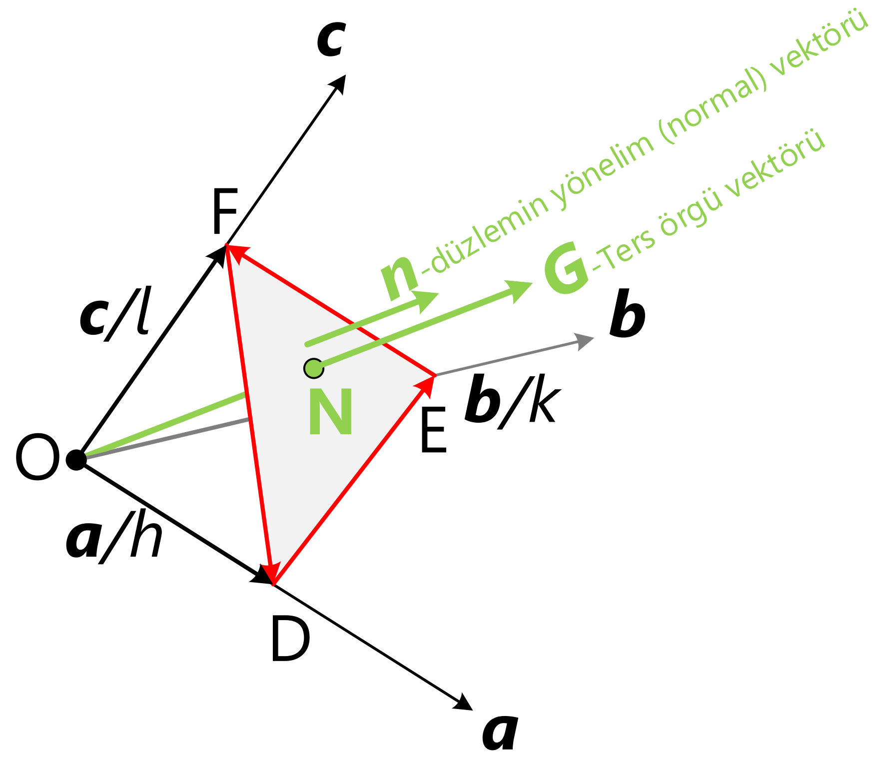
BÖLÜM 3-Ters Örgü Vektörü

$\boldsymbol{G} = h\boldsymbol{A} + k\boldsymbol{B} + l\boldsymbol{C}$ ters örgü vektörü (hkl) Miller indisleri ile tanımlana düzleme diktir. (hkl) düzlemi $\boldsymbol{a}, \boldsymbol{b}$ ve $\boldsymbol{c}$ kristal yönelim eksenlerini $\boldsymbol{a}/h, \boldsymbol{b}/k$ ve $\boldsymbol{c}/l$ noktalarından keser.



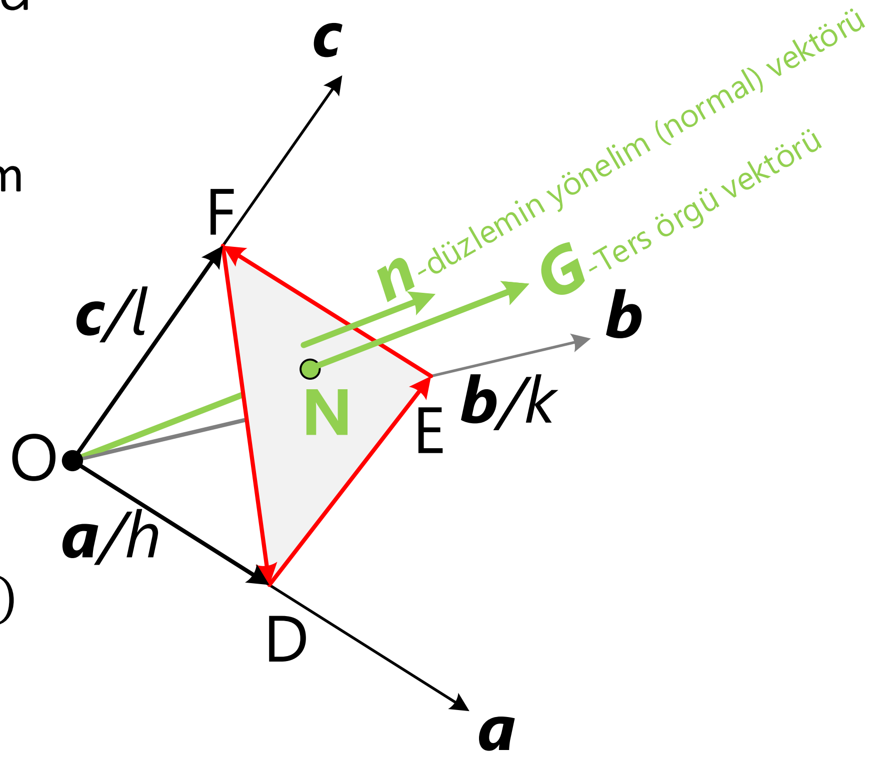
$$\boldsymbol{DE} = \boldsymbol{OE} - \boldsymbol{OD} = \frac{\boldsymbol{b}}{k} - \frac{\boldsymbol{a}}{h}$$

