

2.5 Multipolentwicklung

Abgesehen von Spezialfällen ist das Integral in Gl. (2.14) schwierig zu berechnen. Wir führen darum die Multipolentwicklung als Näherungsmethode ein, die auch eine klare physikalische Interpretation zulässt.

2.5.1 Multipolentwicklung in kartesischen Koordinaten

Wir führen die Entwicklung zunächst in kartesischen Koordinaten durch, die einen besseren Anschluss zur Experimentalphysik erlauben aber schwer in hohe Ordnungen zu bringen sind. Die Crux an Gl. (2.14) ist die räumliche Abhängigkeit des Nenners

$$|\vec{r} - \vec{r}'|^{-1} = \sqrt{r^2 + r'^2 - 2\vec{r} \cdot \vec{r}'}^{-1}.$$

Insbesondere das Skalarprodukt am Ende verdient besondere Aufmerksamkeit. Wir gehen jetzt davon aus, dass wir uns weit weg von der Ladungsverteilung befinden, d.h. außerhalb einer Kugel um den Ursprung mit Radius R ist keine Ladung, $\rho = 0$ und wir berechnen das Feld in einem Aufpunkt \vec{r} mit $r \gg R$. Dies erlaubt es, r'/r als kleinen Parameter zu behandeln. Wir nutzen außerdem die binomische Reihenentwicklung

$$(1+x)^{-1/2} = \sum_{k=0}^{\infty} \binom{1/2}{k} x^k = 1 - \frac{x}{2} + \frac{3x^2}{8} + O(x^3). \quad (2.15)$$

Wir entwickeln also

$$|\vec{r} - \vec{r}'|^{-1} = \frac{1}{r} \sqrt{1 - 2\frac{\vec{r} \cdot \vec{r}'}{r^2} + \frac{r'^2}{r^2}}^{-1} = \quad (2.16)$$

$$= \frac{1}{r} \left(1 + \frac{\vec{r} \cdot \vec{r}'}{r^2} + -\frac{1}{2} \frac{r'^2}{r^2} + \frac{3}{2} \frac{(\vec{r} \cdot \vec{r}')^2}{r^4} \right) + O\left(\frac{1}{r^4}\right). \quad (2.17)$$

Hier ist zu beachten, dass wir am Ende einmal einen Term aus der ersten Ordnung von (2.15) mit der zweiten Ordnung kombinieren, weil die beide die gleiche Ordnung in $1/r$ haben. Auch gilt es zu beachten, dass jedes \vec{r} im Zähler natürlich mit $O(r)$ zur Gesamtordnung des betreffenden Terms zählt.

Wir diskutieren jetzt diese drei Ordnungen in $1/r$.

Der erste Term in der Klammer nähert $|\vec{r} - \vec{r}'|^{-1} \simeq 1/r$. In dieser Näherung ist dann Gl. (2.14) näherungsweise

$$\phi(\vec{r}) \simeq \phi_0(\vec{r}) = \frac{Q}{4\pi\epsilon_0 r} \quad Q = \int d^3r \rho(\vec{r}).$$

Diese Ordnung fällt also wie $1/r$ ab und ist allein durch die Gesamtladung Q gegeben. Das Potenzial ist isotrop. Man nennt dies auch den Monopolbeitrag.

In der nächsten Ordnung erhalten wir eine Korrektur in der nächsten Ordnung von der Form

$$\phi_d(\vec{r}) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{\vec{d} \cdot \vec{e}_r}{r^2} \quad \vec{d} = \int d^3r \vec{r} \rho(\vec{r}).$$

Der Vektor \vec{d} ist der über die Ladungsverteilung gewichtet gemittelte Ortsvektor und heißt Dipolmoment. Dieser Beitrag zum Potenzial ist anisotrop auf eine einfache Art und Weise - ihr Betrag hängt vom Winkel des Ortsvektors mit dem Dipolvektor ab. Das Dipolmoment hat als Dimension Ladung mal Länge und skaliert mit QR . Der Beitrag fällt schneller ab als die vorherige Ordnung, nämlich wie $O(R/r^2)$. Zur Berechnung des zugehörigen Dipolfeldes berechnen wir exemplarisch

$$\frac{\partial}{\partial x} \frac{\vec{p} \cdot \vec{r}}{r^3} = \frac{p_x r - 3(\vec{p} \cdot \vec{r}) x/r}{r^4}.$$

Damit erhalten wir insgesamt für den Dipolbeitrag zum Feld

$$\vec{E}_d = \frac{3\vec{r}(\vec{p} \cdot \vec{r}) - r^2 \vec{p}}{4\pi\epsilon_0 r^5}.$$

Trotz der Schreibweise fällt dieses Feld in $O(R/r^3)$ ab und besteht aus einer radialen Komponente die besonders groß ist, wenn man entlang des Dipolmoments schaut, und einer Komponente parallel zum Dipolmoment.

