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, inservible 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 → Este no lo conocemos

$\rho_M =$ Densidad de cargas (microscópica)

Oscila rápidamente por movimiento Browniano

ii) Definimos un promedio fenomenológico

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

↳ 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

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

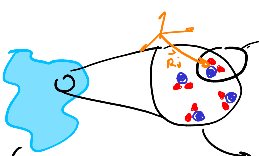
Con estos tres puntos concluimos que:

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

$$\nabla\cdot\vec{E} = \frac{\langle\rho_M\rangle}{\varepsilon_0}$$
$$\nabla\times\vec{E} = \vec{0}$$
$$\vec{E} = -\nabla\langle\phi_M\rangle$$

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



→ j-ésima partícula compleja

↳ Materia macroscópica

↳ Colección de M partículas complejas

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

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

y con esto, el potencial de las M partículas es

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

↳ promediando ⟶

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

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

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

Con este desarrollo, definimos

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

$$\vec P(\vec r) = \langle\vec\pi_{eff}(\vec r)\rangle = \frac{1}{V}\sum_{j\in V}\vec P_j \to$$ Polarización (macroscópica) ⟶ 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

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

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

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

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

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

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 ⟶ Por otro lado $\nabla\cdot\vec E = \rho_{tot}(\vec r)/\varepsilon_0$

De igual manera, es conveniente definir

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

y de igual forma

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

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

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

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

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

$+\rho_{ind}(\vec r')$

→ 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 $\vec E = \vec E_{ext} + \vec E_{ind}$

→ Debido a redistribución de las cargas dentro de un material

Cargas adicionales o externas

↳ Por probar 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

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

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

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

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

Medios dieléctricos

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

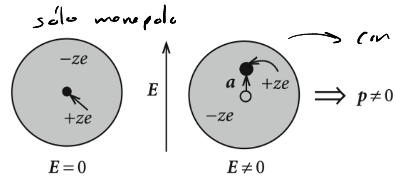
↳ Sólo hay cargas que deforman su distribución, dando pie a momentos multipolares en el equilibrio

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

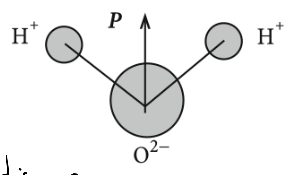


→ con el campo se crea un momento dipolar

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

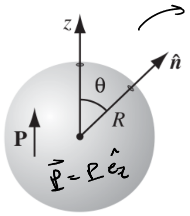
3) Ferroeléctricos.

↳ Materiales con $\vec P(\vec E=\vec 0)\neq\vec 0$ sin embargo esto sólo ocurre para temperatura T tal que $T<T_c$ → Temperatura de Curie.

Ecuaciones constitutivas (Propiedades eléctricas)

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

Supongamos que una esfera es tal que tiene una polarización constante:



En este caso $\sigma_{ind} = \vec{P}\cdot\hat{n} = P\cos\theta = P\,P_1(\cos\theta)$

Además, si no hay cargas externas $\frac{\sigma_{ind}}{\varepsilon_0} = (\vec{E}_> - \vec{E}_<)\Big|_{r=R}\cdot\hat{n} = \left(-\frac{\partial\phi_>}{\partial r} + \frac{\partial\phi_<}{\partial r}\right)\Big|_{r=R}$

y como $\phi_< = \sum_\ell A_\ell r^\ell P_\ell(\cos\theta)$

$\phi_> = \sum_\ell \frac{B_\ell}{r^{\ell+1}} P_\ell(\cos\theta)$

y como $\phi_<(R) = \phi_>(R) \Rightarrow A_\ell R^\ell = \frac{B_\ell}{R^{\ell+1}} \Rightarrow B_\ell = A_\ell R^{2\ell+1}$

$$\Rightarrow \left(-\frac{\partial\phi_<}{\partial r} + \frac{\partial\phi_>}{\partial r}\right)\Big|_{r=R} = -\sum_\ell\left(A_\ell\,\ell\, r^{\ell-1} - \frac{B_\ell}{r^{\ell+2}}(-\ell-1)\right)\Big|_{r=R} P_\ell(\cos\theta) = -\sum_\ell\left(A_\ell R^{\ell-1}\ell + \frac{A_\ell R^{2\ell+1}}{R^{\ell+2}}(\ell+1)\right)P_\ell(\cos\theta)$$

$$\Rightarrow \frac{\sigma_{ind}}{\varepsilon_0} = \frac{P}{\varepsilon_0}P_1(\cos\theta) = -\sum_\ell A_\ell R^{\ell-1}(2\ell+1)P_\ell(\cos\theta) \Rightarrow$$

Todos los $A_\ell = 0$ si $\ell \geq 2$

y $P = A_1 R^{1-1}(2\cdot 1+1)\varepsilon_0$

$\Rightarrow A_1 = \frac{P}{3\varepsilon_0}$

Por tanto

$\phi_< = \frac{P R^3 r\cos\theta}{3} = \frac{1}{3\varepsilon_0}\vec{P}\cdot\vec{r}$

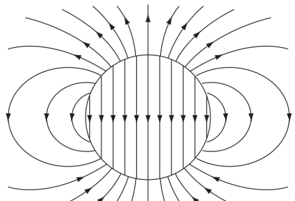
$\phi_> = \frac{R^3}{3\varepsilon_0}\frac{\vec{P}\cdot\vec{r}}{r^2}$

$\vec{E}_< = -\nabla\phi_< = -\frac{\vec{P}}{3\varepsilon_0}\nabla\cdot\vec{r} = -\frac{\vec{P}}{\varepsilon_0}$

$E_> = \frac{-1}{3\varepsilon_0}\vec{P}\cdot\nabla\left(\frac{\vec{r}}{r}\right) = \frac{R^3}{3}\frac{\vec{P}}{\varepsilon_0}\cdot\frac{\vec{r}}{r^3} = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{\vec{p}\cdot\vec{r}}{r^3}$

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

Notemos antes que si hubiera un campo eléctrico externo



$\vec{E}_{tot} = \vec{E}_{ext} + \vec{E}_{in} = \vec{E}_{ext} - \frac{\vec{P}}{\varepsilon_0}$ No lo podemos en general, sino un caso particular para este comportamiento.

