Wdh · Effekte d. Freq.-Abhängigkeit Dipolst.

· N ident. Streuzentren

$$\left.\frac{d\sigma}{d\Omega}\right|_N = \left.\frac{d\sigma}{d\Omega}\right|_1 \cdot |F(\underline{q})|^2 \qquad F(\underline{q}) = \sum_{j=1}^{N} e^{-i\underline{q}\cdot\underline{r}_j}$$

$\underline{k}-k\underline{e}_r$ Pos. von j-ten Streuz.

$\underline{e}_r$

Freq. Licht

* Kristall $\sin\frac{\vartheta}{2} = \frac{\lambda}{2a}\sqrt{h_x^2+h_y^2+h_z^2}$ $\quad h_i \in \mathbb{Z}$

$\vartheta = \sphericalangle(\underline{k}, \underline{e}_r)$ Gitterkonstante

+ kohärente & inkohärente Streuung

$$|F(\underline{q})|^2 = F(\underline{q})\cdot F^*(\underline{q}) = \sum_\ell e^{+i\underline{q}\cdot\underline{r}_\ell} \sum_j e^{-i\underline{q}\cdot\underline{r}_j} = \sum_{\ell j} e^{-i\underline{q}(\underline{r}_\ell-\underline{r}_j)}$$

$$= N + \underbrace{2\cdot\sum_{\ell<j}\cos[\underline{q}\cdot(\underline{r}_\ell-\underline{r}_j)]}_{\text{mittelt sich für inkohärente Streuung weg}}$$

$|r_\ell - r_j| \gg \lambda \hookrightarrow |F(\underline{q})|^2 \approx N$

falls $|r_\ell - r_j| \ll \lambda \rightsquigarrow |F(\underline{q})|^2 \approx N^2$

Kond. von Wasserdampf

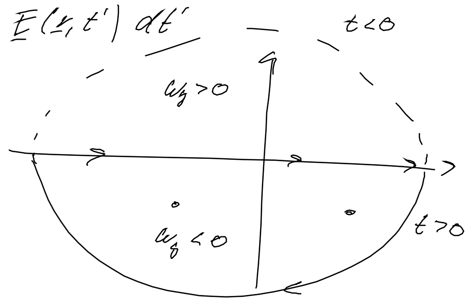
· Verknüpfungsgl. $\underline{D}(\underline{r},\omega) = \varepsilon(\omega)\cdot\underline{E}(\underline{r},\omega)$ $\qquad \varepsilon(\omega) = 1+4\pi\chi(\omega)$

$\underline{B}(\underline{r},\omega) = \mu(\omega)\cdot\underline{H}(\underline{r},\omega)$ $\qquad = 1+4\pi\cdot n\cdot\alpha(\omega)$

$\alpha(\omega) \in \mathbb{C}$

inv. FT

$$\underline{D}(\underline{r},t) = \underline{E}(\underline{r},t) + \frac{4\pi}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{+\infty}\chi(t-t')\,\underline{E}(\underline{r},t')\,dt'$$



für $\chi(\omega) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\frac{\omega_p^2}{\omega_0^2-\omega^2-i\Gamma\omega}$

$$e^{-i\omega t} = e^{-i\omega_x t}\,\underline{e^{+\omega_y t}}$$

$\rightsquigarrow \chi(t) = f(t)\cdot\Theta(t)$

$$\underline{D}(\underline{r},t) = \underline{E}(\underline{r},t) + \frac{4\pi}{\sqrt{2\pi}}\int_0^\infty \chi(\tau)\,\underline{E}(\underline{r},\underbrace{t-\tau}_{<t})\,d\tau$$

Kausalität

$\chi^*(\omega) = \chi(-\omega^*)$ folgt aus $\chi(\tau) \in \mathbb{R}$

$$\chi(\omega) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int \chi(\tau)\, e^{+i\omega\tau}\, d\tau$$

$$\chi^*(\omega) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int \chi(\tau)\, e^{-i\omega^*\tau}\, d\tau = \chi(-\omega^*)$$

Schrittweise umdrehen: Kausalität fordern $\chi(\tau) = f(\tau)\cdot\Theta(\tau)$

$$\chi(\omega) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{+\infty}\chi(t)\, e^{+i\omega t}\, dt = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{0}^{\infty}\chi(t)\, e^{+i\omega t}\, dt \quad \in \mathbb{C}$$

$\Rightarrow$ $\chi(\omega)$ ist holomorph für $\operatorname{Im}\omega > 0$ $\qquad \omega = \omega_r + i\omega_i$

$$e^{+i\omega t} = e^{i\omega_r t}\, e^{-\omega_i t}$$

Pole von $\chi(\omega)$ müssen in der unt. HE liegen

hatten $\quad \varepsilon(\omega) = 1 + \dfrac{4\pi n_0\, e^2/m_e}{\omega_0^2 - \omega^2 - i\Gamma\omega}$ $\quad$ für 1 geb. e^- z.B. H

für jedes Atom Z Elektronen $\quad \omega_j \quad \Gamma_j \qquad Z = \sum_j f_j$ $\quad$ # d. gleich geb. Elektronen

