

UNIVERSIDADE FEDERAL DO ESPIRITO SANTO
CENTRO DE CIÊNCIAS EXATAS
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA

JEFFERSON RODRIGUES ROCHA

**A ENERGIA DE CASIMIR E A ENERGIA DE
TRANSIÇÃO DE FASE FERROMAGNÉTICA
EM DUPLAS PEROVSQUITAS**

VITÓRIA
2017

JEFFERSON RODRIGUES ROCHA

**A ENERGIA DE CASIMIR E A ENERGIA DE
TRANSIÇÃO DE FASE FERROMAGNÉTICA EM
DUPLAS PEROVSQUITAS**

Tese apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Física da Universidade Federal do Espírito Santo, para a obtenção de Título de Doutor em Física.

Orientador: Prof. Dr. Marcos Tadeu D'Azeredo Orlando

VITÓRIA
2017

JEFFERSON RODRIGUES ROCHA

**A ENERGIA DE CASIMIR E A ENERGIA DE
TRANSIÇÃO DE FASE FERROMAGNÉTICA EM
DUPLAS PEROVSQUITAS**

Tese apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Física da Universidade Federal do Espírito Santo, para a obtenção de Título de Doutor em Física.

COMISSÃO EXAMINADORA

Prof. Dr. Marcos Tadeu D'Azeredo Orlando (Orientador)
Universidade Federal do Espírito Santo

Prof. Dr. José Alexandre Nogueira
Universidade Federal do Espírito Santo

Prof. Dr. Antônio Brasil Batista
Universidade Federal do Espírito Santo

Prof. Dr. João Francisco Justo
Universidade de São Paulo

Profa. Dra. Jacyra Soares
Universidade de São Paulo

Dedicado a minha Família

Agradecimentos

Agradeço a Deus por ter me dado saúde e a oportunidade de trabalhar com Dr. Marcos Tadeu D'Azeredo Orlando e com meus colegas, a minha mãe dona Rute Rodrigues Rocha e meu pai Luis Rocha (in memoriam) e meus irmãos. Agradeço também a Capes pela concessão da bolsa e a Universidade Federal do Espírito Santo.

“Quando chega o momento da ação, o momento da
preparação já se foi ”

Michael Phelps

Resumo

Esta tese está baseada na teoria de Bordag sobre a energia de Casimir. Esta proposta relaciona a energia de Casimir entre planos de plasma condutores e a energia térmica na transição em duplas perovskitas ferromagnéticas condutoras. Utilizando esta associação foi possível calcular a temperatura crítica de Curie T_c relacionando a fração da energia entre planos condutores presentes nesses materiais e o parâmetro de Sommerfeld γ de cada composto. Para avaliar experimentalmente nossa proposta foram consideradas as temperaturas de transição T_c e os parâmetros γ de 3 amostras: Sr_2CrReO_6 , Sr_2FeReO_6 e Ba_2FeReO_6 . Verificamos que para essas amostras a distância c entre os planos condutores é associada a temperatura de Curie T_c . Nossa proposta para o cálculo de T_c é consistente com os valores encontrados na literatura para amostras com essas características (ferrometálicas e condutoras). Com base na nossa teoria propusemos a confecção de uma nova amostra que apresentasse um parâmetro c similar ao da amostra Sr_2CrReO_6 gerando com isso uma temperatura de Curie $T_c \approx 635K$, a saber: $Sr_{1.8}Y_{0.2}CrReO_6$. Esse novo composto é uma dupla perovskita com características metálicas ferromagnéticas e com planos condutores formados por octaedros alternados de ReO_6 e FeO_6 que apresentou $T_c = 635K$.

Abstract

This thesis is based on Bordag's theory of Casimir energy. This proposal relates the Casimir energy between conductor plasma planes and the thermal energy in the transition in double ferromagnetic conductive perovskites. Using this association it was possible to calculate the critical temperature of Curie T_c relating the fraction of the energy between these materials and the parameters of Sommerfeld γ of each compound. To evaluate experimentally our proposal we considered the transition temperatures T_c and the parameters of 3 samples: Sr_2CrReO_6 , Sr_2FeReO_6 e Ba_2FeReO_6 . We have found that for these samples the distance c between the conducting planes is associated with the Curie temperature T_c . Our proposal for the calculation of T_c is consistent with the values found in the literature for samples with these characteristics (ferrometal and conductive). Based on our theory we proposed the preparation of a new sample that presented a parameter c similar to that of the sample Sr_2CrReO_6 thus generating a Curie temperature $T_c \approx 635K$, namely: $Sr_{1.8}Y_{0.2}CrReO_6$. This new compound is a double perovskite with ferromagnetic metallic characteristics and octahedral geometry formed by planes containing ReO_6 and presenting $T_c = 635K$.

Lista de Figuras

3.1	Duas placas paralelas condutoras neutras experimentam uma força atrativa atribuída a flutuações do campo eletromagnético quantizado no estado vácuo.	38
3.2	Cavidade em forma de paralelepípedo com paredes perfeitamente condutoras e neutras. L_z, L, L são as dimensões do paralelepípedo.	39
3.3	Primeiro modelo de Bordag.	45
3.4	Segundo modelo de Bordag. Folhas infinitamente finas de plasma separadas por uma distância d	46
3.5	Representação de κ no plano complexo.	48
3.6	Típico potencial ligado unidimensional: Os estados ligados são mostrados pelas linhas pontilhadas.	48
3.7	Interação do campo eletromagnético com a superfície de um metal.	49
3.8	Modos de plasmon de superfície associados a oscilação da carga eletrônica. Anti simétrico e simétrico.	59
4.1	Vértices em uma malha cúbica de estados que se aproximam de uma esfera de raio k_F no espaço k	66
5.1	Dupla perovskita típica A_2MReO_6 ($A=Sr,Ca$; $M=Mg,Sc,Cr,Mn,Fe,Co,Ni,Zn$). Fonte:Referência [57]	73
5.2	Estrutura esquemática de uma dupla perovskita ferromagnética formada por planos de plasma metálicos.	74
5.3	Transições de fase levando se em conta uma constante de Curie fixa. T_c é a temperatura de transição para fase ferromagnética.	75
A.1	Deslocamento virtual feito a tempo fixo (t) e deslocamento real feito a tempo ($t+dt$)	84

Lista de Tabelas

6.1	Temperaturas calculadas com base na fração da energia de Casimir tomando $T_c=400$ K do composto Sr_2FeReO_6 como referência	79
6.2	Cálculo do coeficiente de Sommerfeld com base em uma amostra padrão $T_C = 400K$, Área= a.b	79
6.3	Temperaturas calculadas com base na fração da energia de Casimir tomando T_c (referencia) = 400 K	80

Sumário

1	Introdução	13
2	Revisao Teórica	16
2.1	Teoria Clássica de Campos	16
2.1.1	Formulação Lagrangiana e Hamiltoniana de Campos	16
2.1.2	Equações de Euler-Lagrange	17
2.1.3	Lagrangiana do Campo Eletromagnético	19
2.2	Quantização do Campo Eletromagnético	24
2.2.1	Gauge de Coulomb	25
2.2.2	Gauge de Lorentz	30
3	Modelo de Bordag e energia de Casimir	37
3.1	Revisão sobre o efeito Casimir	37
3.1.1	Calculo da energia de Casimir	38
3.2	A proposta de Bordag para energia de Casimir	45
3.2.1	Condições de contorno para o caso dielétrico	50
3.2.2	Condições de contorno para Folhas de Plasma	51
3.2.3	Modelo das placas	55
3.2.4	Energia do Vácuo	58
3.2.5	Calculo da contribuição dos plasmons na Energia	60
4	Revisão teórica sobre o modelo de Sommerfeld para metais	64
4.1	Propriedades do gás de Fermi no estado fundamental	64
4.1.1	Densidade de estados	67
4.1.2	Espansão de Sommerfeld	69
5	Duplas perovsquitas	72
5.1	Sobre as duplas perovsquitas.	72

6	Correlação entre a teoria de Bordag e o estado magnético em duplas perovskitas magnéticas e metálicas	76
6.1	Relação entre a temperatura de transição na dupla perovskita e efeito Casimir .	77
6.1.1	Verificação experimental	80
7	Discussão e Conclusão	81
A	Formalismo de Lagrange e Hamilton	83
A.1	Vínculos	83
A.2	Princípio D’Alembert	84
A.3	Dedução das equações de Lagrange	85
A.4	Equações de Hamilton	90
A.5	Parênteses de Poisson	93
B	Campo Eletromagnético	95
B.1	Equações de Maxwell	95
B.1.1	Formulação Covariante do Eletromagnetismo	98
C	Massa Efetiva	106
D	Publicações geradas a partir desta tese	109
	Referências Bibliográficas	121

Capa, prefácio e afins

Capítulo 1

Introdução

O efeito Casimir foi proposto pelo físico holandês H.B.G.Casimir em 1948 e consiste basicamente na atração entre duas placas perfeitamente condutoras paralelas e neutras [1]. Esse efeito tem sua origem na química coloidal e está diretamente relacionado à interação de Van der Waals [2–8]. A explicação correta para a interação de Van der Waals não retardada entre dois átomos neutros mas polarizáveis só foi possível após o estabelecimento da mecânica quântica. Usando uma aproximação perturbativa London [9] mostrou em 1930 pela primeira vez que a interação mencionada era $V \approx -(3/4)(\hbar \cdot w_0 \alpha^2 / d^6)$, onde α é a polarizabilidade estática do átomo, w_0 é frequência de transição dominante e d representa a distância entre os átomos. Na década de 40, vários experimentos foram realizados para estudar o equilíbrio em suspensões coloidais entre estes os experimentos de Verwey e Overbeck [10]. Basicamente, dois tipos de força foram utilizadas para explicar esse equilíbrio, foram utilizadas a força eletrostática repulsiva entre as camadas de partículas carregadas absorvidas por partículas coloidais e as forças atrativas de London-Van der Waals mas, as experiências mostraram que para grandes distâncias a expressão de London não era correta. A convergência entre os resultados experimentais e teóricos só era possível se a interação entre os átomos caísse mais rapidamente que $1/d^6$ foi sugerido que a diferença no comportamento para grandes distâncias era devido a efeitos de retardo da interação eletromagnética isto é, as informações de alguma mudança ou flutuação ocorrida em um átomo deveria levar um tempo finito para alcançar o outro. Efeitos de retardo devem ser levados em conta sempre que o intervalo de tempo gasto para que um sinal de luz viaje de um átomo a outro for da ordem de ou maior que os tempos atômicos característicos i.e $\frac{r}{c} \geq \frac{1}{\omega_{mn}}$ onde

ω_{mn} são frequências de transição atômicas. Casimir e Polder [11], motivados pelo desacordo entre a experiência e a teoria consideraram pela primeira vez os efeitos do retardo nas forças de Van der Waals entre dois átomos ou entre um átomo e uma parede condutora. Eles mostraram que no regime de retardo o potencial de van der Waals entre dois átomos é dado pela expressão $V_{RET} = -23\hbar\alpha_a\alpha_b/4\pi d^7$ em contraste com o resultado encontrado por London. Estes resultados foram obtidos no contexto da eletrodinâmica quântica (QED). Em 1948, seguindo uma sugestão de Neils Bohr, Casimir [1] refez os cálculos anteriores de uma forma mais simples pelo cálculo da mudança na energia de ponto zero causada pela presença de paredes condutoras neutras e infinitas. A energia de Casimir encontrada pelo cálculo da diferença entre a energia de ponto zero causada pela presença das placas foi $E_c = -\hbar.c.\frac{\pi^2.A}{d^3}$ onde \hbar é a constante de Planck dividido por 2π , A é a área das placas, d a distância entre elas e c é a velocidade da luz. Em 1956, Lifshitz *et al* [12] obteve pela primeira vez um resultado mais geral que leva em conta efeitos como a permissividade e a temperatura [13]. A teoria de Lifshitz no limite em que as condições de contorno são as propostas por Casimir leva ao mesmo resultado [2–8]. A influência de outros efeitos como plasmons de superfície isto é, excitações do campo eletromagnético que, se propagam ao longo da interface entre dois meios ou, ao longo de placas finas de plasma [14, 15] foi considerada em vários trabalhos [16–19]. Bordag *et al* [20] em 2006, considerou as forças de Casimir entre duas placas de plasma separadas por uma distância d preenchidas com material dielétrico e duas placas de plasma infinitamente finas separadas por vácuo notando que, a grandes distâncias, predomina a contribuição de ondas transversais isto é fótons enquanto a curtas distâncias predomina o efeito de plasmons de superfície. A verificação experimental do efeito Casimir foi realizada por alguns trabalhos [21–23] e suas aplicações tem sido utilizadas em materiais magnéticos com configuração planar [24, 25]. Nesse cenário, nossa proposta baseada na teoria de Bordag [6, 20, 26–28] é relacionar a energia térmica na transição em materiais magnéticos usando como ambiente ou ferramentas as duplas perovskitas ferromagnéticas condutoras. A tese está estruturada da seguinte forma:

- Capítulos 2: É feita uma revisão teórica sobre as teorias clássica e quântica de campos.
- Capítulo 3: O modelo de Bordag e a teoria de Casimir são demonstradas.
- Capítulo 4: É feita uma revisão teórica sobre o modelo de Sommerfeld.

- Capítulo 5: Apresentamos os compostos cuja estrutura pode ser modelada como planos magnéticos metálicos.
- Capítulo 6: Apresentamos nossa proposta teórica relacionando a energia de Casimir através do modelo de Bordag e o estado magnético em duplas perovskitas ferromagnéticas metálicas.
- Capítulo 7: Discussão e conclusão

Capítulo 2

Revisao Teórica

2.1 Teoria Clássica de Campos

O formalismo desenvolvido nesta seção tem por base a formulação lagrangeana e hamiltoniana de partículas descrito no Apêndice A e na teoria eletromagnética, cuja descrição se encontra no Apêndice B.

2.1.1 Formulação Lagrangiana e Hamiltoniana de Campos

Entende-se por campo, uma função definida em todos os pontos do espaço [29–34]. Por serem definidos sobre um conjunto contínuo de pontos, os campos podem ser descritos analogamente a um sistema de partículas quando o número de graus de liberdade tende a infinito. O sistema contínuo pode ser construído através de uma coordenada $\phi_{\vec{x}}$ associada a cada ponto \vec{x} do espaço e essa construção, pode ser feita considerando um sistema mecânico descrito por coordenadas generalizadas $q_1(t), \dots, q_\alpha(t)$. O conjunto dos q_α^s caracteriza um número finito de graus de liberdade, dessa forma, o sistema contínuo pode ser construído trocando o índice discreto α pelo índice contínuo \vec{x} [30–34].

2.1.2 Equações de Euler-Lagrange

Utilizando a notação $\phi(x,t)$ para o caso unidimensional e notando que a lagrangiana de um sistema discreto envolve uma soma sobre todos os graus de liberdade como demonstrado na seção A.3 equação (A.38), a lagrangiana de um sistema contínuo deve ser expressa em termos da integral espacial de \mathcal{L} , isto é, a densidade lagrangeana [30–34]. A função \mathcal{L} deve conter o termo equivalente às coordenadas generalizadas para o caso contínuo ϕ , um termo cinético isto é, $\frac{\partial\phi}{\partial t}$ e supondo que um campo interage somente com seus vizinhos infinitesimais denotando a ação local do campo em contraste com a idéia de ação a distância, a função \mathcal{L} deve conter o termo $\frac{\partial\phi}{\partial x}$. Admitindo uma possível dependência explícita em x e t [30–34],

$$S = \int_{x_1}^{x_2} \mathcal{L}(\phi, \frac{\partial\phi}{\partial t}, \frac{\partial\phi}{\partial x}, x, t) dx dt. \quad (2.1)$$

A ação mais geral para uma teoria de campos unidimensional é, portanto,

$$S = \int_{t_1}^{t_2} \int_{x_1}^{x_2} \mathcal{L}(\phi, \frac{\partial\phi}{\partial t}, \frac{\partial\phi}{\partial x}, x, t) dx dt, \quad (2.2)$$

e pelo princípio de Hamilton [29–31, 33]

$$\delta S = 0 \quad (2.3)$$

$$\int_{t_1}^{t_2} dt \int_{x_1}^{x_2} \delta \mathcal{L}(\phi, \frac{\partial\phi}{\partial t}, \frac{\partial\phi}{\partial x}, x, t) dx = 0. \quad (2.4)$$

Analogamente a uma corda vibrante a variação do campo se anula tanto nos extremos temporais, quanto nos extremos da coordenada espacial x , isto é,

$$\delta\phi(x, t_1) = \delta\phi(x, t_2) = 0, \quad (2.5)$$

$$\delta\phi(x_1, t) = \delta\phi(x_2, t) = 0, \quad (2.6)$$

$$\delta S = \int_{t_1}^{t_2} dt \int_{x_1}^{x_2} \left\{ \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\phi} \delta\phi + \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\dot{\phi}} \delta\dot{\phi} + \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\phi'} \delta\phi' \right\} dx, \quad (2.7)$$

onde $\dot{\phi} = \frac{\partial \phi}{\partial t}$ e $\phi' = \frac{\partial \phi}{\partial x}$. Realizando integrações por partes e considerando (2.5) e (2.6)

$$\int_{t_1}^{t_2} dt \int_{x_1}^{x_2} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\phi}} \delta \dot{\phi} dx = \int_{x_1}^{x_2} dx \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\phi}} \delta \phi(t_2) - \int_{t_1}^{t_2} dt \int_{x_1}^{x_2} dx \left[\frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\phi}} \right) \right] \delta \phi, \quad (2.8)$$

$$\int_{t_1}^{t_2} dt \int_{x_1}^{x_2} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\phi}} \delta \dot{\phi} dx = - \int_{t_1}^{t_2} dt \int_{x_1}^{x_2} dx \left[\frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\phi}} \right) \right] \delta \phi, \quad (2.9)$$

$$\int_{t_1}^{t_2} dt \int_{x_1}^{x_2} dx \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \phi'} \delta \phi' = \int_{t_1}^{t_2} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \phi'} \delta \phi(x_2) - \int_{t_1}^{t_2} dt \int_{x_1}^{x_2} dx \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \phi'} \right) \delta \phi, \quad (2.10)$$

$$\int_{t_1}^{t_2} \int_{x_1}^{x_2} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \phi'} \delta \phi dx = - \int_{t_1}^{t_2} dt \int_{x_1}^{x_2} dx \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \phi'} \right) \delta \phi, \quad (2.11)$$

Substituindo as equações (2.9) e (2.11) na equação (2.7) e utilizando o princípio de Hamilton para $\delta \phi$:

$$\int_{t_1}^{t_2} dt \int_{x_1}^{x_2} dx \left\{ \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \phi} - \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \left(\frac{\partial \phi}{\partial t} \right)} \right) - \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \left(\frac{\partial \phi}{\partial x} \right)} \right) \right\} \delta \phi = 0. \quad (2.12)$$

Com isso obtém-se a equação de Lagrange:

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \left(\frac{\partial \phi}{\partial t} \right)} \right) + \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \left(\frac{\partial \phi}{\partial x} \right)} \right) - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \phi} = 0. \quad (2.13)$$

Generalizando, para N campos em três dimensões o princípio de Hamilton leva a :

$$\delta S = \int_{t_1}^{t_2} dt \int_V d^3x \sum_{\alpha=1}^N \left\{ \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \phi_\alpha} \delta \phi_\alpha + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\phi}_\alpha} \delta \dot{\phi}_\alpha + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\nabla \phi_\alpha)} \delta \nabla \phi_\alpha \right\}, \quad (2.14)$$

$$\int_{t_1}^{t_2} dt \int_V d^3x \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\phi}_\alpha} \delta \dot{\phi}_\alpha = - \int_{t_1}^{t_2} dt \int_V d^3x \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\phi}_\alpha} \right) \delta \dot{\phi}_\alpha, \quad (2.15)$$

$$\int_{t_1}^{t_2} dt \int_v d^3x \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial(\vec{\nabla}\phi_\alpha)} \cdot \delta\vec{\nabla}\phi_\alpha = - \int_{t_1}^{t_2} dt \int_v d^3x \vec{\nabla} \cdot \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial(\vec{\nabla}\phi_\alpha)} \right), \quad (2.16)$$

Assim,

$$\delta S = \int_{t_1}^{t_2} dt \int_v d^3x \sum_{\alpha=1}^N \left[\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial\phi_\alpha} - \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial\dot{\phi}_\alpha} \right) - \vec{\nabla} \cdot \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial(\vec{\nabla}\phi_\alpha)} \right) \right] \delta\phi_\alpha = 0 \quad (2.17)$$

e a equação de Lagrange se torna para um $\delta\phi_\alpha$ arbitrário:

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial\phi_\alpha} - \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial\dot{\phi}_\alpha} \right) - \vec{\nabla} \cdot \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial(\vec{\nabla}\phi_\alpha)} \right) = 0. \quad (2.18)$$

2.1.3 Lagrangiana do Campo Eletromagnético

Notando que a ação deve ser um invariante de Lorentz assumindo que S seja um escalar,

$$S = \int \mathcal{L} dx^4, \quad (2.19)$$

a densidade lagrangiana deve ser um escalar e, além disso, as variáveis dinâmicas serão tomadas como sendo o quadri-potencial, suas derivadas e do tempo, $\mathcal{L}(A_\mu, \partial_\mu A_\nu(x), t)$ [35, 36].

A lagrangeana mais geral possível para o campo eletromagnético pode ser construída a partir dos tensores $F^{\mu\nu}$ ou $\mathcal{F}^{\mu\nu}$ (tensor dual). Os únicos escalares que podem ser construídos a partir desses tensores são $F^{\mu\nu} F_{\mu\nu}$, $F^{\mu\nu} \mathcal{F}_{\mu\nu}$ e $\mathcal{F}^{\mu\nu} \mathcal{F}_{\mu\nu}$ definidos no Apêndice B em termos de \vec{A} e suas derivadas.

$$A_\mu A^\mu, \quad (2.20)$$

$$(\partial_\mu A^\mu)^2, \quad (2.21)$$

$$(\partial_\mu A^\nu) (\partial^\mu A_\nu) (\partial_\mu A^\nu) (\partial_\nu A^\mu), \quad (2.22)$$

$$J_\mu A^\mu. \quad (2.23)$$

Se a corrente é conservada, $\partial_\mu J^\mu = 0$. O termo $J_\mu A^\mu$ referente a interação com as correntes topológicas, deve ser adicionado à lagrangiana do campo eletromagnético. Assim, a forma mais geral de \mathcal{L} é

$$\mathcal{L} = \alpha (\partial_\mu A^\mu)^2 + \beta (\partial_\mu A^\nu) (\partial^\mu A_\nu) + \gamma (\partial_\mu A^\nu) (\partial_\nu A^\mu) + \delta A_\mu A^\mu + \epsilon J_\mu A^\mu. \quad (2.24)$$

A equação de Euler-Lagrange para a densidade lagrangeana \mathcal{L} (2.24) é:

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial A_\mu} - \partial^\nu \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial^\nu A_\mu)} = 0. \quad (2.25)$$

Calculando o primeiro termo da equação (2.25):

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial A_\mu} &= 2\alpha \partial_\mu A^\mu \frac{\partial}{\partial A_\mu} (\partial_\mu A^\mu) + \beta \left[(\partial_\mu A^\nu) \frac{\partial}{\partial A_\mu} (\partial^\mu A_\nu) + (\partial^\mu A_\nu) \frac{\partial}{\partial A_\mu} (\partial_\mu A^\nu) \right] + \\ + \gamma &\left[(\partial_\mu A^\nu) \frac{\partial}{\partial A_\mu} (\partial_\nu A^\mu) + (\partial_\nu A^\mu) \frac{\partial}{\partial A_\mu} (\partial_\mu A^\nu) \right] + \delta \left[A_\mu \frac{\partial}{\partial A_\mu} A^\mu + A^\mu \frac{\partial}{\partial A_\mu} A_\mu \right] + \epsilon J_\mu \frac{\partial}{\partial A_\mu} A^\mu, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial A_\mu} &= 2\alpha \partial_\mu A^\mu \partial_\mu \left(\frac{\partial A^\mu}{\partial A_\mu} \right) + \beta \left[(\partial_\mu A^\nu) \partial^\mu \left(\frac{\partial A_\nu}{\partial A_\mu} \right) + (\partial^\mu A_\nu) \partial_\mu \left(\frac{\partial A^\nu}{\partial A_\mu} \right) \right] \\ + \gamma &\left[(\partial_\mu A^\nu) \partial_\nu \left(\frac{\partial A^\mu}{\partial A_\mu} \right) + (\partial_\nu A^\mu) \partial_\mu \left(\frac{\partial A^\nu}{\partial A_\mu} \right) \right] + \delta \left[A_\mu \frac{\partial A^\mu}{\partial A_\mu} + A^\mu \frac{\partial A_\mu}{\partial A_\mu} \right] + \epsilon J_\mu \frac{\partial A^\mu}{\partial A_\mu}, \end{aligned}$$

Usando o tensor métrico,

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial A_\mu} &= 2\alpha \partial_\mu A^\mu \partial_\mu g^{\mu\mu} \left(\frac{\partial A_\mu}{\partial A_\mu} \right) + \beta \left[(\partial_\mu A^\nu) \partial^\mu g^\nu_\mu \left(\frac{\partial A_\mu}{\partial A_\mu} \right) + (\partial^\mu A_\nu) \partial_\mu g^{\nu\mu} \left(\frac{\partial A_\mu}{\partial A_\mu} \right) \right] + \\ + \gamma &\left[(\partial_\mu A^\nu) \partial_\nu g^{\mu\mu} \left(\frac{\partial A_\mu}{\partial A_\mu} \right) + (\partial_\nu A^\mu) \partial_\mu g^{\nu\mu} \left(\frac{\partial A_\mu}{\partial A_\mu} \right) \right] + \delta \left[A_\mu g^{\mu\mu} \frac{\partial A_\mu}{\partial A_\mu} + A^\mu \frac{\partial A_\mu}{\partial A_\mu} \right] + \epsilon J_\mu g^{\mu\mu} \frac{\partial A_\mu}{\partial A_\mu} \end{aligned}$$

Assim,

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial A_\mu} &= 2\alpha \partial_\mu A^\mu \partial_\mu g^{\mu\mu} + \beta \left[(\partial_\mu A^\nu) \partial^\mu g^\nu_\mu + (\partial^\mu A_\nu) \partial_\mu g^{\nu\mu} \right] + \gamma \left[(\partial_\mu A^\nu) \partial_\nu g^{\mu\mu} + (\partial_\nu A^\mu) \partial_\mu g^{\nu\mu} \right] \\ &\quad + \delta \left[A_\mu g^{\mu\mu} + A^\mu \right] + \epsilon J_\mu g^{\mu\mu} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial A_\mu} &= \delta [A^\mu + A^\mu] + \epsilon J^\mu, \\ &= 2\delta A^\mu + \epsilon J^\mu.\end{aligned}\quad (2.26)$$

o segundo termo é resolvido aplicando a derivada em todos os termos,

$$\begin{aligned}\partial_\nu \left[\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_\nu A_\mu)} \right] &= \partial_\nu [2\alpha (\partial_\mu A^\mu) \delta_\mu^\nu g^{\mu\mu} + \beta \{ (\partial_\mu A^\nu) g^{\mu\nu} \delta_\nu^\mu + (\partial^\mu A_\nu) \delta_\mu^\nu g^{\nu\mu} \} + \\ &\quad + \gamma \{ (\partial_\mu A^\nu) g^{\mu\mu} + (\partial_\nu A^\mu) \delta_\mu^\nu g^{\nu\mu} \}] \\ &= \partial_\nu [2\alpha g^{\mu\mu} \delta_\mu^\nu (\partial_\mu A^\mu) + \beta \{ (\delta_\mu^\nu \partial_\nu g^{\nu\mu} A_\mu) g^{\mu\nu} \delta_\nu^\mu + (g^{\mu\nu} \partial_\nu \delta_\nu^\mu A_\mu) \delta_\mu^\nu g^{\nu\mu} \} + \\ &\quad + \gamma \{ (\delta_\mu^\nu \partial_\nu g^{\nu\mu} A_\mu) g^{\mu\mu} + (\partial_\nu g^{\mu\mu} A_\mu) \delta_\mu^\nu g^{\nu\mu} \}] \\ &= \partial_\nu [2\alpha g^{\mu\mu} \delta_\mu^\nu (\partial_\mu A^\mu) + \beta \{ 2\delta_\mu^\nu g^{\nu\mu} g^{\mu\nu} \delta_\nu^\mu \partial_\nu A_\mu \} + \gamma \{ 2\delta_\mu^\nu g^{\nu\mu} g^{\mu\mu} \partial_\nu A_\mu \}] \\ &= \partial_\nu [2\alpha g^{\mu\mu} \delta_\mu^\nu (\partial_\mu A^\mu) + 2\beta g^{\mu\nu} \delta_\nu^\mu \partial_\mu A^\nu + 2\gamma g^{\nu\mu} \partial_\mu A^\nu].\end{aligned}\quad (2.27)$$

Portanto, substituindo as Equações (2.26) e (2.27) na Equação (2.25),

$$\begin{aligned}2\delta A^\mu + \epsilon J^\mu - \partial_\nu [2\alpha g^{\mu\mu} \delta_\mu^\nu (\partial_\mu A^\mu) + 2\beta g^{\mu\nu} \delta_\nu^\mu \partial_\mu A^\nu + 2\gamma g^{\nu\mu} \partial_\mu A^\nu] &= 0, \\ 2\delta A^\mu + \epsilon J^\mu - 2\alpha g^{\mu\mu} \delta_\mu^\nu \partial_\nu (\partial_\mu A^\mu) - 2\beta g^{\mu\nu} \delta_\nu^\mu \partial_\nu (\partial_\mu A^\nu) - 2\gamma g^{\nu\mu} \partial_\nu (\partial_\mu A^\mu) &= 0, \\ 2\delta A^\mu + \epsilon J^\mu - 2\alpha \partial^\mu (\partial_\mu A^\mu) - 2\beta \delta_\nu^\mu \partial^\mu (\partial_\mu A^\nu) - 2\gamma \partial^\mu (\partial_\mu A^\mu) &= 0, \\ 2\delta \delta_\nu^\mu A^\nu + \epsilon \delta_\nu^\mu J^\nu - 2\alpha \delta_\nu^\mu \partial^\nu (\partial_\mu A^\mu) - 2\beta \delta_\nu^\mu \partial^\mu (\partial_\mu A^\nu) - 2\gamma \delta_\nu^\mu \partial^\nu (\partial_\mu A^\mu) &= 0, \\ \delta_\nu^\mu [2\delta A^\nu + \epsilon J^\nu - 2\alpha \partial^\nu (\partial_\mu A^\mu) - 2\beta \partial^\mu (\partial_\mu A^\nu) - 2\gamma \partial^\nu (\partial_\mu A^\mu)] &= 0, \\ 2\delta A^\nu + \epsilon J^\nu - 2\alpha \partial^\nu (\partial_\mu A^\mu) - 2\beta \partial^\mu (\partial_\mu A^\nu) - 2\gamma \partial^\nu (\partial_\mu A^\mu) &= 0, \\ 2\delta A^\nu + \epsilon J^\nu - 2(\alpha + \gamma) \partial^\nu (\partial_\mu A^\mu) - 2\beta \square^2 A^\nu &= 0.\end{aligned}$$

Esta última equação pode ser reescrita como

$$\beta \square^2 A^\nu + (\alpha + \gamma) \partial^\nu (\partial_\mu A^\mu) = \delta A^\nu + \frac{1}{2} \epsilon J^\nu \quad (2.28)$$

$$\square^2 A^\nu - \partial^\nu (\partial_\mu A^\mu) = \mu_0 J^\nu \quad (2.29)$$

Considerando o enfoque em descrever o eletromagnetismo, compara-se a equação (2.28) com a equação (2.29) Sendo assim, pode ser feita a escolha $\alpha + \gamma = \frac{1}{2\mu_0}$, $\beta = -\frac{1}{2\mu_0}$, $\delta = 0$ e $\epsilon = -1$.

Portanto, a equação (2.24) se torna

$$\begin{aligned}
\mathcal{L} &= \alpha (\partial_\mu A^\mu)^2 - \frac{1}{2\mu_0} (\partial_\mu A^\nu) (\partial^\mu A_\nu) + \left(\frac{1}{2\mu_0} - \alpha \right) (\partial_\mu A^\nu) (\partial_\nu A^\mu) - J_\mu A^\mu, \\
&= \alpha [(\partial_\mu A^\mu)^2 - (\partial_\mu A^\nu) (\partial_\nu A^\mu)] - \frac{1}{2\mu_0} (\partial_\mu A^\nu) (\partial^\mu A_\nu) + \frac{1}{2\mu_0} (\partial_\mu A^\nu) (\partial_\nu A^\mu) - J_\mu A^\mu, \\
&= \alpha [(\partial_\mu A^\mu) (\partial_\mu A^\mu) - (\partial_\mu \delta_\mu^\nu A^\mu) (\partial_\nu A^\mu)] - \frac{1}{2\mu_0} [(\partial_\mu A^\nu) (\partial^\mu A_\nu) - (\partial_\mu A^\nu) (\partial_\nu A^\mu)] - J_\mu A^\mu, \\
&= \alpha [(\partial_\mu A^\mu) (\partial_\mu A^\mu) - (\partial_\mu A^\mu) (\partial_\mu A^\mu)] - \frac{1}{2\mu_0} [(\partial_\mu A^\nu) (\partial^\mu A_\nu) - (\partial_\mu A^\nu) (\partial_\nu A^\mu)] - J_\mu A^\mu, \\
\mathcal{L} &= -\frac{1}{2\mu_0} [(\partial_\mu A^\nu) (\partial^\mu A_\nu) - (\partial_\mu A^\nu) (\partial_\nu A^\mu)] - J_\mu A^\mu. \tag{2.30}
\end{aligned}$$

Agora, a equação (2.30) pode ser reescrita como

$$\begin{aligned}
\mathcal{L} &= -\frac{1}{2\mu_0} \left[\frac{1}{2} (\partial_\mu A^\nu) (\partial^\mu A_\nu) - \frac{1}{2} (\partial_\mu A^\nu) (\partial_\nu A^\mu) - \frac{1}{2} (\partial_\mu A^\nu) (\partial_\nu A^\mu) + \frac{1}{2} (\partial_\mu A^\nu) (\partial^\mu A_\nu) \right] - J_\mu A^\mu, \\
&= -\frac{1}{4\mu_0} [(\partial_\mu A^\nu) (\partial^\mu A_\nu) - (\partial_\mu A^\nu) (\partial_\nu A^\mu) - (\partial_\mu A^\nu) (\partial_\nu A^\mu) + (\partial_\mu A^\nu) (\partial^\mu A_\nu)] - J_\mu A^\mu, \\
&= -\frac{1}{4\mu_0} [(\partial_\mu g^{\nu\nu} A_\nu) (\partial^\mu A_\nu) - (\partial_\mu g^{\nu\nu} A_\nu) (\partial_\nu A^\mu) - (\delta_\mu^\nu \partial_\nu A^\nu) (\partial_\nu \delta_\nu^\mu A^\nu) + \\
&\quad + (\delta_\mu^\nu \partial_\nu A^\nu) (\delta_\nu^\mu \partial^\nu A_\nu)] - J_\mu A^\mu, \\
&= -\frac{1}{4\mu_0} [(\partial_\mu A_\nu) (\partial^\mu g^{\nu\nu} A_\nu) - (\partial_\mu A_\nu) (g^{\nu\nu} \partial_\nu A^\mu) - (\partial_\nu \delta_\nu^\mu A^\nu) (\delta_\mu^\nu \partial_\nu A^\nu) + \\
&\quad + (\partial_\nu \delta_\nu^\mu A^\nu) (\partial^\nu \delta_\mu^\nu A_\nu)] - J_\mu A^\mu, \\
&= -\frac{1}{4\mu_0} [(\partial_\mu A_\nu) (\partial^\mu A^\nu) - (\partial_\mu A_\nu) (\partial^\nu A^\mu) - (\partial_\nu A^\mu) (\partial_\mu A^\nu) + (\partial_\nu A^\mu) (\partial^\nu A_\mu)] - J_\mu A^\mu, \\
&= -\frac{1}{4\mu_0} [(\partial_\mu A_\nu) (\partial^\mu A^\nu) - (\partial_\mu A_\nu) (\partial^\nu A^\mu) - (\partial_\nu g^{\mu\mu} A_\mu) (\partial_\mu A^\nu) + (\partial_\nu g^{\mu\mu} A_\mu) (\partial^\nu A_\mu)] - J_\mu A^\mu, \\
&= -\frac{1}{4\mu_0} [(\partial_\mu A_\nu) (\partial^\mu A^\nu) - (\partial_\mu A_\nu) (\partial^\nu A^\mu) - (\partial_\nu A_\mu) (g^{\mu\mu} \partial_\mu A^\nu) + (\partial_\nu A_\mu) (\partial^\nu g^{\mu\mu} A_\mu)] - J_\mu A^\mu, \\
&= -\frac{1}{4\mu_0} [\partial_\mu A_\nu \partial^\mu A^\nu - \partial_\mu A_\nu \partial^\nu A^\mu - \partial_\nu A_\mu \partial^\mu A^\nu + \partial_\nu A_\mu \partial^\nu A^\mu] - J_\mu A^\mu, \\
&= -\frac{1}{4\mu_0} (\partial_\mu A_\nu - \partial_\nu A_\mu) (\partial^\mu A^\nu - \partial^\nu A^\mu) - J_\mu A^\mu, \\
\mathcal{L} &= -\frac{1}{4\mu_0} F_{\mu\nu} F^{\mu\nu} - J_\mu A^\mu. \tag{2.31}
\end{aligned}$$

Portanto, o campo eletromagnético pode ser descrito pela densidade de Lagrangiana

$$\mathcal{L} = -\frac{1}{4\mu_0} F_{\mu\nu} F^{\mu\nu} - J_\mu A^\mu. \tag{2.32}$$

onde o primeiro termo em (2.32) é o termo cinético e o segundo termo é o termo relacionado à

energia potencial devido as correntes topológicas (carga ou corrente). Para o campo eletromagnético no vácuo, pode se ainda escrever:

$$\mathcal{L} = -\frac{1}{4\mu_0} F_{\mu\nu} F^{\mu\nu}. \quad (2.33)$$

A densidade lagrangeana \mathcal{L} pode ser escrita em termos do traço de $F^{\mu\nu} F_{\nu\mu}$:

$$Tr(F^{\mu\nu} F_{\nu\mu}) = 2 \left(\frac{E^2}{c^2} - B^2 \right). \quad (2.34)$$

Conseqüentemente, a Lagrangeana do campo eletromagnético pode ser escrita em termos dos campos elétrico E e magnético B :

$$\mathcal{L}(E_i, B_j) = \frac{1}{2} \left(\frac{E^2}{c^2} - B^2 \right). \quad (2.35)$$

O momento canônico conjugado é portanto:

$$\pi^\mu = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_0 A_\mu)} = -F^{0\mu}, \quad (2.36)$$

$$-F^{0\mu} = F^{\mu 0}, \pi^0 = 0, \pi^i = F^{i0}$$

$$\pi^\mu = -\frac{E_\mu}{c}. \quad (2.37)$$

A componente temporal do momento é portanto:

$$\pi^0 = \frac{1}{\mu_0 c} [-\mathcal{L} + \pi^\mu \partial_0 A_\mu], \quad (2.38)$$

e representa uma transformada de Legendre. Assim, a densidade do hamiltoniano \mathcal{H} é:

$$\mathcal{H} = c\pi^0 = \frac{1}{\mu_0} [\pi^\mu \partial_0 A_\mu - \mathcal{L}], \quad (2.39)$$

$$\mu_0 \mathcal{H} = [\pi^\mu \partial_0 A_\mu - \mathcal{L}], \quad (2.40)$$

$$\mu_0 \mathcal{H} = -\pi_\mu (\partial_0 A_\mu) - \mathcal{L}, \quad (2.41)$$

e lembrando que:

$$\pi_\mu = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_0 A_\mu)} = \partial_\mu A_0 - \partial_0 A_\mu, \quad (2.42)$$

$$\partial_0 A_\mu = \partial_\mu A_0 - \pi_\mu, \quad (2.43)$$

e substituindo na equação (2.41) para a densidade Hamiltoniana:

$$\mu_0 \mathcal{H} = -\pi_k (-\pi_k + \partial_k A_0) - \frac{1}{2} (\pi_k^2 - B_k^2) - A_0 (\partial_k \pi_k), \quad (2.44)$$

$$\mu_0 \mathcal{H} = \frac{1}{2} (\pi_k^2 + B_k^2) - \pi_k (\partial_k A_0) - A_0 (\partial_k \pi_k), \quad (2.45)$$

$$\mu_0 \mathcal{H} = \frac{1}{2} (\pi_k^2 + B_k^2) - \partial_k (\pi_k A_0). \quad (2.46)$$

Sendo assim, a densidade hamiltoniana \mathcal{H} integrada sobre todo o espaço leva ao Hamiltoniano do campo eletromagnético, fundamental para a quantização do campo eletromagnético e para os objetivos propostos nesse trabalho:

$$H = \frac{1}{\mu_0} \int \mathcal{H} d^3 x, \quad (2.47)$$

$$H = \frac{1}{2\mu_0} \int (\pi_k^2 + B_k^2) d^3 x. \quad (2.48)$$

2.2 Quantização do Campo Eletromagnético

Nesta seção, será feita a quantização do campo ou segunda quantização, nos gauges de Coulomb e Lorentz utilizando o formalismo apresentado nas seções anteriores [4, 35, 36].

