Eletromagnetismo e termodinâmica estão entrelaçados? O caso da ferroeletricidade

Rafael Prudêncio Leite N° USP: 11224852 Geovanni Fernandes Garcia N° USP: 11298560 Leonardo Ayres Martins Queiroz N° USP: 10300261 Bernard Lourenço Costa N° USP: 9392512 Handres Povidaiko N° USP: 9779141 Yuri Vargas Guedes N° USP: 9796763

26 de fevereiro de 2024

Prof°: Julio Antonio Larrea Jimenez

1 Introdução

Em nossa graduação, a separação de disciplinas pode dar a entender que as áreas estudadas estão muito desconexas umas das outras, o que nos dá a errônea impressão de que conceitos de áreas diferentes, mesmo que básicos, não possuem qualquer interdepêndencia entre si. O maior exemplo disso é que muitos físicos hoje buscam unir áreas como a mecânica quântica à relatividade geral, buscando uma teoria unificadora (como a gravitação quântica ou a teoria das supercordas).

Dada tal problemática, os artigos propostos neste Case Study nos revelam a dependência que conceitos estudados na disciplina como campo elétrico, polarização, campo de deslocamento e permissividade elétrica tem com a temperatura a qual o sistema está. Dessa forma, entender como esses fenômenos se comportam em diferentes temperaturas é essencial para estimar os efeitos práticos da junção entre a teoria eletromagnética e a teoria termodinâmica.

As correções feitas no limite quântico também se fizeram necessárias para a compreensão da transição de fase entre o estado ferroelétrico para o estado paraelétrico em baixas temperaturas.

2 Questões do Case Study 2

As respostas referidas às perguntas do Case Study estão apresentadas pelo número de cada questão:

1. Como visto em aula, a polarização em materiais dielétricos é linear:

$$\vec{P} = \chi_e \epsilon_0 \vec{E} \tag{1}$$

onde \vec{P} é a polarização, χ_e é a suscetibilidade elétrica, ϵ_0 é a permissividade elétrica e \vec{E} é o campo elétrico. Um gráfico de $\vec{P} \times \vec{E}$ deste sistema está ilustrado na Figura 1.

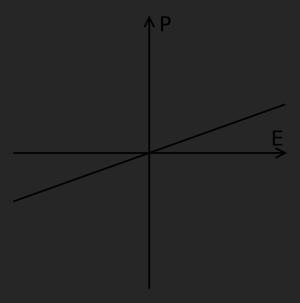


Figura 1: Gráfico de $\vec{P} \times \vec{E}$ em dieletricos lineares.

Já para os materiais paraelétricos a polarização, embora dependa da aplicação de um campo elétrico externo para que o material se polarize, não possui uma relação totalmente linear como em (1). Um gráfico de $\vec{P} \times \vec{E}$ deste sistema está apresentado na Figura 2, nele é fácil observar essa não-linearidade.

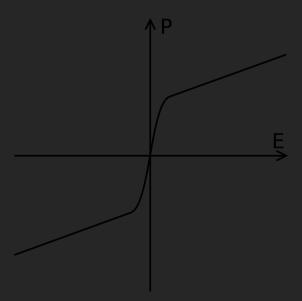


Figura 2: Gráfico de $\vec{P} \times \vec{E}$ em paraeletricos=.

Por fim, os materiais ferroelétricos possuem polarização espontânea diferente de zero, ao contrário dos dois anteriores, mas não é linear assim como o paraelétrico. Um gráfico de $\vec{P} \times \vec{E}$ deste tipo de material está apresentado na Figura 3.

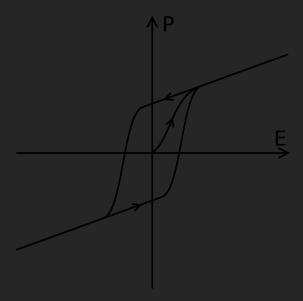


Figura 3: Gráfico de $\vec{P} \times \vec{E}$ em ferroeletricos.

A quebra de simetria reside na dependência do comportamento destes materiais com a temperatura: podem apresentar-se como paraelétricos ou ferroelétricos. Neste caso, ele é ferroelétrico à temperaturas abaixo de T_C e é paraelétrico acima dessa temperatura. Em outras palavras, a polarização espontânea desaparece ao ultrapassar tal temperatura, e o cristal ferroelétrico se transforma cristal paraelétrico (inclusive alterando sua estrutura cristalina [1]). Um fato que encontramos é que muitos ferroelétricos perdem suas propriedades acima de T_C completamente, uma vez que a sua fase paraelétrica tem uma estrutura cristalina centrosimétrica [1]. Os gráficos que evidenciam essa quebra de simetria estão mostrados na Figura 4.

