II Makroskopische Beschreibung

1. Räumliche Mittlung

bisher: mikroskopische Adressierung der Punktladungen
nicht mgl. für makroskopische Systeme (10^{23} Teilchen)

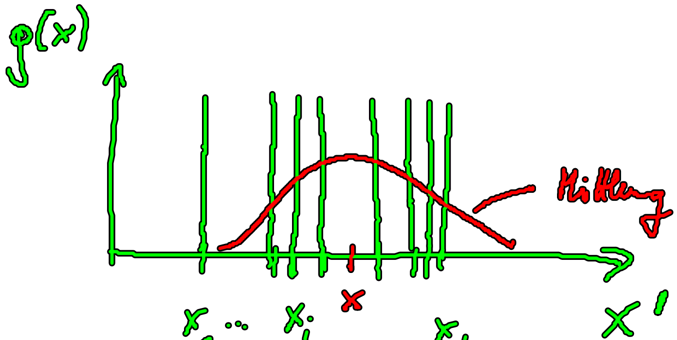
→ Reduktion der Information

Ansatz

a_0 (Bohrradius) < ℓ < λ (Wellenlänge)
„atomare Skala" „mesoskopische Skala" „Feldvariation"

abstrahieren beschreiben

betrachten: Großraumskala zwischen atomarer und
Wellenlängenvariationen („Auflösung")



Exp.: z.B. Mikroskop

um den Meßprozeß zu beschreiben müsse die

mikroskopische Maxwellgln. gemittelt werden,
erfolgt über Mittelungsfunktion $g(\vec{r})$

mittlere Ladungsdichte:

$$\underbrace{\langle \rho(r) \rangle}_{\text{Mittelungsprozedur}} = \int d^3r' \, g(\vec{r}\,' - \vec{r}) \, \rho(\vec{r}\,')$$

$\rho(r')$ wird gezählt (Ladungen zählen)
unterhalb der Mittelungsfunktion,
dann wird Mittelungsprozedur wiederholt
mit $\vec{r}$ an einem anderen Ort
(Weiterschieben der Funktion)

Eigenschaft: $g(\vec{r}) = g(-\vec{r})$
$g(\vec{r})$ hat Ausdehnung groß gegen
atomare Abstände, aber klein
gegen Länge in experimenteller Fragestellg.

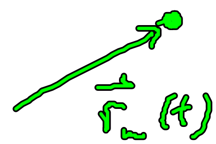
→ nutzen um Materialgleichungen und Maxwellgleichungen
zu mitteln.

2. Makroskopische Ladungen und Ströme

a) Ladungsdichte

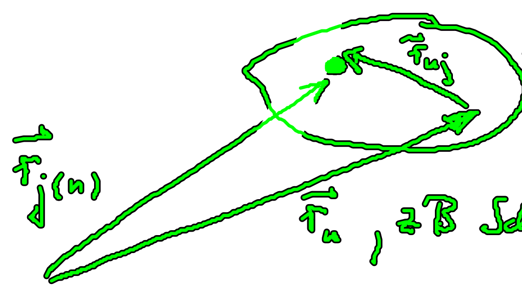
$$\langle \rho(r)\rangle = \sum_i q_i \left\langle \delta(\vec{r} - \vec{r}_i)\right\rangle$$

Unterscheidung: (i) freie Ladungen, Index „m"



(Metalle, Plasma)

(ii) gebundene Ladungen, Index „j"



