

ANNALEN DER PHYSIK.

VIERTE FOLGE. BAND 49.

1. Zur Begründung der Kristalloptik; von P. P. Ewald.

Einleitung zu Teil I (Dispersionstheorie) und Teil II (Theorie der Reflexion und Brechung).

Das Problem, die Kristalloptik aus der Strukturtheorie der Kristalle zu begründen, habe ich in meiner Dissertation 1912 behandelt. Die mir damals gestellte Aufgabe war, zu untersuchen, ob die Anordnung von Dipolen, wie sie seit Drude zur Erklärung der Dispersion benutzt werden, in einem rhombischen Gitter hinreicht — als einfachstes Bild eines doppelbrechenden Kristalls —, um optische Doppelbrechung zu erzeugen; ferner ob die Doppelbrechung, bei plausiblen Annahmen über die Verschiedenheit der drei Achsenlängen, von einer der beobachteten vergleichbaren Größenordnung sei. Es sei daran erinnert, daß diese Fragen gestellt wurden, bevor überhaupt durch Laues und seiner Mitarbeiter Versuche über die Interferenz der Röntgenstrahlen mit Sicherheit die Gültigkeit der Strukturtheorie der Kristalle entschieden war, und daß gehofft werden konnte, in der Dispersion ein Argument für die Strukturtheorie zu finden.

Das Resultat der Dissertation ist, daß ein Gitter mit nicht extremen Achsenverhältnissen in der Tat allein durch die Ungleichheit der Abstände der Dipole in den verschiedenen Richtungen Anlaß gibt zu einer starken Doppelbrechung; daß ferner das Gesetz, das Brechungsindex mit Fortschrittsrichtung der Welle verbindet (Normalenfläche), das richtige ist. Das einfache Bild des Kristalls ist also vom Standpunkt der Optik aus richtig.

Daß bei dem numerisch durchgerechneten Gitter mit den Achsenabschnitten wie bei Anhydrit eine andere als die beobachtete Doppelbrechung gefunden wurde, wurde schon damals in Zusammenhang damit gebracht, daß der Kristall in Wirklichkeit nicht aus *einem*, sondern aus vielen einfachen Gittern

des der Rechnung zugrunde gelegten Typus besteht — eine Tatsache, an der nach den Offenbarungen über Kristallaufbau, die wir den Röntgenstrahlen verdanken, nicht zu zweifeln ist.

Auch heute läßt sich noch nicht entscheiden, ob die Doppelbrechung in manchen Fällen allein durch die Anisotropie der *Lage* hervorgerufen wird, oder ob stets noch eine Anisotropie der *Bindung* hinzukommt, d. h. eine nach den drei Hauptrichtungen ungleiche rücktreibende Kraft. Es fehlt zurzeit noch an einem doppelbrechenden Kristall von einfachem chemischem Aufbau, dessen Struktur aus Röntgenuntersuchungen bekannt ist und dessen auf Grund der Lage allein zu erwartende Doppelbrechung sich nach den in der Dissertation gebrauchten Methoden berechnen läßt. Durch Vergleich mit der Erfahrung werden sich Rückschlüsse auf die Anisotropie der Bindung und damit auf die inneren Kräfte des Kristalls ergeben. Schwefel wird ein geeignetes Beispiel sein, sobald seine Struktur ganz bekannt ist. Der auf numerische Rechnung abzielende Teil ist gekürzt worden.

Während das Hauptinteresse bei der Fragestellung, wie geschildert, in der Doppelbrechung, ihrer Größe und ihrem Zustandekommen lag, ergab sich bald, daß die Behandlung auch vom Standpunkte der Dispersionstheorie aus manches neue bot. Die genau gegebenen Lagen der Dipole ermöglichten eine strengere Rechnungsart, als früher bei der Behandlung der Dispersion isotroper Körper unter Bildung von Mittelwerten möglich war, und kleine begriffliche Unklarheiten traten hier, die Aufmerksamkeit erzwingend, hervor. Es ist dies einmal die Frage, wie eigentlich — im unendlich ausgedehnt gedachten Kristall — die von den einzelnen Dipolen ausgehenden Felder zu summieren sind; also eine Konvergenzfrage, die aber im endlichen Kristall ihren physikalischen Sinn beibehält.

Ein zweiter neuer Gesichtspunkt, wenigstens gegenüber der Planckschen und der Lorentzschen Theorie, bestand in dem Fortlassen der „einfallenden Welle“. Bei Planck wie bei Lorentz wird der einzelne Dipol durch eine elektrische Kraft erregt, die sich aus zwei Teilen zusammensetzt: dem was „von außen“ einfällt (\mathfrak{E}_0) und dem, was dem Dipol von den anderen Dipolen des Körpers zugestrahlt wird. Der erste

Teil \mathcal{E}_0 hatte keinen Platz in der Theorie des unbegrenzten Kristalls. Allein die gegenseitige Zustrahlung unterhielt die Dipolschwingungen, so daß der ganze Schwingungszustand des Kristalls wie eine Art von freier Schwingung aufzufassen ist, ohne äußere erzwingende Kräfte. Als Grund für das Fortlassen der äußeren Anregung \mathcal{E}_0 wurde die Idealisierung des Problems angegeben, die darin liegt, daß ein unbegrenzter Kristall betrachtet wird; und es wurde die Behauptung aufgestellt, daß dem Rande des begrenzten Kristalles die Rolle zufallen müsse, die einfallende Welle \mathcal{E}_0 für das ganze Innere des Kristalles zu kompensieren. So allein war zu begreifen, daß im unbegrenzten Kristall von der äußeren Anregung nichts zu spüren sein sollte.

In dieser Behauptung lag das Eingeständnis, daß zu einem vollkommenen Verständnis der Dispersionstheorie die Behandlung der Reflexion und Brechung, also der Vorgänge in der Grenzschicht des Körpers, unumgänglich notwendig sei. Diesem Mangel will der zweite Teil der vorliegenden Arbeit abhelfen, der somit neu ist.¹⁾ Er behandelt folgendes Problem:

Gegeben sei ein begrenzter Kristall — der etwa den ganzen oberen Halbraum erfülle mit Grenzfläche $z = 0$; von unten falle unter beliebigem Winkel eine ebene Welle \mathcal{E}_0 auf. Welches ist die Schwingungsweise der Dipole und entstehen durch ihre Schwingungen gebrochene und reflektierte Wellen — also die Fresnelschen Formeln; ist endlich von dem vermuteten Einfluß des Randes etwas zu spüren?

Dieses Problem des berandeten Kristalls erscheint von vornherein bedeutend schwieriger, als das des unbegrenzten. In der Tat bildet der in der Dissertation aufgefundene Schwingungszustand mit seinen Anklängen an die freie Schwingung eines mechanischen Systems die Vorstufe, mit deren Hilfe die Behandlung des begrenzten Körpers gelingt. Gerade dadurch, daß die Randschicht das Innere des Kristalles gegen das Eindringen der äußeren Welle abschirmt, kommt es nämlich, daß im Innern vom Rande ab die Schwingungsweise

¹⁾ *Anm. bei der Korrektur:* Kürzlich hat Herr C. W. Oseen in anderem Zusammenhange auf die Notwendigkeit hingewiesen, die Dispersionstheorie in dem hier durchgeführten Sinne zu ergänzen, Physikal. Zeitschr. 16. p. 404. 1915.

herrscht, als gäbe es weder einen Rand, noch die einfallende Welle. Diese Schwingungsweise ist uns aber in der Grundlösung des unbegrenzten Kristalles bekannt, und so wird mit kleiner Mühe der begrenzte Körper auf den bekannten unbegrenzten zurückgeführt.

Wenn soweit der zweite Teil dieser Arbeit als Fortsetzung des Problems der Dissertation und im besondern als Beweis für eine dort aufgestellte Behauptung gelten kann, so wird in ihm ferner auf einen Punkt näher eingegangen, der früher nicht behandelt worden ist. Dies ist der Übergang von dem genauen mikroskopischen Feld, das zwischen den Dipolen herrscht, zu dem makroskopischen gemittelten Feld, das in der phänomenologischen Theorie zur Behandlung der Reflexion und Brechung dient, und dessen Amplituden in den Fresnelschen Formeln festgelegt sind. Bei diesen handelt es sich um den Vergleich der Feldstärken außerhalb und innerhalb des Kristalles und man hat daher genau auf den Zusammenhang des errechneten mikroskopischen im freien Äther zwischen den Dipolen des Körpers geltenden Feldes mit den Maxwell'schen Größen \mathcal{E} und \mathcal{D} im Körper einzugehen. Beim reinen Problem der Dispersion, wo es sich nur um die Ermittlung der Phasengeschwindigkeit handelt, mit der irgendeine der Größen \mathcal{E} , \mathcal{D} oder \mathcal{H} fortschreitet, fällt die Notwendigkeit fort, zwischen \mathcal{E} und \mathcal{D} zu unterscheiden, und die Dissertation konnte ihr Ergebnis allein dem Vektorpotential entnehmen, ohne überhaupt in diesem Zusammenhang die Feldstärken zu beachten. Bei den Fresnelschen Formeln aber muß dies besprochen werden. Der § 5 des II. Teils gehört dem Inhalt nach eigentlich ebensosehr zum I. Teil (Dispersion) wie zur Theorie der Brechung, wurde aber dort gelassen, um die für die reine Aufgabe der Dispersionstheorie notwendigen Gedankengänge nicht zu unterbrechen.

Schließlich sei erwähnt, daß auch das Verhalten des Kristalles ganz kurzen Wellen (Röntgenstrahlen) gegenüber in der strengen Rechnung mit einbegriffen ist, wovon der letzte Paragraph (§ 7) handelt. Besonders gut läßt sich der Übergang vom Fall der Röntgenwellen mit den zahlreichen Interferenzstrahlen zu den optischen Wellen mit den drei einzigen Wellen (einfallend, gebrochen, reflektiert) verfolgen.

Teil I: Theorie der Dispersion.¹⁾

§ 1. Fragestellung.

1. Gegeben sei ein einfaches rhombisches Gitter, dessen Gitterpunkte die rechtwinkligen Koordinaten

$$X = 2al; \quad Y = 2bm; \quad Z = 2cn$$

(l, m, n ganzzahlig von $-\infty$ bis $+\infty$)

haben. An diese Gitterpunkte sind Elektronen quasi-elastisch und isotrop gebunden; das letztere soll heißen, daß die vom Gitterpunkt auf das Elektron ausgeübte Kraft nur von der Größe, nicht von der Richtung der Elongation abhängt. Mit welcher Geschwindigkeit und welcher Dämpfung kann sich eine ebene Welle von gegebener Frequenz in diesem Medium fortpflanzen?

2. Zunächst sei darauf hingewiesen, daß die schwingenden Elektronen für die Rechnung in bekannter Weise durch Dipole ersetzt werden, indem die Ladungen $+e$ und $-e$, die sich kompensieren, in den Gitterpunkten hinzugedacht werden. $+e$ bildet mit dem verschobenen Elektron zusammen den Dipol, während das statische Feld der in den Gitterpunkten ruhenden Ladungen $-e$ hier nicht interessiert.

Beschreibt man eine ebene Welle durch die Formel

$$\mathcal{E} = \Re (E e^{-int + ik_s}),$$

wo E eine Amplitude, n Frequenz und s die im Sinne der Wellennormalen gezählte laufende Koordinate ist, so sind die gesuchten Größen der Phasengeschwindigkeit und Dämpfung in der Konstante k enthalten, deren reeller Teil k_1 die Phasengeschwindigkeit $q = n/k_1$ gibt, während der imaginäre Teil k_2 die Dämpfung verursacht.

Es wird nun der Ansatz gemacht, daß die Ebenen senkrecht zu s Ebenen gleicher Dipolphase sind. Dabei bleibt die Geschwindigkeit q , mit welcher sich die Phase über das Gitter hinwegbewegt, zunächst unbestimmt. Man zeigt nun durch Übereinanderlagern der von den Dipolen ausgehenden Einzelfelder, daß infolge des Ansatzes für die (diskreten) Dipol-schwingungen auch die (kontinuierlichen) Feldgrößen die Form einer ebenen Welle annehmen, und daß Geschwindig-

1) Gekürzte Dissertation München 1912. Ich möchte es nicht unterlassen, auch an dieser Stelle Hrn. Prof. Sommerfeld für die Anregung und Unterstützung dieser Arbeit meinen herzlichen Dank auszusprechen

keit und Dämpfung bei beiden Wellen — dem Felde und der Dipolanregung — identisch sind. Um diese Größen selbst, die sich in der komplexen Konstanten k zusammenfassen lassen, zu bestimmen, muß auf die *dynamische Möglichkeit* des Ansatzes eingegangen werden. Es ist nämlich zu verlangen, daß jeder Dipol von dem ihm zugestrahlten Felde zu seinen Schwingungen erregt wird. Diese Forderung kann bei jeder Frequenz durch passende Wahl der verfügbaren Konstanten k erfüllt werden und liefert den Zusammenhang zwischen Frequenz und Phasengeschwindigkeit, d. h. die Dispersionsformel.

