Ondas clássicas

Introdução à Química Moderna

Prof. Guilherme Duarte, Ph. D.

1 Números complexos

Em química quântica é bastante frequente a ocorrência de funções de números complexos, isto é, números que envolvem uma unidade imaginária, i:

$$i = \sqrt{-1}. \tag{1}$$

Quando estamos procurando raízes de polinômios, frequentemente encontramos situações em que as soluções são números imaginários. Por exemplo, ao resolver a equação $z^2 - 2z + 5 = 0$, encontramos que as raízes são $z = 1 \pm 2\sqrt{-1} = 1 \pm 2i$. Conforme vimos nesse exemplo, um número complexo é denotado como:

$$z = x + iy, \tag{2}$$

em que a parte real é dada por $Re(z) = x$ e a parte imaginária é dada por $Im(z) = y$. Essa notação, chamada de cartesiana, é bastante útil porque nos permite descrever o número complexo como um vetor em um plano de Argand-Gauss: a parte real fica na abcissa e a parte imaginária fica na ordenada (Figura 1). O plano complexo nos remonta à coordenadas polares, onde temos que

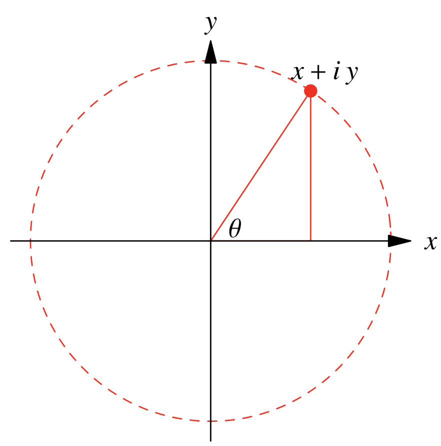

Figura 1: Plano complexo (ou de Argand-Gauss) para a representação de números complexos.

$x = r\cos\theta$ e $x = r\sin\theta$. r, nesse caso, é o valor absoluto do número complexo z e:

$$z = r\cos\theta + ir\sin\theta \implies z = r(\cos\theta + i\sin\theta) \tag{3}$$

O termo entre parêntesis no lado direito da equação 3 nos introduz a uma identidade muito importante dos números complexos:

$$\mathrm{e}^{i\theta} = \cos\theta + i\sin\theta, \tag{4}$$

o que torna o número complexo representável pela sua notação polar:

$$z = r\mathrm{e}^{i\theta}, \tag{5}$$

onde $r^2 = x^2 + y^2$ e que é muito mais conveniente de usar no dia-a-dia.

Números complexos possuem complexos conjugados. Se $z = x + iy$, seu complexo conjugado é:

$$z^* = x - iy = r\mathrm{e}^{-i\theta} \tag{6}$$

Ao multiplicar um número complexo pelo seu conjugado, encontramos o quadrado do seu valor absoluto:

$$z^* z = (x - iy)(x + iy) = x^2 + ixy - ixy - i^2 y^2 = x^2 + y^2 = r^2. \tag{7}$$

Essa relação é mais facilmente encontrada usando a forma polar dos números complexos:

$$z^* z = r\mathrm{e}^{-i\theta} \cdot r\mathrm{e}^{i\theta} = r^2 \mathrm{e}^{i\theta - i\theta} = r^2. \tag{8}$$

2 Ondas clássicas

Chamamos de onda qualquer efeito (ou perturbação) que se transmite entre dois pontos em um meio. Essa transmissão ocorre sem que haja transporte de matéria. O som, por exemplo, é uma onda clássica do tipo longitudinal e se propaga gerando regiões de maior e menor densidade, como mostrado na figura 2, à esquerda: a perturbação transmitida ocorre ao longo da direção de propagação da onda. Um pulso em uma corda, por sua vez, é uma onda transversal (figura 2 à direita): a perturbação se move perpendicularmente ao sentido da propagação da onda.