In der nächsten Ordnung, bestehend aus den letzten beiden Termen von Gl. (2.15) schreiben wir diese Terme zunächst etwas um, nämlich

$$\int d^3 r' \rho(\vec{r}') \left[-\frac{r'^2}{r^2} + 3 \frac{(\vec{r}' \cdot \vec{r})^2}{r^4} \right] = \frac{1}{r^4} \vec{r}^T \cdot \overleftrightarrow{Q} \cdot \vec{r}.$$

Hier haben wir die Quadrupolmatrix \overleftrightarrow{Q} definiert als

$$\overleftrightarrow{Q} = \int d^3 r' \left(3\vec{r}' \cdot \vec{r}'^T - r'^2 \overleftrightarrow{1} \right) \rho(\vec{r}').$$

In dieser kompakten Schreibweise ist zu beachten, dass $\overleftrightarrow{1}$ die dreidimensionale Einheitsmatrix ist und dass es sich bei $\vec{r}' \cdot \vec{r}'^T$ um eine Matrix handelt, das sogenannte dyadische Produkt. Beim Skalarprodukt wäre der erste Faktor transponiert und der zweite nicht. Der Eintrag der Matrix an der Stelle ij ist dann

$$Q_{ij} = \int d^3 r' \left(3r'_i r'_j - \delta_{ij} r'^2 \right) \rho(\vec{r}').$$

Es lässt sich leicht zeigen, dass $\sum_i Q_{ii} = 0$, die Matrix ist also spurlos. Außerdem ist sie symmetrisch, was die Zahl der unabhängigen Parameter auf 5 legt. Das resultierende Potenzial

$$\phi_Q(\vec{r}) = \frac{1}{8\pi\epsilon_0} \frac{1}{r^5} \vec{r}^T \cdot \overleftrightarrow{Q} \cdot \vec{r}$$

fällt ab wie $1/r^3$ und ist wiederum anisotroper als das Dipolpotenzial. Daraus lässt sich entsprechend auch wieder das Feld konstruieren. Die Namen Dipol- und Quadrupolmoment lassen sich anhand von Punkt Di- und Quadrupolen verstehen (Übungsaufgabe) die aus 2 bzw. 4 entgegengesetzten Punktladungen bestehen. Wir sehen, dass mit ansteigender Ordnung das Potenzial immer

schneller abfällt und immer anisotroper wird. Dies lässt sich (Vorlesung!) grafisch leicht verstehen: Je weiter man weg ist, desto mehr gleichen sich Ladungen von unterschiedlichen Orten aus, da der Unterschied in der Entfernung zwischen Aufpunkt und verschiedenen Punkten in der Ladungsverteilung immer unwichtiger wird.

2.5.2 Kugelflächenfunktionen

An der Art der gerade durchgeführten Entwicklung sehen wir, dass es schwierig ist, diese in höhere Ordnung zu treiben. Zum einen wird die Buchhaltung der verschiedenen Terme immer schwieriger, da wir Ordnungen im anisotropen Term mit denen des r'^2 Terms vermischen. Zum anderen bekommen wir dann Tensoren höherer Stufe. Da wir aber schon gesehen haben, dass das auch eine Entwicklung im Grad der Anisotropie der Ladungsverteilung ist, wollen wir eine ähnliche Vorgehensweise jetzt in Kugelkoordinaten anwenden. Wir folgen weitestgehend der sehr vollständigen, wenn auch auf ersten Blick nonchalant wirkenden Darstellung aus Kapitel 20 von Schwinger.

Wir diskutieren zunächst die Zusammenhänge zwischen verschiedenen Lösungen der Laplacegleichung für $r > 0$.

Gradienten von Lösungen Ist $\phi(\vec{r})$ eine Lösung der Laplacegleichung, dann ist $(\vec{a} \cdot \vec{\nabla}) \phi(\vec{r})$ eine Lösung der Laplacegleichung.

Dies ist klar, denn die Anwendung des Laplaceoperators kann mit der Anwendung partieller Ableitungen vertauscht werden, ebenso die Bildung linearer Kombinationen aus diesen partiellen Ableitungen.

Damit können wir per Induktion schließen, dass für beliebige Vektoren $\vec{a}_1, \dots, \vec{a}_l$ auch

$$\left[(\vec{a}_1 \cdot \vec{\nabla}) \cdots (\vec{a}_l \cdot \vec{\nabla}) \right] \frac{1}{r} \equiv \frac{1}{r^{2l+1}} f_l(\vec{r}) \quad (2.18)$$

eine Lösung der Laplacegleichung für $r > 0$ ist.