§ 2. Gang der Rechnung.

Seien XYZ die Koordinaten eines Dipols, xyz die laufenden Koordinaten des Aufpunktes; sei ferner

$$S = X \cos(s, x) + Y \cos(s, y) + Z \cos(s, z)$$

der Abstand eines Dipols von der durch den Koordinatenanfangspunkt gehenden Ebene gleicher Dipolphase; q die (unbestimmte) Geschwindigkeit der Dipolphase, n die Frequenz, welche in dem Faktor e^{-int} den zeitlich periodischen Verlauf regelt, so daß

$$e^{-in/q \cdot s}$$

der Phasenfaktor der in der Richtung $-S$ sich fortpflanzenden Dipolanregung ist.

Die *Einzelanregung*, die ein Dipol von der Ladung $\pm e$ aussendet, ist dann durch den *Hertzischen Vektor*

$$(1) \quad \mathfrak{H} \cdot e^{-int} = e \mathfrak{a} \cdot \frac{1}{R} \cdot e^{-in \left(t - \frac{R}{c} + \frac{S}{q} \right)}$$

charakterisiert, in welchem $R = [(X - x)^2 + (Y - y)^2 + (Z - z)^2]^{\frac{1}{2}}$ den Abstand Dipol - Aufpunkt bedeutet. Der Term R/c im Exponenten besagt, daß das Feld des Dipols sich mit der gleichen Geschwindigkeit c wie im reinen Äther zum Aufpunkt hin fortpflanzen soll.

Indem wir den allen Dipolen gemeinsamen Faktor e^{-int} fortlassen und

$$(2) \quad \frac{n}{c} = k_0, \quad \frac{n}{q} = k$$

einführen, schreiben wir den für uns wichtigen Teil des Hertzischen Vektors:

$$(3) \quad \mathfrak{H} = e \mathfrak{a} \cdot \frac{1}{k} \cdot e^{ik_0 R - ik S},$$

und erinnern daran, daß im Medium von der Dielektrizitätskonstante 1 die elektrische Feldstärke \mathfrak{E} und die magnetische \mathfrak{H} gewonnen werden durch die Operationen

$$(4) \quad \left\{ \begin{array}{l} \mathfrak{E} = \text{rotrot } \mathfrak{P}; \quad \mathfrak{H} = \frac{1}{c} \text{rot } \mathfrak{P} \\ \quad = \text{grad div } \mathfrak{P} - \Delta \mathfrak{P}. \end{array} \right.$$

Statt $\Delta \mathfrak{P}$ kann vermöge der außerhalb der Elektronen geltenden Ausbreitungsgleichung

$$(5) \quad \Delta \mathfrak{P} + k_0^2 \mathfrak{P} = 0$$

auch $-k_0^2 \mathfrak{P}$ eingesetzt werden.

Das Gesamtfeld ist dann gegeben durch das Potential

$$(6) \quad \Sigma \mathfrak{P} = e a \Sigma \frac{e^{i k_0 R - i k S}}{R} = e a II,$$

die Summe erstreckt über alle Dipole des Gitters. Das Gesamtpotential wird bei jedem Dipol unendlich wie $1/R$ und ist also, da in festen Körpern auf die Wellenlänge des Lichtes viele hundert Moleküle entfallen, ein räumlich äußerst schnell wechselndes Feld, aus welchem *das beobachtbare optische Feld* nur die großzügige „Dünnung“ darstellt, die durch Mittelung gewonnen wird.

Das gemittelte optische Feld ist nicht etwa maßgebend für die Schwingungen der einzelnen Dipole. Diese werden vielmehr durch das „*erregende Feld*“ veranlaßt, das wir

$$(7) \quad e a II' = \Sigma' \mathfrak{P}$$

schreiben, wobei der Akzent bedeutet, daß über alle Dipole mit Ausnahme des gerade betrachteten, zu erregenden Dipols summiert werden soll. Das erregende Feld ist somit gleich dem Gesamtfeld vermindert um den Anteil, der vom „Aufdipol“ herrührt. Für die *Schwingung* gilt dann [nach (4)] die Gleichung

$$(8) \quad \left\{ \begin{array}{l} m \ddot{\mathfrak{p}} + g \dot{\mathfrak{p}} + f \mathfrak{p} = e \mathfrak{E}' \\ \quad = e^2 \text{rotrot } (a II' \cdot e^{-int}). \end{array} \right.$$

Hierbei ist

$$\mathfrak{p} = a \cdot e^{-int}$$

die Elongation, m Masse, e Ladung, f quasielastische Kraft, g Reibungskoeffizient; führt man die Eigenfrequenz

$$n_0^2 = \frac{f}{m}$$

ein, so verlangt also diese Gleichung:

$$\alpha \left(-n^2 + n_0^2 - i n \frac{g}{m} \right) = \frac{e^2}{m} \text{rotrot } \alpha II'.$$

Setzen wir zur Abkürzung

$$(9) \quad \frac{m}{e^2} \left(n_0^2 - n^2 - i n \frac{g}{m} \right) = \Omega$$

und führen statt rotrot das äquivalente ($\text{grad div} - \Delta$) ein, so muß sein

$$(10) \quad \alpha (\Omega + \Delta II') = \text{grad div } \alpha II'$$

oder in Komponenten (die Indizes am Potential II' bedeuten Differentiationen, diejenigen an der Amplitude α dagegen Komponenten):

$$(10 \text{ a}) \quad \left\{ \begin{array}{l} \alpha_x (\Omega + \Delta II' - II'_{xx}) - \alpha_y II'_{xy} - \alpha_z II'_{xz} = 0 \\ -\alpha_x II'_{xy} + \alpha_y (\Omega + \Delta II' - II'_{yy}) - \alpha_z II'_{yz} = 0 \\ -\alpha_x II'_{xz} - \alpha_y II'_{yz} + \alpha_z (\Omega + \Delta II' - II'_{zz}) = 0. \end{array} \right.$$

Die Bedingung, daß diese drei homogenen Gleichungen gleichzeitig erfüllt werden, ist:

$$(11) \quad \left| \begin{array}{ccc} \Omega + \Delta II' - II'_{xx} & - II'_{xy} & - II'_{xz} \\ - II'_{xy} & \Omega + \Delta II' - II'_{yy} & - II'_{yz} \\ - II'_{xz} & - II'_{yz} & \Omega + \Delta II' - II'_{zz} \end{array} \right| = 0.$$

Die II' .. hängen ab von der Konstanten k der Dipolphase, welche identisch ist mit der für die Ausbreitung des optischen Feldes maßgebenden Größe. Daher stellt die Determinante (11) die Verbindung her zwischen dem Brechungsindex

$$(12) \quad v = \frac{c}{q} = \frac{k}{k_0}$$

und der Größe Ω , welche Elektronenkonstanten und Frequenz der optischen Welle enthält (Dispersionsgesetz).

Die Hauptbrechungsindizes des rhombischen Gitters erhalten wir, indem wir die Dipolschwingung ganz in die Richtung einer der drei Achsen legen; da dies für jede Achse mit zwei ausgezeichneten Fortpflanzungsrichtungen der optischen Welle möglich ist, erhalten wir zunächst sechs Hauptbrechungsindizes, die außer vom Polarisationszustand auch von der Richtung der Wellennormale s abhängen:

Schwingung $\alpha = \alpha_x$,	Ausbreitung längs z :	k_{xz}, ν_{xz}
. . .		y : k_{xy}, ν_{xy}
$\alpha = \alpha_y$		x : k_{yx}, ν_{yx}
. . .		z : k_{yz}, ν_{yz}
$\alpha = \alpha_z$		x : k_{zx}, ν_{zx}
. . .		y : k_{zy}, ν_{zy}

Hierin liegt eine Abweichung des Gitters von den wirklichen Kristallen, bei denen nur drei Hauptbrechungsindizes beobachtet sind, und wir wollen uns die Entstehung der sechs Indizes noch direkter klar machen.

Die Dipolamplitude möge mit der Richtung der x -Achse zusammenfallen; dann gibt es zwei ausgezeichnete Fälle, über die Ebenen konstanter Dipolphase zu verfügen (vgl. Fig. 1):

1. Phasenebene ist die xy -Ebene (Ausbreitung längs z)
2. Phasenebene ist die xz -Ebene (Ausbreitung längs y).

Wegen der Verschiedenheit der y - und z -Richtung beim rhombischen Gitter ergeben diese beiden Fälle zwei verschiedene erregende Felder und es sind im ganzen wirklich sechs Hauptbrechungsindizes vorhanden.

Es ist aber ohne weitere Rechnung klar, daß der Unterschied der beiden Brechungsindizes ν_{xy} und ν_{xz} sehr klein ist. Denn er entsteht nur dadurch, daß einmal die in der y -Richtung gelegenen Nachbarn eines Aufdipols den Phasenunterschied gegen diesen haben, daß andere Mal die nach der z -Richtung gelegenen Nachbarn. Da der Phasenunterschied wegen der Länge der optischen Welle selbst klein ist, so ist es erst recht der durch die Differenz der Unterschiede hervorgerufene Effekt.

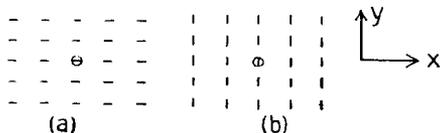


Fig. 1.

Man wird sich also damit begnügen können, später die drei Hauptbrechungsindizes ν_x, ν_y, ν_z zu unterscheiden, die für die drei Schwingungsrichtungen $\alpha_x, \alpha_y, \alpha_z$ gelten. Ihr Unterschied ist die eigentliche Doppelbrechung. Er ist bedeutend größer als der vorhergehende Unterschied, da er nicht wesentlich von der Wellenlänge abhängt. Fig. 1a zeigt die nach der

x -Richtung ausschwingenden Dipole, Fig. 1 b das gleiche Gitter mit Schwingungen nach y . Wegen der physikalischen Bedeutung des Unterschiedes von ν_{xy} und ν_{xz} (optisches Drehungsvermögen) vgl. den Schluß von § 4.

Bei der Berechnung der Hauptbrechungsindizes (Ausbreitung längs einer, Schwingung in einer anderen Achse) behält das Gitter die drei Koordinatenebenen als Symmetrieebenen und deshalb sind an den Gitterpunkten die Differentialquotienten $\Pi'_{xy} = \Pi'_{xz} = \Pi'_{yz} = 0$; die Determinante reduziert sich auf die Diagonalglieder und man hat nach (10a) zur Bestimmung von ν_{xz} die Gleichung

$$(13) \quad \Omega + (\Delta\Pi' - \Pi'_{xx})_z = 0.$$

Der Index z soll daran erinnern, daß die für Ausbreitung längs z spezialisierten Formeln genommen werden müssen, um ν_{xz} zu finden. In dieser Gleichung enthalten die zweiten Ableitungen des Potentials — wie die Annäherungen zeigen — nur das Verhältnis $k/k_0 = \nu$, das die Frequenz n nicht enthält; diese kommt nur in der Elektronenkonstanten Ω vor.

Eliminiert man also aus (13) und der analogen Gleichung für ν_{yz}

$$(13a) \quad \Omega + (\Delta\Pi' - \Pi'_{yy})_z = 0$$

die Elektronenkonstante Ω , so erhält man eine implizite Beziehung zwischen den zwei Hauptbrechungsindizes ν_{xz} und ν_{yz} , welche unabhängig ist von der Frequenz n , ferner von der Anzahl und Art der schwingenden Dipole und die allein abhängt von der Struktur:

$$(14) \quad (\Delta\Pi' - \Pi'_{xx})_z = (\Delta\Pi' - \Pi'_{yy})_z.$$

Wie sich weiterhin ergeben wird, liefert diese Gleichung im Fall des rhombischen Gitters die bereits von T. H. Havelock (vgl. § 4) aufgestellte Beziehung

$$\frac{1}{\nu_x^2 - 1} - \frac{1}{\nu_y^2 - 1} = \text{Konst.} = D_{xy},$$

deren Unabhängigkeit von der Wellenlänge Havelock bei einigen Kristallen bestätigt fand. Die Berechnung von Π'_{xx} und Π'_{yy} setzt uns in die Lage, die Größe dieses Maßes D der strukturellen Doppelbrechung aus gegebenen Achsenverhältnissen abzuleiten.