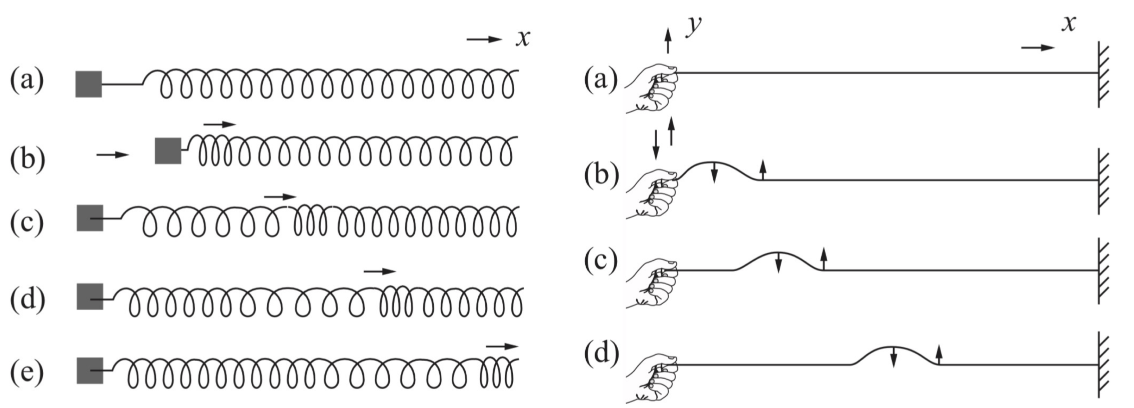

Figura 2: Ondas longitudinais (esquerda) e transversais (direita). Note que as ondas longitudinais geram regiões de compressão e rarefação ao longo do meio. Ondas transversais, por sua vez, são perturbações que geram movimento perpendicular ao sentido de propagação da onda.

Vamos considerar o caso de ondas transversais se propagando em uma direção. O perfil da onda em uma corda em um instante t é a forma da corda nesse tempo, sendo dada por $y(x, t)$, onde x é a posição na corda, como mostra a figura 3. Em 3(a), temos a posição inicial da onda; em (b) temos a onda após a sua propagação em uma distância vt. Note que na figura 3 que o perfil da onda em um instante $t + \Delta t$ é o mesmo perfil da onda no instante t. Isso pode ser verificado ao se mudar a referência. Se o observador estiver se movendo na velocidade propagação da onda, a impressão

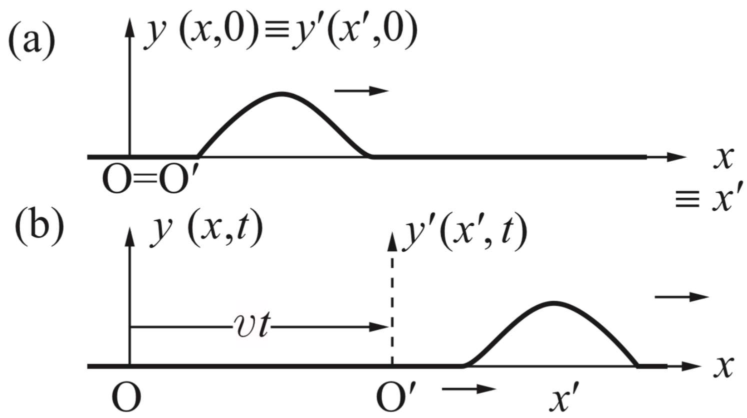

Figura 3: Onda transversal progressiva se movendo para a direita.

passada a quem observa é que a onda não saiu da posição inicial. Assim, podemos dizer que os dois referenciais estão relacionados por uma transformação simples:

$$
\begin{aligned}
x' &= x - vt \\
y' &= y.
\end{aligned}
\tag{9}
$$

As transformações na equação 9 significam que y depende de x e t por meio da relação $x' = x - vt$, podendo ser uma função qualquer de x', o que implica em:

$$
y(x,t) = y(x + \Delta x, t + \Delta t) \tag{10}
$$

para $\Delta x = v\Delta t$.