2.2.1 Gauge de Coulomb

Procedendo a quantização do campo eletromagnético no gauge de Coulomb, isto é tomando $A_0 = 0$ e $\vec{\nabla} \cdot \vec{A} = 0$, a segunda condição garante que somente duas componentes de A são independentes. Resolvento a equação $\square A = 0$, ou seja, $\nabla^2 A - \frac{1}{c^2} \frac{\partial A}{\partial t^2} = 0$,

$$A \propto \frac{1}{\sqrt{V}} \exp i \left(\vec{k} \vec{x} - \omega t \right). \quad (2.49)$$

A relação de dispersão é $\omega = k \cdot c \equiv \omega_k$ e as soluções da equação de onda no Gauge de coulomb são portanto periódicas podendo ser escritas em termos da expansão em ondas planas:

$$A(\vec{x}, t) = \frac{c}{\sqrt{V}} \sum_{\lambda=1}^2 \int d\vec{k} q_{k,\lambda}(t) e^{i\vec{k} \cdot \vec{x}} \hat{\epsilon}_{k,\lambda}, \quad (2.50)$$

$$\pi(\vec{x}, t) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\lambda=1}^2 \int d\vec{k} e^{i\vec{k} \cdot \vec{x}} p_{k,\lambda}(t) \hat{\epsilon}_{k,\lambda}. \quad (2.51)$$

Notando que V é o volume espacial e $\lambda = 1, 2$ indica duas possibilidades duas direções mutuamente ortogonais de polarização isto é $\hat{\epsilon}_{k,\lambda} \cdot \hat{\epsilon}_{k,\lambda}^* = \delta_{\lambda,\lambda'}$.

A soma, $\sum \int$ ocorre sobre o parâmetro (λ) e a integração sobre o parâmetro contínuo (k), $\vec{\nabla} \cdot \vec{A} = 0$, isso implica em (2.52):

$$\hat{\epsilon}_{k,\lambda} \cdot \hat{k} = 0. \quad (2.52)$$

Utilizando a relação $\frac{1}{V} \int e^{i\vec{k} \cdot \vec{x}} = \delta(\vec{k})$ têm se que:

$$\int \pi^2 d^3x = \frac{1}{V} \sum \int_{k,\lambda} \sum \int_{k',\lambda'} \epsilon_{k,\lambda} \epsilon_{k',\lambda'} e^{i(\vec{k} + \vec{k}') \cdot \vec{x}} p_{k,\lambda}(t) p_{k',\lambda'}, \quad (2.53)$$

$$\int \pi^2 d^3x = \sum \int_{k,\lambda} \sum \int_{k',\lambda'} \epsilon_{k,\lambda} \epsilon_{k',\lambda'} \delta(\vec{k} + \vec{k}') p_{k,\lambda} p_{k',\lambda'}, \quad (2.54)$$

$$\int \pi^2 d^3x = \sum \int_{k,\lambda,\lambda'} p_{k,\lambda}(t) p_{-k',\lambda'}(t) \epsilon_{k,\lambda} \epsilon_{-k,\lambda'}. \quad (2.55)$$

Os operadores \hat{A} e $\hat{\pi}$ devem ser hermitianos e segue que $\pi(x, t)$ leva em conta o somatório sobre

as componentes negativas e positivas de k :

$$\pi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum \int_{k,\lambda} e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}} p_{k,\lambda}(t) \hat{\epsilon}_{k,\lambda}, \quad (2.56)$$

$$\pi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum \int_{k,\lambda} e^{-i\vec{k}\cdot\vec{x}} \hat{\epsilon}_{k,\lambda} p_{k,\lambda}(t) = \pi^*(x,t), \quad (2.57)$$

e o complexo conjugado de π conforme (2.58):

$$\pi^*(x,t) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum \int_{k,\lambda} e^{ikx} \epsilon_{-k,\lambda}^* p_{-k,\lambda}^*(t), \quad (2.58)$$

$$\epsilon_{k,\lambda} p_{k,\lambda}(t) = \epsilon_{-k,\lambda}^* p_{-k,\lambda}(t), \quad (2.59)$$

ou,

$$\epsilon_{k,\lambda}^* p_{k,\lambda}^*(t) = \epsilon_{-k,\lambda}(t) p_{-k,\lambda}(t), \quad (2.60)$$

de modo que:

$$\int \pi^2 d^3x = \sum \int_{k,\lambda,\lambda'} \epsilon_{k,\lambda} \epsilon_{-k,\lambda'}^* p_{k,\lambda}(t) p_{-k,\lambda'}(t), \quad (2.61)$$

$$\int \pi^2 d^3x = \sum \int_{k,\lambda,\lambda'} \epsilon_{k,\lambda} \epsilon_{k,\lambda'}^* p_{k,\lambda}(t) p_{k,\lambda'}^*(t), \quad (2.62)$$

$$\int \pi^2 d^3x = \sum \int_{k,\lambda} p_{k,\lambda}^*(t) p_{k,\lambda}(t), \quad (2.63)$$

de maneira a utilizar um procedimento analogo para todos os termos do Hamiltoniano, exploramos qual é o resultado obtido com o segundo termo da equação (2.48) quando substituímos $\vec{B} = \vec{\nabla} \times \vec{A}$,

$$\int B^2 d^3x = \int (\vec{\nabla} \times \vec{A}) (\vec{\nabla} \times \vec{A}) d^3x = \int (\vec{\nabla} \times \vec{A})^2 d^3x. \quad (2.64)$$

Para o desenvolvimento de (2.64) utiliza se a lei de Gauss com $\vec{G} = \vec{A} \times \vec{\nabla} \times \vec{A}$:

$$\int \vec{\nabla} \cdot \vec{G} d^3x = \int \vec{G} \cdot d\vec{F} \quad (2.65)$$

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{G} = \vec{\nabla} \cdot [\vec{A} \times (\vec{\nabla} \times \vec{A})], \quad (2.66)$$

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{G} = \vec{\nabla} \cdot [\vec{A} \times \vec{\nabla} \times \vec{A}], \quad (2.67)$$

$$\vec{\nabla} \cdot (\vec{A} \times \vec{B}) = \vec{B} \cdot (\vec{\nabla} \times \vec{A}) - \vec{A} \cdot (\vec{\nabla} \times \vec{B}), \quad (2.68)$$

$$\vec{\nabla} \cdot \{ \vec{A} \times [\vec{\nabla} \times \vec{A}] \} = (\vec{\nabla} \times \vec{A}) \cdot (\vec{\nabla} \times \vec{A}) - \vec{A} \cdot (\vec{\nabla} \times [\vec{\nabla} \times \vec{A}]), \quad (2.69)$$

e utilizando a relação:

$$(\vec{\nabla} \times \vec{A}) \cdot (\vec{\nabla} \times \vec{A}) = \vec{\nabla} \cdot (\nabla \cdot \vec{A}) - \nabla^2 \vec{A}, \quad (2.70)$$

obtem se:

$$\vec{\nabla} \cdot \{ \vec{A} \times [\vec{\nabla} \times \vec{A}] \} = (\vec{\nabla} \times \vec{A}) \cdot (\vec{\nabla} \times \vec{A}) - (\vec{A} \cdot \vec{\nabla}) (\vec{\nabla} \cdot \vec{A}) + \vec{A} \cdot (\nabla^2 \vec{A}), \quad (2.71)$$

$$\begin{aligned} & \int (\vec{\nabla} \times \vec{A}) \cdot (\vec{\nabla} \times \vec{A}) d^3x - \int (\vec{A} \cdot \vec{\nabla}) (\vec{\nabla} \cdot \vec{A}) d^3x \\ & + \int \vec{A} \cdot (\nabla^2 \vec{A}) d^3x = \int \vec{A} \times (\vec{\nabla} \times \vec{A}) \cdot d\vec{F}, \end{aligned} \quad (2.72)$$

Igualando o lado esquerdo da equação (2.72) a $\vec{G} \cdot d^3x$,

$$\int [\vec{A} \times (\vec{\nabla} \times \vec{A})] \cdot d\vec{F} = \int \vec{G} \cdot d\vec{F}, \quad (2.73)$$

$$\int \vec{G} \cdot d\vec{F} = \int d\vec{F} \cdot \{ A \vec{\nabla} A - (\vec{A} \cdot \vec{\nabla}) \vec{A} \}. \quad (2.74)$$

O lado direito da equação (2.74) é uma integral de superfície com $\vec{A} \rightarrow 0$ consequentemente essa integral é nula. Com a fixação de gauge $\vec{\nabla} \cdot \vec{A} = 0$, a outra contribuição também se anula

em (2.72) e conseqüentemente,

$$\int [\vec{\nabla} \times \vec{A}] \cdot [\vec{\nabla} \times \vec{A}] d^3x = - \int \vec{A} \cdot (\nabla^2 \vec{A}) d^3x, \quad (2.75)$$

$$\int B_k^2 d^3x = - \int \vec{A} \cdot (\nabla^2 \vec{A}) d^3x, \quad (2.76)$$

Considerando a equação de Helmholtz a saber $\nabla^2 A = k^2 A$,

$$\int B_k^2 d^3x = k^2 \int \vec{A} \cdot \vec{A} d^3x, \quad (2.77)$$

e utilizando a equação (2.51),

$$k^2 \int A^2 d^3x = k^2 \frac{c^2}{V} \sum \int_{k,\lambda} \sum \int_{k',\lambda'} \epsilon_{k,\lambda} \epsilon_{k',\lambda'} e^{i(\vec{k}+\vec{k}')\vec{x}} q_{k,\lambda}(t) q_{k',\lambda'}, \quad (2.78)$$

$$k^2 \int A^2 d^3x = k^2 c^2 \sum \int_{k,\lambda} \sum \int_{k',\lambda'} \epsilon_{k,\lambda} \epsilon_{k',\lambda'} \delta(\vec{k} + \vec{k}'), q_{k,\lambda} q_{k',\lambda'}, \quad (2.79)$$

$$k^2 \int A^2 d^3x = k^2 c^2 \sum \int_{k,\lambda,\lambda'} q_{k,\lambda}(t) q_{-k',\lambda'}(t) \epsilon_{k,\lambda} \epsilon_{-k,\lambda'}. \quad (2.80)$$

Conseqüentemente, o segundo termo da equação (2.48) é:

$$\int B_k^2 d^3x = \sum \int_{k,\lambda} w_k^2 q_{k,\lambda}^*(t) q_{k,\lambda}(t) \quad (2.81)$$

Dessa forma, a expressão para o hamiltoniano do campo eletromagnético, fazendo as substituições acima fica:

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2\mu_0} \sum \int_{k,\lambda} [p_{k,\lambda}^* p_{k,\lambda} + w_k^2 q_{k,\lambda}^* q_{k,\lambda}], \quad (2.82)$$

O próximo passo é quantização. Exigindo que as condições:

$$[\hat{A}_i(\vec{x},t), \hat{A}_j(\vec{x}',t)] = 0, \quad (2.83)$$

$$[\hat{\pi}_i(\vec{x},t), \hat{\pi}_j(\vec{x}',t)] = 0, \quad (2.84)$$

$$[\hat{\pi}_j(\vec{x},t), \hat{A}_i(\vec{x},t)] = \frac{i\mu_0 \hbar}{c} \cdot \delta_{ij} \delta(\vec{x} - \vec{x}'), \quad (2.85)$$

ou , em termos de q e p conforme (2.86), (2.87) e (2.88),

$$[\hat{q}_{k,\lambda}(t), \hat{q}_{k',\lambda'}(t)] = 0, \quad (2.86)$$

$$[\hat{p}_{k,\lambda}, \hat{q}_{k',\lambda'}(t)] = i\mu_0 \hbar \delta_{k,k'} \delta_{\lambda,\lambda'}, \quad (2.87)$$

$$[\hat{p}_{k,\lambda}(t), \hat{p}_{k',\lambda'}(t)] = 0, \quad (2.88)$$

Agora definindo os operadores criação e aniquilação em termos de momentos p_k e coordenadas q_k em (2.89) e (2.90):

$$\hat{a}_{\lambda,k} = \sqrt{\frac{w_k}{2}} \left(\hat{q}_{k,\lambda} + \frac{i}{w_k} \hat{p}_{k,\lambda} \right), \quad (2.89)$$

$$\hat{a}^+_{\lambda,k} = \sqrt{\frac{w_k}{2}} \left(\hat{q}_{k,\lambda} - \frac{i}{w_k} \hat{p}_{k,\lambda} \right), \quad (2.90)$$

e utilizando as relações de comutação para os operadores de criação e de aniquilação do oscilador,

$$[\hat{a}_{\lambda,k}, \hat{a}_{\lambda',k'}] = 0, \quad (2.91)$$

$$[\hat{a}^+_{\lambda',k'}, \hat{a}^+_{\lambda,k}] = 0, \quad (2.92)$$

$$[\hat{a}_{\lambda,k}, \hat{a}^+_{\lambda,k}] = \mu_0 \hbar \delta_{\lambda\lambda'} \delta_{kk'}, \quad (2.93)$$

De forma equivalente ao oscilador harmônico, o hamiltoniano,

$$\hat{\mathcal{H}} = \sum \int_{k,\lambda} w_k \left(\frac{\hat{a}^+_{k,\lambda} \hat{a}_{k,\lambda}}{\mu_0} + \frac{\hbar}{2} \right). \quad (2.94)$$

O estado de vácuo ou ground state $|0\rangle$ é definido como

$$\hat{a}_{\lambda,k}|0\rangle = 0, \quad (2.95)$$

para todos os k e λ . A energia média E_0 , para o sistema no vácuo, $n = 0$,

$$E_0 = \langle 0 | \hat{H} | 0 \rangle = \frac{1}{2} \sum_{k,\lambda} \hbar w_k. \quad (2.96)$$

2.2.2 Gauge de Lorentz

Lembrando que a densidade de Lagrangiana do campo eletromagnético é dado por

$$\mathcal{L} = -\frac{1}{4\mu_0} F^{\mu\nu} F_{\mu\nu}, \quad (2.97)$$

o momento canonicamente conjugado ao campo A^μ é

$$\pi^\mu = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial(\partial_0 A_\mu)}, \quad (2.98)$$

então temos que

$$[A_\mu(x,t), \pi_\nu(x',t)] = -i\mu_0 \frac{\hbar}{c} g^{\mu\nu} \delta^3(x - x'), \quad (2.99)$$

A equação (2.99) implica a existência de fótons escalares e fótons transversais no gauge de Lorentz.

Uma vez que \vec{A} não é transversal no gauge de Lorentz (em geral), existem componentes transversais e longitudinais de \vec{A} no gauge de Lorentz e, assim, aparecem fótons longitudinais e fótons transversais no gauge de Lorentz. Os fótons longitudinais não têm significado físico e não aparecem em quantidades mensuráveis. Em particular, a condição para esse gauge (2.100):

$$\partial_\mu A^\mu = 0, \quad (2.100)$$

implica que as partes longitudinal e transversal não são independentes.

A lagrangiana (2.97) implica que a componente temporal do momento é $\pi^0 = 0$, e conforme (2.98), isso é inconsistente com a condição de quantização (2.99). Para manter a consistência da quantização no gauge de Lorentz, a lagrangiana do campo eletromagnético é modificada de acordo com a proposta de Fermi [4]:

$$\mathcal{L} = -\frac{1}{4\mu_0} F^{\mu\nu} F_{\mu\nu} - \frac{\xi}{2} (\partial_\alpha A^\alpha)^2, \quad (2.101)$$

onde ξ é um parâmetro que pode assumir valores inteiros. Assim, para a lagrangeana na equação (2.101) o momento canônico conjugado a A^μ é,

$$\pi^\mu = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial(\partial_0 A_\mu)} = F^{\mu 0} - \frac{\xi}{2} \partial_\alpha A^\alpha. \quad (2.102)$$

Notando que, da lagrangiana modificada $\pi^0 = \xi(\partial_\alpha A^\alpha) \neq 0$, e a equação de onda $\partial_\mu \partial^\mu A_\nu = 0$ no gauge de Lorentz é reescrita modificada conforme equação (2.99):

$$\partial_\mu \partial^\mu A_\nu - (1 - \xi) \partial_\nu (\partial_\alpha A^\alpha) = 0. \quad (2.103)$$

Escolhendo $\xi = 1$ (gauge de Feynman) temos

$$\partial_\mu \partial^\mu A_\nu = 0, \quad (2.104)$$

e, o momento canônico conjugado (componente temporal), $-\pi^0 = \partial_\alpha A^\alpha$.

Agora a condição de Lorentz $\partial_\alpha A^\alpha = 0$ leva a $\pi^0 = 0$ mas essa condição é contraditória com a condição de quantização (2.98) e a equação (2.104) tem solução análoga ao gauge de Coulomb, isto é :

$$A^\mu(x,t) = \int \frac{d^3k}{2\pi^3} \frac{1}{2w_k} \sum_{\lambda=0}^{\lambda=3} [\hat{a}(k,\lambda)e^{-ikx} + \hat{a}^+(k,\lambda)e^{ikx}], \quad (2.105)$$

cuja solução, apresenta quatro estados de polarização linearmente independentes: $\lambda = 0$ relativa a uma polarização do tipo tempo e, $\lambda = 1, 2$ e 3 relativas as polarizações espaciais, sendo que, $\lambda = 1$ e 2 são referentes aos estados de polarizações transversais e $\lambda = 3$ ao estado de polarização longitudinal, de acordo com nossa escolha de base. Efetivando o processo canônico de quantização, teremos que o campo em questão satisfará as seguintes relações de comutação para tempos iguais (ETCR), [4, 35, 36, 36]:

$$\begin{aligned} [\hat{A}^\mu(\vec{x},t), \hat{\pi}^\nu(\vec{y},t)] &= ig^{\mu\nu} \delta^3(\vec{x} - \vec{y}), \\ [\hat{A}^\mu(\vec{x},t), \hat{A}^\nu(\vec{y},t)] &= 0, \\ [\hat{\pi}^\mu(\vec{x},t), \hat{\pi}^\nu(\vec{y},t)] &= 0 \end{aligned} \quad (2.106)$$

e para o momento canônico,

$$\hat{\pi}^\mu(x,t) = i \int \frac{1}{2} d^3k w_k \sum [\hat{a}_{k,\lambda}^+ e^{-ikx} - \hat{a}_{k,\lambda} e^{ikx}]. \quad (2.107)$$

Os quadrivetores satisfazem a relação:

$$\epsilon_\mu(k,\lambda)\epsilon^\mu(k,\lambda') = g_{\lambda,\lambda'}. \quad (2.108)$$

a equação(2.108) implica em que todos os vetores formam um sistema ortonormal quadridimensional. Agora temos que

$$[\partial_\mu \hat{A}^\mu, \hat{A}^\nu] = [\partial_0 A^0 + \vec{\nabla} \cdot \vec{A}, A^\nu], \quad (2.109)$$

$$[\partial_\mu \hat{A}^\mu(\vec{x},t), \hat{A}^\nu(\vec{y},t)] = -[\pi^0(\vec{x},t), A^\nu(\vec{y},t)] + \partial_i [A^i(\vec{x},t), A^\nu(\vec{y},t)], \quad (2.110)$$

$$[\partial_\mu \hat{A}^\mu, \hat{A}^\nu] = ig^{\nu 0} \delta^3(\vec{x} - \vec{y}). \quad (2.111)$$

Notando que para que a relação de comutação calculada anteriormente fosse nula, ou o operador $\partial_\mu A^\mu(\vec{x},t)$ teria que ser nulo ou este teria que comutar com $\hat{A}^\mu(\vec{x},t)$ mas, de acordo com a equação (2.111) esses operadores não comutam e como $\hat{A}^\mu(\vec{x},t) \neq 0$ o operador de campo não satisfaz o calibre de Lorentz ou seja,

$$\partial_\mu \hat{A}^\mu \neq 0, \quad (2.112)$$

Assim, o processo de quantização canônica não é compatível com o calibre de Lorentz.

Para encontrar o operador hamiltoniano, escreve-se o operador lagrangiano em termos de \vec{A} ,

$$\mathcal{L} = -\frac{1}{4} (\partial_\mu A_\nu - \partial_\nu A_\mu) (\partial^\mu A^\nu - \partial^\nu A^\mu) - \frac{1}{2} (\partial_\alpha A^\alpha)^2, \quad (2.113)$$

$$\mathcal{L} = -\frac{1}{4} (\partial_\mu A^\nu \partial^\mu A^\nu - \partial_\mu A^\nu \partial^\nu A^\mu - \partial_\nu A_\mu \partial^\mu A^\nu + \partial_\nu A_\mu \partial^\nu A^\mu) - \frac{1}{2} (\partial_\alpha A^\alpha)^2, \quad (2.114)$$

$$\mathcal{L} = -\frac{1}{2}\partial_\mu A^\nu \partial^\mu A^\nu - \frac{1}{2}\partial_\mu A^\nu \partial^\nu A^\mu - \frac{1}{2}\partial_\mu A^\mu \partial_\nu A^\nu, \quad (2.115)$$

$$\mathcal{L} = \frac{-1}{2}\partial_\mu A_\nu \partial^\mu A^\nu + \frac{1}{2}[A_\nu (\partial^\nu A^\mu) - (\partial_\nu A^\nu) A^\mu]. \quad (2.116)$$

Sendo o segundo termo a quadri-divergência, esse não contribui para a densidade lagrangiana.

Assim,

$$\mathcal{L} = -\frac{1}{2}\partial_\mu A_\nu \partial^\mu A^\nu, \quad (2.117)$$

Utilizando a transformada de legendre,

$$\mathcal{H} = \pi^\mu \partial_o A_\mu - \mathcal{L}, \quad (2.118)$$

e, sendo π^μ o momento canônico conjugado, a densidade do hamiltoniano é

$$\mathcal{H} = -\pi^\mu \pi_\mu + \frac{1}{2}\partial_i A_\nu \partial^i A^\nu \quad (2.119)$$

Aplicando a derivada ∂_i em (2.105),

$$\partial_i A^\mu = i \int \sum_{\lambda=0}^3 [\hat{a}_{k\lambda} u_k - \hat{a}_{k\lambda}^+ u_{k\lambda}^*] d^3 k, \quad (2.120)$$

e o hamiltoniano pode ser escrito como:

$$\hat{H} = -\frac{1}{2} \int \sum_{\lambda\lambda'} \epsilon^\mu(k,\lambda) \epsilon_\mu(k,\lambda') [\hat{a}_{k,\lambda}^+ \hat{a}_{k\lambda'} + \hat{a}_{k\lambda} \hat{a}_{k,\lambda'}^+], \quad (2.121)$$

que de acordo com (2.108),

$$\hat{H} = -\frac{1}{2} \int w_k g_{\lambda\lambda'} [\hat{a}_{k,\lambda}^+ \hat{a}_{k\lambda'} + \hat{a}_{k\lambda} \hat{a}_{k,\lambda'}^+], \quad (2.122)$$

ou ainda:

$$\hat{H} = \int w_k \sum_0^3 (g_{\lambda\lambda}) \hat{a}_{k,\lambda}^+ \hat{a}_{k\lambda}. \quad (2.123)$$

Para os elementos da diagonal principal onde $\lambda = \lambda'$, explicitando o somatório em (2.123),

$$\hat{H} = \int w_k [-\hat{a}_{k0}^+ \hat{a}_{k0} + \hat{a}_{k1}^+ \hat{a}_{k1} + \hat{a}_{k2}^+ \hat{a}_{k2} + \hat{a}_{k3}^+ \hat{a}_{k3}] \quad (2.124)$$

de maneira que é possível para este caso, a obtenção de operadores de criação e aniquilação relativos a fótons com quatro diferentes tipos de polarização sendo que a polarização do tipo tempo traz problemas de valor negativo. Como no caso discreto,

$$\hat{a}_{k\lambda}|0\rangle = 0, \quad (2.125)$$

de onde conclui se que, a partir do vácuo, para criar um único fóton ,

$$|1_{k\lambda}\rangle = \hat{a}_{k\lambda}^+ |0\rangle \quad (2.126)$$

Tomando o limíte para o contínuo:

$$|1_{k\lambda}\rangle = \int F_k(k') \hat{a}_{k\lambda}^+ |0\rangle. \quad (2.127)$$

Na expressão (2.127), $F_k(k')$ é uma função que descreve a distribuição dos vários estados de criação e aniquilação com número de onda k .

$$\langle 1_{k\lambda} | 1_{k\lambda} \rangle = \int d^3 k' \int d^3 k'' F_k(k') F_k(k'') \langle 0 | \hat{a}_{k\lambda'} \hat{a}^+ | \hat{a}_{k''\lambda} | 0 \rangle, \quad (2.128)$$

tendo em vista que pelas relações de comutação do oscilador harmônico ,

$$[\hat{a}_{k,\lambda}^+, \hat{a}_{k',\lambda'}] = g_{\lambda\lambda'} \delta(\vec{k} - \vec{k}'), \quad (2.129)$$

$$\langle 1_{k\lambda} | 1_{k\lambda} \rangle = \int d^3 k' \int d^3 k'' F_k(k') F_k(k'') \langle 0 | (\hat{a}_{k'\lambda}^+ \hat{a}_{k\lambda} - g_{\lambda\lambda}) \delta^3(\vec{k}' - \vec{k}'') | 0 \rangle \quad (2.130)$$

$$\langle 1_{k\lambda} | 1_{k\lambda} \rangle = \int dk'^3 \int dk''^3 F_k(k') F_k(k'') \langle 0 | -g_{\lambda\lambda} \delta^3(k', k'') | 0 \rangle, \quad (2.131)$$

$$\langle 1_{k\lambda} | 1_{k\lambda} \rangle = -g_{\lambda\lambda} \int |F_k(k')|^2 \langle 0 | 0 \rangle dk'^3, \quad (2.132)$$

de maneira que a norma de $|1_{k\lambda}\rangle$ é negativa isto é ,

$$\langle 1_{k\lambda} | 1_{k\lambda} \rangle = -g_{\lambda\lambda}. \quad (2.133)$$

Daí, conclui se que a norma para o estado de um único fóton em $\lambda = 0$ é negativa, o que impossibilita uma interpretação probabilística do ponto de vista da teoria quântica. Esse resultado leva ainda a um valor de energia negativa para $\lambda = 0$ no quadrivetor $e^\mu(k, \lambda)$. De maneira a solucionar esse problema, um subespaço de Hilbert $|\Psi\rangle$ é vinculado impondo :

$$\langle \Psi | \partial_\mu A^\mu | \Psi \rangle = 0. \quad (2.134)$$

A equação (2.134) é válida em um subespaço do espaço de Hilbert, ou seja, a média de $\partial_\mu A^\mu$ deve ser nula quando calculada nesse subespaço. Escrevendo o operador de campo, por simplicidade, como

$$\hat{A}(x, t) = \hat{A}^{\mu(+)}(x, t) + \hat{A}^{\mu(-)}(x, t), \quad (2.135)$$

$$\partial_\mu \hat{A}^{\mu(+)} | \Psi \rangle = 0, \quad (2.136)$$

e

$$\langle \Psi | \partial_\mu \hat{A}^{\mu(-)} = 0. \quad (2.137)$$

A condição (2.134) pode então ser reescrita como :

$$\langle \Psi | \partial_\mu \hat{A}^\mu | \Psi \rangle = \langle \Psi | \partial_\mu \hat{A}^{\mu(+)} | \Psi \rangle + \langle \Psi | \partial_\mu \hat{A}^{\mu(-)} | \Psi \rangle = 0. \quad (2.138)$$

A equação (2.138) é chamada condição de Gupta Breuler [4, 7]. Uma vez que $\partial_\nu \partial^\nu A_\mu = 0$, A_μ pode ser expandido em séries de fourier:

$$\hat{A}_\mu(x) = \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \cdot \frac{1}{2w_k} \sum_{\lambda=0}^3 [\hat{a}_{k\lambda} \exp(-ikx) + \hat{a}_{k\lambda}^+ \exp(ikx)], \quad (2.139)$$

$$\int \frac{d^3k}{\sqrt{2\omega_k}(2\pi)^3} \exp \left[-i \left(\vec{k}\vec{x} - \omega t \right) \right] \sum_{\lambda=0}^3 k_\mu \epsilon^\mu(k, \lambda) \hat{a}_{k, \lambda} |\Psi\rangle = 0, \quad (2.140)$$

e abrindo o somatório em (2.140),

$$\int \frac{d^3k}{\sqrt{2\omega_k}(2\pi)^3} \exp -i \left(\vec{k}\vec{x} - \omega t \right) [k_\mu \epsilon^\mu(k, 0) + k_\mu \epsilon^\mu(k, 1) + k_\mu \epsilon^\mu(k, 2) + k_\mu \epsilon^\mu(k, 3)] \hat{a}_{k, \lambda} |\Psi\rangle = 0 \quad (2.141)$$

Para que a equação (2.141) seja nula ,

$$\hat{L}_k |\Psi\rangle = (\hat{a}_{k0} - \hat{a}_{k3}) |\Psi\rangle = 0. \quad (2.142)$$

Analogamente a equação (2.142),

$$\langle \Psi | \hat{L}_k^+ = \langle \Psi | (\hat{a}_{k0}^+ - \hat{a}_{k3}^+) = 0 \quad (2.143)$$

as equações (2.142) e (2.143) implicam em:

$$\hat{a}_{k0} |\Psi\rangle = \hat{a}_{k3} |\Psi\rangle. \quad (2.144)$$

Analogamente,

$$\langle \Psi | \hat{a}_{k0}^+ = \langle \Psi | \hat{a}_{k3}^+. \quad (2.145)$$

E com base nessas equações, o valor esperado do Hamiltoniano é ,

$$\langle \hat{H} \rangle = \int \langle \Psi | (-\hat{a}_{k0}^+ \hat{a}_{k0} + \hat{a}_{k1}^+ \hat{a}_{k1} + \hat{a}_{k2}^+ \hat{a}_{k2} + \hat{a}_{k3}^+ \hat{a}_{k3}) | \Psi \rangle \omega_k d^3k \quad (2.146)$$

de maneira que a equação (2.146) fica

$$\langle \hat{H} \rangle = \int \sum_{\lambda=1}^{\lambda=2} \langle \Psi | \hat{a}_{k\lambda}^+ \hat{a}_{k\lambda} | \Psi \rangle \omega_k d^3k. \quad (2.147)$$

Com base nos argumentos acima, especificamente a equação (2.147) conclui se que os fótons longitudinais e escalares não contribuem para o cálculo da energia de ponto zero [4, 5, 7].

Capítulo 3

Modelo de Bordag e energia de Casimir

Neste capítulo consideramos o modelo de Bordag *et.al* [20] levando em conta o efeito dos plasmons de superfície. O efeito dos plasmons de superfície na energia de Casimir desempenham um importante papel a distâncias d da ordem do comprimento de onda dos plasmons e será importante para a proposta desta tese. Na seção seguinte será feita uma revisão sobre o efeito Casimir.

3.1 Revisão sobre o efeito Casimir

A eletrodinâmica quântica (QED) permite que pares de partículas virtuais sejam criadas espontaneamente no vácuo, desde que essas partículas se aniquilem mutuamente em um prazo suficientemente curto de tempo regido pelo princípio da incerteza de Heisenberg. Uma vez que flutuações de partículas virtuais estão sempre presentes, isto leva a uma redefinição do conceito do que constitui o vácuo. O vácuo é o estado mais baixo de energia de um sistema, que normalmente implica um volume na ausência de partículas reais. As flutuações do vácuo em geral, não são notadas a menos que o vácuo seja perturbado de alguma forma. O distúrbio no vácuo pode ser devido a um campo eletromagnético externo ou, por vezes sob a forma de simples condições de contorno. [4–7, 35]. Em 1948, H.B Casimir [1] considerou que fótons virtuais devem obedecer às mesmas condições de contorno que campos clássicos. Assim, se duas placas paralelas, perfeitamente condutoras e neutras são colocadas no vácuo, apenas alguns modos de

vibração da onda são permitidos entre as placas. Por outro lado, qualquer modo pode existir fora, onde os limites estão no infinito. A densidade de energia do vácuo fora é maior que a densidade de energia entre as duas placas e haverá uma força atrativa resultante entre as placas (ver figura 3.1). Na subseção 3.1.1 faremos o calculo quantitativo da energia de Casimir com

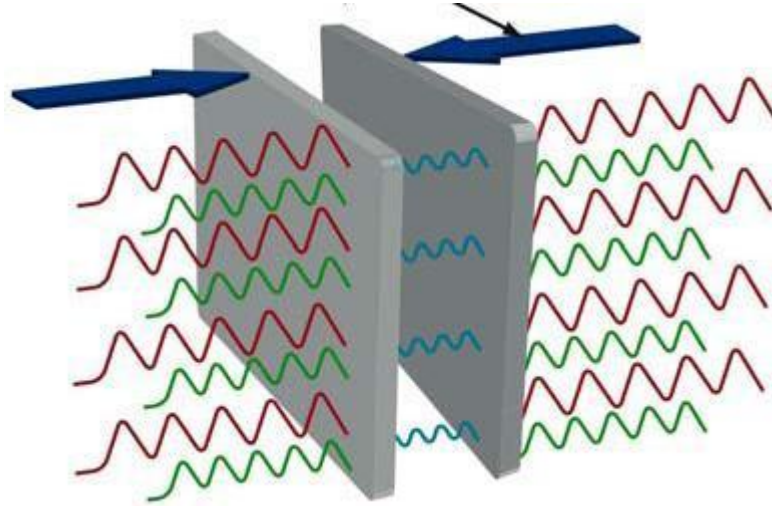


Figura 3.1 – Duas placas paralelas condutoras neutras experimentam uma força atrativa atribuída a flutuações do campo eletromagnético quantizado no estado vácuo.

base na energia de ponto zero E_0 determinante na caracterização do estado vácuo decorrente da quantização do campo eletromagnético (ver capítulo 2.2).

