PUC RIO

CETUC

Introdução aos metamateriais eletromagnéticos

Prof. Dr. Gláucio Lima Siqueira

I²META Instituto de Inovação em Metamateriais

PROPRIEDADE DE GLÁUCIO LIMA SIQUEIRA E JORGE VIRGILIO DE ALMEIDA

Apresentação por Jorge Virgilio de Almeida

Informações gerais

- Contato
  - glaucio@cetuc.puc-rio.br
- Dia e horário do curso
  - Sextas-feiras, de 09h às 12h
  - Sala 3 do CETUC
- Avaliação
  - Lista de exercícios
  - Projeto final
- Referência Bibliográfica
  - ELE5322 21st Century Electromagnetics, Dr. Raymond C. Rumpt, UTEP, USA
  - http://emlab.utep.edu/ee5390em21.htm/

PROPRIEDADE DE GLÁUCIO LIMA SIQUEIRA E JORGE VIRGILIO DE ALMEIDA

Ementa (I)

- Parte 1 – Eletrodinâmica em meios periódicos
  - Tópico 1 – Revisão do eletromagnetismo clássico
  - Tópico 2 – Modelos de Drude e Lorentz para condutores e dielétricos
  - Tópico 3 – Propagação da onda eletromagnética em meios anisotrópicos e não lineares
  - Tópico 4 – Teoria dos modos acoplados
  - **Tópico 5 – Teoria das estruturas periódicas**
  - Tópico 6 – Redes de difração
  - Tópico 7 – Ressonância do modo guiado
  - Tópico 8 – Homogeneização de estruturas periódicas

PROPRIEDADE DE GLÁUCIO LIMA SIQUEIRA E JORGE VIRGILIO DE ALMEIDA

Ementa (II)

- Parte 2 – Fenômeno e aplicações de metamateriais
  - Tópico 9 – Teoria dos metamateriais
  - Tópico 10 – Eletromagnetismo transformacional aplicado aos metamateriais
  - Tópico 11 – Ondas de superfície
  - Tópico 12 – Ondas lentas
  - Tópico 13 – Linha de transmissão orientada à esquerda
  - Tópico 14 – Aplicações de metamateriais

PROPRIEDADE DE GLÁUCIO LIMA SIQUEIRA E JORGE VIRGILIO DE ALMEIDA

Tópico 5
Teoria das estruturas periódicas

- Dispositivos periódicos
- Descrição matemática
- Ondas eletromagnéticas em estruturas periódicas
- Bandas eletromagnéticas
- Contornos de isofrequência
- Exemplos de estruturas periódicas

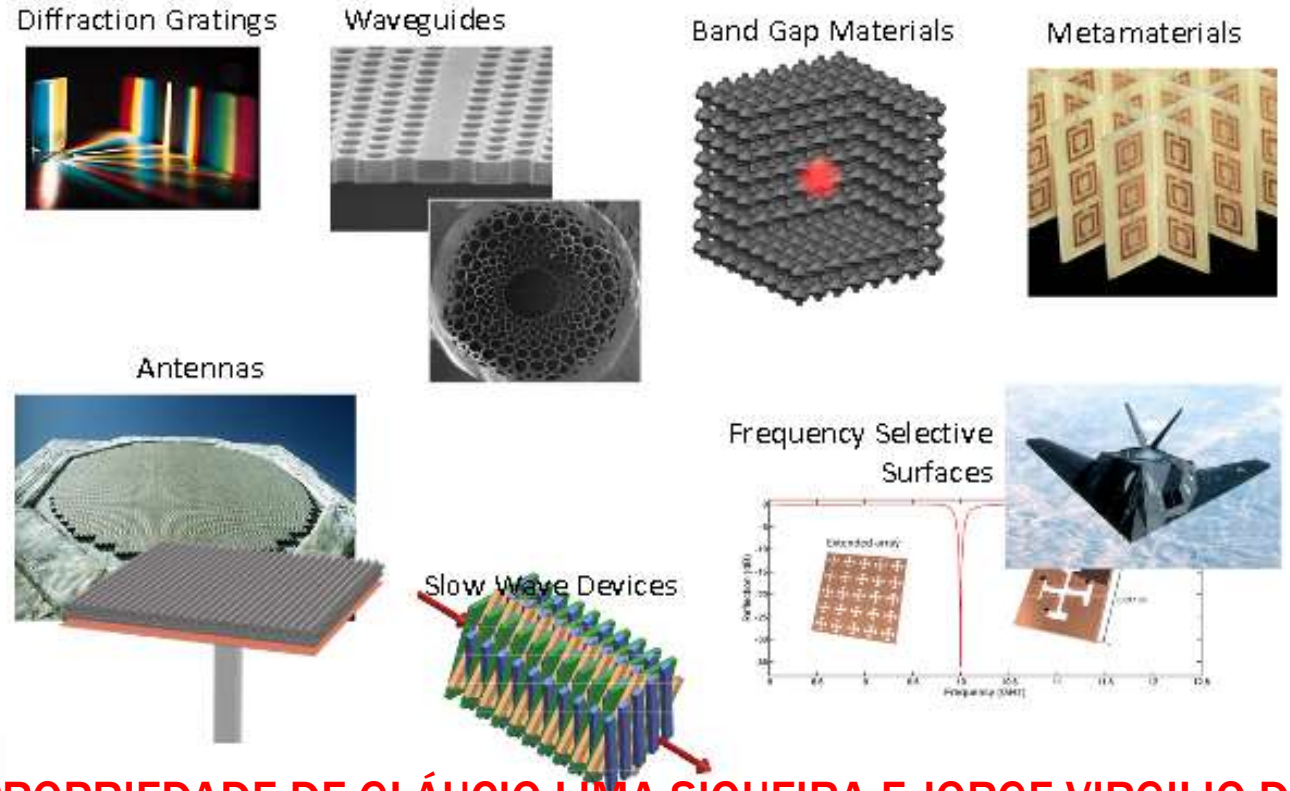
PROPRIEDADE DE GLÁUCIO LIMA SIQUEIRA E JORGE VIRGILIO DE ALMEIDA

Dispositivos periódicos

PROPRIEDADE DE GLÁUCIO LIMA SIQUEIRA E JORGE VIRGILIO DE ALMEIDA

Dispositivos periódicos

- Pelo menos desde o século XIX que os “comportamentos estranhos” na propagação de ondas eletromagnéticas devido a estruturas periódicas é estudado

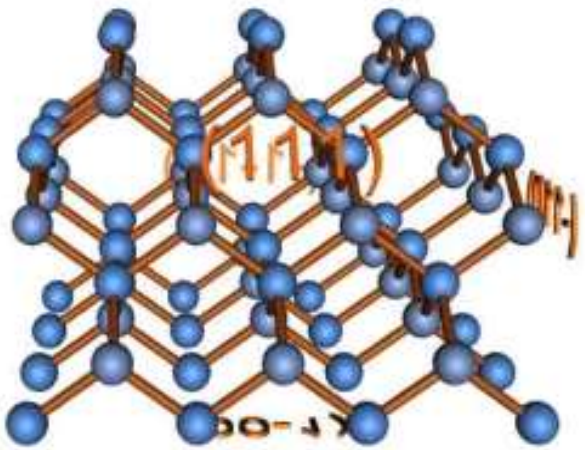


PROPRIEDADE DE GLÁUCIO LIMA SIQUEIRA E JORGE VIRGILIO DE ALMEIDA

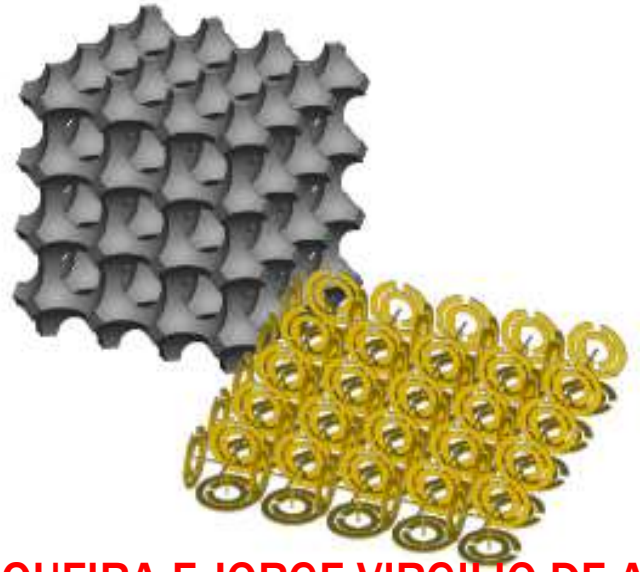
O que é uma estrutura periódica?

- Materiais naturais são periódicos na escala atômica
- Metamateriais são periódicos numa escala muito maior, mas menor que λ
- A matemática para descrever como as coisas são periódicas é a mesma tanto para escala atômica como para escalas mais largas

Periodicidade em escala atômica



Periodicidade em larga escala



PROPRIEDADE DE GLÁUCIO LIMA SIQUEIRA E JORGE VIRGILIO DE ALMEIDA

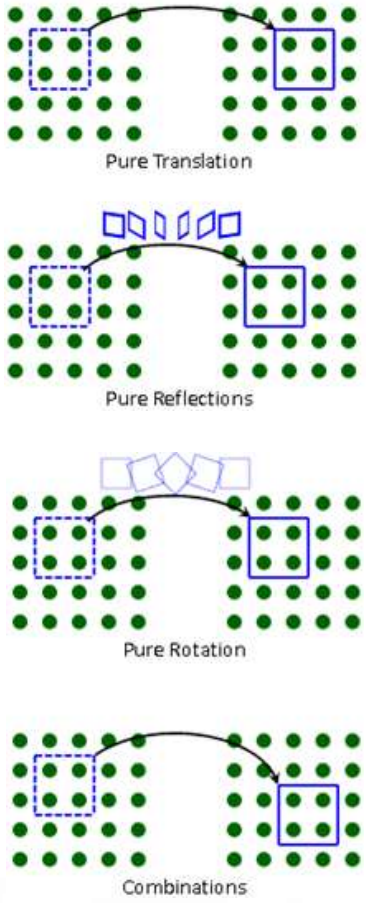
Descrevendo estruturas periódicas

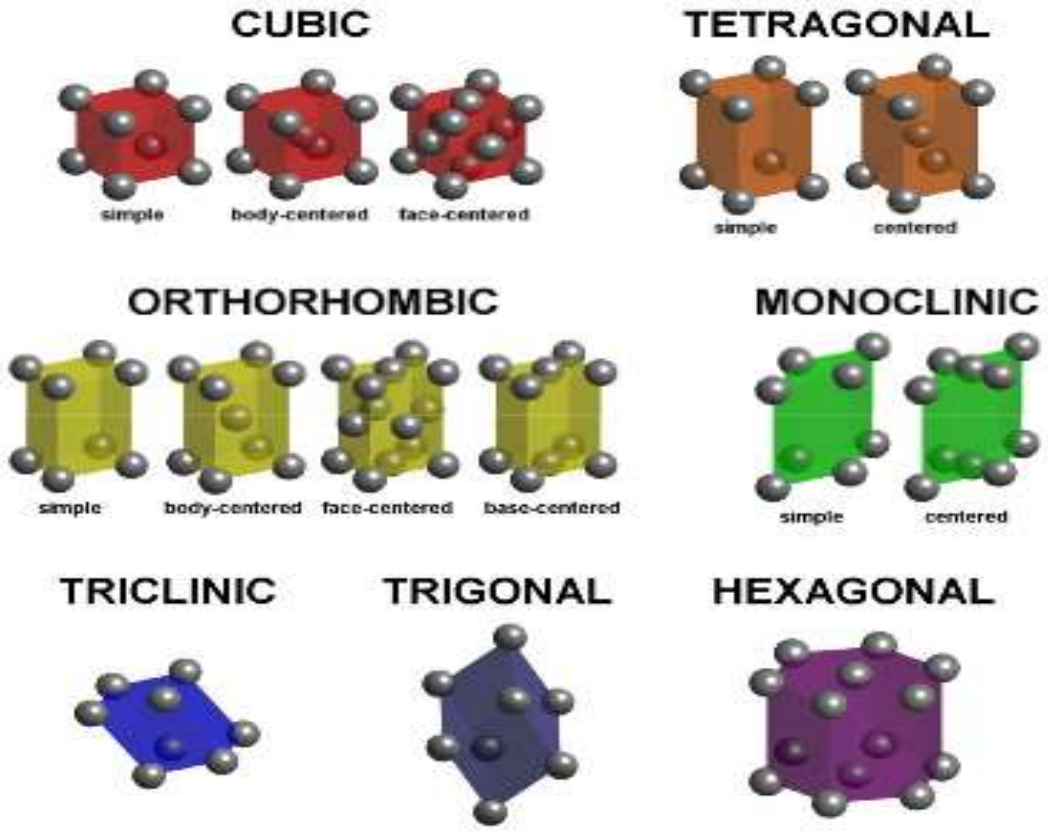
- Existe um número infinito de modos em que as estruturas podem ser periódicas
- Para classificá-las é necessário generalizações
- A classificação de estruturas periódicas pode ser dividida em:
  - 230 grupos espaciais
  - 32 classes de cristais
  - 14 redes de Bravais
  - 7 sistemas cristalinos

