

## Skript zum Versuch

# F68

### Strukturuntersuchungen an kolloidalen Lösungen: Lichtstreuung an Latexpartikeln

Oktober 2019

Herausgeber: Institut für Physikalische Chemie

## 1 Aufgaben und Lernziele

In diesem Versuch werden die Grundlagen der Streuung von Wellen an Materie behandelt. In einem einfachen Experiment mit Licht im sichtbaren Spektralbereich (632,8 nm) wird untersucht, wie und welche Informationen aus der Messung der Streuintensität gewonnen werden können. Die Strukturen, die mit sichtbarem Licht aufgeklärt werden können, liegen naturgemäß im Bereich von einigen 10 nm bis zu einigen 100 nm.<sup>1</sup>

Es sollen der Strukturfaktor  $S(Q)$  einer kolloidalen Latex-Suspension mit flüssigkeitsähnlicher Struktur und daraus der mittlere Teilchenabstand bestimmt werden. Aus dem Formfaktor  $P(Q)$  der sphärischen Latexteilchen wird die Partikelgröße ermittelt.

## 2 Was man wissen sollte

Grundlagen der Strukturaufklärung mit Streu- bzw. Beugungsmethoden, Fouriertransformation, Form- und Strukturfaktoren, verschiedene strukturelle Anordnungskategorien von Teilchen (statistisch, nahgeordnet und ferngeordnet) mit der Angabe von Beispielen, Coulombpotenzial und abgeschirmtes Coulombpotenzial.

---

<sup>1</sup>Von großer Bedeutung in der Chemie ist die Aufklärung von Strukturen auf atomarer Längenskala (z. B. Kristallstrukturaufklärung). Als Sonden werden hier Röntgenstrahlen oder Neutronenstrahlen mit Wellenlängen im Angströmbereich ( $1 \text{ \AA} = 10^{-10} \text{ m}$ ) eingesetzt.

### 3 Grundlagen

#### 3.1 Individuelles Streuvermögen einzelner Teilchen oder intrapartikuläre Streuung: Der Formfaktor

Die kohärente, elastische Streuung lässt sich in Abhängigkeit von den Wellenzahlvektoren für die einlaufende Welle  $\vec{k}_{in}$  und die auslaufende Welle  $\vec{k}_{out}$  beschreiben. Der Streuwinkel  $\theta$  und der Streuvektor  $\vec{Q}$  sind wie folgt definiert:

$$\vec{Q} = \vec{k}_{out} - \vec{k}_{in}, \quad \text{mit: } |\vec{k}_{in}| = |\vec{k}_{out}| = \frac{2\pi n}{\lambda_0} \quad (1)$$

Mit  $n$  dem Brechungsindex des umgebenden Mediums (in diesem Experiment: Wasser),  $\lambda_0$  Vakuum-Wellenlänge der Lichtquelle. Definiert man den Streuwinkel  $\theta$  so wie in Abbildung 1,<sup>2</sup> dann erhält man für den Betrag des Streuvektors  $\vec{Q}$ :

$$|\vec{Q}| = \frac{4\pi n}{\lambda_0} \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) \quad (2)$$

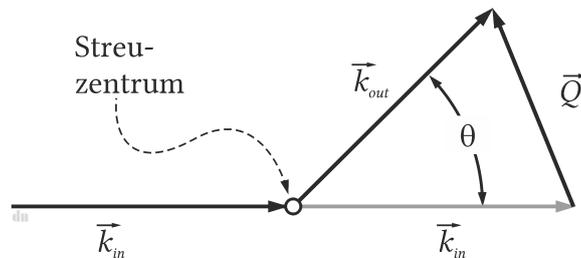


Abbildung 1: Definition von Streuwinkel und Streuvektor

Zur Interpretation und Analyse von Streuexperimenten muss man nun wissen, welche Eigenschaft eines Teilchens für den Streuprozess und das Streuvermögen ursächlich ist. Für Photonen im Röntgengebiet ist es die Elektronendichteverteilung eines Atoms. Für Photonen im sichtbaren Spektralbereich ist es die Brechungsindex-Inhomogenität.

Um aus der Winkelverteilung der Streulichtintensität auf die Struktur eines Ensembles von Teilchen – seien es die Atome in einem Kristall, die Atome oder Moleküle einer Flüssigkeit oder eben die Latex-Kolloide in einer Suspension – ermitteln zu können, muss zunächst die Winkelabhängigkeit des Streuvermögens eines einzelnen Teilchens bekannt sein.