Quando uma onda atinge a extremidade fixa de uma corda finita, ela é refletida e gera uma onda progressiva no sentido oposto. Se uma onda progressiva se propagando no sentido positivo pode ser descrita como $y(x,t) = f(x - vt)$, uma onda se propagando no sentido negativo é $g(x + vt)$. Assim, uma corda com ondas se propagando em ambas direções podem ser representadas por:

$$
y(x,t) = f(x - vt) + g(x + vt) \tag{11}
$$

Um caso especial de ondas são as ondas harmônicas, em que a fonte da perturbação é uma oscilação harmônica. O perfil da onda é uma função periódica:

$$
f(x') = A\cos{(kx' + \delta)} = A\cos{[k(x - vt) + \delta]} = A\cos{(kx - \omega t + \delta)}, \tag{12}
$$

onde ω é a frequência angular e é igual a:

$$
\omega = kv = 2\pi\nu = \frac{2\pi}{\tau}, \tag{13}
$$

ν é a frequência da onda e τ é o seu período, isto é, o tempo de uma oscilação. δ é o que chamamos de constante de fase. No domínio do espaço, definimos o comprimento de onda, λ como o período temporal, isto é, a distância entre dois picos ou dois vales consecutivos na onda:

$$
\lambda = \frac{2\pi}{k}. \tag{14}
$$

Se a frequência $\nu = 1/\tau$ determina a quantidade de ciclos por unidade de tempo, podemos determinar o número de comprimentos de onda por unidade de comprimento por $\sigma = 1/\lambda$. $k = 2\pi\sigma = 2\pi/\lambda$ é o equivalente espacial da frequência angular e é chamado de número de onda. A é a amplitude da onda e δ, a constante de fase, determina a posição da onda com relação ao eixo y. Conforme vimos na seção anterior, uma função oscilatória pode ser descrita usando a notação complexa, assim uma onda harmônica é descrita por:

$$y(x,t) = Re\left[A\mathrm{e}^{i(kx-\omega t+\delta)}\right]. \tag{15}$$

3 Equação de onda

Para encontrar uma equação de movimento para a propagação da onda, considere a aceleração de um ponto x no meio de propagação. Sabemos que a aceleração é a segunda derivada da posição y com relação ao tempo t:

$$a = \frac{\partial^2}{\partial t^2} y(x,t) \tag{16}$$

A notação da equação 16 indica que é uma derivada parcial, isto é, se temos uma função de várias variáveis, derivamos $y(x,t)$ somente com relação à variável em questão. Na equação 16, derivamos com relação ao tempo e mantemos tudo que depende da posição constante. Sabemos que:

$$y(x,t) = f(x'). \tag{17}$$

Para calcular as derivadas de y com relação a t, temos que lembrar que $f(x')$ é uma função implícita de t, logo temos que aplicar a regra da cadeia. Na primeira derivada:

$$\frac{\partial y}{\partial t} = \frac{df}{dx'}\frac{dx'}{dt} = -v\frac{df}{dx'}, \tag{18}$$

onde $x' = x - vt$. De forma análoga, como x' é uma função de t e f é função de x':

$$\frac{\partial^2 y}{\partial t^2} = -v\frac{\partial}{\partial t}\Big(\frac{df}{dx'}\Big) = -v\frac{d}{dx'}\Big(\frac{df}{dx'}\Big)\frac{\partial x'}{\partial t} = v^2\frac{d^2 f}{dx'^2} \tag{19}$$

onde, se $f(g(t)) \implies f'(g(t)) = (df/dg)(dg/dt)$:

$$\frac{\partial}{\partial t}\Big(\frac{df(x'(t))}{dx'}\Big) = \frac{d(df/dx')}{dx'}\frac{dx'}{dt} = v\frac{d}{dx'}\Big(\frac{df}{dx'}\Big)$$

Agora temos que transformar a derivada do lado direito da equação 19 em uma derivada em x e não em x'. Para isso temos que transformar $x' \rightarrow x$ e isso é feito usando a regra da cadeia, pois f é função implícita de x:

$$\frac{\partial x'}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x}(x - vt) = 1$$

Assim, pela regra da cadeia:

$$\frac{\partial y}{\partial x} = \frac{df}{dx'}\frac{\partial x'}{\partial x} = \frac{df}{dx'} \tag{20}$$

Observe que $\partial y/\partial x = df/dx'$ e podemos usar esse resultado para encontrar a segunda derivada de y de forma análoga nas equações a seguir:

$$\frac{\partial^2 y}{\partial x^2} = \frac{d^2 f}{dx'^2}\frac{\partial x'}{\partial x} = \frac{d^2 f}{dx'^2}. \tag{21}$$

