Theoretische Physik III (Schäfer)

Robin Heinemann

12. November 2017

Inhaltsverzeichnis

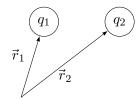
A	Phänomenologie der Maxwell-Gleichungen	3
A.1	elektrisches Feld	4
A.2	elektrische Feldstärke	4
A.3	Maxwell-Gleichungen	4
A.4	Eigenschaften der Maxwell-Gleichungen	5
A.5	Erhaltung der elektrischen Ladung	6
A.6	Elektrodynamik in Materie	6
A. 7	elektrisches Potenzial \rightarrow Elektrostatik	7
A.8	Dirac-Funktion δ_D	8
A.9	potenzielle Energie und das elektrostatische Potenzial	8
A. 10	Eigenschaften der δ_D -Funktion	9
A.11	Feldänderung an einer Oberfläche	9
A.12	Energie einer statischen Ladungsverteilung	10
В	Potentialtheorie	12
B. 1	Green-Theoreme	13
B.2	Eindeutigkeit des Potenzials	14
В.3	$\textbf{Green-Funktion} \rightarrow \textbf{Potenzial einer Punktladung}$	14
B.4	Multipolentwicklung	16
B.5	sphärisch-harmonische Funktionen	18

$\textbf{Alternativer Zugang zur Multipolentwicklung} \rightarrow \textbf{Taylor-Reihe in kartesischen Koordinaten}$	19
Wechselwirkung einer Ladunsverteilung mit einem externen Feld	21
Polarisation und Modelle für Dielektrika	21
orthogonale Funktionensysteme	23
orthogonale Funktionensysteme	24
Kugelflächenfunktionen (spherical harmonics)	26
	Alternativer Zugang zur Multipolentwicklung → Taylor-Reihe in kartesischen Koordinaten Wechselwirkung einer Ladunsverteilung mit einem externen Feld Polarisation und Modelle für Dielektrika orthogonale Funktionensysteme orthogonale Funktionensysteme Kugelflächenfunktionen (spherical harmonics)

Teil A. Phänomenologie der Maxwell-Gleichungen

A.1 elektrisches Feld 4

A.1. elektrisches Feld



$$F = k \frac{q_1 q_2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|^2}$$

$$k = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}$$

$$\varepsilon_0 = 8654 \times 10^{-12} \,\mathrm{A\,s\,V^{-1}\,m} \simeq \frac{1}{4\pi9 \times 10^9} \,\mathrm{A\,s\,V^{-1}\,m}$$

im SI-System.

$$q \to \frac{q}{\sqrt{4\pi\varepsilon_0}} \to k = 1, F = \frac{q_1 q_2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|^2}$$

q wird gemessen in $\sqrt{\text{erg cm}} = 1 \text{ esu}$ "elektrostatic unit".

A.2. elektrische Feldstärke

$$\vec{E}(\vec{r}) = \frac{\vec{F}(\vec{r})}{q}$$



viele Bücher verlangen:

$$\vec{E}(\vec{r}) = \lim_{\Delta q \to 0} \frac{\Delta \vec{F}}{\Delta q}$$

dies ist nicht notwending \rightarrow Linearität der Elektrodynamik

analog: Lorentz-Kraft auf bewegte Ladungen ightarrow magnetische Felder

A.3. Maxwell-Gleichungen

ightarrow axiomatisch für die Elektrodynamik. Verbindung zwischen Ladungsdichte ho, elektrischen Stromdichte \vec{j} und den Feldern $\vec{E}, \vec{D}, \vec{H}$ und \vec{B} . In einem Inertialsystem nehmen die Maxwell-Gleichungen diese Form an:

1. div $\vec{E}=\nabla\cdot\vec{E}=4\pi\rho$ Gesetz von Grauß. elektrische Ladungen sind Quellen des elektrischen Feldes

Satz von Gauß eingschl. Ladung
$$\int_V \mathrm{d}^3 r \, \mathrm{div} \; \vec{E} \stackrel{\uparrow}{=} \int_{\partial V} \mathrm{d} \, \vec{S} \, \vec{E} = \psi = \int_v \mathrm{d}^3 r 4\pi \rho = 4\pi q$$
 el. Fluss

2. div
$$\vec{B} = \nabla \vec{B} = 0$$

$$\int_{\mathcal{V}} \mathrm{d}^3 r \, \mathrm{div} \, \vec{B} = \int_{\partial V} \mathrm{d} \vec{S} \, \vec{B} = \phi = 0$$

3. rot $\vec{E} = \nabla \times \vec{E} = -\partial_{ct}\,\vec{B}$ Faraday-Induktionsgesetz. \downarrow

Lenz.-Regel.

$$\partial_{ct} = \frac{\partial}{\partial(ct)} = \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t}$$

$$\int_{S} d\vec{S} \cdot \operatorname{rot} \vec{E} = \underbrace{\int_{\partial S} d\vec{r} \vec{E}}_{U} = -\frac{d}{d(ct)} \underbrace{\int_{s} d\vec{S} \cdot \vec{B}}_{\phi}$$

4. rot
$$\vec{B} = \nabla \times \vec{B} = \partial_{ct} \vec{E} + \frac{4\pi}{c} \vec{j}$$

$$\int_{S} d\vec{S} \operatorname{rot} \vec{B} = \int_{\partial S} d\vec{r} \vec{B} = \frac{d}{(ct)} \underbrace{\int_{S} d\vec{S} \vec{E}}_{ty} + \frac{4\pi}{c} \underbrace{\int_{S} d\vec{S} \vec{j}}_{I}$$

A.4. Eigenschaften der Maxwell-Gleichungen

- zwei skalare und zwei vektoriell Gleichungen
- lineare, partielle Differenzialgleichungen erster Ordnung
- für vorgegebene ρ und \vec{j} lassen sich \vec{E} und \vec{B} berechnen
- oder aus einer Feldkonfiguration \vec{E} und \vec{B} lassen sich Ladungen ρ und \vec{j} finden
- Maxwell-Gleichungen gelten in einem Inertialsystem: erst die Definitonen aus Bezugssystem bestimmt, was ρ und \vec{j} ist, und damit \vec{E} und \vec{B} darüber hinaus ist mit Wahl des Systems klar, was xvolt ist, und damit ∂_{ct} und ∇ .
- nur eine Skala enthalten: $c \sim$ Lichtgeschwindigkeit

• im Vakuum:
$$\rho=0,\, \vec{j}=0$$
: $\varepsilon=1=\mu \to \vec{D}=\vec{E},\, \vec{H}=\vec{B}.$ div $\vec{E}=0$ div $\vec{B}=0$ rot $\vec{E}=-\partial_{ct}\, \vec{B}$ rot $\vec{B}=-\partial_{ct}\, \vec{E}$

Wenn man $\vec E o \vec B, \, \vec B o - \vec E$ vertauscht, dann ändern sich die Gleichungen nicht o **elektromagnetische Dualität**.

- seltsame Asymmetrie, es gibt kein $ho_{
m mag}$ oder $ec{j}_{
m mag}$

div
$$\vec{B} = 4\pi \rho_{\text{mag}} = 0$$

rot $\vec{E} = -\partial_{ct} \vec{B} + \underbrace{\frac{4\pi}{c} \vec{j}_{\text{mag}}}_{-0}$

A.5. Erhaltung der elektrischen Ladung

$$\operatorname{rot} \vec{B} = \partial_{ct} \vec{E} + \frac{4\pi}{c} \vec{j}$$

$$\operatorname{div} \operatorname{rot} \vec{B} = \varepsilon_{ijk} \partial_i \partial_j B_k = 0 = \partial_{ct} \underbrace{\operatorname{div} \vec{E}}_{=4\pi\rho} + \frac{4\pi}{c} \operatorname{div} \vec{j}$$

$$= \frac{4\pi}{c} \left(\partial_t \rho + \operatorname{div} \vec{j} \right)$$

$$\Longrightarrow \partial_t \rho + \operatorname{div} \vec{j} = 0$$
(Kontinuitätsgleichung)

Aus der Kontinuitätsgleichung folgt die Ladungserhaltung

$$\int_{V} d^{3}r \partial_{t} \rho = \frac{d}{dt} \underbrace{\int_{V} d^{3}r \rho}_{q} = -\int_{V} d^{3}r \operatorname{div} \vec{j} = -\int_{\partial V} d\vec{S} \cdot \vec{j}$$

- Änderung der Ladung in einem Volumen = Fluss der Ladung durch die Oberfläche.
- Dynamik der Felder ist konsistent zur Bewegung der Ladungen
- gilt auch in Materie! Ampere-Gesetz und Gauß-Gesetz enthalten falls $\varepsilon \neq 1$ die dielektrische Verschiebung \vec{D} .
- es existiert implizit eine zweite Erhaltungsgleichung für die magnetische Ladungen, die nicht existieren. 2(1+3) Maxwell-Gleichungen für $2\cdot 2\cdot 3$ Felder!

