



UNIVERSIDADE
FEDERAL
DE PERNAMBUCO

UNIVERSIDADE FEDERAL DE PERNAMBUCO
CENTRO ACADÊMICO DO AGRESTE
NÚCLEO DE FORMAÇÃO DOCENTE
FÍSICA-LICENCIATURA

Modelos para Constante Dielétrica de Líquidos com Aproximação de Meio Contínuo

Valdemir Manoel da Silva Júnior

Orientador: Paulo Henrique Ribeiro Peixoto

CARUARU

2014



UNIVERSIDADE
FEDERAL
DE PERNAMBUCO

UNIVERSIDADE FEDERAL DE PERNAMBUCO
CENTRO ACADÊMICO DO AGRESTE
NÚCLEO DE FORMAÇÃO DOCENTE
FÍSICA-LICENCIATURA

Modelos para a Constante Dielétrica de Líquidos com Aproximação de Meio Contínuo

Valdemir Manoel da Silva Júnior

Trabalho de Conclusão de Curso apresentado à
Universidade Federal de Pernambuco – Núcleo de
Formação Docente como um dos requisitos à conclusão do
curso de Física Licenciatura.

Orientador: Paulo Henrique Ribeiro Peixoto

Caruaru

2014

Catálogo na fonte:
Bibliotecária – Paula Silva CRB/4-1223

S586m Silva Júnior, Valdemir Manoel da.
Modelos para constante dielétrica de líquidos com aproximação de meio contínuo. /
Valdemir Manoel da Silva Júnior. – Caruaru, 2014.
57 f., il.; 30 cm.

Orientador: Paulo Henrique Ribeiro Peixoto.
Monografia (Trabalho de Conclusão de Curso) – Universidade Federal de
Pernambuco, CAA, Física - Licenciatura, 2014.
Inclui referências.

1. Dielétricos. 2. Modelos. 3. Líquidos. 4. Eletrodinâmica. I. Peixoto, Paulo
Henrique Ribeiro (Orientador). II. Título.

371.12 CDD (23. ed.) UFPE (CAA 2014-130)



PARECER DA COMISSÃO EXAMINADORA DE DEFESA NA
DISCIPLINA DE TRABALHO DE CONCLUSÃO DE CURSO II

VALDEMIR MANOEL DA SILVA JUNIOR

Título

**“MODELOS PARA A CONSTANTE DIELETRICA DE LÍQUIDOS
COM APROXIMAÇÃO DE MEIO CONTÍNUO”**

A comissão examinadora composta pelos professores: PAULO HENRIQUE RIBEIRO PEIXOTO, NFD/UFPE; GUSTAVO CAMELO NETO, NFD/UFPE e JEHAN FONSÊCA DO NASICMENTO, NFD/UFPE, sob a presidência do primeiro, consideram o graduando **VALDEMIR MANOEL DA SILVA JUNIOR**
APROVADO.

Caruaru, 30 de julho de 2014.

~~JOÃO E. L. DE FREITAS~~
Coordenador do curso de Física –
Licenciatura

~~PAULO H. R. PEIXOTO~~
Orientador e 1º Examinador

~~GUSTAVO CAMELO NETO~~
2º Examinador

~~JEHAN F. DO NASCIMENTO~~
3º Examinador

DEDICATÓRIA

Dedico este trabalho ao meu filho Juan Manoel, à minha esposa Lucivânia, à minha mãe Goretti e minha avó materna Dona Carmosa, que são os meus portos seguros na hora da aflição e me mostram que o amor é o princípio de tudo.

AGRADECIMENTOS

Agradeço a Deus por me proporcionar as condições necessárias para seguir esse rumo científico nem sempre tranquilo.

A minha esposa e família, que sempre me apoiam e encorajam em todos os momentos da minha vida.

Aos companheiros de estrada, principalmente Henrique Patriota, Maylson Marckesan, Aristóteles Rodrigues e Hébio Oliveira. Juntos vivemos grandes vitórias e derrotas nestes 4,5 anos de graduação.

Ao meu orientador, e amigo, Paulo Peixoto, por todo aprendizado, conhecimento e amadurecimento que me proporcionou durante a jornada.

Aos amigos Monalisa Macedo e Alan Marcionilo; a distância só nos une mais.

Ao meu filho Juan Manoel, que simboliza o prêmio maior em minha vida.

RESUMO

Este trabalho se propõe a apresentar, detalhadamente, os principais modelos para constante dielétrica de líquidos com aproximação de meio contínuo, possibilitando um estudante de graduação em Física, que tenha cursado uma disciplina de Eletrodinâmica Clássica uma complementação de sua formação em Dielétricos. Utilizando os conceitos de transposição didática apresentados por Chevallard (1991) e Alves Filho (2000), que buscam a melhor forma de transformar o saber sábio em saber ensinado, os conhecidos modelos de Clausius-Mosotti, de Debye e de Onsager são expostos a partir de um simples procedimento que facilita a construção de cada um dos modelos, possibilitando um melhor aproveitamento do estudo. A constante dielétrica (ϵ_r) expressa a contribuição do meio dielétrico linear nas interações eletrostáticas de cargas livres, tornando-a muito importante quando o tema é campos eletrostáticos na matéria. Com a perspectiva de disponibilizar um melhor meio de aprofundamento do tema “Dielétricos”, a análise dos principais modelos para a constante dielétrica com aproximação de meio contínuo e uma estruturação que os relacione é importante para que o processo de aprendizagem seja menos desgastante e mais proveitoso.

PALAVRAS CHAVE: Dielétricos, Modelos, Constante Dielétrica, Líquidos.

SUMÁRIO

LISTA DE FIGURAS	08
1 INTRODUÇÃO	10
1.1 A PROPOSTA	10
1.2 A TRANSPOSIÇÃO DIDÁTICA	11
1.3 REQUISITOS PARA COMPREENSÃO DOS MODELOS DE POLARIZAÇÃO ELÉTRICA COM APROXIMAÇÃO DE MEIO	13
1.3.1 EXPANSÃO DE MULTIPOLOS	14
1.3.2 CAMPOS ELETROSTÁTICOS NA MATÉRIA	17
1.3.2.1 DIPOLOS INDUZIDOS E PERMANENTES	17
1.3.2.2 POLARIZAÇÃO	19
1.3.2.3 O CAMPO DE UM OBJETO POLARIZADO	19
1.3.2.4 INTEPRETAÇÃO FÍSICA DE σ_b E ρ_b	20
1.3.3 O CAMPO INTERNO DE UM DIELETRICO	21
1.3.4 O DESLOCAMENTO ELÉTRICO	22
1.3.5 DIELETRICOS LINEARES	22
1.4 O PROCEDIMENTO PARA OS MODELOS	23
CAPÍTULO 2 – A APRESENTAÇÃO DOS MODELOS	26
2.1 MODELO DE CLAUSIUS MOSOTTI	26
2.2 MODELO DE DEBYE	31
2.3 MODELO DE ONSAGER	33
3. CAPÍTULO 3 – COMPARAÇÃO ENTRE OS MODELOS DE CLAUSIUS- MOSOTTI, DEBYE E ONSAGER	39

3. 1 ALGUMAS CONSIDERAÇÕES FÍSICAS SOBRE OS MODELOS DE CLAUSIUS-MOSOTTI, DEBYE E ONSAGER	39
4. CAPÍTULO 4 – CONCLUSÕES E PERSPECTIVAS	41
APÊNDICES	42
APÊNDICE A: MECÂNICA ESTATÍSTICA E OS CONHECIMENTOS NECESSÁRIOS	40
APÊNDICE B: VALIDADE DA EQUAÇÃO (2.2)	50
APÊNDICE C: CÁLCULO DE $\langle \vec{\mu}_0 \rangle$ PARA OS MODELOS DE DEBYE E ONSAGER	53
APÊNDICE D: SOBRE OS CAMPOS DE REAÇÃO E CAVIDADE PARA O MODELO DE ONSAGER	55
6. REFERÊNCIAS	56

LISTA DE ILUSTRAÇÕES

LISTA DE FIGURA	PÁG
Figura 1. Distribuição localizada de cargas	15
Figura 2. Representação de um sistema com um dipolo físico	17
Figura 3. Molécula da água	18
Figura 4. Representação de um átomo ou molécula apolar	18
Figura 5. Objeto polarizado	19
Figura 6. Representação do efeito da polarização nas cargas livres	21
Figura 7. Cavidade de raio a em um meio dielétrico. No centro encontra-se uma molécula apolar, representada por seu momento de dipolo, submetido a um campo macroscópico \vec{E}	26
Figura 8. Esquema do resultado da ação do campo macroscópico E em um dielétrico e em uma cavidade com uma molécula apolar no centro.	27
Figura 9. Componentes de ação do campo elétrico resultante da distribuição de carga superficial na cavidade.	28
Figura 10. Representação de um meio dielétrico submetido a um campo macroscópico uniforme \vec{E} , com uma cavidade microscópica de raio a e, em seu centro, uma molécula polar representada pelo momento de dipolo induzido $\vec{m} = \vec{\mu}_0 + \alpha\vec{F}$	31
Figura 11. Linhas do campo do momento de dipolo induzido \vec{m} .	33
Figura 12. Cavidade em um meio dielétrico submetido a um campo macroscópico uniforme \vec{E} e a representação de seu campo de cavidade.	34
Figura 13. Cavidade em um meio dielétrico submetido a um campo macroscópico uniforme \vec{E} e a representação de seu campo total \vec{F} .	35
Figura 14. Representações de microestados possíveis na faixa E e $E+\delta E$	42
Figura 15. Representação ou não de um microestado possível ao sistema, desde que tenha energia na faixa E e $E+\delta E$.	42
Figura 16. Sistema isolado em contato com reservatório térmico.	44
Figura 17. Gráfico da distribuição $\mathcal{P}(E)$.	46

Figura 18. Representação de um meio dielétrico submetido a um campo 50
macroscópico uniforme \vec{E} e dois caminhos Γ e Γ' entre dois pontos A e B na
superfície

Figura 19. Representação de um meio dielétrico submetido a um campo 51
macroscópico uniforme \vec{E} e um caminho Γ'' ligando os pontos A e B na
superfície do dielétrico.

CAPÍTULO 1 – INTRODUÇÃO

Este capítulo socializa a proposta do trabalho como um guia para reprodução dos principais modelos da constante dielétrica com aproximação de meio contínuo. Expor aspectos da transposição didática que norteia a fundamentação teórica, além de apresentar o procedimento que será tomado no cálculo da constante dielétrica ϵ_r , por fim, comentar os requisitos básicos para compreensão dos modelos.

1.1 A PROPOSTA

Os modelos de polarização elétrica para campos estáticos tratam de como obter a constante dielétrica ϵ_r para um meio linear a partir do conhecimento de parâmetros microscópicos, como a polarizabilidade e momento de dipolo permanente das moléculas, e parâmetros macroscópicos como densidade e temperatura absoluta do meio.

Neste trabalho, não serão discutidos os mecanismos de polarização em sólidos, que exigem uma abordagem quântica, pois as moléculas estão próximas, aumentando o nível de interação, dificultando o estudo da polarização. O objeto de estudo são os gases e líquidos de baixa densidade, para que se possa desprezar a superposição (*overlap*) das funções de onda eletrônica associadas a cada molécula já que as moléculas estão distantes o suficiente para tornar a superposição pouco interagente.

Para esses sistemas, os modelos de polarização podem ser basicamente classificados em dois tipos: modelos com aproximação de meio contínuo e modelos mecânico-estatísticos. Esta classificação é feita de acordo com a forma que as moléculas “enxergam-se” dentro do dielétrico. Serão trabalhados aqui os modelos com aproximação de meio contínuo, que são os modelos, em que as moléculas se “enxergam” como meio contínuo.

Esta discussão acerca dos modelos com aproximação de meio contínuo é importante quando pensamos numa formação mais aprofundada, de um estudante de graduação, em Dielétricos. A motivação inicial do trabalho em si é disponibilizar de forma mais acessível uma forma simples de reproduzir os modelos para a constante dielétrica de gases ou líquidos e de baixa densidade, com aproximação de meio contínuo.

Baseado nos estudos de Chevallard (1991) e Alves Filho (2000) sobre a transposição didática, tem-se que a análise do saber sábio envolvido nos principais modelos para constante dielétrica com aproximação de meio contínuo e uma estruturação que os aproxime do saber a

ensinar é importante para que o aluno, ao se deparar com a necessidade de estudar os modelos, tenha mais oportunidades para refletir acerca destes modelos e das considerações que se fazem essenciais, visto que normalmente não há tempo hábil para fazer esta reflexão durante a formação devido à grande carga de atividades durante a realização da disciplina de Eletromagnetismo, por exemplo, levando o aluno a apenas realizar cálculos, e não compreender plenamente o que está sendo feito.

Como diz Alves Filho (2000, p.218) a transposição didática é um instrumento de análise do processo de transformação do conhecimento, sendo através dele possível compreender as diferentes formas do saber e suas estruturas organizacionais. Assim, com esta análise, será possível estudar os modelos para constante dielétrica de forma sintetizada e clara.

