3.5.4 Lösungen zur Laplace-Gleichg.: Kugelkoordinaten

- Motivation: $\underline{\nabla}^2 \phi = 0$ ... zentrale Gl. der mathem. Physik, gilt im ladgsfreien Raum & anderen Disziplinen
- Lösungsmethode: Entwickle ϕ nach VONS!
- kartesische Koordi.: $\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right) \phi(\underline{r}) = 0$

  Basisfkt: ebene Wellen $e^{i\underline{k}\cdot\underline{r}}$ & Randbed.

  bzw.: $\sin hx \cdot \sin ky \cdot \sin lz$ etc

- Kugelkoordinaten:

  $\longrightarrow$ kugelsymmetrische Probleme, z.B. über Ränder

  (1) Laplace Operator: $\underline{\nabla}^2 = \underline{\nabla}_r^2 + \frac{1}{r^2} \underline{\nabla}_\omega^2$ (3.69)

  (3.70) $\begin{cases} \text{mit Radialanteil: } \underline{\nabla}_r^2 = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r} \\ \text{" Winkelanteil: } \underline{\nabla}_\omega^2 = -\frac{1}{\hbar^2} \underline{L}^2 = \frac{1}{\sin\vartheta} \frac{\partial}{\partial\vartheta} \sin\vartheta \frac{\partial}{\partial\vartheta} + \frac{1}{\sin^2\vartheta} \frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} \end{cases}$

  Drehimpulsoperator der QM

  (2) Produktsatz:

  $$\phi(r, \vartheta, \varphi) = R(r)\, Y(\vartheta, \varphi) \text{ in } \nabla^2 \phi = 0$$

  $$\longrightarrow Y \underline{\nabla}_r^2 R + \frac{R}{r^2} \nabla_\omega^2 Y = 0 \;\Big|\; \frac{r^2}{RY}$$

  $$\longrightarrow \frac{r^2}{R} \underline{\nabla}_r^2 R = -\frac{1}{Y} \underline{\nabla}_\omega^2 Y = \underbrace{l(l+1)}_{\text{Konstante} \geq 0} \quad \text{o.B.d.A.} \quad (3.69a)$$

  Konstante ≥ 0, da $\underline{\nabla}_r^2, -\underline{\nabla}_\omega^2$ positiv, semidefinite Operatoren

  (3) Radialanteil: $R = \frac{u}{r}$ in (3.69a)

  $$\longrightarrow \frac{d^2 u}{dr^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} u = 0 \longrightarrow R = \alpha r^l + \beta r^{-(l+1)} \quad (3.71)$$

(4) Winkelanteil:

$$\boxed{-D_\omega^2 Y_{lm} = l(l+1)\, Y_{lm}} \qquad (3.72)$$

EW-Problem von $\underline{L}^2 \longrightarrow Y_{lm}$ ... Kugelflächenfkt.

$$\left.\begin{array}{l} Y_{lm} \ \ldots \ \text{Kugelflächenfkt.} \\ l = 0, 1, 2, \ldots \\ m = -l, \ldots, l \end{array}\right\} \begin{array}{l} \text{VONS} \\ \text{in } (\vartheta,\varphi)\text{-Raum} \\ \text{auf Einheits-} \\ \text{kugel} \end{array}$$

Eigenschaften:

Orthonormierung: $\int d\Omega\, Y^*_{lm}(\vartheta,\varphi)\, Y_{l'm'}(\vartheta,\varphi) = \delta_{ll'}\, \delta_{mm'}$

Vollständigkeitsrelation: $\sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^{l} Y_{lm}(\vartheta,\varphi)\, Y^*_{lm}(\vartheta'\varphi') = \delta(\cos\vartheta - \cos\vartheta')\, \delta(\varphi-\varphi')$

(5) Gesamtlösung:

$$\phi(r,\vartheta,\varphi) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^{l} \left(\alpha_{lm} r^l + \beta_{lm} r^{-(l+1)}\right) Y_{lm}(\vartheta,\varphi) \qquad (3.73)$$

Gebiete mit $r=0$: $\beta_{lm} = 0$

$r = \infty$: $\alpha_{lm} = 0$ für $l > 1$

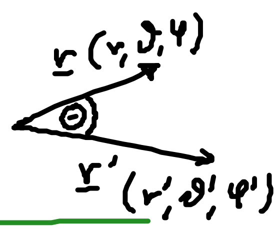
$l = 1 \longrightarrow$ homogenes E-Feld