- **Grupos espaciais**
  Conjunto de todas as possíveis combinações de operações de simetria que restaura o cristal a ele próprio
- **Redes de Bravais**
  Conjunto de todos os possíveis modos de uma estrutura ser periódica se esferas idênticas forem colocadas nas pontas da rede
- **Sistema cristalino**
  Conjunto de todas as Redes de Bravais que possuem a mesma forma para a célula unitária convencional

PROPRIEDADE DE GLÁUCIO LIMA SIQUEIRA E JORGE VIRGILIO DE ALMEIDA

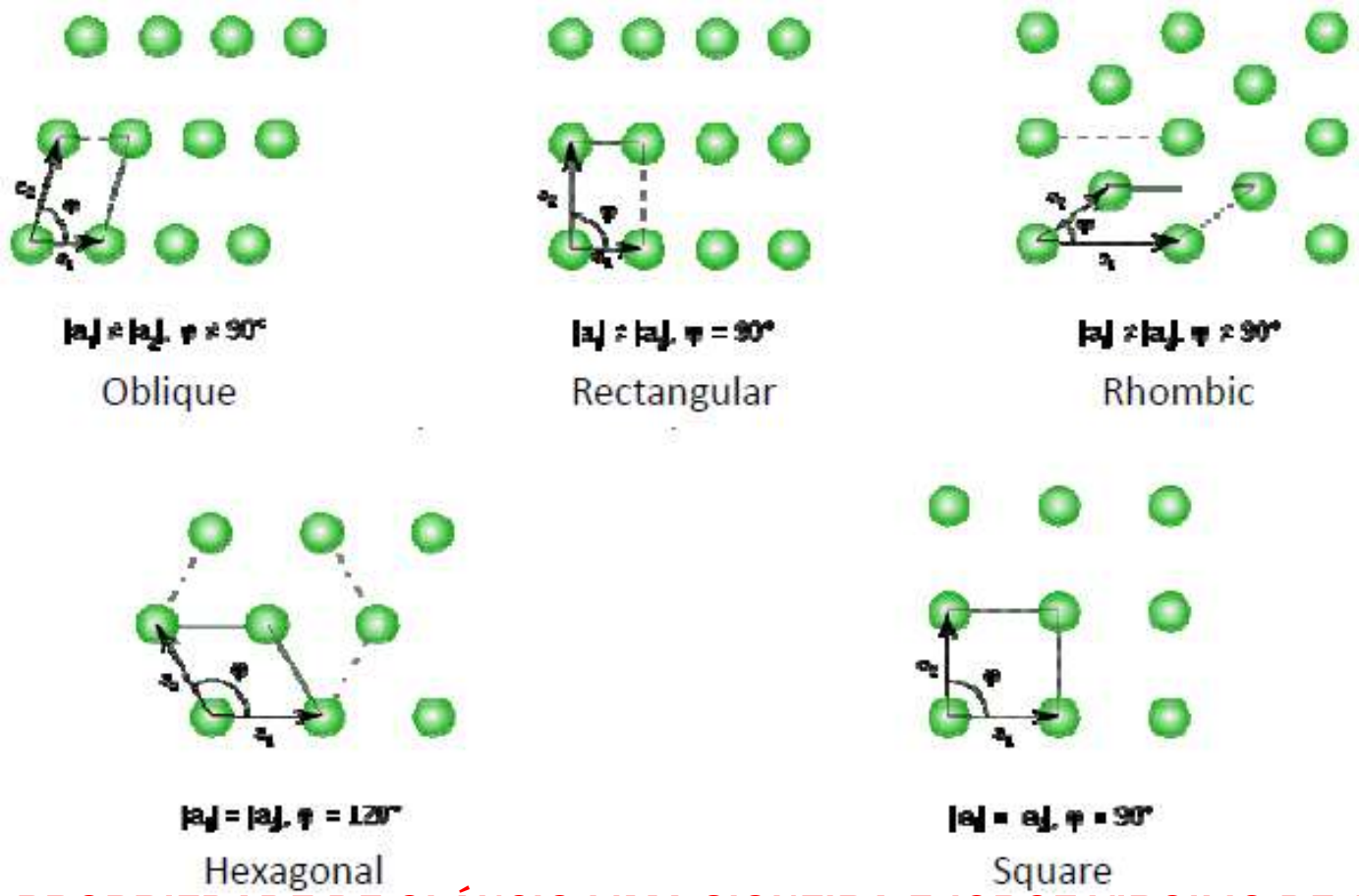
As 14 redes de Bravais e os 7 sistemas cristalinos





PROPRIEDADE DE GLÁUCIO LIMA SIQUEIRA E JORGE VIRGILIO DE ALMEIDA

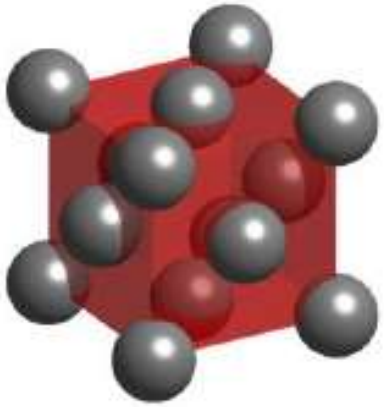
Redes de Bravais bi-dimensionais



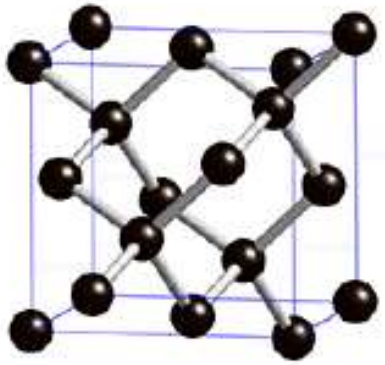
PROPRIEDADE DE GLÁUCIO LIMA SIQUEIRA E JORGE VIRGILIO DE ALMEIDA

Simetrias híbridas

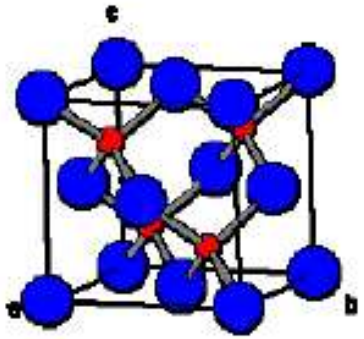
Simetria FCC



Diamante = FCC + FCC



Sulfeto de zinco

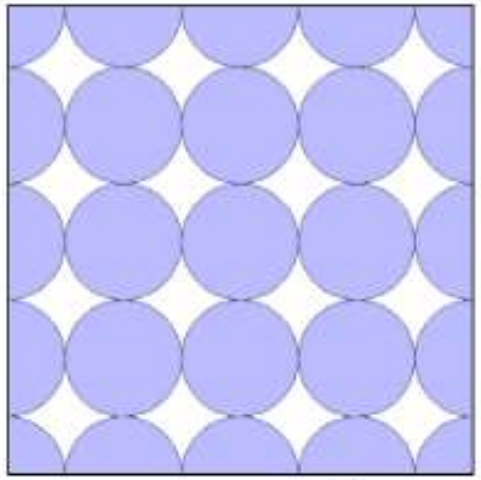


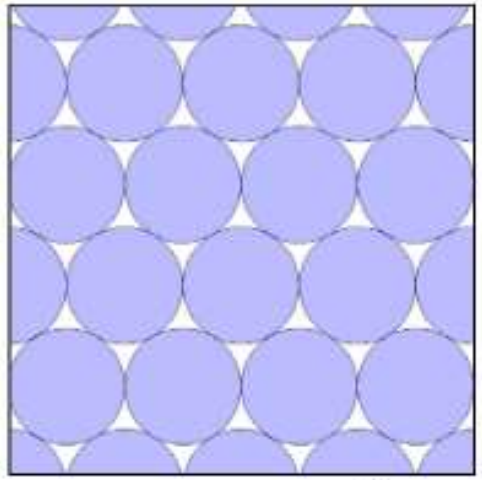
* GaAs

PROPRIEDADE DE GLÁUCIO LIMA SIQUEIRA E JORGE VIRGILIO DE ALMEIDA

A simetria hexagonal tem densidade de empacotamento ótima

- A resposta eletromagnética em um arranjo hexagonal tende a acontecer em frequências mais baixas em comparação com um arranjo quadrado
- Isso implica que para um arranjo hexagonal as estruturas podem ter dimensões maiores
- Crítico em altas frequências e em fotônica onde as dimensões são mais difíceis de se realizar
- Arranjos hexagonais possuem mais ressonâncias (mais simetrias)





$$f_{sq} = \pi \left(\frac{r}{a}\right)^2$$

$$\frac{f_{hex}}{f_{sq}} = \frac{2}{\sqrt{3}} = 1.1547$$

$$f_{hex} = \frac{2\pi}{\sqrt{3}} \left(\frac{r}{a}\right)^2$$

PROPRIEDADE DE GLÁUCIO LIMA SIQUEIRA E JORGE VIRGILIO DE ALMEIDA

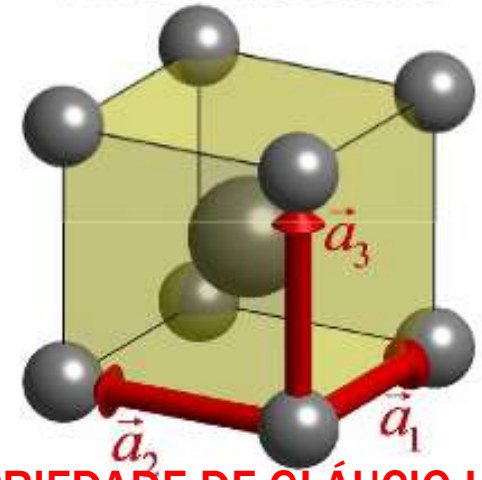
Descrição matemática de estruturas periódicas

PROPRIEDADE DE GLÁUCIO LIMA SIQUEIRA E JORGE VIRGILIO DE ALMEIDA

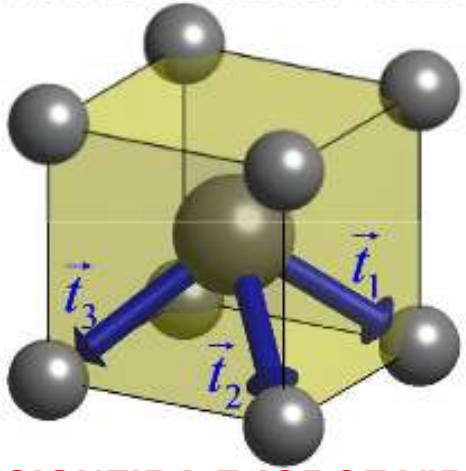
Vetores Primitivos da Rede

- Os **vetores axiais primitivos** definem a forma e a orientação da célula unitária e são capazes de descrever de modo inequívoco os 7 sistemas cristalinos
- Para descrever de forma inequívoca as 14 redes de Bravais, é necessário definir os **vetores de translação primitivos** que conectam quaisquer dois pontos da rede
- Os vetores de rede primitivos definem o conjunto com os menores vetores capazes de descrever a célula unitária da rede.

