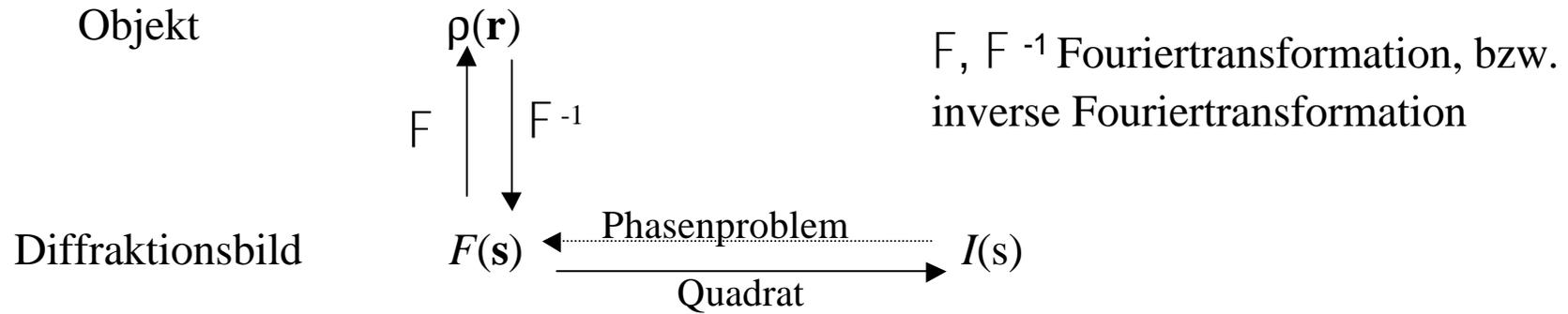


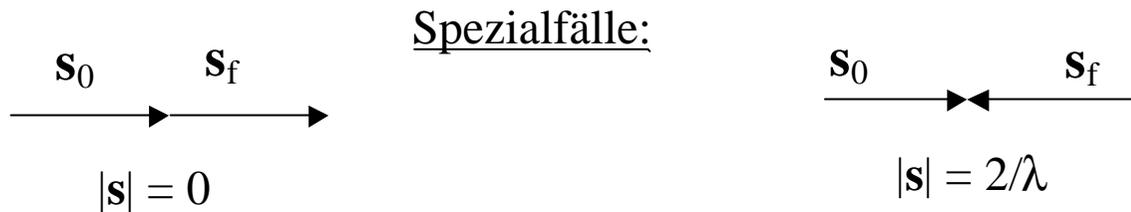
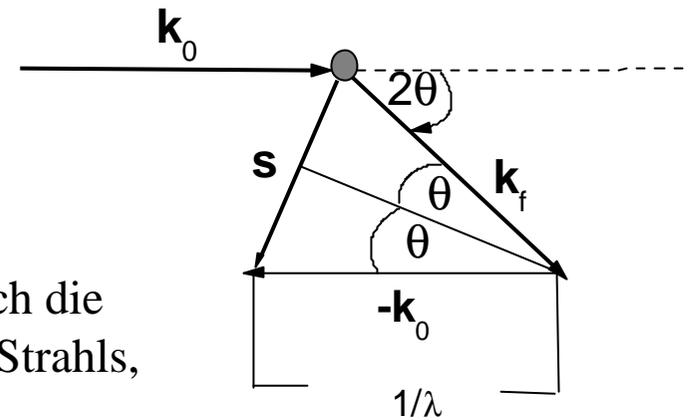
Schematische Darstellung der Diffraktion



Der Streuvektor \mathbf{s}

$$\frac{|\mathbf{s}|}{2} / \frac{1}{\lambda} = |\sin \mathbf{q}| \quad \Rightarrow \quad \boxed{|\mathbf{s}| = \frac{2}{\lambda} |\sin \mathbf{q}|}$$

Die Länge des Streuvektors \mathbf{s} wird sowohl durch die **Richtung** des einfallenden und des gebeugten Strahls, als auch durch die **Wellenlänge** bestimmt.



Der Strukturfaktor und die Elektronendichteverteilung

Im Prinzip ist die Elektronendichteverteilung $\rho(\mathbf{r})$ direkt messbar und muss somit eine reelle Größe darstellen. Diese Tatsache hat einen Einfluss auf $F(\mathbf{s})$:

Da $\rho(\mathbf{r})$ reel ist, muss gelten $\rho(\mathbf{r}) = \rho(\mathbf{r})^*$ (i.e. die konjugiert komplexe Größe)

$$\Rightarrow \int_{-\infty}^{+\infty} F_r(\mathbf{s}) + iF_i(\mathbf{s})e^{-i2\mathbf{p}\mathbf{s}\mathbf{r}} d\mathbf{s} = \int_{-\infty}^{+\infty} F_r(\mathbf{s}) - iF_i(\mathbf{s})e^{+i2\mathbf{p}\mathbf{s}\mathbf{r}} d\mathbf{s}$$

Da diese Gleichung für alle möglichen \mathbf{r} gelten muß, folgt:

$$F_r(\mathbf{s}) = F_r(-\mathbf{s}) \qquad F_i(\mathbf{s}) = -F_i(-\mathbf{s}) \qquad \Rightarrow \text{Konjugierte Funktion}$$

Realteil:

symmetrisch im Ursprung

Imaginärteil:

anti-symmetrisch im Ursprung

$$\text{Für die Intensitäten folgt: } I(\mathbf{s}) = |F(\mathbf{s})|^2 = F_r^2 + F_i^2 = |F(-\mathbf{s})|^2 = I(-\mathbf{s})$$

\Rightarrow Die **gebeugte Intensität ist symmetrisch im Ursprung** des reziproken Raums.

Dieses Resultat, dass $I(\mathbf{s})$ ein Symmetriezentrum hat, ist als **Friedel-Gesetz** bekannt.

\Rightarrow Es muss die Information nur einer Hälfte des reziproken Raums gemessen werden !

Kontrast: Die Heterogenität der Elektronendichteverteilung

Wäre die Elektronendichteverteilung absolut gleichmäßig im Raum verteilt das heißt $\rho(\mathbf{r}) = \rho$, so würde sich für den Strukturfaktor ergeben:

$$F(\mathbf{s}) = \rho \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i2\pi\mathbf{s}\cdot\mathbf{r}} d\mathbf{r}$$

Dieser Ausdruck ist durch die Dirac'sche Deltafunktion gegeben

$$\Rightarrow \delta(\mathbf{s}-0)$$

Die gebeugte Strahlung von der Probe tritt also nur bei $F(0)$ auf. Streuung mit $\mathbf{s} = 0$ zeugt von gestreuter Strahlung parallel zum einfallenden Strahl. Mit anderen Worten, ein absolut homogenes Medium kann keine Strahlung beugen, so wie ein optisches Medium mit konstanten Brechungsindex keine Fokussierung hervorrufen kann.

\Rightarrow Ein fundamentales Prinzip der Beugung ist die Notwendigkeit von örtlicher (oder zeitlicher) Heterogenität bezüglich der Elektronendichteverteilung.