Con esto podemos ver que $\vec{P}$ modifica el campo eléctrico total dentro del material y que, en general, lo podemos pensar como $\vec{P}(\vec{E})$ t.q. $\vec{P}(\vec{0}) = \vec{0}$ → Excepto ferroeléctricos

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

→ Serie de potencias $P_i(\vec{E}) = \sum_j \chi_{ij}E_j + \sum_{jk}\beta_{ijk}E_jE_k + \dots$ → Expresión general.

Materiales lineales (1) → $P_i(\vec{E}) = \sum_j \chi_{ij}E_j$

→ Si $\chi_{ij} = \chi\,\delta_{ij}$ → Material isótropos (2)

→ Si no, son materiales anisótropos

(3) Además si $\chi_{ij} \neq \chi_{ij}(\vec{r})$

→ Medio homogéneo, es decir tiene simetría de traslación

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

$$\boxed{\vec{P} = \chi_e\,\varepsilon_0\,\vec{E}}$$

χ_e → Susceptibilidad eléctrica (adimensional)
→ Función respuesta.

→ Como $\vec{D} = \vec{P} + \varepsilon_0\vec{E}$ ⟶ $\vec{D} = \chi_e\varepsilon_0\vec{E} + \varepsilon_0\vec{E} = \underbrace{(1+\chi_e)\varepsilon_0}_{=\varepsilon}\vec{E} = \varepsilon\vec{E}$

$\varepsilon/\varepsilon_0 = \varepsilon_{rel}$

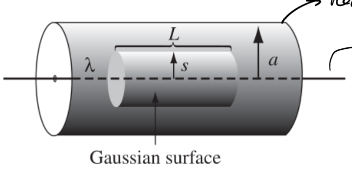
$=\varepsilon$ → Permitividad eléctrica del material.

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

$\nabla\cdot\vec{E} = \frac{1}{\varepsilon_0}\rho_{car} = \frac{1}{\varepsilon_0}(\rho_{ext} + \rho_{ind}) = \frac{1}{\varepsilon_0}(\rho_{ext} - \nabla\cdot\vec{P}) \Rightarrow \nabla\cdot(\vec{P} + \varepsilon_0\vec{E}) = \nabla\cdot\vec{D} = \rho_{ext}$ ← General (Diferencial)

→ $\oint_{\partial V}\vec{D}\cdot d\vec{a} = \int_V \rho_{ext}\,dV$ ← General (Integral)

= Ejemplo =



Recubrimiento de hule de radio a → Dentro del hule, sabemos que

Cable con λ uniforme

$$\nabla\cdot\vec D = \rho_{ext} \rightarrow \int_{\partial V}\vec D\cdot d\vec a = D\,2\pi s L = \int_V \rho_{ext}\,dv = \lambda L$$

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

Como $\vec D = \varepsilon_0\vec E + \vec P \Rightarrow \vec E = \frac{1}{2\pi\varepsilon_0}\frac{\lambda}{s}\hat e_s - \vec P$ → No conocemos $\vec P$, entonces no podemos calcular $\vec E$ en el material

Pero $\vec P = \vec 0$ si $s>a$, entonces ahí sí podemos conocer $\vec E$

Si tenemos la expresión de $\vec P$ la podemos conocer, y si $\vec P = \varepsilon_0\chi_e$ entonces $\vec D = \varepsilon\vec E \Rightarrow \vec E = \frac{\vec D}{\varepsilon} = \frac{1}{2\pi\varepsilon}\frac{\lambda}{s}\hat e_s$

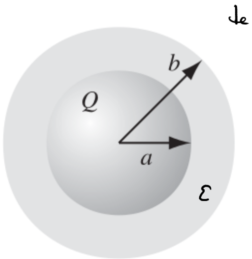
De este ejemplo vemos que si el medio dieléctrico es infinito, basta con remplazar $\varepsilon_0 \longrightarrow \varepsilon$.

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

$$\nabla\times\vec D = \nabla\times(\cancel{\varepsilon_0\vec E} + \vec P) = \nabla\times\vec P \neq 0$$ ⇒ No se puede definir un potencial ϕ_D como sí para $\vec E$.

= Ejemplo 2 =

Esfera metálica cargada recubierta de un material dieléctrico → De entrada si $r<a$, entonces $\vec E = \vec P = \vec D = \vec 0$



si $r>a$ $\vec D = \frac{Q}{4\pi\varepsilon}\frac{\hat e_r}{r^2}$ y $\varepsilon = \varepsilon$ si $a<r<b$; $\varepsilon = \varepsilon_0$ si $b<r$

$$\Rightarrow \vec E = \begin{cases} \vec 0 & r<a \\ (Q/4\pi\varepsilon)\,\hat e_r/r^2 & a<r<b \\ (Q/4\pi\varepsilon_0)\,\hat e_r/r^2 & b<r \end{cases}$$

→ Con $\vec E$, podemos calcular

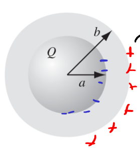
$$\phi(\vec r) = -\int_\infty^{\vec r}\vec E(\vec r')\cdot d\vec l' = \begin{cases} (Q/4\pi\varepsilon_0)\frac{1}{r} & r>b \\ (Q/4\pi)\left[\frac{1}{\varepsilon_0 b} + \frac{1}{\varepsilon r}\right] & b>r>a \\ (Q/4\pi)\left[\frac{1}{\varepsilon_0 b} + \frac{1}{\varepsilon a} - \frac{1}{\varepsilon b}\right] & a>r \end{cases}$$

