

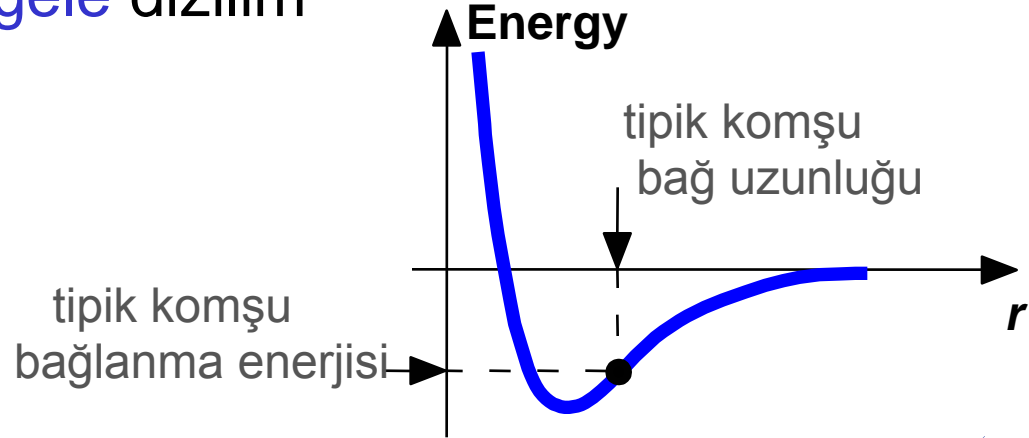
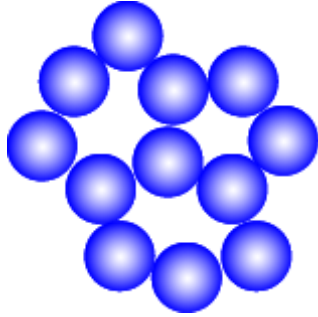
Bölüm 3: Kristal Yapılı Katılar

- Atomlar birleşip nasıl katı yapıyı oluştururlar?
- Malzemenin yoğunluğu yapısına nasıl bağlıdır?
- Malzemenin özellikleri katı yerleşimi ile nasıl ilişkilidir?

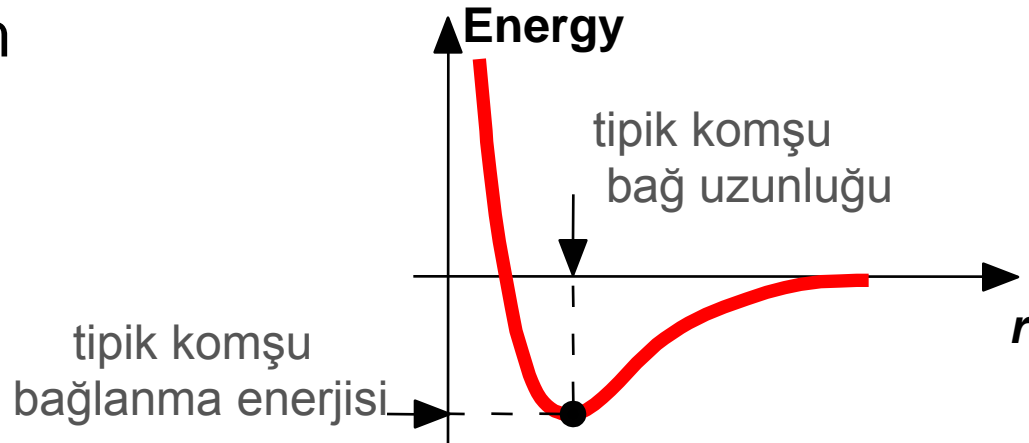
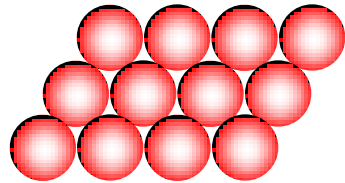


Enerji and Dizilim

- yoğun olmayan, rastgele dizilim



- Yoğun, tekrarlı dizilim

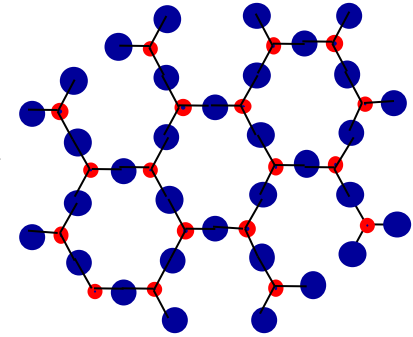


Yoğun, tekrarlı dizilim yapının enerjisi daha düşüktür.

Enerji and Dizilim

Kristal malzemeler...

- atomlar düzenli dizilmiştir, 3-boyutlu sıralama
- tipik olarak:
 - metaller
 - çoğu seramikler
 - çoğu polimerler



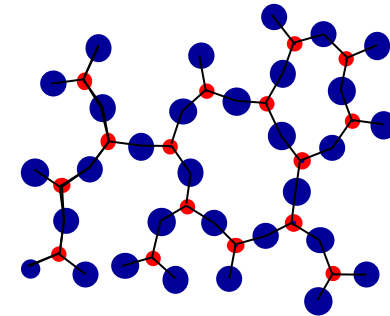
kristal SiO₂

Adapted from Fig. 3.23(a),
Callister & Rethwisch 8e.

Kristal olmayan malzemeler...

- atomlar düzenli sıralanmamıştır
- genellikle:
 - kompleks yapılar
 - hızlı soğutma

• **Si** • **Oxygen**



amorf SiO₂

Adapted from Fig. 3.23(b),
Callister & Rethwisch 8e.

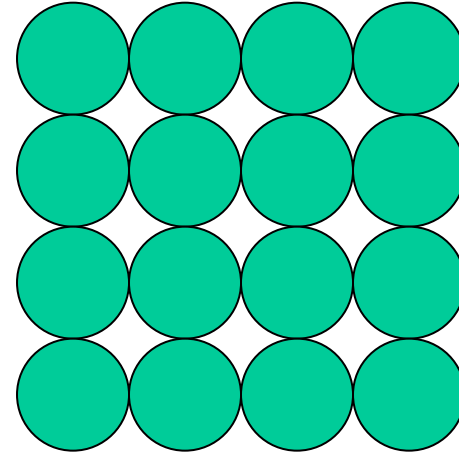
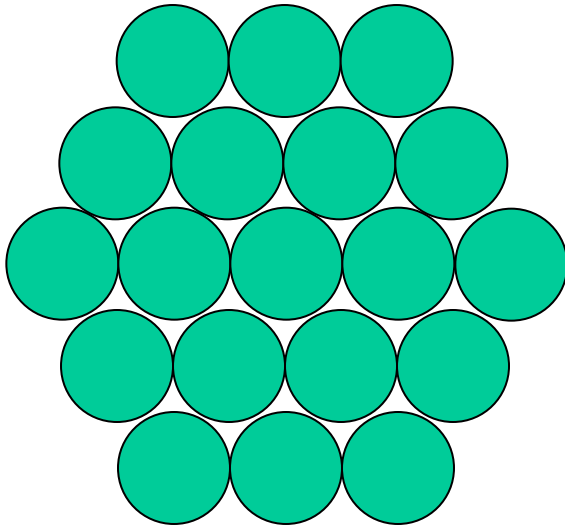
"Amorf" = kristal olmayan



Metalik Kristal Yapı

- Atomları nasıl dizelimki ara boşluklar en az olsun?

2-boyutta



Şimdi 2 boyutu 3 boyuta çevirelim

Metalik Kristal Yapı

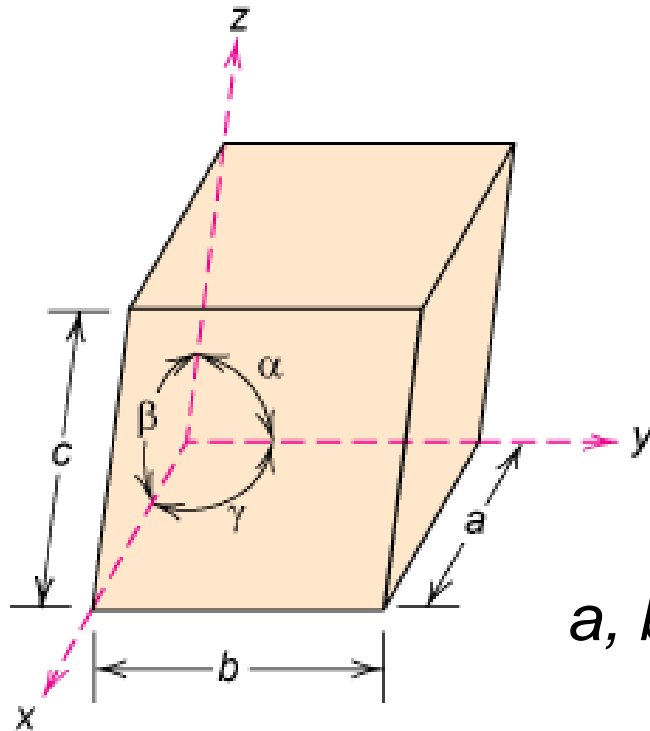
- çok sıkı dizilim eğilimi gösterirler.
- sıkı dizilimin sebepleri:
 - Genellikle tek tip elementin atomları dizilir ve sabit atom yarıçapı vardır.
 - Metalik bağ yönlü değildir.
 - En yakın komşunun uzaklığı bağlanma enerjisini azaltmak için çok yakın olmalıdır.
 - Elektron bulutu metal çekirdekleri birbirinden uzakta tutar.
- En basit kristal yapı türleridir.

