

Kontinuitätstheorie der Röntgenstrahlausbreitung in Krystallen

Von
E. Lohr

(Vorgelegt in der Sitzung am 3. Juli 1924)

Einleitung.

Die Korpuskulartheorie behandelt bekanntlich das so überaus wichtige und interessante Gebiet der Röntgenstrahlausbreitung in Krystallen auf Grund der Krystallgittervorstellung und hat auf diesem Wege große Erfolge zu verzeichnen, welche sich den zahlreichen Erfolgen der Korpuskulartheorie auf anderen Gebieten würdig anreihen. Es liegt mir ferne, diese Erfolge verkleinern und die eminente praktisch-heuristische Bedeutung der Korpuskulartheorie bestreiten zu wollen. Wenn aber hervorragende Forscher immer wieder die Behauptung wagen, die Existenz der Korpuskeln sei unzweifelhaft erwiesen, wenn beispielsweise P. P. Ewald sein vorzügliches Lehrbuch »Krystalle und Röntgenstrahlen« mit den Worten beginnt: »Die Erforschung des Aufbaues der Materie mit Röntgenstrahlen bringt einen überzeugenden Beweis für die Realität der Atome. so kann ich solchen Behauptungen nicht zustimmen.

Die von Jaumann auf dem Boden der klassischen Mechanik, Elektrodynamik und Thermodynamik konsequent aufgebaute Kontinuitätstheorie, an deren Weiterentwicklung auch ich mich wiederholt beteiligen konnte, hat, so unvollkommen sie im einzelnen auch noch sein mag, doch jedenfalls gezeigt, daß sie dem überreichen Erfahrungsmaterial der modernen Physik und Chemie prinzipiell durchaus gewachsen ist. Gerade in prinzipieller Hinsicht läßt die Korpuskulartheorie, durch das Hinzutreten der Quantentheorie, derzeit wenigstens, recht viel zu wünschen übrig. Daß sich die gegenwärtig von den Physikern fast vollständig vernachlässigte Kontinuitätstheorie an Einzelleistungen und Erfolgen, an Intensität der Durcharbeitung nicht mit der Korpuskulartheorie messen kann, ist selbstverständlich.

So lag auch speziell auf dem Gebiete der Röntgenstrahlausbreitung in Krystallen, von kontinuierlichkeitstheoretischer Seite bisher lediglich die von Jaumann¹ ausgesprochene Vermutung vor, daß die Krystalle eine periodische Struktur besitzen. Es schien mir dringend geboten, mit diesem höchst bedeutungsvollen und physikalisch ungemein ansprechenden Gedanken Ernst zu machen

¹ G. Jaumann, Physik der kontinuierlichen Medien. Wien, Denkschr., Bd. 1918, p. 462.

und zu untersuchen, ob und wie sich auf Grund dieser Hypothese die charakteristischen Tatsachen der Röntgenstrahlausbreitung in Krystallen erklären lassen. Ein Erfolg war vorauszusehen und hat sich auch eingestellt, allerdings darf man wieder nicht erwarten, daß alles, was ein großer Stab von Korpuskulartheoretikern im Laufe eines Jahrzehnts geleistet hat, nun mit einem Schlag und in allen Einzelheiten kontinuierätstheoretisch erfaßt werden kann. Nicht unerwähnt möchte ich lassen, daß mir die tiefschürfenden Ewald'schen Arbeiten,¹ die ich allerdings erst, nachdem meine eigenen Untersuchungen schon ziemlich weit fortgeschritten waren, eingehender studiert habe, manche wertvolle Anregung boten.

1. Allgemeines.

Die Jaumann'sche Kontinuitätstheorie beschreibt das Naturgeschehen bekanntlich durch ein energetisch und entropisch geschlossenes System physikalisch-chemischer Differentialgesetze, durch welche die Fluxionen (Differentialquotienten nach der Zeit) der Zustandsvariablen bestimmt werden. Energetisch und entropisch geschlossen heißt, daß sich aus dem System die Differentialform des Energieprinzipes und des Entropieprinzipes deduzieren lassen muß. Von diesen Differentialgesetzen wird prinzipiell gefordert, daß sie möglichst einfach gebaut, also insbesondere von erster Ordnung sein sollen, sie sind jedoch im allgemeinen nicht linear. Die Zustandsvariablen sind skalare, vektorische, dyadische, eventuell noch höhere Gebilde (z. B. Tetraden); zu ihnen gehören die Temperatur, die Geschwindigkeit, der elektrische und der magnetische Vektor, ferner die sogenannten stofflichen Variablen, die chemischen Dichtvariablen u. s. f. Eine Vervielfältigung der Variablen der letztgenannten Gruppen ist unbedenklich, falls sie nur durch formal identische, beziehungsweise analog gebaute Differentialgesetze beherrscht werden. Außer den Zustandsvariablen sollen im Prinzip nur noch universelle Konstante auftreten, die dann wegen der Isotropie des Raumes wesentlich skalare Größen sein müssen.

Von der expliziten Kenntnis solcher Differentialgesetze, sie stellen gewissermaßen das Endziel der Kontinuitätstheorie dar, sind wir allerdings noch sehr weit entfernt. Wir müssen uns mit Differentialgesetzen begnügen, in welchen explizit noch nicht bekannte Materialfunktionen auftreten. Die Materialfunktionen, welche sich voraussetzungsgemäß aus skalaren universellen Konstanten und irgendwelchen Zustandsvariablen aufbauen, können je nach der Natur der beteiligten Zustandsvariablen, sehr wohl auch Dyaden oder Tetraden u. s. f. sein. Dürfen gewisse Materialfunktionen für ein gewisses Erscheinungsgebiet als konstant angesehen werden, verschwindet also ihre totale Fluxion, so heißen sie Material-

P. P. Ewald, Zur Begründung der Krystalloptik. Ann. d. Phys., Bd. 40.
1 p. 117 Bd. 54, p. 519 u. p. 557

konstante des betreffenden Erscheinungsgebietes. Die relative Konstanz der Materialfunktionen muß als ein durch den jeweiligen Gesamtzustand bedingtes stabiles Gleichgewicht in den Werten der beteiligten Zustandsvariablen aufgefaßt werden. Die Aufhellung dieser Stabilitätsverhältnisse, die Ermittlung der expliziten Form der zahlreichen Materialfunktionen und die Bestimmung der in ihnen steckenden universellen Konstanten bilden ein heute noch fernes Ziel der Kontinuitätstheorie nicht unähnlich, wie für die Korpuskulartheorie die vollständige Zurückführung der Makrophysik auf die Mikrophysik.

Wenn also die Jaumann'sche Theorie behauptet, daß in Krystallen gewisse Materialfunktionen, welche in isotropen Körpern skalar sind, dyadische, beziehungsweise tetradische Werte annehmen, so heißt das den soeben präzisierten Vorstellungen gemäß: Der krystalline Zustand ist dadurch ausgezeichnet, daß in ihm von Null verschiedene, relativ stabile Gleichgewichtswerte gewisser dyadischer oder tetradischer Zustandsvariablen auftreten, von denen jene Materialfunktionen abhängen. Der Gedanke der periodischen Struktur verlangt nun weiter, daß im krystallinen Zustand gewisse Materialfunktionen periodische Funktionen des Ortes sein sollen. Auch das Zustandekommen dieser periodischen Struktur muß wieder als ein relativ stabiler Gleichgewichtszustand verstanden werden. Wodurch all diese Gleichgewichtszustände im einzelnen bedingt sind, das wissen wir, wie gesagt, heute noch nicht und sind damit nicht wesentlich schlechter daran wie die Korpuskulartheorie, welche auch noch nicht anzugeben vermag, warum ein Stoff gerade in einer bestimmten Atomanordnung krystallisiert.

Lediglich um anzudeuten, wie eine solche Struktur etwa zustande kommen könnte, sei hier ein naheliegendes rein schematisches Beispiel angeführt.

Es folge etwa unter bestimmten Voraussetzungen aus den allgemeinen Differentialgesetzen für Krystalle bei verschwindender Fluxion (Gleichgewicht), die Relation:

$$T \nabla; \nabla \alpha + \varphi \alpha = 0, \quad (1)$$

worin T eine tetradische, φ eine dyadische Materialkonstante des Krystalls und α irgendeine skalare Zustandsvariable bedeutet, ∇ ist der Hamiltonsche Operator; die verwendete Symbolik ist hier wie auch im folgenden stets die Gibbs-Jaumann'sche.

Es sei nun weiters:

$$\varphi = \varphi_1^2 \mathfrak{p}_1; \mathfrak{p}_1 + \varphi_2^2 \mathfrak{p}_2; \mathfrak{p}_2 + \varphi_3^2 \mathfrak{p}_3; \mathfrak{p}_3$$

$$T = T_1^2 \mathfrak{p}_1; \mathfrak{p}_1; \mathfrak{p}_1; \mathfrak{p}_1 + T_2^2 \mathfrak{p}_2; \mathfrak{p}_2; \mathfrak{p}_2; \mathfrak{p}_2 + T_3^2 \mathfrak{p}_3; \mathfrak{p}_3; \mathfrak{p}_3; \mathfrak{p}_3$$

$\mathfrak{p}_1, \mathfrak{p}_2, \mathfrak{p}_3$ sind irgend drei nicht koplanare, im allgemeinen schiefwinklige Einheitsvektoren, die übrigen Größen positive skalare Konstante.

Ist p'_1, p'_2, p'_3 das zu p_1, p_2, p_3 reziprokale System und schreiben wir den Ortsvektor in der Form:

$$r = u_1 p_1 + u_2 p_2 + u_3 p_3,$$

so folgt:

$$\nabla = p'_1 \frac{\partial}{\partial u_1} + p'_2 \frac{\partial}{\partial u_2} + p'_3 \frac{\partial}{\partial u_3}$$

und Gleichung (1) zerfällt in die drei skalaren:

$$T_x^2 \frac{\partial^2 \alpha}{\partial u_x^2} + \varphi_x^2 \alpha = 0 \quad \text{für } x = 1, 2, 3.$$

Daraus ergibt sich das Integral:

$$\alpha = \sum A_k \sin(\pm \nu_1 u_1 \pm \nu_2 u_2 \pm \nu_3 u_3 + \gamma_k)$$

mit $\nu_x = \frac{\varphi_x}{T_x}$. A_k und γ_k sind noch verfügbare Konstante, mittels welcher gewisse Randbedingungen erfüllt werden können.

Tatsächlich liegen die Verhältnisse sicher viel komplizierter, die periodische Struktur des Krystals muß allgemein durch eine dreifache Fourierreihe bestimmt sein und die Compton'sche Frequenzänderung der zerstreuten Röntgenstrahlen macht es recht wahrscheinlich, daß die periodische Struktur eigentlich durch äußerst langsame stehende Schwingungen gewisser Zustandsvariablen bedingt ist. So wichtig und gerade vom kontinuierlichkeitstheoretischen Standpunkt sympathisch mir dieser neue Gedanke zu sein scheint, wäre es doch vielleicht verfrüht, ihn schon den Überlegungen dieser Arbeit zugrunde zu legen und damit die ohnehin hinreichend komplizierten Rechnungen noch unübersichtlicher zu machen.

2. Die Differentialgesetze.

Wir gehen zunächst aus von den Jaumann'schen Differentialgleichungen in der Fassung, wie ich sie in einer früheren Arbeit¹ der Krystalloptik zugrunde gelegt habe und beschränken uns auf ruhende und — der Einfachheit halber — hier auf nichtabsorbierende Medien. Die Gleichungen lauten:

$$\varepsilon_0 \cdot \frac{\partial e}{\partial t} + \varepsilon_0 \cdot \nabla (a \sigma_s + b \tau_s) = c_0 \nabla \times m. \quad (I)$$

¹ E. Lohr, Das Problem der Grenzbedingungen in G. Jaumann's elektromagnetischer Theorie. Zweite Mitteilung. Wien. Ber., 1912, p. 633 u. p. 664.

$$\frac{\partial \mathfrak{m}}{\partial t} = -c_0 \nabla \times \left[\mathfrak{e} - \frac{1}{c_0} (k\sigma_r + l\tau_r) \right] \quad (\text{II})$$

$$g: \frac{\partial \sigma}{\partial t} + r\tau + k[\nabla; \mathfrak{m} - \mathfrak{m}; \nabla] + a \nabla \cdot (\varepsilon_0 \cdot \mathfrak{e}) \mathbf{I} = 0. \quad (\text{III})$$

$$\frac{\partial \tau}{\partial t} - r\sigma + l[\nabla; \mathfrak{m} - \mathfrak{m}; \nabla] + b \nabla \cdot (\varepsilon_0 \cdot \mathfrak{e}) \mathbf{I} = 0. \quad (\text{IV})$$

Hierin bedeuten: \mathfrak{e} den elektrischen, \mathfrak{m} den magnetischen Vektor; und τ diadische, stoffliche Zustandsvariable, σ_s, τ_s ihre Skalare, σ_r, τ_r ihre Rotore; a, b, k, l, r skalare, ε_0 eine dyadische, g, g' tetradische Materialkonstante, c_0 die universelle Vakuumlichtgeschwindigkeit; t die Zeit, ∇ den Hamilton'schen Operator, \mathbf{I} die Identitätsdyade. Man zeigt leicht nach der üblichen Methode, daß das Energieprinzip erfüllt ist und erhält als Energiefluß

$$\mathfrak{s} = c_0 \left[\mathfrak{e} - \frac{1}{c_0} (k\sigma_r + l\tau_r) \right] \times \mathfrak{m} + \varepsilon_0 \cdot \mathfrak{e} (a\sigma_s + b\tau_s). \quad (2)$$

Die Größe:

$$\mathfrak{e} - \frac{1}{c_0} (k\sigma_r + l\tau_r) = \mathfrak{Q} \quad (3)$$

habe ich in der zitierten Arbeit, als »Lichtvektor« bezeichnet, er übernimmt in der hier vorgetragenen Theorie für transversale Wellen die Rolle des elektrischen Vektors der einfachen Maxwell'schen Theorie wie man aus der Formel für den Energiefluß und aus den Grenzbedingungen leicht erkennt. Als inhärente Grenzbedingungen folgen aus den Gleichungen (I) bis (IV): Der stetige Übergang der Parallelkomponenten von \mathfrak{Q} und \mathfrak{m} , der Normalkomponente von $\varepsilon_0 \cdot \mathfrak{e}$ und der skalaren Größe $(a\sigma_s + b\tau_s)$ oder formelmäßig:

$$\begin{aligned} [\mathfrak{Q}_p]_1 &= [\mathfrak{Q}_p]_2; [\mathfrak{m}_p]_1 = [\mathfrak{m}_p]_2; [(\varepsilon_0 \cdot \mathfrak{e})_n]_1 = [(\varepsilon_0 \cdot \mathfrak{e})_n]_2 \\ [a\sigma_s + b\tau_s]_1 &= [a\sigma_s + b\tau_s]_2; \end{aligned} \quad (4)$$

ε_0 wurde schon implizite als symmetrische Dyade vorausgesetzt, wir wollen weiter annehmen:

$$\begin{aligned} g &= g_s I^{(IV)} + \varphi_1; \varphi_1 + \varphi_2; \varphi_2 + \varphi_3; \varphi_3, \\ g' &= g'_s I^{(IV)} + \varphi'_1; \varphi'_1 + \varphi'_2; \varphi'_2 + \varphi'_3; \varphi'_3. \end{aligned}$$

Hierin sollen g_s, g'_s skalare Konstante, $I^{(IV)}$ die Identitätstetrade, $\varphi'_1, \varphi'_2, \varphi'_3$ rein antisymmetrische Dyaden bedeuten.

Setzen wir noch:

$$g_s I + \frac{1}{2} (\varphi_{1r}; \varphi_{1r} + \varphi_{2r}; \varphi_{2r} + \varphi_{3r}; \varphi_{3r}) = \varphi,$$

$$g'_s I + \frac{1}{2} (\varphi'_{1r}; \varphi'_{1r} + \varphi'_{2r}; \varphi'_{2r} + \varphi'_{3r}; \varphi'_{3r}) = \varphi', \quad (5)$$

so können wir die Gleichungen (III) und (IV) zerschlagen und erhalten:

$$\frac{\partial \tau_s}{\partial t} + r \tau_s + a \nabla \cdot (\varepsilon_0 \cdot e) = 0. \quad (III_1)$$

$$\frac{\partial \tau_s}{\partial t} - r \tau_s + b \nabla \cdot (\varepsilon_0 \cdot e) = 0. \quad (IV_1)$$

$$\frac{\partial \tau_r}{\partial t} + r \tau_r + 2k \nabla \times m = 0. \quad (III_2)$$

$$\varphi' \frac{\partial \tau_r}{\partial t} - r \tau_r + 2l \nabla \times m = 0. \quad (IV_2)$$

Integrieren wir nun unser Gleichungssystem durch ebene Wellen, indem wir in unmittelbar verständlicher Schreibweise den Ansatz machen:

$$e = e_0 e^{i(q \cdot x - p t)}; \quad m = m_0 e^{i(q \cdot x - p t)},$$

$$\tau_s = \tau_0 e^{i(q \cdot x - p t)}; \quad \tau_r = \tau_0 e^{i(q \cdot x - p t)}, \quad (6)$$

$$\tau_r = \bar{\tau}_0 e^{i(q \cdot x - p t)}; \quad \tau_r = \bar{\tau}_0 e^{i(q \cdot x - p t)},$$

so folgt aus den Gleichungen (III₁) und (IV₁)

$$\tau_0 = \frac{p a g'_s - i b r}{p^2 g_s g'_s - r^2} q \cdot \varepsilon_0 \cdot e_0,$$

$$\bar{\tau}_0 = \frac{p b g_s + i a r}{p^2 g_s g'_s - r^2} q \cdot \varepsilon_0 \cdot e_0.$$

Aus (5) folgt, daß φ und φ' symmetrische Dyaden sind, wir nehmen noch an, daß sie gleiche Hauptachsen i, j, f besitzen und setzen:

$$\varphi = A_1 i; i + A_2 j; j + A_3 f; f; \quad \varphi' = A'_1 i; i + A'_2 j; j + A'_3 f; f. \quad (8)$$

Bezeichnen wir:

$$\phi = \frac{1}{p^2 A_1 A'_1 - r^2} i; i + \frac{1}{p^2 A_2 A'_2 - r^2} j; j + \frac{1}{p^2 A_3 A'_3 - r^2} f; f, \quad (9)$$

so folgt aus (III₂) und (IV₂):

$$\begin{aligned} \bar{\sigma}_0 &= 2 [pk\psi \cdot \varphi' - ilr\psi] \cdot q \times m_0, \\ \bar{\tau}_0 &= 2 [pl\psi \cdot \varphi + ikr\psi] \cdot q \times m_0. \end{aligned} \quad (10)$$

Die Relationen (7) liefern:

$$a\tau_0 + b\tau_0 = p \frac{a^2 g'_s + b^2 g_s}{p^2 g'_s g'_s - r^2} q \cdot \varepsilon_0 \cdot c_0 = p W q \cdot \varepsilon_0 \cdot c_0; \quad (11)$$

aus den Relationen (10) folgt analog:

$$k\bar{\sigma}_0 + l\bar{\tau}_0 = p [2\psi \cdot (k^2 \varphi' + l^2 \varphi)] \cdot q \times m_0 = p \Phi \cdot q \times m_0. \quad (12)$$

Die Gleichungen (I) und (II) ergeben, wenn wir noch gemäß (3) den Lichtvektor

$$\mathcal{Q} = \mathcal{Q}_0 e^{i(q \cdot r - pt)}$$

einführen:

$$\begin{aligned} -p\varepsilon_0 \cdot \mathcal{Q}_0 + \varepsilon_0 \cdot qpWq \cdot \varepsilon_0 \cdot c_0 &= c_0 \left(I + \frac{p^2}{c_0^2} \varepsilon_0 \cdot \Phi \right) \cdot q \times m_0 \quad (13) \\ p m_0 &= c_0 q \times \mathcal{Q}_0 \end{aligned}$$

und daraus:

$$\mathcal{Q}_0 \cdot \left[\varepsilon_0 + \frac{c_0^2}{p^2} (q; q - q^2 I) \cdot \left(I + \frac{p^2}{c_0^2} \varepsilon_0 \cdot \Phi \right) \right] = c_0 \cdot [Wq \cdot \varepsilon_0; q \cdot \varepsilon_0]. \quad (14)$$

Aus Formel (14) ergibt sich mit Berücksichtigung der Relation

$$c_0 = \mathcal{Q}_0 \cdot [I + (q; q - q^2 I) \cdot \Phi], \quad (15)$$

erstens die Existenz von Transversalwellen

$$c_0 \cdot \varepsilon_0 \cdot q = 0 \quad (16)$$

für deren Fortpflanzungsgeschwindigkeit, wie ich seinerzeit gezeigt habe, das bekannte Fresnel'sche Gesetz, und zwar inklusive der Dispensionserscheinungen folgt. Es sei hier daran erinnert, daß durch eine entsprechende Vervielfältigung der Zustandsvariablen und τ , also auch der Gleichungen (III) und (IV), beliebig viele Eigenschaften des Mediums berücksichtigt werden können, wobei rechnerisch lediglich Φ und W den betreffenden Summen gleichzusetzen sind. Unsere Differentialgesetze sind, was ausdrücklich betont werden soll, auch im übrigen tunlichst einfach und keineswegs so allgemein als möglich formuliert.

Zweitens ergibt sich aus Formel (14) die Existenz von Longitudinalstrahlen (Kathoden- und Kanalstrahlen)

$$q \parallel \varepsilon_0 \parallel \mathcal{Q}_0 \quad (17)$$

deren Fortpflanzungsgeschwindigkeit sich aus

$$1 = Wq \cdot \varepsilon_0 \cdot q \quad (18)$$

berechnet.

