

Electrostática en materiales

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

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

(En este sentido, electrones y protones)

$\sim 10^{23} \text{ cm}^{-3}$

La alternativa al es realizar promedios de la siguiente manera

Adicionalmente una teoría con esta información requeriría de información no accesible de forma experimental.

y por tanto, inmensa la teoría.

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

$$\nabla \cdot \vec{E} = \rho_m / \epsilon_0 \quad \nabla \times \vec{E} = \vec{0}$$

caso
estático

$\vec{E} \equiv$ Campo eléctrico microscópico \rightarrow Este no lo conocemos
 $\rho =$ Densidad de cargas (microscópica)

Oscilan rápidamente por movimiento Browniano

ii) Definimos un promedio fenomenológico

$$\langle F(\vec{r}, t) \rangle = \frac{1}{V(\vec{r})} \int_{V(\vec{r})} d^3r' F(\vec{r}', t) = \frac{1}{V} \int_{V(0)} d^3r' F(\vec{r}' + \vec{r}, t)$$

Contenido medible macroscópica \rightarrow Volumen grande en escalas microscópicas, pero pequeño en escalas macroscópicas

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

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

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

Con estos tres puntos concluimos que:

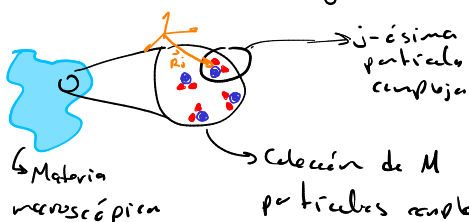
$$\left. \begin{aligned} \nabla \cdot \vec{E} &= \nabla \cdot \langle \vec{E} \rangle = \langle \nabla \cdot \vec{E} \rangle = \langle \rho_m / \epsilon_0 \rangle = \langle \rho_m \rangle / \epsilon_0 \\ \nabla \times \vec{E} &= \nabla \times \langle \vec{E} \rangle = \langle \nabla \times \vec{E} \rangle = \vec{0} \end{aligned} \right\}$$

$$\vec{E} = -\nabla \phi_m \rightarrow \vec{E} = \langle \vec{E} \rangle = \langle -\nabla \phi_m \rangle = -\nabla \langle \phi_m \rangle$$

Meno

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

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



$$\left\{ \begin{aligned} \text{densidad de carga} &\rightarrow \rho_j(\vec{r}') = \sum_n q_n^{(j)} \delta(\vec{r}' - \vec{r}_n) \\ \text{carga total} &\rightarrow q_j = \int d^3r' \rho_j(\vec{r}') = \sum_n q_n^{(j)} \\ \text{momento dipolar} &\rightarrow \vec{p}_j = \int d^3r' q_j(\vec{r}') (\vec{r}' - \vec{R}_j) \end{aligned} \right\}$$

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

$$\Rightarrow \phi_j(\vec{r}) \approx \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \left(\frac{q_j}{|\vec{r} - \vec{R}_j|} + \frac{\vec{p}_j \cdot (\vec{r} - \vec{R}_j)}{|\vec{r} - \vec{R}_j|^3} \right)$$

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

$$\rho_{\text{eff}}(\vec{r}) = \sum_j q_j \delta(\vec{r} - \vec{R}_j), \quad \vec{p}_{\text{eff}}(\vec{r}) = \sum_j \vec{p}_j \delta(\vec{r} - \vec{R}_j)$$

Y con esto, el potencial de las M partículas es

$$\phi_M(\vec{r}) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \int d^3r' \left[\frac{\rho_{ext}(\vec{r}')}{\|\vec{r}-\vec{r}'\|} + \frac{\vec{\pi}_{ext}(\vec{r}') \cdot (\vec{r}-\vec{r}')}{\|\vec{r}-\vec{r}'\|^3} \right]$$

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

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

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

Con este desarrollo, definimos

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

$$\vec{P}(\vec{r}) = \langle \vec{\pi}_{ext}(\vec{r}) \rangle = \frac{1}{V} \sum_{j \in V} \vec{p}_j \rightarrow \text{Polarización}$$

(macroscópica) \rightarrow Momento dipolar total por unidad de volumen.

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

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

$$\phi(\vec{r}) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \int d^3r' \left[\frac{\rho_{ext}(\vec{r}')}{\|\vec{r}-\vec{r}'\|} + \vec{P}(\vec{r}') \cdot \nabla_{\vec{r}'} \left(\frac{1}{\|\vec{r}-\vec{r}'\|} \right) \right]$$

$\nabla_{\vec{r}'} \left(\frac{1}{\|\vec{r}-\vec{r}'\|} \right) = -\frac{(\vec{r}-\vec{r}')}{\|\vec{r}-\vec{r}'\|^3} = -\frac{(\vec{r}-\vec{r}')}{\|\vec{r}-\vec{r}'\|^2}$

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

Para el campo eléctrico, notamos que

$$\begin{aligned} \nabla_{\vec{r}} \cdot \vec{E} &= \nabla_{\vec{r}} \cdot (-\nabla_{\vec{r}} \phi) = -\nabla_{\vec{r}}^2 \phi = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \int d^3r' \left\{ \underbrace{\rho_{ext}(\vec{r}') \nabla_{\vec{r}}^2 \left(\frac{1}{\|\vec{r}-\vec{r}'\|} \right)}_{= 4\pi\epsilon_0 \delta(\vec{r}-\vec{r}')} + \underbrace{\vec{P}(\vec{r}') \cdot \nabla_{\vec{r}'} \left[\nabla_{\vec{r}}^2 \left(\frac{1}{\|\vec{r}-\vec{r}'\|} \right) \right]}_{= 4\pi\epsilon_0 \delta(\vec{r}-\vec{r}')} \right\} \\ &= -\frac{\rho_{ext}(\vec{r})}{\epsilon_0} - \frac{1}{\epsilon_0} \int d^3r' \underbrace{\vec{P}(\vec{r}') \cdot \nabla_{\vec{r}'} \delta(\vec{r}-\vec{r}')}_{\text{pero de nuevo la delta es simétrica}} \\ &= -\frac{\rho_{ext}(\vec{r})}{\epsilon_0} + \frac{\nabla_{\vec{r}} \cdot \int d^3r' \vec{P}(\vec{r}') \delta(\vec{r}-\vec{r}')}{\epsilon_0} \quad \text{entonces } \nabla_{\vec{r}'} \delta(\vec{r}-\vec{r}') = -\nabla_{\vec{r}} \delta(\vec{r}-\vec{r}') \\ &= -\frac{1}{\epsilon_0} (\rho_{ext}(\vec{r}) - \nabla \cdot \vec{P}(\vec{r})) \end{aligned}$$

Resumiendo, notamos que

$$\nabla \cdot \vec{E} = \frac{1}{\epsilon_0} (\rho_{ext}(\vec{r}) - \nabla \cdot \vec{P}(\vec{r}))$$

$$\Rightarrow \nabla \cdot (\epsilon_0 \vec{E} + \vec{P}(\vec{r})) = \rho_{ext}(\vec{r})$$

Definimos el vector de desplazamiento $\vec{D} \equiv \epsilon_0 \vec{E} + \vec{P}$

$$\therefore \left| \begin{array}{l} \nabla \cdot \vec{D} = \rho_{ext} \text{ y } \nabla \times \vec{E} = \vec{0} \end{array} \right|$$

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

De igual manera, es conveniente definir

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

y de igual forma

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

\vec{E} tiene la respuesta de todas las cargas: las externas, y las que se re-acomodaron (inducidas).