→ Además en el material $\vec P = \chi_e\varepsilon_0\vec E(a<r<b)$

$$= \frac{Q\chi_e}{4\pi}\left(\frac{\varepsilon_0}{\varepsilon}\right)\frac{\hat e_r}{r^2} \Rightarrow \rho_{ind} = -\nabla\cdot\vec P = -\frac{Q\chi_e}{4\pi}\left(\frac{\varepsilon_0}{\varepsilon}\right)\nabla\cdot\left[\nabla\left(\frac{1}{r}\right)\right] = -Q\chi_e\left(\frac{\varepsilon_0}{\varepsilon}\right)\delta^3(\vec r-\vec 0) = 0$$

$$\Rightarrow \rho_{ind} = 0$$

$$\longrightarrow \sigma_{ind} = \vec P\cdot\hat n\Big|_{\hat n = \pm\hat e_r}^{r=b,\ r=a} = \begin{cases} +\frac{Q\chi_e}{4\pi}\left(\frac{\varepsilon_0}{\varepsilon}\right)\frac{1}{b^2} \\ -\frac{Q\chi_e}{4\pi}\left(\frac{\varepsilon_0}{\varepsilon}\right)\frac{1}{a^2} \end{cases}$$



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

⇒ Podemos pensar a un dieléctrico como un "mal" conductor pues para un conductor perfecto, el cambio de cargas sí cancela el campo dentro.

= Condiciones de frontera

Dicho esto, podemos redefinir nuestras condiciones

$\nabla\cdot\vec E = \frac{1}{\varepsilon_0}\rho_{tot} \longrightarrow \nabla\cdot\vec D = \rho_{ext} \xrightarrow{\text{Versión integral}} \sigma_{ext} = (\vec D_> - \vec D_<)\cdot\hat n$ → condición de frontera para $\vec D$

con $\vec D = \vec P + \varepsilon_0\vec E$

$\nabla\times\vec E = 0$

$$\boxed{(\vec E_> - \vec E_<)\times\hat n = \vec 0}$$

$$\boxed{(\phi_< - \phi_>) = 0}$$

si $\vec P = \chi_e\varepsilon_0\vec E$ → $\vec D = (1+\chi_e)\varepsilon_0\vec E = \varepsilon\vec E$

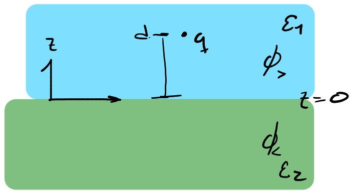
$$\sigma_{ext} = [(\varepsilon\vec E)_< - (\varepsilon\vec E)_>]\cdot\hat n = (\varepsilon_<\vec E_< - \varepsilon_>\vec E_>)\cdot\hat n$$

$$\boxed{\sigma_{ext} = (-\varepsilon_<\nabla\phi_< + \varepsilon_>\nabla\phi_>)\cdot\hat n}$$

Condición de frontera para medios lineales, homogéneos e isótropos

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

$$\nabla\cdot(\varepsilon_1\vec{E}) = \rho_{ext} \quad \dots\dots \; z>0 \quad \text{con} \quad \rho_{ext} = q\,\delta^3(\vec{r}-d\hat{e}_z)$$

$$\nabla\cdot(\varepsilon_2\vec{E}) = 0 \quad \dots\dots \; z<0$$

$$\nabla\times\vec{E} = \vec{0} \qquad \forall z$$

Sabemos que $(\vec{D}_> - \vec{D}_<)\cdot\hat{n}\Big|_{z=0} = \sigma_{ext} = 0 \Rightarrow (\vec{D}_> - \vec{D}_<)\Big|_{z=0}\cdot\hat{e}_z = 0 \Rightarrow (\varepsilon_1 E_z^< - \varepsilon_2 E_z^>)\Big|_{z=0} = 0$

Entonces el potencial debe cumplir

$$\left(-\varepsilon_1\frac{\partial\phi_>}{\partial z} + \varepsilon_2\frac{\partial\phi_<}{\partial z}\right)\Big|_{z=0} = 0 \quad y \quad (\phi_< - \phi_>)\Big|_{z=0} = 0 \quad \dots\dots \text{(Condiciones de frontera)}$$

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

1) $-\varepsilon_1\nabla^2\phi_> = q\,\delta^3(\vec{r}-\underbrace{d\hat{e}_z}_{\text{Esto sería } \vec{r}'}) \Rightarrow \phi_>(\vec{r}) = \frac{1}{4\pi\varepsilon_1}\frac{q}{\|\vec{r}-d\hat{e}_z\|} + \underbrace{f_D(\vec{r},\vec{r}')}_{\text{tal que } \nabla^2 f_D = 0} = \frac{1}{4\pi\varepsilon_1}\left(\frac{q}{\|\vec{r}-d\hat{e}_z\|} + \frac{q'}{\|\vec{r}+d\hat{e}_z\|}\right)$ para $z>0$

→ Hay que determinar q'

2) $-\varepsilon_2\nabla^2\phi_< = 0$ (Ya que aquí no hay fuentes) $\Rightarrow \phi_<(\vec{r}) = \overbrace{f_D'(\vec{r},\vec{r}')}^{\nabla^2 f_D = 0} = \frac{1}{4\pi\varepsilon_2}\frac{q''}{\|\vec{r}-d\hat{e}_z\|}$ para $z<0$ → Por determinar q''

Los posiciones de 1) y 2) se escogieron por simplicidad. Notemos que $\|\vec{r}\pm d\hat{e}_z\| = \sqrt{s^2+(z\pm d)^2}$, $s^2 = x^2+y^2$