$$\boldsymbol{EF} = \boldsymbol{OF} - \boldsymbol{OE} = \frac{\boldsymbol{c}}{l} - \frac{\boldsymbol{b}}{k}$$

$$\boldsymbol{FD} = \boldsymbol{OD} - \boldsymbol{OF} = \frac{\boldsymbol{a}}{h} - \frac{\boldsymbol{c}}{l}$$

Vektörlerin birbirlerine dik olup olmadığını kontrol etmek için skaler çarpım yapılır: $\boldsymbol{G} \cdot \boldsymbol{DE} = (h\boldsymbol{A} + k\boldsymbol{B} + l\boldsymbol{C}) \cdot (\frac{\boldsymbol{b}}{k} - \frac{\boldsymbol{a}}{h})$

BÖLÜM 3-Ters Örgü Vektörü



Vektörlerin birbirlerine dik olup olmadığını kontrol etmek için skaler çarpım

yapılır: $\boldsymbol{G}\cdot\boldsymbol{DE}=(h\boldsymbol{A}+k\boldsymbol{B}+l\boldsymbol{C})\cdot(\frac{\boldsymbol{b}}{k}-\frac{\boldsymbol{a}}{h})$

$V=\boldsymbol{a}\cdot(\boldsymbol{b}\times\boldsymbol{c})$ birim hücrenin hacmi olmak üzere

$$\boldsymbol{G}\cdot\boldsymbol{DE}=(h2\pi\frac{\boldsymbol{b}\times\boldsymbol{c}}{\boldsymbol{a}\cdot(\boldsymbol{b}\times\boldsymbol{c})}+k2\pi\frac{\boldsymbol{c}\times\boldsymbol{a}}{\boldsymbol{a}\cdot(\boldsymbol{b}\times\boldsymbol{c})}+l2\pi\frac{\boldsymbol{a}\times\boldsymbol{b}}{\boldsymbol{a}\cdot(\boldsymbol{b}\times\boldsymbol{c})})\cdot(\frac{\boldsymbol{b}}{k}-\frac{\boldsymbol{a}}{h})$$

$$\boldsymbol{G}\cdot\boldsymbol{DE}=\left(h2\pi\frac{\boldsymbol{a}}{V}+k2\pi\frac{\boldsymbol{b}}{V}+l2\pi\frac{\boldsymbol{c}}{V}\right)\cdot\left(\frac{\boldsymbol{b}}{k}-\frac{\boldsymbol{a}}{h}\right)=2\pi-2\pi=0$$

elde edilir. Ters örgü vektörü düz örgü noktalarına diktir.

BÖLÜM 3-Basit Kübik Kristal Sisteminin Ters Örgü Vektörü- $\boldsymbol{G}$

Basit kübik örgünün ilkel öteleme vektörleri $\boldsymbol{a} = a\boldsymbol{x}$, $\boldsymbol{b} = a\boldsymbol{y}$, $\boldsymbol{c} = a\boldsymbol{z}$ şeklinde yazılabilir. Burada $\boldsymbol{x}$, $\boldsymbol{y}$, $\boldsymbol{z}$ birim vektörleri göstermekte, a örgü sabitidir. Bu durumda basit kübik sistemin ilkel birim hücresinin hacmi

$$\boldsymbol{a} \cdot (\boldsymbol{b} \times \boldsymbol{c}) = a\boldsymbol{x} \cdot \left(a(\boldsymbol{y}) \times a(\boldsymbol{z})\right) = (a)^{\mathbf{3}}(\boldsymbol{x}) \cdot (\boldsymbol{y} \times \boldsymbol{z}) = (a)^{\mathbf{3}}(\boldsymbol{x}) \cdot (\boldsymbol{x}) = a^{\mathbf{3}}$$

