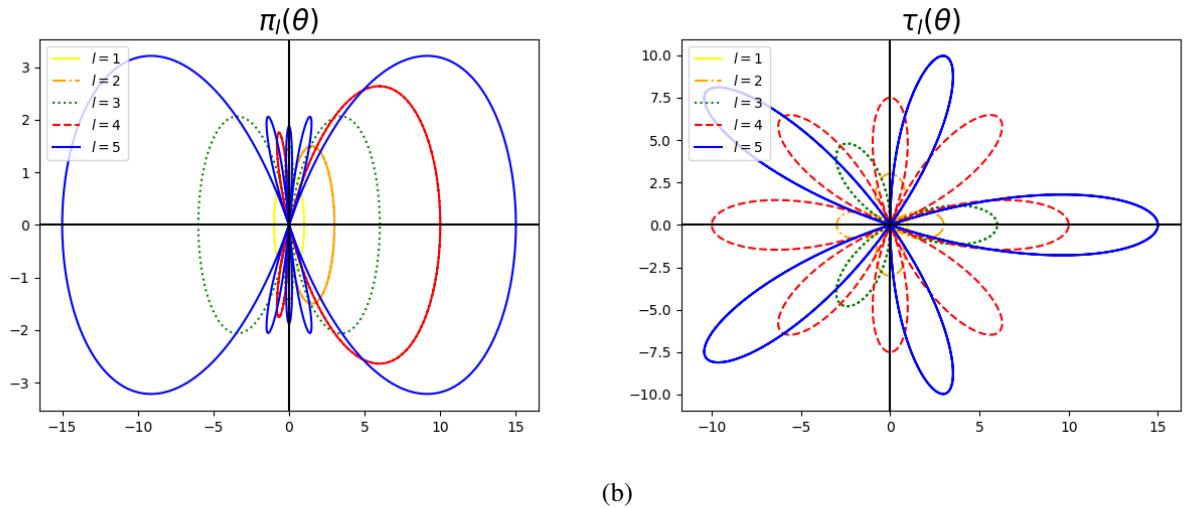
De qualquer forma, quanto maior o valor de l considerado para o truncamento, maior a influência na direção de propagação ($\theta = 0$) o campo espalhado terá. De tal sorte que a equação (53) sugere que quanto maior o corpo, mais espalhado na direção de propagação e menos na direção contrária à propagação o campo será, que é um resultado conhecido da óptica geométrica.

Prosseguindo os cálculos para coeficientes de choque para uma onda plana, das definições em (44) e (45), segue que:

$$\sigma_{sca} = \frac{2}{k^2 R^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1)(|a_l|^2 + |b_l|^2) \quad (54) \quad \sigma_{ext} = \frac{2\pi}{k^2 R^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1)Re(a_l + b_l) \quad (55)$$

O que pode ser feito com esse resultado, então, é calcular o quanto a luz é espalhada para diferentes frequências, entendendo de forma qualitativa a coloração de diferentes materiais e suspensões coloidais. O índice de refração num caso geral, todavia, é dependente do comprimento de onda. Existem diversos modelos[11][12] que calculam essa dependência, mas a discussão deles foge do escopo deste

¹A teoria de óptica geométrica leva a alguns resultados diferentes da solução exata. Um dos exemplos é que para corpos muito grandes as leis de Maxwell preveem que a seção de choque de extinção tende a duas vezes a seção de choque geométrica, enquanto a óptica geométrica prevê que ambas deveriam ser iguais. Esse é o chamado paradoxo da extinção [22].



(a)

(b)

Figura 4: Representação polar de $\pi_l(\theta)$ e $\tau_l(\theta)$ para $l = 1, 2, 3, 4$ e 5 .

Fonte: elaboradas pelo autor.

texto. Nos gráficos a seguir são utilizados dados de índice de refração disponíveis *online* [13].