Diante desses elementos busca-se, para os modelos de polarização elétrica com aproximação de meio contínuo, um modo consensual de reproduzir esses modelos, uma atualização do saber, seja em sala de aula ou não, operacionalizada de forma instigante ao estudante e uma articulação essencial entre os saberes novos e velhos.

Este trabalho tem por finalidade apresentar, de forma didática, os principais modelos para a constante dielétrica de líquidos em meio contínuo – possibilitando a um estudante de graduação em Física, e áreas afins, que tenha cursado a disciplina de Eletrodinâmica Clássica uma complementação de sua formação em dielétricos.

1.2 A TRANSPOSIÇÃO DIDÁTICA

A transposição didática analisa as transformações ocorridas no saber desde a sua origem na comunidade científica, denominado Saber Sábio, até à sala de aula, chamado Saber Ensinado, objetivando explicar que o ensino não é um simples processo de simplificação do conhecimento. No processo da transposição do conhecimento fazem-se necessárias regras e características importantes nas metamorfoses que antecedem o Saber Ensinado que provém do Saber Sábio.

Essa teoria propõe a existência de três níveis do saber. O Saber Sábio, o Saber a Ensinar e o Saber Ensinado. Interligando estes níveis ou esferas do saber, encontra-se a Noosfera, que nada mais é que a esfera na qual a ação de transformação do saber é realizada pelos elementos destes grupos. E o sistema educacional, como um todo, é o grande sistema oficial, onde essa transposição acontece.

Para tanto, a constante divulgação de material, seja ele composto de saber sábio ou saber a ensinar é essencial para a constante atualização do saber, critério chave para o bom

avanço do conhecimento. Resumidamente os níveis do saber possuem os seguintes significados:

➤ **SABER SÁBIO**

O Saber Sábio diz respeito ao saber selecionado como referência na definição da disciplina escolar. Tal saber é construído no interior da comunidade científica. Esse saber passa por um processo criterioso de fundamentação e validação antes de vir a público, quando há publicação através de teses, revistas científicas.

Ao ser publicado, o conhecimento está puro, impessoal e que não traz todo o caminho para sua construção, pois ao ser resumido deixa embutido várias etapas. Esse patamar do saber é composto pelos cientistas e pesquisadores de uma maneira geral. Sua forma sistemática, com começo, meio e fim, não mostrando os conflitos ocorridos no contexto da descoberta, é a forma descrita no trabalho.

Desde a descoberta até a publicação de seu trabalho, existem dois momentos distintos, entre um e outro:

“Há um processo de reelaboração racional que elimina elementos emotivos e processuais, valorizando o encadeamento lógico e a neutralidade de sentimentos. Aqui, de certa forma, há uma transposição –não didática -mas, diríamos, científica, caracterizada por uma despersonalização e reformulação do saber” (Alves Filho, 2000, p.224)

Essa descaracterização do saber acarreta no saber a ensinar, estruturando o conhecimento num caminho mais acessível. Estes momentos configuram a transposição didática externa e transposição didática interna como será discutido a seguir.

➤ **SABER A ENSINAR**

Segunda fase do processo, onde a proposta se enquadra em sua ação, é o momento em que se dá a transformação do saber sábio em saber a ensinar e corresponde a Transposição Didática Externa. Manifesta-se na produção de livros didáticos, manuais de ensino para formação universitária, programas escolares que têm como alvo os alunos universitários e professores da Educação Básica.

Nessa parte do processo, o conhecimento é “desestruturado”, reorganizando, utilizando-se uma linguagem mais simples e lógica. Os autores de livros didáticos, os

especialistas das disciplinas, os professores e o público em geral, são os atores desta esfera, onde são selecionadas as características que devem ser modificadas em relação ao Saber Sábio.

Nesse processo de desestruturação, o conhecimento sofre uma “descontextualização” (Chervallard, 1991, p. 53). O saber passa por uma verdadeira reestruturação e linearização, com uma sequência lógica que encaixem nas mudanças necessárias, adotando um novo contexto.

Diferente do Saber Sábio, o Saber a Ensinar pode tornar-se ultrapassado no contexto educacional e ser substituído, ou ser banalizado pelos outros grupos da Noosfera. É importante enfatizar que este processo por completo tem como principal objetivo melhorar o ensino conhecendo as estruturas organizacionais dos saberes em seus diferentes níveis da Noosfera.

➤ SABER ENSINADO

Terceira e última etapa na transformação do conhecimento, é a adaptação ao tempo didático, isto é, a organização, separação e remodelação sofridas pelo saber para o sequenciamento das aulas ou atividades propostas.

O ator principal, mas não único, é o professor, que utiliza toda a gama de material e experiência para moldar o que efetivamente chegará aos alunos. Esse processo de transformação do saber a ensinar em saber ensinado é denominado “Transposição Didática Interna”, pois ocorre no interior do espaço escolar.

1.3 REQUISITOS PARA COMPREENSÃO DOS MODELOS DE POLARIZAÇÃO ELÉTRICA COM APROXIMAÇÃO DE MEIO CONTÍNUO

O estudante necessita do domínio de certos conteúdos para estar apto a compreender o cálculo da constante dielétrica ϵ_r e completamente absorver as etapas de construção dos modelos. Após estudos e reflexões, foi detectado que os tópicos mais utilizados, considerados pré-requisitos são:

- Expansão de termos de Multipolos
- Campos Eletrostáticos na Matéria
 - Dipolos induzidos e dipolos permanentes;
 - Polarização;

- Deslocamento elétrico (a lei de Gauss no interior da matéria);
- Mecânica Estatística
 - Estados de um sistema;
 - Princípio de igual probabilidade a priori;
 - Cálculo de Probabilidades;
 - Cálculo de Médias.
 - Sistemas em contato com um reservatório térmico;

A seguir, serão discutidos mais abertamente estes requisitos básicos, municiando o leitor para um estudo mais apropriado do trabalho, focando o necessário para a reprodução dos modelos.

1.3.1 EXPANSÃO DE MULTIPOLOS

Quando se analisa o comportamento de uma distribuição localizada de carga numa posição muito distante desta carga é uma boa aproximação fazer seu potencial $V=Q/(4\pi\epsilon_0 r)$, onde Q é a carga total. Mas e se $Q=0$? Não seria o suficiente, de certo modo, apenas afirmar que $V=0$, já que a proposta é um aprofundamento quantitativo.

Tratando do estudo de líquidos e gases de baixa densidade neutros, tem-se que $Q=0$, de tal forma que considerar toda a substância como um monopolo não será tão atrativo quanto possa parecer. Desta forma, a expansão de multipolos poderá trazer uma melhor resposta ao analisar o comportamento do potencial gerado por este tipo de configuração.

A figura 1 representa uma distribuição localizada de cargas elétricas. O cálculo do potencial elétrico V aproximado num ponto P muito afastado da distribuição pode ser encontrado através da seguinte Equação (GRIFFITHS, 1989):

$$V(P) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \int_{vol} \frac{1}{r} \rho d\tau, \quad (1.1)$$

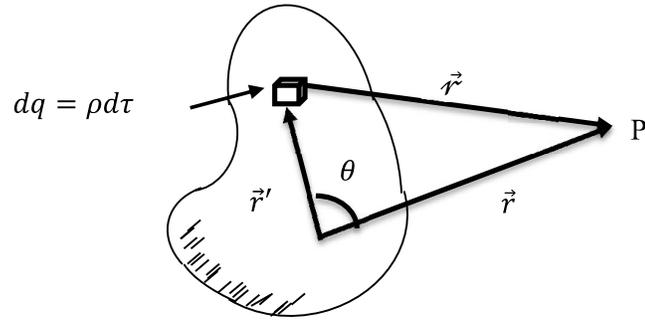


Figura 1. Distribuição localizada de cargas

em que $d\tau$ é o elemento de volume, ρ é a densidade de carga volumétrica e r é o módulo do vetor distância entre o elemento de carga $dq = \rho d\tau$ e o ponto P, e ϵ_0 é permissividade elétrica no vácuo. Sendo, $\vec{r} = \vec{r} - \vec{r}'$.

Da figura 1, tem-se:

$$r^2 = r^2 + r'^2 - 2rr' \cos \theta. \quad (1.2)$$

Pela (1.2) expande-se $\frac{1}{r}$ em uma série de potências de (r'/r) .

$$\frac{1}{r} = \frac{1}{r} \left[1 + \left(\frac{r'}{r}\right)^2 - 2\frac{r'}{r} \cos \theta \right]^{-\frac{1}{2}},$$

sendo $\delta \equiv \left(\frac{r'}{r}\right)^2 - 2\left(\frac{r'}{r}\right) \cos \theta$, obtém-se uma série de Taylor (MACHADO,2000) na forma

$$(1 + \delta)^{-\frac{1}{2}} = 1 - \frac{1}{2}\delta + \frac{3}{8}\delta^2 - \frac{5}{16}\delta^3 + \dots,$$

assim, $\frac{1}{r}$ em série de potências de $\left(\frac{r'}{r}\right)$ assume a forma:

$$\frac{1}{r} = \frac{1}{r} \left[1 + \left(\frac{r'}{r}\right) (\cos \theta) + \left(\frac{r'}{r}\right)^2 \left(\frac{3}{2} \cos^2 \theta - \frac{1}{2}\right) + \left(\frac{r'}{r}\right)^3 \left(\frac{5}{2} \cos^3 \theta - \frac{3}{2} \cos \theta\right) + \dots \right]$$

Os coeficientes da série são os chamados polinômios de Legendre (MACHADO,2000) na variável $\cos \theta$, ou seja, $P_n(\cos \theta)$. Logo,

$$\frac{1}{r} = \frac{1}{r} \sum_{n=0}^{\infty} \left(\frac{r'}{r}\right)^n P_n(\cos \theta). \quad (1.3)$$

A (1.3) na Equação (1.1), obtém-se (GRIFFITHS, 1989):

$$V(P) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{r^{n+1}} \int (r')^n P_n(\cos \theta) \rho d\tau \quad (1.4)$$

De forma mais explícita:

$$V(P) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \left[\frac{1}{r} \int \rho d\tau + \frac{1}{r^2} \int r' \cos \theta \rho d\tau + \frac{1}{r^3} \int (r')^2 \left(\frac{3}{2} \cos^2 \theta - \frac{1}{2} \right) \rho d\tau \right]. \quad (1.5)$$

A igualdade da Equação (1.5) é a **expansão multipolar** de V . O primeiro termo ($n=0$) é a contribuição monopolar ($\propto 1/r$), o segundo termo ($n=1$) é a dipolar ($\propto 1/r^2$), o terceiro termo ($n=2$), é a quadrupolar, e assim sucessivamente. Observe os termos de monopolo (V_{mon}) e dipolo (V_{dip}) considerando que $\int \rho d\tau = Q$:

$$V_{mon} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Q}{r}, \quad (1.6)$$

$$V_{dip} = \frac{\vec{p} \cdot \hat{r}}{4\pi\epsilon_0 r^2}, \quad (1.7)$$

com

$$\vec{p} \equiv \int \vec{r}' \rho d\tau, \quad (1.8)$$

onde a Equação (1.8) (GRIFFITHS, 1989) é definido como o “momento de dipolo” da distribuição de cargas. Se a distribuição for discreta:

$$\vec{p} = \sum_i q_i \vec{r}_i. \quad (1.9)$$

Um exemplo importante é o dipolo físico, que nada mais é que duas cargas de mesmo módulo com sinais contrários, separados por uma distância s . Uma molécula polarizada pode ser considerada um dipolo e isto é considerado no cálculo do potencial, já que considerar a molécula como um monopolo não é mais tão atraente. Veja:

$$\vec{p} = q\vec{r}_+ + (-q\vec{r}_-) = q(\vec{r}_+ - \vec{r}_-) = q\vec{s}$$

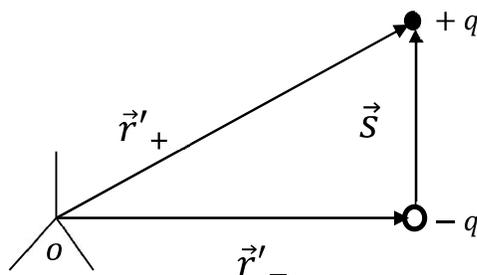


Figura 2. Representação de um sistema com um dipolo físico

Desta forma fica, imediato mostrar que em um sistema de dipolos físicos $\vec{p}_1, \dots, \vec{p}_n$, o momento de dipolo total do sistema é dado por $\vec{p}_{tot} = \sum_{i=1}^n \vec{p}_i$. Se tratando de moléculas neutras, de modo que a carga líquida do sistema de moléculas é nula, tem-se $V_{mon} = 0$. Aqui será tratado de dielétricos que, para efeito de estudo, podem ser representados como um sistema de dipolos elétricos.

1.3.2 CAMPOS ELETROSTÁTICOS NA MATÉRIA

Neste tópico, será estudado como moléculas reagem à ação de campos eletrostáticos e como os campos elétricos influenciam a distribuição de carga deste um dielétrico.