A.6. Elektrodynamik in Materie

Wechselwirkungen zwischen dem elektromagnetischen Feld und Materie ist **sehr** kompliziert im Mikroskopischen → in vielen Fällen ist es trotzdem möglich, mit zwei Konstatnen eine einfach **effektive** Beschreibung zu finden.

- ε : Dielektrizitätskonstante $\rightarrow \vec{D} = \varepsilon \vec{E}$
- μ : Permeabilitätskonstante ightarrow $\vec{B} = \mu\,\vec{H}$

Im Vakuum: $\varepsilon=1, \mu=1$, in Materie: $\varepsilon\neq 1, \mu\neq 1$

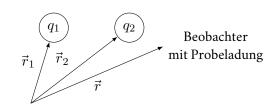
$$\begin{array}{ll} \text{im Vakuum} & \text{in Materie} \\ & \text{div } \vec{E} = 4\pi\rho & \text{div } \vec{D} = 4\pi\rho \\ & \text{div } \vec{B} = 0 & \text{div } \vec{B} = 0 \\ & \text{rot } \vec{E} = -\partial_{pt}\vec{B} & \text{rot } \vec{E} = -\partial_{pt}\vec{B} \\ & \text{rot } \vec{B} = \partial_{ct}\vec{E} + \frac{4\pi}{c}\vec{j} & \text{rot } \vec{H} = \partial_{ct}\vec{D} + \frac{4\pi}{c}\vec{j} \end{array}$$

(wir brauchen noch zwei Konzepte, Dipolfelder und das elektrische Potenzial um ein Modell für ε aufstellen zu können).

A.7. elektrisches Potenzial \rightarrow Elektrostatik

$$\vec{E}(\vec{r}) = q_1 \frac{\vec{r} - \vec{r}_1}{|\vec{r} - \vec{r}_1|^3}$$

$$\vec{E}(\vec{r}) = \sum_i q_i \frac{\vec{r} - \vec{r}_i}{|\vec{r} - \vec{r}_i|^3}$$



(Definiton: Probeladung ist positiv \rightarrow abstoßende

Coulomb-Kraft falls $q_1 > 0$.)

Superposition wegen der Linearität der Maxwell-Gleichnug.

Kontinuumslimit: ersetze $q \rightarrow \rho$

$$\begin{split} \vec{E}(\vec{r}) &= \int_{V} \mathrm{d}^{3}r' \rho(\vec{r}) \frac{\vec{r} - \vec{r}'}{|\vec{r} - \vec{r}'|^{3}} = -\int_{V} \mathrm{d}^{3}r' \rho(\vec{r}) \nabla \frac{1}{|r - r'|} \\ &= -\nabla \underbrace{\int_{V} \mathrm{d}^{3}r' \frac{\rho(\vec{r})}{|\vec{r} - \vec{r}'|}}_{=\phi(\vec{r})} \\ \rightarrow & \boxed{\vec{E}(\vec{r}) = -\nabla \phi(\vec{r})} \\ \phi(\vec{r}) &= \int_{V} \mathrm{d}^{3}r' \frac{\rho(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} \end{split}$$

und es gilt automatisch in diesem Fall:

rot
$$\vec{E} = -\operatorname{rot} \nabla \phi = 0;$$
 $(\operatorname{rot} E)_i = \varepsilon_{ijk} \partial_j \partial_k \phi = 0$

Substitution in das Gauß-Gesetz:

div
$$\vec{E}=4\pi\rho$$

$$\rightarrow \boxed{\Delta\phi=-4\pi\rho}$$
 (Poisson-Gleichung)

Falls keine Ladungen vorliegen, muss $\triangle \phi = 0$ gelten.

$$\phi(\vec{r}) = \frac{1}{|r - r'|}$$

Für Quelle mit q=1 an der Stelle $\vec{r}'=\vec{0}$:

$$\triangle \phi = \left(\partial_x^2 + \partial_y^2 + \partial_z^2\right) \phi = \triangle \frac{1}{r} = \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} \left(r \frac{1}{r}\right) = 0$$

Kugelkoordinaten, Winkel fallen weg, da sie nicht in ϕ vorkommen

klar, bei \vec{r} ist die Ladung nicht, sondern bei $\vec{0}$

$$\int_{V} d^{3}r \, \Delta \phi = \int_{V} d^{3}r \nabla (\nabla \phi) = \int_{\partial V} d\vec{S} \nabla \phi$$
Satz von Gauß
$$= \int r^{2} d\Omega \underbrace{\frac{\partial \phi}{\partial r}}_{=-\frac{1}{r^{2}}} = -\int d\Omega = -4\pi$$

Zusammenfassung beider Fälle

$$\triangle \frac{1}{|\vec{r} - \vec{r}'|} = -4\pi \delta_D (\vec{r} - \vec{r}')$$

analog für Gravitation

$$\operatorname{div} \vec{g} = 4\pi \rho$$
$$\Delta \phi = 4\pi G \rho$$

A.8. Dirac-Funktion δ_D

Elektrodynamik ist eine Kontinuumstheorie ightarrow
ho ist eine Ladungsdichte:

$$\int_{V} \mathrm{d}^{3} r \rho = q \qquad \qquad \text{(im Volumen } V\text{)}$$

8

 $q\delta_D(\vec{r}-\vec{r}')$ repräsentiert eine Punktladung q an der Stelle \vec{r}' .

$$\rho(\vec{r}) = \sum_{i} q_{i} \delta_{D}(\vec{r} - \vec{r}_{i})$$

$$\phi(\vec{r}) = \int d^{3}r' \frac{\rho(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|}$$

denn

$$\triangle \phi(\vec{r}) = \int d^3 r' \rho(\vec{r}') \, \triangle \frac{1}{|\vec{r} - \vec{r}'|} = \int d^3 r' \rho(\vec{r}') (-4\pi) \delta_D(\vec{r} - \vec{r}')$$

$$\triangle \phi(\vec{r}) = -4\pi \sigma(\vec{r})$$
Poisson-Gleichung

im diskreten Fall:

$$\phi(\vec{r}) = \sum_{i} \frac{q_{i}}{|\vec{r} - \vec{r}_{i}|}$$

$$\triangle \phi(\vec{r}) = \sum_{i} q_{i} \triangle \frac{1}{|\vec{r} - \vec{r}'|} = \sum_{i} q_{i} (-4\pi) \delta_{D}(\vec{r} - \vec{r}_{i})$$

$$= -4\pi \sum_{i} q_{i} \sigma_{D}(\vec{r} - \vec{r}') = -4\pi \rho(\vec{r})$$

A.9. potenzielle Energie und das elektrostatische Potenzial



bitte seid super vorsichtig mit Energieinterpretationen von allem, was mit Relativität zutun hat!

Coulomb-Kraft \vec{F} :

$$\vec{F}(\vec{r}) = q\vec{E}(\vec{r})$$

Verschiebearbeit W:

$$W = \int_A^B \mathrm{d}\vec{r} \cdot \vec{F} = -q \int_A^B \mathrm{d}\vec{r} \, \vec{E} = g \int_A^B \underbrace{\mathrm{d}\vec{r} \nabla \phi}_{=\frac{\partial}{\partial \vec{r}} \phi}$$

$$\vec{E} = -\nabla \phi$$

mit $d\vec{r} \cdot \frac{\partial}{\partial \vec{r}} \phi = d\phi$ (totales Differenzial)

$$W = q \int_{A}^{B} d\phi = q(\phi(B) - \phi(A))$$

- Potenzialdifferenz entspricht der Verschiebearbeit pro Ladung
- Verschiebung muss extrem langsam erfolgen, dass $E \to B$ nicth transformiert (Lorentz!)