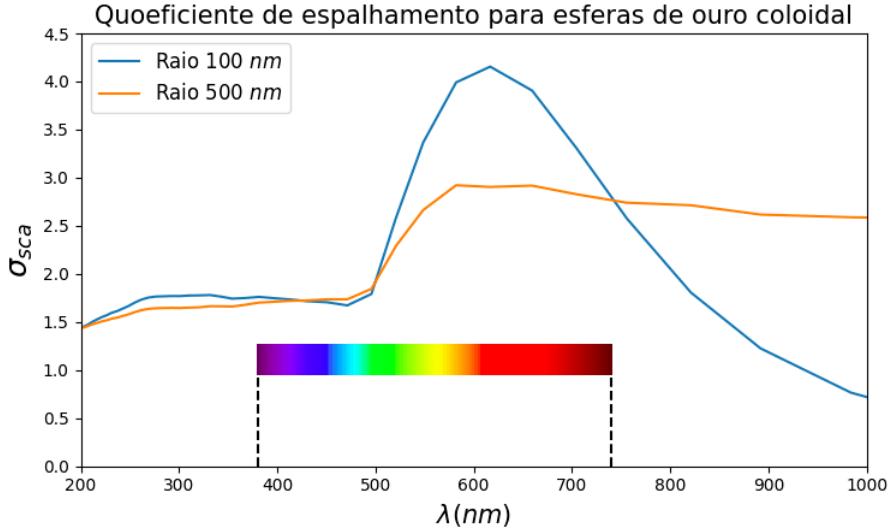


Figura 5: Coeficientes de espalhamento para esferas de ouro de diferentes raios no limite coloidal.

Fonte: elaborada pelo autor.

Utilizando os valores do índice de refração para esferas de ouro de diferentes raios, obtém-se a curva da figura 5. É interessante notar que o máximo das curvas para ambos os raios está na região do vermelho visível. É satisfatório dizer, então, que a teoria do espalhamento consegue explicar a coloração avermelhada do ouro coloidal.

Outro fato interessante é o demonstrado pela figura 6. Para raios muito pequenos, o coeficiente angular da curva log – log tende a -4. Ou seja, para partículas muito pequenas, $\sigma_{sca} \propto \frac{1}{\lambda^4}$. Isso é justamente o resultado de Rayleigh comentado na introdução, o que mostra que partículas pequenas espalham mais na região do azul, como é o caso dos gases da atmosfera, o que explica a cor do céu ser azul! Isso é um indício fortíssimo do poder dessa teoria que não assume considerações sobre o

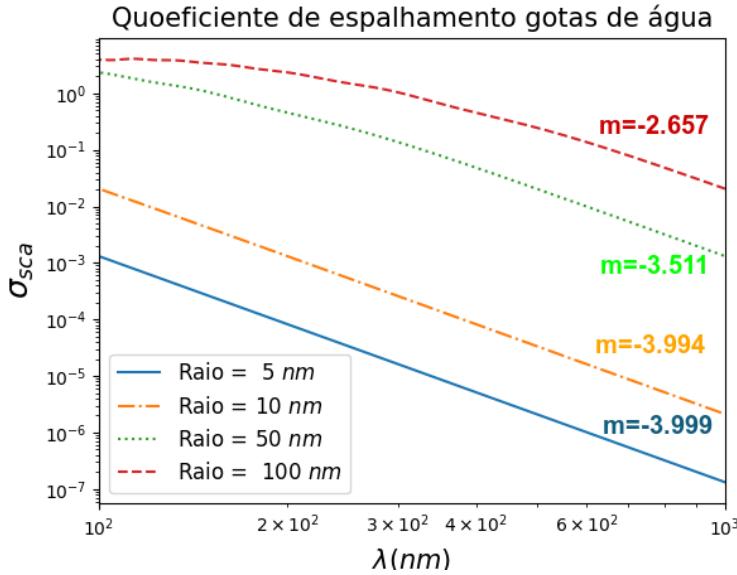


Figura 6: Coeficiente de espalhamento para gotículas esféricas de água de diferentes tamanho, em escala log – log e m é o coeficiente angular melhor reta do fit linear.

