# CAPITULO II
# POLARIZACIÓN

## 2.1 Polarización de la materia

La polarización de la materia se entiende como el desplazamiento relativo de cargas a escala atómica cuya extensión depende de qué tan rígida sea la unión entre las cargas[22,23]. En el electromagnetismo clásico, la polarización eléctrica es el campo vectorial que expresa la densidad de los momentos eléctricos dipolares permanentes o inducidos en un material dieléctrico. El vector de polarización $\vec{P}$ se define como el momento dipolar por unidad de volumen, recordando que el momento dipolar total de una distribución de carga viene dado por la ecuación

$$\vec{p} = \sum q_n \vec{r}_n \qquad 2.1$$

siendo $\vec{r}_n$ el vector de posición de la carga $q_n$. Por otro lado, el vector polarización tiene la siguiente forma:

$$\vec{P} = N\vec{p} \qquad 2.2$$

donde $N$ es el número de moléculas[24].

La polarización eléctrica $\vec{P}$ es uno de los tres campos eléctricos macroscópicos que describen el comportamiento de los materiales, los otros dos son el campo eléctrico $\vec{E}$ y el campo de desplazamiento eléctrico $\vec{D}$ [22,25,26,27].

Se sabe, por estudios anteriores y reconocidos ya en la literatura científica, que "el origen último del comportamiento dieléctrico está en la naturaleza eléctrica de la materia. Aunque de manera normal es eléctricamente neutra como conjunto, en detalle, la materia, está constituida por cargas positivas y negativas en igual número. A diferencia de los electrones de conducción, en las sustancias dieléctricas estas cargas no son libres de moverse, bajo la influencia de un campo eléctrico de origen externo"[3].

Pues bien, cuando sobre un medio dieléctrico se aplica un campo eléctrico, ya sea estático o dinámico, se produce en su interior una reordenación de carga que microscópicamente da lugar a la aparición de dipolos eléctricos. El efecto de la aparición de dichos dipolos se observa macroscópicamente.

La aparición de estos dipolos se puede producir mediante distintos tipos de mecanismos:

- Polarización de orientación. Este mecanismo da lugar a la aparición inducida debido a la orientación, en la dirección del campo aplicado, de los momentos dipolares que poseen las moléculas que componen ciertos medios (sustancias polares). En las siguientes figuras presentamos un esquema dipolar de un material arbitrario sin y con campo eléctrico.

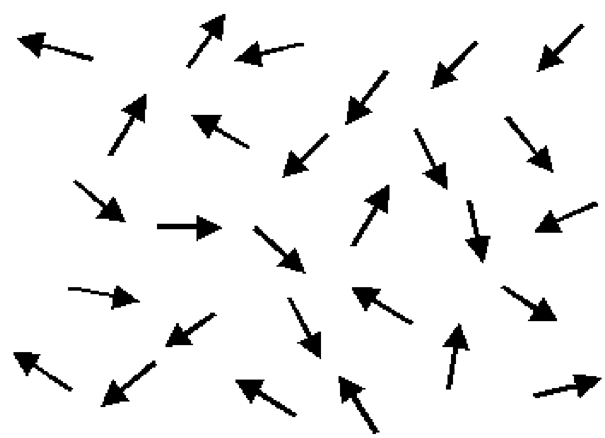

Fig. 2.1 Esquema de orientación dipolar al azar sin la presencia de un campo eléctrico

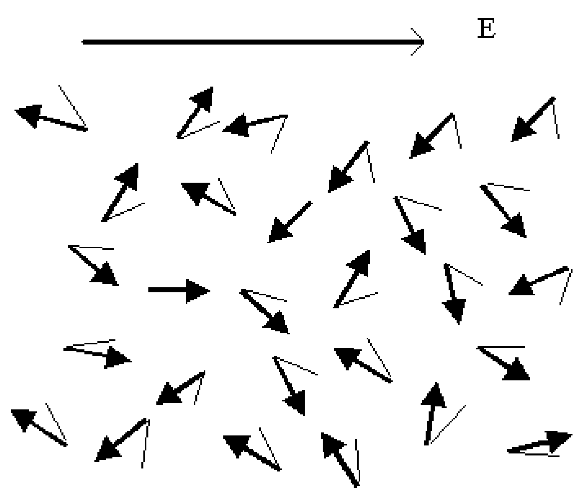


Fig. 2.2 Esquema de orientación dipolar en presencia de un campo eléctrico. Las líneas junto a las flechas indican hacia donde se orientan los dipolos en presencia del campo.