Homogenität Das oben definierte $f_l(\vec{r})$ ist eine homogene Funktion vom Grad l , d.h. $f(s\vec{r}) = s^l f(\vec{r})$.

Wir schreiben den Gradienten in Kugelkoordinaten als $\vec{\nabla} = \hat{e}_r \partial_r + \hat{e}_\theta \frac{1}{r} \partial_\theta + \hat{e}_\phi \frac{1}{r \sin \theta} \partial_\phi$. Unter der Transformation $r \rightarrow sr$ $\vec{\nabla} \rightarrow s^{-1} \vec{\nabla}$. Damit transformiert sich die linke Seite von Gl. (2.18) mit s^{-l-1} woraus die Behauptung folgt.

Inversion Ist $\phi(\vec{r})$ eine Lösung der Laplacegleichung für $r > 0$, dann ist dies auch $\psi(\vec{r}) = \frac{1}{r} \phi(\vec{r}/r^2)$.

Dies lässt sich leicht nachrechnen, wenn man beide Funktionen in Kugelkoordinaten ausdrückt und den Laplaceoperator in Kugelkoordinaten

$$\Delta = \frac{1}{r^2} \partial_r (r^2 \partial_r) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \partial_\theta (\sin \theta \partial_\theta) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \partial_\phi^2 \quad (2.19)$$

benutzt. Als Korrolar sehen wir, dass die so definierte Inverse der rechten Seite von Gl. (2.18) gerade $f_l(\vec{r})$ ist, somit ist $f_l(\vec{r})$ eine Lösung der Laplacegleichung für $r > 0$.

Homogene Polynome Motiviert durch diese Ergebnisse konzentrieren wir uns auf Lösungen der Laplacegleichung, die homogene Polynome vom Grad l sind. Wieviele linear unabhängige Lösungen gibt es? Nun, eine Basis des Raums aller Polynome sind die Monome $x^{k_1}y^{k_2}z^{k_3}$. Wir wollen das erst in zwei Dimensionen klären: Von den $x^{k_1}y^{k_2}$ fordern wir den Grad $n=k_1+k_2$. Dies führt zu $n+1$ unabhängigen Monomen vom Grad n . In drei Dimensionen geben wir zunächst k_3 einen festen Wert. Damit ist $k_1+k_2=l-k_3$. Für diesen Wert gibt es nach dem eben gesagten $l-k_3+1$ Möglichkeiten. Wenn wir das jetzt über k_3 summieren sehen wir, dass es $\frac{1}{2}(l+1)(l+2)$ solcher Monome gibt.

Wieviele dieser Monome lösen jetzt die Laplacegleichung? Nach zweimaligem Differenzieren entsteht ein Monom vom Grad $l-2$. Analog zu oben gibt es davon $\frac{1}{2}l(l-1)$ Stück. Dieses muss aber null sein, d.h. dies ist die Zahl der Einschränkungen. Die Gesamtzahl an Monomen vom Grad l die die Laplacegleichung lösen ist damit

$$\frac{1}{2}(l+1)(l+2) - \frac{1}{2}l(l-1) = 2l+1.$$

Dies ist ein bemerkenswertes Ergebnis. Wenn wir auf die Multipolmomente Ladung, Dipolmoment, und Quadrupolmoment zurückblicken so sehen wir, dass dies Beispiele für unsere Konstruktion sind: Es sind homogene Funktionen vom Grad $-l-1$ und es gibt 1,3, bzw. 5 von ihnen.

Zusammengefasst haben wir Lösungen der Laplacegleichung behandelt (ohne sie ausdrücklich zu konstruieren), die homogene Funktionen vom Grad l sind und zusammenhängen mit homogenen Funktionen vom Grad $-l-1$ zusammenhängen. In Kugelkoordinaten können wir die r -Abhängigkeit (die die Homogenität bestimmt) und die Winkelabhängigkeit separieren und diese beiden Gruppen von Lösungen schreiben als

$$r^l Y_{l,m}(\theta, \phi) \quad r^{-l-1} Y_{l,m}(\theta, \phi).$$

Die Funktionen $Y_{l,m}$ heißen *Kugelflächenfunktionen*.