1.3.2.1 DIPOLOS INDUZIDOS E PERMANENTES

Nos dielétricos, todas as cargas estão presas às moléculas ou a átomos específicos e podem se mover muito pouco dentro da molécula ou átomo. Esses pequenos deslocamentos microscópicos não são tão grandes quanto num condutor, mas seus efeitos respondem pelo comportamento característico do dielétrico.

Observe a molécula da água na figura 3. Ela possui uma separação natural de cargas e consequente formação do momento de dipolo permanente, indicado por $\vec{\mu}_0$. Essa molécula é dita polar quando o campo elétrico uniforme externo \vec{E} tende a alinhar $\vec{\mu}_0$ em sua direção, caso contrário, as moléculas são denominadas apolares.

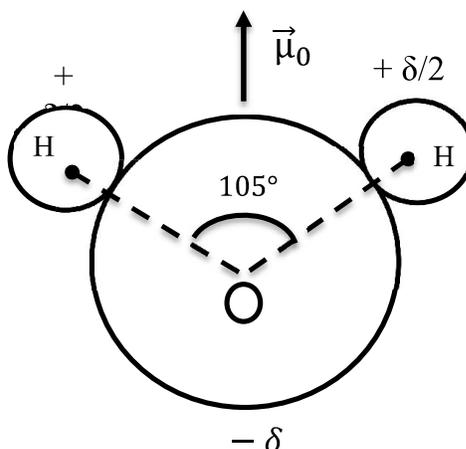


Figura 3. Molécula de água

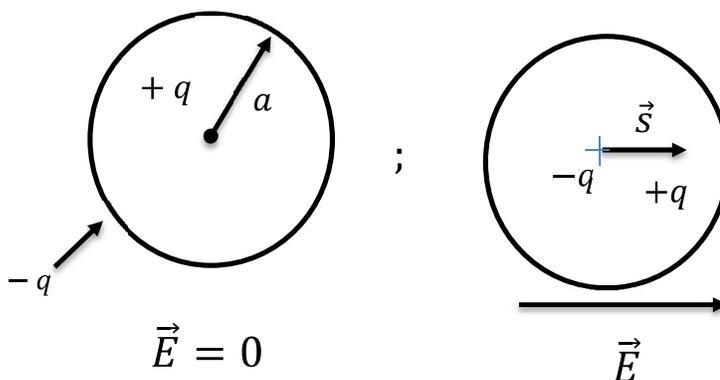


Figura 4. Representação de um átomo ou molécula apolar

Moléculas polares e apolares apresentam momento de dipolo induzido \vec{p}_{ind} quando submetidas a um campo externo \vec{E} . Em primeira aproximação, para muitos sistemas podemos escrever (GRIFFITHS, 1989):

$$\vec{p}_{ind} = \alpha \vec{E}, \quad (1.10)$$

em que α é a chamada polarizabilidade da molécula ou do átomo.

1.3.2.2 POLARIZAÇÃO

A polarização \vec{P} de um meio é definida como o momento de dipolo total por unidade de volume. Ou seja, sendo \vec{m} o momento de dipolo total do meio e \mathcal{V} o seu volume, temos (GRIFFITHS, 1989):

$$\vec{P} = \frac{\vec{m}}{\mathcal{V}} \quad (1.11)$$

Se o meio dielétrico não é homogêneo, é mais conveniente definirmos \vec{P} ponto a ponto de modo que, em determinada região do material, tem-se:

$$\vec{P} = \frac{d\vec{m}}{dV}. \quad (1.12)$$

1.3.2.3 O CAMPO DE UM OBJETO POLARIZADO

Considere um material polarizado com uma porção de dipolos microscópicos alinhados (Veja na figura 4 a representação de uma molécula apolar). A polarização \vec{P} é conhecida. Da Figura 5 obtemos $dV(A) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{d\vec{p} \cdot \hat{r}}{r^2}$, mas $d\vec{p} = \vec{P} d\tau$. Assim, tem-se:

$$V = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \int \frac{\vec{P} \cdot \hat{r}}{r^2} d\tau. \quad (1.13)$$

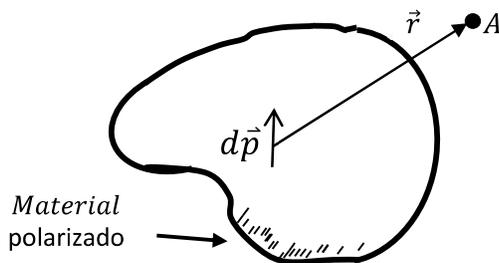


Figura 5. Objeto polarizado

Sabendo que $\nabla \left(\frac{1}{r}\right) = -\frac{\hat{r}}{r^2}$ (GRIFFITHS, 1989) e usando a regra do produto

$$\nabla \cdot (f\vec{A}) = f(\nabla \cdot \vec{A}) + \vec{A} \cdot (\nabla f) \Rightarrow \vec{A} \cdot (\nabla f) = \nabla \cdot (f\vec{A}) - f \cdot (\nabla \cdot \vec{A})$$

E usando esta relação e o teorema da divergência (GRIFFITHS, 1989), a Equação (1.13) é reescrita como (GRIFFITHS, 1989):

$$V = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \left[\int_{sup} \frac{\vec{P} \cdot \hat{n}}{r} da - \int_{vol} \frac{\vec{\nabla} \cdot \vec{P}}{r} d\tau \right]. \quad (1.14)$$

O primeiro termo de (1.14) mostra-se como o potencial gerado por uma superfície carregada, com densidade superficial σ_b , dada por

$$\sigma_b \equiv \vec{P} \cdot \hat{n} = P \cos \theta \quad (1.15)$$

onde \hat{n} é o versor normal à superfície e θ o ângulo entre \vec{P} e \hat{n} . Quanto ao segundo termo observa-se como o potencial gerado por uma distribuição volumétrica de cargas, com densidade volumétrica de carga dada por:

$$\rho_b \equiv -\vec{\nabla} \cdot \vec{P}. \quad (1.16)$$

Com as equações (1.15) e (1.16), a Equação (1.14) torna-se:

$$V = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \left[\int_{sup} \frac{1}{r} \sigma_b da + \int_{vol} \frac{1}{r} \rho_b d\tau \right]. \quad (1.17)$$

1.3.2.4 INTEPRETAÇÃO FÍSICA DE σ_b E ρ_b

É destacável que as densidades de cargas da Equação (1.17), σ_b e ρ_b , não podem estar relacionadas à presença de cargas “livres”, pois esta é hipótese não é admitida. Logo, σ_b e ρ_b só podem estar relacionados às chamadas cargas “ligadas”. Observe na figura 6 o efeito da polarização em cargas livres.

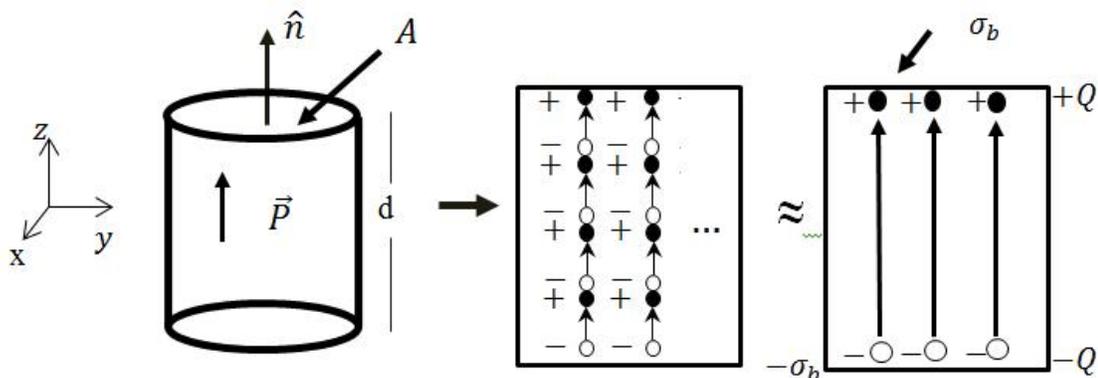


Figura 6. Representação do efeito da polarização nas cargas livres

Observe que:

$$\sigma_b = \frac{Q}{A} = \frac{Qd}{Ad} = \frac{m}{V} = P = \vec{P} \cdot \hat{n}, \quad (1.18)$$

e

$$\rho_b = -\vec{\nabla} \cdot \vec{P} = 0 \Leftrightarrow \frac{\partial P_x}{\partial x} + \frac{\partial P_y}{\partial y} + \frac{\partial P_z}{\partial z} = 0. \quad (1.19)$$

1.3.3 O CAMPO INTERNO DE UM DIELÉTRICO

Considerando que a polarização é gerada apenas com dipolos puros, já que as dimensões moleculares são de ordens de grandeza bem menores que as dimensões macroscópicas do dielétrico, tem-se que a representação de dipolos moleculares discretos com uma aproximação de meio contínuo para \vec{P} é uma boa aproximação. Assim, fora do dielétrico a hipótese de que a polarização é gerada apenas por dipolos puros não traz consigo nenhum problema, já que r é muito maior que a distância entre as cargas positivas e negativas. Porém, dentro do dielétrico, dificilmente r estará longe de todos os dipolos.

No nível microscópico, considerando distâncias relativas, movimento dos elétrons, agitação térmica, seria extremamente complexo calcular o campo exato e não é interessante, já que da mesma forma que se considera a água um fluido contínuo, também será feito para os dielétricos, focando no **campo médio macroscópico**. Define-se campo médio como o campo sobre uma região grande suficiente para conter uma enorme quantidade de átomos ou moléculas, mas pequena o suficiente para que as variações no campo não sejam desprezíveis.

1.3.4 O DESLOCAMENTO ELÉTRICO

Neste tópico, é calculado o campo elétrico total em um dielétrico. O campo total é a soma das contribuições das cargas “livres” (ρ_f) com as das cargas “ligadas” (ρ_b). Qualquer carga que não é resultado da polarização é chamada de livre. Logo, podemos considerar que a densidade de carga pode ser expressa por (GRIFFITHS, 1989):

$$\rho = \rho_b + \rho_f.$$

Assim, a lei de Gauss (MACHADO, 2000) assume a forma:

$$\epsilon_0 \vec{\nabla} \cdot \vec{E} = \rho_b + \rho_f.$$

Segue que

$$\epsilon_0 \vec{\nabla} \cdot \vec{E} = \rho_f - \vec{\nabla} \cdot \vec{P} \Rightarrow \vec{\nabla} \cdot (\epsilon_0 \vec{E} + \vec{P}) = \rho_f. \quad (1.20)$$

Definindo o deslocamento elétrico :

$$\vec{D} \equiv (\epsilon_0 \vec{E} + \vec{P}),$$

segue que:

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{D} = \rho_f. \quad (1.21)$$

A Equação (1.21) é a lei de Gauss no interior da matéria.

1.3.5 DIELÉTRICOS LINEARES

Para muitos meios, uma ótima aproximação é considerar a polarização proporcional ao campo aplicado. Então, define-se então a susceptibilidade elétrica χ_e , uma grandeza adimensional e que expressa o aumento da permissividade elétrica em um dielétrico, a partir da Equação (GRIFFITHS, 1989):

$$\vec{P} = \epsilon_0 \chi_e \vec{E}. \quad (1.22)$$

Dielétricos que obedecem à Equação (1.22) são denominados dielétricos lineares. Os modelos de polarização direta que serão apresentados neste trabalho são aplicáveis *apenas* a dielétricos lineares. A Equação (1.22) na Equação (1.20), obtemos:

$$\vec{\nabla} \cdot (\epsilon_0 \vec{E} + \epsilon_0 \chi_e \vec{E}) = \rho_f \implies \epsilon_0 (1 + \chi_e) \vec{\nabla} \cdot \vec{E} = \rho_f, \quad (1.23)$$

Definindo a permissividade relativa como $\epsilon_r \equiv (1 + \chi_e)$ e a permissividade absoluta do meio $\epsilon \equiv \epsilon_0 \epsilon_r$, a Equação (1.23) pode ser reescrita como:

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{E} = \frac{\rho_f}{\epsilon}. \quad (1.24)$$

Sem dúvida alguma, a obtenção da Equação (1.24) foi um grande feito, e merece atenção. A lei de Gauss envolve tanto cargas livres quanto cargas ligadas presentes no meio, todavia, o que a Equação (1.24) diz é que, para dielétricos lineares, o efeito das cargas está embutido em ϵ_r . E isto é ótimo, já que não é possível ter acesso “direto” às cargas ligadas. Para frisar o que foi dito acima observe com atenção o que se segue.