$\mathrm{V} = |\boldsymbol{a} \cdot (\boldsymbol{b} \times \boldsymbol{c})| = a^3$ ve ters örgünün doğrultu vektörleri ise aşağıdaki gibidir:

$$\boldsymbol{A} = 2\pi \frac{\boldsymbol{b}\times\boldsymbol{c}}{\boldsymbol{a}\cdot(\boldsymbol{b}\times\boldsymbol{c})} , \boldsymbol{B} = 2\pi \frac{\boldsymbol{c}\times\boldsymbol{a}}{\boldsymbol{a}\cdot(\boldsymbol{b}\times\boldsymbol{c})} , \boldsymbol{C} = 2\pi \frac{\boldsymbol{a}\times\boldsymbol{b}}{\boldsymbol{a}\cdot(\boldsymbol{b}\times\boldsymbol{c})}$$

$$\boldsymbol{G} = (h\boldsymbol{A} + k\boldsymbol{B} + l\boldsymbol{C}) = 2\pi(h \frac{\boldsymbol{b}\times\boldsymbol{c}}{\boldsymbol{a}\cdot(\boldsymbol{b}\times\boldsymbol{c})} + k \frac{\boldsymbol{c}\times\boldsymbol{a}}{\boldsymbol{a}\cdot(\boldsymbol{b}\times\boldsymbol{c})} + l \frac{\boldsymbol{a}\times\boldsymbol{b}}{\boldsymbol{a}\cdot(\boldsymbol{b}\times\boldsymbol{c})})$$

BÖLÜM 3-Basit Kübik Kristal Sisteminin Ters Örgü Vektörü- $\boldsymbol{G}$

Böylece basit kübik örgünün ters örgüsünün de basit kübik olduğu görülmektedir. Ters örgü öteleme vektörlerinin büyüklüğü$|\boldsymbol{A}| = |\boldsymbol{B}| = |\boldsymbol{C}| = \frac{2\pi}{a}$'ya eşittir. Ters örgünün ilkel hücresinin hacmi :

$\mathrm{V}' = |\boldsymbol{A} \cdot (\boldsymbol{B} \times \boldsymbol{C})| = (\frac{2\pi}{a})^3$ şeklinde elde edilir.

BÖLÜM 3-Hacim Merkezli kübik Kristal Sisteminin Ters Örgü Vektörü- $\boldsymbol{G}$

Hacim merkezli kübik örgünün ilkel öteleme vektörleri

$\boldsymbol{a} = \frac{a}{\boldsymbol{2}}(\boldsymbol{x} + \boldsymbol{y} + \boldsymbol{z})$, $\boldsymbol{b} = \frac{a}{2}(-\boldsymbol{x} + \boldsymbol{y} + \boldsymbol{z})$, $\boldsymbol{c} = \frac{a}{2}(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{y} + \boldsymbol{z})$ şeklinde yazılabilir. Burada $\boldsymbol{x}$, $\boldsymbol{y}$, $\boldsymbol{z}$ birim vektörleri göstermekte, a örgü sabitidir. Bu durumda hacim merkezli kübik ilkel birim hücrenin hacmi

$$\boldsymbol{a} \cdot (\boldsymbol{b} \times \boldsymbol{c}) = \frac{a}{\boldsymbol{2}}(\boldsymbol{x} + \boldsymbol{y} + \boldsymbol{z}) \cdot \left(\frac{a}{2}(-\boldsymbol{x} + \boldsymbol{y} + \boldsymbol{z}) \times \frac{a}{2}(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{y} + \boldsymbol{z})\right)$$

$$= (\frac{a}{2})^{\boldsymbol{3}}(\boldsymbol{x} + \boldsymbol{y} + \boldsymbol{z}) \cdot (-\boldsymbol{x} \times \boldsymbol{x} - \boldsymbol{x} \times (-\boldsymbol{y}) - \boldsymbol{x} \times \boldsymbol{z} + \boldsymbol{y} \times \boldsymbol{x} + \boldsymbol{y} \times (-\boldsymbol{y}) + \boldsymbol{y} \times \boldsymbol{z} + \boldsymbol{z} \times \boldsymbol{x} + \boldsymbol{z} \times (-\boldsymbol{y}) + \boldsymbol{z} \times \boldsymbol{z})$$

$$= (\frac{a}{2})^{\boldsymbol{3}}(\boldsymbol{x} + \boldsymbol{y} + \boldsymbol{z}) \cdot (\boldsymbol{z} + \boldsymbol{y} - \boldsymbol{z} + \boldsymbol{x} + \boldsymbol{y} + \boldsymbol{x}) = \left(\frac{a}{2}\right)^{\boldsymbol{3}} (\boldsymbol{x} + \boldsymbol{y} + \boldsymbol{z}) \cdot (2\boldsymbol{y} + 2\boldsymbol{x}) = \left(\frac{a}{2}\right)^{\boldsymbol{3}} (2 + 2) = 4\left(\frac{a}{2}\right)^{\boldsymbol{3}} = \frac{a^3}{2}$$

$$\mathrm{V} = |\boldsymbol{a} \cdot (\boldsymbol{b} \times \boldsymbol{c})| = \frac{a^3}{2}$$

