Volle Herleitung der Bragg-Bedingung

Advanced

- Im Hauptteil steht: "Setzt man (*die Fouriertransformierte der Ladunsgdichte*) in die Gleichung für die Strukturamplitude ***F*** ein , erhält man nach einiger Rechnung, daß nur für $\underline{k} - \underline{k}' = \mathbf{G} \pm \Delta\underline{k}$ 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 $\rho(\underline{r})$

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

$$\rho(\underline{r}) = \Sigma\, n_G \cdot e^{i(\underline{G} \cdot \underline{r})}$$

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

$$F = \Sigma\, n_G \cdot \int_V e^{i\underline{r} \cdot (\underline{G} - \underline{q})} \cdot dV$$

  - 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 δ-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 Ausdehung 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