vetores axiais primitivos



vetores de translação primitivos



PROPRIEDADE DE GLÁUCIO LIMA SIQUEIRA E JORGE VIRGILIO DE ALMEIDA

Axiais → Translação

Simple

$$\begin{bmatrix} \vec{f}_1 \\ \vec{f}_2 \\ \vec{f}_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \vec{a}_1 \\ \vec{a}_2 \\ \vec{a}_3 \end{bmatrix}$$

Body-Centered

$$\begin{bmatrix} \vec{f}_1 \\ \vec{f}_2 \\ \vec{f}_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -1/2 & 1/2 & 1/2 \\ 1/2 & -1/2 & 1/2 \\ 1/2 & 1/2 & -1/2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \vec{a}_1 \\ \vec{a}_2 \\ \vec{a}_3 \end{bmatrix}$$

Face-Centered

$$\begin{bmatrix} \vec{f}_1 \\ \vec{f}_2 \\ \vec{f}_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & 1/2 & 1/2 \\ 1/2 & 0 & 1/2 \\ 1/2 & 1/2 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \vec{a}_1 \\ \vec{a}_2 \\ \vec{a}_3 \end{bmatrix}$$

Base-Centered

$$\begin{bmatrix} \vec{f}_1 \\ \vec{f}_2 \\ \vec{f}_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -1/2 & 1/2 & 0 \\ 1/2 & 1/2 & 0 \\ 0 & 0 & 1/2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \vec{a}_1 \\ \vec{a}_2 \\ \vec{a}_3 \end{bmatrix}$$

Trigonal

$$\begin{bmatrix} \vec{f}_1 \\ \vec{f}_2 \\ \vec{f}_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 1/3 & 1/3 \\ -1/3 & 1/3 & 1/3 \\ -1/3 & -1 & 1/3 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \vec{a}_1 \\ \vec{a}_2 \\ \vec{a}_3 \end{bmatrix}$$

PROPRIEDADE DE GLÁUCIO LIMA SIQUEIRA E JORGE VIRGILIO DE ALMEIDA

Vetores de rede não primitivos

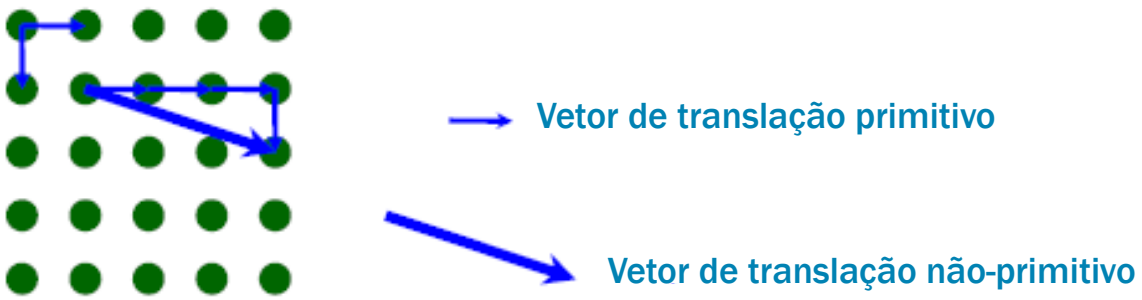
- Quando falamos em “vetores de rede” sempre nos referimos aos vetores de translação e não aos vetores axiais
- Um vetor de translação é qualquer vetor que conecta dois pontos da rede. Eles devem ser uma combinação linear inteira dos vetores de translação primitivos

$$\vec{t}_{pqr} = p\vec{t}_1 + q\vec{t}_2 + r\vec{t}_3$$

$$p = \cdots, -2, -1, 0, 1, 2, \cdots$$

$$q = \cdots, -2, -1, 0, 1, 2, \cdots$$

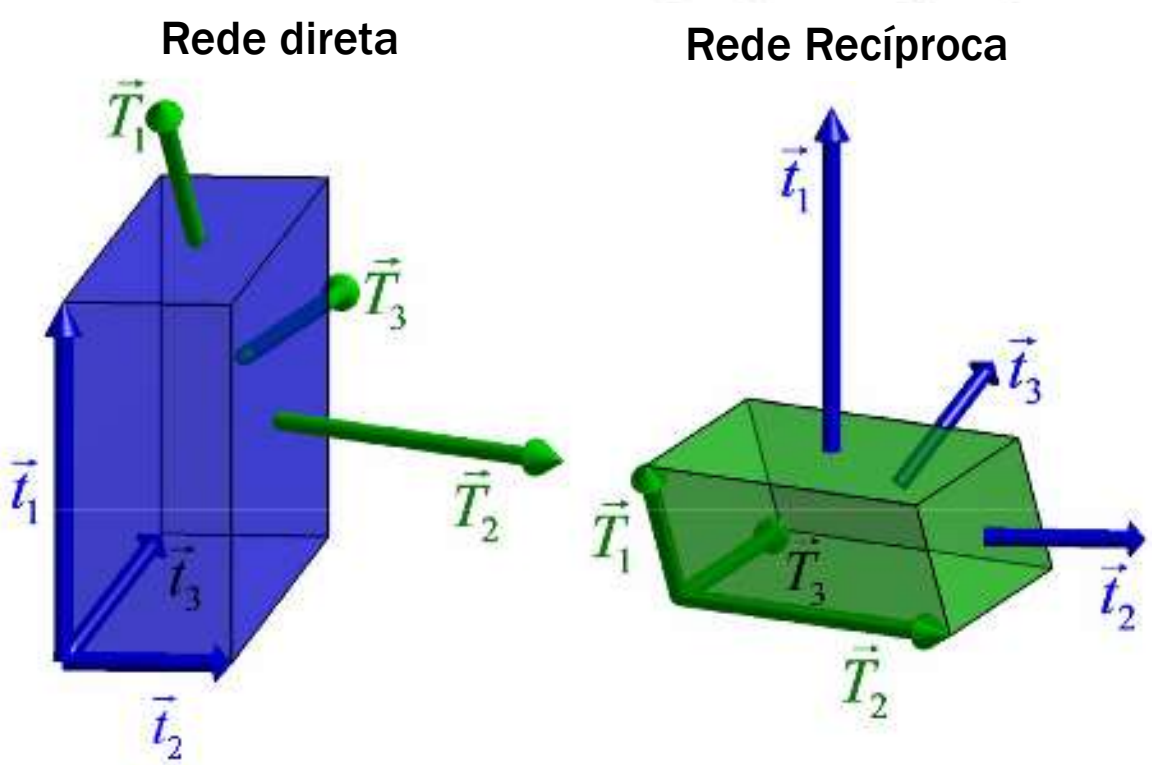
$$r = \cdots, -2, -1, 0, 1, 2, \cdots$$



PROPRIEDADE DE GLÁUCIO LIMA SIQUEIRA E JORGE VIRGILIO DE ALMEIDA

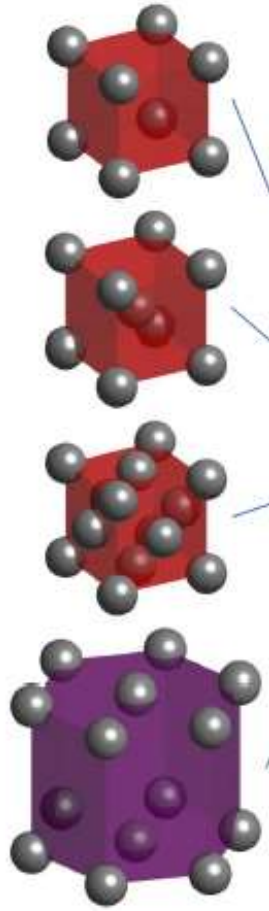
Redes direta e recíproca

- Toda rede possui uma rede recíproca única!

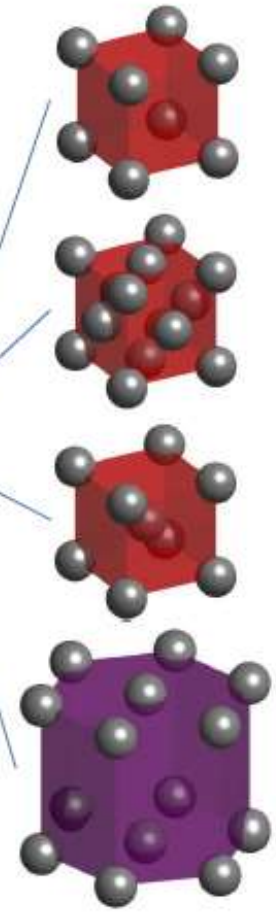


PROPRIEDADE DE GLÁUCIO LIMA SIQUEIRA E JORGE VIRGILIO DE ALMEIDA

Redes recíprocas



Direct Lattice	Reciprocal Lattice
Simple Cubic	Simple Cubic
Body-Centered Cubic	Face-Centered Cubic
Face-Centered Cubic	Body-Centered Cubic
Hexagonal	Hexagonal



PROPRIEDADE DE GLÁUCIO LIMA SIQUEIRA E JORGE VIRGILIO DE ALMEIDA

Vetores da rede recíproca para redes 3D

- Os vetores primitivos da rede recíproca podem ser calculados (e vice-versa) a partir dos vetores primitivos da rede direta:

$$\vec{T}_1 = 2\pi \frac{\vec{t}_2 \times \vec{t}_3}{\vec{t}_1 \bullet \left(\vec{t}_2 \times \vec{t}_3\right)} \qquad \vec{T}_2 = 2\pi \frac{\vec{t}_3 \times \vec{t}_1}{\vec{t}_1 \bullet \left(\vec{t}_2 \times \vec{t}_3\right)} \qquad \vec{T}_3 = 2\pi \frac{\vec{t}_1 \times \vec{t}_2}{\vec{t}_1 \bullet \left(\vec{t}_2 \times \vec{t}_3\right)}$$

$$\vec{t}_1 = 2\pi \frac{\vec{T}_2 \times \vec{T}_3}{\vec{T}_1 \bullet \left(\vec{T}_2 \times \vec{T}_3\right)} \qquad \vec{t}_2 = 2\pi \frac{\vec{T}_3 \times \vec{T}_1}{\vec{T}_1 \bullet \left(\vec{T}_2 \times \vec{T}_3\right)} \qquad \vec{t}_3 = 2\pi \frac{\vec{T}_1 \times \vec{T}_2}{\vec{T}_1 \bullet \left(\vec{T}_2 \times \vec{T}_3\right)}$$

- Todo vetor da rede recíproca pode ser determinado como uma combinação linear inteira de primitivos

$$\vec{T}_{PQR} = P\vec{T}_1 + Q\vec{T}_2 + R\vec{T}_3$$

$$P = \cdots, -2, -1, 0, 1, 2, \cdots$$
$$Q = \cdots, -2, -1, 0, 1, 2, \cdots$$
$$R = \cdots, -2, -1, 0, 1, 2, \cdots$$