T-Dichte der Atome

$$\boxed{\varepsilon(\omega) = 1 + \frac{4\pi n_0 \cdot e^2}{m_e}\sum_j \frac{f_j}{\omega_j^2 - \omega^2 - i\Gamma_j\cdot\omega}}$$

Bindung von j-ten e^- $\qquad$ Dämpfung von j-ten e^-

Lorentz-Modell

7.2. Wellenlösungen in Materie

$$\underline{E}(r,\omega) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int \underline{E}(r,t)\cdot e^{+i\omega t}\, dt$$

betrachte FT-MW G $\quad$ keine freien Ladungen & Ströme $\quad \rho(r,\omega) = 0$, $\ j(r,\omega) = 0$

$$\nabla\cdot\underline{E}(r,\omega) = 0 \qquad \nabla\cdot B(r,\omega) = 0$$

$$\nabla\times E(r,\omega) - i\frac{\omega}{c}B(r,\omega) = 0 \qquad \nabla\times B(r,\omega) + i\frac{\omega}{c}\mu(\omega)\,\varepsilon(\omega)\cdot E(r,\omega) = 0$$

$$\nabla\times\left(\nabla\times E(r,\omega)\right) = -\Delta E(r,\omega) \Rightarrow$$

$$-\Delta E(r,\omega) - i\frac{\omega}{c}\left(-i\frac{\omega}{c}\mu(\omega)\cdot\varepsilon(\omega)\right)E(r,\omega) = 0$$

$$\left[\Delta + \frac{\omega^2}{c^2}\underbrace{\mu(\omega)\cdot\varepsilon(\omega)}_{\text{kann komplex sein}}\right]\cdot\underline{E}(r,\omega) = 0 \qquad \text{Wellengl. (analog } B(r,\omega))$$

Ansatz $\quad \underline{E}(r,\omega) = \underline{E}_0\, e^{i\underline{k}\cdot\underline{r}} \qquad B(r,\omega) = \underline{B}_0\cdot e^{i\underline{k}\cdot\underline{r}}$

$$\Rightarrow \quad \partial_i\, \underline{E}(r,\omega) = i k_i\, \underline{E}(r,\omega)$$

$$\underline{k}\cdot\underline{E}_0 = 0 \qquad \underline{k}\cdot\underline{B}_0 = 0 \qquad\qquad k \perp E_0,\ B_0$$

$\underline{k}\times\underline{E}_0 - \frac{\omega}{c}\underline{B}_0 = 0 \qquad \underline{k}\times\underline{B}_0 + \frac{\omega}{c}\mu(\omega)\cdot\varepsilon(\omega)\cdot\underline{E}_0 = 0$

$\in\mathbb{R} \longrightarrow \omega^2 = \frac{c^2\cdot \underline{k}^2}{\underbrace{\varepsilon(\omega)\cdot\mu(\omega)}_{\in\mathbb{C}}}$, $\underline{k}^2 \in\mathbb{C}$ $\qquad \underline{k}\cdot\underline{k} = k_x^2 + k_y^2 + k_z^2 \in\mathbb{C}$

$= \frac{c^2\cdot \underline{k}^2}{n^2(\omega)}$

Brechungsindex $n(\omega) = \sqrt{\varepsilon(\omega)\cdot\mu(\omega)} \in\mathbb{C}$

$= n_r(\omega) + i\,\kappa(\omega)$

Vakuum: $n_r(\omega) = 1 \quad \kappa(\omega) = 0$

im Allg: $\underline{k} = \underline{k}_r(\omega) + i\,\underline{k}_i(\omega)$

Schwingung $\qquad$ Dämpfung / Verstärkung

Bsp Ausbreitung in x-Richtung $\quad \underline{k} = \begin{pmatrix}\beta + i\frac{\alpha}{2}\\ 0\\ 0\end{pmatrix} \qquad e^{i\underline{k}\cdot\underline{r}} = e^{i\beta\cdot x}\, e^{-\alpha\cdot x/2}$

Intensität fällt in Ausbreitungsrichtung wie $e^{-\alpha x}$

$\varepsilon(\omega)\cdot\mu(\omega)\cdot\frac{\omega^2}{c^2} = \left(\beta + \frac{i\alpha}{2}\right)^2 = \underline{k}^2$

$\mathrm{Re}\ \varepsilon(\omega)\cdot\mu(\omega)\cdot\frac{\omega^2}{c^2} = \beta^2 - \frac{\alpha^2}{4} \qquad \mathrm{Im}\ \varepsilon(\omega)\cdot\mu(\omega)\frac{\omega^2}{c^2} = \beta\cdot\alpha$

empirisch $\mu(\omega)\approx 1 \qquad$ geringe Absorption $\quad \alpha \ll \beta \qquad \alpha$ - Absorptions-Koeffizient

