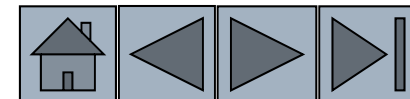


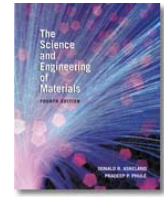
MALZEME BİLİMİ VE MÜHENDİSLİĞİ

Bölüm 3 – Atomik ve İyonik Düzenler

Hazırlayanlar

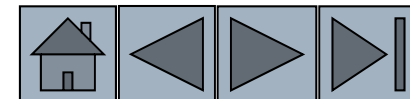
Prof. Dr. Gültekin Göller
Doç. Dr. Özgül Keleş
Araş. Gör. İpek Akın

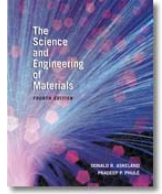




Bölüm 3. Hedefler

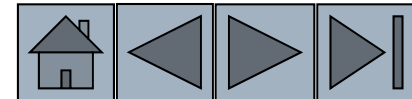
- Atomik/iyonik düzenlemelerine bağlı olarak malzemelerin sınıflandırılması.
- Latislere ve kristal yapılarına göre kristal katılarda düzenleri tanımlamak.

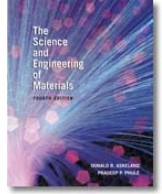




İçerik

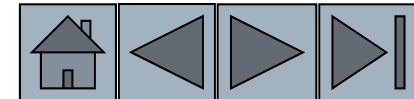
- 3.1 Kısa düzen ve uzun düzenler
- 3.2 Amorf Malzemeler: Prensipleri ve Teknolojik Uygulamaları
- 3.3 Latis, birim hücreler ve Kristal Yapılar.
- 3.4 Allotropik ve Polimorfik Dönüşümler
- 3.5 Birim hücrede noktalar, yönler, düzlemler
- 3.6 Arayerler
- 3.7 İyonik Malzemelerin Kristal Yapıları
- 3.8 Kovalent Yapılar



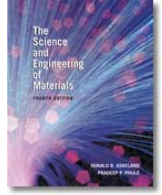


Bölüm 3.1. Kısa Mesafeli Düzenler-Uzun Mesafeli Düzenler

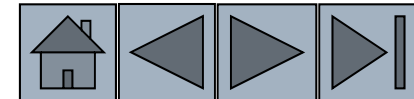
- **Kısa Mesafeli Düzenler (SRO)** – Kısa mesafede atomların tahmin edilebilir düzenlilikleridir. Bir veya iki atom aralıklı.
- **Uzun Mesafeli Düzenler (LRO)** – Bir katıda büyük bir mesafeyi işgal eden atomların tekrar edilebilen düzenleridir.
- **Bose-Einstein yoğunluğu condensate (BEC)** – Bir grup atomun aynı kuantum haline sahip atom gruplarıdır. Deneysel olarak yeni doğrulanmıştır.

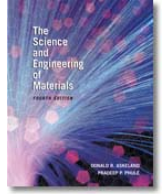


Bölüm 3.1. Kısa Mesafeli Düzenler-Uzun Mesafeli Düzenler



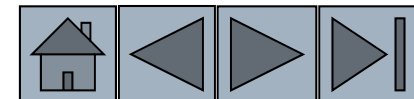
- ❑ Atomik dizilme katı bir maddenin mikroyapı ve davranışlarını belirlemede önemli rol oynamaktadır.
- ❑ Atomlar
 - ❑ Düzensiz (asal gazlar)
 - ❑ Kısa mesafeli istif düzeni (Cam)
 - ❑ Uzun mesafeli istif düzeni (Metaller ve pek çok katı)

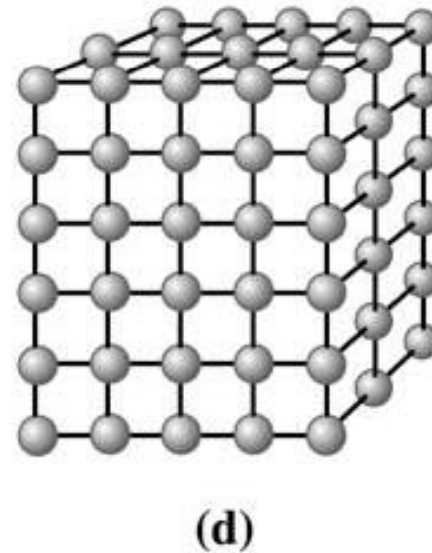
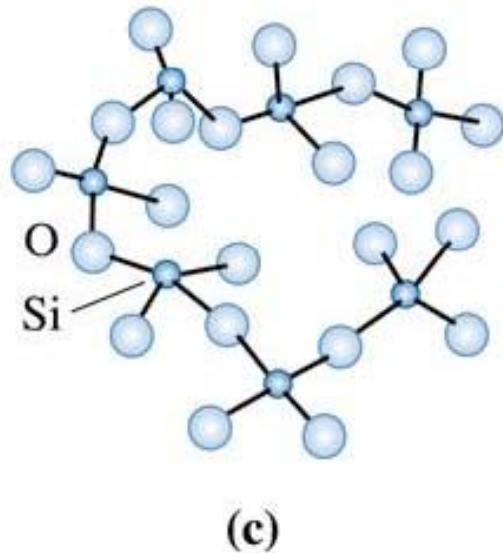
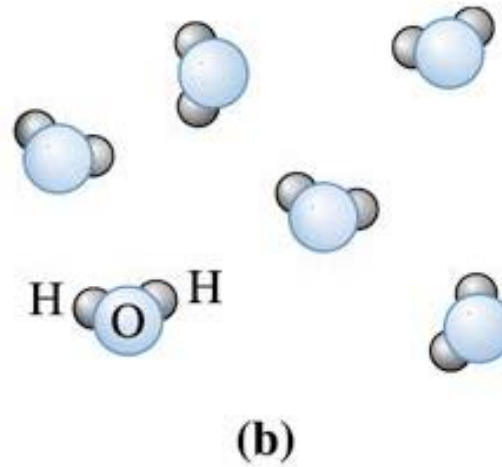
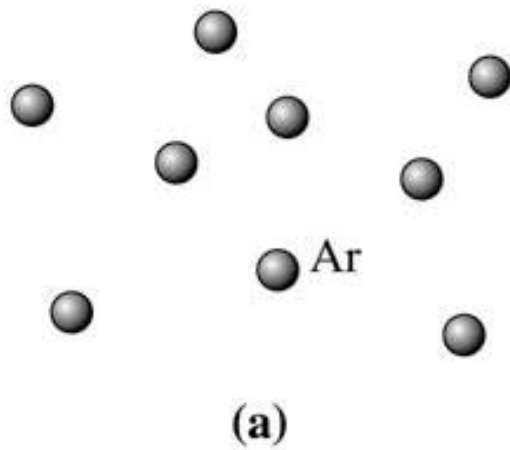
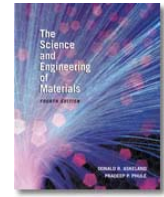




Bölüm 3.1. Kısa Mesafeli Düzenler-Uzun Mesafeli Düzenler

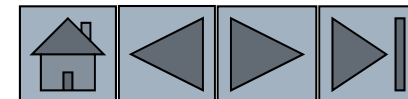
- ❑ Metaller, seramikler ve diğer pekçok katı malzemede atomlar tamamen düzenli şekilde dizilirler.
- ❑ Her kafes noktası bir veya daha atom ile temas halindedir