3.1.1 Cálculo da energia de Casimir

Considerando se uma cavidade condutora em forma de paralelepípedo conforme mostra Figura 3.2 e que as paredes são perfeitamente condutoras, as condições de contorno são:

$$\begin{cases} \hat{n} \cdot \vec{B} = 0, \\ \hat{n} \times \vec{E} = 0. \end{cases} \quad (3.1)$$

As condições de contorno na Equação (3.1) implicam em :

$$\vec{E}_t|_A = \vec{B}_n|_A = 0. \quad (3.2)$$

Na equação (3.2) "t" e "n" são respectivamente as componentes tangencial e normal à superfície de área A . Se $L_z \ll \sqrt{A}$, e, $L_x = L_y = L$ e L_z as condições propostas por Casimir podem

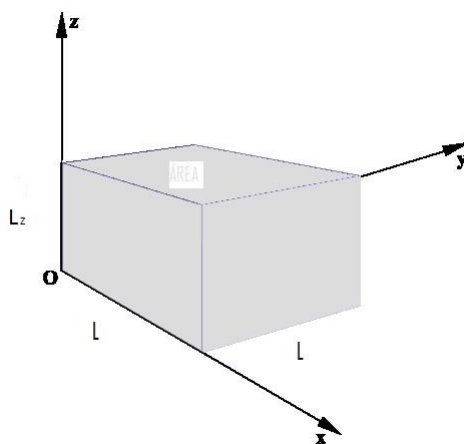


Figura 3.2 – Cavidade em forma de paralelepípedo com paredes perfeitamente condutoras e neutras. L_z, L, L são as dimensões do paralelepípedo.

ser obtidas construindo se um paralelepípedo de paredes perfeitamente condutoras. Assim, no espaço livre não há restrição à propagação do campo eletromagnético, já no interior da cavidade as ondas são estacionárias. O potencial eletromagnético na cavidade é [1, 2, 4, 5, 7, 37]:

$$\begin{aligned} A_x(\vec{r}) &= (8/V)^{1/2} [\text{Cos}(k_x x) \text{Sen}(k_y y) \text{Sen}(k_z z)], \\ A_y(\vec{r}) &= (8/V)^{1/2} [\text{Sen}(k_x x) \text{Cos}(k_y y) \text{Sen}(k_z z)], \\ A_z(\vec{r}) &= (8/V)^{1/2} [\text{Sen}(k_x x) \text{Sen}(k_y y) \text{Cos}(k_z z)]. \end{aligned} \quad (3.3)$$

A constante de normalização obedece a condição:

$$\int_V |A(\vec{r}) d\vec{r}|^2 = 1, \quad (3.4)$$

$$\int_0^L dx \int_0^L dy \int_0^{L_z} [A_x^2 + A_y^2 + A_z^2] = 1. \quad (3.5)$$

Para a componente A_x ,

$$\begin{aligned} A_x^2 &= \frac{2}{L} \frac{2}{L_z} \frac{2}{L} \int_0^L \int_0^L \int_0^{L_z} \text{Sen} \left(\frac{n\pi x}{L} \right) \text{Sen} \left(\frac{n'\pi y}{L} \right) \text{Sen} \left(\frac{l\pi y}{L} \right) \text{Sen} \left(\frac{l'\pi x}{L} \right) \times \\ &\quad \text{Sen} \left(\frac{m\pi z}{L_z} \right) \text{Sen} \left(\frac{m'\pi z}{L_z} \right) \end{aligned} \quad (3.6)$$

de maneira que a constante de normalização para as 3 componentes é igual a $\left(\frac{8}{V}\right)^{1/2}$ onde V . O volume da cavidade é $V = L.L_z$ e, $k_x = \frac{n\pi}{L}$, $k_y = \frac{l\pi}{L}$, $k_z = \frac{m\pi}{L_z}$.

A fixação do gauge de Coulomb implica na condição de transversalidade isto é $\vec{\nabla} \cdot \vec{A} = 0$ pois, conforme analisado no capítulo 2.2 seção 2.2.1 e 2.2.2, a quantização do campo eletromagnético no gauge de Lorentz introduz a contribuição de fótons longitudinais, os quais, não possuem realidade física. Lembrando que $\vec{\nabla} \cdot \vec{A} = \frac{\partial A_x}{\partial x} + \frac{\partial A_y}{\partial y} + \frac{\partial A_z}{\partial z}$,

$$\frac{n.\pi A_x}{L} + \frac{l.\pi A_y}{L} + \frac{m.\pi A_z}{L_z} = 0, \quad (3.7)$$

há no máximo duas formas de polarização possíveis.

A frequência de oscilação permitida na cavidade é $\omega = k.c$:

$$w_{n,l,m} = c \left[\frac{n^2.\pi^2}{L^2} + \frac{l^2.\pi^2}{L^2} + \frac{m^2.\pi^2}{L_z^2} \right]^{1/2}. \quad (3.8)$$

A equação (3.7) mostra que, duas das constantes são independentes e, portanto, as oscilações permitidas são duplamente degeneradas. Essas degenerescências significam que, para cada oscilação permitida existem 2 configurações permitidas para o campo eletromagnético. [1, 2, 4, 37].

Considerando os modos de vibração permitidos na cavidade conforme equação (3.8) e, a energia de ponto zero (média), calculada na seção 2.2 equação (2.96), dentro da cavidade [4, 35]:

$$\sum_{n,l,m} 2 \cdot \frac{\hbar.w_{n,l,m}}{2} = \sum_{n,l,m} \pi.\hbar.c \left[\frac{n^2.\pi^2}{L^2} + \frac{l^2.\pi^2}{L^2} + \frac{m^2.\pi^2}{L_z^2} \right]. \quad (3.9)$$

O fator "2" aparece devido a 2 possíveis modos de polarização do campo eletromagnético na cavidade. Na situação física de interesse, $L \gg L_z = d$ (ver Figura 3.1). Assim, os somatórios em n e l devem ser substituídos por integrais [4, 35]:

$$\sum_{n,l,m} \rightarrow \frac{L^2 (\hbar.c)}{\pi^2} \sum_m \int \int dk_x dk_y, \quad (3.10)$$

e a energia eletromagnética entre as duas placas condutoras posicionadas em $z = 0$ e $z = d$,

paralelas a x e y é:

$$E_0(d) = \sum_{nlm} 2 \cdot \frac{1}{2} \hbar \cdot \omega_{n,lm} \longrightarrow \frac{L^2 (\hbar \cdot c)}{\pi^2} \sum_m \int_0^\infty dk_x \int_0^\infty dk_y \left[k_x^2 + k_y^2 + \frac{m^2 \pi^2}{d^2} \right]^{1/2}. \quad (3.11)$$

A equação (3.11) leva a uma divergência na energia de ponto zero E_0 a uma distância d entre as placas, isto é, E_0 tende a infinito. Lembrando que a área $A = L^2$ e tomando d também arbitrariamente grande obtém se:

$$E(\infty) = \frac{L^2}{\pi^2} (\hbar \cdot c) \frac{d}{\pi} \int_0^\infty dk_x \int_0^\infty dk_y \int_0^\infty dk_z (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2)^{1/2}. \quad (3.12)$$

Assim, a energia necessária para trazer as placas de uma grande separação para uma separação de d é dada pela diferença entre a equação (3.11) e (3.12), isto é:

$$E(d) - E(\infty) = \frac{L^2 \hbar \cdot c}{\pi^2} \left[\sum_m \int_0^\infty dk_y \int_0^\infty dk_x \left(k_x^2 + k_y^2 + \frac{m^2 \pi^2}{d^2} \right)^{1/2} - \frac{d}{\pi} \int_0^\infty dk_x \int_0^\infty dk_y \int_0^\infty dk_z (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2)^{1/2} \right] \quad (3.13)$$

Embora a diferença na eq.(3.13) seja infinita, é possível extrair um significado físico transformando k_x e k_y na equação (3.13) para coordenadas polares (r, θ) , $dk_x dk_y = r dr d\theta$:

$$U(d) = \hbar \cdot c \frac{L^2}{\pi^2} \cdot \left[\sum_m \int_0^{\frac{\pi}{2}} d\theta \int_0^\infty \left(r^2 \sin^2 \theta + r^2 \cos^2 \theta + \frac{m^2 \pi^2}{d^2} \right)^{1/2} r dr - \frac{d}{\pi} \int_0^{\frac{\pi}{2}} d\theta \int_0^\infty dk_z \int_0^\infty (r^2 \sin^2 \theta + r^2 \cos^2 \theta + k_z^2)^{1/2} r dr \right] \quad (3.14)$$

$$U(d) = \frac{L^2 \hbar \cdot c \pi}{\pi^2} \frac{1}{2} \left[\sum_m \int_0^\infty \left(r^2 + \frac{m^2 \pi^2}{d^2} \right)^{1/2} r dr - \frac{d}{\pi} \int_0^\infty dk_z \int_0^\infty (r^2 + k_z^2)^{1/2} r dr \right] \quad (3.15)$$

Uma vez que θ varia de 0 a $\frac{\pi}{2}$ para $k_x, k_y > 0$ introduzimos uma função de cutoff f tal que $f(k)=1$ para $k \ll k_m$ e $f = 0$ $k \gg k_m$ $k_m = \frac{1}{a_0}$ onde a_0 é o raio de Bohr. Essas considerações acima levam em conta que o efeito Casimir seja de baixa frequência e não relativístico, e, reescrevendo

a equação(3.15) [1,4–7],

$$U(d) = \frac{L^2 \hbar \cdot c \pi}{\pi^2} \frac{\pi}{2} \left[\sum_{m=0}^{\infty} \int_0^{\infty} \left(r^2 + \frac{m^2 \pi^2}{d^2} \right)^{1/2} r dr f \left(r^2 + \frac{m^2 \pi^2}{d^2} \right)^{1/2} - \frac{d}{\pi} \int_0^{\infty} dk_z \int_0^{\infty} r \left(r^2 + k_z^2 \right)^{1/2} \cdot f \left(r^2 + k_z^2 \right)^{1/2} dr \right]. \quad (3.16)$$

Introduzindo a variável u ,

$$u = \frac{d^2}{\pi^2} \cdot r^2,$$

$$du = \frac{d^2}{\pi^2} (2r dr),$$

$$(2r dr) = \frac{\pi^2}{d^2} du,$$

$$r dr = \frac{\pi^2}{2d^2} du.$$

Reescrevendo a equação (3.16) em (3.17), com a troca de variáveis sugerida acima:

$$U(d) = \frac{L^2 \hbar \cdot c \pi}{\pi^2} \frac{\pi}{2} \left[\sum_{m=0}^{\infty} \int_0^{\infty} \sqrt{\frac{m^2 \pi^2}{d^2} + \frac{\pi^2 u}{d^2}} \left(\frac{\pi^2}{2d^2} \right) f \left(\frac{\pi^2 u}{d^2} + \frac{m^2 \pi^2}{d^2} \right)^{1/2} du - \frac{d}{\pi} \int_0^{\infty} dk_z \int_0^{\infty} \left(\frac{\pi^2 u}{d^2} + k_z^2 \right)^{1/2} f \left(\frac{\pi^2 u}{d^2} + k_z^2 \right)^{1/2} \left(\frac{\pi^2}{2d^2} \right) du \right], \quad (3.17)$$

$$U(d) = \frac{L^2 \hbar \cdot c \pi \pi \pi^2}{\pi^2 d 2 2d^2} \left[\sum_{m=0}^{\infty} \int_0^{\infty} \sqrt{m^2 + u} f \left[\frac{\pi}{d} (m^2 + u)^{1/2} \right] du - \frac{d}{\pi} \int_0^{\infty} dk_z \int_0^{\infty} \left(u + \frac{d^2}{\pi^2} k_z^2 \right)^{1/2} f \left(u + \frac{d^2}{\pi^2} k_z^2 \right)^{1/2} du \right]. \quad (3.18)$$

Introduzindo a nova variável $t = \frac{d}{\pi} k_z$, a diferencial dt :

$$dt = \frac{d}{\pi} dk_z$$

e substituindo na equação (3.18),

$$U(d) = \frac{L^2 \hbar c \pi \pi \pi^2}{\pi^2 d 2 2d^2} \left[\sum_{m=0}^{\infty} \int_0^{\infty} \sqrt{m^2 + u} f\left[\frac{\pi}{d} (m^2 + u)^{1/2}\right] du - \frac{d}{\pi} \int_0^{\infty} \frac{\pi}{d} dt \int_0^{\infty} (u + t^2)^{1/2} f\left[\frac{\pi}{d} (u + t^2)^{1/2}\right] du \right] \quad (3.19)$$

ou ainda:

$$U(d) = \frac{L^2 \hbar \pi^2 c}{4d^3} \left[\sum_{m=0}^{\infty} \int_0^{\infty} \sqrt{m^2 + u} f\left[\frac{\pi}{d} (m^2 + u)^{1/2}\right] du - \int_0^{\infty} dt \int_0^{\infty} (u + t^2)^{1/2} f\left[\frac{\pi}{d} (u + t^2)^{1/2}\right] du \right] \quad (3.20)$$

A diferença de energia potencial $U(d)$ calculada em (3.22) pode ser reescrita, notando a diferença entre a série em m e a integral e, lembrando que $t = \frac{d}{\pi} k_z$, $t = \frac{d}{\pi} m \cdot \frac{\pi}{d}$, isto é $t = m$:

$$U(d) = \frac{\pi^2 \hbar c}{4d^3} \cdot L^2 \left[\frac{1}{2} F(0) + \sum_{m=1}^{\infty} F(m) - \int_0^{\infty} F(t) dt \right], \quad (3.21)$$

Onde $F(t)$ é definido como

$$F(t) = \int_0^{\infty} (u + t^2)^{1/2} f\left[\frac{\pi}{d} (u + t^2)^{1/2}\right] du. \quad (3.22)$$

O fator $1/2$ multiplicando $F(0)$ refere se a um único modo de polarização quando $m = 0$. Para o cálculo da diferença entre a série e a integral na equação (3.21) será aplicada a fórmula de Euller-Maclaurin,

$$\frac{1}{2} F(0) + \sum_{m=1}^{\infty} F(m) - \int_0^{\infty} F(t) dt = - \sum_{\alpha=1}^{\infty} \frac{1}{(2\alpha)!} B^{2\alpha-1}(0), \quad (3.23)$$

onde o termo à direita da igualdade na equação (3.23) são polinômios de Bernoulli [38]. Para o cálculo das derivadas de F temos que, pela equação (3.22) substituindo $(u + t^2)^{1/2}$ por ω :

$$F(t) = \int_{t^2}^{\infty} \sqrt{w} f\left(\frac{\pi}{d} \omega\right) d\omega, \quad (3.24)$$

$$F(t) = \int_{t^2}^{\infty} \sqrt{w} f \left[\frac{\pi}{d} \sqrt{w} \right] dw. \quad (3.25)$$

Integrando por partes a equação (3.25) tem se

$$F(t) = \frac{2}{3} w^{3/2} f \left(\frac{\pi}{d} \sqrt{w} \right) \Big|_{t^2}^{\infty} - \int_{t^2}^{\infty} \frac{2}{3} w^{3/2} f' \left(\frac{\pi}{d} \sqrt{w} \right)$$

. Notando que $F(\infty) \rightarrow 0$ e $F(0) \rightarrow 1$,

$$F'(t) = -2.t^2 f \left(\frac{\pi}{d} t \right), \quad (3.26)$$

$$F^{(1)} = F'(t) = -\sqrt{t^2} f \left(\frac{\pi \sqrt{t^2}}{d} \right) \frac{dt^2}{dt} = -2t^2 f \left(\frac{\pi t}{d} \right), \quad (3.27)$$

$$F^{(2)} = F''(t) = 4t f - 2t^{(2)} f^{(1)}. \quad (3.28)$$

$$F^{(3)} = -4f - 8t f^{(1)} - 2t^2 f^{(2)}. \quad (3.29)$$

portanto $F'(0) = 0$; $F'''(0) = -4$ e todas as derivadas de ordem mais elevada se anulam quando $t = 0$.

$$\frac{1}{2} F(0) + \sum_{m=1}^{\infty} F^{(m)}(0) - \int_0^{\infty} F(t) dt = -\frac{4}{720}. \quad (3.30)$$

A energia de Casimir 3.19, associada a duas placas paralelas condutoras neutras é :

$$U(d) = \left(\frac{\pi^2 \hbar.c}{4d^3} \right) \cdot \left(\frac{-4}{720} \right) = -\frac{\pi^2 \hbar.c}{720d^3} A \quad (3.31)$$

onde $A = L^2$ é a área das placas. A força atrativa entre as duas placas é então :

$$F = -\frac{\pi^2 \hbar c}{240d^4} A. \quad (3.32)$$

3.2 A proposta de Bordag para energia de Casimir

Para uma compreensão mais aprofundada das forças de Casimir, Bordag et al [20] propôs um modelo no qual plasmons de superfície dominam a força de Casimir em pequenas separações, enquanto em grandes separações os modos de fótons, isto é, às ondas que se propagam perpendicularmente as superfícies dominam o efeito. Os modelos considerados na proposta de Bordag foram:

1. Primeiro Modelo: Duas placas de plasma separadas por uma distância d com um material dielétrico entre elas. A função dielétrica é descrita por:

$$\epsilon_p(\omega) = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2} \quad (3.33)$$

onde $\omega_p = \omega p(\omega) = \sqrt{\frac{n \cdot e^*}{m^*}}$ é a frequência de plasma.

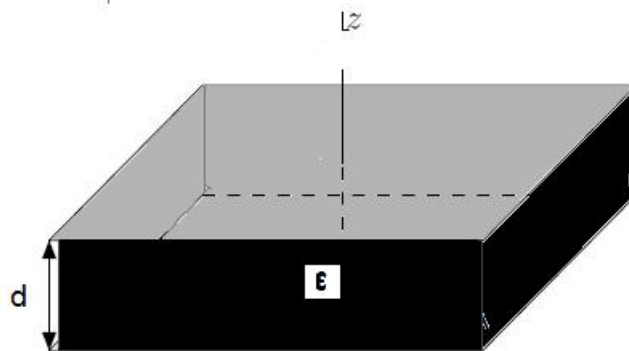


Figura 3.3 – Primeiro modelo de Bordag.

2. Segundo Modelo: Folhas infinitamente finas de plasma separadas por vácuo em analogia com o modelo de Barton et.al [18,20], que considerou um fluido carregado para descrever uma única camada de estrutura hexagonal de átomos de carbono. As interações das referidas placas de plasma com o campo eletromagnético resultam num conjunto de condições de contorno.

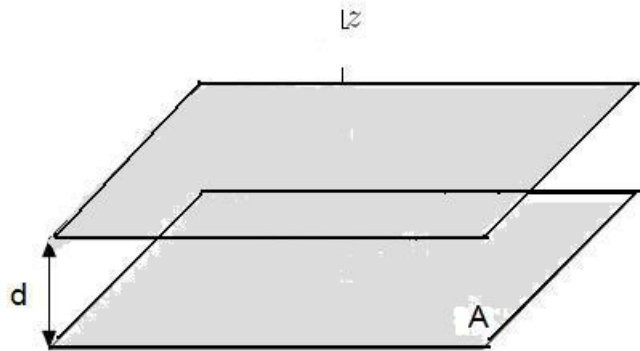


Figura 3.4 – Segundo modelo de Bordag. Folhas infinitamente finas de plasma separadas por uma distância d .

Em geral, a força de Casimir pode ser derivada a partir da energia do estado fundamental do campo electromagnético quantizado conforme descrito em (2.96),

$$E_0 = \sum_{(n)} \frac{1}{2} \hbar \omega_n, \quad (3.34)$$

onde a soma é executada sobre todos os números quânticos, ou seja, ao longo de todo o espectro físico na equação (3.34). Nos casos considerados pelo modelo de Bordag [20] a energia de ponto zero consiste em fótons que se propagam em todo o espaço indexados por um vetor de onda \vec{k} do espaço R_3 e um índice discreto para as duas polarizações TE e TM. Para descrição do modelo nas duas situações, considera-se um campo escalar Φ em uma configuração na qual os planos são paralelos, e próximo as placas o campo elétrico é dado por $\vec{E} = \vec{E}_{\parallel} + \vec{E}_{\perp}$. A equação de onda para a componente z do campo elétrico $E_z = E_z(x, y, z, t)$, é

$$\nabla^2 \vec{E}_z = \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 E_z}{\partial t^2}, \quad (3.35)$$

Substituindo a transformada da parte temporal de $E_z(\vec{r}, t)$,

$$\vec{E}_z = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} F(\vec{r}, \omega) e^{-i\omega t} d\omega, \quad (3.36)$$

$$\nabla^2 \int_{-\infty}^{\infty} F(\vec{r}, \omega) e^{-i\omega t} d\omega - \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} F(\vec{r}, \omega) e^{-i\omega t} d\omega = 0, \quad (3.37)$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial^2}{\partial t^2} F(\vec{r}, w) e^{-iwt} dw = \int_{-\infty}^{\infty} F(\vec{r}, w) \frac{\partial^2}{\partial t^2} e^{-iwt} dw = - \int_{-\infty}^{\infty} w^2 F(\vec{r}, w) dw, \quad (3.38)$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \left(\nabla^2 + \frac{w^2}{c^2} \right) F(\vec{r}, w) e^{-iwt} dw = 0 \quad (3.39)$$

ou explicitamente,

$$\left(\nabla^2 + \frac{w^2}{c^2} \right) E_z(\vec{r}, t) = 0 \quad (3.40)$$

Aplicando se a transformada de Fourier as componentes x e y obtem se:

$$E_z = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} X(k_x) e^{-ik_x x} \int_{-\infty}^{\infty} Y(k_y) e^{-ik_y y} dw, \quad (3.41)$$

$$\left(\frac{w^2}{c^2} - k_{\parallel}^2 + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) E_z = 0, \quad (3.42)$$

Onde $k_{\parallel} = k_x \vec{x} + k_y \vec{y}$ e $k_{\parallel}^2 = k_x^2 + k_y^2$. A componente z é perpendicular às placas e o problema de propagação é essencialmente unidimensional. A solução geral da equação (3.42) é:

$$\vec{E}(\vec{r}, t) = \vec{E}_0 e^{i(\vec{k}\vec{r} - \omega t)} = \vec{E}_0 e^{i(\vec{k}_{\parallel} \cdot \vec{\rho} + k_z z - \omega t)}, \quad (3.43)$$

onde $\vec{E}_0 = \text{constante}$ e $\rho = x\hat{x} + y\hat{y}$.

A descrição do problema pode ser feita por meio de uma função escalar $\Phi(k_{\parallel}, z)$ que satisfaz a equação (3.42)

$$\left(\frac{w^2}{c^2} - k_{\parallel}^2 + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \Phi(k_{\parallel}, z) = 0. \quad (3.44)$$

Considerando um potencial unidimensional no eixo z , ($z \in (-\infty, \infty)$), associado ao operador \hat{P} isto é:

$$\hat{P}\Phi = \lambda\Phi. \quad (3.45)$$

A equação (3.44) tem duas soluções linearmente independentes:

$$\begin{aligned} \Phi_1(z)_{z \rightarrow -\infty} &= Ae^{ikz} + S_{12}e^{-ikz} & , \Phi_1(z)_{z \rightarrow \infty} &= S_{11}e^{ikz} \\ \Phi_2(z)_{z \rightarrow -\infty} &= S_{22}e^{-ikz} & , \Phi_2(z)_{z \rightarrow \infty} &= S_{21}e^{ikz} + e^{-ikz}. \end{aligned} \quad (3.46)$$

A matriz (3.46) é unitária com base nisso, para k real,

$$S_{11}^2 - S_{21}^2 = \frac{S_{11}(k)}{S_{11}(-k)} = e^{-2i\delta(k)} \quad (3.47)$$

A solução $\Phi_1(z)$ descreve uma onda incidente da esquerda que é espalhada devido ao potencial, $t(k) = S_{11}(k)$ é o coeficiente de transmissão, $r(k) = S_{12}(k)$ é o coeficiente de reflexão. A segunda solução tem o mesmo significado para uma onda incidente no sentido oposto. A função $S_{11}(k)$ é meromorfa e os pólos se existirem estão localizados no eixo imaginário $k_z = i\kappa$, correspondendo aos estados ligados de ondas eletromagnéticas que se propagam ao longo da superfície (plasmons) [6, 20, 26–28].

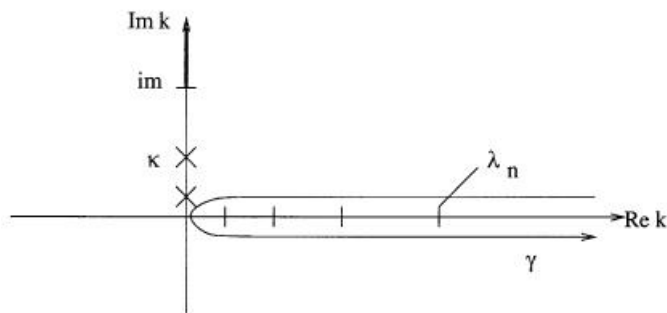


Figura 3.5 – Representação de κ no plano complexo. Adaptado da referência [27].

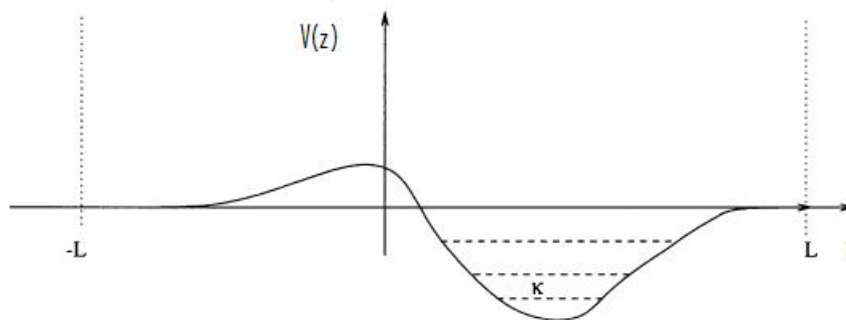


Figura 3.6 – Típico potencial ligado unidimensional: Os estados ligados são mostrados pelas linhas pontilhadas.

Adaptado da referência [27].

Considerando que a equação (3.34) é uma soma convergente de plasmons e fótons a energia de ponto zero pode ser escrita conforme equação (3.48):

$$E_0 = E_{plasmons} + E_{Fotons}. \quad (3.48)$$

A frequência das soluções (3.46) para $\Phi_1(z)$ com a interpretação física descrita acima segue a partir da relação de dispersão $\frac{\omega}{c^2} = k_{\parallel}^2 + k_z^2$ e retomando a solução assintótica [6, 20, 26–28]:

$$\Phi_1(k_{\parallel}, z)_{z \rightarrow -\infty} \sim e^{ikz} + r e^{-ikz}, \quad (3.49)$$

$$\Phi_1(k_{\parallel}, z)_{z \rightarrow \infty} \sim t e^{ikz}. \quad (3.50)$$

A função de onda Φ que descreve os plasmons aparece para $k_z = i\kappa$ depois de dividir a equação (3.50) por t :

$$\Phi_{BS}(k_{\parallel}, z)_{z \rightarrow -\infty} \sim \frac{r}{t} e^{\kappa z}, \quad (3.51)$$

$$\Phi_{BS}(k_{\parallel}, z)_{z \rightarrow \infty} \sim e^{-\kappa z}, \quad (3.52)$$

O campo elétrico é dado pela expressão (3.53)

$$\vec{E} = (\vec{E}_{\parallel} + \vec{E}_{\perp}) e^{i\vec{k} \cdot \vec{\rho} - \omega t} \Phi(k_{\parallel}, z), \quad (3.53)$$

Na equação (3.53), $\vec{\rho} = x\vec{x} + y\vec{y}$. Esquemáticamente, a interação do espectro eletromagnético quantizado com a superfície é descrita na Figura 3.7:

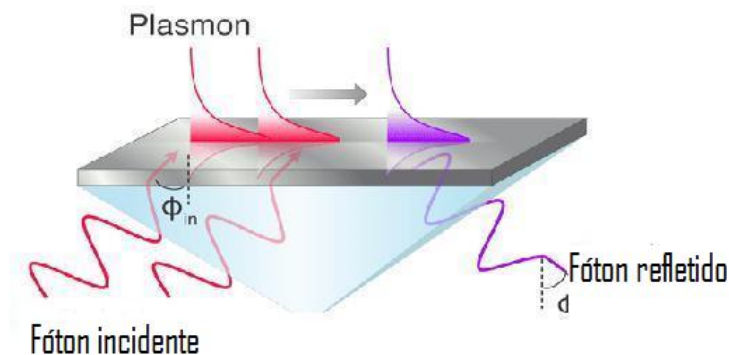


Figura 3.7 – Interação do campo eletromagnético com a superfície de um metal. Adaptado da referência [39].

3.2.1 Condições de contorno para o caso dielétrico

As componentes do campo \vec{D}_\perp e \vec{E}_\parallel através da superfície devem ser contínuas. A polarização do campo eletromagnético pode ser separada em (TE) e (TM), assim:

$$\begin{aligned} \Phi_+(0) - \Phi_-(0) = 0 \quad , \quad \Phi'_+(d) - \Phi'_-(d) = 0, \quad (TE) \\ \varepsilon_+ \Phi_+(0) - \varepsilon_- \Phi_-(0) = 0 \quad , \quad \Phi'_+(d) - \Phi'_-(d) = 0, \quad (TM). \end{aligned} \quad (3.54)$$

A velocidade de propagação da onda eletromagnética muda com o meio de propagação,

$$v = \frac{c}{n} = \frac{1}{\sqrt{\epsilon\mu_0}}, \quad (3.55)$$

$$n = \sqrt{\epsilon}. \quad (3.56)$$

A permissividade relativa ϵ de acordo com o modelo de plasma é [6, 14, 15]:

$$\epsilon \equiv 1 - \left(\frac{\Omega_p^2}{\omega^2} \right), \quad (3.57)$$

$$\frac{\omega^2}{k^2} = \frac{1}{\epsilon} c^2 \quad (3.58)$$

Onde Ω_p é a frequência do plasma.

$$\frac{\omega^2}{c^2} \epsilon = k^2, \quad (3.59)$$

$$k_\parallel^2 + k_z^2 = \frac{\omega^2}{c^2} \left(1 - \frac{\Omega_p^2}{\omega^2} \right). \quad (3.60)$$

Portanto,

$$\frac{\omega}{c} = \sqrt{k_\parallel^2 + k_z^2 + \frac{\Omega_p^2}{c^2}}. \quad (3.61)$$

Retomando o comportamento assintótico obtêm se:

$$\Phi(k_{\parallel}, z) = \begin{cases} e^{ikz} + re^{-ikz} & z < 0, \\ te^{iqz} & z > 0, \end{cases} \quad (3.62)$$

onde \vec{q} é o vetor de onda perpendicular aos planos e $\frac{\omega^2}{c^2} = k^2 + q^2$. Aplicando se as condições de contorno à polarização (TE) isto é $E_z = 0$,

$$\Phi_+(k_{\parallel}, 0) = \Phi_-(k_{\parallel}, 0) \Rightarrow 1 + r = t. \quad (3.63)$$

$$\Phi'_+(z) = \Phi'_-(z) \Rightarrow k + kr = qt, \quad (3.64)$$

$$k(1 - r) = q(1 + t), \quad (3.65)$$

$$r = \frac{(k - q)}{k + q} \quad \text{e} \quad t = \frac{2k}{(k + q)} \quad (3.66)$$

Para as condições (TM) i.e $B_z = 0$ tem se:

$$\epsilon\Phi_+(k_{\parallel}, 0) - \epsilon\Phi_-(k_{\parallel}, 0) = 0 \quad \epsilon(1 + r) = t, \quad (3.67)$$

$$\Phi'_+(z) = \Phi'_-(z) \quad \text{i.e} \quad k(1 - r) \Rightarrow k - \epsilon q = r(k + \epsilon q) \quad (3.68)$$

$$r = \frac{k - \epsilon q}{k + \epsilon q} \quad t = \frac{2\epsilon k}{k + \epsilon q}. \quad (3.69)$$

3.2.2 Condições de contorno para Folhas de Plasma

O plasma é formado por um conjunto denso de átomos livres, elétrons e íons, em uma distribuição quase neutra (números de partículas positivas e negativas é praticamente igual), que possuem comportamento coletivo. Essencialmente o plasma pode ser entendido como um fluido neutro de cargas com massa nm e carga $-ne$ por unidade de área e os núcleos imóveis, uniformemente distribuídos, com densidade de carga ne . Seja $\vec{\xi}$ o deslocamento de elétrons sobre a placa [18, 19]:

$$\sigma = n.e\vec{\nabla}_{\parallel} \cdot \vec{\xi}, \quad \vec{j} = -n.e \cdot \frac{\partial \vec{\xi}}{\partial t}. \quad (3.70)$$

O deslocamento é tangencial às folhas de plasma e pode ser escrito como

$$\vec{\xi}(\vec{x}, t) \approx \vec{\xi}(\vec{x})e^{-i\omega t}, \quad (3.71)$$

supondo $d\xi/dt \ll c$, tem se pela segunda lei de Newton:

$$m_e \frac{\partial^2 \vec{\xi}}{\partial t^2} = -m_e \omega^2 \vec{\xi} = -e \cdot E_{\parallel}. \quad (3.72)$$

As equações de Maxwell para uma onda evanescente similar a $\exp(-i\omega t)$ são

$$\begin{aligned} \vec{\nabla} \cdot \vec{E} &= 0, & \vec{\nabla} \times \vec{E} &= i\omega \vec{B}, \\ \vec{\nabla} \cdot \vec{B} &= 0, & \vec{\nabla} \times \vec{B} &= -\frac{i\omega}{c^2} \vec{E}. \end{aligned} \quad (3.73)$$

Por consequência, as condições de contorno são dadas por:

$$\begin{aligned} E_{\parallel+} - E_{\parallel-} &= 0, & B_{+\parallel} - B_{-\parallel} &= \mu_0 \vec{j} \times \vec{z} \\ E_{+z} - E_{-z} &= \frac{\sigma}{\epsilon_0}, & B_{+z} - B_{-z} &= 0. \end{aligned} \quad (3.74)$$

Da equação (3.72) tem se

$$\vec{E}_{\parallel} = \frac{w^2 m_e}{e} \vec{\xi}, \quad (3.75)$$

e aplicando a equação (3.75) em (3.74)

$$\sigma = \frac{n \cdot e^2}{w^2 m_e} \vec{\nabla}_{\parallel} \cdot \vec{E}_{\parallel}, \quad (3.76)$$

e a componente perpendicular do campo elétrico é portanto,

$$E_{+z} - E_{-z} = \frac{2\Omega \cdot c^2}{w} \vec{\nabla}_{\parallel} \cdot \vec{E}_{\parallel} \quad (3.77)$$

onde Ω depende da densidade de portadores de carga na folha e , da massa efetiva m^* dos portadores, da permeabilidade magnética μ_0 e da susceptibilidade elétrica ϵ_0 e tem dimensão de número de onda m^{-1} [19].

$$\Omega = \frac{\mu \cdot n \cdot e^2}{m^* \epsilon_0} \quad (3.78)$$

Para ondas elétricas transversais, isto é, $E_z = 0$, as condições para função escalar da qual os campos elétrico e magnético dependem, são :

$$\vec{E}_{+\parallel} - \vec{E}_{-\parallel} = 0, \quad (3.79)$$

que implica em

$$\vec{E}_{\parallel} e^{-i\omega t} \Phi_+(z) = \vec{E}_{\parallel} e^{-i\omega t} \Phi_-(z), \quad (3.80)$$

$$\Phi_+(z) - \Phi_-(z) = 0. \quad (3.81)$$

Aplicando a lei de Faraday ou seja a equação (3.73),

$$\vec{\nabla} \times \vec{E} = -i\omega \vec{B} \quad , \quad -\frac{\partial E_y}{\partial z} = i\omega B_x, \quad \frac{\partial E_x}{\partial z} = i\omega B_y, \quad (3.82)$$

com B_x e B_y sendo as componentes do campo magnético transversal,

$$\vec{B} = \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{i}{\omega} E_y \hat{x} - \frac{i}{\omega} E_x \hat{y} \right). \quad (3.83)$$

Da transversalidade do campo magnético obtêm se:

$$B_{\parallel+} - B_{\parallel-} = \mu_0 \vec{j}_x \vec{y} - \mu_0 \vec{j}_y \vec{x} = i\omega \mu_0 n \cdot e (\xi_y \vec{x} - \xi_x \vec{y}), \quad (3.84)$$

e da equação (3.72),

$$i\omega \frac{\partial}{\partial z} (E_y \vec{x} - E_x \vec{y}) = i\omega \mu_0 n \cdot e \frac{e}{m^* \omega^2} (E_y \vec{x} - E_x \vec{y}), \quad (3.85)$$

$$\frac{\partial \Phi^+}{\partial z} - \frac{\partial \Phi^-}{\partial z} = \frac{\mu_0 n e^2}{m^*} \Phi_{z=0}, \quad (3.86)$$

A equação (3.86) implica em

$$\frac{\partial \Phi^+}{\partial z} - \frac{\partial \Phi^-}{\partial z} = 2\Omega \Phi. \quad (3.87)$$

Se a componente $B_z = 0$, isto é, ondas transversais magnéticas *TM*,

$$\nabla \times \vec{B} = -\frac{i\omega}{c^2} \vec{E}, \quad (3.88)$$

$$\frac{\partial B_y}{\partial z} = -i\omega E_x, \quad \frac{\partial B_x}{\partial z} = -i\omega E_y, \quad (3.89)$$

$$\frac{\partial B_{y+}}{\partial z} - \frac{\partial B_{y-}}{\partial z} = -\frac{i\omega}{c^2} (E_{x+} - E_{x-}) = 0, \quad (3.90)$$

$$\frac{\partial \Phi_+}{\partial z} - \frac{\partial \Phi_-}{\partial z} = 0. \quad (3.91)$$

Escrevendo a equação (3.77) e a lei de Gauss:

$$E_{Z+} - E_{Z-} = 2\frac{\Omega c^2}{\omega^2} \vec{\nabla}_{\parallel} \cdot \vec{E}_{\parallel}, \quad \vec{\nabla}_{\parallel} \cdot \vec{E}_{\parallel} = -\frac{\partial E_Z}{\partial z}. \quad (3.92)$$

Reescrevendo em termos da função escalar Φ ,

$$\Phi_+ - \Phi_- = -\frac{2\Omega \cdot c^2}{\omega^2} \frac{\partial \Phi}{\partial z}. \quad (3.93)$$

A polarização pode então ser separada em *TE* e *TM* com as seguintes condições de contorno:

$$\begin{aligned} \Phi_+(0) - \Phi_-(0) &= 0, & \Phi'_+(d) - \Phi'_-(d) &= 2\Omega\Phi(d) & \text{(TE)} \\ \Phi'_+(0) - \Phi'_-(0) &= 0, & \Phi_+(d) - \Phi_-(d) &= -\frac{2\Omega}{\omega^2}\Phi'(d). & \text{(TM)} \end{aligned} \quad (3.94)$$

Aqui a relação de dispersão é somente $\omega = c\sqrt{k_{\parallel}^2 + k_z^2}$ e aplicando se as condições de contorno (3.94) à solução assintótica (3.62) para ondas TE ,

$$t - r - 1 = 0 \quad \text{implica que} \quad t = r + 1, \quad (3.95)$$

$$ikt + ikr - ik = 2\Omega t, \quad (3.96)$$

$$ik(r + 1) + ikr - ik = 2\Omega(r + 1), \quad (3.97)$$

$$2ikr = 2\Omega r + 2\Omega \quad (3.98)$$

$$r = \frac{\Omega}{ik - \Omega}, \quad t = \frac{ik}{ik - \Omega} + 1. \quad (3.99)$$

Para as ondas TM, aplicam se as equações (3.92) e (3.93),

$$t - r - 1 = \frac{2\Omega c^2}{\omega^2} ikt, \quad (3.100)$$

$$ikt + ikr - ik = 0, \quad (3.101)$$

$$1 - r - 1 - r = -\frac{2\Omega c^2}{w^2} ik(1 - r) \quad (3.102)$$

donde,

$$r = \frac{ik\Omega c^2}{w^2 + ik\Omega c^2}, \quad t = \frac{w^2}{w^2 + ik\Omega c^2}. \quad (3.103)$$

As condições de contorno da onda TE não admitem estados ligados, pois são semelhantes às de um potencial delta positivo e nesse potencial não há plasmons de superfície. As condições de contorno para ondas TM podem ser comparadas às condições do potencial δ e devido ao parâmetro $-2\frac{\Omega c^2}{\omega^2}$, permite estados ligados portanto os plasmons de superfície só existem para polarização TM [14–17, 20, 28].

