

Wdh

• Add. Theorem $P_l(\cos \vartheta) = \sum_{k=-l}^{+l} Y_{lk}(\vartheta, \varphi) Y_{lk}(\vartheta, \varphi) \cdot a_l$

↳ Kugelsche harmonischen Funktionen

$$\Phi(r, \vartheta, \varphi) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{k=-l}^{+l} \frac{4\pi}{2l+1} \frac{1}{r^{l+1}} Y_{lk}(\vartheta, \varphi) \int_{\mathcal{V}} Y_{lk}^*(\vartheta', \varphi') \rho(r') r'^l d^3r'$$

$$Y_{lk} = \int Y_{lk}^*(\vartheta', \varphi') \rho(r') (r')^l d^3r'$$

Multipolentwicklung (sphärisch)

- 1 Monopolmoment
- 3 Dipolmomente
- 5 Quadrupolmom.
- (2l+1) l-Polmomente

• kartesische Entw.

$$\Phi = \frac{Q}{r} + \frac{\mathbf{p} \cdot \mathbf{r}}{r^3} + \frac{1}{6} \sum_{i,j=1}^3 \frac{3x_i x_j - r^2 \delta_{ij}}{r^5} \cdot Q_{ij} + \dots$$

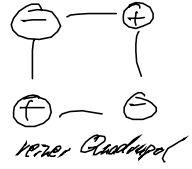
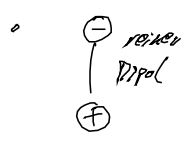
Moment Dipol $\mathbf{p} = \int \mathbf{r}' \rho(\mathbf{r}') d^3r'$

hängt ab von KS
hinlängl. Abstand zu Schwerpunkt von ρ

$$Q_{ij} = \int \rho(\mathbf{r}) [3x_i x_j - r^2 \delta_{ij}] d^3r$$

5 Komponenten

$$\sum_i Q_{ii} = 0$$



• Beispiel: WW-Energie von 2 Dipolen

$$W_{12} = \frac{p_1 p_2 - 3(\mathbf{u} \cdot p_1)(\mathbf{u} \cdot p_2)}{r^3}$$

→ kin. Energie

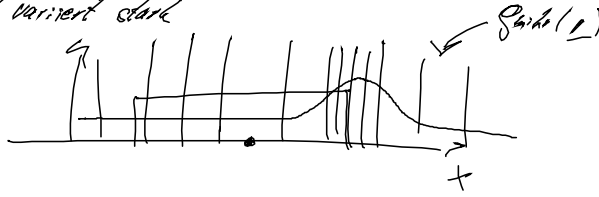
3 Dielektrika

Freier $\nabla \cdot \mathbf{E} = \frac{1}{\epsilon_0} \rho_f; \quad \nabla \times \mathbf{E} = 0$

Analyse: gibt nicht bekannt

Problem: + viele Elektronen sind fest gebunden, können sich aber ein wenig verschieben
 + mikroskop. Feld variiert stark

z.B. Ladung
 1D



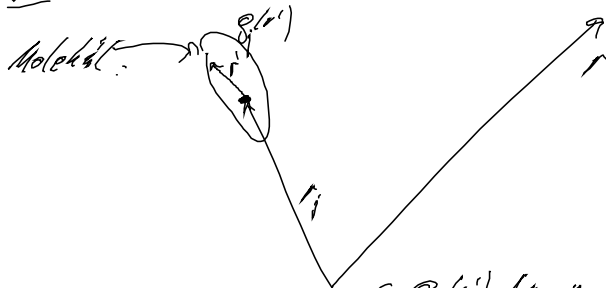
=> 3.1. Mittelungen

$$\rho_{\text{eff}}(r) = \frac{1}{\Delta V} \int_{\Delta V} \rho_{\text{eigentlich}}(r+r') d^3 r'$$

Wichtig $\Delta V \Rightarrow$ Volumenproblem $E_{\text{eff}}(r) = \frac{1}{\Delta V} \int_{\Delta V} E_{\text{eigentlich}}(r+r') d^3 r'$

Ziel: Ableitung effektiver Maxwell Gl. für die mikroskop. Felder & Potent.

Idee: naive Multipolentwicklung bis hin zum Dipol



erzeugt Feld
$$E_j(r) = \int_{\text{Mol}} \frac{\rho_j(r') (r - r_j - r')}{|r - r_j - r'|^3} d^3 r'$$

$$= -\nabla \int_{\text{Mol}} \frac{\rho_j(r')}{|r - r_j - r'|} d^3 r'$$

$$\overline{\Phi}(r) = \frac{q_j}{r} + \frac{p_j \cdot r}{r^3} + \dots \quad \overline{\Phi}(r)$$