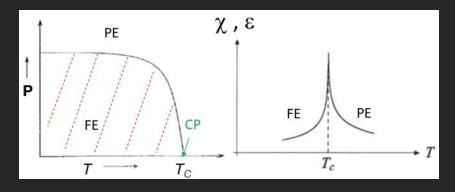


Figura 4: Gráficos da quebra de simetria por T_C .

Quanto às condições de contorno, temos que quando $\|\vec{E}\|$ é muito grande, todos os três materiais apresentam comportamento linear, semelhante ao dielétrico. Por outro lado, quando $\|\vec{E}\| \sim 0$, enquanto materiais dielétricos e paraelétricos apresentam polarização nula, os materiais ferroelétricos apresentam polarização não nula.

2. Em [1], Trainer define a componente complexa de $\chi(T)$ como:

$$\chi(T) = \chi' + i\chi'' \tag{2}$$

O valor de χ'' é quantificado por meio da razão:

$$tg \, \delta = \frac{\chi''}{\chi'} \tag{3}$$

onde tg δ é a energia perdida por ciclo na forma de calor. Neste caso, χ' é obtido pelo valor da capacitância medida por meio da seguinte equação:

$$C = \frac{Q}{V} = C_0(1 + \chi') \tag{4}$$

onde $C_0 = \epsilon_0 A/d$.

Na Figura 5 pode-se ver que o valor de χ'' aumenta perto da transição de fase. Isso ocorre devido ao que chamamos de relaxamento dielétrico. Para um dielétrico é ideal que χ'' seja pequeno, pois é necessária uma baixa perda de energia por ciclo. Em contrapartida, a alta perda de energia por ciclo causa o aquecimento do capacitor que, em determinadas circunstâncias, pode levar a uma quebra destrutiva do dielétrico.

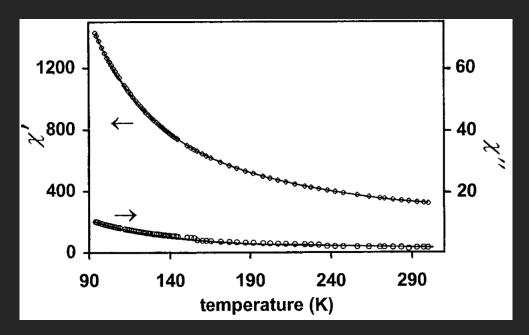


Figura 5: Gráfico de suscetibilidade elétrica do SrTiO₃ vs Temperatura.

3. No artigo do Trainer [1], verifica-se que o intervalo encontrado no qual vale a lei de Curie-Wiess corresponde a $110^{o}C < T < 300^{o}C$. Esta lei é dada por:

$$\chi_e = \frac{C_{CW}}{(T - T_0)} \tag{5}$$

Quanto ao comportamento do dos campos \vec{E} , \vec{P} e \vec{D} , temos que \vec{E} varia de maneira independente da temperatura do sistema, já que ele é um campo externo aplicado para a mudança de polarização do sistema. Dada a variação da temperatura e do campo elétrico, podemos encontrar o comportamento do campo de polarização a partir da equação (1) onde χ_e é dado pela lei de Curie Wiess (5), nos dando que:

$$\vec{P} = \epsilon_0 \frac{C_{CW}}{(T - T_0)} \vec{E} \tag{6}$$

Onde C_{CW} é a constante de Curie-Wiess, T_0 é a temperatura de Curie-Wiess e T é a temperatura do sistema. Ao fixar uma determinada temperatura na equação (6), vemos que ela descreve uma relação linear entre a polarização e o campo elétrico, mas sabemos que a relação entre estes dois campos é, por definição, não linear. Dado isso, procuramos

possíveis respostas para isso nos artigos do Case Study, no livro de eletrodinâmica do Griffths, do Reitz e de maneira muito mais ampla na internet, no entanto, não tivemos o sucesso de encontrar algum desenvolvimento satisfatório para esta questão. O mais perto que conseguimos chegar de um bom palpite é que isso pode ocorrer devido às flutuações quânticas explicadas pela mecânica quântica no artigo do Rowley [2].

Por fim, o campo de deslocamento elétrico, \vec{D} , que é relacionado com os outros dois pela expressão

 $\vec{D} = (1 + \chi_e) \,\epsilon_0 \vec{E} \tag{7}$

Substituindo novamente χ_e pela lei de Curie-Wiess, chegamos a:

$$\vec{D} = \left(1 + \frac{C_{CW}}{(T - T_0)}\right) \epsilon_0 \vec{E} \tag{8}$$

Dado que o material deve se comportar como ferroelétrico quando $T < T_0$ se como paraelétrico quando $T > T_0$, temos que o gráfico de $\vec{P} \times \vec{E}$ deles serão a Figura 3 e a Figura 2, respectivamente.