PROPRIEDADE DE GLÁUCIO LIMA SIQUEIRA E JORGE VIRGILIO DE ALMEIDA

Para redes 2D

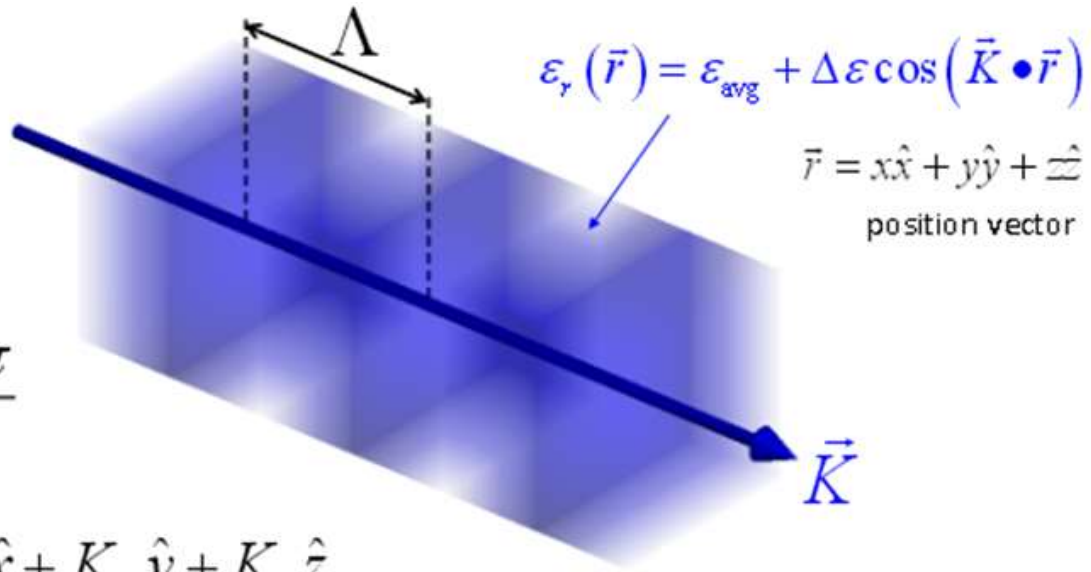
$$\vec{T}_1 = \frac{2\pi}{\left|\vec{t}_1 \times \vec{t}_2\right|}\begin{bmatrix} t_{2,y} \\ -t_{2,x} \end{bmatrix} \qquad \vec{T}_2 = \frac{2\pi}{\left|\vec{t}_1 \times \vec{t}_2\right|}\begin{bmatrix} -t_{1,y} \\ t_{1,x} \end{bmatrix}$$

$$\vec{t}_1 = \frac{2\pi}{\left|\vec{T}_1 \times \vec{T}_2\right|}\begin{bmatrix} T_{2,y} \\ -T_{2,x} \end{bmatrix} \qquad \vec{t}_2 = \frac{2\pi}{\left|\vec{T}_1 \times \vec{T}_2\right|}\begin{bmatrix} -T_{1,y} \\ T_{1,x} \end{bmatrix}$$

PROPRIEDADE DE GLÁUCIO LIMA SIQUEIRA E JORGE VIRGILIO DE ALMEIDA

Vetor de rede

- O vetor de rede (grating vector) é definido no sentido dos planos de índice de refração constante, sua magnitude é 2π dividido pelo parâmetro de periodicidade Λ, que é a distância entre os planos do espaço recíproco



$$|\vec{K}| = \frac{2\pi}{\Lambda}$$

$$\vec{K} = K_x\hat{x} + K_y\hat{y} + K_z\hat{z}$$

Devido a essa "equivalência" entre os vetores da rede recíproca e o vetor de onda, as estruturas periódicas são sempre analisadas no seu espaço recíproco!

$$\vec{T}_a \rightarrow \vec{K}_a = \frac{2\pi}{\Lambda_a}$$

PROPRIEDADE DE GLÁUCIO LIMA SIQUEIRA E JORGE VIRGILIO DE ALMEIDA

Índices de Miller

- Os índices de Miller identificam planos repetitivos dentro da estrutura periódico como de um cristal

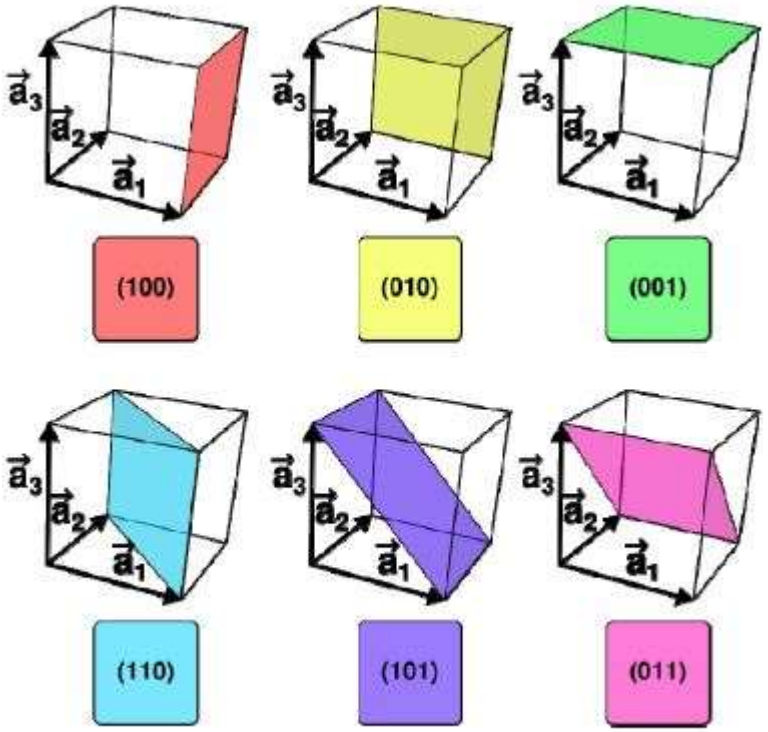
- Lembrando da definição de um vetor da rede recíproca:

$$\vec{T}_{PQR} = P\vec{T}_1 + Q\vec{T}_2 + R\vec{T}_3$$

- *P*, *Q* e *R* são chamados índices de Miller

  dos planos descritos pelo vetor da rede

  recíproca $\vec{T}_{PQR}$: $\langle PQR \rangle$

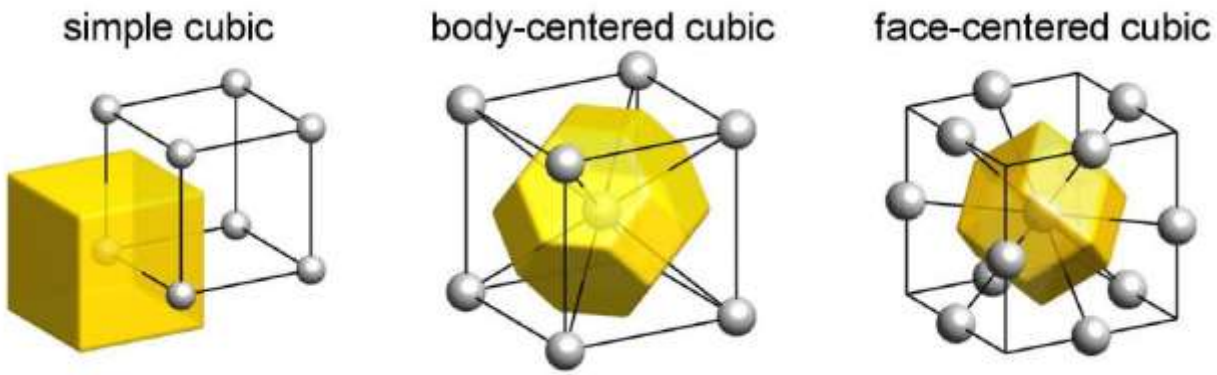


PROPRIEDADE DE GLÁUCIO LIMA SIQUEIRA E JORGE VIRGILIO DE ALMEIDA

Células unitárias primitivas

- Células unitárias primitivas são o menor volume do espaço que reproduz a rede completamente, sem vazios ou superposições

- Pelo método Wigner-Seitz, ele é definido como o volume de espaço ao redor de um único "átomo" da rede (pontos) cujos pontos estão mais próximos deste átomo do que de qualquer outro

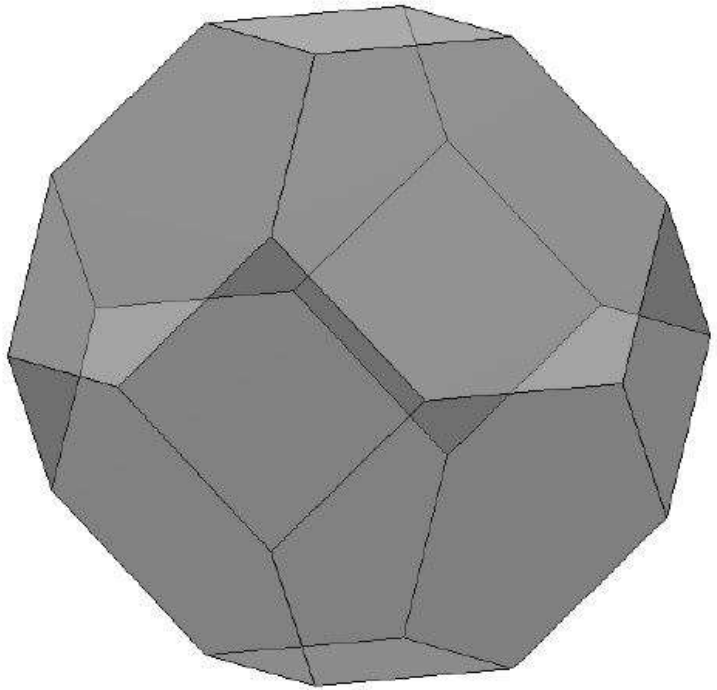


- Vemos acima a relação entre as redes unitárias convencionais (frames) e as células de Wigner-Seitz (volumes) para as redes cúbicas

PROPRIEDADE DE GLÁUCIO LIMA SIQUEIRA E JORGE VIRGILIO DE ALMEIDA

Zonas de Brillouin

- Zonas de Brillouin são as células unitárias primitivas da rede recíproca



Zona de Brillouin da rede FCC

Esta é a mais “esférica” das zonas de Brillouin periódicas e por isto a FCC é dita ter a maior simetria das redes de Bravais

Dentre as redes FCC, a do diamante tem a mais alta simetria

Octaedro truncado com 14 faces.

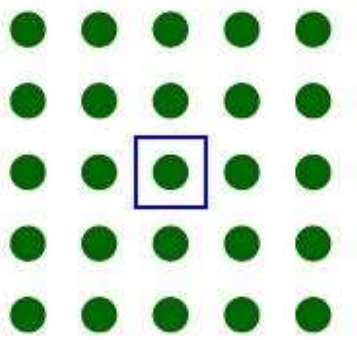
PROPRIEDADE DE GLÁUCIO LIMA SIQUEIRA E JORGE VIRGILIO DE ALMEIDA

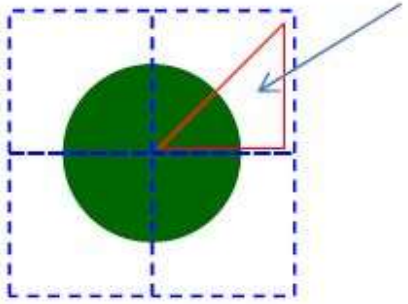
Zona de Brillouin irredutível

- Se o campo for conhecido em todos os pontos da célula unitária então ele será conhecido em toda a rede, pois o campo assume a mesma simetria da rede apenas se repetindo

- Como a rede recíproca define univocamente a rede direta, conhecendo a solução da equação de onda dentro da célula unitária recíproca, conheceremos o campo em toda a rede recíproca

- Muitas vezes ainda existe simetria para ser explorada e o volume de espaço que descreve completamente a onda eletromagnética pode ser menor do que a célula unitária. Esta região é chamada Zona de Brillouin Irredutível



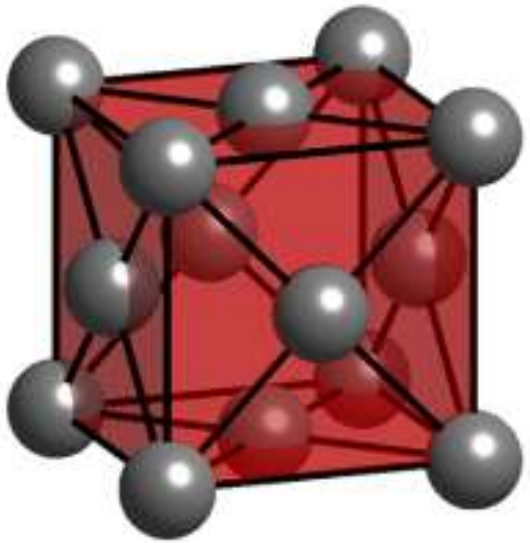


Devido à simetria deste exemplo, o campo em qualquer ponto da rede pode ser mapeado a um ponto equivalente no triângulo.