Fonte: elaborada pelo autor.

tamanho dos corpos espalhadores para explicar o fenômeno do espalhamento em qualquer escala!

Uma grande limitação dessa abordagem é a da geometria do corpo espalhador. Cristais metálicos em suspensões coloidais podem ter diversos formatos, como cubos, octaedros, placas e cilindros [2], e em primeira ordem uma aproximação esférica pode ser boa para partículas tão pequenas. Quanto maior o objeto, mais difícil fica desconsiderar efeitos de borda nessa aproximação geométrica e o erro entre o valor teórico e o medido em laboratório pode diferir bastante. Para pinças ópticas, por exemplo, onde o extremo controle em forças e torques são a alma do experimento, a consideração de que um nanotubo é esférico na hora do planejamento pode levar a efeitos cuja análise pela teoria de Mie levaria a resultados absurdos. Por isso é de suma importância a compreensão desse fenômeno e desenvolvimento de teorias analíticas para o estudo de outras geometrias.

3.3 O cilindro infinito

Uma outra geometria que pode aproveitar bastante dos sistemas de coordenadas que desenvolvemos na seção de teoria é a de um cilindro reto infinito. o caso geral para qualquer feixe é resolvível, mas de uma complexidade relativamente alta para o tamanho do texto. Uma alternativa então é fazer duas considerações sobre o problema: considerá-lo uma onda plana cuja direção de propagação faz um ângulo ξ com o eixo z e separar as ondas em duas polarizações ortogonais mais facilmente resolvidas. Para nos aproveitarmos da simetria do problema, o eixo z é colocado no eixo do cilindro.

As polarizações escolhidas para as contas são: ondas no plano xz (subíndice “par”), de tal forma que $\mathbf{E}_{i,par}(k, \mathbf{r}) = E_0 e^{-ik(r \sin \xi \cos \varphi + z \cos \xi)} (-\cos \xi \hat{\mathbf{z}} + \sin \xi \hat{\mathbf{x}})$, e ondas perpendiculares ao plano xz (subíndice “perp”), de tal forma que $\mathbf{E}_{i,perp}(k, \mathbf{r}) = E_0 e^{-ik(r \sin \xi \cos \varphi + z \cos \xi)} \hat{\mathbf{y}}$. Pelo formato das

equações, em ambos os casos é criada uma restrição para os possíveis valores de l na expansão da equação (22) de forma que $l = -ik \cos \xi$, restringindo o parâmetro de tamanho $\rho_l = kR \sin \xi$. Assim:

$$\mathbf{E}_{i,par} = \frac{E_0}{k \sin \xi} \sum_{m=-\infty}^{\infty} (-i)^m \mathbf{N}_m^{(j)} \quad (56) \quad \mathbf{E}_{i,perp} = \frac{E_0}{k \sin \xi} \sum_{m=-\infty}^{\infty} (-i)^{m+1} \mathbf{M}_m^{(j)} \quad (57)$$

$$\mathbf{E}_{s,par} = -\frac{E_0}{k \sin \xi} \sum_{m=-\infty}^{\infty} (-i)^m (ia_{m,par} \mathbf{M}_m^{(h)} + b_{m,par} \mathbf{N}_m^{(h)}) \quad (58)$$

$$\mathbf{E}_{s,perp} = \frac{E_0}{k \sin \xi} \sum_{m=-\infty}^{\infty} (-i)^m (ia_{m,perp} \mathbf{M}_m^{(h)} + b_{m,perp} \mathbf{N}_m^{(h)}) \quad (59)$$