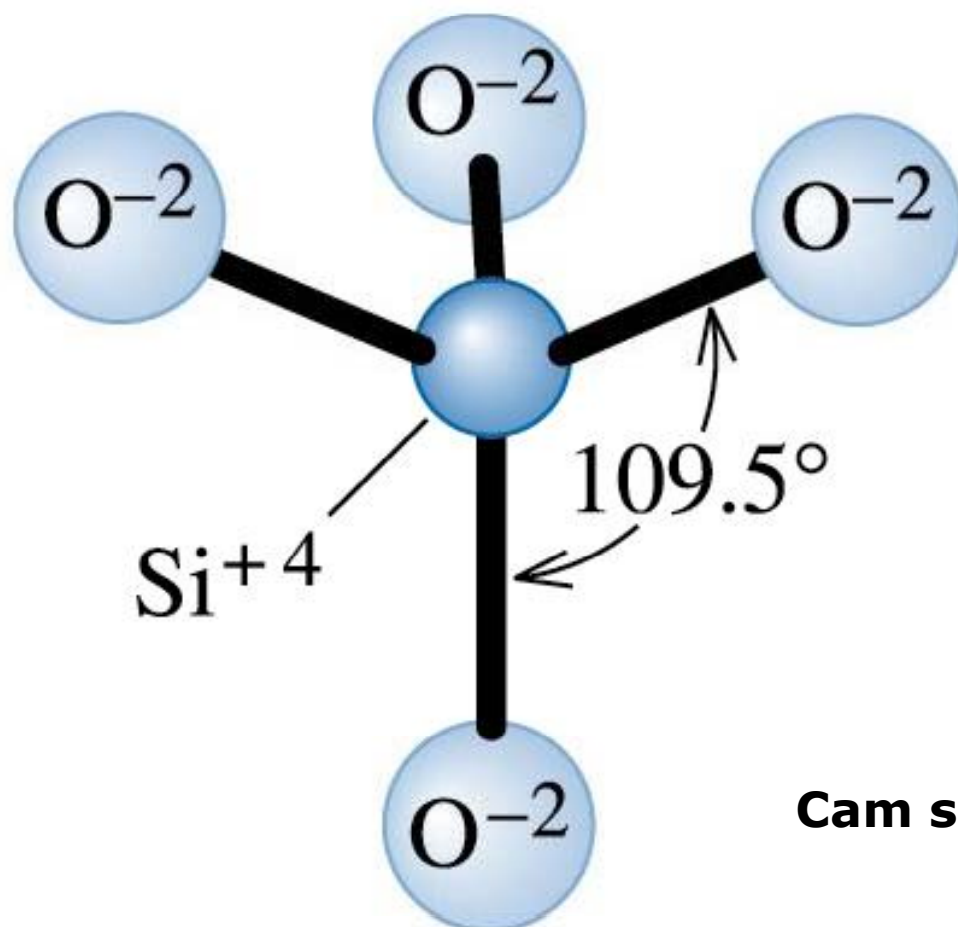




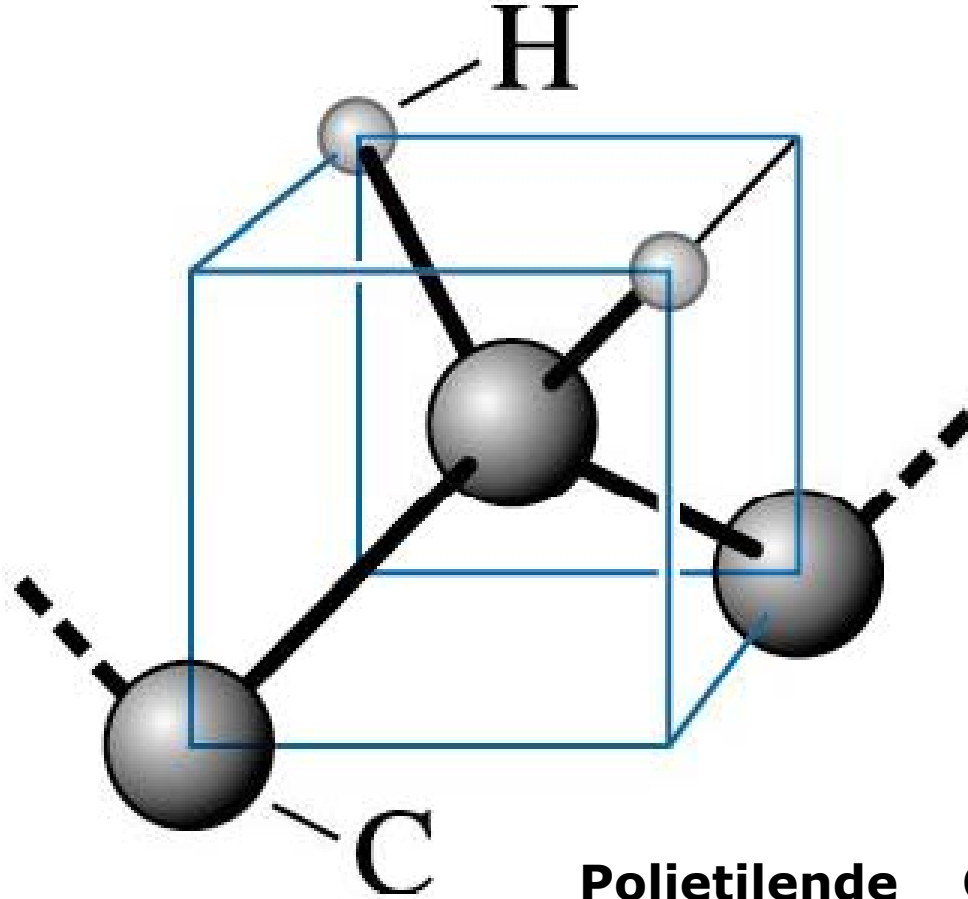
Malzemelerdeki atomik düzenlerin seviyeleri

(a) düzensiz inert monoatomik gazlar
(b,c) Kısa mesafeli düzenler (su buharı, azot gazı, amorf silisyum, ve cam silikat)
(d) Metaller, alaşımlar, çoğu seramikler ve polimerler atomların/iyonların malzemede düzenli olduğu uzun mesafeli düzenlere sahiptirler.



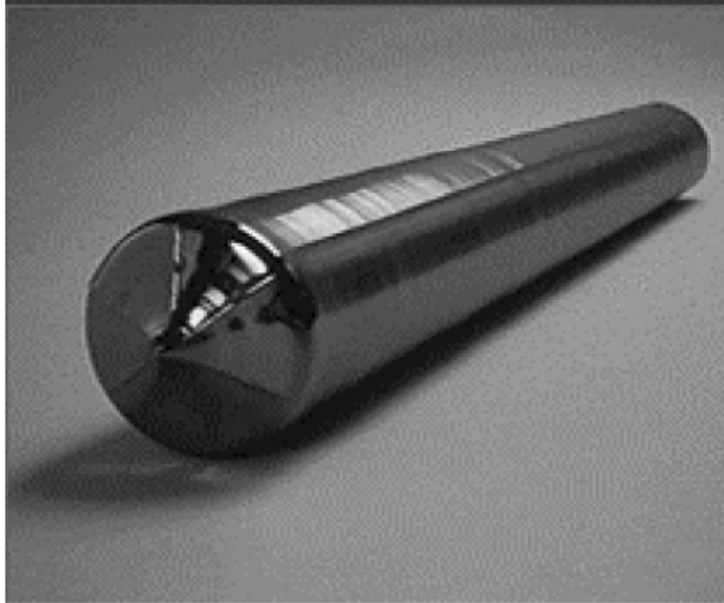


Cam silika *Si-O* tetrahedronu.

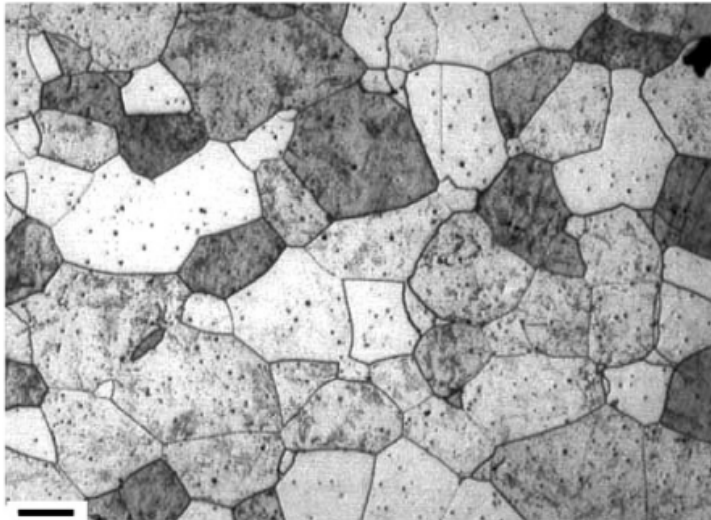


Polietilende C-H bağlarının tetrahedral düzeni.

(c) 2003 Brooks/Cole Publishing / Thomson Learning™

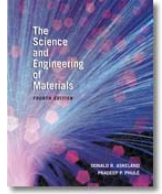


(a)



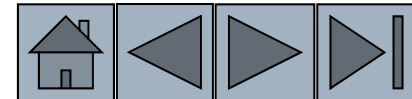
(b)

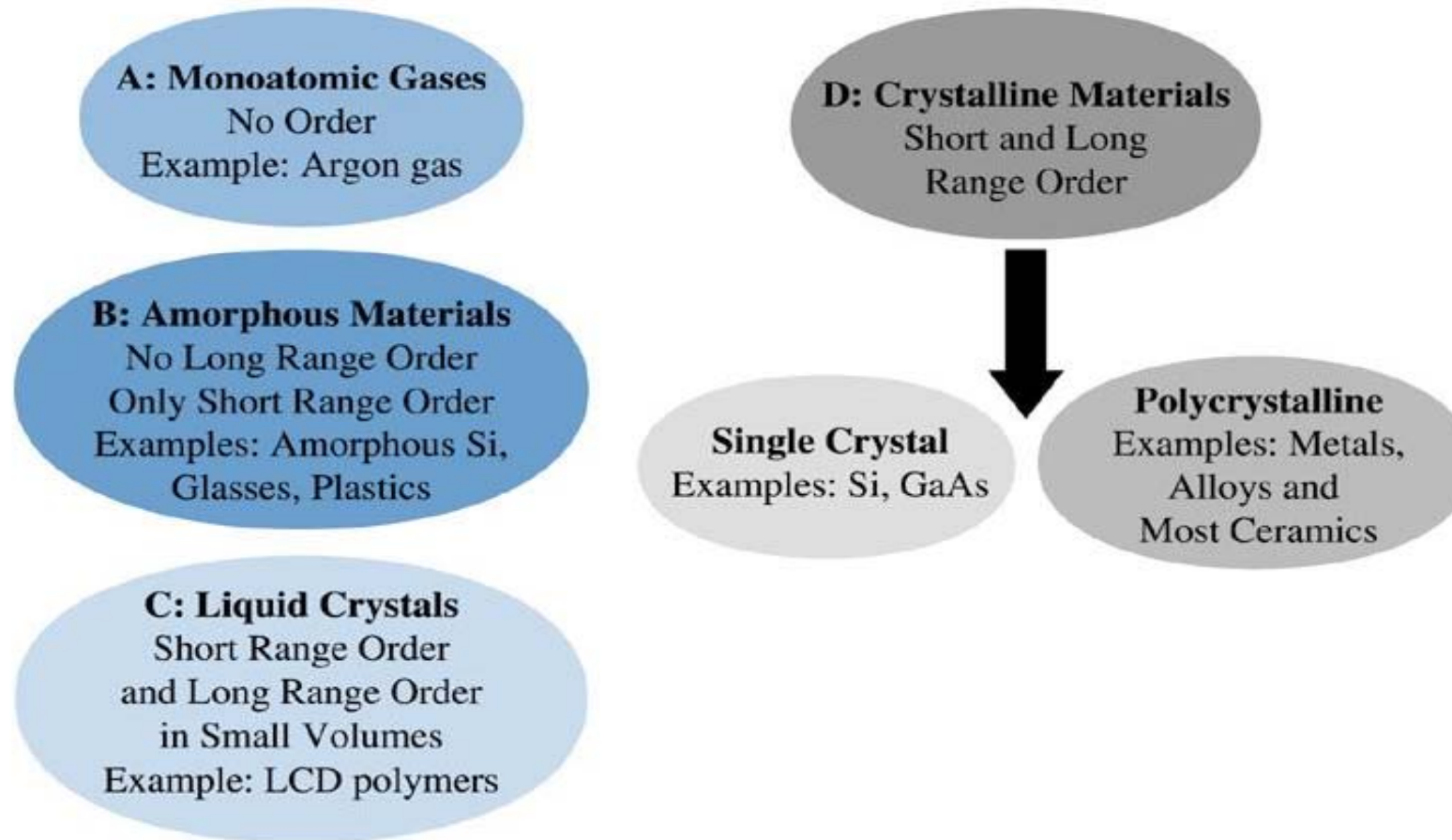
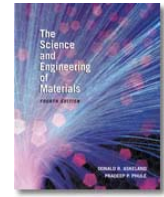
Silisyum tek kristallinin fotoğrafı. (b) Polikristal paslanmaz çeliğin mikroyapısı. Taneler ve tane sınırları. (Courtesy Dr. M. Hua, Dr. I. Garcia, and Dr. A.J. Deardo.)