Die Röntgenstrahlen sollen nun Transversalwellen sehr hoher Frequenz sein und wir wollen annehmen, daß wir für diese Frequenzen r^2 gegen $p^2 A_1 A_1'$, beziehungsweise gegen $p^2 A_2 A_2'$, beziehungsweise gegen $p^2 A_3 A_3'$ vernachlässigen dürfen. Kommen mehrere Gleichungspaare (III) und (IV) in Betracht, so soll eine analoge Voraussetzung für jedes Gleichungspaar zutreffen. Es folgt dann aus (8), (9) und (12):

$$\Phi = \frac{2}{p^2} \left[\left(\frac{k^2}{A_1} + \frac{l^2}{A_1'} \right) i; i + \left(\frac{k^2}{A_2} + \frac{l^2}{A_2'} \right) j; j + \left(\frac{k^2}{A_3} + \frac{l^2}{A_3'} \right) f; f \right] \quad (19)$$

(beziehungsweise Φ gleich einer Summe aus analog gebauten Ausdrücken).

Wir wollen nun allgemein fordern:

$$\lim_{p=\infty} (p^2 \varepsilon_0 \cdot \Phi) = c_0^2 (\varepsilon_0 - I), \quad (20)$$

also in unserem Falle für:

$$\varepsilon_0 = \varepsilon_{01} i; i + \varepsilon_{02} j; j + \varepsilon_{03} f; f$$

mit Berücksichtigung von (19):

$$2 \left(\frac{k^2}{A_1} + \frac{l^2}{A_1'} \right) = c_0^2 \left(1 - \frac{1}{\varepsilon_{01}} \right); \quad 2 \left(\frac{k^2}{A_2} + \frac{l^2}{A_2'} \right) = c_0^2 \left(1 - \frac{1}{\varepsilon_{02}} \right);$$

$$2 \left(\frac{k^2}{A_3} + \frac{l^2}{A_3'} \right) = c_0^2 \left(1 - \frac{1}{\varepsilon_{03}} \right)$$

Es folgt dann aus (14) und (15):

$$\begin{aligned} & \mathcal{Q}_0 \cdot \left[\left(1 - \frac{c_0^2}{p^2} q^2 \right) I + \right. \\ & \left. + \frac{c_0^2}{p^2} (1 - Wq \cdot \varepsilon_0 \cdot q) q; q - W \left(1 - \frac{c_0^2}{p^2} q^2 \right) \varepsilon_0 \cdot q; q \right] \cdot \varepsilon_0 = 0. \end{aligned} \quad (21)$$

Die Bedingungsgleichung für die Planarität der eingeklammerten Dyade ergibt die Existenz von Transversalwellen

$$\mathcal{Q}_0 \perp q \quad (22)$$

mit der universellen Fortpflanzungsgeschwindigkeit

$$\frac{p^2}{q^2} = c_0^2 \quad (23)$$

und die Existenz von Longitudinalwellen

$$\mathfrak{L}_0 \parallel \mathfrak{q}$$

für deren Fortpflanzungsgeschwindigkeit wieder die Relation (18) gilt.

Unsere Forderung (20) hebt also, wie (22) und (23) zeigen, den direkten Einfluß der dyadischen, beziehungsweise tetradischen Krystalleigenschaften für Röntgenstrahlen auf. Sie können sich dann nur indirekt geltend machen, indem sie, wie es in § 1 angedeutet wurde, eine periodische Struktur des Krystalles bewirken.

Diese periodische Struktur müssen wir nunmehr in unseren Differentialgesetzen zum Ausdruck bringen, was wieder in tunlichst einfacher und nicht in tunlichst allgemeiner Weise geschehen soll. Da uns die Longitudinalstrahlen in dieser Arbeit nicht unmittelbar interessieren (sie werden in Krystallen jedenfalls starke Dämpfungen erfahren), wollen wir sie zur Vereinfachung der Rechnung zunächst ganz unterdrücken. Wir gehen also jetzt von folgenden Differentialgesetzen aus:

$$(1 + \beta) \varepsilon_0 \frac{\partial \mathfrak{e}}{\partial t} = c_0 \nabla \times \mathfrak{m}. \tag{I'}$$

$$\frac{\partial \mathfrak{m}}{\partial t} = -c_0 \nabla \times \left[\mathfrak{e} - \frac{1}{c_0} (k \tau_r + l \tau_r) \right] \tag{II'}$$

$$(1 + \beta) \left[\varphi \frac{\partial \tau_r}{\partial t} + r \tau_r \right] + 2k \nabla \times \mathfrak{m} = 0. \tag{III'_2}$$

$$(1 + \beta) \left[\varphi' \frac{\partial \tau_r}{\partial t} - r \tau_r \right] + 2l \nabla \times \mathfrak{m} = 0. \tag{IV'_2}$$

Hierin soll β eine periodische Ortsfunktion bedeuten, für welche wir den allgemeinen Ansatz machen:

$$\beta = \beta_1 (\Sigma B_{h_1} e^{i h_1 \nu_1 u_1}) (\Sigma B_{h_2} e^{i h_2 \nu_2 u_2}) (\Sigma B_{h_3} e^{i h_3 \nu_3 u_3}). \tag{24}$$

Jede Summe ist über alle positiven und negativen ganzzahligen Werte der h_i einschließlich der Null zu erstrecken und es sollen die zu entgegengesetzt gleichen Werten der h_i gehörenden B_{hi} konjugiert komplex sein. Im übrigen sind die B_{hi} sowie die reellen Größen ν_1, ν_2, ν_3 , den Krystall charakterisierende Konstante.

u_1, u_2, u_3 sind wieder im allgemeinen schiefwinklige Ortskoordinaten, die zu dem Ortsvektor:

$$\mathfrak{r} = u_1 \mathfrak{p}_1 + u_2 \mathfrak{p}_2 + u_3 \mathfrak{p}_3$$

gehören. Die Definitionsgleichung (24) können wir in unmittelbar verständlicher Schreibweise auch auf die Form bringen

$$\beta = \beta_1 \Sigma B_{h_1, h_2, h_3} e^{i(h_1 \nu_1 \nu'_1 + h_2 \nu_2 \nu'_2 + h_3 \nu_3 \nu'_3) \cdot r} = \beta_1 \Sigma B_x e^{i q_x} \quad (25)$$

$$B_x = B_{h_1, h_2, h_3} = B_{h_1} B_{h_2} B_{h_3}; \quad \bar{q}_x = h_1 \nu_1 \nu'_1 + h_2 \nu_2 \nu'_2 + h_3 \nu_3 \nu'_3. \quad (26)$$

3. Integration mit Berücksichtigung der periodischen Struktur.

Statt der Relationen (6) wollen wir nunmehr den Ansatz machen:

$$e = e' e^{i(q_0 \cdot r - p t)} = \hat{e} e^{-i v} \quad (27)$$

worin

$$e' = e_0 + \sum_{\lambda} e_{\lambda} e^{i \bar{q}_{\lambda}}$$

sein soll und analog für die übrigen Variablen.

Ferner wollen wir noch schreiben:

$$q_{\lambda} = q_0 + \bar{q}_{\lambda}. \quad (28)$$

Wir erhalten dann zunächst aus den Gleichungen (III'₂) und (IV'₂) gemäß Formel (12)

$$k \hat{s}_r + l \hat{t}, = -i \frac{p}{1 + \beta} \Phi \cdot \nabla \times \hat{m}. \quad (29)$$

Führen wir wieder den Lichtvektor ein, so ergeben die Gleichungen (I') und (II'):

$$\begin{aligned} -ip(1 + \beta) \varepsilon_0 \cdot \hat{\mathcal{L}} &= c_0 \left[I + \frac{p^2}{c_0^2} \varepsilon_0 \cdot \Phi \right] \nabla \times \hat{m} \\ -ip \hat{m} &= -c_0 \nabla \times \hat{\mathcal{L}}. \end{aligned} \quad (30)$$

Aus diesen Relationen folgt für Röntgenstrahlen mit Berücksichtigung der Forderung (20)

$$-ip(1 + \beta) \varepsilon_0 \cdot \hat{\mathcal{L}} = -i \frac{c_0^2}{p} \varepsilon_0 \cdot \nabla \times \nabla \times \hat{\mathcal{L}}$$

und daraus

$$(1 + \beta) \hat{\mathcal{L}} = \frac{c_0^2}{p^2} \nabla \times \nabla \times \hat{\mathcal{L}}. \quad (31)$$

Mit Berücksichtigung der Ansätze (25), (26), (27) und (28) erhalten wir aus (31) Gleichungen von der Form:

$$\begin{aligned} \mathcal{L}_0 + \beta_1 \Sigma (B_{-x} \mathcal{L}_x) &= \frac{c_0^2}{p^2} (q_0^2 I - q_0; q_0) \cdot \mathcal{L}_0 \\ \mathcal{L}_{\lambda} + \beta_1 \Sigma_x (B_{\lambda-x} \mathcal{L}_x) &= \frac{c_0^2}{p^2} (q_{\lambda}^2 I - q_{\lambda}; q_{\lambda}) \cdot \mathcal{L}_{\lambda}, \end{aligned} \quad (32)$$

worin die Indizes κ und λ alle möglichen mit unseren Ansätzen verträglichen Werte annehmen sollen. Es folgt nun weiter:

$$\mathfrak{L}_\lambda = - \frac{\beta_1 \sum_{\kappa} (B_{\lambda-\kappa} \mathfrak{L}_\kappa)}{1 - \frac{c_0^2}{p^2} q_\lambda^2} \cdot \left(I - \frac{c_0^2}{p^2} q_\lambda; q_\lambda \right) \quad (33)$$

Nehmen wir q_λ reell an und

$$\left| 1 - \frac{c_0^2}{p^2} q_\lambda^2 \right| \geq 1, \quad (34)$$

so folgt, wenn wir noch

$$\sum_{\kappa} (B_{\lambda-\kappa} \mathfrak{L}_\kappa) = \mathfrak{L}_\lambda \quad (35)$$

setzen, aus

$$\begin{aligned} \mathfrak{L}_\lambda \cdot q_\lambda &= - \beta_1 \mathfrak{L}_\lambda \cdot q_\lambda \\ \mathfrak{L}_\lambda \times q_\lambda &= - \beta_1 \frac{\mathfrak{L}_\lambda \times q_\lambda}{1 - \frac{c_0^2}{p^2} q_\lambda^2} \end{aligned} \quad (36)$$

für die absoluten Beträge unmittelbar:

$$|\mathfrak{L}_\lambda| \leq \beta_1 |\mathfrak{L}_\lambda| \leq \beta_1 \sum_{\kappa} |B_{\lambda-\kappa}| |\mathfrak{L}_\kappa|. \quad (37)$$

Wir schreiben weiter:

$$\beta_1 \sum_{\kappa} |B_{\lambda-\kappa}| |\mathfrak{L}_\kappa| \leq R_\lambda |\mathfrak{L}_0| \quad (38)$$

Wo R_λ eine passend gewählte positive reelle Zahl bedeutet, die wir in Form eines Produktes:

$$R_\lambda = R_{l_1} R_{l_2} R_{l_3} \quad (39)$$

darstellen wollen. Mit Berücksichtigung von (26), (37), (38), (39) erhalten wir dann:

$$\begin{aligned} \beta_1 \sum_{\kappa} |B_{\lambda-\kappa}| |\mathfrak{L}_\kappa| &\leq \beta_1 \sum_{\kappa} |B_{\lambda-\kappa}| R_\kappa |\mathfrak{L}_0| \leq \beta_1 |\mathfrak{L}_0| \left(\sum_{h_1} |B_{l_1-h_1}| R_{h_1} \right) \cdot \\ &\cdot \left(\sum_{h_2} |B_{l_2-h_2}| R_{h_2} \right) \cdot \left(\sum_{h_3} |B_{l_3-h_3}| R_{h_3} \right) \end{aligned} \quad (40)$$

Wir machen nun beispielsweise den Ansatz:

$$\begin{aligned} |B_{hi}| &= |B_{-hi}| = \alpha_i^{hi} & B_{0i} &= \alpha_{0i} \\ R_{hi} &= R_{-hi} = \tau_i (\nu_i \alpha_i)^{|hi|}; & R_{0i} &= 1. \end{aligned} \quad (41)$$

Den Index i lassen wir im folgenden der einfacheren Schreibweise wegen weg und erhalten für irgendeinen ganzzahligen, positiven oder negativen Wert von l :

$$\sum_h |B_{l-h}| R_h = \alpha^{|l|} \left\{ 1 + \eta (v + v^2 + \dots + v^{|l|-1} + \alpha_0 v^{|l|}) + \eta \sum_{n=1}^{\infty} (v^{|l|+n} + v^n) \alpha^{2n} \right\} \quad (42)$$

Setzen wir noch:

$$\gamma = \sum_{n=1}^{\infty} (v \alpha^2)^n = \frac{v \alpha^2}{1 - v \alpha^2} \quad (43)$$

wobei wir voraussetzen:

$$v \alpha^2 < 1, \quad (44)$$

so ergibt sich:

$$\sum_h |B_{l-h}| R_h = |B_l| \left\{ v^{|l|} \eta \left(\frac{v}{v-1} + \alpha_0 + \gamma - 1 \right) + \left(1 + \eta \left(\gamma - \frac{v}{v-1} \right) \right) \right\} \quad (45)$$

Wählen wir noch:

$$1 + \eta \left(\gamma - \frac{v}{v-1} \right) = 0; \quad \alpha_0 = 1 \quad (46)$$

so wird:

$$\sum_h |B_{l-h}| R_h = |B_l| v^{|l|} \{1 + 2 \eta \gamma\} \quad (47)$$

und diese Formel gilt dann auch für $l = 0$.

Diese Relationen werden beispielsweise erfüllt für:

$$v = 1 + 10^{-2}; \quad v \alpha = 1 - 10^{-1}; \quad v \alpha^2 = \frac{(1 - 10^{-1})^2}{1 + 10^{-2}}; \quad (48)$$

$$\gamma = 4 \cdot 05; \quad \frac{1}{\eta} = 96 \cdot 95$$

$$\sum_h |B_{l-h}| R_h = |B_l| v^{|l|} 1 \cdot 084.$$

Wir kehren zur Formel (40) zurück und setzen voraus:

$$\beta_1 \leq \frac{\eta_1}{1 + 2 \eta_1 \gamma_1} - \frac{\eta_2}{1 + 2 \eta_2 \gamma_2} - \frac{\eta_3}{1 + 2 \eta_3 \gamma_3} \quad (49)$$

Trifft die Gleichung (47) für alle drei Werte des bei der Ableitung nicht angeschriebenen Index i zu, so folgt jetzt aus (37) und (40) wieder rückwärts die Relation (38) also:

$$|\mathcal{Q}_\lambda| \leq \beta_1 \sum_x |B_{\lambda-x}| |\mathcal{Q}_x| \leq \eta_1 \eta_2 \eta_3 (v_1 \alpha_1)^{|l_1|} (v_2 \alpha_2)^{|l_2|} (v_3 \alpha_3)^{|l_3|} |\mathcal{Q}_0| = R_\lambda |\mathcal{Q}_0|, \quad (50)$$

womit die Abschätzung des absoluten Betrages der Sekundärwellen-Amplituden \mathcal{Q}_λ beendet ist.

Würde unser Zahlenbeispiel für alle drei Werte des Index i zutreffen, so hätten wir speziell

$$|\mathcal{Q}_\lambda| \leq \eta_1 \eta_2 \eta_3 (1 - 10^{-1})^{|l_1| + |l_2| + |l_3|} |\mathcal{Q}_0| \sim \sim 10^{-6} (1 - 10^{-1})^{|l_1| + |l_2| + |l_3|} |\mathcal{Q}_0|.$$

Man rechnet leicht nach, daß in diesem Falle auch noch $\sum_\lambda |\mathcal{Q}_\lambda|$ unter ein Prozent von $|\mathcal{Q}_0|$ bleibt.

Nicht nur unser Zahlenbeispiel, sondern auch die Ansätze (41) sind noch sehr speziell, sie gestatten aber sofort eine wesentliche Verallgemeinerung, wenn berücksichtigt wird, daß die Ungleichung (50) a fortiori auch dann gilt, wenn:

$$|B_{hi}| = |B_{-hi}| \leq \alpha_i^{|hi|} \quad (51)$$

ist. Damit gewinnen wir eine weitgehende Freiheit für die Werte $|B_{hi}|$, insbesondere können auch beliebig viele derselben identisch gleich Null sein. Welche Werte nun auch die B_{hi} in jedem Einzelfall haben mögen, wir wollen jedenfalls, gestützt auf die soeben durchgeführten Untersuchungen voraussetzen, daß aus dem Wertesysteme der $|B_{hi}|$, beim Zutreffen der Bedingung (34)

$$|\mathcal{Q}_\lambda| \ll |\mathcal{Q}_0| \quad (52)$$

folge. Übrigens braucht auch die Bedingung (34) nicht exakt erfüllt zu sein, gilt nämlich nur:

$$|\mathcal{Q}_\lambda| \leq \beta_1 \rho |\mathcal{Q}_\lambda| \quad (53)$$

wo ρ größer als Eins ist, so führen unsere früheren Überlegungen wieder zu dem gleichen Ergebnis, wenn nur β_1 so klein ist, daß die Ungleichung (49) auch noch für $\beta_1 \rho$ zutrifft. Es gibt aber selbstverständlich stets eine obere Grenze für ρ , also eine untere

Grenze für $\left| 1 - \frac{c_0^2}{p^2} q_\lambda^2 \right|$ derart, daß wenn diese Grenzen über, beziehungsweise unterschritten werden, unsere Schlüsse bestimmt nicht mehr zutreffen.

Der Fall, daß einer oder einige der Werte $\left| 1 - \frac{c_0^2}{p^2} q_\lambda^2 \right|$ gegen Null gehen, bedarf also einer gesonderten Untersuchung. Ehe wir zu dieser Untersuchung schreiten, wollen wir noch feststellen, daß, falls kein solcher Ausnahmefall vorliegt, also die Ungleichung (50) durchwegs zutrifft und somit insbesondere auch

$$\beta_1 \Sigma B_{-x} |\mathcal{Q}_x| \ll |\mathcal{Q}_0$$

bleibt, aus der ersten Gleichung (32) mit entsprechender Annäherung folgt:

$$\mathcal{Q}_0 \cdot q_0 = 0; \quad \frac{p^2}{q_0^2} = c_0$$

womit auch die zur Vereinfachung eingeführte Voraussetzung, daß die q_λ reell seien, nachträglich mit der gleichen Annäherung legitimiert erscheint.

Handelt es sich um Frequenzen des optischen Bereiches und setzen wir:

$$\left[I + \frac{p^2}{c_0^2} \varepsilon_0 \cdot \Phi \right]^{-1} \varepsilon_0 = P,$$

so lauten die Gleichungen (32) jetzt:

$$P \cdot [\mathcal{Q}_0 + \beta_1 \Sigma (B_{-x} \mathcal{Q}_x)] = \frac{c_0^2}{p^2} (q_0^2 I - q_0; q_0) \cdot \mathcal{Q}_0, \quad (32a)$$

$$P \cdot [\mathcal{Q}_\lambda + \beta_1 \Sigma_x (B_{\lambda-x} \mathcal{Q}_x)] = \frac{c_0^2}{p^2} (q_\lambda^2 I - q_\lambda; q_\lambda) \cdot \mathcal{Q}_\lambda.$$

Die Behandlung dieser Gleichungen ist etwas komplizierter und interessiert uns hier nicht unmittelbar. Man überschlägt jedoch leicht, daß sich bei analogen Voraussetzungen auch jetzt wieder analoge Schlüsse ziehen lassen, solange die zu

$$\left(P - \frac{c_0^2}{p^2} q_\lambda^2 I + \frac{c_0^2}{p^2} q_\lambda; q_\lambda \right)$$

reziproke Dyade existiert und nicht allzu große Werte annimmt.

Aus (32a) folgt ja:

$$\mathcal{Q}_\lambda = -\beta_1 \Sigma (B_{\lambda-x} \mathcal{Q}_x) \cdot P \cdot \left[P - \frac{c_0^2}{p^2} q_\lambda^2 I + \frac{c_0^2}{p^2} q_\lambda; q_\lambda \right]^{-1} \quad (54)$$

bleibt nun P (der Fall, daß sich die Frequenz einer Eigenfrequenz nähert, wäre noch gesondert zu untersuchen) und die reziproke Dyade innerhalb mäßiger Grenzen, so sind kleine Werte von \mathcal{Q}_λ

$$q_0 = \frac{2\pi}{\lambda} (\mu_1 \nu_1 + \mu_2 \nu_2 + \mu_3 \nu_3) \quad (58)$$

so folgt:

$$\lambda = -4\pi \frac{l_1 \nu_1 \mu_1 + l_2 \nu_2 \mu_2 + l_3 \nu_3 \mu_3}{q_0^2} \quad (59)$$

für die Wellenlänge der in der Richtung q , verlaufenden Sekundärwelle starker Amplitude.

Setzen wir noch

$$\nu_1 = \frac{2\pi}{d_1}; \nu_2 = \frac{2\pi}{d_2}; \nu_3 = \frac{2\pi}{d_3} \quad (60)$$

und wählen speziell ν_1, ν_2, ν_3 als orthogonale Einheitsvektoren und $d_1 = d_2 = d_3 = d_g$, so erhalten wir:

$$\lambda = -2d_g \frac{l_1 \mu_1 + l_2 \mu_2 + l_3 \mu_3}{l_1^2 + l_2^2 + l_3^2} \quad (61)$$

die wohlbekannte Laue'sche Formel für den kubischen Krystall, wenn d_g die »Gitterkonstante« bedeutet. Auch die allgemeine Formel (59) entspricht, bei analoger Deutung der Konstanten d_1, d_2, d_3 , vollkommen der üblichen, nur daß wir es eben nicht mit einem diskontinuierlichen Raumgitter und mitschwingenden Elektronen, sondern mit einer kontinuierlichen periodischen Struktur zu tun haben.