Por otro lado $\nabla \cdot \vec{E} = \rho_{tot}(\vec{r}) / \epsilon_0$

Ahora de seguir retomemos la expresión del potencial en función de \vec{E} o $\rho_{ext}(\vec{r})$

$$\phi(\vec{r}) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \int d^3r' \left[\frac{\rho_{ext}(\vec{r}')}{\|\vec{r}-\vec{r}'\|} + \vec{P}(\vec{r}') \cdot \nabla_{\vec{r}'} \left(\frac{1}{\|\vec{r}-\vec{r}'\|} \right) \right]$$

\rightarrow 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
$$\phi(\vec{r}) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \int_V d^3r' \left[\frac{\rho_{ext}(\vec{r}') + \rho_{ind}(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} \right] + \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \int_V d^3r' \nabla' \cdot \left(\frac{\vec{P}(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} \right)$$

Tarea de la longitud

$$= \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \int_V d^3r' \left(\frac{\rho_{ext}(\vec{r}') + \rho_{ind}(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} \right) + \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \oint_{\partial V} \frac{\vec{P} \cdot \hat{n}}{|\vec{r} - \vec{r}'|} d^2r'$$

Definimos una densidad superficial de carga inducida $\sigma_{ind} = \vec{P} \cdot \hat{n}$

En resumen:

El campo electrostático macroscópico
Adicionalmente, la polarización

$$\vec{E} = \vec{E}_{ext} + \vec{E}_{ind}$$

Debido a redistribución de las cargas dentro de un material

$$\vec{P} = \frac{1}{V} \int_V d^3r' \vec{p}(\vec{r}') = \frac{1}{V} \int_V d^3r' \sum_j \vec{p}_j \delta(\vec{r} - \vec{r}_j)$$

→ Momento dipolar por unidad de volumen

Definimos

$$\vec{D} = \epsilon_0 \vec{E} + \vec{P} \Rightarrow \nabla \cdot \vec{D} = \rho_{ext}$$

Cargas adicionales o externas

Por polarización que $\vec{E}_{ind} = -\frac{\vec{P}}{\epsilon_0}$

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

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

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

Medios dieléctricos

No hay e^- libres

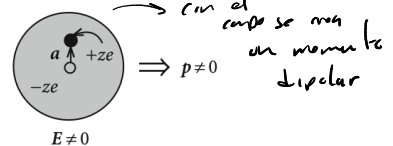
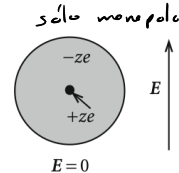
Restringiendo la discusión a medios no conductores,

→ Solo 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



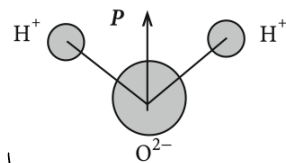
2) Piezoelectricos

Si el material tiene momentos

dipolos 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 causa que la energía del sistema sea

→ El piezoelectrismo

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

$$U = -\vec{P} \cdot \vec{E}_{ext}$$

3) Ferroeléctricos.

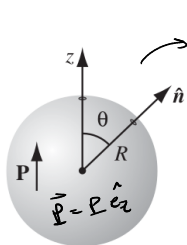
→ Materiales con $\vec{P}(\vec{E} = \vec{0}) \neq \vec{0}$ sin embargo

esto sólo como por temperatura T tal que $T < T_c$ → Temperaturas de Curie.

Equaciones constitutivas (Propiedades eléctricas)

Hasta el momento sólo hemos mencionado las propiedades generales de los materiales dando una polarización \vec{P} sin embargo, aún no conocemos \vec{P} . Antes de entrar en detalles con los diferentes modelos para los materiales, vemos qué pasa si $\vec{P} = \vec{0}$

Supongamos que nos esbri. es la que tiene una polarización constante:



En este caso $\sigma_{ind} = \vec{P} \cdot \hat{n} = P \cos \theta = P \cos \theta$

Además, si no hay cargas entonces $\sigma_{ind} = (\vec{E}_s - \vec{E}_c) \cdot \hat{n} = \left(-\frac{\partial \phi_s}{\partial r} + \frac{\partial \phi_c}{\partial r} \right) \Big|_{r=R}$

y como $\phi_c = \sum_l A_l r^l P_l(\cos \theta)$

y como $\phi_s = \sum_l \frac{B_l}{r^{l+1}} P_l(\cos \theta)$ y como $\phi_c(R) = \phi_s(R) \Rightarrow A_l R^l = \frac{B_l}{R^{l+1}} \Rightarrow B_l = A_l R^{2l+1}$

$$\Rightarrow \left(-\frac{\partial \phi_c}{\partial r} + \frac{\partial \phi_s}{\partial r} \right) \Big|_{r=R} = -\sum_l \left(A_l l R^{l-1} - \frac{B_l (-l-1)}{R^{l+2}} \right) P_l(\cos \theta) = -\sum_l \left(A_l R^{l-1} l + \frac{A_l R^{2l+1} (l+1)}{R^{l+2}} \right) P_l(\cos \theta)$$

$$\Rightarrow \sigma_{ind} = \frac{P}{\epsilon_0} \cos \theta = -\sum_l A_l R^{l-1} (2l+1) P_l(\cos \theta) \Rightarrow \text{Todos los } A_l = 0 \text{ si } l \neq 1$$

Por tanto

$$\phi_c = \frac{P R^3}{3} \cos \theta = \frac{1}{3\epsilon_0} \vec{P} \cdot \vec{r}$$

$$\phi_s = \frac{R^3}{3\epsilon_0} \frac{\vec{P} \cdot \vec{r}}{r^2}$$

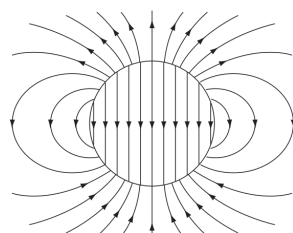
$$\vec{E}_c = -\nabla \phi_c = -\frac{P}{3\epsilon_0} \nabla \cdot \vec{r} = -\frac{P}{\epsilon_0}$$

$$\vec{E}_s = -\frac{1}{3\epsilon_0} \vec{P} \cdot \nabla \left(\frac{1}{r} \right) = \frac{R^3}{3} \frac{\vec{P}}{\epsilon_0} \cdot \frac{\vec{r}}{r^3} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{\vec{P} \cdot \vec{r}}{r^3}$$

Notemos entonces que si hubiera un campo eléctrico externo

$$\vec{E}_{tot} = \vec{E}_{ext} + \vec{E}_{ind} = \vec{E}_{ext} - \frac{P}{\epsilon_0}$$

Con esto podemos ver que \vec{P} modifica el campo eléctrico total dentro del material y que, en general, lo pudes pensar como $\vec{P}(\vec{E}) + \vec{P}(\vec{\sigma}) = \vec{0}$ excepto ferroeléctricos



$$\text{con } \vec{P} = \frac{4}{3}\pi R^3 \frac{\vec{P}}{V}$$

Si $\vec{P}(\vec{E})$, entonces

Se dice de potencias $P_i(\vec{E}) = \sum_j \gamma_{ij} E_j + \sum_{j,k} \beta_{ijk} E_j E_k + \dots \rightarrow$ Expresión general.

