

3.6 Multipolentwicklung

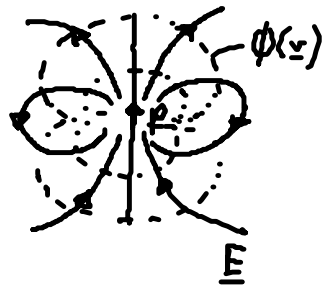
$$\Phi(r) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \left[\frac{q}{r} + \frac{p \cdot r}{r^3} + \frac{1}{2} Q_{ij} \frac{x_i x_j}{r^3} + \dots \right]$$

3.6.1 Discussion der Multipol-Momente

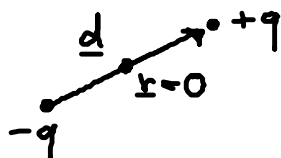
(1) Monopol: $\Phi_m(r) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{q}{r} \rightarrow \underline{E} = -\underline{\nabla}\Phi = \frac{q}{4\pi\epsilon_0} \frac{r}{r^3}$

(2) Dipol: $\Phi_d(r) = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} p \cdot \underline{\nabla} \frac{1}{r} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{p \cdot r}{r^3} \sim \frac{1}{r^2}$ (3.82)

$\rightarrow \underline{E}_i = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} p_j \nabla_i \nabla_j \frac{1}{r} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{p_j}{r^3} (3 \frac{x_i x_j}{r^2} - \delta_{ij})$ (3.83)



- elementarer Dipol:



$$\int_V \rho(r) d^3r$$

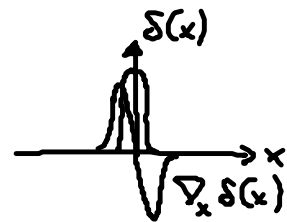
$\rho_d(r) = q \left[\delta(r - \frac{d}{2}) - \delta(r + \frac{d}{2}) \right]$ (3.84) \rightarrow $\underline{p} = q \underline{d} \parallel \underline{d}$ (3.85)

Einheit: $[p] = 1 \text{ Debye} = 3,34 \cdot 10^{-30} \text{ Cm}$

Bsp: $\text{H}_2\text{O}: p = 1,84$ $\text{CO}: p = 0,11$ $\text{NaCl}: p = 8,5$

- Punktdipol: $\underline{p} = \lim_{\substack{d \rightarrow 0 \\ qd < \infty}} q \underline{d}$... idealisiertes Objekt

mit $\rho_d(r) \stackrel{(3.84)}{=} -\underline{p} \cdot \underline{\nabla} \delta(r)$ (3.86)



Berechne Φ_d :

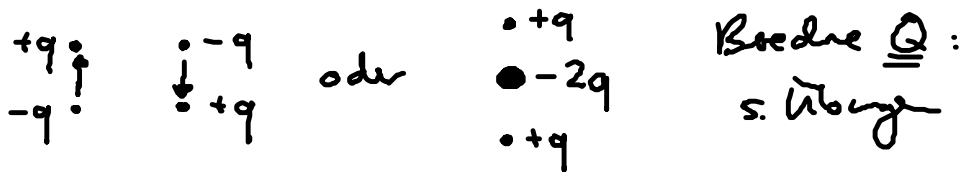
$$\left. \begin{aligned} -\underline{p} \cdot \underline{\nabla} \left| \nabla^2 \Phi_m = -\frac{1}{\epsilon_0} \delta(r) \right. \\ \left. \Phi_m = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r} \right\} \quad \left. \begin{aligned} \nabla^2 \Phi_d = -\frac{1}{\epsilon_0} \delta_d \\ \Phi_d = -\underline{p} \cdot \underline{\nabla} \Phi_m \\ \rightarrow \Phi_d = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \underline{p} \cdot \underline{\nabla} \frac{1}{r} \end{aligned} \right\}$$

• (3) Quadrupol:

$$\Phi_G = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{6} Q_{kl} \nabla_k \nabla_l \frac{1}{r} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{2} Q_{kl} \frac{x_k x_l}{r^5} \sim \frac{1}{r^3} \quad (3.87)$$

$$E_i = - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{6} Q_{kl} \nabla_i \nabla_k \nabla_l \frac{1}{r} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Q_{kl}}{2} \frac{5x_i x_k x_l - r^2 (\delta_{kl} x_i + \delta_{il} x_k + \delta_{ik} x_l)}{r^7} \quad (3.88)$$

elementare Quadrupole: mit $p=0$



• Bemsgspkt.: $\underline{r} = 0 \rightarrow r_0$, was passiert?

