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 **2p / 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

$$-2 \cdot d_{hkl} \cdot \frac{\underline{G}_{hkl} \cdot \underline{k}}{|\underline{G}_{hkl}| \cdot |\underline{k}|} = n \cdot \lambda$$

$$-2 \cdot \frac{\underline{G}_{hkl} \cdot \underline{k}}{|\underline{G}_{hkl}| \cdot |\underline{k}|} = \frac{n \cdot 2\pi}{d_{hkl}} \cdot \frac{\lambda}{2\pi} = \frac{|\underline{G}_{hkl}|}{|\underline{k}|}$$

$$-2\, \underline{G}_{hkl} \cdot \underline{k} = |\underline{G}_{hkl}|^2$$

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

$$|\underline{k}'|^2 = |\underline{k}|^2 + 2\, \underline{G}_{hkl} \cdot \underline{k} + |\underline{G}_{hkl}|^2$$

$$|\underline{k}'|^2 = (\underline{k} + \underline{G}_{hkl})^2$$

- 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!