Materiales lineales $\rightarrow P_i(\vec{E}) = \sum_j \gamma_{ij} E_j$

①

Además si $\gamma_{ij} \neq \gamma_{ji}(\vec{r})$

Medio homogéneo, es decir tiene simetría de traslación

Si $\gamma_{ij} = \gamma \delta_{ij} \rightarrow$ Material isotrópico ②

Si no, son materiales anisótropos

El material más sencillo de estudiar son los lineales, homogéneos e isotrópicos. Bajo estas condiciones, definimos

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

Susceptibilidad eléctrica (adimensional)

Función respuesta.

$$\text{Como } \vec{D} = \vec{P} + \epsilon_0 \vec{E} \rightarrow \vec{D} = \chi_e \epsilon_0 \vec{E} + \epsilon_0 \vec{E} = \frac{\epsilon}{\epsilon_0} \epsilon_0 \vec{E} = \epsilon \vec{E}$$

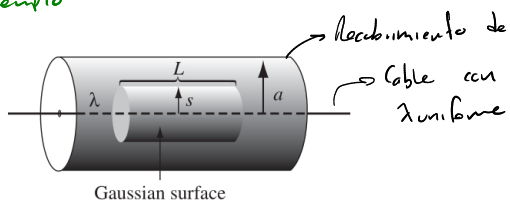
$\epsilon/\epsilon_0 = \epsilon_{rel}$
 $= \epsilon \rightarrow$ Permitividad eléctrica del material.

Es decir, que en un medio material lineal, homogéneo e isotrópico

$$\nabla \cdot \vec{E} = \frac{1}{\epsilon_0} \rho_{ext} = \frac{1}{\epsilon_0} (\rho_{ext} + \rho_{ind}) = \frac{1}{\epsilon_0} (\rho_{ext} - \nabla \cdot \vec{P}) \Rightarrow \nabla \cdot (\vec{P} + \epsilon_0 \vec{E}) = \nabla \cdot \vec{D} = \rho_{ext} \leftarrow \text{General (Diferencial)}$$

$$\hookrightarrow \int_{\partial V} \vec{D} \cdot d\vec{a} = \int_V \rho_{ext} dV \leftarrow \text{General (Integral)}$$

= Ejemplo =



Donde del hilo, sabemos que

$$\nabla \cdot \vec{D} = \rho_{ext} \rightarrow \int_{\text{ov}} \vec{D} \cdot d\vec{a} = D \cdot 2\pi s L = \int_V \rho_{ext} dV = \lambda L$$

$$\Rightarrow \vec{D} = \frac{\lambda}{2\pi s} \hat{e}_s$$

Caso $\vec{D} = \epsilon_0 \vec{E} + \vec{P} \Rightarrow \vec{E} = \frac{1}{2\pi\epsilon_0} \frac{\lambda}{s} \hat{e}_s - \frac{\vec{P}}{\epsilon_0}$
 No conocemos \vec{P} , entonces no podemos calcular \vec{E} en el material.
 Si tenemos la expresión de \vec{P} la podemos conocer, y si $\vec{P} = \chi_e \epsilon_0 \vec{E}$ entonces $\vec{D} = \epsilon \vec{E} \Rightarrow \vec{E} = \frac{\vec{D}}{\epsilon} = \frac{1}{2\pi\epsilon} \frac{\lambda}{s} \hat{e}_s$
 Pero $\vec{P} = \vec{0}$ si $s > a$, entonces ahí sí podemos conocer \vec{E} .

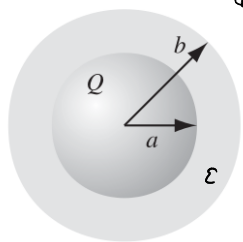
De este ejemplo vemos que si el medio dieléctrico es infinito, basta con reemplazar $\epsilon_0 \rightarrow \epsilon$.

Notemos que, aunque la ley de Gauss puede emplearse de forma análoga con \vec{D} y \vec{E} pero notemos que aunque $\nabla \times \vec{E} = \vec{0}$, para \vec{D} pasa lo siguiente

$$\nabla \times \vec{D} = \nabla \times (\epsilon_0 \vec{E} + \vec{P}) = \nabla \times \vec{P} \neq \vec{0} \Rightarrow \text{No se puede definir un potencial } \phi_D \text{ como si para } \vec{E}.$$

= Ejemplo 2 =

Esfera metálica cargada rodeada por un material dieléctrico \rightarrow De outside si $r < a$, entonces $\vec{E} = \vec{P} = \vec{D} = \vec{0}$
 si $r > a$ $\vec{D} = \frac{Q}{4\pi\epsilon} \frac{\hat{e}_r}{r^2} \Rightarrow \begin{matrix} \epsilon = \epsilon & \text{si } a < r < b \\ \epsilon = \epsilon_0 & \text{si } b < r \end{matrix}$



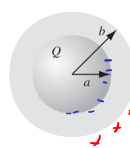
$$\Rightarrow \vec{E} = \begin{cases} \vec{0} & r < a \\ (Q/4\pi\epsilon) \hat{e}_r / r^2 & a < r < b \\ (Q/4\pi\epsilon_0) \hat{e}_r / r^2 & b < r \end{cases}$$

$$\rightarrow \text{Con } \vec{E}, \text{ podemos calcular } \phi(r) = - \int \vec{E}(r') \cdot d\vec{l}' = \begin{cases} (Q/4\pi\epsilon_0) \frac{1}{r} & r > b \\ (Q/4\pi) \left[\frac{1}{\epsilon_0 b} + \frac{1}{\epsilon r} \right] & b > r > a \\ (Q/4\pi) \left[\frac{1}{\epsilon_0 b} + \frac{1}{\epsilon a} - \frac{1}{\epsilon b} \right] & a > r \end{cases}$$

\rightarrow Ahora en el material $\vec{P} = \chi_e \epsilon_0 \vec{E}(a < r < b)$

$$= \frac{Q\chi_e}{4\pi} \left(\frac{\epsilon_0}{\epsilon} \right) \frac{\hat{e}_r}{r^2} \Rightarrow \rho_{ind} = -\nabla \cdot \vec{P} = -\frac{Q\chi_e}{4\pi} \left(\frac{\epsilon_0}{\epsilon} \right) \nabla \cdot \left[\nabla \left(\frac{1}{r} \right) \right] = -Q\chi_e \left(\frac{\epsilon_0}{\epsilon} \right) \delta^3(\vec{r} - \vec{0}) = 0 \Rightarrow \rho_{ind} = 0$$

$$\rightarrow \sigma_{ind} = \vec{P} \cdot \hat{n} \Big|_{\hat{n} = \pm \hat{e}_r} = \begin{cases} + \frac{Q\chi_e}{4\pi} \left(\frac{\epsilon_0}{\epsilon} \right) \frac{1}{b^2} & r=b \\ - \frac{Q\chi_e}{4\pi} \left(\frac{\epsilon_0}{\epsilon} \right) \frac{1}{a^2} & r=a \end{cases}$$



como $b > a \Rightarrow \frac{1}{a^2} > \frac{1}{b^2}$ entonces hay más cargas en este hueco.