Da also diese Relationen mit den aus der Atomgittertheorie bekannten formal identisch sind, brauchen wir uns mit ihrer Diskussion nicht aufzuhalten. Wir kehren zu den Gleichungen (32) zurück, vernachlässigen in ihnen konsequent alle Sekundärwellen kleiner Amplitude und berücksichtigen neben der Hauptwelle \mathcal{Q}_0 nur jene Sekundärwellen $\mathcal{Q}_1, \mathcal{Q}_2, \dots$, für welche, bei gegebener Frequenz, die Laue-Bedingungen (57) exakt oder mit hinreichender Annäherung erfüllt ist und die wir Nebenwellen nennen wollen. Wegen (57a) kann es offenbar nur eine endliche Anzahl von Nebenwellen geben.

Untersuchen wir zunächst die Summenausdrücke $\sum_x (B_{\lambda-x} \mathcal{Q}_x)$ für den Fall, daß keine Nebenwelle existiert. Wir können aus dieser Summe jedenfalls das Glied mit der endlichen Hauptamplitude $B_\lambda \mathcal{Q}_0$ absondern. Für den absoluten Betrag des Summenrestes Π erhalten wir mit Benützung der früheren speziellen Voraussetzungen nach (47) die Abschätzung:

$$|\Pi| \leq v^{l_1 + l_2 + l_3} [(1 + 2\gamma\gamma)^3 v^{l_1 + l_2 + l_3} - 1] |\mathcal{Q}_0|,$$

woraus:

$$\frac{|\Pi|}{B_\lambda |\mathcal{Q}_0|} \leq (1 + 2\gamma\gamma)^3 v^{l_1 + l_2 + l_3} - 1. \quad (62)$$

Da v wegen (46) größer als Eins gewählt werden muß, kann das Verhältnis der Restsumme zum Hauptglied mit zunehmenden

Absolutwerten der l_1, l_2, l_3 hier jedenfalls über alle Grenzen wachsen. Soll es zulässig sein, die Restsumme gegen das Hauptglied für niedrige Werte der l_1, l_2, l_3 zu vernachlässigen, so muß ν sehr nahe an Eins und dementsprechend η sehr klein gewählt werden, wobei man wesentlich über unser Zahlenbeispiel hinausgehen muß. Wie klein man η wählen darf, das hängt gemäß (49) von der Kleinheit des β_1 ab, die zulässige Grenze für β_1 hängt aber, wie wir sehen werden, mit der Größenordnung der Röntgenstrahlfrequenzen zusammen, über die ja vom Standpunkt der Kontinuitätstheorie noch nicht entschieden wurde.

Treten noch Nebenwellen auf, so werden die mit deren Amplituden behafteten Glieder ebenfalls abzusondern sein und wir wollen zur Vereinfachung der Rechnung jedenfalls voraussetzen, daß für alle in Betracht kommenden Nebenwellen, die verbleibende Restsumme gegen die Hauptglieder vernachlässigt werden darf.

Haben wir außer der Hauptwelle \mathcal{L}_0 nur eine Nebenwelle \mathcal{L}_1 , so werden die Gleichungen (32) jetzt lauten:

$$\begin{aligned} (1 + \beta_1 B_0) \mathcal{L}_0 + \beta_1 B_{-1} \mathcal{L}_1 &= \frac{c_0^2}{p^2} (q_0^2 I - q_0; q_0) \cdot \mathcal{L}_0 \\ (1 + \beta_1 B_0) \mathcal{L}_1 + \beta_1 B_1 \mathcal{L}_0 &= \frac{c_0^2}{p^2} (q_1^2 I - q_1; q_1) \cdot \mathcal{L}_1. \end{aligned} \quad (63)$$

Um das belanglose Glied $\beta_1 B_0$ nicht mitschleppen zu müssen, können wir uns etwa den Ansatz (24), beziehungsweise (25) durch das kleine und räumlich konstante Glied: $-\beta_1 B_0$ ergänzt denken, was die durchgeführten Überlegungen und Abschätzungen natürlich nicht merklich beeinflußt.

Wir erhalten dann:

$$\begin{aligned} \mathcal{L}_0 + \beta_1 B_{-1} \mathcal{L}_1 &= \frac{c_0^2}{p^2} (q_0^2 I - q_0; q_0) \cdot \mathcal{L}_0, \\ \mathcal{L}_1 + \beta_1 B_1 \mathcal{L}_0 &= \frac{c_0^2}{p^2} (q_1^2 I - q_1; q_1) \cdot \mathcal{L}_1. \end{aligned} \quad (64)$$

B_1 und B_{-1} sind unseren Voraussetzungen gemäß konjugiert komplex und entsprechen jenem Indextripel l_1, l_2, l_3 , für welches die Laue-Bedingung exakt oder in hoher Annäherung zutrifft. Aus den Gleichungen (64) folgt:

$$\begin{aligned} \mathcal{L}_0 \cdot \left\{ \left[\left(1 - \frac{c_0^2}{p^2} q_0^2 \right) I + \frac{c_0^2}{p^2} q_0; q_0 \right] \cdot \left[\left(1 - \frac{c_0^2}{p^2} q_1^2 \right) I + \frac{c_0^2}{p^2} q_1; q_1 \right] - \right. \\ \left. - \beta_1^2 B_1 B_{-1} I \right\} = 0. \end{aligned} \quad (65)$$

Die Bedingungsgleichung für die Planarität der geschweift geklammerten Dyade ergibt, daß entweder:

$$\left(1 - \frac{c_0^2}{p^2} q_0^2\right) \left(1 - \frac{c_0^2}{p^2} q_1^2\right) - \beta_1^2 B_1 B_{-1} = 0 \quad (66)$$

oder

$$\left[\left(1 - \frac{c_0^2}{p^2} q_0^2\right) \left(1 - \frac{c_0^2}{p^2} q_1^2\right) - \beta_1^2 B_1 B_{-1} \right] (1 - \beta_1^2 B_1 B_{-1}) + \left(\frac{c_0^2}{p^2}\right)^2 \beta_1^2 B_1 B_{-1} (q_0 \times q_1)^2 = 0 \quad (67)$$

sein muß. Man erkennt nun leicht, daß \mathfrak{L}_0 entweder auf der Ebene q_0, q_1 senkrecht steht, in welchem Falle dasselbe auch für \mathfrak{L}_1 gilt und die Relation (66) zutrifft, oder es liegt \mathfrak{L}_0 und dann auch \mathfrak{L}_1 in der Ebene q_0, q_1 und es gilt die Relation (67). In diesem zweiten Falle sind die Longitudinalkomponenten von \mathfrak{L}_0 und \mathfrak{L}_1 von Null verschieden, es folgt aber aus (64), daß sie bei gleicher Größenordnung von \mathfrak{L}_0 und \mathfrak{L}_1 jedenfalls relativ klein bleiben, daß also auch in diesem Falle \mathfrak{L}_0 , beziehungsweise \mathfrak{L}_1 merklich senkrecht auf q_0 , beziehungsweise q_1 stehen. Für die Transversalkomponenten erhalten wir:

$$\begin{aligned} \mathfrak{L}_0 \times q_0 &= - \frac{\beta_1 B_{-1}}{1 - \frac{c_0^2}{p^2} q_0^2} \mathfrak{L}_1 \times q_0, \\ \mathfrak{L}_1 \times q_1 &= - \frac{\beta_1 B_1}{1 - \frac{c_0^2}{p^2} q_1^2} \mathfrak{L}_0 \times q_1. \end{aligned} \quad (68)$$

Sollen \mathfrak{L}_0 und \mathfrak{L}_1 miteinander vergleichbare, endliche Werte haben, so muß jedenfalls, sowohl $1 - \frac{c_0^2}{p^2} q_0^2$, als auch $1 - \frac{c_0^2}{p^2} q_1^2$ hinreichend klein sein. Wäre $1 - \frac{c_0^2}{p^2} q_1^2$ klein, hingegen $1 - \frac{c_0^2}{p^2} q_0^2$ von höherer Größenordnung, so würde \mathfrak{L}_0 klein gegen \mathfrak{L}_1 folgen; \mathfrak{L}_1 übernehme dann die Rolle der Hauptwelle und eine Nebenwelle endlicher Amplitude gäbe es nicht. Da B_1 und B_{-1} konjugiert komplex sind, wollen wir:

$$\beta_1 B_1 = B e^{i\varphi}; \quad \beta_1 B_{-1} = B e^{-i\varphi} \quad (69)$$

setzen, worin also B eine reelle, positive und gegen Eins kleine Größe bedeutet. Ferner sei:

$$q_0 = q_e + \omega a \quad (70)$$

und darin ω ein Skalar, α ein Einheitsvektor. q_e möge der Bedingung:

$$\frac{p^2}{q_e^2} = c_0^2 \quad (71)$$

genügen; dann wäre also für ein nichtkrystallinisches Medium, z. B. für Luft, im Gebiete der Röntgenfrequenzen q_0 gleich q_e zu setzen. Wir führen schließlich noch die Bezeichnung ein:

$$2 q_e \cdot \bar{q}_1 + \bar{q}_1^2 = \mu \quad (72)$$

und wählen zur Vereinfachung der Schreibweise die Längeneinheit so, daß

$$\frac{c_0^2}{p^2} = \frac{1}{q_e^2} = \left(\frac{\lambda_e}{2\pi}\right)^2 = 1 \quad (73)$$

werde (λ_e bedeutet die Wellenlänge in Luft).

Berücksichtigen wir noch, daß

$$q_1 = q_0 + \bar{q}_1$$

ist, so folgt aus (66):

$$(2 \omega q_e \cdot \alpha + \omega^2) (\mu + 2 \omega (q_e + \bar{q}_1) \cdot \alpha + \omega^2) - B^2 = 0. \quad (74)$$

Beide Klammerausdrücke müssen nach den soeben durchgeführten Überlegungen kleine Werte haben. Das ist entweder möglich, wenn sowohl ω als auch μ klein sind, oder möglich, wenn genähert

$$\omega \sim -2 q_e \cdot \alpha; \quad \mu \sim 4 q_e \cdot \alpha \bar{q}_1 \cdot \alpha \quad (75)$$

ist. Im ersten Falle ist gemäß (70) q_0 nahezu gleich q_e und es muß nach (72) die Laue-Bedingung mit hoher Annäherung erfüllt sein. Im zweiten Falle ist

$$q_0 \sim q_e - 2 q_e \cdot \alpha \alpha = q'_e$$

und aus (75) und (72) folgt, daß jetzt wieder die Laue-Bedingung für dieses q_0 mit hoher Annäherung erfüllt sein muß. Da auch für q'_e die Bedingung (71) zutrifft, unterscheiden sich die beiden Fälle nicht wesentlich voneinander, sie gehören nur zu merklich verschiedenen Fortpflanzungsrichtungen der Hauptwelle. Wir können uns also auf den Fall beschränken, daß ω und μ kleine Größen sind. Aus (74) folgt:

$$\omega^4 + 2 \omega^3 [q_e \cdot \alpha + (q_e + \bar{q}_1) \cdot \alpha] + \omega^2 [\mu + 4 q_e \cdot \alpha (q_e + \bar{q}_1) \cdot \alpha] + 2 \omega q_e \cdot \alpha \mu - B^2 = 0. \quad (76)$$

Solange $\mu + 4 q_c \cdot a (q_c + \bar{q}_1) \cdot a$ nicht gegen Null geht, können wir statt (76) genähert schreiben:

$$\omega^2 [\mu + 4 q_c \cdot a (q_c + \bar{q}_1) \cdot a] + 2 \omega q_c \cdot a \mu - B^2 = 0 \quad (77)$$

und daraus:

$$\omega = \frac{-\mu q_c \cdot a}{\mu + 4 q_c \cdot a (q_c + \bar{q}_1) \cdot a} \pm \sqrt{\left(\frac{\mu q_c \cdot a}{\mu + 4 q_c \cdot a (q_c + \bar{q}_1) \cdot a} \right)^2 + \frac{B^2}{\mu + 4 q_c \cdot a (q_c + \bar{q}_1) \cdot a}} \quad (78)$$

Speziell für:

$$\mu = 0, \\ \omega = \pm \frac{B}{2 \sqrt{q_c \cdot a (q_c + \bar{q}_1) \cdot a}} \quad (79)$$

Da in dem betrachteten Falle \mathfrak{L}_0 und \mathfrak{L}_1 auf der Ebene q_0, q_1 senkrecht stehen, wir also

$$\mathfrak{L}_0 \perp \mathfrak{L}_1$$

setzen können, folgt aus (64), bei konsequenter Vernachlässigung von ω^2 gegen in ω lineare Glieder, durch Elimination von ω :

$$\mathfrak{L}_1 = \mathfrak{L}_0 e^{i\rho} \left\{ - \frac{\mu q_c \cdot a}{B^2 (q_c + \bar{q}_1) \cdot a} \pm \sqrt{\left(\frac{\mu q_c \cdot a}{B^2 (q_c + \bar{q}_1) \cdot a} \right)^2 + \frac{q_c \cdot a}{(q_c + \bar{q}_1) \cdot a}} \right\} \quad (80)$$

Sollen \mathfrak{L}_1 und \mathfrak{L}_0 vergleichbare Werte haben, so darf μ seiner Größenordnung nach nicht über B hinauswachsen. Für

$$\mu = 0$$

erhalten wir

$$\mathfrak{L}_1 = \pm \mathfrak{L}_0 e^{i\rho} \sqrt{\frac{q_c \cdot a}{(q_c + \bar{q}_1) \cdot a}} \quad (81)$$

Es liege nun \mathfrak{L}_0 und \mathfrak{L}_1 in der Ebene von q_0 und q_1 , dann gilt die Bedingungsgleichung (67). Wir vernachlässigen B^2 gegen Eins und ersetzen das kleine Glied

$$B^2 (q_0 \times q_1)^2 \text{ genähert durch } B^2 \sin^2 \xi \quad (82)$$

worin ξ den Winkel zwischen q_0 und q_1 bedeutet, die Größe von q_0 und von q_1 ist ja nahezu gleich der Größe von q_c , also nach (73) nahezu gleich Eins. Wir erhalten dann aus (67):

$$(2 \omega q_c \cdot a + \omega^2) (\mu + 2 \omega (q_c + \bar{q}_1) \cdot a + \omega^2) - B^2 \cos^2 \xi = 0. \quad (83)$$

Aus (83) folgen wieder die Formeln (78) und (79), nur daß jetzt $B \cos \xi$ an Stelle von B zu schreiben ist. Wir setzen sie nochmals her, wobei wir aber gleich μ neben $4 q_c \cdot a (q_c + \bar{q}_1) \cdot a$ vernachlässigen wollen:

$$\omega = \frac{-\mu}{4 (q_c + \bar{q}_1) \cdot a} \pm \sqrt{\left(\frac{\mu}{4 (q_c + \bar{q}_1) \cdot a}\right)^2 + \frac{(B \cos \xi)^2}{4 q_c \cdot a (q_c + \bar{q}_1) \cdot a}} \quad (78a)$$

und für $\mu = 0$

$$\omega = \pm \frac{B \cos \xi}{2 \sqrt{q_c \cdot a (q_c + \bar{q}_1) \cdot a}} \quad (79a)$$

Solange \mathfrak{Q}_0 und \mathfrak{Q}_1 von gleicher Größenordnung sind, bleiben sie jedenfalls merklich transversal; bezeichnen wir die Größe dieser Vektoren durch:

$$\sqrt{\bar{\mathfrak{Q}}_0 \cdot \mathfrak{Q}_0} = \mathfrak{Q}'_0; \quad \sqrt{\bar{\mathfrak{Q}}_1 \cdot \mathfrak{Q}_1} = \mathfrak{Q}'_1, \quad (84)$$

so folgt aus den Gleichungen (68) durch Elimination von ω genähert:

$$\mathfrak{Q}'_1 = \mathfrak{Q}'_0 e^{i\rho} \left\{ - \frac{\mu q_c \cdot a}{B \cos \xi \cdot 2 (q_c + \bar{q}_1) \cdot a} \pm \sqrt{\left(\frac{\mu q_c \cdot a}{B \cos \xi \cdot 2 (q_c + \bar{q}_1) \cdot a}\right)^2 + \frac{q_c \cdot a}{(q_c + \bar{q}_1) \cdot a}} \right. \quad (80a)$$

und für $\mu = 0$

$$\mathfrak{Q}'_1 = \pm \mathfrak{Q}'_0 e^{i\rho} \sqrt{\frac{q_c \cdot a}{(q_c + \bar{q}_1) \cdot a}} \quad (81a)$$

Wieder darf μ der Größenordnung nach nicht über $B \cos \xi$ hinauswachsen.

Von $q_c \cdot a$ wollen wir voraussetzen, daß es stets positiv ist, $(q_c + \bar{q}_1) \cdot a$ aber kann auch negativ werden, in diesem Falle ergibt sich ω aus (79), beziehungsweise (79a) imaginär und die Vektoren q_0 und q_1 werden komplex mit einem sehr kleinen imaginären Anteil. Es soll dann ξ den Winkel zwischen den reellen Richtungen von q_0 und q_1 bedeuten und soll auch jetzt genähert

$$(q_0 \times q_1)^2 = \sin^2 \xi; \quad (\mathfrak{Q}_0 \times q_1)^2 = \mathfrak{Q}_0'^2 \cos^2 \xi; \quad (\mathfrak{Q}_1 \times q_0)^2 = \mathfrak{Q}_1'^2 \cos^2 \xi \quad (85)$$

gesetzt werden. Die genäherte Gültigkeit unserer Formeln (80a), (81a) bleibt dadurch erhalten, einer gesonderten Untersuchung bedarf jedoch der Fall, daß $\cos \xi$ oder präziser gesprochen $q_0 \cdot q_1$ gegen Null konvergiert. Die benützten Näherungen sind dann nicht

mehr zulässig und wir müssen auf die Gleichungen (64) bis (67) zurückgreifen.

Schreiben wir (67) in der Form:

$$(1 - q_0^2 - B^2)(1 - q_1^2 - B^2) = B^2 (q_0 \cdot q_1)^2 \quad (86)$$

so folgt für $q_0 \cdot q_1 = 0$, daß

$$\text{entweder } 1 - q_0^2 - B^2 = 0 \text{ oder } 1 - q_1^2 - B^2 = 0 \quad (87)$$

sein muß. Gehen wir mit diesen Werten in die Gleichung (65), so erhalten wir:

$$\mathfrak{L}_0 \cdot q_0 (1 - q_1^2 - B^2) = 0, \text{ beziehungsweise } \mathfrak{L}_0 \cdot q_1 (1 - q_0^2 - B^2) = 0. \quad (88)$$

Demgemäß ist entweder \mathfrak{L}_0 exakt transversal, in welchem Falle aus der zweiten Gleichung (64) folgt, daß \mathfrak{L}_1 exakt longitudinal und klein gegen \mathfrak{L}_0 bleibt oder es gilt im zweiten Falle dieselbe Aussage, wenn wir in ihr \mathfrak{L}_0 mit \mathfrak{L}_1 vertauschen. Zu einer Hauptwelle endlicher Amplitude existiert also, wenn q_0 auf q_1 senkrecht steht, keine Nebenwelle, welche Werte auch q_1^2 annehmen mag, mit alleiniger Ausnahme des Wertes

$$q_0^2 = q_1^2,$$

welche Relation aber nur für einen Wert von ω erfüllt werden kann. In diesem Falle, wo die beiden Gleichungen (87) gleichzeitig erfüllt sind, wird die Orientierung von \mathfrak{L}_0 gegen q_0 unbestimmt, eine Unbestimmtheit, die wohl daher rührt, daß die Gleichungen (64) selbst nur Näherungen darstellen. Dieser Ausnahmefall ist für die folgenden Untersuchungen ohne Bedeutung. Ist $q_0 \cdot q_1$ nicht exakt gleich Null, jedoch sehr klein (merklich unter der Größenordnung von B), so wird für hinreichend kleine Werte von μ , auch in diesem Gebiete, zu einer endlichen Hauptwelle keine Nebenwelle merklicher Amplitude existieren.