Comparando as equações 21 e 19, temos que:

$$\frac{\partial^2 y}{\partial t^2} = v^2 \frac{\partial^2 y}{\partial x^2} \iff \frac{1}{v^2}\frac{\partial^2 y}{\partial t^2} - \frac{\partial^2 y}{\partial x^2} = 0 \tag{22}$$

No lado direito da equação 22 temos a equação de ondas, uma das equações mais importantes da física. É uma equação diferencial parcial de segunda ordem homogênea cujas variáveis podem ser separadas por meio da relação:

$$y(x,t) = X(x)T(t). \tag{23}$$

Substituindo a equação 23 na equação de onda, temos que:

$$T(t)\frac{d^2X(x)}{dx^2} = \frac{1}{v^2}X(x)\frac{d^2T(t)}{dt^2} \implies \frac{1}{X(x)}\frac{d^2X(x)}{dx^2} = \frac{1}{v^2T(t)}\frac{d^2T(t)}{dt^2}. \tag{24}$$

Observe que cada lado da igualdade da direita na equação 24 depende exclusivamente de uma única variável. Assim, podemos separar a equação facilmente em:

$$\frac{1}{X(x)}\frac{d^2X(x)}{dx^2} = K \implies \frac{d^2X(x)}{dx^2} - KX(x) = 0 \text{ e} \tag{25}$$

$$\frac{1}{v^2T(t)}\frac{d^2T(t)}{dt^2} = K \implies \frac{d^2T(t)}{dt^2} - Kv^2T(t) = 0, \tag{26}$$

onde K é chamada de constante de separação. As equações 25 e 26 são chamadas equações diferenciais lineares homogêneas com coeficientes constantes.

4 Encontrando a solução da equação de onda

Para determinar as soluções das equações 25 e 26 precisamos lidar com K. Se $K = 0$, as equações são facilmente resolvidas por integração direta:

$$X(x) = c_1x + c_2 \ \text{ e} \tag{27}$$

$$T(t) = c_3t + c_4, \tag{28}$$

onde c_1, c_2, c_3 e c_4 são constantes de integração determinadas pelas condições iniciais ou pelas condições de contorno do problema. No caso de uma onda harmônica estacionária em uma corda de comprimento L, podemos dizer que $y(0,t) = y(L,t) = 0$. A única forma que as equações 27 e 28 satisfazem as condições de contorno é se $X(x) = 0$, $\forall\, x$, $0 < x < L$. Essa solução não tem interesse físico, pois corresponde a uma corda parada.

Se $K \neq 0$, temos equações diferenciais da forma $\ddot{u} - k^2u = 0$. Esse tipo de equação é resolvida por meio da suposição de uma solução do tipo $u(x) = \mathrm{e}^{rx}$. Aplicando essa lógica para resolver a equação 26, temos que:

$$\frac{d^2}{dx^2}\mathrm{e}^{rx} - K\mathrm{e}^{rx} = 0 \implies (r^2 - K)\mathrm{e}^{rx} = 0, \tag{29}$$

Observe que para determinar a solução da equação diferencial, temos que determinar r e, pela 29:

$$r^2 - K = 0 \implies r = \pm\sqrt{K}. \tag{30}$$

Considere $K > 0$ e $K = k^2$. Observe que temos dois tipos de soluções possíveis, e^{kx} e e^{-kx}; a solução completa será uma função formada pela combinação linear das duas soluções:

$$u(x) = c_1\mathrm{e}^{kx} + c_2\mathrm{e}^{-kx}. \tag{31}$$

Considerando o problema da corda vibrante, se aplicarmos as condições de contorno $y(0,t) = y(L,t) = 0$, temos que $c_1 = c_2 = 0$ e novamente temos uma solução que não nos interessa. Observe que $c_1 = c_2 = 0$ necessariamente têm que ser zero porque não há valor de x para os quais as funções exponenciais e^{kx} e e^{-kx} sejam zero (é importante praticar desenhar gráficos).