Beugung tritt also immer dann auf, wenn es einen Kontrast zwischen einer „lokalen Region“ und seiner Nachbarregion gibt (\Rightarrow vgl. auch Beugung am Spalt in der Optik).

Streuung von einem Atom im Ursprung: Der atomare Streufaktor

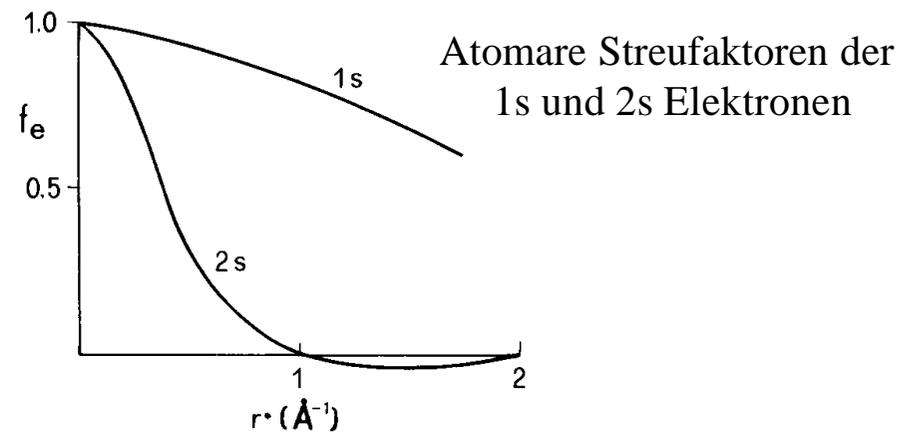
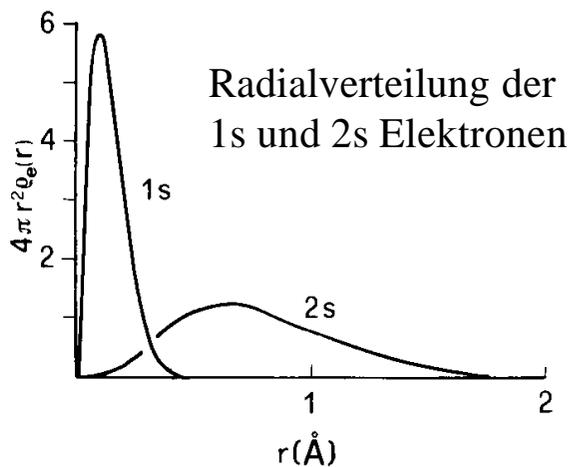
Bei nur einem Atom im Ursprung liegt in guter Näherung eine Elektronendichteverteilung vor, die durch eine Kugelsymmetrie beschreiben werden kann, d.h. die Elektronendichteverteilung hängt nur von der Länge des Ortsvektors $r = |\mathbf{r}|$ ab mit $\rho(\mathbf{r}) = \rho(r)$

$$F(\mathbf{s}) = \int_{-\infty}^{+\infty} \mathbf{r}(\mathbf{r}) e^{i2\mathbf{p}\mathbf{s}\mathbf{r}} d\mathbf{r} \quad (\text{Koordinatentransformation}) \rightarrow 4\mathbf{p} \int_0^{+\infty} \mathbf{r}(r) r^2 \frac{\sin(2\mathbf{p}sr)}{2\mathbf{p}sr} dr \equiv f(s)$$

$f(s)$ ist der **atomare Streufaktor**, der nur vom Betrag des Streuvektors \mathbf{s} mit $s = |\mathbf{s}|$ abhängt.

radiale Verteilungsfunktion: $U = 4\mathbf{p}r^2 \mathbf{r}(r)$ z.B. mit $\mathbf{r}(r) = Nz e^{-kr^2}$ Gaußverteilung
 k : Breite der Verteilung,
 N : Normierung,
 z : Anzahl der Elektronen

Da $\rho(r) = \rho(-r)$ gilt, ist $f(s)$ eine reelle Größe.
 für $f(s)$ gilt also: $f(s) = \pm \sqrt{I(s)}$

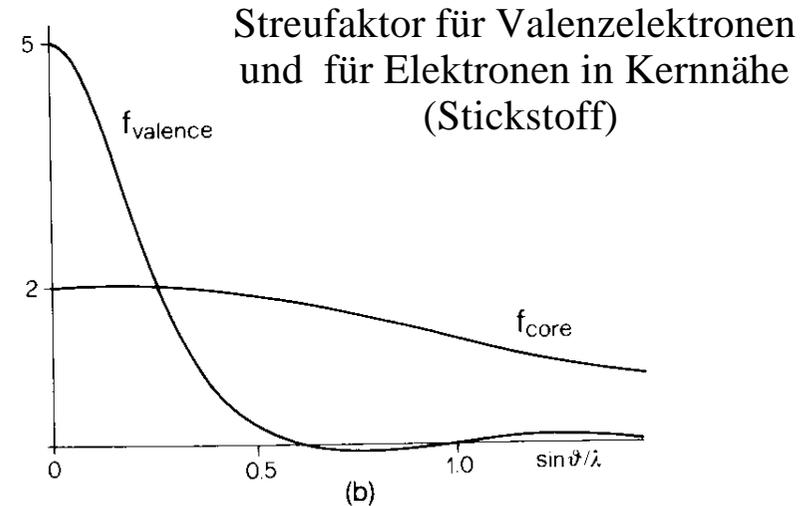


Der atomare Streufaktor

Beiträge verschiedener Elektronen

Die Streuung von großen $\sin(\theta)/\lambda$ –Werten wird durch Elektronen der **inneren Schalen hervorgerufen** (f_{core}), die Streuung bei kleinen $\sin(\theta)/\lambda$ –Werten wird durch die **Valenzelektronen** (f_{val}) bestimmt.

Der resultierende atomare Streufaktor ergibt sich somit aus der Summe: $f = f_{core} + f_{val}$



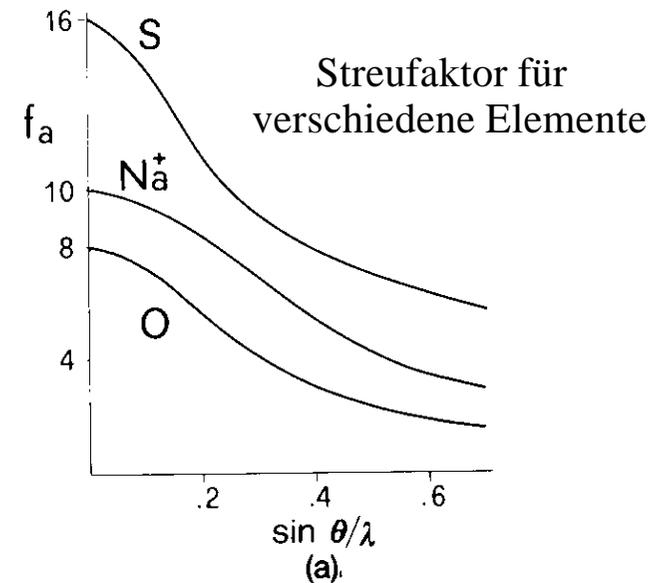
Atomare Streufaktoren unterschiedlicher Elemente

Die Unterschiede in den atomaren Streufaktoren für verschiedene Elemente ergeben sich aus der unterschiedlichen Anzahl der Elektronen:

$$f_a(s) = \sum_{j=1}^Z f e_j$$

$f_a(s)$ maximal (und $\sim Z$) bei $\sin(\theta)/\lambda = 0$.