Colocando esses valores nas equações de condições de contorno (38)-(41), lembrando que $\mathbf{B} = \frac{-i}{\omega} \nabla \times \mathbf{E}$ e considerando os meios não magnéticos ($\mu = \mu_s$) têm se que:

$$a_{m,par} = \frac{C_m V_m - B_m D_m}{W_m V_m + i D_m^2} \quad (60) \quad b_{m,par} = \frac{W_m B_m + i C_m D_m}{W_m V_m + i D_m^2} \quad (61)$$

$$a_{m,perp} = \frac{i C_m D_m - A_m V_m}{W_m V_m + i D_m^2} \quad (62) \quad b_{m,perp} = -i \frac{C_m W_m + A_m D_m}{W_m V_m + i D_m^2} \quad (63)$$

$$A_m := i\zeta [\zeta J'_m(\eta) J_m(\zeta) - \eta J_m(\eta) J'_m(\zeta)] \quad (64) \quad B_m := \zeta [n_s^2 \zeta J'_m(\eta) J_m(\zeta) - \eta J_m(\eta) J'_m(\eta)] \quad (65)$$

$$C_m := m \cos \xi \eta J_m(\eta) J_m(\zeta) \left(\frac{\zeta^2}{\eta^2} - 1 \right) \quad (66) \quad D_m := m \cos \xi \eta J_m(\eta) H_m(\zeta) \left(\frac{\zeta^2}{\eta^2} - 1 \right) \quad (67)$$

$$V_m := \zeta [n_s^2 \zeta J'_m(\eta) H_m(\zeta) - \eta J_m(\eta) H'_m(\zeta)] \quad (68) \quad W_m := i\zeta [\eta J_m(\eta) H'_m(\zeta) - \zeta J'_m(\eta) H_m(\zeta)] \quad (69)$$

Onde $\zeta = kR \sin \xi$ e $\eta = kR \sqrt{n_s^2 - \cos^2 \xi}$. Para os dois casos essa é a solução geral deduzida por Wait [15], mas a generalidade muitas vezes complica a visualização do que está acontecendo. Um caso particular é o da incidência normal ($\xi = \frac{\pi}{2}$), onde são recuperados os coeficientes obtidos por Kerker [14], onde $a_{m,par} = b_{m,perp} = 0$ e $a_{m,perp}$ e $b_{m,par}$ podem ser vistos a seguir:

$$a_{m,perp} = \frac{n_s J'_m(\rho) J_m(\rho_s) - J'_m(\rho_s) J_m(\rho)}{n_s J_m(\rho_s) H'_m(\rho) - J'_m(\rho_s) H_m(\rho)} \quad (70) \quad b_{m,par} = \frac{n_s J'_m(\rho_s) J_m(\rho) - J_m(\rho) J'_m(\rho_s)}{n_s J'_m(\rho_s) H_m(\rho) - J_m(\rho_s) H'_m(kR)} \quad (71)$$

Com $\rho = kR$ e $\rho_s = n_s kR$. É interessantíssimo notar que apesar de a situação física ser completamente diferente, o formato de $b_{m,par}$ é muito similar ao de b_l , e o de $a_{m,par}$ é muito similar ao de a_l , com a diferença sendo a utilização das funções de Bessel ou das funções esféricas de Riccati-Bessel. Isso sugere que pode haver alguma relação na forma que as contribuições dos vetores harmônicos cilíndricos decaem com o parâmetro m e como as contribuições dos vetores harmônicos esféricos decaem com o parâmetro l . É justamente isso que pode ser visto na figura 7. Assim, um bom critério de convergência a ser utilizado em computações pode ser aquele sugerido em (53).

Embora no nosso universo não existam cilindros de fato infinitos, essa solução pode ser muito