Sıvı kristal ekran.

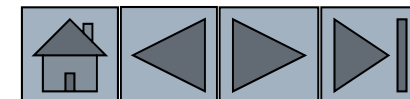
Bu malzemeler genelde amorf olup dıştan uygulanan elektrik alana bağlı olarak kısmi olarak kristalize olurlar. (Courtesy of Nick Koudis/PhotoDisc/Getty Images.)

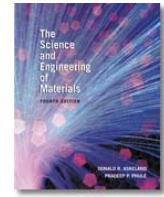




(c) 2003 Brooks/Cole Publishing / Thomson Learning™

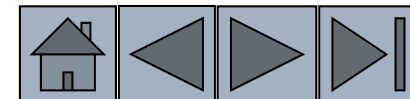
Atomik düzenlerin tipine bağlı olarak malzemelerin sınıflandırılması.

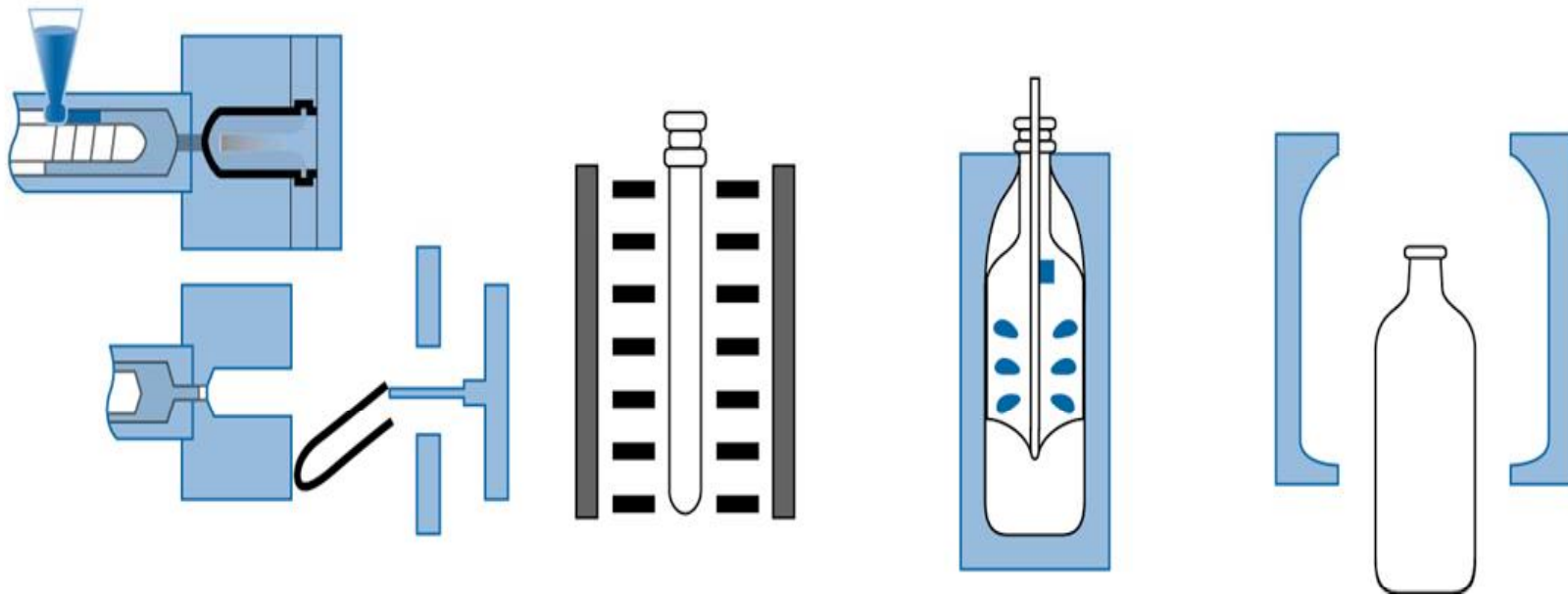




Bölüm 3.2. Amorf Malzemeler: Prensipleri ve Teknolojik Uygulamaları

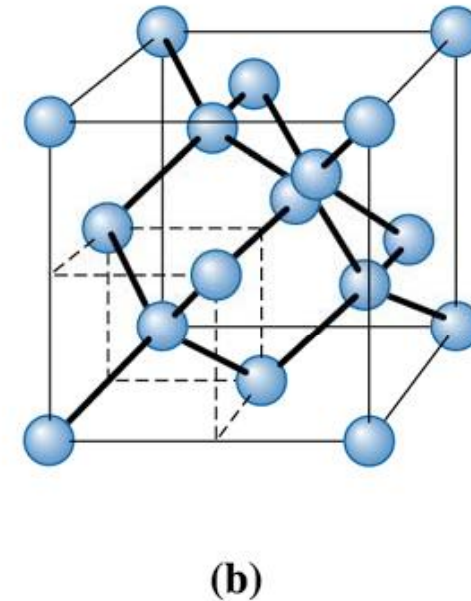
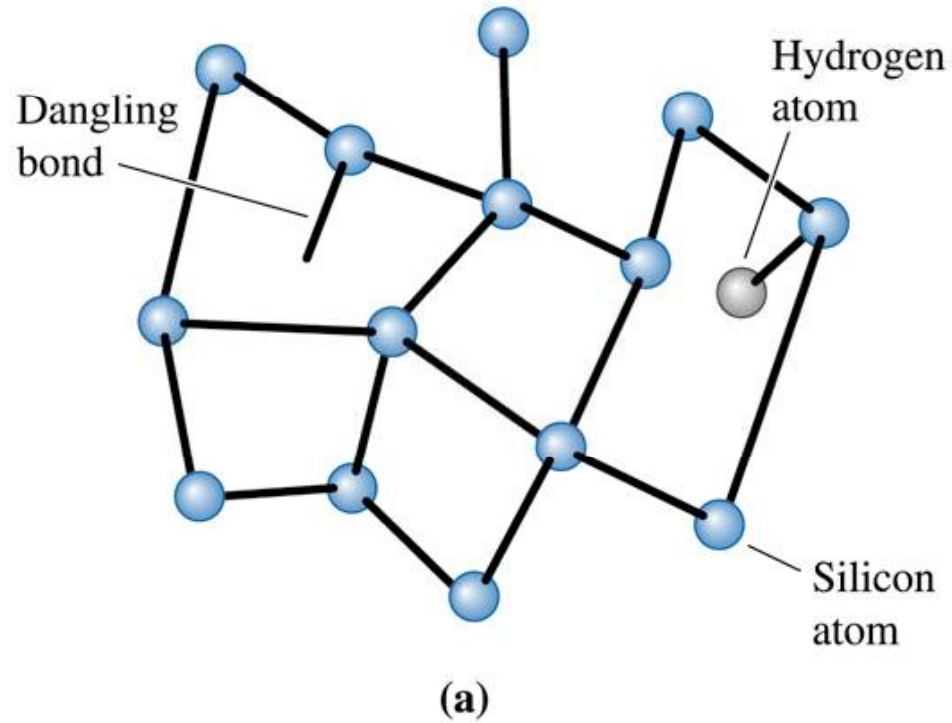
- **Amorf Malzemeler** – Malzemeler örneğin camlar, ne uzun mesafeli düzenlere ne de kristal yapıya sahiptirler.
- **Camlar** – Katı ve kristal olmayan malzemelerdir sadece kısa mesafeli atomik düzenlere sahiptirler.
- **Cam-seramikler** – Ergimiş inorganik camlardan türetilmiş malzeme grubu olup küçük tane yapılı ve gelişmiş mekanik özelliklere sahip kristal malzemeye proses edilirler.





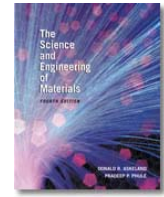
(c) 2003 Brooks/Cole Publishing / Thomson Learning™

Bu şekil üfürme-germe (blow-stretch) prosesini gösterir. İki litrelik PET (polyethylene terephthalate) şişenin üretim aşamalarını içerir. Üfürme ve özellikle germe ile oluşan gerilim sayesinde amorf matris içinde küçük kristaller oluşur ve PET şişenin güçlenmesi sağlanır.



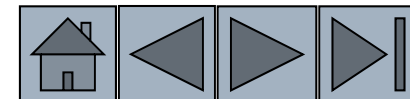
(c) 2003 Brooks/Cole Publishing / Thomson Learning™

Kristalize olmuş silisyum ile amorf silisyumdaki atomik düzenler. (a) Amorf silisyum (b) Kristalin silisyum. Amorf silisyumdaki atomlar arası mesafeye dikkat et!



