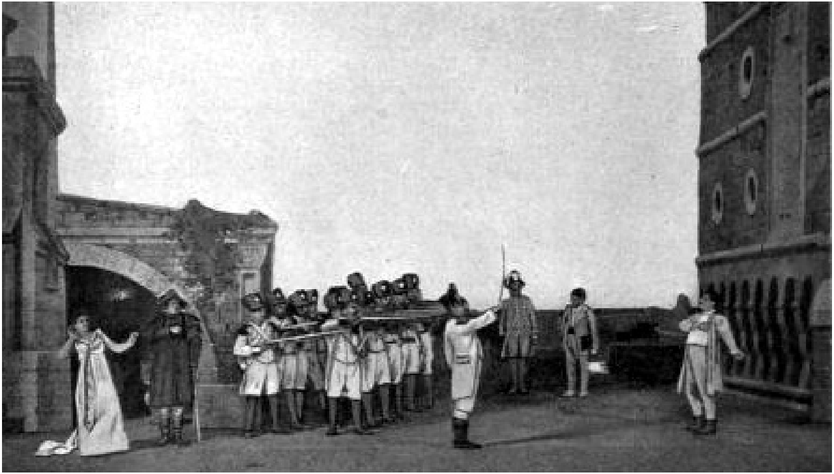
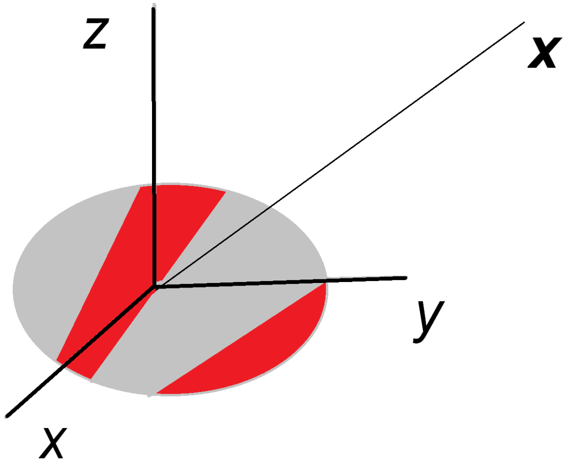
DESARROLLOS MULTIPOLARES Y MEDIOS DIELECTRICOS



Consideramos una distribución arbitraria, pero compacta, de cargas.



El potencial electroestático

$$\Phi(\mathbf{x}) = \int d^3x' \, \frac{\rho(\mathbf{x}')}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|} \tag{1}$$

donde el potencial de Coulomb se puede escribir como

$$\frac{1}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|} = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^{l} \frac{4\pi}{2l+1} \frac{r_<^l}{r_>^{l+1}} Y_{lm}^{*}\left[\theta', \varphi'\right] Y_{lm}\left[\theta, \varphi\right] \tag{2}$$

Si el punto campo se encuentra lo suficientemente lejos, entonces $r_> = r$, $r_< = r'$, y

$$\Phi\left(\mathbf{x}\right) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^{l} \frac{4\pi}{2l+1} \frac{q_{lm}}{r^{l+1}} Y_{lm}\left[\theta, \varphi\right] \tag{3}$$

donde

$$q_{lm} = \int d^3x' \; \rho\left(\mathbf{x}'\right) r'^l Y_{lm}^* \left[\theta', \varphi'\right] \tag{4}$$

son los *momentos multipolares* de la distribución. En particular

$$q_{00} = \frac{Q}{\sqrt{4\pi}} \tag{5}$$

Tambien podemos usar el desarrollo de Taylor

$$\frac{1}{|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|}=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}x'^{j_1}\dots x'^{j_n}\frac{\partial^n}{\partial x^{j_1}\dots\partial x^{j_n}}\frac{1}{r} \tag{6}$$

En esta expresión, para cada n hay $(n+1)(n+2)/2$ términos. Es posible simplificarla usando las propiedades del potencial de Coulomb. Por ejemplo

$$x'^j x'^k \frac{\partial^2}{\partial x^j \partial x^k} \frac{1}{r} = \left[x'^j x'^k - \frac{1}{3} \delta^{jk} r'^2 \right] \frac{\partial^2}{\partial x^j \partial x^k} \frac{1}{r} \tag{7}$$

porque

$$\delta^{jk} \frac{\partial^2}{\partial x^j \partial x^k} \frac{1}{r} = \Delta \frac{1}{r} = 0 \tag{8}$$

(como r es grande, en particular $r \neq 0$)

De esta forma, en vez de 6 términos con $n = 2$, sólo tenemos 5.

