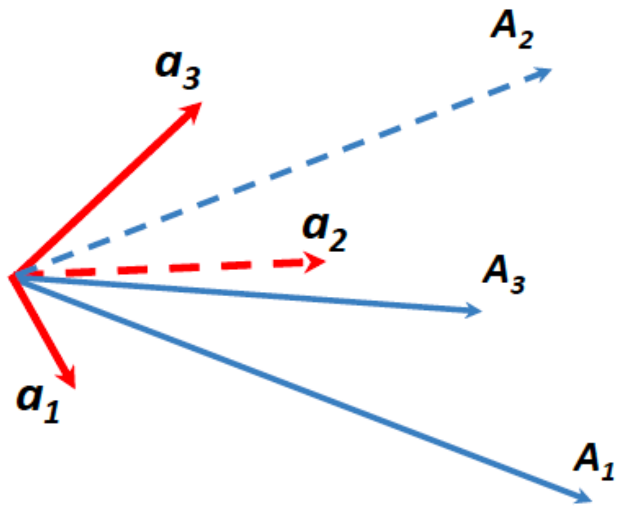
FZM 419

6

3D BAZ VEKTÖRLER ve KRİSTAL ÖRGÜPARAMETRELERİ



Üç baz vektörü (a1 ve a2 ve a3) ile oluşturulan kafesi düşünün
Diğer üç kafes vektörü alın

$A_1=[u_{1i}]=u_{11}\,\boldsymbol{a_1}+u_{12}\,\boldsymbol{a_2}+u_{13}\,\boldsymbol{a_3}$
$A_2=[u_{2i}]=u_{21}\,\boldsymbol{a_1}+u_{22}\,\boldsymbol{a_2}+u_{23}\,\boldsymbol{a_3}$
$A_3=[u_{3i}]=u_{31}\,\boldsymbol{a_1}+u_{32}\,\boldsymbol{a_2}+u_{33}\,\boldsymbol{a_3}$

uij tam sayılardır

Bu yeni üçlü vektör aynı örgüyü mü oluşturuyor?

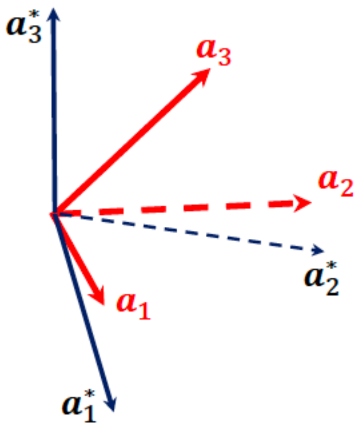
a, b ve c üzerine inşa edilen paralel yüzlü hacminin A1, A2 ve A3 üzerine inşa edilen paralelkenar alanı ile aynı olması sağlanmalıdır.

$$V(\boldsymbol{A}_1,\boldsymbol{A}_2,\boldsymbol{A}_3)=\pm\begin{vmatrix}u_{11} & u_{12} & u_{13}\\ u_{21} & u_{22} & u_{23}\\ u_{31} & u_{32} & u_{33}\end{vmatrix}V(\boldsymbol{a}_1,\boldsymbol{a}_2,\boldsymbol{a}_3)$$

$$\begin{vmatrix}u_{11} & u_{12} & u_{13}\\ u_{21} & u_{22} & u_{23}\\ u_{31} & u_{32} & u_{33}\end{vmatrix}=\pm 1 \qquad (*)$$

Denklem (*) yerine getirilirse A1, A2 ve A3 vektörleri AYNIÖRGÜ için baz vektörler olarak seçilebilir.