Bunlardan dördünü inceliyeceğiz...



Crystal Systems

Unit cell: smallest repetitive volume which contains the complete lattice pattern of a crystal.



7 crystal systems

14 crystal lattices

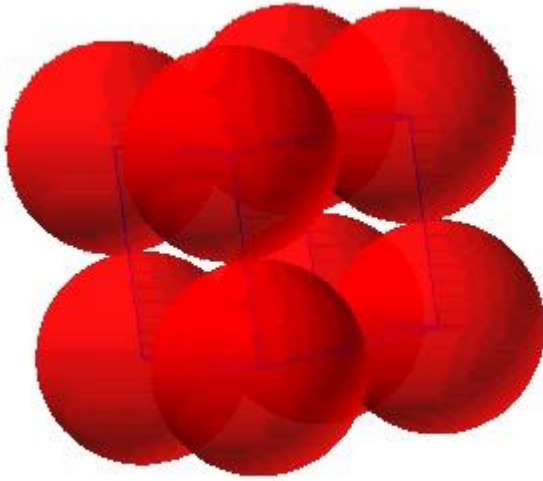
a , b , and c are the lattice constants

Fig. 3.4, Callister & Rethwisch 8e.

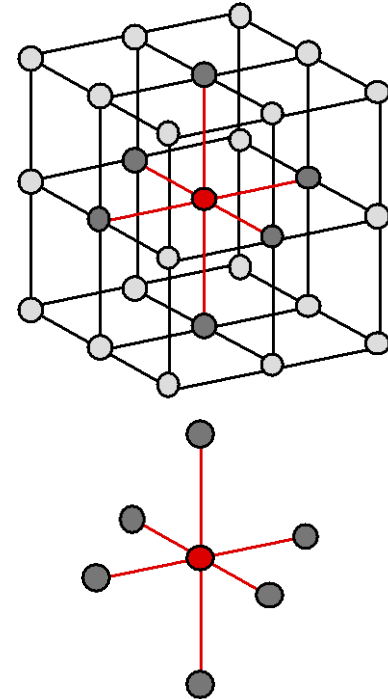


Basit Kübik Kafes(BKK)

- Düşük dizilim yoğunluğu sebebiyle azdır
(sadece Po'un yapısı)
- Sıkı dizilim yönü kübün kenarlarıdır.
 - Kordinasyon sayısı = 6



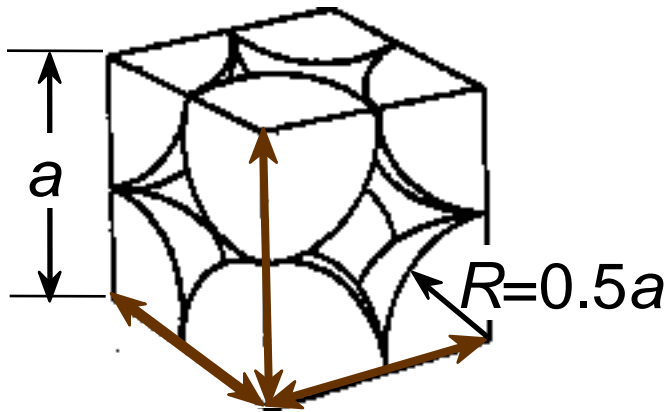
Click once on image to start animation
(Courtesy P.M. Anderson)



Atomal Doluluk Faktörü (ADF)

$$\text{ADF} = \frac{\text{Birim hücredeki atomların hacmi}}{\text{Birim hücrenin hacmi}}$$

- ADF BKK için = 0.52



Sıkı dizilim yönü

$$8 \times 1/8 = 1 \text{ atom/birim hücre}$$

$$\text{APF} = \frac{\text{atom} \times \frac{4}{3} \pi (0.5a)^3}{a^3}$$

$\frac{\text{hacim}}{\text{atom}}$

$\frac{\text{hacim}}{\text{birim hücre}}$

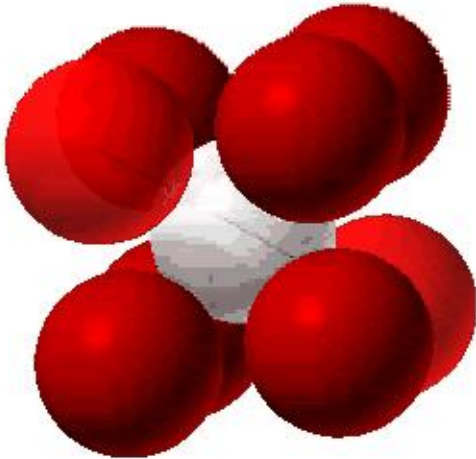


Hacim Merkezli Kübik Yapı(HMK)

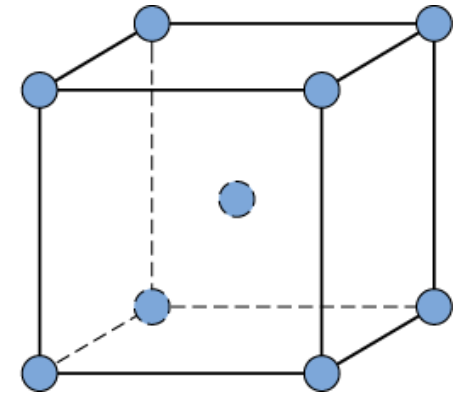
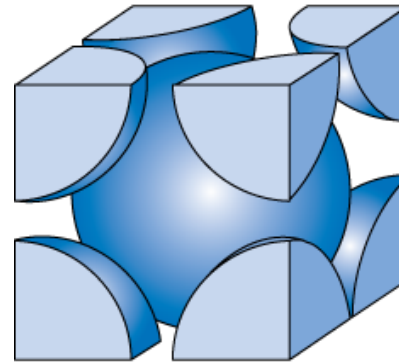
- Atomlar birbirine kübün merkez diyagonallerinden dokunur.
--Not: Tüm atomlar aynıdır; merkezdeki atomun renk farkı kolay anlaşılabilirlik içindir.

Ör: Cr, W, Fe (α), Ta, Mo

- Koordinasyon sayısı = 8



Click once on image to start animation
(Courtesy P.M. Anderson)



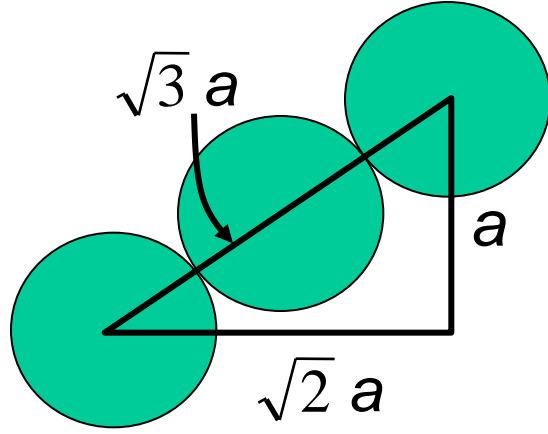
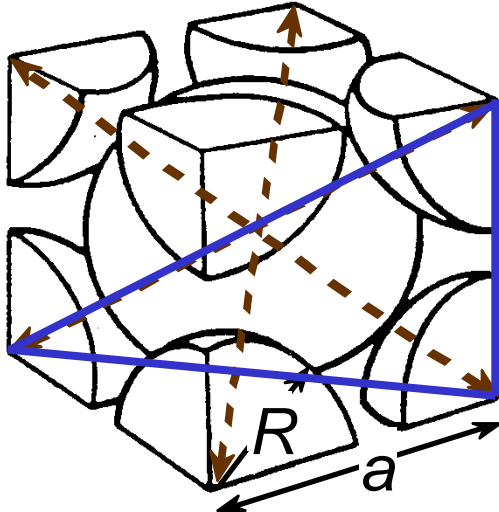
Adapted from Fig. 3.2,
Callister & Rethwisch 8e.