$f e = 1$ für $\sin(\theta)/\lambda = 0$, da in Richtung des einfallenden Strahls keine Compton-Streuung auftritt (der einzige relevante Konkurrenzprozess bei Energien von $\sim 0.5 - 6 \text{ \AA}$).

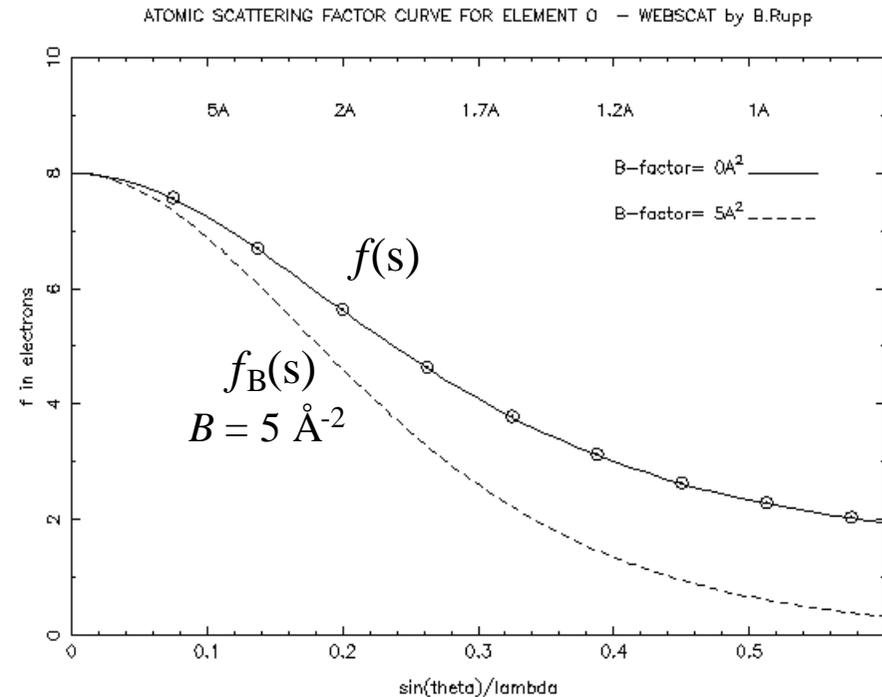
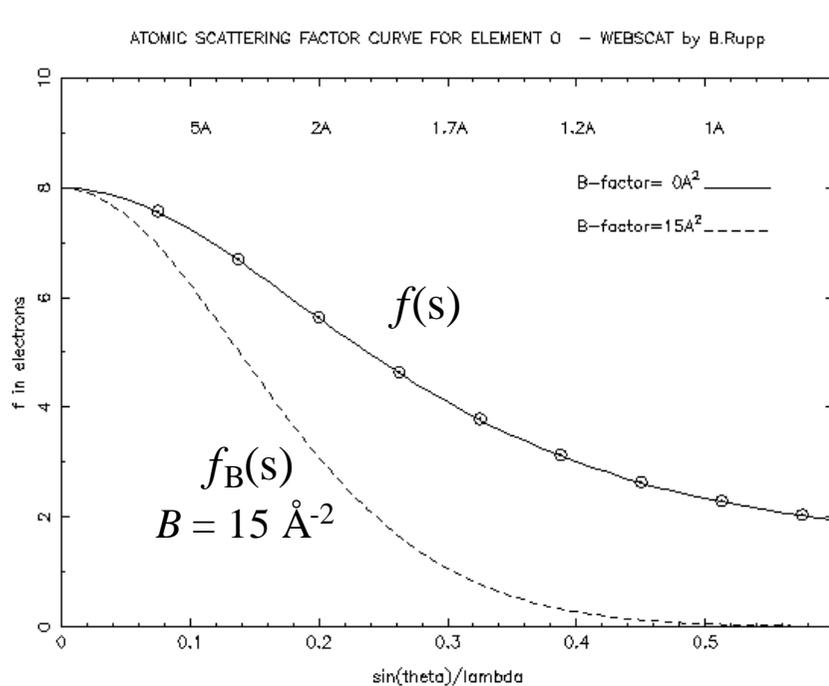


Der atomare Temperatur-, B- oder Debye-Waller- Faktor

Thermische Fluktuationen um die Mittelpunktslage des Atoms finden auf einer sehr viel kürzeren Zeitskala (Femto – Nanosekunden) als ein typisches Streuexperiment statt. Diese Fluktuationen mit einer mittleren Auslenkungsamplitude $\langle u \rangle^2$ sind temperaturabhängig und schwächen den atomaren Strukturfaktor $f(s)$ mit steigenden $\sin(\theta) / \lambda$ –Werten:

$$f_B(s) = f(s)e^{-B \cdot (\sin \theta / \lambda)^2}$$

mit $B = 8\pi^2 \langle u \rangle^2$ (Debye-Waller Faktor)



Verschiebung der Atomlagen

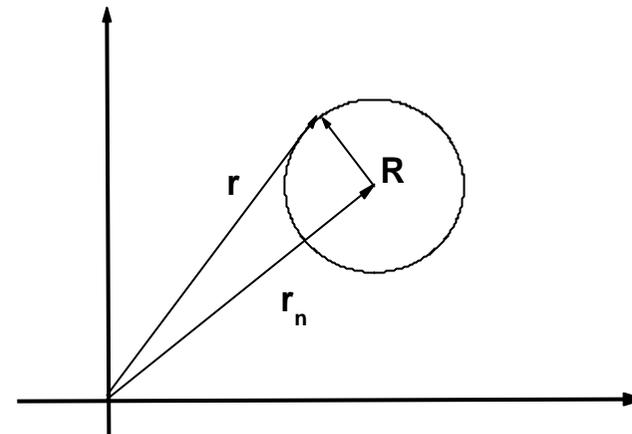
Die Verschiebung eines einzelnen Atoms vom Ursprung zu einer Position \mathbf{r}_n **entspricht im Strukturfaktor einer Phasenverschiebung:**

$$F(\mathbf{s}) = \int_{-\infty}^{+\infty} \mathbf{r}(\mathbf{R} + \mathbf{r}_n) e^{i2\pi\mathbf{s}(\mathbf{R} + \mathbf{r}_n)} d(\mathbf{R} + \mathbf{r}_n)$$

Da \mathbf{r}_n konstant ist, $d(\mathbf{R} + \mathbf{r}_n) = d\mathbf{R}$, und der Term $\exp(2\pi i \mathbf{r}_n \mathbf{s})$ vor das Integral gezogen werden kann ergibt sich:

$$F(\mathbf{s}) = e^{i2\pi\mathbf{s}\mathbf{r}_n} \int_{-\infty}^{+\infty} \mathbf{r}(\mathbf{R} + \mathbf{r}_n) e^{i2\pi\mathbf{s}\mathbf{R}} d(\mathbf{R})$$