(6) Zylindersymmetrie: keine φ-Abhängigkeit

$\longrightarrow$ nur $m = 0$ mit $Y_{l0} \sim P_l(\cos\vartheta)$ ... Legendre Polynome

$$\phi(r,\vartheta) = \sum_{l=0}^{\infty} \left(a_l r^l + b_l r^{-(l+1)}\right) P_l(\cos\vartheta) \qquad (3.74)$$

(7) Additionstheorem:



$$\boxed{\sum_{m=-l}^{l} Y_{lm}(\vartheta,\varphi)\, Y^*_{lm}(\vartheta',\varphi') = \frac{2l+1}{4\pi} P_l(\cos\Theta)} \qquad (3.75)$$

• Greensche Fkt. entwickelt nach Y_{lm}:

$$\boxed{\frac{1}{|\underline{r}-\underline{r}'|} = \frac{1}{(r^2+r'^2-2rr'\cos\Theta)^{1/2}} \overset{\text{o.B.}}{=} \sum_l \frac{r_<^l}{r_>^{l+1}} \underbrace{P_l(\cos\Theta)}_{\text{mit (3.75)} \,\to\, Y_{lm}} \quad \text{mit}} \qquad (3.76)$$

$|\underline{r}-\underline{r}'| = [(\underline{r}-\underline{r}')\cdot(\underline{r}-\underline{r}')]^{1/2}$

$r_> = \max(r, r')$

$r_< = \min(r, r')$

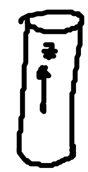
Beweis: mit Hilfe von Erzeugende der P_l („s. Übungen")

• Anwendungen: s. Übungen

• Zylinderkoord. / Zylindersymmetrie: $\longrightarrow$ Besselfkt.

• Potentialtheorie in 2D: z.B. in unendl. langen Geometrien

$\longrightarrow$ keine z-Abhängigkeit



(1) Greensche Fkt.: $G(\underline{r}-\underline{r}') = \ln|\underline{r}-\underline{r}'|$ (3.77)

Beweis: „s. Übungen" [Schwabl]

(2) Zugang über Fkt.theorie:

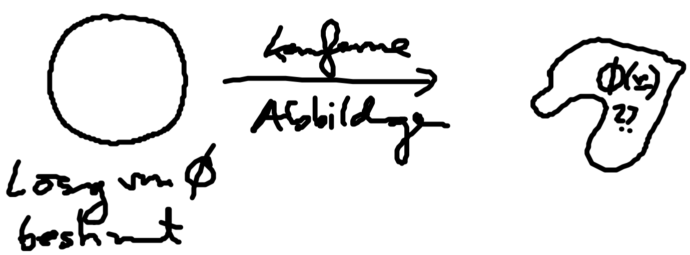
ϕ in komplexwertiger, analytischer Fkt.:

$$f(z) = \phi(x,y) + i\,\psi(x,y) \qquad z = x+iy$$

$\longrightarrow$ Cauchy-Riemann-D. Gl.:

$$\left.\begin{array}{l} \dfrac{\partial\phi}{\partial x} = \dfrac{\partial\psi}{\partial y} \\[2ex] \dfrac{\partial\phi}{\partial y} = -\dfrac{\partial\psi}{\partial x} \end{array}\right\} \longleftrightarrow \left\{\begin{array}{l} \underline{\nabla}^2\phi = 0\ ! \\[2ex] \underline{\nabla}\phi\cdot\underline{\nabla}\psi = 0 \end{array}\right. \qquad (3.78)$$

Feldlinien von $\underline{E}$ $\perp$ Äquipotentiallinien von ϕ



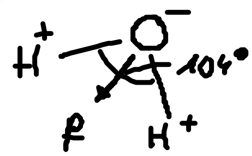
3.6 Multipolentwicklung

- Motivation: Wie sehen Ladungsverteilungen von Weitem aus?

