

Prvi maksimum u difraktogramu, tj. onaj sa najmanjim uglom, odgovara difrakciji sa ravni sa Milerovim indeksima (111). Bragov zakon i izraz koji povezuje rastojanje paralelnih ravni d_{hkl} sa parametrom rešetke a su

$$2d \sin \theta = \lambda, \quad (1)$$

$$\frac{1}{d_{hkl}^2} = \frac{h^2 + k^2 + l^2}{a^2}.$$

Sledi

$$\sin^2 \theta_j = \frac{\lambda^2}{4a^2} (h^2 + k^2 + l^2). \quad (2)$$

Relacija (2) za prvi difrakcioni maksimum ima oblik

$$\sin^2 \theta_1 = \frac{3\lambda^2}{4a^2}. \quad (3)$$

Deljenjem relacije (2) sa (3) dobijamo

$$\frac{3\sin^2 \theta_j}{\sin^2 \theta_1} = h^2 + k^2 + l^2. \quad (4)$$

Redni broj refleksije j	2θ	$\sin\theta$	d_{hkl} (nm)	$\sin^2\theta$	$3\sin^2\theta_j/\sin^2\theta_1$	hkl
1	27.32	0.2362	0.3261	0.0558	3.0	111
2						
3						
4						
5						
6						
7						
8						
9						