Eliminando las expresiones “reducibles” obtenemos un desarrollo

$$\Phi\left(\mathbf{x}\right)=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}Q^{j_1\cdots j_n}\frac{\partial^n}{\partial x^{j_1}\ldots\partial x^{j_n}}\frac{1}{r} \tag{9}$$

donde

$$\begin{aligned} Q &= \int d^3x'\ \rho\left(\mathbf{x}'\right) \\ Q^j &= \int d^3x'\ \rho\left(\mathbf{x}'\right)x'^j\equiv p^j \\ Q^{jk} &= \int d^3x'\ \rho\left(\mathbf{x}'\right)\left[x'^jx'^k-\frac{1}{3}\delta^{jk}r'^2\right] \end{aligned} \tag{10}$$

etc. Cada tensor $Q^{j_1\cdots j_n}$ tiene $2n+1$ componentes independientes, que se pueden escribir como combinaciones lineales de los q_{lm} con $l=n$.

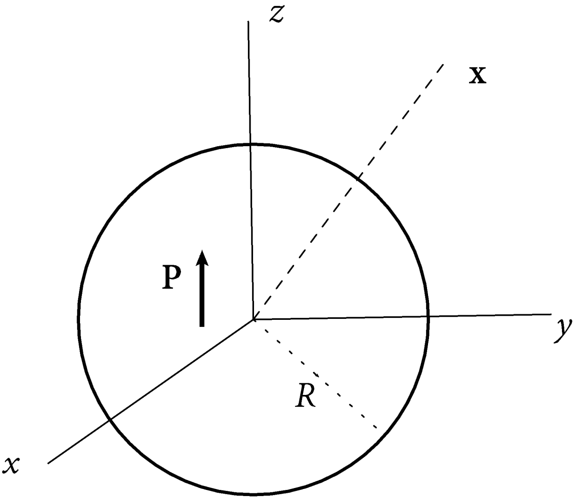
En general los $Q^{j_1\cdots j_n}$ dependen de la elección del origen del sistema de coordenadas, excepto por el primer momento multipolar no nulo.

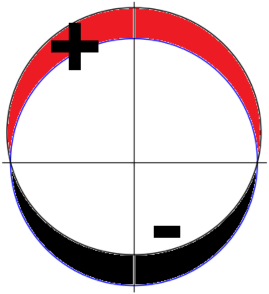
Por ejemplo, si hacemos un cambio de variables de las coordenadas x'^j a nuevas coordenadas $\tilde{x}'^j = x'^j - x_0^j$, entonces

$$\tilde{Q}^{jk} = Q^{jk} - x_0^j p^k - x_0^k p^j + \frac{2}{3}\delta^{jk}\mathbf{x_0}\cdot\mathbf{p} + Q\left[x_0^j x_0^k - \frac{1}{3}\delta^{jk} r_0^2\right] \quad (11)$$

$\tilde{Q}^{jk}$ depende de x_0 salvo cuando $Q = \mathbf{p} = 0$.

EJEMPLO: encontrar el desarrollo multipolar de una esfera con una densidad uniforme de momento dipolar **P**.





Vimos en la primer clase que una distribución de momento dipolar $\bar{\mathbf{P}}$ es equivalente a una densidad de carga inducida $\rho = -\nabla \cdot \bar{\mathbf{P}}$. En nuestro caso la densidad es

$$\bar{\mathbf{P}} = \mathbf{P}\,\theta\left(R - r'\right) \tag{12}$$

Por lo tanto la densidad de carga inducida es

$$\begin{aligned} \rho &= \frac{1}{R}\,\mathbf{P} \cdot \mathbf{x}'\;\delta\left(R - r'\right) \\ &= P\cos\theta\;\delta\left(R - r'\right) \end{aligned} \tag{13}$$