Form der Kugelflächenfunktionen Wir wollen jetzt die $Y_{l,m}$ systematisch konstruieren. Wir machen das über den Ansatz der Lösung als homogene Funktion vom Grad l . Insbesondere fragen wir uns, unter welchen Bedingungen das Monom $(\vec{a} \cdot \vec{r})^l$ eine Lösung der Laplacegleichung ist. Wir differenzieren zwei Mal und erhalten

$$\Delta (\vec{a} \cdot \vec{r})^l = l(l-1) \vec{a}^2 (\vec{a} \cdot \vec{r})^{l-2} = 0.$$

Für $l \geq 2$ kann dies nur erreicht werden, wenn $\vec{a}^2 = 0$ was auch zwangsläufig zu einem komplexen \vec{a} führt. Wir definieren die komplexen Kombinationen $a_x + ia_y = \xi_-^2$ und $a_x - ia_y = -\xi_+^2$. Die komplexen Zahlen ξ_{\pm} sind dabei völlig beliebig und unabhängig, was wir gleich benutzen werden. Es folgt dann mittels

$$0 = \vec{a}^2 = (a_x - ia_y)(a_x + ia_y) + a_z^2$$

automatisch dass $a_z = \xi_+ \xi_-$ sein muss. Damit können wir den Winkelanteil schreiben

$$\begin{aligned}\vec{a} \cdot \hat{e}_r &= \frac{1}{2} (a_x - ia_y) \frac{x + iy}{r} + \frac{1}{2} (a_x + ia_y) \frac{x - iy}{r} + a_z \frac{z}{r} \\ &= \frac{1}{2} [-\xi_+^2 \sin \theta e^{i\phi} + \xi_-^2 \sin \theta e^{-i\phi} + 2\xi_+ \xi_- \cos \theta].\end{aligned}$$

Dies erheben wir jetzt in die l -te Potenz und betreiben dann quadratische Ergänzung

$$\begin{aligned}(\vec{a} \cdot \hat{e}_r)^l &= \left(\frac{\xi_+^2 e^{i\phi}}{2 \sin \theta} \right)^l \left[\left(\frac{\xi_-}{\xi_+} \sin \theta e^{-i\phi} \right)^2 + 2 \frac{\xi_-}{\xi_+} \sin \theta \cos \theta e^{-i\phi} - \sin^2 \theta \right]^l \\ &= \left(\frac{\xi_+^2 e^{i\phi}}{2 \sin \theta} \right)^l \left[\left(\frac{\xi_-}{\xi_+} \sin \theta e^{-i\phi} + \cos \theta \right)^2 - 1 \right]^l.\end{aligned}$$

Jetzt betrachten wir einmal den Ausdruck in den eckigen Klammern. Diesen können wir schreiben als

$$[(\delta z + z_0)^2 - 1]^l = \sum_{s=0}^{2l} \frac{\delta z^m}{m!} \frac{d^s}{dz_0^s} (z_0^2 - 1)^l$$

wobei wir im zweiten Schritt eine Taylorentwicklung von $(z^2 - 1)^l$ um $z = z_0$ vorgenommen haben, die nach $2l$ - Termen enden muss, da wir ja ein Polynom der Ordnung $2l$ entwickeln. Die Taylorentwicklung eines Polynoms mag wie eine ungewöhnliche Maßnahme wirken ist aber sehr wirkungsvoll zur Verschiebung des Ursprungs. Wir setzen dies oben ein und substituieren $m = l - s$ und erhalten

$$\begin{aligned}(\vec{a} \cdot \hat{e}_r)^l &= \frac{\xi_+^{2l} e^{il\phi}}{2^l \sin^l \theta} \sum_{m=-l}^l \frac{1}{(l-m)!} \left(\frac{\xi_-}{\xi_+} \sin \theta e^{-i\phi} \right)^{l-m} \frac{d^{l-m}}{d \cos^{l-m} \theta} (\cos^2 \theta - 1)^l \\ &= l! \sum_{m=-l}^l \frac{\xi_+^{l+m} \xi_-^{l-m}}{\sqrt{(l-m)! (l+m)!}} \sqrt{\frac{(l+m)!}{(l-m)!}} \sin^{-m} \theta e^{im\phi} \frac{d^{l-m}}{d \cos^{l-m} \theta} \frac{(\cos^2 \theta - 1)^l}{2^l l!}.\end{aligned}$$

Im letzten Schritt haben wir einfach ein wenig ummultipliziert. Da die ξ_{\pm} beliebig waren und auf der linken Seite (aufgrund der Parameterisierung) auf jeden Fall eine Lösung der Laplacegleichung steht, ist rechts jeder Term eine Lösung der Laplacegleichung. Wir haben aus einer Lösung als $2l + 1$ Lösungen generiert. Wie definieren

$$\psi_{lm} = \frac{\xi_+^{l+m} \xi_-^{l-m}}{\sqrt{(l-m)! (l+m)!}}$$

und benutzen das bisher gewonnene zur Definition (mit geeigneter Vorfak-

torkonvention - dazu später - der Kugelflächenfunktionen

$$\begin{aligned} \frac{(\vec{a} \cdot \vec{r})^l}{l!} &= r^l \sum_{m=-l}^l \psi_{lm} \sqrt{\frac{4\pi}{2l+1}} Y_{lm}(\theta, \phi) \\ Y_{lm}(\theta, \phi) &= \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} \sqrt{\frac{(l+m)!}{(l-m)!}} e^{im\phi} (\sin\theta)^{-m} \frac{d^{l-m}}{d \cos^{l-m} \theta} \frac{(\cos^2 \theta - 1)^l}{2^l l!}. \end{aligned} \quad (2.20)$$

