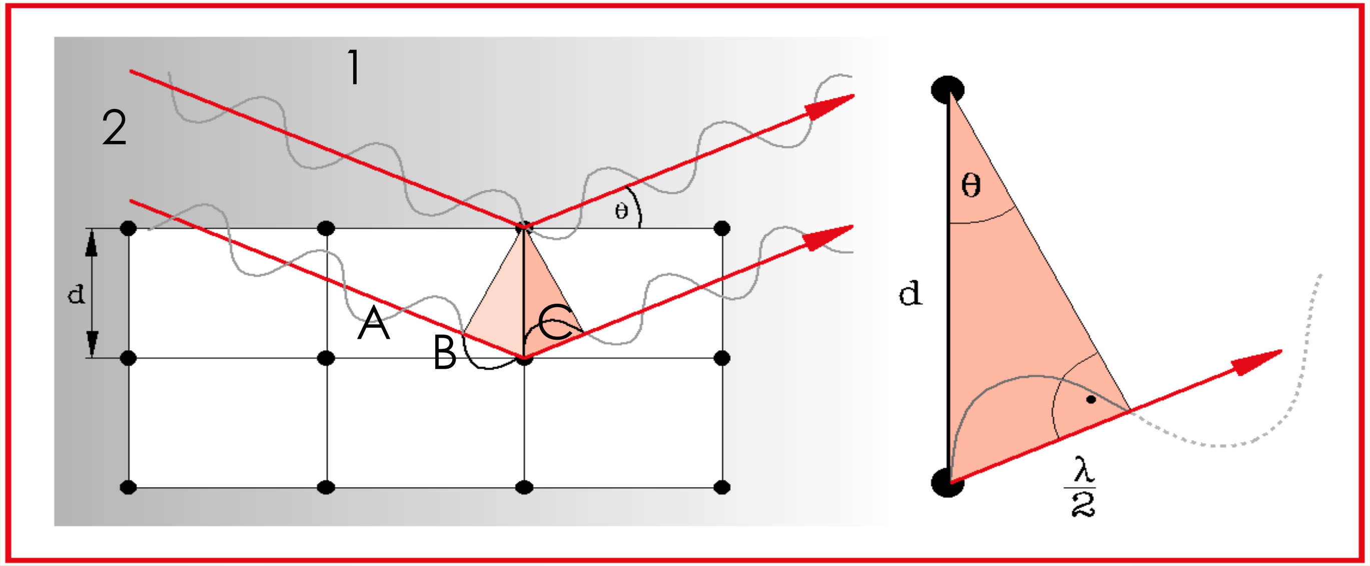
BRAGG YASASI

Bragg Yasası

- Kullanılan ışının dalga boyu 0.1-10 Å mertebesindedir.
- Saçılan X ışınlarının yapıcı girişimi için ardışık düzlemlerden yansıyan demetlerin kristal yüzeyini ayrıldıktan sonra , aynı fazda olmaları gerekir.
- $\lambda \leq 2d$ olması halinde söz konusudur.



AB+BC=nλ n=1,2,3…) n değeri *yansıma mertebesi*

AB=BC olduğundan sinθ=AB/ d

AB=dsinθ

nλ=2dsinθ

Fourier Analizi ve Saçılan Dalganın Genliği

- Bragg yasası örgü noktalarından saçılan ışınların girişim oluşturma şartını net olarak açıklar. Ancak, baz atomlarından oluşan saçılmanın şiddetini belirlemek için daha detaylı analiz gerekir. Yani her bir hücredeki elektronların uzaysal dağılımının hesaba katılması gerekir.
- Kristal peryodik olduğundan $\mathbf{T} = u_1 a_1 + u_2 a_2 + u_3 a_3$ ötelemesi geçerlidir.
- Fourier analizi periyodik fonksiyonlara uygulanır.

Kristalin birçok özelliği elektron yoğunluğuna bağlıdır. Elektron yoğunluğu n(r) fonksiyonu ile temsil edilir. Bu fonksiyon fourier serisine açılırsa, kristalin birçok özelliği fourier katsayıları cinsinden ifade edilebilir.