Em eletrostática, as leis de Gauss e Coulomb são inteiramente equivalentes. Portanto (1.24) mostra que, no interior de um meio dielétrico linear, devido à presença de uma carga livre q , a uma distância r , o campo é descrito por:

$$\vec{E} = \frac{q}{4\pi\epsilon_0\epsilon_r} \frac{\hat{r}}{r^2}. \quad (1.25)$$

Note que o campo elétrico dado por (1.25) é o campo gerado tanto pela carga livre q quanto pelas cargas ligadas. *Enfim, qualquer interação eletrostática entre cargas livres no interior de um meio dielétrico linear pode ser descrita obtendo-se as equações que descrevem as interações entre essas cargas no vácuo e substituindo ϵ_0 por $\epsilon_0\epsilon_r$ ou ϵ nas respectivas expressões.*

1.4 O PROCEDIMENTO PARA DESENVOLVIMENTO DOS MODELOS

Para desenvolver o modelo de Clausius-Mosotti(1879,1847 respectivamente), o modelo de Debye (1912) e o modelo de Onsager (1936), será adotado um procedimento básico e genérico para o desenvolvimento de modelos de polarização elétrica com aproximação de meio contínuo. Mas, antes de iniciar o desenvolvimento dos modelos, observe que da Equação (1.22) e da definição:

$$\epsilon \equiv \epsilon_0 (1 + \chi_e) \equiv \epsilon_r \epsilon_0 \text{ tem-se que:}$$

$$\varepsilon_r = 1 + \frac{P}{\varepsilon_0 E}, \quad (1.26)$$

onde a polarização pode ser encontrada pela Equação

$$\vec{P} = N \langle \vec{m} \rangle, \quad (1.27)$$

onde N é o número de moléculas por unidade de volume do fluido, e \vec{m} é o momento de dipolo total de uma molécula, dado por:

$$\vec{m} = \vec{\mu}_0 + \alpha \vec{F}, \quad (1.28)$$

onde \vec{F} é o campo elétrico que atua na molécula. Assim, conhecendo o momento de dipolo total de uma molécula polarizada de um dielétrico linear pode-se encontrar ε_r .

Com estes fundamentos podemos verificar os passos para a construção dos modelos.

Eis as etapas:

- (i) *Calcular o campo interno resultante \vec{F} que atua numa dada molécula do meio dielétrico submetido a um campo macroscópico uniforme \vec{E} . Nesse ponto tem-se que considerar que a molécula “sente” as demais como formando um meio contínuo;*
- (ii) *Substituir a expressão encontrada para \vec{F} na etapa (i) na Equação $\vec{m} = \vec{\mu}_0 + \alpha \vec{F}$ para a obtenção de \vec{m} , o momento de dipolo total da molécula. Possivelmente \vec{F} dependerá de \vec{m} . Logo, ao substituir \vec{F} em $\vec{m} = \vec{\mu}_0 + \alpha \vec{F}$ deve-se obter a Equação resultante para \vec{m} ;*
- (iii) *Substituir a expressão resultante para \vec{m} encontrada da Equação $\vec{m} = \vec{\mu}_0 + \alpha \vec{F}$ na Equação $\vec{P} = N \langle \vec{m} \rangle$, calcular o valor esperado $\langle \vec{m} \rangle$ para a obtenção de \vec{P} , a polarização do meio. Deve-se obter \vec{P} proporcional a \vec{E} ;*
- (iv) *Substituir a Equação $P = N \langle \vec{m} \rangle$ na Equação $\varepsilon_r = 1 + \frac{P}{\varepsilon_0 E}$ para obtenção de ε_r . Sendo \vec{P} proporcional a \vec{E} , ε_r não dependerá de E .*

Salvo as particularidades de cada modelo, esse é o procedimento essencial proposto por esse trabalho.

CAPÍTULO 2 – A APRESENTAÇÃO DOS MODELOS

Neste capítulo, serão deduzidos os modelos para a constante dielétrica de Clausius-Mosotti, de Debye e de Onsager utilizando o procedimento básico citado no tópico 1.4, mostrando que a sequência proposta, de fato, facilita o desenvolvimento e a análise das particularidades dos modelos para constante dielétrica com aproximação de meio contínuo.

2.1 MODELO DE CLAUSIUS MOSOTTI

Único que não necessita da mecânica estatística, pois é restrito ao tratamento de moléculas apolares. Mesmo limitado, sua importância se dá pelo fato de que todos os modelos recaem neste caso particular para uma molécula apolar ($\bar{\mu}_0 = 0$).

Utilizando o procedimento descrito no tópico 1.4 para o desenvolvimento de modelos de polarização elétrica com aproximação de meio contínuo:

- (i) Cálculo do campo interno \vec{F} para um líquido de moléculas apolares.

A Figura 7 representa um meio dielétrico submetido a um campo macroscópico uniforme \vec{E} , com uma cavidade microscópica de raio a . Em seu centro, uma molécula apolar representada pelo momento de dipolo induzido $\vec{m} = \alpha\vec{F}$ (pois $\bar{\mu}_0 = 0$). \vec{F} é o campo macroscópico que atua na molécula no centro da cavidade.

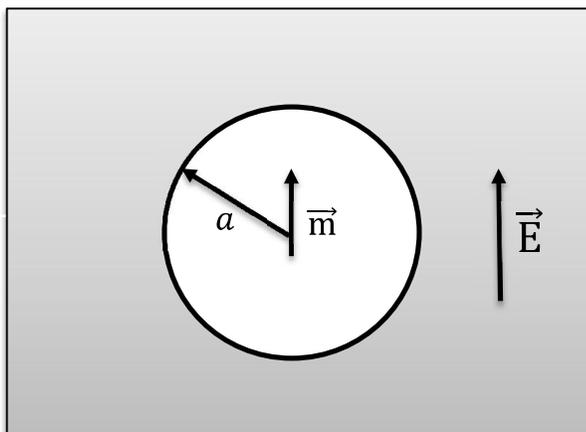


Figura 7. Cavidade de raio a em um meio dielétrico. No centro encontra-se uma molécula apolar, representada pelo seu momento de dipolo, submetido a um campo macroscópico \vec{E} .

$$\vec{E} = \vec{E}_{\text{ext}} + \vec{E}'. \quad (2.2)$$

No Apêndice B é discutida a validade da Equação (2.2). A Equação (2.2) na Equação (2.1):

$$\vec{F} = \vec{E} + \vec{E}_d. \quad (2.3)$$

A Equação (2.3) Agora, o cálculo do campo de Lorentz \vec{E}_d . Da Figura 7 e da Equação (1.18) obtém-se:

$$\sigma_b = P \cos \theta. \quad (2.4)$$

Da Figura 9 e sabendo que o elemento de área da = $a^2 \sin \theta d\theta d\phi$ para a cavidade, obtemos:

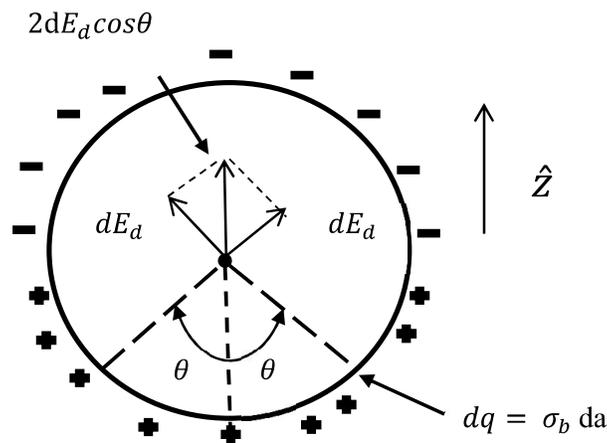


Figura 9. Componentes de ação do campo elétrico resultante da distribuição de carga superficial na cavidade.

$$2dE_d \cos \theta = 2 \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{\sigma_b da}{a^2} \cos \theta = 2 \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{P \cos^2 \theta}{a^2} (a^2 \sin \theta d\theta d\phi).$$

Usando a simetria e integrando dentro dos intervalos e tomando um caráter vetorial:

$$\vec{E}_d = \frac{\vec{P}}{3\epsilon_0}. \quad (2.5)$$

A Equação (2.5) na Equação (2.3):

$$\vec{F} = \vec{E} + \frac{\vec{P}}{3\epsilon_0}. \quad (2.6)$$

A Equação (2.6) corresponde à primeira etapa: Calcular o campo interno \vec{F} .

(ii) Substituir a expressão encontrada para o campo que atua no centro da cavidade, \vec{F} na etapa (i) na Equação $\vec{m} = \vec{\mu}_0 + \alpha\vec{F}$ para a obtenção de \vec{m} , o momento dipolo total da molécula.

Agora, o procedimento sai praticamente numa sequência simples. Substituindo a Equação $\vec{F} = \vec{E} + \frac{\vec{P}}{3\epsilon_0}$ em $\vec{m} = \vec{\mu}_0 + \alpha\vec{F}$ (com $\vec{\mu}_0 = 0$):

$$\vec{m} = \alpha \left(\vec{E} + \frac{\vec{P}}{3\epsilon_0} \right). \quad (2.7)$$

A Equação (2.7) nos dá o momento de dipolo de uma molécula. O próximo passo é encontrar a Polarização P.

(iii) Substituir a Equação resolvida para $\vec{m} = \vec{\mu}_0 + \alpha\vec{F}$ na Equação $\vec{P} = N\langle\vec{m}\rangle$ e calcular o valor esperado $\langle\vec{m}\rangle$ para a obtenção de \vec{P} , a polarização do meio.

Nesta etapa é encontrada a polarização como função do campo: $\vec{P}(\vec{E})$. Inserindo $\vec{m} = \alpha \left(\vec{E} + \frac{\vec{P}}{3\epsilon_0} \right)$ em $\vec{P} = N\langle\vec{m}\rangle$ temos

$$\vec{P} = N \left\langle \alpha \left(\vec{E} + \frac{\vec{P}}{3\epsilon_0} \right) \right\rangle, \quad (2.8)$$

Como

$$\alpha \left(\vec{E} + \frac{\vec{P}}{3\epsilon_0} \right)$$

é constante (lembre que estamos aplicando um campo uniforme \vec{E} e estamos em um meio isotrópico com substâncias apolares, ou seja, \vec{P} é constante), temos $\langle \alpha \left(\vec{E} + \frac{\vec{P}}{3\epsilon_0} \right) \rangle = \alpha \left(\vec{E} + \frac{\vec{P}}{3\epsilon_0} \right)$.

Desenvolvendo, evidenciando \vec{E} do lado direito da igualdade e tomando o módulo:

$$|\vec{P}| = \frac{N\alpha}{1 - N\alpha/3\epsilon_0} |\vec{E}|. \quad (2.9)$$

A Equação (2.9) é a polarização \vec{P} do sistema em função do campo macroscópico \vec{E} . O último passo vem em seguida.

(iv) Substituir a Equação já resolvida $|\vec{P}| = N|\langle \vec{m} \rangle|$ na Equação $\epsilon_r = 1 + \frac{P}{\epsilon_0 E}$, para obtenção de ϵ_r .

Agora basta substituir $|\vec{P}| = \frac{N\alpha}{1 - N\alpha/3\epsilon_0} |\vec{E}|$ em $\epsilon_r = 1 + \frac{P}{\epsilon_0 E}$. Como a polarização \vec{P} é proporcional ao campo \vec{E} , ϵ_r não depende do campo macroscópico:

$$\epsilon_r = 1 + \frac{(N\alpha/\epsilon_0)}{(1 - N\alpha/3\epsilon_0)}. \quad (2.10)$$

Esta é a Equação de Clausius-Mosotti. Ela é comumente apresentada no formato

$$\frac{\epsilon_r - 1}{\epsilon_r + 2} = \frac{N\alpha}{3\epsilon_0}. \quad (2.11)$$

2.2 MODELO DE DEBYE

À Semelhança do que foi feito no desenvolvimento do modelo de Clausius-Mosotti, será seguido os passos apresentados na seção 4 do capítulo 1, para o desenvolvimento do modelo de Debye (DEBYE, 1912). Neste modelo a molécula pode ser polar, ou seja, $\vec{\mu}_0$ pode ser não-nulo.

(i) Cálculo do campo interno \vec{F} para um líquido de moléculas apolares.

A Figura 10 representa um meio dielétrico submetido a um campo macroscópico uniforme \vec{E} , com uma cavidade microscópica de raio a , em seu centro, uma molécula polar representada pelo momento de dipolo total $\vec{m} = \vec{\mu}_0 + \alpha\vec{F}$, onde \vec{F} é o campo macroscópico que atua na molécula no centro da cavidade.