A.10. Eigenschaften der δ_D -Funktion

Normierung

$$\int \mathrm{d}^n x \delta_D(x) = 1$$

Lokalisierung

$$\int d^n x g(x) \delta_D(x - y) = g(y)$$

$$\int_a^b dx \delta_D(x - c) = \begin{cases} 1 & a \le c \le b \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}$$

Durch Substitution

$$\int \mathrm{d}x \delta_D(ax) = \frac{1}{a}$$

Durch partielle Integration

$$\int dx g(x) \delta'_D(x-a) = g(x) \delta_D(x-a) \Big|_{-\infty}^{+\infty} - \int dx g'(x) \delta_D(x-a)$$
$$= 0 - g'(a)$$

A.11. Feldänderung an einer Oberfläche

Betrachte Oberfläche mit Oberflächenladung σ

$$\sigma = \lim_{\Delta S \to 0} \frac{\Delta q}{\Delta S}$$

wie wird ein elektrischen Feld durch diese Oberfläche beeinflusst? (vor Oberfläche: \vec{E}_1 , nach Oberfläche \vec{E}_2) Dazu wählen Zylinder mit den Mantelflächen parallel zur Oberfläche und Volumen ΔV und, dass der elektrische Full durch die Seitenwände sehr klein ist und nicht zum Integral beiträgt.

$$\int_{\Delta V} \mathrm{d}^3 r' \, \mathrm{div} \, \vec{E} = \int_{\Delta S} \mathrm{d} \, \vec{S} \cdot \vec{E} = 4\pi q = 4\pi \int_{\partial V} \mathrm{d} \, \vec{S} \sigma = \Delta S \Big(E_2^\perp - E_1^\perp \Big)$$

$$\mathbf{Gauß}$$

$$\implies E_2^\perp = E_1^\perp + 4\pi \sigma$$

Wenn das Feld tangential zur Oberfläche ist, kann man stattdessen eine Schleife wählen und den Satz von Stokes benutzen:

$$\int_{\partial} d\vec{r} \, \vec{E} \tau \int_{S} d\vec{S} \operatorname{rot} \, \vec{E} = \left(E_{2}^{\parallel} - E_{1}^{\parallel} \right) \Delta r \to E_{2}^{\parallel} = E_{1}^{\parallel}$$

Außerdem: $\vec{E} = -\nabla \phi \implies \operatorname{rot} \vec{E} = -\operatorname{rot} \nabla \phi = 0.$

A.12. Energie einer statischen Ladungsverteilung

/!\Achtung

Energie + Relativitätstheorie: supervorsichtig!

 $\begin{array}{lll} q_1 \text{ an einer Stelle } \vec{r}_1 & \to & \text{Potential } \phi_1 = \frac{q_1}{|\vec{r} - \vec{r}_1|} \\ q_2 \text{ an einer Stelle } \vec{r}_2 & \to & W_2 = q_2 \cdot \phi_1(\vec{r}_2) \\ q_3 \text{ an einer Stelle } \vec{r}_3 & \to & W_3 = q_3 \cdot (\phi_1(\vec{r}_2) + \phi_2(\vec{r}_3)) \end{array} \quad \text{Man erkennt}$

 q_n an einer Stelle $\vec{r}_n \rightarrow W_n = q_n \cdot \sum_i^{n-1} \phi_i(\vec{r}_n)$

$$W = \sum_{n}^{N} W_{n} = \sum_{n}^{N} q_{n} \sum_{i}^{n-1} \phi_{i}(\vec{r}_{n})$$

$$W = \sum_{n}^{N} q_{n} \sum_{i}^{n-1} \frac{q_{1}}{|\vec{r}_{1} - \vec{r}_{n}|} = \frac{1}{2} \sum_{n}^{N} \sum_{\substack{i \ i \neq n}}^{N} \frac{q_{i}q_{n}}{|\vec{r}_{1} - \vec{r}_{n}|}$$

Korrektur der doppelten Zählung

Kontinuums-Limes

$$\sum_{i} q_{i} \to \int d^{3}r' \rho(\vec{r}')$$

$$W = \frac{1}{2} \int d^{3}r \int d^{3}r' \frac{\rho(\vec{r})\rho(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} = \frac{1}{2} \int d^{3}r \rho(\vec{r}) \underbrace{\int d^{3}r' \frac{\rho(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|}}_{=\phi(\vec{r})}$$

$$= \frac{1}{2} \int d^{3}r \rho(\vec{r})\phi(\vec{r})$$

$$W = -\frac{1}{8\pi} \int d^{3}r \, \triangle \phi \phi = -\frac{1}{8\pi} \int d^{3}r^{3} \phi \, \triangle \phi$$

Poisson-Gleichung $\triangle \phi = -4\pi \rho$

Es gilt: $\phi \triangle \phi = \phi \nabla \cdot (\nabla \phi) = \nabla (\phi \nabla \phi) - \nabla \phi \nabla \phi$

$$W = -\frac{1}{8\pi} \int d^3r \nabla(\phi \nabla \phi) + \frac{1}{8\pi} \int d^3r (\nabla \phi)^2$$
$$= -\frac{1}{8\pi} \int d^3r (\nabla \phi)^2 + \frac{1}{8\pi} \int d^3r \underbrace{(\nabla \phi)^2}_{\vec{E} = -\nabla \phi}$$

Satz von Gauß: $\int d\vec{S}(\phi\nabla\phi) = 0$ für große Volumen, da typischerweise $\phi \sim 1/r$, $\nabla\phi \sim 1/r^2 \implies \phi\nabla\phi \sim 1/r$ $1/r^3$, aber d $\vec{S} \sim r^2$

$$W = \frac{1}{8\pi} \int \mathrm{d}^3 r E^2$$

Energiedichte des elektrischen Felds:

$$\rho_{el} = \frac{\vec{E}^2}{8\pi}$$



| Selbstenergie für $\vec{r}' = \vec{r}$ - keine Lösung in der klassischen Elektrodynamik.

Teil B. Potentialtheorie

B.1 Green-Theoreme

Lösungen der Poisson-Gleichung $\triangle \phi = -4\pi \rho$. 3 Probleme

- 1. Inversion des Differenzialoperators \rightarrow Green-Funktion
- 2. Geometrie der Ladungsverteilung → Multipolentwicklung
- 3. Randbedingungen \rightarrow Green-Theorie

B.1. Green-Theoreme

Es gilt für $\vec{A}(\vec{r}) = \varphi \nabla \psi$

$$\operatorname{div} \vec{A} - \operatorname{div}(\varphi \nabla \psi) = \nabla \varphi \nabla \psi + \varphi \triangle \psi$$

Satz von Gauß:

$$\int_{V} d^{3} \operatorname{div} \vec{A} = \int_{\partial V} d\vec{S} \vec{A}$$

 $\vec{S} = dS \vec{n}, \vec{n} \sim \text{Normalenvektor}$

$$\int_V \mathrm{d}^3 r' \big(\nabla' \varphi \nabla' \psi + \varphi \, \triangle' \psi \big) = \int_{\partial V} \mathrm{d} S \varphi \nabla' \psi \cdot \vec{n} = \int_{\partial V} \mathrm{d} S \varphi \frac{\partial \psi}{\partial n} \quad \text{Erste greensche Identität}$$

 $\varphi \rightleftharpoons \psi$ und Subtraktion der Gleichungen

$$\int_V \mathrm{d}^3 r' \big(\varphi \, \triangle' \psi - \psi \, \triangle' \varphi \big) = \int_{\partial U} \mathrm{d} S \bigg(\varphi \frac{\partial \psi}{\partial n} - \psi \frac{\partial \phi}{\partial n} \bigg) \qquad \qquad \text{Zweite greensche Identität}$$

