Electrostática en materiales

Hasta el momento hemos desarrollado teoría para cargas y distribuciones de cargas en vacío.

↳ En este sentido, electrones y protones

Con este formalismo es posible hacer una descripción en medios materiales, sin embargo el número de grados de libertad sería insoluble.

↳ $\sim 10^{23}\,cm^{3}$ → Adicionalmente una teoría con esta información requeriría de información no accesible de forma experimental.

↳ y por tanto, innecesaria la teoría.

La alternativa a esto es realizar promedios de la siguiente manera

i) Las ecuaciones de Maxwell son válidas de forma universal a escala microscópica

$$\nabla\cdot\vec{e} = \rho_M/\varepsilon_0 \qquad \nabla\times\vec{e} = \vec{0}$$

caso estático

$\vec{e} \equiv$ Campo eléctrico microscópico

$\rho_M =$ Densidad de cargas (microscópica)

Este no lo conocemos

Oscilan rápidamente por movimiento Browniano

ii) Definimos un promedio fenomenológico

$$\underbrace{\langle f(\vec{r},t)\rangle}_{\text{Cantidad medible macroscópica}} = \frac{1}{V(\vec{r})}\int_{V(\vec{r})} d^3r'\, f(\vec{r}',t) = \frac{1}{V}\int_{V(0)} d^3r'\, \underbrace{f(\vec{r}'+\vec{r},t)}_{\text{Cantidad microscópica}}$$

$V(\vec{r})$ ↳ Volumen grande en escalas microscópicas, pero pequeño en escalas macroscópicas

$V(\vec{r}) \approx 10^{-6}\,cm^3$ con $N\sim 10^{17}$ partículas

iii) Como el promedio y las derivadas son operadores lineales, se cumple que

$$\vec{E}(\vec{r}) = \langle\vec{e}(\vec{r})\rangle \quad \text{y que} \quad \nabla\langle f(\vec{r})\rangle = \langle\nabla f(\vec{r})\rangle, \quad \frac{\partial}{\partial t}\langle f(\vec{r},t)\rangle = \left\langle \frac{\partial}{\partial t} f(\vec{r},t)\right\rangle$$

Con estos tres puntos concluimos que:

- $\nabla\cdot\vec{E} = \nabla\cdot\langle\vec{e}\rangle = \langle\nabla\cdot\vec{e}\rangle = \langle\rho_M/\varepsilon_0\rangle = \langle\rho_M\rangle/\varepsilon_0$
- $\nabla\times\vec{E} = \nabla\times\langle\vec{e}\rangle = \langle\nabla\times\vec{e}\rangle = \vec{0}$
- $\vec{e} = -\nabla\underbrace{\phi_M}_{\text{Micro}} \to \vec{E} = \langle\vec{e}\rangle = \langle-\nabla\phi_M\rangle = -\nabla\langle\phi_M\rangle$

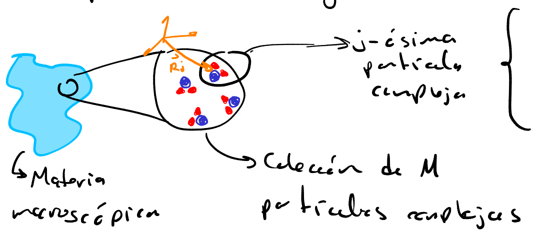
$$\nabla\cdot\vec{E} = \frac{\langle\rho_M\rangle}{\varepsilon_0}$$

$$\nabla\times\vec{E} = \vec{0}$$

$$\vec{E} = -\nabla\langle\phi_M\rangle$$

La idea es determinar el promedio de la densidad de carga y del potencial microscópicos y así determinar las cantidades macroscópicas