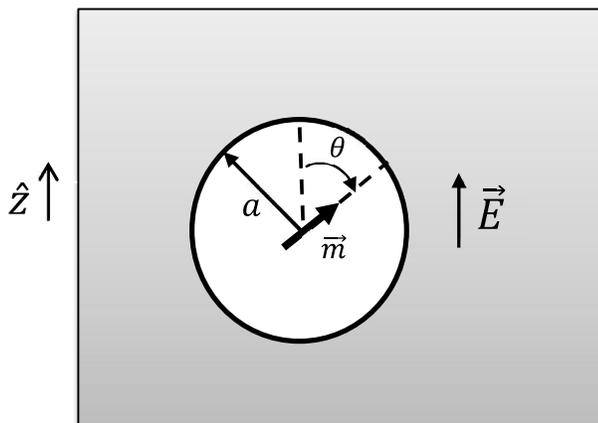


Figura 10. Representação de um meio dielétrico submetido a um campo macroscópico uniforme \vec{E} , com uma cavidade microscópica de raio a , em seu centro, uma molécula polar representada pelo momento de dipolo

$$\text{total } \vec{m} = \vec{\mu}_0 + \alpha\vec{F}.$$

Debye assumiu que a expressão para \vec{F} não muda ao passarmos de uma molécula apolar para uma molécula polar, no interior da cavidade da Figura 9. Com isto, ele admitiu que a expressão para o caso de líquidos de moléculas polares é a mesma que foi obtida na Equação (2.6) para o caso de líquidos de moléculas apolares. Ou seja,

$$\vec{F} = \vec{E} + \frac{\vec{P}}{3\epsilon_0}. \quad (2.12)$$

(ii) Substituir a expressão encontrada para \vec{F} (Equação (2.12)) na Equação para o momento de dipolo total $\vec{m} = \vec{\mu}_0 + \alpha\vec{F}$ para obter \vec{m} , o momento dipolo total da molécula.

$$\vec{m} = \vec{\mu}_0 + \alpha \left(\vec{E} + \frac{\vec{P}}{3\epsilon_0} \right). \quad (2.13)$$

Note que a Equação (2.13) apresenta a primeira modificação substancial em relação ao modelo de Clausius-Mosotti. Esta modificação será melhor vista no cálculo da polarização \vec{P} .

(iii) Substituir a Equação (2.13) ($\vec{m} = \vec{\mu}_0 + \alpha\vec{F}$) na Equação $\vec{P} = N\langle\vec{m}\rangle$ e calcular o valor esperado $\langle\vec{m}\rangle$ para a obtenção de \vec{P} , a polarização do meio.

$$\vec{P} = N \left\{ \langle\vec{\mu}_0\rangle + \alpha \left(\vec{E} + \frac{\vec{P}}{3\epsilon_0} \right) \right\}, \quad (2.14)$$

Desenvolvendo, utilizando $\langle\vec{\mu}_0\rangle = \frac{\mu_0^2}{kT} \vec{E}$ (veja Apêndice C) e evidenciando \vec{E} , obtém-se:

$$\vec{P} = \frac{N(\alpha + \mu_0^2/3kT)}{1 - N(\alpha + \mu_0^2/3kT)/3\epsilon_0} \vec{E}. \quad (2.15)$$

(iv) Substituir a Equação (2.15) ($\vec{P} = N\langle\vec{m}\rangle$) na Equação $\epsilon_r = 1 + \frac{P}{\epsilon_0 E}$, para obtenção de ϵ_r .

Novamente a polarização \vec{P} é proporcional ao campo \vec{E} , assim ϵ_r não depende do campo macroscópico:

$$\epsilon_r = 1 + \frac{N(\alpha + \mu_0^2/3kT)/\epsilon_0}{1 - N(\alpha + \mu_0^2/3kT)/3\epsilon_0}. \quad (2.16)$$

Esta é a Equação de Debye. Ela é comumente apresentada no formato:

$$\frac{\epsilon_r - 1}{\epsilon_r + 2} = \frac{N}{3\epsilon_0} \left(\alpha + \frac{\mu_0^2}{3kT} \right). \quad (2.17)$$

2.3 MODELO DE ONSAGER

Novamente à semelhança do que foi feito no desenvolvimento dos modelos anteriores, será utilizado a sequência do tópico 1.4. Segundo Onsager (ONSAGER, 1936), o equívoco de Debye foi ter utilizado a Equação (2.12), que diz que o campo interno \vec{F} que atua na molécula no centro da cavidade da figura 18 é a soma do campo macroscópico \vec{E} com o campo de Lorentz \vec{E}_d . Seu argumento é bastante simples de ser entendido. Se a Equação (2.12) estivesse correta, \vec{F} seria paralelo a \vec{E} . No entanto, isto não é fisicamente esperado, conforme será mostrado abaixo.

- (i) Cálculo do campo interno \vec{F} para um líquido de moléculas polares.

Se a fonte do campo externo \vec{E} for desligada, teremos $\vec{E} = 0$. Todavia, o momento de dipolo no centro da cavidade da Figura 11 polariza o meio que, em resposta a esta polarização, “reage” com um campo \vec{R} (o chamado “campo de reação”) sobre o dipolo. A Figura 11 ilustra as linhas de campo gerado pelo momento de dipolo.

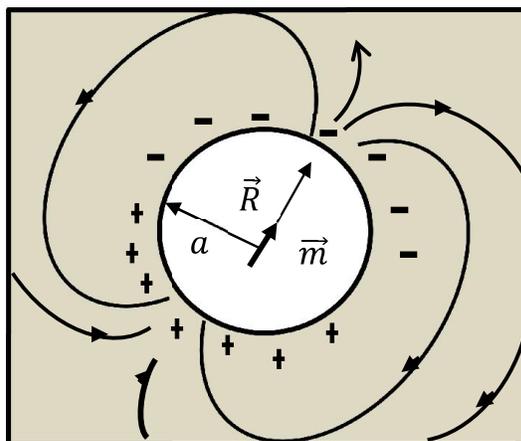


Figura 11. Linhas do campo do momento de dipolo \vec{m} .

As linhas de campo indicadas são as geradas pelo dipolo " \vec{m} ". As cargas são representações das cargas ligadas " σ_b " induzidas pelo campo do dipolo. O cálculo de \vec{R} (veja

o apêndice D) pode ser feito com o uso da Equação de Laplace, que no CGS (Escreveremos ϵ_r como ϵ no CGS):

$$\vec{R} = \frac{2(\epsilon-1)}{(2\epsilon+1)a^3} \vec{m}. \quad (2.18)$$

- **IMPORTANTE:** Até aqui, foi utilizado o Sistema Internacional de unidades (SI). Daqui em diante será utilizado o CGS ou Sistema Gaussiano. A razão é a seguinte: em todas as referências, inclusive no próprio artigo do Onsager (1936), o modelo de Onsager é apresentado nesse sistema. Logo, o uso do CGS neste trabalho facilita a consulta de outras referências.

Agora, se for mantido a fonte do campo externo ($\vec{E} \neq 0$), mas for retirado o dipolo do centro da cavidade, haverá a situação ilustrada na Figura 12.

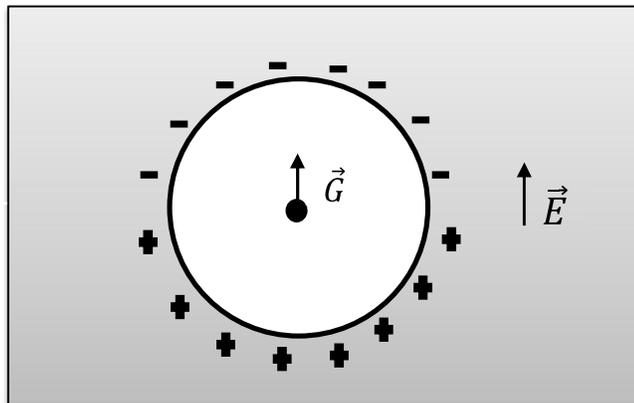


Figura 12. Cavidade em um meio dielétrico submetido a um campo macroscópico uniforme E e a representação de seu campo de cavidade.

O campo \vec{G} (Veja apêndice D) que atua no centro da cavidade (o chamado “campo de cavidade”) pode ser calculado com o uso da Equação de Laplace. No CGS:

$$\vec{G} = \frac{3\epsilon}{2\epsilon+1} \vec{E}. \quad (2.19)$$

Pelo princípio da superposição, o campo interno \vec{F} é dado por:

$$\vec{F} = \vec{G} + \vec{R} = \frac{3\varepsilon}{2\varepsilon+1}\vec{E} + \frac{2(\varepsilon-1)}{(2\varepsilon+1)a^3}\vec{m}. \quad (2.20)$$

É interessante destacar que \vec{F} pode ser calculado diretamente pela Equação de Laplace, porém há as seguintes desvantagens: o problema não apresenta simetria azimutal, tornando a solução mais complexa (com o uso de harmônicos esféricos), e não conseguimos identificar os dois termos da Equação (2.20) de forma explícita como o campo de cavidade e o campo de reação.

O campo interno \vec{F} calculado por Onsager (Equação (2.20)) está indicado na Figura 13. É facilmente perceptível que \vec{F} não é paralelo a \vec{E} , como supôs Debye, mas depende da orientação de \vec{m} .

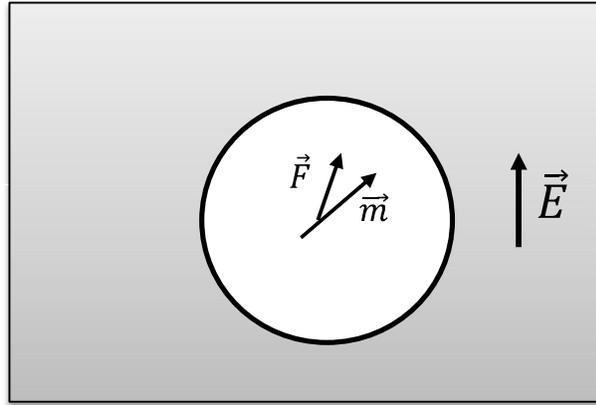


Figura 13. Cavidade em um meio dielétrico submetido a um campo macroscópico uniforme E e a representação de seu campo total F .

(ii) Substituir a expressão encontrada para \vec{F} na etapa (i) (Equação (2.20)) na Equação $\vec{m} = \vec{\mu}_0 + \alpha\vec{F}$ para obter \vec{m} , o momento dipolo total da molécula.

$$\vec{m} = \vec{\mu}_0 + \alpha \left(\frac{3\varepsilon}{2\varepsilon+1}\vec{E} + \frac{2(\varepsilon-1)}{(2\varepsilon+1)a^3}\vec{m} \right). \quad (2.21)$$

Resolvendo para \vec{m} :

$$\vec{m} = \frac{2\varepsilon+1}{[2\varepsilon+1-2(\varepsilon-1)\alpha/a^3]} \frac{3\varepsilon}{(2\varepsilon+1)} \alpha \vec{E} + \frac{2\varepsilon+1}{2\varepsilon+1-2(\varepsilon-1)\alpha/a^3} \vec{\mu}_0. \quad (2.22)$$

No CGS, a Equação de Clausius-Mosotti (Equação (2.11)) é escrita como:

$$\frac{\varepsilon-1}{\varepsilon+2} = \frac{4\pi N\alpha}{3}. \quad (2.23)$$

Onsager utilizou a aproximação de que o volume do meio dielétrico é a soma dos volumes das cavidades de raio a . Logo, sendo \mathcal{N} o número total de moléculas do meio dielétrico, segue que:

$$\mathcal{V} = \mathcal{N} \frac{4}{3} \pi a^3 \Rightarrow N \equiv \frac{\mathcal{N}}{\mathcal{V}} = \frac{3}{4\pi a^3}. \quad (2.24)$$

Substituindo (2.24) em (2.23), a Equação de Clausius-Mosotti fica, no CGS:

$$\frac{\varepsilon-1}{\varepsilon+2} = \frac{\alpha}{a^3}. \quad (2.25)$$

Sabe-se que a Equação de Clausius é aplicável apenas a moléculas apolares. Entretanto, se um líquido de moléculas polares é submetido a um campo elétrico variável no tempo com frequência óptica, os momentos de dipolo permanentes não conseguem acompanhar a oscilação do campo, devido à inércia, portanto pode-se dizer que a polarização do meio é devido apenas aos momentos de dipolos induzidos. Assim, a Equação (2.25) é aplicável. Utilizando a relação de Maxwell

$$\varepsilon = n^2, \quad (2.26)$$

onde n é o índice de refração do material. Na Equação (2.26) obtém-se

$$\frac{n^2-1}{n^2+2} = \frac{\alpha}{a^3}. \quad (2.27)$$

Com o uso da Equação (2.27), reescrevemos a Equação (2.22) como

$$\vec{m} = \frac{\varepsilon(n^2+2)}{(n^2+2\varepsilon)} \alpha \vec{E} + \frac{(2\varepsilon+1)(n^2+2)}{3(n^2+2\varepsilon)} \vec{\mu}_0. \quad (2.28)$$

- (iii) Substituir a Equação $\vec{m} = \vec{\mu}_0 + \alpha \vec{E}$, resolvida para \vec{m} , na Equação $\vec{P} = N\langle \vec{m} \rangle$ e calcular o valor esperado $\langle \vec{m} \rangle$ para a obtenção de \vec{P} , a polarização do meio.