Wahl der Funktionen

$$\psi = \frac{1}{|\vec{r} - \vec{r}'|}$$

$$\varphi = \phi(\vec{r}')$$
elektrostatisches Potential
$$\Rightarrow \Delta' \psi = \Delta' \frac{1}{|\vec{r} - \vec{r}'|} = -4\pi \delta_D(\vec{r} - \vec{r}')$$

$$\Delta' \varphi = \Delta \phi = -4\pi \rho(\vec{r}') - 4\pi \int_V d^3 r' \phi(\vec{r}) \delta(\vec{r} - \vec{r}') + 4\pi \int_V d^3 r' \frac{\rho(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|}$$

$$= \int_{\partial V} dS' \phi(\vec{r}') \frac{\partial}{\partial n'} \frac{1}{|\vec{r} - \vec{r}'|} - \frac{1}{|\vec{r} - \vec{r}'|} \frac{\partial}{\partial n'} \phi(\vec{r}')$$

Falls \vec{r} innerhalb von V liegt:

$$\int_{V} d^{3}r' \phi(\vec{r}') \delta_{D}(\vec{r} - \vec{r}') = \phi(\vec{r})$$

$$\implies \phi(\vec{r}) = \underbrace{\int_{V} d^{3}r' \frac{\rho(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|}}_{\text{Potenzial aus}} + \frac{1}{4\pi} \int_{\partial V} dS' \left(\underbrace{\frac{\sum_{\substack{\text{Neumann-Raundbedingungen}\\ \overline{\partial n} \text{ auf } \partial V}}_{\text{Potenzial aus}} - \underbrace{\frac{\partial \phi}{\partial n} \text{ auf } \partial V}_{\text{Dirichlet-Randbedingung}} \right)$$
Dirichlet-Randbedingung

 ∂V unendlich weit weg:

$$\frac{1}{|\vec{r} - \vec{r}'|} \frac{\partial}{\partial n} \phi \sim \frac{1}{r^3} \to 0$$
$$\phi \frac{\partial}{\partial n} \frac{1}{|\vec{r} - \vec{r}'|} \sim \frac{1}{r^3} \to 0$$

⇒ nur der erste Term bleibt übrig:

$$\phi(\vec{r}) = \int_V d^3r' \frac{\rho(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|}$$

 $\rho(\vec{r})=0$ innerhalb von V : ϕ bestimmt durch ϕ und $\frac{\partial \phi}{\partial n}$ auf der Oberfläche ∂V .

B.2. Eindeutigkeit des Potenzials

Satz B.2.1 Potenzial ϕ ist eindeutig mit der Vorgabe von Dirichlet **oder** Neumann-Randbedingungen.

Beweis Annahme für Widerspruchsbeweis: 2 Potenziale $\phi_1(\vec{r})$ und $\phi_2(\vec{r})$, beide Lösungen der Poisson-Gleichnug:

$$\triangle \phi_1 = -4\pi\rho$$

$$\triangle \phi_2 = -4\pi\rho$$

$$\triangle \phi_2 = -4\pi\rho$$

Randbedingungen:

$$\begin{aligned} \phi_1 \big|_{\partial V} &= \phi_2 \big|_{\partial V} \\ \frac{\partial \phi_1}{\partial n} \big|_{\partial V} &= \frac{\partial \phi_2}{\partial n} \big|_{\partial V} \end{aligned}$$

1 Green-Theorem mit $U=\phi_1-\phi_2$ und $\varphi=\psi=U$

$$\int_{V} d^{3}r' (\underbrace{U \triangle' U}_{=0} + (\nabla' U)^{2}) = \int_{\partial V} dSU \frac{\partial U}{\partial n}$$

wenn n=0 (Dirichlet) oder $\frac{\partial U}{\partial n'}$ (Neumann)

$$\int_{\partial V} dS U \frac{\partial U}{\partial n} = 0$$

$$\implies \int_{V} d^{3}r' (\nabla' U)^{2} = 0$$

 \implies U ist konstant un V, $\phi_1=\phi_2+{\rm const...}$ Die Potenziale unterscheiden sich nur um eine additive Konstante.

B.3. Green-Funktion \rightarrow Potenzial einer Punktladung

Potenzial einer Punktladung:

$$\triangle \frac{1}{\left|\vec{r} - \vec{r}'\right|} = -4\pi \delta_D (\vec{r} - \vec{r}')$$
Green-Funktion von \triangle

Verallgemeinerung:

$$\Delta G(\vec{r}, \vec{r}') = -4\pi \delta_D(\vec{r} - \vec{r}')$$

$$\operatorname{mit} G(\vec{r}, \vec{r}') = \frac{1}{|\vec{r} - \vec{r}'|} + \underbrace{F(\vec{r}, \vec{r}')}_{\wedge F(\vec{r}, \vec{r}') = 0}$$

 $F(\vec{r}, \vec{r}')$ erfüllt die vakuum-Feldgleichngug $\triangle F = 0 \rightarrow F$ kann benutzt werden, um Randbedingungen zu erfüllen. "Spiegelladungen", Superpositionsprinzip (Elektrodynamik ist linear)

$$\triangle G(\vec{r}, \vec{r}') = \triangle \frac{1}{|\vec{r} - \vec{r}'|} = -4\pi \delta_D(\vec{r} - \vec{r}')$$

$$\implies \int d^3r' \triangle G(\vec{r}, \vec{r}') \rho(\vec{r}') = \triangle \int d^3r' G(\vec{r}, \vec{r}') \rho(\vec{r}')$$

$$= \triangle \int d^3r' \frac{\rho(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|}$$

$$= \triangle \phi = -4\pi \int d^3r' \delta_D(\vec{r} - \vec{r}') \rho(\vec{r}')$$

$$= -4\pi \rho(\vec{r})$$

$$\implies \phi = \int d^3r' \frac{\rho(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} \text{ invertient } \triangle \phi = -4\pi \rho$$

Konstruktion von Green-Funktionen im Fourier-Raum

$$\rho(\vec{k}) \xrightarrow{-\frac{1}{k^2}} \phi(\vec{k})$$

$$\mathcal{F} \qquad \qquad \downarrow \\
\rho(\vec{r}) \longleftarrow \phi(\vec{r})$$

für numerische Berechnungen ist es extrem vorteilhaft, die Fourier-Methode zu benutzen \to "Fast-Fourier-Transform (FFT)".

Faltung der Ladungsverteilung mit der Green-Funktion → Multiplikation im Fourier-Raum.

$$\phi(\vec{r}) = \int d^3r' G(\vec{r}, \vec{r}') \rho(\vec{r}') \to \phi(\vec{k}) = G(\vec{k}) \rho(\vec{k})$$

$$\downarrow \qquad \qquad \downarrow$$

$$\frac{1}{|\vec{r} - \vec{r}'|} \text{ für } \triangle \qquad \qquad -\frac{1}{k^2}$$

Bestimmung von Green-Funktionen aus dem Differenzialoperator.

$$\triangle G(\vec{r}, \vec{r}') = -4\pi\delta(\vec{r} - \vec{r}') \rightarrow \text{Fourier-Transformation}$$

$$\triangle G(\vec{r}, \vec{r}') = \int \mathrm{d}^3k G(k) \, \triangle \exp\left(i\vec{k}(\vec{r} - \vec{r}')\right) = 4\pi \int \mathrm{d}^3k \exp\left(i\vec{k}(\vec{r} - \vec{r}')\right)$$

$$= (i\vec{k})^2 = -k^2 \rightarrow G(k) = -\frac{1}{k^2}$$

$$G(\vec{r}, \vec{r}') = \int \mathrm{d}^3k G(k) \exp\left(i\vec{k}\vec{r}\right) \int \mathrm{d}^3k \left(-\frac{1}{k^2}\right) \exp\left(i\vec{k}\vec{r}\right) \operatorname{mit} \vec{r}' = \vec{0}$$