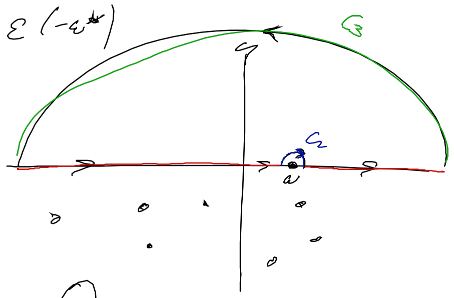
$\Rightarrow \alpha \approx \frac{\mathrm{Im}(\varepsilon)}{\mathrm{Re}(\varepsilon)}\cdot\beta \qquad \beta \approx \frac{\omega}{c}\sqrt{\mathrm{Re}\ \varepsilon(\omega)}$

7.3. Die dielektrische Funktion

7.3.1 Kramers-Kronig-Relation

$\varepsilon(\omega)$ respektiere die Kausalität $\longrightarrow$ $\varepsilon(\omega)$ ist holomorph für $\mathrm{Im}\,\omega \geq 0$

$\chi(\tau)$ sei reell $\longrightarrow \varepsilon^*(\omega) = \varepsilon(-\omega^*)$



$\oint \frac{\varepsilon(\omega')-1}{\omega'-\omega}\,d\omega'$

$= \mathcal{P}\int \frac{\varepsilon(\omega')-1}{\omega'-\omega}\,d\omega'$

$+ \int_{C_2} \frac{\varepsilon(\omega')-1}{\omega'-\omega}\,d\omega' + \underbrace{\int_{C_3} \frac{\varepsilon(\omega')-1}{\omega'-\omega}\,d\omega'}_{\text{vernachl. } (\varepsilon(\omega) \text{ fällt schnell genug ab})} = 0$

$\mathcal{P}\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\varepsilon(\omega')-1}{\omega'-\omega}\,d\omega' = i\pi\,[\varepsilon(\omega)-1]$

$$[\varepsilon(\omega)-1] = \frac{-i}{\pi} \mathcal{P}\int_{-\infty} \frac{\varepsilon(\omega')-1}{\omega'-\omega}\, d\omega'$$

$$\boxed{\begin{aligned} \mathrm{Re}\,\varepsilon(\omega) &= 1 + \frac{1}{\pi}\cdot \mathcal{P}\int \frac{\mathrm{Im}(\varepsilon(\omega'))}{\omega'-\omega}\, d\omega' \\ \mathrm{Im}\,\varepsilon(\omega) &= -\frac{1}{\pi}\mathcal{P}\int \frac{\mathrm{Re}\,\varepsilon(\omega')-1}{\omega'-\omega}\, d\omega' \end{aligned}}$$

Kramers-Kronig Relationen

+ Teste die Kausalität von $\varepsilon(\omega)$

+ Messung des Absorptionsverhaltens $\propto \mathrm{Im}(\varepsilon(\omega))$ (einfacher)

→ Rekonstruktion von $\mathrm{Re}\,\varepsilon(\omega)$

$$\varepsilon^*(\omega) = \varepsilon(-\omega^*) \xrightarrow{\text{für } \omega\in\mathbb{R}} \begin{aligned} \mathrm{Re}\,\varepsilon(-\omega) &= +\mathrm{Re}\,\varepsilon(+\omega) \\ \mathrm{Im}\,\varepsilon(-\omega) &= -\mathrm{Im}(+\omega) \end{aligned}$$

gerade Fkt

$$\int f(\omega)d\omega = \int_0^\infty f(\omega)d\omega + \int_0^\infty f(-\omega)\,d\omega$$

$$\mathrm{Re}\,\varepsilon(\omega) = 1 + \frac{2}{\pi}\mathcal{P}\int_0^\infty \frac{\omega'\,\mathrm{Im}\,\varepsilon(\omega')}{\omega'^2-\omega^2}\, d\omega'$$

Dispersionsgesetze

$$\mathrm{Im}\,\varepsilon(\omega) = -\frac{2\omega}{\pi}\int_0^\infty \frac{\mathrm{Re}\,\varepsilon(\omega')-1}{\omega'^2-\omega^2}\, d\omega'$$

$$\omega^2 = \frac{c^2 k^2}{\underbrace{\varepsilon(\omega)\mu(\omega)}_{n^2(\omega)}}$$

häufige Näherung $\underline{k} = \underline{k}_r(\omega) + i\,\underline{k}_i(\omega) \approx \underbrace{\underline{k}_0}_{c|k_0|=\omega} \cdot \underbrace{n(\omega)}_{\in\mathbb{C}}$