- Kristal kafes ve a, b ve c kafes baz vektörleri çiftini düşünün. Karşılıklı baz vektör çifti, a *, b * ve c *, aşağıdaki iç çarpımlara göre açıklanmıştır

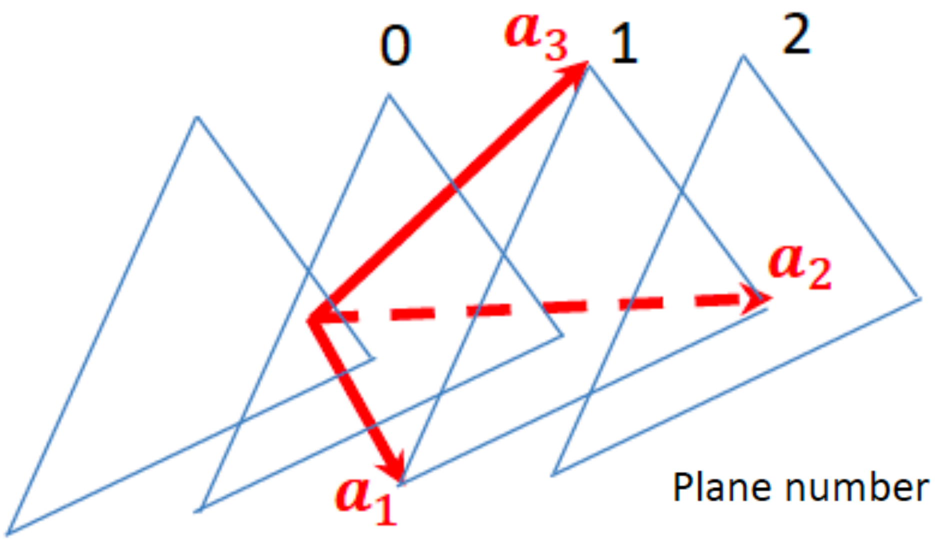


$$\boldsymbol{a}_1 \cdot \boldsymbol{a}_1^* = 1 \quad \boldsymbol{a}_1 \cdot \boldsymbol{a}_2^* = 0 \quad \boldsymbol{a}_1 \cdot \boldsymbol{a}_3^* = 0$$
$$\boldsymbol{a}_2 \cdot \boldsymbol{a}_1^* = 0 \quad \boldsymbol{a}_2 \cdot \boldsymbol{a}_2^* = 1 \quad \boldsymbol{a}_2 \cdot \boldsymbol{a}_3^* = 0$$
$$\boldsymbol{a}_3 \cdot \boldsymbol{a}_1^* = 0 \quad \boldsymbol{a}_3 \cdot \boldsymbol{a}_2^* = 0 \quad \boldsymbol{a}_3 \cdot \boldsymbol{a}_3^* = 1$$

Yani $\boldsymbol{a}1^*$, $(\boldsymbol{a}2\boldsymbol{a}3)$ düzlemine diktir.
Yani $\boldsymbol{a}2^*$ $(\boldsymbol{a}3\boldsymbol{a}1)$ düzlemine diktir.
Yani $\boldsymbol{a}3^*$, $(\boldsymbol{a}1\boldsymbol{a}2)$ düzlemine diktir.

$$\boldsymbol{A} = u_i \boldsymbol{a_i}$$
$$\boldsymbol{B} = h_j \boldsymbol{a_j^*}$$
$$\boldsymbol{A} \cdot \boldsymbol{B} = u_i h_i = u_1 h_1 + u_2 h_2 + u_3 h_3$$

Örgü düzlemlerinin matematiksel açıklaması (3D durum)



Ana baz vektörlerin üçlüsü olan a1, a2 ve a3'ün seçildiğini ve örgü inşa edildiğini varsayalım.
Örgü düzlemler sistemine böleriz, böylece düzlem A1 = [u1i] ve A2 = [u2i] örgü vektörleriyle tanımlanır.
2D duruma benzer şekilde, düzlemlerin denklemlerini oluşturmak için baz vektörlerin seçimi ile ilgili teoremi kullanabiliriz.