$\underbrace{\hspace{15em}}_{= f(\mathbf{s})}$



$$\Rightarrow F(\mathbf{s}) = f(\mathbf{s}) e^{i2\pi\mathbf{s}\mathbf{r}_n}$$

Für ein einzelnes Atom, das in seiner Lage verschoben wird **ändert sich die gestreute Intensität nicht**, da $I(\mathbf{s}) = f^2(\mathbf{s})$ gilt. Wenn jedoch zwei gleiche Atome im Ursprung und an der Position \mathbf{r}_n vorhanden sind ergibt sich:

$$F(\mathbf{s}) = f(\mathbf{s})(1 + e^{i2\pi\mathbf{s}\mathbf{r}_n})$$

Um Intensitäten zu bekommen, die in der Praxis zu messen sind werden sehr viele streuende Atome benötigt. \Rightarrow Strukturinformation aus periodisch angeordneten Strukturen (z.B. Kristalle)

Berechnung der Diffraktionsbilder beliebiger einfacher Objekte

- Positionierung der Atome im Koordinatensystem \mathbf{r} (r_x, r_y, r_z)
wichtig: geeignete Lage im Koordinatensystem => Symmetrien !!
- Berechnung des Streuvektors \mathbf{s} , (s_x, s_y, s_z)
- Berechnung der Streuamplitude $F(s_x, s_y, s_z)$ im reziproken Raum,
i.e. Betrag $|F(s)|$ und Phase ϕ
- Berechnung der gestreuten Intensitäten $I(s_x, s_y, s_z)$ im reziproken Raum => Übungen

Wichtiges Ergebnis:

Bei unterschiedlicher Wahl des Koordinatenursprungs ändert sich nur die Phase. Der Betrag der Streuamplitude $|F(s)|$ und damit die gestreute Intensität bleiben unverändert.

Ist die Struktur **zentrosymmetrisch** erhält man nur Phasen mit den Werten $\phi = 0, \pi$.

Bei N Atomen ergibt sich in diesem Falle:

Für jedes Atom bei \mathbf{r}_n mit $f(s)e^{i2\mathbf{p}\mathbf{s}\mathbf{r}_n}$

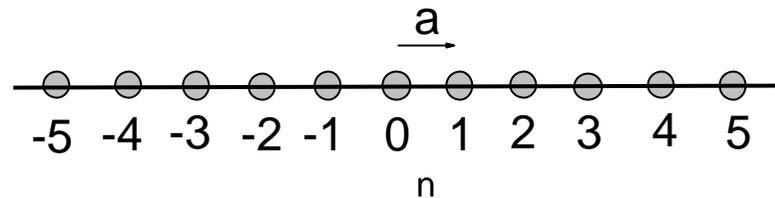
gibt es eines bei $-\mathbf{r}_n$ mit $f(s)e^{-i2\mathbf{p}\mathbf{s}\mathbf{r}_n}$

Mit ($e^{\pm i\phi} = \cos \phi \pm i \sin \phi$) ist zu erkennen, dass alle Sinusterme wegfallen.

$$F_{cs}(\mathbf{s}) = \sum_{n=1}^{N/2} 2f_n(s) \cos(2\mathbf{p}\mathbf{s}\mathbf{r}_n)$$

Interferenzen und periodische Anordnungen mehrerer Atome

Beispiel: eindimensionale periodische Anordnung mit einer Reihe von $2N + 1$ identischen Atomen (das zentrale Atom im Koordinatenursprung)



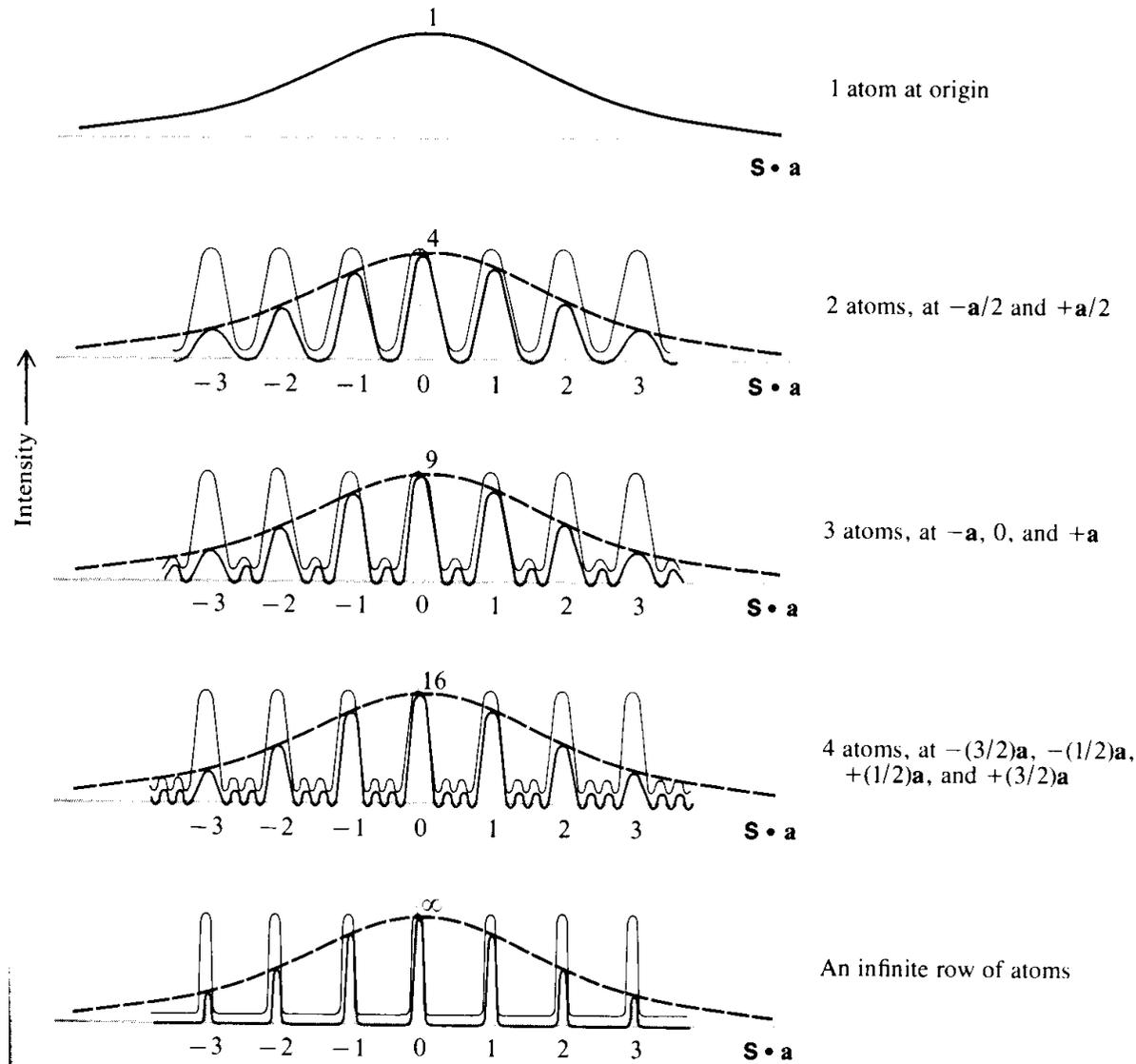
Die Position des n -ten Atoms ist na . Diese Anordnung ist durch Translation des Atoms im Ursprung um die Distanz na entstanden.