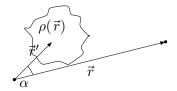
$$= \int k^2 \mathrm{d}k \int \sin\theta \mathrm{d}\theta \int \mathrm{d}\varphi \frac{1}{k^2} \exp(ikr\cos\theta) = 2\pi \int \mathrm{d}k \int_{-1}^{+1} \mathrm{d}\mu \exp(ikr\mu)$$

$$= 2\pi \int \mathrm{d}k \operatorname{sinc}(kr) = \frac{2\pi}{r} \int \mathrm{d}y \operatorname{sinc}(y)$$

$$= \frac{1}{r}$$

B.4. Multipolentwicklung

Idee: Von "weit weg" sieht man nur sphärische Ladungsverteilung. Also zerlege Potenzial in sphärischen Anteil und kleine Korrekturen.



$$\phi(\vec{r}) = \int d^3r' \frac{\rho(\vec{r})}{|\vec{r} - \vec{r}'|}$$
$$\frac{1}{|\vec{r} - \vec{r}'|} = \frac{1}{\sqrt{r^2 - 2rr'\cos\alpha + r^2}}$$

mit $\mu \cos \alpha$:

Annahme
$$r > r'$$
, \vec{r} ist weit weg von der Ladungsverteilung an \vec{r}'

$$= \frac{1}{r} \frac{1}{\sqrt{1 - 2\frac{r'}{r}\mu + \left(\frac{r'}{r}\right)^2}} \stackrel{\uparrow}{=} \frac{1}{r} \left(\mathcal{P}_0(\mu) + \frac{r'}{r} \mathcal{P}_1(\mu) + \left(\frac{r'}{r}\right)^2 \mathcal{P}_2(\mu) + \ldots \right)$$

$$= \sum_{l=0}^{\infty} \frac{r^{l+1}}{r'^l} \mathcal{P}_l(\mu)$$

 $\mathcal{P}_l \sim$ Legendre Polynome, erzeugende Funktion:

$$\frac{1}{\sqrt{1 - 2zx + z^2}} = \sum_{l} \mathcal{P}_l(x)z^l = \mathcal{P}_0(x) + \mathcal{P}_1(x)z + \mathcal{P}_2(x)z^2 + \dots$$

Durch sukksesives Differenzieren kann man durch auswerten an z=0 die \mathcal{P}_l bestimmen:

$$\implies \mathcal{P}_l(\mu) = \frac{1}{2^l l!} \frac{\mathrm{d}^l}{\mathrm{d}\mu^l} (\mu^2 - 1)^l \qquad \qquad \text{Formel von Rodrigues}$$

$$\mathcal{P}_0(\mu) = 1$$

$$\mathcal{P}_1(\mu) = \mu$$

$$\mathcal{P}_2(\mu) = \frac{1}{2} (3\mu^2 - 1)$$

$$\mathcal{P}_3(\mu) = \frac{1}{2} (5\mu^5 - 3\mu^2)$$

Legendre Polynome sind ein Satz orthogonaler Polynome:

$$\int_{-1}^{+1} \mathrm{d}\mu \mathcal{P}_l(\mu) \mathcal{P}_{l'}(\mu) = \frac{2}{2l+1} \delta_{ll'}$$

Additionstheorem: Y_{lm} : spärische-harmonische Funktionen

$$\mathcal{P}_{l}(\mu) = \frac{4\pi}{2l+1} \sum_{m=-l}^{l} Y_{lm}(\theta, \varphi) Y_{lm}^{*}(\theta', \varphi')$$

$$\frac{1}{|\vec{r} - \vec{r}'|} = \sum_{l} \sum_{m=-l}^{+l} \frac{4\pi}{2l+1} \frac{r'^{l}}{r^{l+1}} Y_{lm}(\theta, \varphi) Y_{lm}^{*}(\theta', \varphi')$$

$$\phi(\vec{r}) = \int d^{3}r' \frac{\rho(\vec{r})}{|\vec{r} - \vec{r}'|}$$

$$\implies \phi(\vec{r}) \int d^{3}r' \frac{\rho(\vec{r})}{|\vec{r} - \vec{r}'|} = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^{+l} \frac{4\pi}{2l+1} \frac{1}{r^{l+1}} Y_{lm}(\theta, \varphi) \underbrace{\int d^{3}r' \rho(\vec{r}') r'^{l} Y_{lm}^{*}(\theta', \varphi')}_{q_{lm}}$$

 q_{lm} : Multipol-Moment

Beitrag von q_{lm} zu ϕ ist $\propto \frac{1}{r^{l+1}} \implies$ höhere Multipolmomente haben Beiträge nur auf kleinen Skalen.

• Monopol: $l=0 \implies 1$ Zahl, m=0

$$q_{00} = \int d^3 \rho(\vec{r}') r'^0 Y_{00}(\theta', \varphi') = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \int d^3 r' \rho(\vec{r}') = \frac{Q}{\sqrt{4\pi}}$$

- Dipol $l=1 \implies$ 3 Zahlen, m=-1,0,+1
- Oktupol $l=2 \implies$ 5 Zahlen, m=-2,-1,0,+1,+2
- Hexadekupol $l=3 \implies 7$ Zahlen, m=-3,-2,-1,0,+1,+2,+3
- Multipol $\implies 2l+1$ Zahlen, von -l bis l

Hermitizität:

$$Y_{lm}^* = (-1)^m Y_{lm}$$

$$\implies q_{lm}^* = \int d^3 r' \rho(\vec{r}') r'^l Y_{lm}^* (\theta', \varphi') = (-1)^m \int d^3 r' \rho(\vec{r}') Y_{l,rm}(\theta, \varphi)$$

$$q_{lm}^* = (-1)^m q_{lm}$$

Ladungsverteilung $\rho(\vec{r})$ ist reell \implies nur l+1 unabhängige Momente.

B.5. sphärisch-harmonische Funktionen

Lineares Funktionensystem auf der Kugel (θ, φ) nach dem alle skalaren Funktionen entwickelt werden können.

$$Y_{lm}(\theta,\varphi) = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} \sqrt{\frac{(l-m)!}{(l+m)!}} \mathcal{P}_{lm}(\cos\theta) e^{im\varphi}$$

$$Y_{00}(\theta,\varphi) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \implies \phi(\vec{r}) = \frac{Q}{r}, Q = q_{00}, l = m-0$$

$$Y_{10}(\theta,\varphi) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos\theta$$

$$Y_{11}(\theta,\varphi) = \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin\theta e^{i\varphi}$$

 $\mathcal{P}_{lm}(\cos\theta)$: assoziierte Legendre Polynome

$$\mathcal{P}_{lm}(\mu) = (-1)^m \left(1 - \mu^2\right)^{\frac{m}{2}} \frac{d^m}{d\mu^m} \mathcal{P}_l(\mu)$$

$$\mathcal{P}_{lm}(\mu) = \frac{(-1)^m}{2^l l!} \left(1 - \mu^2\right)^{m/2} \frac{d^{l+m}}{d\mu^{l+m}} (\mu^2 - 1)^l$$

$$\int_{-1}^{+1} d\mu \mathcal{P}_{lm}(\mu) P_{l'm'}(\mu) = \frac{2}{2l+1} \frac{(l+m)!}{(l-m)!} \delta_{ll'}$$