§ 3. Prinzipielles zu Ansatz und Rechnung.

Die Summation der Einzelpotentiale

$$(1) \quad a \frac{e^{i(k_0 R - k S)}}{R}$$

die im vorigen Paragraphen sowohl zur Berechnung des optischen Feldes, als für das „erregende Feld“ gefordert wird, hat bei reellen Werten von $k_0 = n/c$ und $k = n/q$ keinen eindeutigen Sinn. Die Abnahme der Summenglieder wie $1/R$ reicht infolge des oszillierenden Faktors im Zähler zwar hin, um einen endlichen Wert der Summe zu ermöglichen, doch ist dieser Wert unbestimmt und von der Art der Ausführung der Summation abhängig, weil die Konvergenz der Reihe „bedingt“ ist. Um zu einem eindeutigen Resultat zu gelangen, müssen daher die Betrachtungen des vorigen Paragraphen ergänzt werden durch eine Summationsvorschrift, die aus der Natur des physikalischen Problems zu schöpfen ist.

Man ist zunächst aller Konvergenzschwierigkeiten enthoben, wenn man ein endliches Stück Kristall betrachtet, das aus der großen Zahl von N Dipolen besteht. Fällt auf diesen Kristall eine Lichtwelle auf, so geraten die Dipole in Schwingungen und erzeugen, zusammen mit der einfallenden Welle \mathcal{E}_0 , im Körperinnern ein elektrisches Feld. Dieses seinerseits bestimmt ja die Schwingungsweise, Ausbreitungsgeschwindigkeit usw., wie im vorigen Paragraphen gezeigt.

Bei dem endlichen Körper hängt nun dies Feld zweifellos wesentlich von der Begrenzung ab. Ist die Oberfläche, auf die der Einfall geschieht, eben, so entsteht die gebrochene Welle, ist sie gewellt, so werden Beugungsspektren der verschiedensten Ordnungen entstehen, wie ja überhaupt die ganzen Beugungserscheinungen an der Begrenzung des Körpers in der Lösung dieses Problems mit enthalten wären. Die Abhängigkeit von der Oberfläche erstreckt sich durch das ganze Körperinnere.

Offenbar ist der Sinn des Problems der Dispersion beschränkter als die vorgeschlagene Aufgabe: gilt es doch nur, die Ausbreitungsgeschwindigkeit einer Welle zu bestimmen, also eine Materialkonstante, die von den äußeren Bedingungen (Begrenzung) unabhängig ist. Ihre Existenz allein weist darauf hin, daß der wesentliche Vorgang der Wellenausbreitung an

einer Stelle des Körpers bedingt wird durch die Umgebung dieser Stelle. Weder die Berandung noch die äußere Welle \mathfrak{E}_0 können auf diesen Vorgang Einfluß haben — sonst müßte er von Ort zu Ort im Körper verschieden sein. Das Fortschreiten einer Welle im Körperinnern ist ein in sich dynamisch abgeschlossener Vorgang, der die Fähigkeit in sich trägt, wenn er in einem Teil des Körpers erregt ist, ohne Zutun äußerer Kräfte an andere Orte weiter zu wandern. Die Mannigfaltigkeit der Beugungserscheinungen am begrenzten Körper entsteht dadurch, daß der Rand den Körper zu zahlreichen Schwingungen anregt, die sich dann in der „dynamisch abgeschlossenen“ Art weiter entwickeln.

Gehen wir nun in der reinen Dispersionstheorie allein auf die Kenntnis der „dynamisch abgeschlossenen“ Schwingungsart aus, so müssen wir den Einfluß des Randes beseitigen. Wir haben, weil es sich um eine Materialkonstante handelt, nur den Einfluß der Umgebung der Stelle der Ausbreitung zu berücksichtigen. Daß die Umgebung sich allseitig über viele Wellenlängen erstrecken soll, tut für die Konvergenzfrage nichts zur Sache. Am einfachsten verfahren wir so, daß wir zum unendlichen Kristall zurückkehren, aber statt der überall gleichmäßig starken Dipolamplitude a eine in großen Entfernungen vom Aufpunkt allmählich abnehmende Amplitude

$$a e^{-\kappa R}$$

einführen. Ist $\kappa \ll 1/\lambda$, so ändert dies auf viele Wellenlängen Entfernung vom Aufpunkt nichts, erzwingt aber die Bestimmtheit des Problems und die unbedingte Konvergenz der Summe der Einzelpotentiale. Diese Summe wird jetzt geschrieben

$$\sum a e^{-\kappa R} \frac{e^{ik_0 R - ikS}}{R} = \sum a \frac{e^{ik_0' R - ikS}}{R},$$

und ist formal identisch mit der alten Summe, bis auf den Umstand, daß

$$k_0' = k_0 + i\kappa$$

den imaginären Teil κ hat.

Wenn es sich um einen absorbierenden Kristall handelt, bei dem eine (entgegen dem Strahl) exponentiell wachsende Amplitude anzusetzen ist ($k = k_1 + ik_2$), so ist klar, daß

aus den eben dargelegten Gründen zur Erzielung der Bestimmtheit der Summe $\varkappa > k_2$ gewählt werden muß. $\varkappa = k_2$ würde entgegen der Strahlrichtung den Amplitudenzuwachs gerade kompensieren und die gleiche Unbestimmtheit wie im durchsichtigen Kristall mit $\varkappa = 0$ zurücklassen.

Im folgenden führen wir statt k_0' die Bezeichnung wieder ein:

$$k_0 = k_{01} + i k_{02},$$

wobei $k_{02} (= \varkappa) > k_2$ ist. Das Resultat der Summation, das einen bei der reellem k_0 möglichen Werte der Summe darstellt, bleibt auch nach der Rückkehr zu reellem k_0 der gesuchte vom Randeinfluß freie Summenwert.

2. Nach den letzten Ausführungen darf es nicht mehr erstaunen, daß im vorigen Paragraphen von der von außen einfallenden Welle \mathfrak{E}_0 nicht die Rede war. Die Kräfte, die auf der rechten Seite der Schwingungsgleichung stehen, enthalten nur die von den andern Dipolen des Körpers zugestrahlten Felder, nicht wie bei Planck und H. A. Lorentz ein von der einfallenden Welle herrührendes Glied. Ein solches widerstrebt der Auffassung der Wellenausbreitung als eines „dynamisch abgeschlossenen“ Vorgangs. Die Unmöglichkeit der Existenz der ursprünglichen Welle \mathfrak{E}_0 im Körperinnern wird zudem durch das Resultat der Summation der Einzelfelder dargetan: die angesetzten Dipolschwingungen erzeugen ein Feld, das für sich allein die Form einer ebenen mit der Geschwindigkeit q fortschreitenden Welle hat. Wäre diesem Feld noch das ursprüngliche Feld \mathfrak{E}_0 zu überlagern, das sich in anderer Richtung und mit anderer Geschwindigkeit c fortbewegt, so könnten beide Felder sich im Innern nie zu einer ebenen Welle zusammensetzen.

Nach den unter 1. gegebenen Gesichtspunkten ist es klar, daß der Fortfall von \mathfrak{E}_0 eine Wirkung des Randes sein muß. Bei der ebenen Begrenzung eines Körpers übernimmt der Rand die Aufgabe:

1. die einfallende Welle für das ganze Körperinnere zu kompensieren;
2. den „dynamisch abgeschlossenen“ Zustand der Ausbreitung der gebrochenen Welle einzuleiten;
3. im Außenraum die reflektierte Welle zu erzeugen.

Als handgreiflicher Beweis für die geforderte Wirkung des Randes läßt sich der schiefe Einfall eines begrenzten Strahles auf eine ebene Oberfläche auffassen. Ginge nicht von den beleuchteten Randgebieten eine ebene Welle von gleicher Richtung und Geschwindigkeit aber umgekehrter Phase aus, wie die auffallende Welle, so müßte ja eine optische Erregung auch in das

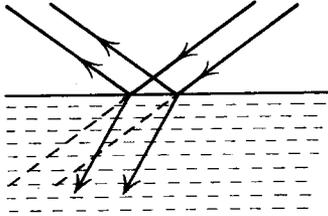


Fig. 2.

zwischen den punktierten Strahlen liegende Gebiet gelangen (vgl. Fig. 2).

§ 4. Verhältnis zu anderen Theorien.

Am nächsten steht diese Arbeit den Dispersionstheorien von Lorentz und Planck. Der Hauptunterschied liegt in der Behandlung, die für den isotropen Körper mit Mittelwerten, hier unter strenger Berücksichtigung der Lage der Dipole geschieht.

Über einen Unterschied des Ansatzes, nämlich den Verzicht auf die einfallende Welle \mathfrak{E}_0 , ist oben schon gesprochen worden. Es bleibt nur zu erwähnen, daß die Resultate der oben genannten Theorien in dieser Arbeit bestätigt werden, wenn die Ergebnisse für einen kubischen Kristall spezialisiert werden.

In der Berechnung der Doppelbrechung geht die Arbeit über die eben genannten hinaus und hängt mit einer Gruppe von Arbeiten von Lord Rayleigh¹⁾, T. Havelock²⁾, N. Kasterin³⁾ zusammen. Ihre Grundlage bildet Rayleighs Arbeit über die Eigenschaften eines Mediums, in dem „Hindernisse“, d. h. kleine Kugeln von abweichender Dielektrizitätskonstante, gitterartig verteilt sind. Nur das Potentialproblem wird behandelt. Havelock erhält hieraus eine Dispersionsformel, indem er die für das zusammengesetzte Medium gefundene Dielektrizitätskonstante als nach der Cauchyschen Formel von der Wellenlänge abhängig ansetzt.

1) Lord Rayleigh, Phil. Mag. **34**. 1892.

2) T. H. Havelock, Proc. Roy. Soc. London **77**. p. 170. 1906.

3) N. Kasterin, Lorentz-Jubiläum, oder Versl. Acad. Wetensch. Amsterdam. p. 460. 1897/98.

Kasterin hingegen gelingt es mit ähnlichen Methoden, wie sie Rayleigh brauchte, für die Ausbreitungsgleichung $\Delta u + k^2 u = 0$ die Lösung zu finden, welche die Grenzbedingungen an den Kugeloberflächen erfüllt und ebene Wellen darstellt. Es ist schade, daß diese hervorragende Arbeit nur auf akustische Probleme angewandt wurde.

Den Übergang von Kasterins Arbeit zu der vorliegenden bildet die Bemerkung¹⁾, daß die Beeinflussung einer ebenen Welle durch ein kleines kugelförmiges Hindernis in erster Näherung ersetzt werden kann durch eine von dem Hindernis ausgehende Dipolkugelwelle.

Eine zweite Arbeit von Havelock²⁾ behandelt die Doppelbrechung im Anschluß an den Gedanken der Planckschen Theorie, daß es in isotropen Körpern um jeden Aufdipol eine kugelförmige Höhlung gibt, derart, daß die in ihr gelegenen Moleküle den Aufdipol im Mittel nicht erregen. Nach Havelocks Auffassung gibt es im Kristall ein Ellipsoid, das die gleiche Eigenschaft hat. Die Doppelbrechung kann durch dessen Exzentrizität ausgedrückt werden, wird aber nicht in Verbindung mit meßbaren Größen gebracht. Havelock findet in dieser Arbeit die Beziehung D_{xy} (§ 2) zwischen den Hauptbrechungsindizes, welche von der Wellenlänge unabhängig sein soll.

Zu der gleichen Beziehung gelangt Langevin³⁾ auf Grund der Annahme, daß jedes Molekül anisotrop sei, d. h. wenn es isoliert im Raum gedacht wird, drei verschiedene Eigenfrequenzen besitze. Wir zeigen in § 9, daß die qualitativen Resultate der Annahme anisotroper Moleküle die gleichen sein müssen, wie bei der Annahme einer Gitterstruktur.

Anm. Seit dem ursprünglichen Erscheinen dieser Arbeit ist das gleiche Problem auch von M. Born in seiner „Dynamik der Kristallgitter“ (Teubner, 1915) behandelt worden. Die mathematische Methode Borns schließt sich eng an die Darstellung an, die D. Hilbert dem gleichen Gegenstand in seiner Vorlesung über Optik 1913 gegeben hat, und die den Gedanken zur konsequenten Durchführung bringt, mathematische Entwicklungen der Potentiale nach Potenzen der kleinen Größen k_0, k, a, β, γ

1) Vgl. P. Debye, Der Lichtdruck auf Kugeln. Diss. p. 50.

2) T. Havelock, Proc. Roy. Soc. London 80. p. 28. 1907.