Como la propia densidad de carga $\rho \propto Y_{10} \propto P_1\left[\cos\theta\right] = \cos\theta$, postulamos un desarrollo en armónicos esféricos con esa única componente. Fuera de la esfera

$$\Phi_>\left(\mathbf{x}\right) = \frac{A}{r^2}\cos\theta \tag{14}$$

Dentro de la esfera $\Phi_<\left(\mathbf{x}\right) = Br\cos\theta$
El potencial es continuo en $r = R$

$$\frac{A}{R^2} - BR = 0 \tag{15}$$

La componente radial del campo eléctrico es discontinua:

$$E_r\left(R^+\right) - E_r\left(R^-\right) = 4\pi P\ \cos\theta \tag{16}$$

De donde

$$2\frac{A}{R^3} + B = 4\pi P \tag{17}$$

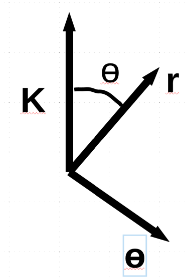
Resolviendo el sistema, encontramos

$$\begin{aligned} B &= \frac{4\pi}{3} P \\ A &= \frac{4\pi}{3} P R^3 \end{aligned} \qquad (18)$$

Dentro de la esfera, $\Phi_< = (4\pi/3)\, P\, z$, y

$$\mathbf{E} = -\,(4\pi/3)\, P\mathbf{K} = -\,(4\pi/3)\,\mathbf{P} \qquad (19)$$

o bien,



$$\begin{aligned} E_r &= -\,(4\pi/3)\, P \cos\theta \\ E_\theta &= (4\pi/3)\, P \sin\theta \quad (20) \end{aligned}$$

Fuera de la esfera, el potencial $\Phi_{>} = (4\pi/3)\,(R/r)^3\, P\, z$ corresponde a un dipolo de intensidad $\mathbf{p} = (4\pi/3)\, R^3 \mathbf{P}$, y el campo ($\mathbf{x} \neq 0$)

$$\mathbf{E} = -\frac{\mathbf{p}}{r^3} + 3\mathbf{x}\frac{\mathbf{p}\cdot\mathbf{x}}{r^5} \tag{21}$$

o bien

$$\begin{aligned} E_r &= 2\left(\frac{4\pi}{3}\right)\frac{R^3}{r^3} P\cos\theta \\ E_\theta &= \left(\frac{4\pi}{3}\right)\frac{R^3}{r^3} P\sin\theta \end{aligned} \tag{22}$$

E_θ es continuo a través de la esfera, mientras que E_r es discontinuo y obedece la ecuación (16).

El desarrollo multipolar tiene un único término, que corresponde al momento dipolar.

Medios dieléctricos

Vimos en la primer clase que un campo eléctrico polariza un medio dieléctrico induciendo una densidad de momento dipolar $\mathbf{P}$, y por lo tanto una densidad de carga inducida $\rho_I = -\nabla \cdot \mathbf{P}$. Discriminando la carga total ρ_T como carga libre ρ más carga inducida ρ_I, la Ley de Gauss

$$\nabla \cdot \mathbf{E} = 4\pi \left(\rho + \rho_I\right) = 4\pi \left(\rho - \nabla \cdot \mathbf{P}\right) \tag{23}$$

O bien

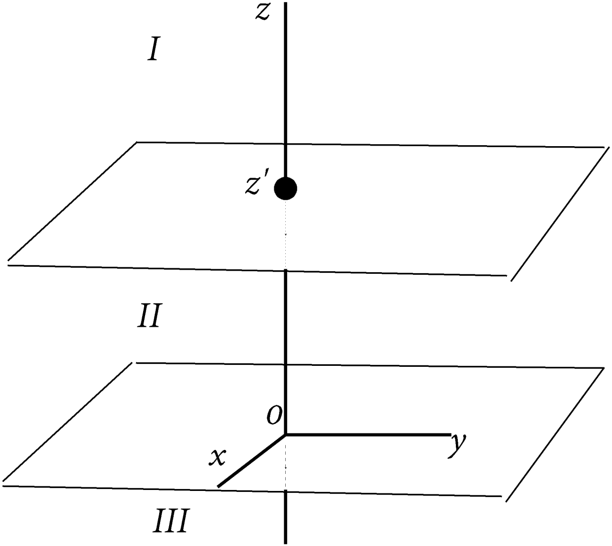
$$\nabla \cdot \mathbf{D} = 4\pi\rho \tag{24}$$

donde $\mathbf{D} = \mathbf{E} + 4\pi\mathbf{P}$. Si el medio es lineal y homogéneo, $\mathbf{D} = \epsilon\mathbf{E}$, $\mathbf{P} = \chi_e\mathbf{E}$, y $\epsilon = 1 + 4\pi\chi_e$. La ley de Faraday sigue siendo