Wird die einlaufende ebene Welle an zwei Streuzentren im Abstand  $\vec{R}$  gestreut, so kommt es zur Interferenz der auslaufenden Kugelwellen. Zur Berechnung der Streuamplitude muss man den Wegunterschied  $x$  bzw. die Phasendifferenz  $\Delta\phi$  ermitteln (siehe Abb. 2):

---

<sup>2</sup>Achtung: gelegentlich wird auch der halbe Ablenkwinkel als Streuwinkel  $\theta$  definiert

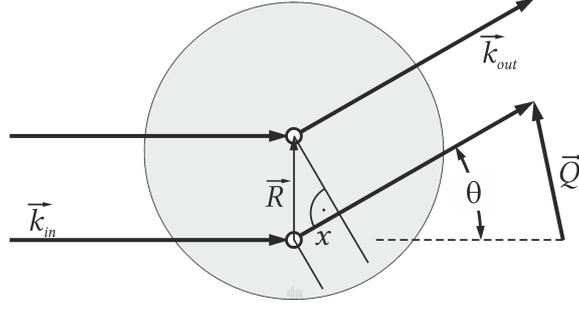


Abbildung 2: Streuprozess an zwei herausgegriffenen Streuzentren innerhalb eines Teilchens (z. B. zwei Elektronen eines Atoms oder an zwei Polymermolekülen eines Latex-Teilchens). Das obere Photon eilt dem unteren nach dem Streuprozess um die Wegstrecke  $x$  voraus.

$$x = |\vec{R}| \sin \theta = |\vec{R}| 2 \sin \frac{\theta}{2} \cos \frac{\theta}{2}$$

$$\Delta\phi = \frac{2\pi x}{\lambda_0} = |\vec{R}| \frac{4\pi}{\lambda_0} \sin \frac{\theta}{2} \cos \frac{\theta}{2} = |\vec{R}| |\vec{Q}| \cos \frac{\theta}{2} = \vec{R} \cdot \vec{Q} \quad (3)$$

Die gesamte Streuamplitude  $A_{gesamt}(\vec{Q})$  ergibt sich aus der phasenrichtigen Summation über alle auslaufenden Kugelwellen. Dazu wird mit dem Phasenfaktor  $\exp(-i\Delta\phi)$  multipliziert.

$$A_{gesamt}(\vec{Q}) = \sum_{j=1}^N A_j = A \sum_{j=1}^N \exp(-i\Delta\phi_j) = A \sum_{j=1}^N \exp(-i\vec{R}_j \cdot \vec{Q}) \quad (4)$$

Die Streuzentren in einem Teilchen kann man auch als kontinuierliche Dichtefunktion  $\rho(\vec{R})$  beschreiben. Man kann dann von der Summation zur Integration übergehen:

$$P(\vec{Q}) = \frac{A_{gesamt}(\vec{Q})}{A} = \int \rho(\vec{R}) \exp(-i\vec{R} \cdot \vec{Q}) d\vec{R} \quad (5)$$

Die Integration wird über den gesamten Definitionsbereich des  $\vec{R}$ -Vektors durchgeführt.

$P(\vec{Q})$  nennt man den Formfaktor. Er beschreibt das Streuvermögen des einzelnen Teilchens. Im Fall von Röntgenstrahlung ist damit das Atom gemeint. Im hier behandelten Experiment mit Laserlicht ist es das einzelne Kolloid-Teilchen.

Im Fall von kugelsymmetrischen Teilchen hängt die Dichtefunktion nur noch vom Betrag des Vektors  $\vec{R}$  ab:  $\rho(\vec{R})$  geht über in  $\rho(R)$ . Der Formfaktor hängt dann auch nur noch vom Betrag des Streuvektors ab. Wie im Anhang gezeigt wird, kann Gleichung (5) dann wie folgt umgeschrieben werden in:

$$P(Q) = \int_0^\infty \rho(R) \frac{\sin(QR)}{QR} 4\pi R^2 dR \quad (6)$$

Mathematisch gesehen beschreiben die Gleichungen (5) und (6) eine Fouriertransformation. Der Formfaktor ist mithin die Fouriertransformierte der zugehörigen Dichtefunktion (sichtbares Licht: Brechungsindexverteilung; Röntgenstrahlung: Elektronendichte im Atom). Das Streuvermögen eines einzelnen Teilchens ergibt sich allgemein als Fouriertransformierte der für den Streuprozess verantwortlichen Dichtefunktion.

### 3.2 Formfaktor harter Kugeln: Bestimmung des Kugelradius

Im vorliegenden Versuch wird das Streuvermögen von Latexkolloiden mit einer engen Größenverteilung untersucht. Wenn man die Latexteilchen als harte Kugeln betrachtet, kann man für  $\rho(R)$  schreiben:

$$\rho(R) = \begin{cases} \rho_0, & \text{für } R \leq R_K \\ 0, & \text{für } R > R_K \end{cases} \quad (7)$$

Für das Integral aus Gleichung (6) gilt dann:

$$P(Q) = 4\pi\rho_0 \int_0^{R_K} \frac{\sin(QR)}{QR} R^2 dR \quad (8)$$

Das Integral ist analytisch lösbar:

$$P(Q) = \frac{4\pi\rho_0}{Q^3} [\sin(QR_K) - QR_K \cos(QR_K)] \quad (9)$$

Die gemessene Intensität ist proportional zum Quadrat von  $P(Q)$ :

$$I(Q) \propto P(Q)^2 \quad (10)$$

Guinier hat gezeigt, dass sich  $I(Q)$  aus den Gleichungen (9) und (10) für nicht zu große Winkel durch folgenden, leicht linearisierbaren Ausdruck approximieren lässt:

$$\frac{I(Q)}{I(0)} = \exp\left(-\frac{Q^2 R_G^2}{3}\right), \quad \text{mit } R_G = \sqrt{\frac{3}{5}} R_K. \quad (11)$$

$R_G$  ist der sogenannte Gyration- oder Guinier-Radius, aus dem sich der Kugelradius wie in Gleichung (11) angeben berechnen lässt.