4. Pelo artigo de Rowley [2], vimos que, quando a fronteira entre a paraeletricidade e a ferroeletricidade se encontra em baixas temperaturas, elas são mais sutis e complexas do que o que foi previsto pela eletrodinâmica clássica. Neste artigo, por exemplo, é apresentado o comportamento de vários materiais na fronteira da ferroeletricidade, observando assim dependências não-clássicas da temperatura T da função dielétrica inversa $1/\epsilon$ abaixo de 50K, além elevações anormais em temperaturas menores, estendendo-se até a faixa de milikelvins. Tal comportamento anômalo é evidenciado ao observar a Figura 6 e a Figura 7.

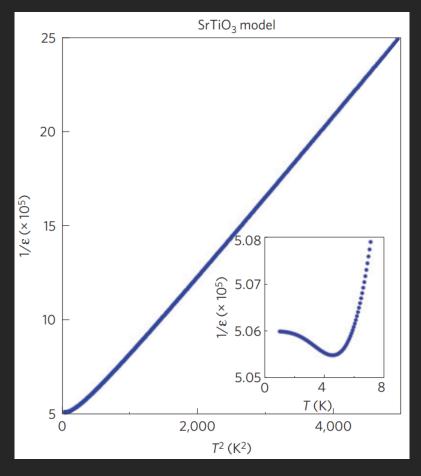


Figura 6: Gráfico de $1/\epsilon \times T^2$ do SrTiO₃.

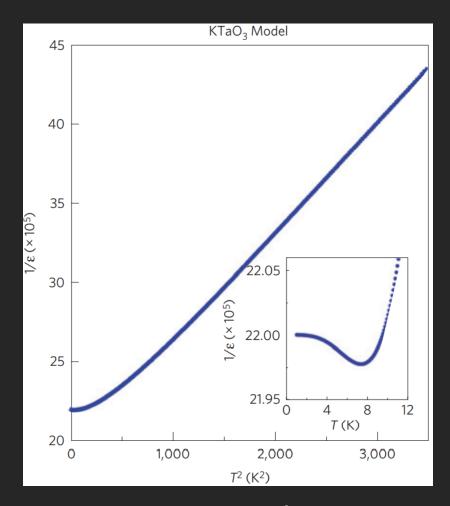


Figura 7: Gráfico de $1/\epsilon \times T^2$ do KTaO₃.

Com o nosso conhecimento de eletrodinâmica, concordamos com a interpretação de Rowley quando ele desconsidera a polarização \vec{P} como um parâmetro de ordem para descrever a física subjacente do ponto crítico quântico ferroelétrico ($T_C = 0$ K), uma vez que fenômenos decorrentes de flutuações quânticas passam a se tornar muito mais relevantes em temperaturas próximas a esta. Tanto na Figura 6 como na Figura 7, observa-se que há linearidade apenas para temperaturas muito maiores que T_C , como previsto pela eletrodinâmica clássica.

Os materiais ferroelétricos descritos por ele no artigo exibem transições entre estados homogêneos sem a aplicação de campos de quebra de simetria e não envolvem a complicação de redução dimensional. A dimensão efetiva na descrição do ponto crítico do quântica é de forma surpreendente a dimensão marginal de 3+1, ou seja, três dimensões de espaço mais uma dimensão de tempo como é o caso da física de partículas elementares. Ao considerar $d_{eff}=4$, Rowley obtém um valor para a suscetibilidade elétrica proporcional a $1/T^2$, o qual induz excitações de energia de baixa altitude. Portanto, também concordamos com ele ao fazer tal afirmação, que dispensa o uso da termodinâmica nestas escalas.

5. Existem inúmeras aplicações decorrentes deste estudo pois, com a compreensão do comportamento dos materiais ferroelétricos em baixas temperaturas, será possível por exemplo ser feito filmes (de supercondutores) com apenas 1 nanômetro de espessura, o que significa que essas células de armazenamento podem ser reduzidas a dimensões abaixo do que acreditavamos ser possível.

3 Conclusão

Por fim, ficou claro que o estudo dos fênomenos de polarização na matéria não tem suas respostas apenas no eletromagnetismo, mas também na termodinamica e na mecânica quântica. Este último em particular trás um novo horizonte ainda inesplorado pelos limites das outras duas. O estudo de caso no geral foi fundamental para a nossa compreensão de como os conceitos vistos em aula refletem na prática, já com o auxílio e correções de outras áreas da Física.

4 Bibliografia

- [1] Trainer, Matthew (2001) Ferroelectricity: Measurement of the dielectric susceptibility of strontium titanate at low temperatures
 - [2] Rowley, S.E (2014) Ferroelectric quantum criticality
 - [3] Safari, Ahmad (2008) Piezoelectric and acoustic materials for transducer applications.