Grundeigenschaften der Kugelflächenfunktionen Wir sehen an Gleichung (2.20), dass die Transformation $\xi_+ \leftrightarrow \xi_-$, $\theta \leftrightarrow -\theta$ und $\phi \leftrightarrow -\phi$ die Gleichung invariant lässt, d.h. für die Kugelflächenfunktionen

$$Y_{lm}(\theta, \phi) = Y_{l,-m}(-\theta, -\phi)$$

was uns die alternative (und oft praktischere Darstellung) liefert

$$Y_{lm}(\theta, \phi) = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} \sqrt{\frac{(l-m)!}{(l+m)!}} e^{im\phi} (-\sin\theta)^m \frac{d^{l+m}}{d \cos^{l+m} \theta} \frac{(\cos^2 \theta - 1)^l}{2^l l!}. \quad (2.21)$$

Wir listen Beispiele für niedrige Indexwerte

$$\begin{aligned} Y_{00} &= \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \\ Y_{10} &= \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos\theta \\ Y_{1\pm 1} &= \mp \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin\theta e^{\pm i\phi} \\ Y_{20} &= \sqrt{\frac{5}{16\pi}} (3 \cos^2 \theta - 1) \\ Y_{2\pm 1} &= \mp \sqrt{\frac{15}{8\pi}} \cos\theta \sin\theta e^{\pm i\phi} \\ Y_{2\pm 2} &= \sqrt{\frac{15}{32\pi}} \sin^2 \theta e^{\pm 2i\phi} \end{aligned} \quad (2.22)$$

Wir können weitere Eigenschaften ablesen: Der polare Anteil windet sich m mal um die Kugel, der azimuthale Anteil ist ein Polynom l ter Ordnung mit entsprechend vielen Nullstellen. Die Funktionen werden also mit steigenden Indizes immer anisotroper.

Orthogonalität Eine für praktische Rechnungen wichtige Eigenschaft der Kugelflächenfunktionen ist ihre Orthogonalität. Wir studieren dazu das Integral

$$\int d\Omega (\vec{a}^* \cdot \hat{e}_r)^l (\vec{a} \cdot \hat{e}_r)^{l'}$$

Da wir über alle Richtungen integrieren muss das Ergebnis ein rotationsinvarianter Skalar sein. Da $\vec{a}^2 = \vec{a}^{*2} = 0$ ist gibt es nur $\vec{a} \cdot \vec{a}^*$. Diese Kombination taucht genau dann als einzige auf, wenn $l = l'$ ist. Damit ist das Integral

$$\int d\Omega (\vec{a}^* \cdot \hat{e}_r)^l (\vec{a} \cdot \hat{e}_r)^{l'} = \delta_{ll'} C_l (\vec{a}^* \cdot \vec{a})^l.$$

Der Koeffizient C_l ist unabhängig von \vec{a} und \vec{a}^* so lange wie $\vec{a}^2 = 0$ ist. Wir wählen $\vec{a} = (1, i, 0)^T$. Damit ist das Integral (nur im Fall $l = l'$)

$$\begin{aligned} \int d\Omega (\sin \theta e^{-i\phi})^l (\sin \theta e^{i\phi})^l &= \int_{-1}^1 d \cos \theta \sin^{2l} \theta \int_0^{2\pi} d\phi \\ &= 2\pi \int_{-1}^1 dz (1 - z^2)^l \\ &= 4\pi \frac{(2^l l!)^2}{(2l + 1)!}. \end{aligned}$$

Den letzten Schritt kann man leicht mit vollständiger Induktion und partieller Integration zeigen. Wenn wir jetzt die Entwicklung (2.20) einsetzen, dann finden wir

$$\begin{aligned} \int d\Omega \frac{(\vec{a}^* \cdot \hat{e}_r)^l}{l!} \frac{(\vec{a} \cdot \hat{e}_r)^{l'}}{l'!} &= 4\pi \delta_{ll'} \frac{2^l}{(2l + 1)!} (\vec{a}^* \cdot \vec{a})^l \\ &= \sum_{m, m'} \psi_{l'm'}^* \psi_{lm} \sqrt{\frac{4\pi}{2l + 1}} \sqrt{\frac{4\pi}{2l' + 1}} \int d\Omega Y_{l'm'}^* Y_{lm}. \end{aligned}$$