Plane number 0

$$\begin{vmatrix} x_1 & x_2 & x_3 \\ u_{11} & u_{12} & u_{13} \\ u_{21} & u_{22} & u_{23} \end{vmatrix} = 0$$

Plane number 1

$$\begin{vmatrix} x_1 & x_2 & x_3 \\ u_{11} & u_{12} & u_{13} \\ u_{21} & u_{22} & u_{23} \end{vmatrix} = 1$$

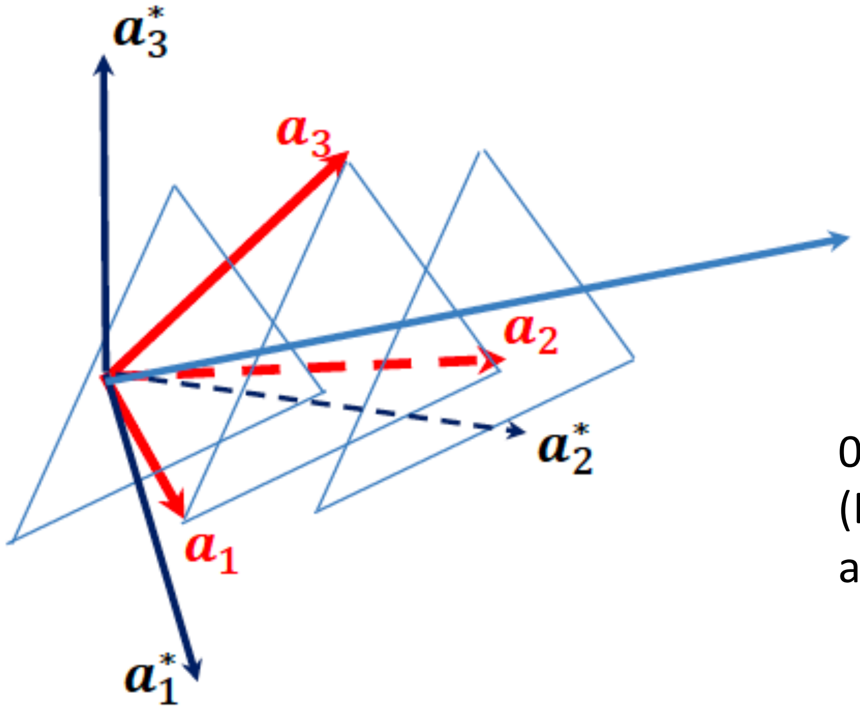
Plane number 2

$$\begin{vmatrix} x_1 & x_2 & x_3 \\ u_{11} & u_{12} & u_{13} \\ u_{21} & u_{22} & u_{23} \end{vmatrix} = 2$$

Genel olarak, başlangıç noktasından düzlem numarası N'nin denklemi

$$h_1 x_1 + h_2 x_2 + h_3 x_3 = N \quad \text{with } h_1 = \begin{vmatrix} u_{12} & u_{13} \\ u_{22} & u_{23} \end{vmatrix} \quad h_2 = -\begin{vmatrix} u_{11} & u_{13} \\ u_{21} & u_{23} \end{vmatrix} \quad h_3 = \begin{vmatrix} u_{11} & u_{12} \\ u_{21} & u_{22} \end{vmatrix}$$

Ters Örgü Baz vektörleri açısından düzlemlerin denklemi (3D)



Kafes düzlemleri için denklem:

$$h_1x_1 + h_2x_2 + h_3x_3 = N$$

artık nokta çarpımla yeniden yazılabilir

$(\boldsymbol{B}\ \boldsymbol{R}) = \mathrm{N}$

$\boldsymbol{R} = x_i\boldsymbol{a_i}$ $\quad$ $\boldsymbol{B} = h_i\boldsymbol{a}_i^*$