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

Por lo tanto:

$$\left(-\varepsilon_1\frac{\partial\phi_>}{\partial z} + \varepsilon_2\frac{\partial\phi_<}{\partial z}\right)\Big|_{z=0} = 0 \longrightarrow -\varepsilon_1\left[\frac{1}{4\pi\varepsilon_1}\left(\frac{q(-d)}{(s^2+d^2)^{3/2}} + \frac{q'(+d)}{(s^2+d^2)^{3/2}}\right)\right] + \varepsilon_2\frac{1}{4\pi\varepsilon_2}\frac{q''(-d)}{(s^2+d^2)^{3/2}} = 0 \Rightarrow +q - q' - q'' = 0$$

$$(\phi_< + \phi_>)\Big|_{z=0} = 0 \longrightarrow \frac{1}{4\pi\varepsilon_1}\left[\frac{q}{(s^2+d^2)^{3/2}} + \frac{q'}{(s^2+d^2)^{3/2}}\right] - \frac{1}{4\pi\varepsilon_2}\frac{q''}{(s^2+d^2)^{3/2}} = 0 \Rightarrow \frac{1}{\varepsilon_1}(q+q') - \frac{q''}{\varepsilon_2} = 0$$

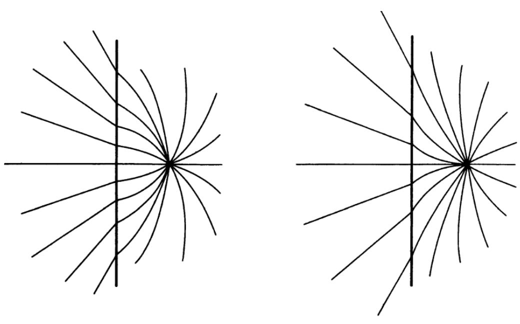
Esto quiere decir

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ -1/\varepsilon_1 & 1/\varepsilon_2 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} q' \\ q'' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} q \\ q/\varepsilon_1 \end{pmatrix} \Rightarrow \begin{pmatrix} q' \\ q'' \end{pmatrix} = \frac{1}{\frac{1}{\varepsilon_2}+\frac{1}{\varepsilon_1}}\begin{pmatrix} 1/\varepsilon_2 & -1 \\ 1/\varepsilon_1 & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} q \\ q/\varepsilon_1 \end{pmatrix} = \frac{\varepsilon_1\varepsilon_2}{\varepsilon_1+\varepsilon_2}\begin{pmatrix} q\left(\frac{1}{\varepsilon_2}-\frac{1}{\varepsilon_1}\right) \\ q(2/\varepsilon_1) \end{pmatrix}$$

$$\therefore \quad q' = \left(\frac{\varepsilon_1-\varepsilon_2}{\varepsilon_2+\varepsilon_1}\right)q \quad , \quad q'' = \frac{2\varepsilon_2}{\varepsilon_2+\varepsilon_1}q$$

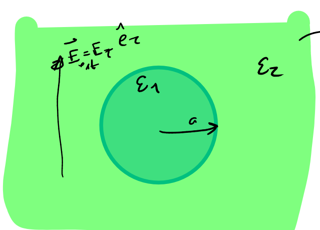
↳ Se interpreta como el apantallamiento debido a la polarización dentro del material debido a q y a las cargas inducidas en la interfaz

↳ El efecto de las cargas inducidas en la superficie en la interfaz.



$\varepsilon_2 > \varepsilon_1$ $\qquad$ $\varepsilon_2 < \varepsilon_1$

↳ Esfera de un material polarizable en un campo eléctrico constante



→ Por la simetría azimutal del problema, en general $\phi = \sum\left(A_\ell r^\ell + \frac{B_\ell}{r^{\ell+1}}\right)P_\ell(\cos\theta)$

Las condiciones a la frontera son:

i) $\phi(r<a) < \infty \longrightarrow \phi_<(\vec{r}) = \phi(r<a) = \sum_\ell A_\ell r^\ell P_\ell(\cos\theta)$

ii) $\phi(r\to\infty) = -E_z z = -E_z r\cos\theta \longrightarrow \phi_>(\vec{r}) = \phi(r>a) = \sum_\ell\left(A_\ell^> r^\ell + \frac{B_\ell}{r^{\ell+1}}\right)P_\ell(\cos\theta)$

iii) $\left(-\varepsilon_2\frac{\partial\phi_>}{\partial r} + \varepsilon_1\frac{\partial\phi_<}{\partial r}\right)\Big|_{r=a} = \sigma_{ext} = 0$, iv) $(\phi_> - \phi_<)\Big|_{r=a} = 0$

Por iii) $A_\ell^{>}=0 \ \forall\, \ell \geq 2$ y $A_1^{>}=-E_z$ pues $P_1(\cos\theta)=\cos\theta \Rightarrow \phi_>(\vec r)=-E_z r P_1(\cos\theta)+\sum_\ell \frac{B_\ell}{r^{\ell+1}}P_\ell(\cos\theta)$

Por iv)
$$-E_z a P_1(\cos\theta)+\sum_{\ell=1}^{\infty}\frac{B_\ell}{a^{\ell+1}}P_\ell(\cos\theta)-\sum_{\ell=1}^{\infty}A_\ell a^\ell P_\ell(\cos\theta)=0$$

$$\Rightarrow \underbrace{\left(-E_z a+\frac{B_1}{a^2}-A_1 a\right)}_{=0}P_1(\cos\theta)+\sum_{\ell=2}^{\infty}\underbrace{\left(\frac{B_\ell}{a^{\ell+1}}-A_\ell a^\ell\right)}_{=0}P_\ell(\cos\theta)=0$$

