

BÖLÜM 3-Hekzagonal Kristal Sisteminin Ters Örgü Vektörü- \mathbf{G}

Hekzagonal örgünün ilkel öteleme vektörleri aşağıdaki gibidir;

$\mathbf{a} = \frac{a\sqrt{3}}{2}\mathbf{x} + \frac{a}{2}\mathbf{y}$, $\mathbf{b} = -\frac{a\sqrt{3}}{2}\mathbf{x} + \frac{a}{2}\mathbf{y}$, $\mathbf{c} = c\mathbf{z}$ şeklinde yazılabilir. Burada \mathbf{x} , \mathbf{y} , \mathbf{z} birim vektörleri göstermekte, a ve c örgü sabitidir. Bu durumda hekzagonal kristal sisteminin ilkel birim hücresinin hacmi

$$\begin{aligned}\mathbf{a} \cdot (\mathbf{b} \times \mathbf{c}) &= \left(\frac{a\sqrt{3}}{2}\mathbf{x} + \frac{a}{2}\mathbf{y}\right) \cdot \left(\left(-\frac{a\sqrt{3}}{2}\mathbf{x} + \frac{a}{2}\mathbf{y}\right) \times (c\mathbf{z})\right) = \left(\frac{a\sqrt{3}}{2}\mathbf{x} + \frac{a}{2}\mathbf{y}\right) \cdot \left(\left(-\frac{a\sqrt{3}}{2}\mathbf{x} \times c\mathbf{z} + \frac{a}{2}\mathbf{y} \times c\mathbf{z}\right)\right) \\ &= \left(\frac{a\sqrt{3}}{2}\mathbf{x} + \frac{a}{2}\mathbf{y}\right) \cdot \left(-\frac{ac\sqrt{3}}{2}(-\mathbf{y}) + \frac{ac}{2}\mathbf{x}\right) = \left(\frac{a\sqrt{3}}{2}\mathbf{x} + \frac{a}{2}\mathbf{y}\right) \cdot \left(\frac{ac}{2}\mathbf{x} + \frac{ac\sqrt{3}}{2}\mathbf{y}\right) \\ &= \left(\frac{a}{2}\right) \left(\frac{ac}{2}\right) (\sqrt{3}\mathbf{x} + \mathbf{y}) \cdot (\mathbf{x} + \sqrt{3}\mathbf{y}) = \left(\frac{a}{2}\right) \left(\frac{ac}{2}\right) (\sqrt{3} + \sqrt{3}) = \left(\frac{a}{2}\right) \left(\frac{ac}{2}\right) (2\sqrt{3}) = \frac{a^2c\sqrt{3}}{2}\end{aligned}$$

Ve ilkel hücrenin hacmi $V = |\mathbf{a} \cdot (\mathbf{b} \times \mathbf{c})| = \frac{a^2c\sqrt{3}}{2}$ olarak bulunur.

BÖLÜM 3-Hekzagonal Kristal Sisteminin Ters Örgü Vektörü- \mathbf{G}

Hekzagonal sistemin ters örgüsünün doğrultu vektörleri $\mathbf{A} = 2\pi \frac{\mathbf{b} \times \mathbf{c}}{\mathbf{a} \cdot (\mathbf{b} \times \mathbf{c})}$, $\mathbf{B} = 2\pi \frac{\mathbf{c} \times \mathbf{a}}{\mathbf{a} \cdot (\mathbf{b} \times \mathbf{c})}$, $\mathbf{C} = 2\pi \frac{\mathbf{a} \times \mathbf{b}}{\mathbf{a} \cdot (\mathbf{b} \times \mathbf{c})}$,

denklemlerinden $\mathbf{a} = \frac{a\sqrt{3}}{2}\mathbf{x} + \frac{a}{2}\mathbf{y}$, $\mathbf{b} = -\frac{a\sqrt{3}}{2}\mathbf{x} + \frac{a}{2}\mathbf{y}$, $\mathbf{c} = c\mathbf{z}$ öteleme vektörleri kullanılarak hesaplanabilir :

$$\mathbf{b} \times \mathbf{c} = \begin{vmatrix} \mathbf{x} & \mathbf{y} & \mathbf{z} \\ -\frac{a\sqrt{3}}{2} & \frac{a}{2} & 0 \\ 0 & 0 & c \end{vmatrix} = \frac{ac}{2}\mathbf{x} + \frac{\sqrt{3}ac}{2}\mathbf{y},$$

$$\mathbf{c} \times \mathbf{a} = \begin{vmatrix} \mathbf{x} & \mathbf{y} & \mathbf{z} \\ 0 & 0 & c \\ \frac{a\sqrt{3}}{2} & \frac{a}{2} & 0 \end{vmatrix} = -\frac{ac}{2}\mathbf{x} - \frac{\sqrt{3}ac}{2}\mathbf{y},$$

$$\mathbf{a} \times \mathbf{b} = \begin{vmatrix} \mathbf{x} & \mathbf{y} & \mathbf{z} \\ \frac{a\sqrt{3}}{2} & \frac{a}{2} & 0 \\ -\frac{a\sqrt{3}}{2} & \frac{a}{2} & 0 \end{vmatrix} = 2\frac{a^2\sqrt{3}}{2}\mathbf{z},$$

BÖLÜM 3-Hekzagonal Kristal Sisteminin Ters Örgü Vektörü- \mathbf{G}

Hekzagonal sistemin ters örgüsünün doğrultu vektörleri $\mathbf{A} = 2\pi \frac{\mathbf{b} \times \mathbf{c}}{\mathbf{a} \cdot (\mathbf{b} \times \mathbf{c})}$, $\mathbf{B} = 2\pi \frac{\mathbf{c} \times \mathbf{a}}{\mathbf{a} \cdot (\mathbf{b} \times \mathbf{c})}$, $\mathbf{C} = 2\pi \frac{\mathbf{a} \times \mathbf{b}}{\mathbf{a} \cdot (\mathbf{b} \times \mathbf{c})}$,

denklemlerinden $\mathbf{a} = \frac{a\sqrt{3}}{2}\mathbf{x} + \frac{a}{2}\mathbf{y}$, $\mathbf{b} = -\frac{a\sqrt{3}}{2}\mathbf{x} + \frac{a}{2}\mathbf{y}$, $\mathbf{c} = c\mathbf{z}$ öteleme vektörleri kullanılarak hesaplanabilir :