Soru: T = $u_1 a_1 + u_2 a_2 + u_3 a_3$ ötelemesi sonucunda elektron sayısı yoğunluğunun n(T), değişmediğini ispatlayınız. (1)

$$n(x) = n_o + \sum_{p\rangle 0}[C_p \cos(\frac{2\pi px}{a}) + S_p \sin(\frac{2\pi px}{a})$$

$n_o \rightarrow Sabit$

$p \rightarrow Pozitif \quad tamsayı$

$C_{p'}, S_p \rightarrow Fourier \quad katsayıatsı$

2π/a faktörü n(x) in a periyotlu olmasını sağlar.
2πp/a faktörü kristalin fourier uzayında veya ters uzayda bir nokta olarak düşünülebilir. Tek boyutta noktalar bir boyutta düşünülebilir.

$$n(x+a) = n_o + \sum_{p\rangle 0}[C_p \cos(\frac{2\pi p(x+a)}{a}) + S_p \sin(\frac{2\pi p(x+a)}{a})$$

$$n(x) = n_o + \sum_{p\rangle 0}[C_p \cos(\frac{2\pi px}{a} + 2\pi p) + S_p \sin(\frac{2\pi px}{a} + 2\pi p)$$

$$\left.\begin{aligned} \cos(a+b) &= \cos a \cos b - \sin a \sin b \\ \sin(a+b) &= \sin a \cos b + \sin b \cos a \end{aligned}\right\}$$ Eşitlikleri uygulanırsa

$$\cos\left(\frac{2\pi px}{a}+2\pi p\right)=\cos\left(\frac{2\pi px}{a}\right)\cos(2\pi p)-\sin\left(\frac{2\pi px}{a}\right)\sin(2\pi p)$$

$$\sin\left(\frac{2\pi px}{a}+2\pi p\right)=\sin\left(\frac{2\pi px}{a}\right)\cos(2\pi p)+\cos\left(\frac{2\pi px}{a}\right)\sin(2\pi p)$$

$$n \rightarrow tamsayı$$

$$\cos(2n\pi)=1$$

$$\sin(2n\pi)=0$$

$$n(x+a)=n_o+\sum_{p\rangle 0}[C_p\cos\left(\frac{2\pi px}{a}\right)+S_p\sin\left(\frac{2\pi px}{a}\right)=n(x)$$

$$n(x) = n_o + \sum_{p\rangle 0}[C_p \cos(\frac{2\pi px}{a}) + S_p \sin(\frac{2\pi px}{a})$$

$$\cos(2\pi px/a) = \frac{1}{2}[e^{i2\pi px/a} + e^{-i2\pi px/a}]$$

$$\sin(2\pi px/a) = \frac{1}{2}[e^{i2\pi px/a} - e^{-i2\pi px/a}]$$

$$n(x) = \sum_{P=-\infty}^{\infty} n_p e^{i2\pi px/a}$$

$n_p \rightarrow kompleks$ sabitler $\qquad n^*_{-p} = n_p$ Olmalıdır.

O zaman p ve –p cinsinden ifade edilen terimlerin toplamı reeldir. θ=2πpx/a dersek

$$n(x) = \sum_{P=-\infty}^{\infty} n_p e^{i2\pi px/a} = n_p(\cos\varphi + i\sin\varphi) + n_{-p}(\cos\varphi - i\sin\varphi)$$

$$n(x) = (n_p + n_{-p})\cos\varphi + i(n_p - n_{-p})\sin\varphi$$

$$n(x) = 2\,\mathrm{Re}(n_p)\cos\varphi + 2im(n_p)\sin\varphi$$

Reel kısım İmajiner kısım

Elektron yoğunluğu üç boyutlu yazılırsa $n(\vec{r}) = \sum_G n_G e^{-i\vec{G}.\vec{r}}$

Yapı Faktörü

- Yapı faktörü kristalde bulunan atomların durumlarını dikkate alır. Yapı faktörü, oluşan bir yansımada birim hücrenin bütün atomlarından saçılmayı tanımlar.
- Kırınıma uğrayan ve yansıyan her ışın bir F_{hkl} yapı faktörü ile tanımlanır. Yapı faktörünün büyüklüğü hkl yansıma şiddetinden elde edilir.
- Her yapı faktörü birim hücredeki bütün atomlardan saçılan X-ışınlarının katkılarının toplamı olarak kabul edilir.