Betrachten wir nun noch den bisher ausgeschlossenen Fall, daß $(q_e + \bar{q}_1) \cdot a$ gegen Null konvergiert, wobei wir zur Vereinfachung voraussetzen wollen, daß

$$\mu = 0$$

sei. Wir erhalten dann aus (76), beziehungsweise (67) und (82) genähert:

$$\omega = \sqrt[3]{\frac{B^2}{2 q_e \cdot a}} \cdot \begin{cases} 1 \\ -\frac{1}{2} + \frac{i}{2} \sqrt{3} \\ -\frac{1}{2} - \frac{i}{2} \sqrt{3} \end{cases} \quad \text{beziehungsweise}$$

$$\omega = \sqrt[3]{\frac{B^2 \cos^2 \xi}{2 q_c \cdot a}} \cdot \begin{cases} -\frac{1}{2} + \frac{i}{2} \sqrt{3} \\ -\frac{1}{2} - \frac{i}{2} \sqrt{3} \end{cases} \quad (89)$$

Beachten wir, daß

$$q_1 = q_c + \bar{q}_1 + \omega a, \text{ also in unserem Falle } q_1 \cdot a = \omega \quad (90)$$

ist, so folgt aus den Gleichungen (64), beziehungsweise (68):

$$\mathfrak{L}_1 = \mathfrak{L}_0 e^{i\rho} \sqrt{\frac{2q_c \cdot a}{q_1 \cdot a}}, \text{ beziehungsweise } \mathfrak{L}'_1 = \mathfrak{L}'_0 e^{i\rho} \sqrt{\frac{2q_c \cdot a}{q_1 \cdot a}} \quad (91)$$

Sind bei derselben Frequenz mehrere Nebenwellen vorhanden, so treten unter analogen Voraussetzungen, an die Stelle der Gleichungen (64) die allgemeinen:

$$\begin{aligned} \mathfrak{L}_0 + \beta_1 B_{-z_1} \mathfrak{L}_{z_1} + \beta_1 B_{-z_2} \mathfrak{L}_{z_2} + \dots + \beta_1 B_{-z_n} \mathfrak{L}_{z_n} &= \frac{c_0^2}{p^2} (q_0^2 I - q_0; q_0) \cdot \mathfrak{L}_0, \\ \mathfrak{L}_{z_m} + \beta_1 B_{z_m} \mathfrak{L}_0 + \beta_1 B_{z_m - z_1} \mathfrak{L}_{z_1} + \dots + \beta_1 B_{z_m - z_n} \mathfrak{L}_{z_n} &= \frac{c_0^2}{p^2} (q_{z_m}^2 - \\ &\quad - q_{z_m}; q_{z_m}) \cdot \mathfrak{L}_{z_m}. \end{aligned} \quad (92)$$

Man erkennt leicht, indem man die Gleichungen (92) mit $q_0 \cdot$, beziehungsweise mit $q_{z_m} \cdot$ multipliziert, daß auch jetzt alle Wellen merklich transversal sein werden, falls die Nebenwellenamplituden von gleicher Größenordnung sind, wie die Hauptwellenamplitude. Im übrigen ist die Auflösung dieser $n+1$ vektorischen, also $3(n+1)$ skalaren Gleichungen ohne spezielle, vereinfachende Voraussetzungen natürlich sehr kompliziert und unübersichtlich. Die Bedingungsgleichung für q_0 , welche wieder in Faktoren zerfallen kann, ist insgesamt vom $4(n+1)$ Grade.

Würden etwa speziell alle $B_{z_m - z_\lambda}$ gegen Null konvergieren, so erhielte man zwar wieder die einfachen Relationen:

$$\mathfrak{L}_{z_m} = -\frac{\beta_1 B_{z_m}}{1 - \frac{c_0^2}{p^2} q_{z_m}^2} \mathfrak{L}_0 \cdot \left[I - \frac{c_0^2}{p^2} q_{z_m}; q_{z_m} \right] \quad (93)$$

um die hochgradige Bedingungsgleichung käme man aber auch dann nicht herum. Eingehender wollen wir nur den einfachen und praktisch besonders wichtigen Fall behandeln, daß in bezug auf q_0 , das wir parallel zu a wählen wollen, Symmetrie herrscht.

Wir benützen wieder die der Formel (73) entsprechende Längeneinheit, unterdrücken den allgemeinen Index κ und setzen voraus:

1. Die Spitzen der aus einem gemeinsamen Ursprung gezogenen Vektoren \bar{q}_1 bis \bar{q}_n liegen auf ein und demselben Kreise, den sie in n gleiche Teile teilen; dieser Kreis steht senkrecht auf q_0 als Achse und hat seinen Mittelpunkt in dieser Achse. Dasselbe gilt dann natürlich auch für die n -Vektoren q_1 bis q_n . Die Indizes entsprechen der Aufeinanderfolge in einem bestimmten Drehsinn.
2. $\beta_1 B_{-x_1} = \beta_1 B_{x_1} = \beta_1 B_{-x_2} = \beta_1 B_{x_2} = \dots \beta_1 B_{-x_n} = \beta_1 B_{x_n} = B$.
3. Auch alle Koeffizienten $\beta_1 B_{x_m - x_j}$, welche nach der Definitionsgleichung (25) zu einem \bar{q} von gleicher Größe gehören, sind untereinander gleich und sollen durch \bar{B}_i bezeichnet werden.

Setzen wir noch:

$$1 - q_0^2 = A_0; \quad 1 - q_1^2 = 1 - q_2^2 = \dots = 1 - q_n^2 = A \quad (94)$$

so werden die Gleichungen (92) jetzt lauten:

$$\begin{aligned} A_0 \mathcal{Q}_0 + q_0 \cdot \mathcal{Q}_0 q_0 + B (\mathcal{Q}_1 + \mathcal{Q}_2 + \dots + \mathcal{Q}_n) &= 0, \\ A \mathcal{Q}_1 + q_1 \cdot \mathcal{Q}_1 q_1 + B \mathcal{Q}_0 + \bar{B}_1 (\mathcal{Q}_2 + \mathcal{Q}_n) + \bar{B}_2 (\mathcal{Q}_3 + \mathcal{Q}_{n-1}) + \bar{B}_3 & \\ & (\mathcal{Q}_4 + \mathcal{Q}_{n-2}) + \dots = 0. \end{aligned} \quad (95)$$

Die folgenden Gleichungen erhält man, indem man in den Indizes der \mathcal{Q} und q zyklisch fortschreitet. Ist die Zahl der Nebenwellen gerade, so lautet das letzte Glied der angeschriebenen Gleichung $\bar{B}_{\frac{n}{2}} \mathcal{Q}_{1+\frac{n}{2}}$; ist diese Zahl ungerade, so lautet es

$$\bar{B}_{\frac{n-1}{2}} \left(\mathcal{Q}_{\frac{n+1}{2}} + \mathcal{Q}_{\frac{n+3}{2}} \right).$$

Um die Rechnung noch weiter zu vereinfachen, wollen wir annehmen, daß auch die \bar{B}_i untereinander merklich gleich sind und wollen demgemäß fordern:

$$\bar{B}_1 = \bar{B}_2 = \dots = \begin{cases} \bar{B}_{\frac{n}{2}} \\ \bar{B}_{\frac{n-1}{2}} \end{cases} = \bar{B}. \quad (96)$$

Dann lauten die Gleichungen (95):

$$\begin{aligned} A_0 \mathcal{Q}_0 + q_0 \cdot \mathcal{Q}_0 q_0 + B \sum_x \mathcal{Q}_x &= 0 \\ A \mathcal{Q}_x + q_x \cdot \mathcal{Q}_x q_x + B \mathcal{Q}_0 + \bar{B} \sum_x \mathcal{Q}_x &= 0, \end{aligned} \quad (97)$$

worin sich die Summe Σ über alle Indizes 1 bis n , die Summe Σ über alle Indizes 1 bis n mit Ausnahme des Index x erstreckt.

Es folgt dann sofort:

$$\mathcal{Q}_x = \frac{1}{A - \bar{B}} \mathcal{Q}_0 \cdot \left[\left(\frac{\bar{B}}{B} A_0 - B \right) I + \frac{\bar{B}}{B} q_0; q_0 \right] \cdot \left[I - \frac{q_x; q_x}{1 - \bar{B}} \right] \quad (98)$$

Setzen wir (98) in die erste der Gleichungen (97) ein, so ergibt sich:

$$\mathcal{Q}_0 \cdot \left\{ [A_0(A - \bar{B}) + n(\bar{B}A_0 - B^2)] I + (A + (n-1)\bar{B}) q_0; q_0 - \frac{\bar{B}A_0 - B^2}{1 - \bar{B}} \sum_x q_x; q_x - \frac{\bar{B}}{1 - \bar{B}} q_0 \cdot q_x \sum_x q_0; q_x \right\} \frac{1}{A - \bar{B}} = 0. \quad (99)$$

Bezeichnet nun α einen Einheitsvektor parallel zu q_0 , n_x einen solchen in der Ebene q_0, q_x und senkrecht zu q_0 , schließlich i und j orthogonale Einheitsvektoren in der Ebene senkrecht zu q_0 , so erhalten wir aus der Voraussetzung 1. leicht folgende Relationen:

$$q_x = \alpha \cdot q_x \alpha + n_x \cdot q_x n_x; \quad \alpha \cdot q_x = q_x \cos \xi = \text{konst};$$

$$n_x \cdot q_x = q_x \sin \xi = \text{konst}. \quad (100)$$

$$\sum_x q_x; q_x = n q_x^2 \cos^2 \xi \alpha; \quad \alpha + \frac{n}{2} q_x^2 \sin^2 \xi (i; i + j; j) \quad \text{für } n > 2$$

$$q_0 \cdot q_x \sum_x q_0; q_x = n q_0^2 q_x^2 \cos^2 \xi \alpha; \quad \alpha.$$

Führen wir die Werte (100) in die Gleichung (99) ein, so erhalten wir:

$$\mathcal{Q}_0 \cdot \{ (S_0 + S_2) I + (S_1 - S_2) \alpha; \alpha \} = 0,$$

$$S_0 = (1 - q_0^2) (1 - q_x^2) + (n-1) \bar{B} (1 - q_0^2) - n B^2, \quad (101)$$

$$S_1 = (1 - q_x^2 + (n-1) \bar{B}) q_0^2 - \cos^2 \xi n \frac{\bar{B} - B^2}{1 - \bar{B}} q_x^2,$$

$$S_2 = - \sin^2 \xi \frac{n}{2} \frac{\bar{B} (1 - q_0^2) - B^2}{1 - \bar{B}} q_x^2.$$

Aus (101) folgt, daß entweder \mathcal{Q}_0 parallel zu q_0 und dann

$$S_0 + S_1 = 0$$

oder \mathcal{Q}_0 senkrecht zu q_0 und dann

$$S_0 + S_2 = 0$$

sein muß. Im ersten Falle haben Hauptwellenamplitude und Nebenwellenamplituden keine vergleichbaren Werte, er ist für uns hier ohne Interesse. Im zweiten Falle erhalten wir:

$$(1 - q_0^2) (1 - q_x^2) \left(1 + \sin^2 \xi \frac{n}{2} \frac{\bar{B}}{1 - \bar{B}} \right) +$$

$$+ (1 - q_0^2) \left((n-1) \bar{B} - \sin^2 \xi \frac{n}{2} \frac{\bar{B}}{1 - \bar{B}} \right) - \quad (102)$$

$$- \sin^2 \xi \frac{n}{2} \frac{B^2}{1 - \bar{B}} (1 - q_x^2) - n B^2 + \sin^2 \xi \frac{n}{2} \frac{B^2}{1 - \bar{B}} = 0.$$

Sollen die Amplituden vergleichbare Werte haben, so muß wieder sowohl $1 - q_0^2$ als auch $1 - q_x^2$ klein sein. Benützen wir den Ansatz (70), ersetzen aber (72) durch:

$$2 q_e \cdot \bar{q}_x + \bar{q}_x^2 = \mu + (n-1) \bar{B} - \sin^2 \xi \frac{n}{2} \frac{\bar{B}}{1-\bar{B}}$$

oder indem wir \bar{B} gegen Eins vernachlässigen, durch:

$$2 q_e \cdot \bar{q}_x + \bar{q}_x^2 = \mu + \bar{B} \left(n \cos^2 \frac{\xi}{2} - 1 \right) \quad (103)$$

so erhalten wir aus (102), falls wir alle Glieder, die von höherer Ordnung klein sind, wieder konsequent vernachlässigen:

$$\omega^2 4 (q_e + \bar{q}_x) \cdot a + 2 \omega \mu - n B^2 \cos^2 \frac{\xi}{2} = 0$$

$$\omega = \frac{-\mu}{4 (q_e + \bar{q}_x) \cdot a} \pm \sqrt{\left(\frac{\mu}{4 (q_e + \bar{q}_x) \cdot a} \right)^2 + \frac{n B^2 \cos^2 \frac{\xi}{2}}{4 (q_e + \bar{q}_x) \cdot a}} \quad (104)$$

oder für $\mu = 0$

$$\omega = \pm B \cos \frac{\xi}{2} \sqrt{\frac{n}{4 (q_e + \bar{q}_x) \cdot a}}$$

Aus (98) folgt dann mit gleicher Annäherung:

$$\begin{aligned} \Omega_x = & \frac{\bar{B} \left(-\frac{\mu}{2} \pm \sqrt{\frac{\mu^2}{4} + n B^2 \cos^2 \frac{\xi}{2} (q_e + \bar{q}_x) \cdot a} \right) + B^2 (q_e + \bar{q}_x) \cdot a}{B (q_e + \bar{q}_x) \cdot a \left(\frac{\mu}{2} \pm \sqrt{\frac{\mu^2}{4} + n B^2 \cos^2 \frac{\xi}{2} (q_e + \bar{q}_x) \cdot a} + \bar{B} n \cos^2 \frac{\xi}{2} \right)} \\ & \Omega_0 \cdot \left(I - \frac{q_x; q_x}{1-\bar{B}} \right) \quad (105) \end{aligned}$$

und für $\mu = 0$

$$\Omega_x = \pm \frac{\Omega_0}{\cos \frac{\xi}{2} \sqrt{n} \sqrt{(q_e + \bar{q}_x) \cdot a}} \left(I - \frac{q_x; q_x}{1-\bar{B}} \right).$$

Schreiben wir (105) in der Form:

$$\Omega_x = k \Omega_0 \cdot \left(I - \frac{q_x; q_x}{1-\bar{B}} \right)$$

und beachten wir, das Ω_x wieder merklich auf q_x senkrecht steht, so folgt aus:

$$\Omega_x \times q_x = k \Omega_0 \times q_x, \quad (106)$$

daß die Größe der einzelnen \mathcal{Q}_x von der Orientierung des \mathcal{Q}_0 zu dem betreffenden q_x abhängen wird. Ist die betrachtete Röntgenwelle unpolarisiert, das heißt, treten alle möglichen Orientierungen von \mathcal{Q}_0 auf, so daß im Mittel keine bevorzugt ist, dann wird die mittlere Intensität der Nebenwellen mit dem Mittelwerte $(\mathcal{Q}_x^2)_m$ proportional.

Aus (106) und (100) ergibt sich genähert:

$$(\mathcal{Q}_x^2)_m = k^2 \mathcal{Q}_0^2 \cos^2 \frac{\xi}{2}$$

und speziell für $\mu = 0$

$$(\mathcal{Q}_x^2)_m = \frac{\mathcal{Q}_0^2}{n(q_c + \bar{q}_x) \cdot a} \tag{107}$$

Würden unsere Symmetrievoraussetzungen wieder zutreffen, jedoch außer den Nebenwellen, welche zu den Vektoren \bar{q}_1 bis \bar{q}_n gehören, noch eine zweite Gruppe von Nebenwellen existieren, derart, daß die Spitzen der zugehörigen Vektoren \bar{q}_{n+1} bis \bar{q}_{n+m} auf einem zweiten Kreis lägen und gälte dann auch für diese:

$$1 - q_{n+1}^2 = 1 - q_{n+2}^2 = \dots = 1 - q_{n+m}^2 = \bar{A} \tag{108}$$

wobei jedoch \bar{A} von A verschieden wäre, so würden wir für ω auf eine Gleichung 3. Grades geführt werden. Gälte für die erste Gruppe wieder der Ansatz (103) und für die zweite Gruppe der analoge Ansatz:

$$2 q_c \cdot \bar{q}_\lambda + \bar{q}_\lambda^2 = \bar{\mu} + \bar{B} \left(m \cos^2 \frac{\bar{\xi}}{2} - 1 \right) \tag{109}$$

worin $\bar{\xi}$ den Winkel zwischen q_0 und q_λ der zweiten Gruppe bedeutete und wäre etwa noch $\mu = \bar{\mu} = 0$, so erhielten wir speziell:

$$\omega^3 - \frac{1}{4} \omega \left[\bar{B}^2 \frac{n \cos^2 \frac{\xi}{2}}{(q_c + \bar{q}_x) \cdot a} \frac{m \cos^2 \frac{\bar{\xi}}{2}}{(q_c + \bar{q}_\lambda) \cdot a} + B^2 \left(\frac{n \cos^2 \frac{\xi}{2}}{(q_c + \bar{q}_x) \cdot a} + \frac{m \cos^2 \frac{\bar{\xi}}{2}}{(q_c + \bar{q}_\lambda) \cdot a} \right) - \frac{B^2 \bar{B}}{4} \frac{n \cos^2 \frac{\xi}{2}}{(q_c + \bar{q}_x) \cdot a} \frac{m \cos^2 \frac{\bar{\xi}}{2}}{(q_c + \bar{q}_\lambda) \cdot a} \right] \tag{110}$$

Würden wir die Wurzeln dieser Gleichung in die Formel (98) einsetzen, so erhielten wir die zugehörigen Amplitudenwerte \mathcal{Q}_x , beziehungsweise, wenn wir in (98) A durch \bar{A} und q_x durch q_λ ersetzen, die Amplitudenwerte \mathcal{Q}_λ . Wir haben in diesem Kapitel die Integration unserer Differentialgesetze so weit gefördert, daß wir uns nunmehr dem Randproblem zuwenden können.

4. Die Lösung des Randproblems (Lauefall).

Ein homogenes, isotropes Medium, für welches die Relation (73) zutrifft, und ein homogener Krystall mögen sich in einer ebenen Trennungsebene berühren. Aus dem isotropen Medium falle eine ebene Sinuswelle

$$\mathcal{Q}_{(c)} = \mathcal{Q}_c e^{i(q_c \cdot r - pt)} \quad (111)$$

unter dem Einfallswinkel φ ein.

Nach (4), beziehungsweise gemäß den Differentialgesetzen (I'), (II'), (III'₂), (IV'₂), werden in der Trennungsebene die inhärenten Grenzbedingungen:

$$\begin{aligned} [\mathcal{Q}_p]_1 &= [\mathcal{Q}_p]_2 \\ [m_p]_1 &= [m_p]_2 \end{aligned} \quad (112)$$

zu erfüllen sein. Es mögen nun a, b, c ein rechtshändiges, orthogonales System von Einheitsvektoren bezeichnen, derart, daß a dem in den Krystall hineinweisenden Einfallslot entspricht, b in der Einfallsebene und c senkrecht zu dieser liegt. Die Gleichung der Trennungsebene sei:

$$a \cdot r = 0. \quad (113)$$

Indem wir wieder die Bezeichnungen des vorigen Kapitels verwenden, können wir aus dem Bestehen von Grenzbedingungen sofort auf die Relationen:

$$\begin{aligned} q_0 &= q_c + \omega a \\ q_1 &= q_c + \omega a + \bar{q}_1 \end{aligned} \quad (114)$$

schließen. Wir wollen nun annehmen, daß in dem Krystalle bei der gegebenen Orientierung und Frequenz, eine Hauptwelle (q_0) nur das Auftreten einer Nebenwelle (q_1) bedinge. Für diesen Fall haben wir im vorigen Kapitel die möglichen ω -Werte genähert berechnet, natürlich müssen und können wir uns auch in diesem Kapitel auf eine erste Näherung beschränken, insbesondere wollen wir wieder alle Sekundärwellen geringer Amplitude konsequent vernachlässigen.

Wir haben gesehen, daß \mathcal{Q}_0 entweder auf der Ebene q_0, q_1 senkrecht stehen oder aber in dieser Ebene liegen muß. — Jedem dieser beiden Fälle entsprechen zwei mögliche ω -Werte, also zwei mögliche Hauptwellen, mit je einer Nebenwelle. Die Lösung unserer Aufgabe wird vereinfacht, wenn wir zunächst annehmen, daß die Ebene q_0, q_1 mit der Einfallsebene zusammenfällt, dann entsprechen den beiden möglichen Lagen von \mathcal{Q}_0 , die senkrecht zur Einfallsebene und die in der Einfallsebene schwingende Komponente von \mathcal{Q}_c , wir wollen sie mit $\bar{\mathcal{Q}}_c$, beziehungsweise $\bar{\mathcal{Q}}_c$ bezeichnen. Außer der einfallenden können im 1. Medium noch zwei reflektierte Wellen auftreten:

$$\begin{aligned}\mathcal{Q}_{[r]} &= \mathcal{Q}_r e^{i[(q_c - 2q_c \cdot a \cdot a) \cdot r - p t]} \\ \mathcal{Q}_{[R]} &= \mathcal{Q}_R e^{i\left\{[(q_c + \bar{q}_1) - ((q_c + \bar{q}_1) \cdot a + \sqrt{(q_c + \bar{q}_1) \cdot a})^2 - \mu] \cdot r - p t\right\}},\end{aligned}\quad (115)$$

worin sich μ aus Formel (72) bestimmt.