Das niedrigste, nicht verschwindende Multipolmoment ist unabhängig vom Bemsgspkt. (3.89)

o.B.
[s. Schwab]

• Multipolentwicklung mit Hilfe $Y_{lm}(\vartheta, \varphi)$

$$\left[\frac{1}{|r-r'|} \leftrightarrow P_l(\cos\theta), Y_{lm}(\vartheta, \varphi) \right]$$

\rightarrow sphärische Multipolmomente $Q_{lm} \leftrightarrow$ kartesische Multipolmomente

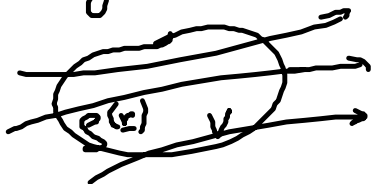
[Tensor: T_{ij} 9 Komponenten
 $\text{Sp} \underline{T} \leftrightarrow l=0$,
 antisymmetrischer Anteil von $\underline{T} \leftrightarrow l=1$
 symmetr./spurlos " von $\underline{T} \leftrightarrow l=2$]

$l=0$... Monopol, $l=1$... Dipol, $l=2$... Quadrupol, $l=3$... Oktupol etc.

„s. Übung“

3.6.2 Energie von Multipolen im äußeren Feld

• Problemstellung:



externes Potential $\phi^e(\underline{r})$
 " Feld $\underline{E}^e = -\nabla \phi^e$

• Energie:

$$U = \int d^3r \rho(\underline{r}) \Phi^e(\underline{r}) \quad \dots \text{Änderung von } \Phi_e \text{ sei nun klein in } V$$

$$\stackrel{\text{Taylor}}{=} \int d^3r \rho(\underline{r}) \left[\Phi^e(0) + \underbrace{\underline{r} \cdot \underline{\nabla} \Phi^e(0)}_{-\underline{E}^e} + \frac{1}{2} \underbrace{x_i x_j}_{x_i x_j - \frac{1}{3} r^2 \delta_{ij}} \underbrace{\nabla_i \nabla_j \Phi^e(0)}_{\substack{-\nabla_i E_i = -\nabla_i E_j \\ \text{da } \nabla^2 \Phi^e = 0 \text{ in } V}} + \dots \right]$$

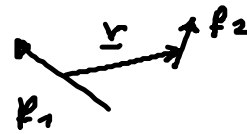
Def. von Multi-
pole

$$U \stackrel{(3.80)}{=} q \Phi(0) - \underline{p} \cdot \underline{E}^e(0) - \frac{1}{6} Q_{ij} \nabla_i \nabla_j E_i^e(0) + \dots \quad (3.90)$$

$$\underbrace{}_{= \nabla_i E_j^e(0)}$$

beliebiger Aufpunkt von ρ : $\underline{r}=0 \rightarrow \underline{r}$

• Wechselwirkung zweier Dipole:



$$U_{00} = -\underline{p}_2 \cdot \underline{E}(\underline{r}) \quad \text{mit } \underline{E}(\underline{r}) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r^3} \left[3 \frac{\underline{r}(\underline{r} \cdot \underline{p}_1)}{r^2} - \underline{p}_1 \right]$$

↑
Feld von Dipol 1
bei \underline{r}

$$\rightarrow U_{00} = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r^3} \left[3 \frac{(\underline{r} \cdot \underline{p}_1)(\underline{r} \cdot \underline{p}_2)}{r^2} - \underline{p}_1 \cdot \underline{p}_2 \right] \quad (3.91)$$

- festes \underline{r} :
- (1) U_{00} minimal für $\underline{p}_1 \parallel \underline{p}_2 \parallel \underline{r}$: ↑↑
 - (2) lokales Minima: $\underline{p}_1 \perp \underline{p}_2 \perp \underline{r}$: ↑↓
 - (3) " Maxima: ↑↓ und ↑↑ (↑←?!?)

• Kraft auf Multipole:

$$F_i = -\nabla_i U \stackrel{(3.90)}{=} -q \nabla_i \Phi^e - p_j \nabla_i \nabla_j \Phi^e - \frac{1}{6} Q_{kl} \nabla_i \nabla_k \nabla_l \Phi^e + \dots \quad (3.92)$$

$$\rightarrow \underline{F} = q \underline{E}^e + \underline{p} \cdot \underline{\nabla} \underline{E}^e + \frac{1}{6} Q_{kl} \nabla_k \nabla_l \underline{E}^e$$

