

Herleitung des vektoriellen Bragg Gesetzes

Illustration

Wir beginnen mit der geometrischen Definition von **reziproken Gittervektoren** $\underline{G}$

- Der Vektor $\underline{G}_{hkl}$ steht senkrecht auf der Netzebenenschar $\{hkl\}$.
- Der Vektor $\underline{G}_{hkl}$ hat den Betrag $2\pi / d_{hkl}$ mit d_{hkl} = Netzebenenabstand.

Damit lässt sich der Sinus des Einfallswinkels auch wie folgt schreiben:

$$\sin \theta = \frac{\underline{G}_{hkl} \cdot \underline{k}}{|\underline{G}_{hkl}| \cdot |\underline{k}|}$$

Einsetzen in die Bragg Bedingung ergibt

$$\begin{aligned} -2 \cdot d_{hkl} \cdot \frac{\underline{G}_{hkl} \cdot \underline{k}}{|\underline{G}_{hkl}| \cdot |\underline{k}|} &= n \cdot \lambda \\ -2 \cdot \frac{\underline{G}_{hkl} \cdot \underline{k}}{|\underline{G}_{hkl}| \cdot |\underline{k}|} &= \frac{n \cdot 2\pi}{d_{hkl}} \cdot \frac{\lambda}{2\pi} = \frac{|\underline{G}_{hkl}|}{|\underline{k}|} \\ -2 \underline{G}_{hkl} \cdot \underline{k} &= |\underline{G}_{hkl}|^2 \end{aligned}$$

Da $|\underline{k}| = |\underline{k}'|$ (elastische Streuung), kann man die letzte Gleichung weiter umformen und erhält

$$\begin{aligned} |\underline{k}'|^2 &= \frac{|\underline{k}|^2}{2} + 2 \underline{G}_{hkl} \cdot \underline{k} + |\underline{G}_{hkl}|^2 \\ |\underline{k}'|^2 &= (\underline{k} + \underline{G}_{hkl})^2 \end{aligned}$$

Damit lautet jetzt das Bragg-Gesetz in einer allgemeineren räumlichen Vektorformulierung

$$\underline{k}' - \underline{k} = \underline{G}_{hkl}$$

Das wär's. Aber selbst hier sind wir mathematisch noch ein bißchen unsauber.

- Der Schritt von der vorletzten Gleichung zur letzten Gleichung bedarf eigentlich einer genaueren Begründung, da vom Betrag eines Vektors nicht allgemein auf den Vektor selbst geschlossen werden kann.
- Wenn man aber auch das noch ganz korrekt haben will (und dann auch noch gleich eine mathematisch saubere Begründung für [unsere Annahme](#): Einfallswinkel = Ausfallswinkel), muß man schwerere Geschütze auffahren. Das tun wir aber nicht!