2 atom/birim hücre: 1 merkez + 8 köşe x 1/8



ADF: BCC

- ADF HMK için= 0.68



Sıkı düzen yönü:
uzunluk= $4R = \sqrt{3} a$

Adapted from
Fig. 3.2(a), Callister &
Rethwisch 8e.

$$\text{APF} = \frac{\text{atom birim hücre}}{a^3} = \frac{2 \cdot \frac{4}{3} \pi (\sqrt{3}a/4)^3}{a^3}$$

atom
birim hücre → 2

hacim
atom ← $\frac{4}{3} \pi (\sqrt{3}a/4)^3$

hacim
birim hücre ← a^3

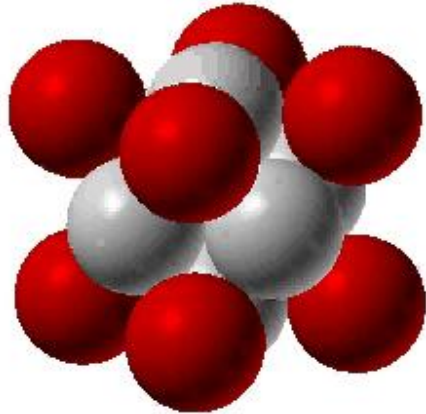


Yüzey Merkezli Kübik Yapı(YMK)

- Atomlar birbirine kübün yüz diyagonallerinden dokunur.
--Not: Tüm atomlar aynıdır; merkezdeki atomun renk farkı kolay anlaşılabilirlik içindir.

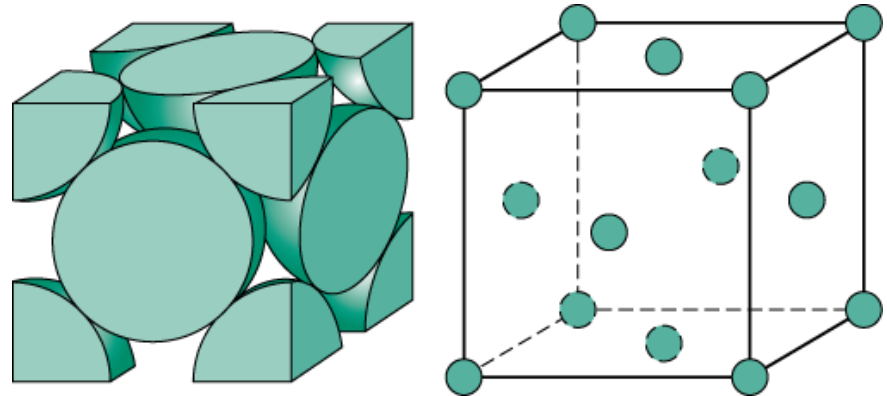
ex: Al, Cu, Au, Pb, Ni, Pt, Ag

- Koordinasyon sayısı = 12



Click once on image to start animation

(Courtesy P.M. Anderson)

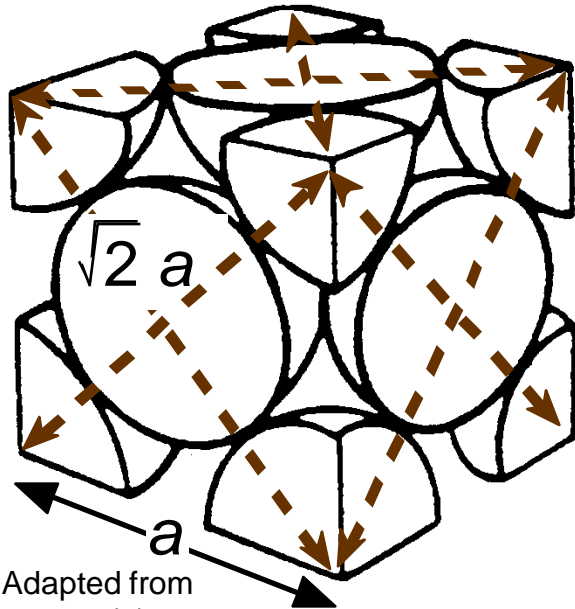


Adapted from Fig. 3.1, *Callister & Rethwisch 8e*.

4 atom/birim hücre: $6 \text{ yüzey} \times \frac{1}{2} + 8 \text{ köşe} \times \frac{1}{8}$

ADF: YMK

- ADF YMK için= 0.74



Adapted from
Fig. 3.1(a),
Callister &
Rethwisch 8e.

En yüksek olabilecek ADF

Sıkı dizilim yönü:

$$\text{uzunluk} = 4R \sqrt{2} a$$

$$\text{ADF} = \frac{\text{atom} / \text{birim hücre} \times \text{hacim atom}}{\text{hacim birim hücre}}$$