3) P. Langevin, Sur les birefringences électrique et magnétique. Le Radium. 7. 1910.

vorzunehmen. Born behandelt das Problem in allgemeiner Fassung, nämlich für beliebige schiefwinklige und aus mehreren Elektronen(Ionen)-arten zusammengesetzte Gitter. Außerdem berücksichtigt er, daß die Ladungen nicht an raumfeste Gitterpunkte, sondern nur untereinander elastisch gebunden sind, und daß deshalb mechanische Schwingungszustände die elektrischen begleiten. Der in meiner Dissertation behandelte Fall ergibt sich aus den Bornschen Formeln, wenn ein rhombisches Gitter genommen wird, in dem alle einfachen Gitter, aus denen es aufgebaut ist, bis auf eines unendlich große Massen haben. Die eine übrig bleibende Gattung von Ladungen schwingt dann, als wäre sie an feste Punkte gebunden.

Die Ergebnisse, die Born selbst aus seiner Darstellung gezogen hat, gehen in einem Punkte bedeutend über die Ergebnisse dieser Arbeit hinaus: in der Erklärung des optischen Drehungsvermögens. Pflanzte sich ein Strahl längs der optischen Achse fort, so ist die Polarisationsrichtung und die Geschwindigkeit in erster Näherung voneinander unabhängig. Erst in dem zweiten Grad der Annäherung — demselben, der bei uns den Unterschied zwischen v_{xy} und v_{zx} ergeben würde — findet sich der gesuchte Zusammenhang, den man bekanntlich so aussprechen kann: zwei entgegengesetzt zirkular polarisierte Strahlen pflanzen sich mit ungleicher Geschwindigkeit fort.

Zahlenrechnungen im Sinne einer Entscheidung, welcher Anteil der Doppelbrechung dem Einfluß der Lage, welche dem der Lagerung zuzuschreiben sei, finden sich bei Born nicht.

Ich habe für die vorliegende Darstellung der Dispersionstheorie dem Hilbertschen Kolleg den Gedanken der konsequenten Reihenentwicklung nach k_0 usw. an der Stelle entnommen, wo für ein kubisches Gitter die Übereinstimmung der Dispersionsformel mit der Lorentz-Planckschen gezeigt werden soll (§ 9).

§ 5. Mathematische Vorbereitungen.

Zur Ausführung der Summation der Einzelpotentiale erweisen sich zwei Darstellungen von

$$\frac{e^{ikR}}{R}$$

als besonders geeignet, da sie nicht die irrationale Größe $R = (x^2 + y^2 + z^2)^{\frac{1}{2}}$, sondern die Koordinaten quadratisch oder linear enthalten. Wir nennen die eine Darstellung das einfache, die andere das dreifache Integral.

I. Das einfache Integral.

Die Größe k^2 liege in der komplexen Ebene unter dem Winkel 2φ gegen die reelle Achse.

Dann konvergiert

$$(1) \quad \int e^{-\varepsilon^2 + \frac{k^2}{\varepsilon^2}} d\varepsilon,$$

wenn ε so geführt wird, daß für kleine bzw. große ε gilt: $\Re\left(\frac{k^2}{\varepsilon^2}\right) < 0$, bzw. $\Re(\varepsilon^2) > 0$ ist. Dies ist z. B. der Fall, wenn ε innerhalb des Sektors $-\pi/4 + \varphi$ und $-\pi/4$ aus dem Nullpunkt austritt und in dieser Richtung geradlinig ins Unendliche läuft.

Der Wert des Integrales läßt sich leicht ermitteln (vgl. Riemann-Weber, d. part. Dgl. d. math. Physik I, 5. Auflage, p. 28):

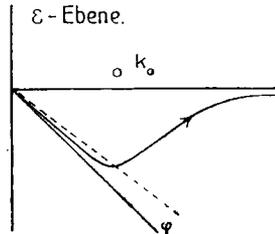


Fig. 3.

$$(2) \quad \int e^{-\varepsilon^2 + \frac{k^2}{\varepsilon^2}} d\varepsilon = \frac{\sqrt{\pi}}{2} e^{+2ik}.$$

Setzen wir $\varepsilon = R \cdot \eta$, so wird der Integrationsweg nicht wesentlich verändert und es ist

$$\int e^{-R^2 \eta^2 + \frac{k^2}{R^2} \cdot \frac{1}{\eta^2}} d\eta = \frac{\sqrt{\pi}}{2} \frac{e^{2ik}}{R}.$$

Schreiben wir schließlich $\frac{1}{2} k R$ für k , so erhalten wir *das einfache Integral*

$$(3) \quad \frac{e^{ikR}}{R} = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_{(0)}^{\infty} e^{-R^2 \varepsilon^2 + \frac{k^2}{4\varepsilon^2}} d\varepsilon,$$

dessen Weg, bis auf den Austritt aus dem Nullpunkt innerhalb des Winkels φ der Fig. 3 auf die reelle Achse gezogen werden kann (Fig. 3).

II. Das dreifache Integral.

Um aus der obigen Darstellung (3), welche die Koordinatenquadrate $R^2 = x^2 + y^2 + z^2$ enthält, eine Darstellung zu gewinnen, bei welcher der Exponent von e eine lineare Funktion von xyz ist, verfahren wir am einfachsten so:

Es ist

$$(4) \quad \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{\lambda^2}{4\varepsilon^2} - i\lambda x} d\lambda = e^{-x^2 \varepsilon^2} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\left(\frac{\lambda}{2\varepsilon} + ix\varepsilon\right)^2} d\lambda = 2\varepsilon e^{-x^2 \varepsilon^2} \cdot \sqrt{\pi}.$$

Ersetzen wir in (3) $e^{-x^2\varepsilon^2}$ durch das hieraus folgende Integral nach λ und ebenso $e^{-y^2\varepsilon^2}$ und $e^{-z^2\varepsilon^2}$ durch analoge Integrale nach Variablen μ und ν , so erhalten wir ein vierfaches Integral:

$$(5) \quad \left\{ \begin{aligned} \frac{e^{ikR}}{R} &= \frac{2}{\sqrt{\pi}} \cdot \left(\frac{1}{2\sqrt{\pi}} \right)^3 \\ &\int \int \int \int e^{-\frac{\lambda^2 + \mu^2 + \nu^2}{4\varepsilon^2} - i(\lambda x + \mu y + \nu z) + \frac{k^2}{4\varepsilon^2}} d\lambda d\mu d\nu \varepsilon^{-3} d\varepsilon. \end{aligned} \right.$$

Die Integrationsfolge darf hierbei vertauscht werden und die Integration nach ε kann ausgeführt werden:

$$(6) \quad \int_{(0)}^{\infty} e^{-\frac{k^2 - \lambda^2 - \mu^2 - \nu^2}{4\varepsilon^2}} \varepsilon^{-3} d\varepsilon = -\frac{2}{k^2 - \lambda^2 - \mu^2 - \nu^2}.$$

Es bleibt das dreifache Integral

$$(7) \quad \frac{e^{ikR}}{R} = -\frac{1}{2\pi^2} \int_{-\infty}^{+\infty} \int \int e^{i\lambda x + i\mu y + i\nu z} \frac{d\lambda d\mu d\nu}{k^2 - \lambda^2 - \mu^2 - \nu^2};$$

dies Integral hat die gewünschte für die Summation äußerst bequeme Form.

Es sei bemerkt, daß die Substitution von $-\lambda$, .. an Stelle von $+\lambda$, .. nichts ändert außer dem Vorzeichen der Exponenten. Ist ferner R der Abstand des Punktes xyz vom Punkte XYZ , so gilt das allgemeinere Integral

$$(8) \quad \frac{e^{ikR}}{R} = -\frac{1}{2\pi^2} \int \int \int e^{\pm i\lambda(X-x) \pm i\mu(Y-y) \pm i\nu(Z-z)} \frac{d\lambda d\mu d\nu}{k^2 - \lambda^2 - \mu^2 - \nu^2}.$$

Schließlich sei bemerkt, daß die Integrationswege von der reellen Achse verschoben werden können, wobei aber nicht

$$k^2 - \lambda^2 - \mu^2 - \nu^2 = 0$$

werden darf. Insbesondere dürfen bei nicht verschwindendem imaginären Teil von k die drei Variablen auf identischen Wegen in kleinem Abstand über der reellen Achse (zwischen dieser Achse und dem Punkt k) laufen.

§ 6. Das Gesamtpotential und das optische Feld.

Um das Gesamtpotential des rhombischen Punktgitters zu bilden, haben wir, zunächst unter Benutzung des dreifachen Integrals [§ 5, (8)], die Einzelpotentiale

$$(1) \frac{e^{i(k_0 R - kS)}}{R} = -\frac{e^{-ikS}}{2\pi^2} \iiint \frac{e^{\pm i\lambda(X-x) \pm i\mu(Y-y) \pm i\nu(Z-z)}}{k_0^2 - \lambda^2 - \mu^2 - \nu^2} d\lambda d\mu d\nu$$

zu summieren.

Die Koordinaten der Gitterpunkte sind

$$X = 2al, \quad Y = 2bm, \quad Z = 2cn,$$

wo l, m, n alle ganzzahligen positiven und negativen Werte annehmen. (a, b, c) sind die halben Abstände von Nachbarpunkten auf den Achsen und zugleich die Abstände benachbarter Symmetrieebenen des Systems. k_0 ist die Ausbreitungskonstante der einzelnen Kugelwellen, k die der Dipolphase. Wir setzen

$$(2) \begin{cases} kS = k(X \cos(S, x) + Y \cos(S, y) + Z \cos(S, z)) \\ \quad = \alpha X + \beta Y + \gamma Z; \end{cases}$$

dabei ist

$$(2a) \quad \alpha^2 + \beta^2 + \gamma^2 = k^2.$$

Das Gesamtpotential ist nun

$$(3) \begin{cases} \Pi = -\frac{1}{2\pi^2} \sum_{l, m, n}^{\dots + \infty} \iiint e^{2ial(\pm\lambda - \alpha) + 2ibm(\pm\mu - \beta) + 2icn(\pm\nu - \gamma)} \\ \quad \cdot e^{\mp i\lambda x \mp i\mu y \mp i\nu z} \frac{d\lambda d\mu d\nu}{k_0^2 - \lambda^2 - \mu^2 - \nu^2} \end{cases}$$

Führen wir die Summation am Integranden aus, so zerfällt die dreifache Summe in das Produkt dreier einfacher geometrischer Reihen, von denen die erste heißt

$$\sum_{-\infty}^{+\infty} e^{2ial(\pm\lambda - \alpha) \mp i\lambda x}.$$

Die Konvergenz dieser Summe für positive und negative l kann dank der Unbestimmtheit des Vorzeichens von λ erreicht werden, sobald der imaginäre Teil k_{02} größer ist als k_2 (vgl. § 3). In diesem Falle ist es nämlich möglich, λ auf einer über a gelegenen Parallelen zur reellen Achse laufen zu lassen, ebenso μ über β , ν über γ ¹⁾, so daß also $+\lambda - \alpha$ einen positiven imaginären Teil hat, was zur Konvergenz der Summe über positive l genügt. Die Summe über die negativen l konvergiert, wenn wir das Vorzeichen von λ umkehren.

1) Den Beweis findet man in der Dissertation Note 1.

Die Summation nach l ergibt demnach

$$\begin{aligned}
 \left. \begin{aligned}
 \sum_{-\infty}^{+\infty} (l) \dots &= \sum_0^{-\infty} e^{2ial(\lambda-a) - i\lambda x} + \sum_{-1}^{-\infty} e^{-2ial(\lambda+a) + i\lambda x} \\
 &= \frac{e^{-i\lambda x}}{1 - e^{2ia(\lambda-a)}} + \frac{e^{+i\lambda x + 2ia(\lambda+a)}}{1 - e^{2ia(\lambda+a)}} \\
 &= \frac{e^{-i\lambda x}(1 - e^{2ia(\lambda+a)}) + e^{i\lambda x + 2ia(\lambda+a)}(1 - e^{2ia(\lambda-a)})}{1 + e^{4ia\lambda} - 2 \cos 2a\alpha e^{2ia\lambda}} \\
 &= \frac{e^{-i\lambda(x+2a)} - e^{-i\lambda x + 2ia\alpha} + e^{i\lambda x + 2ia\alpha} - e^{i\lambda(x+2a)}}{2 \cos 2a\lambda - 2 \cos 2a\alpha} \\
 &= -i \frac{\sin \lambda(x+2a) - e^{2ia\alpha} \sin \lambda x}{\cos 2a\lambda - \cos 2a\alpha}.
 \end{aligned} \right\} (4)
 \end{aligned}$$

Entsprechend gestalten sich die Summationen nach m und n .