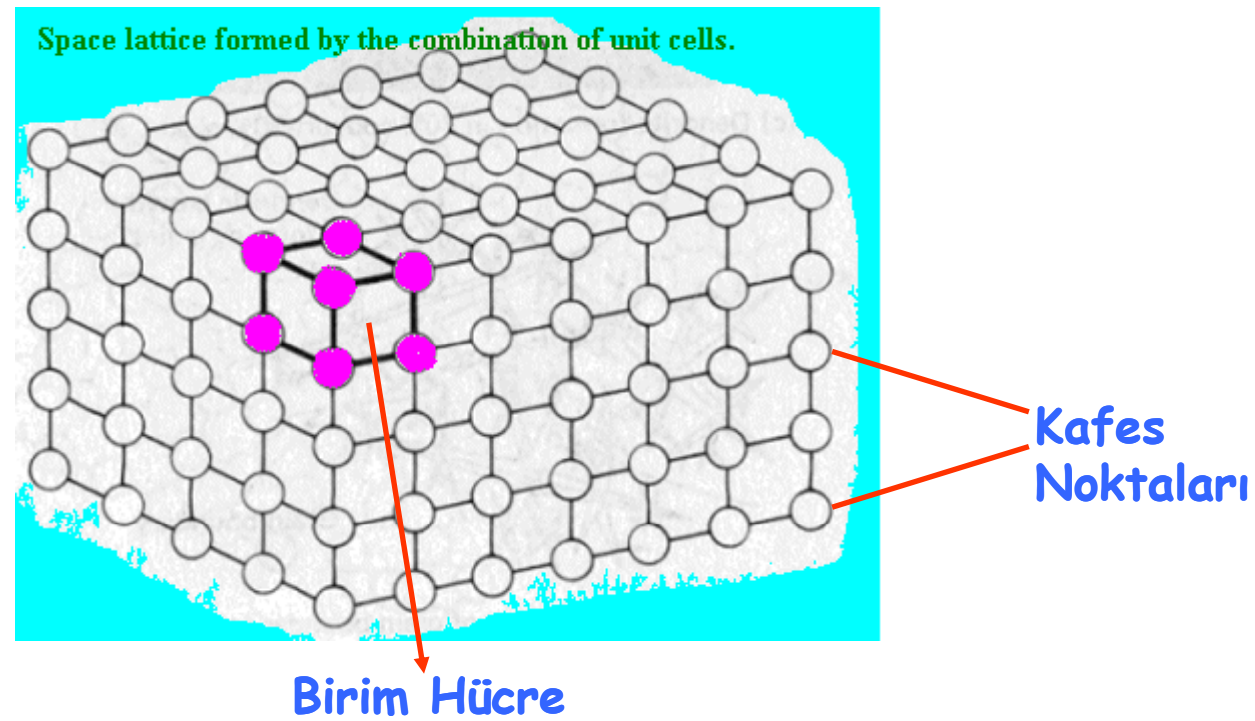
Bölüm 3.3.Latis, Birim Hücre, Basis ve Kristal Yapılar

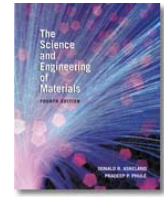
- **Latis** – Uzayı eşit aralıklı segmentlere bölen noktalardır.
- **Basis** – Latis noktaları ile ilişkili atom grubu.
- **Birim Hücreler** – Tüm latisin karakteristiklerini gösteren latisin en küçük birimi.
- **Atomik Yarıçap** – Atomun yarıçapıdır. Birim hücrenin boyutlarından en sıkı paketlenmiş yön (koordinasyon sayısı hesaplanarak) dikkate alınarak hesaplanır.
- **Paketleme Faktörü** – Birim hücrede atomların işgal ettikleri alandır.



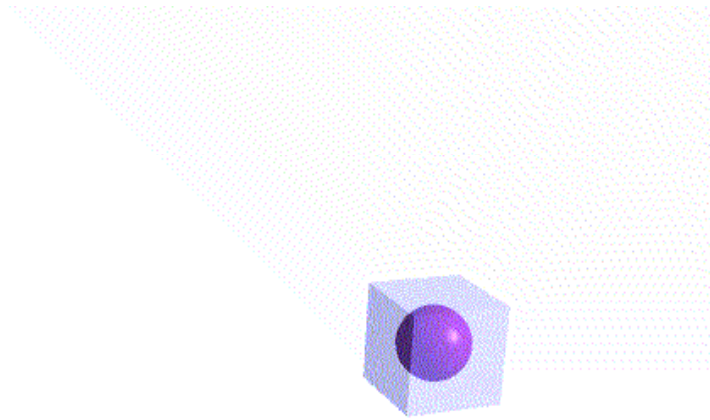
Bölüm 3.3.Latis, Birim Hücre, Basis ve Kristal Yapılar

- **Birim Hücreler** – Tüm latisin karakteristiklerini gösteren latisin en küçük birimi.



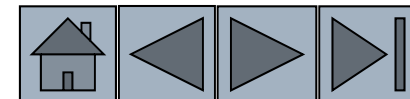


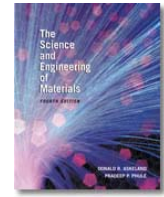
Bölüm 3.3. Latis, Birim Hücre, Basis ve Kristal Yapılar



□ Özdeş hücreler istiflenerek kafesin tamamını oluştururlar.

□ Kafes parametreleri birim hücrenin boyutunu ve şeklini tarif eder.

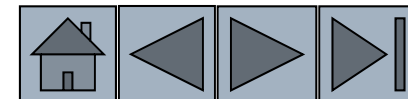


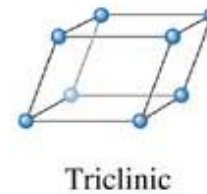
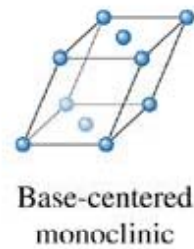
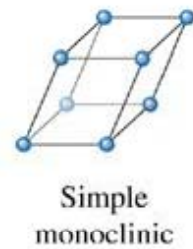
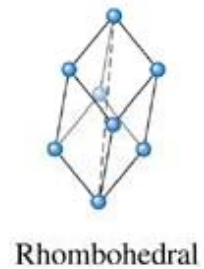
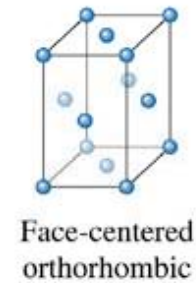
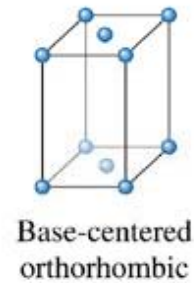
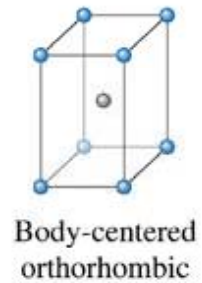
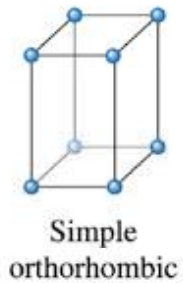
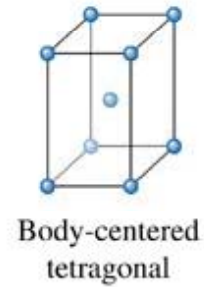
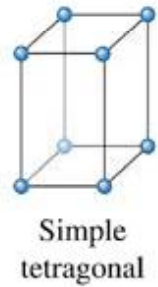
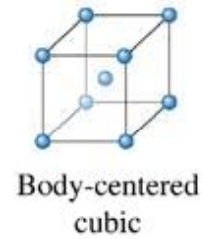
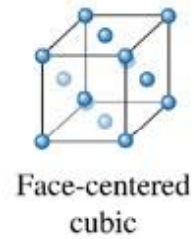
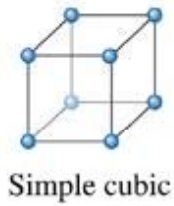
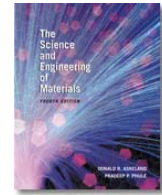


Bölüm 3.3. Latis, Birim Hücre, Basis ve Kristal Yapılar

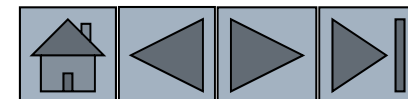
- ❑ Kafes parametreleri birim hücrenin boyutunu ve şeklini tarif eder. Birim hücrenin boyutları ve kenarları arasındaki açılar bu kapsam içindedirler.
- ❑ Oda sıcaklığında ölçülen uzunluk kafes parametresi (a_0) olarak belirlenmiştir.
- ❑ Uzunluk genellikle Angstrom birimi ile ifade edilir.

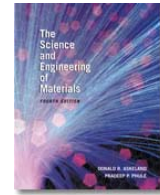
$$1 \text{ Angstrom (Å)} = 10^{-1} \text{ nm} = 10^{-10} \text{ m}$$





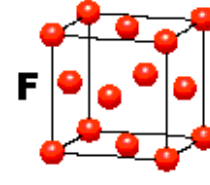
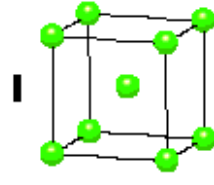
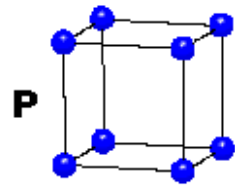
Yedi adet kristal sisteminde 14 adet Bravais latis grubu vardır.





KÜBİK

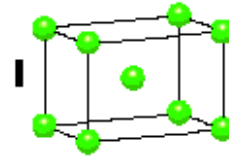
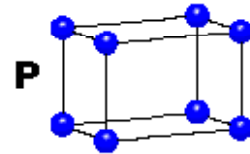
$$a = b = c$$
$$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$$



Yedi adet kristal sisteminde 14 adet Bravais latis grubu vardır.

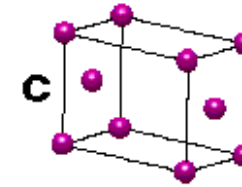
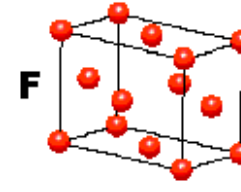
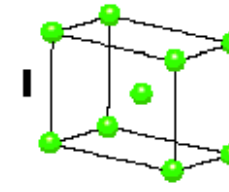
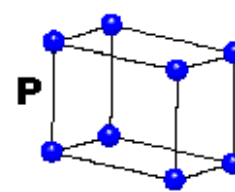
TETRAGONAL

$$a = b \neq c$$
$$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$$



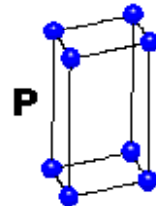
ORTOROMBİK

$$a \neq b \neq c$$
$$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$$



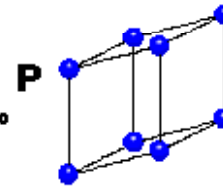
HEKZAGONAL

$$a = b \neq c$$
$$\alpha = \beta = 90^\circ$$
$$\gamma = 120^\circ$$



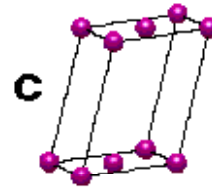
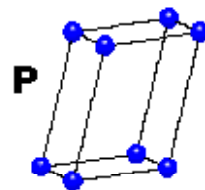
TRIGONAL

$$a = b = c$$
$$\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$$



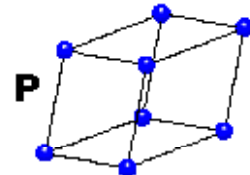
MONOKLİNİK

$$a \neq b \neq c$$
$$\alpha = \gamma = 90^\circ$$
$$\beta \neq 120^\circ$$



TRİKLİNİK

$$a \neq b \neq c$$
$$\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$$



4 Types of Unit Cell

P = Primitive

I = Body-Centred

F = Face-Centred

C = Side-Centred

+

7 Crystal Classes

→ 14 Bravais Lattices

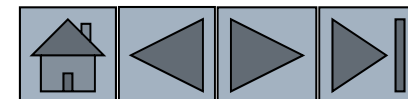
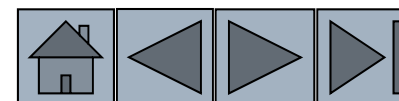
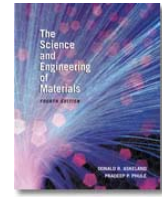