\Rightarrow Podemos pensar a un dieléctrico como un "mal" conductor, pero para un conductor perfecto, el campo de cargas sí concentra el campo dentro.

= Condiciones de frontera

Dicho esto, podemos definir nuestras condiciones

$$\nabla \cdot \vec{E} = \frac{1}{\epsilon_0} \rho_{tot} \rightarrow \nabla \cdot \vec{D} = \rho_{ext} \xrightarrow{\text{Versión integral}} \sigma_{ext} = (\vec{D}_+ - \vec{D}_-) \cdot \hat{n} \rightarrow \text{condición de frontera para } \vec{D}$$

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

$$\vec{D} = \epsilon \vec{E}$$

$$\text{si } \vec{P} = \chi_e \epsilon_0 \vec{E} \rightarrow \vec{D} = (1 + \chi_e) \epsilon_0 \vec{E} = \epsilon \vec{E}$$

$$\sigma_{ext} = [(\epsilon \vec{E})_+ - (\epsilon \vec{E})_-] \cdot \hat{n} = (\epsilon_+ \vec{E}_+ - \epsilon_- \vec{E}_-) \cdot \hat{n}$$

$$(\vec{E}_+ - \vec{E}_-) \cdot \hat{n} = \vec{0}$$

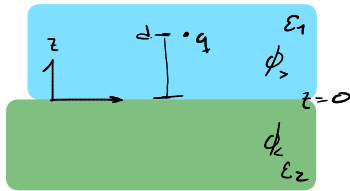
$$(\phi_- - \phi_+) = 0$$

$$\sigma_{ext} = (-\epsilon_- \nabla \phi_- + \epsilon_+ \nabla \phi_+) \cdot \hat{n}$$

Condición de frontera para medios lineales, homogéneos e isotrópicos

Con estas condiciones, podemos emplear el formalismo de Green y de Laplace nuevamente "

Interfaz plana entre dos dieléctricos



→ Para describir este sistema, debemos encontrar la solución a las ecuaciones

$$\begin{aligned} \nabla \cdot (\epsilon_1 \vec{E}) &= \rho_{ext} & \dots & z > 0 & \text{ con } \rho_{ext} = q \delta^3(\vec{r} - d\hat{e}_z) \\ \nabla \cdot (\epsilon_2 \vec{E}) &= 0 & \dots & z < 0 \\ \nabla \times \vec{E} &= \vec{0} & \forall z \end{aligned}$$

Sabemos que $(\vec{D}_1 - \vec{D}_2) \cdot \hat{n} \Big|_{z=0} = \sigma_{ext} = 0 \Rightarrow (\vec{D}_1 - \vec{D}_2) \cdot \hat{e}_z \Big|_{z=0} = 0 \Rightarrow (\epsilon_1 E_z^1 - \epsilon_2 E_z^2) \Big|_{z=0} = 0$

Entonces el potencial debe cumplir

$$\left(-\epsilon_1 \frac{\partial \phi_1}{\partial z} + \epsilon_2 \frac{\partial \phi_2}{\partial z} \right) \Big|_{z=0} = 0 \quad \text{y} \quad (\phi_1 - \phi_2) \Big|_{z=0} = 0 \quad \dots \dots \dots \text{(Condiciones de frontera)}$$

Inspirados en el método de imágenes, sabemos que lo anterior es equivalente a

1) $-\epsilon_1 \nabla^2 \phi_1 = q \delta^3(\vec{r} - d\hat{e}_z) \Rightarrow \phi_1(\vec{r}) = \frac{1}{4\pi\epsilon_1} \frac{q}{|\vec{r} - d\hat{e}_z|} + \int_0^{\infty} \vec{r} \cdot \vec{r} = \frac{1}{4\pi\epsilon_1} \left(\frac{q}{|\vec{r} - d\hat{e}_z|} + \frac{q'}{|\vec{r} + d\hat{e}_z|} \right)$ (determinar q')

Este sería \vec{r}' tal que $\nabla^2 \phi_0 = 0$ Hay que

2) $-\epsilon_2 \nabla^2 \phi_2 = 0 \Rightarrow \phi_2(\vec{r}) = \int_0^{\infty} \vec{r} \cdot \vec{r} = \frac{1}{4\pi\epsilon_2} \frac{q''}{|\vec{r} - d\hat{e}_z|}$ para $z < 0$ → Por determinar q''

Aquí no hay fuentes

Las ecuaciones de 1) y 2) se integran por simplicidad. Notamos que $|\vec{r} - d\hat{e}_z| = \sqrt{s^2 + (z \pm d)^2}$ s = x² + y²

$$\Rightarrow \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{1}{|\vec{r} - d\hat{e}_z|} \right) \Big|_{z=0} = \frac{(z \pm d)}{[s^2 + (z \pm d)^2]^{3/2}} \Big|_{z=0} = \frac{\pm d}{(s^2 + d^2)^{3/2}}$$

Por lo tanto:

$$\left(-\epsilon_1 \frac{\partial \phi_1}{\partial z} + \epsilon_2 \frac{\partial \phi_2}{\partial z} \right) \Big|_{z=0} = 0 \Rightarrow -\epsilon_1 \left[\frac{1}{4\pi\epsilon_1} \left(\frac{q(-d)}{(s^2 + d^2)^{3/2}} + \frac{q'(d)}{(s^2 + d^2)^{3/2}} \right) \right] + \epsilon_2 \frac{1}{4\pi\epsilon_2} \frac{q''(-d)}{(s^2 + d^2)^{3/2}} = 0 \Rightarrow +q - q' - q'' = 0$$

$$(\phi_1 - \phi_2) \Big|_{z=0} = 0 \Rightarrow \frac{1}{4\pi\epsilon_1} \left[\frac{q}{(s^2 + d^2)^{1/2}} + \frac{q'}{(s^2 + d^2)^{1/2}} \right] - \frac{1}{4\pi\epsilon_2} \frac{q''}{(s^2 + d^2)^{1/2}} = 0 \Rightarrow \frac{1}{\epsilon_1} (q + q') - \frac{q''}{\epsilon_2} = 0$$