Das Gesamtpotential ist also

$$\left. \begin{aligned}
 \Pi &= -\frac{i}{2\pi^2} \iiint \frac{\sin \lambda(x+2a) - e^{2ia\alpha} \sin \lambda x}{\cos 2a\lambda - \cos 2a\alpha} \cdot \frac{\sin \mu(y+2b) - e^{2ib\beta} \sin \mu y}{\cos 2b\mu - \cos 2b\beta} \\
 &\quad \cdot \frac{\sin \nu(x+2c) - e^{2ic\gamma} \sin \nu x}{\cos 2\nu c - \cos 2c\gamma} \cdot \frac{d\lambda d\mu d\nu}{k_0^2 - \lambda^2 - \mu^2 - \nu^2},
 \end{aligned} \right\} (5)$$

wobei als Integrationswege für $(\lambda\mu\nu)$ die Parallelen zur reellen Achse oberhalb von $(\alpha\beta\gamma)$ gelten (Weg 1, Fig. 4).

Aus den Integranden läßt sich ein Teil entfernen. Schreiben wir im λ -Integral

$$\begin{aligned}
 &\frac{\sin \lambda(x+2a) - e^{2ia\alpha} \sin \lambda x}{\cos 2a\lambda - \cos 2a\alpha} \\
 &= \frac{\sin \lambda x \cos 2a\lambda + \cos \lambda x \sin 2a\lambda - e^{2ia\alpha} \sin \lambda x}{\cos 2a\lambda - \cos 2a\alpha} \\
 &= \sin \lambda x + \frac{\cos \lambda x \sin 2a\lambda - i \sin \lambda x \sin 2a\alpha}{\cos 2a\lambda - \cos 2a\alpha},
 \end{aligned}$$

so hat der erste Term $\sin \lambda x$ den Nenner, welcher Pole des Integranden bedingt, verloren. Wir können dann für diesen Teil des Integrals den Weg von λ auf die reelle Achse verschieben; da $\sin \lambda x$ eine ungerade, $k_0^2 - \lambda^2 - \mu^2 - \nu^2$ eine gerade Funktion von λ ist, ist das Integral Null und es bleibt übrig, wenn das gleiche für die μ - und ν -Integration vorgenommen wird:

$$(6) \quad \left\{ \begin{aligned} \Pi = -\frac{i}{2\pi^2} \iiint \frac{\cos \lambda x \sin 2 a \lambda - i \sin \lambda x \sin 2 a \alpha}{\cos 2 a \lambda - \cos 2 a \alpha} \dots \\ \dots \frac{d\lambda d\mu d\nu}{k_0^2 - \lambda^2 - \mu^2 - \nu^2} \end{aligned} \right.$$

Es ist bequem, von diesem Integral auf eine Summe überzugehen, indem man die Residuen an den Polen des Integranden bildet. Die Pole für die λ -Integration liegen bei

$$\cos 2 a \lambda_0 = \cos 2 a \alpha, \quad \lambda_0 = \frac{l\pi \pm a \alpha}{a},$$

wo l eine positive oder negative ganze Zahl. In der λ -Ebene liegen die Pole auf den beiden Parallelen zur reellen Achse, die durch die Punkte $\pm a$ gehen (Fig. 4).

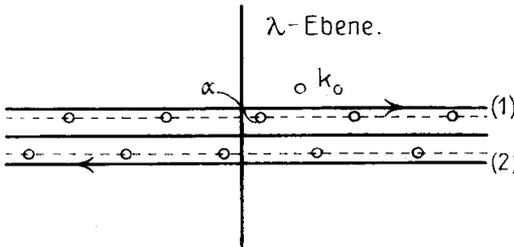


Fig. 4.

Beachten wir, daß der Integrand eine ungerade Funktion ist, so können wir bei der Substitution $\lambda' = -\lambda$ den bisherigen Weg (1) (Fig. 4) von λ ersetzen durch den symmetrisch zu (1) unterhalb der unteren Polreihe liegenden Weg (2), der in umgekehrter Richtung zu durchlaufen ist. Nehmen wir unter Hinzufügung des Faktors $1/2$ für jede Integration in allen drei Variablenebenen den Weg (1) + (2), so entsteht

$$\Pi = -\frac{i}{16\pi^2} \underbrace{\iiint}_{(1)+(2)} \frac{\cos \lambda x \sin 2 a \lambda - i \sin \lambda x \sin 2 a \alpha}{\cos 2 a \lambda - \cos 2 a \alpha} \dots \dots \frac{d\lambda d\mu d\nu}{k_0^2 - \lambda^2 - \mu^2 - \nu^2};$$

der durch das Unendlichferne geschlossene Weg (1) + (2) läßt sich zu Umläufen um die Pole zusammenziehen, wobei diese in negativem Sinne umkreist werden.

Das Residuum an einem der Pole $\lambda_0 = \frac{l\pi \pm a \alpha}{a}$ erhalten wir durch Entwicklung des Integrandennenners nach $(\lambda - \lambda_0)$:

$$\begin{aligned}
 & \frac{\cos \lambda_0 x \sin 2 a \lambda_0 - i \sin \lambda_0 x \sin 2 a \alpha}{-2 a \sin 2 a \lambda_0 (\lambda - \lambda_0) + \dots} \\
 &= \frac{1}{\lambda - \lambda_0} \cdot \frac{-1}{2 a} \left(\cos \lambda_0 x - i \sin 2 a \alpha \cdot \frac{\sin \lambda_0 x}{\sin 2 \lambda_0 \alpha} \right) + \dots \\
 &= \frac{1}{\lambda - \lambda_0} \cdot \frac{-1}{2 a} \left(\cos \lambda_0 x - i \sin \lambda_0 x \cdot \frac{\sin 2 a \alpha}{\pm \sin 2 a \alpha} \right) + \dots \\
 &= \frac{1}{\lambda - \lambda_0} \cdot \frac{-1}{2 a} e^{\mp i \frac{l\pi \pm a\alpha}{a} x} + \dots,
 \end{aligned}$$

wobei die oberen Vorzeichen sich auf die Pole der oberen Reihe beziehen und umgekehrt. Die Summe aller Residuen, die von der Integration nach λ herrühren, ist

$$\frac{2\pi i}{2a} \left\{ \sum_{-\infty}^{+\infty} l \frac{e^{-i \frac{l\pi + a\alpha}{a} x}}{k_0^2 - \mu^2 - \nu^2 - \left(\frac{l\pi + a\alpha}{a}\right)^2} + \sum_{-\infty}^{+\infty} l \frac{e^{+i \frac{l\pi - a\alpha}{a} x}}{k_0^2 - \mu^2 - \nu^2 - \left(\frac{l\pi - a\alpha}{a}\right)^2} \right\}$$

oder da die zweite Summe identisch ist mit der ersten (man setze $-l$ statt l für den Summationsbuchstaben):

$$\frac{2\pi i}{a} \sum_{-\infty}^{+\infty} l \frac{e^{-i \frac{l\pi + a\alpha}{a} x}}{k_0^2 - \mu^2 - \nu^2 - \left(\frac{l\pi + a\alpha}{a}\right)^2}.$$

Bei analoger Ausführung der anderen Integrationen erhalten wir *das Gesamtpotential*:

$$(7) \quad \Pi = -\frac{\pi}{2abc} \sum_{l, m, n}^{\dots, +\infty} \frac{e^{-i \frac{l\pi + a\alpha}{a} x - i \frac{m\pi + b\beta}{b} y - i \frac{n\pi + c\gamma}{c} z}}{k_0^2 - \left(\frac{l\pi + a\alpha}{a}\right)^2 - \left(\frac{m\pi + b\beta}{b}\right)^2 - \left(\frac{n\pi + c\gamma}{c}\right)^2}.$$

Diese Reihe, welche äquivalent ist den Integralen (5) und (6), stellt das genaue elektromagnetische Vektorpotential dar, welches durch Superposition der Kugelwellen entsteht.

Zieht man den Faktor

$$e^{-i(\alpha x + \beta y + \gamma z)} = e^{-iks}$$

vor das Summenzeichen, so hat das Potential die Form

$$(7a) \quad \Pi = -\frac{\pi}{2abc} \cdot e^{-iks} \cdot \sum,$$

wo die übrigbleibende Summe \sum eine periodische Funktion (Fourierreihe) ist mit dem Entwicklungsbereich $\pm a, \pm b, \pm c$. Der Faktor e^{-iks} unterscheidet sich von dem für die Dipol-

phase angesetzten Faktor nur darin, daß an Stelle der sprunghaften Veränderlichen S (der Koordinate eines Dipols) die stetige Koordinate s getreten ist.

Um eine lebhaftere Vorstellung des durch (7a) dargestellten Potentials zu bekommen, muß man sich vor Augen halten, daß der Entwicklungsbereich der periodischen Funktion un- gemein klein ist gegenüber der Strecke, die der Faktor e^{-ik_s} zur vollen Periode braucht. Sind doch die Abstände der Atome in den Körpern von der Größenordnung 10^{-8} cm, während Lichtwellen auch in starkbrechenden Körpern 10^{-5} cm nicht unterschreiten. Es kommen also 100—1000 Atome auf eine Lichtwellenlänge.

Der Faktor e^{-ik_s} verändert sich innerhalb eines Elementar- parallelepipeds also kaum. Um auf (7a) zu kommen, haben wir uns zunächst eine periodische Funktion von ziemlich kompliziertem Charakter vorzustellen, sie sich um jedes Atom herum wiederholt. Sodann haben wir, von Atom zu Atom wandernd, die Amplitude dieser Funktion gemäß dem Maßstab, der durch den langsam veränderlichen Faktor gegeben ist, zu regulieren.

Für die optische Welle kommt es auf die Schroffen und Zacken des mikroskopischen Feldes nicht an und die periodische Funktion wirkt in ihrer Wiederholung von Atom zu Atom nur durch ihren Mittelwert. Dieser ist — das konstante Glied 000 der Fourierschen Reihe —

$$\frac{1}{k_0^2 - k^2}$$

und daher ist das *Potential des optischen Feldes*:

$$(8) \quad a \bar{H} = a \cdot \frac{\pi}{2abc} e^{-ik_s} \frac{1}{k^2 - k_0^2};$$

es stellt mit dem Zeitfaktor e^{-int} versehen, eine ebene Welle der Richtung — s dar, deren Exponent nicht, wie der der einzelnen Kugelwellen als charakteristische Größe k_0 , sondern k enthält. Dementsprechend erfüllt es die Ausbreitungsgleichung

$$\Delta \bar{H} + k^2 \bar{H} = 0.$$

Die ursprünglich für die Dipolphase angesetzte Größe k selbst, bzw. das Verhältnis

$$v = \frac{k}{k_0}$$

ist aus der „dynamischen Gleichgewichtsbedingung“ (10, § 2) zu bestimmen.

Der Faktor $(k_0^2 - k^2)^{-1}$ bestimmt die Amplitude a der mitschwingenden Elektronen, wenn die Intensität der beobachteten optischen Welle gegeben ist: für kleine Werte von $(k_0 - k)$, d. h. wenn der Berechnungsindex nicht viel von 1 abweicht, sind die Amplituden besonders klein; dies ist aber im Grunde nur die Umkehrung der Aussage, daß wenig mitschwingende Elektronen den Brechungsindex wenig beeinflussen.

§ 7. Zweite Summation; erregendes Feld.

Die im vorigen Paragraphen abgeleitete Form des Gesamtpotentials gestattete in durchsichtiger Weise die Entstehung des optischen Feldes zu verfolgen. Besonders war leicht zu sehen, daß das Gesamtpotential an allen Gitterpunkten gleiche Phase e^{ik_s} wie die Dipole hatte. Hierdurch kommt es, daß wir uns zur Berechnung der Dipolschwingungen (10, § 2) auf den Dipol im Nullpunkte beschränken dürfen. Für diesen haben wir das erregende Potential bzw. dessen zweite Ableitungen zu bilden, welche mittels der Determinante 11, § 2 die Phasenkonstante k bestimmen.

An der Summe (7) des vorigen Paragraphen läßt sich die Wirkung des Aufdipols 000 nicht abziehen; dies liegt daran, daß die Summe für $x = y = z = 0$ unendlich wird, indem sie ungleichmäßig konvergiert und schließlich divergiert. Der abziehende Beitrag $R^{-1} e^{ik_0 R}$ hingegen divergiert in ganz anderer Weise. Daher lassen sich beide Ausdrücke nicht verschmelzen, bevor sie unendlich werden. Übrigens gestattet die Form, in der II erscheint, auch nicht eine zweimalige Differentiation.

