

O modelo harmônico de Drude-Lorentz

O modelo de Drude-Lorentz para a matéria é uma simplificação. Supomos um núcleo x_0 e um elétron preso harmonicamente ao núcleo. O modelo de Drude trata de um gás de elétrons na banda de condução, enquanto que o de Lorentz trata o caso de elétrons harmonicamente ligados aos seus respectivos átomos. Como a presente formulação pode descrever ambos os casos, é chamada de modelo de Drude-Lorentz. Além disso, também supomos que o elétron sofra uma força de fricção proporcional à sua velocidade. De acordo com a Segunda Lei de Newton, na presença de um campo eletromagnético a derivada temporal do momentum linear do elétron é igual à força de Lorentz, somada à força harmônica que prende o elétron ao núcleo e à força dissipativa proporcional à velocidade do elétron. Assim, a equação de movimento do elétron, considerando um movimento não relativístico, é dada por

$$m \frac{d^2 \mathbf{r}}{dt^2} = -e\mathbf{E} - e \frac{d\mathbf{r}}{dt} \times \mathbf{B} - m\gamma \frac{d\mathbf{r}}{dt} - m\omega_0^2 \mathbf{r},$$

onde a carga eletrônica é dada por $-e < 0$, γ é uma constante positiva e ω_0 é a frequência natural de oscilação do elétron em torno do núcleo pesado, de acordo com esse modelo. Como essa equação de movimento é linear em \mathbf{r} , podemos considerar sua versão complexa, escrevendo

$$m \frac{d^2 \mathbf{R}}{dt^2} = -e\boldsymbol{\epsilon} - m\gamma \frac{d\mathbf{R}}{dt} - m\omega_0^2 \mathbf{R}, \quad (1)$$

onde

$$\mathbf{r} = \text{Re}(\mathbf{R})$$

e

$$\mathbf{E} = \text{Re}(\boldsymbol{\epsilon}).$$

Aqui, desprezamos a força magnética por considerarmos a velocidade do elétron muito menor do que a velocidade da luz. Em outras palavras, se compararmos as magnitudes das forças magnética e elétrica, teremos

$$\frac{|e \frac{d\mathbf{r}}{dt} \times \mathbf{B}|}{|e\mathbf{E}|} \sim \left| \frac{d\mathbf{r}}{dt} \right| \frac{|\mathbf{B}|}{|\mathbf{E}|}$$

e, como para uma onda plana, por exemplo,

$$\frac{|\mathbf{B}|}{|\mathbf{E}|} \sim \frac{k}{\omega} = \frac{1}{c},$$

concluimos que

$$\frac{|e \frac{d\mathbf{r}}{dt} \times \mathbf{B}|}{|e\mathbf{E}|} \sim \frac{1}{c} \left| \frac{d\mathbf{r}}{dt} \right| \ll 1.$$

Agora suponhamos que uma onda plana monocromática incida sobre o átomo. A onda pode ser representada por seu campo elétrico complexo como

$$\boldsymbol{\epsilon} = \mathbf{E}_0 \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - i\omega t).$$

Para frequências ópticas, da ordem de 10^{15} Hz, e para $r \approx 1$ angstrom,

$$kr = \frac{\omega}{c} r \sim 2\pi \frac{10^{15}}{3 \times 10^8} \times 10^{-10} \ll 1.$$

Logo,

$$\boldsymbol{\epsilon} \approx \mathbf{E}_0 \exp(-i\omega t)$$

é uma boa aproximação para frequências ópticas. Com essa aproximação e ignorando qualquer efeito transiente, um ansatz para a Eq. (1) pode ser escrito como

$$\mathbf{R} = \mathbf{R}_0 \exp(-i\omega t)$$

e, substituindo, dá

$$-m\omega^2\mathbf{R}_0 = -e\mathbf{E}_0 + im\gamma\omega\mathbf{R}_0 - m\omega_0^2\mathbf{R}_0,$$

ou seja,

$$\mathbf{R}_0 = \frac{e\mathbf{E}_0}{m(\omega^2 - \omega_0^2 + i\gamma\omega)}.$$