Multipolterm $q_j = \int_{\text{Mol}} \rho_j(r') d^3 r'$

Dipolterm $p_j = \int_{\text{Mol}} r' \rho_j(r') d^3 r'$
 hängt nicht von r_j ab

$$\vec{E}_j(\underline{r}) = -\nabla \left[\frac{q_j}{|\underline{r}-\underline{r}_j|} + \underline{p}_j \cdot \nabla_j \frac{1}{|\underline{r}-\underline{r}_j|} \right]$$

$$\vec{E}_{\text{ext}}(\underline{r}) = \sum_j \vec{E}_j(\underline{r}) = -\nabla \int d^3r' \left[\frac{\rho_{\text{ext}}(\underline{r}')}{|\underline{r}-\underline{r}'|} + (\underline{P}_{\text{ext}}(\underline{r}') \cdot \nabla') \frac{1}{|\underline{r}-\underline{r}'|} \right]$$

$$\rho_{\text{ext}}(\underline{r}) = \sum_j q_j \delta(\underline{r}-\underline{r}_j)$$

$$\underline{P}_{\text{ext}}(\underline{r}) = \sum_j \underline{p}_j \delta(\underline{r}-\underline{r}_j)$$

$$E_{\text{ext}}(\underline{r}) = \langle \vec{E}_{\text{ext}} \rangle = \frac{1}{\Delta V} \int_{\Delta V} \vec{E}_{\text{ext}}(\underline{r}+\underline{r}') d^3r'$$

$$= \dots = \left[-\nabla \int d^3r' \left[\frac{\rho_{\text{ext}}(\underline{r}')}{|\underline{r}-\underline{r}'|} + (\underline{P}_{\text{ext}}(\underline{r}') \cdot \nabla') \frac{1}{|\underline{r}-\underline{r}'|} \right] \right] = E_{\text{ext}}(\underline{r})$$

$$\rho_{\text{ext}}(\underline{r}) = \frac{1}{\Delta V} \int_{\Delta V} \rho_{\text{ext}}(\underline{r}+\underline{r}') d^3r' = \frac{1}{\Delta V} \sum_j q_j \quad \text{enthält Ladungbeiträge}$$

$$\underline{P}_{\text{ext}}(\underline{r}) = \frac{1}{\Delta V} \int_{\Delta V} \underline{P}_{\text{ext}}(\underline{r}+\underline{r}') d^3r' = \frac{1}{\Delta V} \sum_j \underline{p}_j \quad \text{Dipolbeiträge}$$

3.2. Dielektrische Verschiebung

totale Divergenz

$$\begin{aligned} \nabla \cdot \vec{E}(\underline{r}) &= \int_{\Delta V} d^3r' \left[\rho_{\text{ext}}(\underline{r}') \Delta \frac{1}{|\underline{r}-\underline{r}'|} + (\underline{P}_{\text{ext}}(\underline{r}') \cdot \nabla') \Delta \frac{1}{|\underline{r}-\underline{r}'|} \right] \\ &= \int_{\Delta V} d^3r' \left[\rho_{\text{ext}}(\underline{r}') \cdot 4\pi \delta(\underline{r}-\underline{r}') - (\underline{P}_{\text{ext}}(\underline{r}') \cdot \nabla) \delta(\underline{r}-\underline{r}') \cdot 4\pi \right] \end{aligned}$$

$$\nabla \delta(\underline{r}-\underline{r}') = -\nabla' \delta(\underline{r}-\underline{r}')$$

$$\nabla \cdot E_{\text{ext}}(\underline{r}) = 4\pi \rho_{\text{ext}}(\underline{r}) - 4\pi \nabla \cdot \underline{P}_{\text{ext}}(\underline{r})$$

$$\nabla \cdot (E_{\text{ext}}(\underline{r}) + 4\pi \underline{P}_{\text{ext}}(\underline{r})) = 4\pi \rho_{\text{ext}}(\underline{r})$$

$$\boxed{\text{dielektr. Verschiebung}} \\ \underline{D}(\underline{r}) = E_{\text{ext}}(\underline{r}) + 4\pi \underline{P}_{\text{ext}}(\underline{r})$$

=>

$$\boxed{\nabla \cdot \underline{D} = 4\pi \rho}$$

enthält alle
Ladungsbeiträge

$$\boxed{\nabla \times E_{\text{ext}} = 0}$$

GG der ES
in dielektr.

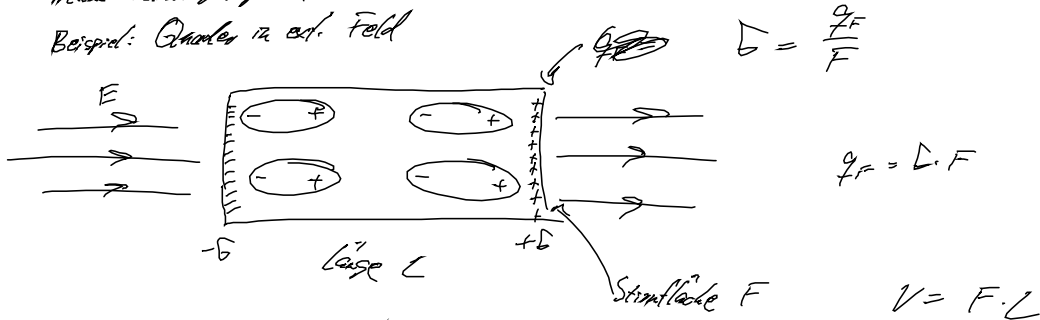
enthält Dipolbeiträge

3.3 Polarisation

≙ Dipoldichte

Welche Beziehungen gelten

Beispiel: Quader in ext. Feld



gesamte Polarisation $|P| \cdot V = Q_F \cdot L$

$$\Rightarrow |P| = \sigma$$

jetzt: allgemein

$$E_{\text{ext}}(r) = -\nabla \int d^3r' \left(\frac{\rho_{\text{ext}}(r')}{|r-r'|} + \frac{(\nabla' P_{\text{ext}}(r') \cdot \nabla')}{|r-r'|} \right) = -\nabla \Phi(r)$$