$\vec{r}_n$, z.B. Schwerpunkt des n-ten Moleküls

$$\vec{r}_{j(n)} = \vec{r}_n + \vec{r}_{nj}$$

$$\rho(r) = \underbrace{\sum_m}_{\text{alle Moleküle}} q_m\, \delta(\vec{r} - \vec{r}_m) + \sum_n \sum_{j(n)} q_{j(n)}\, \delta(\vec{r} - \vec{r}_{j(n)})$$

alle Moleküle → alle Teilchen im n-ten Molekül

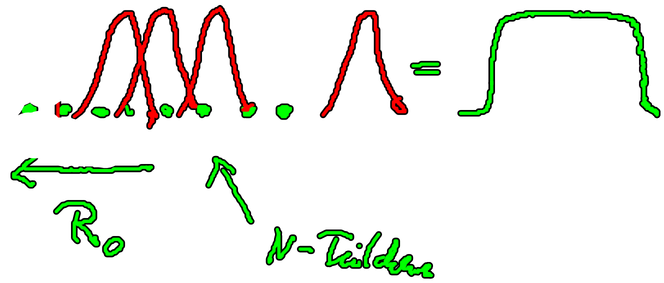
(i) freibewegliche Ladungen

$$\langle \rho(r) \rangle_{frei} = \sum_m q_m\, g(\vec r - \vec r_m) = \rho_m(\vec r)$$

Makroskopische Ladung, entstanden durch Verschmierung der mikroskopischen Ladungen

Bsp.: Ladung in einer Kugel

$$\rho_m(\vec r) = \sum_{Kugel} q_m\, g(\vec r - \vec r_m) =$$



$$= q \frac{N}{V}\, \Theta(R_0 - |r|)$$

Ladungsdichte einer geladenen Kugel mit konstantem $\rho = \frac{N}{V} q$

(ii) gebundene Ladungen

$|\vec r_{nj}| \ll |\vec r_n|$, Taylorentwicklung:

$$\langle \rho(r) \rangle_{gebunden} = \sum_n \sum_{j(n)} q_{j(n)} \int d^3r'\, g(\vec r - \vec r')\, \delta(\vec r' - \vec r_n - \underline{\underline{\vec r_{nj}}})$$

$$= \sum_n \underbrace{\sum_{j(n)} q_{j(n)}}_{} \int d^3r'\, g(\vec r - \vec r')\, \delta(\vec r' - \vec r_n)$$

Summe über alle Ladungen im n-ten Molekül, elektrisch neutral $\rightarrow$ ist Null

$$+\sum_n \sum_{j(n)} q_{j(n)} \int d^3r'\, g(\vec{r}-\vec{r}\,')\,(-\vec{r}_{nj})\cdot\nabla_{r'}\,\delta(\vec{r}\,'-\vec{r}_n)$$

partieller Integration

$$= \sum_n \underbrace{\sum_{j(n)} q_{j(n)}\, \vec{r}_{nj}} \int d^3r'\, \vec{\nabla}_{r'}\, g(\vec{r}-\vec{r}\,')\,\delta(\vec{r}\,'-\vec{r}_n)$$

$$= -\sum_n \vec{d}_n \cdot \vec{\nabla}_r\, g(\vec{r}-\vec{r}_n)$$

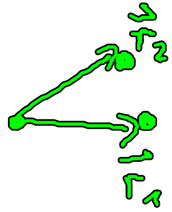
$$= -\vec{\nabla}_r \cdot \sum_n \vec{d}_n\, g(\vec{r}-\vec{r}_n)$$

$$\rho_{geb}(\vec{r}) = -\vec{\nabla}_r \cdot \vec{P}(r,t)$$

Interpretation: ρ_{geb} kann als Divergenz einer Dipoldichte $\vec{P}$ (Polarisation) geschrieben werden

- Dipolmoment des n-ten Moleküls: $\vec{d}_n$

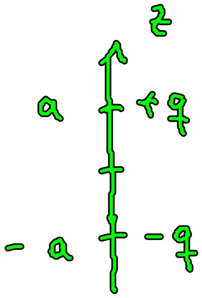
$$\vec{d}_n = \sum_{j(n)} \vec{r}_{nj}\, q_{j(n)}$$ „Ladungsschwerpunkt"



Σ ausführen

für n Wasserstoffatome :