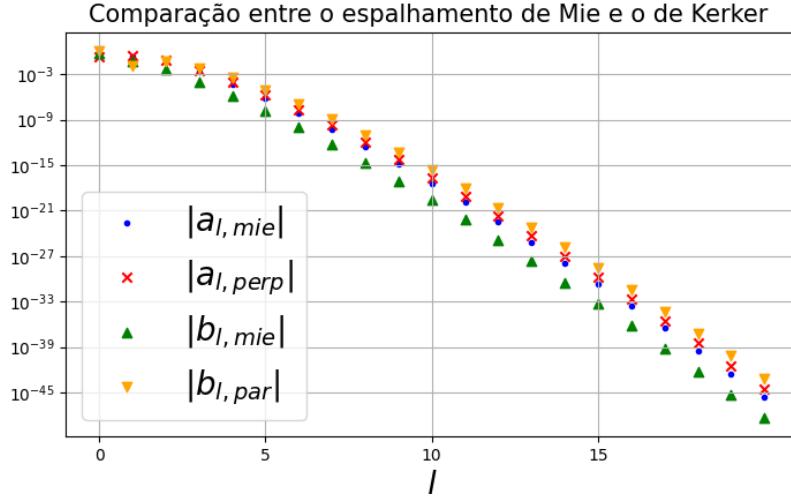


Figura 7: Comparação entre os módulos dos coeficientes da expansão em funções vetoriais de onda no caso do espalhamento Mie e do espalhamento por um cilindro com incidência perpendicular (Kerker) e como variam com a ordem da aproximação. Para um corpo espalhador com $n_s = 1,4585$, $R = 100 \text{ nm}$ sendo iluminado por uma luz com $\lambda = 530 \text{ nm}$. Só se considera $l > 0$ pois $a_{-m,par} = -a_{m,par}$, $b_{-m,par} = b_{m,par}$, $a_{-m,perp} = a_{m,perp}$ e $b_{-m,perp} = -b_{m,perp}$.

Fonte: elaborada pelo autor.

interessante para estudar cilindros que sejam muito finos comparados com sua altura [16]. Uma das considerações que pode ser feita para resolver o problema do espalhamento por um cilindro de altura finita é considerar o campo interno como sendo o do infinito, como feito por Seker & Schneider [17].

3.4 Outras geometrias

Para geometrias que sejam variações ou combinações de cilindros infinitos e esferas, os passos apresentados aqui ainda podem ser utilizados, com o devido cuidado. Diversos exemplos, como esferas ópticamente ativas, anisotrópicas e esferas concêntricas podem ser encontrados no Capítulo 8 de Bohren E Huffman [4]. Um caso muito interessante é o de cilindros concêntricos infinitos [14].

Outro caso desses é o trabalhado por Mangini & Tedeschi [18], de uma esfera imersa num cilindro infinito. Nesse artigo eles utilizam do fato de os vetores harmônicos esféricos e harmônicos cilíndricos estarem ligados pelas equações (72)-(75).

$$\mathbf{M}_{lm}(\mathbf{r}) = \frac{i^{m-l-1}}{2k} \int_0^\pi [\tau_{lm}(\alpha) \mathbf{M}_m(\mathbf{r}) + m\pi_{lm}(\alpha) \mathbf{N}_m(\mathbf{r})] d\alpha \quad (72)$$

$$\mathbf{N}_{lm}(\mathbf{r}) = \frac{i^{m-l-1}}{2k} \int_0^\pi [m\pi_{lm}(\alpha) \mathbf{M}_m(\mathbf{r}) + \tau_{lm}(\alpha) \mathbf{N}_m(\mathbf{r})] d\alpha \quad (73)$$

$$\mathbf{M}_m(\mathbf{r}) = k \sum_{l=m}^{\infty} i^{l-m+1} \frac{2l+1}{n(n+1)} \frac{(n-m)!}{(n+m)!} \sin \xi [\tau_{lm}(\xi) \mathbf{M}_{lm}(\mathbf{r}) + im\pi_{lm}(\xi) \mathbf{N}_{lm}(\mathbf{r})] \quad (74)$$

$$\mathbf{N}_m(\mathbf{r}) = k \sum_{l=m}^{\infty} i^{l-m+1} \frac{2l+1}{n(n+1)} \frac{(n-m)!}{(n+m)!} \sin \xi [im\pi_{lm}(\xi) \mathbf{M}_{lm}(\mathbf{r}) + \tau_{lm}(\xi) \mathbf{N}_{lm}(\mathbf{r})] \quad (75)$$

Para outras geometrias as condições de contorno não ficam num formato tão simples de se resolver, e as soluções das equações de Maxwell comumente precisam ser resolvidas de forma numérica. Alguns métodos comuns para se resolver esse tipo de problema são os Métodos de Elementos Finitos [21], método de Diferenças Finitas no Domínio do Tempo (FDTD) [19], aproximação por dipolos discretos [20] ou Método de Condições de Contorno Extendidas (EBCM) [24].

