Wdh

• Add. Theorem $P_\ell(\cos\gamma) = \sum_{m=-\ell}^{+\ell} Y^*_{\ell m}(\vartheta',\varphi')\, Y_{\ell m}(\vartheta,\varphi)\cdot a_\ell$

$\hookrightarrow$ sphärische Multipolentwicklung

$$\Phi(r,\vartheta,\varphi) = \sum_{\ell=0}^{\infty}\sum_{m=-\ell}^{+\ell} \frac{4\pi}{2\ell+1}\,\frac{1}{r^{\ell+1}}\, Y_{\ell m}(\vartheta,\varphi)\; q_{\ell m}$$

Multipolmomente (sphärisch)

$$q_{\ell m} = \int Y^*_{\ell m}(\vartheta',\varphi')\,\rho(\underline{r}')\,(r')^\ell\, d^3r'$$

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

• kartesische Entw.

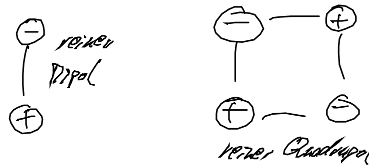
$$\Phi = \frac{q}{r} + \frac{\underline{p}\cdot\underline{r}}{r^3} + \frac{1}{6}\sum_{i,j=1}^{3}\frac{3x_ix_j - r^2\delta_{ij}}{r^5}\cdot Q_{ij} + \dots$$

Monopol Dipol $\underline{p} = \int \underline{r}'\,\rho(\underline{r}')\,d^3r'$ hängt ab von KS
häufig: Ursprung in Schwerpunkt von ρ

$$Q_{ij} = \int \rho(r)\left[3x_ix_j - r^2\delta_{ij}\right]d^3r$$

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

•



• Beispiel: WW-Energie von 2 Dipolen

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

p p $\rightarrow$ min. Energie

3. Dielektrika

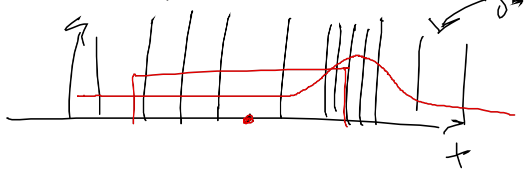
bisher $\nabla E = 4\pi\rho$; $\nabla\times E = 0$

Annahme: ρ ist mikrosk. bekannt

Problem: + viele Elektronen sind fest gebunden, können sich aber ein wenig verschieben

+ mikroskop. Feld variiert stark

z.B. Ladung 1D



⇒ 3.1. Mittelungen

$$\rho_{makro}(r) = \frac{1}{\Delta V} \int_{\Delta V} \rho_{mikro}(r + r')\, d^3 r'$$

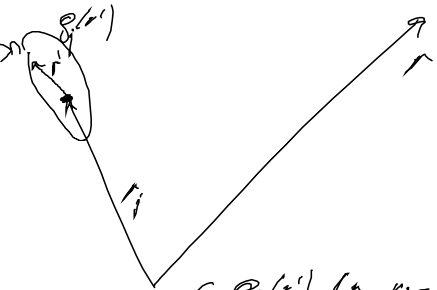
wichtig $\Delta V \gg$ Volumen pro Ladung

$$E_{makro}(r) = \frac{1}{\Delta V} \int_{\Delta V} E_{mikro}(r + r')\, d^3 r'$$

Ziel: Ableitung effektiver Maxwell-Gl. für die makroskop. Felder & Dichten

Idee: nutze Multipolentw. bis hin zum Dipol

Molekül:



erzeugt Feld
$$\underline{E}_j(\underline{r}) = \int_{Mol} \frac{\rho_j(r')\,(\underline{r} - \underline{r}_j - \underline{r}')}{|r - r_j - r'|^3}\, d^3 r'$$
$$= -\nabla \underbrace{\int_{Mol} \frac{\rho_j(r')}{|r - r_j - r'|}\, d^3 r'}_{\Phi(r)}$$

$$\Phi(r) = \frac{q_j}{r} + \frac{\underline{p}_j \cdot \underline{r}}{r^3} + \dots$$

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

Dipolterm $p_j = \int_{Mol} r' \rho_j(r')\, d^3 r'$

hängt nicht von r_j ab

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

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

$$\rho_{\text{mikr}}(r) = \sum_j q_j\,\delta(r-r_j)$$

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

$$E_{\text{makr}}(r) = \langle E_{\text{mikr}} \rangle = \frac{1}{\Delta V}\int_{\Delta V} E_{\text{mikr}}(r+r')\,d^3r'$$

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

$$\rho_{\text{makr}}(r) = \frac{1}{\Delta V}\int_{\Delta V}\rho_{\text{mikr}}(r+r')\,d^3r' = \frac{1}{\Delta V}\sum_j q_j \qquad \text{enthält Monopol-Beiträge}$$

$$\underline{P}_{\text{makr}}(r) = \frac{1}{\Delta V}\int_{\Delta V}\underline{P}_{\text{mikr}}(r+r')\,d^3r' = \frac{1}{\Delta V}\sum_j \underline{p}_j \quad , \quad \text{Dipol-Beiträge}$$