Cualquier partícula compleja, se puede estudiar con sus momentos multipolares, como sigue



densidad de carga → $\rho_j(\vec{r}') = \sum_n q_n^{(j)}\delta(\vec{r}'-\vec{r}_n)$

carga total → $q_j = \int d^3r'\,\rho(\vec{r}') = \sum_n q_n^{(j)}$

momento dipolar → $\vec{p}_j = \int d^3r'\,\rho(\vec{r}')(\vec{r}'-\vec{R}_j)$

Podemos calcular el potencial hasta orden dipolar de forma "sencilla".

$$\Rightarrow \phi_j(\vec{r}) \approx \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\left(\frac{q_j}{\|\vec{r}-\vec{R}_j\|} + \frac{\vec{p}_j\cdot(\vec{r}-\vec{R}_j)}{\|\vec{r}-\vec{R}_j\|^3}\right)$$

Para considerar el efecto de las M partículas complejas, se define

$$\rho_{eff}(\vec{r}') = \sum_j^M q_j\,\delta(\vec{r}'-\vec{R}_j), \qquad \vec{\Pi}_{eff}(\vec{r}') = \sum_j \vec{p}_j\,\delta(\vec{r}'-\vec{R}_j)$$

y con esto, el potencial de las M partículas es

$$\phi_M(\vec{r}) = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\int d^3r' \left(\frac{\rho_{eff}(\vec{r}')}{\|\vec{r}-\vec{r}'\|} + \vec{\pi}_{eff}(\vec{r}')\cdot\frac{(\vec{r}-\vec{r}')}{\|\vec{r}-\vec{r}'\|^3} \right)$$

Promediando $\longrightarrow$

$$\phi(\vec{r}) = \langle \phi_M(\vec{r}) \rangle = \frac{1}{V}\int_{V(\vec{0})} d^3x \int d^3r' \left[\frac{\rho_{eff}(\vec{r}')}{\|\vec{r}+\vec{x}-\vec{r}'\|} + \frac{\vec{\pi}_{eff}(\vec{r}')\cdot(\vec{r}+\vec{x}-\vec{r}')}{\|\vec{r}+\vec{x}-\vec{r}'\|^3} \right]$$

$\vec{r}' = \vec{r}'' + \vec{x}$

$$= \frac{1}{V}\int d^3r'' \int_{V(\vec{0})} d^3x \left[\frac{\rho_{eff}(\vec{r}''+\vec{x})}{\|\vec{r}-\vec{r}''\|} + \vec{\pi}_{eff}(\vec{r}''+\vec{x})\cdot\frac{(\vec{r}-\vec{r}'')}{\|\vec{r}-\vec{r}''\|^3} \right]$$

Con este desarrollo, definimos

$$\rho_{ext}(\vec{r}) = \langle \rho_{eff}(\vec{r}) \rangle = \frac{1}{V(\vec{r})}\sum_{j\in V} q_j$$

$$= \frac{1}{V}\int d^3r'' \left[\frac{\langle \rho_{eff}(\vec{r}'') \rangle}{\|\vec{r}-\vec{r}''\|} + \langle \pi_{eff}(\vec{r}'') \rangle \cdot \frac{(\vec{r}-\vec{r}'')}{\|\vec{r}-\vec{r}''\|^3} \right] \rightarrow \text{Que ya es el potencial que conocemos}$$

$\vec{P}(\vec{r}) = \langle \vec{\pi}_{eff}(\vec{r}) \rangle = \frac{1}{V}\sum_{j\in V} \vec{P}_j \rightarrow$ Polarización (macroscópica) $\rightarrow$ Momento dipolar total por unidad de volumen.