$$\mathbf{b} \times \mathbf{c} = \begin{vmatrix} \mathbf{x} & \mathbf{y} & \mathbf{z} \\ -\frac{a\sqrt{3}}{2} & \frac{a}{2} & 0 \\ 0 & 0 & c \end{vmatrix} = \frac{ac}{2}\mathbf{x} + \frac{\sqrt{3}ac}{2}\mathbf{y} = \frac{ac}{2}(\mathbf{x} + \sqrt{3}\mathbf{y}), \mathbf{A} = 2\pi \frac{\frac{ac}{2}(\mathbf{x} + \sqrt{3}\mathbf{y})}{\frac{a^2c\sqrt{3}}{2}} = \frac{2\pi}{a\sqrt{3}}(\mathbf{x} + \sqrt{3}\mathbf{y}),$$

$$\mathbf{c} \times \mathbf{a} = \begin{vmatrix} \mathbf{x} & \mathbf{y} & \mathbf{z} \\ 0 & 0 & c \\ \frac{a\sqrt{3}}{2} & \frac{a}{2} & 0 \end{vmatrix} = -\frac{ac}{2}\mathbf{x} - \frac{\sqrt{3}ac}{2}\mathbf{y} = -\frac{ac}{2}(\mathbf{x} + \sqrt{3}\mathbf{y}), \mathbf{B} = 2\pi \frac{-\frac{ac}{2}(\mathbf{x} + \sqrt{3}\mathbf{y})}{\frac{a^2c\sqrt{3}}{2}} = -\frac{2\pi}{a\sqrt{3}}(\mathbf{x} + \sqrt{3}\mathbf{y}),$$

$$\mathbf{a} \times \mathbf{b} = \begin{vmatrix} \mathbf{x} & \mathbf{y} & \mathbf{z} \\ \frac{a\sqrt{3}}{2} & \frac{a}{2} & 0 \\ -\frac{a\sqrt{3}}{2} & \frac{a}{2} & 0 \end{vmatrix} = 2 \frac{a^2\sqrt{3}}{2 \cdot 2} \mathbf{z} = \frac{a^2\sqrt{3}}{2} \mathbf{z}, \mathbf{C} = 2\pi \frac{\frac{a^2\sqrt{3}}{2} \mathbf{z}}{\frac{a^2c\sqrt{3}}{2}} = \frac{2\pi}{c} \mathbf{z}$$

BÖLÜM 3-Hekzagonal Kristal Sisteminin Ters Örgü Vektörü- \mathbf{G}

Hekzagonal sistemin ters örgüsünün doğrultu vektörü:

$$\mathbf{A} = \frac{2\pi}{a\sqrt{3}} (\mathbf{x} + \sqrt{3}\mathbf{y}),$$

$$\mathbf{B} = -\frac{2\pi}{a\sqrt{3}} (\mathbf{x} + \sqrt{3}\mathbf{y}),$$

$$\mathbf{C} = \frac{2\pi}{c} \mathbf{z}$$

$$\mathbf{G} = (h\mathbf{A} + k\mathbf{B} + l\mathbf{C}) = 2\pi h \frac{(x+\sqrt{3}y)}{a\sqrt{3}} - 2\pi k \frac{(x+\sqrt{3}y)}{a\sqrt{3}} + 2\pi l \frac{1}{c} \mathbf{z}$$

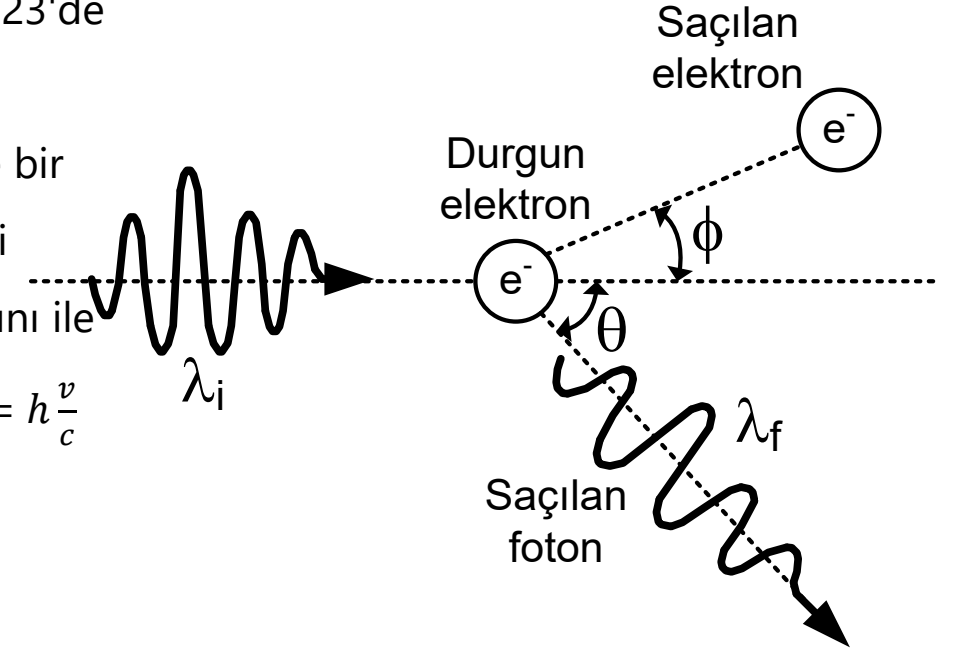
Böylece hekzagonal ters örgüsünün ilkel hücrenin hacmi : $V' = |\mathbf{A} \cdot (\mathbf{B} \times \mathbf{C})|$ denkleminde hesaplanabilir.

$$\mathbf{B} \times \mathbf{C} = \begin{vmatrix} \mathbf{x} & \mathbf{y} & \mathbf{z} \\ -\frac{2\pi}{a\sqrt{3}} & \frac{2\pi}{a} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{2\pi}{c} \end{vmatrix} = \frac{(2\pi)^2}{ac} (\mathbf{x} + \frac{1}{\sqrt{3}} \mathbf{y}), \text{ ters örgü birim hücrenin hacmi}$$

$$V' = |\mathbf{A} \cdot (\mathbf{B} \times \mathbf{C})| = \frac{(2\pi)^2}{ac} (\mathbf{x} + \sqrt{3}\mathbf{y}) \cdot \frac{2\pi}{a\sqrt{3}} (\mathbf{x} + \sqrt{3}\mathbf{y}) = \frac{(2\pi)^3}{a^2 c \sqrt{3}} (1 + \sqrt{3}) \text{ şeklinde hesaplanır.}$$