Dipolwirkung
Gradienten von

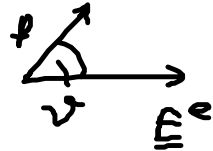
- Drehmoment auf Multipoles: \underline{E} gezogen bzgl. Aufpunkt von $r=0$

$$\underline{M} = \int d^3r \underline{r} \times \underbrace{\rho(\underline{r}) \underline{E}^e(\underline{r})}_{\text{Kraftdichte}} \quad (3.93)$$

$$\rightarrow M_i = \int d^3r \varepsilon_{ijk} x_j \rho(\underline{r}) \underbrace{E_k^{(e)}(\underline{r})}_{\approx E_k^e(0) + x_l \nabla_l E_k^e(0) + \dots}$$

$$\underline{M}_i = (\underline{p} \times \underline{E}^e)_i + \frac{1}{3} \varepsilon_{ijk} Q_{jl} \nabla_l E_k^e \quad (3.94)$$

insbesondere: Dipol (i) $\underline{M} = 0$ für $\underline{p} \parallel \underline{E}^e$



(ii) $U = -\underline{p} \cdot \underline{E}^e = -p E^e \cos\vartheta$

$$\rightarrow M = -\frac{\partial U}{\partial \vartheta} = -p E^e \sin\vartheta = -|\underline{p} \times \underline{E}^e|$$

„ \underline{M} dreht $\underline{p} \parallel \underline{E}$ “

4. Elektrische Felder in Materie

4.1 Mikroskopische Gln. der Elektrostatik & Mittelung

- elektr. Feld $\underline{E} \leftrightarrow$ Ladungsdichte $\rho(\underline{r})$

• In Materie:

(1) freie Ladungen: $\rho_f(\underline{r})$ Bsp: e^- in Metalle

gebundene: $\rho_b(\underline{r})$

Atome/Moleküle an Gitterplätzen / in Flüssigkeiten

1 elektr. neutral

2 Ionen

3 permanente Dipole (Multipoles): Bsp. H_2O

4 induzierte „ durch \underline{E}

→ Ziel: gemittelte Beschreibung über Polarisation (Multipolentwicklung)

(2) Herleitung durch Mittelung aus mikroskop. Gln.:

$$\boxed{\begin{aligned} \operatorname{div} \underline{e} &= \frac{1}{\epsilon_0} \rho(\underline{r}) \\ \operatorname{rot} \underline{e} &= 0 \end{aligned}} \quad (4.1)$$

\underline{e} ... mikroskopisches elektr. Feld

(3) starke räumliche Ladungsschwankungen auf $a \approx 0.1 - 1 \text{ nm}$

1 Kern- ϕ / e- $\phi \ll a$

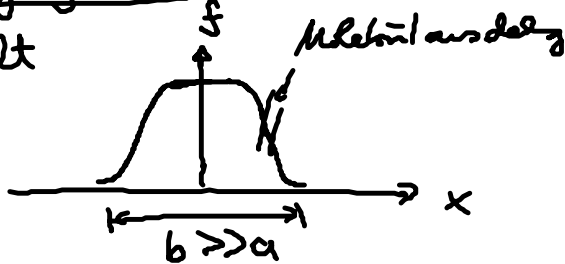
→ Punktladung

2 Ohne Q.M.: räumliche Auflösung nur für $b \geq 10 \text{ nm}$ sinnvoll!

→ räumliche Mittelung / Glättung von $\rho(\underline{r})$!

• Glättungsfunktion:

Gesamt



Bsp: Gauß-Kurve
& Rotationsymmetrie

Glättung:

$$\boxed{\begin{array}{ccc} \text{stark variierte} & \xrightarrow{\text{Mittelung}} & \text{Glättung} \\ \text{Fkt. } F(\underline{r}, t) & & \langle F(\underline{r}, t) \rangle = \int f(|\underline{r}-\underline{r}'|) F(\underline{r}', t) d^3 r' \end{array}} \quad (4.2)$$

Bsp: $F = F_0 \delta(\underline{r}-\underline{r}_0) \rightarrow \langle F \rangle = F_0 f(\underline{r}-\underline{r}_0)$! (4.3)

Eigenschaften: (i) $\langle 1 \rangle = 1 \iff \int f d^3 r = 1$, klar! (4.4)

(ii) $\nabla_i \langle F \rangle = \langle \nabla_i F \rangle$ (4.5)

Beweis: $\nabla_i \langle F \rangle = \int \nabla_i f(\underline{r}-\underline{r}') F(\underline{r}', t)$

$$\begin{aligned}
 \text{part. Integ.} &= \int [-\nabla_i' (f(x-x')) \nabla_i' F - \underbrace{\nabla_i' (f F)}_{\text{Oberflächenkern} = 0}] d^3v \\
 &= \langle \nabla_i' F \rangle_{\text{gel}}
 \end{aligned}$$