Die Komponenten der reflektierten Wellen wollen wir analog bezeichnen wie jene der einfallenden, die vier Hauptwellen- und die vier Nebenwellenamplituden sollen durch Indizes unterschieden werden, derart, daß für die Größe dieser Amplituden folgende Bezeichnungen und Relationen benützt werden mögen:

$$\mathcal{Q}'_{11} = k_1 \mathcal{Q}'_{01}; \quad \mathcal{Q}'_{12} = k_2 \mathcal{Q}'_{02}; \quad \mathcal{Q}'_{13} = k_3 \mathcal{Q}'_{03}; \quad \mathcal{Q}'_{14} = k_4 \mathcal{Q}'_{04}. \quad (116)$$

Wir wollen ferner voraussetzen, daß $q_c \cdot a$ nicht gegen Null geht und daß auch $(q_c + \bar{q}_1) \cdot a$ groß gegen μ und B bleibt. Vernachlässigen wir konsequent alle relativ kleinen Größen, so erhalten wir aus den Grenzbedingungen (112) für »rechtläufige« Nebenwellen, also für

$$q_1 \cdot a > 0, \text{ beziehungsweise } (q_c + \bar{q}_1) \cdot a > 0 \quad (117)$$

folgende Relationen:

$$\begin{aligned}\bar{\mathcal{V}}_c + \bar{\mathcal{V}}_r &= \mathcal{Q}'_{01} + \mathcal{Q}'_{02} \\ q_c \cdot a (\bar{\mathcal{V}}_c - \bar{\mathcal{V}}_r) &= q_c \cdot a (\mathcal{Q}'_{01} + \mathcal{Q}'_{02}) \\ \bar{\mathcal{V}}_R &= k_1 \mathcal{Q}'_{01} + k_2 \mathcal{Q}'_{02} \\ - (q_c + \bar{q}_1) \cdot a \mathcal{Q}_R &= (q_c + \bar{q}_1) \cdot a (k_1 \mathcal{Q}'_{01} + k_2 \mathcal{Q}'_{02}).\end{aligned}\quad (118)$$

$$\begin{aligned}q_c \cdot a (\bar{\mathcal{V}}_c - \bar{\mathcal{V}}_r) &= q_c \cdot a (\mathcal{Q}'_{03} + \mathcal{Q}'_{04}) \\ q_c (\bar{\mathcal{V}}_c + \bar{\mathcal{V}}_r) &= q_c (\mathcal{Q}'_{03} + \mathcal{Q}'_{04}) \\ - (q_c + \bar{q}_1) \cdot a \bar{\mathcal{V}}_R &= (q_c + \bar{q}_1) \cdot a (k_3 \mathcal{Q}'_{03} + k_4 \mathcal{Q}'_{04}) \\ q_c \bar{\mathcal{V}}_R &= q_c (k_3 \mathcal{Q}'_{03} + k_4 \mathcal{Q}'_{04}).\end{aligned}\quad (119)$$

Aus den Relationen (118) und (119) folgt sofort:

$$\bar{\mathcal{V}}_r = \bar{\mathcal{V}}_R = \bar{\mathcal{V}}_r = \bar{\mathcal{V}}_R = 0 \quad (120)$$

und

$$\begin{aligned}\mathcal{Q}'_{01} &= \frac{k_2}{k_2 - k_1} \bar{\mathcal{V}}_c; \quad \mathcal{Q}'_{02} = \frac{-k_1}{k_2 - k_1} \bar{\mathcal{V}}_c; \quad \mathcal{Q}'_{03} = \frac{k_4}{k_4 - k_3} \bar{\mathcal{V}}_c; \\ \mathcal{Q}'_{04} &= \frac{-k_3}{k_4 - k_3} \bar{\mathcal{V}}_c.\end{aligned}\quad (121)$$

Ist speziell $\mu = 0$, so ergibt sich aus den Formeln (81) und (81 a):

$$\mathcal{Q}'_{01} = \mathcal{Q}'_{02} = \frac{1}{2} \bar{\mathcal{V}}_c; \quad \mathcal{Q}'_{03} = \mathcal{Q}'_{04} = \frac{1}{2} \bar{\mathcal{V}}_c. \quad (121 a)$$

Selbstverständlich gelten die Relationen (120) und (121) nicht exakt, sondern nur in erster Annäherung.

Wir gehen nun gleich dazu über, unsere ebene Welle auf eine planparallele Krystallplatte von der Dicke d fallen zu lassen, vor und hinter welcher sich wieder das homogene isotrope Medium befinden möge.

Die rückwärtige Begrenzungsebene der Platte wird dann durch

$$a \cdot x = d \quad (122)$$

gegeben sein. An dieser zweiten Begrenzungsfläche werden zwei ebene Wellen austreten:

$$\begin{aligned} \mathcal{Q}_{[a]} &= \mathcal{Q}_a e^{i[q_c \cdot x - \rho t]} \\ \mathcal{Q}_{[A]} &= \mathcal{Q}_A e^{i[(q_c + \bar{q}_1) \cdot a - ((q_c + \bar{q}_1) \cdot a - \sqrt{((q_c + \bar{q}_1) \cdot a)^2 - \mu}) \cdot x - \nu t]}. \end{aligned} \quad (123)$$

Mittels dieser beiden Wellen lassen sich innerhalb unserer Näherung die Grenzbedingungen an der zweiten Grenzfläche befriedigen. Eine ausführliche Durchrechnung würde zeigen, daß die Amplituden der an der zweiten Fläche in den Krystall zurückreflektierten Wellen von einer zu vernachlässigenden Größenordnung sind.

Setzen wir noch:

$$\begin{aligned} \chi_1 &= e^{i\omega_1 d}; \quad \chi_2 = e^{i\omega_2 d}; \quad \chi_3 = e^{i\omega_3 d}; \quad \chi_4 = e^{i\omega_4 d}; \quad \chi_0 = e^{i(\omega_1 + \omega_2) d} = \\ &= e^{i(\omega_3 + \omega_4) d} \end{aligned} \quad (124)$$

worin ω_1 und ω_2 den Werten (78), ω_3 und ω_4 den Werten (78a) entsprechen soll, so liefern unsere Grenzbedingungen an der zweiten Grenzfläche die Relationen:

$$\begin{aligned} \bar{\mathcal{Q}}_a &= \chi_1 \mathcal{Q}'_{01} + \chi_2 \mathcal{Q}'_{02} \\ \chi_0 \bar{\mathcal{Q}}_A &= \chi_1 k_1 \mathcal{Q}'_{01} + \chi_2 k_2 \mathcal{Q}'_{02} \end{aligned} \quad (125)$$

$$\begin{aligned} \bar{\mathcal{Q}}_a &= \chi_3 \mathcal{Q}'_{03} + \chi_4 \mathcal{Q}'_{04} \\ \chi_0 \bar{\mathcal{Q}}_A &= \chi_3 k_3 \mathcal{Q}'_{03} + \chi_4 k_4 \mathcal{Q}'_{04}. \end{aligned} \quad (126)$$

Aus diesen folgen mit Benützung von (121) und (124) sofort die Werte der Amplituden der austretenden Wellen. Setzen wir noch mit Berücksichtigung von (78), (78a), (80) und (80a):

$$\begin{aligned} \frac{\omega_1 - \omega_2}{2} d &= \sqrt{\left(\frac{\mu}{4(q_c + \bar{q}_1) \cdot a}\right)^2 + \frac{B^2}{4q_c \cdot a(q_c + \bar{q}_1) \cdot a}} \quad d = \vartheta \\ \frac{\omega_3 - \omega_4}{2} d &= \sqrt{\left(\frac{\mu}{4(q_c + \bar{q}_1) \cdot a}\right)^2 + \frac{(B \cos \xi)^2}{4q_c \cdot a(q_c + \bar{q}_1) \cdot a}} \quad d = \vartheta' \end{aligned} \quad (127)$$

$$\frac{k_2 + k_1}{k_2 - k_1} = \frac{1}{\sqrt{1 + 4 \frac{B^2 (q_c + \bar{q}_1) \cdot \alpha}{\mu^2 q_c \cdot a}}} = l \quad (128)$$

$$\frac{k_4 + k_3}{k_4 - k_3} = \frac{1}{\sqrt{1 + 4 \frac{(B \cos \xi)^2 (q_c + \bar{q}_1) \cdot \alpha}{\mu^2 q_c \cdot a}}} = l'$$

$$\frac{2 k_1 k_2}{k_2 - k_1} = \frac{2 \frac{B}{\mu} e^{i\varphi}}{\sqrt{1 + 4 \frac{B^2 (q_c + \bar{q}_1) \cdot \alpha}{\mu^2 q_c \cdot a}}} = s e^{i\varphi} \quad (129)$$

$$\frac{2 k_3 k_4}{k_4 - k_3} = \frac{2 \frac{B |\cos \xi|}{\mu} e^{i\varphi}}{\sqrt{1 + 4 \left(\frac{B |\cos \xi|}{\mu} \right)^2 \frac{(q_c + \bar{q}_1) \cdot \alpha}{q_c \cdot a}}} = s' e^{i\varphi}$$

und nehmen etwa Q_c reell an, so folgt für die Quadrate der absoluten Beträge:

$$\begin{aligned} |\bar{Q}_a|^2 &= [\cos^2 \vartheta + l'^2 \sin^2 \vartheta] \bar{Q}_c^2; & |\bar{Q}_a|^2 &= [\cos^2 \vartheta' + l'^2 \sin^2 \vartheta'] \bar{Q}_c^2 \\ |\bar{Q}_A|^2 &= s^2 \sin^2 \vartheta \bar{Q}_c^2; & |\bar{Q}_A|^2 &= s'^2 \sin^2 \vartheta' \bar{Q}_c^2 \end{aligned} \quad (130)$$

Aus (128), (129) und (130) erhalten wir:

$$\begin{aligned} |\bar{Q}_a|^2 + \frac{(q_c + \bar{q}_1) \cdot \alpha}{q_c \cdot a} |\bar{Q}_A|^2 &= \bar{Q}_c^2 \\ |\bar{Q}_a|^2 + \frac{(q_c + \bar{q}_1) \cdot \alpha}{q_c \cdot a} |\bar{Q}_A|^2 &= \bar{Q}_c^2. \end{aligned} \quad (131)$$

Blieben wir konsequent innerhalb unserer Näherung und beachten wir die Formel (2) für den Energiefluß sowie die Neigung des eintretenden und der austretenden Strahlen gegen die Grenzflächen, so lehren uns die Gleichungen (131), daß, wie es ja zu erwarten war, unsere Lösung mit dem Energieprinzip im Einklange steht.

Über die Intensitätsverhältnisse der austretenden Strahlen informieren wir uns am leichtesten, wenn wir zunächst:

$$\mu = 0$$

voraussetzen.

Aus den Formeln (127) bis (130) folgt in diesem Falle:

$$\begin{aligned} \bar{\mathcal{Q}}_a^2 &= \cos^2 \vartheta \bar{\mathcal{Q}}_c^2 = \cos^2 \left[\frac{Bd}{2 \sqrt{q_c \cdot a (q_c + \bar{q}_1) \cdot a}} \right] \bar{\mathcal{Q}}_c^2 \\ |\bar{\mathcal{Q}}_A|^2 &= \frac{q_c \cdot a}{(q_c + \bar{q}_1) \cdot a} \sin^2 \left[\frac{Bd}{2 \sqrt{q_c \cdot a (q_c + \bar{q}_1) \cdot a}} \right] \bar{\mathcal{Q}}_c^2. \end{aligned} \quad (132)$$

Die Relationen für $|\bar{\mathcal{Q}}_a|^2$, beziehungsweise $|\bar{\mathcal{Q}}_A|^2$ erhalten wir aus (132), wenn wir $B \cos \xi$ an die Stelle von B setzen. Die Intensitäten der austretenden Strahlen sind also in exakt nicht absorbierenden Krystallen und das gilt auch, falls μ ungleich Null ist, periodische Funktionen der Krystalldicke, ein Ergebnis, das der »Pendellösung« P. P. Ewalds¹ vollkommen entspricht. Eine derartige starke Abhängigkeit der Intensitäten von der Dicke des Krystals würde mit der Erfahrung im Widerspruch stehen, sie fällt aber heraus, wenn wir berücksichtigen, daß die einfallenden Wellen weder ihrer Richtung noch ihrer Wellenlänge nach exakt homogen sein werden.

Die Fortpflanzungsrichtung der austretenden Nebenwelle $\mathcal{Q}_{[A]}$ ist nach (123) allgemein durch:

$$q_c + \bar{q}_1 - \left[(q_c + \bar{q}_1) \cdot a - \sqrt{((q_c + \bar{q}_1) \cdot a)^2 - \mu} \right] a$$

oder genähert durch:

$$q_c + \bar{q}_1 - \frac{1}{2} \frac{\mu}{(q_c + \bar{q}_1) \cdot a} a \quad (133)$$

gegeben. Es möge nun für die der Maßbestimmung (73) entsprechende Wellenlänge:

$$\lambda = 2 \pi \quad (134)$$

$$\mu = 0, \text{ also } (2 q_c + \bar{q}_1) \cdot \bar{q}_1 = 0 \quad (135)$$

gelten. Entspricht dem in der Richtung q_c auffallenden Röntgenstrahl ein gewisser Wellenlängenbereich, so werden zu den anderen Wellenlängen von Null verschiedene Werte des μ und gemäß (133) etwas verschiedene Fortpflanzungsrichtungen der austretenden Nebenwellen gehören. Die Intensitäten dieser Nebenwellen werden mit wachsendem μ rasch gegen Null konvergieren und ihre Intensitätsverteilung wird in erster Näherung symmetrisch zur Richtung $q_c + \bar{q}_1$ sein. Nun wird nicht nur ein gewisser Wellenlängenbereich zur Verfügung stehen, sondern der einfallende

¹ P. P. Ewald, »Die Krystalloptik der Röntgenstrahlen«. Ann. d. Phys., 1917, Bd. 54, p. 577.

Röntgenstrahl wird auch stets einen, wenn auch äußerst kleinen Kegel mit der Öffnung Ω um die Einfallrichtung q_e als Achse erfüllen. Allen etwas verschiedenen Einfallrichtungen q'_e mit etwas verschiedenen Wellenlängen, für welche die Bedingung:

$$q'_e + \bar{q}_1 - \left[(q'_e + \bar{q}_1) \cdot a - \sqrt{((q'_e + \bar{q}_1) \cdot a)^2 - \mu} \right] a = w (q_e + \bar{q}_1) \quad (136)$$

$$w = \frac{\lambda}{\lambda'}$$

zutrifft, entspricht aber dieselbe, durch $q_e + \bar{q}_1$ gegebene Richtung der austretenden Nebenwelle.

Beschränken wir uns wieder auf die erste Näherung, so können wir statt (136), falls, was wir voraussetzen wollen, $(q'_e + \bar{q}_1) \cdot a$ nicht gegen Null geht, schreiben:

$$q'_e = w q_e + (w-1) \bar{q}_1 + \frac{1}{2} \frac{\mu}{(q_e + \bar{q}_1) \cdot a} a. \quad (137)$$

Führen wir diesen Wert in die Relation

$$2 q'_e \cdot \bar{q}_1 + \bar{q}_1^2 = \mu$$

ein, so folgt:

$$(w-1) \bar{q}_1^2 = \mu \frac{q_e \cdot a}{(q_e + \bar{q}_1) \cdot a} \quad (138)$$

Es gehört also zu jedem Werte von w ein und nur ein Wert von μ und umgekehrt und dann vermöge (137) auch ein und nur ein Wert von q'_e und umgekehrt. Liegen speziell q_e , \bar{q}_1 und a in einer Ebene, so muß auch q'_e in dieser Ebene liegen. Bilden wir aus (137) und (138)

$$q_e \times q'_e = \frac{\mu}{(q_e + \bar{q}_1) \cdot a} \left[\frac{q_e \cdot a}{\bar{q}_1^2} q_e \times \bar{q}_1 + \frac{1}{2} q_e \times a \right] \quad (139)$$

so erkennen wir, daß $q_e \times q'_e$ für alle Werte von μ dieselbe Richtung hat, daß also q'_e stets nur innerhalb einer Ebene variieren kann. Bezeichnen wir den Winkel zwischen q_e und q'_e durch ψ und die Größe des in eckigen Klammern stehenden Vektors durch R , so folgt aus (139):

$$\mu = w \sin \psi (q_e + \bar{q}_1) \cdot a \frac{1}{R} \sim \psi (q_e + \bar{q}_1) \cdot a \frac{1}{R} \quad (140)$$

Setzen wir nun die Intensität der einfallenden Röntgenstrahlen für den Wellenlängenbereich $d\lambda$ proportional mit:

$$(\bar{\mathcal{Q}}_e^2 + \bar{\mathcal{Q}}_1^2) d\lambda,$$

so folgt aus (130):

$$\begin{aligned} |\bar{\mathcal{Q}}_A|^2 d\lambda &= s^2 \sin^2 \vartheta \bar{\mathcal{Q}}_e^2 d\lambda \\ |\bar{\mathcal{Q}}_A|^2 d\lambda &= s'^2 \sin^2 \vartheta' \bar{\mathcal{Q}}_e^2 d\lambda, \end{aligned} \quad (141)$$

Für unpolarisiertes Röntgenlicht hätten wir für die zeitlichen Mittelwerte:

$$|\overline{\mathcal{Q}}_A| d\lambda = \frac{1}{2} \overline{\mathcal{Q}}_c^2 d\lambda [s^2 \sin^2 \vartheta + s'^2 \sin^2 \vartheta']. \quad (142)$$

Diese Formel gilt, wie wir sehen werden, für beliebige Einfallrichtungen, also auch wenn q_c , \bar{q}_1 und a nicht in derselben Ebene liegen.

Aus (138) erhalten wir nun.

$$-\frac{\lambda}{\lambda'^2} d\lambda = d\mu \frac{q_c \cdot a}{(q_c + \bar{q}_1) \cdot a} \frac{1}{\bar{q}_1^2}$$

oder genähert:

$$d\lambda = -d\mu \frac{q_c \cdot a}{(q_c + \bar{q}_1) \cdot a} \frac{2\pi}{\bar{q}_1^2} \quad (143)$$

$\overline{\mathcal{Q}}_c^2$ wollen wir für die angestrebte genäherte Abschätzung in dem in Frage kommenden kleinen Integrationsbereich als konstant voraussetzen. Für s^2 , s'^2 , ϑ , ϑ' sind die Werte aus den Formeln (127) bis (129) zu entnehmen, in welchen allerdings q_c durch q'_c und B durch $B \frac{p'^2}{c_0^2}$ zu ersetzen wäre, doch können diese kleinen Abweichungen in erster Näherung vernachlässigt werden.

Führen wir noch zur Abkürzung die Bezeichnungen ein:

$$\begin{aligned} \frac{\mu}{2B} \sqrt{\frac{q_c \cdot a}{(q_c + \bar{q}_1) \cdot a}} &= x; & \frac{Bd}{\sqrt{q_c \cdot a (q_c + \bar{q}_1) \cdot a}} &= D \\ \frac{\mu}{2B \cos \xi} \sqrt{\frac{q_c \cdot a}{(q_c + \bar{q}_1) \cdot a}} &= x'; & \frac{B \cdot d' \cos \xi'}{\sqrt{q_c \cdot a (q_c + \bar{q}_1) \cdot a}} &= D' \end{aligned} \quad (144)$$

so folgt:

$$\int_{\lambda_1}^{\lambda_2} d\lambda |\overline{\mathcal{Q}}_A|^{1/2} = \overline{\mathcal{Q}}_c^2 \left(\frac{q_c \cdot a}{(q_c + \bar{q}_1) \cdot a} \right)^{3/2} \frac{4\pi B}{\bar{q}_1^2} \int_{x_2}^{x_1} \frac{dx}{1+x^2} \sin^2 \left(\frac{D}{2} \sqrt{1+x^2} \right) \quad (145)$$

Die Integrationsgrenzen für μ , beziehungsweise für x sind entweder durch den zur Verfügung stehenden Wellenlängenbereich (Formel 138) oder durch den zur Verfügung stehenden Öffnungswinkel ψ (Formel 140) gegeben. Ist:

$$\lambda_1 < \lambda < \lambda_2,$$

so wird x_2 negativ und x_1 positiv. Wir wollen voraussetzen, daß sich normalerweise $|\mu_1|$ und $|\mu_2$ einigermaßen groß gegen die

sehr kleine Größe B ergeben, so daß $|x_1|$ und $|x_2|$ große Werte annehmen. Diese Voraussetzung wird, wie man aus (138), (140) und (144) erkennt, für sehr kleine Werte von $(q_e + \bar{q}_1) \cdot a$ wahrscheinlich nicht mehr zutreffen.

Gleichung (145) ergibt nun:

$$\int_{\lambda_1}^{\lambda_2} d\lambda |\bar{\mathcal{Q}}_A|^2 = \bar{\mathcal{Q}}_c^2 \left(\frac{q_e \cdot a}{(q_e + \bar{q}_1) \cdot a} \right)^{\frac{3}{2}} \frac{2 \pi B}{\bar{q}_1^2} \left\{ [\arctan x_1 - \arctan x_2] - \int_{x_2}^{x_1} \frac{dx}{1+x^2} \cos(D\sqrt{1+x^2}) \right\} \quad (146)$$

Der Betrag des in den geschweiften Klammern stehenden Integrals wird für hinreichend große D ersichtlich klein gegen π , während wir nach unseren Voraussetzungen genähert:

$$\arctan x_1 - \arctan x_2 = \pi$$

setzen dürfen. Vernachlässigen wir das von D , also von der Plattendicke d abhängige Integral gegen π , so erhalten wir genähert:

$$\int_{\lambda_1}^{\lambda_2} d\lambda |\bar{\mathcal{Q}}_A|^2 = \bar{\mathcal{Q}}_c^2 \left(\frac{q_e \cdot a}{(q_e + \bar{q}_1) \cdot a} \right)^{\frac{3}{2}} \frac{B 2 \pi^2}{\bar{q}_1^2} \quad (147)$$

und ganz analog

$$\int_{\lambda_1}^{\lambda_2} d\lambda |\bar{\mathcal{Q}}_A|^2 = \bar{\mathcal{Q}}_c^2 \left(\frac{q_e \cdot a}{(q_e + \bar{q}_1) \cdot a} \right)^{\frac{3}{2}} \frac{B 2 \pi^2 |\cos \xi_1|}{\bar{q}_1^2} \quad (148)$$

Aus diesen Gleichungen ergibt sich unmittelbar der gesamte in der Richtung $q_e + \bar{q}_1$ austretende Energiefluß, welcher ja mit

$$\frac{(q_e + \bar{q}_1) \cdot a}{q_e \cdot a} \int_{\lambda_1}^{\lambda_2} d\lambda |\mathcal{Q}_A|^2$$

proportional ist. Für unpolarisiert einfallendes Röntgenlicht ergebe sich:

$$\frac{(q_e + \bar{q}_1) \cdot a}{q_e \cdot a} \int_{\lambda_1}^{\lambda_2} d\lambda |\mathcal{Q}_A|^2 = \bar{\mathcal{Q}}_c^2 \frac{B \pi^2}{\bar{q}_1^2} \sqrt{\frac{q_e \cdot a}{(q_e + \bar{q}_1) \cdot a}} (1 + \cos \xi_1) \quad (149)$$

Die Formel (149) gilt auch dann, wenn q_e, \bar{q}_1, a nicht in derselben Ebene liegen. Die Relationen (147) bis (149) zeigen uns:

1. Die Intensität der Nebenwelle ist mit B proportional, bei verschwindendem B fällt die zugehörige Nebenwelle aus (Strukturkontrolle).