$$\nabla' \left(\frac{P(r')}{|r-r'|} \right) = \frac{1}{|r-r'|} (\nabla' P_{\text{ext}}(r')) + \frac{(\nabla' P_{\text{ext}}(r') \cdot \nabla')}{|r-r'|}$$

$$\Phi_P(r) = \int d^3r' \nabla' \left(\frac{P(r')}{|r-r'|} \right) - \int d^3r' \frac{(\nabla' P(r'))}{|r-r'|}$$

$$= \oint_{\partial V} \frac{P(r') \cdot \underline{n} \cdot dS'}{|r-r'|} + \int d^3r' \frac{(-\nabla' P(r'))}{|r-r'|}$$

$$\stackrel{!}{=} \oint_{\partial V} \frac{G_P(r') dS'}{|r-r'|} + \int d^3r' \frac{\rho_P(r')}{|r-r'|}$$

Weglässt
bleibt

$$G_P(r) = n \cdot P(r)$$

$$-\rho_P(r) = \nabla \cdot P(r)$$

gesamte Polarisation liefert verschwindet

$$\int d^3r' \rho_P(r') = -\int d^3r' \nabla \cdot P(r') = -\oint_{\partial V} P \cdot d\underline{S} = 0$$

haben $\underline{u} (\underline{E}_2 - \underline{E}_1) = 4\pi \underline{D}$

jetzt $\underline{u} (\underline{P}_2 - \underline{P}_1) = -\underline{D}$ Verhalten an Grenzflächen

empirisch beide werden besten verstanden \underline{P} in Abhängigkeit eines ext. Feldes

allg $\underline{P}_i = \sum_j a_{ij} \cdot \underline{E}_j + \sum_{j,k} b_{ijk} E_j E_k + \dots$

→ auch $\underline{P} = \chi_e \cdot \underline{E}$ $a_{ij} = \chi_e \cdot \delta_{ij}$
 elektr. Suszeptibilität + schwache Felder

$\underline{D} = \underline{E} + 4\pi \underline{P} = (1 + 4\pi \chi_e) \underline{E} = \epsilon \underline{E}$

$\epsilon = 1 + 4\pi \chi_e$ Dielektrizitätskonstante in Gauss

[in SI: $\underline{D}_{SI} = \epsilon_0 \underline{E}_{SI} + \underline{P}_{SI}$]

3.4. Elektrostatische Feldenergie

haben $W = \frac{1}{2} \int \rho(\underline{r}) \cdot \Phi(\underline{r}) d^3r$

jetzt: betrachte Änderung d. Energie bei Änderung von $\delta \rho$

$\delta W = \int \Phi(\underline{r}) \cdot \delta \rho(\underline{r}) d^3r$ aus Maxwell: $\delta \rho = \frac{1}{4\pi} \nabla \cdot (\delta \underline{D})$

$\Phi(\delta \rho) = \frac{1}{4\pi} \Phi(\nabla \cdot \delta \underline{D}) = \frac{1}{4\pi} \nabla \cdot (\Phi \delta \underline{D}) - \frac{1}{4\pi} (\nabla \Phi) \cdot \delta \underline{D}$

$\delta W = \frac{1}{4\pi} \int \nabla \cdot (\Phi \delta \underline{D}) d^3V + \frac{1}{4\pi} \int \underline{E} \cdot \delta \underline{D} d^3V$

$= \frac{1}{4\pi} \oint_{\partial V} (\Phi \cdot \delta \underline{D}) d\underline{F} + \frac{1}{4\pi} \int (\underline{E} \cdot \delta \underline{D}) d^3V$

verschwindet in Grenzfällen
 für $\Phi(\infty) = 0$ und $\underline{D}(\infty) \rightarrow 0$

$$\delta W = \frac{1}{4\pi} \int (\underline{E} \cdot \delta \underline{D}) d^3 \underline{r}$$

$$W = \frac{1}{4\pi} \int d^3 \underline{r} \int_0^{\underline{D}} \underline{E} \cdot \delta \underline{D}$$

$$\frac{1}{2} \delta (\underline{E} \cdot \underline{D}) = \underline{E} \cdot \delta \underline{D}$$

$$W = \frac{1}{8\pi} \int d^3 \underline{r} (\underline{E} \cdot \underline{D})$$

Energiedichte des Feldes in Materie

$$w = \frac{1}{8\pi} \underline{E} \cdot \underline{D}$$

nur für lineare, homogene, isotrope Medien

lineare, homogene, isotrope Medien,

$$\underline{D} = \epsilon \cdot \underline{E}$$