3.2.3 Modelo das placas

Para o cálculo da energia de Casimir entre duas placas paralelas, nas duas condições de contorno discutidas previamente, é necessário o cálculo do coeficiente de transmissão. Tomando a solução para uma onda espalhada análoga às laminas de faces paralelas, para duas folhas finas de plasma, separadas por material dielétrico, obtém se o coeficiente de transmissão t e q (vetor de onda na direção z às placas no caso dielétrico):

$$t = \frac{\frac{4kq}{(k+q)^2}}{1 - \left(\frac{k-q}{k+q}\right)^2 e^{2iqd}}, \quad (\text{TE}) \quad (3.104)$$

$$t = \frac{\frac{4\epsilon kq}{(k+q)^2}}{1 - \left(\frac{k-\epsilon q}{k+\epsilon q}\right)^2 e^{2iqd}} \quad (\text{TM}), \quad (3.105)$$

Para folhas finas de plasma separadas por vácuo, a condição na qual a derivada é contínua em $z = 0$ implica que

$$ik - ikr = ikA - ikB, \quad (3.106)$$

$$1 - r = A - B \quad (3.107)$$

em $z=d$,

$$ikAe^{ikd} - ikBe^{-ikd} = ikte^{ikd}, \quad (3.108)$$

$$t = A - Be^{-2ikd}. \quad (3.109)$$

A descontinuidade em de Φ em $z=0$ implica em

$$A + B - (1 - r) = -\frac{2\Omega \cdot c^2}{w^2} ik(1 - r), \quad (3.110)$$

$$A + B = 1 - \frac{2\Omega \cdot k \cdot c^2}{w^2} + \left(1 + \frac{2\Omega \cdot k \cdot c^2}{w^2}\right) r. \quad (3.111)$$

A descontinuidade de Φ em $z=d$ implica

$$te^{ikd} - Ae^{ikd} - Be^{-ikd} = -\frac{2\Omega \cdot k \cdot c^2}{w^2} ikte^{ikd}, \quad (3.112)$$

$$\left(1 + \frac{2i\Omega \cdot k \cdot c^2}{w^2}\right) t = A + Be^{-2ikd}, \quad (3.113)$$

$$A = \left(1 + \frac{i\Omega \cdot k \cdot c^2}{w^2}\right) \cdot t, \quad (3.114)$$

$$\left(1 + \frac{2i\Omega \cdot k \cdot c^2}{w^2}\right) t = \left(1 + \frac{i\Omega \cdot k \cdot c^2}{w^2}\right) + Be^{-2ikd}, \quad (3.115)$$

$$B = \frac{i\Omega \cdot k \cdot c^2}{w^2} te^{2ikd}. \quad (3.116)$$

O coeficiente de reflexão r é então:

$$r = 1 - A + B, \quad (3.117)$$

$$A + B = \left(1 - \frac{2i\Omega \cdot k \cdot c^2}{w^2}\right) + \left(1 + \frac{2i\Omega \cdot k \cdot c^2}{w^2}\right) (1 - A + B), \quad (3.118)$$

$$A + B = 2 - \left(1 + \frac{2i\Omega.k.c^2}{w^2}\right) (A - B), \quad (3.119)$$

$$2A \left(1 + \frac{i\Omega.k.c^2}{w^2}\right) - 2B \frac{i\Omega.k.c^2}{w^2} = 2. \quad (3.120)$$

Substituindo (3.114) e (3.116) em (3.120):

$$\left(1 + \frac{i\Omega.k.c^2}{w^2}\right)^2 t + \left(\frac{i\Omega.k.c^2}{w^2}\right)^2 t e^{2ikd} = 1, \quad (3.121)$$

$$\left(\frac{w^2 + i\Omega.k.c^2}{w^2}\right)^2 t + \left(\frac{i\Omega.k.c^2}{w^2}\right)^2 t e^{2ikd} = 1, \quad (3.122)$$

$$\left(1 + \frac{(\Omega.k.c^2)^2}{(w^2 + i\Omega.k.c^2)^2} \cdot e^{2ik.d}\right) t = \frac{w^4}{(w^2 + i\Omega.k.c^2)^2} \quad (3.123)$$

$$t = \frac{\frac{w^4}{(w^2 + i\Omega.k.c^2)^2}}{1 + \frac{(\Omega.k.c^2)^2}{(w^2 + i\Omega.k.c^2)^2} \cdot e^{2ik.d}}. \quad (3.124)$$

A equação (3.124) é o coeficiente de transmissão nos modos (TM) (transversal magnético). Nos modos (TE) (transversal elétrico) das folhas de plasma,

$$t = \frac{\frac{-k^2}{(ik - \Omega)^2}}{1 - \left(\frac{\Omega}{ik - \Omega}\right)^2 e^{2ikd}}. \quad (3.125)$$

Os plasmons de superfície se formam nos pólos de t no eixo imaginário $k = ik$. Para o caso das folhas de plasma infinitamente finas separadas por um material dielétrico modo (TM),

$$1 - \left(\frac{k - \varepsilon q}{k + \varepsilon q}\right)^2 e^{-2iqd} = 0. \quad (3.126)$$

A equação transcendental (3.126) tem a seguinte solução:

$$\frac{\kappa + \varepsilon q}{\kappa - \varepsilon q} = -\sigma e^{qd}, \quad \sigma = \pm 1 \quad (3.127)$$

com $\varepsilon = 1 - \frac{\Omega_p^2}{\Omega_p^2 + k_{\parallel}^2 - \kappa^2}$ e $q = \sqrt{k_{\parallel}^2 - \kappa^2}$. Para $\sigma = +1$, os plasmons são simétricos e para $\sigma = -1$ os plasmons são antissimétricos. A solução para $\sigma = -1$ existe somente se

$$k_{\parallel} \geq \frac{\Omega_p/c}{1 + \frac{\Omega_p/c}{\sqrt{1 + \frac{\Omega_p d}{2c}}}}.$$

Denotando as soluções da (3.127) por $\kappa_{\equiv} \kappa_{\sigma}(k_{\parallel}, \Omega_p, d)$ e introduzindo a notação similar para a frequência $\omega(k_{\parallel}, k) = \sqrt{\Omega_p^2 + k_{\parallel}^2 + k^2}$. Considerando o limite κ_{σ} com $d \rightarrow \infty$.

$$\kappa_{single}(k_{\parallel}, \Omega_p, d) = \sqrt{\frac{\Omega_p^2}{(2c)^2} + \sqrt{\left(\frac{\Omega_p^2}{2c}\right)^2 + k_{\parallel}^4}}. \quad (3.128)$$

Calculando o pólo da equação equação (3.103), correspondente ao coeficiente de transmissão nos modos TM para folhas finas de plasma,

$$\frac{\omega^2 - \kappa\Omega}{\kappa\Omega} = -\sigma e^{-\kappa d}, \quad (3.129)$$

$$\omega = c\sqrt{k_{\parallel}^2 - \kappa^2}. \quad (3.130)$$

As soluções existem para $\Omega > 0$ e , na condição $d \rightarrow \infty$, para um plano a solução é :

$$k_{single} = \frac{1}{2} \left(\sqrt{\Omega^2 + 4k_{\parallel}^2} - \Omega \right) \quad (3.131)$$

Introduzindo também a notação $\kappa_{\sigma}(k_{\parallel}, \Omega, d)$ e $\omega(k_{\parallel}, k) = \sqrt{k_{\parallel}^2 + k^2}$.

$k_- < k_{single} < k_+ < k_{\parallel} < \omega_p$, (Dielétrico descrito pelo modelo do Plasma)

$k_- < k_{single} < k_+ < k_{\parallel} < \omega_p$, (Placas de plasma infinitamente finas)

3.2.4 Energia do Vácuo

A energia do vácuo para potenciais ligados que dependem de uma cordenada foram calculados em [20, 27] substituindo $S_{11} \rightarrow t$, e $S_{12} \rightarrow r$ na matriz de espalhamento (3.46),

$$E_0 = \frac{1}{2} \int \frac{dk_{\parallel}}{(2\pi)^2} \left\{ \sum_{\sigma} w(k_{\parallel}, ik_{\sigma}) + \int_0^{\infty} \frac{dk}{2\pi i} w(k_{\parallel}, k) \frac{\partial}{\partial k} \ln \frac{t(k)}{t(-k)} \right\}, \quad (3.132)$$

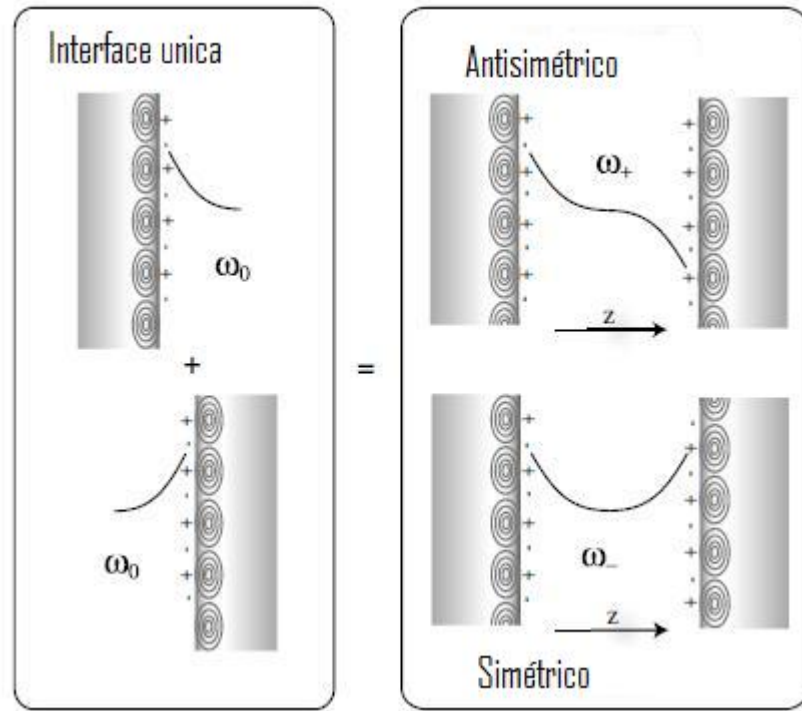


Figura 3.8 – Modos de plasmon de superfície associados a oscilação da carga eletrônica. Anti simétrico e simétrico.

Adaptado da referência [16].

$t(k)$ é o coeficiente de transmissão definido em (3.50) e a soma é executada sobre os plasmons de superfície simétrico e anti-simétrico. Na equação (3.132) as divergências são removidas subtraindo se a dupla contribuição das placas, isto equivale a substituir o limite de grandes distâncias d , isto é $d \rightarrow \infty$ passando a uma única superfície. Explicitamente:

$$w(k_{\parallel}, ik_{\sigma}) \longrightarrow \omega(k_{\parallel}, ik_{\sigma}) - w(k_{\parallel}, ik_{single}) \quad (3.133)$$

com k_{σ} no modelo das placas de plasma dado pela equação (3.127) e k_{single} é dado por (3.131). Assim, termos que não dependem da distância entre as placas e que não contribuem para a energia de Casimir são removidos e (3.132) se torna:

$$E_0 \equiv \frac{1}{2} \int \frac{dk_{\parallel}}{(2\pi)^2} \int_{k_0}^{\infty} \frac{dk}{\pi} w(k_{\parallel}, ik) \frac{\partial}{\partial k} \ln(ik). \quad (3.134)$$

O limite inferior para a integração na equação (3.134) é $k_0 = \sqrt{\frac{\Omega_p^2}{c^2} + k_{\parallel}^2}$ para dielétrico e $k_0 = k_{\parallel}$.

3.2.5 Cálculo da contribuição dos plasmons na Energia

A integração da equação (3.134) feita por partes para fins de integração numérica [20, 27]:

$$E_0 = \frac{1}{2} \int \frac{dk_{\parallel}}{(2\pi)^2 \pi} \left\{ \sqrt{k_{\parallel}^2 - \kappa^2} \ln(t(i\kappa)) \Big|_{k_{\parallel}}^{\infty} - \int_{k_0}^{\infty} d\kappa \frac{\kappa}{\sqrt{k_{\parallel}^2 - \kappa^2}} \ln(t(i\kappa)) \right\} \quad (3.135)$$

Lembrando que $\omega(k, ik) = \sqrt{k_{\parallel}^2 - \kappa^2}$,

$$E_0 = -\frac{1}{2} \int \frac{dk_{\parallel}}{(2\pi)^2} \int_{k_0}^{\infty} \frac{dk}{\pi} \frac{k \ln(t(ik))}{\omega(k_{\parallel}, ik)}. \quad (3.136)$$

levando em conta os coeficientes de transmissão para o eixo imaginário para o caso do dielétrico com $q = \sqrt{k^2 - \Omega_p^2}$ e $\varepsilon = 1 - \frac{\Omega_p^2}{\Omega_p^2 + k_{\parallel}^2 - k^2}$:

$$\begin{aligned} t(i(k))^{-1} &= 1 - \left(\frac{k-q}{k+q} \right)^2 e^{-2qd}, \quad (TE) \\ t(i(k))^{-1} &= 1 - \left(\frac{k-\varepsilon q}{k+\varepsilon q} \right)^2 e^{-2kd}, \quad (TM) \end{aligned} \quad (3.137)$$

para duas lâminas finas de plasma paralelas separadas por vácuo

$$\begin{aligned} t(i(k))^{-1} &= 1 - \left(\frac{\Omega}{k+\Omega} \right)^2 e^{-2kd}, \quad (TE) \\ t(i(k))^{-1} &= 1 - \left(\frac{\Omega k}{k_{\parallel} - k^2 - \Omega k} \right)^2 e^{-2kd}, \quad (TM) \end{aligned} \quad (3.138)$$

e substituindo as equações (3.137) e (3.138) modos TM na equação (3.136), obtêm se:

$$E_0 = \frac{1}{2} \int \frac{dk_{\parallel}}{\pi} \int_{k_{\parallel}}^{\infty} \frac{dk}{\pi} \frac{k}{\omega(k_{\parallel}, ik)} \ln \left(1 - \left(\frac{k-\varepsilon q}{k+\varepsilon q} \right)^2 e^{-2qd} \right) \quad (\text{Dielétrico}) \quad (3.139)$$

$$E_0 = \frac{1}{2} \int \frac{dk_{\parallel}}{\pi} \int_{k_{\parallel}}^{\infty} \frac{dk}{\pi} \frac{k}{\omega(k_{\parallel}, ik)} \ln \left(1 - \left(\frac{\Omega k}{k_{\parallel} - k^2 - \Omega k} \right)^2 e^{-2kd} \right) \quad (\text{Folhas de Plasma}) \quad (3.140)$$

A integração nas equações (3.139) e (3.140) é feita com base no Apêndice da referência [6, 40].

A contribuição dos plasmons de superfície segue a partir das equações (3.132) e (3.133). Para o dielétrico,

$$E_{plasmon} = \frac{\hbar}{2} \int \frac{dk_{\parallel}}{(2\pi)^2} \sum_{\sigma=\pm 1} \sqrt{\frac{\Omega_p^2}{c^2} + k_{\parallel}^2 - \kappa_{\sigma}^2(k_{\parallel}, \Omega_p, d)} - \sqrt{\frac{\Omega_p^2}{c^2} + k_{\parallel}^2 - \kappa_{single}^2(k_{\parallel}, \Omega_p, d)}, \quad (3.141)$$

essa equação pode ser reescrita como :

$$E_{plasmon, \sigma} = \frac{\hbar}{4\pi} \int_{k_{\parallel}}^{\infty} dk_{\parallel} k_{\parallel} \omega_{\sigma}(\Omega_p, d, k_{\parallel}), \quad (3.142)$$

fazendo a substituição $k_{\parallel} \rightarrow \frac{k_{\parallel}}{d}$

$$E_{plasmon, \sigma} = \frac{\hbar}{4\pi d^3} \int_{k_{\parallel} d}^{\infty} dk_{\parallel} k_{\parallel} d \omega_{\sigma}\left(\Omega_p, d, \frac{k_{\parallel}}{d}\right) \quad (3.143)$$

e fazendo a substituição $k \rightarrow \sqrt{\omega_p d}$,

$$E_{plasmon, \sigma} = \hbar c A \frac{\sqrt{\Omega_p d}}{4\pi d^3} f(\Omega_p d), \quad (3.144)$$

onde o fator o fator $f(\omega_p d)$ descreve o desvio em relação ao condutor ideal no valor da energia,

$$f(\omega_p d) = \sqrt{\omega_p d} \int_{k_{\parallel} \sqrt{\frac{d}{\omega_p}}}^{\infty} dk_{\parallel} dk_{\parallel} k_{\parallel} d \Omega_{\sigma}\left(\Omega_p, d, k_{\parallel} \sqrt{\Omega_p/d}\right), \quad (3.145)$$

o calculo de $f(\omega_p d)$ é feito através de métodos numéricos assim, a função $f(x)$ para $x \rightarrow \infty$ tem um limite finito:

$$f(x) = \begin{cases} -1,2448, & (\sigma = +1, \text{plasmon simétrico}) \\ 0,9652, & (\sigma = -1, \text{plasmon anti simétrico}). \end{cases} \quad (3.146)$$

$$\begin{aligned}
E_{plasmon,\sigma=+1} &\approx -0,0305\hbar.cA \frac{\sqrt{\Omega_p d}}{d^{5/2}} \\
E_{plasmon,\sigma=-1} &\approx 0,0267\hbar.cA \frac{\sqrt{\Omega_p d}}{d^{5/2}}.
\end{aligned} \tag{3.147}$$

Somando as duas contribuições dos plasmons de superfície para o dielétrico:

$$E_{Cas} \approx -4 \times 10^{-3} \hbar c A \frac{\sqrt{\omega_p}}{d^2}, \tag{3.148}$$

e para o caso das folhas de plasma,

$$E_{plasmon} = \frac{\hbar}{2} \int \frac{dk_{\parallel}}{(2\pi)^2} \sum_{\sigma=\pm 1} \sqrt{k_{\parallel}^2 - \kappa_{\sigma}^2(k_{\parallel}, \Omega_p, d)} - \sqrt{k_{\parallel}^2 - \kappa_{\sigma}^2(k_{\parallel}, \Omega_p, d)}, \tag{3.149}$$

A equação (3.149) pode ser reescrita como

$$E = \frac{\hbar}{4\pi} \int_{k_{\parallel}}^{\infty} dk_{\parallel} k_{\parallel} \omega_{\sigma}(\Omega, k_{\parallel}, d), \tag{3.150}$$

fazendo a substituição $k_{\parallel} \rightarrow \frac{k_{\parallel}}{d}$ na equação (3.150),

$$E_{plasmon,\sigma} = \frac{1}{4\pi \cdot d^3} \int_{k_{\parallel}^0, d}^0 dk_{\parallel} k_{\parallel} \cdot d \cdot \omega_{\sigma}(\Omega, d, \frac{k_{\parallel}}{d}) \tag{3.151}$$

Substituindo agora $k_{\parallel} \rightarrow k_{\parallel} \sqrt{\Omega \cdot d}$ e a representação para a contribuição dos plasmons pode ser reescrita como:

$$E_{plasmon,\sigma} = \hbar c A \frac{\sqrt{\Omega \cdot d}}{4\pi \cdot d^3} g(\Omega, d), \tag{3.152}$$

com $g(\Omega, d) = \sqrt{\Omega \cdot d} \cdot \int_{k_{\parallel}^0 \cdot \sqrt{\frac{d}{\Omega}}}^{\infty} dk_{\parallel} k_{\parallel} \cdot d \cdot \omega_{\sigma}(\Omega, d, \frac{k_{\parallel}}{d})$. Para as folhas de plasma, a função $g(x)$ não depende de seu argumento, e é dada por:

$$g(x) = \begin{cases} -0.702427, & \text{(plasmon simétrico)} \\ 0.639449, & \text{(plasmon anti simétrico)}. \end{cases} \tag{3.153}$$

Notando com isso que a contribuição dos plasmons cresce $\sqrt{\Omega \cdot d}$ mais rápido que a energia do vácuo. No modelo das folhas de plasma,

$$\begin{aligned} E_{plasmon, \sigma=+1} &= 0,05090 \hbar \cdot c A \frac{\sqrt{\Omega}}{d^{5/2}} \\ E_{plasmon, \sigma=-1} &= -0,05589 \hbar \cdot c A \frac{\sqrt{\Omega}}{d^{5/2}}. \end{aligned} \quad (3.154)$$

A contribuição da energia de Casimir modos (TE) é muito pequena e a energia total devido a contribuição dos plasmons fica dada por:

$$E_{TM} \approx -5,01 \times 10^{-3} \hbar c A \frac{\sqrt{\Omega}}{d^{5/2}} \quad (3.155)$$

Capítulo 4

Revisão teórica sobre o modelo de Sommerfeld para metais

4.1 Propriedades do gás de Fermi no estado fundamental

Nesta secção, são calculadas as propriedades de um gás de Fermi de N portadores no estado fundamental confinados em um volume V . Em razão dos portadores não interagirem entre si é possível encontrar o estado fundamental de um sistema com N portadores primeiramente encontrando os níveis de energia de um elétron no volume V e, preenchendo estes níveis de maneira consistente com o princípio de exclusão de Pauli. Um elétron livre pode ser descrito por uma função de onda $\psi(\vec{r})$ associada a energia E [41, 42]:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r}). \quad (4.1)$$

Para um conjunto de N elétrons, desprezando todas as interações elétron elétron, a equação de Schrödinger para os N elétrons em uma caixa de dimensões $a \times b \times c$ pode ser escrita como.

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\sum_j \nabla_j^2\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_j \dots \vec{r}_N) = E\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_j \dots \vec{r}_N). \quad (4.2)$$

A resolução desta equação para o gás de Fermi livre é dada por

$$\psi_k(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\vec{k}\vec{r}}, \quad (4.3)$$

onde $\frac{1}{\sqrt{V}}$ é o fator de normalização, já que $\int \psi \cdot \psi^* dV = 1$. A função de onda (4.3) pode ser separada nas componentes x, y, z ;

$$\psi_k(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{L_x}} e^{i\vec{k}\vec{x}} \frac{1}{\sqrt{L_y}} e^{i\vec{k}\vec{y}} \frac{1}{\sqrt{L_z}} e^{i\vec{k}\vec{z}}. \quad (4.4)$$

Notando que, $\vec{p} = \hbar \cdot \vec{k}$ com $\vec{k} = (k_x, k_y, k_z)$, os autovalores de energia que satisfazem a equação de Schrödinger são dados pela expressão:

$$E_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}. \quad (4.5)$$

Separando em componentes a equação (4.5),

$$E_k = \frac{\hbar^2 (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2)}{2m}. \quad (4.6)$$

Impondo as condições de contorno de Born-von Karmann [41–43]:

$$\begin{cases} \psi(x + L, y, z) = \psi(x, y, z), \\ \psi(x, y + L, z) = \psi(x, y, z), \\ \psi(x, y, z + L) = \psi(x, y, z), \end{cases} \quad (4.7)$$

com $k_x = 2\pi \frac{n_x}{L}$; $k_y = 2\pi \frac{n_y}{L}$; $k_z = 2\pi \frac{n_z}{L}$, sendo n_x, n_y e n_x números inteiros.

O estado fundamental é construído a partir de produtos das funções de onda da equação (4.4). O princípio de exclusão de Pauli proíbe que qualquer estado dado seja ocupado mais que uma vez e, por consequência, dado qualquer estado indexado por k este não é capaz de receber mais do que dois elétrons, um para cada valor de spin. O estado fundamental de N elétrons é construído pela colocação de dois elétrons no estado de menor energia, que é $|k| = 0$ (os vetores de onda \vec{k} permitidos são definidos pelos pontos cujas coordenadas são múltiplos de $\frac{2\pi}{L}$). Em seguida se coloca 2 elétrons de cada vez em todos os estados com $|k| = \frac{2\pi}{L}$ uma vez

que, a energia cresce com k^2 conforme equação (4.5), e continuando a adicionar elétrons sempre preenchendo os estados com o menores valores possíveis de energia, isto implica que os elétrons são adicionados ao estado fundamental em cascas esféricas sucessivas.

Definindo o número de ocupação de um estado por f_k indexado por k onde k é igual a 1 se este elétron é parte do estado fundamental e 0 caso contrário. Para um grande número N de elétrons, o estado fundamental corresponde ao conjunto de número de ocupação f_k de todos os estados com exceção daqueles determinados pelo vetor de onda k_F (vetor de onda de Fermi) ou seja, o estado fundamental é construído a partir de funções de onda ocupando uma esfera no espaço dos momentos (espaço k). O estado fundamental do gás de elétrons livres é construído ocupando vértices em uma malha cúbica de estados que se aproximam de uma esfera de raio k_F no espaço k . Qualquer outra forma iria impossibilitar a colocação de elétrons o mais próximo possível da origem no espaço k , e portanto, não iria minimizar a energia total [41–45].

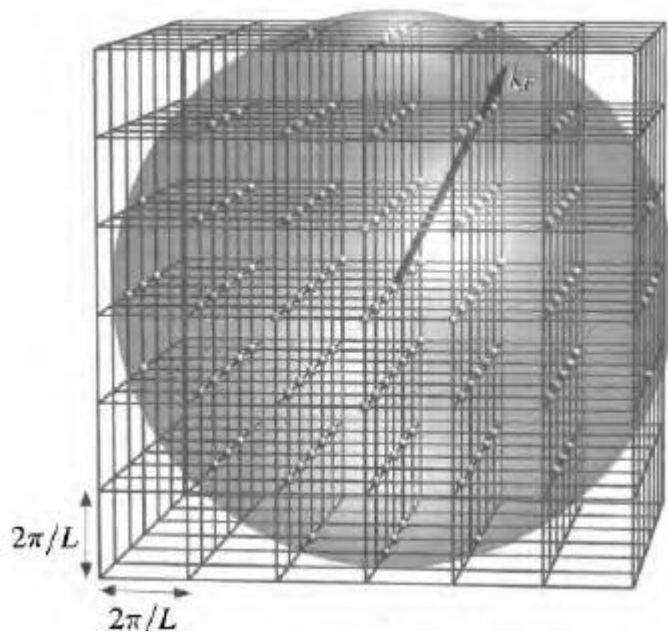


Figura 4.1 – Vértices em uma malha cúbica de estados que se aproximam de uma esfera de raio k_F no espaço k .
ref: [34].

4.1.1 Densidade de estados

No espaço dos momentos, ou ainda, espaço recíproco, os vetores de onda (vetores \vec{k}) permitidos, são definidos pelos pontos cujas coordenadas são múltiplos de $\frac{2\pi}{L}$. O volume no espaço dos k , ocupado por cada estado permitido é $V_k = (2\pi)^3/V$ onde $V = L^3$. A fim de calcular o número total de elétrons N , ou a sua energia E , ou qualquer outra quantidade termodinâmica, é preciso realizar somas do tipo:

$$\sum_{\vec{k}} F_{\vec{k}}, \quad (4.8)$$

onde $F_{\vec{k}}$ é uma função do vetor de onda \vec{k} , com os vetores \vec{k} somados sobre os valores permitidos de \vec{k} e por conveniência matemática as somas são convertidas em integrais de mais de uma função contínua F_k . A integração é definida por partição do espaço em um grande número de elementos de volume e somando uma função ao longo destes elementos multiplicada pelo volume de cada elemento:

$$\int F_{\vec{k}} d\vec{k} = \sum_{\vec{k}} \left(\frac{2\pi}{L}\right)^3 F_{\vec{k}}, \quad (4.9)$$

$$\sum_k F_k = \frac{V}{2\pi} \int F_{\vec{k}} d\vec{k}. \quad (4.10)$$

Em algumas ocasiões, a função F_k , pode envolver uma função delta, tal como a δ_{kq} . Visto como uma função de uma variável contínua, esta função transforma claramente em algum múltiplo de $\delta(k - q)$,

$$\delta_{kq} = \frac{(2\pi)^3}{V} \cdot \delta(\vec{k} - \vec{q}). \quad (4.11)$$

A soma na equação (4.9) é sobre todos os valores de \vec{k} esperados para elétrons livres. Para cada vetor de onda, o princípio da exclusão de Pauli permite dois elétrons, um com spin para cima e outro com spin para baixo. Chama-se densidade de estados, $D(E)$, ao número de estados por unidade de energia e por unidade de volume isto é:

$$D_k(E) = 2 \cdot \frac{1}{(2\pi)^3}, \quad (4.12)$$

que é definido como sendo a quantidade que permite escrever:

$$\sum_{k,\sigma} = V \cdot \int D_{\vec{k}} F_k d\vec{k}, \quad (4.13)$$

Utilizando a notação:

$$\int d\vec{k} = \frac{2}{V} \sum_k = \int d\vec{k} \cdot D_{\vec{k}} = \frac{2}{(2\pi)^3} \int d\vec{k}^3. \quad (4.14)$$

Várias funções separadas D são todos referidos como densidades de estados. Eles são distinguidos por seus argumentos. O mais importante é $D(E)$, a densidade de energia de estados que é útil para lidar com somas de funções que dependem de k através de uma função de energia E_k :

$$\sum_{k,\sigma} F(E_k) = V \int dE D(E) F(E). \quad (4.15)$$

Para encontrar $D(E)$ nota se que :

$$\sum_{k,\sigma} F(E_k) = V \int dk F(E_k), \quad (4.16)$$

$$\sum_{k,\sigma} F(E_k) = V \int dE \int d\vec{k} \delta(E - E_k) F(E). \quad (4.17)$$

Comparando a equação (4.17) com a equação (4.15) tem se

$$D(E) = \int d\vec{k} \delta(E - E_k). \quad (4.18)$$

De maneira geral, para um a densidade de estados para um gás com dimensão d é:

$$D_{\vec{k}} = 2 \cdot \left(\frac{1}{2\pi} \right)^d \quad (4.19)$$

$$D(E) = \int [d\vec{k}] \delta(E - E_k) d\vec{k} \equiv \int d_{\vec{k}} \delta(E - E_k) d\vec{k} = \frac{2}{(2\pi)^d} \int (E - E_k) d\vec{k} \quad (4.20)$$

Introduzindo coordenadas esféricas no espaço d dimensional com $k = |k|$;

$$dk = \begin{cases} 2dk & d = 1, \\ 2\pi k dk & d = 2, \\ 4\pi k^2 dk & d = 3. \end{cases} \quad (4.21)$$

Para densidade de estados em 2d obtem se:

$$\frac{2}{(2\pi)^2} \int_0^\infty 2\pi \frac{\sqrt{2mE_k}}{\hbar} \delta(E - E_k) \left(\frac{m}{2\hbar^2 E_k} \right)^{1/2} dE_k = \left(\frac{m}{2\hbar^2 E_k} \right)^{1/2} dE_k \quad (4.22)$$

que implica:

$$D(E) = \frac{mA}{\pi\hbar^2}, \quad (4.23)$$

4.1.2 Expansão de Sommerfeld

As temperaturas às quais os metais permanecem sólidos são baixas em comparação com típicas temperaturas Fermi, por isso faz sentido elaborar uma expansão a baixa temperatura para propriedades termodinâmicas. Esta expansão foi proposta por Sommerfeld [44], que fez uso da idéia de que a baixas temperaturas os elétrons são apenas ativos dentro de uma pequena faixa de energia $k_B T$ da energia de Fermi. Considerando o processo de adicionar calor a um metal, a medida que a temperatura sobe no metal, a energia média de elétrons aumenta. Este aumento só pode acontecer se elétrons fazem transições para estados de energia mais altos. Apenas bem nas proximidades da energia de Fermi existe tanto uma população de elétrons significativa quanto estados vagos de energia ligeiramente mais elevada para se mover. O número de estados de elétrons é proporcional à $D(E_F)$, e o número de estados que participam no calor específico é proporcional à T . O desenvolvimento formal desta ideia começa com um esquema de cálculo de médias de funções de Fermi [41–45]:

$$\langle H \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} d\epsilon H(\epsilon) F(\epsilon). \quad (4.24)$$

Integrando por partes e assumindo que o integrando é zero nos limites $\pm\infty$;

$$\langle H \rangle = \int_{-\infty}^{\mu} d\epsilon [d\epsilon' H(\epsilon')] \left[\frac{df}{d\mu} \right]. \quad (4.25)$$

Notando que $-\frac{\partial f}{\partial E} = \frac{\partial f}{\partial \mu}$. O passo crucial é $\frac{\partial f}{\partial \mu}$ aparecer dentro do integrando e expandindo o primeiro termo em colchetes em termos de $\epsilon = \mu$ para obter a série:

$$\langle H \rangle = \int_{-\infty}^{\mu} H(\epsilon) d\epsilon + \sum_{n=1}^{\infty} \left[\frac{d^{2n-1}}{d^{2n-1}\mu} \right] H(\mu) \int_{-\infty}^{\infty} \frac{(\epsilon - \mu)^{2n}}{2n!} \left[\frac{\partial f}{\partial \mu} \right], \quad (4.26)$$

$$\langle H \rangle = \int_{-\infty}^{\mu} H(\epsilon) d\epsilon + \sum_{n=1}^{\infty} a_n [k_B T]^{2n} \frac{d^{2n-1}}{d^{2n-1}\mu} H(\mu), \quad (4.27)$$

notando que ,

$$a_n = \int_{-\infty}^{\infty} dx \left[-\frac{\partial}{\partial x} \frac{1}{e^x + 1} \right] \frac{x^{2n}}{2n!} \quad (4.28)$$

$$= \frac{1}{(2n)!} \left(\frac{d}{db} \right)^{2n} \left[\frac{b\pi}{\text{Sen}b\pi} \right], \quad (4.29)$$

$$\langle H \rangle = \int_{-\infty}^{\mu} H(\epsilon) d\epsilon + \frac{\pi^2}{6} [k_B T]^2 H'(\mu) + \frac{7\pi^4}{360} [k_B T]^4 H''(\mu) \dots \quad (4.30)$$

A expressão (4.30) é chamada expansão de Sommerfeld [46]. Para o encontrar o calor específico, calcula se a energia média dos elétrons e, então, usa se a relação:

$$c_v = \frac{1}{V} \int d\epsilon' f(\epsilon') \epsilon' D(\epsilon'), \quad (4.31)$$

$$\frac{E}{V} = \int d\epsilon' f(\epsilon') D(\epsilon'), \quad (4.32)$$

$$= \int_0^{\infty} d\epsilon' \epsilon' D(\epsilon') + \frac{\pi^2}{6} (k_B T)^2 \frac{d(\mu(D(\mu)))}{d\mu}, \quad (4.33)$$

Para prosseguir, deve-se descobrir como o potencial químico μ se comporta como função da temperatura. Para isso, usa se a identidade:

$$\frac{d\mu}{dT} = \frac{\frac{dN}{dT}}{\frac{dN}{d\mu}}. \quad (4.34)$$

Pode se avaliar o lado direito da equação (4.34) utilizando se a equação (4.30) com $H(\epsilon) = D(\epsilon)$ e o número de elétrons N é:

$$N = V \int d\epsilon' f(\epsilon') D(\epsilon') = V \int_0^{\mu} d\epsilon' D(\epsilon') + V \cdot \frac{\pi^2}{6} (k_B T)^2 D'(\mu), \quad (4.35)$$

isto implica em:

$$\frac{d\mu}{dT} = -\frac{\pi^2}{3} k_B^2 T \frac{D'(\mu)}{D(\mu)} \quad (4.36)$$

Quando a temperatura $T = 0$, $\mu = E_F$ (energia de Fermi) ,

$$\mu = \epsilon_F - \frac{\pi^2}{3} (k_B T)^2 \frac{D'(\epsilon)}{D(\epsilon)}, \quad (4.37)$$

$$\frac{\varepsilon}{V} = \int_0^{\varepsilon_F} D(\varepsilon') \varepsilon' d\varepsilon' + \frac{\pi^2}{6} (k_B T)^2 D(\varepsilon_F) + \varepsilon_F \left\{ (\mu - \varepsilon_F) + \frac{\pi^2}{6} (k_B T)^2 D(\varepsilon_F) \right\}. \quad (4.38)$$

Portanto ,

$$\frac{\varepsilon}{V} = \int_0^{\varepsilon_F} d\varepsilon \cdot \varepsilon D(\varepsilon) + \frac{\pi^2}{6} (k_B T)^2 D(\varepsilon_F). \quad (4.39)$$

Podemos agora obter o calor específico eletrônico, que é a derivada da energia em relação a T e que pode ser calculado diretamente, retendo apenas os termos de menor ordem em T e fazendo $\mu = E_F$. Seja $U = \frac{\varepsilon}{V}$,

$$c_v = \frac{dU}{dT}, \quad (4.40)$$

$$\gamma = \frac{c_v}{T}, \quad (4.41)$$

portanto, a constante de Sommerfeld é

$$\gamma = \frac{\pi^2}{3} D(E_F) k_B^2. \quad (4.42)$$

A densidade de estados no nível de Fermi é portanto, relacionada à constante de Sommerfeld pela equação:

$$D(E_F) = \frac{3 \cdot \gamma}{\pi^2 k_B^2}. \quad (4.43)$$

A densidade de estados em 2 D relaciona o coeficiente de Sommerfeld à massa efetiva m^* dos portadores, como será demonstrado no Capítulo 6.