2. Die Intensität der Nebenwelle ist mit $\frac{1}{\bar{q}_1^2}$ proportional (Lorentz-scher Faktor).
3. Bei unpolarisiert einfallendem Röntgenlicht ist die austretende Nebenwelle im allgemeinen teilweise polarisiert. Liegen speziell q_0 , \bar{q}_1 und α in derselben Ebene, so geht die Intensität der parallel zur Einfallsebene schwingenden Komponente mit $\cos \xi$ gegen Null. Der Fall $\cos \xi = 0$, in welchem die benützten Näherungen jedenfalls versagen, ist schon im 3. Kapitel diskutiert worden.

Man könnte daran denken, das letzte Ergebnis zur Konstruktion eines Polarisationsapparates für Röntgenstrahlen zu benutzen, leider geht dieses einfache Resultat wieder verloren, wenn mehrere Nebenwellen merklicher Amplitude auftreten.

Um die Intensität der austretenden Nebenwelle von dem Einfluß der Plattendicke merklich unabhängig zu machen, mußten wir voraussetzen, daß D hinreichend groß sei. Nun ist zwar B , wie wir gesehen haben, eine sehr kleine Größe, trotzdem kann Bd hinreichend groß werden, falls die Wellenlänge der Röntgenstrahlen hinreichend klein ist. Beträgt die Dicke der Platte n Wellenlängen, so folgt gemäß (134):

$$Bd = 2\pi Bn.$$

Wäre z. B. $B = 10^{-6}$; $d = 1 \text{ mm}$; $\lambda = 10^{-7} \text{ mm}$, so erhielten wir:

$$Bd = 20\pi.$$

Man überschlägt leicht, daß in diesem Falle das vernachlässigte Integral ungünstigsten Falles nur wenige Prozente von π erreichen kann. Falls B noch wesentlich kleiner wird, was nach den an die Formel (62) anschließenden Überlegungen nicht unwahrscheinlich ist oder aber, wenn in dem mit D' behafteten Integrale, D' noch vermöge des Faktors $|\cos \xi|$ stark herabgedrückt wird, dann allerdings würde der Einfluß der Plattendicke erst für wesentlich stärkere Platten praktisch unmerklich werden, wenn anders man an der angeschriebenen Größenordnung der Röntgenwellenlängen festhalten will. Es wäre aber zumindest verfrüht, aus diesem Umstande Schlüsse auf die Größenordnung der Röntgenwellenlänge ziehen zu wollen, da auch die Annahme geringfügiger, wohl immer vorhandener Unregelmäßigkeiten der Krystallplatte genügt, um den Einfluß der Plattendicke hinreichend herabzudrücken, worauf schon P. P. Ewald¹ hingewiesen hat.

Wir wollen nun den Fall betrachten, daß ein unpolarisierter Röntgenstrahl senkrecht einfällt und n Nebenwellen auftreten,

¹ P. P. Ewald, l. p. 592.

welche aber den im 3. Kapitel formulierten Symmetriebedingungen genügen. Den Formeln (104) bis (107) entsprechend, ergibt dann die Wiederholung unserer früheren Rechnungen für die zeitlichen Mittelwerte:

$$|\Omega_A|^2 = \frac{B^2 \cos^2 \frac{\xi}{2}}{4 \frac{\mu^2}{n B^2 \cos^2 \frac{\xi}{2}}} \sin^2 \left(1 + 4 \frac{\mu^2}{(q_c + \bar{q}_z) \cdot a} \right) \quad (150)$$

$$\sqrt{\left(\frac{\mu}{4 (q_c + \bar{q}_z) \cdot a} \right)^2 + \frac{n B^2 \cos^2 \frac{\xi}{2}}{4 (q_c + \bar{q}_z) \cdot a}} \Omega_c^2.$$

Der Vergleich der Formel (150) mit den Formeln (127) bis (130) zeigt uns eine ziemlich weitgehende Übereinstimmung mit dem ausführlich behandelten Falle, daß nur eine Nebenwelle existiert. Ein wichtiger Unterschied besteht insofern, als jetzt, wie die Rechnungen des 3. Kapitels ergeben haben, zufolge der Symmetriebedingungen, die senkrecht zur Ebene q_c, \bar{q}_z und die in dieser Ebene schwingende Komponente dieselbe Fortpflanzungsgeschwindigkeit besitzen.

Der charakteristische Unterschied beider Fälle liegt aber in dem Umstand, daß jetzt nach (103):

$$2 q_c \cdot \bar{q}_z + \bar{q}_z^2 = \mu + \bar{B} \left(n \cos^2 \frac{\xi}{2} - 1 \right)$$

zu setzen ist. Die Richtung der austretenden Nebenwelle für $\mu = 0$ wird dann nicht mehr durch $q_c + \bar{q}_z$, sondern genähert durch:

$$q_c + \bar{q}_z = \frac{1}{2} \frac{\bar{B} \left(n \cos^2 \frac{\xi}{2} - 1 \right)}{(q_c + \bar{q}_z) \cdot a} a$$

gegeben sein. Relativ zu dieser Richtung wird jetzt die Intensität der austretenden Wellen symmetrisch abnehmen, diese Richtung werden wir also experimentell als jene der abgebeugten Welle feststellen.

Die neuaufgundene Abweichung von der Laue'schen Formel verschwindet exakt für

$$\bar{B} = 0,$$

eine Ausnahme, die im Sinne der hier vorgetragenen Theorie nicht allgemein zutreffen wird. Jedenfalls ist aber \bar{B} , gleichwie B eine äußerst kleine Größe und die aufgundene Abweichung könnte

praktisch wohl nur für sehr kleine Werte von $(q_e + \bar{q}_x) \cdot a$ merklich werden. Versuche in dieser Richtung wären erwünscht.

Die Wiederholung der oben durchgeführten Rechnungen

würde den gesamten in der Richtung $q_e + \bar{q}_x - \frac{1}{2} \frac{\bar{B} (n \cos^2 \frac{\xi}{2} - 1)}{(q_e + \bar{q}_x) \cdot a} a$ austretenden mittleren Energiefluß genähert proportional mit:

$$(q_e + \bar{q}_x) \cdot a \int_{\lambda_1}^{\lambda_2} d\lambda \mathcal{L}_A^2 = \mathcal{L}_e^2 \frac{B 2 \pi^2 \cos \frac{\xi}{2}}{\bar{q}_x^2} \frac{1}{\sqrt{n (q_e + \bar{q}_x) \cdot a}}$$

ergeben.

Wir kehren zu dem Falle einer Nebenwelle zurück, wollen aber jetzt die Voraussetzung, daß q_e, \bar{q}_1, a in derselben Ebene liegen, fallen lassen. Außer dem bereits definierten System orthogonaler Einheitsvektoren a, b, c führen wir noch das System a', b', c' ein, derart, daß a' wieder dem Einfallslot entspricht, b' in der Ebene $a, q_e + \bar{q}_1$, c' senkrecht zu dieser Ebene liegt. Ferner sollen: $\bar{\mathcal{L}}_c$ parallel zu c , $\bar{\mathcal{L}}$ parallel zu $c \times q_e$, \mathcal{L}'_{01} und \mathcal{L}'_{02} parallel zum Einheitsvektor n_1 , \mathcal{L}'_{03} und \mathcal{L}'_{04} parallel zu $n_1 \times q_e$, $q_e + \bar{q}_1$ parallel zum Einheitsvektor p angenommen werden. Da \mathcal{L}'_{01} und \mathcal{L}'_{02} auf der Ebene q_0, q_1 , also genähert auf der Ebene q_e, \bar{q}_1 senkrecht stehen muß, entspricht n_1 der Normale dieser Ebene.

Wir erhalten dann für die Trennungsebene

$$a \cdot r = 0,$$

statt der Relationen (118) und (119):

$$\begin{aligned} \bar{\mathcal{L}}_c + \bar{\mathcal{L}}_r &= c \cdot n_1 (\mathcal{L}'_{01} + \mathcal{L}'_{02}) + c \cdot (n_1 \times q_e) (\mathcal{L}'_{03} + \mathcal{L}'_{04}) \\ \bar{\mathcal{L}}_c - \bar{\mathcal{L}}_r &= c \cdot n_1 (\mathcal{L}'_{01} + \mathcal{L}'_{02}) + c \cdot (n_1 \times q_e) (\mathcal{L}'_{03} + \mathcal{L}'_{04}) \\ \bar{\mathcal{L}}_R &= c' \cdot n_1 (k_1 \mathcal{L}'_{01} + k_2 \mathcal{L}'_{02}) + c' \cdot (n_1 \times p) (k_3 \mathcal{L}'_{03} + k_4 \mathcal{L}'_{04}) \\ -\bar{\mathcal{L}}_R &= c' \cdot n_1 (k_1 \mathcal{L}'_{01} + k_2 \mathcal{L}'_{02}) + c' \cdot (n_1 \times p) (k_3 \mathcal{L}'_{03} + k_4 \mathcal{L}'_{04}) \end{aligned} \quad (151)$$

$$\begin{aligned} \bar{\mathcal{L}}_c - \bar{\mathcal{L}}_r &= -c \cdot (n_1 \times q_e) (\mathcal{L}'_{01} + \mathcal{L}'_{02}) + c \cdot n_1 (\mathcal{L}'_{03} + \mathcal{L}'_{04}) \\ \bar{\mathcal{L}}_c + \bar{\mathcal{L}}_r &= -c \cdot (n_1 \times q_e) (\mathcal{L}'_{01} + \mathcal{L}'_{02}) + c \cdot n_1 (\mathcal{L}'_{03} + \mathcal{L}'_{04}) \\ -\bar{\mathcal{L}}_R &= -c' \cdot (n_1 \times p) (k_1 \mathcal{L}'_{01} + k_2 \mathcal{L}'_{02}) + c' \cdot n_1 (k_3 \mathcal{L}'_{03} + k_4 \mathcal{L}'_{04}) \\ \bar{\mathcal{L}}_R &= -c' \cdot (n_1 \times p) (k_1 \mathcal{L}'_{01} + k_2 \mathcal{L}'_{02}) + c' \cdot n_1 (k_3 \mathcal{L}'_{03} + k_4 \mathcal{L}'_{04}). \end{aligned} \quad (152)$$

Da $c, n_1, n_1 \times q_e$ und ebenso $c', n_1, n_1 \times p$ in je einer Ebene liegen, können wir:

$$\begin{aligned} c \cdot n_1 &= \cos \alpha, \quad c \cdot (n_1 \times q_c) = \sin \alpha, \quad c' \cdot n_1 = \cos \alpha', \\ c' \cdot (n_1 \times p) &= \sin \alpha' \end{aligned} \quad (153)$$

setzen. Es folgt dann wieder:

$$\bar{\mathcal{Q}}_r = \bar{\mathcal{Q}}_R = \bar{\mathcal{Q}}_r' = \bar{\mathcal{Q}}_R' = 0 \quad (154)$$

und

$$\mathcal{Q}'_{01} = \frac{k_2}{k_2 - k_1} [\cos \alpha \bar{\mathcal{Q}}_c - \sin \alpha \bar{\mathcal{Q}}_c']; \quad \mathcal{Q}'_{02} = \frac{-k_1}{k_2 - k_1} [\cos \alpha \bar{\mathcal{Q}}_c - \sin \alpha \bar{\mathcal{Q}}_c'] \quad (155)$$

$$\mathcal{Q}'_{03} = \frac{k_4}{k_4 - k_3} [\sin \alpha \bar{\mathcal{Q}}_c + \cos \alpha \bar{\mathcal{Q}}_c']; \quad \mathcal{Q}'_{04} = \frac{-k_3}{k_4 - k_3} [\sin \alpha \bar{\mathcal{Q}}_c + \cos \alpha \bar{\mathcal{Q}}_c'].$$

Gehen wir gleich zur Krystallplatte über, so erhalten wir für die rückwärtige Begrenzungsebene:

$$a \cdot r = d$$

jetzt statt der Relationen (125) und (126):

$$\bar{\mathcal{Q}}_a = \cos \alpha (\chi_1 \mathcal{Q}'_{01} + \chi_2 \mathcal{Q}'_{02}) + \sin \alpha (\chi_3 \mathcal{Q}'_{03} + \chi_4 \mathcal{Q}'_{04}) \quad (156)$$

$$\chi_0 \bar{\mathcal{Q}}_A = \cos \alpha' (\chi_1 k_1 \mathcal{Q}'_{01} + \chi_2 k_2 \mathcal{Q}'_{02}) + \sin \alpha' (\chi_3 k_3 \mathcal{Q}'_{03} + \chi_4 k_4 \mathcal{Q}'_{04}).$$

$$\bar{\mathcal{Q}}_a = -\sin \alpha (\chi_1 \mathcal{Q}'_{01} + \chi_2 \mathcal{Q}'_{02}) + \cos \alpha (\chi_3 \mathcal{Q}'_{03} + \chi_4 \mathcal{Q}'_{04}) \quad (157)$$

$$\chi_0 \bar{\mathcal{Q}}_A = -\sin \alpha' (\chi_1 k_1 \mathcal{Q}'_{01} + \chi_2 k_2 \mathcal{Q}'_{02}) + \cos \alpha' (\chi_3 k_3 \mathcal{Q}'_{03} + \chi_4 k_4 \mathcal{Q}'_{04}).$$

Aus diesen Gleichungen erhält man leicht mit Benützung der alten Bezeichnungen:

$$\begin{aligned} |\bar{\mathcal{Q}}_a|^2 + |\bar{\mathcal{Q}}_a'|^2 &= [\cos^2 \vartheta + l^2 \sin^2 \vartheta] [\cos \alpha \bar{\mathcal{Q}}_c - \sin \alpha \bar{\mathcal{Q}}_c']^2 + \\ &+ [\cos^2 \vartheta' + l'^2 \sin^2 \vartheta'] \cdot [\sin \alpha \bar{\mathcal{Q}}_c + \cos \alpha \bar{\mathcal{Q}}_c']^2. \end{aligned} \quad (158)$$

$$\begin{aligned} |\bar{\mathcal{Q}}_A|^2 + |\bar{\mathcal{Q}}_A'|^2 &= s^2 \sin^2 \vartheta [\cos \alpha \bar{\mathcal{Q}}_c - \sin \alpha \bar{\mathcal{Q}}_c']^2 + s'^2 \sin^2 \vartheta' \\ &[\sin \alpha \bar{\mathcal{Q}}_c + \cos \alpha \bar{\mathcal{Q}}_c']^2. \end{aligned} \quad (159)$$

Setzen wir für unpolarisiert einfallendes Röntgenlicht im Zeitmittel:

$$(\bar{\mathcal{Q}}_c^2)_m = (\bar{\mathcal{Q}}_c'^2)_m = \frac{1}{2} (\mathcal{Q}_c^2)_m; \quad (\bar{\mathcal{Q}}_c \bar{\mathcal{Q}}_c')_m = 0,$$

so folgt aus (158) und (159), wenn wir den Mittelungsindex wieder weglassen:

$$|\mathcal{Q}_a|^2 = \frac{1}{2} \mathcal{Q}_c^2 [\cos^2 \vartheta + l^2 \sin^2 \vartheta + \cos^2 \vartheta' + l'^2 \sin^2 \vartheta']$$

$$\mathcal{Q}_A^2 = \frac{1}{2} \mathcal{Q}_c^2 [s^2 \sin^2 \vartheta + s'^2 \sin^2 \vartheta'].$$

Wir erhalten also für unpolarisiertes Röntgenlicht dieselben Schlußformeln, wie sie sich unter den gleichen Voraussetzungen in dem Spezialfalle, daß q_e, \bar{q}_1, α in einer Ebene liegen, also für $\sin \alpha = \sin \alpha' \doteq 0$, ergeben hatten.

5. Das Randproblem im Braggfall.

Wir setzen wieder voraus, daß zu einer Hauptwelle nur eine Nebenwelle gehöre, wollen aber nun annehmen, daß diese Nebenwelle rückläufig sei. Diese Annahme entspricht:

$$(q_e + \bar{q}_1) \cdot \alpha < 0 \quad (160)$$

wenn wir uns auch jetzt wieder auf Fälle beschränken, für welche μ klein gegen $(q_e + \bar{q}_1) \cdot \alpha$ bleibt.¹

Zufolge der Ungleichung (160) und gemäß den Formeln (78) und (79), beziehungsweise (78a) und (79a) wird jetzt ω für μ gleich Null imaginär.

Für von Null verschiedene Werte von μ ergeben sich je zwei zusammengehörende Werte von ω so lange konjugiert komplex, als

$$-\frac{\mu^2}{4B^2} \frac{q_e \cdot \alpha}{(q_e + \bar{q}_1) \cdot \alpha} < 1, \quad (161)$$

beziehungsweise

$$-\frac{\mu^2}{4B^2 \cos^2 \xi} \frac{q_e \cdot \alpha}{(q_e + \bar{q}_1) \cdot \alpha} < 1 \quad (161a)$$

bleibt. Für weiter ansteigende Werte von μ^2 folgen dann wieder reelle Werte der ω . Wir wollen diese beiden Wertebereiche von μ^2 , als das Gebiet I und das Gebiet II unterscheiden.

Für die Lösung des Randproblems lassen sich unsere früheren Überlegungen, wenn wir zunächst wieder voraussetzen, daß q_e, \bar{q}_1, α in derselben Ebene liegen, ganz analog übertragen, nur daß jetzt wegen

$$\mathcal{Q}_{[R]} = \mathcal{Q}_R e^i [[(q_e + \bar{q}_1) - ((q_e + \bar{q}_1) \cdot \alpha + \sqrt{((q_e + \bar{q}_1) \cdot \alpha)^2 - \mu^2}) \alpha] \cdot r - p i] \quad (162)$$

die Richtung der Welle $\mathcal{Q}_{[R]}$ genähert zu $q_e + \bar{q}_1$ parallel ist und demgemäß in den Formeln (118) und (119)

$$\begin{aligned} (q_e + \bar{q}_1) \cdot \alpha \bar{\mathcal{V}}_R \text{ statt } - (q_e + \bar{q}_1) \cdot \alpha \bar{\mathcal{V}}_R \\ (q_e + \bar{q}_1) \cdot \alpha \bar{\mathcal{V}}_R \text{ statt } - (q_e + \bar{q}_1) \cdot \alpha \bar{\mathcal{V}}_R \end{aligned} \quad (163)$$

¹ Der im 3. Kapitel berührte Spezialfall $(q_e + \bar{q}_1) \cdot \alpha = 0$ bietet kein hinreichend großes Interesse, um eine eigene Untersuchung zu rechtfertigen.

und indem wir die Werte von k_1 und k_3 , die sich im Gebiete I ebenfalls komplex ergeben, aus den Formeln (80) und (80a) entnehmen:

$$|\bar{Q}_R|^2 = -\frac{q_c \cdot a}{(q_c + \bar{q}_1) \cdot a} \bar{Q}_c^2; \quad |\bar{Q}_R|^2 = -\frac{q_c \cdot a}{(q_c + \bar{q}_1) \cdot a} \bar{Q}_c^2 \quad (168)$$

Die einfallende Welle wird also an dem einseitig unbegrenzten Krystall innerhalb des Gebietes I in der Richtung:

$$q_c + \bar{q}_1 - \left[(q_c + \bar{q}_1) \cdot a + \sqrt{((q_c + \bar{q}_1) \cdot a)^2 - \mu} \right] a,$$

welche genähert durch:

$$q_c + \bar{q}_1 - \frac{1}{2} \frac{\mu}{(q_c + \bar{q}_1) \cdot a} a \quad (169)$$

gegeben ist, total reflektiert. Für μ gleich Null ergibt sich genau die Richtung $q_c + \bar{q}_1$ und es besteht die Relation:

$$2 q_c \cdot \bar{q}_1 + \bar{q}_1^2 = 0. \quad (170)$$

Die reflektierte Welle wird dann an der »Netzebene« mit der Normale $-\bar{q}_1$ nach dem gewöhnlichen Reflexionsgesetze reflektiert, für $-\bar{q}_1 \perp a$ fällt diese Netzebene mit der Begrenzungsfläche des Krystalls zusammen. Bezeichnen wir den Winkel zwischen q_c und $-\bar{q}_1$ durch $\hat{\phi}$ (Einfallswinkel bezüglich der Netzebene) und setzen:

$$90^\circ - \hat{\phi} = \eta \quad (\text{Glanzwinkel bezüglich der Netzebene}),$$

so folgt aus (170)

$$2 q_c \sin \eta = \bar{q}_1. \quad (171)$$

Beachten wir nun die Definitionsgleichung (25) für β , so entsprechen unserer Nebenwelle die Glieder

$$\beta_1 B_1 e^{i \bar{q}_1 \cdot r} \quad \text{und} \quad \beta_1 B_{-1} e^{-i \bar{q}_1 \cdot r}.$$

Schreiten wir also in der Richtung \bar{q}_1 oder $-\bar{q}_1$ in dem Krystalle fort, so wiederholt sich vermöge dieser Glieder derselbe Zustand in Abständen $d^{(1)}$ (Netzebenenabstand), falls

$$\bar{q}_1 d^{(1)} = 2\pi \quad (172)$$

ist. Aus (171) und (172) aber folgt:

$$2 d^{(1)} \sin \eta = \lambda \quad (173)$$

die bekannte Bragg'sche Reflexionsbedingung.