Elektron, Proton



mikroskop. Dichte $\rho(\vec r) = q\,\delta(\vec r - a\vec e_z) - q\,\delta(\vec r + a\vec e_z)$

makroskopische Dichte $\rho_{geb}(\vec r) = -\vec\nabla \cdot \sum_n \underbrace{\sum_{j(n)} q_{j(n)} \vec r_{nj}}_{\vec d_n}\, g(\vec r - \vec r_n)$

$$\vec d_n = q a \vec e_z - q(-a\vec e_z) = 2 q a \vec e_z$$

f. 1 H-Atom am Ort $\vec r$:

$$\langle \rho(\vec r) \rangle = -\vec\nabla \cdot \vec d\, g(r)$$

$\hat{=}$ Dipolverteilung am Ort $\vec r$

− $P(\vec r, t)$ ist eine Dipoldichte $\left(\dfrac{\text{Dipolmoment}}{\text{Volumen}} \right)$

$$\vec P = \sum_n \vec d_n(t)\, g(\vec r - \vec r_n)$$

Dipolmoments

$\frac{1}{V}$ normierte Funktion

$\vec{P}$ ist also die Anzahl der Dipole pro Volumeneinheit

Klassifizierg. von Stoffen:

Metalle: freibewegl. LT

Dielektrika: $\vec{P}$ im angelegten Feld $\vec{E}$

Ferroelektrika: $\vec{P}$ $\exists$ auch ohne Feld

Zeitabhängigkeit steckt in den zeitlich beweglichen $r_{a_j}(t)$.

insgesamt: $$\langle \rho(\vec{r}) \rangle = \rho_m(\vec{r}) - \vec{\nabla}\cdot\vec{P}(r) + \underbrace{\vec{\nabla}\cdot(\vec{\nabla}\cdot\overleftrightarrow{Q})}$$

Übung $\longleftarrow$ Quadrupol-anteil

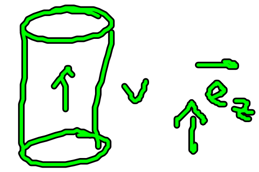
b) Mittlung der Stromdichte

(i) freie Ladungen

$$\langle j(\vec{r},t) \rangle_{frei} = \underbrace{\sum_m q_m \dot{\vec{r}}_m \, g(\vec{r} - \vec{r}_m)}_{j_m(r,t) \text{ makroskopischer Strom}}$$ (Einsetzen der Mittlungsprozedur)

Bsp: Strom entlang eines Drahts mit Radius R_0.

$$\vec{j}_m(r) = v\,\vec{e}_z\,\frac{q\,N}{V}\,\Theta(R_0 - |r|)$$



v ist Geschwindigkeit der LT

(ii) gebundene Ladungen

$$\langle \vec{j}(r)\rangle_{geb} = \sum_n \sum_{j(n)} q_{j(n)} \left(\dot{\vec{r}}_n + \dot{\vec{r}}_{nj}\right) \int d^3r'\, g(\vec{r}-\vec{r}\,')\,\delta(\vec{r}\,' - \vec{r}_n - \vec{r}_{nj})$$

$\swarrow = 0$

ruhende Moleküle ohne Schwerpunktsbewegg.

Taylor

$$= \sum_n \sum_{j(n)} q_{j(n)}\, \dot{\vec{r}}_{nj}\, g(\vec{r}-\vec{r}_n) \longrightarrow \frac{\partial}{\partial t}\vec{P}(\vec{r},t)$$

$$+ \sum_n \sum_{j(n)} q_{j(n)}\, \underbrace{\dot{\vec{r}}_{nj}\, \vec{r}_{nj}\cdot\vec{\nabla}_{r_n}}\, g(\vec{r}-\vec{r}_n)$$

$$\Bigg(\underbrace{\frac{1}{2}\partial_t\left(\vec{r}_{nj}\,\vec{r}_{nj}\cdot\vec{\nabla}_{r_n}\right)}_{\text{Quadrupolanteil}} + \underbrace{\frac{1}{2}\dot{\vec{r}}_{nj}\,\vec{r}_{nj}\cdot\vec{\nabla}_{r_n} - \frac{1}{2}\vec{r}_{nj}\,\dot{\vec{r}}_{nj}\cdot\vec{\nabla}_{r_n}}_{\vec{\nabla}\times\underbrace{(\vec{r}_{nj}\times\dot{\vec{r}}_{nj})}_{\sim\ \text{Drehimpuls}}}\Bigg) g$$

