Grundlagen der Streuung: Teil I – Grundbegriffe

Streuung vs. Beugung

Typisches Streuexperiment

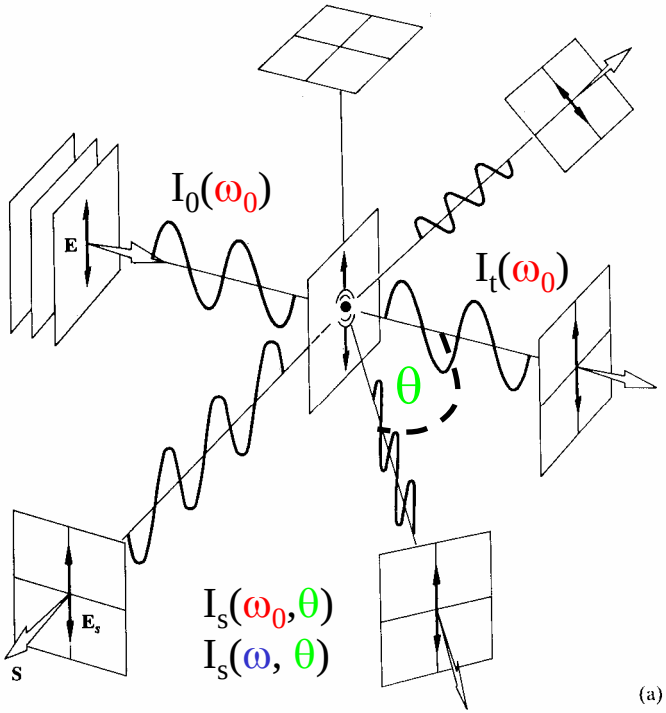


Abbildung 8.36 Streuung von polarisiertem Licht durch ein Molekül.

$I_0(\omega_0)$ = Einfallende Intensität
$I_t(\omega_0)$ = transmittierte Intensität
$I_s(\omega,\theta)$ = Streuintensität
$\omega = \omega_0$ elastische Streuung
$\omega \neq \omega_0$ inelastische Streuung

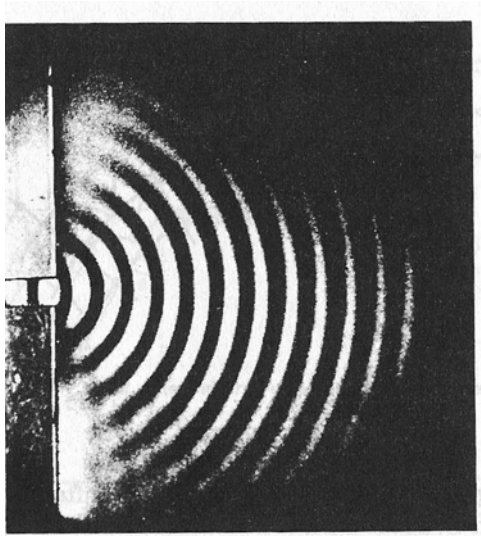
$$I_t = I_0\, e^{-\varepsilon c d}$$

Lambert – Beer

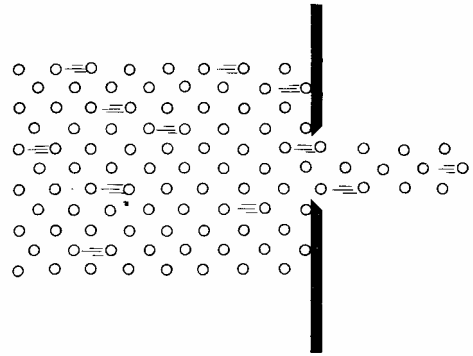
ε = Extinktionskoeffizient
c = Konzentration
d = Schichtdicke

$$I_0 - I_t = I_{ext} = I_{abs} + I_s$$

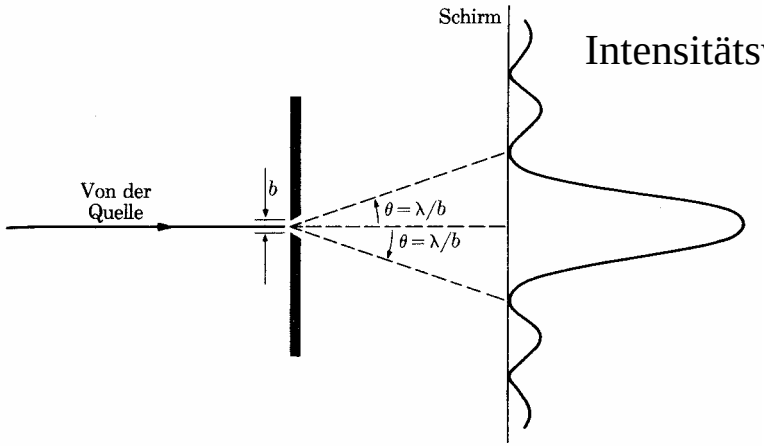
Typisches Beugungsexperiment: Beugung am Spalt



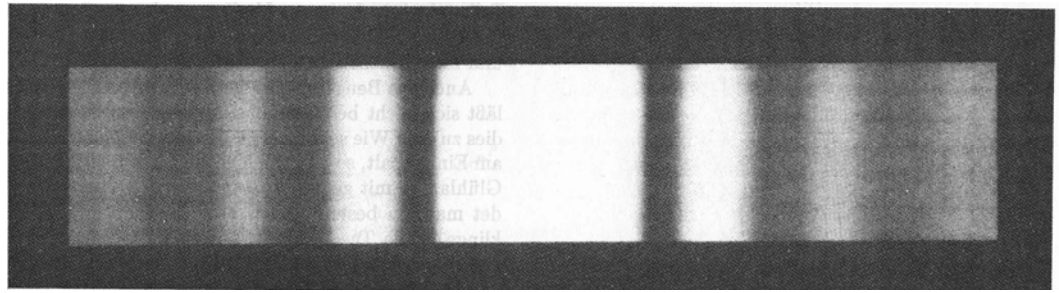
Beugung: Abweichung von der
geradlinigen Ausbreitung
Typisches Wellenphänomen
(Wasserwellen,
Schallwellen
Elektromagnet. Wellen)



Ein Teilchenstrom zeigt diesen Effekt nicht
(solange Teilchengröße << Spaltgröße)



Intensitätsverteilung hinter einem Spalt



Frauenhoferbeugung an einem Einzelspalt

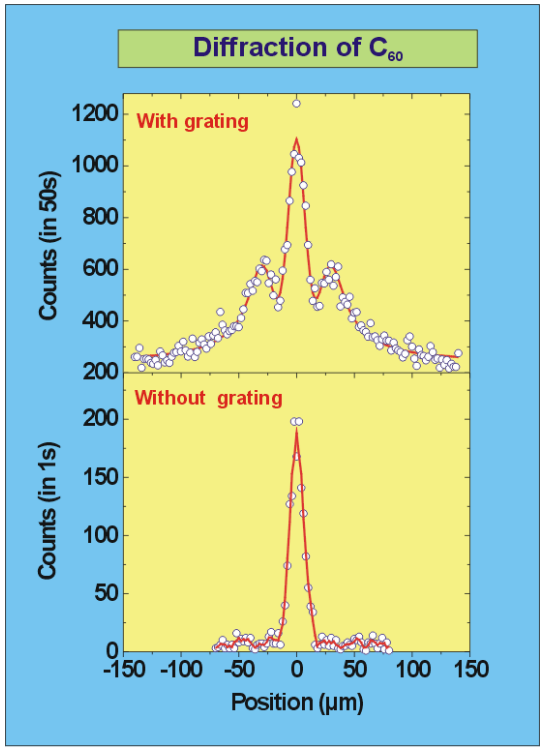
Materiewellen und Partikelstreuung

Welle-Teilchen-Dualismus $p = mv = \frac{h}{\lambda}$

Teilcheneigenschaft (Impuls)