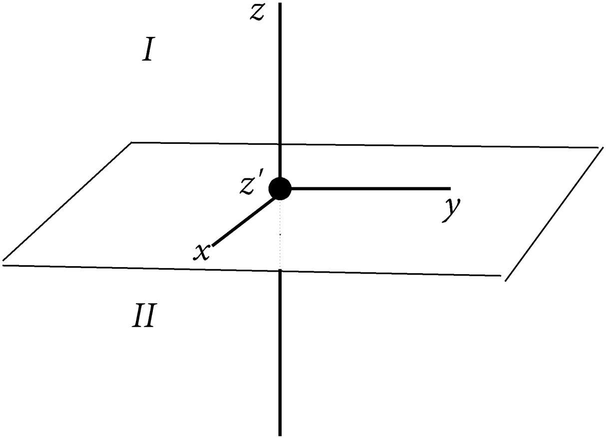
$$\nabla \times \mathbf{E} = 0 \tag{25}$$

En la interfase entre dos medios dieléctricos, en ausencia de carga libre, la componente tangencial de $\mathbf{E}$ y la componente normal de $\mathbf{D}$ son continuas.

Ejemplo I: una carga a distancia z' de una interfase plana entre dos dieléctricos.



Antes de encarar este problema, repasemos cómo se ve un potencial Coulombiano en coordenadas ciíndricas.



Como no hay dependencia en φ, sólo consideramos un desarrollo en funciones de Bessel de orden 0.
Como el dominio incluye al origen, descartamos las funciones de Neumann.
Para $z > 0$, descartamos la exponencial creciente, de modo que

$$\Phi^{I}(\mathbf{x}) = \int_0^{\infty} pdp\; A_p J_0(pr)\, e^{-pz} \tag{26}$$

Para $z < 0$ escribimos

$$\Phi^{II}(\mathbf{x}) = \int_0^{\infty} pdp\; B_p J_0(pr)\, e^{pz} \tag{27}$$

La condición de continuidad en $z = 0$ implica que $A_p = B_p$. Como $J_0(0) = 1$, la delta se escribe

$$\frac{\delta(r)}{r} = \int_0^\infty p dp \, J_0(pr) \tag{28}$$

La condición de discontinuidad en la derivada resulta en

$$2pA_p = 4\pi q \tag{29}$$

Por lo tanto

$$\Phi(\mathbf{x}) = 2\pi q \int_0^\infty dp \, J_0(pr) \, e^{-p|z|} \tag{30}$$

Ahora volvemos al problema con dos dieléctricos. Si $z > 0$, $\epsilon = \epsilon_1$; si $z < 0$, $\epsilon = \epsilon_2$.
Si $z > z'$, escribimos

$$\Phi^{I}(\mathbf{x}) = \int_0^{\infty} pdp\, A_p J_0(pr)\, e^{-pz} \tag{31}$$

Si $z' > z > 0$

$$\Phi^{II}(\mathbf{x}) = \int_0^{\infty} pdp\, J_0(pr) \left[B_p e^{pz} + C_p e^{-pz}\right] \tag{32}$$

Si $0 > z$

$$\Phi^{III}(\mathbf{x}) = \int_0^{\infty} pdp\, J_0(pr)\, D_p e^{pz} \tag{33}$$

Las relaciones de continuidad son

$$\begin{aligned} A_p e^{-pz'} - B_p e^{pz'} - C_p e^{-pz'} &= 0 \\ D_p - B_p - C_p &= 0 \end{aligned} \tag{34}$$

El salto de la pendiente en $z = z'$ da

$$A_p e^{-pz'} + B_p e^{pz'} - C_p e^{-pz'} = \frac{4\pi}{\epsilon_1} \frac{q}{p} \tag{35}$$

