ANÁLISE DA CONSTANTE DIELÉTRICA ATRAVÉS DO MODELO HARMÔNICO
XII INIC / VIII EPG - UNIVAP 2008

Maira Gaspar Tosato[1]; Ivan F. Lupiano Dias[2], Airton A. Martin[3]

[1]Universidade do Vale do Paraíba/ Mestranda em Engenharia Biomédica, Av. Shishima Hifumi, 2911 – Urbanova - São José dos Campos - SP, e-mail: mgtosato@univap.br
[2]Universidade Estadual de Londrina/ Departamento de Física, Rodovia Celso Garcia Cid Pr 445 Km 380 - Campus Universitário - Londrina – PR, e-mail: idias@uel.br
[3]Universidade do Vale do Paraíba/ Instituto de Pesquisa e Desenvolvimento, Av. Shishima Hifumi, 2911 – Urbanova - São José dos Campos - SP, e-mail: amartin@univap.br

Resumo- Os materiais dielétricos apresentam a propriedade de se polarizarem sob a ação de um campo elétrico externo. O grau de polarização depende do campo elétrico aplicado e das propriedades do material. O comportamento dielétrico de um material pode ser especificado por um coeficiente adimensional denominado constante dielétrica relativa. Um modelo de oscilador harmônico é usado para explicar o comportamento desta constante. Neste trabalho desenvolveu-se um estudo do modelo do oscilador harmônico forçado e amortecido para discutir a resposta do material à ação da radiação eletromagnética. Os resultados indicaram que algumas características das propriedades microscópicas dos materiais são ilustradas pelo modelo simples do oscilador harmônico.

Palavras-chave: Oscilador Harmônico, Constante dielétrica, Polarização
Área do Conhecimento: Ciências Exatas e da Terra

Introdução

Sabe-se que a matéria é constituída de átomos e moléculas e estas são compostas de partículas carregadas. Átomos e moléculas, sob determinadas condições, podem se agrupar formando cristais com diferentes propriedades elétricas e ópticas. Estes cristais com relação às suas propriedades elétricas podem ser classificados em condutores e não condutores. Os materiais não condutores são também denominados dielétricos (HALLIDAY; RESNICK; WALKERS, 1993). Neste trabalho estuda-se o comportamento dos materiais dielétricos e semicondutores de importante emprego na indústria optoeletrônica. Dois importantes parâmetros físicos destes materiais são a constante dielétrica e a permeabilidade magnética. A constante dielétrica determina como uma substância interage com um campo elétrico e a permeabilidade determina como ela interage com um campo magnético. Uma vez que radiação eletromagnética contém tanto um campo elétrico quanto um campo magnético, a constante dielétrica e a permeabilidade entre esses campos, determina como o material interage com a luz. A constante dielétrica é definida como o quociente entre a permissividade elétrica de um meio e a do vácuo.

A permissividade elétrica é determinada pela capacidade de um material polarizar-se em resposta a um campo elétrico aplicado.

A constante dielétrica depende da distribuição de cargas no material e inicialmente desenvolve-se as polarizações iônica e eletrônica. O objetivo deste trabalho é desenvolver um estudo do modelo do oscilador harmônico amortecido para explicar as propriedades da constante dielétrica, sob a ação de um campo elétrico.

Metodologia

O estudo da polarização eletrônica e iônica se fez necessário uma vez que, aplicando-se um campo elétrico em um dielétrico, ocorre indução de dipolos elétricos no material e/ou o alinhamento dos dipolos já presentes no material. Na figura 1 considerou-se um átomo idealizado de raio R sob a ação de um campo elétrico variável **E**. A força que atua nas cargas (**-q** e **+q**) do átomo, empregando-se a Lei de Coulomb, é dada por (BERCKELEY, 1973):

$$F_2 = \left(\frac{(Ze)^2}{4\pi\varepsilon_0 R^3} \right) r \qquad (1)$$

onde a carga q=*Z*e, sendo *Z* o número atômico, e o valor da carga do elétron igual a $1,6.10^{-19}$ C e ε_0 a constante elétrica dada por $8,85.10^{-12}\ C^2\ N^{-1}\ m^{-2}$.