Capítulo 5

Duplas perovskitas

5.1 Sobre as duplas perovskitas.

As duplas perovskitas são compostos do tipo $A_2BB'O_6$ em que, A é um metal alcalino ou alcalino terroso e os sítios B e B' são metais de transição ou lantanídeos [47,48]. As propriedades físicas desses materiais têm sido bastante estudadas como a frustração de spin em sistemas com ordenamento antiferromagnético, interações ferromagnéticas e transições metal isolante.

O interesse na engenharia se dá devido à possibilidade de aplicações em células combustíveis [49], construção de sensores magneto resistivos em campos baixos e dispositivos de injeção de spin [50], além de outras aplicações [51, 52].

As duplas perovskitas ordenadas $A_2BB'O_6$ apresentam-se como uma estrutura modificada da perovskita (ABO_3), cuja estrutura ideal é cúbica e pertence ao grupo espacial $Pm\bar{3}m$. Nas duplas perovskitas os octaedros de BO_6 e $B'O_6$ formam um arranjo alternado dentro de duas redes cúbicas de face centrada (fcc), que se sobrepõem conforme ilustrado na figura 5.1.

Em 1961, foi publicado o primeiro trabalho sobre duplas perovskitas com comportamento ferromagnético acima da temperatura ambiente. Esse estudo foi realizado por J. Longo e R. Ward [53] que sintetizaram duplas perovskitas utilizando o elemento Rênio (A_2BReO_6). Esse composto apresentava no sítio B' um átomo de Rênio e com o sítio B sendo ocupado por outro

metal de transição. Para uma estrutura ideal de uma dupla perovskita assume-se uma simetria

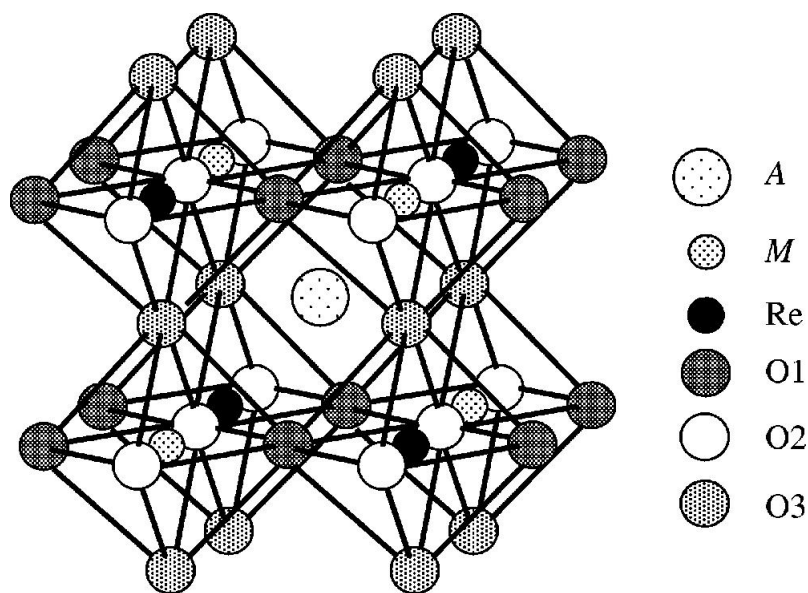


Figura 5.1 – Dupla perovskita típica A_2MReO_6 ($A=\text{Sr,Ca}$; $M=\text{Mg,Sc,Cr,Mn,Fe,Co,Ni,Zn}$).
Fonte:Referência [57]

cúbica, análoga ao caso da perovskita simples. Portanto, para a maioria dos casos a estrutura pode ser descrita como sendo cúbica e pertencente ao grupo espacial $Fm\bar{3}m$. Entretanto esta estrutura apresenta em geral distorções em função da temperatura ou do raio iônico do átomo que ocupa o sítio A ("tiltings"). Este efeito de desajuste entre os cátions A e B – B' induz rotações nos octaedros de modo a encontrar a estrutura energeticamente mais estável. A estrutura oriunda deste ajuste é descrita como pseudo-cúbica, uma vez que a simetria cúbica $Fm\bar{3}m$ perde algumas de suas operações (C_4 em torno do eixo a e σ_h com respeito ao plano 001). Com a distorção da estrutura, as operações de simetria restantes conduzem a uma indicação do grupo espacial $I4/m$ (tetragonal) ou $P2_1$ (ortorrômbica) [54]. Nesses casos os parâmetros a e b são aproximadamente iguais e o parâmetro c é diferente. Ou seja, os parâmetros de rede das células tetragonal (tetra) e pseudocúbica (ps) estão relacionados como segue:

$$c = c_{tetra} = c_s, \quad (5.1)$$

$$a = b = a_{tetra}. \quad (5.2)$$

No caso das duplas perovskitas magnéticas condutoras e metálicas com o parâmetro c maior do que os parâmetros a b , os octaedros podem ser modelados como planos de plasma metálicos, conforme mostra a Figura 5.2: Nesse contexto as duplas perovskitas constituem um exemplo

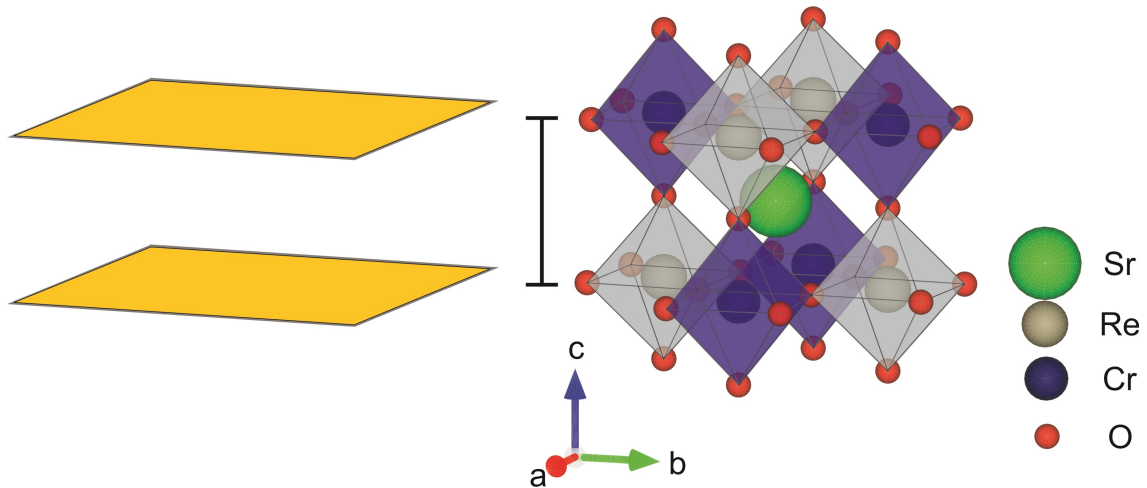


Figura 5.2 – Estrutura esquemática de uma dupla perovskita ferromagnética formada por planos de plasma metálicos.

concreto em que é possível aplicar o modelo de Bordag descrita nos capítulos anteriores conforme proposto também por Kempf [55]. Esses compostos apresentam uma fase ferromagnética FM e antiferromagnética AFM. Na fase ferromagnética o campo molecular age no mesmo sentido do campo magnético externo de forma a alinhar os momentos magnéticos elementares na direção desse campo e paralelo uns aos outros aumentando a susceptibilidade. A temperatura crítica na acima da qual o ordenamento magnético se desfaz em um ferromagneto T_c é chamada temperatura de Curie e em antiferromagneto é chamada temperatura de Neel T_N .

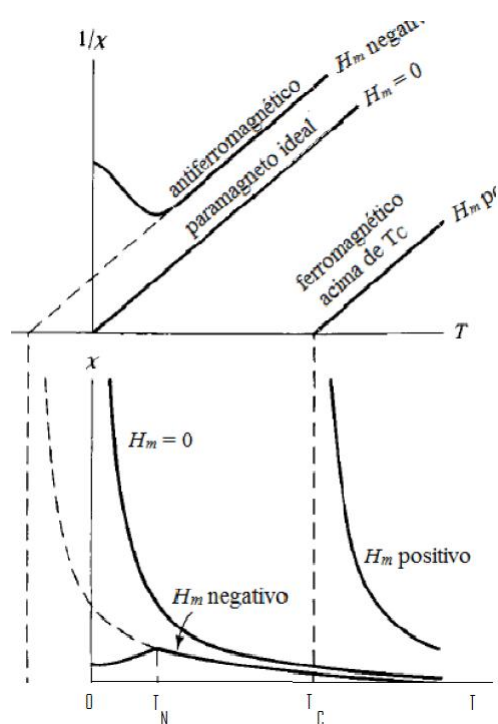


Figura 5.3 – Transições de fase levando se em conta uma constante de Curie fixa. T_c é a temperatura de transição para fase ferromagnética.

Capítulo 6

Correlação entre a teoria de Bordag e o estado magnético em duplas perovskitas magnéticas e metálicas

A energia de Casimir entre duas placas de plasma separadas por uma distância d , discutida na seção 3.2 de acordo com Bordag [20] é dada por

$$E_c = -5 \times 10^{-3} \frac{\hbar c A}{d^{\frac{5}{2}}} \sqrt{\Omega_p}, \quad (6.1)$$

onde $\Omega_p = \frac{\mu_0 n_{2D} q^2}{m^*}$. Reescrevendo a equação (3.155) obtém se a equação 6.2 :

$$E_c = -5 \times 10^{-3} \frac{\hbar c A}{d^{\frac{5}{2}}} \sqrt{\frac{\mu_0 n_{2D} q^2}{m^*}}. \quad (6.2)$$

Nossa proposta inédita é a equivalência entre a energia de Casimir calculada na equação (6.1) e a energia de transição para o ordenamento magnético isto é $E_C \equiv K_B T_{curie}$ isto é,

$$E_c = -5 \times 10^{-3} \frac{\hbar c A}{d^{\frac{5}{2}}} \sqrt{\frac{\mu_0 n_{2D} q^2}{m^*}}, = -D(E_F) \cdot (k_B)^2 T_c^2 \quad (6.3)$$

onde $D(E_F) = \frac{m^* \cdot A}{\pi \cdot \hbar^2}$ é a densidade de estados de Fermi para um gás em 2D, então,

$$-5 \times 10^{-3} \frac{\hbar c A}{d^{\frac{5}{2}}} \sqrt{\frac{\mu_0 n_{2D} q^2}{m^*}} = -\frac{m^* \cdot A}{\pi \cdot \hbar^2} \cdot k_B^2 T_c^2 \quad (6.4)$$

Levando em conta a relação entre a constante de Sommerfeld γ e a densidade de estados $D(E)$:

$$D(E_F) = \frac{3 \cdot \gamma}{\pi^2 k_B^2} \quad (6.5)$$

Assim é possível relacionar a densidade de estados $D(E_F)$ à constante de Sommerfeld pela expressão (6.6):

$$D(E_F) = \frac{m^* A}{\pi \cdot \hbar^2} = \frac{3 \cdot \gamma}{\pi^2 k_B^2} \quad (6.6)$$

$$m^* = \frac{3 \gamma \hbar^2}{k_B^2 \pi A} \quad (6.7)$$

e substituindo a equação (6.6) e (6.7) em (6.4) obtêm se:

$$E_{cas} = -5,01 \times 10^{-3} \frac{\hbar c A}{d^{\frac{5}{2}}} \sqrt{\frac{\mu_0 n_{2D} q^2}{m^*}} = -\frac{3 \gamma}{\pi^2 \cdot k_B^2} \cdot k_B^2 T_c^2, \quad (6.8)$$

$$E_{cas} = -5,01 \times 10^{-3} \frac{\hbar c A}{d^{\frac{5}{2}}} \sqrt{\frac{\mu_0 n_{2D} q^2 k_B^2 \pi A}{3 \gamma \hbar^2}} = -\frac{3 \gamma}{\pi^2 \cdot k_B^2} \cdot k_B^2 T_c^2 \quad (6.9)$$

6.1 Relação entre a temperatura de transição na dupla perovsquita e efeito Casimir

Considerando a estrutura da dupla perovsquita como uma estrutura composta por planos paralelos magnéticos metálicos conforme figura 5.2 e, utilizando a equação (6.8) e a equação (6.9) baseada na expansão de Sommerfeld e na teoria de Bordag 3.2 tomamos como referência um composto em que são conhecidos os parâmetros de rede a , b e c para amostras ferromagnéticas metálicas condutoras, com estrutura de dupla perovsquita temos:

$$E_{cas1} = -5,01 \times 10^{-3} \frac{\hbar c A_1}{d_1^{\frac{5}{2}}} \sqrt{\frac{\mu_0 n_{2D} q^2 k_B^2 \pi A_1}{3\gamma_1 \hbar^2}} = -\frac{3\gamma_1}{\pi^2} \cdot T_{c1}^2, \quad (6.10)$$

$$E_{cas2} = -5,01 \times 10^{-3} \frac{\hbar c A_2}{d_2^{\frac{5}{2}}} \sqrt{\frac{\mu_0 n_{2D} q^2 k_B^2 \pi A_2}{3\gamma_2 \hbar^2}} = -\frac{3\gamma_2}{\pi^2} \cdot T_{c2}^2, \quad (6.11)$$

dividindo a equação (6.10) por (6.11) obtêm se a fração da energia de casimir entre amostras compostas por planos magnéticos de plasma conforme equação (6.12):

$$\frac{E_{cas1}}{E_{cas2}} = \frac{-5,01 \times 10^{-3} \frac{\hbar c A_1}{d_1^{\frac{5}{2}}} \sqrt{\frac{\mu_0 n_{2D} q^2 k_B^2 \pi A_1}{3\gamma_1 \hbar^2}}}{-5,01 \times 10^{-3} \frac{\hbar c A_2}{d_2^{\frac{5}{2}}} \sqrt{\frac{\mu_0 n_{2D} q^2 k_B^2 \pi A_2}{3\gamma_2 \hbar^2}}}, \quad (6.12)$$

$$\frac{-5,01 \times 10^{-3} \frac{\hbar c A_1}{d_1^{\frac{5}{2}}} \sqrt{\frac{\mu_0 n_{2D} q^2 k_B^2 \pi A_1}{3\gamma_1 \hbar^2}}}{-5 \times 10^{-3} \frac{\hbar c A_2}{d_2^{\frac{5}{2}}} \sqrt{\frac{\mu_0 n_{2D} q^2 k_B^2 \pi A_2}{3\gamma_2 \hbar^2}}} = \frac{-\frac{3\gamma_1}{\pi^2} \cdot (T_{c1}^2)}{-\frac{3\gamma_2}{\pi^2} \cdot (T_{c2}^2)}, \quad (6.13)$$

considerando e, $n_{2D1} \approx n_{2D2}$,

$$\left(\frac{d_2}{d_1}\right)^{\frac{5}{2}} \left(\frac{A_1}{A_2}\right) \left(\frac{\gamma_2 A_1}{\gamma_1 A_2}\right)^{\frac{1}{2}} = \left(\frac{\gamma_1}{\gamma_2}\right) \left(\frac{T_{c1}}{T_{c2}}\right)^2 \quad (6.14)$$

isto é,

$$\left(\frac{d_2}{d_1}\right)^{\frac{5}{2}} \left(\frac{A_1}{A_2}\right)^{\frac{3}{2}} \left(\frac{\gamma_2}{\gamma_1}\right)^{\frac{3}{2}} = \left(\frac{T_{c1}}{T_{c2}}\right)^2 \quad (6.15)$$

e pode ser reescrita na expressão 6.16:

$$T_{c2} = T_{c1} \cdot \left(\frac{d_1}{d_2}\right)^{\frac{5}{4}} \cdot \left(\frac{A_2 \gamma_1}{A_1 \gamma_2}\right)^{\frac{3}{4}} \quad (6.16)$$

onde na equação (6.16), d_1 e d_2 são as distâncias entre os planos magnéticos metálicos com $c = d$ para as duplas perovsquitas, A_1 e A_2 são as áreas das placas e γ_1 e γ_2 são as constantes de Sommerfeld para as amostras e, T_{c1} é a temperatura de referência (padrão). Com base em nossa teoria, podemos calcular a temperatura de Curie de uma amostra condutora ferromagnética com estrutura de dupla perovsquita.

Tabela 6.1 – Temperaturas calculadas com base na fração da energia de Casimir tomando $T_c=400$ K do composto Sr_2FeReO_6 como referência

Composto	d (Å)	a (Å)	b (Å)	Area (Å ²)	γ $\left(\frac{mJ}{molK^2}\right)$	Tc (K)	T _{calc} (K)	ref.
Ba2FeReO6	8.0854	8.0854	8.0854	32.6868	23.1	315	336	[56]
Sr2FeReO6	7.9008	5.5613	5.5613	30.9279	18	400	400	[57]
Sr2FeMoO6	7.89960	5.57110	5.57110	31.0372	16	412	438	[58]
(Sr,La)FeMoO6	7.88000	5.63000	5.63000	31.6969	14	475	494	[59]
Sr2 CrReO6	7.80912	5.52718	5.52718	30.5497	10	635	625	[57]

A tabela 6.1 demonstra a consistência de nossa proposta com os valores encontrados experimentalmente para T_c . Portanto, com nossa proposta estipulamos o cálculo para γ (parâmetro de Sommerfeld) a partir da temperatura de Curie e do coeficiente de Sommerfeld de um composto referência (Sr_2FeReO_6) encontrado na literatura no domínio de validade da proposta.

$$\gamma_2 = \gamma_1 \left[\left(\frac{T_{c1}}{T_{c2}} \right)^2 \cdot \left(\frac{d_1}{d_2} \right)^5 \right]^{\frac{1}{3}} \cdot \left(\frac{A_2}{A_1} \right) \quad (6.17)$$

Tabela 6.2 – Cálculo do coeficiente de Sommerfeld com base em uma amostra padrão $T_C = 400K$, Área= a.b

Composto	d (Å)	Area (Å ²)	Tc (K)	γ $\left(\frac{mJ}{molK^2}\right)$	$\gamma_{(Calc)}$ $\left(\frac{mJ}{molK^2}\right)$	α	Ref
Ba2FeReO6	8.0854	32.6868	315	23.1	22.4	7.0	[56]
(Sr1.9,La0.1)FeMoO6	7.90870	31.0405	395	15	18.2	6.0	[58]
(Sr1.95,Eu0.05)FeMoO6	7.8976	31.0639	397		18.3	6.0	[60]
(Sr1.8,La0.2)FeMoO6	7.90710	31.0572	398	15	18.1	5.9	[58]
Sr2FeMoO6	7.89960	31.0372	400	15	18.1	5.9	[58]
Sr2FeReO6	7.9008	30.9279	400	18	18.0	5.9	[57]
(Sr1.7,La0.3)FeMoO6	7.90780	31.0817	400	15	18.1	5.9	[58]
(Sr1.9,Eu0.1)FeMoO6	7.8853	31.0890	408		17.9	5.8	[60]
(Sr1.75,Eu0.25)FeMoO6	7.8819	31.0622	410		17.8	5.8	[60]
Sr2FeMoO6	7.8986	31.0751	412		17.4	5.7	[60]
(Sr1.8,Eu0.2)FeMoO6	7.8826	31.0677	414		17.5	5.7	[60]
(Sr1.7,Eu0.3)FeMoO6	7.8822	31.0645	416		17.0	5.7	[60]
(Sr1.85,Eu0.15)FeMoO6	7.8834	31.0740	416		17.4	5.7	[60]
Sr2FeMoO6	7.88	30.8025	426		16.8	5.5	[59]
(Sr1.5,La0.5)FeMoO6	7.88	31.4721	462		15.4	5.0	[59]
(Sr,La)FeMoO6	7.88	31.6969	475		14.9	4.8	[59]
Sr2 CrReO6	7.80912	30.5497	635	10	10.4	3.4	[57]

6.1.1 Verificação experimental

Por conta da nossa proposta propomos a confecção de uma amostra com previsibilidade de aumento da temperatura T_C com a dopagem. Essa amostra foi $(Sr_{1.8}, Y_{0.2})CrReO_6$ conforme tabela 6.3:

Tabela 6.3 – Temperaturas calculadas com base na fração da energia de Casimir tomando T_c (referencia) = 400 K

Composto	Simetria	d(Angstroms)	γ (mJ/mol.K ²)	T_c (K)	T_c (K)(calc)	referencia
Sr ₂ CrReO ₆	I4/mmm	7,80912	10	635	629	[57]
Sr _{1.8} Y _{0.2} CrReO ₆	I4/mmm	7,8117	10	635	635	[61]

Nossa proposta de dopar o composto com Itrio (Y) visava aumentar o número de portadores no plano $ReO_6 - FeO_6$. Isso ocorreria devido a troca de $Sr^{+2} \rightarrow Y^{+3}$, liberando um portador de carga por fórmula unitária. Isso deveria diminuir γ . Porém, notamos que a substituição parcial aumentou a distância "d" entre as placas, o que neutralizou o aumento de T_c .

O resultado obtido foi publicado sem correlacionarmos a teoria de Casimir com a proposta de Bordag.

Capítulo 7

Discussão e Conclusão

Nossa conclusão, baseada na teoria de Casimir [1] utilizando o modelo de Bordag [20] é que existe uma equivalência entre a energia de Casimir e a energia térmica na transição ferromagnética em duplas perovskitas metálicas condutoras. Considerando este cenário, entendemos que a mediação é feita pelos planos de ReO_2 e FeO_2 , que podem ser modelados como folhas finas de plasma. Nossa proposta de equivalência está em bom acordo com os valores experimentais reportados na literatura, conforme verificado na Tabela 6.1. Concluimos também que a temperatura de Curie está relacionada a mobilidade dos portadores de carga através do parâmetro de Sommerfeld γ tendo em vista a equação (6.16) e a equação (4.42):

$$m^* = \frac{3 \cdot \gamma \cdot \hbar^2}{\pi \cdot A \cdot k_B^2}. \quad (7.1)$$

o que implica que um aumento da massa efetiva dos portadores $m^* = \alpha \cdot m_e$ leva a um aumento do coeficiente de Sommerfeld com isso, a temperatura diminui já que $\gamma \propto 1/T$. Se $m^* = \alpha \cdot m_e$ diminui, γ diminui e levando em conta que $\gamma \propto 1/T$ a temperatura aumenta como pode ser verificado na Tabela 6.2.

Verificamos que não houve alteração da temperatura crítica de Curie T_C por conta da dopagem com Itrio e concluimos que a dopagem com esse ligante aumentou a distância entre os planos e não alterou a opacidade representada por γ isto é, a dopagem com Itrio não alterou o caráter metálico. Sugerimos que para um aumento da temperatura, a distância entre os planos possa ser alterada por meio de pressão hidrostática e feita a dopagem de um ligante que aumente o

caráter metálico isto é diminua o coeficiente de Sommerfeld γ . Nossa previsão é de que essas alterações feitas simultaneamente aumentem a temperatura de Curie.

Apêndice A

Formalismo de Lagrange e Hamilton

A.1 Vínculos

Vínculos são restrições de natureza geométrica ou cinemática ao movimento das partículas, essas restrições são restrições às posições ou velocidades das partículas. Se as restrições sobre o movimento têm origem dinâmica, então isso **não caracteriza um vínculo** pois, essas restrições dependem das condições iniciais que a partícula ou sistema de partículas estão sujeitos. Generalizando, se q_1, q_2, \dots, q_n são coordenadas não especificadas isto é, generalizadas, para descrever um sistema mecânico e os vínculos são todos da forma explicitada na equação (A.1):

$$F(q_1, \dots, q_n, t) = 0, \quad (\text{A.1})$$

então, os vínculos são holônomos. Vínculos que dependem das coordenadas generalizadas, velocidades generalizadas e do tempo são vínculos não holônomos explicitados pela equação (A.2):

$$g(q_1, \dots, q_n, \dot{q}_1, \dots, \dot{q}_n, t) = 0. \quad (\text{A.2})$$

- **EXEMPLO:** Cilindro de raio R rolando sem deslizar em um plano

$$\dot{x} - R\dot{\theta} = 0. \quad (\text{A.3})$$

A.2 Princípio D'Alembert

Um deslocamento virtual $\delta \vec{r}_i$ é um deslocamento infinitesimal do sistema físico compatível com os vínculos do sistema. Nesses deslocamentos, o tempo é considerado fixo ou seja, esses deslocamentos não necessariamente estão associados ao movimento conforme demonstrado na figura (A.1):

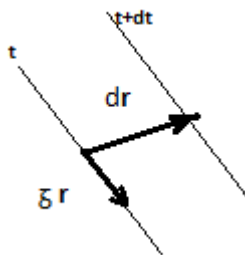


Figura A.1 – Deslocamento virtual feito a tempo fixo (t) e deslocamento real feito a tempo (t+dt)

Considerando vínculos ideais sendo \vec{f}_i a força de vínculo:

$$\sum_i \vec{f}_i \cdot \delta \vec{r}_i = 0. \quad (\text{A.4})$$

Com base nas equações newtonianas do movimento, sendo $\vec{F}_i^{(a)}$ a força resultante sobre cada partícula é conforme a expressão (A.5):

$$\dot{\vec{p}}_i = m \cdot \ddot{\vec{r}} = \vec{F}_i^{(a)} + \vec{f}_i \quad (\text{A.5})$$

Essas forças são responsáveis por manter o vínculo com o sistema. O produto escalar da equação (A.5) pelo deslocamento virtual $\delta \vec{r}_i$ é o trabalho virtual (resultante) das forças que mantêm o vínculo do sistema isto é: \vec{f}_i (força de vínculo) e $\vec{F}_i^{(a)}$ (força aplicada) mas, a derivada temporal do momento linear \vec{p}_i é igual a força resultante e, a equação (A.5) se torna:

$$\sum_i \left(\vec{F}_i^{(a)} - \dot{\vec{p}} \right) \delta \vec{r}_i = \sum_i \vec{f}_i \cdot \delta \vec{r}_i. \quad (\text{A.6})$$

Se os vínculos são ideais isto é, o trabalho das forças de vínculo é zero,

$$\sum_i \vec{f}_i \cdot \delta \vec{r}_i = 0. \quad (\text{A.7})$$

Com base na condição de que os vínculos sejam ideais, o lado direito da igualdade na equação (A.6) é nulo:

$$\sum_i \left(\vec{F}_i^{(a)} - \dot{\vec{p}}_i \right) \delta \vec{r}_i = 0 \quad (\text{A.8})$$

Considerando que apenas a força aplicada exerce trabalho sobre o sistema, suprimindo o índice (a) na equação (A.8) e explicitando na equação (A.9) tem se

$$\sum_i \left(F_i - \dot{P}_i \right) \delta r_i = 0. \quad (\text{A.9})$$

A equação A.9 é o **princípio de D’ALEMBET**.

A.3 Dedução das equações de Lagrange

Considerando que os deslocamentos dependem das coordenadas generalizadas que são independentes entre si, e que os deslocamentos dependem também do tempo explicitando \vec{r}_i na equação (A.10):

$$\vec{r}_i = \vec{r}_i(q_1, q_2, \dots, q_n, t). \quad (\text{A.10})$$

Conectando δr_i com δq_i :

$$\delta \vec{r}_i = \sum_{\alpha} \frac{\partial r_i}{\partial q_{\alpha}} \delta q_{\alpha} \quad (\text{A.11})$$

A expressão para as velocidades generalizadas é encontrada através da derivada total do deslocamento em relação ao tempo conforme demonstrado na equação (A.12):

$$\vec{v}_i = \frac{d\vec{r}_i}{dt} \equiv \sum_{\alpha} \frac{\partial r_i}{\partial q_{\alpha}} \dot{q}_{\alpha} + \frac{\partial r_i}{\partial t}. \quad (\text{A.12})$$

O **princípio de D’ALEMBERT** explicitado na equação (A.9) escrito com $\vec{p}_i = m_i \cdot \vec{v}_i$ na equação (A.13):

$$\sum_i (m_i \cdot \vec{v}_i - \vec{F}_i) \cdot \delta \vec{r}_i = 0, \quad (\text{A.13})$$

onde a inversão do sinal no primeiro membro da igualdade na equação (A.13) em comparação com a equação A.9 pode ser feito uma vez que o segundo membro da igualdade na (A.13) é zero.