El salto de E_z en $z = 0$ da

$$\epsilon_1 \left[B_p - C_p\right] - \epsilon_2 D_p = 0 \tag{36}$$

Resolviendo encontramos

$$
\begin{aligned}
A_p &= \frac{2\pi}{\epsilon_1}\frac{q}{p}\left[e^{pz'} - \frac{\epsilon_2-\epsilon_1}{\epsilon_2+\epsilon_1}e^{-pz'}\right] \\
B_p &= \frac{2\pi}{\epsilon_1}\frac{q}{p}e^{-pz'} \\
C_p &= -\frac{2\pi}{\epsilon_1}\frac{q}{p}\frac{\epsilon_2-\epsilon_1}{\epsilon_2+\epsilon_1}e^{-pz'} \\
D_p &= \frac{4\pi}{\epsilon_2+\epsilon_1}\frac{q}{p}e^{-pz'}
\end{aligned}
\tag{37}
$$

Al reemplazar en el potencial, encontramos
Si $z > z'$,

$$\Phi^{I}(\mathbf{x}) = \frac{2\pi}{\epsilon_1} q \int_0^\infty dp\, A_p J_0(pr)\, e^{-pz} \left[e^{-p(z-z')} - \frac{\epsilon_2 - \epsilon_1}{\epsilon_2 + \epsilon_1} e^{-p(z+z')} \right] \tag{38}$$

Si $z' > z > 0$

$$\Phi^{II}(\mathbf{x}) = \frac{2\pi}{\epsilon_1} q \int_0^\infty dp\, J_0(pr) \left[e^{p(z-z')} + C_p e^{-p(z+z')} \right] \tag{39}$$

Esta solución corresponde al potencial de la carga física q ubicada en z' más una carga imagen

$$q' = -\frac{\epsilon_2 - \epsilon_1}{\epsilon_2 + \epsilon_1} q \tag{40}$$

ubicada en $-z'$.

Si $0 > z$

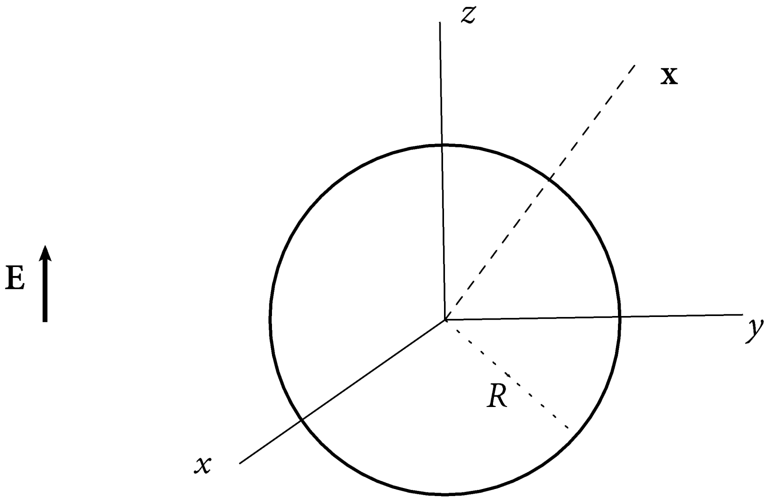
$$\Phi^{III}(\mathbf{x}) = \frac{4\pi}{\epsilon_2 + \epsilon_1} q \int_0^\infty dp\, J_0(pr)\, e^{p(z-z')} \tag{41}$$

que corresponde a una carga

$$q'' = \frac{2\epsilon_2}{\epsilon_2 + \epsilon_1} q \tag{42}$$

ubicada en z'.

Ejemplo II: una esfera de radio R con $\epsilon = \epsilon_2$ inmersa en un medio con $\epsilon = \epsilon_1$; el campo eléctrico lejos de la esfera es $\mathbf{E}_\infty = E_\infty \mathbf{K}$



En este problema no hay carga libre en ningún lado, excepto en infinito. Por simetría asumimos que $E_\varphi = 0$. Entonces las condiciones de contorno son que E_θ y D_r son continuos a través de la esfera. Como $D_r = \epsilon_1 E_r$ fuera de la esfera, y $= \epsilon_2 E_r$ dentro de la esfera, tenemos que

$$E_r\left(R^+,\theta\right) - \frac{\epsilon_2}{\epsilon_1} E_r\left(R^-,\theta\right) = 0 \tag{43}$$