Der Strukturfaktor dieser Anordnung ist somit $F_{Tot}(\mathbf{s}) = f(s) \sum_{n=-N}^N e^{2\mathbf{p}i n \mathbf{s} a}$

Dieser Term stellt eine geometrische Reihe dar die sich wie folgt darstellen lässt:

$$F_{Tot}(\mathbf{s}) = f(s) \frac{\sin[(2N+1)\mathbf{p}\mathbf{s}a]}{\sin\mathbf{p}(\mathbf{s}a)} \quad \Rightarrow \quad I_{Tot}(\mathbf{s}) = |F_{Tot}(\mathbf{s})|^2 = |f(s)|^2 \left(\frac{\sin[(2N+1)\mathbf{p}\mathbf{s}a]}{\sin\mathbf{p}(\mathbf{s}a)} \right)^2$$

Interferenzen und periodische Anordnungen mehrerer Atome



Beispiel: eindimensionale periodische Anordnung

Beugungsverteilung
(Einhüllende Kurve):
Streuung an einem Atom

Interferenzmuster
(„fringe“-function):
Lage der Atome

Interferenzen und periodische Anordnungen mehrerer Atome

Beispiel: eindimensionale periodische Anordnung

Eigenschaften der Beugung:

- Der Term \mathbf{sa} stellt die relative Orientierung der Probe zum Detektor dar.
- Die Intensität ist bei $\mathbf{sa} = 0$ maximal. Dies tritt nur dann auf wenn \mathbf{s} senkrecht auf der Achse der Atomreihe steht.
- Der Strukturfaktor und damit die Intensität wird immer dann sehr groß, wenn $\sin(\pi\mathbf{sa})$ gegen null geht. Das geschieht immer wenn \mathbf{sa} den Wert einer ganzen Zahl annimmt. Verglichen damit ist die Intensität an den anderen Stellen zu vernachlässigen (insbesondere bei einer großen Anzahl von Atomen in der Reihe: $N \rightarrow \infty$).
- Die „fringe“-Funktion einer linearen Anordnung führt zu einem diskontinuierlichen (diskreten) Beugungsbild.
- Nur für bestimmte Orientierungen der Probe zum einfallenden Strahl wird überhaupt messbare Intensität beobachtet: nur für $\mathbf{sa} = h$ mit $h = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots$ (**Laue-Bedingung**)

Fourierreihen und Fouriertransformation

Entwicklung einer Funktion in eine Potenzreihe:

$$f(x) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n \cdot x^n = a_0 + a_1 \cdot x + a_2 \cdot x^2 + a_3 \cdot x^3 + \dots$$

Koeffizienten der Potenzreihe: a_n

Die Funktion $f(x)$ ist an der Stelle x mit der Potenzreihe identische.

$f(x)$ muß beliebig häufig differenzierbar sein (siehe Taylorreihenentwicklung).

Der Bereich in dem sich eine Funktion in eine Potenzreihe entwickeln läßt, heißt *Gültigkeitsbereich* oder *Konvergenzbereich*.

Beispiele:

1: geometrische Reihe

$$1 + x + x^2 + x^3 + \dots = \frac{1}{1-x}$$

Die Entwicklung ist nur konvergent für $-1 < x < 1$ und daher nur für diesen Bereich gültig.

2: periodische Funktion

$$f(x) = \sin x = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{(2n+1)!} x^{2n+1} = x - \frac{x^3}{3!} + \frac{x^5}{5!} - \dots$$

Diese Entwicklung ist konvergent für $-\infty < x < \infty$

Vorteile der Potenzreihen:

- einfache Funktionen und daher leicht differenzierbar
- oft reichen wenige Elemente der Reihe aus, um die Funktion schon recht präzise zu beschreiben

Fourierreihen und Fouriertransformation

Entwicklung einer beliebigen periodischen Funktion

$f(x) = f(x+T)$; T : Periode

in eine unendliche Reihe periodischer (trigonometrischer) Funktionen:

=> *Fourierreihe*

$$f(x) = \frac{a_0}{2} + \sum_{n=1}^{\infty} [a_n \cos(n\omega x) + b_n \sin(n\omega x)]$$

mit $\omega = 2\pi/T$ mit $T = 2\pi$ ist $\omega = 1$.

Wichtig zur Beschreibung der Fourierreihe ist nun die Bestimmung der

Fourierkoeffizienten. Für $T = 2\pi$ gilt:

$$a_0 = \frac{1}{P} \int_{-p}^p f(x) dx \quad a_n = \frac{1}{P} \int_{-p}^p f(x) \cos(nx) dx \quad b_n = \frac{1}{P} \int_{-p}^p f(x) \sin(nx) dx$$

Symmetriebetrachtungen:

gerade Funktion: $f(x) = f(-x)$ Bsp. cos-Funktion

ungerade Funktion: $f(x) = -f(-x)$ Bsp. sin-Funktion

Ist die Funktionen $f(x)$ gerade verschwinden die Koeffizienten b_n .

$$\Rightarrow f(x) = \frac{a_0}{2} + \sum_{n=1}^{\infty} [a_n \cos(n\omega x)]$$

Ist die Funktion $f(x)$ ungerade verschwinden die Koeffizienten a_n .

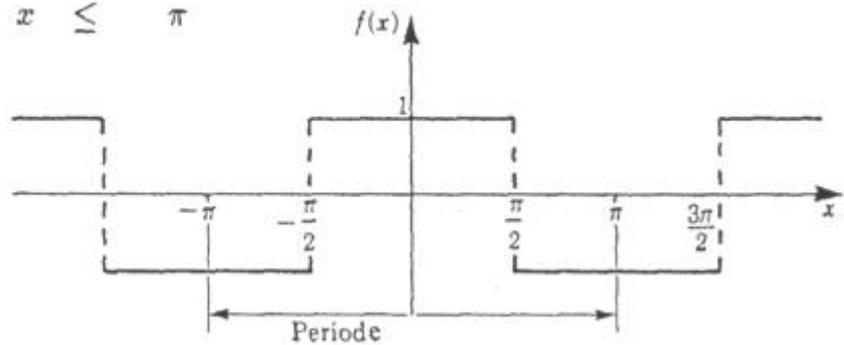
$$\Rightarrow f(x) = \sum_{n=1}^{\infty} [b_n \sin(n\omega x)]$$

Fourierreihen und Fouriertransformation

Beispiel einer Rechteckschwingung: $f(t)$ ist im Intervall von $-\pi$ bis π definiert:

$$f(t) = \begin{cases} -1 & \text{für } -\pi \leq x \leq -\frac{\pi}{2} \\ 1 & \text{für } -\frac{\pi}{2} \leq x \leq \frac{\pi}{2} \\ -1 & \text{für } \frac{\pi}{2} \leq x \leq \pi \end{cases}$$