Um einen vernünftigen Koeffizientenvergleich durchführen zu können, müssen wir $(\vec{a} \cdot \vec{a}^*)^l$ nach Potenzen von ξ_{\pm} sortieren. Wir finden mittels der binomischen Formel

$$\begin{aligned} \frac{2^l (\vec{a} \cdot \vec{a}^*)^l}{(2l + 1)!} &= \frac{(\xi_+^* \xi_+ + \xi_-^* \xi_-)^{2l}}{(2l + 1)!} \\ &= \frac{1}{(2l + 1)!} \sum_{m=-l}^l \frac{(2l)!}{(l + m)! (l - m)!} (\xi_+^* \xi_+)^{l+m} (\xi_-^* \xi_-)^{l-m} \\ &= \frac{1}{2l + 1} \sum \psi_{lm}^* \psi_{lm} \end{aligned}$$

Da klarerweise die Diskussion nur $m = m'$ beinhaltet, liefert Koeffizientenvergleich die Orthogonalitätsrelation

$$\int d\Omega Y_{l'm'}^* Y_{lm} = \delta_{ll'} \delta_{mm'}. \quad (2.23)$$

Legendrepolynome Da Kernelement der azimuthalen Abhängigkeit der Kugelflächenfunktionen sind die Legendrepolynome

$$P_l(x) = \frac{d^l}{dx^l} \frac{(x^2 - 1)^l}{2^l l!}.$$

Dies sind Polynome vom Grad l die so normiert sind, dass $P_l(1) = 1$ ist.

2.5.3 Multipolentwicklung in Kugelkoordinaten

Wir haben jetzt viele Eigenschaften der Kugelflächenfunktionen kennengelernt - wie helfen sie uns, elektrostatische Aufgaben zu lösen und insbesondere das Greensfunktionsintegral zu knacken?

Unsere Rechnung spielt sich in Kugelkoordinaten ab, d.h. wir benutzen die entsprechende Darstellung des Laplaceoperators Gl. Inversion. Wir haben schon gezeigt, dass für $r > 0$ die Funktionen $r^l Y_{lm}(\theta, \phi)$ und $r^{-l-1} Y_{lm}(\theta, \phi)$ Lösungen der Laplacegleichung sind. Wenn wir uns jetzt den Radialteil hernehmen finden wir

$$\frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{d}{dr} \right) \left\{ \frac{r^l}{r^{-l-1}} \right\} = l(l+1) \left\{ \frac{r^l}{r^{-l-1}} \right\}$$

weshalb wir auch gezeigt haben, dass

$$\left[l(l+1) + \frac{1}{\sin \theta} \partial_\theta (\sin \theta \partial_\theta) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \partial_\phi^2 \right] Y_{lm}(\theta, \phi) = 0$$

ist. Wir wollen jetzt die Greensche Funktion, also die Lösung von (2.12) konstruieren. Dazu schreiben wir das Diracdelta auf der rechten Seite in Kugelkoordinaten um

$$\delta^3(\vec{r} - \vec{r}') = \frac{1}{r^2} \delta(r - r') \frac{1}{\sin \theta} \delta(\theta - \theta') \delta(\phi - \phi')$$

(zum Beweis brauchen Sie die Substitutionsregel im Integral, Übungsaufgabe!). Damit brauchen wir für $r \neq r'$ eine Lösung der Laplacegleichung und setzen an, unter Berücksichtigung der Randbedingungen

$$G(\vec{r} - \vec{r}') = \begin{cases} \sum_{lm} A_{lm}(\theta', \phi') r^l Y_{lm}(\theta, \phi) & \text{für } r < r' \\ \sum_{lm} B_{lm}(\theta', \phi') r^{-l-1} Y_{lm}(\theta, \phi) & \text{für } r > r' \end{cases} \quad (2.24)$$

mit zu bestimmenden Koeffizienten A_{lm} und B_{lm} . An der Stelle $r = r'$ hätten wir jetzt gerne, dass die Funktion stetig ist, die Ableitung aber springt gemäß

$$-r^2 \frac{\partial G}{\partial r} \Big|_{r'-0+}^{r'+0+} = \frac{4\pi}{\sin \theta} \delta(\theta - \theta') \delta(\phi - \phi').$$

Zum Herleiten dieser Beziehung haben wir die Laplacegleichung über eine infinitesimale Kugelschale um $r = r'$ integriert. Wenn wir unseren Ansatz in die

Stetigkeitsbedingung einsetzen erhalten wir $r^l A_{lm} = r'^{l-1} B_{lm}$. Die Koeffizienten sind also nicht unabhängig, sondern können beide durch eine einzige Größe C_{lm} ausgedrückt werden gemäß

$$A_{lm} = r'^{l-1} C_{lm} \quad B_{lm} = r^l C_{lm}. \quad (2.25)$$

Die Anschlussbedingung für die Ableitung liefert

$$\begin{aligned} \sum_{lm} \left[(l+1) \frac{B_{lm}}{r'^l} + l r'^{l+1} A_{lm} \right] Y_{lm}(\theta, \phi) &= \\ \sum_{lm} (2l+1) C_{lm}(\theta', \phi') Y_{lm}(\theta, \phi) &= \frac{4\pi}{\sin \theta} \delta(\theta - \theta') \delta(\phi - \phi') \end{aligned} \quad (2.26)$$