BÖLÜM 3-Hacim Merkezli kübik Kristal Sisteminin Ters Örgü Vektörü- $\boldsymbol{G}$

Hacim merkezli kübik ters örgünün doğrultu vektörleri $\boldsymbol{A} = 2\pi \frac{\boldsymbol{b}\times\boldsymbol{c}}{\boldsymbol{a}\cdot(\boldsymbol{b}\times\boldsymbol{c})}$, $\boldsymbol{B} = 2\pi \frac{\boldsymbol{c}\times\boldsymbol{a}}{\boldsymbol{a}\cdot(\boldsymbol{b}\times\boldsymbol{c})}$, $\boldsymbol{C} = 2\pi \frac{\boldsymbol{a}\times\boldsymbol{b}}{\boldsymbol{a}\cdot(\boldsymbol{b}\times\boldsymbol{c})}$,

denklemleriyle hesaplanabilir :

$$\boldsymbol{A} = 2\pi \frac{\frac{a}{2}(-\boldsymbol{x}+\boldsymbol{y}+\boldsymbol{z})\times\frac{a}{2}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}+\boldsymbol{z})}{\boldsymbol{a}\cdot(\boldsymbol{b}\times\boldsymbol{c})}, \boldsymbol{B} = 2\pi \frac{\frac{a}{2}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}+\boldsymbol{z})\times\frac{a}{2}(\boldsymbol{x}+\boldsymbol{y}+\boldsymbol{z})}{\boldsymbol{a}\cdot(\boldsymbol{b}\times\boldsymbol{c})}, \boldsymbol{C} = 2\pi \frac{\frac{a}{2}(\boldsymbol{x}+\boldsymbol{y}+\boldsymbol{z})\times\frac{a}{2}(-\boldsymbol{x}+\boldsymbol{y}+\boldsymbol{z})}{\boldsymbol{a}\cdot(\boldsymbol{b}\times\boldsymbol{c})}$$

Ters örgünün ilkel öteleme vektörleri ise , $\boldsymbol{A} = \frac{2\pi}{a}(\boldsymbol{x}+\boldsymbol{y})$, $\boldsymbol{B} = \frac{2\pi}{a}(\boldsymbol{y}+\boldsymbol{z})$, $\boldsymbol{C} = \frac{2\pi}{a}(\boldsymbol{x}+\boldsymbol{z})$,

$$\boldsymbol{G} = (h\boldsymbol{A} + k\boldsymbol{B} + l\boldsymbol{C}) = \frac{2\pi}{a}(h(\boldsymbol{x}+\boldsymbol{y}) + k(\boldsymbol{y}+\boldsymbol{z}) + l(\boldsymbol{x}+\boldsymbol{z}))$$

Böylece hacim merkezli kübik örgünün ters örgüsü yüz merkezli kübik olur. Ters örgünün ilkel hücresinin hacmi : $\mathrm{V}' = |\boldsymbol{A}\cdot(\boldsymbol{B}\times\boldsymbol{C})| = 2(\frac{2\pi}{a})^3$ şeklinde hesaplanır.

BÖLÜM 3-Yüz Merkezli kübik Kristal Sisteminin Ters Örgü Vektörü- $\boldsymbol{G}$

Yüz merkezli kübik örgünün ilkel öteleme vektörleri $\boldsymbol{a} = \frac{a}{\boldsymbol{2}}(\boldsymbol{x} + \boldsymbol{y})$, $\boldsymbol{b} = \frac{a}{2}(\boldsymbol{y} + \boldsymbol{z})$, $\boldsymbol{c} = \frac{a}{2}(\boldsymbol{x} + \boldsymbol{z})$ şeklinde yazılabilir. Burada $\boldsymbol{x}$, $\boldsymbol{y}$, $\boldsymbol{z}$ birim vektörleri göstermekte, a örgü sabitidir. Bu durumda yüz merkezli kristal sisteminin ilkel birim hücresinin hacmi