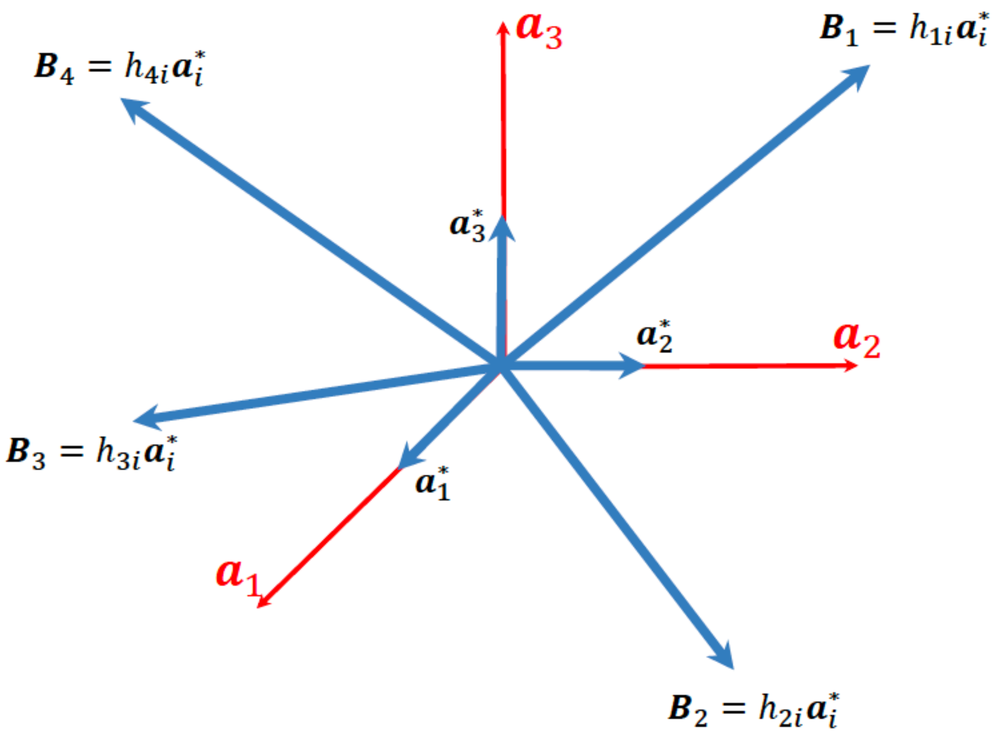
0 numaralı düzlem için (başlangıç noktasından geçen düzlem) (B R) = 0 elde ederiz, bu, düzlemin B vektörüne dik olduğu anlamına gelir. İlk düzlem için (B R) = 1.

Her kafes sıraları kümesi Miller ENDEKSLERİ olarak bilinen TAM SAYILAR (tipik olarak h, k ve l olarak adlandırılır) ile tanımlanır.

Miller ENDEKSLERİ ile kafes düzlemlerin özellikleri h k l

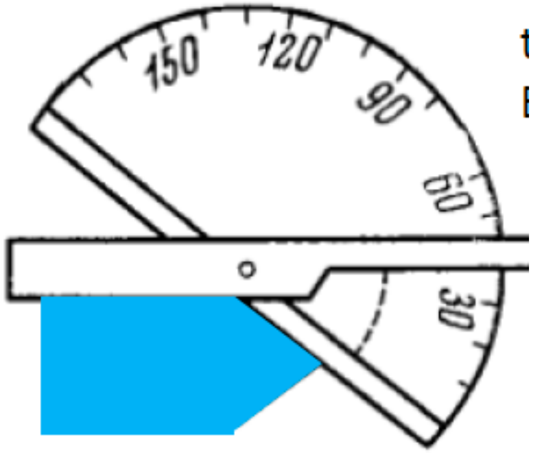
- 1. Düzlemlerin denklemi h x + k y + lz = N'dir (N tamsayı ile)
- 2. Düzlem seti ters örgü vektörü B = ha * + kb * + lc * 'ye diktir.
- 3. Komşu düzlemler arasındaki mesafe d = 1 / | B |
- 4. Düzlem örgü temel vektörlerini [N / h, 0, 0], [0, N / k, 0], [0,0, N / l] noktalarında keser.