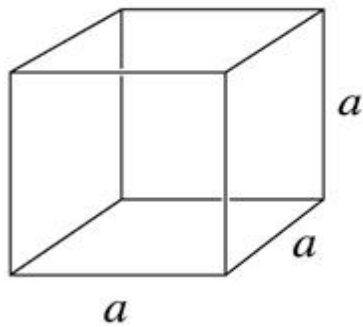
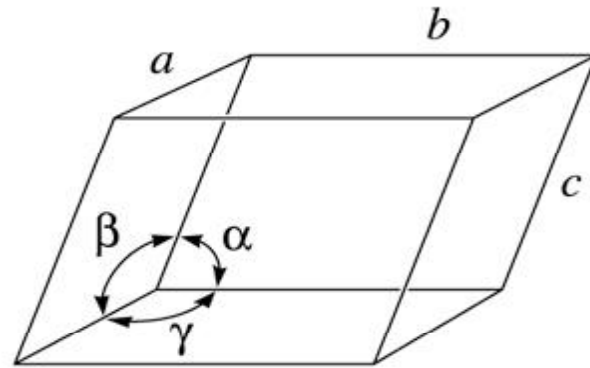
TABLE 3-1 ■ Characteristics of the seven crystal systems

Structure	Axes	Angles between Axes	Volume of the Unit Cell
Cubic	$a = b = c$	All angles equal 90°	a^3
Tetragonal	$a = b \neq c$	All angles equal 90°	a^2c
Orthorhombic	$a \neq b \neq c$	All angles equal 90°	abc
Hexagonal	$a = b \neq c$	Two angles equal 90° . One angle equals 120° .	$0.866a^2c$
Rhombohedral or trigonal	$a = b = c$	All angles are equal and none equals 90°	$a^3\sqrt{1 - 3\cos^2\alpha + 2\cos^3\alpha}$
Monoclinic	$a \neq b \neq c$	Two angles equal 90° . One angle (β) is not equal to 90°	$abc \sin \beta$
Triclinic	$a \neq b \neq c$	All angles are different and none equals 90°	$abc\sqrt{1 - \cos^2\alpha - \cos^2\beta - \cos^2\gamma + 2\cos\alpha\cos\beta\cos\gamma}$

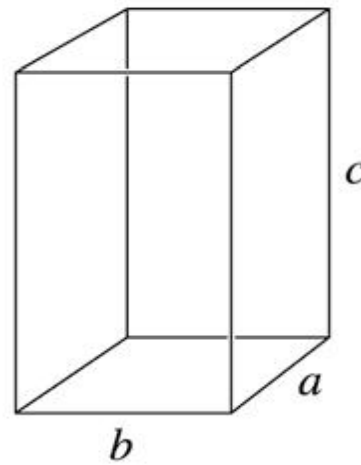




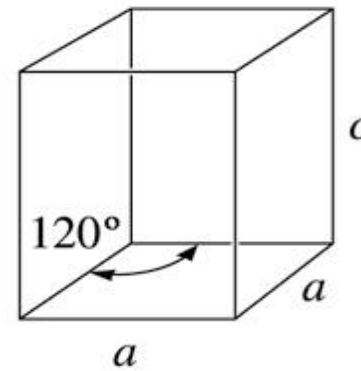
Latis parametrelerinin tanımı ve kübik, ortorombik ve hekzagonal kristal sistemlerinde kullanımı.



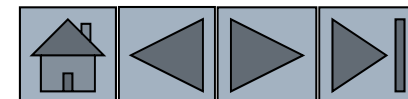
Cubic

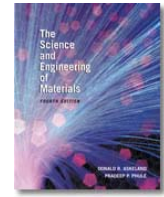


Orthorhombic

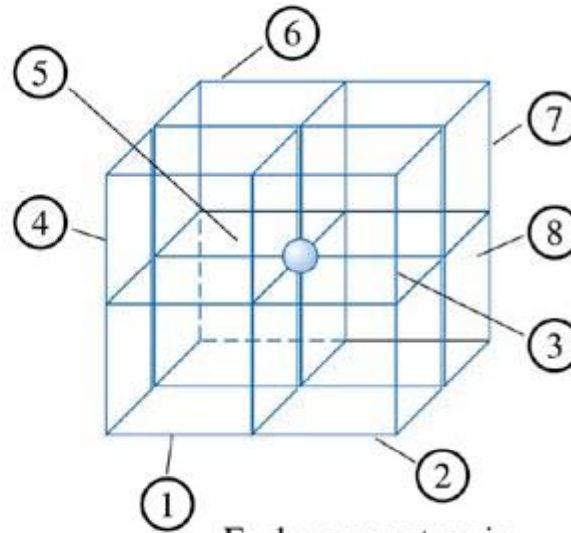
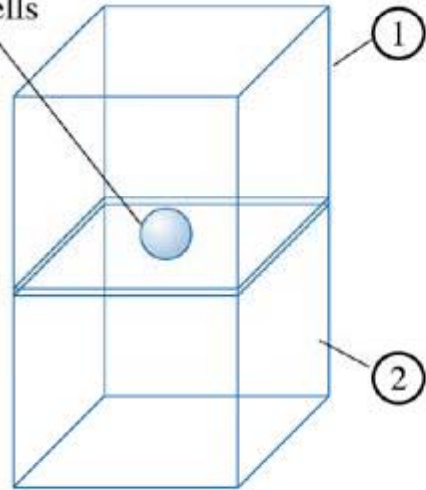


Hexagonal



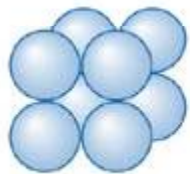


Face center atom
shared between
two unit cells

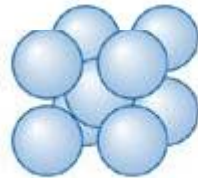


Each corner atom is
shared by 8 unit cells
(1-4 in front, 5-8 in back)

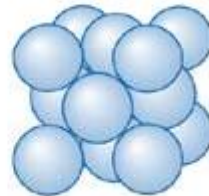
(a)



Simple cubic



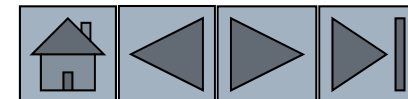
Body-centered
cubic

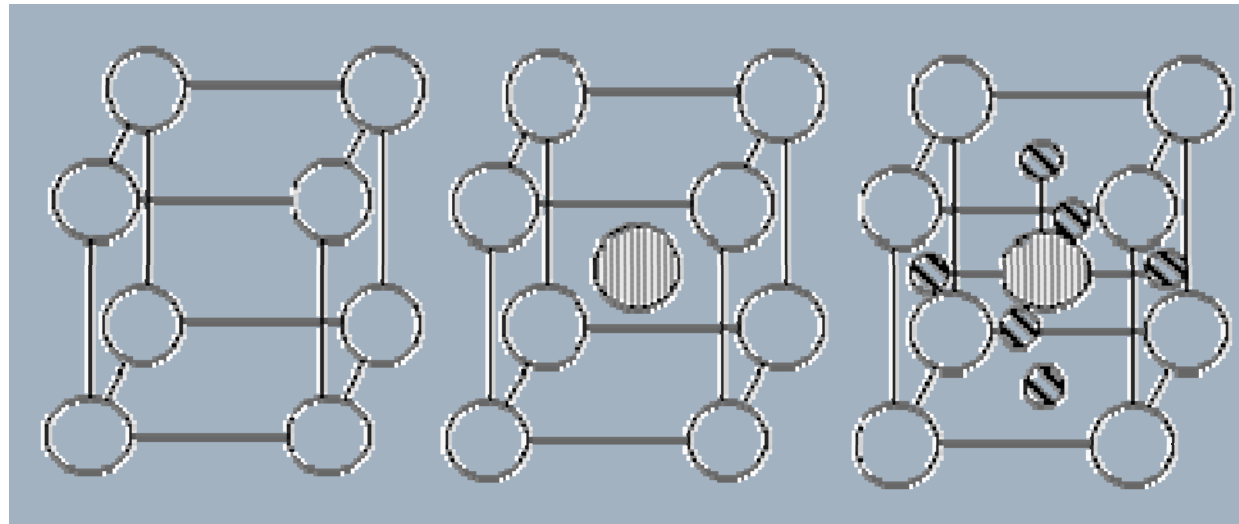


Face-centered
cubic

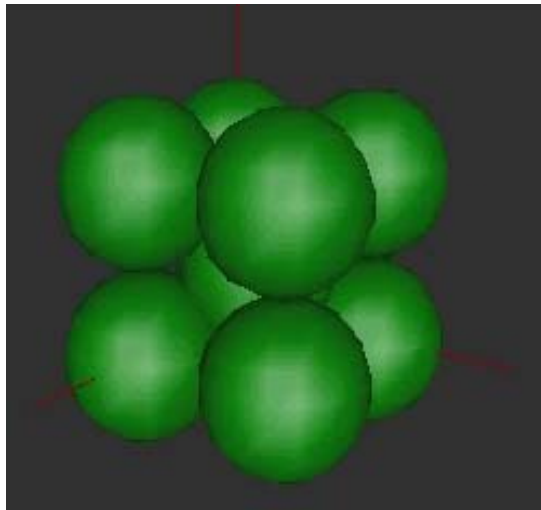
(b)

Şekil (a) Yüzeyler ve köşelerdeki atomların gösterimi. (b) Basit Kübik (BK), Hacim Merkezli Kübik (HMK), and Yüzey Merkezli Kübik (YMK) birim hücreler, her latis noktasında sadece bir atomun olduğu öngörülmüştür.