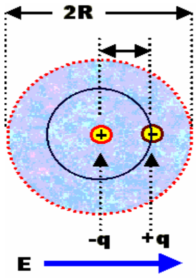


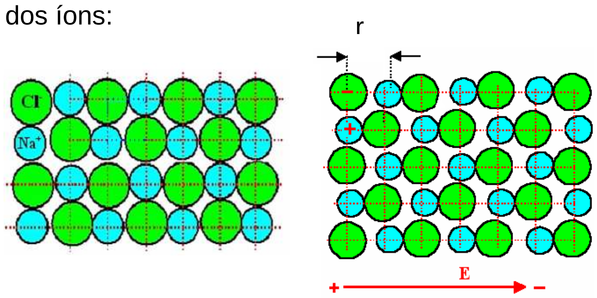
Figura 1: Átomo neutro com os centros de cargas deslocados

A equação (1) pode ser comparada à força elástica de um oscilador harmônico dado por (SYMON, 1986):

$$F_3 = Kr \qquad (2)$$

onde *K* e *r* são, respectivamente, a constante elástica e o deslocamento da mola.

Para materiais com caráter iônico, os momentos de dipolo são gerados por um deslocamento dos íons a partir de sua posição inicial. Considera-se um cristal iônico, como por exemplo, o cloreto de sódio (NaCl). A rede cristalina sofrerá uma pequena distorção com a aplicação de um campo elétrico, devido os íons serem atraídos em direções opostas. A seguir, a figura 2 apresenta um esquema do deslocamento dos íons:



(a) (b)

Figura 2: (a) Arranjo de um cristal iônico sem aplicação do campo elétrico; (b) Distorção da rede cristalina após a aplicação de um campo elétrico.

A distância de equilíbrio neste caso é dada em função da constante elástica da mola, *K*, permitindo usar o modelo do oscilador harmônico.

$$r = \frac{qE}{K} \qquad (3)$$

Considerando-se um material real onde existe força de atrito, a incidência de uma radiação eletromagnética com campo elétrico $E = E_0 e^{-i\omega t}$, encontra-se a equação do movimento dada por:

$$m\frac{d^2 r}{dt^2} + b\frac{dr}{dt} + Kr = qE_0 e^{-i\omega t} \qquad (4)$$

onde *m* é a massa da partícula, ω é a freqüência de oscilação do sistema e b=γ*m* sendo γ o coeficiente de amortecimento. A solução geral da equação (4) é dada pela relação (SYMON,1986):

$$r(t) = r_0 e^{-i\omega t} \qquad (5)$$

Usando-se o modelo do oscilador harmônico simples, pode-se determinar a frequência natural do sistema, $\omega_0 = (k/m)^{1/2}$, e considerando γ =b/m encontra-se a seguinte relação:

$$r_0(\omega) = \frac{qE_0}{m[(\omega_0^2 - \omega^2) - i\gamma\omega]} \qquad (6)$$

Multiplicando-se a equação (6) pelo seu complexo conjugado e separando as partes real e imaginária obteve-se:

$$r_0(\omega) = \frac{qE_0}{m}\left[\frac{\omega_0^2 - \omega^2}{(\omega_0^2 - \omega^2)^2 + (\gamma\ \omega)^2} + i\frac{\gamma\ \omega}{(\omega_0^2 - \omega^2)^2 + (\gamma\ \omega)^2}\right] \qquad (7)$$

A polarização de um material pode ser dada em função da amplitude (r(ω)) e do momento de dipolo (p(r(ω))). Se existirem N moléculas por unidade de volume do dielétrico, e cada uma possui um momento de dipolo qr, substitui-se a equação (6) em função do momento de dipolo e chega-se a:

$$p = \frac{q^2 E_o}{m}\frac{1}{[(\omega_o^2 - \omega^2) - i\gamma\omega]} \qquad (8)$$

Se o momento de dipolo for substituído na equação da polarização encontra-se:

$$\mathbf{P} = N\frac{q^2 E_o}{m}\frac{1}{(\omega_o^2 - \omega^2 - i\gamma\omega)} \qquad (9)$$