3.5 Forças ópticas

A luz, além de carregar energia, carrega também momento linear e eventualmente momento angular. Quando o espalhamento ocorre o campo incidente e espalhado em geral não carregam o mesmo momento linear em direções opostas. Como a quantidade de movimento deve se conservar localmente, há uma transferência de momentum entre o campo incidente e o corpo espalhador. A taxa de variação do momento no tempo leva à chamada “força de radiação”, que pode ser uma quantidade de interesse para diversos experimentos de aprisionamento óptico. Essa força pode ser calculada integrando o fluxo de momento eletromagnético ao longo de uma superfície esférica A de raio r que englobe a partícula, como na figura 2, de tal forma que:

$$\mathbf{F}_{rad} = -\frac{\epsilon}{4} r^2 \oint_A \left[|\mathbf{E}_s|^2 + \frac{c^2}{n_s^2} |\mathbf{B}_s|^2 + 2Re \left(\mathbf{E}_i \cdot \mathbf{E}_s^* + \frac{c^2}{n_s^2} \mathbf{B}_i \cdot \mathbf{B}_s^* \right) \right] \hat{\mathbf{r}} dA \quad (76)$$

Onde c é a velocidade da luz no vácuo e $|\cdot|$ representa módulo do vetor, tal que $|\mathbf{a}|^2 = \mathbf{a} \cdot \mathbf{a}^*$.

A integral em (76) não parece tão simples de resolver num caso geral da forma que está. Toda-via, expandindo os campos \mathbf{E}_i e \mathbf{E}_s em vetores harmônicos esféricos e utilizando suas relações de completeza, temos que a componente da força em uma dada direção $\hat{\mathbf{u}}$, em termos dos coeficientes de expansão A_s do campo espalhado e W_i do campo incidente, é dada por [5]:

$$F_{rad}(\hat{\mathbf{u}}) = -\frac{\epsilon E_i^2}{2k^2} \frac{4\pi}{3} \sum_{plm} \sum_{p'l'm'} \sum_{\mu=-1}^1 i^{l-l'} \left[A_{s,lm}^{(p)*} A_{s,l'm'}^{(p')} + W_{i,lm}^{(p)*} A_{s,l'm'}^{(p')} \right] Y_{1\mu}^*(\hat{\mathbf{u}}) \quad (77)$$

Onde $K_{\mu;lml'm'}^{pp'}$ são coeficientes numéricos dependentes dos coeficiente de Clebsch-Gordan.

Um exemplo do comportamento da força de radiação para um feixe de luz focado pode ser visto na figura 8. Q_i é a chamada *eficiência de força*, que é o módulo força de radiação na direção i dividida pela potência do feixe vezes a velocidade da luz. É interessante ressaltar o comportamento de aprisionamento axial e radial da força encontrada. O comportamento linear próximo ao foco é justamente o comportamento encontrado nas pinças ópticas [5], que é o que justifica a definição de constantes de força para estes aparelhos experimentais. Isso indica, mais uma vez, o quanto importante