Este problema es equivalente a un campo homogéneo $\mathbf{E}_\infty$ en todo el espacio superpuesto a una esfera con densidad de momento dipolar $\mathbf{P} = P\mathbf{K}$ en el origen (con el valor de P a determinar). Efectivamente resulta:
Fuera de la esfera

$$\begin{aligned} E_r^> &= E_\infty \cos\theta + 2\left(\frac{4\pi}{3}\right)\frac{R^3}{r^3} P\cos\theta \\ E_\theta^> &= -E_\infty \sin\theta + \left(\frac{4\pi}{3}\right)\frac{R^3}{r^3} P\sin\theta \end{aligned} \qquad (44)$$

Dentro de la esfera

$$\begin{aligned} E_r^< &= E_\infty \cos\theta - \left(\frac{4\pi}{3}\right) P\cos\theta \\ E_\theta^< &= -E_\infty \sin\theta + \left(\frac{4\pi}{3}\right) P\sin\theta \end{aligned} \qquad (45)$$

Por lo tanto E_θ es continuo, y

$$E_r^> - E_r^< = 4\pi P \cos\theta \tag{46}$$

pero

$$\cos\theta = \frac{E_r^<}{E_\infty - \left(\frac{4\pi}{3}\right) P} \tag{47}$$

de modo que

$$E_r^> - \left[1 + \frac{4\pi P}{E_\infty - \left(\frac{4\pi}{3}\right) P}\right] E_r^< = 0 \tag{48}$$

Los dos problemas son equivalentes provisto que

$$1 + \frac{4\pi P}{E_\infty - \left(\frac{4\pi}{3}\right) P} = \frac{\epsilon_2}{\epsilon_1} \tag{49}$$

Resolviendo encontramos que

$$\left(\frac{4\pi}{3}\right) P = \frac{\epsilon_2 - \epsilon_1}{\epsilon_2 + 2\epsilon_1} E_\infty \tag{50}$$

y por lo tanto el campo constante dentro de la esfera es

$$\mathbf{E}^< = \frac{3\epsilon_1}{\epsilon_2 + 2\epsilon_1} \mathbf{E}_\infty \tag{51}$$

LA FORMULA DE CLAUSIUS-MOSSOTTI

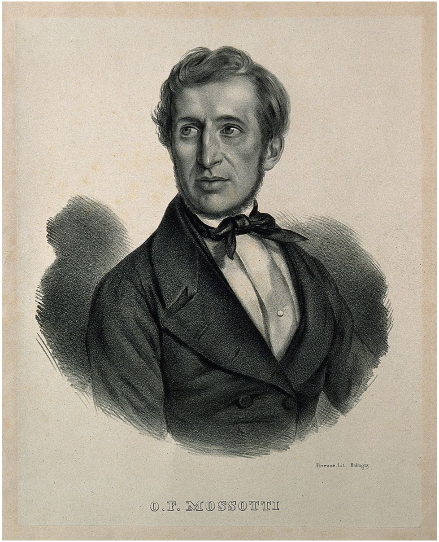
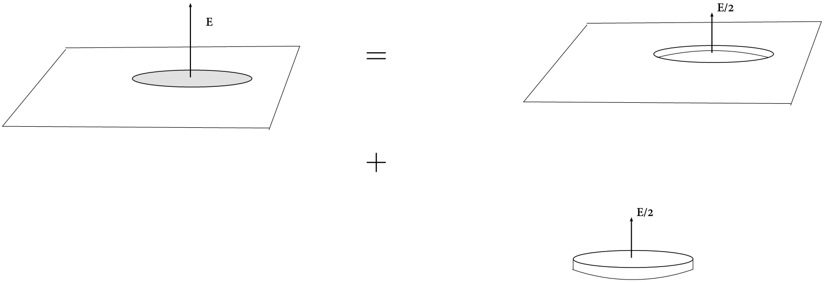