Es ist nun auch im Hinblick auf die numerische Rechnung besonders erfreulich, daß mit Hilfe des einfachen Integrals für das Einzelpotential (3, § 5) sich die Summation ebenfalls ausführen läßt. Man erhält ein einfaches Integral über ein Produkt von Thetafunktionen und Exponentialfunktionen und kann am Integranden die Substraktion des unendlich werden Gliedes wirklich vornehmen, so daß bei dieser Berechnung des erregenden Potentials kein Term $\infty - \infty$ auftritt. Dies ist im Grunde das Verdienst der ϑ -Transformationsformel, d. h. des Umstandes, daß jede ϑ -Funktion zwei ganz verschiedene Entwicklungen zuläßt. In der einen Entwicklung stellt für uns jedes Glied die Wirkung eines Dipols dar und deshalb kann der Beitrag des Aufdipols gesondert erkannt und abgezogen

werden. Bei der anderen Entwicklung sind die Anteile der einzelnen Dipole ganz durcheinander geworfen und jedes Glied der Entwicklung entspricht einem der Terme, aus denen wir im vorigen Paragraphen das Gesamtpotential als dreifache Summe aufgebaut haben. Indem nun beide Darstellungen geeignet benutzt werden, gelingt es leicht, den Anteil des Aufdipols abzuziehen und doch die wesentlichen Teile des Feldes von den andern zu trennen.

Wir gehen aus von dem Integral 3, § 5:

$$(1) \quad \frac{e^{ik_0 R}}{R} = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_{(0)}^{\infty} e^{-k^2 \varepsilon'^2 + \frac{k^2}{4\varepsilon'^2}} d\varepsilon';$$

in dieses führen wir eine dimensionslose Variable ε ein, indem wir setzen

$$(2) \quad \varepsilon = \frac{2d}{\sqrt{\pi}} \varepsilon', \quad \varepsilon_0^2 = \frac{d^2 k_0^2}{\pi}, \quad \varepsilon^2 = \frac{d^2 k^2}{\pi}, \quad P^2 = \frac{\pi}{4} \cdot \frac{x^2 + y^2 + z^2}{d^2},$$

wo d eine Länge von der Größenordnung der a, b, c sei, welche wir später als das geometrische Mittel dieser Kantenlängen wählen werden. Dann ist

$$(3) \quad \frac{e^{ik_0 R}}{R} = \frac{1}{d} \int_{(0)}^{\infty} e^{-\frac{\pi \varepsilon^2}{4} \{ (X-x)^2 + (Y-y)^2 + (Z-z)^2 \} + \frac{\varepsilon_0^2}{\varepsilon^2}} d\varepsilon.$$

Die Bestimmung des § 5 über die Richtung des Auslaufens aus dem Nullpunkte wird durch die Transformation nicht geändert.

Multiplizieren wir mit dem Dipolphasenfaktor und summieren, so erhalten wir das Gesamtpotential:

$$(4) \quad \Pi = \frac{1}{d} \sum_{l, m, n} \int_{(0)}^{\infty} e^{-\frac{\pi \varepsilon^2}{4} \{ (2al-x)^2 + (2bm-y)^2 + (2cn-z)^2 \} - 2iaal - 2ib\beta m - 2icy n + \frac{\varepsilon_0^2}{\varepsilon^2}} d\varepsilon.$$

Der vom Summationsbuchstaben l abhängige Teil des Exponenten ist

$$-\varepsilon^2 \frac{\pi a^2}{d^2} l^2 + \left(\varepsilon^2 \frac{\pi a x}{d^2} - 2iaa \right) l.$$

Die einfachste Thetafunktion (welche auch ϑ_{00} oder ϑ_3 genannt wird) läßt folgende Reihenentwicklung zu:

$$(5) \quad \vartheta(v | i\tau) = \sum_{-\infty}^{+\infty} e^{-\pi i^2 \tau - 2\pi i v}.$$

Bei Vertauschung von Summations- und Integrationsfolge haben wir daher in (4)

$$\vartheta\left(\frac{\alpha\alpha}{\pi} + i\frac{ax}{2d^2}\varepsilon^2 \middle| i\frac{a^2}{d^2}\varepsilon^2\right)$$

vor uns und das Gesamtpotential ist

$$(6) \quad \left\{ \begin{aligned} II &= \frac{1}{d} \int_{(0)}^{\infty} \vartheta\left(\frac{\alpha\alpha}{\pi} + \frac{iax\varepsilon^2}{2d^2} \middle| i\frac{a^2}{d^2}\varepsilon^2\right) \cdot \vartheta\left(\frac{b\beta}{\pi} + \frac{iby\varepsilon^2}{2d^2} \middle| i\frac{b^2}{d^2}\varepsilon^2\right) \\ &\quad \cdot \vartheta\left(\frac{c\gamma}{\pi} + \frac{icx\varepsilon^2}{2d^2} \middle| i\frac{c^2}{d^2}\varepsilon^2\right) \cdot e^{-P^2\varepsilon^2 + \frac{\kappa_0^2}{\varepsilon^2}} d\varepsilon. \end{aligned} \right.$$

Lassen wir bei der Summation den Dipol 000 aus, so fällt das Glied 000 fort und wir erhalten das *erregende Potential*:

$$(7) \quad II' = \frac{1}{d} \int_{(0)}^{\infty} \{ \vartheta \cdot \vartheta \cdot \vartheta - 1 \} e^{-P^2\varepsilon^2 + \frac{\kappa_0^2}{\varepsilon^2}} d\varepsilon.$$

Um die Integrale ausführen zu können benutzen wir die Reihenentwicklungen der ϑ . Die ursprüngliche Reihe (5) konvergiert schnell, wenn ε groß ist; eine für kleine ε brauchbare Entwicklung erhalten wir durch die ϑ -Transformationsformel¹⁾

$$(8) \quad \left\{ \begin{aligned} \vartheta(v | i\tau) &\equiv \frac{1}{\sqrt{\tau}} e^{-\pi \frac{v^2}{\tau}} \vartheta\left(i \frac{v}{\tau} \middle| i \frac{i}{\tau}\right) \\ &= \frac{1}{\sqrt{\tau}} e^{-\pi \frac{v^2}{\tau}} \sum e^{-\pi \frac{l^2}{\tau} - 2\pi i l \frac{v}{\tau}}. \end{aligned} \right.$$

Mittels der „transformierten“ und der „ursprünglichen“ Reihe ergeben sich folgende Integrale für II' :

$$9) \quad II' = \left\{ \begin{aligned} &\frac{1}{d} \cdot \frac{d^3}{abc} \int \sum e^{-\frac{\pi}{\varepsilon^2} \left\{ \left(l \frac{d}{a} + \frac{d\alpha}{\pi} \right)^2 + \dots \right\} - i\pi \left\{ \left(l \frac{d}{a} + \frac{d\alpha}{\pi} \right) \frac{x}{d} + \dots \right\} + \frac{\kappa_0^2}{\varepsilon^2}} \varepsilon^{-3} d\varepsilon \\ &\frac{1}{d} \int \sum e^{-\pi \varepsilon^2 \left\{ \left(l \frac{\alpha}{d} + \frac{x}{2d} \right)^2 + \dots \right\} - 2i(l\alpha + \dots) + \frac{\kappa_0^2}{\varepsilon^2}} d\varepsilon. \end{aligned} \right.$$

Die Integranden sind für jedes ε identisch gleich. Wir wollen abkürzend die Exponenten im ersten und zweiten Integral

1) Vgl. z. B. A. Krazer, Lehrbuch der Thetafunktionen, p. 96. Teubner.

durch I und II bezeichnen. Dann sind die Ableitungen

$$\frac{\partial^2 \Pi}{\partial x^2} = \Pi_{xx} \quad \text{und} \quad \frac{\partial^2 \Pi}{\partial x \partial y} = \Pi_{xy}:$$

$$(10) \quad \Pi_{xx} = \begin{cases} -\frac{\pi^2}{abc} \int \sum \left(l \frac{d}{a} + \frac{d\alpha}{\pi} \right)^2 \cdot e^i \cdot \varepsilon^{-3} d\varepsilon \\ \frac{1}{d^3} \int \sum \left\{ \pi^2 \varepsilon^4 \left(l \frac{a}{d} + \frac{x}{2d} \right)^2 - \frac{\pi \varepsilon^8}{2} \right\} e^{11} d\varepsilon. \end{cases}$$

$$(11) \quad \Pi_{xy} = \begin{cases} -\frac{\pi^2}{abc} \int \sum \left(l \frac{d}{a} + \frac{d\alpha}{\pi} \right) \left(m \frac{d}{b} + \frac{d\beta}{\pi} \right) e^i \cdot \varepsilon^{-3} d\varepsilon \\ \frac{1}{d^3} \int \sum \pi^2 \varepsilon^4 \left(l \frac{a}{d} + \frac{x}{2d} \right) \left(m \frac{b}{d} + \frac{y}{2d} \right) e^{11} d\varepsilon. \end{cases}$$

Wir müssen nun von Π_{xx} das zweimal nach x differenzierte Einzelpotential des Aufdipols abziehen. Zu dem Zweck teilen wir die Integration, welche Π_{xx} liefert, in zwei Teile: von 0 bis E und von E bis ∞ . E ist zunächst unbestimmt. Auf der ersten Weghälfte benutzen wir die Reihen mit dem Exponenten I, auf der zweiten die Reihen mit II. Abzuziehen ist (vgl. (3) dieses Paragraphen)

$$(12) \quad \frac{\partial^2}{\partial x^2} \frac{e^{ik_0 R}}{R} = \frac{1}{d^3} \int_{(0)}^{\infty} \left(\pi^2 \varepsilon^4 \frac{x^2}{4d^2} - \pi \frac{\varepsilon^2}{2} \right) e^{-P^2 \varepsilon^2 + \frac{\kappa_0^2}{\varepsilon^2}} d\varepsilon.$$

Teilen wir auch dies Integral durch die Übergangsstelle E in zwei Teile, so ist das Integral von E bis ∞ identisch mit dem Gliede 000 der zweiten Hälfte von Π_{xx} . Die Subtraktion läßt sich also durch einen Akzent an der Summe ausführen und es ist, wenn wir gleichzeitig zu $x = y = z = P = 0$ übergehen

$$(13) \quad \begin{cases} \Pi'_{xx} = \Pi_{xx}^{(1)} + \Pi_{xx}^{(2)}; \\ \Pi_{xx}^{(1)} = -\frac{\pi^2}{abc} \sum \int_0^E \left(l \frac{d}{a} + \frac{d\alpha}{\pi} \right)^2 \cdot e^i \cdot \varepsilon^{-3} d\varepsilon + \frac{1}{d^3} \int \frac{\pi \varepsilon^2}{2} e^{\frac{\kappa_0^2}{\varepsilon^2}} d\varepsilon \\ \Pi_{xx}^{(2)} = \frac{1}{d^3} \sum' \int_E^{\infty} \left\{ \left(l \pi \varepsilon^2 \frac{a}{d} \right)^2 - \frac{\pi \varepsilon^2}{2} \right\} e^{11} d\varepsilon, \end{cases}$$

wo die Exponenten für den Nullpunkt sind:

$$I = -\frac{\pi}{\varepsilon^2} \left\{ \left(l \frac{d}{a} + \frac{d\alpha}{\pi} \right)^2 + \dots \right\} + \frac{\kappa_0^2}{\varepsilon^2},$$

$$II = -\pi \varepsilon^2 \left\{ l^2 \frac{a^2}{d^2} + \dots \right\} - 2i(l\alpha\alpha + \dots) + \frac{\kappa_0^2}{\varepsilon^2}.$$

In $\Pi_{xx}^{(1)}$ läßt sich das allgemeine Summenglied leicht integrieren, wenn man beachtet, daß $\varepsilon^{-3} d\varepsilon = -\frac{1}{2} d\left(\frac{1}{\varepsilon^2}\right)$ ist. Das unbestimmt integrierte Glied liefert bei $\varepsilon = 0$ wegen der Richtung des Auslaufens aus dem Nullpunkt keinen Beitrag; es bleibt der Wert an der oberen Grenze E und man hat

$$(14) \left\{ \begin{aligned} \Pi_{xx}^{(1)} &= \frac{\pi^2}{2abc} \sum \frac{\left(l \frac{d}{a} + \frac{d\alpha}{\pi}\right)^2 e^{-\frac{\pi}{E^2} \left\{ \left(l \frac{d}{a} + \frac{d\alpha}{\pi}\right)^2 + \dots \right\} + \frac{\kappa_0^2}{E^2}}}{\kappa_0^2 - \pi \left(l \frac{d}{a} + \frac{d\alpha}{\pi}\right)^2 - \dots} \\ &+ \frac{\pi}{2d^3} \int_{(0)}^E e^{\frac{\kappa_0^2}{\varepsilon^2}} \varepsilon^2 d\varepsilon. \end{aligned} \right.$$

Man sieht hier deutlich den Zusammenhang mit dem Gesamtpotential in der Form des § 6. Für $E = \infty$ geht Π'_{xx} über in das (formal) differenzierte Gesamtpotential (7), § 6, genommen am Nullpunkte und vermindert um das (ebenfalls unendliche) vom Aufdipol herrührende Glied. Wird aber E im Endlichen beibehalten, so sind alle Terme endlich, weil sich der unendlich große Teil der Wirkung des Aufdipols in $\Pi_{xx}^{(2)}$ herausgehoben hat.