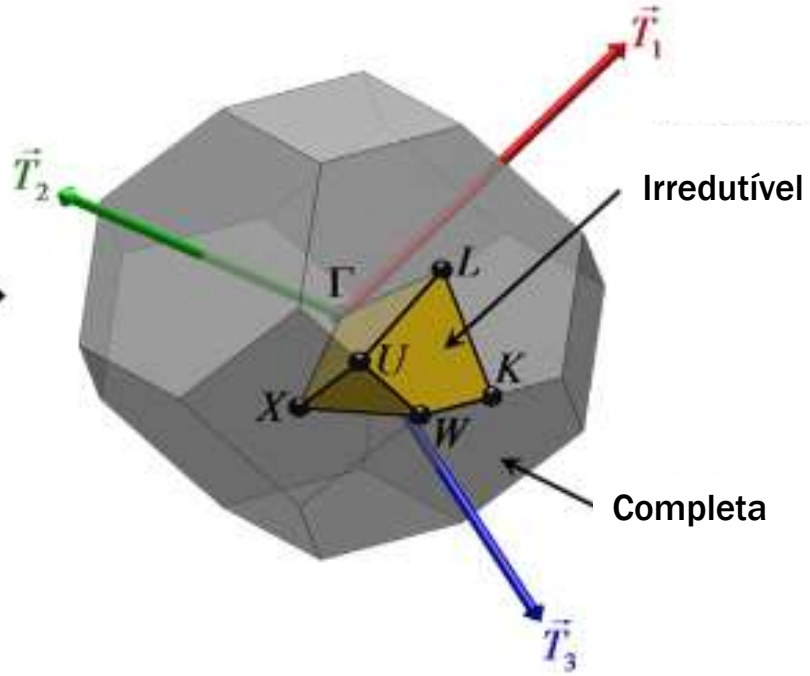
PROPRIEDADE DE GLÁUCIO LIMA SIQUEIRA E JORGE VIRGILIO DE ALMEIDA

Exemplo 1

Rede FCC

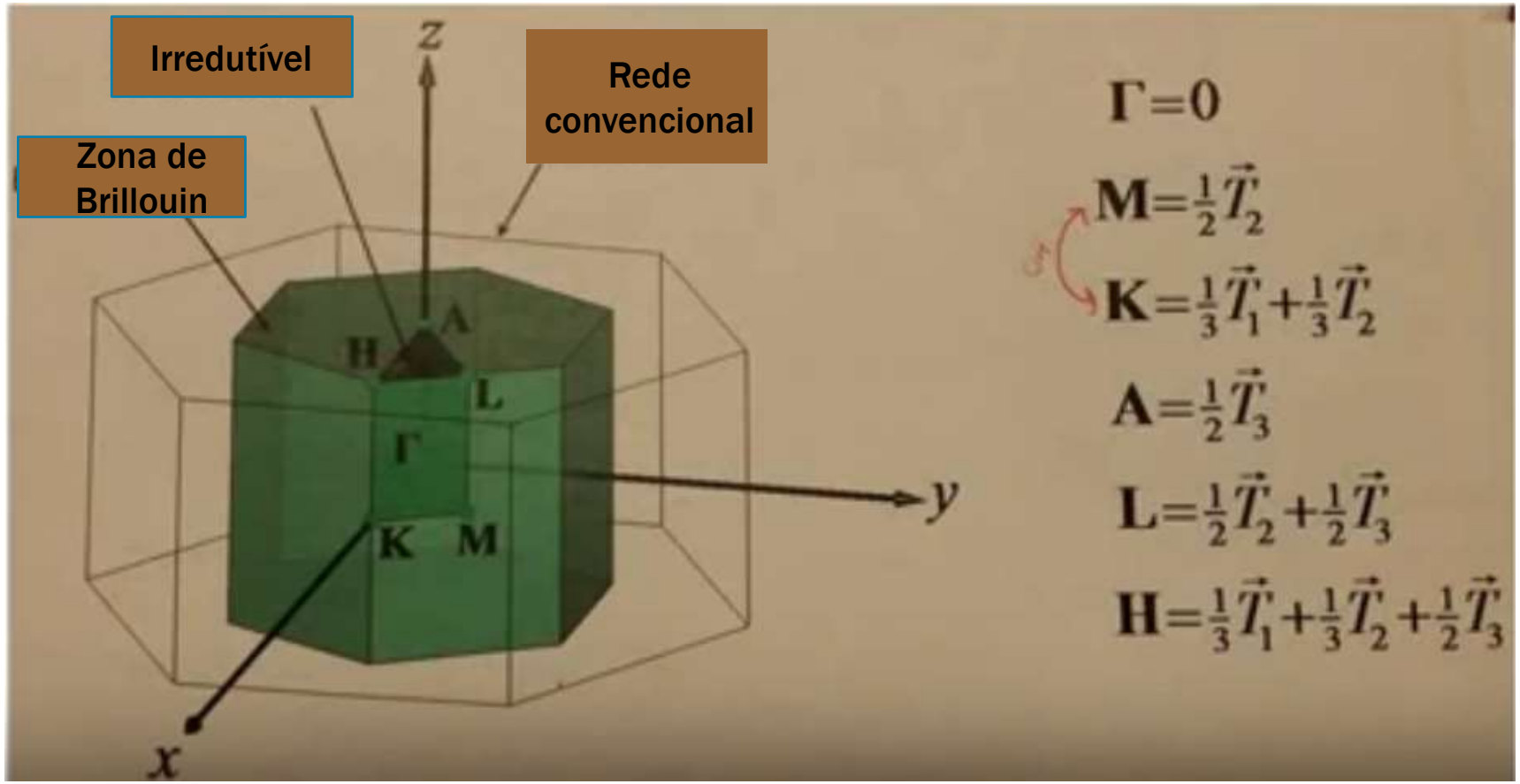


Zona de Brillouin



PROPRIEDADE DE GLÁUCIO LIMA SIQUEIRA E JORGE VIRGILIO DE ALMEIDA

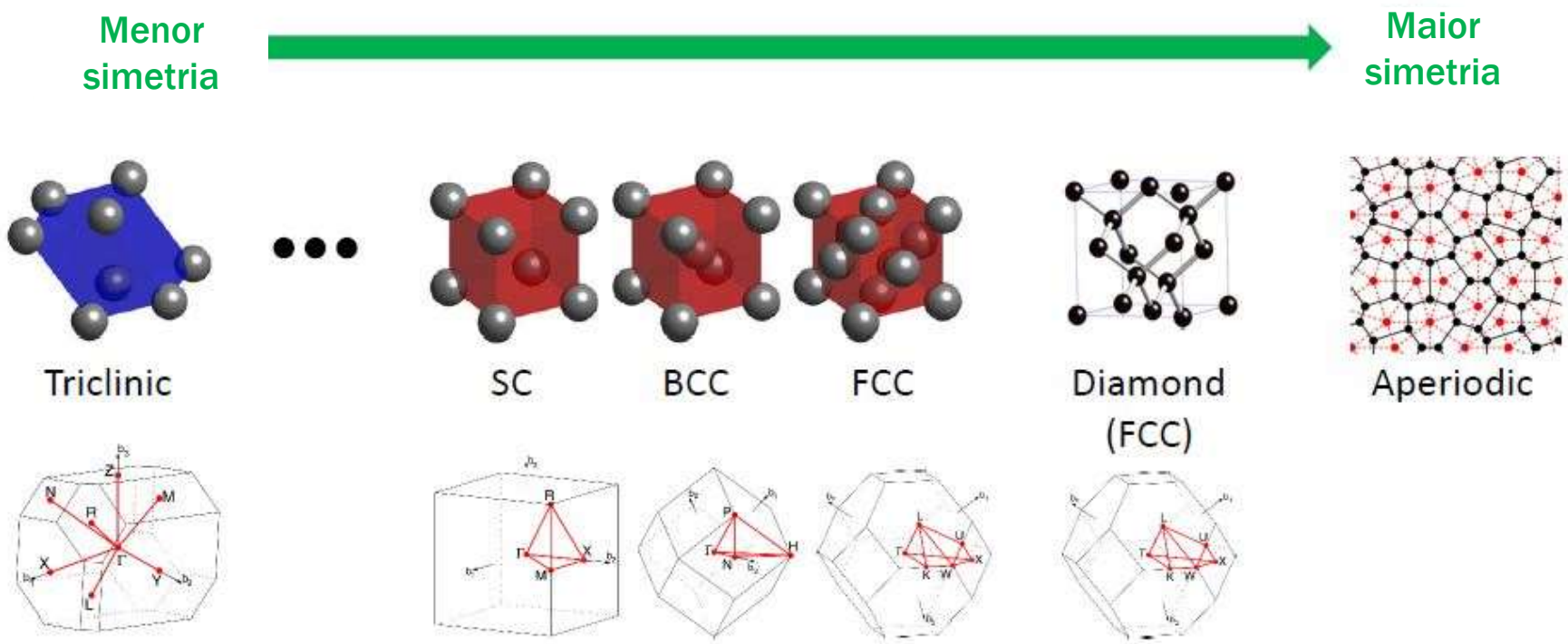
Exemplo 2



PROPRIEDADE DE GLÁUCIO LIMA SIQUEIRA E JORGE VIRGILIO DE ALMEIDA

Graus de simetria

- O grau de simetria se refere ao quão “esférica” é a Zona de Brillouin



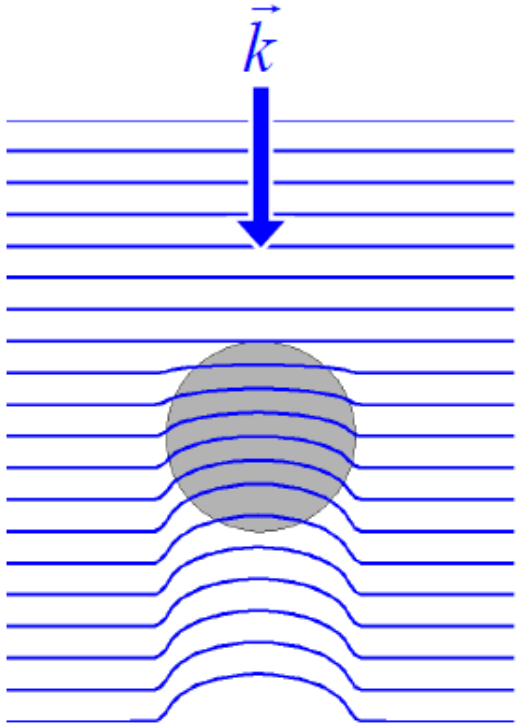
PROPRIEDADE DE GLÁUCIO LIMA SIQUEIRA E JORGE VIRGILIO DE ALMEIDA

Ondas eletromagnéticas em estruturas periódicas

PROPRIEDADE DE GLÁUCIO LIMA SIQUEIRA E JORGE VIRGILIO DE ALMEIDA

Campos são perturbados pelos objetos

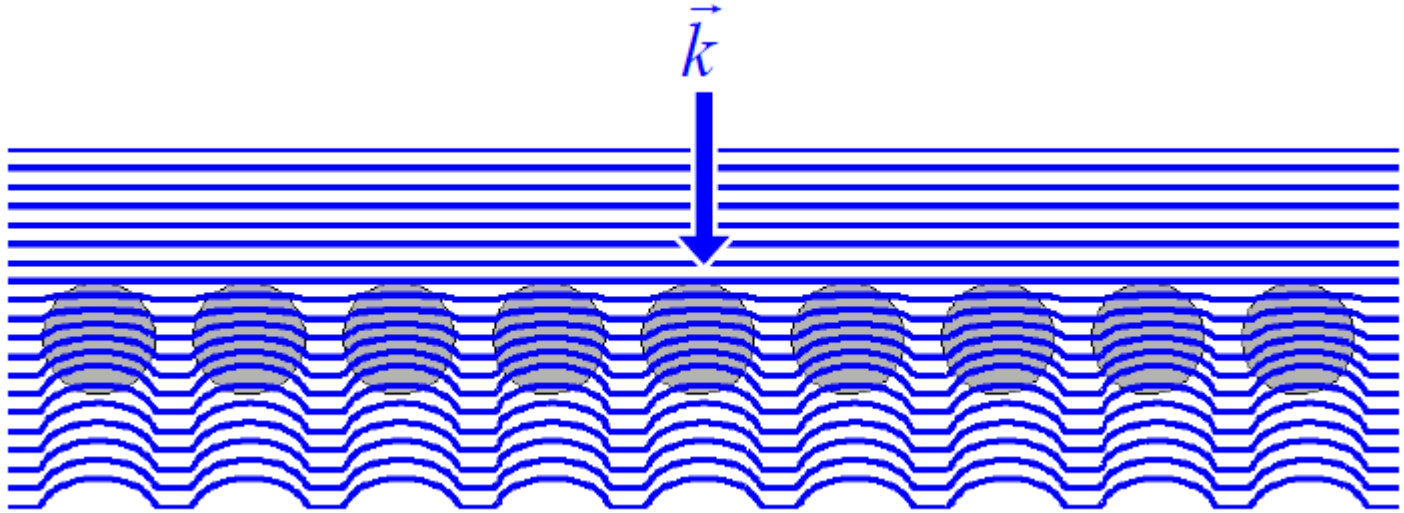
- Uma porção da frente de onda é atrasada após passar através do objeto dielétrico



PROPRIEDADE DE GLÁUCIO LIMA SIQUEIRA E JORGE VIRGILIO DE ALMEIDA

Campos em estruturas periódicas

Ondas em estruturas periódicas adquirem a mesma periodicidade da estrutura



PROPRIEDADE DE GLÁUCIO LIMA SIQUEIRA E JORGE VIRGILIO DE ALMEIDA

Teorema de Bloch

- Uma onda EM propagando-se em um meio periódico podem ser descrita como ondas de Bloch dentro das zonas de Brillouin

- **Teorema de Bloch:**

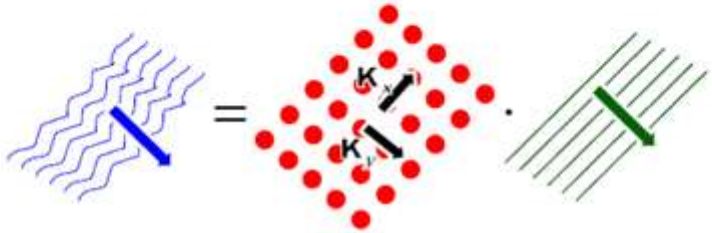
  - O campo da onda é dada por uma base de autoenergias de Bloch

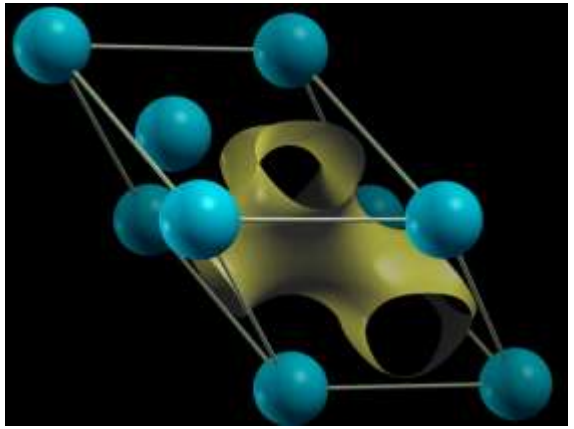
$$\vec{E}(\vec{r}) = \vec{A}(\vec{r})\, e^{j\vec{\beta}\bullet\vec{r}}$$

Campo total

Amplitude da envoltória com a mesma periodicidade e simetria da rede

Onda plana



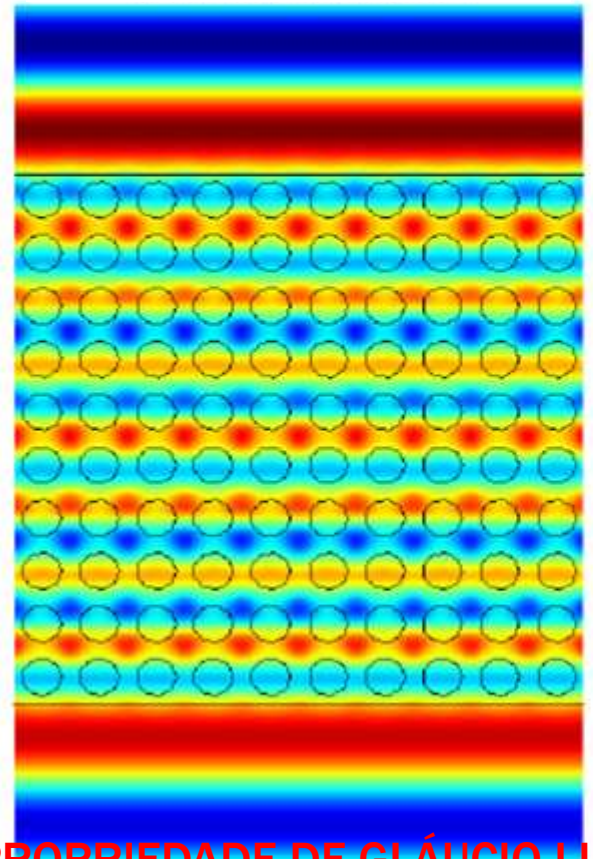