Hier können wir jetzt die Orthonormierung benutzen, d.h. wir multiplizieren beide Seiten mit $Y_{lm}^*(\theta, \phi)$ und integrieren über den Raumwinkel Ω . Dies liefert

$$C_{lm} = \frac{4\pi}{2l+1} Y_{lm}^*(\theta', \phi').$$

Wenn wir dies wieder in Gl. (2.26) einsetzen, dann erhalten wir

$$\sum_{lm} Y_{lm}(\theta, \phi) Y_{lm}^*(\theta', \phi') = \frac{1}{\sin \theta} \delta(\theta - \theta') \delta(\phi - \phi').$$

Dieser Ausdruck mag auf den ersten Blick einer Orthonormiertheitsbedingung ähneln, aber die Indizes scheinen vertauscht. Tatsächlich ist das die *Vollständigkeitsrelation* für die Kugelflächenfunktionen - was rechts steht ist eine Art Einheitsmatrix zumindest für den Winkelteil der Kugelkoordinaten, links steht letztlich, dass wir durch das Zusammenfügen der Kugelflächenfunktionen die Einheit herstellen, also Vektoren auf sich selbst abbilden. Diese Art der Argumentation wird in der Quantenmechanik gang und gäbe sein - hier wird sie nachher in die Rechenmethode zur Anwendung der Multipolentwicklung einfließen. Dies zeigt uns auch, dass unser nonchalanter Ansatz, homogene Polynome zu suchen, und genügend Funktionen geliefert hat.

Jetzt können wir die Greensche Funktion aufschreiben, indem wir Gln. (2.24)(2.25) kombinieren zu

$$\begin{aligned} G(\vec{r} - \vec{r}') &= \frac{1}{4\pi |\vec{r} - \vec{r}'|} = \sum_{l=0}^{\infty} \frac{1}{2l+1} \frac{r'^l}{r_{>}^{l+1}} \sum_{m=-l}^l Y_{lm}(\theta, \phi) Y_{lm}^*(\theta', \phi') \\ r &= \min_{\max} \{r, r'\}. \end{aligned} \quad (2.28)$$

Damit können wir die Lösung eines elektrostatischen Problems schreiben, indem wir innere und äußere Multipolmomente definieren

$$\begin{aligned} q_{lm}^>(r) &= \int_0^r dr' r'^{l+2} \int d\Omega' Y_{lm}^*(\theta', \phi') \rho(\vec{r}') \\ q_{lm}^<(r) &= \int_r^\infty dr' r'^{l-1} \int d\Omega' Y_{lm}^*(\theta', \phi') \rho(\vec{r}') \end{aligned} \quad (2.29)$$

Diese sind nicht mehr von der Räumlichen Orientierung des Aufpunkts \vec{r} abhängig. Das gesamte Potenzial können wir dann als Kombination von inneren und äußeren Beiträgen schreiben

$$\phi(\vec{r}) = \frac{1}{\epsilon_0} \sum_{lm} \frac{1}{2l+1} \left[\frac{q_{lm}^>(r)}{r^{l+1}} + q_{lm}^<(r) r^l \right] Y_{lm}(\theta, \phi).$$

In praktischen Berechnungen von $q_{lm}^{> / <}$ können wir die Orthogonalität der Kugelflächenfunktionen (2.23) nutzen. Wir sehen, dass wenn der Aufpunkt außerhalb der Ladungsverteilung liegt, ist $q_{lm}^< = 0$ und das Potenzial fällt schneller ab, je höher der Multipolindex l ist, wie r^{-l-1} . Auch bedeutet höheres l dass die Ladungsverteilung und das Potenzial entsprechend anisotroper werden, siehe die Diskussion über die Eigenschaften der Kugelflächenfunktionen oben.