A polarização também pode ser escrita por uma relação constitutiva:

$$P = \chi\ \varepsilon_o E \qquad (9.1)$$

onde χ é a susceptibilidade elétrica e pode ser encontrada comparando-se as equações (9) e (9.1) onde determina-se a freqüência de plasma (FRENCH, 1971):

$$\omega_p^2 = \frac{Nq^2}{m\varepsilon_o} \qquad (9.2)$$

Através da susceptibilidade elétrica e da polarização, determina-se a equação para a função dielétrica visto que ela é escrita como:

$$\varepsilon = 1+\chi \tag{10}$$

Substituindo-se o valor de χ na equação (10), multiplicando-a pelo seu complexo conjugado e separando as partes real e imaginária determina-se a função dielétrica:

$$\varepsilon(\omega)=1+\frac{\omega_p^2\left(\omega_o^2-\omega^2\right)}{\left[\left(\omega_o^2-\omega^2\right)^2+(\gamma\omega)^2\right]}+i\frac{\omega_p^2\gamma\omega}{\left[\left(\omega_o^2-\omega^2\right)^2+(\gamma\omega)^2\right]} \tag{10.1}$$

Para as análises da função dielétrica, dada pela relação (10.1), pode-se usar o modelo do oscilador harmônico forçado com amortecimento uma vez que

Resultados

Considerando inicialmente a relação (5) onde a amplitude r_0 é uma função complexa, há uma diferença de fase, dada pelo ângulo θ, entre r_0 e o campo elétrico (E) fazendo-se uma análise matemática onde $e^{i\theta} = \cos\theta + i\,\mathrm{sen}\,\theta = e^{-i(\omega t)}$. Chega-se às equações:

$$|r_0| = \frac{qE_0}{m}\frac{1}{\left[\left(\omega_0^2-\omega^2\right)^2+(\gamma\,\omega)^2\right]^{\frac{1}{2}}} \tag{11}$$

e

$$\theta = \mathrm{arctg}\,\frac{\gamma\omega}{\omega_0^2-\omega^2} \tag{12}$$

Derivando-se as relações (11) e (12), obtiveram-se os gráficos para a amplitude e para a fase representados nas figuras 3 e 4:

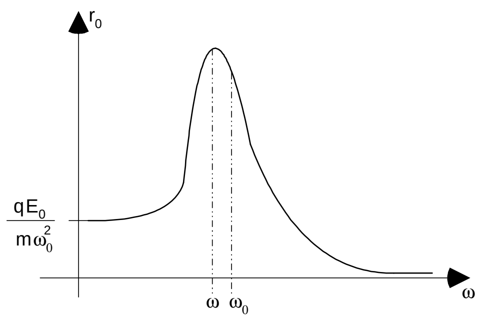


Figura 3: Curva de ressonância para amplitude r_0.

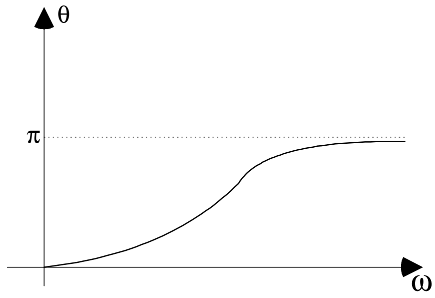


Figura 4: Curva de ressonância para a fase θ.

O oscilador harmônico amortecido é caracterizado por dois parâmetros: a constante ω_0 (freqüência natural) e γ (coeficiente de amortecimento). Alguns textos estabelecem uma relação entre estes parâmetros de acordo com (FRENCH, 1971):

$$Q = \frac{\omega_0}{\gamma} \tag{13}$$

onde Q é um número puro denominado fator de qualidade. Substituindo nas relações (11) e (12) o coeficiente de amortecimento por $\gamma = \omega_0/Q$ obtém-se:

$$r_0(\omega)=\frac{qE_0}{m}\frac{1}{\left[\left(\omega_0^2-\omega^2\right)^2+\left(\frac{\omega\omega_0}{Q}\right)^2\right]^{1/2}} \tag{14}$$

$$\theta(\omega)=\mathrm{arctg}\frac{\omega\omega_0}{Q\left(\omega_0^2-\omega^2\right)} \tag{14.1}$$