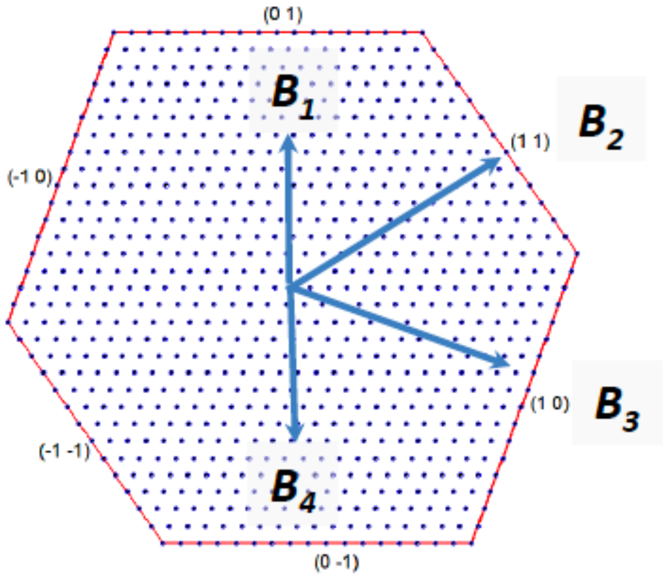
Kübik kafese karşılık gelen kristal şekiller (kafes sabitleri a = b = c, $\alpha = \beta = \gamma = 90°$)



Yüzler arasındaki açılar: kristal kafese nasıl bağlıdırlar

- Miller indeksli yüz (hkl) ters örgü vektörü
- B = [hkl]* = ha* + kb* + lc* 'ye diktir.





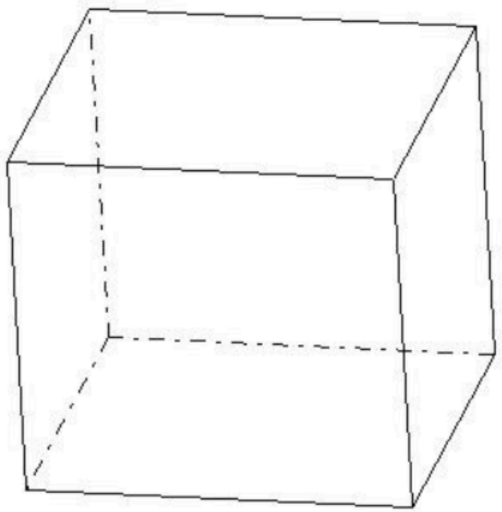
The angle between faces $\alpha_{IJ} = \angle(\boldsymbol{B}_I, \boldsymbol{B}_J)$

$$cos\alpha_{IJ} = \frac{(\boldsymbol{B}_I \cdot \boldsymbol{B}_J)}{B_I B_J}$$

$$(\boldsymbol{B}_I \cdot \boldsymbol{B}_J) = h_{Ii} h_{Jj} G^*_{ij}$$

Kübik kafese karşılık gelen kristal şekiller (kafes sabitleri a = b = c, $\alpha = \beta = \gamma = 90^{\circ}$)

Cube

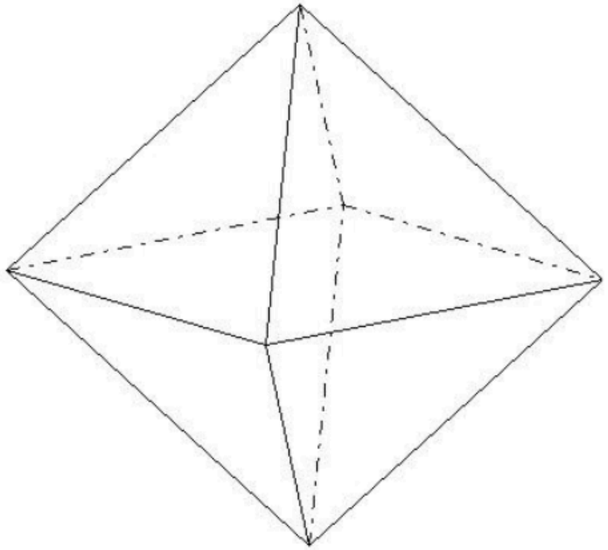


The list of faces for a cube:

(100) (010) (001)