Levando em conta que o deslocamento ocorre a tempo fixo (deslocamento virtual):

$$\sum_i \sum_{\alpha} m_i \cdot \vec{v}_i \cdot \frac{\partial r_i}{\partial q_{\alpha}} \delta q_{\alpha} = \sum_i \sum_{\alpha} \vec{F}_i \cdot \frac{\partial r_i}{\partial q_{\alpha}} \delta q_{\alpha}. \quad (\text{A.14})$$

A componente Q_{α} é a α – esima componente da força generalizada identificada pela soma sobre α no segundo membro da equação (A.14):

$$Q_{\alpha} = \sum_i \vec{F}_i^{(a)} \cdot \frac{\partial r_i}{\partial q_{\alpha}}. \quad (\text{A.15})$$

Retomando a equação (A.14):

$$\sum_i \sum_\alpha m_i \cdot \vec{v}_i \cdot \frac{\partial r_i}{\partial q_\alpha} \delta q_\alpha = \sum_\alpha Q_\alpha \delta q_\alpha. \quad (\text{A.16})$$

Notando que o primeiro termo da equação (A.14) pode ser:

$$\sum_i \sum_\alpha m_i \cdot \vec{v}_i \cdot \frac{\partial r_i}{\partial q_\alpha} = \sum_i \sum_\alpha \frac{d}{dt} \left(m_i v_i \frac{\partial r_i}{\partial q_\alpha} \right) - \sum_i \sum_\alpha m_i \cdot \vec{v}_i \cdot \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial r_i}{\partial q_\alpha} \right). \quad (\text{A.17})$$

Com base na expressão para as velocidades generalizadas (A.12) expressa novamente na equação (A.18):

$$\vec{v}_i = \frac{d\vec{r}_i}{dt} \equiv \sum_\alpha \frac{\partial r_i}{\partial q_\alpha} \dot{q}_\alpha + \frac{\partial r_i}{\partial t}, \quad (\text{A.18})$$

Diferenciando essa expressão em relação a \dot{q}_α :

$$\frac{\partial v_i}{\partial \dot{q}_\alpha} = \frac{\partial r_i}{\partial q_\alpha}, \quad (\text{A.19})$$

pela regra da cadeia, $\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial r_i}{\partial q_\alpha} \right)$ aplicada ao segundo membro da equação A.19 pode ser calculada como demonstrado na equação A.20 :

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial r_i}{\partial q_\alpha} \right) = \sum_l \frac{\partial}{\partial q_l} \left(\frac{\partial r_i}{\partial q_\alpha} \right) \dot{q}_l + \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\partial r_i}{\partial q_\alpha} \right) \quad (\text{A.20})$$

Como $\vec{r}_i(q_1, \dots, q_n, t)$ é diferenciável um número n de vezes, em particular com derivadas contínuas, a ordem da diferenciação é irrelevante e trocando a ordem das derivadas :

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial r_i}{\partial q_\alpha} \right) = \sum_l \frac{\partial}{\partial q_\alpha} \left(\frac{\partial r_i}{\partial q_l} \right) \dot{q}_l + \frac{\partial}{\partial q_\alpha} \left(\frac{\partial r_i}{\partial t} \right) \quad (\text{A.21})$$

:

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial \vec{r}_i}{\partial q_\alpha} \right) = \frac{\partial}{\partial q_\alpha} \sum_l \frac{\partial \vec{r}_i}{\partial q_l} \dot{q}_l + \frac{\partial \vec{r}_i}{\partial t} \quad (\text{A.22})$$

E,utilizando a expressão para a velocidade A.12 conclui se que :

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial \vec{r}_i}{\partial q_\alpha} \right) = \frac{\partial v_i}{\partial q_\alpha} \quad (\text{A.23})$$

Substituindo A.19 e A.23 em A.17:

$$\sum_i \sum_\alpha m_i \vec{v}_i \cdot \frac{\partial \vec{r}_i}{\partial q_\alpha} = \sum_i \sum_\alpha \frac{d}{dt} \left(m_i \vec{v}_i \cdot \frac{\partial \vec{v}_i}{\partial \dot{q}_\alpha} \right) - \sum_i \sum_\alpha m_i \vec{v}_i \cdot \frac{\partial \vec{v}_i}{\partial q_\alpha} \quad (\text{A.24})$$

e retomando a equação A.16:

$$\sum_\alpha \left[\sum_i \frac{d}{dt} \frac{\partial}{\partial \dot{q}_\alpha} \left(\frac{m_i v_i^2}{2} \right) - \sum_i \frac{\partial}{\partial q_\alpha} \left(\frac{m_i v_i^2}{2} \right) \right] = \sum_\alpha Q_\alpha \delta q_\alpha \quad (\text{A.25})$$

Como a derivada da soma é a soma das derivadas :

$$\sum_\alpha \left[\frac{d}{dt} \frac{\partial}{\partial \dot{q}_\alpha} \sum_i \left(\frac{m_i v_i^2}{2} \right) - \frac{\partial}{\partial q_\alpha} \sum_i \left(\frac{m_i v_i^2}{2} \right) \right] - \sum_\alpha Q_\alpha \delta q_\alpha = 0 \quad (\text{A.26})$$

A energia cinética T é identificada em A.27 como:

$$T = \sum_B \frac{m_i v_i^2}{2} = T(q, \dot{q}, t) \quad (\text{A.27})$$

E identificando T na equação A.26:

$$\sum_\alpha \left[\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial T}{\partial \dot{q}_\alpha} \right) - \frac{\partial T}{\partial q_\alpha} - Q_\alpha \right] \delta q_\alpha = 0 \quad (\text{A.28})$$

Para δq_α arbitrário:

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial T}{\partial \dot{q}_\alpha} \right) - \frac{\partial T}{\partial q_\alpha} = Q_\alpha \quad (\text{A.29})$$

Se as forças aplicadas são conservativas ou seja :

$$\vec{F}_i = -\vec{\nabla} V_i \quad (\text{A.30})$$

$$Q_\alpha = \sum_i F_i \cdot \frac{\partial r_i}{\partial q_\alpha} = -\frac{\partial V}{\partial q_\alpha} \quad (\text{A.31})$$

E explicitando [A.31](#) em [A.29](#):

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial T}{\partial \dot{q}_\alpha} \right) - \frac{\partial T}{\partial q_\alpha} = -\frac{\partial V}{\partial q_\alpha} \quad (\text{A.32})$$

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial T}{\partial \dot{q}} \right) - \frac{\partial T}{\partial q_\alpha} + \frac{\partial V}{\partial q_\alpha} = 0 \quad (\text{A.33})$$

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial T}{\partial \dot{q}} \right) - \left(\frac{\partial T - V}{\partial q_\alpha} \right) = 0 \quad (\text{A.34})$$

V é independente das velocidades generalizadas e depende somente das coordenadas generalizadas

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial (T - V)}{\partial \dot{q}_\alpha} - \frac{\partial (T - V)}{\partial q_\alpha} = 0 \quad (\text{A.35})$$

Identificando a função lagrangeana:

$$L = T - V \quad (\text{A.36})$$

E substituindo a lagrangeana na equação A.35:

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_\alpha} \right) - \frac{\partial L}{\partial q_\alpha} = 0 \quad (\text{A.37})$$

As equações A.37 são as equações de **Lagrange** para $\alpha = 1, 2, \dots, N$ e portanto a lagrangeana é função de coordenadas generalizadas, velocidades generalizadas e do tempo:

$$L = L(q, \dot{q}, t) \quad (\text{A.38})$$

A.4 Equações de Hamilton

As variáveis no formalismo lagrangiano são as coordenadas generalizadas q , as velocidades generalizadas \dot{q} e o tempo t . No formalismo hamiltoniano, as coordenadas generalizadas e momentos generalizados são utilizadas como variáveis independentes:

$$H \equiv H(q, p, t), \quad (\text{A.39})$$

H pode ser construído matematicamente com base em uma transformação de Legendre. Nesse contexto, a função Hamiltoniana consiste na troca das velocidades generalizadas pelos momentos canônicos como variáveis básicas, utilizando-se a lagrangiana. Notando que $L(q, \dot{q}, t)$ e diferenciando em relação ao tempo :

$$\frac{dL}{dt} = \sum_i \frac{\partial L}{\partial q_i} \dot{q}_i + \sum_i \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \ddot{q}_i, \quad (\text{A.40})$$

$$\frac{dL}{dt} = \frac{d}{dt} \sum_i \left(\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \right) \dot{q}_i + \sum_i \frac{\partial L}{\partial q_i} \dot{q}_i, \quad (\text{A.41})$$

Logo, integrando a equação (A.41):

$$\frac{dL}{dt} = \sum_i \frac{d}{dt} \left(\dot{q}_i \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \right), \quad (\text{A.42})$$

$$\frac{dL}{dt} - \sum_i \frac{d}{dt} \left(\dot{q}_i \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \right) = 0, \quad (\text{A.43})$$

$$\frac{d}{dt} \left(L - \sum_i \left(\dot{q}_i \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \right) \right) = 0. \quad (\text{A.44})$$

A expressão entre parênteses na equação (A.44), obtida através de uma transformação de Legendre análoga a (A.41) é a função hamiltoniana, isto é,

$$H = \sum_i \dot{q}_i \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} - L. \quad (\text{A.45})$$

Reconhecendo o primeiro termo da (A.45) isto é, a derivada da lagrangiana com relação a velocidade generalizada \dot{q}_i como o momento generalizado p_i através das equações (A.29) e (A.37):

$$H = \sum_i p_i \dot{q}_i - L. \quad (\text{A.46})$$

A diferencial total da (A.46) é explicitada em (A.47) e (A.49):

$$dH = p_i \cdot dq_i + \dot{q}_i dp_i - dL, \quad (\text{A.47})$$

A diferencial total da lagrangiana é:

$$dL = \frac{\partial L}{\partial q}dq + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}}d\dot{q} + \frac{\partial L}{\partial t}dt. \quad (\text{A.48})$$

Substituindo a diferencial total da lagrangeana em A.47:

$$dH = \dot{q}_i dp_i + p_i d\dot{q}_i - \dot{p}_i dq_i - p_i d\dot{q}_i - \frac{\partial L}{\partial t}dt, \quad (\text{A.49})$$

$$dH = \dot{q}_i dp_i - \dot{p}_i dq_i - \frac{\partial L}{\partial t}dt. \quad (\text{A.50})$$

Considerando que a função hamiltoniana $H(q,p,t)$:

$$dH = \frac{\partial H}{\partial q_i}dq_i + \frac{\partial H}{\partial p_i}dp_i + \frac{\partial H}{\partial t}dt. \quad (\text{A.51})$$

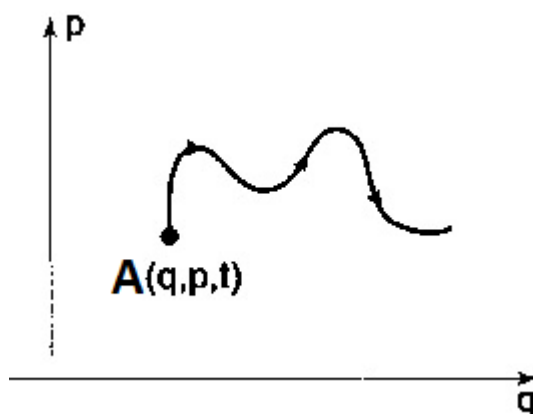
Comparando as equações (A.51) e (A.50):

$$\dot{q}_i = \frac{\partial H}{\partial p_i}, \quad (\text{A.52})$$

$$\dot{p}_i = -\frac{\partial H}{\partial q_i}, \quad (\text{A.53})$$

$$\frac{\partial H}{\partial t} = -\frac{\partial L}{\partial t}. \quad (\text{A.54})$$

As equações (A.52), (A.53) e (A.54) são conhecidas como equações canônicas de Hamilton. Dadas as condições iniciais do sistema, essas equações apresentam solução única com cada par (q,p) representando um ponto no espaço de fase:



A.5 Parênteses de Poisson

Seja $\rho \equiv \rho(q,p,t)$, tomando a derivada total da função $\rho(q,p,t)$ em relação ao tempo, obtemos a evolução temporal do sistema conforme (A.55) :

$$\frac{d\rho}{dt} = \sum_i \left(\frac{\partial \rho}{\partial q_i} \dot{q}_i + \frac{\partial \rho}{\partial p_i} \dot{p}_i \right) + \frac{\partial \rho}{\partial t}, \quad (\text{A.55})$$

Portanto a derivada temporal da (A.55) levando em conta as equações canônicas de hamilton em (A.52) e (A.53) é :

$$\frac{d\rho}{dt} = \sum_i \left(\frac{\partial \rho}{\partial q_i} \frac{\partial H}{\partial p_i} - \frac{\partial \rho}{\partial p_i} \frac{\partial H}{\partial q_i} \right) + \frac{\partial \rho}{\partial t}. \quad (\text{A.56})$$

O primeiro termo do lado direito da igualdade em (A.56) é conhecido como **parênteses de Poisson** :

$$\{\rho, H\} = \sum_i \left(\frac{\partial \rho}{\partial q_i} \frac{\partial H}{\partial p_i} - \frac{\partial \rho}{\partial p_i} \frac{\partial H}{\partial q_i} \right) \quad (\text{A.57})$$

Sendo assim, a evolução temporal do sistema em termos da definição (A.57) é:

$$\frac{d\rho}{dt} = \{\rho, H\} + \frac{\partial \rho}{\partial t} \quad (\text{A.58})$$

Se ρ não é uma função explícita do tempo,

$$\frac{d\rho}{dt} = 0. \quad (\text{A.59})$$

Com base na equação (A.59):

$$\{\rho, H\} = \dot{\rho}. \quad (\text{A.60})$$

Analogamente, se \dot{q} e \dot{p} não dependem explicitamente do tempo :

$$\dot{q} = \{q, H\}, \quad (\text{A.61})$$

$$\dot{p} = \{p, H\}. \quad (\text{A.62})$$

Apêndice B

Campo Eletromagnético

B.1 Equações de Maxwell

As equações de Maxwell são um grupo de equações diferenciais parciais que, juntamente com a lei da força de Lorentz, compõe a base do eletromagnetismo clássico. Conceitualmente, as equações de Maxwell descrevem como cargas elétricas e correntes elétricas agem como fontes dos campos elétrico e magnético. Além deste aspecto, as equações de Maxwell descrevem como um campo elétrico que varia no tempo gera um campo magnético que também varia no tempo [36, 62, 63]. Das quatro equações, duas delas, a lei de Gauss e a lei de Gauss para o magnetismo, descrevem como os campos são gerados a partir de cargas. Para o campo magnético, como não há carga magnética, as linhas de campo magnético não começam nem terminam, ou seja, as linhas são como trajetórias fechadas. As outras duas equações descrevem como os campos "circulam" em torno de suas respectivas fontes: o campo magnético "circula" em torno de correntes elétricas e de campos elétricos variantes com o decorrer do tempo, conforme a lei de Ampère com a correção do próprio Maxwell; campos elétricos "circulam" em torno dos campos magnéticos que variam com o tempo, conforme a lei de Faraday. Explicitamente [62, 63]:

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{E} = \frac{\rho}{\epsilon_0}, \quad (\text{B.1})$$

$$\vec{\nabla} \times \vec{E} = -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t}, \quad (\text{B.2})$$

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{B} = 0, \quad (\text{B.3})$$

$$\vec{\nabla} \times \vec{B} = \mu_0 \epsilon \frac{\partial \vec{E}}{\partial t} + \mu_0 \vec{J}. \quad (\text{B.4})$$

As equações de Maxwell descrevem como carga e corrente geram campos elétrico e magnético. Essas equações são suplementadas pela equação de continuidade, isto é formalmente, a carga em um volume v é dada por:

$$Q = \int_v \rho(\vec{r}, t) dv \quad (\text{B.5})$$

e diferenciando a equação (B.5) com relação ao tempo, a corrente que flui através de uma superfície S , $\oint_s \vec{J} \cdot \vec{n} da$,

$$\frac{dQ}{dt} = - \oint_s \vec{J} \cdot \vec{n} da. \quad (\text{B.6})$$

Seja $\rho(\vec{r}, t)$ a densidade de carga em um volume v :

$$\oint_s \vec{J} \cdot \vec{n} da = - \frac{d}{dt} \int_v \rho dv, \quad (\text{B.7})$$

$$\oint_s \vec{J} \cdot \vec{n} da = - \int_v \frac{\partial \rho}{\partial t} dv, \quad (\text{B.8})$$

e utilizando o teorema da divergência:

$$\oint_s \vec{J} \cdot \vec{n} da = \int_v (\vec{\nabla} \cdot \vec{J}) dv. \quad (\text{B.9})$$

Notando pelas equações (B.8) e (B.9) que:

$$- \int_v \frac{\partial \rho}{\partial t} dv = \int_v (\vec{\nabla} \cdot \vec{J}) dv, \quad (\text{B.10})$$

$$\int_v \left(\vec{\nabla} \cdot \vec{J} + \frac{\partial \rho}{\partial t} \right) dv = 0. \quad (\text{B.11})$$

A equação (B.12) é a equação de continuidade e, leva ao princípio da conservação de carga:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot \vec{J} = 0. \quad (\text{B.12})$$

Nota se que os campos \vec{E} e \vec{B} derivam de potenciais escalares $\phi(x,t)$ e vetoriais $\vec{A}(\vec{x},t)$:

$$\vec{\nabla} \times \vec{E} = -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t}, \quad (\text{B.13})$$

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

e, utilizando a equação (B.4) com o potencial vetor \vec{A} ,

$$\vec{\nabla} \times \left(\vec{\nabla} \times \vec{A} \right) = \mu_0 \vec{J} + \mu_0 \epsilon_0 \frac{\partial \vec{E}}{\partial t}, \quad (\text{B.15})$$

$$\vec{\nabla} \times \vec{\nabla} \times \vec{A} = \vec{\nabla}(\vec{\nabla} \cdot \vec{A}) - \nabla^2 \vec{A}, \quad (\text{B.16})$$

$$\vec{\nabla}(\vec{\nabla} \cdot \vec{A}) - \nabla^2 \vec{A} = \mu_0 \cdot \epsilon_0 \cdot \frac{\partial}{\partial t} \left(-\vec{\nabla} \Phi - \frac{\partial \vec{A}}{\partial t} \right). \quad (\text{B.17})$$

Nesse ponto, existe uma infinidade de pares (Φ, \vec{A}) que geram (\vec{E}, \vec{B}) impondo as seguintes restrições:

1. Gauge de Coulomb:

Nesse gauge, $\vec{\nabla} \cdot \vec{A} = 0$ que implica nas equações para os potenciais ϕ e \vec{A} , são

$$\nabla^2 \phi = -\frac{\rho}{\epsilon_0}, \quad (\text{B.18})$$

$$\nabla^2 \vec{A} = \mu_0 \epsilon_0 \frac{\partial^2 \vec{A}}{\partial t^2} - \mu_0 \vec{J} + \mu_0 \epsilon_0 \vec{\nabla} \left(\frac{d\phi}{dt} \right), \quad (\text{B.19})$$

onde $\rho = 0$ e $\vec{J} = 0$.

2. gauge de Lorentz:

Nesse gauge, $\vec{\nabla} \cdot \vec{A} = -\mu_0 \epsilon_0 \frac{d\phi}{dt}$ e as equações para os potenciais escalar ϕ e vetor \vec{A} são:

$$\nabla^2 \phi = \mu_0 \epsilon_0 \frac{\partial^2 \phi}{\partial t^2} - \mu_0 \epsilon_0 \frac{d\phi}{dt}, \quad (\text{B.20})$$

$$\nabla^2 \vec{A} = \mu_0 \epsilon_0 \frac{\partial^2 \vec{A}}{\partial t^2} - \mu_0 \vec{J}. \quad (\text{B.21})$$

Tomando outros potenciais (ϕ', \vec{A}') relacionados a (ϕ, \vec{A}) :

$$\phi' \longrightarrow \phi - \frac{\partial \Lambda}{\partial t} \quad (\text{B.22})$$

$$\vec{A}' \longrightarrow \vec{A} - \vec{\nabla} \Lambda \quad (\text{B.23})$$

$\Lambda(\vec{x}, t)$ é uma função escalar qualquer que também satisfaz o calibre de Lorentz, esta mudança para novos potenciais é denominada transformação de Padrão ou Liberdade de Calibre do Eletromagnetismo [34, 62, 63]

B.1.1 Formulação Covariante do Eletromagnetismo

Espaço de Minkowski

Considerando a transformação de Lorentz na forma geral, que apenas realiza transformações no espaço tempo obtêm se transformações de Lorentz inhomogêneas que, são chamadas também de transformações do grupo de Poincaré [36]. então o vetor 4 dimensional é escrito na forma

covariante x_μ , $\mu = 0,1,2,3$.

$$x_0 = ct, x_1 = -x, x_2 = -y, x_3 = -z$$

$$ds^2 = dx_0^2 - \sum_{i=1}^3 (dx_i)^2 \equiv g_{\mu\nu} dx^\mu dx^\nu \quad (\text{B.24})$$

A matriz g define uma métrica no espaço de Minkowski e seus elementos $g_{\mu\nu}$ são chamados de componentes do tensor métrico $g_{\mu\nu}$:

$$g = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \equiv g^{\mu\nu} \quad (\text{B.25})$$

por outro lado, a matriz unitária é definida por:

$$\hat{1} = \delta_\mu^\rho \equiv g_\mu^\rho, \quad (\text{B.26})$$

$$\delta_\mu^\rho g_{\rho\nu} \equiv g_{\mu\nu}, \quad (\text{B.27})$$

$$g_{\mu\nu} g^{\nu\rho} = \delta_\mu^\rho. \quad (\text{B.28})$$

O 4 vetor contravariante x^μ é então:

$$x^\mu = g^{\mu\nu} x_\nu, \quad (\text{B.29})$$

$$dx^\mu = g^{\mu\nu} dx_\nu. \quad (\text{B.30})$$

De outra forma:

$$dx^\mu = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} dx_0 \\ -dx_1 \\ -dx_2 \\ -dx_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} dx_0 \\ dx_i \end{pmatrix}, \quad (\text{B.31})$$

$$dx_\mu dx^\mu = \begin{pmatrix} dx_0, & -dx_i \end{pmatrix} \begin{pmatrix} dx_0 \\ dx_i \end{pmatrix} = ds^2. \quad (\text{B.32})$$

A quantidade a direita de (B.32) (ds^2) somada sobre todos os índices, é um invariante de Lorentz. As derivadas contravariante e covariante são respectivamente:

$$\partial^\mu = \left(\frac{\partial}{\partial x_\mu} \right) = \left(\frac{\partial}{\partial x_0}, -\vec{\nabla} \right), \quad (\text{B.33})$$

$$\partial_\mu = \left(\frac{\partial}{\partial x^\mu} \right) = \left(\frac{\partial}{\partial x^0}, \vec{\nabla} \right). \quad (\text{B.34})$$

Com essas definições obtêm se:

$$\partial^\mu \partial_\mu = \frac{\partial}{\partial x_0^2} - \nabla^2 \equiv -\square^2. \quad (\text{B.35})$$

Construção do Tensor $F_{\mu\nu}$

Com base na equação da continuidade definindo o quadri vetor densidade de corrente $J^\mu = (\rho, c, \vec{J})$:

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{J} + \frac{\partial \rho}{\partial t} = 0, \quad (\text{B.36})$$

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{J} = \frac{\partial J_x}{\partial x} + \frac{\partial J_y}{\partial y} + \frac{\partial J_z}{\partial z} = \sum_{i=1}^3 \frac{\partial J^i}{\partial x^i}, \quad (\text{B.37})$$

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \frac{1}{c} \frac{\partial J^0}{\partial x^0}, \quad (\text{B.38})$$

$$\frac{\partial J^\mu}{\partial x^\mu} \equiv \partial_\mu J^\mu = 0. \quad (\text{B.39})$$

As equações para os potenciais ,

$$\nabla^2 \vec{A} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \vec{A}}{\partial t^2} = -\mu_0 \vec{J}, \quad (\text{B.40})$$

$$\nabla^2 \phi - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \phi}{\partial t^2} = \frac{-\rho}{\epsilon_0}. \quad (\text{B.41})$$

Considerando o gauge de Lorentz:

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{A} + \frac{1}{c} \frac{\partial \phi}{\partial t} = 0, \quad (\text{B.42})$$

e,

$$A^\mu = \left(\frac{\phi}{c}, \vec{A} \right) \equiv (A^0, \vec{A}) \quad (\text{B.43})$$

com $\partial_\mu A^\mu = 0$. Dessa forma, o operador D'Alambertiano pode ser escrito como em (B.35):

$$-\square^2 \equiv \partial^\mu \partial_\mu = \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \nabla^2 \quad (\text{B.44})$$

e a equação para os potenciais (ϕ, \vec{A}) nas equações (B.40) e (B.41) é equivalente a equação (B.45):

$$\partial^\rho \partial_\rho A^\mu = \mu_0 J^\mu. \quad (\text{B.45})$$

Os campos \vec{E} e \vec{B} em termos de potenciais,

$$\vec{E} = -\nabla \phi - \frac{\partial \vec{A}}{\partial t}, \quad (\text{B.46})$$

$$\vec{B} = \vec{\nabla} \times \vec{A}. \quad (\text{B.47})$$

E as componentes do campo elétrico E_x, E_y e E_z :

$$\frac{E_x}{c} = -\frac{\partial A_0}{\partial x^1} - \frac{\partial A_1}{\partial x^0} = -\partial^0 A^1 + \partial^1 A^0, \quad (\text{B.48})$$

$$\frac{E_y}{c} = -\frac{\partial A_0}{\partial x^2} - \frac{\partial A_2}{\partial x^0} = -\partial^0 A^2 + \partial^2 A^0, \quad (\text{B.49})$$

$$\frac{E_z}{c} = -\frac{\partial A_0}{\partial x^3} - \frac{\partial A_3}{\partial x^0} = -\partial^0 A^3 + \partial^3 A^0, \quad (\text{B.50})$$

$$B_x = \frac{\partial A^3}{\partial x^2} - \frac{\partial A^2}{\partial x^3} = -(\partial^2 A^3 - \partial^3 A^2), \quad (\text{B.51})$$

$$B_y = \frac{\partial A^1}{\partial x^3} - \frac{\partial A^3}{\partial x^1} = -(\partial^3 A^1 - \partial^1 A^3), \quad (\text{B.52})$$

$$B_z = \frac{\partial A^1}{\partial x^3} - \frac{\partial A^3}{\partial x^1} = -(\partial^3 A^1 - \partial^1 A^3). \quad (\text{B.53})$$

A similaridade entre $\frac{E_i}{c}$ e B_j sugere a introdução do tensor $F_{\mu\nu}$ isto é, um tensor antisimétrico de segunda ordem com 6 componentes independentes.

$$F^{\mu\nu} = \frac{\partial A^\nu}{\partial x_\mu} - \frac{\partial A^\mu}{\partial x_\nu} = \partial^\mu A^\nu - \partial^\nu A^\mu, \quad (\text{B.54})$$

$$F^{\mu\nu} = \begin{pmatrix} 0 & -\frac{E_x}{c} & -\frac{E_y}{c} & -\frac{E_z}{c} \\ \frac{E_x}{c} & 0 & B_z & B_y \\ \frac{E_y}{c} & B_z & 0 & -B_x \\ \frac{E_z}{c} & B_y & -B_x & 0 \end{pmatrix} \quad (\text{B.55})$$

A forma covariante $F_{\mu\nu}$ é:

$$F_{\mu\nu} = \eta_{\mu\rho} F^{\rho\gamma} \eta_{\gamma\nu} \quad (\text{B.56})$$

Assim o tensor eletromagnético na forma covariante é um tensor antisimétrico $F_{\mu\nu}$,

$$F_{\mu\nu} = \begin{pmatrix} 0 & \frac{E_x}{c} & \frac{E_y}{c} & \frac{E_z}{c} \\ -\frac{E_x}{c} & 0 & -B_z & B_y \\ -\frac{E_y}{c} & B_z & 0 & -B_x \\ -\frac{E_z}{c} & -B_y & B_x & 0 \end{pmatrix} = -F_{\nu\mu}^*. \quad (\text{B.57})$$

Segue que $F_{\mu\nu}$ é encontrado a partir do tensor $F^{\mu\nu}$ pela substituição \vec{E} por $-\vec{E}$.

Outro tensor necessário para a descrição do eletromagnetismo é o chamado tensor dual, $\mathcal{F}^{\mu\nu}$ definido por:

$$\mathcal{F}^{\mu\nu} \equiv {}^* F^{\mu\nu} = \frac{1}{2} \epsilon^{\mu\nu\rho\sigma} F_{\rho\sigma}, \quad (\text{B.58})$$

$$\mathcal{F}^{\mu\nu} = \begin{pmatrix} 0 & -B_x & -B_y & -B_z \\ B_x & 0 & \frac{E_z}{c} & -E_y \\ B_y & -\frac{E_x}{c} & 0 & \frac{E_x}{c} \\ B_z & \frac{E_y}{c} & \frac{E_x}{c} & 0 \end{pmatrix}, \quad (\text{B.59})$$

onde $\epsilon^{\mu\nu\rho\sigma}$ é o tensor de Levi-Civita

$$\epsilon^{\mu\nu\rho\sigma} = \begin{cases} 1, \mu\nu\rho\sigma \text{ permutação par} \\ -1, \mu\nu\rho\sigma \text{ permutação ímpar} \\ 0, \text{ dois índices iguais} \end{cases} \quad (\text{B.60})$$

A "dualidade" é expressa por $*F^{\mu\nu} = F^{\mu\nu}$ e $*F^{\mu\nu} = -F^{\mu\nu}$. O tensor dual $\mathcal{F}^{\mu\nu}$ é obtido a partir de $F^{\mu\nu}$ pela substituição $\frac{\vec{E}}{c}$ por \vec{B} e \vec{B} por $-\frac{\vec{E}}{c}$. Assim o eletromagnetismo é descrito por um tensor anti simétrico $F^{\mu\nu}$. A forma covariante das equações de campo para os campos físicos incorpora duas das quatro equações de Maxwell, explicitamente:

$$\partial_\mu F^{\mu\nu} = \mu_0 J^\nu, \quad (\text{B.61})$$

$$\partial_\mu F^{\mu\nu} = \left(\frac{\partial}{\partial x^0}, \vec{\nabla} \right) \cdot \begin{pmatrix} 0 & -\frac{E_x}{c} & -\frac{E_y}{c} & -\frac{E_z}{c} \\ \frac{E_x}{c} & 0 & -B_z & B_y \\ \frac{E_y}{c} & B_z & 0 & -B_x \\ \frac{E_z}{c} & -B_y & B_x & 0 \end{pmatrix} \quad (\text{B.62})$$

e,

$$\left(\frac{1}{c} \vec{\nabla} \cdot \vec{E}, -\frac{1}{c} \frac{\partial E_x}{\partial x^0} + \frac{\partial B_z}{\partial y} - \frac{\partial B_y}{\partial z}, -\frac{1}{c} \frac{\partial E_y}{\partial x^0} - \frac{\partial B_z}{\partial x} + \frac{\partial B_x}{\partial z}, -\frac{1}{c} \frac{\partial E_z}{\partial x^0} + \frac{\partial B_y}{\partial x} - \frac{\partial B_x}{\partial y} \right) = \mu_0 (c, \rho, \vec{J}) \quad (\text{B.63})$$

e identificando as componentes :

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{E} = \frac{\rho}{\epsilon_0}, \quad (\text{B.64})$$

$$\vec{\nabla} \times \vec{B} = \mu_0 \vec{J} + \mu_0 \epsilon_0 \frac{\partial \vec{E}}{\partial t}. \quad (\text{B.65})$$

Analogamente a (B.61) utilizando o tensor \mathcal{F} tal que $\mathcal{F} = \frac{1}{2} \epsilon^{\mu\rho\sigma} F_{\rho\sigma}$,

$$\partial_\mu \mathcal{F}^{\mu\nu} = \left(\frac{\partial}{\partial x^0}, \vec{\nabla} \right) \cdot \begin{pmatrix} 0 & -B_x & -B_y & -B_z \\ B_x & 0 & \frac{E_z}{c} & -E_y \\ B_y & -\frac{E_x}{c} & 0 & \frac{E_x}{c} \\ B_z & \frac{E_y}{c} & \frac{E_x}{c} & 0 \end{pmatrix}, \quad (\text{B.66})$$

e igualando a (B.66) a zero,

$$\left(\vec{\nabla} \cdot \vec{B}, -\frac{\partial \vec{B}}{\partial x^0} + \vec{\nabla} \times \vec{E} \right) = 0, \quad (\text{B.67})$$

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{B} = 0, \quad (\text{B.68})$$

$$\vec{\nabla} \times \vec{E} = -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t}, \quad (\text{B.69})$$

isto é ,

$$\partial_\mu \mathcal{F}^{\mu\nu} = 0 \quad (\text{B.70})$$

As quatro equações de maxwell na forma covariante, ou seja invariantes sobre uma transformação de Lorentz ou 4-vetores no espaço de Minkowski são escritas através de duas equações conforme é mostrado nas equações (B.71) e (B.72).

$$\partial_\mu F^{\mu\nu} = \mu_0 J^\nu, \quad (\text{B.71})$$

$$\partial_\mu \mathcal{F}^{\mu\nu} = 0. \quad (\text{B.72})$$

A equação (B.72),pode ser reescrita da seguinte forma:

$$\partial_\alpha \epsilon^{\alpha\beta\rho\sigma} F_{\rho\sigma} = 0, \quad (\text{B.73})$$

$$\epsilon^{\alpha\beta\rho\sigma} \partial_\alpha F_{\rho\sigma} = -\epsilon^{\beta\alpha\rho\sigma} F_{\rho\sigma} = -\frac{\epsilon^{\beta\alpha\rho\sigma}}{3} [\partial_\alpha F_{\rho\sigma} + \partial_\rho F_{\sigma\alpha} + \partial_\sigma F_{\alpha\rho}], \quad (\text{B.74})$$

$$\partial_\alpha F_{\beta\gamma} + \partial_\beta F_{\gamma\alpha} + \partial_\gamma F_{\alpha\beta} = 0. \quad (\text{B.75})$$

A equação (B.75) é conhecida como identidade de Bianchi,explicitando as equações homogêneas [62, 63]:

$$\frac{\partial F^{\mu\nu}}{\partial x_\mu} = 0, \quad (\text{B.76})$$

$$\frac{\partial F^{0\nu}}{\partial x^\nu} = \frac{\partial F^{00}}{\partial x^0} + \frac{\partial F^{01}}{\partial x^1} + \frac{\partial F^{02}}{\partial x^2} + \frac{\partial F^{03}}{\partial x^3}, \quad (\text{B.77})$$

$$\frac{\partial B_x}{\partial x} + \frac{\partial B_y}{\partial y} + \frac{\partial B_z}{\partial z} = 0, \quad (\text{B.78})$$

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{B} = 0, \quad (\text{B.79})$$

$$\frac{\partial F^{1\nu}}{\partial x^\nu} = \frac{\partial F^{10}}{\partial x^0} + \frac{\partial F^{11}}{\partial x^1} + \frac{\partial F^{12}}{\partial x^2} + \frac{\partial F^{13}}{\partial x^3}, \quad (\text{B.80})$$

$$\frac{\partial F^{1\nu}}{\partial x^\nu} = -\frac{1}{c} \frac{\partial B_x}{\partial t} - \frac{1}{c} \frac{\partial E_z}{\partial y} - \frac{\partial E_y}{\partial z} = 0, \quad (\text{B.81})$$

$$\vec{\nabla} \times \vec{E} = -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t}, \quad (\text{B.82})$$

$$\vec{E} = -\vec{\nabla}\Phi - \frac{\partial \vec{A}}{\partial t}, \quad (\text{B.83})$$

$$\vec{B} = \vec{\nabla} \times \vec{A}. \quad (\text{B.84})$$

Apêndice C

Massa Efetiva

A existência de bandas de energia traz importantes consequências no movimento de elétrons em sólidos. Assim ondas de de Broglie submetidas a forças externas movem se com uma velocidade de grupo v_g :

$$v_g = \frac{d\omega}{dk} = \frac{d(E/\hbar)}{dk} = \frac{1}{\hbar} \frac{dE}{dk} \quad (\text{C.1})$$

de outra forma,

$$dE = v_g \hbar dk, \quad (\text{C.2})$$

O trabalho infinitesimal realizado sobre o elétron por uma força externa em um deslocamento infinitesimal dx é:

$$d\omega = F \cdot dx = F \cdot v_g dt = dE. \quad (\text{C.3})$$

A equação (C.3) implica em:

$$v_g \hbar \cdot dk = F_{ext} v_g dt, \quad (\text{C.4})$$

ou de outra forma,

$$F = \hbar \cdot \frac{dk}{dt}. \quad (\text{C.5})$$

A aceleração da onda de broglie do elétron pode ser obtida derivando se a equação (C.1) em

relação ao tempo;

$$a_g = \frac{dv_g}{dt} = \frac{1}{\hbar} \frac{d^2 E}{dk \cdot dt} = \frac{1}{\hbar} \cdot \frac{d^2 E}{dk^2} \left(\frac{dk}{dt} \right), \quad (\text{C.6})$$

$$a_g = \frac{1}{\hbar} \frac{d^2 E}{dk^2} \left(\frac{F}{\hbar} \right), \quad (\text{C.7})$$

ou ainda,

$$F = \frac{\hbar^2}{d^2 E / dk^2} a_g = m^* \cdot a_g. \quad (\text{C.8})$$

onde m^* é conhecida como massa efetiva do elétron no cristal. A equação (C.8) mostra que um elétron de massa m_e deve responder a força externa como se tivesse uma massa efetiva dada por:

$$\frac{1}{m^*} = \frac{1}{\hbar} \frac{d^2 E}{dk^2}. \quad (\text{C.9})$$

As características da rede cristalina determinam o comportamento da massa efetiva uma vez que ela define a forma de $E(k)$. Próximo a origem,

$$\frac{1}{m^*} = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial^2 E}{\partial k^2} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{\hbar^2 2k}{2m} = \frac{1}{m} \quad (\text{C.10})$$

consequentemente nessa região o elétron responde a rede como se fosse um elétron livre. Quando $\frac{1}{m^*} \approx 0$ ou de outra forma m^* tende a infinito uma dada força externa não provoca aceleração no elétron.

Se $\frac{1}{m^*} \leq 0$ a força acelera o elétron no sentido oposto a aquele esperado. De forma geral,

$$a_i = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial \omega(k)}{\partial k_i \partial k_j} = F_j = \frac{1}{\hbar^2} \cdot \left(\frac{\partial E}{\partial k_i \partial k_j} \right) F_j \quad (\text{C.11})$$

portanto m_{ij} :

$$[m^{-1}]_{ij} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 E}{\partial k_i \partial k_j}. \quad (\text{C.12})$$

O tensor em (C.12) expressa a mudança na velocidade de grupo devido a mudança no momento

dentro do sólido e está relacionado a mobilidade dos portadores. Se a mobilidade dos portadores ocorre em 2D a matriz será diagonal.

Apêndice D

Publicações geradas a partir desta tese

Blucher Proceedings
VI Encontro Científico de Física Aplicada

Blucher

Efeito Casimir em meios dielétricos

Rocha, J.R; Orlando, M.T. D

¹ Programa de Pós-Graduação em Física, Universidade Federal do Espírito Santo, Vitória, ES, Brasil.

* e-mail: Jeffersonrocha2004@ig.com.br

Resumo

Em 1948, Hendrik Casimir demonstrou que, duas placas paralelas condutoras e neutras sofrem uma força atrativa devido a flutuações do campo eletromagnético no vácuo. Neste trabalho, foi investigado o efeito Casimir entre dois semiespaços paralelos separados por uma distância d , e de constantes dielétricas $\epsilon_1(\omega)$ e $\epsilon_2(\omega)$ intercalados por um espaço de constante dielétrica $\epsilon_3(\omega)$. Foram investigadas as forças entre as superfícies metálicas paralelas imersas entre os espaços e, discutida a contribuição dos plasmões no efeito Casimir nessas condições de contorno.

Abstract

In 1948, Hendrik Casimir showed that two conductive parallel and neutral plates experience an attractive force due to fluctuations of the electromagnetic field in a vacuum state. In this study, was investigated the Casimir effect between two semi spaces separated by a distance d , and dielectric constants $\epsilon_1(\omega)$ and $\epsilon_2(\omega)$ interspersed by a space which dielectric constant is $\epsilon_3(\omega)$. Were investigated the forces between the parallel metal surfaces immersed among the spaces and discussed the contribution of plasmons in the Casimir effect in these boundary conditions.

Keywords (Palavras chaves): Casimir, Dielectrics, plasmons.

1. Introdução

A teoria quântica para o campo eletromagnético na ausência de qualquer fonte foi formulada por Born, Heisenberg e Jordan em 1926. A primeira aplicação foi feita por Dirac em 1927 que, tratou da emissão e absorção de radiação. A eletrodinâmica quântica (QED) prediz a existência de flutuações no campo eletromagnético mesmo na ausência de fontes, isto é um campo eletromagnético de vácuo, relacionado à energia de ponto zero ou energia de vácuo $E_0 = \frac{1}{2}h\omega$. Em 1948, H.B.Casimir [1], demonstrou que uma das consequências da energia de ponto zero é uma força atrativa F entre duas placas condutoras, paralelas e neutras separadas por uma distância d :

$$F = -hc \frac{\pi}{240} \frac{1}{d^4} \quad (1)$$



Figura 1: Placas condutoras separadas por d

A generalização da teoria de Casimir para placas condutoras (Figura 1) pode ser feita considerando-se o caso de um meio dielétrico cuja constante $\epsilon_3(\omega)$ entre dois semiespaços de constantes dielétricas $\epsilon_1(\omega)$ e $\epsilon_2(\omega)$ estes meios ocupam as regiões $0 \leq x \leq d, x < 0$ e $x > d$ respectivamente como mostrado na figura 2.