### 3.3 Streuvermögen von Teilchen-Ensembles oder interpartikuläre Streuung: Der Strukturfaktor und die Paarverteilungsfunktion

Beschreibt der Formfaktor  $P(Q)$  das Streuvermögen des einzelnen Teilchens, so gibt der Strukturfaktor  $S(Q)$  an, wie die Streuintensität durch die spezifische Anordnung eines Teilchenensembles moduliert wird. Auch hier müssen alle auslaufenden Kugelwellen phasenrichtig addiert werden. Sind die Teilchen vollständig ungeordnet, d. h. zufällig verteilt, gilt für alle Winkel bzw. für alle Werte des Streuvektors  $\vec{Q}$ :

$$S(\vec{Q}) = 1 \quad (12)$$

Jede Abweichung von Eins hat ihre Ursache in einer mehr oder weniger geordneten Struktur des Teilchenensembles. In einer Flüssigkeit oder in einem amorphen Festkörper (z. B. Glas) manifestiert sich Ordnung in einem mittleren Abstand, den die Teilchen untereinander einnehmen und in der Bevorzugung einer mittleren Koordinationszahl. Quantifiziert werden diese strukturellen Aspekte mit Hilfe der sogenannten Paarverteilungsfunktion  $g(R)$ .

Sie gibt an, mit welcher Wahrscheinlichkeit in einem bestimmten Abstand  $R$  vom Bezugsteilchen aus gesehen ein anderes Teilchen anzutreffen ist. In einer Flüssigkeit kann man eine vorhandene Nahordnung durch Maxima und Minima in  $g(R)$  erkennen. Die Paarverteilungsfunktion ist für große  $R$  auf 1 normiert. Strukturfaktor  $S(Q)$  und Paarverteilungsfunktion sind nun wiederum durch eine Fouriertransformation

$$S(Q) - 1 = 4\pi n_0 \int_0^\infty [g(R) - 1] \frac{\sin(QR)}{QR} R^2 dR \quad (13)$$

bzw. durch ihre Umkehrung

$$g(R) - 1 = \frac{4\pi}{n_0} \int_0^\infty [S(Q) - 1] \frac{\sin(QR)}{QR} Q^2 dQ \quad (14)$$

miteinander verknüpft ( $n_0$ : mittlere Teilchenzahldichte).

### 3.4 Die Modellsysteme: Kolloidale Latexsuspensionen

Die im Experiment verwendete kolloidale Suspension besteht aus kugelförmigen Latexpartikeln mit einer engen Partikelgrößenverteilung. Die Oberfläche wird im Wesentlichen aus den R–O–SO<sub>2</sub>–O–Kopfgruppen gebildet, d. h. sie ist negativ aufgeladen. Die Latexpartikel wechselwirken untereinander mit einem repulsiven Coulombpotenzial, das in Konkurrenz zur thermischen Unordnung für den Aufbau einer nahgeordneten Struktur sorgt. Im vorliegenden System gelingt das jedoch nur dann, wenn das Coulombpotenzial langreichweitig ist und nicht durch die Gegenwart anderer geladener Teilchen abgeschirmt wird.<sup>3</sup> Zum Strukturaufbau muss die Ionenstärke mit Hilfe des Ionenaustauschers reduziert werden. Die Streuintensität  $I(Q)$  der Probe mit Ionenaustauscher ist im Unterschied zu Gleichung (10) durch

$$I(Q) = NS(Q)P(Q)^2 \quad (15)$$

gegeben.  $N$  ist die Anzahl der Latexpartikel im Streuvolumen  $V$ . In der Probe ohne Ionenaustauscher wurde im Suspensionsmittel Wasser eine NaCl-Konzentration von  $10^{-5}$  mol/L eingestellt. Dadurch wird das Coulomb-Potenzial der Latexpartikel – ähnlich wie in der Debye-Hückel-Theorie beschrieben – stark abgeschirmt und kurzreichweitig.

<sup>3</sup>Informieren Sie sich in Lehrbüchern über das Coulomb-Potenzial und das abgeschirmte Coulomb-Potenzial.