Superfície equipotencial de uma onda de Bloch

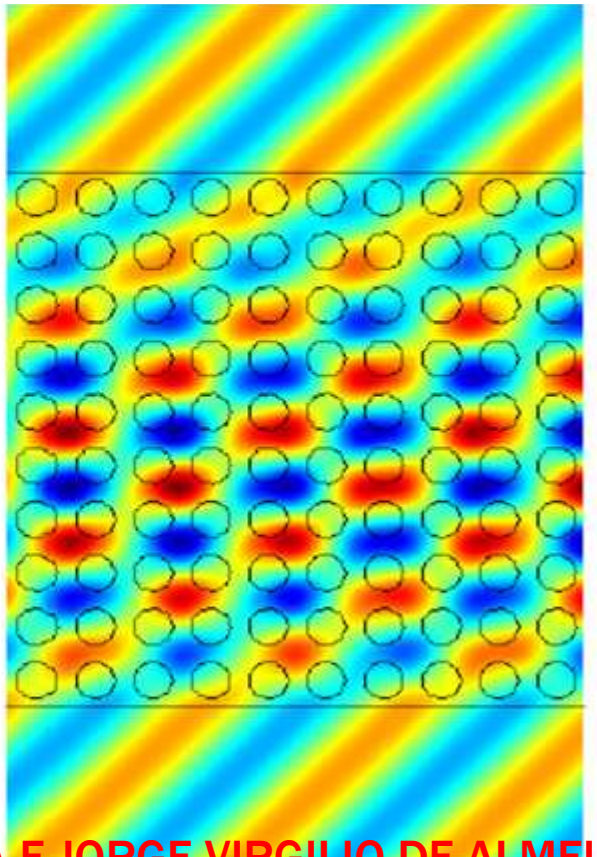
PROPRIEDADE DE GLÁUCIO LIMA SIQUEIRA E JORGE VIRGILIO DE ALMEIDA

Exemplos de ondas numa rede periódica

Onda normalmente incidente
numa estrutura periódica



Onda incidente à 45 graus
na mesma estrutura periódica



PROPRIEDADE DE GLÁUCIO LIMA SIQUEIRA E JORGE VIRGILIO DE ALMEIDA

Descrição matemática da periodicidade

- Uma estrutura é periódica se suas propriedades materiais se repetem. Dada a rede de vetores, a periodicidade é expressa como:

$$\varepsilon\left(\vec{r}+\vec{t}_{pqr}\right)=\varepsilon\left(\vec{r}\right) \qquad \vec{t}_{pqr}=p\vec{t}_1+q\vec{t}_2+r\vec{t}_3$$

- Lembre-se que é a amplitude da onda de Block que tem a mesma periodicidade da estrutura em que a onda está. Assim:

$$A\left(\vec{r}+\vec{t}_{pqr}\right)=A\left(\vec{r}\right) \qquad \vec{t}_{pqr}=p\vec{t}_1+q\vec{t}_2+r\vec{t}_3$$

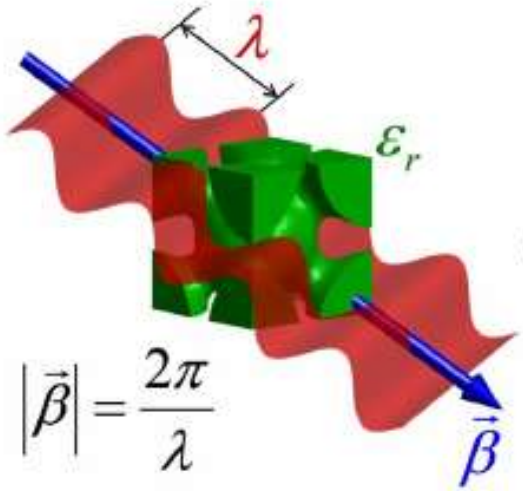
PROPRIEDADE DE GLÁUCIO LIMA SIQUEIRA E JORGE VIRGILIO DE ALMEIDA

Bandas eletromagnéticas

PROPRIEDADE DE GLÁUCIO LIMA SIQUEIRA E JORGE VIRGILIO DE ALMEIDA

Diagramas de banda (I)

- Diagramas de banda são um meio compacto mas incompleto de caracterizar as propriedades eletromagnéticas de uma estrutura periódica. Ela é essencialmente um mapa das frequências dos auto-modos em função do vetor de onda de Bloch $\vec{\beta}$



Solução de Problema de autovalor

$$\nabla \times \frac{1}{\varepsilon_r} \nabla \times \vec{H} = k_0^2 \vec{H}$$

$k^2_{0,i,\vec{\beta}} \equiv$ autovalor

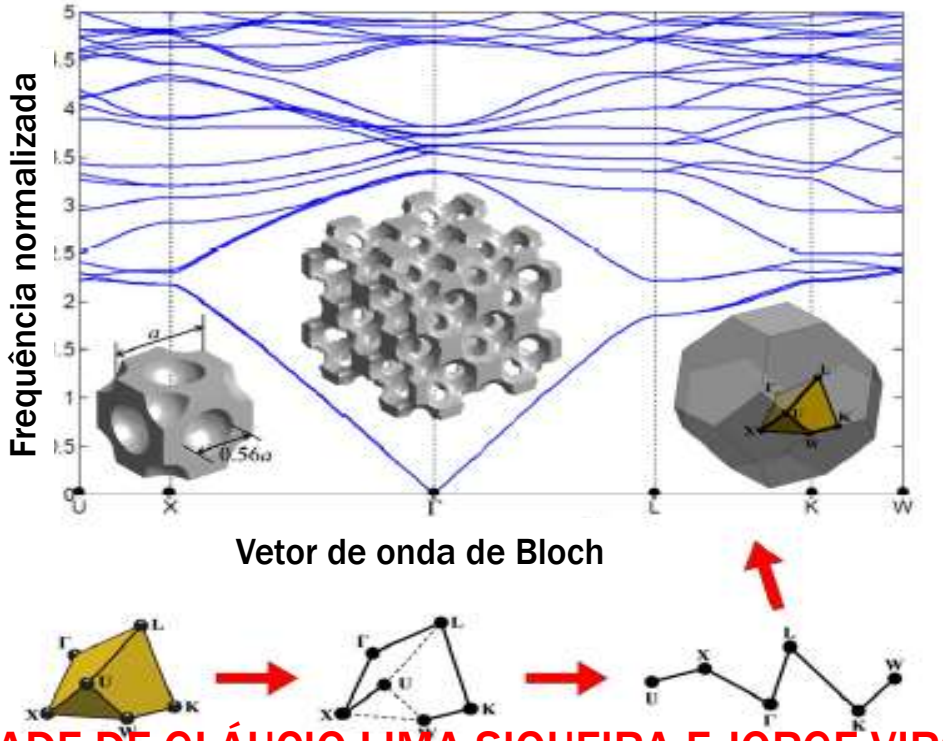
$\vec{H}_{i,\vec{\beta}} \equiv$ autovetor