Considere, agora, $K < 0$ e $K = -k^2$. A solução geral, lembrando da equação 30, será:

$$u(x) = c_1\mathrm{e}^{ikx} + c_2\mathrm{e}^{-ikx}. \tag{32}$$

Sabemos da sessão anterior que uma função exponencial imaginária pode ser escrita em termos de senos e cossenos (equação 4, $\mathrm{e}^{\pm i\theta} = \cos\theta \pm i\sin\theta$), assim podemos reescrever a função na equação 32 como:

$$\begin{aligned}
u(x) &= c_1\mathrm{e}^{ikx} + c_2\mathrm{e}^{-ikx} \\
&= c_1(\cos kx + i\sin kx) + c_2(\cos kx - i\sin kx) \\
&= (c_1 + c_2)\cos kx + (ic_1 - ic_2)\sin kx \implies \\
u(x) &= c_3\cos kx + c_4\sin kx
\end{aligned} \tag{33}$$

Observe que, as condições de fronteira podem ser observadas pela solução encontrada na equação 33. Primeiramente, $y(0,t) = 0 \implies X(0) = 0$, assim $c_3 = 0$:

$$X(x) = c_4\sin kx. \tag{34}$$

A segunda condição, $y(L,t) = 0 \implies X(L) = 0$, portanto:

$$\begin{aligned}
&X(L) = c_4\sin kL = 0 \implies kL = n\pi \implies k = \frac{n\pi}{L}, \quad n = 1,2,3,\ldots \\
&X(x) = A_n\sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right), \quad n = 1,2,\ldots
\end{aligned} \tag{35}$$

A resolução da equação temporal é bem semelhante. Lembrando que $K = -k^2$, temos que:

$$\frac{d^2T(t)}{dt^2} + k^2v^2T(t) = 0. \tag{36}$$

Sabemos que $k = n\pi/L$, logo:

$$\frac{d^2T(t)}{dt^2} + \frac{n^2\pi^2v^2}{L^2}T(t) = 0. \tag{37}$$

A solução geral desse problema pode ser encontrada idêntica ao problema espacial e é a função:

$$T(t) = B_n\cos\left(\frac{n\pi v}{L}t\right) + C_n\sin\left(\frac{n\pi v}{L}t\right), \quad n = 1,2,\ldots \tag{38}$$

Conforme vimos anteriormente, a quantidade $k_nv = n\pi v/L = \omega_n$ é a frequência angular da onda. A solução completa da equação de onda é dada por $y(x,t) = X(x)T(t)$:

$$y_n(x,t) = [D_n\cos\omega_nt + E_n\sin\omega_nt]\sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right), \quad n = 1,2,\ldots \tag{39}$$

onde $D_n = B_n A_n$ e $E_n = C_n A_n$. Como uma combinação linear de quaisquer soluções também é uma solução, a forma geral é dada por:

$$y(x,t) = \sum_{n=1}^{\infty} [D_n \cos \omega_n t + E_n \sin \omega_n t] \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right). \tag{40}$$

O termo dentro de colchetes na equação 40 pode ser reescrito como uma função cosseno deslocada devido a um fator de fase:

$$y(x,t) = \sum_{n=1}^{\infty} [F_n \cos(\omega_n t + \delta)] \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right). \tag{41}$$

É importante notar que a imposição de condições de contorno $y(0,t) = y(L,t)$ é diretamente relacionada ao surgimento do comportamento ondulatório.

5 Interferência de ondas

Sabemos que, classicamente, a luz é um fenômeno ondulatório. Uma das consequências dessa natureza é o fenômeno da interferência: quando duas ondas se sobrepõem, suas amplitudes se somam, conforme mostra a figura 4. Se um pico se sobrepõe a um pico ou um vale se sobrepõe a um vale, ocorre uma **interferência construtiva**; se um pico se sobrepõe a um vale, a soma das amplitudes resulta em uma onda com intensidade reduzida, uma **interferência destrutiva**. Experimentos de

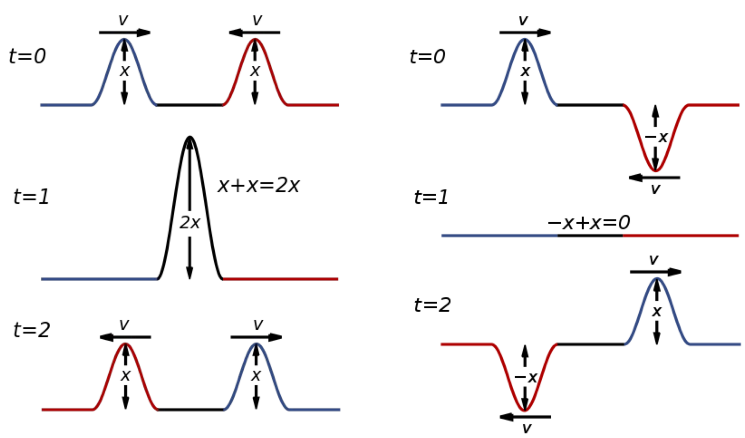

Figura 4: Interferência construtiva (esquerda) e destrutiva (direita) de ondas em uma corda.