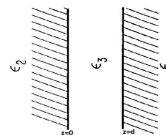


Figura 2: Placas semi-infinitas separadas por uma distância d separadas por uma camada de constante dielétrica ϵ_3

O cálculo da força entre os dois espaços semi-infinitos é feito com base na energia de ponto zero do campo

eletromagnético, $E = \sum_n \frac{1}{2} \hbar \omega_n$ onde ω_n são os modos de frequência na situação retratada na (figura 2) [2].

2. Teoria

2.1 Quantização do campo eletromagnético e energia de ponto zero

A quantização do campo eletromagnético implica em escrever os observáveis em termos de operadores que aumentam ou, diminuem o número de certas quantidades discretas no sistema, essas quantidades são conhecidas como quanta de excitação. Essa descrição do campo eletromagnético em termos de operadores pode ser feita reescrevendo o Hamiltoniano do campo em termos de quantidades fundamentais. Dessa forma, escrevendo a hamiltoniana do campo eletromagnético em (2)[3,4,5]:

$$\mathcal{H} = \int \frac{1}{2\mu_0} B^2 + \frac{\epsilon_0}{2} E^2 d^3x \quad (2)$$

Reescrevendo (2) em termos do quadri-potencial $A^\mu \equiv (\phi, \vec{A})$ lembrando que:

$$\vec{E} = -\vec{\nabla}\phi - \overline{\dot{\vec{A}}(\vec{r})} \quad (3)$$

$$\vec{B} = \vec{\nabla} \times \vec{A}$$

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2} \int \left\{ \frac{1}{\epsilon_0} \Pi^2(\vec{r}) + \epsilon_0 c^2 [\vec{\nabla} \times \vec{A}]^2 \right\} \quad (4)$$

Onde $\Pi(\vec{r})$ é o momento canônico conjugado. Explicitamente, $\Pi(\vec{r}) = -\epsilon_0 E(\vec{r})$ e, assumindo a dependência espacial $\vec{A}(\vec{r}) = \vec{A}(\mathbf{0})e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$, o Hamiltoniano pode ser reescrito em termos do espaço dos momentos,

$$\mathcal{H} = \int \left(\frac{1}{\epsilon_0} \Pi(k)^2 + \epsilon_0 k^2 A(k)^2 \right) dk^3 \quad (5)$$

A hamiltoniana (5) pode então ser reescrita em termos de operadores (6) e (7):

$$a(k) = \sqrt{\frac{\epsilon_0}{2\hbar\omega}} \left[wA(k) + \frac{i}{\epsilon_0} \Pi(k) \right] \quad (6)$$

$$a^*(k) = \sqrt{\frac{\epsilon_0}{2\hbar\omega}} \left[wA(k) - \frac{i}{\epsilon_0} \Pi(k) \right] \quad (7)$$

$$\mathcal{H} = \sum \int \hbar\omega \left[a^*(k)a(k) + \frac{1}{2} \right] dk^3 \quad (8)$$

O Hamiltoniano em (8) é o idêntico ao oscilador harmônico:

$$[\hat{A}(k), \Pi(k')] = i\hbar(k - k') \quad (9)$$

Ou, escrito de outra forma:

$$[\hat{a}(k), \hat{a}(k')] = i\hbar(k - k') \quad (10)$$

Vale ressaltar que a quantização do campo eletromagnético proposta nessa seção foi feita no gauge de Coulomb isto é,

$$\Phi = \text{constante} \quad (11)$$

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{A} = 0$$

Com base no hamiltoniano (9) é possível encontrar os autovalores de energia associados ao campo eletromagnético quantizado no estado fundamental. Aplicando o operador aniquilação no estado fundamental[3,4,5]:

$$a_{k\lambda} |0\rangle = 0 \quad (12)$$

A energia deste estado é a energia de ponto zero E_0 :

$$E_0 = \langle 0 | H | 0 \rangle \quad (13)$$

$$E_0 = \sum_k \frac{\hbar\omega}{2} \quad (14)$$

2.2 O efeito Casimir

O efeito CASIMIR [1] descreve a força atrativa entre duas placas perfeitamente condutoras separadas por uma distância d no vácuo (ver figura 1) esse efeito ocorre devido a flutuações do campo eletromagnético nesse estado. Considerando uma cavidade de dimensões L_x , L_y e L_z , com as possíveis vibrações da cavidade isto é, $k_x = \frac{n}{L_x} \pi$, $k_y = \frac{l}{L_y} \pi$, $k_z = \frac{m}{L_z} \pi$, sendo n, l e m números positivos inteiros.

$$k = \sqrt{k_x^2 + k_y^2 + k_z^2} = \sqrt{k^2 + k_z^2} \quad (15)$$

Para cada número de onda k_x , k_y e k_z há dois modos de polarização, exceto para n_l igual a zero, pois, nesse caso há apenas um modo de polarização. Para k_x e k_y esse fato não tem relevância uma vez que devido a L grande, k_x e k_y podem ser tratadas como variáveis contínuas. Assim, igualando a energia de ponto zero à energia eletromagnética na cavidade para L muito maior que L_z :

$$\sum \frac{2\hbar\omega}{2} = \sum_{n,l,m} \pi \hbar c \sqrt{\left[\frac{n^2\pi^2}{L^2} + \frac{l^2\pi^2}{L^2} + \frac{m^2\pi^2}{L_z^2} \right]} \quad (16)$$

O fator 2 na equação (16) ocorre devido aos dois possíveis modos de polarização. Na situação física de interesse, $L_z \ll d$, pois L é muito maior que L_z . Assim, a energia a uma distância d da cavidade é:

$$E(d) = \frac{L^2}{\pi^2} \hbar c \sum_m \int_0^\infty dk_x \int_0^\infty dk_y \left(k_x^2 + k_y^2 + \frac{m^2 \pi^2}{d^2} \right). \quad (17)$$

A equação (17) leva a um valor infinito para a energia de ponto zero em um volume finito. Se d for feito arbitrariamente grande,

$$E(\infty) = \frac{L^2}{\pi^2} \hbar c \frac{d}{\pi} \int_0^\infty dk_x \int_0^\infty dk_y \int_0^\infty dk_z (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2)^{1/2} \quad (18)$$

A equação (18) leva também a um valor infinito, portanto, a energia potencial $U(d)$ quando as placas estão separadas por uma distância d é dada pela diferença entre as equações (17) e (18). Essa diferença é infinita, contudo, é possível extrair um significado físico a partir de um valor finito. Transformando a diferença $U(d) = E(d) - E(\infty)$ para coordenadas polares (r, θ) :

$$U(d) = \frac{L^2 \hbar c}{\pi^2} \sum_m \int_0^{\pi/2} d\theta \int_0^\infty r \left(r^2 \sin^2 \theta + r^2 \cos^2 \theta + \frac{m^2 \pi^2}{d^2} \right)^{1/2} r dr \quad (19)$$

$$- \left(\frac{d}{\pi} \right) \int_0^\infty dk_z \int_0^\infty r (r^2 \sin^2 \theta + r^2 \cos^2 \theta + k_z^2)^{1/2} dr \int_0^{\pi/2} d\theta$$

De maneira a resolver o problema da regularização, isto é a diferença entre duas grandezas infinitas, é introduzida uma função de corte no integrando:

$$U(d) = \frac{L^2 \hbar c}{\pi^2} \frac{\pi}{2} \left[\sum_{m=0}^\infty \int_0^\infty r \left(r^2 + \frac{m^2 \pi^2}{d^2} \right)^{1/2} f \left(r^2 + \frac{m^2 \pi^2}{d^2} \right)^{1/2} \right] -$$

$$\frac{d}{\pi} \int_0^\infty r (r^2 + k_z^2)^{1/2} dr dk_z f \left((r^2 + k_z^2)^{1/2} \right) \quad (20)$$

Introduzindo agora a variável $t = \frac{d}{\pi} k_z$ e $u = \frac{d^2}{\pi^2} r^2$,

$$U(d) = \frac{L^2 \hbar c}{4d^3} \left[\sum_{m=0}^\infty \int_0^\infty \sqrt{(m^2 + u)} f \left(\frac{\pi}{d} [m^2 + u]^{1/2} \right) - \int_0^\infty dt \int_0^\infty (u + t^2)^{1/2} f \left(\frac{\pi}{d} [u + t^2]^{1/2} \right) du \right] \quad (21)$$

Definindo a função $f(t)$ como:

$$f(t) = \int_0^\infty (u + t^2)^{1/2} f \left(\frac{\pi}{d} [u + t^2]^{1/2} \right) du \quad (22)$$

A diferença entre a série e a integral na equação (21) pode ser reescrita da seguinte forma:

$$U(d) = \frac{\pi^2 \hbar c}{4d^3} \left[\frac{1}{2} F(0) + \sum_{m=0}^\infty f(m) - \int_0^\infty f(t) dt \right] \quad (23)$$

Aplicando se a fórmula de Euler-maclaurin:

$$\sum_{m=0}^\infty f(m) - \int_0^\infty f(t) dt = -\frac{1}{2} [f(0) + f(\infty)] + \frac{1}{12} [f'(\infty) - f'(0)] + \frac{1}{720} [f'''(\infty) - f'''(0)] \quad (24)$$

Aplicando a equação (24) em (23):

$$U(d) = -\frac{\pi^2 \hbar c}{720d^3} \quad (25)$$

A equação (25) é a energia associada a duas placas condutoras paralelas no vácuo, isto é a energia de Casimir. A força associada à energia descrita em (25) é encontrada calculando o gradiente da energia potencial,

$$F(d) = -\frac{\pi^2 \hbar c}{240d^4} A \quad (26)$$

O sinal negativo em (26) se deve ao fato de que a força nessa configuração de placas paralelas no vácuo é atrativa [3,4,5,8,10].

2.3 O efeito Casimir em meios dielétricos

A extensão do efeito Casimir para meios dielétricos pode ser feita a partir da teoria de Lifshitz [7]. Especificamente, para a situação ilustrada na figura 2, em que as constantes dielétricas são respectivamente [1, 2, 7, 10, 11]:

$$\varepsilon(z) = \begin{cases} \varepsilon_1 & z < 0 \\ \varepsilon_3 & 0 < z < d \\ \varepsilon_2 & z > d \end{cases} \quad (27)$$

As componentes diádicas de Green para as condições (27) devem ser expressas em termos dos modos TE (transversal elétrico ou H) e TM (transversal magnético ou E), dados pelas funções escalares de Green:

$$\left(-\frac{\partial^2}{\partial z^2} + k^2 - w^2 \varepsilon \right) g^H(z, z') = \delta(z - z') \quad (28)$$

$$\left(-\frac{\partial}{\partial z} \frac{1}{\varepsilon} \frac{\partial}{\partial z'} + \frac{k^2}{\varepsilon} - w^2 \right) g^E(z, z') = \delta(z - z') \quad (29)$$

de forma geral $\varepsilon = \varepsilon(z)$ e $\varepsilon' = \varepsilon'(z')$. As componentes não nulas de \mathbf{g} são:

$$g_{xx} = \frac{1}{\varepsilon} \delta(z - z') + \frac{1}{\varepsilon} \frac{\partial}{\partial z} \frac{1}{\varepsilon} \frac{\partial}{\partial z'} g^E \quad (30)$$

$$g_{yy} = w^2 g^H \quad (31)$$

$$g_{zz} = -\frac{1}{\varepsilon} \delta(z - z') + \frac{k^2}{\varepsilon \varepsilon'} g^E \quad (32)$$

$$g_{xz} = i \frac{k}{\epsilon \epsilon'} \frac{\partial}{\partial z} g^E \quad (33)$$

$$g_{zx} = i \frac{k}{\epsilon \epsilon'} \frac{\partial}{\partial z} g^E \quad (34)$$

Tomando o limite $z=z'$,

$$g_{kk} = \left(w^2 g^H + \frac{k^2}{\epsilon \epsilon'} g^E + \frac{1}{\epsilon \epsilon'} \frac{\partial}{\partial z'} g^E \right) z = z' \quad (35)$$

Quando a segunda interface (figura 2) é deslocada de uma quantidade δd ,

$$\delta \epsilon(z) = \delta d \cdot (\epsilon_2 - \epsilon_3) \delta(z - d) \quad (36)$$

Seja A área da seção transversa de uma da região imersa entre os meios dielétricos,

$$\frac{\delta E}{A} = \frac{i}{2} \int \frac{dw}{2\pi} \frac{dk}{(2\pi)^2} \delta \epsilon(z) g_{kk}(z, z, k, w) = -F \delta d \quad (37)$$

Onde a força por unidade de área é:

$$F = \frac{i}{2} \int \frac{dw}{2\pi} \frac{dk}{(2\pi)^2} (\epsilon_2 - \epsilon_3) g_{kk}(d, d, k, w) \quad (38)$$

Levando em conta que g^H , g^E e $\frac{1}{\epsilon} \frac{\partial}{\partial z} \frac{1}{\epsilon'} \frac{\partial}{\partial z'}$ enquanto $\epsilon \epsilon'$ é descontínua z se aproxima de z' por lados opostos da interface então o termo $\frac{k^2}{\epsilon \epsilon'} g^E$ é aproximadamente $\frac{k^2}{\epsilon_1 \epsilon_2} g^E$ deve se avaliar apenas um lado da interface, assim, a função de Green g^H para $z, z' > d$ é:

$$g^H(z, z') = \frac{1}{2k_2} (e^{-k_2|z - z'|} + r e^{-k_2(z + z' - 2d)}) \quad (39)$$

Onde o coeficiente de reflexão é:

$$r = \frac{k_2 - k_3}{k_2 + k_3} + \frac{4k_2 k_3}{k_3^2 - k_2^2} d^{-1} \quad (40)$$

$$D = \frac{k_2 + k_3}{k_3 - k_2} \frac{k_3 + k_1}{k_3 - k_1} e^{2k_3 d} - 1 \quad (41)$$

A função de Green g^E tem a mesma forma da equação (39), apenas deve se levar em conta que k é substituído por $\equiv k'$, avaliando a função de Green apenas fora da interface (Figura 2) encontra se a força por unidade de área [3, 4, 5, 8, 10]:

$$F = \frac{i}{2} \int \frac{dw}{2\pi} \frac{d(k)}{(2\pi)^2} \{ [k_3 - k_2 + 2k_3 D^{-1}] + [k_3 - k_2 + 2k_3 D'^{-1}] \} \quad (42)$$

Na equação (42), o primeiro colchete vem dos modos TE da função de Green e o segundo colchete da parte TM, os primeiros termos em cada colchete que, não fazem referencia a distancia, podem ser vistos como a mudança na energia por unidade de volume do sistema. Estes termos representam a energia eletromagnética necessária para substituir o meio 2 pelo meio 3 o termo restante, que depende da distancia, é à força de Casimir [1]. Realizando uma rotação complexa na frequência:

$$w \rightarrow i\zeta \quad (43)$$

$$k^2 = K^2 + \epsilon \zeta^2 \quad (44)$$

A partir da rotação proposta em (44),

$$F = -\frac{1}{8\pi^2} \int_0^\infty d\zeta \int_0^\infty 2k_3 (D^{-1} + D'^{-1}) dk^2 \quad (45)$$

Em particular, se o meio intermediário é o vácuo $\epsilon_3=1$ e $\epsilon_2 = \epsilon_1 = \infty$ e $k_1=k_2=0$ recupera se a força de Casimir para duas placas condutoras paralelas separadas por uma distancia d conforme expressão (26). De forma geral, se o meio intermediário não é o vácuo,

$$F = -\frac{1}{8\pi^2} \int_0^\infty d\zeta \int_{\frac{2\zeta}{\epsilon}}^{\frac{2\zeta}{\epsilon_2}} \frac{4k^2}{e^{2k_3 d} - 1} dk^2 \quad (46)$$

$$F = -\frac{\pi^2}{240\sqrt{\epsilon}} \frac{1}{d^4} \quad (47)$$

A equação (47) é a generalização do resultado encontrado em (26) imersa entre meios dielétricos. [7,10,11]

2.4 Influência dos Plasmons no efeito Casimir

Uma onda evanescente que percorre uma superfície com um comprimento de onda específico é chamada plasmon (ver figura 3). A energia de ponto zero a uma distância d da superfície é:

$$E(d) = \sum_n \frac{\hbar \omega_{na}}{2} + \sum_n \frac{\hbar \omega_{nb}}{2} \quad (48)$$

Onde os índices (a) e (b) são os dois modos de vibração na superfície na equação (48)

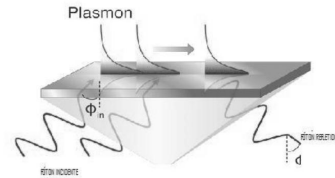


Figura 3: Plasmon se propagando em uma superfície metálica. Na figura o fóton incidente e refletido. Fonte: referencia [8]

$$E(d) = \frac{\hbar L^2}{4\pi} \int_0^\infty [\sum_N \omega_{NA}(k) + \sum_N \omega_{NB}(k)] k dk \quad (49)$$

De acordo com Bordag. Et.al [9]., a energia de ponto zero E_0 . Para o dielétrico tem uma contribuição da energia do fóton incidente e dos plasmons de superfície [9]:

$$E_0 = E_{Plasmon} + E_{Fóton} \quad (50)$$

3. Resultados e discussão

Foram discutidas a quantização do campo eletromagnético no gauge de Coulomb e o efeito da radiação no estado do vácuo sobre uma cavidade em forma de paralelepípedo cuja uma das dimensões é muito pequena comparada a área da seção

transversal, isto é o efeito Casimir com base no modelo de Lifshitz[7];, foi feito o cálculo da energia de ponto zero para uma cavidade imersa em um meio dielétrico e encontrada a força a uma distância d como foi feito para o vácuo e, os resultados são convergentes com a teoria de Casimir como um caso limite conforme explicitado na seção 2.3, finalmente, verificamos os efeitos das vibrações de superfície (plasmons) sobre uma cavidade imersa entre meios dielétricos. através dessas análises, foram verificados os efeitos dos plasmons no efeito Casimir em dielétricos.

[11]CHEN, F. et al. Control of the Casimir force by the modification of dielectric properties with light. **Physical review B**, v. 76, n. 3, p. 035338, 2007.

4. Agradecimentos

Os autores agradecem a CAPES pelo apoio financeiro.

5. Referências

- [1] CASIMIR, H. B. G 1948 Proc. K. In: **Ned. Akad. Wet. B**. p. 793.
- [2] VAN KAMPEN, N. G.; NIJBOER, B. R. A.; SCHRAM, K. On the macroscopic theory of van der Waals forces. **Physics letters A**, v. 26, n. 7, p. 307-308, 1968.
- [3]MILONNI, P. W. Casimir forces without the vacuum radiation field. **Physical Review A**, v. 25, n. 3, p. 1315, 1982.
- [4]LANDAU, Lev Davidovich et al. **Electrodynamics of continuous media**. Elsevier, 1984.
- [5]GREINER, Walter. **Quantum electrodynamics of strong fields**. Springer Berlin Heidelberg, 1985.
- [6]SCHWINGER, Julian. On gauge invariance and vacuum polarization. **Physical Review**, v. 82, n. 5, p. 664, 1951.
- [7] LIFSHITZ, E. M. The theory of molecular attractive forces between solids. 1956.
- [8] DIONNE, Jennifer A. Viewpoint: Mirror, Mirror. **Physics**, v. 5, p. 38, 2012.
- [9] BORDAG, Michael. The Casimir effect for thin plasma sheets and the role of the surface plasmons. **Journal of Physics A: Mathematical and General**, v. 39, n. 21, p. 6173, 2006.
- [10] SCHWINGER, Julian; DERAAD, Lester L.; MILTON, Kimball A. Casimir effect in dielectrics. **Annals of Physics**, v. 115, n. 1, p. 1-23, 1978.



Contents lists available at ScienceDirect

Journal of Alloys and Compounds

journal homepage: <http://www.elsevier.com/locate/jalcom>Effects of yttrium doping in ordered double perovskite $\text{Sr}_2\text{CrReO}_6$ M.T.D. Orlando ^{a,*}, A.S. Cavichini ^a, J.B. Depianti ^a, J.L. Passamai ^a, J.R. Rocha ^a,
J.F. Salvador ^{a,b}, C.G.P. Orlando ^a^a Universidade Federal do Espírito Santo, Vitória, ES, 29075-910, Brazil^b Instituto Federal do Espírito Santo, Vitória, ES, 29056-255, Brazil

ARTICLE INFO

Article history:

Received 26 April 2016

Received in revised form

13 June 2016

Accepted 14 June 2016

Available online 16 June 2016

Keywords:

Double perovskite

Yttrium doping

Ceramic

Solid solution

Crystallography

Magnetic properties

ABSTRACT

Solid-state reactions carried out in a sealed quartz tube showed that the yttrium solubility limit in the ordered double perovskite $\text{Sr}_2\text{Y}_x\text{CrReO}_6$ is $x = 0.2$. Using X-ray diffraction analysis and Rietveld refinement, it was possible to confirm the existence of a solid solution with a maximum yttrium (at.%) content of 10%. The compound obtained, $\text{Sr}_{1.8}\text{Y}_{0.2}\text{CrReO}_6$, exhibited a microstructure with grain sizes similar to those of $\text{Sr}_2\text{CrReO}_6$. However, it was noticed that the volume of the unit cell had increased by 0.2%. The compound $\text{Sr}_{1.8}\text{Y}_{0.2}\text{CrReO}_6$ also exhibited an increase in magnetization of 10% with respect to that of $\text{Sr}_2\text{CrReO}_6$ without there being a change in the critical temperature (~ 640 K) and with the characteristics of a structured crystalline solid solution being maintained. This suggested that $\text{Sr}_{1.8}\text{Y}_{0.2}\text{CrReO}_6$ can be used for the development and fabrication of spintronics devices.

© 2016 Elsevier B.V. All rights reserved.

1. Introduction

Materials that can be used in development and fabrication of spintronics devices [1–3] have attracted great research interest in recent years. The magnetoresistance properties of these materials have generated great expectations regarding their use in novel technological applications. The ordered double perovskites with the formula $\text{A}_2\text{BB}'\text{O}_6$ (A: alkaline earth; B: transition metal ion; and B': other transition metal) are among such materials and are deemed particularly attractive after the discovery of their colossal magnetoresistance at room temperature [4].

The use of these compounds in devices involving high-performance spintronics requires that their various parameters such as the Curie temperature (T_c), magnetization, and electrical conductivity be as high as possible. The Curie temperature is of particular importance since it is desirable that such compounds have a high magnetic-ordering temperature. Given this requirement, compounds with a structure similar to that of ordered double perovskites are good candidate materials, since they have a high Curie temperature and exhibit electrical conductivity characteristics similar to those of metals [5,6].

Compounds such as $\text{Sr}_2\text{CrReO}_6$ and $\text{Sr}_2\text{CrOsO}_6$, which have the ordered double-perovskite structure, exhibit high Curie temperatures, which are 635 K [7] and 720 K [8], respectively. Further, these compounds are stable, have previously been used to produce high-quality thin films, and can be synthesized by various techniques [9–11]. This increases the possibility of using them to create spintronics devices such as electrodes for magnetic tunnel junctions.

As reported by Philipp et al. [12] and Popov et al. [13], there is a correlation between the size of the ion positioned at the A site of a double perovskite and the magnetic moment saturation of the compound. Studies [14–16] on this correlation have shown that the Curie temperature increases when Sr in the compound $\text{Sr}_2\text{FeMoO}_6$ is replaced by a rare earth element. Researchers have also found [17,18] that the substitution of Sr^{+2} by Nd^{+3} reduces the T_c of $\text{Sr}_2\text{CrReO}_6$. Given these facts, many researchers believe that the magnetic behavior associated with chemical doping can be exploited for developing new and more effective compounds for spintronics devices.

Following the idea described in the previous paragraph, in this study, we investigated the effects of the partial replacement of Sr by Y in the double perovskite $\text{Sr}_{2-x}\text{Y}_x\text{CrReO}_6$. The study focused on the phase-diagram region corresponding to a solid solution ($x = 0.2$). In particular, we assessed the changes in the structural parameters and their correlation with the magnetic properties of the resultant compound.

* Corresponding author.

E-mail address: mtdorlando@gmail.com (M.T.D. Orlando).

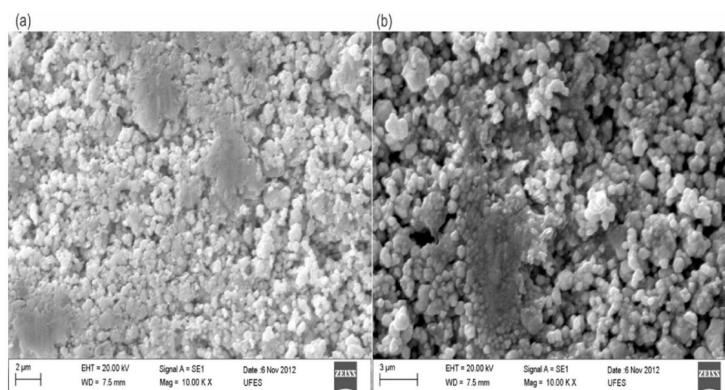


Fig. 1. Secondary electron images of the (a) $\text{Sr}_2\text{CrReO}_6$ and (b) $\text{Sr}_{1.8}\text{Y}_{0.2}\text{CrReO}_6$ samples.

Table 1

Results of Rietveld refinement of the $\text{Sr}_2\text{CrReO}_6$ sample ($T = 285 \text{ K}$). The errors represent the standard deviation (statistical only).

$\text{Sr}_2\text{CrReO}_6$	$a = 5.5305 (3) \text{ \AA}$	$c = 7.8117 (9) \text{ \AA}$	$\text{Vol.} = 238.94 (1) \text{ \AA}^3$	$B (\text{Å}^2)$	Occ. (%)
Atom	x	y	z		
Sr	0	1/2	1/4	1.35 (2)	100
Cr1	0	0	0	0.101 (4)	88
Re1	0	0	0	0.101 (4)	12
Re2	0	0	1/2	0.112 (1)	83
Cr2	0	0	1/2	0.279 (1)	17
O1	0	0	0.252 (5)	1.56 (1)	100
O2	0.236 (3)	0.265 (4)	0	1.35 (5)	100
$R_{\text{wp}} = 0.232$					
$R_p = 0.152$					
$\chi^2 = 1.681$					
$\text{R}[\text{**2}] = 0.097$					

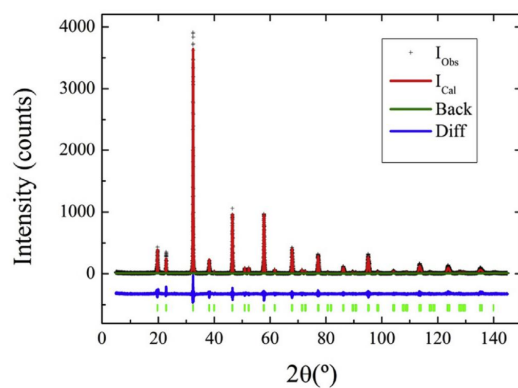


Fig. 2. Powder X-ray diffraction ($T = 285 \text{ K}$) and Rietveld refinement of $\text{Sr}_2\text{CrReO}_6$ with $\lambda_{\text{ave}} = 1.5421 \text{ \AA}$.

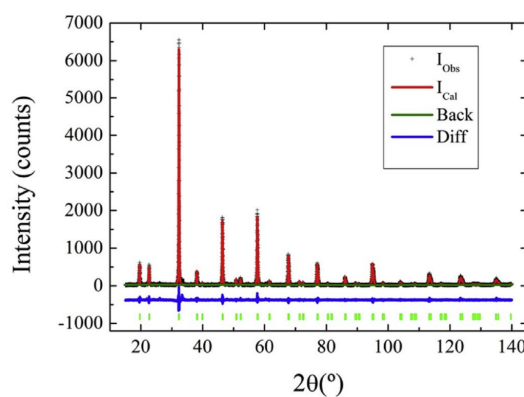


Fig. 3. Rietveld refinement output and X-ray diffraction pattern ($T = 285 \text{ K}$) of $\text{Sr}_{1.8}\text{Y}_{0.2}\text{CrReO}_6$. The radiation used had an average wavelength, λ_{ave} , of 1.5421 \AA .

2. Materials and methods

2.1. Synthesis procedure

Polycrystalline $\text{Sr}_{2-x}\text{Y}_x\text{CrReO}_6$ ($x = 0, 0.2, 0.3$ and 0.4) samples were prepared through a sealed solid-state reaction of the oxides

SrO (Alfa Aesar Puratronic, 99.95%), Y_2O_3 (Sigma Aldrich, 99.995%), Cr_2O_3 (Alfa Aesar, Puratronic, 99.9%), ReO_2 (Sigma Aldrich, 99.7%), and ReO_3 (Sigma Aldrich, 99.9%). Before the start of the synthesis procedure, the oxides were heated at $400 \text{ }^\circ\text{C}$ for 24 h to remove any impurities and water vapor. The powders were then mixed and pressed into pellets, which were wrapped in Au foil (Alfa Aesar,

Table 2
Rietveld fitting results for the lattice and atomic parameters of the sample $\text{Sr}_{1.8}\text{Y}_{0.2}\text{CrReO}_6$ ($T = 285$ K). The errors represent the standard deviation (statistical only).

$\text{Sr}_{1.8}\text{Y}_{0.2}\text{CrReO}_6$	a = 5.5340 (2) Å		c = 7.8169 (5) Å		Vol. = 239.40 (1) Å ³	B (Å ²)	Occ. (%)
Atom	x	y	z				
Sr	0	1/2	1/4			7.66 (2)	87
Y	0	1/2	1/4			7.66 (2)	13
Cr1	0	0	0			3.94 (5)	83
Re1	0	0	0			1.64 (5)	17
Re2	0	0	1/2			5.61 (8)	80
Cr2	0	0	1/2			3.32 (8)	20
O1	0	0	0.246 (4)			2.455 (7)	100
O2	0.281 (3)	0.222 (2)	0			9.3 (5)	100
$R_{\text{wp}} = 0.166$							
$R_p = 0.111$							
$\chi^2 = 1.842$							
$F[**2] = 0.062$							

Puratronic, 99.999%) and sealed in an evacuated (10^{-2} torr) quartz tube. The sealed quartz tube was placed in a tubular furnace filled with Ar at 12 bar and heated at a rate of 100 °C/h to 910 °C, where it remained for 24 h. It was then cooled at the same rate to room temperature. This was done three intermediate steps of grinding. The second and third heat treatments were performed at 1000 °C for 48 h. Finally, for the fourth treatment, the pellets were placed in a crucible instead of being wrapped in a Au foil inside a sealed quartz tube and were heated at 1200 °C for 24 h using the same heating/cooling rate.

2.2. Sample characterization

X-ray powder diffraction measurements were performed using a diffractometer (Ultima IV, Rigaku) with Cu-K α radiation ($\lambda_{\text{av}} = 1.5421$ Å; $0.6 \times \lambda_{K\alpha 1} = 1.54056$ Å + $0.4 \times \lambda_{K\alpha 2} = 1.54439$ Å) at a voltage of 40 kV and current of 20 mA. The measurements were made for 2θ values of 5–145° using divergence slits: 1/2 horizontal divergence slits with widths of 10 mm, 1/2 scattering slit, and receiving slit with width of 0.3 mm. Each step was 0.02° (2 θ), and the time per step was 6 s. All X-ray powder diffraction patterns of this study were carried out at $T = 285(2)$ K. NIST standard reference materials Al_2O_3 and CeO_2 [19] were analyzed under the same experimental conditions, in order to obtain the instrument parameters. The software program GSAS [20] with the EXPGUI interface [21] was used for the Rietveld analysis.

The morphologies and chemical compositions of the samples were determined using a scanning electron microscopy (SEM) system (Zeiss – EVO 40) combined with an energy-dispersive X-ray spectroscopy (EDS – OXFORD) system. The SEM observations were carried out at magnifications up to 10000 \times . The electron beam energy was 20 keV, and the probe current was of the order of 25 μA .

Magnetic measurements were performed using a vibrating sample magnetometer for temperatures of 300–700 K and a magnetic field, H, of 0.25 T.

Table 3
Lengths and angles of the bonds present in the compounds $\text{Sr}_2\text{CrReO}_6$ and $\text{Sr}_{1.8}\text{Y}_{0.2}\text{CrReO}_6$. The errors represent one standard deviation and are only statistical. O1 represents the apical oxygen atom, while O2 is the planar oxygen atom.

CrO_6	Sr_2		ReO_6		
	Sr_2	$\text{Sr}_{1.8}\text{Y}_{0.2}$	Re–O1 (Å)	Sr_2	$\text{Sr}_{1.8}\text{Y}_{0.2}$
Cr–O1 (Å)	1.97 (2)	1.92 (2)	Re–O1 (Å)	1.94 (2)	1.99 (2)
Cr–O2 (Å)	1.96 (2)	1.98 (2)	Re–O2 (Å)	1.95 (2)	1.96 (2)
			Sr_2		$\text{Sr}_{1.8}\text{Y}_{0.2}$
Cr–O1–Re (°)		180.0 (3)			180.0 (3)
Cr–O2–Re (°)		173.4 (4)			166.5 (4)

Table 4

Determination of valences using the sum of bond valences rule [$V = \sum S_{ij}$], where $S_{ij} = \exp(R_0 - R_{ij})$ is the experimental bond valence and $R_0 = 1.910$ Å for Re, $R_0 = 1.708$ Å for Cr [5], R_{ij} is the metal-oxygen (M–O) bond length (from the Rietveld refinement), and B is a constant (0.37).

$\text{Sr}_2\text{CrReO}_6$		$\text{Sr}_{1.8}\text{Y}_{0.2}\text{CrReO}_6$	
Cation (site)	BVS	Cation (site)	BVS
Cr1 (0 0 0)	3.0 (1)	Cr1 (0 0 0)	3.0 (1)
Re1 (0 0 0)	5.2 (2)	Re1 (0 0 0)	5.2 (2)
Re2 (0 0 1/2)	5.4 (1)	Re2 (0 0 1/2)	5.1 (1)
Cr2 (0 0 1/2)	3.13 (6)	Cr2 (0 0 1/2)	2.98 (6)

3. Results and discussion

The preliminary results of the X-ray diffraction analysis indicated that only the double perovskite $\text{Sr}_{2-x}\text{Y}_x\text{CrReO}_6$ samples with $x = 0$ and 0.2 were structurally of a single phase. The $\text{Sr}_{1.7}\text{Y}_{0.3}\text{CrReO}_6$ sample ($x = 0.3$) showed a loss of stoichiometry; Re was removed from the compound and deposited on the walls of the sealed quartz tube. Further, an increase in the Y content to $\text{Sr}_{1.6}\text{Y}_{0.4}\text{CrReO}_6$ ($x = 0.4$) caused the removal of greater amount of Re and its deposition on the walls of the sealed quartz ampoule. Even after repeating the treatment at several temperatures, it was found that the rhenium oxide deposited on the walls of the tube did not return to the initially prepared compounds having the nominal stoichiometries ($\text{Sr}_{1.7}\text{Y}_{0.3}\text{CrReO}_6$ and $\text{Sr}_{1.6}\text{Y}_{0.4}\text{CrReO}_6$). The analysis of X-ray powder diffraction patterns showed significant amounts (>5% by volume) of SrCr_2O_7 , Cr_2O_3 , $\text{Sr}_2\text{CrReO}_6$ and Y_2ReO_5 in both cases ($x = 0.3$ and $x = 0.4$).

After the synthesis of the various samples, it was determined that the one with the nominal composition $\text{Sr}_{1.8}\text{Y}_{0.2}\text{CrReO}_6$ ($x = 0.2$) was the only one that showed reproducibility and maintained its stoichiometry. This was because no precipitates were formed and no material was deposited on the internal walls of the quartz tube in the case of this sample. Further, the total mass of the sample remained unchanged.

3.1. Microstructure

The microstructures of the monophasic samples were analyzed by visually inspecting their SEM images (Fig. 1(a) and (b)). It was found the particles of the $\text{Sr}_2\text{CrReO}_6$ and $\text{Sr}_{1.8}\text{Y}_{0.2}\text{CrReO}_6$ samples were smaller than 1 μm .