Die Gleichung (173) bestimmt natürlich stets die Richtung der abgebeugten Welle, welche ja von der Orientierung der

einfallenden Welle zum Krystall abhängt, je nachdem diese abgebeugte Welle bezüglich des Einfallslotes rechtläufig oder rückläufig ist, ergibt sich dann der Lauefall oder der Braggfall.

Gehen wir nun zur Krystallplatte von der endlichen Dicke d über, so erhalten wir aus (164) und (166):

$$\begin{aligned} \bar{\Omega}'_{01} &= \frac{\chi_2 k_2}{\chi_2 k_2 - \chi_1 k_1} \bar{\Omega}_c; \quad \bar{\Omega}'_{02} = \frac{-\chi_1 k_1}{\chi_2 k_2 - \chi_1 k_1} \bar{\Omega}_c; \quad \bar{\Omega}'_{03} = \frac{\chi_4 k_4}{\chi_4 k_4 - \chi_3 k_3} \bar{\Omega}_c; \\ \bar{\Omega}'_{04} &= \frac{-\chi_3 k_3}{\chi_4 k_4 - \chi_3 k_3} \bar{\Omega}_c. \end{aligned} \quad (174)$$

$$\bar{\Omega}_a = \chi_1 \chi_2 \frac{k_2 - k_1}{\chi_2 k_2 - \chi_1 k_1} \bar{\Omega}_c; \quad \bar{\Omega}_R = k_1 k_2 \frac{\chi_2 - \chi_1}{\chi_2 k_2 - \chi_1 k_1} \bar{\Omega}_c. \quad (175)$$

$$\bar{\Omega}_a = \chi_3 \chi_4 \frac{k_4 - k_3}{\chi_4 k_4 - \chi_3 k_3} \bar{\Omega}_c; \quad \bar{\Omega}_R = k_3 k_4 \frac{\chi_4 - \chi_3}{\chi_4 k_4 - \chi_3 k_3} \bar{\Omega}_c. \quad (176)$$

Setzen wir noch, analog wie in (144), zur Abkürzung:

$$\begin{aligned} \frac{\mu}{2B} \sqrt{\frac{q_c \cdot a}{-(q_c + \bar{q}_1) \cdot a}} &= x; \quad \frac{Bd}{\sqrt{-q_c \cdot a(q_c + \bar{q}_1) \cdot a}} = D \\ \frac{\mu}{2B|\cos \xi|} \sqrt{\frac{q_c \cdot a}{-(q_c + \bar{q}_1) \cdot a}} &= x'; \quad \frac{Bd|\cos \xi|}{\sqrt{-q_c \cdot a(q_c + \bar{q}_1) \cdot a}} = D' \end{aligned} \quad (177)$$

so folgt aus (175) und (176) im Gebiete I:

$$\begin{aligned} \bar{\Omega}_a^2 &= \frac{1-x^2}{\sinh^2\left(\frac{D}{2} \sqrt{1-x^2}\right) + 1-x^2} \bar{\Omega}_c^2 \\ \bar{\Omega}_R^2 &= -\frac{q_c \cdot a}{(q_c + \bar{q}_1) \cdot a} \frac{\sinh^2\left(\frac{D}{2} \sqrt{1-x^2}\right)}{\sinh^2\left(\frac{D}{2} \sqrt{1-x^2}\right) + 1-x^2} \bar{\Omega}_c^2 \end{aligned} \quad (178)$$

Die Werte von $\bar{\Omega}_a$ und $|\bar{\Omega}_R|^2$ ergeben sich aus (178), wenn dort x durch x' , D durch D' und $\bar{\Omega}_c^2$ durch $\bar{\Omega}_c'^2$ ersetzt wird.

Im Gebiete II aber erhalten wir:

$$|\bar{\Omega}_a|^2 = \frac{x^2 - 1}{\sin^2\left(\frac{D}{2} \sqrt{x^2 - 1}\right) + x^2 - 1} \bar{\Omega}_c'^2 \quad (179)$$

$$|\bar{\mathcal{Q}}_R|^2 = \frac{q_c \cdot a}{(q_c + \bar{q}_1) \cdot a} \frac{\sin^2\left(\frac{D}{2} \sqrt{x^2 - 1}\right)}{\sin^2\left(\frac{D}{2} \sqrt{x^2 - 1}\right) + x^2 - 1} \bar{\mathcal{Q}}_c^2 \quad (179)$$

und daraus wieder $|\bar{\mathcal{Q}}_a|^2$ und $|\bar{\mathcal{Q}}_R|^2$ durch dieselben Vertauschungen wie oben. Man überblickt sofort, daß der Energiesatz wieder erfüllt ist.

Die Formeln (178) gelten gemäß (161) für $x^2 < 1$, die Formeln (179) für $x^2 > 1$. Für $x^2 = 1$ folgen aus unserer Näherungslösung nach (174) zwar unendliche Werte der Hauptwellenamplituden, die Formeln (178) und (179) ergeben aber auch in diesem Falle endliche und übereinstimmende Werte für $|\mathcal{Q}_a|^2$ und $|\mathcal{Q}_R|^2$, nämlich:

$$|\bar{\mathcal{Q}}_a|^2 = \frac{1}{\frac{D^2}{4} + 1} \bar{\mathcal{Q}}_c^2; \quad |\mathcal{Q}_R|^2 = \frac{q_c \cdot a}{(q_c + \bar{q}_1) \cdot a} \frac{\frac{D^2}{4}}{\frac{D^2}{4} + 1} \bar{\mathcal{Q}}_c^2. \quad (180)$$

Das Maximum für $|\mathcal{Q}_R|^2$ liegt bei $x^2 = 0$, also bei $\mu = 0$ und die Intensitätsverteilung ist bei einer Nebenwelle in erster Näherung wieder symmetrisch bezüglich der Nullstelle von μ , ein Ergebnis, das von dem entsprechenden P. P. Ewalds¹ abweicht. Im ganzen Gebiete I bleibt die Reflexion für hinreichend große Werte von D sehr stark. Mit den im vorigen Kapitel beispielsweise angenommenen Größenordnungen würde, bei einer Plattendicke von 0.1 mm , $|\bar{\mathcal{Q}}_a|^2$ gemäß (180) selbst für $x^2 = 1$ noch unter 10% von $\bar{\mathcal{Q}}_c^2$ bleiben. Im Gebiete II nimmt dann mit zunehmendem x^2 die Reflexion ab, jedoch mit starken Schwankungen, analog wie es bei der »Pendellösung« des vorigen Kapitels der Fall war.

Durch Wiederholung der entsprechenden Überlegungen des 4. Kapitels und mit denselben Voraussetzungen wie dort können wir auch jetzt wieder den gesamten in der Richtung $q_c + \bar{q}_1$ reflektierten Energiefluß abschätzen. Wir erhalten dann zunächst an Stelle der Gleichung (145):

$$\int_{\lambda_1}^{\lambda_2} d\lambda |\bar{\mathcal{Q}}_R|^2 = \bar{\mathcal{Q}}_c^2 \left(\frac{q_c \cdot a}{-(q_c + \bar{q}_1) \cdot a} \right)^{\frac{3}{2}} \frac{4 \pi B}{\bar{q}_1^2} \left[\int_{-1}^{+1} dx \frac{\sinh^2\left(\frac{D}{2} \sqrt{1-x^2}\right)}{\sinh^2\left(\frac{D}{2} \sqrt{1-x^2}\right) + 1 - x^2} \right. \\ \left. + \int_1^{x_2} dx \frac{\sin^2\left(\frac{D}{2} \sqrt{x^2-1}\right)}{\sin^2\left(\frac{D}{2} \sqrt{x^2-1}\right) + x^2 - 1} + \int_1^{-x_1} dx \frac{\sin^2\left(\frac{D}{2} \sqrt{x^2-1}\right)}{\sin^2\left(\frac{D}{2} \sqrt{x^2-1}\right) + x^2 - 1} \right] \quad (181)$$

¹ L. c. p. 593. (Nahezu streifende Incidenz oder Reflexion haben wir geschlossen.)

entsprechenden Vorzeichenumkehr an Stelle der Gleichungen (151), (152), (156) und (157) bei Verwendung derselben Bezeichnungen:

$$\begin{aligned}\bar{Q}_c &= \cos \alpha (\mathcal{Q}'_{01} + \mathcal{Q}'_{02}) + \sin \alpha (\mathcal{Q}'_{03} + \mathcal{Q}'_{04}) \\ \bar{Q}_R &= \cos \alpha' (k_1 \mathcal{Q}'_{01} + k_2 \mathcal{Q}'_{02}) + \sin \alpha' (k_3 \mathcal{Q}'_{03} + k_4 \mathcal{Q}'_{04}) \quad (185) \\ \bar{Q}_e &= -\sin \alpha (\mathcal{Q}'_{01} + \mathcal{Q}'_{02}) + \cos \alpha (\mathcal{Q}'_{03} + \mathcal{Q}'_{04}) \\ \bar{Q}_R &= -\sin \alpha' (k_1 \mathcal{Q}'_{01} + k_2 \mathcal{Q}'_{02}) + \cos \alpha' (k_3 \mathcal{Q}'_{03} + k_4 \mathcal{Q}'_{04}) \\ \bar{Q}_a &= \cos \alpha (\chi_1 \mathcal{Q}'_{01} + \chi_2 \mathcal{Q}'_{02}) + \sin \alpha (\chi_3 \mathcal{Q}'_{03} + \chi_4 \mathcal{Q}'_{04}) \\ 0 &= \cos \alpha' (\chi_1 k_1 \mathcal{Q}'_{01} + \chi_2 k_2 \mathcal{Q}'_{02}) + \sin \alpha' (\chi_3 k_3 \mathcal{Q}'_{03} + \chi_4 k_4 \mathcal{Q}'_{04}) \\ \bar{Q}_a &= -\sin \alpha (\chi_1 \mathcal{Q}'_{01} + \chi_2 \mathcal{Q}'_{02}) + \cos \alpha (\chi_3 \mathcal{Q}'_{03} + \chi_4 \mathcal{Q}'_{04}) \quad (186) \\ 0 &= -\sin \alpha' (\chi_1 k_1 \mathcal{Q}'_{01} + \chi_2 k_2 \mathcal{Q}'_{02}) + \cos \alpha' (\chi_3 k_3 \mathcal{Q}'_{03} + \chi_4 k_4 \mathcal{Q}'_{04}).\end{aligned}$$

Aus diesen Formeln erhalten wir leicht:

$$\begin{aligned}\bar{Q}_a &= \cos \alpha \chi_1 \chi_2 \frac{k_2 - k_1}{\chi_2 k_2 - \chi_1 k_1} (\bar{Q}_c \cos \alpha - \bar{Q}_e \sin \alpha) + \\ &\quad + \sin \alpha \chi_3 \chi_4 \frac{k_4 - k_3}{\chi_4 k_4 - \chi_3 k_3} (\bar{Q}_c \sin \alpha + \bar{Q}_e \cos \alpha) \\ \bar{Q}_a &= -\sin \alpha \chi_1 \chi_2 \frac{k_2 - k_1}{\chi_2 k_2 - \chi_1 k_1} (\bar{Q}_c \cos \alpha - \bar{Q}_e \sin \alpha) + \\ &\quad + \cos \alpha \chi_3 \chi_4 \frac{k_4 - k_3}{\chi_4 k_4 - \chi_3 k_3} (\bar{Q}_c \sin \alpha + \bar{Q}_e \cos \alpha) \quad (187) \\ \bar{Q}_R &= \cos \alpha' k_1 k_2 \frac{\chi_2 - \chi_1}{\chi_2 k_2 - \chi_1 k_1} (\bar{Q}_c \cos \alpha - \bar{Q}_e \sin \alpha) + \\ &\quad + \sin \alpha' k_3 k_4 \frac{\chi_4 - \chi_3}{\chi_4 k_4 - \chi_3 k_3} (\bar{Q}_c \sin \alpha + \bar{Q}_e \cos \alpha) \\ \bar{Q}_R &= -\sin \alpha' k_1 k_2 \frac{\chi_2 - \chi_1}{\chi_2 k_2 - \chi_1 k_1} (\bar{Q}_c \cos \alpha - \bar{Q}_e \sin \alpha) + \\ &\quad + \cos \alpha' k_3 k_4 \frac{\chi_4 - \chi_3}{\chi_4 k_4 - \chi_3 k_3} (\bar{Q}_c \sin \alpha + \bar{Q}_e \cos \alpha)\end{aligned}$$

Aus den Relationen (187) ergibt sich, wenn sowohl x als x' im Gebiete I liegen:

$$\begin{aligned}|\bar{Q}_a|^2 + |\bar{Q}_a|^2 &= \frac{1 - x^2}{\sinh^2 \left(\frac{D}{2} \sqrt{1 - x^2} \right) + 1 - x^2} (\bar{Q}_c \cos \alpha - \bar{Q}_e \sin \alpha)^2 + \\ &\quad (188) \\ &\quad + \frac{1 - x'^2}{\sinh^2 \left(\frac{D'}{2} \sqrt{1 - x'^2} \right) + 1 - x'^2} (\bar{Q}_c \sin \alpha + \bar{Q}_e \cos \alpha)^2\end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \bar{\mathcal{Q}}_R^2 + |\bar{\mathcal{Q}}_R|^2 = & - \frac{q_c \cdot a}{(q_c + \bar{q}_1) \cdot a} \left\{ \frac{\sinh^2 \left(\frac{D}{2} \sqrt{1-x^2} \right)}{\sinh^2 \left(\frac{D}{2} \sqrt{1-x^2} \right) + 1 - x^2} \right. \\ & \cdot (\bar{\mathcal{Q}}_c \cos \alpha - \bar{\mathcal{Q}}_c \sin \alpha)^2 + \frac{\sinh^2 \left(\frac{D'}{2} \sqrt{1-x'^2} \right)}{\sinh^2 \left(\frac{D'}{2} \sqrt{1-x'^2} \right) + 1 - x'^2} \\ & \left. \cdot (\bar{\mathcal{Q}}_c \sin \alpha + \bar{\mathcal{Q}}_c \cos \alpha)^2 \right\} \end{aligned} \quad (188)$$

Liegen sowohl x als x' im Gebiete II, so ist in den Formeln (188), den Gleichungen (179) entsprechend, $1-x^2$ mit x^2-1 , $1-x'^2$ mit x'^2-1 und der hyperbolische Sinus mit dem trigonometrischen zu vertauschen. Liegt nur x' im Gebiete II, so sind die betreffenden Vertauschungen nur in den zweiten Gliedern der Formeln (188) durchzuführen.

Fällt unpolarisiertes Röntgenlicht ein, so können wir im Zeitmittel wieder:

$$[(\bar{\mathcal{Q}}_c \cos \alpha - \bar{\mathcal{Q}}_c \sin \alpha)^2]_{\text{m}} = [(\bar{\mathcal{Q}}_c \sin \alpha + \bar{\mathcal{Q}}_c \cos \alpha)^2]_{\text{m}} = \frac{1}{2} [\mathcal{Q}_c^2]_{\text{m}}$$

setzen, wodurch die Formeln (188) mit jenen identisch werden, welche unter gleichen Voraussetzungen für den Spezialfall, daß q_c, \bar{q}_1, a in derselben Ebene liegen, folgen.

Der Fall, daß ein unpolarisierter Röntgenstrahl senkrecht einfällt und n Nebenwellen auftreten, welche jedoch den Symmetriebedingungen genügen, wäre auch jetzt wieder leicht zu erledigen, würde aber nichts wesentlich neues lehren.

6. Allgemeine Diskussion der Theorie.

Die Ergebnisse unserer Deduktionen zeigen eine sehr weitgehende Übereinstimmung mit jenen, welche P. P. Ewald auf Grund der korpuskulartheoretischen Krystallgitterhypothese erhielt. Das war insoferne zu erwarten, als die Annahme einer allgemeinen periodischen Struktur der Krystalle die diskontinuierliche Gitterstruktur als Spezialfall mit umfaßt. Ein physikalisch wesentlicher Unterschied besteht jedenfalls darin, daß wir nur eine Periodizität gewisser Materialkonstanten voraussetzten, während die Korpuskulartheorie die einzelnen Atome oder Ionen, welche das Gitter bilden, als schwingungsfähige Individuen auffaßt, die unter dem

Einfluß des »erregenden« Feldes Wellen aussenden, deren Zusammenwirken die tatsächlich beobachteten Erscheinungen bedingt. Es wäre eine reizvolle und wohl nicht allzu schwierige Aufgabe der mathematischen Verwandtschaft dieser beiden physikalisch so grundverschiedenen Lösungen im einzelnen nachzugehen. Hier sollen die Zusammenhänge nur durch eine auch physikalisch interessante, rein kontinuieritätstheoretische Variante beleuchtet werden. Nehmen wir an, wir wären durch Spezialisierung für das Röntgengebiet zu folgenden Differentialgesetzen gelangt:

$$\frac{\partial e}{\partial t} + k\sigma_r = c_0 \operatorname{rot} m \quad (Ia)$$

$$\frac{\partial m}{\partial t} = -c_0 \operatorname{rot} e \quad (IIa)$$

$$g \frac{\partial \sigma_r}{\partial t} + r\tau_r = ke \quad (IIIa)$$

$$g' \frac{\partial \tau_r}{\partial t} - r\sigma_r = 0 \quad (IVa)$$

σ_r, τ_r sollen wieder vektorische Zustandsvariable bedeuten. Sind nun die Materialkonstanten g, g', r, k sämtlich proportional mit β , wie es in Gleichung (25) definiert wurde und hat β speziell nur innerhalb gewisser Raumteile (merklich) von Null verschiedene Werte, so sind die Gleichungen (IIIa), (IVa) eben die Schwingungsgleichungen jener Raumteile, welche vermöge ke mit dem elektrischen Vektor, dem »erregenden« Feld verkoppelt sind. Die Rückkoppelung durch $k\sigma_r$ ist eine Forderung des Energieprinzips. In den Raumteilen, wo β von Null verschieden ist, haben wir dann gewissermaßen die mitschwingenden Atome, wo es Null ist, bleiben nur die ungestörten Maxwell'schen Gleichungen übrig. Die angeschriebenen Differentialgesetze, welche formal mit jenen der korpuskularen Dispersionstheorie übereinstimmen, entsprechen bei solchen Voraussetzungen einer räumlichen Struktur, die der korpuskular-theoretischen Auffassung einigermaßen nahekommt.

Integrieren wir nun diese Differentialgesetze wieder mittels der Ansätze (27), so folgt aus (IIIa) und (IVa):

$$\hat{\sigma}_r = i \frac{pk g'}{p^2 g g' - r^2} \dot{e}$$

und dann aus (Ia) und (IIa), wenn wir noch:

$$\beta = \frac{g}{g_0} = \frac{g'}{g'_0} = \frac{r}{r_0} = k_0$$

setzen:

$$\left(1 + \beta \frac{k_0^2 g_0'}{r_0^2 - p^2 g_0 g_0'}\right) \dot{\epsilon} = \frac{c_0^2}{p^2} \nabla \times \nabla \times \dot{\epsilon}$$

Eine Gleichung, welche, da $\frac{k_0^2 g_0'}{r_0^2 - p^2 g_0 g_0'}$ räumlich konstant ist, der Relation (31) in mathematischer Hinsicht vollkommen entspricht.

Wir können etwa noch $p^2 g_0 g_0'$ klein gegen r_0^2 und $\frac{k_0^2 g_0'}{r_0^2} = 1$

voraussetzen, was aber keineswegs notwendig ist und dann alle unsere Deduktionen formal identisch wiederholen. Man gelangt zu genau denselben Ergebnissen, da, wie man leicht erkennt, ϵ jetzt auch bezüglich der Grenzbedingungen und des Energieflusses an die Stelle von \mathcal{U} tritt. Ich bin in dieser Arbeit von den auf optischem Gebiete gut bewährten Jaumann'schen Differentialgesetzen ausgegangen, die soeben besprochene Variante entspricht dem Typus der Differentialgesetze, wie ich sie in meiner Wärmestrahlungsarbeit¹ verwendet habe. Natürlich wäre auch die hier ad hoc eingeführte Variante einer entsprechenden Ausgestaltung fähig, worauf in diesem Zusammenhange nicht eingegangen werden kann. Wir sehen jedenfalls, wie wenig durch das Zutreffen von Deduktionen auf einem Teilgebiet die richtige Form der zugrunde liegenden Differentialgesetze festgelegt erscheint. Erst das Zusammenschweißen möglichst vieler Erscheinungsgebiete zu einem einheitlichen, geschlossenen System von Differentialgesetzen vermag das mit einiger Sicherheit zu leisten. Ein Eingehen auf numerische Einzelheiten wäre derzeit wohl verfrüht. Unser Ansatz für β ist so allgemein, daß er alle möglichen Gitter mit beliebiger Basis als Spezialfälle enthält. Vom Kontinuitätstheoretischen Standpunkt wird man natürlich keinen nahezu oder vollkommen diskontinuierlichen, vielmehr einen wesentlich glatten Verlauf der Ortsfunktion β vermuten. Durch die Ortsfunktionen β sind die Koeffizienten B_n der Fourierreihe gegeben, welche wieder in den Intensitätsformeln für die abgebeugte (reflektierte) Röntgenwelle auftreten. Nun sind aber einerseits immer nur relativ wenige Glieder der Fourierreihe der Beobachtung zugänglich, andererseits hängen die Intensitäten, wie wir gesehen haben, auch noch von anderen Faktoren ab. Ich verweise insbesondere auf den Spezialfall mehrerer Nebenwellen, welchen wir durchgerechnet haben und merke an, daß die gegenseitige Beeinflussung der Intensitätsverhältnisse im Falle mehrerer Nebenwellen bei weniger einfachen Voraussetzungen jedenfalls merklich komplizierter wird. Ist auch das Stehenbleiben bei der ersten Näherung im allgemeinen wohl unbedenklich, so waren doch unsere Ausgangsgleichungen selbst schon weitgehend idealisiert und schließlich haben wir für die Berechnung des Energieflusses wieder neue

¹ E. Lohr, »Wärmestrahlung und Kontinuitätstheorie«. Wiener Denkschriften, 1923.

vereinfachende Annahmen benutzt (z. B. schon beim Ansatz für die Intensität der einfallenden Röntgenwelle). Mit Berücksichtigung aller dieser Umstände erscheint es wohl aussichtslos, aus dem derzeit vorliegenden Material über Intensitätsmessungen auf den Gesamtverlauf der Ortsfunktion β in den verschiedenen Krystallen schließen zu wollen.