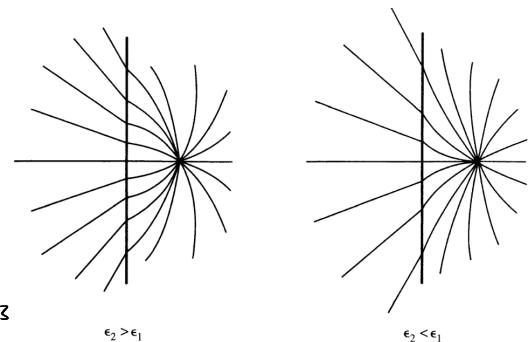
Es lo que decir

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ -1/\epsilon_1 & 1/\epsilon_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} q' \\ q'' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} q \\ q/\epsilon_1 \end{pmatrix} \Rightarrow \begin{pmatrix} q' \\ q'' \end{pmatrix} = \frac{1}{\epsilon_2 + \frac{\epsilon_2}{\epsilon_1}} \begin{pmatrix} 1/\epsilon_2 & -1 \\ 1/\epsilon_1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} q \\ q/\epsilon_1 \end{pmatrix} = \frac{\epsilon_1 \epsilon_2}{\epsilon_1 + \epsilon_2} \begin{pmatrix} q(\frac{1}{\epsilon_2} - \frac{1}{\epsilon_1}) \\ q(\frac{1}{\epsilon_1} + \frac{1}{\epsilon_2}) \end{pmatrix}$$

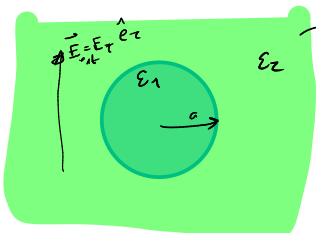
$$\therefore q' = \left(\frac{\epsilon_1 - \epsilon_2}{\epsilon_1 + \epsilon_2} \right) q, \quad q'' = \frac{2\epsilon_2}{\epsilon_1 + \epsilon_2} q$$

→ El signo de las cargas inducidas en la superficie en la interfaz.

→ Se interpreta como el apantallamiento debido al material debido a q y a las cargas inducidas en la interfaz.



Esfera de un material polarizable en un campo eléctrico constante



→ Por la simetría azimutal del problema, en general $\phi = \sum (A_l r^l + \frac{B_l}{r^{l+1}}) P_l(\cos \theta)$

Las condiciones a la frontera son:

i) $\phi(r < a) < \infty \Rightarrow \phi_1(r) = \phi(r < a) = \sum_l A_l r^l P_l(\cos \theta)$

ii) $\phi(r \rightarrow \infty) = -E_0 z = -E_0 r \cos \theta \Rightarrow \phi_2(r) = \phi(r > a) = \sum_l (A_l r^l + \frac{B_l}{r^{l+1}}) P_l(\cos \theta)$

iii) $(-\epsilon_2 \frac{\partial \phi_2}{\partial r} + \epsilon_1 \frac{\partial \phi_1}{\partial r}) \Big|_{r=a} = \sigma_{ext} = 0$, iv) $(\phi_2 - \phi_1) \Big|_{r=a} = 0$

Por ii) $A_l = 0 \quad \forall l \geq 2$ y $A_1 = -E_z$ pues $P_2(\cos\theta) = \cos\theta \Rightarrow \phi_2(\vec{r}) = -E_z r P_2(\cos\theta) + \sum_l \frac{B_l}{r^{l+1}} P_l(\cos\theta)$

Por iv) $-E_z a P_1(\cos\theta) + \sum_{l=1}^{\infty} \frac{B_l}{a^{l+1}} P_l(\cos\theta) - \sum_{l=1}^{\infty} A_l a^l P_l(\cos\theta) = 0$

$$\Rightarrow \left(-E_z a + \frac{B_1}{a^2} - A_1 a \right) P_1(\cos\theta) + \sum_{l=2}^{\infty} \left(\frac{B_l}{a^{l+1}} - A_l a^l \right) P_l(\cos\theta) = 0$$

$\underbrace{\quad}_{=0} \quad \underbrace{\quad}_{=0}$

$B_l = A_l a^{2l+1} \quad l \geq 2$

$\hookrightarrow B_1 - A_1 a^3 = E_z a^3 \dots (1)$

Por iii) $-E_z \left[-E_z P_1(\cos\theta) + \sum_l \frac{B_l}{a^{l+1}} P_l(\cos\theta) \right] + E_1 \left[\sum_l A_l a^{l-1} P_l(\cos\theta) \right] = 0$

$$\Rightarrow \left[E_z E_z + E_z \frac{B_1}{a^3} (1+1) + E_1 (1) A_1 \right] P_1(\cos\theta) + \sum_{l=2}^{\infty} \left[E_z \frac{B_l}{a^{l+1}} (l+1) + E_1 l A_l a^{l-1} \right] P_l(\cos\theta) = 0$$

$\underbrace{\quad}_{=0} \quad \underbrace{\quad}_{=0}$

$\hookrightarrow -\frac{E_z}{E_1} E_z a^3 = \frac{2 E_z}{E_1} B_1 + A_1 a^3 \dots (2)$

$\left[\frac{E_z}{E_1} (l+1) + l \right] A_l a^{l-1} = 0, \quad l \geq 2$

Reescribiendo (1) y (2)

$$\begin{pmatrix} -1 & 1 \\ 1 & \frac{2E_z}{E_1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_1 a^3 \\ B_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} E_z a^3 \\ -\frac{E_z}{E_1} E_z a^3 \end{pmatrix} \Rightarrow \begin{pmatrix} A_1 a^3 \\ B_1 \end{pmatrix} = \frac{-E_z a^3}{2E_z/E_1 + 1} \begin{pmatrix} 2E_z/E_1 - 1 \\ -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ -E_z/E_1 \end{pmatrix}$$

$$\therefore A_1 = -\frac{2E_z/E_1 + E_z/E_1}{2E_z/E_1 + 1} E_z = -\frac{3}{2 + E_1/E_z} E_z \quad \text{y} \quad B_1 = -\frac{-1 + E_1/E_z}{+1 + 2E_z/E_1} a^3 E_z = \frac{E_1/E_z - 1}{E_1/E_z + 2} a^3 E_z$$

$$= -\frac{3E_z}{2E_z + E_1} E_z \quad = \frac{E_1 - E_z}{E_1 + 2E_z} a^3 E_z$$

Por tanto $\phi_c(\vec{r}) = -\frac{3}{2 + E_1/E_z} E_z r \cos\theta \Rightarrow \vec{E}_c = -\nabla\phi_c = \frac{\vec{E}_{ext}}{2 + E_1/E_z}$ según E_1 y E_z puede ser que $\|\vec{E}_c\|$ sea mayor o menor que el campo externo

$\phi_s(\vec{r}) = -E_z r \cos\theta + \left(\frac{E_1/E_z - 1}{E_1/E_z + 2} \right) E_z \frac{a^3 \cos\theta}{r^2} \frac{4\pi\epsilon_0}{4\pi\epsilon_0}$

$\underbrace{\quad}_{\text{este término puede verse con } \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{\vec{P} \cdot \vec{r}}{r^3}; \text{ con } \vec{P} = 4\pi\epsilon_0 a^3 \left(\frac{E_1/E_z - 1}{E_1/E_z + 2} \right) \vec{E}_{ext}}$

según E_z y E_1 , el dipolo \vec{P} puede ser paralelo o antiparalelo al campo externo