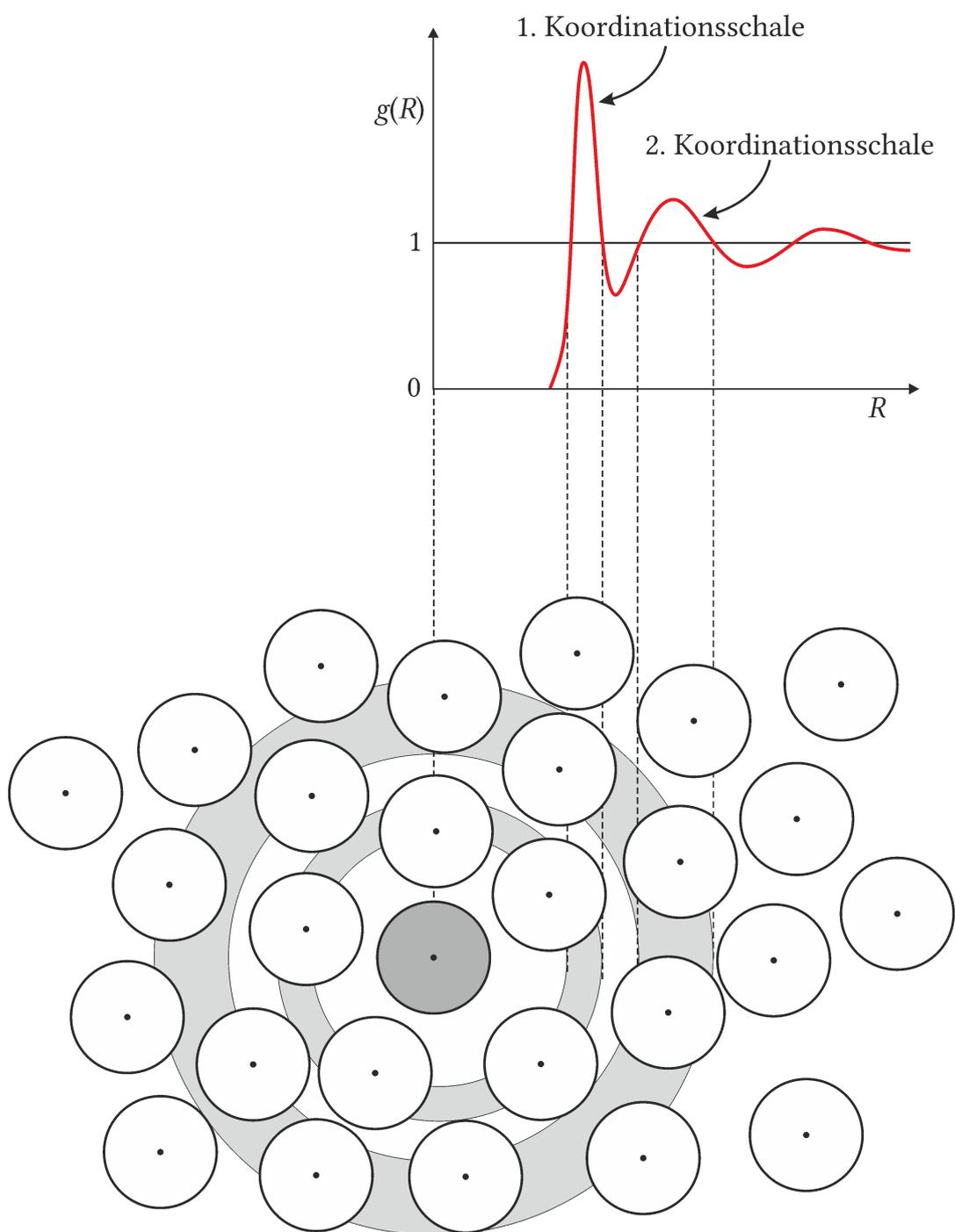


Abbildung 3: Anordnung von Teilchen im Raum und Beschreibung der Struktur mit Hilfe der Paarverteilungsfunktion  $g(R)$ . Die Koordinationsschalen sind durch Maxima in  $g(R)$  erkennbar.