The SEM images (Fig. 1(a) and (b)) shows that the two representative ceramics were produced successfully. Further, it can be observed that most of their particles had a bead-like morphology. Considering their spherical morphology, an analysis was performed

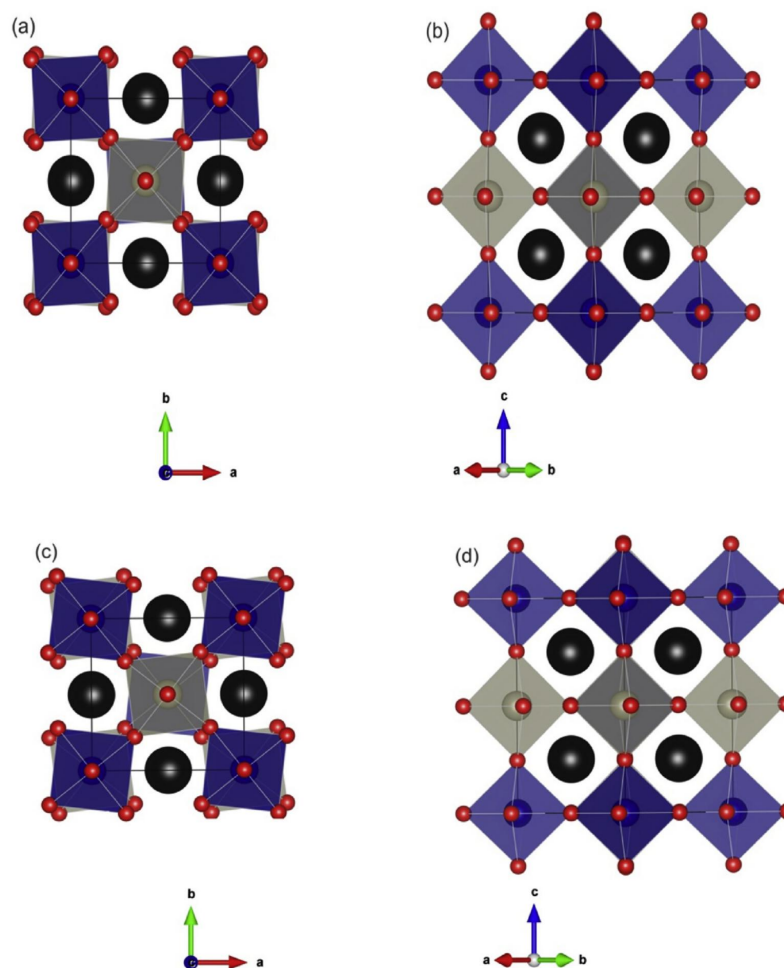


Fig. 4. Schematic structures of (a) $\text{Sr}_2\text{CrReO}_6$ and (b) $\text{Sr}_{1.8}\text{Y}_{0.2}\text{CrReO}_6$. View of the unit cell along the crystallographic $[001]$ direction corresponding to a pseudocubic a or b axis. The blue octahedra represent CrO_6 and the gray octahedra represent ReO_6 ; the rotations of the octahedra in opposite directions along the viewing axis can be seen. (c) $\text{Sr}_2\text{CrReO}_6$ and (d) $\text{Sr}_{1.8}\text{Y}_{0.2}\text{CrReO}_6$. View along the crystallographic $[110]$ direction showing the out-of-phase rotations. (For interpretation of the references to colour in this figure legend, the reader is referred to the web version of this article.)

using a gamma distribution associated with the apparent particle diameter, as determined by SEM. Data were analyzed by ImageJ software and the uncertainty of the average diameter values were obtained based on the variance of the gamma distribution calculated by the Wolfram Mathematica software. Using this model, it was found that the average particle diameter, d , was (250 ± 7) nm for the ceramic $\text{Sr}_2\text{CrReO}_6$ and (255 ± 8) nm for the ceramic $\text{Sr}_{1.8}\text{Y}_{0.2}\text{CrReO}_6$. As the heat treatment used was identical for both samples, one may infer that the doping did not significantly affect the growth dynamics and agglomeration of the particles.

Several areas of the samples were analyzed by EDS. The average result for each element present in the undoped sample was as follows: $\text{Sr}_{2.01}\text{Cr}_{0.99}\text{Re}_{0.98}\text{O}_6$. On the other hand, for the sample doped with Y, the average composition was $\text{Sr}_{1.78}\text{Y}_{0.21}\text{Cr}_{1.01}\text{Re}_{0.97}\text{O}_6$.

3.2. Crystal structure

The first Rietveld refinements of the compounds $\text{Sr}_2\text{CrReO}_6$ and $\text{Sr}_{1.8}\text{Y}_{0.2}\text{CrReO}_6$ were performed considering the $I4/m$ [5,18,22] and $Fm-3m$ [17,22] symmetries. On reviewing the refining quality (Table 1), it was found that the $I4/m$ symmetry was the best fit for the $\text{Sr}_2\text{CrReO}_6$ and $\text{Sr}_{1.8}\text{Y}_{0.2}\text{CrReO}_6$ samples. The diffraction pattern of $\text{Sr}_2\text{CrReO}_6$ ($T = 285$ K) and the results of its Rietveld refinement are shown in Fig. 2.

There were no traces of any secondary phases or precipitated impurities in the diffraction pattern of the $\text{Sr}_2\text{CrReO}_6$ sample (Fig. 2). An analysis performed using the Williamson–Hall method [23] indicated that the crystal size, D , was 114 (2) nm and the microstrain, ϵ , was 0.96%. The Rietveld refinement output was $D = 87$ (8) nm and $\epsilon = 1.2\%$.

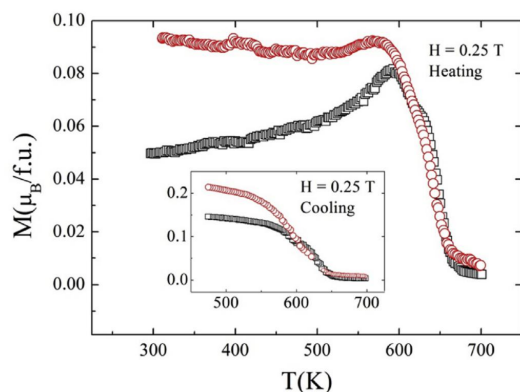


Fig. 5. Magnetization as a function of temperature under an applied direct current field of 0.25 T for the compounds $\text{Sr}_2\text{CrReO}_6$ (black square) and $\text{Sr}_{1.8}\text{Y}_{0.2}\text{CrReO}_6$ (red circle) during heating. Inset: curves of the compounds during cooling. (For interpretation of the references to colour in this figure legend, the reader is referred to the web version of this article.)

Table 5

Calculated values of the coupling energy of the M–O bond arranged in the ascending order (left to right) of magnetization of the various compounds [18]. O1 is the apical oxygen atom, while O2 is the planar xy oxygen atom.

E_{pd}	$\text{Sr}_{1.8}\text{Nd}_{0.3}\text{CrReO}_6$ [Michalik et al. [18]]	$\text{Sr}_{1.8}\text{La}_{0.3}\text{CrReO}_6$ [Michalik et al. [18]]	$\text{Sr}_2\text{CrReO}_6$	$\text{Sr}_{1.8}\text{Y}_{0.2}\text{CrReO}_6$
	(eV)	(eV)	(eV)	(eV)
Cr–O1	–3.9	–4.1	–4.0	–4.4
Cr–O2	–5.4	–5.4	–4.0	–3.8
Re–O1	–6.0	–6.8	–6.1	–5.5
Re–O2	–6.4	–6.2	–6.0	–5.8

The structural parameters of the compound $\text{Sr}_2\text{CrReO}_6$, which are shown in Table 1, were almost similar to those reported by Kato et al. [5].

The disorder of the site B (0,0,0) as determined in this study (Cr/Re \cong 88/12) was lower than that reported by Kato et al. [5] (Cr/Re \cong 77/23) (see Table 1). The lower disorder caused a small difference between the structural parameters determined in this study and those reported by Kato et al. ($a = 5.52718$ (4) Å and $c = 7.80912$ (11) Å).

The diffraction pattern and results of the Rietveld refinement of the doped compound $\text{Sr}_{1.8}\text{Cr}_{0.2}\text{ReO}_6$ ($T = 285$ K) are shown in Fig. 3.

Traces of an unknown residual phase (less than 5%) were seen in the diffraction pattern of $\text{Sr}_{1.8}\text{Y}_{0.2}\text{CrReO}_6$ ($2\theta \approx 32.6^\circ$). However, it was not possible to quantify this phase through Rietveld refinements. The Williamson–Hall analysis shown that D was 127 (2) nm and ϵ was 0.69%. The Rietveld refinement shown as output $D = 92$ (9) nm and $\epsilon = 0.82\%$. A comparison with $\text{Sr}_2\text{CrReO}_6$ ($D = 114$ (2) nm, $\epsilon = 0.96\%$ from Williamson–Hall, and $D = 87$ (8) nm, $\epsilon = 1.2\%$ from Rietveld refinement) indicated that Y doping increased the crystallite size and reduced the microstrain. As considering the low doping content ($x = 0.2$), the smaller ionic radius of Yttrium (0.09 nm) in relation to Strontium (0.12 nm) may have caused the reduction of microstrain.

The doping of the $\text{Sr}_{2-x}\text{Y}_x\text{CrReO}_6$ sample ($x = 0.2$) with Y caused an increase in the parameters a and c of the unit cell; however, the $I4/m$ symmetry remained unchanged. Table 2 lists the results obtained from the Rietveld refinement of $\text{Sr}_{1.8}\text{Y}_{0.2}\text{CrReO}_6$.

The volume of the unit cell of the doped sample $\text{Sr}_{1.8}\text{Y}_{0.2}\text{CrReO}_6$ was $\sim 0.2\%$ greater than that of the undoped sample $\text{Sr}_2\text{CrReO}_6$.

The Rietveld refinement of the X-ray diffraction pattern of the sample $\text{Sr}_{1.8}\text{Y}_{0.2}\text{CrReO}_6$ using the $I4/m$ symmetry showed that site A (0, 1/2, 1/4) was partially occupied by Sr ($\sim 88\%$) and Y ($\sim 12\%$). It was also observed that the substitution of Y at site A (0, 1/2, 1/4) caused a concomitant change in site B (0,0,0). In addition, it was seen that the B site (0,0,0) showed a partial decrease in the Cr concentration to $\sim 83\%$ and an increase in the Re concentration to $\sim 17\%$, in contrast to the case for the undoped sample, $\text{Sr}_2\text{CrReO}_6$ (Cr/Re $\sim 88/12$). It was not possible to compare the data from this study on the disorder at site B' (0,0,1/2) because Kato et al. did not publish any data for this site [5]. However, the results obtained indicated a greater degree of disorder (Cr/Re $\sim 20/80$) as compared to the undoped sample (Cr/Re $\sim 17/83$) for the site. Therefore, in the case of the B (0,0,0) and B' (0,0,1/2) sites, the doped Y caused an increase in the partial concentration of Re atoms at the B (0,0,0) site and a decrease at the B' (0,0,1/2) site.

Table 3 shows the distances and angles between sites B and B'.

A decrease in the length of the Cr–O1 bond and an increase in the length of the Re–O1 bond were observed with the partial substitution of Sr by Y; this was accompanied by a decrease in the Cr–O2–Re angle. No changes were observed in the lengths of the Cr–O2 and Re–O2 bonds, when considering the uncertainties. A

change in the metal–oxygen apical (M–O1) distances and the decrease in the Cr–O2–Re angle (plane) were also observed by Michalik et al. [18] when Sr was partially substituted for the rare earth element Nd in the $\text{Sr}_2\text{CrReO}_6$ structure. Further, Michalik et al. [18] have also reported a decrease in the Cr–O2–Re angle (plane) when $\text{Sr}_2\text{CrReO}_6$ was doped with the rare earth element La at the Sr site.

The valences of the elements at sites B and B', shown in Table 4, were calculated using the bond valence sum model [24] and the software ValList [25]. The input parameters were the bond distances of Cr–O and Re–O, as determined by the Rietveld refinements.

The calculations indicated that the average valences of Cr and Re at site B (0,0,0) did not change with the addition of Y^{+3} ; however, the average valence of Re at site B' (0,0,1/2) decreased, considering the uncertainties. The Cr ion at site B' did not exhibit a change in its average valence. The decrease in the average valence of Re at the B' site was associated with the substitution of Sr^{+2} for Y^{+3} at site A (0, 1/2, 1/4). The results of the valence calculations for $\text{Sr}_2\text{CrReO}_6$ suggested that Cr was present at both sites and Re at site B', in keeping with the results reported by Kato et al. [5]. These results were also in accordance with those published by Blasco et al. [17], who used X-ray absorption near edge structure measurements to evaluate the Cr^{+3} and Re^{+5} valences in the perovskite $\text{Sr}_2\text{CrReO}_6$. Moreover, the analysis of X-ray Absorption Near Edge Structure measurements of these batch samples (carried out at National Laboratory of Synchrotron Light – LNLS – Campinas – Brazil) indicated to be the valence of Cr = $+(3.1 \pm 0.2)$ and Re = $+(5.2 \pm 0.2)$ for doped and undoped sample.

Schematic presentations of the structures of $\text{Sr}_2\text{CrReO}_6$ and

$\text{Sr}_{1.8}\text{Y}_{0.2}\text{CrReO}_6$ are shown in Fig. 4(a)–(d). According to Glazer's notation, an $a^0a^0c^-$ configuration existed along the pseudocubic axes [26].

It was seen that the substitution of Y^{+3} at the site occupied by Sr^{+2} caused a reversal of the direction of rotation of the octahedra (Fig. 4(a) and (c)). In the compound $\text{Sr}_2\text{CrReO}_6$, the CrO_6 and ReO_6 octahedra are inclined at -3.3° in the counter-clockwise direction and $+3.3^\circ$ in the clockwise direction, respectively, relative to the $b\perp a$ plane. However, in the case of $\text{Sr}_{1.8}\text{Y}_{0.2}\text{CrReO}_6$, the CrO_6 octahedra are rotated by $+6.9^\circ$ in the clockwise direction and the ReO_6 octahedra are rotated by -6.9° in the counter-clockwise direction, in relation to the $b\perp a$ plan. Therefore, it was concluded that the partial substitution of a Y^{+3} ion at the site occupied by the Sr^{+2} ion caused spins in the CrO_6 and ReO_6 octahedra of $\sim 10.2^\circ$ in the opposite directions relative to the $b\perp a$ plan observed in the compound $\text{Sr}_2\text{CrReO}_6$.

3.3. Magnetization

The magnetization curve obtained for $\text{Sr}_2\text{CrReO}_6$ was in agreement with that reported in the literature (under a field of 0.1T) [17]. The magnetization curves for the doped and undoped compounds are shown in Fig. 5.

The magnetization measurements showed that there was increase ($\sim 10\%$) in the region of the maximum of the magnetization curve (~ 590 K) in the case of the compound $\text{Sr}_{1.8}\text{Y}_{0.2}\text{CrReO}_6$ relative to that of the undoped sample. Moreover, the curve of the former remained unchanged from T_c to 640 K.

It has been reported that substitutions at the Sr site in the compound $\text{Sr}_2\text{CrReO}_6$ [18] of rare earth elements such as Sm and Nd increase the volume of the unit cell. However, the maximum magnetization under a 5 T field decreases at a temperature of 5 K. In the case reported here, doping also caused an increase in the unit cell volume; however, this was accompanied by an increase in the magnetization as well.

In order to understand the difference in the observed magnetization behavior and that reported by Michalik et al. [18], the bond distances and their correlation to the pd orbital coupled to Cr-O and Re-O were evaluated on the basis of hybridization parameters such as the bandwidth and coupling energy.

Table 5 shows a comparison of the energy bands of pd hybridized with respect to Cr-O and Re-O for the two samples in this study and those reported in the literature while considering a pseudocubic symmetry.

The calculations used to determine the values of these terms as well as the coupling energies were based on the work of Harrison (1999, page 693) [27]. The coupling energy, $E_{pd} (= (4/3) \cdot [V_{pda} - (V_{pdr}\pi) \cdot (2/3^{1/2})])$ was calculated based on the pd coupling parameters, $V_{pdr} (= -\{[(3.15^{1/2})/2\pi] \cdot [h^2 \cdot (r_d \cdot r_p^3)^{1/2} / (4\pi^2 \cdot m \cdot d^4)]\})$ and $V_{pda} (= \{[(3.5^{1/2})/2\pi] \cdot [h^2 \cdot (r_d \cdot r_p^3)^{1/2} / (4\pi^2 \cdot m \cdot d^4)]\})$, where r_d is the radius of the metal "d" and r_p is the radius of the "p" ligand (in this case oxygen) (the values of both were taken from Ref. [27]), "d" is the length of the metal-oxygen (MO) bond [22], and "m" is the electron mass.

Using the results of the X-ray diffraction analysis of $\text{Sr}_2\text{CrReO}_6$ and $\text{Sr}_{1.8}\text{Y}_{0.2}\text{CrReO}_6$ as the input parameters, it was possible to verify that there was a decrease in the chemical bond energy of the xy plane (Cr–O2 and Re–O2). However, the calculations also showed a singular increase in coupling energy of the Cr–O1 bond in the apical direction. As the Cr atom contributes more to the total magnetic moment (expected value of 3.88 μ_B , considering only the spin and localized electrons) compared to the Re atom (expected value of 2.83 μ_B , considering only the spin and localized electrons), the increased binding energy in the apical direction would result in an increase in the electron hopping integral B–O–B'. This increase

in the hopping integral would, in turn, reinforce the indirect ferromagnetic interactions [22]. This would be consistent with the increase in the magnetization (Fig. 4) seen in the case of $\text{Sr}_{1.8}\text{Y}_{0.2}\text{CrReO}_6$ relative to that of $\text{Sr}_2\text{CrReO}_6$.

Lucy et al. [11] observed that a $\text{Sr}_2\text{CrReO}_6$ film undergoes changes in its magnetization under tensile and compressive stresses. In the same study, they observed that the $\text{Sr}_2\text{CrReO}_6$ film under tension exhibited increases in the magnetic spin of Cr (apical) and Re (out of plane, c -axis). Using supplementary material [28], they attributed this increase to several factors: (1) rotation of the octahedra; (2) increase in the length of the axis; (3) decrease in the Cr–O bond length in the apical direction (c axis) and the Re–O bond length in the xy plane; and (4) increase in the length of the Re–O bond in the apical direction (c -axis) and the Cr–O bond in the xy plane.

In the compound $\text{Sr}_{1.8}\text{Y}_{0.2}\text{CrReO}_6$, the partial substitution of Y^{+3} at the Sr^{+2} site caused an increase in the unit cell volume, inducing a mechanical stress in the crystal lattice. As a result, in addition to changing the Cr–O and Re–O bond lengths, the partial replacement caused a spin around the c -axis in the CrO_6 octahedra of $+10.2^\circ$ (clockwise) and of -10.2° (counter-clockwise) in the ReO_6 octahedra. These spins around the c -axis were similar to those observed by Lucy et al. [11,28] in a film under tensile stress. Thus, it can be concluded that the mechanically induced stresses reported by Lucy and coworkers were similar in nature to those caused by the chemical substitution of Y^{+3} at the Sr^{+2} site in $\text{Sr}_{1.8}\text{Y}_{0.2}\text{CrReO}_6$.

4. Conclusions

It was found that the double perovskite $\text{Sr}_{2-x}\text{Y}_x\text{CrReO}_6$ has a solubility limit of Y atoms of $\sim 10\%$ ($x = 0.2$) when subjected to a solid-vapor reaction in a sealed quartz ampoule. The obtained solid solution, $\text{Sr}_{1.8}\text{Y}_{0.2}\text{CrReO}_6$, exhibited a polycrystalline ceramic microstructure with grain sizes similar to those of the undoped compound ($\text{Sr}_2\text{CrReO}_6$). However, the volume of the unit cell had increased by 0.2%. A small amount of Y added at the Sr site induced small increases in the lattice parameters a and c . However, there was no change in the crystal symmetry ($I4/m$). A small increase in the disorder at sites B and B' was also observed after doping, without there being any change in the symmetry.

The substitution of Sr for Y caused changes in the directions of rotation of the CrO_6 and ReO_6 octahedra and the M–O1 bond distance (apical) and an increase in the chemical energy of the Cr–O1 bond (apical). This last change caused an increase in the magnetization of the material, since it increased the integral hopping B–O–B'.

The magnetic behavior of $\text{Sr}_{1.8}\text{Y}_{0.2}\text{CrReO}_6$ indicated an increase in the magnetization as well as a change in the magnetization curve when compared to those of $\text{Sr}_2\text{CrReO}_6$. More specifically, it was found that the magnetization of $\text{Sr}_{1.8}\text{Y}_{0.2}\text{CrReO}_6$ ($\text{Sr}_2\text{CrReO}_6$ doped with Y at the Sr site) was higher by 10% with respect to that of $\text{Sr}_2\text{CrReO}_6$ without there being a concomitant change in the critical temperature ($T_c \approx 640$ K) and with the structural characteristics of the solid solution remaining unchanged.

Thus, it can be concluded that the partial substitution of Y at the Sr site in a concentration of up to $\sim 10\%$ is within the limit of yttrium solubility for $\text{Sr}_2\text{CrReO}_6$ and increases the magnetization, which suggests that $\text{Sr}_{1.8}\text{Y}_{0.2}\text{CrReO}_6$ is a promising compound for the fabrication of spintronics devices.

Acknowledgements

We would like to thank Laboratório Nacional de Luz Sincrotron – LNLS – Brasil for use facilities (XRD and XAS lines beam) and Prof. Dr. Mohammed El Massalami (Universidade Federal do Rio de

Janeiro - UFRJ, Brazil) for his help with the magnetization measurements. This work was supported by Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal Pesquisa de Nível Superior – CAPES grant # 23038.000861/2015-51, Fundação de Amparo a Pesquisa do Espírito Santo – FAPES grant # 67666027, and Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico – CNPq grant # 303072/2013-0, Brazil.

References

- [1] S.A. Wolf, D.D. Awschalom, R.A. Buhrm, J.M. Daughton, S. von Molnár, M.L. Roukes, A.Y. Chtchelkanova, D.M. Treger, *Science* 294 (2001) 1488.
- [2] D. Wei, M. Obstbaum, M. Ribow, C.H. Back, G. Woltersdorf, *Nat. Commun.* 5 (2014) 3768.
- [3] K.-W. Kim, H.-W. Lee, *Nat. Phys.* 10 (2014) 549.
- [4] K.-I. Kobayashi, T. Kimura, H. Sawada, K. Terakura, Y. Tokura, *Nature* 395 (1998) 677.
- [5] H. Kato, T. Okuda, Y. Okimoto, Y. Tomioka, *Phys. Rev. B* 69 (2004) 184412.
- [6] D. Serrate, J.M. De Teresa, P.A. Algarabel, C. Marquina, J. Blasco, M.R. Ibarra, J. Galibert, *J. Phys. Condens. Matter* 19 (2007) 436226.
- [7] H. Kato, T. Okuda, Y. Okimoto, Y. Tomioka, Y. Takenoya, A. Ohkubo, M. Kawasaki, Y. Tokura, *Appl. Phys. Lett.* 81 (2002) 328.
- [8] Y. Krockenberger, K. Mogare, M. Reehuis, M. Tovar, M. Jansen, G. Vaitheeswaran, V. Kanchana, F. Bultmark, A. Delin, F. Wilhelm, A. Rogalev, A. Winkler, L. Alff, *Phys. Rev. B* 75 (2007) 020404.
- [9] S. Chakraverty, A. Ohtomo, M. Kawasaki, *Appl. Phys. Lett.* 97 (2010) 243107.
- [10] Y. Liu, J.M. Lucy, A. Glavic, H. Ambaye, V. Lauter, F.Y. Yang, *Phys. Rev. B* 90 (2014) 104416.
- [11] J.M. Lucy, M.R. Ball, O.D. Restrepo, A.J. Hauser, J.R. Soliz, J.W. Freeland, P.M. Woodward, W. Windl, F.Y. Yang, *Phys. Rev. B* 90 (2014), 180401(R).
- [12] J.B. Philipp, P. Majewski, L. Alff, A. Erb, R. Gross, T. Graf, M.S. Brant, J. Simon, T. Walther, W. Mader, D. Topwal, D.D. Sarma, *Phys. Rev. B* 68 (2003) 1444311.
- [13] G. Popov, M.V. Lobanov, E.V. Tsiper, M. Greenblatt, E.N. Caspi, A. Borissov, V. Kiryukhin, J.W. Lynn, *J. Phys. Condens. Matter* 16 (2004) 135.
- [14] J. Navarro, C. Frontera, L. Balcells, B. Martínez, J. Fontcuberta, *Phys. Rev. B* 64 (2001) 092411.
- [15] D. Serrate, J.M. De Teresa, J. Blasco, M.R. Ibarra, L. Morellón, C. Ritter, *Appl. Phys. Lett.* 80 (2002) 4573.
- [16] D. Serrate, J.M. De Teresa, J. Blasco, M.R. Ibarra, L. Morellón, C. Ritter, *Eur. Phys. J. B* 39 (2004) 35.
- [17] J. Blasco, J.M. Michalik, J. García, G. Subías, J.M. Teresa, *Phys. Rev. B* 76 (2007) 144402.
- [18] J.M. Michalik, J.M. De Teresa, J. Blasco, C. Ritter, P.A. Algarabel, M.R. Ibarra, Cz. Kapusta, *Solid State Sci.* 12 (2010) 1121.
- [19] L.G. Martinez, R.U. Ichikawa, K. Imakuma, M.T.D. Orlando, X. Turrillas, in: *Anais do V Encontro Científico de Física Aplicada*, Editora Edgard Blücher, São Paulo, 2014, p. 115, <http://dx.doi.org/10.5151/phypro-ecfa-051>.
- [20] A.C. Larson, R.B. Von Dreele, Los Alamos National Laboratory Report LAUR, 2004, pp. 86–748.
- [21] B.H. Toby, *J. Appl. Cryst.* 34 (2001) 210.
- [22] J.M. De Teresa, D. Serrate, C. Ritter, J. Blasco, M.R. Ibarra, L. Morellón, W. Tokarz, *Phys. Rev. B* 71 (2005) 092408.
- [23] G.K. Williamson, W.H. Hall, *Acta Metall.* 1 (1953) 2231.
- [24] I.D. Brown, *The Chemical Bond in Inorganic Chemistry: the Bond Valence Model*, Oxford University Press, New York, 2006, p. 278.
- [25] A.S. Wills, *Valist*, Program available from www.ccp14.ac.uk (accessed 10.03.16).
- [26] C.J. Howard, B.J. K. P.M. Woodward, *Acta Crystallogr. Sect. B Struct. Sci.* 59 (2003) 463.
- [27] W.A. Harrison, *Elementary Electronic Structures*, World Scientific, Singapore, 1999.
- [28] [Lucy_2014_supplemental material] See Supplemental Material at <http://journals.aps.org/prb/supplemental/10.1103/PhysRevB.90.180401>.

Referências Bibliográficas

- [1] CASIMIR, H. B. G. On the attraction between two perfectly conducting plates. *Proc. K. Ned. Akad. Wet.*, v. 51, n. April, p. 793–795, 1948.
- [2] MOSTEPANENKO, V. M. *The Casimir effect and its applications*. [S.l.: s.n.].
- [3] RODRIGUEZ, A. W.; CAPASSO, F.; JOHNSON, S. G. The casimir effect in microstructured geometries. *Nature photonics*, Nature Publishing Group, v. 5, n. 4, p. 211–221, 2011.
- [4] MILONNI, P. W. *The quantum vacuum: an introduction to quantum electrodynamics*. [S.l.]: Academic press, 2013.
- [5] DALVIT, D. et al. *Casimir Physics*. [S.l.]: Springer, 2011. v. 834.
- [6] BORDAG, M. et al. *Advances in the Casimir effect*. [S.l.]: OUP Oxford, 2009. v. 145.
- [7] MILTON, K. A. *The Casimir effect: physical manifestations of zero-point energy*. [S.l.]: World Scientific, 2001.
- [8] FARINA, C. The casimir effect: some aspects. *Brazilian journal of physics*, SciELO Brasil, v. 36, n. 4A, p. 1137–1149, 2006.
- [9] LONDON, F. Zur theorie und systematik der molekularkräfte. *Zeitschrift für Physik*, Springer, v. 63, n. 3-4, p. 245–279, 1930.
- [10] VERWEY, E. J. W.; OVERBEEK, J. T. G.; OVERBEEK, J. T. G. *Theory of the stability of lyophobic colloids*. [S.l.]: Courier Corporation, 1999.
- [11] CASIMIR, H.; POLDER, D. The influence of retardation on the london-van der waals forces. *Physical Review*, APS, v. 73, n. 4, p. 360, 1948.

- [12] LIFSHITZ, E. The theory of molecular attractive forces between solids. 1956.
- [13] SCHWINGER, J.; DERAAD, L. L.; MILTON, K. A. Casimir effect in dielectrics. *Annals of Physics*, Elsevier, v. 115, n. 1, p. 1–23, 1978.
- [14] SARID, D.; CHALLENGER, W. *Modern introduction to surface plasmons: theory, Mathematica modeling, and applications*. [S.l.]: Cambridge University Press, 2010.
- [15] RAETHER, H. *Surface plasmons on smooth surfaces*. [S.l.]: Springer, 1988.
- [16] INTRAVAIA, F.; LAMBRECHT, A. Surface plasmon modes and the casimir energy. *Physical review letters*, APS, v. 94, n. 11, p. 110404, 2005.
- [17] INTRAVAIA, F.; HENKEL, C.; LAMBRECHT, A. Role of surface plasmons in the casimir effect. *Physical Review A*, APS, v. 76, n. 3, p. 033820, 2007.
- [18] BARTON, G. Casimir energies of spherical plasma shells. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, IOP Publishing, v. 37, n. 3, p. 1011, 2004.
- [19] BARTON, G. Casimir effects for a flat plasma sheet: I. energies. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, IOP Publishing, v. 38, n. 13, p. 2997, 2005.
- [20] BORDAG, M. The casimir effect for thin plasma sheets and the role of the surface plasmons. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, IOP Publishing, v. 39, n. 21, p. 6173, 2006.
- [21] LAMOREAUX, S. K. Demonstration of the casimir force in the 0.6 to 6 μ m range. *Physical Review Letters*, APS, v. 78, n. 1, p. 5, 1997.
- [22] MOHIDEEN, U.; ROY, A. Precision measurement of the casimir force from 0.1 to 0.9 μ m. *Physical Review Letters*, APS, v. 81, n. 21, p. 4549, 1998.
- [23] SPARNAAY, M. J. Measurements of attractive forces between flat plates. *Physica*, Elsevier, v. 24, n. 6-10, p. 751–764, 1958.
- [24] WILSON, C. et al. Observation of the dynamical casimir effect in a superconducting circuit. *Nature*, Nature Publishing Group, v. 479, n. 7373, p. 376–379, 2011.

- [25] ORLANDO, M. et al. Pressure effect on hg-12 (n- 1) n superconductors and casimir effect in nanometer scale. *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*, IOP Publishing, v. 42, n. 2, p. 025502, 2008.
- [26] BORDAG, M. Vacuum energy in smooth background fields. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, IOP Publishing, v. 28, n. 3, p. 755, 1995.
- [27] BORDAG, M.; MOHIDEEN, U.; MOSTEPANENKO, V. M. New developments in the casimir effect. *Physics reports*, Elsevier, v. 353, n. 1, p. 1–205, 2001.
- [28] BORDAG, M. *Surface plasmon for graphene in the Dirac equation model*. [S.l.], 2012.
- [29] LANDAU, L. D. *The classical theory of fields*. [S.l.]: Elsevier, 2013. v. 2.
- [30] LEMOS, N. A. *Mecânica analítica*. [S.l.]: Editora Livraria da Física, 2007.
- [31] GOLDSTEIN, H. *Classical mechanics*. [S.l.]: Pearson Education India, 1965.
- [32] LANDAU, L.; LIFSHITZ, E. *Classical mechanics*. [S.l.]: Pergamon Press, Oxford, 1960.
- [33] MARION, J. B. *Classical dynamics of particles and systems*. [S.l.]: Academic Press, 2013.
- [34] MARSDEN, J. E.; RATIU, T. *Introduction to mechanics and symmetry: a basic exposition of classical mechanical systems*. [S.l.]: Springer Science & Business Media, 2013. v. 17.
- [35] GREINER, W.; REINHARDT, J. *Quantum electrodynamics*. [S.l.]: Springer Science & Business Media, 2012.
- [36] MÜLLER-KIRSTEN, H. J. *Electrodynamics*. [S.l.]: World Scientific, 2011.
- [37] DUTRA, S. M. *Cavity quantum electrodynamics: the strange theory of light in a box*. [S.l.]: John Wiley & Sons, 2005.
- [38] ARFKEN, G. B.; WEBER, H. J.; HARRIS, F. E. *Mathematical methods for physicists: a comprehensive guide*. [S.l.]: Academic press, 2011.
- [39] DIONNE, J. A. Viewpoint: Mirror, mirror. *Physics*, APS, v. 5, p. 38, 2012.
- [40] GENET, C.; LAMBRECHT, A.; REYNAUD, S. Temperature dependence of the casimir effect between metallic mirrors. *Physical Review A*, APS, v. 62, n. 1, p. 012110, 2000.

- [41] KITTEL, C.; FONG, C.-y. *Quantum theory of solids*. [S.l.]: Wiley New York, 1963. v. 33.
- [42] ASHCROFT, N. W. *Nd mermin solid state physics*. Saunders College, Philadelphia, p. 120, 1976.
- [43] MARDER, M. P. *Condensed matter physics*. [S.l.]: John Wiley & Sons, 2010.
- [44] BLACKMAN, M. The theory of the specific heat of solids. *Reports on Progress in Physics*, IOP Publishing, v. 8, n. 1, p. 11, 1941.
- [45] OLIVEIRA, I. S.; JESUS, V. D. Física do estado sólido. *São Paulo: Livraria da Física, 1ª edição*, 2005.
- [46] SOMMERFELD, A. Zur elektronentheorie der metalle auf grund der fermischen statistik. *Zeitschrift für Physik A Hadrons and Nuclei*, Springer, v. 47, n. 1, p. 1–32, 1928.
- [47] SHIZUYA, M.; ISOBE, M.; TAKAYAMA-MUROMACHI, E. Structure and properties of the CaCo_2O_4 -type cobalt oxide CaCo_2O_4 . *Journal of Solid State Chemistry*, Elsevier, v. 180, n. 9, p. 2550–2557, 2007.
- [48] FENG, H. L. et al. Synthesis, crystal structures, and magnetic properties of double perovskites SrLaNiO_6 and BaLaNiO_6 . *Solid State Communications*, Elsevier, v. 243, p. 49–54, 2016.
- [49] HUANG, Y.-H. et al. Double perovskites as anode materials for solid-oxide fuel cells. *Science*, American Association for the Advancement of Science, v. 312, n. 5771, p. 254–257, 2006. ISSN 0036-8075. Disponível em: <<http://science.sciencemag.org/content/312/5771/254>>.
- [50] KOBAYASHI, K.-I. et al. Room-temperature magnetoresistance in an oxide material with an ordered double-perovskite structure. *Nature*, Nature Publishing Group, v. 395, n. 6703, p. 677–680, 1998.
- [51] DIAZ-MORALES, O. et al. Iridium-based double perovskites for efficient water oxidation in acid media. *Nature Communications*, Nature Research, v. 7, 2016.
- [52] GRIMAUD, A. et al. Double perovskites as a family of highly active catalysts for oxygen evolution in alkaline solution. *Nature communications*, Nature Publishing Group, v. 4, 2013.

- [53] LONGO, J.; WARD, R. Magnetic compounds of hexavalent rhenium with the perovskite-type structure. *Journal of the American Chemical Society*, ACS Publications, v. 83, n. 13, p. 2816–2818, 1961.
- [54] CORRÊA, H. et al. Synthesis and structural characterization of the $\text{Ca}_2\text{MnReO}_6$ double perovskite. *Cerâmica*, SciELO Brasil, v. 56, n. 338, p. 193–200, 2010.
- [55] KEMPF, A. On the casimir effect in the high- T_c cuprates. *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*, IOP Publishing, v. 41, n. 16, p. 164038, 2008.
- [56] PRELLIER, W. et al. Properties of the ferrimagnetic double perovskites $\text{A}_2\text{BFeReO}_6$ (A = Ba and Ca). *Journal of Physics: Condensed Matter*, IOP Publishing, v. 12, n. 6, p. 965, 2000.
- [57] KATO, H. et al. Structural and electronic properties of the ordered double perovskites A_2MReO_6 (A = Sr, Ca; M = Mg, Sc, Cr, Mn, Fe, Co, Ni, Zn). *Physical Review B*, APS, v. 69, n. 18, p. 184412, 2004.
- [58] MORITOMO, Y. et al. Electron doping effects in conducting $\text{Sr}_2\text{FeMoO}_6$. *Physical Review B*, APS, v. 62, n. 21, p. 14224, 2000.
- [59] KAHOUL, A. et al. Effect of La doping on the properties of $\text{Sr}_{2-x}\text{La}_x\text{FeMoO}_6$ double perovskite. *Journal of Applied Physics*, American Institute of Physics, v. 104, n. 12, p. 123903, 2008.
- [60] ZHANG, Q. et al. Eu doping effects on structural and magnetic properties of $(\text{Sr}_{2-x}\text{Eu}_x)\text{FeMoO}_6$ compounds. *Journal of Solid State Chemistry*, Elsevier, v. 183, n. 10, p. 2432–2437, 2010.
- [61] ORLANDO, M. et al. Effects of yttrium doping in ordered double perovskite $\text{Sr}_2\text{CrReO}_6$. *Journal of Alloys and Compounds*, Elsevier, v. 687, p. 463–469, 2016.
- [62] JACKSON, J. D. *Classical electrodynamics*. [S.l.]: Wiley, 1999.
- [63] GRIFFITHS, D. J.; COLLEGE, R. *Introduction to electrodynamics*. [S.l.]: prentice Hall Upper Saddle River, NJ, 1999. v. 3.