Recordemos que la polarización es tal que

$\vec{P} = \epsilon_0 \chi_e \vec{E}$ y podemos escribir χ_e en términos de ϵ_1/ϵ_z como sigue: $\vec{D} = \vec{P} + \epsilon_0 \vec{E} = \epsilon_z \chi_e \vec{E} + \epsilon_0 \vec{E} = \epsilon_z \left(\frac{\epsilon_1}{\epsilon_z} + 1 \right) \vec{E}$

$\Rightarrow \frac{\epsilon_1}{\epsilon_z} = \chi_e + 1$

$\vec{P} = \epsilon_0 \left(\frac{\epsilon_1}{\epsilon_z} - 1 \right) \vec{E} = (\epsilon_1 - \epsilon_0) \vec{E}$; pero $\vec{P} = \int_V \vec{p} = \frac{4}{3} \pi a^3 \vec{P}$

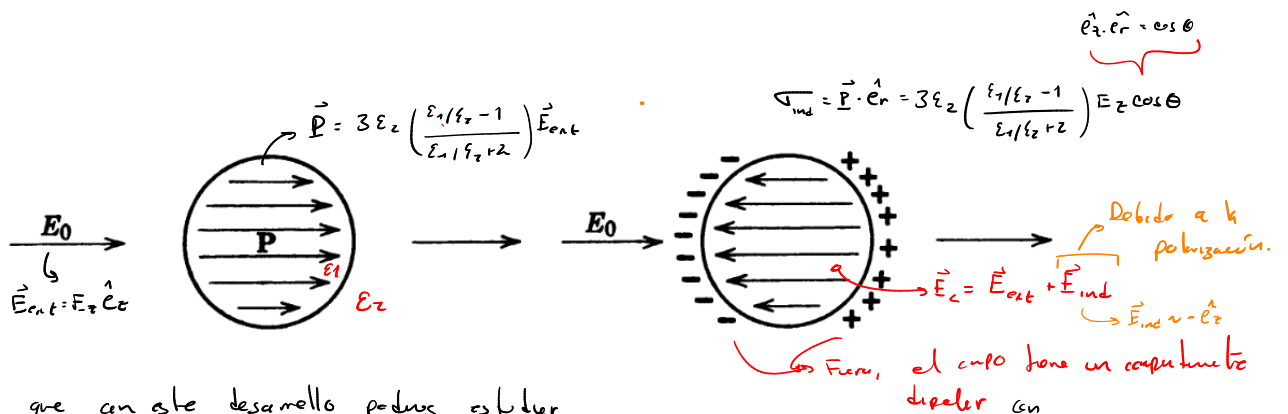
$\Rightarrow \vec{P} = \frac{3}{4\pi a^3} \vec{P}$

$\Rightarrow \vec{P} = \frac{3}{4\pi a^3} 4\pi\epsilon_0 a^3 \left(\frac{\epsilon_1/\epsilon_z - 1}{\epsilon_1/\epsilon_z + 2} \right) \vec{E}_{ext}$

$\Rightarrow \vec{P} = 3\epsilon_0 \left(\frac{\epsilon_1/\epsilon_z - 1}{\epsilon_1/\epsilon_z + 2} \right) \vec{E}_{ext}$

$\Rightarrow \vec{P} = 3\epsilon_0 \left(\frac{\epsilon_1/\epsilon_z - 1}{\epsilon_1/\epsilon_z + 2} \right) \vec{E}_{ext}$

Resumen:



* Notamos que con este desarrollo podemos establecer también cavidades, es decir $\epsilon_1 \rightarrow \epsilon_0$

Polarizabilidad molecular

En esta sección relacionaremos las propiedades micro y macroscópicas de la materia pero para esto recordamos los siguientes puntos:

i) El promedio fenomenológico se hacen en volúmenes muy pequeños a escalas macroscópicas pero grandes a escalas microscópicas. En particular **consideraremos esferas**.

Para una esfera con $\vec{P} = \text{cte}$ en la presencia de un campo externo constante

ii) El campo dentro de la esfera es $\vec{E}_c = \frac{-\vec{P}}{3\epsilon_0}$

iii) El campo inducido, fuera de la esfera, es la de un dipolo puntual \vec{p} tal que

$\vec{P} \sim \vec{E}_{ext} \longrightarrow$ Definimos entonces

$$\vec{P} = \alpha \vec{E}_{ext}$$

Polarizabilidad, y en general es un tensor

Si de nuevo consideramos la estructura de la materia y nos fijamos en las partículas "complejas" que ahora llamaremos moléculas, recordamos que definimos:

$$\vec{P} = N e \epsilon_0 \vec{E} = \langle \vec{\Pi} \rangle$$

$\xrightarrow{\text{Promedio de la densidad de dipolos}}$
 \downarrow Campo macroscópico

Para recuperar \vec{E} y $\langle \vec{\Pi}(\vec{r}) \rangle$ debemos determinar cuál es el campo eléctrico actuando sobre las partículas complejas:

Si todas las partículas complejas son iguales

$$\langle \vec{\Pi}(\vec{r}) \rangle = \left\langle \sum_{i=1}^N \vec{P}_i(\vec{r}) \right\rangle \frac{1}{V(\vec{r})}$$

$$= \frac{N(V) \langle \vec{P}_i(\vec{r}) \rangle}{V(\vec{r})}$$

no necesitamos el promedio
 $= N(\vec{r}) \langle \vec{P}_i(\vec{r}) \rangle$
 Densidad de número de partículas

$$\vec{E}_{ex} = \vec{E} + \vec{E}_{int}$$

\downarrow Campo exacto en \vec{r}
 \downarrow Campo promedio
 \downarrow Campo interno

Campo interno

$$\vec{E}_{int} = \vec{E}_{neut} - \vec{E}_{pol}$$

\downarrow Campo debido a las moléculas cercanas al punto \vec{r}

Campo de todas las moléculas tratadas como un continuo mediante \vec{P}

$$\vec{E}_{int} = \frac{\vec{P}}{3\epsilon_0} + \vec{E}_{neut}$$

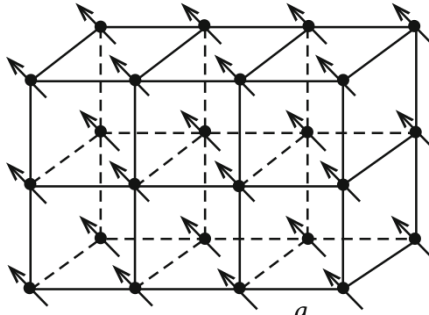
\vec{E}_{pol} lo podemos conocer si consideramos el campo promedio en una esfera infinitamente chica con $\vec{P} = \text{cte}$. Este cálculo lo realizamos anteriormente y obtenimos que dentro de la esfera $\vec{E}_c = \vec{E}_{pol} = -\frac{\vec{P}}{3\epsilon_0}$

→ Para determinar el campo cercano consideramos:

→ Campo eléctrico debido a las acciones de las N dipolos \vec{P}_i

→ Estos son producto de un campo externo y por tanto todos se alinean en su dirección

→ Los N dipolos se encuentran en una red cuadrada con constante de red a .