BÖLÜM 3-Compton saçılması

Işınımın parçacık doğasının en dolaysız kanıtını Compton olayı verir. Compton 1923'de molibdenyum'dan elde edilen 20 keV enerjili X-ışınlarının hafif elementli metal yapraklardan saçılmasını inceledi. Klasik teoriye göre, saçıcı maddeye giren böyle bir elektromagnetik dalga (X-ışını), serbest sayabileceğimiz atomik elektronları kendi frekansıyla titreşime zorlar. Böylece elektron basit harmonik hareket yaparak X-ışını ile aynı frekanslı bir ışımada bulunur. Compton, gelen ışınımı $E = hv$ enerjili ve $p = h\frac{v}{c}$ çizgisel momentumlu bir foton demeti (dalga paketi) olarak ele alıp, tıpkı bilardo topları gibi, bir fotonun bir elektronla esnek çarpışma yaptığını düşünerek deney sonucunu doğruladı. Şekildeki esnek çarpışmada çizgisel momentum ve enerji korunmaktadır : $p = p' + P$, $hv + mc^2 = hv' + \sqrt{(m^2c^4 + c^2P^2)}$. Burada m elektronun durgun kütlesi, p gelen (hv/c) ve p' saçılan (hv'/c) fotonun momentumu, P elektronun çarpışmadan sonraki momentumu olmak üzere



$$P^2 = p^2 + p'^2 - 2pp' \cos \theta = \frac{h^2}{c^2} (v^2 + v'^2 - 2vv' \cos \theta)$$

$$hv - hv' + mc^2 = \sqrt{(m^2c^4 + c^2P^2)} , (hv - hv' + mc^2)^2 = (\sqrt{(m^2c^4 + c^2P^2)})^2.$$

BÖLÜM 3-Compton saçılması

Şekildeki esnek çarpışmada çizgisel momentum $p = p' + P$ ve enerji $h\nu + mc^2 =$

$h\nu' + \sqrt{(m^2c^4 + c^2P^2)}$ korunmaktadır. Burada m elektronun durgun kütlesi, p gelen $(h\nu/c)$ ve p' saçılan $(h\nu'/c)$ fotonun momentumu, P elektronun çarpışmadan sonraki momentumu olmak üzere

$$P^2 = p^2 + p'^2 - 2pp' \cos \theta = \frac{h^2}{c^2} (\nu^2 + \nu'^2 - 2\nu\nu' \cos \theta)$$

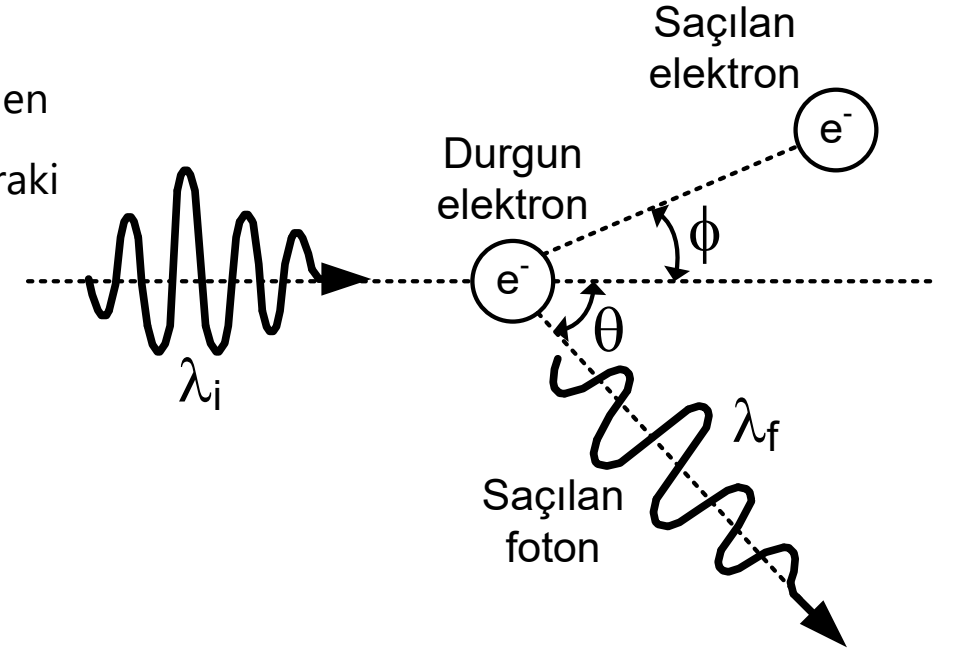
$$h\nu - h\nu' + mc^2 = \sqrt{(m^2c^4 + c^2P^2)}, (h(\nu - \nu') + mc^2)^2 = (\sqrt{(m^2c^4 + c^2P^2)})^2$$

$$h^2(\nu - \nu')^2 + m^2c^4 + 2h(\nu - \nu')mc^2 = (m^2c^4 + c^2P^2)$$

$$h^2(\nu - \nu')^2 + 2h(\nu - \nu')mc^2 = c^2P^2$$

$$h^2(\nu - \nu')^2 + 2h(\nu - \nu')mc^2 = c^2\left(\frac{h^2}{c^2}(\nu^2 + \nu'^2 - 2\nu\nu' \cos \theta)\right)$$

$$h^2(\nu^2 - 2\nu\nu' + \nu'^2) + 2h(\nu - \nu')mc^2 = h^2(\nu^2 + \nu'^2 - 2\nu\nu' \cos \theta)$$