⇒ sphärisch harmonische Funktionen

$$\int_{0}^{2\pi} d\varphi \int_{0}^{\pi} \sin\theta d\theta Y_{lm}(\theta,\varphi) Y_{l'm'}^{*}(\theta,\varphi) = \delta_{ll'} \delta_{mm'}$$

$$\sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^{+l} Y_{lm}(\theta,\varphi) Y_{lm}^{*}(\theta',\varphi') = \delta_{D}(\varphi - \varphi') \underbrace{\delta_{D}(\cos\theta - \cos\theta')}_{=\delta_{D}(\theta - \theta')}$$

$$\mathcal{P}_{l}(\cos\alpha) = \frac{4\pi}{2l+1} \sum_{m=-l}^{+l} Y_{lm}^{*}(\theta,\varphi) Y_{lm}(\theta',\varphi')$$
(Orthogonalität)

in karthesischen Koordinaten:

$$q_{10} = \int d^3r' \rho(\vec{r}) r' Y_{10}(\theta', \varphi') = \int d^3r' \rho(\vec{r}) r' \frac{3}{4\pi} \cos \theta$$

$$q_{11} = \int d^3r' \rho(\vec{r}) r' Y_{10}(\theta', \varphi') = \int d^3r' \rho(\vec{r}) r' \frac{3}{8\pi} \sin \theta (\cos \varphi + i \sin \varphi)$$

intuitives System, Dipolmoment $\vec{p} = q \vec{a}$

$$\rho(\vec{r}) = q \left(\delta_D \left(\vec{r} - \frac{1}{2} \vec{a} \right) - \delta_D \left(\vec{r} + \frac{1}{2} \vec{a} \right) \right)$$

$$\vec{p} = \int d^3 r' \rho(\vec{r}') \vec{r}' = q \int d^3 r' \left(\delta_D \left(\vec{r}' - \frac{\vec{a}}{2} \right) - \delta_D \left(\vec{r}' + \frac{\vec{a}}{2} \right) \right) \vec{r}' = q \vec{a}$$
(Dipolmoment)
$$q_{10} = \int d^3 r' \delta(\vec{r}) \sqrt{\frac{3}{4\pi}} r' \cos \theta' = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} p_z$$

$$q_{11} = \int d^3 r' \delta(\vec{r}) \sqrt{\frac{3}{8\pi}} r' \sin \theta' \left(\cos \varphi' + i \sin \varphi' \right) = \sqrt{\frac{3}{8\pi}} (p_x + i p_y)$$

Quadrupolmomente (l=2)

B.6. Alternativer Zugang zur Multipolentwicklung \rightarrow Taylor-Reihe in kartesischen Koordinaten

Green-Funktion

$$G(\vec{r}') = \frac{1}{|\vec{r} - \vec{r}'|}$$

Taylorentwicklung bei $\vec{r}' = 0$

$$G(\vec{r}') = G(\vec{r}' = \vec{0}) + \sum_{i} \frac{\partial G}{\partial x_{i}'}|_{\vec{r}' = \vec{0}} \cdot x_{i}' + \frac{1}{2!} \sum_{ij} \frac{\partial G}{\partial x_{i}'\partial x_{j}'}|_{\vec{r}' = \vec{0}} \cdot x_{i}'x_{j}' + \dots$$

$$= \sum_{n} \frac{1}{n!} \left(\sum_{i} x_{i}' \frac{\partial}{\partial x_{i}'} \right)^{n} G|_{\vec{r}' = 0} = \sum_{n} \frac{1}{n!} \cdot (\vec{r}' \nabla')^{n} G|_{\vec{r}' = \vec{0}}$$

$$G(\vec{r}') = \frac{1}{|\vec{r} - \vec{r}'|} = \left[\sum_{i} (x_{i} - x_{i}')^{2} \right]^{-1/2}$$

$$G(\vec{r}')|_{\vec{r}' = \vec{0}} = \frac{1}{r}$$

$$\frac{\partial}{\partial x_{i}'} G(\vec{r}')|_{\vec{r}' = \vec{0}} = \frac{x_{i}}{r^{3}}$$

$$\frac{\partial^{2}}{\partial x_{i}'\partial x_{j}'} G(\vec{r}')|_{\vec{r}' = 0} = \frac{3x_{i}x_{j} - r^{2}\delta_{ij}}{r^{5}}$$

$$\phi(\vec{r}) = \int d^{3}r' \rho(\vec{r}') G(\vec{r}, \vec{r}')$$

$$= \int d^{3}r' \rho(\vec{r}') \left(\frac{1}{r} + \sum_{i} \frac{x_{i}x_{i}'}{r^{3}} + \frac{1}{2} \sum_{ij} \frac{3x_{i}x_{j} - r^{2}\delta_{ij}}{r^{5}} x_{i}'x_{j}' + \dots \right)$$

$$= \frac{1}{r} \int d^{3}r' \rho(\vec{r}') + \sum_{i} \frac{x_{i}}{r^{3}} \int d^{3}r' \rho(\vec{r}') x_{i}' + \frac{1}{2} \sum_{ij} \int d^{3}r' \rho(\vec{r}') \frac{3x_{i}x_{j} - r^{2}\delta_{ij}}{r^{5}} x_{i}'x_{j}' + \dots$$

Umschreiben des Quadrupolterms

Quadrupolterm $\times 3$:

$$= \sum_{ij} \frac{3x_{i}x_{j} - r^{2}\delta_{ij}}{r^{5}} \int d^{3}r' \rho(\vec{r}') 3x'_{i}x'_{j} \underbrace{-r'^{2}\delta_{ij} + r'^{2}\delta_{ij}}_{=0}$$

$$= \sum_{ij} \frac{3x_{i}x_{j} - r^{2}\delta_{ij}}{r^{5}} \left(\int \underbrace{d^{3}r' \rho(\vec{r}') (3x'_{i}x'_{j} - r'^{2}\delta_{ij})}_{Q_{ij}} + \int d^{3}r' \rho(\vec{r}') r'^{2}\delta_{ij} \right)$$

2. Term verschwindet:

$$\sum_{ij} \frac{3x_i x_j - r^2 \delta_{ij}}{r^5} \delta_{ij} = 0$$

$$\sum_{ij} x_i x_j \delta_{ij} = \sum_i x_i^2 = r^2$$

$$\sum_{ij} \delta_{ij} \delta_{ij} = \sum_i \delta_{ii} = 3$$

$$\implies \phi(\vec{r}) = \frac{Q}{r} + \frac{\vec{r}\,\vec{p}}{r^3} + \frac{1}{6} \sum_{ij} Q_{ij} \frac{3x_i x_j - r^2 \delta_{ij}}{r^5} + \dots$$

 $Q_{ij}=Q_{ji}\implies$ symmetrische Matrix \implies 6 Einträge! Aber: in sphärischen Koordinaten: $q_{-2,-2}q_{2,-1},q_{2,0},q_{2,1},q_{22}\implies$ 5 Einträge. Es gilt: Q_{ij} ist spurfrei:

$$\sum_{i} Q_{ij} = \sum_{i} \int d^{3}r' \rho(\vec{r}') \left(3x'_{i}x'_{i} - r'^{2}\delta_{ij}\right)$$
$$= \int d^{3}r' \rho(\vec{r}') \left(3\sum_{i} x'_{i}^{2} - r'^{2}\sum_{i} \delta_{ii}\right) = 0$$

B.7. Wechselwirkung einer Ladunsverteilung mit einem externen Feld

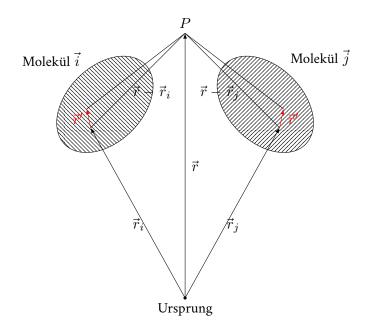
$$W = \int d^3r \rho(\vec{r}) \phi(\vec{r})$$

Subtraktion von $\Delta \phi = 0$, weil die felderzeugende Ladung woanders ist!