$\hookrightarrow B_\ell = A_\ell a^{2\ell+1} \quad \ell\geq 2$

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

Por iii)
$$-\varepsilon_z\left[-E_z P_1(\cos\theta)-\sum_\ell \frac{B_\ell}{a^{\ell+2}}(\ell+1)P_\ell(\cos\theta)\right]+\varepsilon_1\left[\sum_\ell \ell A_\ell a^{\ell-1}P_\ell(\cos\theta)\right]=0$$

$$\Rightarrow \underbrace{\left[\varepsilon_z E_z+\varepsilon_z\frac{B_1}{a^3}(1+1)+\varepsilon_1(1)A_1\right]}_{=0}P_1(\cos\theta)+\sum_{\ell=2}^{\infty}\underbrace{\left[\frac{\varepsilon_z \overbrace{B_\ell}^{A_\ell a^{2\ell+1}}}{a^{\ell+2}}(\ell+1)+\varepsilon_1 \ell A_\ell a^{\ell-1}\right]}_{=0}P_\ell(\cos\theta)=0$$

$\hookrightarrow -\frac{\varepsilon_z}{\varepsilon_1}E_z a^3 = \frac{2\varepsilon_z}{\varepsilon_1}B_1 + A_1 a^3 \quad \ldots\ldots (2)$

$\hookrightarrow \left[\frac{\varepsilon_z}{\varepsilon_1}(\ell+1)+\ell\right]A_\ell a^{\ell+1}=0, \quad \ell\geq 2$

En este caso $A_\ell=0$

o bien $\frac{\varepsilon_z}{\varepsilon_1}=\frac{\ell}{\ell+1} \rightarrow$ Retomaremos esta solución más adelante

Reescribiendo (1) y (2)

$$\begin{pmatrix}-1 & 1\\ 1 & \frac{2\varepsilon_z}{\varepsilon_1}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}a^3A_1\\ B_1\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}E_z a^3\\ -\frac{\varepsilon_z}{\varepsilon_1}E_z a^3\end{pmatrix}\Rightarrow\begin{pmatrix}a^3A_1\\ B_1\end{pmatrix}=\frac{-E_z a^3}{2\varepsilon_z/\varepsilon_1+1}\begin{pmatrix}2\varepsilon_z/\varepsilon_1 & -1\\ -1 & -1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1\\ -\varepsilon_z/\varepsilon_1\end{pmatrix}$$

$$\therefore A_1=-\frac{2\varepsilon_z/\varepsilon_1+\varepsilon_z/\varepsilon_1}{2\varepsilon_z/\varepsilon_1+1}E_z=-\frac{3}{2+\varepsilon_1/\varepsilon_z}E_z=-\frac{3\varepsilon_z}{2\varepsilon_z+\varepsilon_1}E_z$$

$$\text{y}\quad B_1=-\frac{-1+\varepsilon_z/\varepsilon_1}{1+2\varepsilon_z/\varepsilon_1}a^3E_z=\frac{\varepsilon_1/\varepsilon_z-1}{\varepsilon_1/\varepsilon_z+2}a^3E_z=\frac{\varepsilon_1-\varepsilon_z}{\varepsilon_1+2\varepsilon_z}a^3E_z$$

Por tanto $\phi_<(\vec r)=-\frac{3}{2+\varepsilon_1/\varepsilon_z}E_z r\cos\theta \rightarrow \vec E_< = -\nabla\phi_< = \frac{\vec E_{ext}}{2+\varepsilon_1/\varepsilon_z} \rightarrow$ según ε_1 y ε_2 puede ser que $\|\vec E_<\|$ sea mayor o menor que el campo externo

$$\phi_>(\vec r)=-E_z r\cos\theta+\underbrace{\left(\frac{\varepsilon_1/\varepsilon_z-1}{\varepsilon_1/\varepsilon_z+2}\right)E_z\frac{a^3\cos\theta}{r^2}\frac{4\pi\varepsilon_z}{4\pi\varepsilon_0}}$$

Según ε_2 y ε_1, el dipolo $\vec p$ puede ser paralelo o antiparalelo al campo externo

$\hookrightarrow$ este término puede verse como $\frac{1}{4\pi\varepsilon_z}\frac{\vec p\cdot\vec r}{r^3}$; con $\vec p = 4\pi\varepsilon_z a^3\left(\frac{\varepsilon_1/\varepsilon_z-1}{\varepsilon_1/\varepsilon_z+2}\right)\vec E_{ext}$

Recordemos que la polarización es tal que

$\vec{\mathcal P}=\varepsilon_z\chi_e\vec E$ ($\hookrightarrow$ Medio infinito) y podemos escribir χ_e en términos de $\varepsilon_1/\varepsilon_z$ como sigue: $\vec D=\vec{\mathcal P}+\varepsilon_z\vec E=\varepsilon_z\chi_e\vec E+\varepsilon_z\vec E = \varepsilon_z\underbrace{(\chi_e+1)}_{=\varepsilon_1/\varepsilon_z}\vec E$

$\Rightarrow \frac{\varepsilon_1}{\varepsilon_z}=\chi_e+1$

$\hookrightarrow \vec{\mathcal P}=\varepsilon_z\left(\frac{\varepsilon_1}{\varepsilon_z}-1\right)\vec E=(\varepsilon_1-\varepsilon_z)\vec E$; pero $\vec p=\int d^3r\,\vec{\mathcal P}=\frac{4}{3}\pi a^3\vec{\mathcal P}$

constante $\Rightarrow \vec{\mathcal P}=cte$

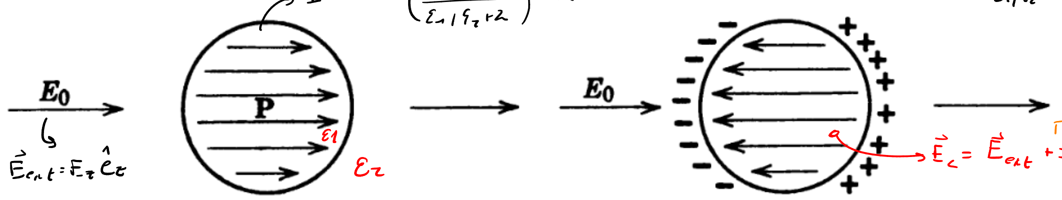
$\Rightarrow \vec{\mathcal P}=(\varepsilon_1-\varepsilon_z)\vec E$
$$=3\varepsilon_z\left(\frac{\varepsilon_1/\varepsilon_z-1}{\varepsilon_1/\varepsilon_z+2}\right)\vec E_{ext}$$