Welleneigenschaft (Wellenlänge)

Moderner Nachweis der Materiewellen:
Quantenfußball

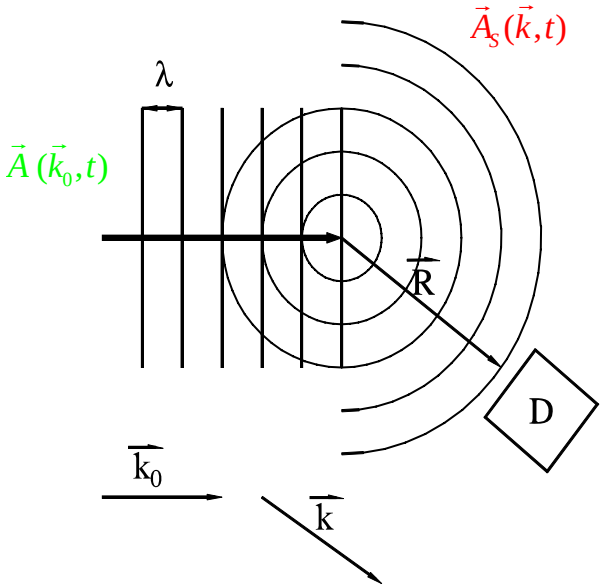


Partikelstreumethoden:

Elektronenbeugung
Neutronenstreuung
Myonen-Streuung

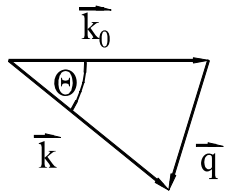
Grundlagen der Streuung: Teil II – Von einem Streuer zu N Streuzentren

Ein Streuzentrum – Elementarer Streuprozess :



Einfallende Welle = ebene Welle $\vec{A}(\vec{k}_0,t) = \vec{A}_0 \exp\left[i\left\{ \vec{k}_0\vec{R} - \omega t \right\} \right]$

Gestreute Welle = Kugelwelle $\vec{A}_S(\vec{k},t) = \frac{\vec{A}_0 b}{R} \exp\left[i\left\{ \vec{k}\vec{R} - \omega t \right\} \right]$

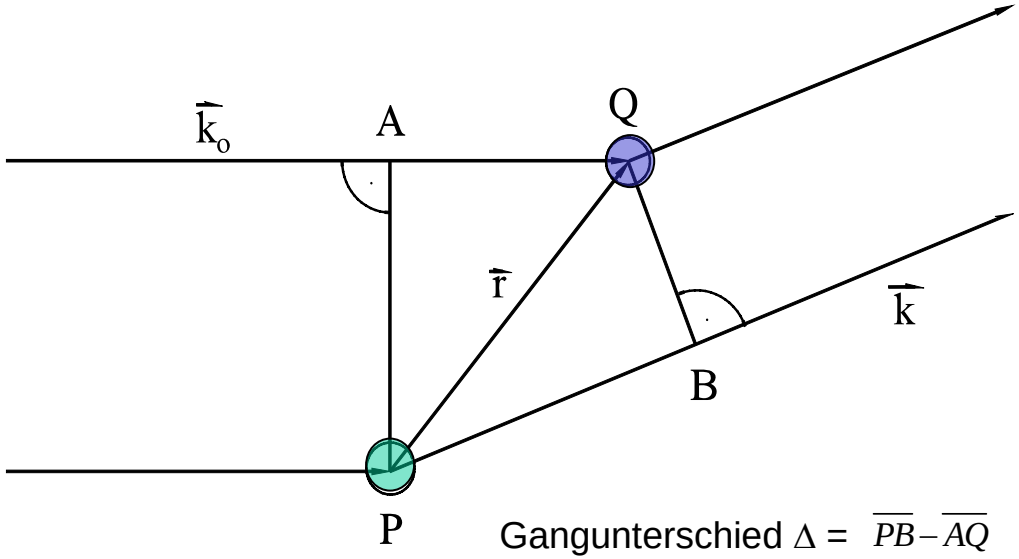


$\left|\vec{k}_0\right| = \frac{2\pi}{\lambda} = \left|\vec{k}\right|$ d.h. elastische Streuung

$q = \frac{4\pi n_D}{\lambda} \sin\frac{\Theta}{2}$ (q = Streuvektor, ist die Differenz der Wellenvektoren der einfallenden und der gestreuten Welle)

Θ	Streuwinkel
n_D	Brechungsindex des Mediums
λ	Wellenlänge
b	Streuvermögen (abhängig von Art der Streuung – Licht, Xray etc.)

Streuung an zwei Streuzentren: Interferenz



$$\vec{A}_Q(\vec{k},t) = \frac{\vec{A}_0 b}{R}\exp\left[i\left\{\vec{k}\vec{R}+\Phi\right\}\right]\exp(-i\omega t)$$

$$\vec{A}_P(\vec{k},t) = \frac{\vec{A}_0 b}{R}\exp\left[i\left\{\vec{k}\vec{R}\right\}\right]\exp(-i\omega t)$$

Gangunterschied $\Delta = \overline{PB} - \overline{AQ}$ $\Rightarrow$ Phasendifferenz $\Phi = \vec{q}\vec{r}$

$$\vec{A}_s(\vec{k},t) = \vec{A}_P(\vec{k},t) + \vec{A}_Q(\vec{k},t) =$$

$$\frac{b\vec{A}_0}{R}\exp\left[i\left\{\vec{k}\vec{R}\right\}\right]\exp(-i\omega t)\left[1+\exp(i\vec{q}\vec{r})\right]$$

Strukturinformation

Wechselwirkung
Welle $\leftrightarrow$ Materie

Wellenausbreitung

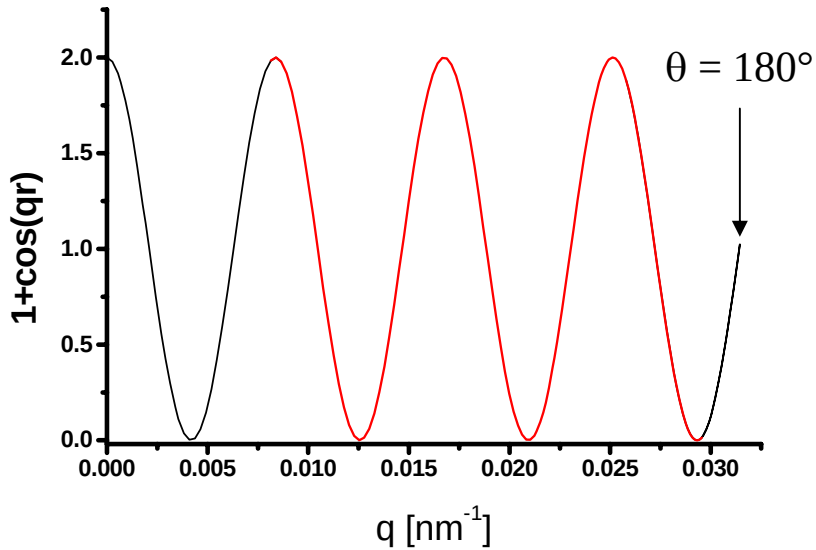
Interferenz $\leftrightarrow$ Addition der Amplituden