$$\text{ADF} = \frac{4 \times \frac{4}{3} \pi (\sqrt{2}a/4)^3}{a^3}$$



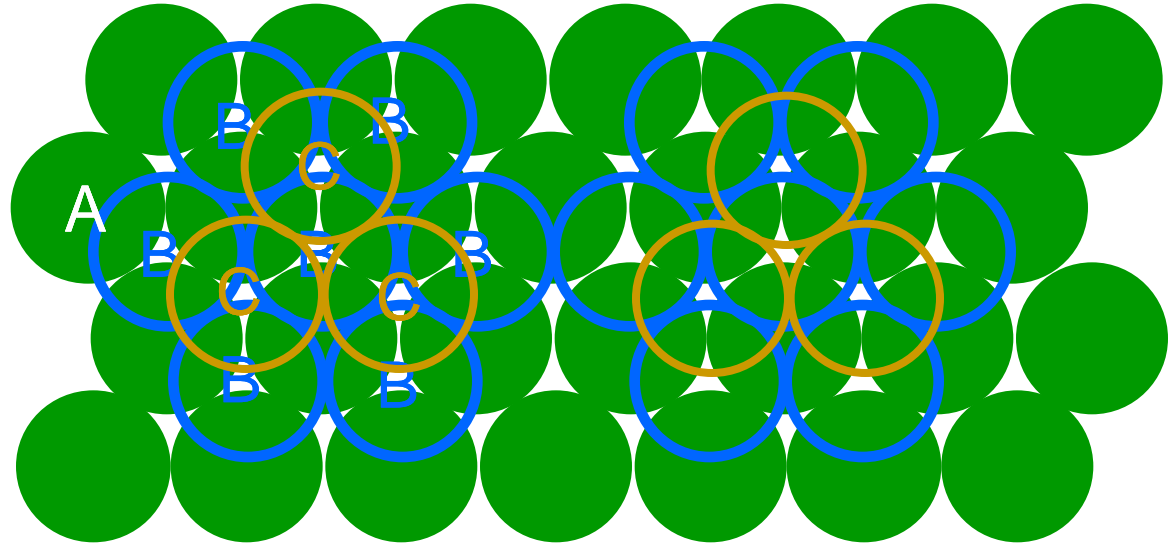
YMK Dizilim sıralaması

- ABCABC... Dizilim sıralaması
- 2-Boyut

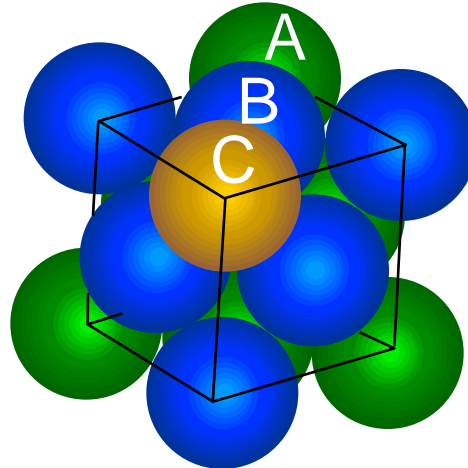
A sırası

B sırası

C sırası

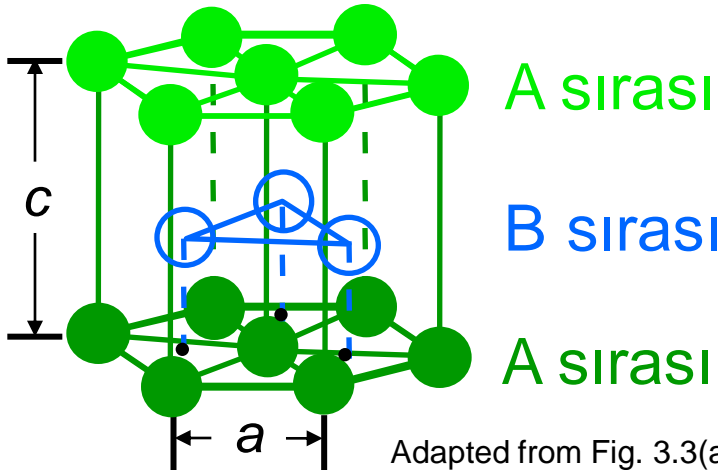


- YMK birim hücre



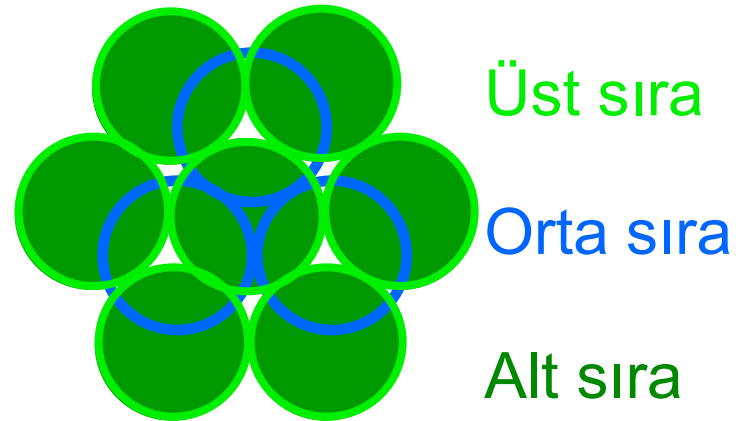
Hekzagonal Sıkı Düzen Yapı(HSD)

- ABAB... Dizilim sıralaması
- 3 boyutlu görünüm



Adapted from Fig. 3.3(a),
Callister & Rethwisch 8e.

- 2 boyutlu görünüm



- Koordinasyon sayısı = 12

- ADF = 0.74

- $c/a = 1.633$

6 atom/birim hücre

ex: Cd, Mg, Ti, Zn



Teorik Yoğunluk, ρ

$$\text{Yoğunluk} = \rho = \frac{\text{Birim hücredeki atomların kütlesi}}{\text{Birim hücrenin hacmi}}$$

$$\rho = \frac{n A}{V_C N_A}$$

n = atom sayısı/birim hücre

A = atom ağırlığı

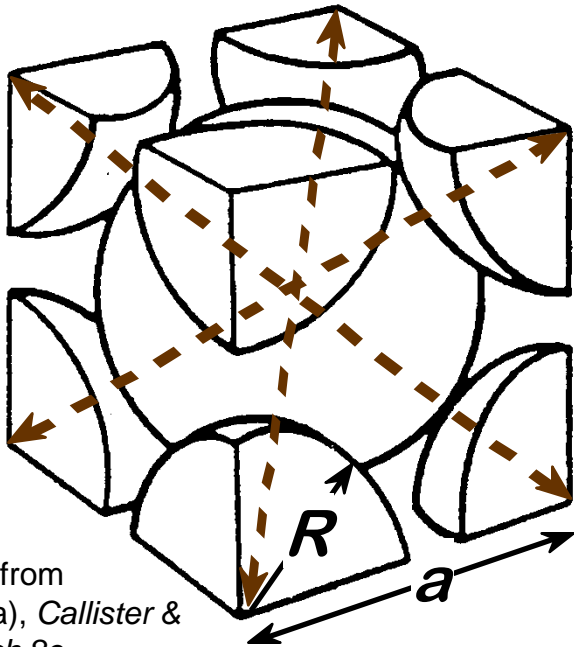
V_C = birim hücrenin hacmi = a^3 kübik yapılarda

N_A = Avogadro sayısı

= 6.022×10^{23} atom/mol



Teorik Yoğunluk, ρ



Adapted from Fig. 3.2(a), Callister & Rethwisch 8e.

- Ör: Cr (HMK)

$$A = 52.00 \text{ g/mol}$$

$$R = 0.125 \text{ nm}$$

$$n = 2 \text{ atom/birim hücre}$$

$$a = 4R/\sqrt{3} = 0.2887 \text{ nm}$$

$$\rho = \frac{\text{atom}}{\text{birim hücre}} \cdot \frac{A}{\text{g/mol}}$$

2 52.00

$$\frac{\text{g}}{\text{mol}}$$

ρ_{teorik}	$= 7.18 \text{ g/cm}^3$
$\rho_{\text{gerçek}}$	$= 7.19 \text{ g/cm}^3$

$$\rho = \frac{a^3 \cdot 6.022 \times 10^{23}}{\text{atom/mol}}$$

hacim
birim hücre

atom
mol



Malzeme Sınıflarının Yoğunlukları

Genel olarak

$$\rho_{\text{metaller}} > \rho_{\text{seramikler}} > \rho_{\text{polimerler}}$$

Metaller/
Alaşımlar

Grafit/
seramikler/
yariletkenler

Polimerler

Kompozitler/
lifler

Neden?

Metaller...

- sıkı paketlidirler (metalik bağ)
- genelde büyük atom ağırlıkları

Seramikler...

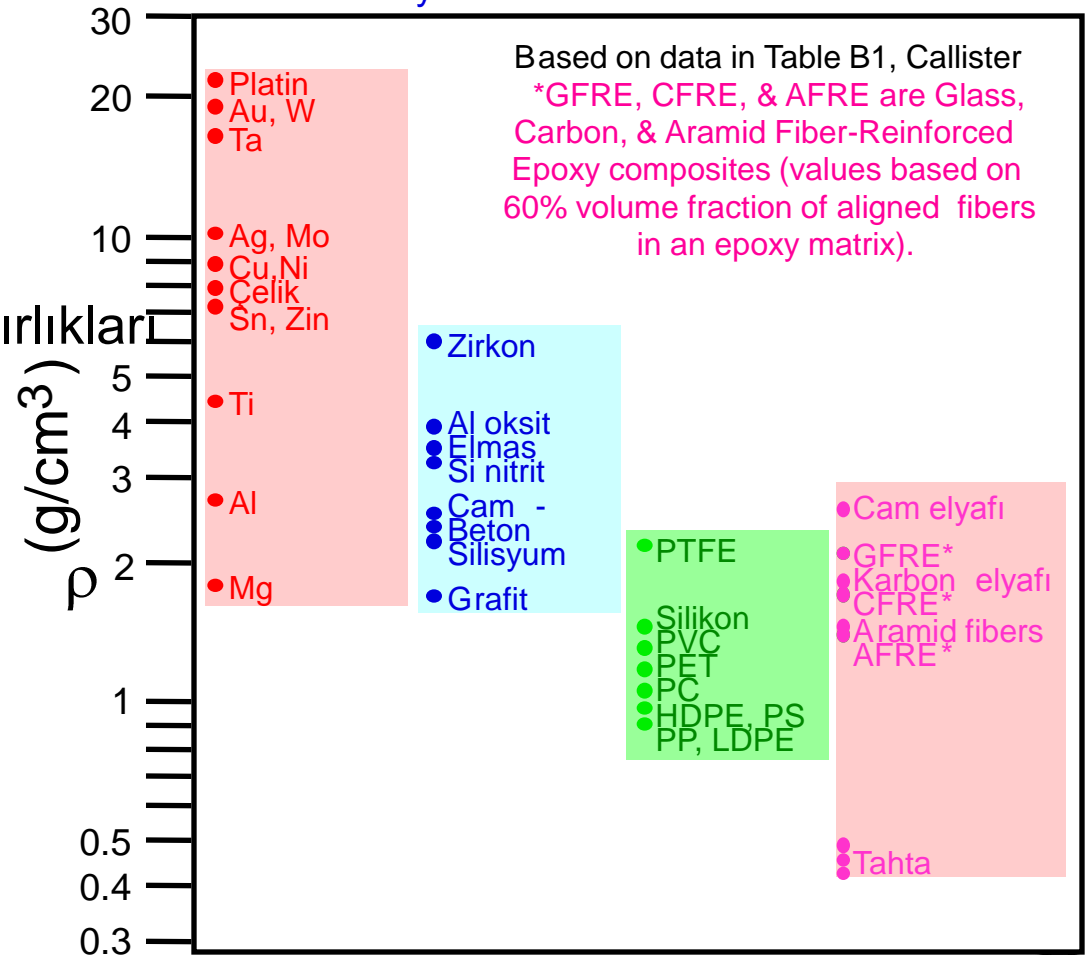
- daha seyrek dolu
- daha hafif

Polimerler...