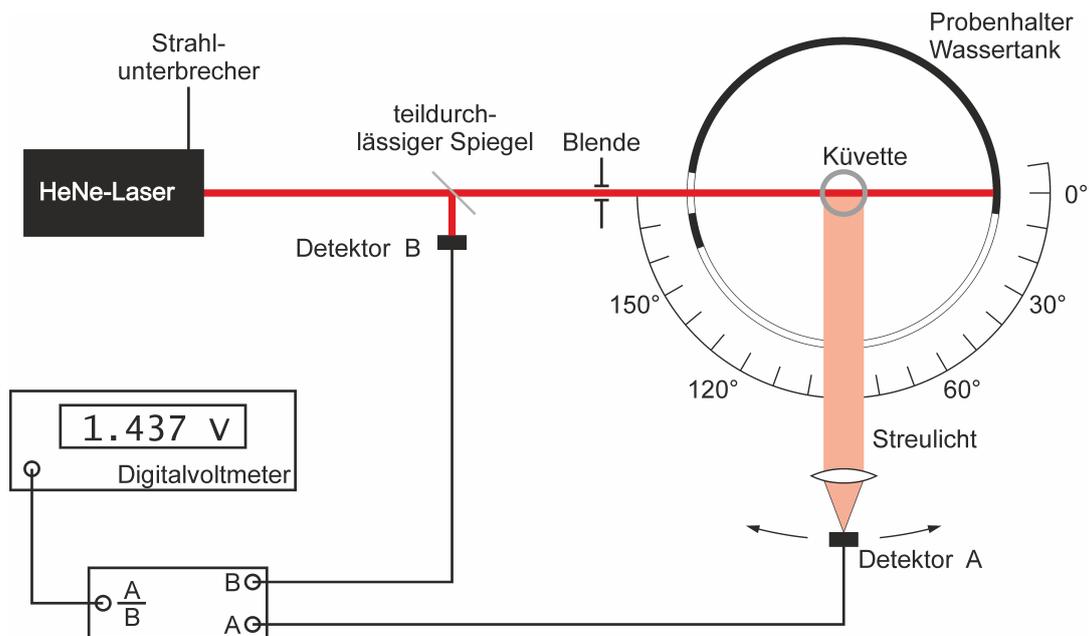


Abbildung 4: Aufbau des Experiments

Wir können die dominierenden intermolekularen Wechselwirkungen in diesen Modellsystemen gleichsam abschalten. Die Partikel üben keine Kräfte mehr aufeinander aus und ordnen sich völlig ungeordnet oder statistisch an. Für die Streuintensität  $I_0(Q)$  der Probe ohne Ionenaustauscher gilt gemäß Gleichung (10):

$$I_0(Q) = NP(Q)^2 \quad (16)$$

Damit ist der Strukturfaktor der nahgeordneten Systeme vergleichsweise einfach zugänglich durch:

$$S(Q) = \frac{I(Q)}{I_0(Q)} \quad (17)$$

## 4 Aufbau und Durchführung des Experiments

In Abbildung 4 sind die wesentlichen Komponenten des Experiments schematisch dargestellt: Der Strahl eines HeNe-Lasers (632,8 nm) wird durch einen teildurchlässigen Spiegel und eine Blende geführt. Er trifft auf die Probenküvette in der Mitte eines Probenhalters, der als Wassertank ausgelegt ist. Das Streulicht tritt unter dem Streuwinkel  $\theta$  aus der Küvette aus und erreicht durch eine weitere Blende und eine fokussierende Linse den Detektor A. Dieser ist um die zentrale Achse drehbar, in der die Probe positioniert ist. Der Winkel  $\theta$  kann auf der rechten Seite des Detektorarms an einer Markierung, die im Betrieb mit dem fahlen Licht einer Leuchtdiode erhellt wird, abgelesen werden. Zur Verminderung des Einflusses von Laserlichtschwankungen wird ein Teil der Laserintensität am halbdurchlässigen Spiegel ausgekoppelt und mit Detektor B gemessen. Aus den

Signalen A und B wird der Quotient in der Verstärkereinheit gebildet und dieser mit dem Digitalvoltmeter angezeigt.

Es ist wichtig, dass die Detektoren von anderen Lichtquellen abgeschirmt werden, die das Signal verfälschen können. Die Messungen sollten daher bei absoluter Dunkelheit erfolgen. Eine Lichtquelle (Taschenlampe o. ä.) soll nur dann eingeschaltet werden, wenn der Intensitätsmesswert notiert wird. Beobachten Sie, wie sich der Intensitätswert ändert, wenn eine zusätzliche Lichtquelle eingeschaltet wird!

Zur Montage der Proben in der zentralen Bohrung des Wassertanks bleibt der Strahlunterbrecher des Lasers zunächst geschlossen. Zur Überprüfung der Justierung wird er geöffnet. Der Wassertank, der drehbar und höhenverstellbar aufgeständert ist, wird so orientiert, dass der einfallende Laserstrahl durch den Spalt auf die Probe fallen kann und nach Durchgang vom Strahlfänger gestoppt wird. Justieren Sie den Tank in der Höhe so, dass der Laserstrahl die Probe etwa 1 cm über dem Ionentauscher durchstrahlt. Anschließend wird der Wassertank mit vollentsalztem Wasser gefüllt, wobei die Wasseroberfläche mindestens 1 cm oberhalb der Streuebene liegen soll. Beim Probenwechsel darf die Tankjustierung nicht mehr verändert werden.

**Achtung:** die Latexsuspension mit Ionentauscher darf nicht geschüttelt werden, da sonst die Nahordnung zerstört wird. Die Neubildung eines nahgeordneten Zustands dauert mehrere Tage!

Es werden zwei Proben vermessen:

- die Latexsuspension ohne Ionentauscher,
- die Latexsuspension mit Ionentauscher.

Zunächst wird die Startintensität des Messsystems durch Justierung der Referenzintensität festgelegt: Dazu wird die Probe ohne Ionentauscher eingesetzt und der Detektor auf  $20^\circ$  eingestellt. Der Quotientenverstärker und die Anzeigeeinheit werden eingeschaltet. Alle anderen Lichtquellen werden ausgeschaltet. Durch leichtes Verschieben (sehr empfindlich) des schwarzen Filters am Referenzdetektor kann die Startanzeige auf einen Wert zwischen 0,6 und 1,3 eingestellt werden.