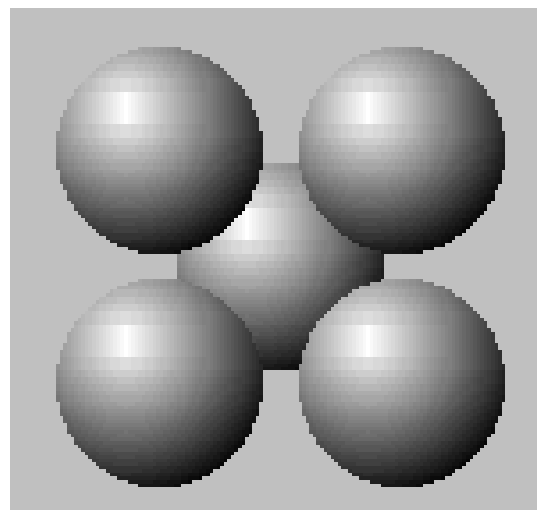




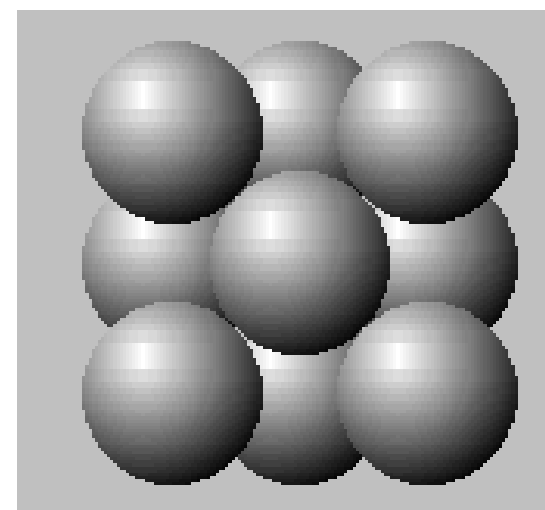
BK



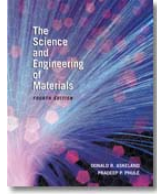
HMK



YMK



Örnek 3.1. Kübik Kristal Sistemlerde Latis Noktalarının Sayısının Belirlenmesi



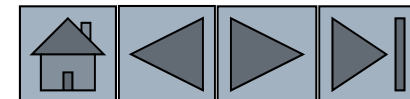
Kübik kristal sistemlerde latis noktalarının sayısını belirleyiniz. Her bir latis noktasında sadece bir atomun bulunduğu düşünerek, birim hücredeki atomların sayısını hesaplayınız.

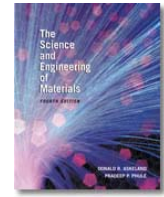
ÇÖZÜM

Basit Kübik Birim Hücresinde: latis noktaları / Birim hücre = $(8 \text{ köşe})1/8 = 1$

Hacim Merkezli Kübik Birim Hücre: latis noktaları/birim hücre = $(8 \text{ köşe})1/8 + (1 \text{ merkez})(1) = 2$

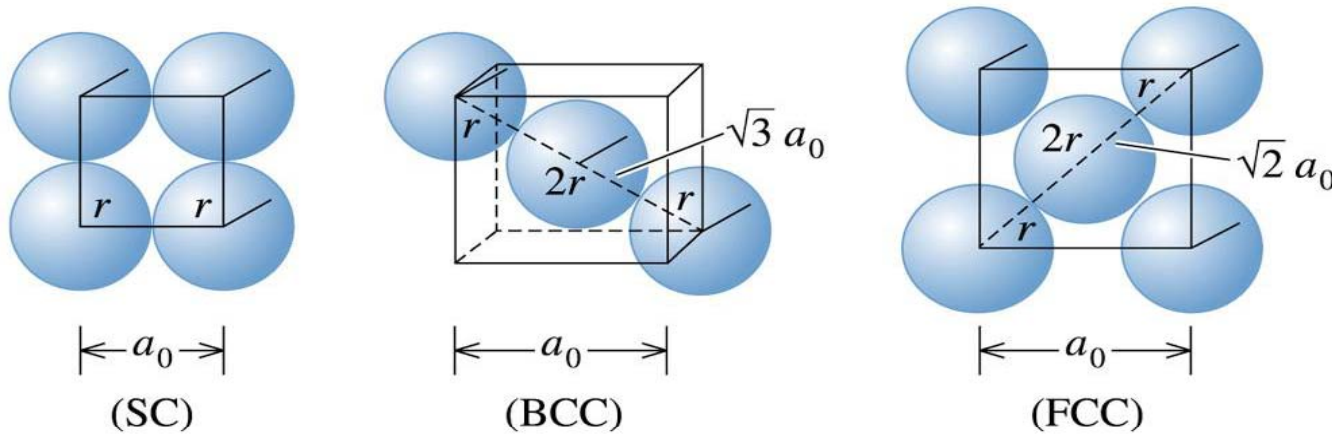
Yüzey Merkezli Kübik Birim Hücre: latis noktaları / birim hücre = $(8 \text{ köşe})1/8 + (6 \text{ yüzey})(1/2) = 4$





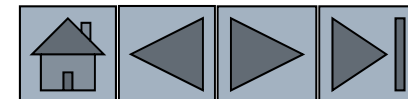
Örnek 3.2. Atomik yarıçap ve Latis Parametreleri Arasındaki İlişki

Her bir latis noktasında bir atomun olduğunu varsayarak atomik yarıçap ve latis parametreleri arasındaki ilişkiyi basit kübik, yüzey merkezli kübik ve hacim merkezli kübik kristal yapıları için hesaplayınız?

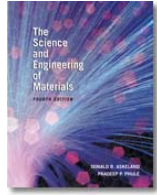


(c) 2003 Brooks/Cole Publishing / Thomson Learning™

Kübik sistemlerde atomik yarıçap ve latis parametreleri arasındaki ilişki.



ÇÖZÜM



Şekil de görüldüğü gibi **basit kübik** yapıda küp kenarlarına değen atomlar:

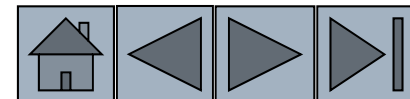
$$a_0 = 2r$$

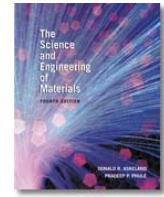
Hacim köşegeninde **hacim merkezli kübik yapıda**, köşegen ile temasta olan atomların toplam yarıçapı:

$$a_0 = \frac{4r}{\sqrt{3}}$$

Yüzey merkezli kübik yapıda, yüzey köşegenine değen atomların yarıçapları:

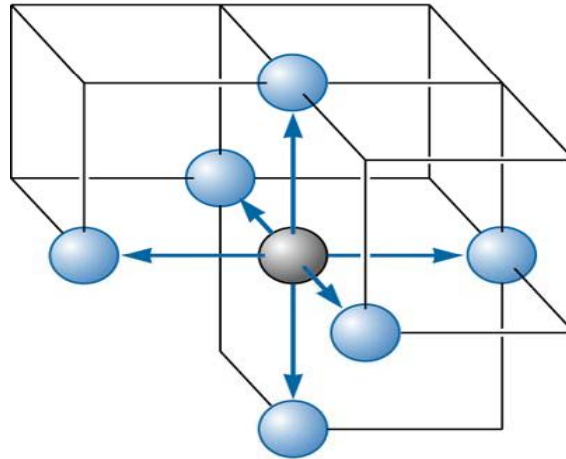
$$a_0 = \frac{4r}{\sqrt{2}}$$



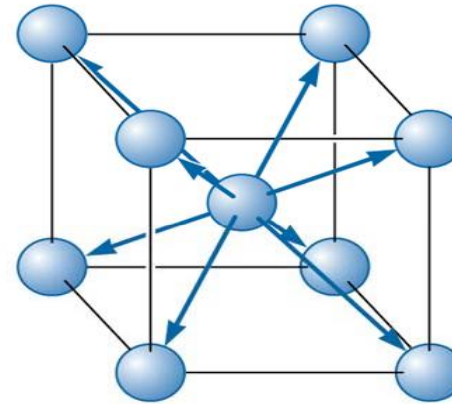


Koordinasyon Sayısı

Belirli bir atoma temas eden atomların sayısı veya en yakın komşuların sayısı koordinasyon sayısıdır ve atomların nasıl sıkı ve yoğun bir şekilde paketlenildiğini gösterir.

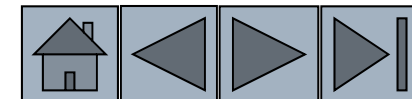


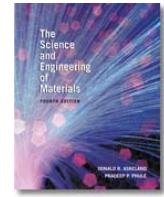
(a)



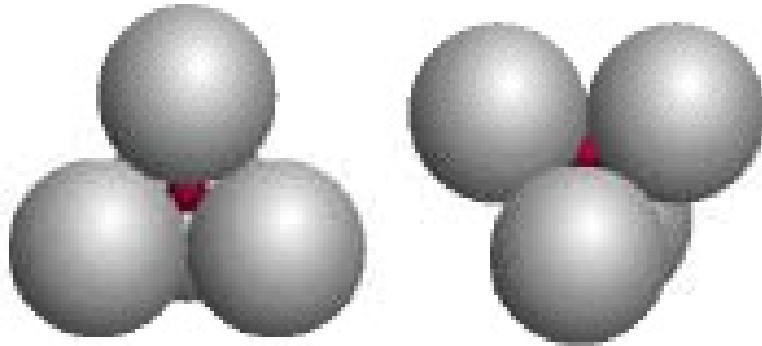
(b)

Koordinasyonların basit ve hacim merkezli kübik yapıda gösterimi. Basit küpteki her bir atomla 6 atom temas halinde, hacim merkezli kübik yapıda ise 8 atom temas halindedir.