Durch analoge Rechnung ergibt sich:

$$(15) \left\{ \begin{aligned} \Pi'_{xy} &= \Pi_{xy}^{(1)} + \Pi_{xy}^{(2)} \\ \Pi_{xy}^{(1)} &= \frac{\pi^2}{2abc} \sum \frac{\left(l \frac{d}{a} + \frac{d\alpha}{\pi}\right) \left(m \frac{d}{b} + \frac{d\beta}{\pi}\right) \cdot e^{-\frac{\pi}{E^2} \left\{ \left(l \frac{d}{a} + \frac{d\alpha}{\pi}\right)^2 + \dots \right\} + \frac{\kappa_0^2}{E^2}}}{\kappa_0^2 - \pi \left(l \frac{d}{a} + \frac{d\alpha}{\pi}\right)^2 + \dots} \\ \Pi_{xy}^{(2)} &= \frac{\pi^2}{d^3} \frac{ab}{d^2} \int_E^\infty \sum' l \cdot m \cdot \varepsilon^4 \cdot \varepsilon^{11} d\varepsilon. \end{aligned} \right.$$

In $\Pi_{xy}^{(1)}$ fehlt das Integral, welches bei $\Pi_{xx}^{(1)}$ dem von der Summe abzuziehenden Einzelpotential entspricht; dies liegt daran, daß bei der Differentiation von (3) nach x und y kein unabhängig von der Richtung unendlich werdendes Glied auftritt. Der Akzent an der Summe in $\Pi_{xy}^{(2)}$ darf trotz des Faktors $l \cdot m$ nicht fortgelassen werden, da das Integral über das Glied $l = m = n = 0$ unendlich ist.

Die Reihen (14) für $\Pi_{xx}^{(1)}$ und (13) für $\Pi_{xx}^{(2)}$ geben die zur Berechnung der Hauptbrechungsindizes nötigen Daten, soweit sie

sich ohne Vernachlässigungen finden lassen. Im folgenden Paragraphen werden nun die Vereinfachungen benutzt, welche die wirklichen Größenverhältnisse bei der Ausbreitung des Lichtes in festen Körpern mit sich bringen.

§ 8. Vernachlässigungen wegen der Kleinheit von κ , κ_0 .

Die in § 7, (11) und (12) aufgestellten Formeln für die Ableitungen des erregenden Potentials am Orte des Dipols 000 können erheblich vereinfacht werden, wenn κ_0 , κ und $d \cdot \alpha$, $d \cdot \beta$, $d \cdot \gamma$ kleine Zahlen sind. Dies ist stets der Fall, sobald es sich um sichtbares Licht und feste Körper handelt, da d von der Größe der Atomabstände, k_0 , k , α , β , γ von der Ordnung $1/\lambda$ sind. Wie schon oben festgestellt wurde, ist das Verhältnis d/λ von der Ordnung $1/100$ bis $1/1000$, und von der gleichen Ordnung sind die obigen Größen.

Unter diesen Umständen spielen Terme wie $d\alpha/\pi$ in den Reihen (13), (14), § 7, nur dann eine Rolle, wenn $l = m = n = 0$ ist.

Wir streichen deshalb in allen Gliedern der Reihe die kleinen Größen, nachdem wir das Glied 000 abgedeutert haben. Dieses Glied lautet für $II_{xx}^{(1)}$ nach (14), § 7:

$$\frac{\pi^2}{2abc} \frac{d^2 \alpha^2}{\pi^2} \frac{1}{\kappa_0^2 - \kappa^2} = \frac{\pi}{2abc} \frac{\nu^2 \cos^2(S, x)}{1 - \nu^2},$$

wobei $\nu = \kappa/\kappa_0$ der Brechungsindex ist. Das Glied ist also von der Größenordnung 1 in bezug auf κ^2 .

Das in (14) des vorigen § auftretende Integral

$$\int_{(0)}^E e^{\frac{\kappa_0^2}{\epsilon^2}} \epsilon^2 d\epsilon$$

hat wegen der Kleinheit von κ_0 einen Integranden, der erst dort von ϵ^2 erheblich abweicht, wo der Integrand ohnehin sehr klein ist. Wir begehen einen Fehler höchstens von der Ordnung κ_0^2 , wenn wir dies Integral ersetzen durch das von κ_0 unabhängige

$$\int_{(0)}^E \epsilon^2 d\epsilon = \frac{E^3}{3}.$$

Im ganzen wird hiernach der erste Teil des erregenden Potentials

$$II_{xx}^{(1)} = \frac{\pi}{2abc} \left(\frac{\nu^2}{1 - \nu^2} \cos^2(S, x) + \psi_{xx}^{(1)} \right),$$

wo $\psi_{xx}^{(1)}$ in dieser Annäherung weder von κ und κ_0 noch von der Ausbreitungsrichtung der Welle, sondern allein von den a, b, c abhängt.

Die analoge Betrachtung wird an der Reihe (13), § 7, für $\Pi_{xx}^{(2)}$ durchgeführt. Auch hier können die kleinen Größen von der Ordnung κ_0^2 im Exponenten der e -Funktion vernachlässigt werden, sobald sie neben Gliedern der Größenordnung 1 stehen. Nur für das Summenglied 000 wäre dies nicht der Fall; da dieses Glied aber durch den Akzent sowieso ausgeschlossen ist, so wird $\Pi_{xx}^{(2)}$ ganz und gar unabhängig von den kleinen Größen. Wir schreiben in dieser Näherung

$$\Pi_{xx}^{(2)} = \frac{\pi}{2abc} \psi_{xx}^{(2)}$$

und haben im ganzen für das erregende Potential, wenn noch $\psi_1 + \psi_2 = \psi$ gesetzt wird:

$$(1) \quad \Pi'_{xx} = \frac{\pi}{2abc} \left(\frac{v^2}{1-v^2} \cos^2(S, x) + \psi_{xx} \right)$$

und analog

$$(2) \quad \Pi'_{xy} = \frac{\pi}{2abc} \left(\frac{v^2}{1-v^2} \cos(S, x) \cos(S, y) \right).$$

Bei Π'_{xy} und den analogen Differentiationen tritt offenbar kein Glied ψ_{xy} auf; denn dieses wäre ja unabhängig von der Richtung und also bei Ausbreitung längs einer der Koordinatenachsen auch vorhanden. Wir wissen aber, daß aus Symmetrie in diesem Fall $\Pi'_{xy} = 0$ ist (vgl. oben).

Schließlich ist in dieser Bezeichnungsweise auch

$$(3) \quad \Delta \Pi' = \frac{\pi}{2abc} \left(\frac{v^2}{1-v^2} + \Delta \psi \right).$$

§ 9. Die Dispersionsformel.

In § 2 hatten wir sechs Fälle zur Berechnung der Hauptbrechungsindizes unterscheiden müssen, je nach der Richtung von Schwingung und Strahl, hatten aber bereits dort vermutet, daß je zwei dieser Indizes so nahe zusammenfielen, daß ihre Unterscheidung praktisch unnötig wäre. In der Tat können wir jetzt die Bestimmungsgleichung bei Ausbreitung der optischen Welle in der z -Richtung und Schwingung in der x -Richtung aufschreiben:

$$\Omega + (\Delta \Pi' - \Pi'_{xx})_{\alpha=\beta=0}^{\gamma=k} = \Omega + \frac{\pi}{2abc} \left(\frac{v_{xz}^2}{1-v_{xz}^2} + \Delta \psi - \psi_{xx} \right) = 0$$

und finden dann, daß in unserer Annäherung wegen der Unabhängigkeit der ψ von der Richtung des Strahles die identische Gleichung auch für v_{xy} , d. h. bei $\alpha = \gamma = 0$, $\beta = k$, gelten würde. Wir lassen deshalb den Unterschied zwischen v_{xy} und v_{xz} fort, indem wir v_x für den Hauptbrechungsindex bei Dipol-schwingungen parallel der x -Achse schreiben.

Nennen wir v das einen Dipol enthaltende Volumen $Sabc$, so haben wir für den Brechungsindex die Gleichung

$$(1) \quad \frac{v_x^2}{v_x^2 - 1} = \frac{v}{4\pi} \Omega + \Delta \psi - \psi_{xx}$$

oder

$$(2) \quad v_x^2 = 1 + \frac{1}{\frac{v}{4\pi} \Omega + \Delta \psi - \psi_{xx} - 1}.$$

Erinnern wir uns der Bedeutung der Elektronenkonstanten Ω (9, § 2)

$$\Omega = \frac{m}{e^2} \left(n_0^2 - n^2 - i n \frac{g}{m} \right);$$

dabei soll, um durchsichtige Kristalle zu betrachten, der Reibungskoeffizient $g = 0$ gesetzt werden. Dann ist die Dispersionsformel:

$$(3) \quad v_x^2 = 1 + \frac{1}{\frac{v}{4\pi} \frac{m}{e^2} n_0^2 - (1 - \Delta \psi + \psi_{xx}) - \frac{v}{4\pi} \frac{m}{e^2} n^2}$$

$$(4) \quad = 1 + \frac{1}{B_x - A n^2};$$

oder unter Einführung der Wellenlänge $\lambda = \frac{2\pi c}{n}$:

$$(5) \quad v_x^2 = 2 + \frac{\lambda^2}{\lambda^2 B_x - 4\pi^2 c^2 A}.$$

Wir haben hier eine Dispersionsformel mit zwei Konstanten vor uns, von gleicher Bauart, wie die H. A. Lorentzsche¹⁾ und die Plancksche¹⁾ Formel. Letztere lautet in unseren Bezeichnungen

$$v^2 = 1 + \frac{1}{\frac{v}{4\pi} \frac{m}{e^2} n_0^2 - \frac{1}{3} - \frac{v}{4\pi} \frac{m}{e^2} n^2},$$

1) Zitate unter § 4.

während Lorentz $-(\frac{1}{3} + s)$ statt $-\frac{1}{3}$ hat, wobei s unbestimmt bleibt. In allen drei Formeln bedeutet dieser Term den Einfluß der Dipole im Körper auf einen Aufdipol. Der Teil $\frac{1}{3}$ stammt von der zu einem homogenen Medium aus gebreiteten weiteren Umgebung des Aufdipols, während in Lorentz' s die unbestimmte Einwirkung der Nachbarmoleküle berücksichtigt ist. Für den Fall kubischer Anordnung der Nachbarmoleküle zeigt H. A. Lorentz, daß $s = 0$ wird, so daß seine Formel mit der Planckschen identisch wird.

Auch bei uns erhält man für ein kubisches Gitter den Term $\frac{1}{3}$. Man hat dann nämlich aus Symmetrie

$$(6) \quad 1 - \Delta\psi + \psi_{xx} = 1 - \frac{2}{3}\Delta\psi.$$

Nun läßt sich aber $\Delta\psi$ auf folgende Art bestimmen: Man entwickle das Gesamtpotential (7), § 6 nach Potenzen von k . Man erhält

$$\Pi = -\frac{4\pi}{v} \left(\frac{1}{k_0^2 - k^2} + [k^{-1} \dots + \dots] \right)$$

wenn nur die niedrigste Potenz ausgeschrieben wird.

Um das erregende Potential zu erhalten, muß hiervon

$$\frac{e^{ikR}}{R} = \frac{1}{R} + ik - \dots$$

abgezogen werden. Das Glied mit k^{-2} in der Entwicklung von Π geht unverändert in die Entwicklung von Π' über. Daher hat man

$$\begin{aligned} \Delta\Pi &= -k_0^2\Pi = \frac{4\pi}{v} \left(\frac{k_0^2}{k_0^2 - k^2} + [k \dots + \dots] \right) \\ &= \frac{4\pi}{v} \left(\frac{1}{1 - \nu^2} + [k \dots - \dots] \right) \\ &= \frac{4\pi}{v} \left(\frac{\nu^2}{1 - \nu^2} + 1 + [k \dots] \right). \end{aligned}$$

Durch Vergleich mit (3), § 8 ergibt sich also

$$\Delta\psi = 1,$$

und daher nach (6)

$$1 - \Delta\psi + \psi_{xx} = \frac{1}{3}.$$

Insoweit der isotrope Körper durch eine kubische Anordnung ersetzt werden darf, stimmt also unsere Formel gänzlich mit der Lorentz-Planckschen überein.