$\swarrow$ unterliegt oft Dipolterm

$(\longrightarrow 0)$

$$\langle j(r,t)\rangle = \underbrace{\vec{j}_m(r,t)}_{\substack{\text{Makroskopischer} \\ \text{Strom} \\ \text{„Elektron im Draht"}}} + \underbrace{\frac{\partial}{\partial t}\vec{P}(r,t)}_{\text{Dipolstrom}} + \underbrace{\frac{1}{\mu_0}\vec{\nabla}\times\vec{M}(r,t)}_{\text{Magnetisierungsstrom}}$$

$\vec{M}$ ist die Magnetisierungsdichte

$$\vec{M} = \sum_n \vec{l}_n(t)\, g(\vec{r}-\vec{r}_n), \quad \vec{l}_n = \frac{\mu_0}{2}\sum_{j(n)} \frac{q_{jn}}{m_{jn}} \underbrace{\vec{l}_{jn}}_{\substack{\text{Drehimpuls} \\ m_{jn}\vec{r}_{jn}\times\dot{\vec{r}}_{jn}}}$$

$$\vec{P} = \sum_n \vec{d}_n(t)\, g(\vec{r}-\vec{r}_n) \quad \vec{d}_n = \sum_{j(n)} q_{jn}\vec{r}_{jn}$$

Die Magnetisierungsdichte wird durch die Drehimpulseigenschaften bestimmt, Spin fehlt (allerdings oft dominant)

3 Makroskopische Maxwellgleichungen

werden durch Einsetzen hergeleitet aus den mikroskopischen.

a) $\langle \vec{\nabla}\cdot\vec{E}\rangle = \left\langle \frac{\rho}{\varepsilon_0}\right\rangle \rightarrow \vec{\nabla}\cdot\langle\vec{E}\rangle = \frac{\langle\rho\rangle}{\varepsilon_0}$

$$\vec{\nabla}\cdot\langle\vec{E}\rangle = \frac{1}{\varepsilon_0}\left(\rho_m - \vec{\nabla}\cdot\vec{P}\right)$$

$$\vec{\nabla}\cdot\left(\langle\vec{E}\rangle + \frac{\vec{P}}{\varepsilon_0}\right) = \frac{\rho_m}{\varepsilon_0}$$

$$\vec{\nabla}\cdot\left(\underbrace{\varepsilon_0\langle\vec{E}\rangle + \vec{P}}\right) = \rho_m$$

$\vec{D}$: dielektrisch Verschiebungsfeld

$$\boxed{\vec{\nabla}\cdot\vec{D} = \rho_m}$$

Quelle des dielektrisch Verschiebungsfelds sind die makroskopischen Ladungen

b) $\vec{\nabla}\cdot\langle\vec{B}\rangle = 0$

c) $\vec{\nabla}\times\langle\vec{E}\rangle = -\partial_t\langle B\rangle$

d) $\vec{\nabla}\times\langle\vec{B}\rangle = \mu_0\langle\vec{j}\rangle + \frac{1}{c^2}\partial_t\langle\vec{E}\rangle$

$$\vec{\nabla}\times\langle\vec{B}\rangle = \mu_0\left(j_m + \partial_t\vec{P} + \frac{1}{\mu_0}\vec{\nabla}\times\vec{M}\right) + \frac{1}{c^2}\partial_t\langle E\rangle$$