BÖLÜM 3-Compton saçılması

$$h^2(-2vv') + 2h(v - v')mc^2 = h^2(-2vv' \cos \theta)$$

$$h(-2vv') + 2(v - v')mc^2 = h(-2vv' \cos \theta)$$

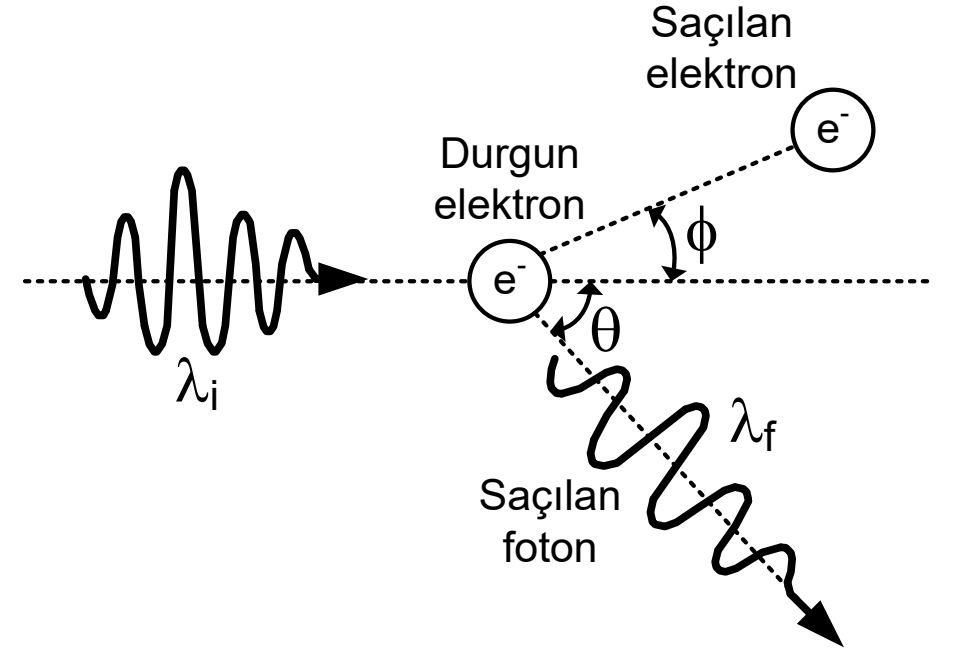
$$2(v - v')mc^2 = h(2vv') - h(2vv' \cos \theta)$$

$$2(v - v')mc^2 = (2hvv')(1 - \cos \theta)$$

$$\frac{(v-v')}{hvv'} mc^2 = (1 - \cos \theta)$$

$$\frac{(v-v')}{vv'} = \frac{1}{v'} - \frac{1}{v} = \frac{1}{\frac{c}{\lambda'}} - \frac{1}{\frac{c}{\lambda}} = \frac{\lambda'}{c} - \frac{\lambda}{c} = \lambda' - \lambda = \frac{h}{mc} (1 - \cos \theta)$$

Compton saçılması fotonun elektronla çarpışması sonucunda fotonun dalga boyu değiştiğini göstermektedir.



BÖLÜM 3-Ters Örgü Vektörleri ve Kırınım koşulları

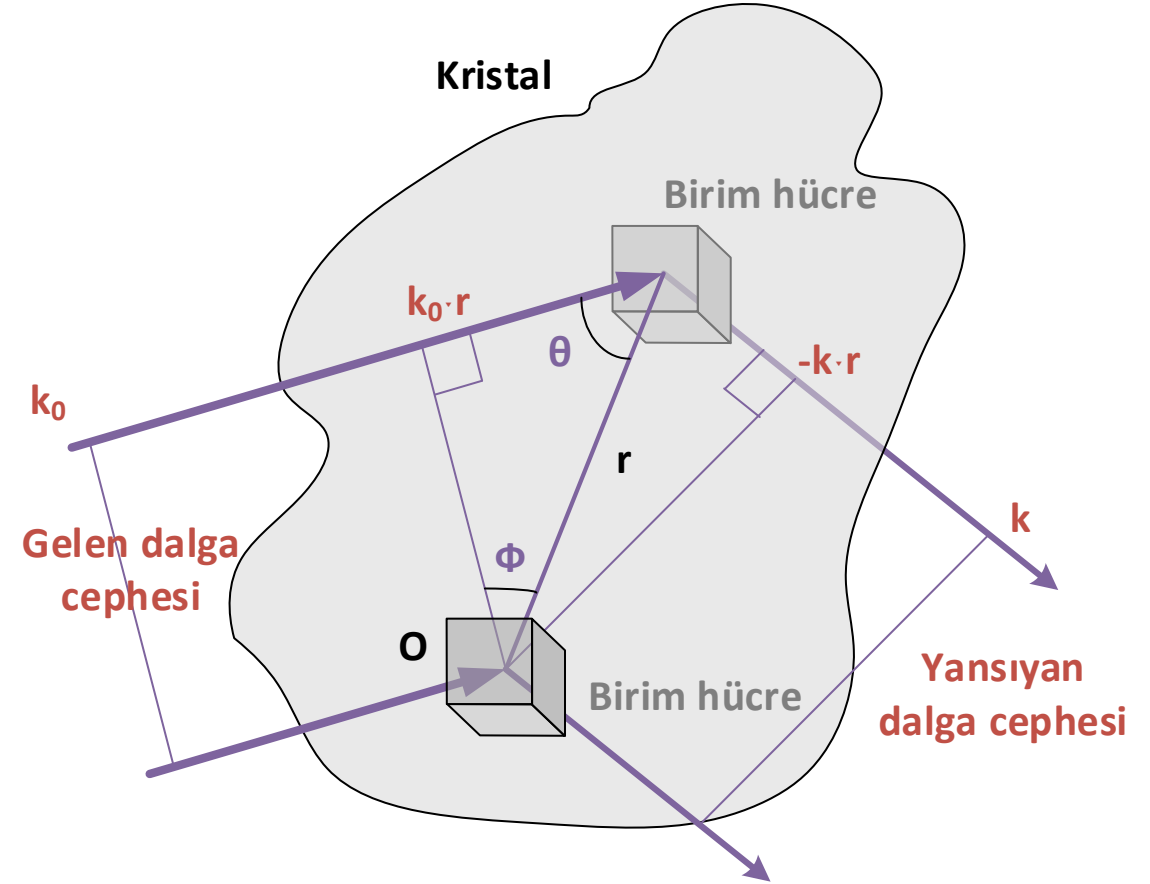
Compton saçılma olayı ile kırınım deseni oluşabilir mi?