Considerando alguns valores numéricos para Q, obtiveram-se as curvas visualizadas na figura 5 e 6: (FRENCH, 1971):

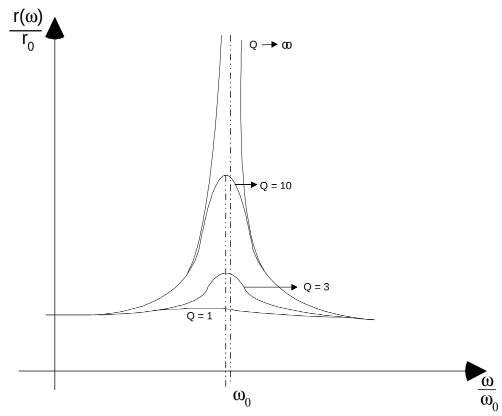


Figura 5: Razão da amplitude em função da freqüência para diferentes valores de Q, supondo a força de magnitude constante, mas freqüência variável.

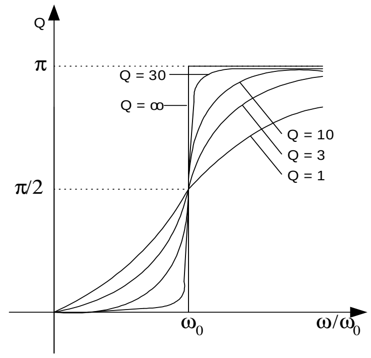


Figura 6: Fator de qualidade em função da freqüência, supondo a força de magnitude constante, mas freqüência variável.

Analisando-se a equação (7) onde as partes, real e imaginária são:

$$\operatorname{Re} r_0(\omega)=\frac{qE_0}{m}\left[\frac{\omega_0^2-\omega^2}{\left(\omega_0^2-\omega^2\right)^2+(\gamma\omega)^2}\right] \qquad (15)$$

$$\operatorname{Im} r_0(\omega)=\frac{qE_0}{m}\left[\frac{\gamma\omega}{\left(\omega_0^2-\omega^2\right)^2+(\gamma\omega)^2}\right] \qquad (16)$$

Avaliando-se as equações (15) e (16), obtiveram-se os gráficos e os sobrepôs conforme a figura 6:

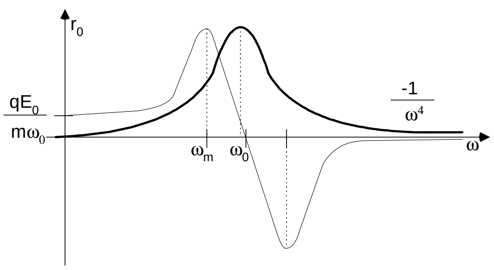


Figura 7: A curva com contorno grosso representa a parte imaginária da amplitude em função da freqüência e a curva com contorno fino representa a parte real da amplitude em função da freqüência.

Para a equação (10.1), fez-se a derivada e obtiveram-se dois gráficos de acordo com as figuras 8 e 9:

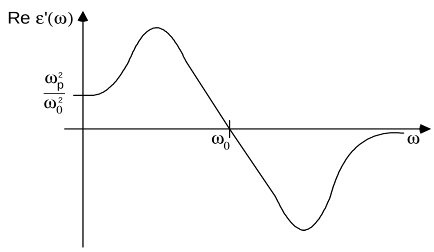


Figura 8: Curva da parte real da função dielétrica

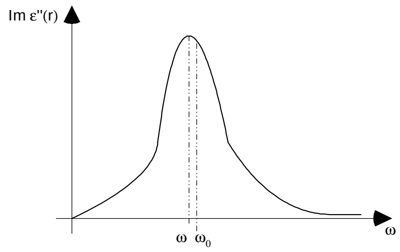


Figura 9: Curva da parte imaginária da função dielétrica

A constante dielétrica complexa $\varepsilon_r=\varepsilon_r'+i\varepsilon_r''$ está acoplada, através de algumas soluções, ao índice de refração complexo (BOHREN, 1983):

