

MODELAGEM TERMODINÂMICA DA POLARIZAÇÃO ELÉTROSTÁTICA¹

Lucas Martinho Bicalho Belo², Luizdarcy de Matos Castro³

RESUMO

Quando incidido um campo elétrico externo em um meio material, as moléculas tendem a se alinhar com o campo. As apolares se polarizam formando dipolos induzidos, enquanto as polares possuem um dipolo na sua própria estrutura. No entanto, as energias de movimento se contrapõem a este alinhamento, e são medidas macroscopicamente na forma de temperatura. Portanto, o objetivo deste trabalho é obter modelos matemáticos da energia termodinâmica para molécula polar e apolar, fazendo comparação das suas propriedades em meio um campo elétrico externo. As energias obtidas mostraram que a molécula apolar apresenta susceptibilidade elétrica independente da temperatura, ao contrário da polar. Em temperaturas baixas, a vibração da molécula aparece mais evidente na sua energia.

PALAVRA-CHAVE: Mecânica Estatística, Molécula Apolar, Molécula Polar, Termodinâmica.

THERMODYNAMICS MODELING OF ELETROSTATICS POLARIZATION

ABSTRACT

When placed an extern electric field in a material, the molecules tend to align with field direction. In this case, the nonpolar molecules form an induced dipole, while polar molecules have a dipole in your structure. However, the kinetic energy opposes this alignment. These energies are mensurate in form of temperature. Therefore, the goal of this paper is getting a mathematical model of thermodynamical energy with respect a polar molecules and unipolar molecules and comparing your proprieties on extern electric field. The obtained energy showed a constant electric susceptibility in unipolar molecule, differently of polar molecule. In low temperatures, the molecular vibration appears in more evidence.

Keywords: Nonpolar Molecule, Polar Molecule, Statistical Mechanics, Thermodynamics.

INTRODUÇÃO

A polaridade da carga elétrica é uma propriedade da natureza na qual compartilha potenciais atrativos ou repulsivos, em caso de oposição ou semelhança, respectivamente (Machado, 2000, p. 124-125). Um campo elétrico incidido em uma molécula ou sistemas de moléculas eletricamente neutras, com suas cargas distribuídas uniformemente (molécula apolar), tende a polarizar-se. Deste modo, a carga negativa é atraída pelo campo e a positiva repelida, criando um dipolo molecular induzido. Pelo contrário, algumas moléculas possuem um dipolo na sua própria estrutura, um dipolo

¹ Instituição financiadora: IC-UESB.

² Licenciando em Física, Universidade Estadual do Sudoeste da Bahia.

³ Professor Titular, Departamento de Ciências Exatas e Tecnológicas, Universidade Estadual do Sudoeste da Bahia.

intrínseco – a molécula dipolar, que também vai tender a se alinhar com campo elétrico (ib., p. 642-732). Nestes casos há ausência de elétrons de condução na banda de valência, que caracteriza um material isolante – ou dielétrico (ib., p. 125-130). O *momentum* dipolar é a grandeza que mede estes afastamentos.

A energia potencial eletrostática do campo elétrico incidido externamente se contrapõem às energias cinéticas da molécula. Macroscopicamente, essas energias de movimento têm contribuição direta na temperatura do sistema (Salinas, 2002, p.143-144). Dessa forma, pergunta-se: qual a relação entre a temperatura e a efetividade da ação do campo elétrico na polarização molecular? Neste sentido, quais as diferenças e semelhanças entre a molécula polar e apolar? Considerando que a energia interna possui todas as informações termodinâmicas de um sistema (Fließbach, 2000, p.192-198), o objetivo do presente trabalho é obtê-las matematicamente a fim de responder tais perguntas.

MATERIAL E MÉTODOS

Para o caso de N moléculas com *momentum* dipolar $\vec{\mu}$, sob ação de um campo elétrico externo \vec{e} , elas se encontram em posições generalizadas $q = (q_1, \dots, q_f)$ com os *momenta* relacionados $p = (p_1, \dots, p_f)$. Considera-se um sistema com temperatura T fixa aberto para a troca de energia com o seu exterior. Para analisa-lo, segue os seguintes passos:

- 1) *Especificação dos estados microscópicos* através do hamiltoniano $H = H(p, q, N, \mu, \epsilon,)$ da molécula;
- 2) *Utilização da teoria das probabilidades* para obter a função canônica de partição

$$\begin{aligned}
 & Z(T, N, \mu, \epsilon) \\
 &= \frac{1}{N! h^f} \prod_{i=1}^N \iint dq_i dp_i \exp \left\{ -\frac{1}{k_b T} H(p, q, N, \mu, \epsilon,) \right\};
 \end{aligned}
 \tag{1}$$

- 3) *Conexão com a termodinâmica* através do valor médio do hamiltoniano em termos da função de partição, que dá a energia termodinâmica

$$E(T, N, \mu, \epsilon) = -\frac{\partial}{\partial \beta} \ln Z(T, N, \mu, \epsilon).
 \tag{2}$$

RESULTADOS E DISCUSSÃO

O hamiltoniano é construído através das características da molécula, que dá a energia do estado microscópico. Consideramos dois casos: 1) Molécula polar, onde o momento dipolar μ é rígido assumindo graus de liberdade de rotação e translação. 2) Molécula apolar, com momento dipolar que varia com a distância intramolecular r_i , adicionado o grau de liberdade para vibração, translação e rotação.

1) Molécula polar:

$$E = \frac{5N}{2} k_b T - N \mu \epsilon \operatorname{cotgh} \left(\frac{\mu \epsilon}{k_b T} \right). \quad (3)$$

2) Molécula apolar:

$$E = 3N k_b T - N \frac{q^2 \epsilon^2}{2m\omega^2}. \quad (4)$$

Como esperado, os graus de liberdade influenciam na contribuição com a energia na forma $\frac{1}{2} k_b T$, com aposição de um termo de energia proporcional ao campo elétrico. Este termo é mais acentuado em (4), independentemente da temperatura. As moléculas polares são menos susceptíveis ao campo em temperaturas significativamente altas apesar do seu maior grau de liberdade. No entanto, a expressão (4) da apolar se encontra com uma inconsistência com as leis da física, apresentando um calor específico não variável, refutado via experimentação. Um tratamento quântico do hamiltoniano de molécula apolar levou a (5), que em uma aproximação para altas temperaturas via série de Taylor resulta em (4) como um caso particular. A energia de oscilação $\hbar\omega$ são mais significativas, porém fraca em temperaturas mais altas em relação a ela. Isso representa os casos na temperatura ambiente.

$$E = \frac{3\hbar\omega}{e^{\frac{\hbar\omega}{k_b T}} - 1} + \frac{1}{2} \hbar\omega - \frac{q^2 \epsilon^2}{2m\omega^2} \quad (5)$$

Vale ressaltar que não foi considerado a interação entre os átomos. A tentativa levou a uma não determinação da função de partição, o que é fisicamente inconsistente, já que a mesma deve garantir a existência de um estado termodinâmico.

CONCLUSÃO

Conclui-se que a molécula polar possui susceptibilidade elétrica variável com a temperatura, ao contrário da apolar. Em temperaturas suficientemente baixas, energia de vibração da molécula apolar fica mais evidente. Fica como trabalhos futuros a modelagem com interação molecular e comparações dos resultados obtidos com experimentos e simulações.

REFERÊNCIAS

1. COHEN-TANNOUJDI, C.; DIU, B.; FRANCK, L. **Quantum Mechanics**. Vol. 1, Paris: Herman and John Wiley & Sons. Inc., 1977.
2. FLIESSBACH, T., **Curso de Física Estatística**. 3ª ed., Fundação Calouste Gulbenkian, Lisboa, 2000.
3. MACHADO, Kleber D. **Teoria do Eletromagnetismo. Volume 1**. Editora UEPG. 2000. Ponta Grossa – PR
4. REICHL, L. E. **A Modern Course in Statistical Physics**. 2nd ed., John Wiley and Sons Inc., 1998.
5. SALINAS, S. R. **Introdução à Física Estatística**, EDUSP, São Paulo, 2002.
6. TSALIS, C., Possible Generalization of Boltzmann-Gibbs Statistics. **Journal of Statistical Physics**, vol. 52, n. 1, 1988.

Lucas agradece a bolsa concedida pela IC-UESB e seu esforço para manter e ampliar tais bolsas em tempos de baixo investimento. Agradece ao orientador, por ser um grande professor que influenciou diretamente as suas concepções de educação, bem como sua presença significativa no desenvolvimento do aluno e da pesquisa científica.