Die Proben werden im Winkelbereich zwischen  $20^\circ$  und  $140^\circ$  in  $2^\circ$ -Schritten vermessen. Zur Überprüfung der Reproduzierbarkeit wird anschließend von  $140^\circ$  in  $10^\circ$ -Schritten zurückgemessen. Achten Sie darauf, dass Sie sich während der Messung nicht auf der Grundplatte des Experiments abstützen (führt zu Dejustierungen und Fehlmessungen).

Schließen Sie nach dem Experiment den Strahlunterbrecher des Lasers, entnehmen Sie die zuletzt vermessene Probe und entleeren Sie den Wassertank. Schalten Sie die Detektoren und das Digitalvoltmeter aus. Der Laser bleibt in der Regel an (erkundigen Sie sich diesbezüglich bei der Praktikumsorganisation).

## 5 Darstellung der Messergebnisse und Auswertung

1. Die Messdaten werden z. B. in eine Excel- oder Origin-Tabelle eingegeben. Stellen Sie die  $2^\circ$ -Rohdaten und  $10^\circ$ -Rohdaten der beiden Proben in einem Diagramm

gegen den Streuwinkel dar (unterscheidbar in Symbol oder Farbe). Erläutern Sie, wie gut Ihre Messreihen reproduzierbar waren. Alle weiteren Darstellungen und Rechnungen erfolgen jetzt nur noch mit den 2°-Daten.

2. Berechnen Sie den Betrag des Streuvektors  $\vec{Q}$  und erstellen Sie folgende Diagramme:  $I_{ohne}$  gegen  $|\vec{Q}|$  und  $I_{mit}$  gegen  $|\vec{Q}|$ .
3. Bilden Sie dann den Quotienten  $I_{mit}/I_{ohne}$  und tragen Sie ihn gegen  $Q$  auf. Sie erhalten dann den Strukturfaktor der naheordneten Suspension nach Gleichung (17). Eine einfache Auswertung des Strukturfaktors führt zum mittleren Teilchenabstand  $R_0$ , wenn wir das Maximum als Bragg-Reflex interpretieren. Für einen Bragg-Reflex gilt:

$$m \frac{\lambda_0}{n} = 2R_0 \sin \left( \frac{\theta_{max}}{2} \right), \quad (18)$$

wobei  $\theta_{max}$  der Winkel des ersten Intensitätsmaximums,  $m = 1$  die Beugungsordnung,  $\lambda_0$  die Vakuumwellenlänge des Laserlichts und  $n$  der Brechungsindex von Wasser bei Raumtemperatur sind.

4. Untersuchen Sie als nächstes den Formfaktor der Latexteilchen, indem Sie eine Guinier-Auftragung von  $I_{ohne}$  vornehmen. Suchen Sie den  $Q$ -Bereich mit einem nahezu linearen Verlauf Ihrer Daten<sup>4</sup> und errechnen Sie aus der Steigung den Teilchenradius.
5. Diskutieren Sie den Kurvenverlauf von  $I_{ohne}$  gegen  $Q$  oder  $\theta$ : warum und in welchem Winkelbereich ergeben sich Abweichungen von Gl. (9) bis (11)? Achten Sie auch auf experimentelle Einflüsse.
6. Betrachten Sie den Kurvenverlauf von  $S(Q)$ : welche Gründe könnte es für die große Halbwertsbreite des Maximum geben? Oder: was bedeutet ein scharf ausgeprägtes Maximum in  $S(Q)$ , was bedeutet ein breites? Hinweis: Wenden Sie die Scherrer-Gleichung auf diese Fragestellungen an.
7. Plotten Sie  $I_{ohne}$  gegen  $Q$  nach Gleichung (9) bzw. (10) (also die exakte Lösung für kugelförmige Teilchen) und nach der Guinier-Näherung nach Gleichung (11). In welchem Winkelbereich ist die Übereinstimmung besser als 1%?  
Hinweis: Berechnen Sie  $(P_{exakt}(Q)/P(0))^2$  mit Ihrem Wert für  $R_K$ , d. h. Sie müssen den Grenzwert für  $Q = 0$  aus Gleichung (9) finden. Vergleichen Sie dann mit  $I(Q)/I(0)$  nach Gleichung (11).
8. Zeigen Sie, dass  $P(0)$  für die Streuung von Röntgenphotonen an Atomen die Ordnungszahl  $Z$  der jeweiligen Atomsorte ist.
9. Warum wird die Probe in einem zylindrischen Wassertank platziert?

---

<sup>4</sup>Meist wird dieser Bereich zwischen 20° und 80° liegen

## 6 Literatur

1. D. W. L. Hukins: *X-Ray Diffraction by Disordered and Ordered Systems*, Pergamon Press (Oxford 1981).
2. A. Guinier und G. Fournet: *Small-Angle Scattering of X-Rays*, Wiley (New York 1955).