$$N=n+i\kappa(\omega) \qquad (17)$$

Discussão

Os átomos e moléculas que compõe os materiais, independentemente do estado físico em que se encontram, estão em constante vibração. Para aplicar-se o modelo do oscilador harmônico, considera-se uma molécula diatômica. Naturalmente a molécula apresenta uma freqüência de vibração ω_0. Quando se considera a radiação incidindo no material, a freqüência de oscilação da molécula muda em conseqüência a amplitude do movimento se altera. A curva da figura 3 obtida para a expressão da amplitude máxima ($r_0(\omega)$) chega a um máximo num ponto pouco menor do que a freqüência natural do sistema, ω_0, e começa a decrescer novamente. Isto ocorre devido ao amortecimento que o sistema apresenta, ou seja, o movimento de uma partícula real, por exemplo, após sofrer um impulso inicial, como o campo elétrico aplicado, chega a uma amplitude máxima e então começa a diminuir devido ao atrito com outros átomos e moléculas do meio. A figura 4 que é a curva para a fase $\theta(\omega)$, aumenta continuamente da origem até 180^0 a qual passa a tender ao infinito. Exatamente em 90^0 a freqüência angular é igual à freqüência natural do sistema, ω_0.

Analisando-se as equações (14) e (14.1) observa-se que para $\gamma \to\infty$, o fator qualidade tenderá a zero. Neste caso o amortecimento é tão grande que o movimento é quase nulo e assim pode-se comparar ao modelo de oscilador harmônico sem amortecimento. Para um sistema sem amortecimento (γ = 0) o fator qualidade na equação (13) tenderá ao infinito ($Q \to \infty$). Substituindo-se este valor de Q na equação (14.1) verifica-se que $tg\theta = 0$ então $\theta = 90º$.

Na figura 7 pode-se observar que a curva $Rer_0(\omega)$ tem um ponto máximo para um valor menor do que ω_0 e um ponto mínimo para um valor maior do que ω_0. Entre um máximo e o mínimo a função decresce com o aumento da freqüência e esta região é chamada de dispersão anômala. A curva da parte imaginária $Imr_0(\omega)$ apresenta um ponto máximo para um valor menor do que a freqüência natural.

Para a análise das figuras 8 e 9, o tratamento das propriedades ópticas dos materiais considerando-os compostos por um conjunto de osciladores harmônicos em diferentes freqüências, fornece resultados bastante próximos da realidade.

Os índices de refração n e de absorção k de um material, que juntos são chamados de constantes ópticas, são os parâmetros que determinam a interação entre a luz e o material numa interface descontínua. A relação entre a constante dielétrica e os índices de refração (n) e absorção (k) do material é diretamente proporcional.

Compreendendo, portanto, o comportamento dos osciladores harmônicos, pode-se descrever bem sobre as propriedades ópticas dos materiais, como a reflexão e a transmissão da luz.

Conclusão

Neste trabalho verificou-se que o estudo da constante dielétrica pode ser elaborado através de uma analogia com o oscilador harmônico forçado amortecido. Isto mostra que algumas características das propriedades microscópicas dos materiais são ilustradas pelo modelo simples do oscilador harmônico.

Para trabalhos futuros propõe-se o estudo detalhado de diferentes tipos de vibrações dos átomos.

Referências

-BERCKELEY, C. F. **Eletricidade e Magnetismo**, São Paulo: Ed. Edgard Blücher Ltda, 1973.

-BOHREN, C. F.; HUFFMAN, D. R. **Absorption and Scattering of Light by Small Particles**. EUA: John Wiley &Sons, 1983.

-FRENCH, A. P. **Vibrations and Waves**, New York: Ed. John Wiley, 1971.

-HALLIDAY;RESNICK; WALKERS. **Fundamentos de Física – Eletromagnetismo**. V.3, 4. ed. São Paulo: Ed. Mc Graw-Hill, 1993.

-SYMON,K.R. **Mecânica**. 2. ed. Rio de Janeiro: Ed. Campos, 1986.