- çok seyrek doluluk (genelde amorf)
- hafif elementler(C,H,O)

Kompozitler...

- arada değerler



Data from Table B.1, Callister & Rethwisch, 8e.



Kristaller Yapı Blokları

- *Bazı mühendislik uygulamaları tek kristalli oluşum ister.*
 - elmas tek kristalden oluşur
 - türbin kanatları



(Courtesy Martin Deakins, GE Superabrasives, Worthington, OH. Used with permission.)

Fig. 8.33(c), Callister & Rethwisch 8e. (Fig. 8.33(c) courtesy of Pratt and Whitney).



- Malzemenin özellikleri genellikle kristal yapısına göre değişir.
 - Ör: Kuartz bazı yönlerden diğer yönlere nazaran daha kolay kırılır



(Courtesy P.M. Anderson)

Polikristaller

- mühendislik malzemelerinin çoğu polikristallidir.



Anizotropik

Adapted from Fig. K,
color inset pages of
Callister 5e.
(Fig. K is courtesy of
Paul E. Danielson,
Teledyne Wah Chang
Albany)

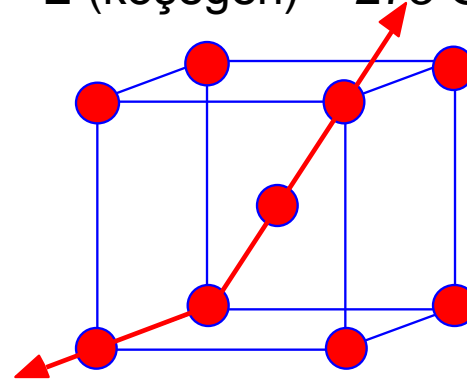
Izotropik

- Nb-Hf-W yüzeyinin elektron mikrokobunda görünümü.
- her bir "tane" tek kristaldir.
- eğer taneler rastgele dağılmış ise, bileşke özellikleri yönsüzdür.
- tane boyutu genellikle 1 nm den 2 cm ye değişir

Tek Kristaller & Polikristaller

- Tekli kristaller
 - özellikler yöne bağlıdır
: **anizotropik**.
 - ör: Elastiklik Modülü (E) in HMK-demir:

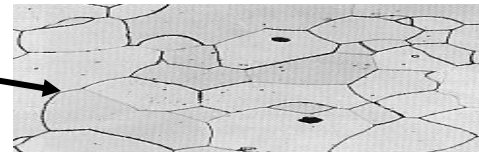
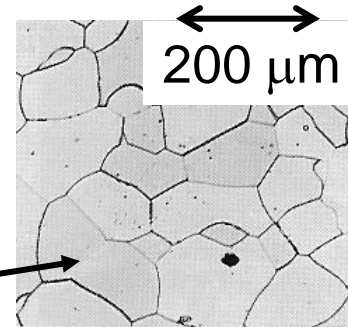
$$E (\text{köşegen}) = 273 \text{ GPa}$$



Data from Table 3.3, *Callister & Rethwisch 8e*. (Source of data is R.W. Hertzberg, *Deformation and Fracture Mechanics of Engineering Materials*, 3rd ed., John Wiley and Sons, 1989.)

$$E (\text{kenar}) = 125 \text{ GPa}$$

- Polikristaller
 - özellikler yöne bağlı veya değildir.
 - taneler rastgele dağılmışlarsa
: **izotropik**.
($E_{\text{poli demir}} = 210 \text{ GPa}$)
 - düzgün dağılımlı taneler ;
anizotropik.



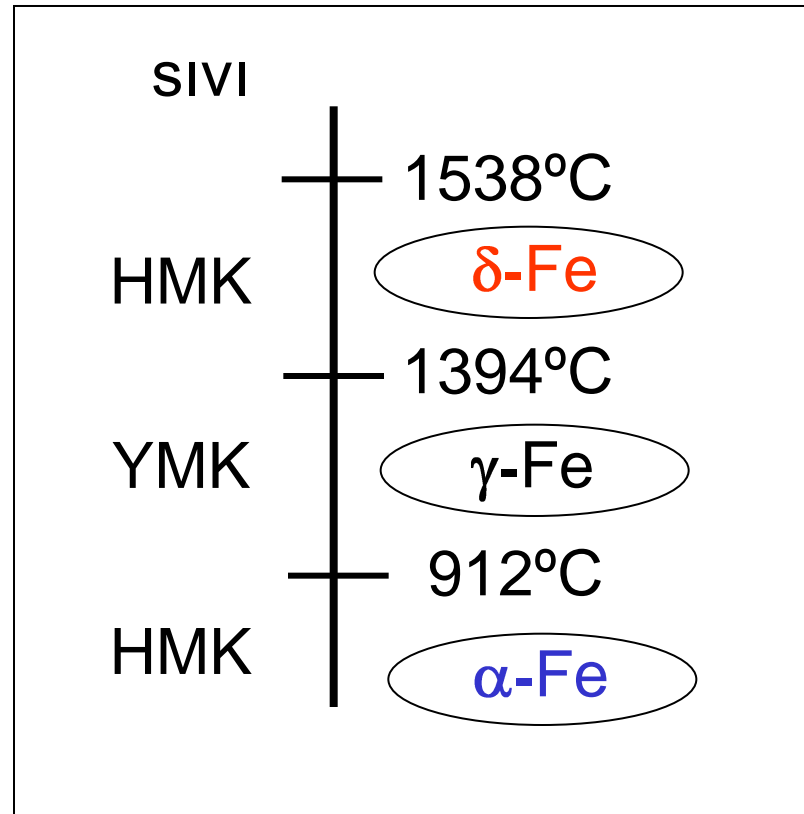
Adapted from Fig. 4.14(b), *Callister & Rethwisch 8e*. (Fig. 4.14(b) is courtesy of L.C. Smith and C. Brady, the National Bureau of Standards, Washington, DC [now the National Institute of Standards and Technology, Gaithersburg, MD].)

Polimorfizm

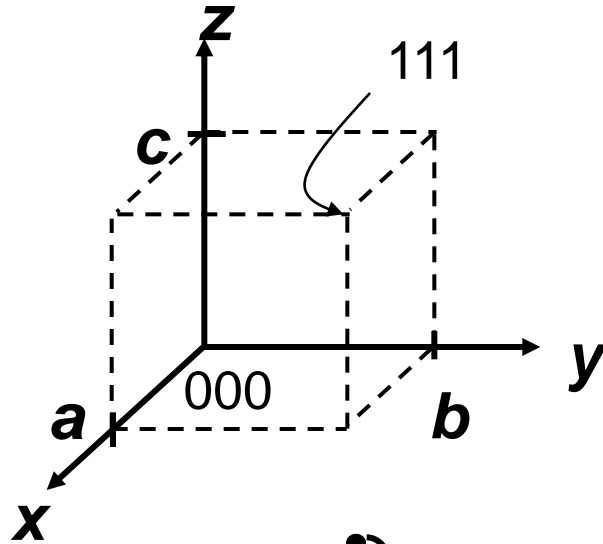
- Aynı kimyasal bileşime sahip fakat değişik kristal yapıları cisimlere **polimorflar** ve bu özelliğe de **polimorfizm** (Allotropi) denir. demir

titanyum
 α , β -Ti

karbon
elmas, grafit



Noktasal Koordinatlar

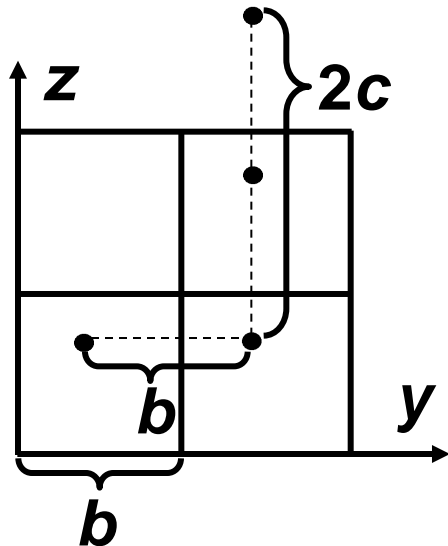


Kübün merkezinin koordinatı

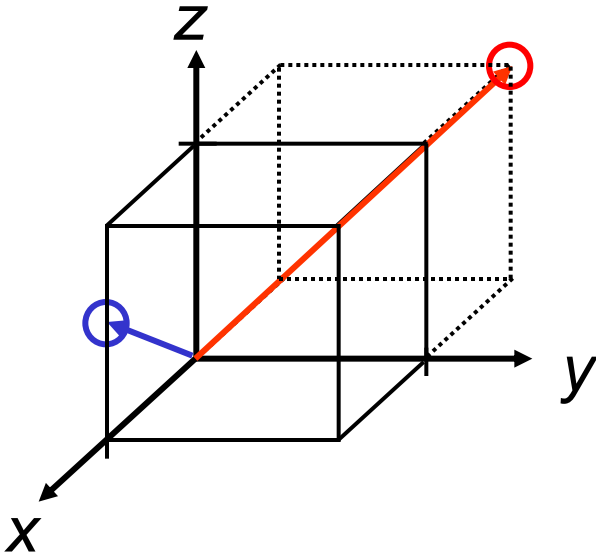
$$a/2, b/2, c/2 \quad \frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{2}$$

Kübün bir köşesinin koordinatı

$$111$$



Kristal Yönler



Algoritma

1. Birim hücrenin boyutları a , b , ve c olacak şekilde x , y ve z yönlerindeki kesişim noktaları alınır.
2. Hepsi en küçük tamsayıya çevrilir.
3. Yönler nokta kullanılmadan köşeli parantezle gösterilir.