$(\bar{1}00)$ $(0\bar{1}0)$ $(00\bar{1})$

Octahedron

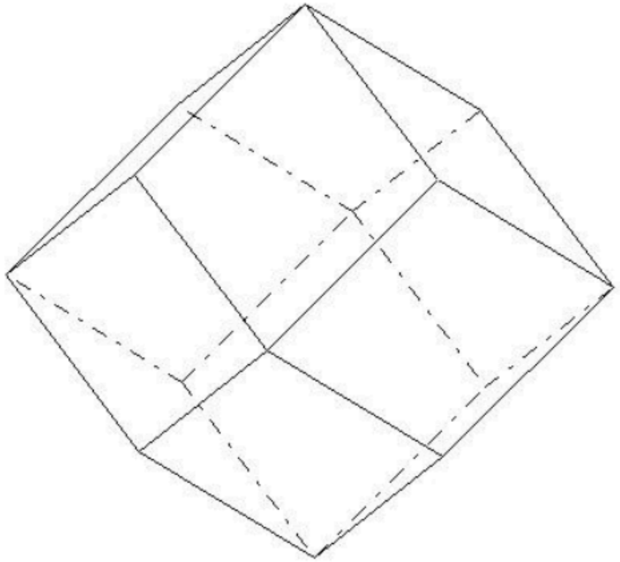


The list of faces for an octahedron:

(111) $(\bar{1}11)$ $(1\bar{1}1)$ $(\bar{1}\bar{1}1)$

$(11\bar{1})$ $(\bar{1}1\bar{1})$ $(1\bar{1}\bar{1})$ $(\bar{1}\bar{1}\bar{1})$

Rhombododecahedron



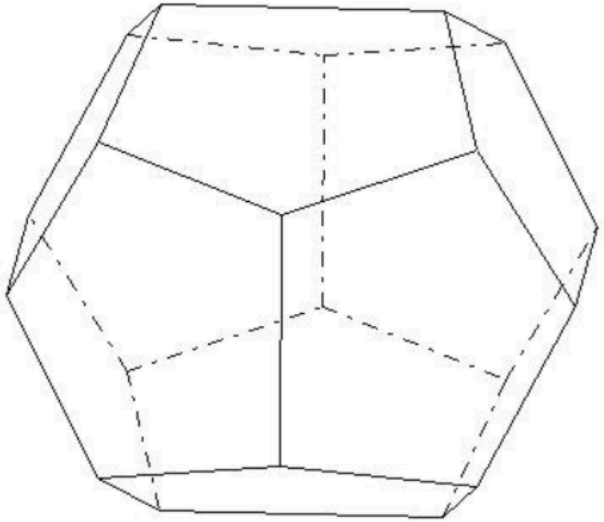
The list of faces :