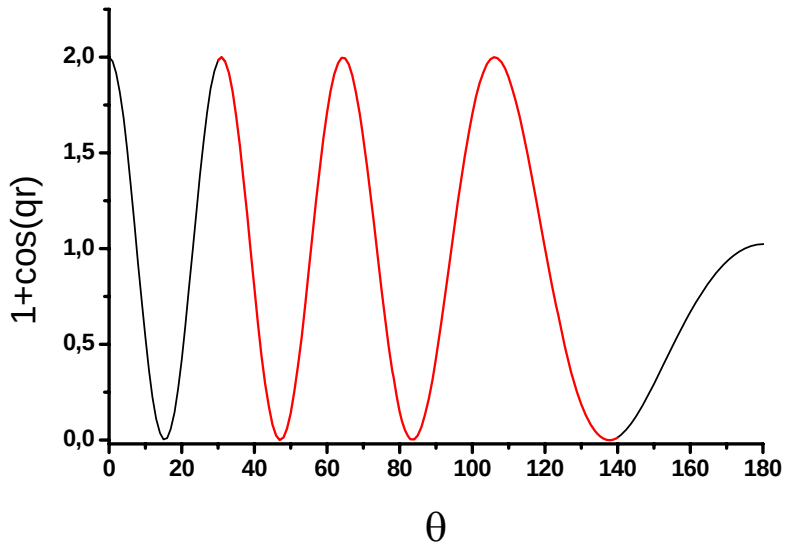
Streuintensität für 2 Streuzentren (N = 2):

$$I(q,t) = \left|\vec{A}_s(\vec{k},t)\right|^2 = \frac{\vec{A}_0^2 b^2}{R^2}\left(1+e^{i\vec{q}\vec{r}}\right)\left(1+e^{-i\vec{q}\vec{r}}\right) = \frac{2\vec{A}_0^2 b^2}{R^2}\left(1+\cos(\vec{q}\vec{r})\right)$$

Streuintensität oszilliert mit

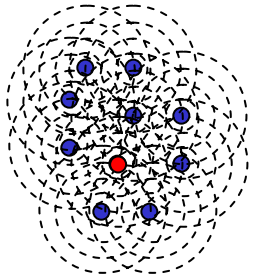
$$\vec{q}(\theta)\vec{r} \leftrightarrow I = I(q) \hat{=} I(\theta)$$





Berechnet mit λ = 532 nm, r = 750 nm, n_D = 1.332 (H_2O)

Streuung an vielen Streuzentren: N diskrete, statische Punktstreuer



Jede Sekundärwelle interferiert mit allen anderen ⇒ kompliziertes Interferenzmuster

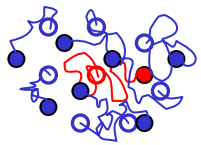
$$I(q) = \sum_j^N \sum_k^N \frac{\vec{A}_0^2 b_j b_k}{R^2} e^{i\vec{q}\vec{r}_j} e^{-i\vec{q}\vec{r}_k}$$

Winkelabhängigkeit der Streuintensität I(q)

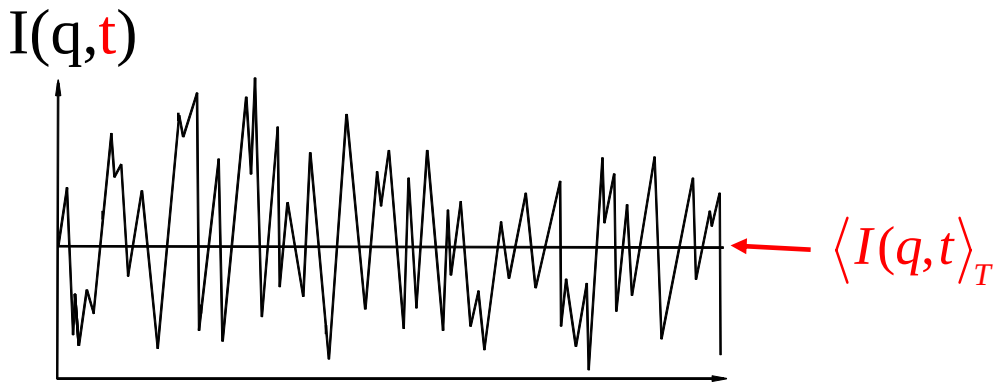
⇕

Anordnung der Streuzentren
(z.B. Kristallstrukturen)

Streuung an vielen Streuzentren: N diskrete, dynamische Punktstreuer



$$I(q,t) = \sum_j^N \sum_k^N \frac{\vec{A}_0^2 b_j b_k}{R^2} e^{i\vec{q}\vec{r}_j(t)} e^{-i\vec{q}\vec{r}_k(t)}$$



Zeitlich fluktuierende Streuintensität⇔ Bewegung der Streuzentren

Zwei Arten von Streuexperimenten:

i) Statische Streuung: Messung der zeitlich gemittelten Streuintensität $\langle I(q,t)\rangle_T$

$\Rightarrow$ Bestimmung der zeitlich gemittelten Anordnung der streuenden Objekte

Verdünnte Systeme: Teilchenformfaktor P(q) $\rightarrow$ Struktur von Molekülen und Makromolekülen;

Dichte Systeme: statischer Strukturfaktor S(q) $\rightarrow$ Nahordnung von Flüssigkeiten und konzentrierten Polymersystemen)

ii) Dynamische Streuung: zeitliche Analye der Intensitätsfluktuationen über Spektren S(q,ω) und Korrelationsfunktionen f(q,t)

Verdünnte Systeme: Bestimmung von Diffusionskoeffizienten

Dichte Systeme: Zeitliche Veränderung von Strukturen (Strukturrelaxation)