$[uvw]$

ex: $1, 0, \frac{1}{2} \Rightarrow 2, 0, 1 \Rightarrow [201]$

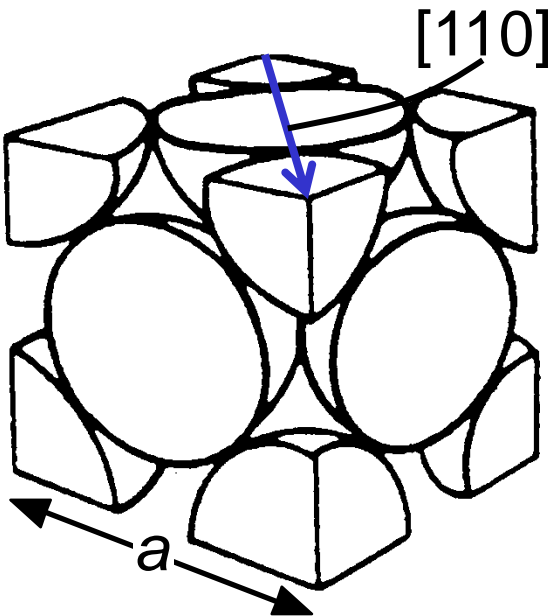
$-1, 1, 1 \Rightarrow [\bar{1}11]$ Üstteki kesik çigi yönün eksi yönde olduğunu gösterir.

Yönlerin familyası $\langle uvw \rangle$



Doğrusal Yoğunluk

Atomların Doğrusal Yoğunluğu \equiv LD = $\frac{\text{Doğrudaki atom sayısı}}{\text{Doğru vektörünün birim uzunluğu}}$



Adapted from
Fig. 3.1(a),
Callister &
Rethwisch 8e.

ör: Al'nin $[110]$ yönündeki doğrusal yoğunluğunu hesaplayınız.

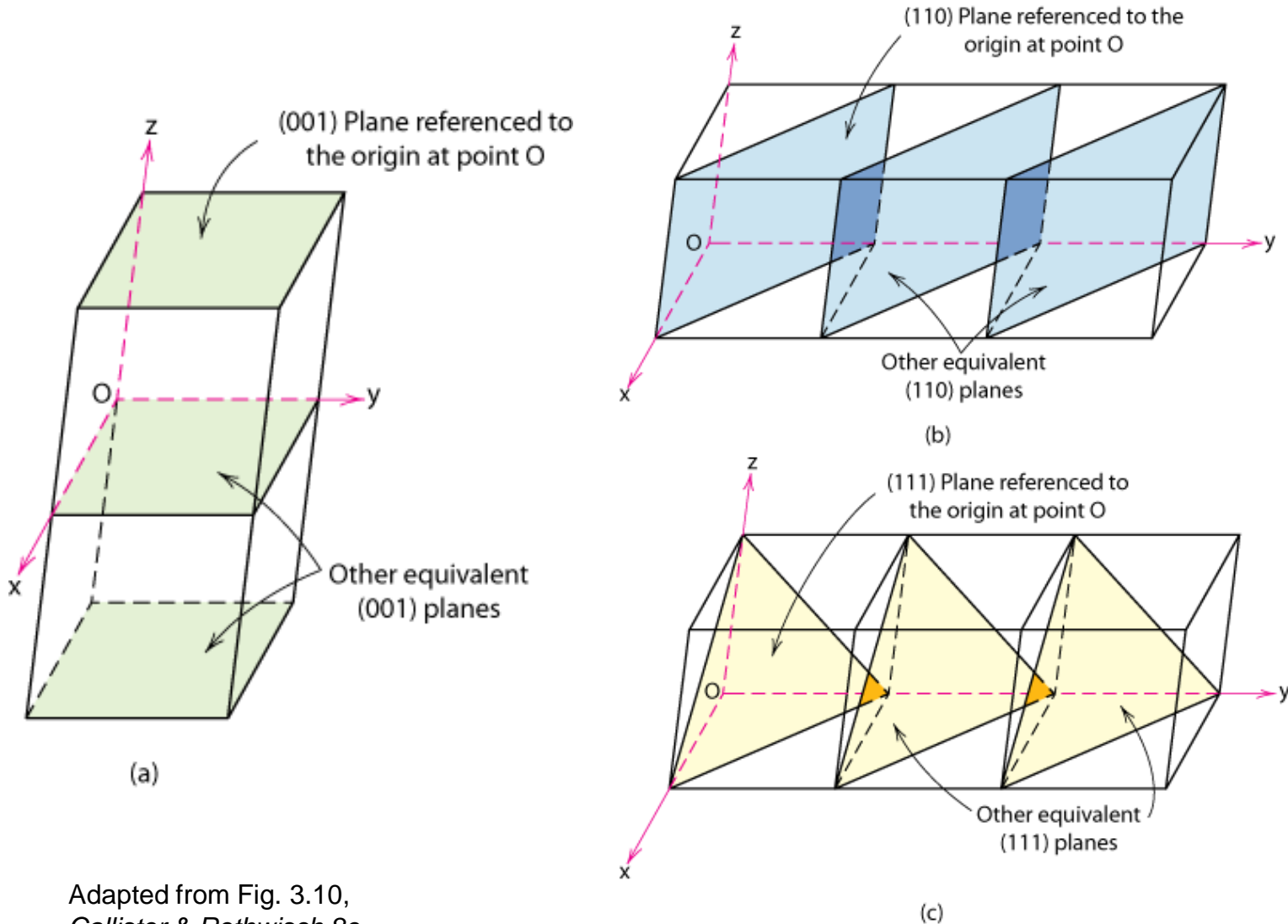
$$a = 0.405 \text{ nm}$$

atom sayısı \rightarrow 2

uzunluk \rightarrow $\sqrt{2}a$

$$\text{LD} = \frac{2}{\sqrt{2}a} = 3.5 \text{ nm}^{-1}$$

Kristal Düzlemler



Adapted from Fig. 3.10,
Callister & Rethwisch 8e.



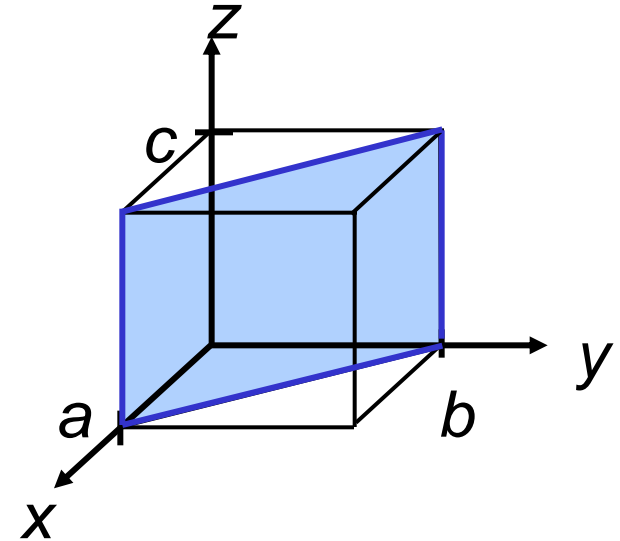
Kristal Düzlemler

- Miller İndisleri: Bir kristalde belirli atom düzlemleri özel bir öneme sahiptir. Metaller atomların çok sıkı paketlenildiği düzlemler boyunca şekil değiştirir. Bu düzlemleri tanımlamak için **(hkl)** şeklinde tam sayılardan oluşan Miller indisleri kullanılır.
- Algoritma
 1. Düzlemin x , y , z eksenlerini kestiği noktaların koordinatları tanımlanır
 2. Bu noktaların tersi alınır
 3. Bu sayılar uygun bir ortak çarpanla en küçük tam sayılar grubu haline getirilir.
 4. Sonuç **(hkl)** şeklinde gösterilir, negatif numaralar üzerine **(-)** işareti konur.
 5. Eşdeğer düzlemler ailesi **{hkl}** ile gösterilir.