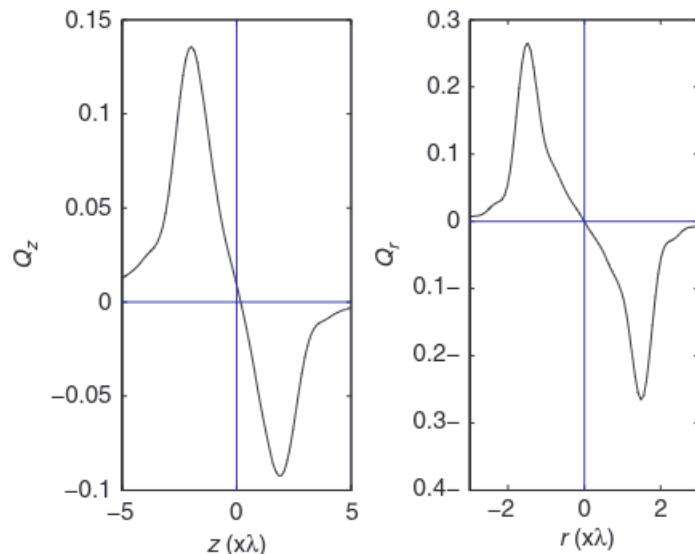


Figura 8: Eficiência de força axial (figura à esquerda) e radial (à direita) de um feixe de $\lambda = 1064 \text{ nm}$ focado em água por uma lente de abertura numérica 1.25 espalhado por posição para uma esfera de sílica de raio $1.2 \mu\text{m}$. A origem do sistema de coordenadas está no foco do feixe.

Fonte : Niemen, T.A. et al [23]

é o desenvolvimento de teorias de espalhamento para a compreensão correta e para o planejamento adequado de experimentos que envolvam aprisionamento óptico [5].

4 Conclusão

Neste trabalho discutimos sobre soluções da equação de Helmholtz para coordenadas cilíndricas e esféricas, no contexto do eletromagnetismo. Utilizamos desta teoria para resolver analiticamente o problema do espalhamento para os casos canônicos da esfera dielétrica e do cilindro reto infinito dielétrico com quaisquer tamanhos característicos. Com isso, obtemos expressões exatas para o campo espalhado por estes objetos. Além disso, comentamos sobre outras geometrias derivadas das canônicas e sobre métodos numéricos para a solução desse problema para quaisquer geometrias.

Também discutimos em quais limites de tamanho podem ser interessante utilizar essa abordagem. Concluímos que para corpos muito grandes o truncamento deve ser feito com muitos termos, o que requer muito poder computacional e pode não trazer resultados fundamentalmente diferentes da teoria de óptica geométrica. Para corpos muito pequenos, as teorias aqui desenvolvidas reproduzem o espalhamento Rayleigh. Assim, para corpos com tamanho característico da ordem do comprimento de onda da luz incidente, as teorias de Mie e de Wait são descrições exatas que levam a truncamentos razoáveis para os campos espalhado e transmitido com poucos termos.

Encontramos expressões analíticas para o coeficiente de espalhamento para suspensões coloidais com partículas esféricas, analisando o caso do ouro, sob o ponto de vista de teoria de Mie. Além disso, mostramos que a intensidade da luz espalhada para pequenas partículas é inversamente proporcional à quarta potência do comprimento de onda. Por fim, mostramos como a expansão por VHEsf pode facilitar a computação de forças ópticas pela transformação de integrais em somatórios.

Portanto, a busca por soluções exatas para o problema do espalhamento de luz para diferentes geometrias no limite mesoscópico nos leva à compreensão do azul do céu, do vermelho do ouro, das forças ópticas de aprisionamento e de muito mais.