$$F(v_1 v_2 v_3) = \sum_{J=1}^{s} e^{-i\vec{G}\,\vec{r}\,j} f_i$$

G ters uzayda, r gerçek uzayda bir vektör.

$$F(v_1v_2v_3) = \sum_{J=1}^{s} e^{-i\vec{G}\,\vec{r}_j} f_i \qquad \vec{G} = h\vec{b}_1 + k\vec{b}_2 + l\vec{b}_3$$

$$\vec{r}_j = x_j\vec{a}_1 + y_j\vec{a}_2 + z_j\vec{a}_3$$

$$F(v_1v_2v_3) = \sum_{j=1}^{s} f_j e^{-2\pi i(x_j h + y_j k + z_j l)}$$

$$F(v_1v_2v_3) = [1 + e^{-\pi i(h+k+l)}]f$$

Bcc yapı için atomların (000) ve (½ ½ ½) koordinatları dikkate alındığında yapı faktörü

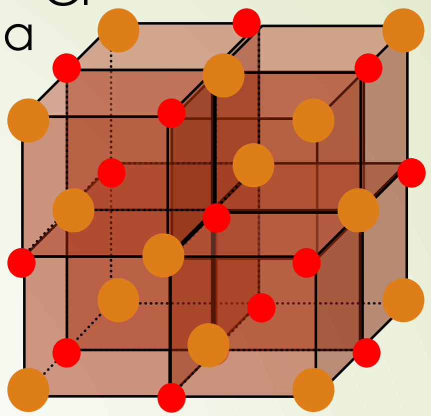
$$F(v_1v_2v_3) = [1 + e^{-\pi i(h+k+l)}]f \qquad e^{-i\pi n} = (-1)^n \begin{cases} -1 & n \text{ tek} \\ 1 & n \text{ çift} \end{cases}$$

Bcc yapı için $(h+k+l)$ toplamı tek sayı ise yapı faktörü sıfıra eşittir.

Bu toplamı tek sayı yapan düzlemler için yansıma olmaz.

Toplamı çift sayı ise maksimum şiddette yansıma olur ve yapı faktörü 2f olur.

Soru: NaCl yapının yapı faktörünü bulunuz.



- FCC yapıda kristalleşen NaCl kristalini incelediğimizde

Sodyum ve klor atomlarının koordinatları

- Na (½) ½ ½) (00 ½) (0 ½0) (½00)
- Cl (000) (0 ½ ½) (½ ½0) (½0 ½)

Na ve Cl atomlarından gelen saçılmalar farklı olacaktır. Her bir atomdan gelen saçılmalar ayrı ayrı bulunup toplanır.

$$F(v_1 v_2 v_3) = \sum_{J=1}^{s} e^{-i\vec{G}\vec{r}_j} f_i$$

$$e^{-i\pi n} = (-1)^n \quad \begin{cases} -1 & \text{n tek} \\ 1 & \text{n çift} \end{cases}$$

$$F(hkl) = F(Na) + F(Cl)$$

$$= F_{Na}(e^{-i\pi(h+k+l)} + e^{-i\pi(h)} + e^{-i\pi(k)} + e^{-i\pi(l)}) + F_{Cl}(e^{0} + e^{-i\pi(h+k)} + e^{-i\pi(h+l)} + e^{-i\pi(h+l)})$$

h,k,l indisleri hepsi tek olursa F(hkl)=4F_{Cl}-4F_{Na}≠0 ve indisler kısmen tek yada çift olursa F(hkl)=0 olur.

Kaynaklar

- X-ışınları Difraksiyonu- B. D. Cullity
- Katıhal Fiziğine Giriş- Charles Kittel
- Katıhal Fiziği- Mustafa Dikici
- Katıhal Fiziği- J.R. Hook&H.E. Hall
- Katıhal Fiziği-Şakir Aydoğan
- X-ışınları Kristalografisi- Mehmet Kabak
- Katıhal Fiziğine Giriş- Tahsin Nuri Durlu
- https://www.fizikbilimi.gen.tr/madde-ve-ozellikleeri/
- http://fizikodevleri.blogcu.com/madde-nedir/5068422
- http://kisi.deu.edu.tr/aytac.gokce/
- https://tex.stackexchange.com/questions/151935/drawing-brillouin-zones-in-tikz