$$\begin{split} \phi(\vec{r}) &= \phi(\vec{r}=0) + \sum_{i} x_{i} \frac{\partial \phi}{\partial x_{i}} \Big|_{\vec{r}=\vec{0}} + \frac{1}{2} \sum_{ij} x_{i}^{\uparrow} x_{j} \frac{\partial^{2} \phi}{\partial x_{i} \partial x_{j}} + \dots \\ \Delta \phi &= \sum_{i} \frac{\partial^{2}}{\partial x_{i}^{2}} \phi = \sum_{ij} \delta_{ij} \frac{\partial^{2}}{\partial x_{i} \partial x_{j}} \phi \\ \phi(\vec{r}) &= \phi(\vec{r}=0) + \sum_{i} x_{i} \frac{\partial \phi}{\partial x_{i}} \Big|_{\vec{r}=\vec{0}} + \frac{1}{3!} \sum_{ij} (3x_{i}x_{j} - r^{2}\delta_{ij}) \frac{\partial^{2} \phi}{\partial x_{i} \partial x_{j}} \Big|_{\vec{r}=0} + \dots \\ W &= \underbrace{\int d^{3} r \rho(r)}_{Q} \phi(\vec{r}=0) + \sum_{i} \underbrace{\int d^{3} r \rho(r) x_{i}}_{p_{i}} \cdot \frac{\partial \phi}{\partial x_{i}} \Big|_{\vec{r}=\vec{0}} + \frac{1}{3!} \sum_{ij} \underbrace{\int d^{3} r \rho(r) (3x_{i}x_{j} - r^{2}\delta_{ij}) \cdot \frac{\partial^{2}}{\partial x_{i} \partial x_{j}}}_{Q_{ij}} \Big|_{v=\vec{0}} + \dots \\ &= q \phi(\vec{r}=0) + \vec{p} \nabla \phi \Big|_{\vec{r}=0} + \sum_{ij} Q_{ij} \frac{\partial^{2} \phi}{\partial x_{i} \partial x_{j}} \Big|_{\vec{r}=0} + \dots \end{split}$$

l Multipol wechselwirkt mit der l-fachen Ableitung von ϕ .

B.8. Polarisation und Modelle für Dielektrika



Feld \vec{E}_j an der Stelle \vec{r} , hervorgerufen durch Molekül j

$$\vec{E}_{j}(\vec{r}) = \int d^{3}r' \rho_{j}(\vec{r}') \frac{\vec{r} - \vec{r}_{j} - \vec{r}'}{|\vec{r} - \vec{r}_{j} - \vec{r}'|^{3}} = -\nabla \int d^{3}r' \frac{\rho(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}_{j} - \vec{r}'|}$$

Multipolentwickulng

$$\frac{1}{|\vec{r} - \vec{r}'_j - \vec{r}'|} = \frac{1}{|\vec{r} - \vec{r}_j|} + (\vec{r}'\nabla_j)\frac{1}{|\vec{r} - \vec{r}_j|} + \frac{1}{2}(\vec{r}'\nabla_j)^2 \frac{1}{|\vec{r} - \vec{r}_j|} + \dots$$

$$\implies \vec{E}_j(\vec{r}) = -\nabla \left(\int d^3r' \frac{\rho_j(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}_j|} + \int d^3r' \rho_j(\vec{r}') \vec{r}' \nabla_j \frac{1}{|\vec{r} - \vec{r}_j|} + \dots \right)$$

$$= -\nabla \left(\frac{q_j}{|\vec{r} - \vec{r}_j|} + \vec{p}_j \nabla_j \frac{1}{|\vec{r} - \vec{r}_j|} + \dots \right)$$

Ladungsdichte:

$$\rho(\vec{r}) = \sum_{j} q_{j} \delta_{D}(\vec{r} - \vec{r}_{j})$$

Polarisationsdichte:

$$ec{\pi}(ec{r}) = \sum_{j} ec{p}_{j} \delta_{D}(ec{r} - ec{r}_{j})$$

Summation der Felder zum Kontinuums-Limes:

$$\vec{E}(\vec{r}) = \sum_{j} \vec{E}_{j}(\vec{r}) = -\nabla \left(\sum_{j} \frac{q_{j}}{|\vec{r} - \vec{r}_{j}|} + \vec{p}_{j} \nabla_{j} \frac{1}{|\vec{r} - \vec{r}_{j}|} \right)$$

$$= -\nabla \left(\int d^{3}r' \frac{\rho(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} + \vec{\pi}(\vec{r}') \nabla' \frac{1}{|\vec{r} - \vec{r}'|} \right)$$

$$\text{div } \vec{E} = -\Delta \left(\int d^{3}r' \frac{\rho(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} + \vec{\pi}(\vec{r}) \nabla' \frac{1}{|\vec{r} - \vec{r}'|} \right)$$

$$= -\int d^{3}r' \rho(\vec{r}') \underbrace{\Delta \frac{1}{|\vec{r} - \vec{r}'|} + \vec{\pi}(\vec{r}') \nabla' \Delta \frac{1}{|\vec{r} - \vec{r}'|}}_{=-4\pi\delta_{D}(\vec{r} - \vec{r}')}$$

$$= -\nabla \delta_{D}(\vec{r} - \vec{r}')$$

$$\text{div } \vec{E} = 4\pi \int d^{3}r' \rho(\vec{r}') \delta_{D}(\vec{r} - \vec{r}') - 4\pi \nabla \int d^{3}r' \vec{\pi}(\vec{r}') \delta_{D}(\vec{r} - \vec{r}')$$

$$\text{div } \vec{E} = 4\pi \rho - 4\pi \text{ div } \vec{\pi}$$

$$\text{div } \underbrace{(\vec{E} + 4\pi \vec{\pi})}_{\vec{D}} = 4\pi \rho$$

 $\vec{\pi}$ ist oft abhängig von dem externen Feld (da das externe Feld die Moleküle ausrichtet), dann gilt:

$$\vec{\pi} = \varkappa \vec{E}, \quad \varkappa$$
: Suszeptibilität $\vec{D} = \varepsilon \vec{E}, \varepsilon = 1 + 4\pi \varkappa$

Teil X. orthogonale Funktionensysteme

X.1. orthogonale Funktionensysteme

Satz von Funktionen $\{u_1,\ldots,u_n(x)\}$. Für komplexe Funktionen definiert

$$\langle u_i, u_j \rangle = \int_A^b \mathrm{d} x u_i(x) u_j^*(x) = A_i \delta_{ij} \\ \downarrow \\ \text{Orthogonalitäts relation } A_i = 1 \implies \text{orthonormal.}$$

ein Skalarprodukt.(symmetrisch, bilinear und positiv definit). Norm von $u_i(x)$:

$$\int_a^b \mathrm{d}x u_i(x) u_i^*(x) = A_i$$

 \implies normalisiere u_i :

$$u_i'(x) = \frac{u(x)}{\sqrt{\int_a^b \mathrm{d}x u_i(x) u_i^*(x)}}$$

Bilden die orthonomalen Funktionen eine Basis?

$$g(x) \stackrel{?}{=} \sum_{i}^{n} g_{i}u_{i}(x)$$

$$0 \le \Delta n = \int_{a}^{b} dx \left| g(x) - \sum_{i}^{n} g_{i}u_{i}(x) \right|^{2}$$

$$= \int_{a}^{b} dx g(x)g^{*}(x) - \int_{a}^{b} dx g(x) \sum_{i} g_{i}^{*}u_{i}^{*}(x) - \int_{a}^{b} dx \sum_{i} g_{i}u_{i}(x)g^{*}(x) + \int_{a}^{b} dx \sum_{ij} g_{i}u_{i}(x)g_{j}^{*}u_{j}^{*}$$

$$= \int_{a}^{b} dx g(x)g^{*}(x) - \sum_{i} g_{i}^{*} \int_{a}^{b} dx g(x)u_{i}^{*}(x) - \sum_{i} g_{i} \int_{a}^{b} dx u_{i}(x)g^{*}(x) + \sum_{i} g_{i}g_{j}^{*} \int_{a}^{b} dx u_{i}(x)u_{j}^{*}$$

Minimierung von Δn :

$$\frac{\partial \Delta}{\partial g_i} \stackrel{!}{=} 0 = g_i^* - \int_a^b \mathrm{d}x g^*(x) u_i(x)$$
$$\frac{\partial \Delta}{\partial g_i^*} = g_i - \int_a^b \mathrm{d}x g(x) u_i^*(x)$$
$$\implies g_i = \int_a^b \mathrm{d}x g(x) u_i^*(x)$$

Minimum:

$$\Delta = \int_a^b \mathrm{d}x g(x) g^*(x) - \sum_i g_i g_i^*$$

Konvergenz im quadratischen Mittel

$$\lim_{n \to \infty} \Delta_n \Big|_{min} = \lim_{n \to \infty} \int_a^b \left| \sum_i^n g_i u_i(x) - g(x) \right|^2 = 0$$