(110) $(1\bar{1}0)$ $(\bar{1}10)$ $(\bar{1}\bar{1}0)$

(101) $(10\bar{1})$ $(\bar{1}01)$ $(\bar{1}0\bar{1})$

(011) $(01\bar{1})$ $(0\bar{1}1)$ $(0\bar{1}\bar{1})$

Pentagondodecahedron

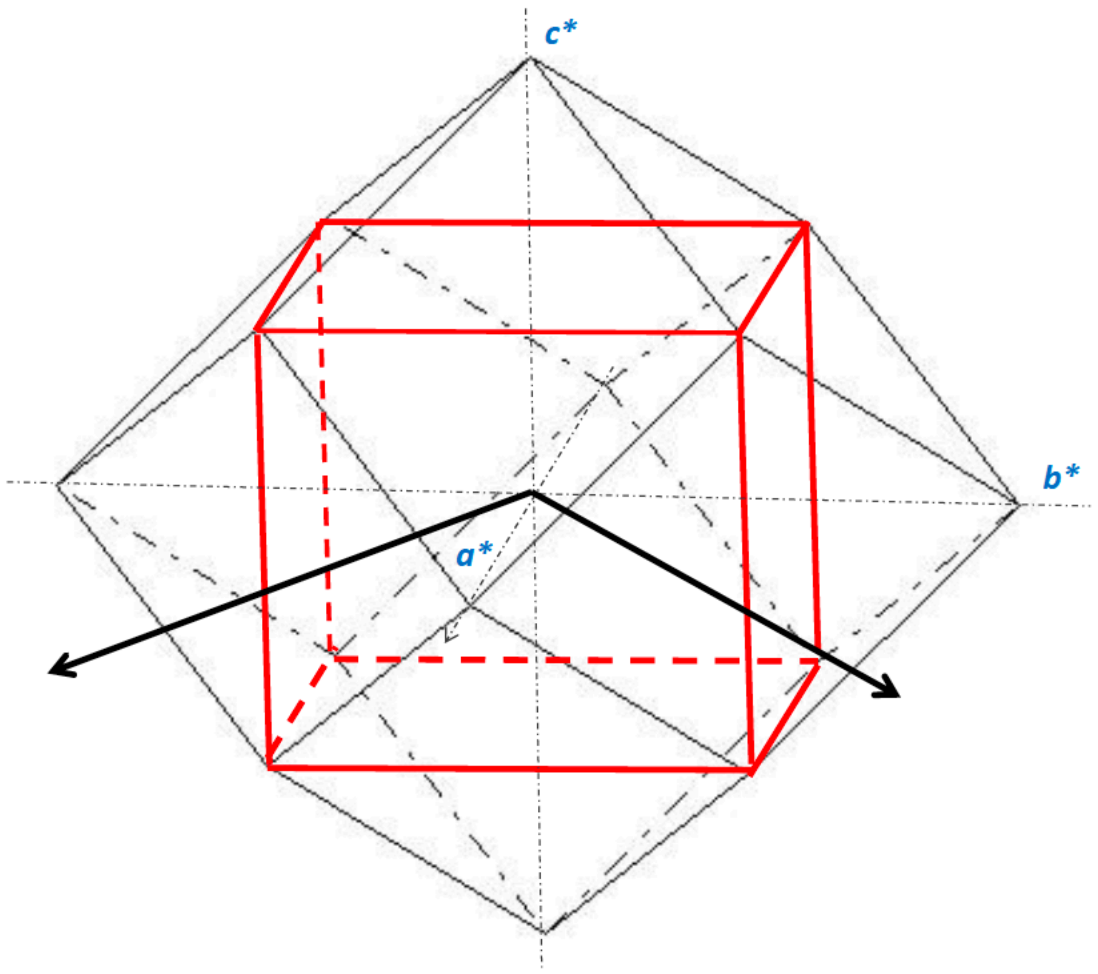


The list of faces :

(120) $(1\bar{2}0)$ $(\bar{1}20)$ $(\bar{1}\bar{2}0)$

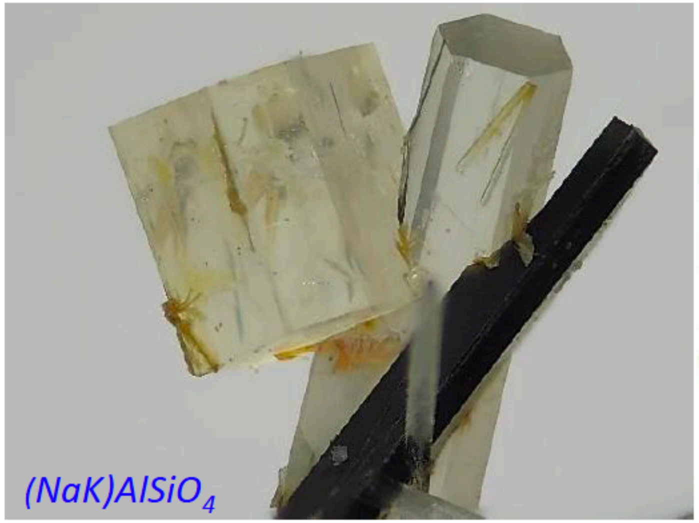
(201) $(20\bar{1})$ $(\bar{2}01)$ $(\bar{2}0\bar{1})$