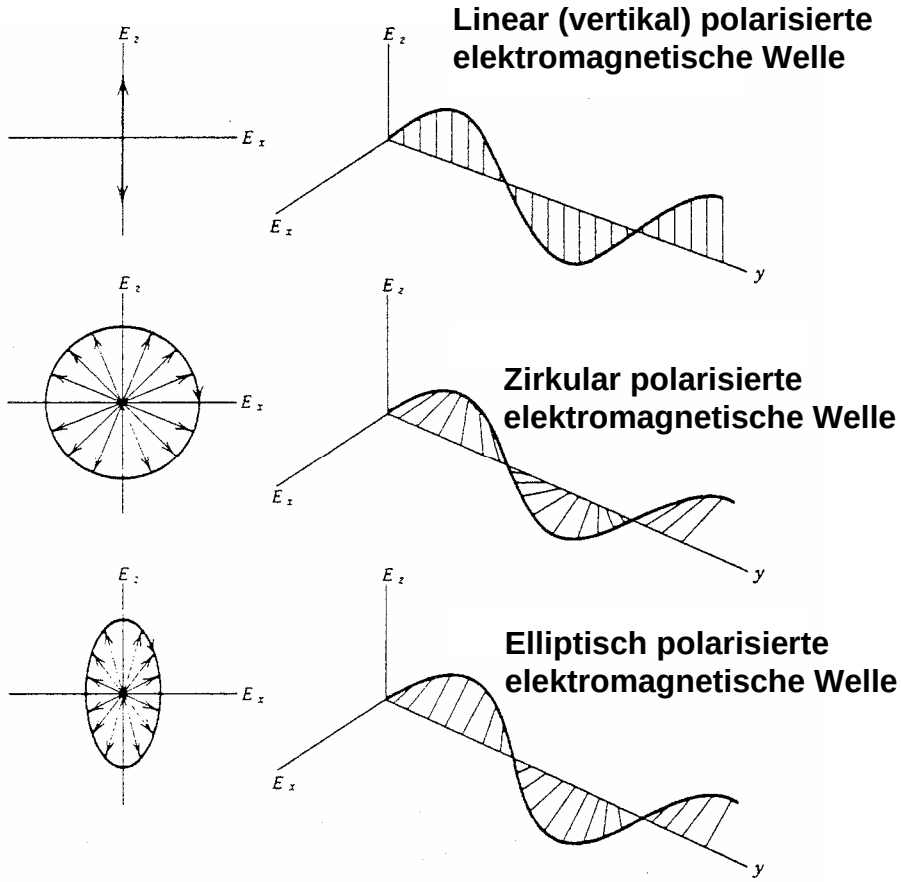
Verknüpfung von Experiment und Theorie :

Experimentell zugänglich $\langle I(q,t)\rangle_T = \langle I(q,t)\rangle_E$ Theoretisch zugänglich

Zeitmittel — Ensemblemittel (Scharmittel)

Grundlagen der Streuung: Teil III – Wechselwirkung zwischen Elektron und Elektromagnetischem Feld

- Polarization des E-Felds



Wechselwirkung zwischen Elektron und Elektromagnetischem Feld: Hertzsche Dipolstrahlung

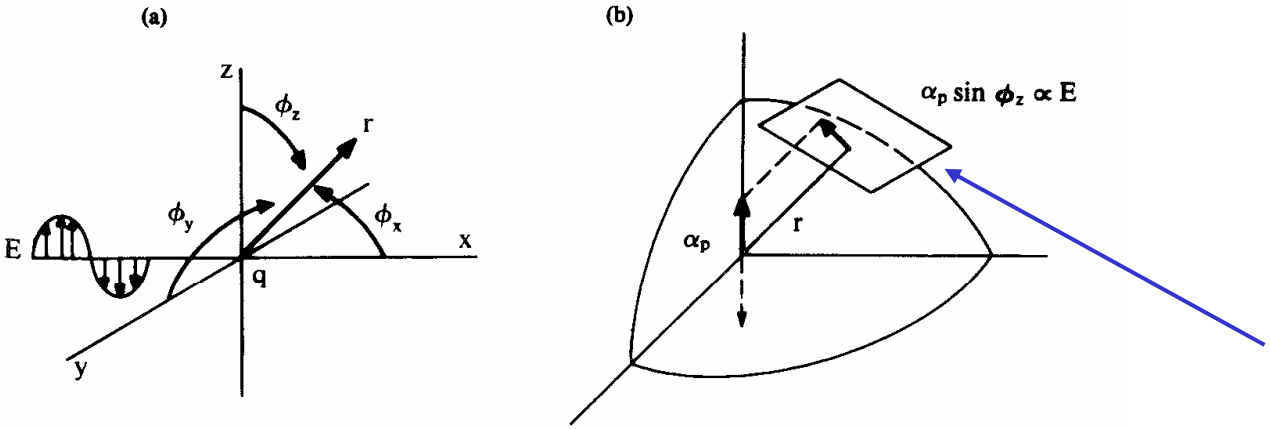


Figure 5.3 (a) The coordinates of an electric field **E** relative to an oscillating charge located at the origin. (b) Projection of the acceleration in the plane perpendicular to the line of sight.

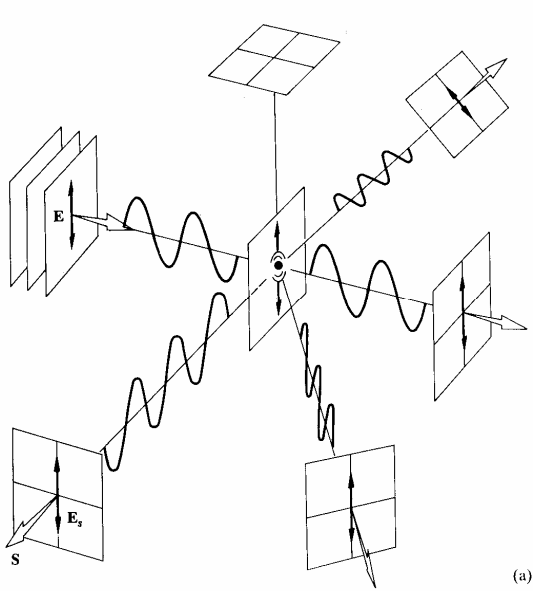
Amplitude des abgestrahlten E-Felds ist proportional zur Projektion der Beschleunigung in die Detektionsebene

Keine Abstrahlung in Richtung der Beschleunigung (Antennenstrahlung)

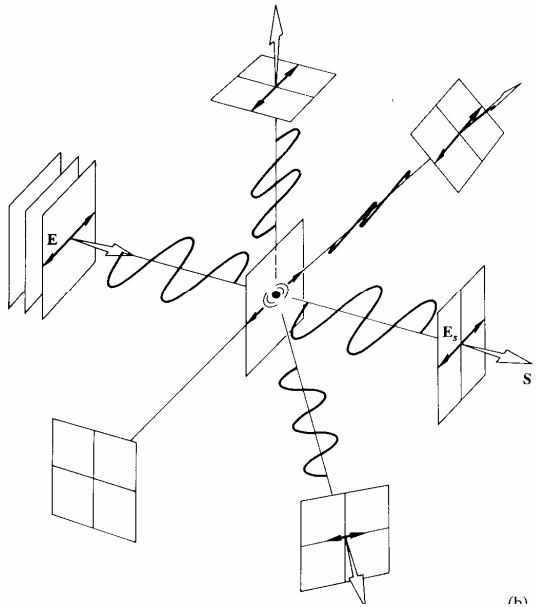
Vertikal (linear) polarisiertes Licht: $$\vec{E}_s = \frac{q\, a_p \sin\phi_z}{4\pi\varepsilon_0\, c^2 r}$$

q = Ladung
a_p= periodische Beschleunigung
c = Lichtgeschwindigkeit
ε_0 = elektrische Feldkonstante