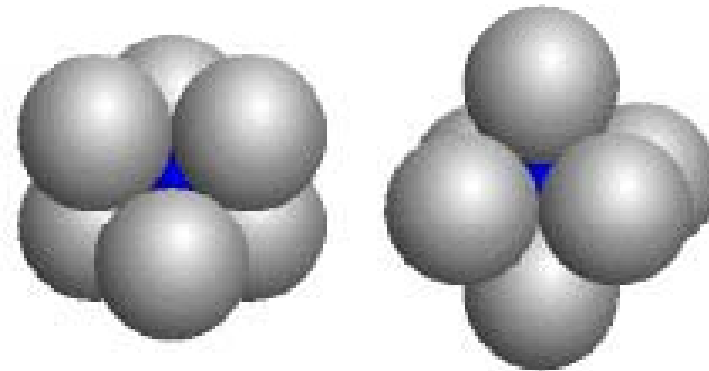




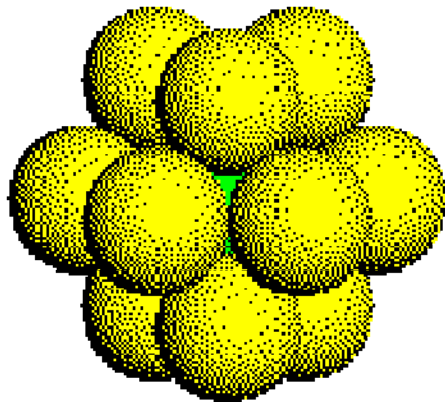
Koordinasyon Sayısı



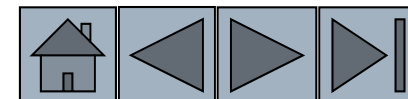
Koordinasyon Sayısı (CN) = 4



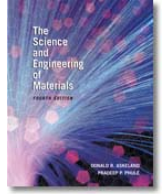
Koordinasyon Sayısı (CN) = 6



Koordinasyon Sayısı (CN) = 12



Atomik Dolgu Faktörü

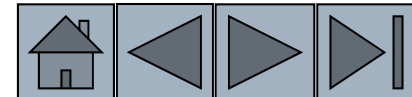


Atomlar küre olarak kabullenildiğinde birim hücrede işgal ettikleri hacim oranıdır.

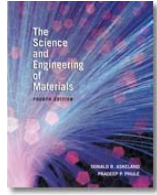
$$\text{ADF} = \frac{(\text{Atom sayısı} / \text{Hücre}) \cdot (\text{Her atomun hacmi})}{\text{Birim Hücrenin Hacmi}}$$

Metallerde ADF değerleri:

- YMK için 0.74
- HMK için 0.68
- BK için 0.52



Örnek 3.3. Atomik Dolgu Faktörü Hesaplanması



Yüzey merkezli kübik yapıda atomik dolgu/paketleme faktörünü hesaplayınız?

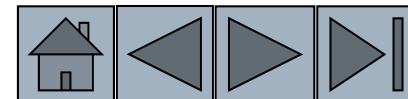
ÇÖZÜM

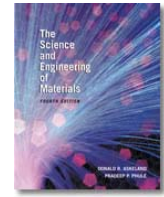
Yüzey Merkezli Kübik Hücrede, her hücrede 4 latis noktası vardır. Her latis noktasında bir atom olduğu düşünülürse hücre başına a_0^3 dört adet atom vardır. Bir atomun hacmi $4\pi r^3/3$ dür. Ve birim hücrenin hacmi:

$$\text{Packing Factor} = \frac{(4 \text{ atoms/cell}) \left(\frac{4}{3} \pi r^3 \right)}{a_0^3}$$

Since, for FCC unit cells, $a_0 = 4r/\sqrt{2}$

$$\text{Packing Factor} = \frac{(4) \left(\frac{4}{3} \pi r^3 \right)}{(4r / \sqrt{2})^3} = \frac{\pi}{\sqrt{18}} \cong 0.74$$





Örnek 3.4. Hacim Merkezli Kübik Demirin Yoğunluğunun Hesaplanması

Latis parametresi 0.2866 nm olan hacim merkezli kübik demirin yoğunluğunu hesaplayınız?

ÇÖZÜM

Atom/hücre = 2, $a_0 = 0.2866 \text{ nm} = 2.866 \times 10^{-8} \text{ cm}$

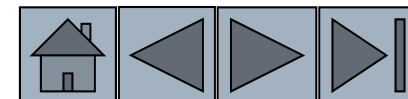
Atomik ağırlık = 55.847 g/mol

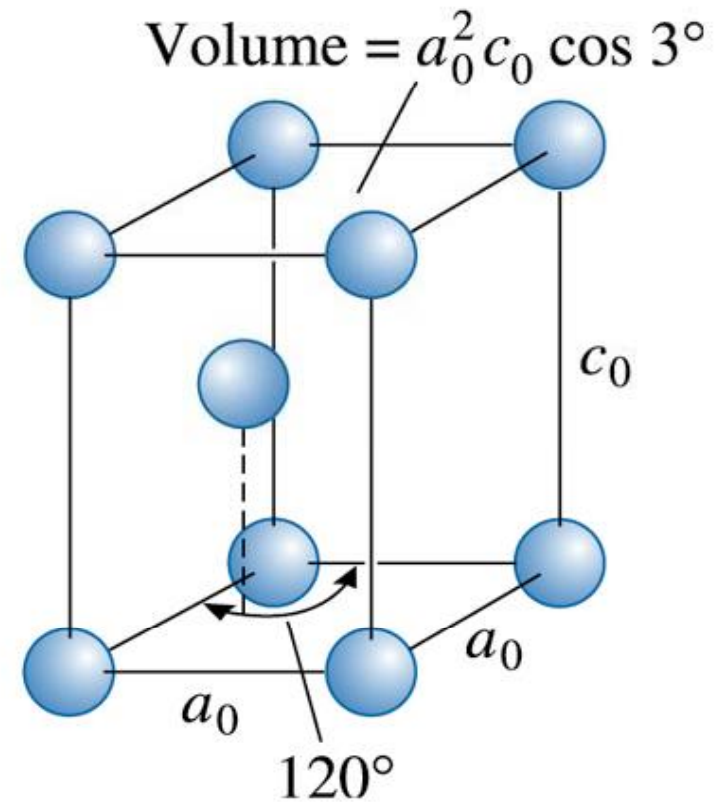
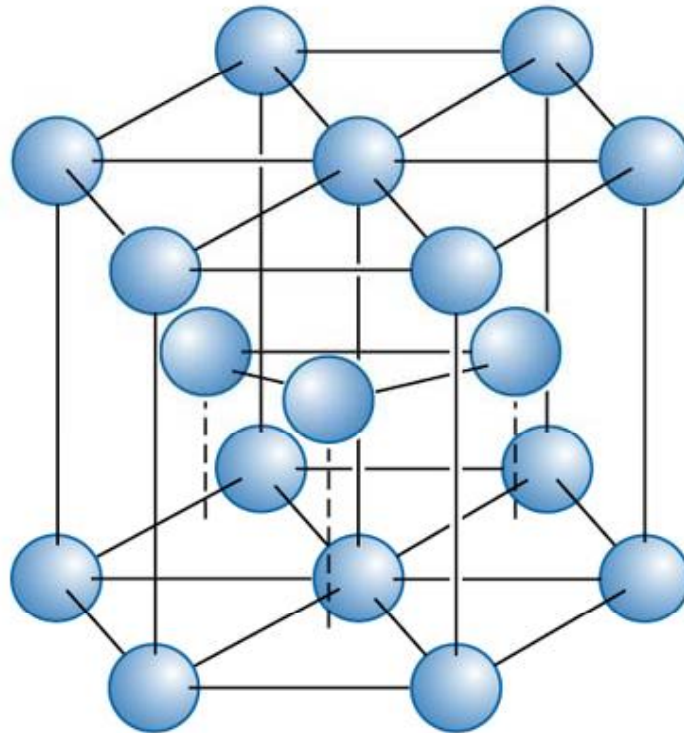
Birim hücrenin hacmi = $a^3 = (2.866 \times 10^{-8} \text{ cm})^3 = 23.54 \times 10^{-24} \text{ cm}^3/\text{cell}$

Avagadro sayısı $N_A = 6.02 \times 10^{23} \text{ atom/mol}$

$$\text{Density } \rho = \frac{(\text{number of atoms/cell})(\text{atomic mass of iron})}{(\text{volume of unit cell})(\text{Avogadro's number})}$$

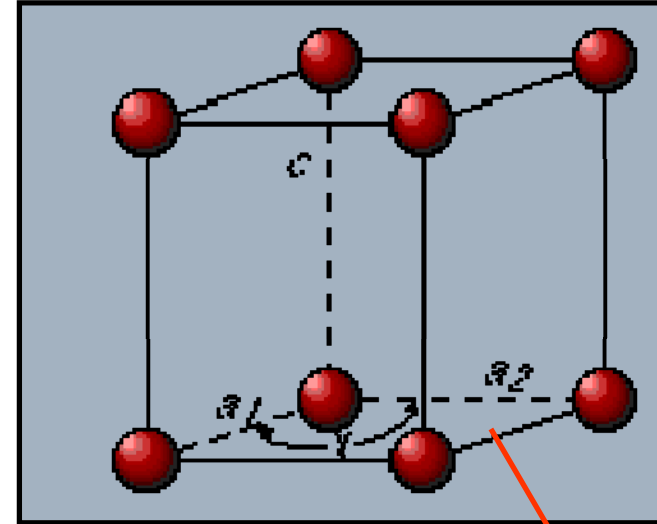
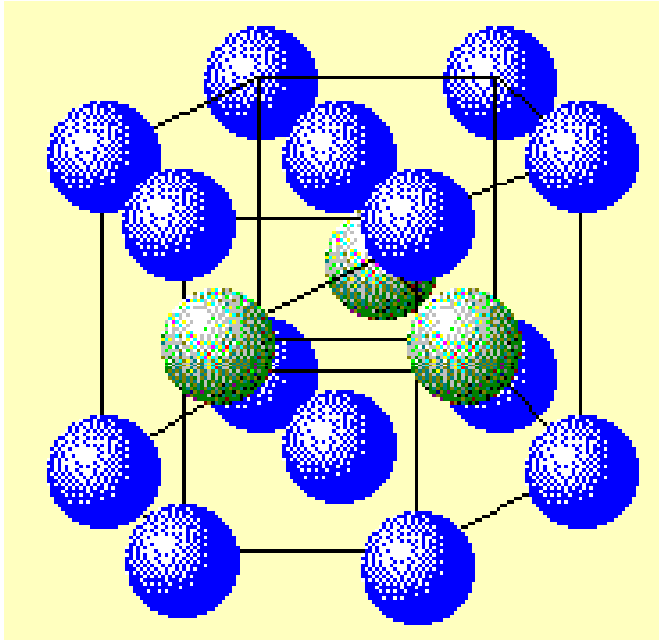
$$\rho = \frac{(2)(55.847)}{(23.54 \times 10^{-24})(6.02 \times 10^{23})} = 7.882 \text{ g / cm}^3$$





(c) 2003 Brooks/Cole Publishing / Thomson Learning™

Hekzagonal sıkı paket (HCP) ve birim hücre



$$a_1 = a_2$$

$$\text{Hacim} = a_0^2 \cdot c_0 \cdot \text{Cos}30$$

Her hücre sekiz köşeden bir ve birim hücre içinden bir olmak üzere 2 kafes noktasına sahiptir.