- Polarización de distorsión. La aplicación de campos eléctricos sobre medios materiales puede producir la modificación de distribuciones de carga generando la aparición de dipolos eléctricos. Dependiendo de la forma en que son inducidos los dipolos se distinguen dos tipos de polarizaciones:
*Polarización electrónica. Se puede decir que el dipolo es inducido a nivel atómico debido a un desplazamiento relativo entre el centro de cargas de la corteza electrónica y el núcleo atómico

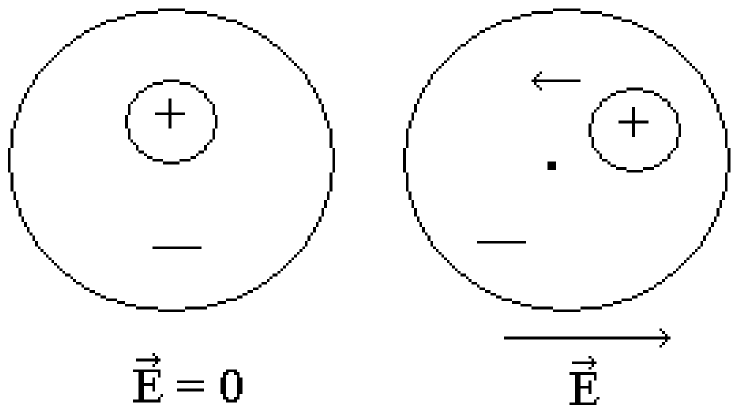


Fig. 2.3 Esquema de polarización electrónica

*Polarización iónica. Los dipolos son inducidos a nivel cristalino debido a un desplazamiento relativo entre iones positivos y negativos.

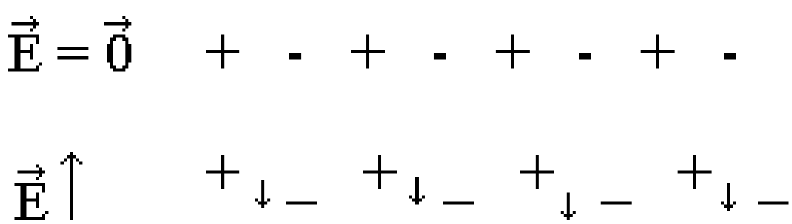


Fig. 2.4 Aparición de momento dipolar eléctrico por desplazamiento relativo de las capas iónicas

Desde el punto de vista macroscópico, estos mecanismos de polarización pueden aparecer simultáneamente y por ende su estudio puede ser complicado. Por esto, presento a continuación, unas breves palabras sobre dieléctricos conectándolo con el tema de polarización.

## 2.2 Dieléctricos

Puede entenderse por dieléctrico a toda aquella materia no conductora que cuenta con una constante $K$ llamada constante dieléctrica[23] o, en otras palabras, es un material que no contiene cargas libres[28]. La constante $K$ es una cantidad adimensional definida ya sea por la permitividad $\varepsilon$ o por la susceptibilidad $\chi$[28].

Cuando un capacitor contiene entre sus placas una substancia dieléctrica y se le aplica un campo eléctrico, las placas del capacitor tendrán una carga mayor que si no hubiera dicha substancia. La razón de este hecho es debido a que el material dieléctrico polarizado reorienta sus dipolos existentes dejando en la superficie de si mismo, tanto superior como inferior, una densidad superficial de carga que no es compensada con los dipolos internos sino con las cargas existentes, de signo contrario a las del dieléctrico, en las placas del capacitor por causa del campo eléctrico externo aplicado; de esta manera obtendremos el equilibrio entre las cargas. Si la constante dieléctrica es igual a 1 entonces la carga de las placas y la carga originada por el material son iguales, pero si es mayor que 1 entonces tendremos una carga mayor que la inicial.

## 2.3 Vector de polarización[30,31,32]

El vector de polarización es el que nos permite describir todos los momentos dipolares existentes en el material, como ya se mencionó anteriormente. Otra forma matemática de representarlo es la siguiente:

$$\vec{P} = \frac{d\vec{p}}{dV} \qquad 2.3$$

Aquí $dV$ debe ser lo suficientemente pequeño para ser considerado como infinitesimal pero lo suficientemente grande como para poder contener un número elevado de dipolos que nos permita hacer esta expresión macroscópica.

Ahora bien, dado que el interés del trabajo es presentar una técnica de caracterización eléctrica de materiales estimulada térmicamente, misma que tiene un comportamiento de cinética de primer orden, llamada ITC, el vector de polarización lo abordaremos desde el concepto de polarización por orientación. Cuando este tipo de polarización está presente vamos observar un proceso de relajación, esto es, los dipolos permanentes asociados a moléculas, relajan a una posición de equilibrio. Esta relajación se produce a una dada por un determinado tiempo de relajación $\tau$ que estará directamente relacionado con el tiempo característico de las rotaciones moleculares posibles dentro de un material. Este tiempo corresponde normalmente a frecuencias.

## 2.4 Polarización en la teoría de Bucci y Fieschi

La dependencia del tiempo y la temperatura de la polarización dipolar se determinan por la competencia entre la acción orientadora del campo y la acción al azar de los movimientos térmicos. Para tratar este problema, Debye propuso que el comportamiento de los dipolos bajo la acción de un campo es el típico comportamiento asintótico de los fenómenos transitorios. Por tanto, la polarización por orientación vendrá dada por la expresión:

$$P(t) = P_e\left[1 - \exp\left(-\frac{t}{\tau}\right)\right] \qquad 2.4$$

donde $\tau$ es el tiempo de relajación dipolar y $P_e$ es la polarización de equilibrio. Esta polarización tiene una forma matemática sencilla que obtendremos a partir del siguiente desarrollo.