Kristal Düzlemler

<u>Örnek</u>	<i>a</i>	<i>b</i>	<i>c</i>
1. Koordinat noktalar	1	1	∞
2. Tersleri	1/1	1/1	1/ ∞
3. En küçük tam sayı	1	1	0
4. Miller indisleri	(110)		



Düzlem familyası $\{hkl\}$

Ör: $\{100\} = (100), (010), (001), (\bar{1}00), (0\bar{1}0), (00\bar{1})$

Düzlemsel Yoğunluk

Atomların Düzlemsel Yoğunluğu $\equiv PD = \frac{\text{Düzlemdeki atom sayısı}}{\text{Düzlemin birim alanı}}$



Kristal Düzlemler

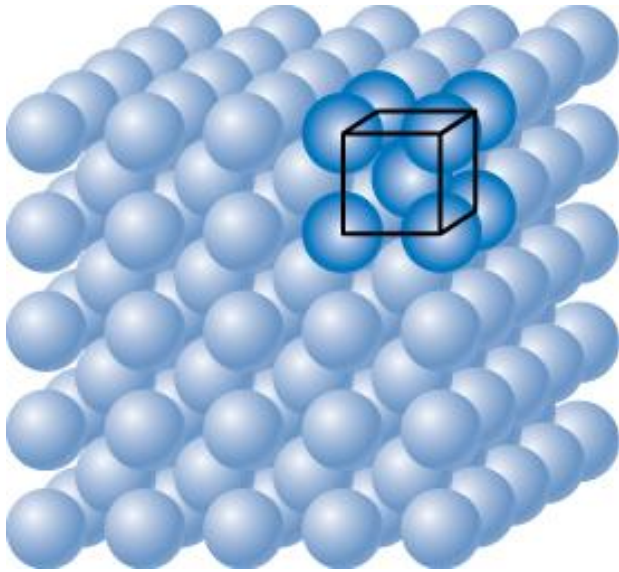
Örnek:

- Demir folyo katalist olarak kullanılabilir. Verilen düzlemde atomsal doluluk faktörü önemlidir.
 - a) Fe için (100) ve (111) kristaligrafik düzlemini çiziniz.
 - b) Her iki düzlem için düzlemsel yoğunluğu hesaplayınız.

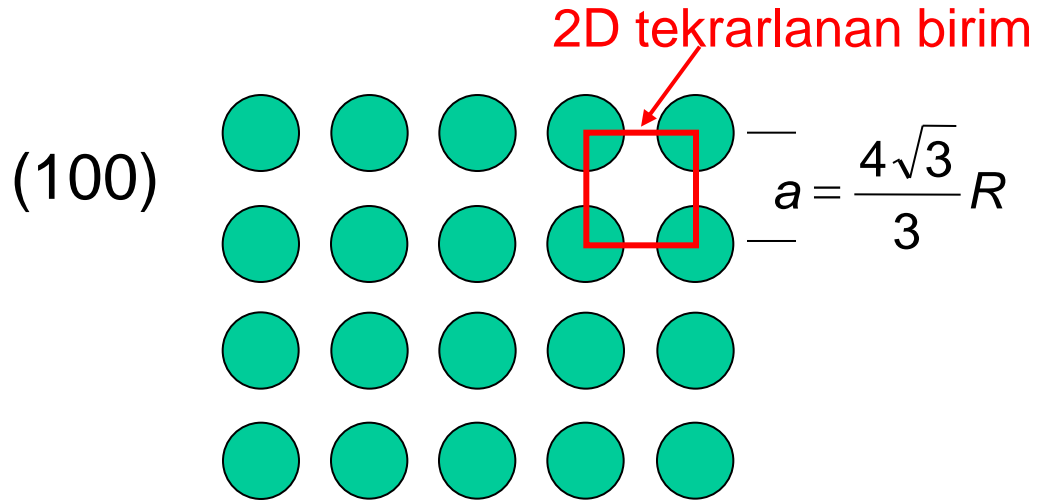


Demir (100) düzlemsel yoğunluğu

Çözüm: $T < 912^{\circ}\text{C}$ de demir HMK yapıdadır.



Adapted from Fig. 3.2(c), Callister & Rethwisch 8e.



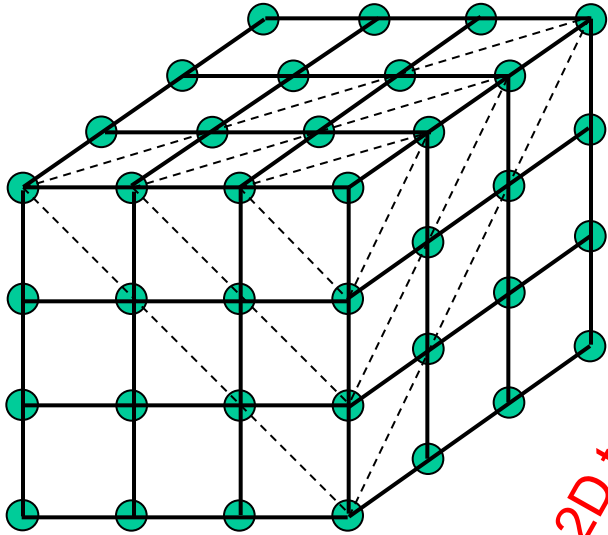
Fe nin yarıçapı $R = 0.1241 \text{ nm}$

$$\frac{\text{atom}}{\text{2D tekrarlanan b.}} \cdot \frac{\text{alan}}{\text{2D tekrarlanan b.}} = \frac{1}{a^2} = \frac{1}{\left(\frac{4\sqrt{3}}{3}R\right)^2} = 12.1 \frac{\text{atom}}{\text{nm}^2} = 1.2 \times 10^{19} \frac{\text{atom}}{\text{m}^2}$$

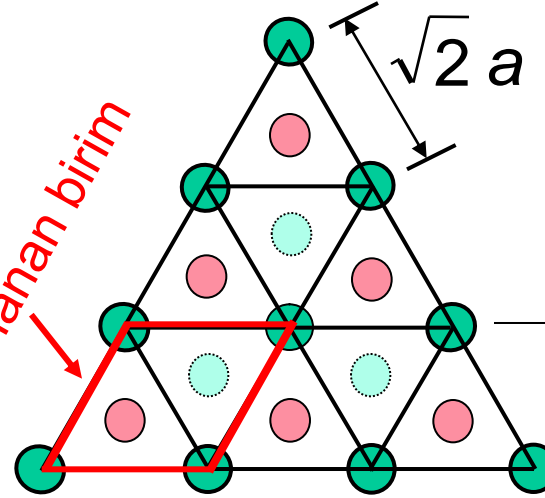
Demir (111) düzlemsel yoğunluğu

Çözüm: (111) Düzlemi

1 atom düzlemde/ birim hücrede



2D tekrarlanan birim



- düzlemdeki atomlar
- düzlemin üstündeki atomlar
- Düzlemin altındaki atomlar

$$\text{alan} = \sqrt{2} ah = \sqrt{3} a^2 = \sqrt{3} \left(\frac{4\sqrt{3}}{3} R \right)^2 = \frac{16\sqrt{3}}{3} R^2$$

atom
2D tekrarlanan b.

1

Düzlemsel yoğunluk = $\frac{1}{\frac{16\sqrt{3}}{3} R^2} = 7.0 \frac{\text{atom}}{\text{nm}^2} =$

alan
2D tekrarlanan b.