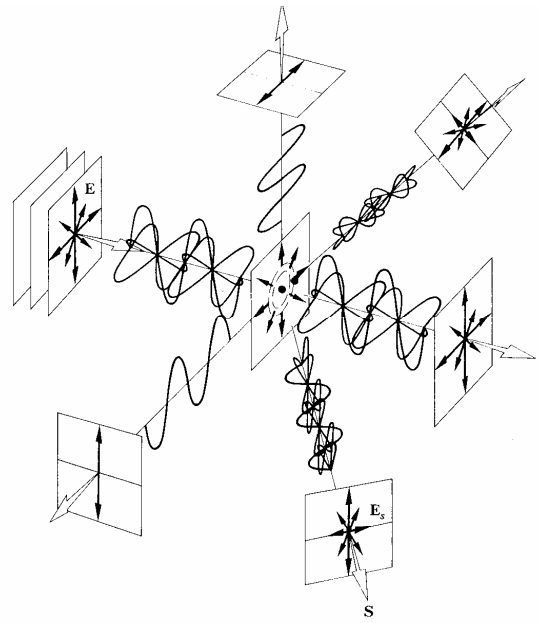
Wechselwirkung zwischen Elektron und Elektromagnetischem Feld: Polarisation des Streulichts



Vertikal polarisiert



Horizontal polarisiert



Unpolarisiert – Darstellbar als Überlagerung von vertikal und horizontal polarisierter Strahlung (Streulicht teilweise polarisiert)

Polarisation des Streulichts: Darstellung über Polfiguren

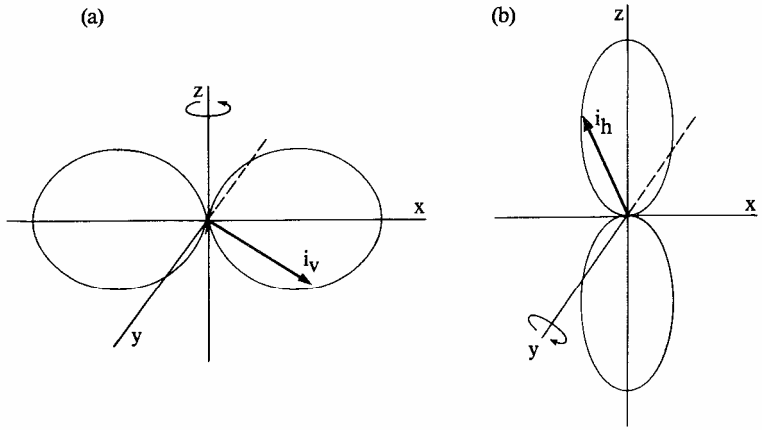


Figure 5.4 The intensity pattern for light scattered by a particle located at the origin. The incident and the scattered light are vertically polarized in (a) and horizontally polarized in (b). The length of the radius vector is proportional to the scattered intensity at each angle.

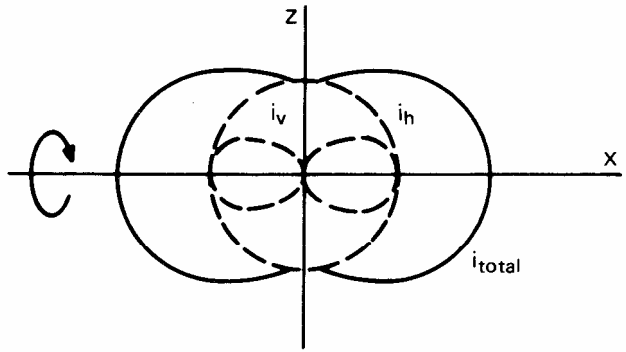
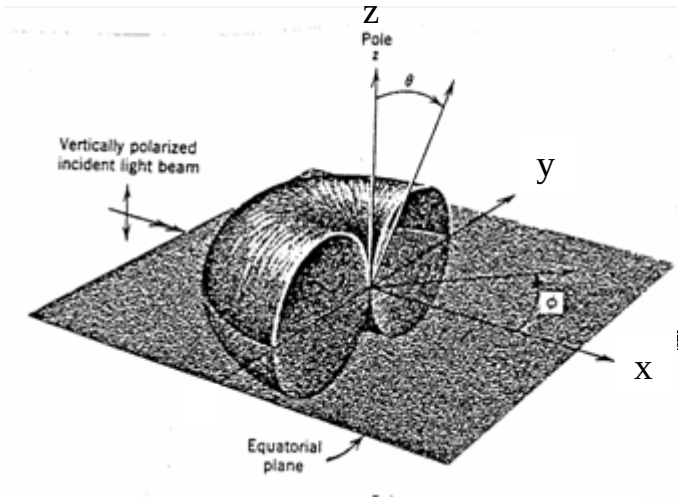
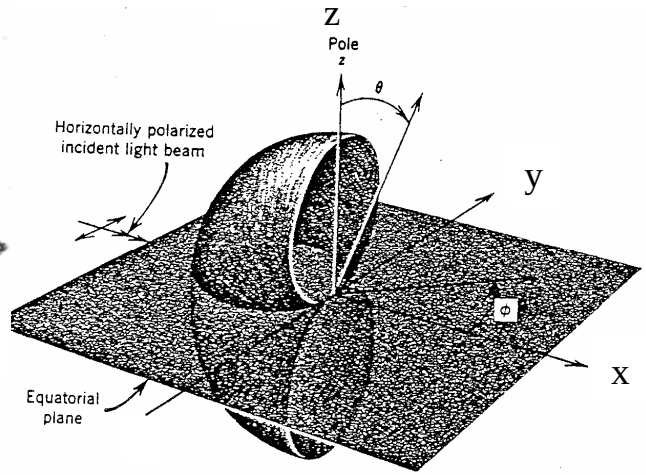
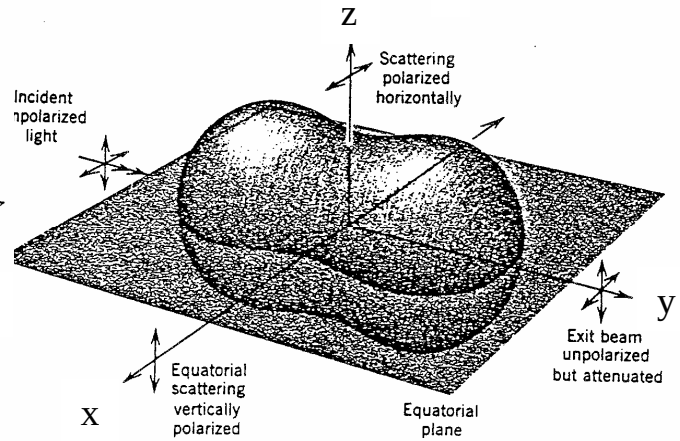


Figure 5.5 Projection in the *xz* plane of i_v, i_h, and their resultant i_{total} for light scattered by a molecule situated at the origin. The intensity of scattered unpolarized light at any angle ϕ_x is proportional to the length of the radius vector at this angle.