$\Rightarrow \vec{\mathcal P}=\frac{3}{4\pi a^3}\vec p$
$$=\frac{3}{4\pi a^3}4\pi\varepsilon_z a^3\left(\frac{\varepsilon_1/\varepsilon_z-1}{\varepsilon_1/\varepsilon_z+2}\right)\vec E_{ext}$$

Resumen:

$$\sigma_{ind}=\vec{\mathcal P}\cdot\hat e_r=3\varepsilon_z\left(\frac{\varepsilon_1/\varepsilon_z-1}{\varepsilon_1/\varepsilon_z+2}\right)E_z\underbrace{\cos\theta}_{\hat e_z\cdot\hat e_r=\cos\theta}$$

$\vec{\mathcal P}=3\varepsilon_z\left(\frac{\varepsilon_1/\varepsilon_z-1}{\varepsilon_1/\varepsilon_z+2}\right)\vec E_{ext}$



$\vec E_{ext}=E_z\hat e_z$

$\vec E_< = \vec E_{ext}+\vec E_{ind}$ ← Debido a la polarización. $\vec E_{ind}\sim-\hat e_z$

Fuera, el campo tiene un comportamiento dipolar con

$$\vec p = 4\pi\varepsilon_z a^3\left(\frac{\varepsilon_1/\varepsilon_z-1}{\varepsilon_1/\varepsilon_z+2}\right)\vec E_{ext}$$

$\hookrightarrow$ Es decir $\vec p\sim\vec E_{ext}$.

* Notemos que con este desarrollo podemos estudiar también cavidades, escogiendo $\varepsilon_1\longrightarrow\varepsilon_0$

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 $\vec{P}=cte$ en la presencia de un campo externo constante

ii) El campo dentro de la esfera es $\vec{E}_< = \frac{-\vec{P}}{3\varepsilon_0}$

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

$$\boxed{\vec{p} = \alpha \vec{E}_{ext}}$$

$\alpha \to$ 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:

$$\vec{P} = \chi_e \varepsilon_0 \vec{E} = \langle \vec{\pi} \rangle$$

$\vec{E}$: Campo macroscópico

$\langle \vec{\pi} \rangle$: Promedio de la densidad de dipolos $\longrightarrow$ Si todas las partículas complejas son iguales

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

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

$$= n(\vec{r}) \langle \vec{P}_i(\vec{r}) \rangle$$

$n(\vec{r})$: Densidad de número de partículas

$\langle \vec{P}_i(\vec{r}) \rangle$: momento dipolar promedio

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

$$\underbrace{\vec{E}_{ex}}_{\text{Campo exacto en } \vec{r}} = \underbrace{\vec{E}}_{\text{Campo promedio}} + \underbrace{\vec{E}_{int}}_{\text{Campo interno}}$$

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

$\vec{E}_{near}$: campo debido a las moléculas cercanas al punto $\vec{r}$

$\vec{E}_{pol}$: Campo de todas las moléculas tratadas como un continuo mediante $\vec{P}$ $\longrightarrow$ $\vec{E}_{pol}$ lo podemos conocer si consideramos el campo promedio en una esfera suficientemente chica con $\vec{P}=cte$. Este cálculo lo realizamos anteriormente y obtuvimos que dentro de la esfera $\vec{E}_< = \vec{E}_{pol} = -\frac{\vec{P}}{3\varepsilon_0}$

$$\vec{E}_{int} = +\frac{\vec{P}}{3\varepsilon_0} + \vec{E}_{near}$$

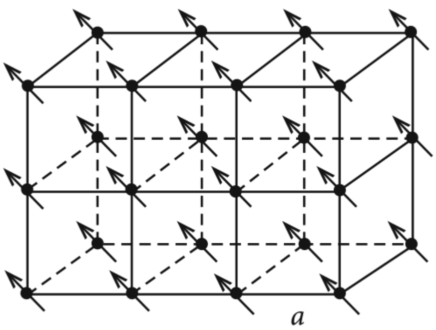
$\hookrightarrow$ ya sólo nos falta determinar este campo.

$\longrightarrow$ Para determinar el campo cercano consideramos:

$\longrightarrow$ Campo eléctrico debido a la acción de los N dipolos $\vec{P}_i$

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

$\longrightarrow$ Los N dipolos se encuentran en una red cuadrada con constante de red a.



a

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

$\Rightarrow$ El campo eléctrico de cada dipolo es: $$\vec{E}_{ijk} = \frac{3\vec{r}_{ijk}(\vec{p}\cdot\vec{r}_{ijk}) - \vec{p}(r_{ijk}^2)}{4\pi\varepsilon_0 r_{ijk}^5}$$

$\Rightarrow$ El campo eléctrico total es:

$$\vec{E}_{near} = \sum_{i,k,j} \vec{E}_{ijk} \longrightarrow \text{Fijémonos en } \vec{E}_{near} \cdot \hat{e}_x = \sum_{i,k,j} \vec{E}_{ijk} \cdot \hat{e}_x = \frac{1}{a^3} \sum_{ijk} \frac{3i(P_x i + P_y j + P_z k) - P_x(i^2+j^2+k^2)}{4\pi\varepsilon_0 (i^2+j^2+k^2)^{5/2}}$$

$$\Rightarrow \vec{E}_{near} \cdot \hat{e}_x = \frac{1}{a^3} \sum_{ijk} \left[\frac{3(i^2 P_x + ij P_y + ik P_z) - P_x(i^2+j^2+k^2)}{4\pi\varepsilon_0 (i^2+j^2+k^2)^{5/2}} \right]$$