Hayır. kırınım oluşmaz. Çünkü Compton saçılmasında dalga boyu değişmekte yani elektromanyetik dalga kristalin atomları ile etkileşmektedir.

Yandaki şekideki O noktasındaki bir hacim elemanından saçılan dalga ile r vektörü ile gösterilen bir başka hacim elemanı tarafından saçılan dalga arasındaki faz farkı

$$(\mathbf{k}_0 - \mathbf{k}) \cdot \mathbf{r}$$

Denklemini yazılabilir.

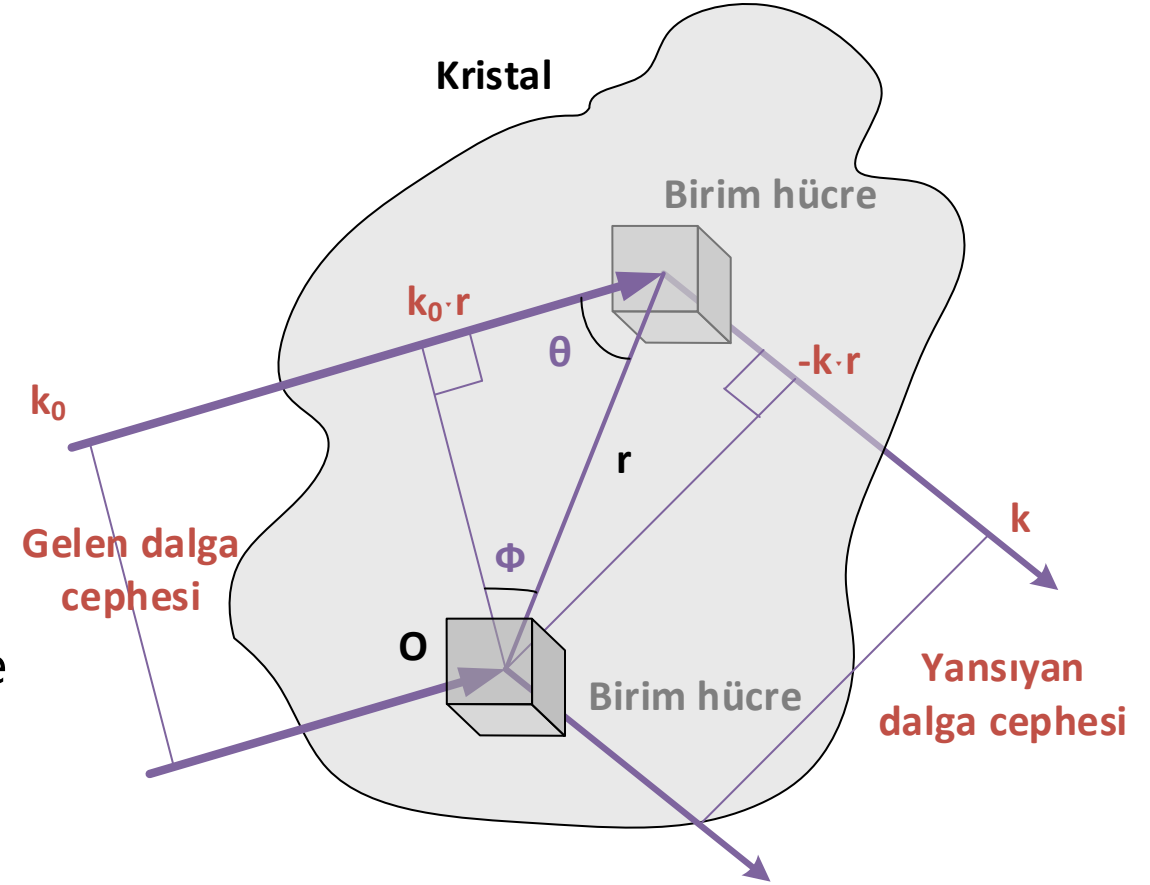


BÖLÜM 3-Ters Örgü Vektörleri ve Kırınım koşulları

Kristal içindeki bir dV hacim elemanı tarafından saçılan dalganın genliği, bu hacim elemanındaki bölgesel elektron yoğunluğu ile orantılıdır. Bu durumda dV hacim elemanı tarafından \mathbf{k} -doğrultusunda saçılan dalganın genliği $n(\mathbf{r})dV$ ifadesi ile verilir.

dV hacminden saçılan dalganın genliği A , $n(\mathbf{r})dV$ ile $e^{i(\mathbf{k}_0-\mathbf{k})\cdot\mathbf{r}}$ fazının çarpımından elde edilen ifadenin kristalin tamamından elde edilen toplam veya integrali ile elde edilebilir: $A = \int_{\text{kristal}} n(\mathbf{r})e^{i(\mathbf{k}_0-\mathbf{k})\cdot\mathbf{r}} dV$ denklemdeki

$\mathbf{k}_0 + \Delta\mathbf{k} = \mathbf{k}$ şeklindedir. $\Delta\mathbf{k}$ vektörü saçılma sırasında dalga vektöründe meydana gelen değişmeyi temsil eder ve saçılma vektörü olarak adlandırılır.



BÖLÜM 3-Ters Örgü Vektörleri ve Kırınım koşulları

$n(\mathbf{r}) = \sum_G n_G e^{i\mathbf{G}\cdot\mathbf{r}}$ elektron yoğunluğu genlik ifadesinde yerine yazılırsa,

$$A = \int_{\text{kristal}} \sum_G n_G e^{i\mathbf{G}\cdot\mathbf{r}} e^{i(\mathbf{k}_0-\mathbf{k})\cdot\mathbf{r}} dV$$

$$A = \sum_G \int_{\text{kristal}} n_G e^{i\mathbf{G}\cdot\mathbf{r}} e^{-i(\Delta\mathbf{k})\cdot\mathbf{r}} dV = \sum_G \int_{\text{kristal}} n_G e^{-i(\mathbf{G}-\Delta\mathbf{k})\cdot\mathbf{r}} dV$$

Bu ifadede \mathbf{G} ters örgü vektörü $\Delta\mathbf{k}$ saçılma vektörüne eşit olduğunda üstel terim 1'e eşit olur ve bu durumda saçılan dalganın genliği $A = Vn_G$ elde edilir.