interferência normalmente são realizados com luz monocromática (ω fixo): a radiação é representada por um campo elétrico oscilante representado por:

$$E(x,t) = Re[v(x)e^{-i\omega t}]. \tag{42}$$

Chamamos de ondas planas aquelas que a fase é constante em um plano perpendicular à direção de propagação. Elas são matematicamente representadas por:

$$E(x,t) = A\cos(kx - \omega t + \delta) \tag{43}$$

onde a parte espacial $v(x)$ é:

$$v(x) = A\mathrm{e}^{i\delta} \cdot \mathrm{e}^{ikx}. \tag{44}$$

A é a amplitude da onda e $A\mathrm{e}^{i\delta}$ é a sua amplitude complexa. k é o número de onda e está relacionado ao vetor de onda, $\boldsymbol{k} = k\hat{\boldsymbol{u}}$, que determina a direção da propagação, o eixo x, no nosso exemplo. Superfícies em que a fase da onda $\phi(x,t) = kx - \omega t + \delta$ é constante, são chamadas de frentes de onda. Chamamos de ondas esféricas aquelas oriundas de uma fonte puntiforme e cujas frentes de onda são esferas concêntricas. Como ondas carregam energia na sua propagação e a frente de onda se amplia com o aumento da distância da fonte, ondas esféricas têm a sua amplitude atenuada e são descritas como:

$$E(\boldsymbol{r},t) = \frac{A}{r}\cos\left(kr - \omega t + \delta\right) \ \text{ e} \tag{45}$$

$$v(\boldsymbol{r}) = A\mathrm{e}^{i\delta} \cdot \frac{\mathrm{e}^{ikr}}{r}. \tag{46}$$

A intensidade de uma onda monocromática oscila no tempo, mas como a frequência da radiação visível é de $10^{15}\,\mathrm{s}^{-1}$, experimentos em geral apenas capturam valores médios temporais, assim o valor médio da intensidade da radiação é proporcional somente à parte espacial da onda:

$$I(x) = |v(x)|^2 \tag{47}$$

Assim, a intensidade é constante para uma onda plana, mas cai com $1/r^2$ para ondas esféricas.

Considere o experimento de dupla-fenda de Thomas Young (figura 5): uma fonte puntiforme F ilumina um anteparo opaco $\mathcal{A}$ que contém duas fendas P_1 e P_2 próximas entre si. A observação é feita em um outro anteparo, $\mathcal{O}$, que recebe a radiação emitida por P_1 e P_2. Um ponto arbitrário P em $\mathcal{O}$ pode ser atingido por radiação que percorre dois caminhos diferentes $\overline{P_1P}$ e $\overline{P_2P}$. Conforme

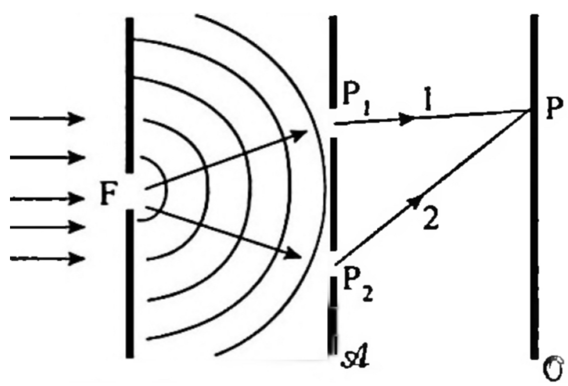

Figura 5: Experimento de dupla-fenda de Young.