### Originalarbeiten:

3. W. Härtl, H. Versmold, U. Wittig, V. Marohn: *Liquid-like structure of charged colloidal dispersions in the presence of screening ions*, Mol. Phys. **50** (1983) 815.
4. W. Härtl, H. Versmold: *Light scattering investigations of the structure and dynamics of liquid-like ordered colloidal suspensions*, Z. Phys. Chem. NF **153** (1987) 1.
5. C. Segschneider, H. Versmold: *A simple Bragg diffraction experiment with harmless visible light*, J. Chem. Educ. **67** (1990) 967.
6. B. H. Spencer, R. N. Zare: *Direct visualization of Bragg diffraction with a He-Ne laser and an ordered suspension of charged microspheres*, J. Chem. Educ. **68** (1991) 97.
7. J. C. Brown, J. W. Goodwin, R. H. Ottewill, P. N. Pusey: *The determination of the radial distribution function for interacting latex particles*, Colloid Interface Sci. [Proc. Int. Conf.] 50<sup>th</sup>, **4** (1976) 59.

## 7 Hinweise zur Gefährdungsbeurteilung

Bei diesem Versuch ist die Gefährdung durch den verwendeten HeNe-Laser zu beurteilen. Er ist in die Laserklasse 3B eingestuft. Mit seinen 5 mW Lichtleistung kann er eine Gefahr darstellen, wenn der Laserstrahl ins Auge strahlt. Der Lidreflex ist nicht schnell genug, um eine Schädigung zu verhindern! Sie dürfen also keinesfalls direkt in den Strahl blicken, auch dann nicht, wenn dieser an einer Oberfläche spiegelnd reflektiert wird (z. B. Glasoberfläche). Das an rauen Oberflächen gestreute Licht und das von der Probe diffus gestreute Licht ist bei diesem Laser ungefährlich. Er stellt auch bei direkter Bestrahlung der Haut keine Gefährdung dar. Überlegen Sie, welche

1. organisatorischen und administrativen Maßnahmen,
2. technischen Maßnahmen Sie ergreifen sollten und
3. welche persönliche Schutzausrüstung sinnvoll ist.

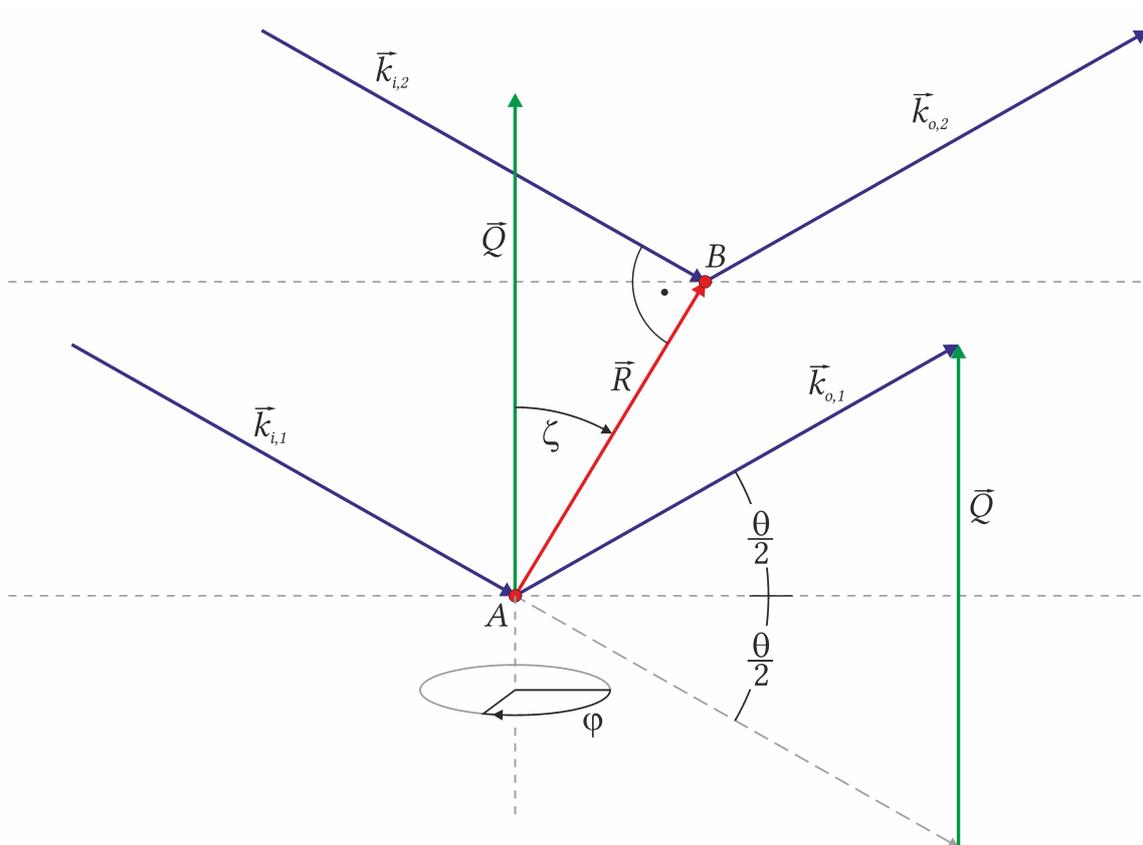


Abbildung 5: Variante der Streugeometrie analog Abb. 2 zur Verdeutlichung der Integration über das gesamte Volumen.  $\vartheta$  wird als Polarwinkel,  $\varphi$  als Azimutalwinkel bezeichnet (man beachte den Unterschied zu  $\theta$  und  $\phi$ ).