Faz çarpanı olan üstel terimin 1'e eşit olması yasımanın yapıcı veya kuvvetlendirici girişim olduğunu gösterir.

$\mathbf{G} \neq \Delta\mathbf{k}$ olduğunda A 'yı ihmal edilebilir ve yansıyan dalga için yıkıcı girişim oluştuğunu belirtilir.

Kısaca $\mathbf{G} = \Delta\mathbf{k}$ kırınım şartı olur.

BÖLÜM 3-Ters Örgü Vektörleri ve Kırınım koşulları

$\mathbf{G} = \Delta\mathbf{k} = \mathbf{k} - \mathbf{k}_0$ kırınım şartı olur. $\mathbf{k}_0 = \mathbf{k} - \mathbf{G}$ ifadesinin her iki tarafı Planck sabiti ile çarpılırsa

$$\hbar\mathbf{k}_0 + \hbar\mathbf{G} = \hbar\mathbf{k}$$

Denklemdaki

$\hbar\mathbf{k}_0$ -gelen elektromanyetik dalganın momentumu,

$\hbar\mathbf{G}$ -gelen elektromanyetik dalganın kazanmış olduğu momentum,

$\hbar\mathbf{k}$ -yansıyan elektromanyetik dalganın sahip olduğu momentum,

$-\hbar\mathbf{G}$ -kristalin kaybetmiş olduğu momentum

$\mathbf{P} = \hbar\mathbf{k}$ Kristal çok büyük olduğundan elektromanyetik dalga ile çarpışmasından sonra kinetik enerjisi ihmal edilebilir. Yani elektromanyetik dalganın kristalden saçılması esnek saçılma olacaktır.

$$\frac{\mathbf{P}^2}{2m} = \frac{(\hbar\mathbf{G})^2}{2m}$$

BÖLÜM 3-Ters Örgü Vektörleri ve Kırınım koşulları

$\frac{p^2}{2m} = \frac{(\hbar\mathbf{G})^2}{2m}$ Buradaki kırınım X-ışını fotonu ile kristalin çarpışması olayına dönüşür. Yani saçılan X-ışını fotonu $\hbar\mathbf{G}$ momentumu kazanır ya da $-\hbar\mathbf{G}$ momentumu kadar ters yönde itilir (geri teper). Yani sistemin enerjisi korunmuş olur.

Gelen fotonun w_0 -açısal frekansı ($w_0 = c|\mathbf{k}_0|$), saçılan fotonun w -açısal frekansına ($w = c|\mathbf{k}|$) eşit olur.

$$|\mathbf{k}_0| = |\mathbf{k}|,$$

$$|\mathbf{k}_0 + \mathbf{G}|^2 = |\mathbf{k}|^2,$$

$$|\mathbf{k}_0|^2 + |\mathbf{G}|^2 + 2\mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{G} = |\mathbf{k}|^2,$$

$$|\mathbf{G}|^2 + 2\mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{G} = 0,$$

$|\mathbf{G}|^2 = -2\mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{G}$, $-\mathbf{G}$ ters örgü vektörüdür. $|\mathbf{G}|^2 = 2\mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{G}$ Bragg kırınım şartı değişik şekilde edilmiş olur.

Bu Brillouin kırınım şartıdır.

BÖLÜM 3-Brillouin ve Bragg Kırınım koşulları

$|\mathbf{G}|^2 = 2\mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{G}$ Brillouin kırınım şartı ,

$2 d \sin \theta = n\lambda$ Bragg kırınım şartıdır. θ -gelen açı ile yansıma düzlemi arasındaki açıdır.

$d_{hkl} = \frac{2\pi}{|\mathbf{G}|}$, $|\mathbf{G}| = \frac{2\pi}{d_{hkl}}$ ve $|\mathbf{k}_0| = \frac{2\pi}{\lambda}$ ifadelerini hatırlarsak,

$|\mathbf{G}|^2 = 2|\mathbf{k}_0||\mathbf{G}| \cos\phi$, faz farkı olarak tanımlanan $\phi + \theta + 90^\circ = 180^\circ$, $\phi = 90^\circ - \theta$

veya

$\left(\frac{2\pi}{d_{hkl}}\right)^2 = 2 \frac{2\pi}{\lambda} \cdot \left|\frac{2\pi}{d_{hkl}}\right| \cos(90^\circ - \theta)$ ve $\cos(90^\circ - \theta) = \cos 90^\circ \cos \theta + \sin 90^\circ \sin \theta = \sin \theta$ ve $n = 1$

$\lambda = 2 d \sin \theta$ veya $n_{hkl}\lambda = 2d_{hkl} \sin \theta_{hkl}$ olarak yazılabilir.