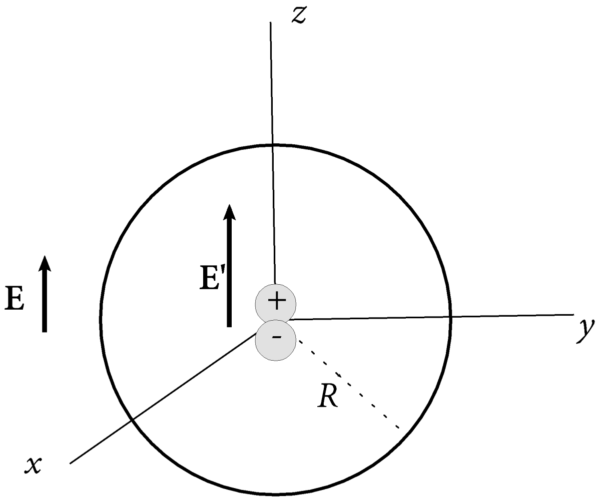
Figura: *Ottaviano Fabrizio Mossotti*

Dijimos que la imposición de un campo eléctrico $\mathbf{E}$ polariza las moléculas del medio dieléctrico. Pero $\mathbf{E}$ es la resultante de los campos de las cargas libres y todas las moléculas del medio. El campo generado por una molécula no puede contribuir a polarizar esa misma molécula. En otras palabras, una molécula en particular se polariza como respuesta al campo $\mathbf{E}'$ generado por las cargas libres y todas las otras moléculas, menos las que estamos mirando. $\tilde{\mathbf{E}}'$ difiere de $\mathbf{E}$ por el autocampo de la molécula.

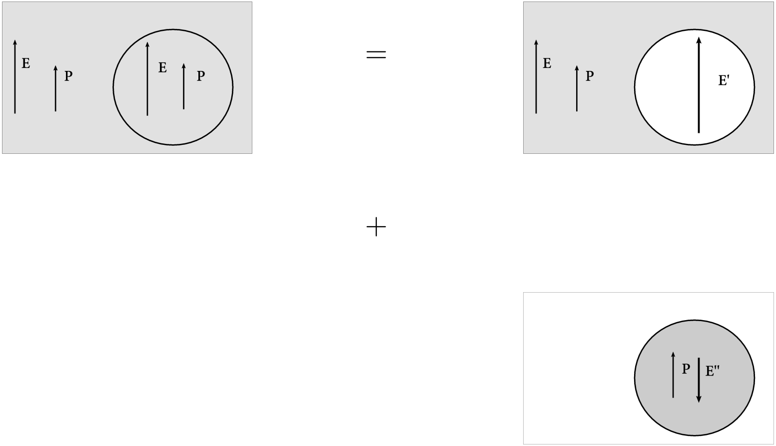
El argumento es igual al que dice que la fuerza sobre un elemento de superficie de un conductor es $E_n\sigma/2$, en vez de $E_n\sigma$



Consideremos una esfera de radio R dentro de nuestro dieléctrico homogéneo, y miremos una molécula dentro de esta esfera. Asumimos que la resultante de los campos generados por las otras moléculas dentro de la esfera es nula.



El campo $\mathbf{E}'$ que polariza a nuestra molécula es el campo externo más el generado por las moléculas más allá de la esfera. Este campo es el campo medio $\mathbf{E}$ menos el campo $-4\pi\mathbf{P}/3$, que es el autocampo de la esfera.



Bajo la acción del campo $\mathbf{E}'$, la molécula genera un momento dipolar $\mathbf{p} = \gamma_{mol}\mathbf{E}'$, y entonces

$$\mathbf{p} = \gamma_{mol}\mathbf{E}' = \gamma_{mol} \left[\mathbf{E} + \left(\frac{4\pi}{3}\right)\mathbf{P}\right] \tag{52}$$

Encontramos la densidad de momento dipolar multiplicando $\mathbf{p}$ por la densidad n

$$\mathbf{P} = n\gamma_{mol}\left[\mathbf{E} + \left(\frac{4\pi}{3}\right)\mathbf{P}\right] \tag{53}$$

pero

$$\mathbf{P} = \chi_e \mathbf{E} = \frac{\epsilon - 1}{4\pi}\mathbf{E} \tag{54}$$

y entonces

$$\gamma_{mol} = \frac{3}{4\pi n}\frac{\epsilon - 1}{\epsilon + 2} \tag{55}$$

que es la *fórmula de Clausius-Mossotti*.

La próxima clase vamos a investigar la energía de sistemas de cargas y campos en presencia de dieléctricos.