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

los términos $\displaystyle\sum_{ijk} \frac{ij P_y}{(i^2+j^2+k^2)^{5/2}} = \sum_{ijk} \frac{ik}{(i^2+j^2+k^2)^{5/2}} = 0$

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

$$\Rightarrow \vec{E}_{near} \cdot \hat{e}_x = \frac{1}{a^3} \sum_{ijk} \frac{[3i^2 - (i^2+j^2+k^2)]\, \vec{P} \cdot \hat{e}_x}{4\pi\varepsilon_0 (i^2+j^2+k^2)^{5/2}} = 0$$

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

$$\vec{E}_{near} = \vec{0} \longrightarrow \text{Para una red cuadrada}$$

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

$\hookrightarrow$ Si bien, para otras estructuras este resultado no es exacto, sino que $\vec{E}_{near} = \$\,\vec{P}$ — se aproxima como que $\vec{E}_{near} \approx \vec{0}$.

$\$$: tensor con la simetría de la red

Tras estos cálculos, recapitulemos

- $\vec{P} = \chi_e \varepsilon_0 \vec{E} = \langle \vec{\pi} \rangle = \left\langle \left(\sum^{N} \vec{p} \right) \frac{1}{V} \right\rangle = \frac{N}{V} \langle \vec{p} \rangle = n \langle \vec{p} \rangle$

Macroscópico ($\vec{E}$)

Asimismo: $\vec{E}_{ex} = \vec{E} + \vec{E}_{int} = \vec{E} + \cancel{\vec{E}_{near}}^{\,0} - \cancel{\vec{E}_{pol}}^{\,-\vec{P}/(3\varepsilon_0)}$

y para esferas $\langle \vec{p} \rangle = \langle \alpha_{mol} \vec{E}_{ex} \rangle$

$$\therefore \vec{E}_{ex} = \vec{E} + \frac{\vec{P}}{3\varepsilon_0}$$

Juntando estas ideas $\quad \vec{P} = n\langle \vec{p} \rangle = n \langle \alpha_{mol} \vec{E}_{ex} \rangle = n\alpha_{mol} \langle \underbrace{\vec{E} + \frac{\vec{P}}{3\varepsilon_0}}_{\text{ya son promedio}} \rangle = n\alpha_{mol}\left(\vec{E} + \frac{\vec{P}}{3\varepsilon_0} \right)$

Sustituyendo $\vec{P} = \varepsilon_0 \chi_e \vec{E} \longrightarrow$ en el lado derecho

$$\vec{P} = \varepsilon_0 \chi_e \vec{E} = n\alpha_{mol}\left(\vec{E} + \frac{\varepsilon_0 \chi_e \vec{E}}{3\varepsilon_0} \right) = n\alpha_{mol} \vec{E} + \varepsilon_0 \chi_e \frac{n\alpha_{mol}}{3\varepsilon_0} \vec{E}$$

$$\Rightarrow \varepsilon_0 \chi_e \left(1 - \frac{n\alpha_{mol}}{3\varepsilon_0} \right) \vec{E} = n\alpha_{mol} \vec{E} \longrightarrow \varepsilon_0 \chi_e \left(1 - \frac{n\alpha_{mol}}{3\varepsilon_0} \right) = n\alpha_{mol}$$

$$\Rightarrow \boxed{\chi_e = \frac{n\alpha_{mol}}{\varepsilon_0 - \frac{n\alpha_{mol}}{3}}}$$

y también habíamos visto que

$$\vec{D} = \varepsilon \vec{E} = \varepsilon_0 \vec{E} + \vec{P} = \vec{E} + \chi_e \varepsilon_0 \vec{E} = (1+\chi_e)\varepsilon_0 \vec{E}$$

$$\Rightarrow \frac{\varepsilon}{\varepsilon_0} = 1 + \chi_e \Rightarrow \chi_e = \frac{\varepsilon}{\varepsilon_0} - 1 \longrightarrow \frac{\varepsilon}{\varepsilon_0} - 1 = \frac{n\alpha_{mol}}{\varepsilon_0 - \frac{n\alpha_{mol}}{3}} \Rightarrow \left(\frac{\varepsilon}{\varepsilon_0} - 1 \right)\left(1 - \frac{n\alpha_{mol}}{3\varepsilon_0} \right) = \frac{n\alpha_{mol}}{\varepsilon_0}$$

$$\Rightarrow (\varepsilon/\varepsilon_0 - 1) - \frac{n\alpha_{mol}}{3\varepsilon_0}(\varepsilon/\varepsilon_0 - 1) = \frac{n\alpha_{mol}}{\varepsilon_0} \Rightarrow (\varepsilon/\varepsilon_0 - 1) = \frac{n\alpha_{mol}}{3\varepsilon_0}\left[3 + (\varepsilon/\varepsilon_0 - 1) \right] = \frac{n\alpha_{mol}}{3\varepsilon_0}\left[(\varepsilon/\varepsilon_0 + 2) \right]$$

$$\therefore \boxed{\alpha_{mol} = \frac{3\varepsilon_0}{n}\left(\frac{\varepsilon/\varepsilon_0 - 1}{\varepsilon/\varepsilon_0 + 2} \right)}$$

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

$\rightarrow$ Relación de Clausius-Mossotti o de Lorenz-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 estos dos casos un modelo sencillo es considerar que las cargas dentro de cada partícula compleja se encuentran atadas a su centro por un tipo de resorte. En este caso:

$$\underbrace{\vec{F} = q_e\vec{E} = m\omega_0^2\vec{r}} \Rightarrow \vec{r} = \frac{q_e}{m\omega_0^2}\vec{E} \Rightarrow \vec{P}_{mol} = q_e\vec{r} = \frac{q_e^2}{m\omega_0^2}\vec{E}$$

Si se tienen diversos tipos de partículas complejas, entonces $\alpha_{mol} = \frac{1}{\varepsilon_0}\sum_j \frac{q_j^2}{m_j\omega_j^2}$