BÖLÜM 3-Laue Kırınım koşulları

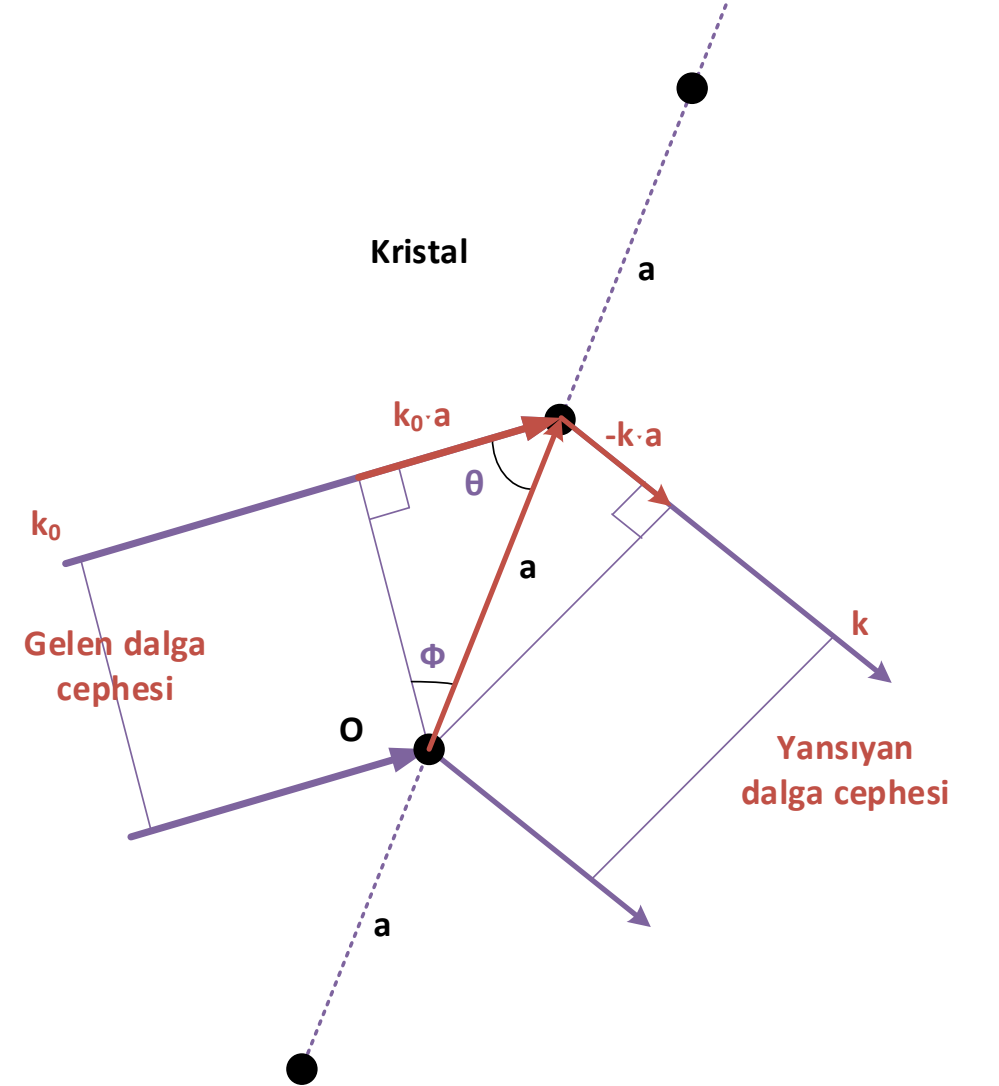
$\mathbf{G} = \Delta\mathbf{k}$ kırınım şartı kullanarak Laue kırınım şartı olarak adlandırılan eşitliklere ulaşılır. \mathbf{a} , \mathbf{b} ve \mathbf{c} kristal örgü vektörleri olmak üzere,

$$\mathbf{a} \cdot \Delta\mathbf{k} = \mathbf{a} \cdot \mathbf{G} = 2\pi h,$$

$$\mathbf{b} \cdot \Delta\mathbf{k} = \mathbf{b} \cdot \mathbf{G} = 2\pi k, \quad \text{Laue kırınım şartı (koni şeklini gösterir).}$$

$$\mathbf{c} \cdot \Delta\mathbf{k} = \mathbf{c} \cdot \mathbf{G} = 2\pi l,$$

Bu şartlar geometrik olarak ifade edilebilir



BÖLÜM 3-Laue Kırınım koşulları

$\mathbf{G} = \Delta\mathbf{k}$ kırınım şartı kullanarak Laue kırınım şartı olarak adlandırılan eşitliklere ulaşılır. \mathbf{a} , \mathbf{b} ve \mathbf{c} kristal örgü vektörleri olmak üzere,

$$\mathbf{a} \cdot \Delta\mathbf{k} = \mathbf{a} \cdot \mathbf{G} = 2\pi h,$$

$$\mathbf{b} \cdot \Delta\mathbf{k} = \mathbf{b} \cdot \mathbf{G} = 2\pi k, \quad \text{Laue kırınım şartı (koni şeklini gösterir).}$$

$$\mathbf{c} \cdot \Delta\mathbf{k} = \mathbf{c} \cdot \mathbf{G} = 2\pi l,$$

Bu şartlar geometrik olarak ifade edilebilir. Bragg yansıma formülünden

$$\sin \theta_{hkl} = \frac{n_{hkl}\lambda}{2d_{hkl}} = n_{hkl} \frac{1}{\frac{2}{\lambda}} \quad \text{denklemde } n_{hkl} = 1 \text{ alınırsa } \sin \theta_{hkl} = \frac{1}{\frac{2}{\lambda}} = \frac{\sigma_{hkl}}{2\frac{1}{\lambda}}$$
 şekline getirilerek

geometrik bir çizimde ters örgüyü dalga boyuna bağlarız. Şekilde bu çizim görülmektedir. Bir çemberde

çapı gören çevre açısı dik açıdır. Çapı $\frac{2}{\lambda}$ olan bir çemberin OP kirişinin çapa oranı şekilde görülmektedir.