$$\vec{\nabla}\times\left(\frac{\langle\vec{B}\rangle - \vec{M}}{\mu_0}\right) = \vec{j}_m + \partial_t\vec{D}$$

$$\vec{\nabla}\times\vec{H} = \vec{j}_m + \partial_t\vec{D}$$

Die Wirbel der magnetischen Feldstärke H

ist durch den makroskop. Strom und ein

zeitlich veränderliches DAJ gegeben

<u>immer dran denken:</u> Einführung makroskopischer Größe gut für $a_0 \ll \lambda$, d.h. im optischen Bereich okay, nicht f. <u>Röntgen</u>

4. Bewegungsgleichungen für Ladungen – makroskopischer Zugang

Mittelung der Bewegungsgleich. für die Newtongleichung der Teilchen durchführen:

$$m \ddot{\vec{r}}_i = q_i \left(\vec{E}(r_i, t) + \dot{\vec{r}}_i \times \vec{B}(\vec{r}_i, t) \right)$$

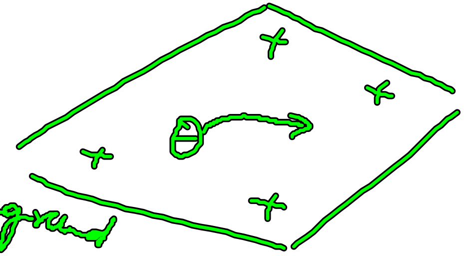
ist nötig, um $\vec{P} = \vec{P}(E)$

2 Grenzfälle: $\vec{j}_m$: makroskopische Ströme (Metalle) (freie Ladungen)

$\vec{P}$: Dielektrika (gebundene Ladungen)

4.1. Makroskopische Ströme

Beschreibg. einer Elektronenflüssigkeit



Bewegg. vieler El. auf positivem Ladungshintergrund

(Jellium-Modell)

mittleres Geschwindigkeitsfeld $\vec{u}_m(\vec{r},t)$,

makroskopisch

beschreibt die Bewegg. eines Probeteilchens (Elektrons) in Elektronenflüssigkeit

1) Kontinuitätsgleichg.: $\partial_t \rho_m = -\vec{\nabla}\cdot(\rho_m \vec{u}_m)$

2) Gleichg. f. Geschwindigkeitsfeld:

$$\partial_t \vec{u}_m + \vec{u}_m\cdot\vec{\nabla}\,\vec{u}_m = \frac{q}{m}\left(\vec{E} + \vec{u}_m\times\vec{B}\right)$$

El-Ladg + Masse

partielles Dgl.-System f. $\vec{u}_m$ am Ort $\vec{r}$ zur Zeit t und ρ_m am Ort $\vec{r}$ zur Zeit t.

+ Anfangs- und Randbedingg. → lösbar

beschreibt die Bewegung der Elektronenflüssigkeit im elektromagnetischen Feld,

kann selbstkonsistent mit Maxwellgleichungen

für $\vec{E} = E(j_m, \rho_m)$, $B = B(j_m, \rho_m)$

gelöst werden.

Einfachste Anwendung: Ohmsches Gesetz

- phänomenolog. Dämpfung der Geschwindigkeit
- kleine Geschwindigkeiten
- homogenes El.plasma

$$\partial_t \vec{u}_m + \cancel{\vec{u}_m \cdot \vec{\nabla} u_m} = \frac{q}{m}\left(\vec{E} + \vec{u}_m \times \vec{B}\right) - \nu \vec{u}_m$$

stationäre Lsg. $\nu \gg \partial_t$

$$u_m = \frac{q}{m\nu}\left(\vec{E} + \vec{u}_m \times \vec{B}\right)$$

$$\vec{j}_m = \underbrace{\frac{\rho_m q}{m\nu}}_{\sigma \text{ Leitfähigkeit}}\left(\vec{E} + u_m \times \vec{B}\right)$$