Para tener en cuenta fluctuaciones térmicas consideremos el Hamiltoniano

Momento de la partícula

$$\mathcal{H}_0 = \frac{\|\vec{P}\|^2}{2m} + \frac{m\omega_0^2}{2}\|\vec{r}\|^2 + q\phi = \frac{\|\vec{P}\|^2}{2m} + \frac{m\omega_0^2}{2}\|\vec{r}\|^2 - qEz$$

Este Hamiltoniano asume que no había dipolos antes del campo eléctrico

campo eléctrico en $\hat{e}_z$

$$f(\mathcal{H}) = e^{-\mathcal{H}/k_BT}$$

Función de distribución de Boltzmann para partículas clásicas

k_B = cte de Boltzmann, T = Temperatura

Con esto, $$\langle P_{mol}\rangle = \frac{\int d^3p\int d^3r\,(ez)\,f(\mathcal{H}_0)}{\int d^3p\int d^3r\, f(\mathcal{H}_0)};$$

Integramos en todo el espacio y todos los momentos

Si $\vec{r}\,' = \vec{r} - \frac{Eq_e}{m\omega_0^2}\hat{e}_z$ ent. $\mathcal{H} = \frac{\|\vec{P}\|^2}{2m} + \frac{m\omega_0^2}{2}\|\vec{r}\,'\|^2 - \frac{q^2E^2}{2m\omega_0^2} \longrightarrow \langle \vec{P}_{mol}\rangle = \frac{\int d^3p\int d^3r'\left(ez' + \frac{q^2E}{m\omega_0^2}\right)f(\mathcal{H}_0)}{\int d^3p\int d^3r' f(\mathcal{H}_0)}$

Como $f(\mathcal{H})$ es par, $z'f(\mathcal{H})$ es impar y por tanto

$$\langle P_{mol}\rangle = \frac{\int d^3p\int d^3r'\left(\cancel{ez'}^{\,0} + \frac{q^2E}{m\omega_0^2}\right)f(\mathcal{H}_0)}{\int d^3p\int d^3r' f(\mathcal{H}_0)} = \underbrace{\frac{q_e}{m\omega_0^2}}\vec{E}$$

No quitamos fluctuaciones térmicas

$\varepsilon_0\alpha_{mol}$ de un dieléctrico de moléculas sin momentos dipolares antes del campo eléctrico

Para materiales polares, con dipolos antes del campo eléctrico, el Hamiltoniano se redefine como sigue:

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 - \vec{P}_0\cdot\vec{E} = \mathcal{H}_0 - P_0E\cos\theta \Rightarrow f(\mathcal{H}) = f(\mathcal{H}_0)\,e^{P_0E\cos\theta/k_BT}$$

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

por lo tanto

$$\langle\vec{P}_0\rangle = \frac{\int d^3p\int d^3r'\,\vec{P}_0\, f(\mathcal{H}_0)e^{P_0E\cos\theta/k_BT}}{\int d^3p\int d^3r' f(\mathcal{H}_0)\,e^{P_0E\cos\theta/k_BT}} = \frac{\int d\Omega\, P_0\cos\theta\, e^{P_0E\cos\theta/k_BT}}{\int d\Omega\, e^{P_0E\cos\theta/k_BT}}\hat{e}_z$$

Por simetría, las otras componentes se pierden a cero

$$= \int_{-1}^{1} du\, pu\, e^{PEu/k_BT}\Big/\int_{-1}^{1} du\, e^{PEu/k_BT}$$; como solo para $T\to 0$ $\frac{P_0E}{k_BT} \gg 1$, desarrollamos en potencias $e^x \approx 1 + x \to e^{PEu/k_BT} \approx 1 + \frac{PE}{k_BT}u$

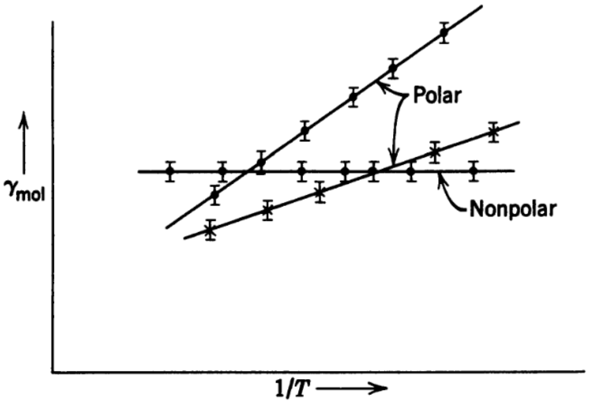
$$\approx \int_{-1}^{1} du\,(pu)\Big(\underbrace{\cancel{1}^{\,0}}_{impar} + \frac{P_0E}{k_BT}u\Big)\Big/\int_{-1}^{1} du\Big(1 + \underbrace{\cancel{\frac{P_0E}{k_BT}u}^{\,0}}_{impar}\Big)$$

$$= \frac{1}{3}\frac{P_0^2E}{k_BT}$$

Con esto, podemos ver que en general

$$\alpha_{mol} = \alpha_{ion} + \alpha_{pol} \; ; \text{ donde } \quad \underbrace{\alpha_{ion} = \frac{1}{\varepsilon_0}\frac{q_e^2}{m\omega_0^2}}_{\text{Independiente de } T} \quad \text{y} \quad \underbrace{\alpha_{pol} = \frac{1}{3\varepsilon_0}\frac{p_0^2 E}{k_B T}}_{\text{Modelo de Debye-Langevin.}}$$

Para $T \to \infty$, $\alpha_{pol} \to 0$, como es de esperarse.



* Más adelante, cuando comenzemos a hablar de electrodinámica, veremos que también hay modelos para ε, donde uno de interés se conoce como Modelo de Drude-Sommerfeld y otro como Modelo de Lorentz.