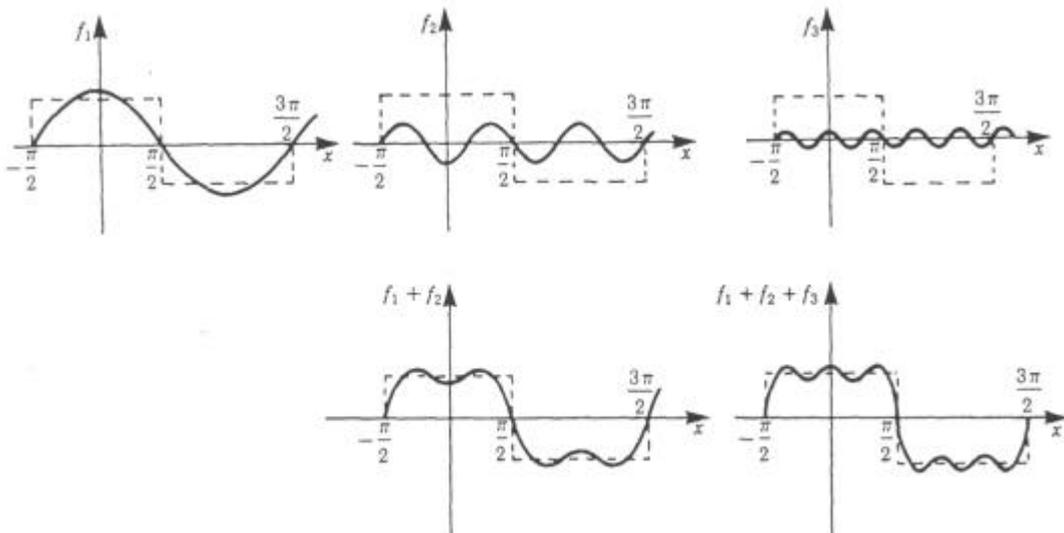
$f(t)$ ist eine gerade Funktion. Deshalb brauchen wir nur die Koeffizienten a_n zu berechnen.



Die Fourierreihe der Rechteckschwingung mit der Periode 2π lautet:

$$f(t) = \sum_{n=1}^{\infty} \left[\frac{4}{n\pi} \sin\left(\frac{n\pi}{2}\right) \cdot \cos(nt) \right]$$

Die folgende Abbildung zeigt die drei ersten Fourierkomponenten und die schrittweisen Näherungen für die Funktion $f(t)$:



Fourierreihen und Fouriertransformation

Die Fourierreihe in spektraler Darstellung:

$$f(t) = \frac{A_0}{2} + \sum_{n=1}^{\infty} \left[A_n \cos \left(n \frac{2p}{T} t + j_n \right) \right]$$

$$\text{Periode: } T \quad \text{Frequenz } \omega = \frac{2p}{T}$$

$$\text{Amplituden: } A_n = \sqrt{a_n^2 + b_n^2} \quad ; \quad \text{Phasenwinkel: } j_n = \frac{a_n}{b_n}$$

- Die Darstellung der Amplituden A_n als Funktion der Frequenz ω wird *Amplitudenspektrum* genannt (Fourier – oder Frequenzspektrum).
- Die Darstellung der Phasenwinkel j_n als Funktion der Frequenz ω wird *Phasenspektrum* genannt.

Die Ermittlung von Amplitudenspektrum und Phasenspektrum wird *Fourieranalyse* oder *Frequenzanalyse* genannt. Die umgekehrte Operation wird *Fouriersynthese* genannt (Bsp. in der Musik: Synthesizer).

Übergang von der Fourierreihe zum Fourierintegral

Darstellung einer *nicht-periodischen Funktion*:

- Ausgehend von einer periodischen Funktion wird für die Periodendauer der Grenzübergang $T \rightarrow \infty$ durchgeführt.
- Die Laufzahldifferenz Δn wird durch die Frequenzdifferenz $\Delta \omega$ ersetzt:

$$\Delta \omega = \frac{2p}{T} \Delta n$$

=> Allgemeine Fourier-Transformation

Fourierreihen und Fouriertransformation

Allgemeine Fouriertransformation:

$$f(t) = \int_0^{+\infty} [A(\omega) \cdot \cos(\omega t) + B(\omega) \cdot \sin(\omega t)] d\omega$$

Amplitudenspektrum:

$$A(\omega) = \frac{1}{p} \int_{-\infty}^{+\infty} f(t) \cos(\omega t) dt \quad B(\omega) = \frac{1}{p} \int_{-\infty}^{+\infty} f(t) \sin(\omega t) dt$$

Komplexe Darstellung der Fouriertransformation:

Die Euler'sche Beziehung ermöglicht die folgende vereinfachte Darstellung:

$$f(t) = \int_0^{+\infty} F(\omega) \cdot e^{i\omega t} d\omega$$

mit der *Amplitudenfunktion* in komplexer Form:

$$F(\omega) = \frac{1}{2p} \int_{-\infty}^{+\infty} f(t) \cdot e^{-i\omega t} dt$$

$F(\omega)$ lässt sich in zwei Funktionen trennen: $F(\omega) = A(\omega) \cdot e^{-ij(\omega)}$

$A(\omega)$: kontinuierliches *Amplitudenspektrum*

$e^{-ij(\omega)}$: kontinuierliches *Phasenspektrum*

Fourierreihen und Fouriertransformation

Beispiele für Fouriertransformationen:

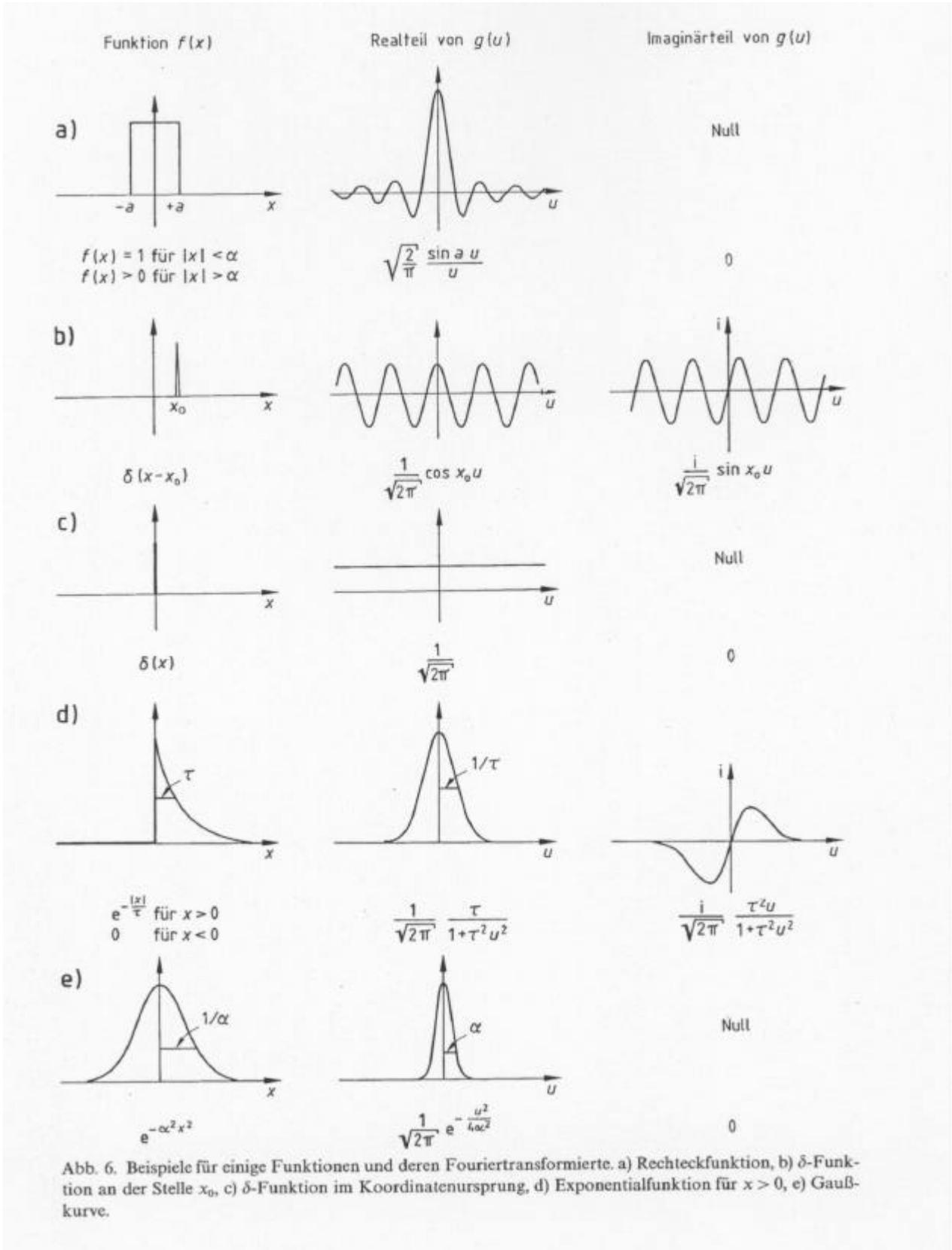
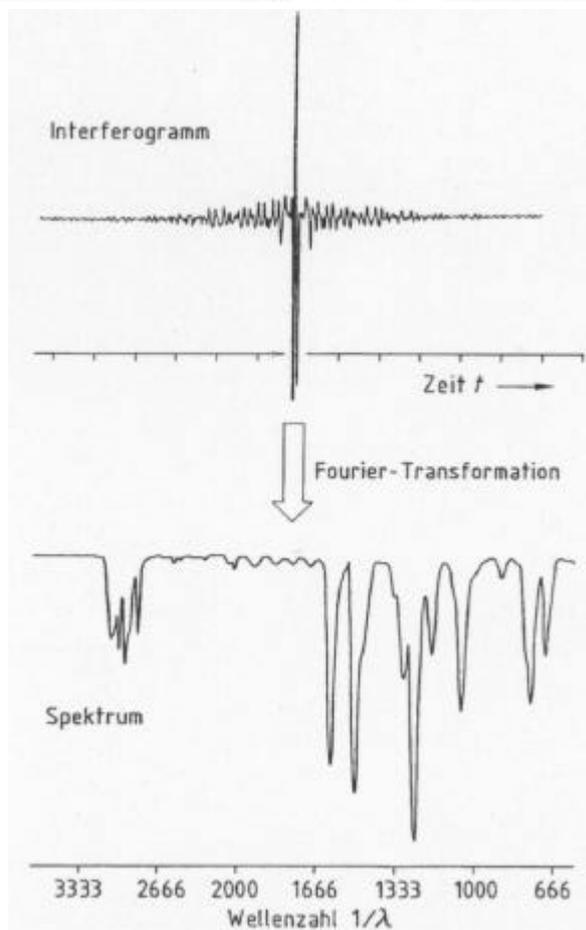
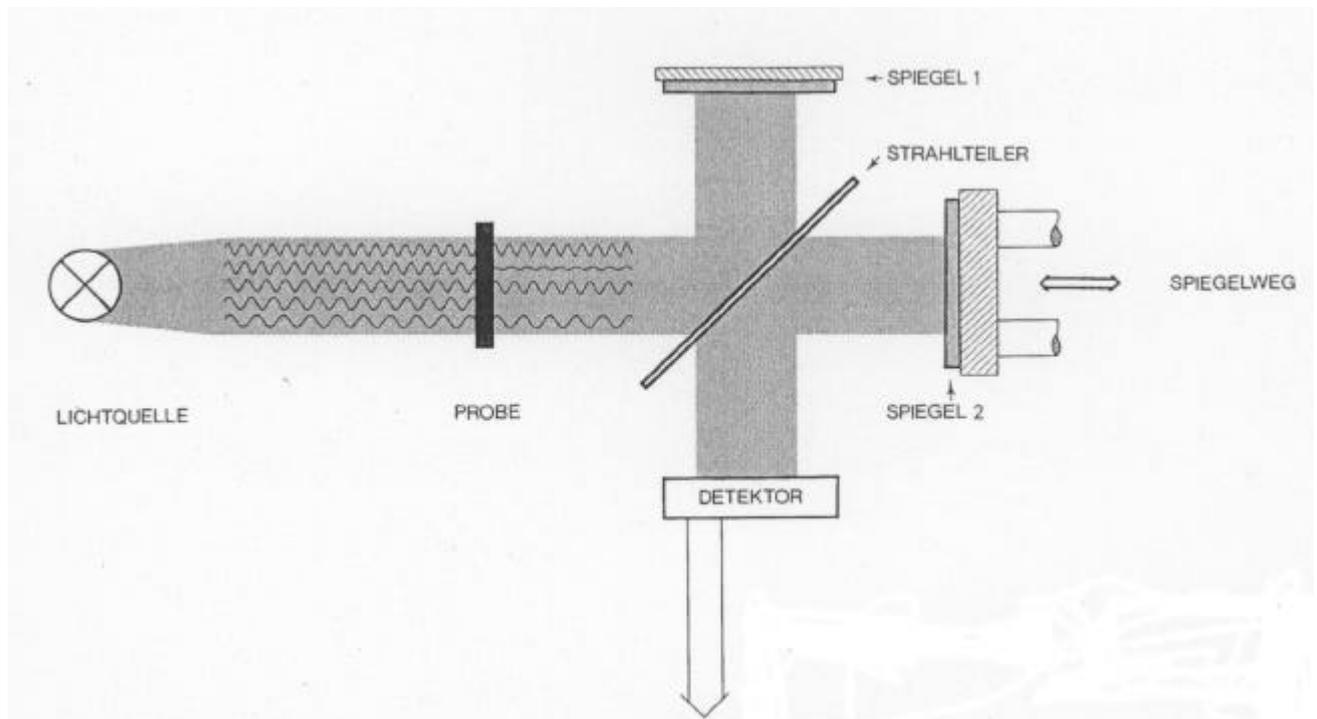


Abb. 6. Beispiele für einige Funktionen und deren Fouriertransformierte. a) Rechteckfunktion, b) δ -Funktion an der Stelle x_0 , c) δ -Funktion im Koordinatenursprung, d) Exponentialfunktion für $x > 0$, e) Gaußkurve.