Lichtstreuung an Atomen - Polarisierbarkeiten

Elektrisches Feld polarisiert die Elektronenwolke von Atomen

⇒Induziertes Dipolmoment $\vec{\mu}_{ind} = \alpha \vec{E}$ $\alpha = Polarisierbarkeit$

Streufeld E_s ist proportional zur Beschleunigung des induzierten Dipolmoments

$$\vec{E}_s(t) = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0} \frac{d^2\mu}{dt^2} \frac{\sin\phi_z}{r} = \frac{\alpha\omega^2 \sin\phi_z}{4\pi\varepsilon_0 c^2} E(t)$$

$\alpha/4\pi\varepsilon_0$ hat die Dimension eines Volumens

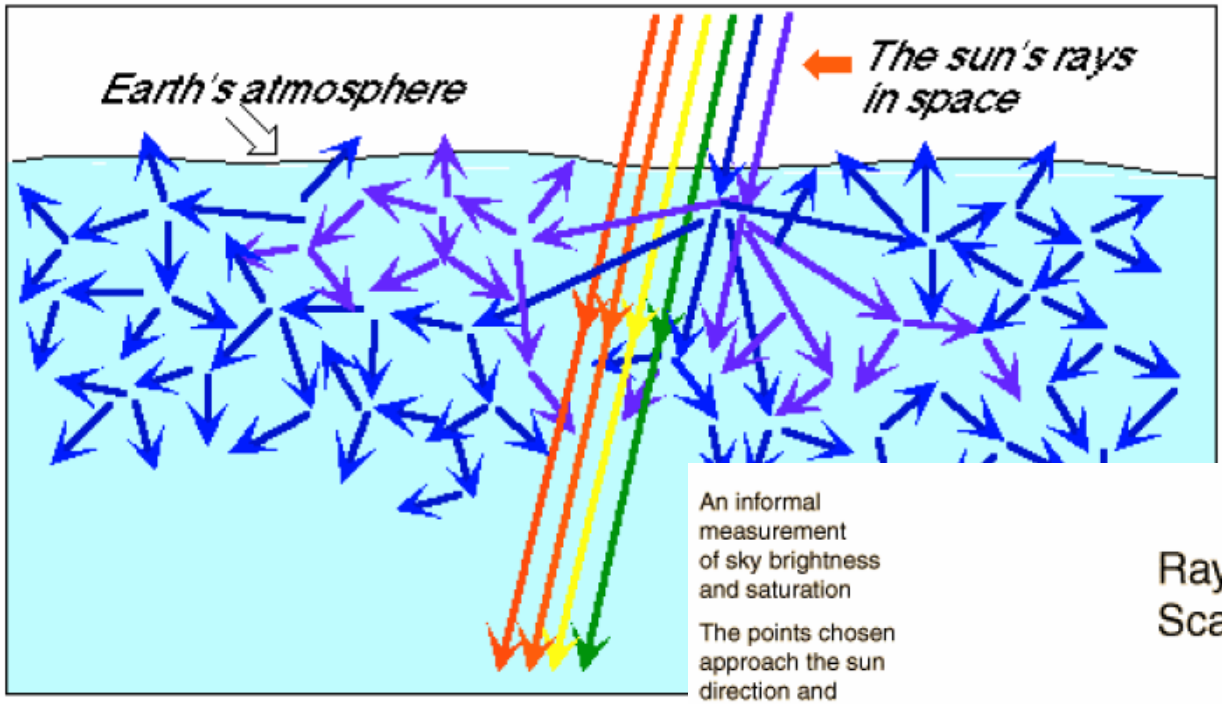
$$I_s = |E|^2 \propto \frac{V_{atom}}{\lambda^4}$$

Rayleighstreuung

Atom	He	Ne	Ar	Kr	Xe
$\alpha/4\pi\varepsilon_0$ [Å^3]	0.205	0.395	1.64	2.48	4.04

Atom	Li	Na	K	Rb	Cs
$\alpha/4\pi\varepsilon_0$ [Å^3]	24.3	23.6	43.4	47.3	59.6

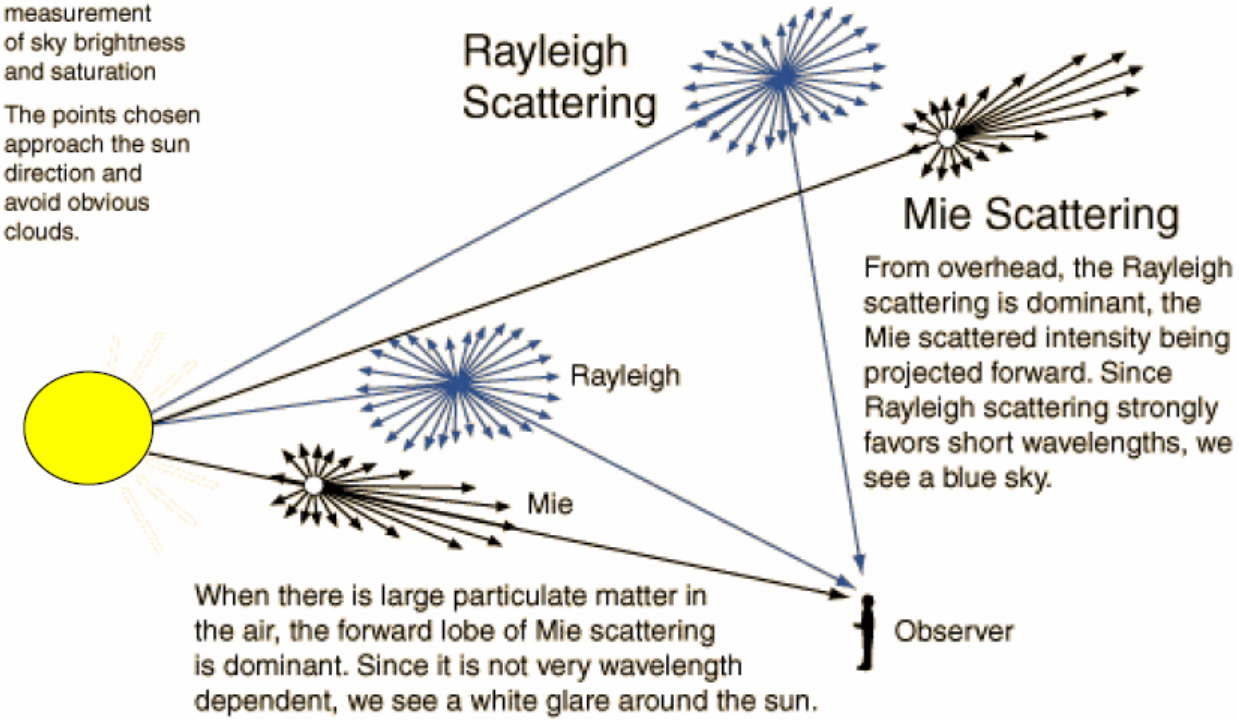
Warum ist der Himmel Blau?