3.2. Dielektrische Verschiebung

betr. Divergenz

$$\nabla E(r) = \int_{\Delta V} d^3r'\left[\rho_{\text{makr}}(r')\,\Delta\frac{1}{|r-r'|} + \left(P_{\text{makr}}(r')\cdot\nabla'\right)\Delta\frac{1}{|r-r'|}\right]$$

$$= \int d^3r'\left[\rho_{\text{makr}}(r')\cdot 4\pi\,\delta(r-r') - \left(P_{\text{makr}}(r')\cdot\nabla\right)\delta(r-r')\cdot 4\pi\right]$$

$$\nabla\delta(r-r') = -\nabla'\delta(r-r')$$

$$\nabla\cdot E_{\text{makr}}(r) = 4\pi\,\rho_{\text{makr}}(r) - 4\pi\,\nabla\cdot P_{\text{makr}}(r)$$

$$\nabla\left(E_{\text{makr}}(r) + 4\pi\,P_{\text{makr}}(r)\right) = 4\pi\,\rho_{\text{makr}}(r)$$

dielektr. Verschiebung
$$\boxed{D(r) = E_{\text{makr}}(r) + 4\pi\,P_{\text{makr}}(r)} \quad \Longrightarrow \quad \boxed{\underline{\nabla}\cdot\underline{D} = 4\pi\,\rho}$$

makroskop. enthält nur Monopolbeiträge

enthält Dipol-Beiträge

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

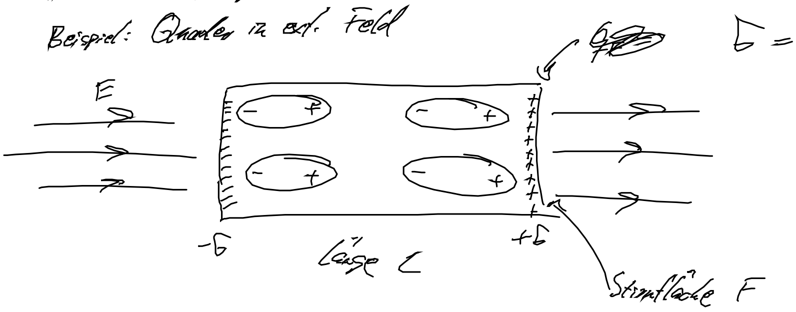
GG der ES zu lösen

3.3 Polarisation

$\hat{=}$ Dipoldichte

Welche Beziehungen gelten

Beispiel: Quader im ext. Feld



$$\sigma = \frac{q_F}{F}$$

$$q_F = \sigma \cdot F$$

$$V = F \cdot L$$

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

$$\Rightarrow \boxed{|P| = \sigma}$$

jetzt: allgemein

$$E_{(mak)}(r) = -\nabla \int d^3r' \left(\frac{\rho_{mak}(r')}{|r-r'|} + \underline{(P_{mak}(r')\nabla') \frac{1}{|r-r'|}} \right) d^3r' = -\nabla \Phi_\rho(r) - \nabla \Phi_P(r)$$

$$\nabla' \left(\frac{P(r')}{|r-r'|} \right) = \frac{1}{|r-r'|} \left(\nabla' P_{mak}(r') \right) + \underline{\left(P_{mak}(r') \nabla' \right) \frac{1}{|r-r'|}}$$

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

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

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

Vergleich liefert $\sigma_P(r) = n \cdot P(r)$ $\qquad -\rho_P(r) = \nabla P(r)$

gesamte Polarisationsladung verschwindet

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

hatten $\underline{n}\,(\underline{E}_a - \underline{E}_i) = 4\pi\sigma$

jetzt $\underline{n}\,(\underline{P}_a - \underline{P}_i) = -\sigma$ Verhalten an Grenzflächen

empirisch: bei den meisten Medien verschwindet P in Abwesenheit eines ext. Feldes

allg $P_i = \sum_j a_{ij} \cdot E_j + \sum_{jk} b_{ijk} E_j E_k + \ldots$

$\Rightarrow$ auch $\underline{P} = \chi_e \cdot \underline{E}$ $\qquad a_{ij} = \chi_e \cdot \delta_{ij}$

elektr. Suszeptibilität $\qquad$ + schwache Felder

$$D = E + 4\pi P = (1 + 4\pi\chi_e)\,E = \varepsilon E$$

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

[in SI: $D_{SI} = \varepsilon_0 E_{SI} + P_{SI}$]

3.4. Elektrostatische Feldenergie

hatten $W = \frac{1}{2}\int \varrho(r)\cdot\Phi(r)\, d^3r$

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

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

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

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

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

verschwindet im Unendlichen
für $\Phi(\infty) = 0$ und $D(\infty) \to 0$

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

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

linear, homogene, isotrope Medien

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

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

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

Energiedichte des Feldes im Medium

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

nur für lineare isotrope Medien