Substituindo (2.28) em $\vec{P} = N\langle \vec{m} \rangle$ chega-se à expressão:

$$\vec{P} = N \left\{ \frac{\varepsilon(n^2+2)}{(n^2+2\varepsilon)} \alpha \vec{E} + \frac{(2\varepsilon+1)(n^2+2)}{3(n^2+2\varepsilon)} \langle \vec{\mu}_0 \rangle \right\}, \quad (2.29)$$

Calculando $\langle \vec{\mu}_0 \rangle$ (veja o apêndice C), tem-se:

$$\langle \vec{\mu}_0 \rangle = \frac{3\varepsilon}{2\varepsilon+1-2(\varepsilon-1)\alpha/a^3} \frac{\mu_0^2}{kT} \vec{E}.$$

Assim, a Equação (2.29) assume a forma:

$$\vec{P} = N \left\{ \frac{\varepsilon(n^2+2)}{(n^2+2\varepsilon)} \alpha + \frac{(2\varepsilon+1)(n^2+2)}{3(n^2+2\varepsilon)} \frac{3\varepsilon}{2\varepsilon+1-\frac{2(\varepsilon-1)\alpha}{a^3}} \frac{\mu_0^2}{3kT} \right\} \vec{E}. \quad (2.30)$$

Para simplificar ainda mais, das equações (2.24) e (2.25) obtem-se:

$$a^3 = \frac{3}{4\pi N}, \quad (2.31)$$

$$\alpha = \frac{n^2-1}{n^2+2} \frac{3}{4\pi N}. \quad (2.32)$$

Com a ajuda da Equação (2.32) escreve-se a Equação (2.30) da forma:

$$\vec{P} = N \left\{ \frac{\varepsilon(n^2+2)}{(n^2+2\varepsilon)} \frac{n^2-1}{n^2+2} \frac{3}{4\pi N} + \frac{(2\varepsilon+1)(n^2+2)^2}{3(n^2+2\varepsilon)^2} \varepsilon \frac{\mu_0^2}{3kT} \right\} \vec{E}. \quad (2.33)$$

- (iv) Substituir a Equação $\vec{P} = N\langle \vec{m} \rangle$ na Equação $\varepsilon = 1 + \frac{4\pi P}{E}$ que é a correspondente à Equação (1.27) no CGS, para obtenção de ε (após várias manipulações).

$$\frac{(\varepsilon - n^2)(2\varepsilon + n^2)}{\varepsilon(n^2 + 2)^2} = \frac{4\pi N}{9kT} \mu_0^2. \quad (2.34)$$

Esta é a Equação de Onsager. Quando escrita de modo a explicitar α em detrimento de n , adquirindo novo formato, pondo ε em evidência:

$$\varepsilon = \frac{1}{4(3 - 4\pi N\alpha)} \left\{ 8\pi N\alpha + 3 + \frac{36\pi N\mu_0^2}{kT(3 - 4\pi N\alpha)} + \left[\left(8\pi N\alpha + 3 + \frac{36\pi N\mu_0^2}{kT(3 - 4\pi N\alpha)} \right)^2 + 8(8\pi N\alpha + 3)^2 \right]^{1/2} \right\} \quad (2.35)$$

CAPÍTULO 3 – COMPARAÇÃO ENTRE OS MODELOS DE CLAUSIUS-MOSOTTI,
DEBYE E ONSAGER

Neste capítulo, serão comparadas as expressões deduzidas para os modelos de Clausius-Mosotti, Debye e Onsager.

3.1 ALGUMAS CONSIDERAÇÕES FÍSICAS SOBRE OS MODELOS DE CLAUSIUS-MOSOTTI, DEBYE E ONSAGER

Primeiramente, para uma boa análise, serão escritas as equações de Clausius-Mosotti (Equação (2.11)) e Debye (Equação (2.17)) no CGS, enquanto a Equação de Onsager (Equação(2.35)) se mantém, já que desde o início foi escrita no CGS:

$$\varepsilon = 1 + \frac{4\pi N\alpha}{(1-4\pi N\alpha/3)}. \quad (3.1)$$

$$\varepsilon = 1 + \frac{4\pi N(\alpha + \mu_0^2/3kT)}{1-4\pi N(\alpha + \mu_0^2/3kT)/3}, \quad (3.2)$$

e

$$\varepsilon = \frac{1}{4(3-4\pi N\alpha)} \left\{ 8\pi N\alpha + 3 + \frac{36\pi N\mu_0^2}{kT(3-4\pi N\alpha)} + \left[\left(8\pi N\alpha + 3 + \frac{36\pi N\mu_0^2}{kT(3-4\pi N\alpha)} \right)^2 + 8(8\pi N\alpha + 3)^2 \right]^{\frac{1}{2}} \right\}. \quad (3.3)$$

Estas são as equações para ε , de Clausius-Mosotti, Debye e Onsager, respectivamente. Vamos às análises:

- É evidente que a Equação de Debye recai na Equação de Clausius-Mosotti para moléculas apolares ($\vec{\mu}_0 = 0$).
- Fazendo $\vec{\mu}_0 = 0$ na Equação (3.3), obtem-se:

$$\varepsilon = \frac{1}{4(3-4\pi N\alpha)} \left\{ 8\pi N\alpha + 3 + [(8\pi N\alpha + 3)^2 + 8(8\pi N\alpha + 3)^2]^{\frac{1}{2}} \right\} \Rightarrow$$

$$\varepsilon = \frac{1}{4(3-4\pi N\alpha)} \{(8\pi N\alpha+3)+3(8\pi N\alpha+3)\} \Rightarrow$$

$$\varepsilon = \frac{8\pi N\alpha/3 + 1}{(1-4\pi N\alpha/3)} \Rightarrow$$

$$\varepsilon = 1 + \frac{4\pi N\alpha}{(1-4\pi N\alpha/3)}.$$

Ou seja, a Equação de Onsager recai na Equação de Clausius-Mosotti para moléculas apolares ($\vec{\mu}_0 = 0$).

Foi observado que há uma diferença entre os campos $\vec{F}_{Onsager}$ e \vec{F}_{Debye} . Porém para gases diluídos (baixas densidades), o campo de reação $\vec{R} \approx 0$ já que as moléculas estão mais distantes e fazem com que a densidade superficial de carga seja mínima. Disto segue, que:

$$\vec{F}_{Onsager} = \vec{G} = \frac{3\varepsilon}{2\varepsilon+1} \vec{E}. \quad (3.4)$$

Considere a situação em que $\varepsilon = 1 + \delta$, de tal forma que $0 < \delta \ll 1$. Fazendo uma boa aproximação por série de Taylor:

$$f(\varepsilon) \equiv \frac{3\varepsilon}{2\varepsilon+1} \approx f(1) + f'(1)(\varepsilon - 1) = 1 + \frac{1}{3}(\varepsilon - 1) = \frac{3 + \varepsilon - 1}{3} = \frac{\varepsilon + 2}{3}.$$

Assim, nestas condições:

$$\vec{F}_{Onsager} \approx \frac{\varepsilon + 2}{3} \vec{E} = \vec{F}_{Debye}$$

Este resultado mostra a equivalência entre os campos de Onsager e Debye para situações com gases diluídos (ou outros em que $\varepsilon \approx 1$). Desta forma, utilizar a Equação de Debye, que é bem mais simples, não significa cometer um erro grotesco. Lembre que está situação é apenas quando $\varepsilon \approx 1$.

CAPÍTULO 4 – CONCLUSÃO

Ao longo deste trabalho foram discutidos alguns tópicos da Transposição Didática aliados ao conteúdo desenvolvido nos capítulos 1, 2 e 3 (e apêndices) de forma a justificar e reforçar a importância de haver ferramentas práticas de ensino que possibilitem aperfeiçoar os conhecimentos do leitor quando estuda os modelos para Constante Dielétrica.

Enquadrando-se como Transposição Didática Externa, inserida como um material didático, trazendo um procedimento único para a obtenção de três Modelos para Constante Dielétrica em Campos Estáticos com Aproximação de Meio Contínuo, esta monografia mostra a importância de uma atualização e interligação do saber, além de sua modernização ao desenvolver passo-a-passo a dedução destes conceitos, critérios estes, essenciais para uma boa Transposição.

Os modelos descritos trazem consigo particularidades. O modelo de Onsager, mesmo sendo o mais completo dentre os três, não é o mais utilizado, pois o modelo de Debye, com boa aproximação, serve para várias aplicações como monitorar concentração de biodiesel no diesel. O modelo de Clausius-Mosotti é interessante por ser um ponto de apoio na verificação da coerência do modelo. Assim, se faz útil estas três formas de encontrar a constante dielétrica, constante essa que exprime o quanto o meio dielétrico afeta o campo elétrico devido a polarização das cargas presentes no material dielétrico.

O público alvo pode ser considerado reduzido se visto da seguinte forma: estudantes que já tenham certa maturidade e já tenham cursado a disciplina de Eletromagnetismo Clássico I, porém, não se pode esquecer que todos que já passaram por esta disciplina, ou não, e que precisem deste estudo não terão maiores dificuldades, visto que a disposição detalhada do trabalho minimiza as chances de dificuldades na desenvoltura, já que faz uma pequena revisão dos conceitos básicos para a compreensão dos modelos.

Aliando novos conceitos aos antigos, trabalhando numa sequência lógica e unificada, além de ir além do mínimo esperado para o aluno de Eletromagnetismo Clássico I, este trabalho visa a aprimoramento dos conhecimentos para seu público alvo. Ignorar a necessidade da atualização do Saber, seja em qual categoria for, é tentar atrasar o desenvolvimento do conhecimento de uma forma mais ampla. Para inseri-lo em sala de aula, uma boa abordagem seria como um trabalho extraclasse para os estudantes cursando a disciplina de Eletromagnetismo Clássico I.

APÊNDICES

APÊNDICE A: MECÂNICA ESTATÍSTICA: CONHECIMENTOS NECESSÁRIOS

Neste tópico serão expostos os conhecimentos mínimos, porém importantes, em mecânica estatística para a construção dos modelos para a constante dielétrica ϵ_r de Debye e Onsager. A utilização efetiva deste apêndice se dá no apêndice C.

A.1 ESTADOS DE UM SISTEMA

Considere um sistema físico a ser estudado; por exemplo, um líquido dielétrico com volume \mathcal{V} a uma temperatura T . Suponha que a energia desse sistema mantenha-se na faixa entre E e $E+\delta E$, sendo δE o limite de precisão com que essa energia pode ser medida. Esse sistema possui vários “estados acessíveis” nesta faixa de energia.

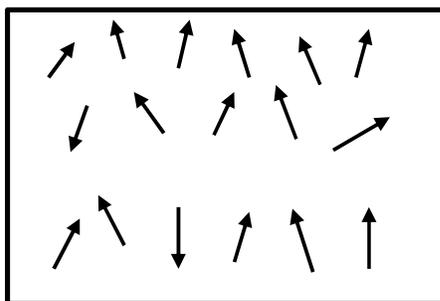


Figura 14. Representações de microestados possíveis na faixa entre E e $E+\delta E$

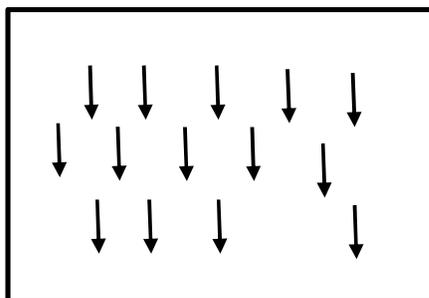


Figura 15. Representação ou não de um microestado possível ao sistema, desde que tenha energia na faixa entre E e $E+\delta E$.

A.2 PRINCÍPIO DE IGUAL PROBABILIDADE A PRIORI CÁLCULO

Em todos os cálculos de média será considerado o seguinte princípio (REIF,1965):
“Um sistema isolado possui igual probabilidade de ser encontrado em qualquer um dos seus estados acessível.”.

A.3 CÁLCULO DE PROBABILIDADES

Considere um sistema isolado, isto é, com energia entre E e $E + \delta E$. A probabilidade de ocorrer um dado estado acessível a este sistema é:

$$p = \frac{1}{\Omega(E)}, \quad (\text{A.1})$$

onde $\Omega(E) \equiv$ número total de estados acessíveis ao sistema com energia entre E e $E + \delta E$. A Equação (A.1) decorre do princípio de igual probabilidade a priori. A probabilidade de ocorrer qualquer um dos estados acessíveis ao sistema é dada por:

$$\sum_{\text{todos os estados acessíveis}} p = \sum_{\text{todos os estados acessíveis}} \frac{1}{\Omega(E)} = \Omega(E) \frac{1}{\Omega(E)} = 1, \quad (\text{A.2})$$

o que está correto. Agora, seja y uma grandeza “macroscópica” do sistema isolado em consideração. Seja y_k um dado valor para a grandeza y . A probabilidade de o sistema ser encontrado de forma que $y = y_k$ é:

$$\mathcal{P}(y_k) = \frac{\Omega(E; y_k)}{\Omega(E)}, \quad (\text{A.3})$$

onde $\Omega(E; y_k)$ é o número de estados acessíveis ao sistema tal que $y = y_k$. A Equação (A.1) decorre de (A.3), basta fazer com que haja apenas um estado acessível em que $y = y_k$.