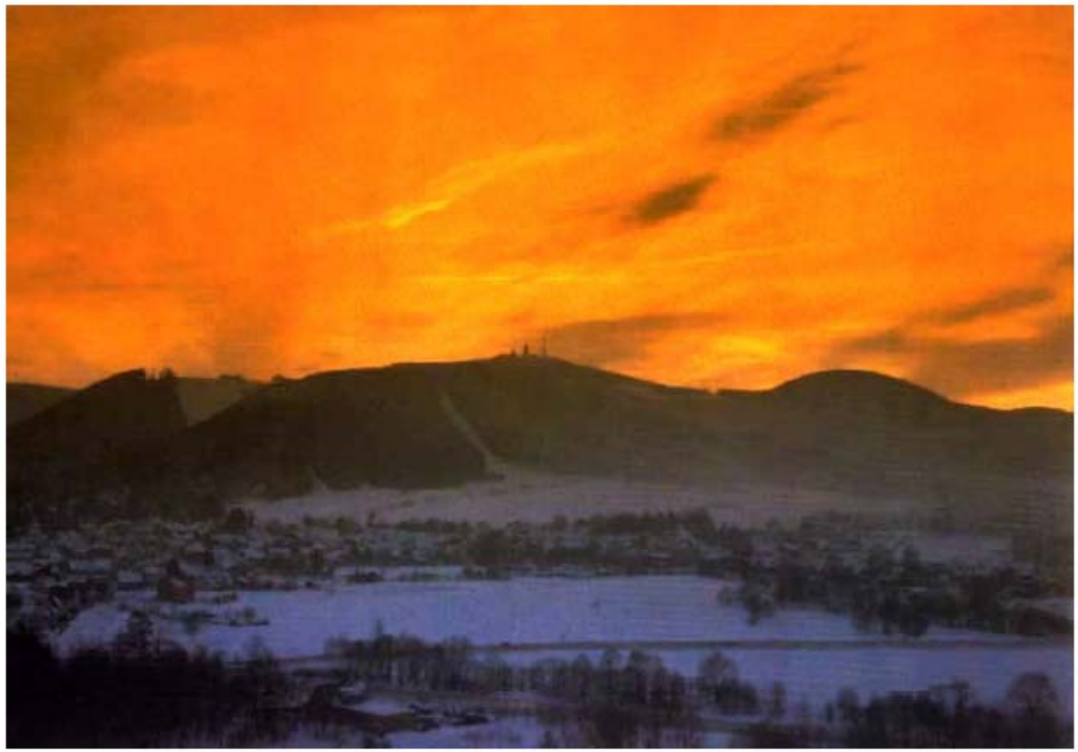
$$I \propto \frac{1}{\lambda^4}$$

An informal measurement of sky brightness and saturation

The points chosen approach the sun direction and avoid obvious clouds.

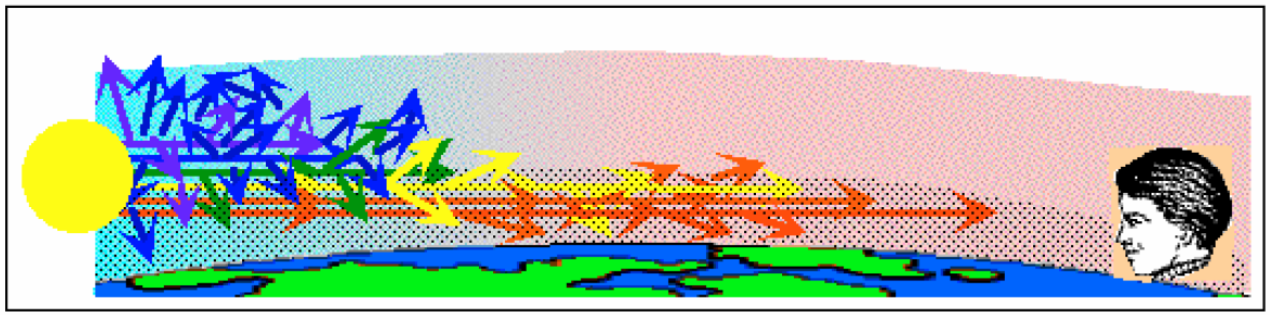


Abendrot - Morgenrot



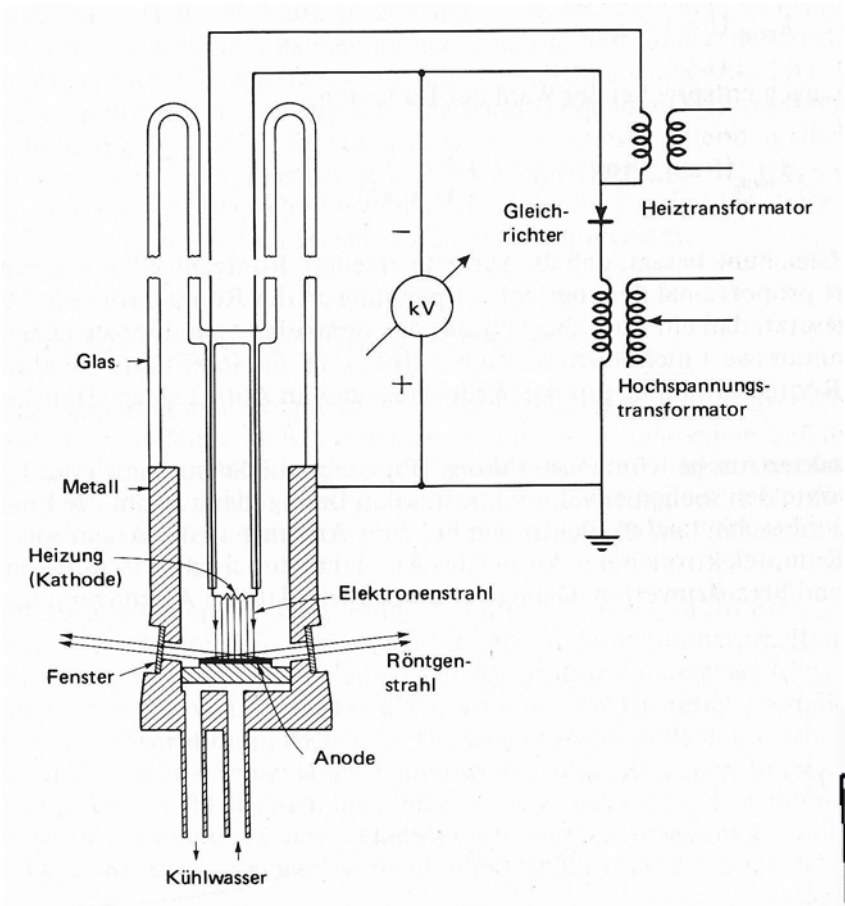
Rayleighstreuung :
das blaue Licht wird auf dem Weg
zum Beobachter weggestreut:

Nur rotes Licht kommt noch an

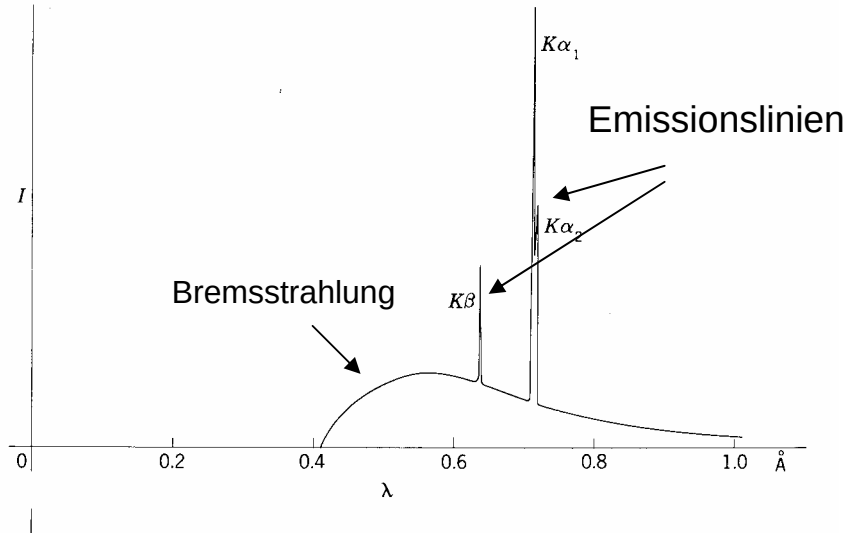


Erzeugung von Röntgenstrahlen (→ SAXS = Small Angle Xray Scattering)