Con estas definiciones podemos escribir el potencial macroscópico $\phi(\vec{r})$ como sigue:

$$\phi(\vec{r}) = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\int d^3r' \left[\frac{\rho_{ext}(\vec{r}')}{\|\vec{r}-\vec{r}'\|} + \vec{P}(\vec{r}')\cdot\nabla_{\vec{r}'}\left(\frac{1}{\|\vec{r}-\vec{r}'\|}\right) \right]$$

pues $\nabla_{\vec{r}}\left(\frac{1}{\|\vec{r}-\vec{r}'\|}\right) = \frac{-(\vec{r}-\vec{r}')}{\|\vec{r}-\vec{r}'\|^2} = -\frac{(\vec{r}-\vec{r}')}{\|\vec{r}-\vec{r}'\|^2}$

y $\nabla_{\vec{r}} = -\nabla_{\vec{r}'}$ para $1/\|\vec{r}-\vec{r}'\|$

Para el campo eléctrico, notamos que

$$\nabla_{\vec{r}}\cdot\vec{E} = \nabla_{\vec{r}}\cdot(-\nabla_{\vec{r}}\phi) = -\nabla_{\vec{r}}^2\phi = -\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\int d^3r' \left\{ \rho_{ext}(\vec{r}')\underbrace{\nabla_{\vec{r}}^2\left(\frac{1}{\|\vec{r}-\vec{r}'\|}\right)}_{=4\pi\delta(\vec{r}-\vec{r}')} + \vec{P}(\vec{r}')\cdot\nabla_{\vec{r}'}\left[\underbrace{\nabla_{\vec{r}}^2\left(\frac{1}{\|\vec{r}-\vec{r}'\|}\right)}_{=4\pi\delta(\vec{r}-\vec{r}')}\right] \right\}$$

$$= -\frac{\rho_{ext}(\vec{r})}{\varepsilon_0} - \frac{1}{\varepsilon_0}\int d^3r'\, \vec{P}(\vec{r}')\cdot\nabla_{\vec{r}'}\delta(\vec{r}-\vec{r}')$$

pero de nuevo la delta es simétrica entonces $\nabla_{\vec{r}'}\delta(\vec{r}-\vec{r}') = -\nabla_{\vec{r}}\delta(\vec{r}-\vec{r}')$

$$= -\frac{\rho_{ext}(\vec{r})}{\varepsilon_0} + \frac{\nabla_{\vec{r}}\cdot}{\varepsilon_0}\int d^3r'\, \vec{P}(\vec{r}')\delta(\vec{r}-\vec{r}')$$

$$= -\frac{1}{\varepsilon_0}\left(\rho(\vec{r}) - \nabla\cdot\vec{P}(\vec{r})\right)$$

Resumiendo, notemos que

$$\nabla\cdot\vec{E} = \frac{1}{\varepsilon_0}\left(\rho_{ext}(\vec{r}) - \nabla\cdot\vec{P}(\vec{r})\right)$$

$$\Rightarrow \nabla\cdot\left(\varepsilon_0\vec{E} + \vec{P}(\vec{r})\right) = \rho_{ext}(\vec{r})$$

Definimos el vector de desplazamiento $\vec{D} = \varepsilon_0\vec{E} + \vec{P}$

$$\therefore \boxed{\nabla\cdot\vec{D} = \rho_{ext} \quad y \quad \nabla\times\vec{E} = \vec{0}}$$

$\vec{D}$ responde únicamente a las cargas externas, o bien, al reacomodo de las cargas de la estructura. En este sentido decimos que se modifica debido a cargas externas

De igual manera, es conveniente definir

$\rho_{ind}(\vec{r}) = -\nabla\cdot\vec{P} \longrightarrow$ Densidad de carga inducida

y de igual forma

$$\rho_{Tot}(\vec{r}) = \rho_{ext}(\vec{r}) + \rho_{ind}(\vec{r})$$

$\longrightarrow$ Por otro lado $\nabla\cdot\vec{E} = \rho_{Tot}(\vec{r})/\varepsilon_0$ $\rightarrow$ $\vec{E}$ tiene la respuesta de todas las cargas: las externas, y las que se re-acomodaron (inducidas).