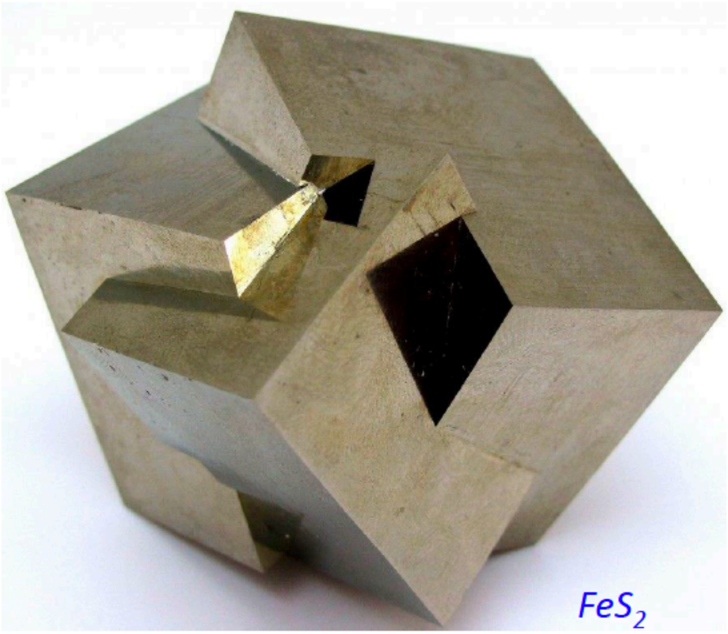
(012) $(01\bar{2})$ $(0\bar{1}2)$ $(0\bar{1}\bar{2})$


c*
b*
a*

Kristal morfolojileri

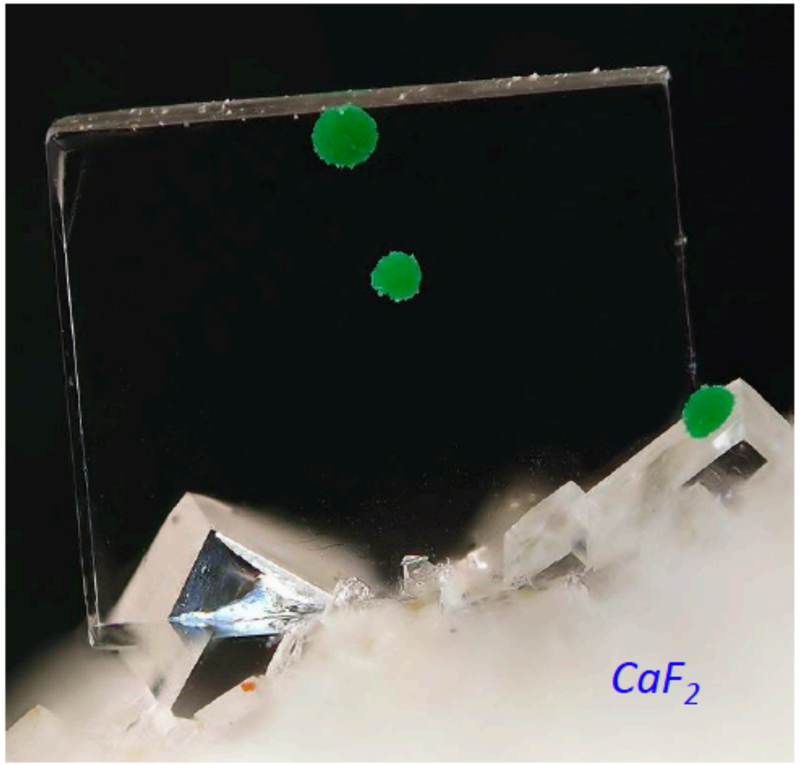
http://www.geologypage.com/p/minerals.html





http://www.geologypage.com/p/minerals.html

http://www.geologypage.com/p/minerals.html



http://www.geologypage.com/p/minerals.html