=> Cada dipolo se encuentra en la posición $\vec{r}_{ijk} = a(i\hat{e}_x + j\hat{e}_y + k\hat{e}_z)$

=> El campo eléctrico de cada dipolo es: $\vec{E}_{ijk} = \frac{3\vec{r}_{ijk}(\vec{P} \cdot \vec{r}_{ijk}) - \vec{P}(r_{ijk}^2)}{4\pi\epsilon_0 r_{ijk}^5}$

→ El campo eléctrico total es:

$$\vec{E}_{\text{total}} = \sum_{i,j,k} \vec{E}_{ijk} \rightarrow \text{Fijémosnos en } \vec{E}_{\text{total}} \cdot \hat{e}_x = \sum_{i,j,k} \vec{E}_{ijk} \cdot \hat{e}_x = \frac{1}{q^3} \sum_{i,j,k} \frac{3i(P_x i + P_y j + P_z k) - P_x (i^2 + j^2 + k^2)}{4\pi\epsilon_0 (i^2 + j^2 + k^2)^{5/2}}$$

$$\Rightarrow \vec{E}_{\text{total}} \cdot \hat{e}_x = \frac{1}{q^3} \sum_{i,j,k} \left[\frac{3(i^2 P_x + j^2 P_y + k^2 P_z) - P_x (i^2 + j^2 + k^2)}{4\pi\epsilon_0 (i^2 + j^2 + k^2)^{5/2}} \right]$$

Como i,j,k corren sobre los mismos índices (positivos y negativos)

los términos $\sum_{i,j,k} \frac{ijP_y}{(i^2+j^2+k^2)^{5/2}} = \sum_{i,j,k} \frac{jk}{(i^2+j^2+k^2)^{5/2}} = 0$

$$\sum_{i,j,k} \frac{i^2}{(i^2+j^2+k^2)^{5/2}} = \sum_{i,j,k} \frac{j^2}{(i^2+j^2+k^2)^{5/2}} = \sum_{i,j,k} \frac{k^2}{(i^2+j^2+k^2)^{5/2}}$$

$$\Rightarrow \vec{E}_{\text{total}} \cdot \hat{e}_x = \frac{1}{q^3} \sum_{i,j,k} \frac{[3i^2 - (i^2 + j^2 + k^2)] P_x \cdot \hat{e}_x}{4\pi\epsilon_0 (i^2 + j^2 + k^2)^{5/2}} = 0$$

Realizando el procedimiento análogo en $\vec{E}_{\text{total}} \cdot \hat{e}_y$ y $\vec{E}_{\text{total}} \cdot \hat{e}_z$, llegamos a la conclusión de que

$$\vec{E}_{\text{total}} = \vec{0} \rightarrow \text{para una red cuadrada}$$

→ Es un caso con alta simetría y por tanto es de esperarse que lo mismo se valga para sólidos amorfos.

Si bien, para otras estructuras este resultado no es exacto, sino que

$$\vec{E}_{\text{total}} = \sum \vec{P} \rightarrow \text{se aproxima como que } \vec{E}_{\text{total}} \approx \vec{0}.$$

→ tener en la simetría de la red

Tras estos cálculos, recordemos

→ *Muover copia*

$$\vec{P} = \chi_e \epsilon_0 \vec{E} = \langle \vec{P} \rangle = \left\langle \sum_i \vec{P}_i \right\rangle = \frac{N}{V} \langle \vec{P} \rangle = n \langle \vec{P} \rangle$$

Asimismo: $\vec{E}_{\text{ext}} = \vec{E} + \vec{E}_{\text{int}} = \vec{E} + \vec{E}_{\text{total}} = \vec{E} + \frac{\vec{P}}{3\epsilon_0}$

→ $\frac{\vec{P}}{3\epsilon_0}$

→ $\vec{E}_{\text{ext}} = \vec{E} + \frac{\vec{P}}{3\epsilon_0}$

y para esferas

$$\langle \vec{P} \rangle = \langle \alpha_{\text{mol}} \vec{E}_{\text{ext}} \rangle$$

Entiendo estas ideas $\vec{P} = n \langle \vec{P} \rangle = n \langle \alpha_{\text{mol}} \vec{E}_{\text{ext}} \rangle = n \alpha_{\text{mol}} \left\langle \vec{E} + \frac{\vec{P}}{3\epsilon_0} \right\rangle = n \alpha_{\text{mol}} \left(\vec{E} + \frac{\vec{P}}{3\epsilon_0} \right)$

ya son promedio

Sustituyendo $\vec{P} = \epsilon_0 \chi_e \vec{E}$ en el lado derecho

$$\vec{P} = \epsilon_0 \chi_e \vec{E} = n \alpha_{\text{mol}} \left(\vec{E} + \frac{\epsilon_0 \chi_e \vec{E}}{3\epsilon_0} \right) = n \alpha_{\text{mol}} \vec{E} + \epsilon_0 \chi_e \frac{n \alpha_{\text{mol}}}{3\epsilon_0} \vec{E}$$

$$\Rightarrow \epsilon_0 \chi_e \left(1 - \frac{n \alpha_{\text{mol}}}{3\epsilon_0} \right) \vec{E} = n \alpha_{\text{mol}} \vec{E} \rightarrow \epsilon_0 \chi_e \left(1 - \frac{n \alpha_{\text{mol}}}{3\epsilon_0} \right) = n \alpha_{\text{mol}}$$

$$\Rightarrow \chi_e = \frac{n \alpha_{\text{mol}}}{\epsilon_0 - \frac{n \alpha_{\text{mol}}}{3}}$$

y también habíamos visto que

$$\vec{D} = \epsilon \vec{E} = \epsilon_0 \vec{E} + \vec{P} = \vec{E} + \chi_e \epsilon_0 \vec{E} = (1 + \chi_e) \epsilon_0 \vec{E}$$

$$\Rightarrow \frac{\epsilon}{\epsilon_0} = 1 + \chi_e \Rightarrow \chi_e = \frac{\epsilon}{\epsilon_0} - 1 \rightarrow \frac{\epsilon}{\epsilon_0} - 1 = \frac{n \alpha_{\text{mol}}}{\epsilon_0 - \frac{n \alpha_{\text{mol}}}{3}} \Rightarrow \left(\frac{\epsilon}{\epsilon_0} - 1 \right) \left(\epsilon_0 - \frac{n \alpha_{\text{mol}}}{3} \right) = \frac{n \alpha_{\text{mol}}}{\epsilon_0}$$

$$\Rightarrow (\epsilon/\epsilon_0 - 1) - \frac{n \alpha_{\text{mol}}}{3\epsilon_0} (\epsilon/\epsilon_0 - 1) = \frac{n \alpha_{\text{mol}}}{\epsilon_0} \Rightarrow (\epsilon/\epsilon_0 - 1) = \frac{n \alpha_{\text{mol}}}{3\epsilon_0} [3 + (\epsilon/\epsilon_0 - 1)] = \frac{n \alpha_{\text{mol}}}{3\epsilon_0} [(\epsilon/\epsilon_0 + 2)]$$

$$\therefore \alpha_{\text{mol}} = \frac{3\epsilon_0}{n} \left(\frac{\epsilon/\epsilon_0 - 1}{\epsilon/\epsilon_0 + 2} \right)$$

Es posible conocer propiedades microscópicas a partir de cantidades macroscópicas como ϵ .