$$\boldsymbol{a} \cdot (\boldsymbol{b} \times \boldsymbol{c}) = \frac{a}{\boldsymbol{2}}(\boldsymbol{x} + \boldsymbol{y}) \cdot \left(\frac{a}{2}(\boldsymbol{y} + \boldsymbol{z}) \times \frac{a}{2}(\boldsymbol{x} + \boldsymbol{z})\right) = (\frac{a}{2})^{\boldsymbol{3}}(\boldsymbol{x} + \boldsymbol{y}) \cdot (\boldsymbol{y} \times \boldsymbol{x} + \boldsymbol{y} \times \boldsymbol{z} + \boldsymbol{z} \times \boldsymbol{x} + \boldsymbol{z} \times \boldsymbol{z})$$

$$= (\frac{a}{2})^{\boldsymbol{3}}(\boldsymbol{x} + \boldsymbol{y}) \cdot (-\boldsymbol{z} + \boldsymbol{x} + \boldsymbol{y}) = (\frac{a}{2})^{\boldsymbol{3}}(\boldsymbol{x} \cdot (-\boldsymbol{z}) + \boldsymbol{x} \cdot (\boldsymbol{x}) + \boldsymbol{x} \cdot (\boldsymbol{y}) + \boldsymbol{y} \cdot (-\boldsymbol{z}) + \boldsymbol{y} \cdot (\boldsymbol{x}) + \boldsymbol{y} \cdot (\boldsymbol{y})) =$$

$$= (\frac{a}{2})^{\boldsymbol{3}}(1 + 1) = 2(\frac{a}{2})^{\boldsymbol{3}} = \frac{a^{\boldsymbol{3}}}{4} \text{ ve } V = |\boldsymbol{a} \cdot (\boldsymbol{b} \times \boldsymbol{c})| = \frac{a^3}{4}$$

BÖLÜM 3-Yüz Merkezli kübik Kristal Sisteminin Ters Örgü Vektörü- $\boldsymbol{G}$

Yüz merkezli kübik sistemin ters örgünün doğrultu vektörleri $\boldsymbol{A} = 2\pi \frac{\boldsymbol{b}\times\boldsymbol{c}}{\boldsymbol{a}\cdot(\boldsymbol{b}\times\boldsymbol{c})}$, $\boldsymbol{B} = 2\pi \frac{\boldsymbol{c}\times\boldsymbol{a}}{\boldsymbol{a}\cdot(\boldsymbol{b}\times\boldsymbol{c})}$, $\boldsymbol{C} = 2\pi \frac{\boldsymbol{a}\times\boldsymbol{b}}{\boldsymbol{a}\cdot(\boldsymbol{b}\times\boldsymbol{c})}$,

denklemlerinden hesaplanabilir : $\boldsymbol{A} = 2\pi \frac{\frac{a}{2}(\boldsymbol{y}+\boldsymbol{z})\times\frac{a}{2}(\boldsymbol{x}+\boldsymbol{z})}{\boldsymbol{a}\cdot(\boldsymbol{b}\times\boldsymbol{c})}$, $\boldsymbol{B} = 2\pi \frac{\frac{a}{2}(\boldsymbol{x}+\boldsymbol{z})\times\frac{a}{2}(\boldsymbol{x}+\boldsymbol{y})}{\boldsymbol{a}\cdot(\boldsymbol{b}\times\boldsymbol{c})}$, $\boldsymbol{C} = 2\pi \frac{\frac{a}{2}(\boldsymbol{x}+\boldsymbol{y})\times\frac{a}{2}(\boldsymbol{y}+\boldsymbol{z})}{\boldsymbol{a}\cdot(\boldsymbol{b}\times\boldsymbol{c})}$

Ters örgünün ilkel öteleme vektörleri ise , $\boldsymbol{A} = \frac{2\pi}{a}(\boldsymbol{x} + \boldsymbol{y})$, $\boldsymbol{B} = \frac{2\pi}{a}(\boldsymbol{y} + \boldsymbol{z})$, $\boldsymbol{C} = \frac{2\pi}{a}(\boldsymbol{x} + \boldsymbol{z})$,

$$\boldsymbol{G} = (h\boldsymbol{A} + k\boldsymbol{B} + l\boldsymbol{C}) = \frac{2\pi}{a}(h(\boldsymbol{x} + \boldsymbol{y}) + k(\boldsymbol{y} + \boldsymbol{z}) + l(\boldsymbol{x} + \boldsymbol{z}))$$

Böylece hacim merkezli kübik örgünün ters örgüsü yüz merkezli kübik olur. Yüz merkezli ters örgünün ilkel hücresinin hacmi : $\mathrm{V}' = |\boldsymbol{A} \cdot (\boldsymbol{B} \times \boldsymbol{C})| = 2(\frac{2\pi}{a})^3$ şeklinde hesaplanır.