A.4 CÁLCULO DE MÉDIAS

Seja y uma grandeza “macroscópica” de um sistema isolado. O valor médio de y é, seguindo o princípio de igual probabilidade a priori:

$$\langle y \rangle = \frac{1}{\Omega(E)} \sum_{i=1}^{\Omega(E)} y_i, \quad (\text{A.4})$$

$\langle y \rangle$ trata-se de uma medida calculada no “ensemble” representativo do sistema. Ora, $\Omega(E; y_k)$ é o número de estados acessíveis ao sistema tal que $y = y_k$. Assim, (A.4) é reescrita como:

$$\langle y \rangle = \frac{1}{\Omega(E)} \sum_k y_k \Omega(E; y_k), \quad (\text{A.5})$$

Onde a soma é feita sobre todos os valores possíveis y_k de y assumido pelo sistema isolado. Substituindo (A.3) em (A.5):

$$\langle y \rangle = \sum_k y_k \mathcal{P}(y_k). \quad (\text{A.6})$$

A.5 SISTEMAS EM CONTATO COM UM RESERVATÓRIO TÉRMICO

Considere dois sistemas físicos A e A' , tal que A' tem muito mais graus de liberdade do que A (Figura 16). Considere ainda que $A^{(0)} = A + A'$ é um sistema isolado.

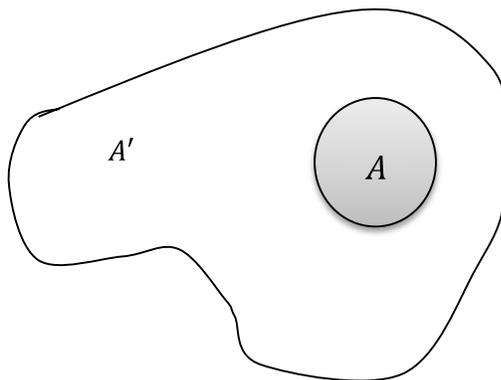


Figura 16. Sistema em contato com um reservatório térmico.

Buscando obter a probabilidade \mathcal{P}_r de encontrarmos A em um estado específico, com energia E_r , é importante ressaltar que pelo princípio de igual probabilidade a priori só é válido para sistemas isolados, logo, não pode ser aplicado ao sistema A , mas apenas ao sistema $A^{(0)} = A + A'$. Portanto, a probabilidade \mathcal{P}_r é dada pela razão:

$$\frac{[\text{número de estados acessíveis ao sistema } A^{(o)} \text{ quando } A \text{ encontra-se em um estado específico, com energia } E_r]}{[\text{número total de estados possíveis ao estado } A^{(o)}]}$$

O numerador da Equação acima corresponde ao número $\Omega'(E^{(o)} - E_r)$ de estados acessíveis ao sistema A' quando A encontra-se em um estado específico com energia E_r , multiplicado por 1 (já que A encontra-se em um único estado). Logo, a Equação acima se torna:

$$\mathcal{P}_r = \frac{\Omega'(E^{(o)} - E_r)}{\Omega_{tot}^{(o)}}. \quad (\text{A.7})$$

Utilizando a condição de normalização $\sum_r \mathcal{P}_r = 1$, obtemos:

$$\frac{1}{\Omega_{tot}^{(o)}} \sum_r \Omega'(E^{(o)} - E_r) = 1 \Rightarrow$$

$$\Omega_{tot}^{(o)} = \sum_r \Omega'(E^{(o)} - E_r) \Rightarrow$$

$$\mathcal{P}_r = \frac{\Omega'(E^{(o)} - E_r)}{\sum_r \Omega'(E^{(o)} - E_r)} \quad (\text{A.8})$$

Devido ao fato de A' ter muito mais graus de liberdade do que A , segue que $E_r \ll E_o$. Com excelente aproximação segue que:

$$\ln \Omega'(E^{(o)} - E_r) = \ln \Omega'(E^{(o)}) - \left. \frac{\partial \ln \Omega'}{\partial E'} \right|_{E^{(o)}} E_r ;$$

Definindo $E' \equiv E^{(o)} - E_r$ e $\beta \equiv \left. \frac{\partial \ln \Omega'}{\partial E'} \right|_{E^{(o)}}$ chega-se à expressão:

$$\Omega'(E^{(o)} - E_r) = \Omega'(E^{(o)}) \exp(-\beta E_r). \quad (\text{A.9})$$

A Equação (A.9) na Equação (A.8):

$$\mathcal{P}_r = \frac{\exp(-\beta E_r)}{\sum_r \exp(-\beta E_r)}. \quad (\text{A.10})$$

É necessário agora encontrar uma expressão alternativa para β . Acima, é indicado por $\Omega'(E^{(o)} - E_r)$ o número de estados acessíveis ao sistema A' quando A encontra-se em um estado específico, com energia E_r . Logo, o número $\Omega'(E^{(o)})$ de estados acessíveis ao sistema total $A^{(o)}$ quando A possui energia E é dado por:

$$\Omega^{(o)}(E) = \Omega(E)\Omega'(E^{(o)} - E). \quad (\text{A.11})$$

Segue então que a probabilidade de o sistema A possuir energia em torno de E é denotada por:

$$\mathcal{P}(E) = \frac{\Omega^{(o)}(E)}{\Omega_{tot}^{(o)}} = \frac{1}{\Omega_{tot}^{(o)}} \Omega(E)\Omega'(E^{(o)} - E). \quad (\text{A.12})$$

Sabe-se que $\Omega(\xi)$ cresce muito rapidamente com ξ . Logo, $\Omega(E)$ cresce muito rapidamente com E e $\Omega'(E^{(o)} - E)$ cai muito rapidamente com E . Conclusão: $\mathcal{P}(E)$ possui um gráfico semelhante ao mostrado na Figura 17.

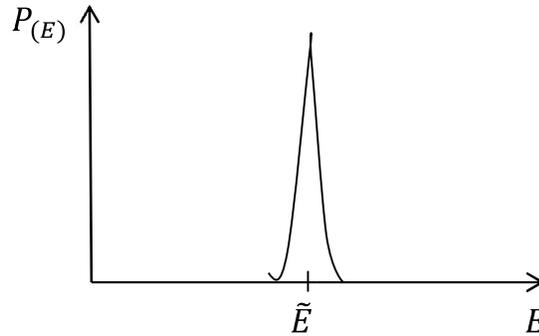


Figura 17. Gráfico de $\mathcal{P}(E)$.

Logo, há uma grande probabilidade que o sistema A seja encontrado com energia em torno de \tilde{E} . Da Figura segue que:

$$\left. \frac{\partial \mathcal{P}}{\partial E} \right|_{E=\tilde{E}} = 0 \implies \left. \frac{1}{\mathcal{P}} \frac{\partial \mathcal{P}}{\partial E} \right|_{E=\tilde{E}} = 0 \implies \left. \frac{\partial \ln \mathcal{P}}{\partial E} \right|_{E=\tilde{E}} = 0. \quad (\text{A.13})$$

Da Equação (A.12):

$$\ln \mathcal{P} = -\ln \Omega_{tot}^{(o)} + \ln \Omega(E) + \ln \Omega'(E'); \quad E' \equiv E^{(o)} - E. \quad (\text{A.14})$$

A Equação (A.14) na Equação (A.12):

$$\begin{aligned} \frac{\partial \ln \Omega(E)}{\partial E} + \frac{\partial \ln \Omega'(E')}{\partial E'} \frac{\partial E'}{\partial E} = 0 &\Rightarrow \frac{\partial \ln \Omega(E)}{\partial E} + \frac{\partial \ln \Omega'(E')}{\partial E'} (-1) = 0 \Rightarrow \\ &\frac{\partial \ln \Omega(E)}{\partial E} = \frac{\partial \ln \Omega'(E')}{\partial E'}. \end{aligned} \quad (\text{A.15})$$

Usando a definição para β :

$$\beta(\tilde{E}) = \beta'(\tilde{E}'), \quad (\text{A.16})$$

Logo, β é uma grandeza cuja unidade é o recíproco da unidade de energia e que pode ser utilizada para caracterizar o equilíbrio térmico entre dois sistemas (quando o equilíbrio é atingido, a Equação (A.16) se verifica). Isto sugere relacionar β com a temperatura absoluta T . Esta relação se dá através da Equação:

$$kT \equiv \beta^{-1}, \quad (\text{A.17})$$

onde k é introduzida para que T seja adimensional. Se T é a temperatura em Kelvin, no SI k é a constante de Boltzmann que tem valor $k = 1,381 * 10^{-23} J$. A Equação (A.17) é reescrita como uma distribuição “canônica”:

$$\mathcal{P}_r = \frac{\exp(-E_r/kT)}{\sum_r \exp(-E_r/kT)}. \quad (\text{A.18})$$

A.6 DISCUSSÕES ADICIONAIS

- I. Na seção A.4 foi mostrado como calcular a média de uma grandeza “macroscópica” y de um sistema isolado. Para uma grandeza “macroscópica” y de um sistema em contato com um reservatório térmico o raciocínio é semelhante.

Considere novamente a Figura 16, que mostra um sistema A em contato com um reservatório térmico A' , tal que $A^{(o)} = A + A'$ forma um sistema isolado. Seja y uma grandeza macroscópica do sistema A . A cada sistema isolado $A^{(o)}$ corresponde um estado r do sistema A e, conseqüentemente, um valor y_r da grandeza y . Logo, a média de y é dada por:

$$\langle y \rangle = \frac{1}{\Omega_{tot}^{(o)}} \sum_{i=1}^{\Omega_{tot}^{(o)}} y_i, \quad (\text{A.19})$$

onde $\Omega_{tot}^{(o)}$ é o número total de estados acessíveis ao sistema $A^{(o)}$. Sabe-se que, para cada r acessível ao sistema A , existem $\Omega'(E^{(o)} - E_r)$ estados acessíveis para A' e, portanto, ao sistema $A^{(o)}$. A Equação (A.19) é reescrita como:

$$\langle y \rangle = \frac{1}{\Omega_{tot}^{(o)}} \sum_r y_r \Omega'(E^{(o)} - E_r), \quad (\text{A.20})$$

onde a soma é feita sobre todos os estados acessíveis ao sistema A . Das equações (A.6) e (A.10), temos a Equação (A.20) na forma:

$$\langle y \rangle = \frac{\sum_r y_r \exp(-\beta E_r)}{\sum_r \exp(-\beta E_r)}. \quad (\text{A.21})$$

II. Em geral, a Equação (A.21) pode ser reescrita como uma razão de integrais em vez de uma razão de somatórios. Em (A.21), as somas são feitas sobre todos os estados acessíveis ao sistema em contato com o reservatório térmico. Como esses estados são funções das posições e momentos que descrevem completamente o sistema, no lugar de E_r e y_r podemos escrever $E(q_1, \dots, p_f)$ e $y(q_1, \dots, p_f)$ respectivamente. Obtemos, então:

$$\langle y \rangle = \frac{\int y(q_1, \dots, p_f) \exp(-\beta E(q_1, \dots, p_f))}{\int \exp(-\beta E(q_1, \dots, p_f))}, \quad (\text{A.22})$$

onde as somas continuam sendo feitas sobre todos os estados acessíveis ao sistema em contato com o reservatório térmico. No espaço de fase desse sistema, existem regiões de “volume” $dq_1 \dots dp_f$ tais que $y(q_1, \dots, p_f)$ e $E(q_1, \dots, p_f)$ permanecem constantes. Por outro lado, o

número de células dessas regiões é dado por $(dq_1 \dots dp_f)/(\delta q_1 \dots \delta p_f)$. Logo, a Equação (A.22) pode ser reescrita como

$$\langle y \rangle = \frac{\int \dots \int y(q_1, \dots, p_f) \exp[-\beta E(q_1, \dots, p_f)] (dq_1 \dots dp_f)/(\delta q_1 \dots \delta p_f)}{\int \dots \int \exp[-\beta E(q_1, \dots, p_f)] (dq_1 \dots dp_f)/(\delta q_1 \dots \delta p_f)}, \quad (\text{A.23})$$

Onde, as integrais são calculadas sobre todos os estados acessíveis ao sistema em contato com o reservatório térmico. Para simplificar a notação, reescreveremos (A.23) como:

$$\langle y \rangle = \frac{\int \dots \int y \exp(-\beta E)(dq_1 \dots dp_f)}{\int \dots \int \exp(-\beta E)(dq_1 \dots dp_f)}. \quad (\text{A.24})$$

III. Na Equação (A.24), E é a energia total do sistema, em um de seus estados acessíveis. Para os sistemas físicos em contato com reservatórios térmicos que será estudado aqui, escreve-se:

$$E(q_1, \dots, p_f) = T(p_1, \dots, p_f) + U(q_1, \dots, q_f) \quad (\text{A.25})$$

e

$$y = y(q_1, \dots, q_f). \quad (\text{A.26})$$

Substituindo (A.26) e (A.25) em (A.24) e fazendo simplificações para o termo dependente de $T(p_1, \dots, p_f)$:

$$\langle y \rangle = \frac{\int \dots \int y(q_1, \dots, q_f) \exp[-\beta U(q_1, \dots, q_f)] (dq_1 \dots dq_f)}{\int \dots \int \exp[-\beta U(q_1, \dots, q_f)] (dq_1 \dots dq_f)}. \quad (\text{A.27})$$

Para simplificar a notação, definia $dX \equiv dq_1 \dots dq_f$ e a Equação acima fica:

$$\langle y \rangle = \frac{\int y \exp(-\beta U) dX}{\int \exp(-\beta U) dX}. \quad (\text{A.28})$$

Pronto, com estes requisitos um estudante estaria preparado para estudar o modelo de Debye e o modelo de Onsager. O modelo de Clausius-Mosotti não necessita de mecânica estatística.