Referências

- [1] LORD RAYLEIGH F.R.S. X. *on the electromagnetic theory of light*. The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science, Series 5, v. 12, n. 73, p. 81–101, 1881.
- [2] MIE, G. *Beitrage zur optik trüber medien, speziell kolloidaler metallosungen*. Annalen der Physik, v. 330, n. 3, p. 377–445, 1908.
- [3] CRAIG, F. ; BOHREN, F. ; HUFFMAN, D. R. *Absorption and scattering of light by small particles*. New York: Wiley, 1998. cap.3 p.57-81.
- [4] CRAIG, F. ; BOHREN, F. ; HUFFMAN, D. R. *Absorption and scattering of light by small particles*. New York: Wiley, 1998. cap.8 p.181-223.
- [5] JONES, P.H; MARAGÒ, O. M.; VOLPE, G. *Optical tweezers: Principles and applications*. Cambridge University Press, 2015.
- [6] DAVE, J.V. *Scattering of electromagnetic radiation by a large, absorbing sphere*. IBM Journal of Research and Development, v.13, n. 3, p. 302–313, 1969.
- [7] KHARE, V.. *Short-wavelength scattering of electromagnetic waves by a homogeneous dielectric sphere*, 1975. Thesis (PhDT), University of Rochester, 1975.
- [8] WISCOMBE, W. J. *Mie scattering calculations: Advances in technique and fast, vector-speed computer codes*. Boulder: National Technical Information Service, US Department of Commerce, 1979. v.10.
- [9] Lord Rayleigh. V. *on the incidence of aerial and electric waves upon small obstacles in the form of ellipsoids or elliptic cylinders, and on the passage of electric waves through a circular aperture in a conducting screen*. The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science, v.44, n.266, p. 28–52, 1897.
- [10] Wikipedia contributors. *Mie scattering* — Wikipedia, the free encyclopedia, 2020.[Online;accessed 23-November-2020].
- [11]CRAIG, F.; BOHREN, F.; HUFFMAN, D. R. *Absorption and scattering of light by small particles*. New York: Wiley, 1998. cap.9 p.226-267.
- [12] HAO, F.; NORDLANDER, P. *Efficient dielectric function for FDTD simulation of the optical properties of silver and gold nanoparticles*. Chemical Physics Letters. v. 446, n.1, p.115–118, September, 2007.
- [13] Refractive index info. Disponível em: <https://refractiveindex.info/> Accessado em: 15/09/2021.
- [14] KERKER, M.; MATIJEVIC, E.. *Scattering of electromagnetic waves from concentric infinite cylinders*. J. Opt. Soc. Am. v.51, n. 5, p.506–508, May 1961.
- [15] WAIT, J. R.. *Scattering of a plane wave from a circular dielectric cylinder at oblique incidence*. Canadian Journal of Physics. v.33, n.5, p. 189–195, 1955.

- [16] LIND, A.C.; GREENBERG, J.M. *Electromagnetic scattering by obliquely oriented cylinders*. Journal of applied physics v. 37, n.8, p.3195–3203, 1966.
- [17] SEKER, S. .S.; SCHNEIDER, A. *Electromagnetic scattering from a dielectric cylinder of finite length*. IEEE Transactions on Antennas and Propagation, v.36, n.2, p.303–307, 1988.
- [18] MANGINI, F. and TEDESCHI, N. *Scattering of an electromagnetic plane wave by a sphere embedded in a cylinder*. J. Opt. Soc. Am. A , v.34, n.5, p.760–769, May 2017.
- [19] FUSCO, M. *FDTD algorithm in curvilinear coordinates (em scattering)*. IEEE Transactions on Antennas and Propagation, v.38, n.1, p.76–89, 1990.
- [20] DRAINE, B. T.; FLATAU, P. J. *Discrete-dipole approximation for scattering calculations*. J. Opt. Soc. Am. A , v.11, n.4, p.1491–1499, Apr 1994.
- [21] VOLAKIS, J. L.; CHATTERJEE, A.; KEMPEL, L. C. *Review of the finite-element method for three dimensional electromagnetic scattering*. J. Opt. Soc. Am. A, v.11, n.4, p.1422–1433, Apr 1994.
- [22] BERG, M.J; SORENSEN, C.M.; CHAKRABARTI, A. *A new explanation of the extinction paradox*. Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer, v.112, n.7. p.1170–1181, 2011. Sixth International Symposium on Radiative Transfer.
- [23] NIEMEN, T. A.; LOKE, V. L. Y.; STILGOE, A. B.; HECKENBERG, N. R.; RUBINSZTEIN-DULOP, H. *T-matrix method for modelling optical tweezers*. Journal of Modern Optics, v.58, n.5-6, p.528–544, 2011.
- [24] WATERMAN, P. C. *Symmetry, unitarity, and geometry in electromagnetic scattering*. Physical review D, v.3, n.4, p.825. 1971.