Konvergenz gesichert, falls: (Parseval-Reltation/Vollständigkeitsrelation)

$$\int_a^b \mathrm{d}x g(x) g^*(x) = \sum_i g_i g_i^*$$

Bessel-Ungleichnug:

$$\int_{a}^{b} \mathrm{d}x g(x) g^{*}(x) \ge \sum_{i} g_{i} g_{i}^{*}$$

denn:

$$0 \le \int_a^b \mathrm{d}x \left| g(x) - \sum_i^n g_i u_i(x) \right|^2$$

$$= \int_a^b \mathrm{d}x g(x) g^*(x) - 2 \sum_i g_i \int_a^b \mathrm{d}x g^*(x) u_i(x) + \sum_{ij} g_i g_j^* \underbrace{\int_a^b \mathrm{d}x u_i(x) u_i^*(x)}_{=\delta_{ij}}$$

Im Fall $\Delta n = 0$ für $n \to \infty$:

$$\int_a^b \mathrm{d}x g(x) g^*(x) = \sum_i^n g_i g_i^*$$

Was bedeutet das für das Basissystem?

$$\sum_{i} g_{i} g_{i}^{*} = \sum_{i} \int dx g(x) u_{i}^{*}(x) \int dx' g^{*}(x') u_{i}(x')$$

$$= \int_{a}^{b} dx g(x) \int_{a}^{b} dx' g^{*}(x') \underbrace{\sum_{i} u_{i}^{*}(x) u_{i}(x')}_{\delta_{D}(x-x')} \stackrel{?}{=} \int_{a}^{b} dx g(x) g^{*}(x)$$

$$= \int_{a}^{b} g(x) \int_{a}^{b} g^{*}(x') \delta_{D}(x-x') = \int_{a}^{b} g(x) g^{*}(x)$$

dies gilt, wenn: (Anforderung an das Basissystem)

$$\sum_{i} u_i^*(x)u_i(x') = \delta_D(x - x')$$

Basissystem muss in der Lage sein, die δ_D -Funktion darzustellen. Cauchy-Schwarz-Ungleichung \sim Eindeutigkeit der Linearzerlegung:

$$\begin{split} \left(\sum_{i}a_{i}b_{i}\right)^{2} &\leq \sum_{i}a_{i}^{2}\sum_{j}b_{j}^{2} \\ \Longrightarrow |\vec{a}\,\vec{b}|^{2} &\leq \vec{a}^{2}\,\vec{b}^{2} \\ |\vec{a}-\lambda\,\vec{b}|^{2} &= 0 \quad \text{kann nur} \begin{cases} 1 \text{ L\"osung haben} & \text{falls } \vec{a} \parallel \vec{b} \\ \text{keine L\"osung haben} & \text{falls } \vec{a} \parallel \vec{b} \end{cases} \\ &= \vec{a}^{2} - 2\lambda\,\vec{a}\,\vec{b} + \lambda^{2}\,\vec{b}^{2} \\ \Longrightarrow \lambda_{\pm} &= 2\,\vec{a}\,\vec{b} \pm \sqrt{4(\vec{a}\,\vec{b})^{2} - 4\,\vec{a}^{2}\,\vec{b}^{2}} \\ \sqrt{4(\vec{a}\,\vec{b})^{2} - 4\,\vec{a}^{2}\,\vec{b}^{2}} \begin{cases} \text{hat eine L\"osung} & \text{falls } (\vec{a}\,\vec{b})^{2} &= \vec{a}^{2}\,\vec{b}^{2} \\ \text{hat keine L\"osung} & \text{falls } (\vec{a}\,\vec{b})^{2} &< \vec{a}^{2}\,\vec{b}^{2} \end{cases} \end{split}$$

falls $(\vec{a}\vec{b})^2 = \vec{a}^2\vec{b}^2$ ist, sind $\vec{a} \parallel \vec{b}$ und \vec{a} lässt sich durch den Vektor \vec{b} darstellen:

$$\left(\int \mathrm{d}x g(x) h^*(x)\right)^2 \le \int_a^b \mathrm{d}x g(x) g^*(x) \int_a^b \mathrm{d}x h(x) h^*(x)$$
$$\int_a^b \mathrm{d}x (g(x) - \lambda h(x))^2 = \int_a^b \mathrm{d}x g(x) g^*(x) - 2\lambda \int_a^b \mathrm{d}x g(x) h^*(x) + \lambda^2 \int_a^b \mathrm{d}x h(x) h^*(x)$$

dann gleiches Argument

Mögliche Wahlen von orthonormalen Systemen:

 $\triangle \phi = \text{const.} \phi$

Sinus (ungerade) und Konsinus (gerade):

$$\frac{1}{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} dx \sin(nx) \sin(mx) = \delta_{mn}$$
$$\frac{1}{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} dx \cos(nx) \cos(mx) = \delta_{mn}$$

⇒ orthonormale Funktionen:

$$u_m(x) = \frac{1}{\sqrt{\pi}}\sin(mx)$$
$$v_m(x) = \frac{1}{\sqrt{\pi}}\sin(mx)$$

Man erhält die Fourier-Reihe

$$\implies g(x) = \frac{a_0}{2} + \sum_{m=1} a_m \cos(mx) + b_m \sin(mx)$$

$$a_m = \frac{1}{\pi} \int_{-\pi}^{+\pi} dx' g(x') \cos(mx')$$

$$b_m = \frac{1}{\pi} \int_{-\pi}^{+\pi} dx' g(x') \sin(mx')$$

Kontinuumslimit

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \exp(ikx) \exp(ik'x)^* = \delta_D(k - k') \delta_D(x - x') \qquad = \sum_i u_i(x) u_i^*(x')$$
Wellen
$$\sum_n \cos(nx) \cos(nx') = \delta_D(x - x')$$

$$\sum_n \exp(inx) \exp(inx') = \delta_D(x - x')$$

X.2. Kugelflächenfunktionen (spherical harmonics)

 \triangle in Kugelkoordinaten (in 3D), Laplace-Gleichung: $\triangle \phi = 0$:

$$\triangle \phi = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \phi \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial \phi}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \phi$$

Separation der Variablen

$$\phi(r, \theta, \varphi) = R(r) \cdot Y(\theta, \varphi)$$

Radialteil:

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r} \left(r^2 \frac{\mathrm{d}R}{\mathrm{d}r} \right) = \lambda R$$

Lösungen:

$$R(r) = Ar^{\lambda} + Br^{-(1+\lambda)}$$

Winkelteil:

$$\frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin\theta \frac{\partial Y}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2\theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} Y = \lambda Y$$

Separation:

$$Y(\theta, \varphi) = P(\theta)Q(\varphi)$$

in φ -Richtung, harmonische Differentialgleichung:

$$\frac{\mathrm{d}^2 Q}{\mathrm{d}\theta^2} = -m^2 Q$$

in θ -Richtung

$$\lambda \sin^2 \theta + \frac{\sin \theta}{P} \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\theta} \left(\sin \theta \frac{\mathrm{d}P}{\mathrm{d}\theta} \right) = m^2$$

Wellen in φ -Richtung, Periodizität 2π

$$\implies Q(\varphi) \sim \exp(\pm im\varphi)$$

 λ muss gleich l(l+1) mit $l \geq |m|$ sein, damit Lösungen für P existieren. Substitution $\mu = \cos \theta \to \text{Legendre-Differentialgleichung}$

$$\implies 0 = \left(1 - \mu^2\right) \frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\mu^2} P_{lm}(\mu) - 2 \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\mu} P_{lm}(\mu) + \left(l(l+1) - \frac{m^2}{1 - \mu^2}\right) P_{lm}(\mu)$$

Zusammensetzen der Winkellösung

$$Y_{lm}(\theta,\varphi) = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} \sqrt{\frac{(l-m)!}{(l+m)!}} \underbrace{P_{lm} \cos(\theta)}_{=P} \underbrace{\exp(-im\varphi)}_{=Q}$$
 mit
$$\int \mathrm{d}\Omega Y_{lm} Y_{l'm'} = \delta_{ll'} \delta_{mm'}$$