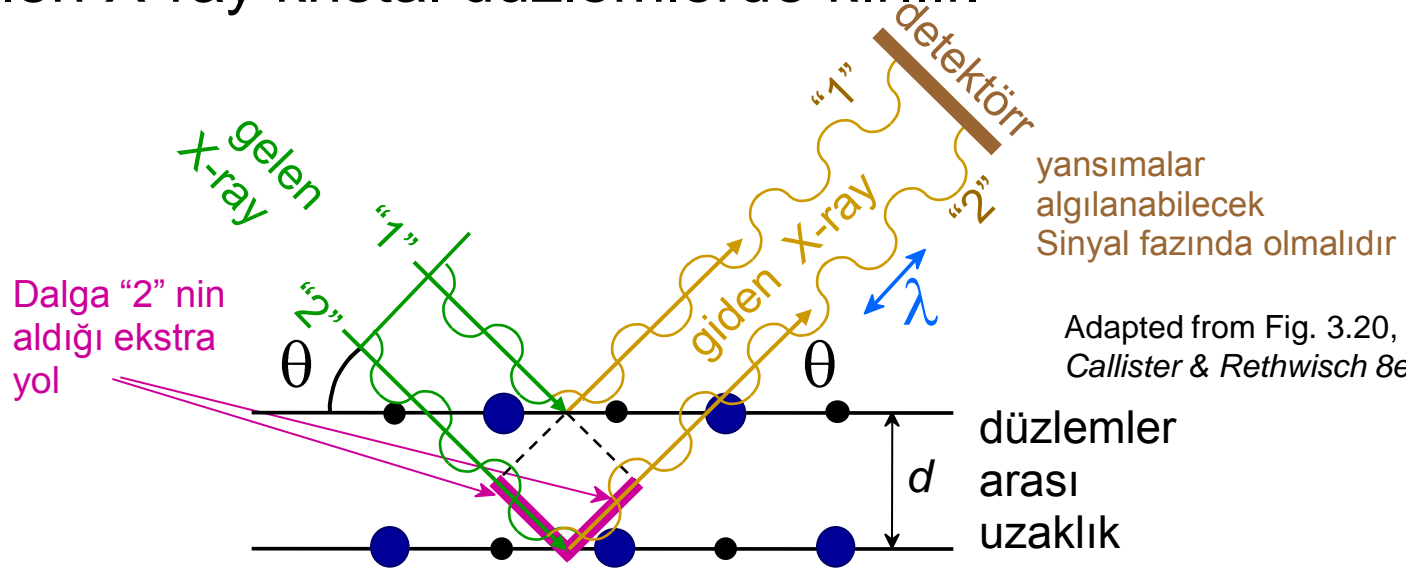
$$\frac{16\sqrt{3}}{3} R^2$$

$$0.70 \times 10^{19} \frac{\text{atom}}{\text{m}^2}$$



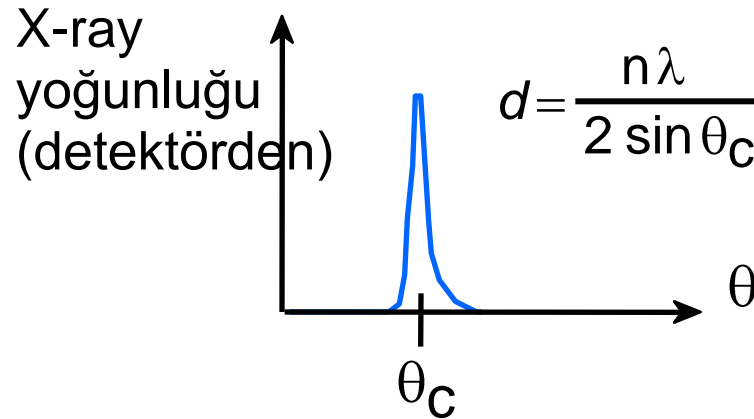
Kristal Yapı Tayini için X-Ray

- Gelen X-ray kristal düzlemlerde kırılır.

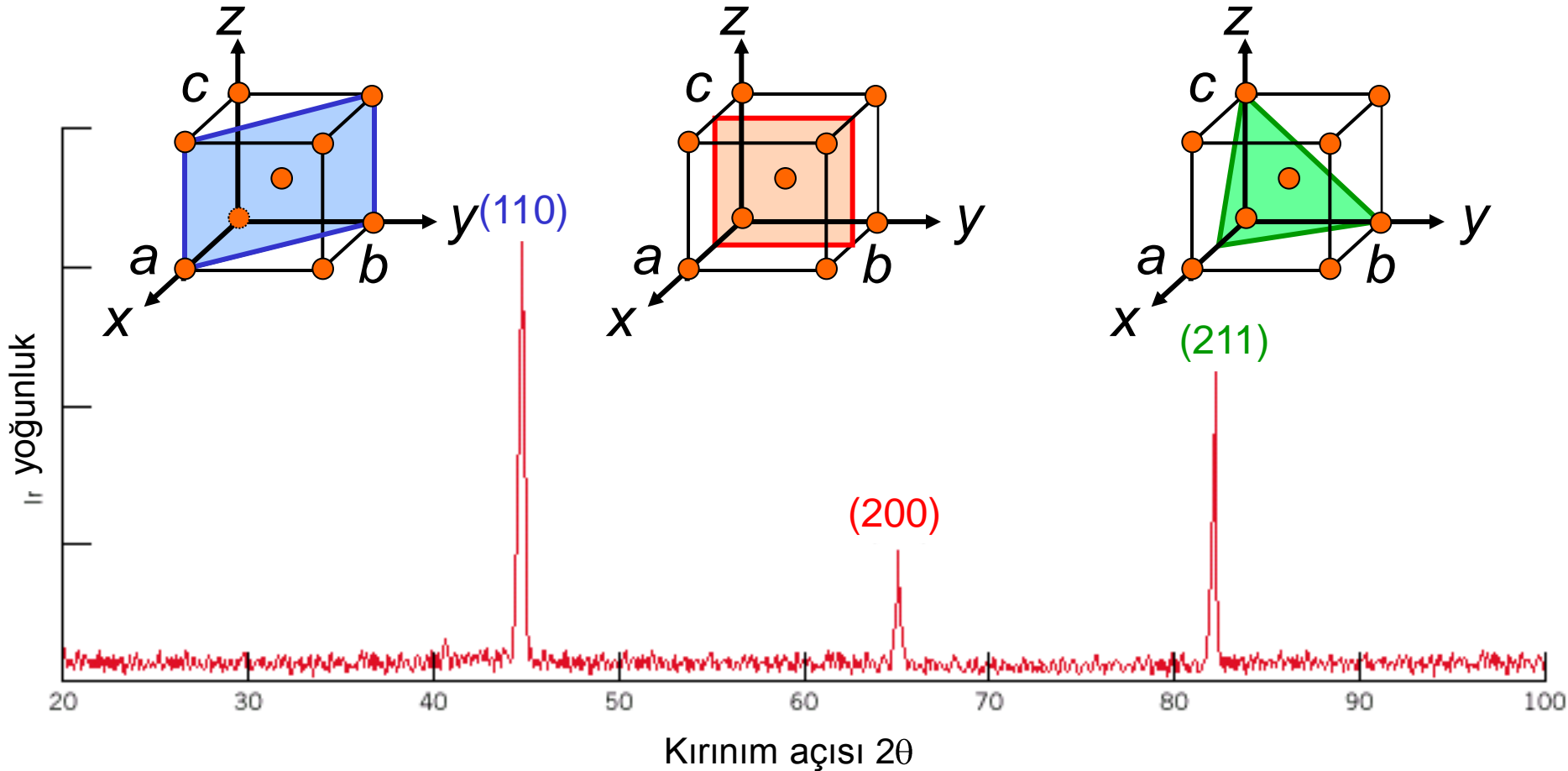


Adapted from Fig. 3.20,
Callister & Rethwisch 8e.

Ölçülen kritik açı, θ_c ,
düzlemler arası
mesafenin, d ,
hesaplanmasını sağlar.



X-Ray Kırınım dokuları



Polikristal demirin, α -iron (HMK), kırınım dokuları

Adapted from Fig. 3.22, *Callister 8e*.

ÖZET

- Atomlar **kristal** yada **amorf** yapıda dizilebilirler.
- En çok görülen kristal yapılar **YMK, HMK ve HSD** dir. **ADF** YMK ve HSD yapıları için aynıdır.
- **Malzemenin Yoğunluğunu atom ağırlığı, atom yarı çapı, ve kristal yapısı** verildiğinde hesaplayabiliriz (ör., YMK, HMK, HSD)
- Kristalografik doğrultular ve düzlemler **atomsal doğrusal yoğunluk ve düzlemsel yoğunluğu** bulmamızı sağlar.



ÖZET

- Malzemeler **tekli kristal yada polikristal** olabilir.
Malzemelerin özellikleri tekli kristalde genellikle oryantasyonla değişir (bu durumda **anizotropiktir**), ama genel olarak polikristal malzemelerde yöne , oryantasyona bağlı değildir (bu durumda **izotropiktirler**).
- Bazı malzemeler birden fazla kristal yapıya sahiptirler. Buna **polymorfizm** denir (yada **allotropi**).
- **X-ray diffraksiyonu** kristal yapıyı ve **düzlemlerarası uzaklığı** belirlemede kullanılır.