Was die Wellenlängen der Röntgenstrahlen betrifft, so führen unsere diesbezüglichen Formeln, welche ja mit jenen der Korpuskulartheorie im wesentlichen formal identisch sind, natürlich auch zu denselben relativen Wellenlängen. Über die absolute Größe der Röntgenfrequenzen läßt sich vom Kontinuitätstheoretischen Standpunkt aus solchen Messungen so lange nichts Bestimmtes schließen, als uns keine anderweitigen Erfahrungen über die absolute Größe der Konstanten ν_1, ν_2, ν_3 zur Verfügung stehen. Solche Erfahrungen werden wir aber erst gewinnen können, wenn der Einfluß der periodischen Struktur auf andere Erscheinungsgebiete kontinuitätstheoretisch erschlossen sein wird. Auf die geringfügigen Abweichungen, welche die relative Wellenlängenbestimmung zu beeinflussen vermögen, wurde ausdrücklich hingewiesen. Sie ergeben sich dann, wenn die Intensitätsverteilung auch in erster Näherung nicht genau zur Richtung $q_c + \bar{q}_1$ symmetrisch verläuft. Wir haben an einem einfachen Spezialfalle erkannt, daß solche Abweichungen durch die gegenseitige Beeinflussung mehrerer Nebenwellen hervorgerufen werden können. So interessant und charakteristisch diese kleinen Abweichungen auch sind, darf bei ihrer Bewertung doch wieder nicht vergessen werden, wie weitgehend idealisiert schon unsere Ausgangsgleichungen waren.

Zu den Idealisierungen, die wir uns zur Vereinfachung unserer Aufgabe gestattet haben, gehört auch die Voraussetzung des exakten Verschwindens der Absorption. Die Absorption kann leicht berücksichtigt werden, wenn man die Differentialgesetze (III₂) und (IV₂) des 2. Kapitels durch:

$$(1 + \beta) \left[\varphi \cdot \frac{\partial \sigma_r}{\partial t} + \gamma \sigma_r + r \tau_r \right] + 2 k^{-1} \times m = 0 \quad (\text{III}'_2)$$

$$(1 + \beta) \left[\varphi' \frac{\partial \tau_r}{\partial t} + \gamma' \tau_r - r \sigma_r \right] + 2 l^{-1} \times m = 0 \quad (\text{IV}'_2)$$

ersetzt. γ und γ' bedeuten dann die für die Absorption verantwortlichen Materialkonstanten. Bei der Integration ergibt sich dann statt der durch Gleichung (19) definierten Dyade Φ eine Dyade Φ

welche aus Φ hervorgeht, wenn man in (19) A_1 durch $A_1 + i \frac{\gamma}{p}$

und so fort, A'_1 durch $A'_1 + i \frac{\gamma'}{p}$ u. s. f. ersetzt. Da wir $\frac{\gamma'^2}{p^2}$ für Röntgen-

frequenzen sicher gegen A_1^2, A_2^2, A_3^2 und $\frac{y'^2}{p^2}$ gegen $A_1'^2, A_2'^2, A_3'^2$ vernachlässigen dürfen, ergibt sich statt (19):

$$\Phi' = \Phi - \frac{2i}{p^3} \left[\left(\frac{y k^2}{A_1^2} + \frac{y' l^2}{A_1'^2} \right) i; i + \left(\frac{y k^2}{A_2^2} + \frac{y' l^2}{A_2'^2} \right) j; j + \left(\frac{y k^2}{A_3^2} + \frac{y' l^2}{A_3'^2} \right) k; k \right]$$

Fordern wir jetzt außer (20) noch:

$$2 \left(\frac{y k^2}{A_1^2} + \frac{y' l^2}{A_1'^2} \right) = 2 \left(\frac{y k^2}{A_2^2} + \frac{y' l^2}{A_2'^2} \right) = 2 \left(\frac{y k^2}{A_3^2} + \frac{y' l^2}{A_3'^2} \right) = c_0^2 \gamma,$$

so folgt statt (31):

$$(1 + \beta) \hat{\mathcal{L}} = \frac{c_0^2}{p^2} \left(1 - i \frac{\gamma}{p} \right) \nabla \times \nabla \times \hat{\mathcal{L}}. \tag{31''}$$

Der Unterschied der Gleichung (31'') gegenüber (31) besteht also lediglich darin, daß $\frac{c_0^2}{p^2} \left(1 - i \frac{\gamma}{p} \right)$ an die Stelle von $\frac{c_0^2}{p^2}$ getreten ist. Man könnte allerdings auch noch y und y' und damit γ selbst als periodisch veränderliche Ortsfunktionen auffassen, also etwa:

$$\gamma = \gamma_0 + \beta \gamma_1$$

setzen, was für eine weitere Ausarbeitung der Theorie im Auge zu behalten wäre. Jedenfalls werden die ω_i und die k_i jetzt auch im Lauefall komplex. Der »Pendelcharakter« der Laue-Lösung wird durch die Absorption verwischt und die Intensität der austretenden Wellen naturgemäß verringert. Wir wollen die etwas umständlichen Rechnungen hier nur für den Fall, daß q_c, \bar{q}_1, a in derselben Ebene liegen, an dem Beispiel der senkrecht zu dieser Ebene schwingenden Komponente von \mathcal{L} illustrieren, wobei wir zur Vereinfachung noch μ gleich Null und γ etwa von gleicher Größenordnung mit B annehmen. Statt (66) erhalten wir zunächst:

$$\left[1 - \frac{c_0^2}{p^2} \left(1 - i \frac{\gamma}{p} \right) q_0^2 \right] \left[1 - \frac{c_0^2}{p^2} \left(1 - i \frac{\gamma}{p} \right) q_1^2 \right] - B^2 = 0$$

und daraus mit Benützung der Maßbestimmung (73) genähert:

$$\left(2 q_c \cdot a \omega - i \frac{\mu}{p} \right) \left(2 (q_c + \bar{q}_1) \cdot a \omega + \mu - i \frac{\mu}{p} \right) - B^2 = 0 \tag{189}$$

Für $\mu = 0$ folgt aus (189):

$$\omega = i \frac{p}{4 q_c \cdot a (q_c + \bar{q}_1) \cdot a} \pm \sqrt{- \left(\frac{\gamma}{p} \frac{\bar{q}_1 \cdot a}{4 q_c \cdot a (q_c + \bar{q}_1) \cdot a} \right)^2 + \frac{B^2}{4 q_c \cdot a (q_c + \bar{q}_1) \cdot a}} \quad (190)$$

$$e^{-i\varphi} k = -i \frac{\gamma}{2 B p} \frac{\bar{q}_1 \cdot a}{(q_c + \bar{q}_1) \cdot a} \pm \sqrt{- \left(\frac{\gamma}{2 B p} \frac{\bar{q}_1 \cdot a}{(q_c + \bar{q}_1) \cdot a} \right)^2 + \frac{q_c \cdot a}{(q_c + \bar{q}_1) \cdot a}} \quad (191)$$

Dem Lauefall $((q_c + \bar{q}_1) \cdot a > 0)$ entsprechen jetzt zwei verschiedene Lösungen, je nachdem der Radikand positiv oder negativ ist. Schreiben wir im ersten Falle (190) in der Form:

$$\omega = i\kappa \pm \bar{\omega}, \quad (190a)$$

so ergibt sich mit Benützung der entsprechenden Formeln des 4. Kapitels:

$$|\bar{Q}_A|^2 = \frac{q_c \cdot a}{(q_c + \bar{q}_1) \cdot a} \cdot \frac{\sin^2(\bar{\omega} d)}{1 - \frac{\left(\frac{\gamma}{2 B p} \bar{q}_1 \cdot a \right)^2}{q_c \cdot a (q_c + \bar{q}_1) \cdot a}} e^{-2\kappa d} \bar{Q}_e^2 \quad (192)$$

Im zweiten Falle schreiben wir:

$$\omega = i \frac{p}{4 q_c \cdot a (q_c + \bar{q}_1) \cdot a} \pm i \sqrt{\left(\frac{\gamma}{p} \frac{\bar{q}_1 \cdot a}{4 q_c \cdot a (q_c + \bar{q}_1) \cdot a} \right)^2 - \frac{B^2}{4 q_c \cdot a (q_c + \bar{q}_1) \cdot a}} \quad (190b)$$

$$\omega = i(\kappa \pm \tilde{\kappa})$$

und erhalten dann:

$$|\bar{Q}_A|^2 = \frac{q_c \cdot a}{(q_c + \bar{q}_1) \cdot a} \cdot \frac{\sinh^2(\tilde{\kappa} d)}{\frac{\left(\frac{\gamma}{2 B p} \bar{q}_1 \cdot a \right)^2}{q_c \cdot a (q_c + \bar{q}_1) \cdot a} - 1} e^{-2\kappa d} \bar{Q}_e^2 \quad (193)$$

Konvergiert γ gegen Null, so geht (192) in die Pendellösung (132) über, in (193) ist der Pendelcharakter vollständig verschwunden.

Nach beiden Formeln erreicht $|\mathfrak{L}_A|^2$ für eine bestimmte Plattendicke ein Maximum, sie bestimmt sich im ersten Falle aus:

$$\tan(\tilde{\omega}d) = \frac{\tilde{\omega}}{\kappa}$$

wo der kleinste Wert von d zu nehmen ist, welcher die Relation erfüllt. Die entsprechende Relation im zweiten Falle lautet:

$$\tanh(\tilde{\kappa}d) = \frac{\tilde{\kappa}}{\kappa}$$

Konvergiert $\tilde{\omega}$, beziehungsweise $\tilde{\kappa}$ gegen Null, so nimmt $|\mathfrak{L}_A|^2$ nach (192) und nach (193) denselben endlichen Grenzwert an:

$$|\bar{\mathfrak{L}}_A|^2 = \frac{q_c \cdot \alpha}{(q_c + \bar{q}_1) \cdot \alpha} \frac{B^2 d^2 \cdot e^{-2\kappa d}}{4 q_c \cdot \alpha (q_c + \bar{q}_1) \cdot \alpha} \bar{\mathfrak{L}}_c^2. \quad (194)$$

Für die Relation (194) liegt das Maximum bei $d = \frac{1}{\kappa}$ und beträgt:

$$|\bar{\mathfrak{L}}_A|^2 = \frac{q_c \cdot \alpha}{(q_c + \bar{q}_1) \cdot \alpha} e^{-2} \bar{\mathfrak{L}}_c^2.$$

Wir wenden uns nun dem Braggfall zu ($(q_c + \bar{q}_1) \cdot \alpha < 0$), dann ist der Radikand in (190b) jedenfalls positiv und wir erhalten aus den entsprechenden Formeln des 5. Kapitels:

$$|\bar{\mathfrak{L}}_R|^2 = \frac{q_c \cdot \alpha}{-(q_c + \bar{q}_1) \cdot \alpha} \cdot \quad (195)$$

$$\frac{\sinh^2(\tilde{\kappa}d)}{\left[\frac{-\gamma}{2Bp} \frac{\bar{q}_1 \cdot \alpha}{\sqrt{-q_c \cdot \alpha (q_c + \bar{q}_1) \cdot \alpha}} \sinh(\tilde{\kappa}d) + \sqrt{\left(\frac{-\gamma}{2Bp} \frac{\bar{q}_1 \cdot \alpha}{\sqrt{-q_c \cdot \alpha (q_c + \bar{q}_1) \cdot \alpha}} \right)^2 + 1} \cosh(\tilde{\kappa}d) \right]^2} \bar{\mathfrak{L}}_c^2.$$

Für verschwindendes γ geht die Formel (195) in (178) über, wenn dort wegen $\mu = 0$, $\kappa = 0$ gesetzt wird. Man erkennt leicht, daß $|\bar{\mathfrak{L}}_R|^2$ bei gegebener Plattendicke mit zunehmendem γ abnimmt und bei gegebenem γ mit zunehmender Plattendicke zunimmt.

Für $d = \infty$ erhalten wir:

$$|\bar{\mathfrak{L}}_R|^2 = \frac{q_c \cdot \alpha}{-(q_c + \bar{q}_1) \cdot \alpha} \left[\frac{-\gamma}{2Bp} \frac{\bar{q}_1 \cdot \alpha}{\sqrt{-q_c \cdot \alpha (q_c + \bar{q}_1) \cdot \alpha}} - \right.$$

$$-\sqrt{\left(\frac{-r}{2Bp} \frac{\bar{q}_1 \cdot a}{\sqrt{-q_c \cdot a(q_c + \bar{q}_1) \cdot a}}\right)^2 + 1} \bar{Q}_c^2,$$

also auch in diesem Falle ($\bar{q}_1 \cdot a$ ist negativ) keine Totalreflexion mehr. Mit diesen Andeutungen über den Einfluß der Absorption können wir uns hier begnügen.

Um die Longitudinalstrahlen, welche wir außer Betracht gelassen haben, nachträglich wieder einzuführen, brauchen wir nur das Gleichungssystem (I') bis (IV'₂) am Schlusse des 2. Kapitels durch:

$$(1+\beta) \left[g_s \frac{\partial \sigma_s}{\partial t} + r \tau_s \right] + a \nabla \cdot [(1+\beta) \varepsilon_0 \cdot e] = 0 \quad (\text{III}'_1)$$

$$(1+\beta) \left[g'_s \frac{\partial \tau_s}{\partial t} - r \sigma_s \right] + b \nabla \cdot [(1+\beta) \varepsilon_0 \cdot e] = 0 \quad (\text{IV}'_1)$$

zu ergänzen und außerdem (I') durch:

$$(1+\beta) \varepsilon_0 \cdot \left[\frac{\partial e}{\partial t} + \nabla (a \sigma_s + b \tau_s) \right] = c_0 \text{ rot } m \quad (\bar{\text{I}}')$$

zu ersetzen. Nehmen wir bei der Integration gemäß dem Ansatz (27) jetzt:

$$\hat{\sigma}_s = \hat{\tau}_s = 0 \quad (196)$$

an, so folgt aus ($\bar{\text{I}}'$) sofort:

$$\nabla \cdot [(1+\beta) \varepsilon_0 \cdot \hat{e}] = 0.$$

Das heißt die Annahme (196) ist mit den Gleichungen (III'₁), (IV'₁) verträglich und das neue Gleichungssystem reduziert sich durch diese Annahme wieder auf das alte, welches unseren Deduktionen zugrunde lag. Umgekehrt würde für:

$$\hat{\sigma}_r = \hat{\tau}_r = 0 \text{ und } \hat{m} = 0 \quad (197)$$

zunächst wegen (3):

$$\hat{e} = \hat{Q}$$

dann aus ($\bar{\text{I}}'$):

$$-ip \hat{Q} + \nabla (a \hat{\sigma}_s + b \hat{\tau}_s) = 0$$

folgen, wodurch auch die Gleichung (II') identisch erfüllt wird. Für die der Annahme (197) entsprechenden »Longitudinalstrahlen« würden wir erhalten:

$$\hat{e} + \nabla \left(\frac{W}{1+\beta} \nabla \cdot [(1+\beta) \varepsilon_0 \cdot \hat{e}] \right) = 0 \quad (198)$$

worin W durch Gleichung (11) bestimmt ist.

Sowohl im Energiefluß [Gleichung (2)] als in den Grenzbedingungen [Relationen (4)] ist jetzt ε_0 selbstverständlich durch $(1+\beta)\varepsilon_0$ zu ersetzen.

Die Integration der Gleichung (198) wirklich durchzuführen, kann hier nicht unsere Aufgabe sein, es genügt uns, gezeigt zu haben, daß zufolge unserer Differentialgesetze sich Transversalstrahlen und Longitudinalstrahlen auch in Krystallen unabhängig voneinander auszubreiten vermögen. Wichtig ist, daß sich diese Unabhängigkeit, wie man unmittelbar einsieht, auch auf die Erfüllung der Grenzbedingungen erstreckt, es folgt ja aus (\bar{I}') für Transversalwellen automatisch der stetige Übergang der Normalkomponente von $(1+\beta)\varepsilon_0 \cdot e$ und für Longitudinalwellen automatisch der stetige Übergang der Parallelkomponente von \mathfrak{L} . Es genügen aber schon geringe Abweichungen von dem idealisierten Typus unserer Differentialgesetze, um diese Unabhängigkeit, namentlich was die Grenzbedingungen betrifft, zu stören. Die Berücksichtigung der Absorption in der behandelten Form ändert zwar nichts an unseren diesbezüglichen Schlüssen, aber schon die Einfügung eines metallischen Leitungsgliedes von der Form $(1+\beta)\bar{\gamma} \cdot e$ in die Gleichung (\bar{I}) hebt die Unabhängigkeit der Grenzbedingungen jedenfalls auf. Es werden dann Longitudinalstrahlen durch Transversalstrahlen lediglich zufolge der Grenzbedingungen »exzitert« und umgekehrt.¹ Natürlich wird die weitere Ausgestaltung der Theorie auch das ganze Gebiet der »Fluoreszenzstrahlungen« berücksichtigen müssen, wodurch eine tiefgreifende Umformung der Differentialgesetze notwendig werden wird.

Zusammenfassung.

Die Jaumann'sche Idee einer periodischen Struktur der Krystalle wird zur Grundlage der mathematischen Behandlung der Röntgenstrahlausbreitung in Krystallen gemacht. Das 1. Kapitel erörtert allgemein den Kontinuitätstheoretischen Standpunkt für dieses Erscheinungsbereich. Im 2. Kapitel werden die Jaumann'schen Differentialgesetze in der vom Verfasser für die Krystalloptik geprägten Form als Ausgangspunkt gewählt und es wird dann lediglich über die Materialkonstanten in geeigneter Weise verfügt, wobei insbesondere gewisse Materialeigenschaften als periodisch veränderliche Ortsfunktionen aufgefaßt werden.

Das 3. Kapitel bringt eine näherungsweise Integration der aufgestellten Differentialgesetze. Es zeigt sich, daß die periodische Struktur im optischen Gebiete keinen merklichen Einfluß ausübt, da die durch die periodische Struktur bewirkte Zerstreuung hinreichend klein gehalten werden kann. Im Röntgengebiet (hohe

¹ Siehe auch E. Lohr, »Das Problem der Grenzbedingungen in G. Jaumanns elektromagnetischer Theorie II.« Wiener Ber., 1912, p. 662.

Frequenzen) können aber neben der Hauptwelle noch andere ebene Wellen mit vergleichbarer Amplitude auftreten, die Nebenwellen genannt werden. Die Bedingung für das Zustandekommen dieser abgelenkten Wellen entspricht vollkommen der Laue'schen. Die weiteren Rechnungen, auch in den folgenden Kapiteln, beschränken sich meist auf den Fall, daß die Hauptwelle nur von einer Nebenwelle begleitet wird und bleiben durchwegs bei der ersten Näherung stehen.

Das 4. Kapitel löst das Grenzproblem im Lauefall, das 5. Kapitel im Braggfall, und zwar naturgemäß mit voller Berücksichtigung der Polarisationsverhältnisse. Die Ergebnisse stimmen, soweit es sich um derzeit nachprüfbar erscheinende Erscheinungen handelt, mit jenen der Korpuskulartheorie sehr weitgehend überein. Im letzten Kapitel wird zunächst gezeigt, daß auch ganz anders geformte Differentialgesetze zu denselben Deduktionen führen würden und auf die formale Verwandtschaft dieser Variante mit korpuskulartheoretischen Vorstellungen hingewiesen. Es wird dann betont, daß erst die Erforschung des Einflusses der periodischen Struktur auf andere Erscheinungsgebiete die Kontinuitätstheorie in die Lage versetzen wird, über numerische Verhältnisse, speziell auch über die absolute Größe der Röntgenwellenlängen, bestimmte Aussagen zu machen. Schließlich wird noch der Einfluß der Absorption kurz erörtert und der Zusammenhang mit dem Gebiete der Longitudinalstrahlen angedeutet.

ZOBODAT - www.zobodat.at

Zoologisch-Botanische Datenbank/Zoological-Botanical Database

Digitale Literatur/Digital Literature

Zeitschrift/Journal: [Sitzungsberichte der Akademie der Wissenschaften mathematisch-naturwissenschaftliche Klasse](#)

Jahr/Year: 1924

Band/Volume: [133_2a](#)

Autor(en)/Author(s): Lohr Erwin

Artikel/Article: [Kontinuitätstheorie der Röntgenstrahlausbreitung in Kristallen. 517-572](#)