Fourierreihen und Fouriertransformation

Anwendungsbeispiel: Fourier-Transform Infrarot-Spektroskopie (FTIR)



Weitere Anwendungen:

- **Magnetische Kernresonanz**
(Transformation vom Zeitraum in den Frequenzraum)
- **Röntgenbeugung**
(Transformation vom reziproken Ortsraum in den realen Ortsraum)

Eigenschaften der Exponentialfunktion

Periodische Funktionen können entweder als Sinus – bzw.- Kosinusfunktionen dargestellt werden oder entsprechend der Euler`schen Beziehung mit einer komplexen Exponentialfunktion:

$$e^{i\phi} = \cos \phi + i \sin \phi$$

Die Reihenentwicklung der trigonometrischen Funktionen zeigt unmittelbar die obige Beziehung

$$\begin{aligned} \cos(x) &= 1 - x^2/2! + x^4/4! - x^6/6! + \dots &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{(2n)!} x^{2n} \\ i \sin(x) &= ix - ix^3/3! + ix^5/5! - ix^7/7! + \dots &= \sum_{n=0}^{\infty} i \frac{(-1)^n}{(2n+1)!} x^{2n+1} \\ e^{ix} &= 1 + ix - x^2/2! - ix^3/3! + x^4/4! + ix^5/5! - \dots &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(ix)^n}{(n)!} \end{aligned}$$

Die Beziehungen $\cos(-x) = \cos(x)$ und $\sin(-x) = -\sin(x)$ führen zur folgenden Beziehung:

$$e^{-i\phi} = \cos \phi - i \sin \phi$$

Eine trigonometrische Funktion kann somit immer in Termen der komplexen Exponentialfunktion dargestellt werden:

$$\begin{aligned} \cos(x) &= (1/2) (e^{ix} + e^{-ix}) \\ \sin(x) &= (1/2i) (e^{ix} - e^{-ix}) \end{aligned}$$

Eigenschaften der Dirac'schen Deltafunktion

Im dreidimensionalen Raum hat die Dirac'schen Deltafunktion $\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}_0)$ die folgenden Eigenschaften:

$$\delta = 0 \text{ für } \mathbf{r} \neq \mathbf{r}_0 \quad \text{und} \quad \delta = \infty \text{ für } \mathbf{r} = \mathbf{r}_0 \quad \text{mit} \quad \int_r \mathbf{d}(\mathbf{r}-\mathbf{r}_0) \, d\mathbf{r} = 1 \quad (1)$$

Die Deltafunktion repräsentiert also eine unendlich scharfe Linie am Ort \mathbf{r}_0 . Natürlich gibt es auch eine Komponentendarstellung der Deltafunktion: mit $\mathbf{r}_0 = x_0\mathbf{a}+y_0\mathbf{b}+z_0\mathbf{c}$ folgt $\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}_0) = \delta(x-x_0) \delta(y-y_0) \delta(z-z_0)$

Eine weitere wichtige Darstellung der Deltafunktion ist gegeben durch:

$$\mathbf{d}(x-x_0) = \int_{-\infty}^{+\infty} \exp[2\mathbf{p}ix^*(x-x_0)] dx^* \quad x^*: \text{ reele Variable}$$

Es kann gezeigt werden, daß diese Beziehung die oben gegebenen Eigenschaften (1) erfüllt:

$$\lim_{g \rightarrow \infty} \int_{-g}^{+g} \exp[2\mathbf{p}ix^*(x-x_0)] dx^* = \lim_{g \rightarrow \infty} \frac{\sin[2\mathbf{p}g(x-x_0)]}{\mathbf{p}(x-x_0)}$$

Eigenschaften der Dirac'schen Deltafunktion

Die Funktion $\sin[2\pi g(x-x_0)]/[\pi(x-x_0)]$ hat ihren Maximalwert von $2g$ bei $x = x_0$, oszilliert mit der Periode $1/g$ und hat abnehmende weitere Maxima mit steigendem x . Aus diesem Grund zeigt diese Darstellung für den Grenzwert $g \rightarrow \infty$ die gewünschte Eigenschaft:

$$\text{Eigenschaft: } \mathbf{d}(x-x_0) = \lim_{g \rightarrow \infty} \frac{\sin[2\pi g(x-x_0)]}{\pi(x-x_0)}$$

Im dreidimensionalen Raum gilt dann:

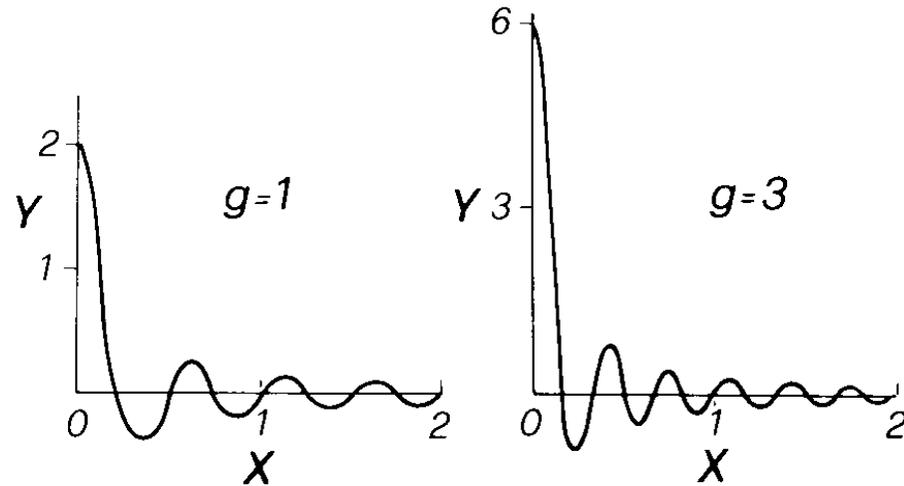
$$\mathbf{d}(\mathbf{r}-\mathbf{r}_0) = \int_r \exp[2\pi i \mathbf{r}^* (\mathbf{r}-\mathbf{r}_0)] d\mathbf{r}^*$$

Weiter wichtige Eigenschaften:

$$\mathbf{d}(\mathbf{r}-\mathbf{r}_0) = \mathbf{d}(\mathbf{r}_0-\mathbf{r})$$

$$f(\mathbf{r})\mathbf{d}(\mathbf{r}-\mathbf{r}_0) \equiv f(\mathbf{r}_0)\mathbf{d}(\mathbf{r}-\mathbf{r}_0)$$

$$\Rightarrow \int_r f(\mathbf{r})\mathbf{d}(\mathbf{r}-\mathbf{r}_0) d\mathbf{r} = f(\mathbf{r}_0) \rightarrow$$



Die Deltafunktion (unter dem Integral) kann genutzt werden, um einen Funktionswert an der Stelle \mathbf{r} „auf einen an der Stelle \mathbf{r}_0 zu verschieben“.