APÊNDICE B: VALIDADE DA EQUAÇÃO (2.2)

Para se convencer da validade da Equação (2.2) que diz que o campo macroscópico \vec{E} no interior do dielétrico é dado por:

$$\vec{E} + \vec{E}_{ext} + \vec{E}_d.$$

observe a Figura 7. A figura destaca uma molécula em meio a muitas outras (da ordem de 10^{23}) e portanto está bastante fora de escala. Se não fosse destacado nenhuma molécula, a figura seria semelhante à figura 6. Na figura 6 foram substituídos os dipolos moleculares por densidades superficiais $+\mathcal{P}$ e $-\mathcal{P}$ como uma boa aproximação para o potencial gerado pelo meio polarizado em regiões distantes de cada dipolo molecular. Isto está ilustrado melhor na figura abaixo, onde a fonte do campo externo \vec{E}_{ext} está representada por um capacitor de placas paralelas com densidades $+\sigma$ e $-\sigma$.

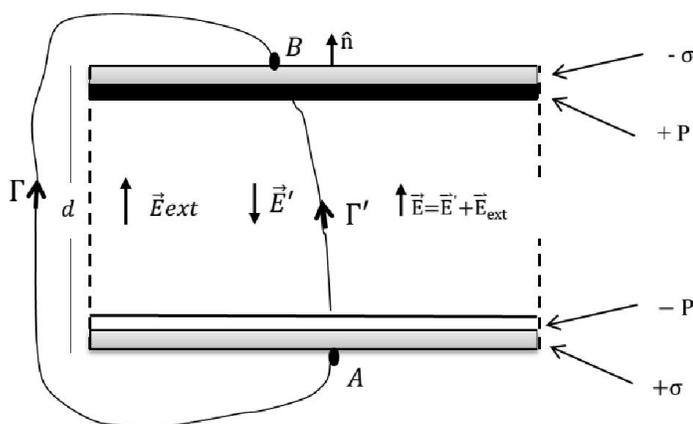


Figura 18. Representação de um meio dielétrico submetido a um campo macroscópico uniforme E e dois caminhos Γ e Γ' entre dois pontos A e B na superfície.

Para calcular a d.d.p. entre dois pontos A e B nas superfícies do meio dielétrico basta escolher o caminho Γ distante dos dipolos moleculares e utilizar a configuração da Figura 18, fazendo:

$$V_A - V_B = \int_{\Gamma} \vec{E} \cdot d\vec{l}. \quad (\text{B.1})$$

Utilizando a lei de Faraday para campos estáticos, num circuito fechado (MACHADO,2000):

$$\oint \vec{E} \cdot d\vec{l} = 0.$$

$V_A - V_B$ pode ser calculado, na Figura 18, utilizando o caminho que pertence à região das placas (Γ'). A vantagem deste caminho é que conhecemos o comportamento do campo ao longo do mesmo. Assim,

$$V_A - V_B = \int_{\Gamma} \vec{E} \cdot d\vec{l} = Ed \Rightarrow V_A - V_B = (E_{ext} - E')d. \quad (\text{B.2})$$

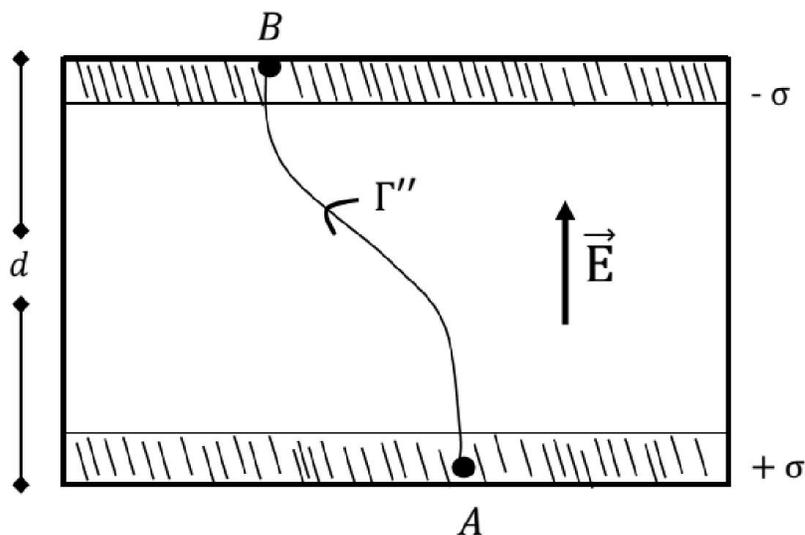


Figura 19. Representação de um meio dielétrico submetido a um campo macroscópico uniforme E e um caminho Γ'' ligando os pontos A e B na superfície do dielétrico.

Foi mostrado acima que $V_A - V_B$ é dado pela Equação (B.2). Um cálculo direto desta quantidade usando o caminho descrito em Γ' seria muito complicado se fosse levado em conta a granulosidade do meio, ou seja, tratar explicitamente o caráter discreto constituído pelas moléculas. Todavia, utilizando um tratamento macroscópico, pode-se representar o campo médio no interior do material por \vec{E} . Como este campo é uniforme, tem-se que:

$$V_A - V_B = Ed. \quad (\text{B.3})$$

Comparando as equações (B.2) e (B.3) temos a correspondência da Equação (2.2):

$$E = E_{ext} - E'ou \vec{E} = \vec{E}_{ext} + \vec{E}'. \quad (\text{B.4})$$

APÊNDICE C: CÁLCULO DE $\langle \vec{\mu}_0 \rangle$ PARA OS MODELOS DE DEBYE E ONSAGER

Nesta seção será calculado o momento de dipolo natural médio $\langle \vec{\mu}_0 \rangle$ para o modelo de Debye e de Onsager:

Na Figura 9, consideramos que a molécula representada pelo seu momento de dipolo total \vec{m} faz o papel de um sistema A em contato com um reservatório térmico à temperatura T . Sendo $\vec{\mu}_0$ uma variável deste sistema (REIF,1965):

$$\langle \vec{\mu}_0 \rangle = \frac{\int \mu_0 \exp(-\beta U) dX}{\int \exp(-\beta U) dX}, \quad (\text{C.1})$$

onde U é a energia potencial do dipolo sob a ação do campo F . Da eletrostática fundamental, temos que, a energia em um dipolo que sofre a ação de um campo é (MACHADO,2000):

$$U = -\vec{\mu}_0 \cdot \vec{F} = -\mu_0 F \cos \theta, \quad (\text{C.2})$$

em que θ é o ângulo entre o momento de dipolo e o campo F . Nesse caso, dX representa o volume no espaço de configurações onde $\cos \theta$ permanece constante. Tomando como elemento de volume $dX = (2\pi a \sin \theta)(a d\theta)$, calculamos $\langle \cos \theta \rangle$ nos intervalos adequados ($0 \leq \theta \leq \pi$) à cavidade e checamos à seguinte Equação:

$$\langle \cos \theta \rangle = \coth a - \frac{1}{a} \equiv L(a), \quad (\text{C.3})$$

em que $a \equiv \frac{\mu_0 F}{kT}$ e $L(a)$ é a função de Langevin (PEIXOTO, Notas de aula). Fazendo uma aproximação (por série) para a situação em que $0 \leq a \leq 1$, temos como boa aproximação

$$\langle \cos \theta \rangle \approx \frac{a}{3}. \quad (\text{C.4})$$

Com esta aproximação, a Equação (C.4) na Equação (C.2), explicitando a e tomando um caráter vetorial, temos $\langle \vec{\mu}_0 \rangle$ para o modelo de Debye:

$$\langle \vec{\mu}_{0_{Debye}} \rangle = \frac{\mu_0^2}{3kT} \vec{F}. \quad (\text{C.5})$$

Para calcular o momento de dipolo natural médio $\langle \vec{\mu}_0 \rangle$ para o modelo de Onsager será mais conveniente utilizar o fato de que $\vec{m} = \vec{\mu}_0 + \alpha \vec{F}$ e colocar \vec{F} em evidência na Equação (2.20) para facilitar nos cálculos, obtendo:

$$\vec{F} = \vec{F}_E + \vec{F}_{\mu_0}, \quad (\text{C.6})$$

em que é definido $\vec{F}_E \equiv \frac{3\varepsilon}{2\varepsilon+1-2(\varepsilon-1)\alpha/a^3} \vec{E}$ e $\vec{F}_{\mu_0} \equiv \frac{2(\varepsilon-1)}{(2\varepsilon+1)a^3-2(\varepsilon-1)\alpha} \vec{\mu}_0$. A facilidade desta manipulação vem de \vec{F}_{μ_0} ser paralelo a $\vec{\mu}_0$, ou seja, apenas \vec{F}_E contribui no cálculo de $\langle \vec{\mu}_0 \rangle$.

Utilizando a Equação (C.5) e fazendo a mudança de \vec{F} para \vec{F}_E e já substituindo na Equação (C.6):

$$\langle \vec{\mu}_{0_{Onsager}} \rangle = \frac{\mu_0^2}{kT} \vec{F}_E = \frac{3\varepsilon}{2\varepsilon+1-\frac{2(\varepsilon-1)\alpha}{a^3}} \frac{\mu_0^2}{3kT} \vec{E}. \quad (\text{C.7})$$

APÊNDICE D: SOBRE OS CAMPOS DE REAÇÃO (\vec{R}) E CAVIDADE (\vec{G}) PARA O MODELO DE ONSAGER

O campo que atua na molécula em um dielétrico polarizado pode ser dividido em campo de cavidade (\vec{G}) e um campo de reação (\vec{R}), que são proporcionais ao momento de dipolo total. O campo de reação não exerce um torque na molécula. Assim, o campo de Onsager é diferente e menor que o considerado por Debye por uma quantidade do campo de reação e de cavidade. Considerando que a molécula é representada, no centro de uma cavidade esférica de raio a , pelo seu momento de dipolo, haverá um campo de reação dado por (após algumas contas com o uso da Equação de Laplace):

$$\vec{R} = \frac{2(\epsilon-1)}{4\pi\epsilon_0 a^3(\epsilon+1)} \vec{m}. \quad (\text{D.1})$$

Para o CGS temos $\frac{1}{4\pi\epsilon_0} = 1$, chegando à expressão (2.18).

O campo de cavidade, retirado da Equação de Laplace, é constante e é proveniente da polarização natural da superfície da cavidade quando não houver molécula no seu interior. Seu valor é proporcional ao campo externo, já que é o único que força uma polarização na superfície da cavidade. Este campo é (no CGS) a Equação:

$$\vec{G} = \frac{3\epsilon}{2\epsilon+1} \vec{E}. \quad (\text{D.2})$$

Utilizando o princípio da superposição, o campo interno total será a contribuição do campo da cavidade (sem a molécula, mas com campo) + campo de reação (com molécula, mas sem o campo).

6. REFERÊNCIAS

ALVES FILHO, José Pinho. Atividades Experimentais: Do método à Prática Construtivista. Tese de Doutorado, UFSC, Florianópolis, 2000.

BÖTTCHER, C. J. F., *Theory of Electry Polarization* (Elsevier Scientific Publishing Company, Amsterdã, 1973)

CHEVALLARD, Yves. La Transposicion Didactica: Del saber sabio al saber enseñado. 1ª ed. Argentina: La Pensée Sauvage, 1991.

DEBYE, P. Physik. Z., **13**, 97 (1912).

FREINKEL, Josif. Princípios de eletrodinâmica clássica. 2.ed. editor: UEPG. 2005.

GRIFFITHS, David J. Introduction to electrodynamics. 2.ed. 1989.

JACKSON, John David. Classical Electrodynamics. 2.ed. 1999.

MACHADO Kleber Daum. Teoria do Eletromagnetismo. 3.ed. 2000.

MCGRUM, N. G., READ, B. E., WILLIAMS, G. *Anelastic and Polimeric Effects in Polimeric Solids*. (John Wiley & Sons, Londres, 1967)

ONSAGER, I. Electric moments of molecules in liquids. J. Am. Chem. Soc., v.58, p. 1486-1493, 1936.

OSTERMANN, Fernanda; MOREIRA, Marco Antônio. Física contemporânea em la escuela secundaria: una experiencia en el aula involucrando formación de profesores. Enseñanza de las ciencias, Barcelona: v.18, n.3, p.391-404, 2000.

PEIXOTO, P. H. R. Notas de aula.

PINTO, A.C., ZANETIC, J. É possível levar a física quântica para o ensino médio? Caderno Catarinense de Ensino de Física, Florianópolis, V.16, n.1, p.7-34, abril 99.

REIF, F. *Fundamentals of Statistical and Thermal Physics*. (McGraw-Hill, London, 1965).

SIQUEIRA, M., PIETROCOLA, M. A transposição didática aplicada a teoria contemporânea: A física de partículas elementares no Ensino. X Encontro Nacional de Pesquisa em Ensino de Física, Londres, 2006.