2.5.4 Beispiel: Doppelhalbkugelschale

Als Beispiel für diese Methode betrachten wir zwei hohle Halbkugelschalen vom Radius R , die entgegengesetzte Ladungen $\pm q$ tragen. Die Ladungsdichte ist also damit

$$\rho(r, \theta) = \sigma \delta(r - R) \text{sign}(\cos \theta)$$

wobei $\text{sign} x = x/|x|$ die Vorzeichenfunktion ist. Zunächst mal berechnen wir die Ladung der oberen Kugelschale

$$q = \rho \int dr r^2 \delta(r - R) \int_0^1 d \cos \theta \int d\phi = 2\pi \sigma R$$

also $\sigma = q/2\pi R^2$. Uns interessiert das Potenzial außerhalb, $r > R$. Für das Winkelintegral in Gl. (2.29) benötigen wir zunächst das azimuthale Integral. Gemäß Gl. (2.21) brauchen wir

$$\int_0^{2\pi} d\phi \rho(r, \theta) e^{im\phi} = 2\pi \rho(r, \theta) \delta_{m0}.$$

Wir sehen also, aufgrund der azimuthalen Symmetrie, also der ϕ -Unabhängigkeit von ρ tragen nur Terme mit $m = 0$ bei. Damit haben wir nur

$$Y_{l0}(\theta, \phi) = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} \frac{d^l}{d \cos^l \theta} \frac{(\cos^2 \theta - 1)^l}{2^l l!}$$

zu benutzen. Wir sehen, dass dieses Polynom in $\cos \theta$ den Grad l hat und für (un)gerades l (un)gerade in $\cos \theta$ ist. Damit tragen nur ungerade l zum Integral

$$q_{l0}^> = 2qR^l \int_0^1 d \cos \theta Y_{l0}(\theta, \phi)$$

bei. Dies können wir noch ein wenig umformen zu, mit $l = 2k+1$

$$q_{2k+1,0}^> = \sqrt{\frac{4k+3}{4\pi}} q R^{2k+1} \frac{1}{2^{2k} (2k+1)!} \frac{d^{2k}}{d \cos^{2k} \theta} (\cos^2 \theta - 1)^{2k+1} \Big|_0^1.$$

An der oberen Grenze erhalten wir immer den Wert null, da bei $2k$ Ableitungen von $2k + 1$ Faktoren immer einer übrig bleibt. Wir haben also nur den Beitrag von der unteren Grenze. Andererseits haben wir durch das letzte Differenzieren immer einen Faktor $\cos\theta$, der an der unteren Grenze verschwindet, es sei denn $k = 0$. Damit bleibt nur der Dipolbeitrag $q_{1,0}^> = \sqrt{\frac{3}{4\pi}}qR$. Insgesamt erhalten wir für das Potenzial, mittels Gl. (2.22)

$$\phi(|\vec{r}| > R) = \frac{q}{4\pi\epsilon_0} \frac{R}{r^2} \cos\theta.$$

2.6 Randwertprobleme der Elektrostatik

Wir haben uns jetzt einen Satz von Methoden zurecht gelegt, mit denen wir elektrostatische Probleme lösen können, bei denen die triviale Randbedingung $\phi(r \rightarrow \infty) \rightarrow \infty$ angenommen wird, die Ladungen sich also im leeren Raum bewegen. In der Praxis können wir das meist nicht annehmen. Stattdessen können Randbedingungen auf Flächen S vorgegeben sein. Man unterscheidet hierbei

- metallische Flächen: In Metallen können sich Ladungen frei bewegen, wenn sie elektrischen Feldern ausgesetzt sind. In der in diesem Kapitel diskutierten *statischen* Situation tritt dies nicht auf, darum sollten im Metall keine elektrischen Felder existieren. Im Inneren des Metalls sind diese dann auch von Oberflächenladungen abgeschirmt, darum müssen wir uns nicht weiter kümmern. An der Oberfläche können senkrechte Felder ebenfalls die Ladung nicht bewegen (Austritt von Elektronen durch starke Potentiale sei hierbei außer Acht gelassen). Entscheidend ist es dann, dass Felder, die *tangenzial* zur Metalloberfläche stehen, verschwinden. Das wird erreicht, indem das Potenzial auf der Metalloberfläche konstant gehalten wird. Der Wert kann dabei durch Anschluss an eine entsprechende Apparatur vorgegeben werden. Noch allgemeiner könnten wir uns vorstellen, dass eine Oberfläche aus lauter kleinen Metallsegmenten vorliegt, auf denen individuell ein Potenzial vorgegeben wird. Mathematisch nennen wir all diese Fälle einer Randbedingung mit vorgegebenem Potenzial die *Dirichlet-Randbedingung*.
- isolierende Flächen: Auf isolierenden Flächen, z.B. an der Oberfläche polarer Nichtleiter, sitzen i.A. starke Ladungen nahe der Oberfläche. Diese geben das elektrische Feld auf der Oberfläche vor. Hier spricht man von der *von-Neumann-Randbedingung*.

Im Allgemeinen sind in elektrostatischen Problemen gemischte Randbedingungen vorgegeben. Wir wollen jetzt unsere Greensfunktionsmethode dahingehend erweitern, dass wir exemplarisch den Fall von Dirichlet-Randbedingungen behandeln, was uns zur Methode der Spiegelladungen führen wird. Die Konstruktion des von-Neumann-Falls geht ganz analog