Die Diskussion der erhaltenen Dispersionsformel würde, was Abhängigkeit des Brechungs- und Absorptionsindex von der Wellenlänge betrifft, nichts anderes ergeben, als was bereits von Planck ausgeführt wurde.

Nur was die Besonderheiten, die durch die Anisotropie der Formel (3) entstehen, betrifft, soll hier folgendes bemerkt werden:

1. Aus zwei Messungen von n_x können A und B_x (Formel 4) berechnet werden. Da die ψ durch die Kantenlängen des Gitters gegeben sind, so erhält man unter Benutzung der Werte eines einzigen Hauptbrechungsindex bei zwei verschiedenen Wellenlängen die vollständige Dispersionsformel nicht nur für diesen Index, sondern auch für die beiden anderen Hauptbrechungsindizes.

2. Die Konstante A hat unabhängig davon, an welchem Brechungsindex sie bestimmt wird, den für das Gitter charakteristischen Wert $v/4\pi \cdot m/e^2$. Sie sollte also gleich groß sein, einerlei welchen Hauptbrechungsindex man zu ihrer Bestimmung benutzt. Man findet aber diese Beziehung nicht erfüllt. Z. B. ist für Anhydrit

$$A_\alpha = 1,6125 \cdot 10^{-33}; \quad A_\beta = 1,6726 \cdot 10^{-33}; \quad A_\gamma = 1,5501 \cdot 10^{-33},$$

also Abweichungen von 8 Proz.

Dies liegt einmal daran, daß das von den Elektronen mit der Eigenfrequenz n_0 gebildete Gitter kein so einfaches Bravaisches ist, wie hier vorausgesetzt wurde; ferner aber gibt es neben den Elektronen mit der Eigenfrequenz n_0 andere mit anderen Eigenfrequenzen und eventuell Ionen mit Eigenfrequenzen im Ultrarot.

Die zweikonstantige Formel (3) ist dann als Annäherung an eine Formel komplizierterer Bauart aufzufassen und die Konstante A der Dispersion verliert hierbei ihre einfache Bedeutung und kann von der Ausbreitungsrichtung der Welle oder dem Polarisationszustand abhängen. Hierher gehört die

Bemerkung von Drude¹⁾, daß im Kalkspath bei Einfall senkrecht zur optischen Achse auf den ordentlichen Strahl *scheinbar* fünf, auf den außerordentlichen zwei Elektronen pro Molekül mitschwingen.

3. Aus der Formel (3) geht ohne weiteres hervor, daß die Wirkung der Gitterstruktur auch aufgefaßt werden kann *wie eine anisotrope Lagerung der Elektronen in den Molekülen*. Die Änderung der Dispersionsformel, welche beim Übergang von ν_x zu ν_y bzw. von ψ_{xx} zu ψ_{yy} stattfindet, kann ja, wie (3) zeigt, für alle Wellenlängen ersetzt werden durch eine geeignete Abänderung der Eigenschwingung n_0 . Innerhalb des Gitterverbandes besitzt ein Dipol, der an sich isotrop gebunden wäre, durch den Einfluß der Struktur von selbst drei verschiedene Eigenschwingungsdauern und Frequenzen. Die beiden Ansichten, von denen die eine die Doppelbrechung auf Anisotropie der kleinsten Teilchen, die andere auf die anisotrope Lage der isotrop gedachten kleinsten Teilchen zurückführen will, stimmen in ihren qualitativen Folgerungen überein.

§ 10. Die Gleichung der Normalenfläche.

Wir haben uns bisher ausschließlich mit den Hauptbrechungsindizes beschäftigt, deren wir ursprünglich sechs unterscheiden mußten. Mit Vernachlässigung der Glieder von der Ordnung $(a/\lambda)^2$ erkannten wir je zwei, die sich auf den gleichen Polarisationszustand beziehen, als einander gleich, so daß die Eigenschaften des Gitters in dieser Hinsicht mit denen eines zweiachsigen Kristalles übereinstimmen.

Es fragt sich, ob dies für alle Richtungen gilt, d. h. ob die *Beziehung zwischen Richtung der Wellennormalen S und dem Brechungsindex, welche in der Determinante (11, § 2) enthalten ist, von der gleichen Art ist, wie bei rhombischen Kristallen*.

Indem wir mit demselben Grad der Genauigkeit rechnen, tragen wir die Werte (1), (2), (3) aus § 8 in die erste Zeile der Determinante ein. Diese wird:

1) Ann. d. Phys. 14. p. 691. 1904.

$$\Omega + \frac{\pi}{2abc} \left(\frac{\nu^2}{1-\nu^2} (1 - \cos^2(s, x)) + \Delta\psi - \psi_{xx} \right);$$

$$- \frac{\pi}{2abc} \frac{\nu^2}{1-\nu^2} \cos(s, x) \cos(s, y); - \frac{\pi}{2abc} \frac{\nu^2}{1-\nu^2} \cos(s, x) \cos(s, z).$$

Führen wir die Abkürzungen

$$N = \frac{\nu^2}{1-\nu^2}, \quad \cos(s, x) = \cos 1 \dots$$

ein und ersetzen

$$\frac{2abc}{\pi} \Omega + \Delta\psi - \psi_{xx} = \frac{\nu_x^2}{1-\nu_x^2} = N_x$$

durch seinen Wert N_x , so lautet die Determinante:

$$\begin{vmatrix} N \sin^2 1 - N_x & -N \cos 1 \cos 2 & -N \cos 1 \cos 3 \\ -N \cos 1 \cos 2 & N \sin^2 2 - N_y & -N \cos 2 \cos 3 \\ -N \cos 1 \cos 3 & -N \cos 2 \cos 3 & N \sin^2 3 - N_z \end{vmatrix} = 0.$$

Schreiben wir in der Diagonalreihe $(1 - \cos^2 \dots)$ statt $\sin^2 \dots$ und nehmen den (außer in trivialen Fällen) von Null verschiedenen Faktor

$$- N^3 \cos^2 1 \cdot \cos^2 2 \cdot \cos^2 3$$

heraus, so bleibt

$$\begin{vmatrix} \left(1 - \frac{N-N_x}{N \cos^2 1}\right) & 1 & 1 \\ 1 & \left(1 - \frac{N-N_y}{N \cos^2 2}\right) & 1 \\ 1 & 1 & \left(1 - \frac{N-N_z}{N \cos^2 3}\right) \end{vmatrix} = 0$$

oder, bis auf einen Faktor:

$$\frac{N \cos^2 1}{N-N_x} + \frac{N \cos^2 2}{N-N_y} + \frac{N \cos^2 3}{N-N_z} - 1 = 0.$$

Dies ist aber nichts anderes als die Gleichung der Normalenfläche eines zweiachsigen Kristalls. Ersetzt man nämlich

die 1 durch $\cos^2 1 + \cos^2 2 + \cos^2 3$ und die $N\dots$ durch ihre Ausdrücke in ν , so erhält die Gleichung die übliche Form:

$$\frac{\nu_x^3 \cos^2 1}{\nu^2 - \nu_x^2} + \frac{\nu_y^3 \cos^2 2}{\nu^2 - \nu_y^2} + \frac{\nu_z^3 \cos^2 3}{\nu^2 - \nu_z^2} = 0.$$

Wir sehen hierdurch, daß ein Punktgitter der betrachteten Art, sich nach allen Richtungen wie ein Kristall verhält und daß vom Standpunkt der Optik nichts gegen eine noch so einfache Gittervorstellung der Kristalle einzuwenden ist.

§ 11. Die Doppelbrechung D.

Bereits in den allgemeinen Betrachtungen des § 2 war auf eine Beziehung zwischen den Hauptbrechungsindizes hingewiesen worden, welche nach (14), § 2 hieß

$$(1) \quad (\Delta \Pi' - \Pi'_{xx})_z = (\Delta \Pi' - \Pi'_{yy})_z.$$

Die Indizes z an den Klammern sollten daran erinnern, daß die Potentiale sich beiderseits auf den Fall der Ausbreitung des Feldes längs z (allein $\gamma \neq 0$) beziehen, daß aber links der Brechungsindex ν_x für Schwingungen $a = a_x$, rechts ν_y für $a = a_y$ gemeint ist.

Setzen wir in diese Beziehung die angenäherten Werte (1), (2), (3), § 8 ein, so entsteht

$$\frac{\pi}{2abc} \left(\frac{\nu_x^2}{1 - \nu_x^2} + \Delta \psi - \psi_{xx} \right) = \frac{\pi}{2abc} \left(\frac{\nu_y^2}{1 - \nu_y^2} + \Delta \psi - \psi_{yy} \right)$$

oder da $\Delta \psi$ in beiden Fällen das gleiche ist:

$$(2) \quad \frac{\nu_x^2 - \nu_y^2}{(1 - \nu_x^2)(1 - \nu_y^2)} = \psi_{xx} - \psi_{yy} = D_{xy}.$$

Die links stehende Zahl, welche bereits von T. H. Havelock als unabhängig von der Wellenlänge erkannt wurde, finden wir überhaupt nur abhängig von den Verhältnissen $a : b : c$ des Gitters und nennen sie das Maß der strukturellen Doppelbrechung.

Durch die Reihen des § 7 sind wir in der Lage, diese Konstante für beliebige Verhältnisse $a : b : c$ auszurechnen. Die

Reihen konvergieren bei passend gewählter Teilungsstelle E genügend schnell, um eine bequeme Zahlenrechnung zu ermöglichen.

Es kann aber heute noch keinen Erfolg versprechen, die Rechnung an einen bestimmten Kristall anzuknüpfen in der Hoffnung, eine Übereinstimmung zwischen berechnetem und beobachtetem Wert zu finden. Denn keiner der bisher (Herbst 1915) ihrer Struktur nach bekannten Kristalle hat eine so einfache Konstitution, daß mit einiger Sicherheit geschlossen werden kann, daß eine Elektronensorte zu seiner Beschreibung in optischer Hinsicht ausreicht.

Die numerische Rechnung und die Ausdehnung der Theorie auf kompliziertere Raumgitter soll daher hier unterbleiben.

Nur zur Orientierung über die zu erwartende Größenordnung des Effektes sei angegeben, daß unter Zugrundelegung des Verhältnisses $a : b : c = 0,8932 : 1 : 1,0008$ (Anhydrit) sich ergibt:

$$D_{xy} = 0,17848 \quad D_{xz} = 0,17983 \quad D_{yz} = 0,00133,$$

während beobachtete Werte sind (ebenfalls Anhydrit)

$$D_{\beta\alpha} = 0,05145 \quad D_{\gamma\alpha} = 0,05925 \quad D_{\gamma\beta} = 0,00854$$

Hieraus kann geschlossen werden, daß die anisotrope Anordnung allein genügt, um Doppelbrechung der beobachteten Größe zu erklären.

Daß die einfachen Annahmen über das Raumgitter nicht hinreichen, um im speziellen Fall den Erscheinungen gerecht zu werden, zeigt sich auch daran, daß in der Beobachtung D nur bis zu einem gewissen Grade unabhängig von der Wellenlänge gefunden wird. So ist bei Quarz die Änderung von D zwischen den Linien C und E des Spektrums 15mal geringer, als die Änderung der Doppelbrechung ($\omega - \epsilon$) in gewöhnlichem Sinne. Bei den meisten Kristallen ist die Änderung von D etwa 3 bis 6mal kleiner als die der gewöhnlichen Doppelbrechung — es gibt aber einige, bei denen sich D stärker als die Doppelbrechung ändert.

Ob die Konstanz von D in beliebig zusammengesetzten Punktsystemen aus gleichen Elektronen gilt, möge dahin-

gestellt bleiben; sicherlich gilt sie nicht in einem aus verschiedenartigen Ionengittern zusammengesetzten Punktsystem, da es nicht möglich ist, aus den zwei Dispersionsgleichungen für ν_x und ν_y , die zwei oder mehr Elektronenkonstanten Ω_i zu eliminieren.

Bei zwei Elektronengattungen läßt sich leider keine entsprechende einfache Beziehung zwischen den drei Hauptbrechungsindizes angeben, welche unabhängig von der Wellenlänge gilt.

(II. Teil im folgenden Heft.)