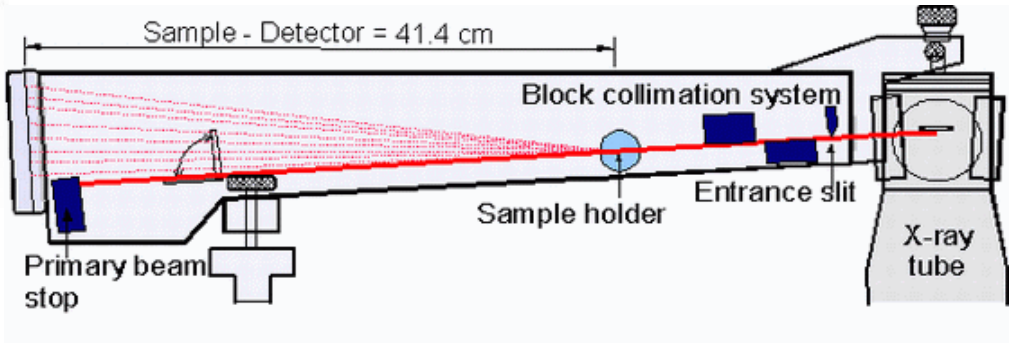
Prinzip der Röntgenröhre



Emissionsspektrum eines Mo Targets



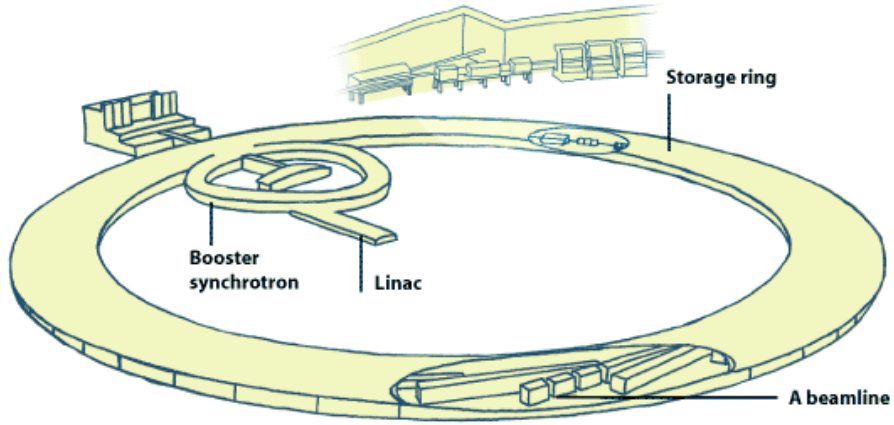
Aufbau einer Röntgenkleinwinkelkamera

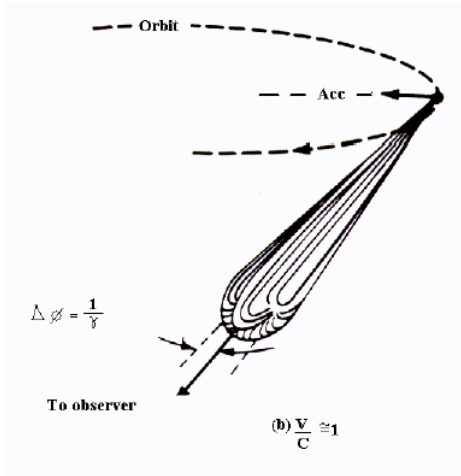


Erzeugung von Röntgenstrahlen

Synchrotronstrahlung: ESRF in Grenoble

ESRF = European Synchrotron Radiation Facility





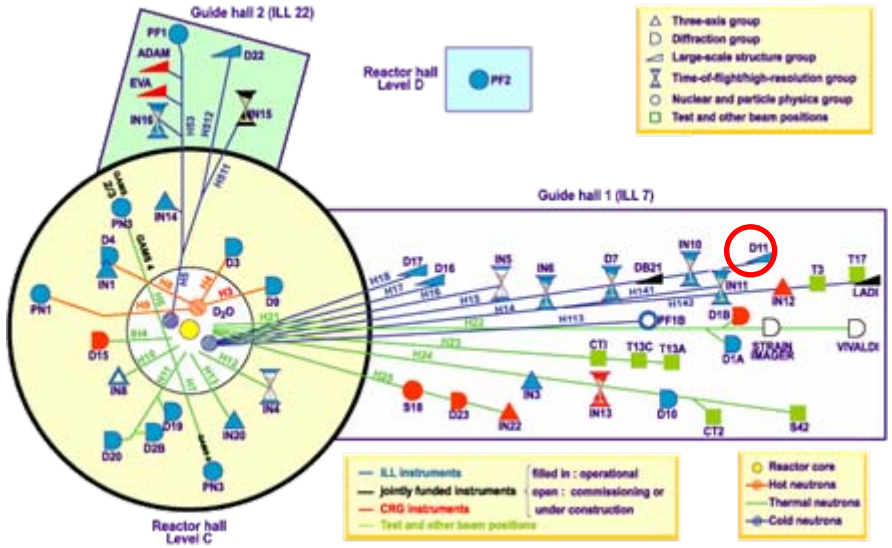
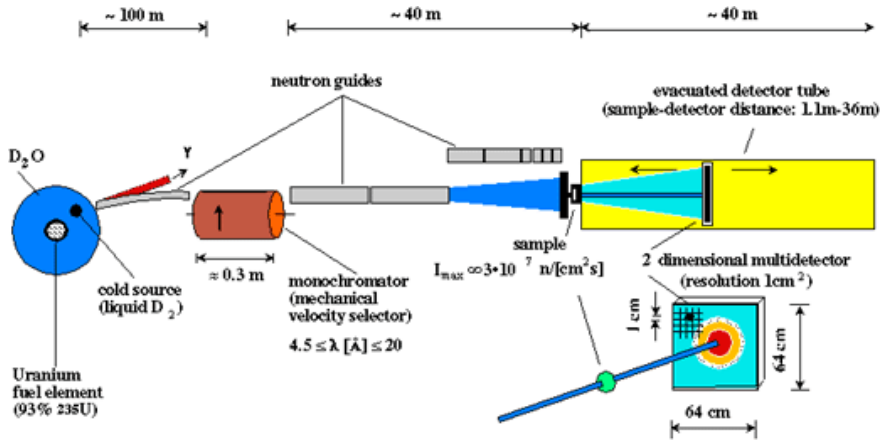
Elektronenbewegung mit Relativistischer Geschwindigkeit:

- tangentiale Abstrahlung mit hoher Kollimation
- hohe Leistungsdichte (Intensität)
- kontinuierliches Durchstimmen Wellenlänge

Erzeugung von Neutronen (→ SANS = Small Angle Neutron Scattering)

Neutronen aus dem Reaktor:
ILL in Grenoble

ILL = Institut Laue-Langevin



D11