→ Relación de Clausius-Mossotti o de Lorentz-Lorentz

= Modelo para la polarizabilidad =

Para los materiales que estamos considerando hay dos tipos de comportamiento de los dipolos:

- Se generan debido a un campo eléctrico externo
- Los dipolos existentes se alinean según el campo externo

Para estas dos cosas un **modelo sencillo** es considerar que las cargas dentro de cada partícula compuesta se encuentran atadas a su centro por un tipo de resorte. En este caso:

$$\vec{F} = q_e \vec{E} = m \omega_0^2 \vec{r} \Rightarrow \vec{r} = \frac{q_e}{m \omega_0^2} \vec{E} \Rightarrow \vec{p}_{ind} = q_e \vec{r} = \frac{q_e^2}{m \omega_0^2} \vec{E}$$

Si se tienen diversas tipos de partículas compuestas, entonces $\alpha_{mol} = \frac{1}{\epsilon_0} \sum_j \frac{q_j^2}{m_j \omega_j^2}$

Para tener en cuenta fluctuaciones térmicas consideramos el Hamiltoniano

$$\mathcal{H}_0 = \frac{\|\vec{p}\|^2}{2m} + \frac{m \omega_0^2}{2} \|\vec{r}\|^2 + q_e \phi = \frac{\|\vec{p}\|^2}{2m} + \frac{m \omega_0^2}{2} \|\vec{r}\|^2 - q_e E z$$

\rightarrow **Momento de la partícula**
 \rightarrow **Este Hamiltoniano asume que no había dipolos antes del campo eléctrico**
 \rightarrow **campo eléctrico en \hat{e}_z**

$$f(u) = e^{-\mathcal{H}/k_B T}$$

\rightarrow **Función de distribución de Boltzmann para partículas clásicas**

$k_B =$ cte de Boltzmann, $T =$ temperatura

$$\text{Con esto, } \langle p_{ind} \rangle = \frac{\int d^3 p \int d^3 r (e z) f(u_0)}{\int d^3 p \int d^3 r f(u_0)}$$

$$\text{Si: } \vec{r}' = \vec{r} - \frac{E q_e}{m \omega_0^2} \hat{e}_z \text{ entonces } \mathcal{H} = \frac{\|\vec{p}\|^2}{2m} + \frac{m \omega_0^2}{2} \|\vec{r}'\|^2 - \frac{q_e^2 E^2}{2 m \omega_0^2} \rightarrow \langle \vec{p}_{ind} \rangle = \frac{\int d^3 p \int d^3 r' (e z' + \frac{q_e^2 E}{m \omega_0^2}) f(u_0)}{\int d^3 p \int d^3 r' f(u_0)}$$

\rightarrow **Integremos en todo el espacio y todas las momentas**

Como $f(u)$ es par, $z' f(u)$ es impar y por tanto

$$\langle p_{ind} \rangle = \frac{\int d^3 p \int d^3 r' (e z' + \frac{q_e^2 E}{m \omega_0^2}) f(u_0)}{\int d^3 p \int d^3 r' f(u_0)} = \frac{q_e}{m \omega_0^2} \vec{E}$$

\rightarrow **Nos quedamos fluctuaciones térmicas**

\rightarrow **Es como si de un dieléctrico de materiales sin momentos dipolares antes del campo eléctrico**

Para materiales polares, con dipolos antes del campo eléctrico, el Hamiltoniano se modifica uno sigue:

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 - \vec{p}_0 \cdot \vec{E} = \mathcal{H}_0 - p_0 E \cos \theta \Rightarrow f(u) = f(u_0) e^{p_0 E \cos \theta / k_B T}$$

\rightarrow **$\vec{E} = E \hat{e}_z$**

por lo tanto

$$\langle \vec{p}_0 \rangle = \frac{\int d^3 p \int d^3 r' \vec{p}_0 f(u_0) e^{p_0 E \cos \theta / k_B T}}{\int d^3 p \int d^3 r' f(u_0) e^{p_0 E \cos \theta / k_B T}} = \frac{\int d\Omega p_0 \cos \theta e^{p_0 E \cos \theta / k_B T}}{\int d\Omega e^{p_0 E \cos \theta / k_B T}} \hat{e}_z$$

\rightarrow **Por simetría, las otras componentes se pierden a cero**

$$= \frac{\int_{-1}^1 du p_0 u e^{p_0 E u / k_B T} / \int_{-1}^1 du e^{p_0 E u / k_B T}}{\int_{-1}^1 du p_0 u (1 + \frac{p_0 E}{k_B T} u) / \int_{-1}^1 du (1 + \frac{p_0 E}{k_B T} u)}$$

\rightarrow **impar**

\rightarrow **impar**

$$= \frac{1}{2} \frac{p_0^2 E}{k_B T}$$

Polares $e^x \approx 1+x \rightarrow e^{p_0 E u / k_B T} \approx 1 + \frac{p_0 E}{k_B T} u$

Com este, podemos ver que em geral!

$$\alpha_{\text{mol}} = \alpha_{\text{ion}} + \alpha_{\text{pol}} ; \text{ donde}$$

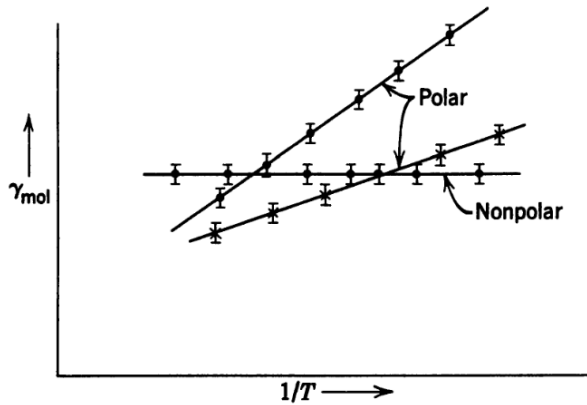
$$\alpha_{\text{ion}} = \frac{1}{\epsilon_0} \frac{q_e^2}{m \omega_0^2}$$

Independente de T

$$\alpha_{\text{pol}} = \frac{1}{\epsilon \epsilon_0} \frac{p^2 E}{k_B T}$$

Modelo de Debye-Lorentz.

Para $T \rightarrow \infty$, $\alpha_{\text{pol}} \rightarrow 0$, como
es de esperar.



* Mais adiante, quando começamos a falar de electrodinâmica, veremos que também há modelos para ϵ , donde no de interés se conoce como Modelo de Drude-Sommerfeld y otros como Modelo de Lorentz.