$i = 1 \ldots \infty$

PROPRIEDADE DE GLÁUCIO LIMA SIQUEIRA E JORGE VIRGILIO DE ALMEIDA

Diagramas de banda (II)

- Para construir um diagrama de banda, consideramos pequenos deslocamentos no perímetro da Zona de Brillouin Irredutível (IBZ) e calculamos os autovalores em cada passo. Quando fazemos o gráfico de todos os autovalores como uma função de β, os pontos se alinham para formar "bandas" contínuas



PROPRIEDADE DE GLÁUCIO LIMA SIQUEIRA E JORGE VIRGILIO DE ALMEIDA

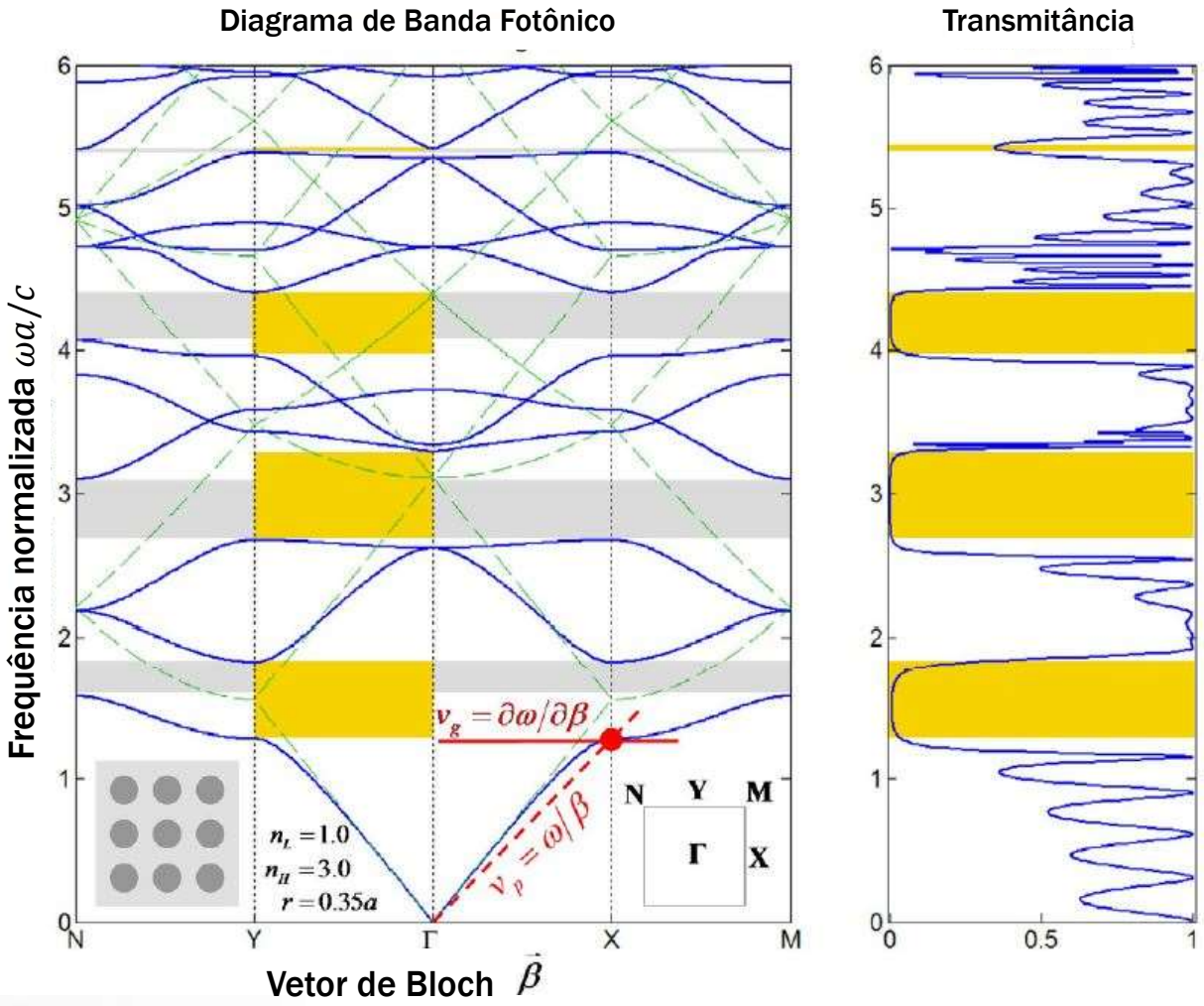
Lendo diagrama de banda (I)

- Pelo menos cinco propriedades eletromagnéticas podem ser estimadas de um diagrama de banda:

1. **Espaço de banda**
   - Ausência de qualquer banda dentro de uma faixa de frequências indica ausência de banda
   - Um ESPAÇO DE BANDA COMPLETO é aquele que existe em todos os possíveis vetores de onda de Bloch
2. **Espectro de Transmissão/Reflexão**
   - Espaço de Banda leva à supressão de transmisão e aumento da reflexão
3. **Velocidade de fase**
   - Inclinação da reta que liga Γ a qualquer ponto na banda $\longrightarrow$ $n_{p,efetivo}$
4. **Velocidade de grupo**
   - Inclinação da banda no ponto de interesse $\longrightarrow$ $n_{g,efetivo}$
5. **Dispersão**
   - Toda vez que a banda desvia de uma linha reta existe dispersão

PROPRIEDADE DE GLÁUCIO LIMA SIQUEIRA E JORGE VIRGILIO DE ALMEIDA

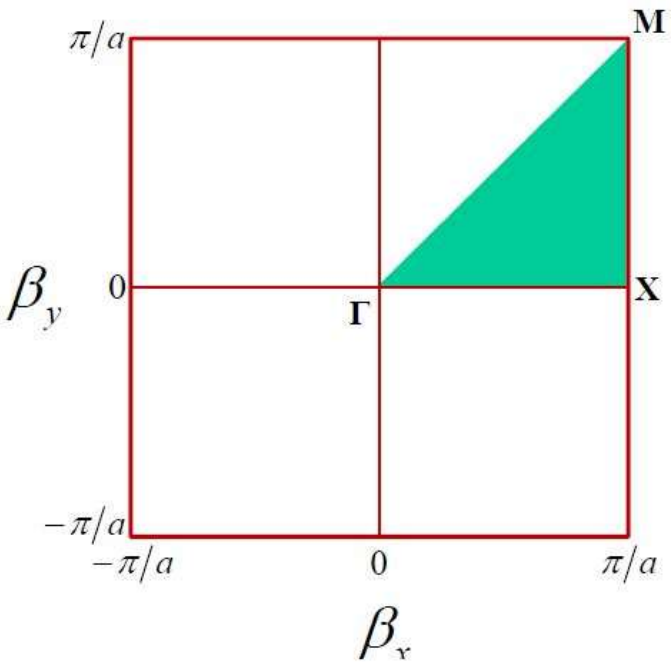
Lendo diagrama de banda (II)

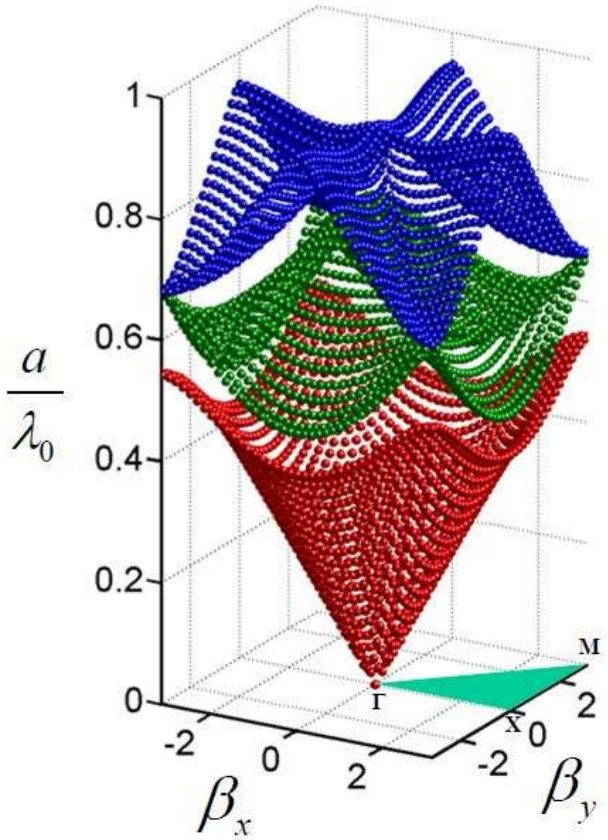


PROPRIEDADE DE GLÁUCIO LIMA SIQUEIRA E JORGE VIRGILIO DE ALMEIDA

Diagrama de banda completo

- Zona de Brillouin completa





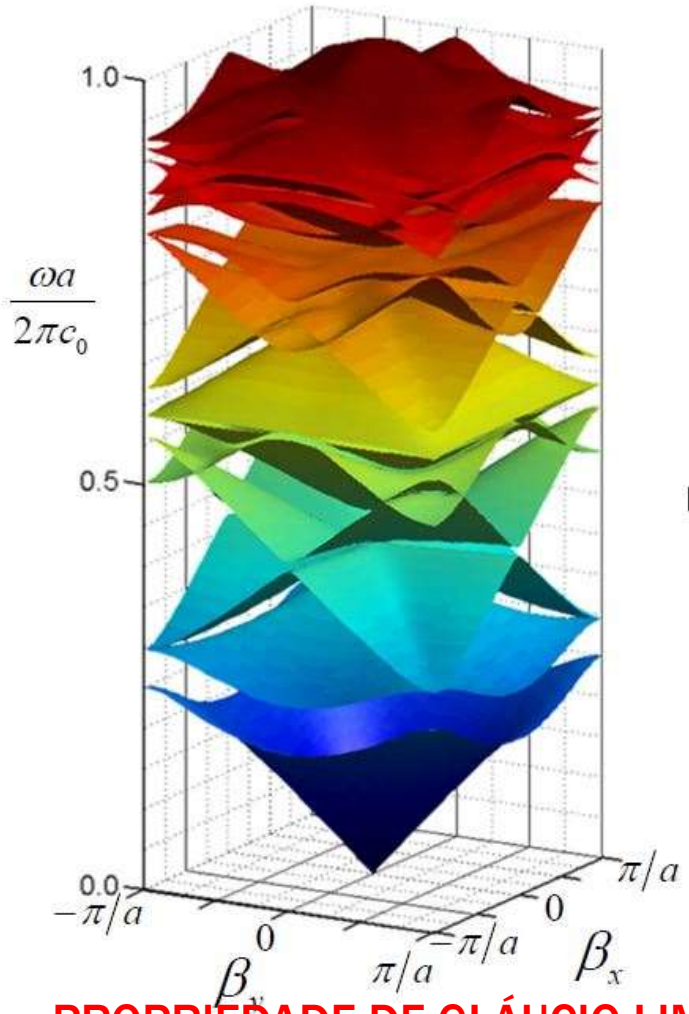
Existe um conjunto infinito de autofrequências associadas com cada ponto da zona de Brillouin. Eles formam “superfícies” como mostrado acima