BÖLÜM 3-Laue Kırınım koşulları

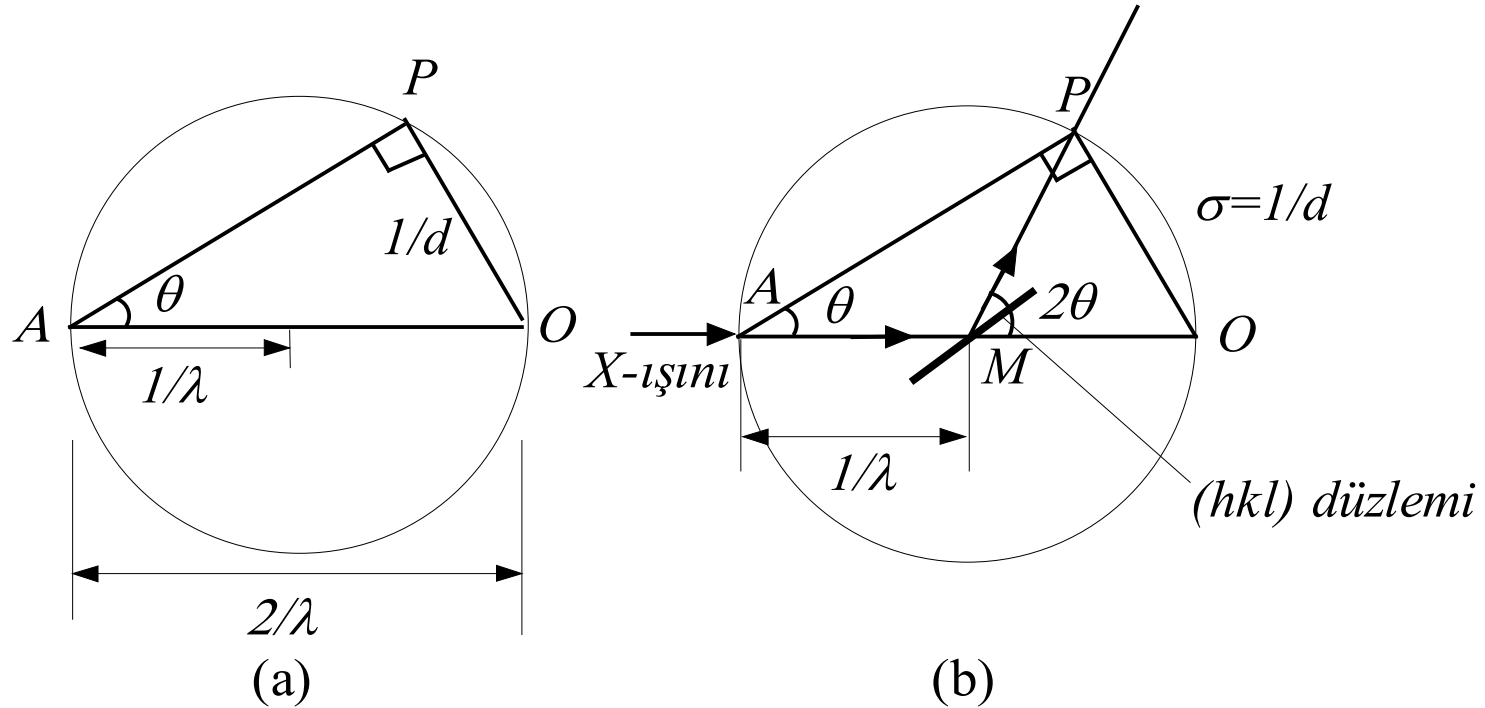
Çapı $\frac{2}{\lambda}$ olan bir çemberin OP kirişinin çapa oranı $\sin \theta = \frac{1/d}{2/\lambda} = \frac{\sigma}{2/\lambda} = \frac{OP}{AO}$ şekilden görülmektedir. Böylece bu

geometrik çizim bir fiziksel yorum kazanır. Şekilde kristalin M noktasında bulunduğunu düşünelim.

Kristalin bir düzlemi (hkl) olsun. AO X-ışını MP doğrultusunda bir yansıma vermiş olsun. Ya da O

noktasından o uzaklığında bir nokta P noktası olsun. Şekilde Bragg bağıntısının geometrik gösterimi

verilmektedir.



BÖLÜM 3-Laue Kırınım koşulları-Ewald Küresi

1-Kristal, yarıçapı $\frac{1}{\lambda}$ olan bir çemberin (üç boyutta bir kürenin) M merkezine konmuş gibi düşünülür.

2-X-ışını demetinin kristal içinden geçtikten sonra küreyi terkettiği O noktası kristalin ters örgüsünün başlangıç noktası olarak alınır.

3- σ_{hkl} ters örgü vektörünün son noktası P küre üzerinde ise M kristal merkezi ve P ters örgü noktasından geçen MP doğrultusu hkl düzleminden yansıyan girişim saçığının doğrultusudur.

Geometrik çizimi elde etmek için kullandığımız küreye yansıma küresi veya Ewald küresi denir. Bu kürenin yarıçapını birim olarak almak sureti ile de çizimi gerçekleştirebiliriz. Bragg bağıntısını bir daha

yazalım $\sin \theta = \frac{\lambda}{2d} = \frac{\lambda \frac{1}{d}}{2} = \frac{\lambda |\sigma|}{2}$. Yansıma küresinin yarıçapı 1 olarak alınır, ters örgü vektörü $|\sigma|$ yerine

deneyde kullanılan X-ışını dalga boyu λ ile çarparak $\lambda \sigma$ ifadesi kullanılırsa yansımaların toplanabileceği bir bölge tanımlanır.

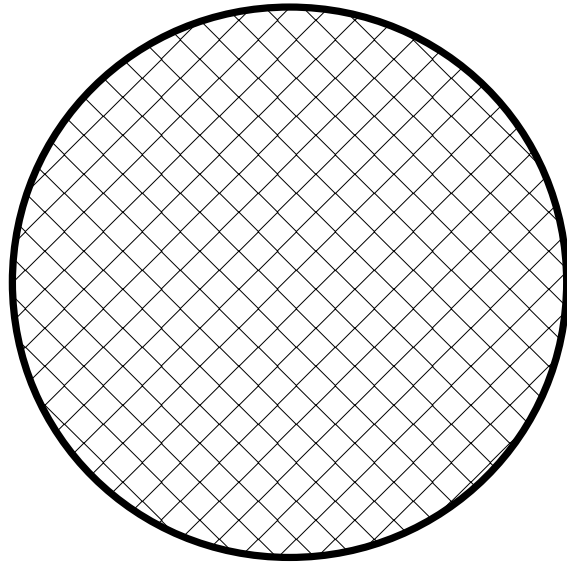
BÖLÜM 3-Laue Kırınım koşulları-Ewald Küresi

arın toplanabileceği bir bölge tanımlanır. Yansıma sayısı = $\frac{4\pi}{3} r^3$ hacim hesabından bulunabilir. Denklemde

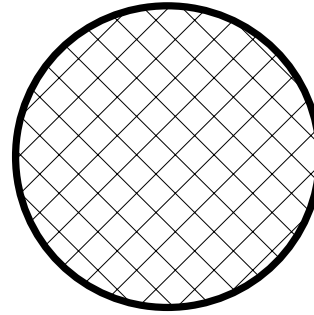
$r = \frac{1}{\lambda}$, n -birim hücredeki örgü noktası sayısı, λ -kullanılan X-ışının dalga boyu, V -birim hücrenin hacmi

olmak üzere, Toplanabilecek yansıma sayısı = $\frac{4\pi}{3} \left(\frac{8V}{n\lambda^3}\right)$ 'dir. Her örgü parametresi için 10'ar tane yansıma

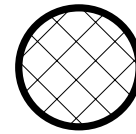
toplanması yeterli olacaktır. Kullanılan dalga boylarına göre toplanabilecek yansıma sayısı şekildeki gibidir.



Mo K_α
0.71Å



Cu K_α
1.54Å



Cr K_α
2.29Å