podemos esperar pelo comportamento ondulatório da luz, a intensidade medida em P não é a soma das iluminações oriundas de cada orifício, mas faixas brilhantes e escuras (figura 6) chamadas de franjas de interferência. No experimento de Young com luz monocromática, a onda resultante no ponto P é a soma das contribuições oriundas de P_1 e P_2, assim:

$$E(x,t) = Re[v_1(x)e^{i\omega t} + v_2(x)e^{-i\omega t}] \tag{48}$$

A intensidade resultante em P, segundo a equação 47, é:

$$I(x) = |v_1(x) + v_2(x)|^2. \tag{49}$$

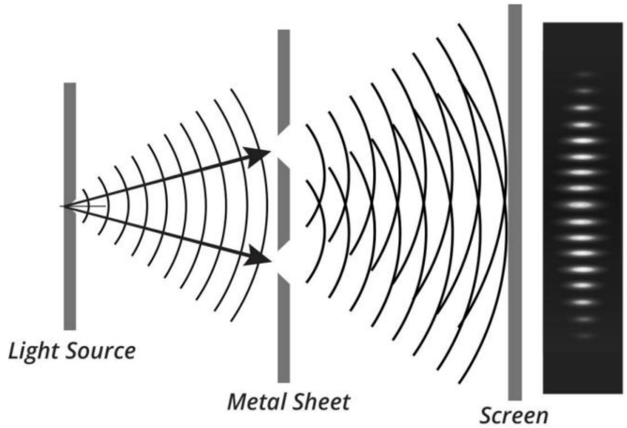

Figura 6: Experimento de dupla-fenda de Young e padrões de interferência observados.

Para simplificar o tratamento, vamos considerar v_1 e v_2 números complexos de fases ϕ_1 e ϕ_2, respectivamente. A equação 49 se torna:

$$I(x) = ||v_1|\mathrm{e}^{i\phi_1} + |v_2|\mathrm{e}^{i\phi_2}|^2. \tag{50}$$

Sabemos que o quadrado do valor absoluto de um número complexo é dado pela equação 8, portanto:

$$\begin{aligned} I(x) &= (|v_1|\mathrm{e}^{-i\phi_1} + |v_2|\mathrm{e}^{-i\phi_2})(|v_1|\mathrm{e}^{i\phi_1} + |v_2|\mathrm{e}^{i\phi_2}) \\ &= |v_1|^2 + |v_2|^2 + |v_1||v_2|(\mathrm{e}^{i(\phi_2-\phi_1)} + \mathrm{e}^{-i(\phi_2-\phi_1)}) \end{aligned} \tag{51}$$

Usando a identidade:

$$\cos\theta = \frac{\mathrm{e}^{i\theta} + \mathrm{e}^{-i\theta}}{2},$$

temos que a intensidade do sinal no anteparo $\mathcal{O}$ é dada por:

$$I(x) = |v_1|^2 + |v_2|^2 + 2|v_1||v_2|\cos(\phi_2 - \phi_1) \iff I = I_1 + I_2 + 2\sqrt{I_1 I_2}\cos(\phi_2 - \phi_1). \tag{52}$$

Observe que o último termo da equação representa a interferência e a equação 52 é chamada de lei básica da interferência. $\Delta = \phi_2 - \phi_1$, a diferença de fase, ajuda a determinar se ocorre interferência construtiva ou destrutiva:

$$\begin{aligned} \Delta = 2n\pi &\implies I = (\sqrt{I_1} + \sqrt{I_2})^2 \implies \text{interferência construtiva} \\ \Delta = (2n+1)\pi &\implies I = (\sqrt{I_1} - \sqrt{I_2})^2 \implies \text{interferência destrutiva,} \end{aligned} \tag{53}$$

onde $n = 0, \pm1, \pm2, \ldots$. Se $I_1 = I_2$, a interferência construtiva leva a uma intensidade $I = 4I_1$ e a interferência destrutiva leva a uma intensidade de franja $I = 0$. A existência de padrões de interferência é um aspecto bastante característico de ondas que tem consequências importantíssimas no desenvolvimento da química moderna.

6 Leituras Recomendadas

[1] Donald A. McQuarrie (1997), *Physical Chemistry: a molecular approach*, University Science Books. Capítulos A e 2.

[2] H. Moysés Nussenzveig (1997), *Curso de Física Básica 4: Ótica, Relatividade e Física Quântica*, Editora Edgard Blücher. Capítulo 3.1.