

## Volle Herleitung der Bragg-Bedingung

Advanced

Im Hauptteil steht: "Setzt man (die Fouriertransformierte der Ladungsdichte) in die Gleichung für die Strukturamplitude  $F$  ein, erhält man nach einiger Rechnung, daß nur für  $\underline{k} - \underline{k}' = \underline{G} \pm \Delta \underline{k}$  die Strukturamplitude wesentlich verschieden ist von  $0$ .

Schon wahr, aber ganz so schlimm ist die Rechnung gar nicht.

Wir starten mit der [Gleichung für die Strukturamplitude](#)  $F$  und der [Fouriertransformierten der Ladungsdichte](#)  $\rho(\underline{r})$

$$F = \int_V \rho(\underline{r}) \cdot e^{i\underline{r} \cdot (\underline{k} - \underline{k}')} \cdot dV$$
$$\rho(\underline{r}) = \sum n_{\underline{G}} \cdot e^{i(\underline{G} \cdot \underline{r})}$$

Mit der Abkürzung  $\underline{q} = (\underline{k} - \underline{k}') =$  **Streuvektor** und Vorziehen der Summe vor das Integral erhält man

$$F = \sum n_{\underline{G}} \cdot \int_V e^{i\underline{r} \cdot (\underline{G} - \underline{q})} \cdot dV$$

Der so eingeführte Streuvektor  $\underline{q}$  *minus einem passenden reziproken Gittervektor* beschreibt also quantitativ die Abweichung von der exakten Bragg-Bedingung.

Damit sind wir schon fertig, denn "wie am leicht sieht" ist das Integral nur für  $\underline{G} = \underline{q} = (\underline{k} - \underline{k}')$  wesentlich von Null verschieden; für  $\underline{G} = \underline{q}$ , also bei Erfüllung der Bragg-Bedingung, erhalten wir als Wert schlicht das Gesamtvolumen  $V$  des Körpers.

Noch pointierter: Das Integral ausgeschrieben in den Komponenten, ist jeweils die Darstellung der  $\delta$ -Funktion.

Aha!

Wer's nicht gleich sieht (wie ich), möge kurz mitüberlegen:

Für  $\underline{G} \neq \underline{q}$  wird über einen Sinus / Cosinus integriert, mit der [Wellenlänge](#)  $2\pi/|\underline{G} - \underline{q}|$ . Der maximale Wert eines Integrals über einen Sinus oder Cosinus ist die Fläche unter *einer* Halbwelle, denn über eine ganze Periode erhält man immer Null.

Der maximale Wert entspricht also der "mittleren" Amplitude mal einer halben Wellenlänge. Für kleine Wellenlängen (deutlich kleiner als die Ausdehnung des Körpers), d.h. große  $\underline{G} - \underline{q}$  wird das sehr viel kleiner sein als die ganze Amplitude (= 1) mal lineare Ausdehnung, oder, was dasselbe ist, die dritte Wurzel aus dem Volumen.

Damit ist jetzt zumindest der Spur nach klar, dass mit zunehmendem  $\underline{q}$ , d.h. mit wachsender Abweichung von der Bragg-Bedingung, die Strukturamplitude  $F$  und damit auch die Intensität der gestreuten Strahlung ( $\propto |F|^2$ ) schnell in die Knie geht, insbesondere für große Körper.

Aber klar ist auch: Für kleine (= dünne) Körper oder für kleine Abweichungen von der Bragg-Bedingung, wird man noch ein bißchen Intensität erhalten.

Als Faustregel merken wir uns: Für die [Ewald Konstruktion](#) "mutieren" die Punkte im reziproken Gitter zu Ellipsoiden, deren Ausdehnung in der entsprechenden reziproken Gitterrichtung gleich 1/Ausdehnung im realen Raum ist. Dünne Folien, wie in der Elektronenmikroskopie gebräuchlich, haben damit ein reziprokes Gitter mit "Stäbchen" senkrecht zur Foliennormalen