La polarización de equilibrio esta dada por la siguiente expresión

$$P_e = \frac{N\mu}{V} \qquad 2.5$$

donde N es el número de dipolos, $\mu$ es el momento dipolar y V es el volumen. Ahora bien, el momento dipolar promedio es

$$\langle \mu \rangle = \mu_0 \langle Cos\theta \rangle$$

Aquí $\mu_0$ es el momento dipolar molecular y $\langle Cos\theta \rangle$ el valor medio del ángulo de todos los dipolos existentes en el material. Este último valor promedio, el del ángulo, es el promedio de la distribución de Boltzmann que se expresa de la siguiente manera

$$\langle Cos\theta \rangle = \frac{\int_0^\pi Cos\theta \exp\left(\frac{\mu_0 E Cos\theta}{\kappa T}\right) Sen\theta d\theta}{\int_0^\pi \exp\left(\frac{\mu_0 E Cos\theta}{\kappa T}\right) Sen\theta d\theta}$$

Haciendo un cambio de variable de la forma

$$u = \frac{\mu_0 E}{\kappa T} \quad \text{y} \quad x = Cos\theta$$

tendremos que

$$\langle Cos\theta \rangle = \frac{\int_{-1}^{1} x \exp(ux) dx}{\int_{-1}^{1} \exp(ux) dx}$$

Resolvamos ahora las integrales. Primeramente la del numerador

$$\int_{-1}^{1} x \exp(ux) dx$$

Integrando por partes haciendo el siguiente cambio de variable:

$$l = x \qquad dv = e^{ux}dx$$

$$dl = dx \qquad v = \frac{1}{u}e^{ux}$$

$$\int_{-1}^{1} x\exp(ux)dx = \left[\frac{x}{u}e^{ux}\right]_{-1}^{1} - \frac{1}{u}\int_{-1}^{1} e^{ux}dx$$

$$= \left[\frac{x}{u}e^{ux}\right]_{-1}^{1} - \frac{1}{u}\left[\frac{1}{u}e^{ux}\right]_{-1}^{1}$$

$$= \frac{1}{u}e^{u} + \frac{1}{u}e^{-u} - \frac{1}{u^2}e^{u} + \frac{1}{u^2}e^{-u}$$

$$= \left(\frac{1}{u} - \frac{1}{u^2}\right)e^{u} + \left(\frac{1}{u} + \frac{1}{u^2}\right)e^{-u}$$

Haciendo uso de la propiedad siguiente

$$e^{u} = Cosh(u) + Senh(u) \quad ; \quad e^{-u} = Cosh(u) - Senh(u)$$

Tendremos que

$$\int_{-1}^{1} x\exp(ux)dx = \left(\frac{1}{u} - \frac{1}{u^2}\right)(Cosh(u) + Senh(u)) + \left(\frac{1}{u} + \frac{1}{u^2}\right)(Cosh(u) - Senh(u))$$

$$= \frac{Cosh(u)}{u} - \frac{Cosh(u)}{u^2} + \frac{Senh(u)}{u} - \frac{Senh(u)}{u^2} + \frac{Cosh(u)}{u} - \frac{Cosh(u)}{u^2} - \frac{Senh(u)}{u} + \frac{Senh(u)}{u^2}$$

$$= \frac{2Cosh(u)}{u} - \frac{2Cosh(u)}{u^2} = \frac{2Cosh(u)}{u}\left(1 - \frac{1}{u}\right)$$

Ahora resolvamos la del denominador

$$\int_{-1}^{1} \exp(ux)dx = \left[\frac{1}{u}e^{ux}\right]_{-1}^{1} = \frac{1}{u}\left[e^{u} - e^{-u}\right]$$

$$= \frac{1}{u}\left(Cosh(u) + Senh(u) - Cosh(u) + Senh(u)\right) = \frac{2}{u}Senh(u)$$

Dividiendo estos dos resultados tenemos finalmente que

$$\langle Cos\theta \rangle = Coth(u) - \frac{1}{u}$$

Sustituyendo en $P_e$ esta solución tendremos que

$$P_e = \frac{N}{V}\left(Coth(u) - \frac{1}{u}\right)$$

Ahora bien, sustituyendo el valor de $u = \frac{\mu_0 E}{\kappa T}$ y haciendo un desarrollo de Taylor de la función $Coth\left(\frac{\mu_0 E}{\kappa T}\right)$ tendremos finalmente que

$$P_e = \frac{N\mu_0^2 E}{3V\kappa T} \qquad 2.6$$

Que es la expresión sencilla que habíamos predicho.