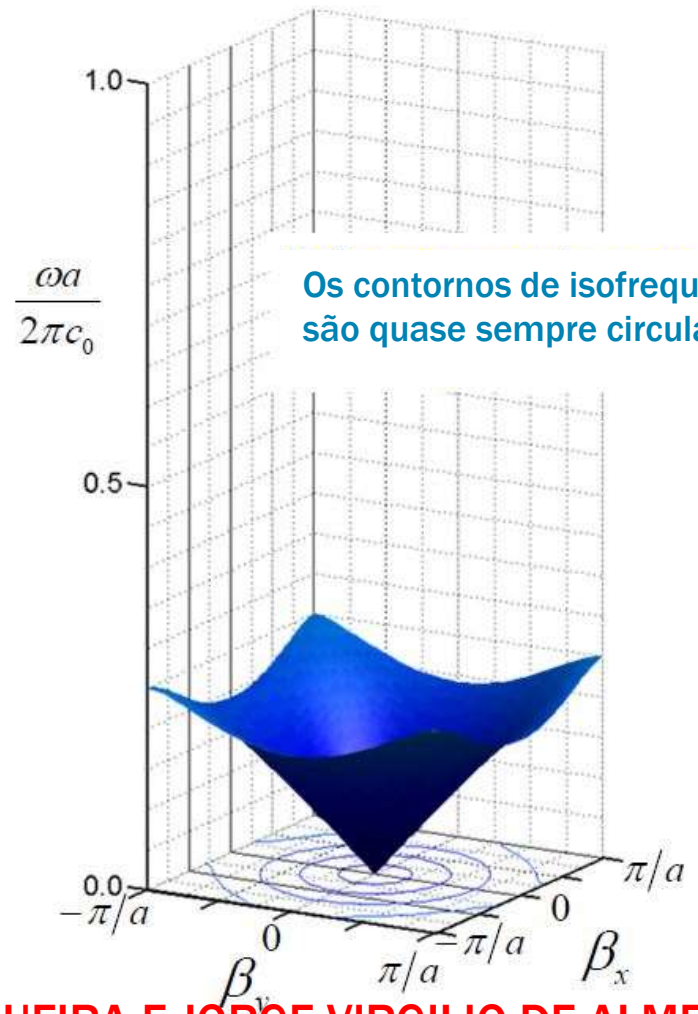
PROPRIEDADE DE GLÁUCIO LIMA SIQUEIRA E JORGE VIRGILIO DE ALMEIDA

Contornos de Isofrequência
(Índices Elipsoidais para Estruturas Periódicas)

PROPRIEDADE DE GLÁUCIO LIMA SIQUEIRA E JORGE VIRGILIO DE ALMEIDA

Contornos de Isofrequência para Bandas de Primeira Ordem

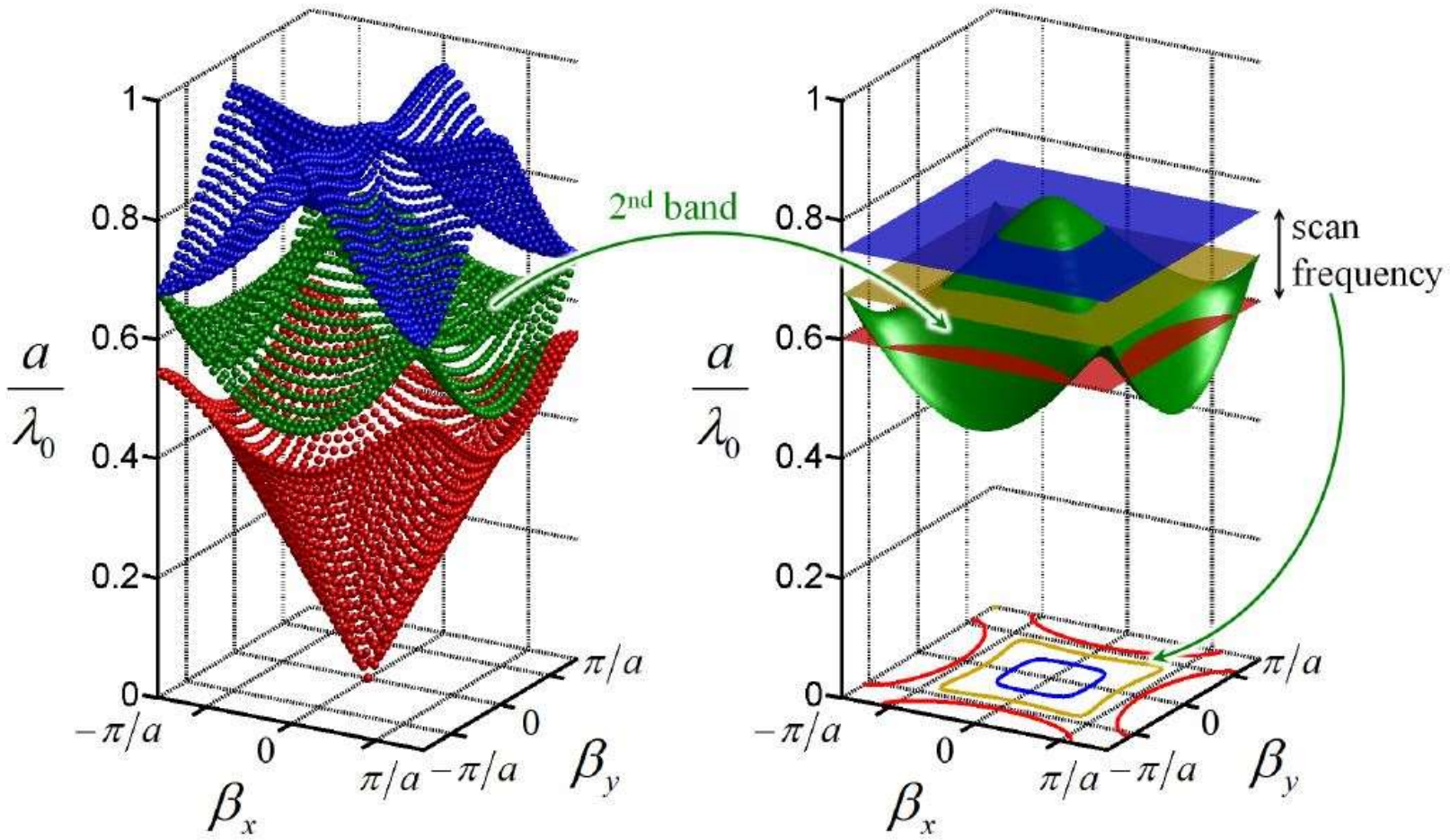




Os contornos de isofrequência são quase sempre circulares

PROPRIEDADE DE GLÁUCIO LIMA SIQUEIRA E JORGE VIRGILIO DE ALMEIDA

Contornos de Isofrequência para Bandas de Segunda Ordem

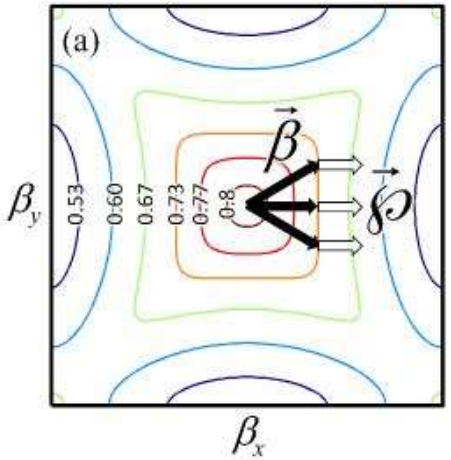


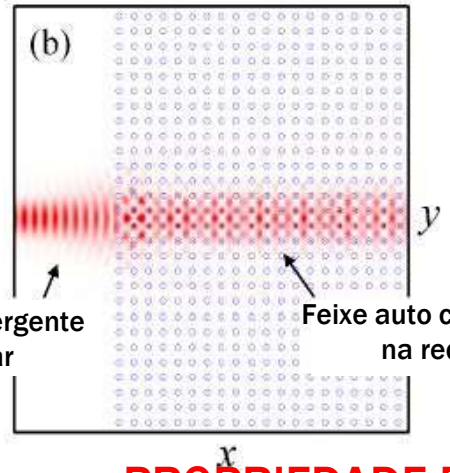
PROPRIEDADE DE GLÁUCIO LIMA SIQUEIRA E JORGE VIRGILIO DE ALMEIDA

Índices elipsoidais são "contornos isofrequência" no plano $\vec{k}$

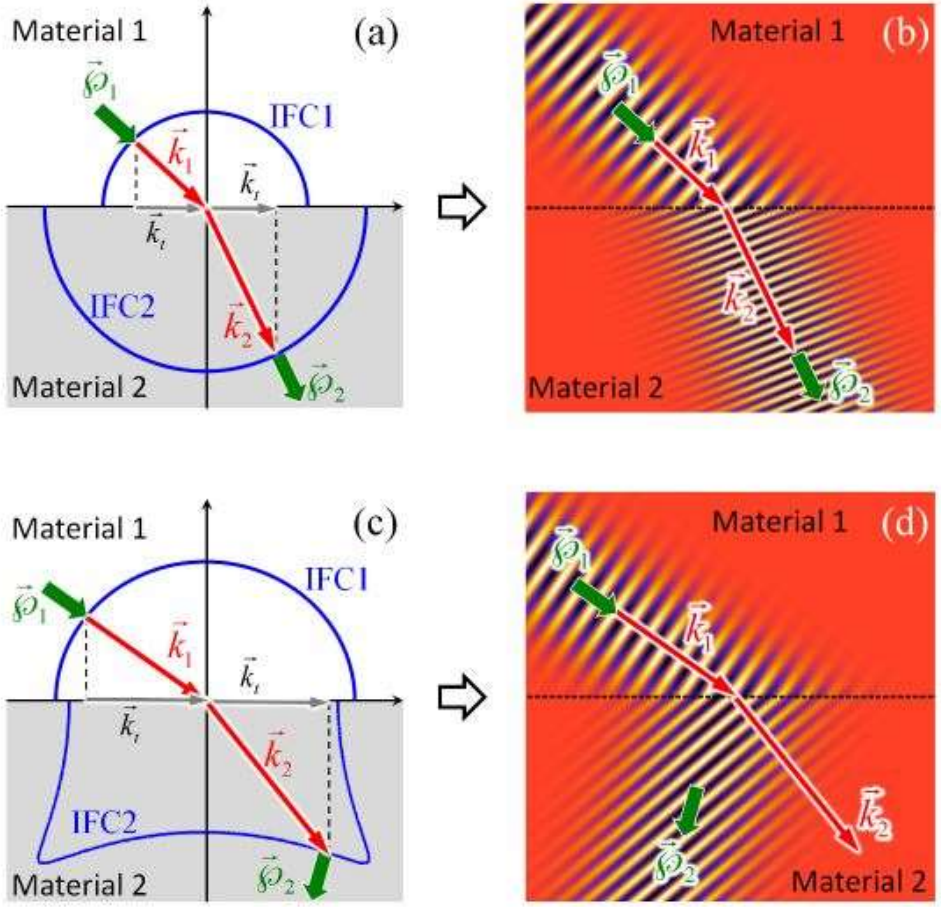
Exemplos de Aplicação

Auto colimação





Refração negativa



PROPRIEDADE DE GLÁUCIO LIMA SIQUEIRA E JORGE VIRGILIO DE ALMEIDA

Obrigado pela atenção!
Até a próxima aula...

PROPRIEDADE DE GLÁUCIO LIMA SIQUEIRA E JORGE VIRGILIO DE ALMEIDA