Antes de seguir retomemos la expresión del potencial en función de $\vec{P}$ y $\rho_{ext}(\vec{r})$

$$\phi(\vec{r}) = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\int d^3r' \left[\frac{\rho_{ext}(\vec{r}')}{\|\vec{r}-\vec{r}'\|} + \vec{P}(\vec{r}')\cdot\nabla_{\vec{r}'}\left(\frac{1}{\|\vec{r}-\vec{r}'\|}\right) \right]$$

$\hookrightarrow$ Esto puede reescribirse como $\nabla_{\vec{r}'}\cdot\left(\frac{\vec{P}}{\|\vec{r}-\vec{r}'\|}\right) - (\nabla_{\vec{r}'}\cdot\vec{P})\frac{1}{\|\vec{r}-\vec{r}'\|}$

Entonces $\phi(\vec r) = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\int_V d^3r' \left[\frac{\rho_{ext}(\vec r') \overbrace{- \nabla_{\vec r'}\cdot \vec P(\vec r')}^{+\,\rho_{ind}(\vec r')}}{\|\vec r - \vec r'\|}\right] + \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\int_V d^3r' \, \nabla_{\vec r'}\cdot\left(\frac{\vec P(\vec r')}{\|\vec r-\vec r'\|}\right)$ → Teorema de la Divergencia

$$= \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\int_V d^3r' \left(\frac{\rho_{ext}(\vec r') + \rho_{ind}(\vec r')}{\|\vec r-\vec r'\|}\right) + \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\oint_{\partial V}\frac{\vec P\cdot\hat n}{\|\vec r-\vec r'\|}\,d^2r'$$

→ Definimos una densidad superficial de carga inducida

$\sigma_{ind} = \vec P\cdot\hat n$

En resumen:

↳ El campo electrostático macroscópico $\vec E = \vec E_{ext} + \vec E_{ind}$

$\vec E_{ext}$: Cargas adicionales o externas

$\vec E_{ind}$: Debido a redistribución de las cargas dentro de un material

↳ Por probar (de tarea) que $\vec E_{ind} = -\frac{\vec P}{\varepsilon_0}$

Adicionalmente, la polarización

$$\vec P = \frac{1}{V}\int_V d^3r' \, \vec \Pi(\vec r) = \frac{1}{V}\int_V \sum_j \vec p_j \, \delta(\vec r' - \vec R_j)\, d^3r'$$

↳ Momento dipolar por unidad de volumen

y $\rho_{ind} = -\nabla\cdot\vec P$

$\sigma_{ind} = \vec P\cdot\hat n$

Definimos $\boxed{\vec D = \varepsilon_0 \vec E + \vec P \longrightarrow \nabla\cdot\vec D = \rho_{ext}}$

Lo que resta es introducir modelos de la respuesta electrostática de diversos materiales.

Medios dieléctricos

Restringiendo la discusión a medios no conductores, → No hay e^- libres

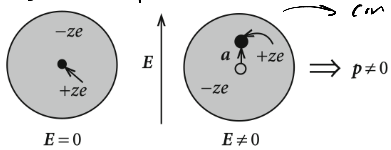
↳ Sólo hay cargas que deforman su distribución, dando pie a momentos multipolares en el equilibrio

1) Dieléctricos ordinarios

↳ Materiales sin dipolos permanentes, que sólo se inducen ante la presencia de un campo eléctrico externo

↳ Por ejemplo un átomo →

sólo monopolo

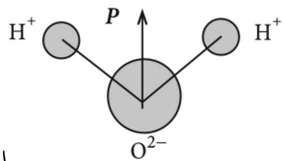


→ con el campo se crea un momento dipolar

2) Paraeléctricos

Si el material tiene momentos dipolares en su distribución de cargas, éstos tenderán al desorden por movimiento Browniano. Sin embargo, ante un campo eléctrico, éstos tenderán a alinearse

En promedio con $\vec E = \vec 0$, $\vec P = \vec 0$.



→ Como las moléculas de agua. En este caso un campo eléctrico causaría que la energía del sistema sea $U = -\vec p\cdot\vec E_{ext}$

↳ El paraeléctrisismo es, entonces, un resultado que depende de la temperatura del sistema.

3) Ferroeléctricos.