## 8 Anhang

Für Interessierte wird hier die Gleichung 6 aus Gleichung 5 hergeleitet.<sup>5</sup> Der Stoff ist nicht prüfungsrelevant.

In Abbildung 5 ist die Streugeometrie analog Abb. 2 in leicht variiert Form und etwas detaillierter dargestellt. Die beiden Wellen mit den Wellenvektoren  $\vec{k}_{i,1}$  und  $\vec{k}_{i,2}$  treffen mit einer Phasenverschiebung von  $\Delta\phi = 0$  auf die beiden Streuzentren A und B (zur Verdeutlichung an Punkt B ein rechter Winkel). Die Phasenverschiebung nach dem Streuprozess beträgt gemäß Gleichung 3

$$\Delta\phi = |\vec{R}||\vec{Q}| \cos \frac{\theta}{2} \quad (19)$$

Aus geometrischen Gründen gilt gemäß Abbildung 5:

<sup>5</sup>siehe z. B. : Berry/Rice/Ross, *Physical Chemistry*, Wiley, New York u. a. O (1980)

$$\vartheta = \frac{\theta}{2} \quad \text{und damit} \quad \Delta\phi = |\vec{R}||\vec{Q}| \cos \vartheta. \quad (20)$$

Gleichung 5 kann auch als Dreifachintegral über die kartesischen Komponenten  $x$ ,  $y$  und  $z$  des Vektors  $\vec{R}$  dargestellt werden (Abkürzungen:  $|\vec{R}| = R$  und  $|\vec{Q}| = Q$ ):

$$P(Q) = \int \int \int \rho(\vec{R}) \exp(-iRQ \cos \vartheta) dx dy dz \quad (21)$$

In Systemen mit sphärischer Symmetrie geht die Dichtefunktion  $\rho(\vec{R})$  über in  $\rho(R)$ . Die Integration über das Volumen wird zweckmäßigerweise in Kugelkoordinaten durchgeführt. Für das Volumenelement, über das zu integrieren ist, gilt dann:<sup>6</sup>

$$dV = dx dy dz = R^2 \sin \vartheta dR d\vartheta d\varphi \quad (22)$$

Winkel gemäß der Notation aus Abbildung 5. Aus Gleichung 21 wird dann:

$$P(Q) = \int_{\varphi=0}^{2\pi} \int_{\vartheta=0}^{\pi} \int_{R=0}^{\infty} \rho(R) \exp(-iRQ \cos \vartheta) R^2 \sin \vartheta dR d\vartheta d\varphi \quad (23)$$

Die Integration über  $\varphi$  liefert den Faktor  $2\pi$

$$P(Q) = 2\pi \int_{\vartheta=0}^{\pi} \int_{R=0}^{\infty} \rho(R) \exp(-iRQ \cos \vartheta) R^2 \sin \vartheta dR d\vartheta \quad (24)$$

Nach Umstellen des Integranden erhält man:

$$\begin{aligned} P(Q) &= 2\pi \int_{R=0}^{\infty} \left[ \int_{\substack{\vartheta=0 \\ \cos \vartheta=1}}^{\vartheta=\pi \\ \cos \vartheta=-1} \exp(-iRQ \cos \vartheta) d(\cos \vartheta) \right] \rho(R) R^2 dR \\ &= 2\pi \int_0^{\infty} \left[ \left. \frac{i \cdot \exp(-iRQ \cos \vartheta)}{QR} \right|_{\cos \vartheta=1}^{\cos \vartheta=-1} \right] \rho(R) R^2 dR \\ &= 2\pi \int_0^{\infty} \left[ \frac{i \cdot \exp(iQR)}{QR} - \frac{i \cdot \exp(-iQR)}{QR} \right] \rho(R) R^2 dR \\ &= 2\pi \int_0^{\infty} \left[ \frac{2 \sin(QR)}{QR} \right] \rho(R) R^2 dR \\ P(Q) &= 4\pi \int_0^{\infty} \rho(R) \frac{\sin(QR)}{QR} R^2 dR \end{aligned} \quad (25)$$

Diese Endergebnis ist unzweifelhaft identisch mit Gleichung 6

---

<sup>6</sup> siehe z. B. : M. R. Spiegel, *Höhere Mathematik für Ingenieure und Naturwissenschaftler*, McGraw-Hill, Hamburg u. a. O. (1978), S. 129.