  $\longrightarrow$ Klassifizierung von Ladungsverteilungen: Momente

  $\longrightarrow$ " ihre Potentiale/Felder

- Bsp: (1) H_2O - Molekül:



Elektronegativität von O $\longrightarrow$ Ladungsverschiebung

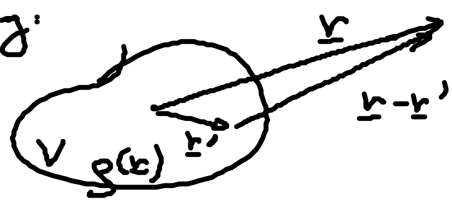
$q(O) = -0{,}8\, e_0$

$q(H) = +0{,}4\, e_0$

$\longrightarrow$ neutral, aber elektr. Dipol $\underline{p}$

(2) Atomkerne: $\longrightarrow$ elektr. Quadrupole

- Problemstellung:



$\Phi(\underline{r}),\ \underline{E}(\underline{r})$

- Entwicklung nach Momenten der Ladungsverteilung:

$$\Phi(\underline{r}) = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0} \int \frac{\rho(\underline{r}')}{|\underline{r}-\underline{r}'|}\, d^3r' \qquad (3.10)$$

Taylorentwicklung um $\underline{r}$: $\quad r = |\underline{r}|,\ \nabla_i = \frac{\partial}{\partial x_i},\ \underline{r} = (x_1, x_2, x_3)$

$$\frac{1}{|\underline{r}-\underline{r}'|} = \frac{1}{r} - x_i' \nabla_i \frac{1}{r} + \frac{1}{2} \underbrace{x_i' x_j'}_{x_i' x_j' - \frac{1}{3} r'^2 \delta_{ij}} \nabla_i \nabla_j \frac{1}{r} + \ldots + \frac{(-1)^n}{n!} x_{i_1}' \ldots x_{i_n}' \nabla_{i_1} \ldots \nabla_{i_n} \frac{1}{r} + \ldots \qquad (3.79)$$

da $\delta_{ij} \nabla_i \nabla_j \frac{1}{r} = \nabla^2 \frac{1}{r} = 0$

(1) Momente der Ladungsverteilung. (3.79) in (3.10)

$$\boxed{\begin{aligned}
&\text{(Gesamt-)Ladung:} && q = \int \rho(\underline{r}')\, d^3r' \\
&\text{Dipolmoment:} && p_i = \int x_i' \rho(\underline{r}')\, d^3r' \\
&\text{Quadrupolmoment:} && Q_{ij} = \int (3x_i'x_j' - r'^2\delta_{ij})\rho(\underline{r}')\, d^3r' \\
& && \text{mit } Sp\, \underline{\underline{Q}} = Q_{ii} = 0\,! \\
& && \vdots \\
&\text{n-tes Multipolmoment:} && M_{i_1\dots i_n} \sim \int (x_{i_1}' \dots x_{i_n}' - \underbrace{\dots}_{\text{Terme mit } r'^2\delta_{ij}})\rho(\underline{r}')\, d^3r'
\end{aligned}} \quad (3.80)$$

(2) Potential: (3.79) in (3.10) mit (3.80)

$$\longrightarrow \phi(\underline{r}) = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\left[\frac{q}{r} - p_i\nabla_i\frac{1}{r} + \frac{1}{6}Q_{ij}\nabla_i\nabla_j\frac{1}{r} + \dots M_{i_1\dots i_n}\nabla_{i_1}\dots\nabla_{i_n}\frac{1}{r} + \dots\right]$$

verwende: (i) $\nabla_i \frac{1}{r} = -\frac{1}{r^2}\nabla_i r = -\frac{x_i}{r^3}$

(ii) $\nabla_i\nabla_j\frac{1}{r} = 3\frac{x_ix_j}{r^5} - \underbrace{\frac{\delta_{ij}}{r^3}}$ (o.B.)

$$\left[Q_{ij}\delta_{ij} = Q_{ii} = 0\right]!$$

$$\longrightarrow \boxed{\phi(\underline{r}) = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\left[\frac{q}{r} + \frac{\underline{p}\cdot\underline{r}}{r^3} + \frac{1}{2}Q_{ij}\frac{x_ix_j}{r^5} + \dots\right]} \quad (3.81)$$

$$\longrightarrow \quad \underline{E}(\underline{r}) = -\underline{\nabla}\phi(\underline{r})$$

3.6.1 Diskussion der Multipol-Momente

· (1) Monopol: $\phi_m(\underline{r}) = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{q}{r} \longrightarrow \underline{E} = \frac{q}{4\pi\varepsilon_0}\frac{\underline{r}}{r^3}$

= Potential/Feld einer Punktladung $\rho_m = q\,\delta(\underline{r})$