Com isso, a solução fica

$$\mathbf{R} = \frac{-e\mathbf{E}_0 \exp(-i\omega t)}{m(\omega_0^2 - \omega^2 - i\gamma\omega)}.$$

O momento dipolar elétrico de um elétron é dado por

$$\begin{aligned} \mathbf{p} &= -e\mathbf{r} \\ &= -e\text{Re}(\mathbf{R}). \end{aligned}$$

Com a solução obtida acima, temos:

$$\begin{aligned} \mathbf{p} &= -e\text{Re}\left(\frac{-e\mathbf{E}_0 \exp(-i\omega t)}{m(\omega_0^2 - \omega^2 - i\gamma\omega)}\right) \\ &= \text{Re}\left(\frac{e^2\mathbf{E}_0 \exp(-i\omega t)}{m(\omega_0^2 - \omega^2 - i\gamma\omega)}\right). \end{aligned}$$

Se, ao invés de um átomo com um só elétron, o material for feito de moléculas com mais do que um elétron, então, se houver n_k elétrons do tipo k por molécula, o momento dipolar elétrico induzido na molécula ficará

$$\mathbf{p} = \text{Re}\left(\sum_k \frac{n_k e^2 \mathbf{E}_0 \exp(-i\omega t)}{m(\omega_k^2 - \omega^2 - i\gamma_k \omega)}\right).$$

Os elétrons, claramente, são todos iguais individualmente. Referimo-nos acima a elétrons do tipo k para indicar que esses elétrons têm, na molécula, a mesma frequência ω_k e o mesmo coeficiente de dissipação γ_k . Supondo que haja N moléculas por unidade de volume, a polarização do meio pode ser escrita como

$$\mathbf{P} = \text{Re}\left(\sum_k \frac{N n_k e^2 \mathbf{E}_0 \exp(-i\omega t)}{m(\omega_k^2 - \omega^2 - i\gamma_k \omega)}\right).$$

Notemos que essa polarização não é proporcional ao campo elétrico, diferentemente do caso eletrostático. Há uma defasagem na polarização com relação ao campo elétrico aplicado, implicando a existência de um atraso para a indução de polarização no meio material. Podemos escrever

$$\begin{aligned} \text{Re}\left(\frac{\exp(-i\omega t)}{\omega_k^2 - \omega^2 - i\gamma_k \omega}\right) &= \text{Re}\left\{\frac{[\cos(\omega t) - i\text{sen}(\omega t)](\omega_k^2 - \omega^2 + i\gamma_k \omega)}{(\omega_k^2 - \omega^2 - i\gamma_k \omega)(\omega_k^2 - \omega^2 + i\gamma_k \omega)}\right\} \\ &= \frac{(\omega_k^2 - \omega^2) \cos(\omega t) + \gamma_k \omega \text{sen}(\omega t)}{(\omega_k^2 - \omega^2)^2 + (\gamma_k \omega)^2} \\ &= \frac{\cos \varphi_k \cos(\omega t) + \text{sen} \varphi_k \text{sen}(\omega t)}{\sqrt{(\omega_k^2 - \omega^2)^2 + (\gamma_k \omega)^2}}, \end{aligned}$$

onde definimos

$$\cos \varphi_k = \frac{\omega_k^2 - \omega^2}{\sqrt{(\omega_k^2 - \omega^2)^2 + (\gamma_k \omega)^2}}$$

e

$$\text{sen} \varphi_k = \frac{\gamma_k \omega}{\sqrt{(\omega_k^2 - \omega^2)^2 + (\gamma_k \omega)^2}}.$$

Assim,

$$\mathbf{P} = \sum_k \frac{N n_k e^2 \mathbf{E}_0 \cos(\omega t - \varphi_k)}{m \sqrt{(\omega_k^2 - \omega^2)^2 + (\gamma_k \omega)^2}},$$

supondo que $\mathbf{E}_0 \in \mathbb{R}^3$.

Bibliografia

[1] John R. Reitz, Frederick J. Milford e Robert W. Christy , *Foundations of Electromagnetic Theory*, terceira edição (Addison-Wesley Publishing Company, 1979).