İdeal HSP metallerde; $c/a = 1,633$

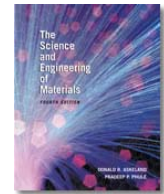
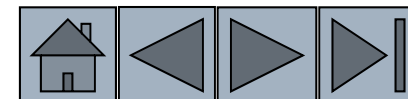
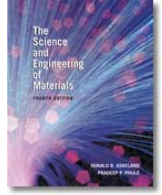


TABLE 3-2 ■ *Crystal structure characteristics of some metals*

Structure	a_0 versus r	Atoms per Cell	Coordination Number	Packing Factor	Examples
Simple cubic (SC)	$a_0 = 2r$	1	6	0.52	Polonium (Po), α -Mn
Body-centered cubic	$a_0 = 4r/\sqrt{3}$	2	8	0.68	Fe, Ti, W, Mo, Nb, Ta, K, Na, V, Zr, Cr
Face-centered cubic	$a_0 = 4r/\sqrt{2}$	4	12	0.74	Fe, Cu, Au, Pt, Ag, Pb, Ni
Hexagonal close-packed	$a_0 = 2r$ $c_0 \approx 1.633a_0$	2	12	0.74	Ti, Mg, Zn, Be, Co, Zr, Cd



Bölüm 3.4. Allotropik ve Poliformik Dönüşümler

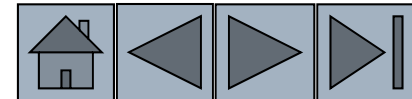


- **Allotropi** – Sıcaklık ve basınca bağlı olarak, birden fazla kristal yapıda var olan elemanın karakteristiğidir.
- **Polimorfizm** – Birden fazla kristal türü sergileyen kristal yapılardır.

Birden fazla kristal yapıya sahip olabilen malzemeler allotropik veya polimorfik olarak adlandırılır.

Demir, titanyum örnek olarak verilebilir.

Düşük sıcaklıkta demir HMK yapıdadır. Yüksek sıcaklıkta YMK yapıya dönüşür.





Stabilize zirkonya bileşiklerden oluşan oksijen gaz sensörleridir. (*Image courtesy of Bosch © Robert Bosch GmbH.*)



Örnek 3.5. Polimorf Zirkonyada Hacim Değişimleri

Zirkonya tetragonalardan monoklinik yapıya dönüştüğünde oluşacak hacim değişimini hesaplayınız?

Monoklinik birim hücrenin latis sabitleri

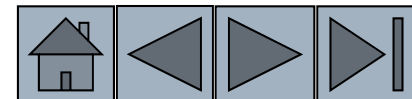
$$a = 5.156, b = 5.191, c = 5.304 \text{ \AA},$$

$$\beta \text{ açısı} : 98.9.$$

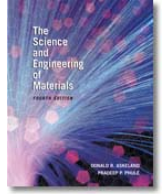
Tetragonal birim hücrenin $a = 5.094$ and $c = 5.304 \text{ \AA}$.

Bu dönüşüm esnasında zirkonya büzülür mü genişler mi?

Bu dönüşümün zirkonyanın mekanik özelliklerindeki etkisi nasıl olacaktır?



ÇÖZÜM



Tetragonal birim hücrenin hacmi:

$$V = a^2c = (5.094)^2 (5.304) = 134.33 \text{ \AA}^3.$$

Monoklinik hücrenin hacmi

$$V = abc \sin \beta = (5.156) (5.191) (5.304) \sin(98.9) = 140.25 \text{ \AA}^3.$$

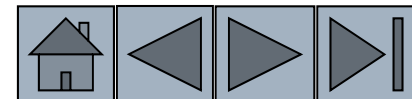
Tetragonalden monoklinik e dönüşüm sonucu genişleme olmuştur.

Hacimdeki yüzde değişim:

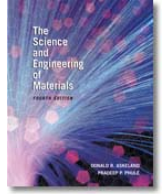
$$= (\text{son hacim} - \text{başlangıç hacim}) / (\text{başlangıç hacim}) * 100$$

$$= (140.25 - 134.33 \text{ \AA}^3) / 134.33 \text{ \AA}^3 * 100 = 4.21\%.$$

Çoğu seramikler oldukça kırılğan olup %0.1 den fazla hacim değişimine dayanamazlar. ZrO_2 seramikler monoklinik yapılarında kullanılamazlar çünkü bu dönüşüm gerçekleştiğinde kırılma olasılıkları yüksektir. Bu yüzden, ZrO_2 bazı ilavelerle CaO, MgO, ve Y_2O_3 kübik formlarında tutulmaya çalışılırlar.



Örnek 3.6. Hacim Değişimini Ölçmek İçin Sensör Tasarımı



Demirin yüksek sıcaklıklarda nasıl bir davranış sergilediğini anlamak için bir cihaz tasarlamak istiyoruz. Bu cihaz (%1 doğrulukla 1-cm³ demir küpündeki değişimi ısıtıldığında oluşan poliformik dönüşüm sonrasında hissedebilmelidir.

Demir 911°C, HMK latis parametresi 0.2863 nm.

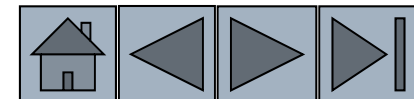
913°C, ise YMK latis parametresi 0.3591 nm.

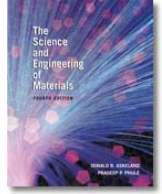
Ölçüm aletinin ihtiyaç duyduğu doğruluk toleransını belirleyiniz?

ÇÖZÜM

HMK nın hacmi

$$V_{BCC} = a_0^3 = (0.2863 \text{ nm})^3 = 0.023467 \text{ nm}^3$$





ÇÖZÜM (devamı)

YMK nin hacmi:

$$V_{FCC} = a_0^3 = (0.3591 \text{ nm})^3 = 0.046307 \text{ nm}^3$$

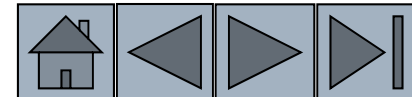
Fakat bu dönüşümde YMK da 4 demir atomu, HMK da ise 2 demir atomu bu hacmi işgal etmektedir.

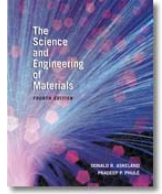
$$\text{Bu nedenle; HMK } 2 \cdot (0.023467) = 0.046934 \text{ nm}^3$$

$$\text{Volume change} = \frac{(0.046307 - 0.046934)}{0.046934} \times 100 = -1.34\%$$

1-cm³ demir küpü dönüşüm sonrası 1 - 0.0134 = 0.9866 cm³ büzülü; bu yüzden, % 1 lik doğruluğu sağlamak için cihazın:

$$\Delta V = (0.01)(0.0134) = 0.000134 \text{ cm}^3 \text{ lık değişimi dedekte etmesi gerekmektedir.}$$

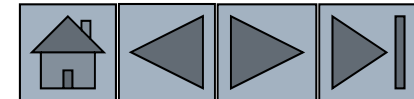


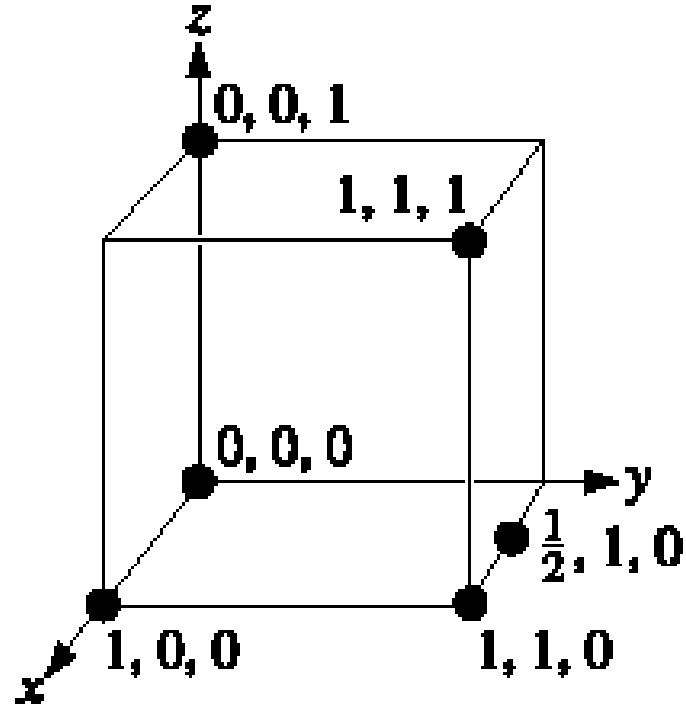


Bölüm 3.5. Birim Hücrede Noktalar, Yönler ve Düzlemler

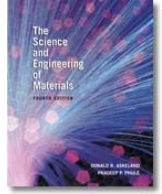
Birim hücredeki atomların pozisyonları koordinat sistemi (x,y,z) kullanılarak gösterilir.

- **Miller indisleri** –İngiliz mineralci [William Hallowes Miller](#) in geliştirdiği Millerian sistemi malzemedeki belirli kristallografik doğrultu ve düzlemleri göstermek için kullanılan işaretlerdir.
- **Tekrar edilen uzaklık**- Latis noktaları arasındaki uzaklık.
- Doğrultular köşeli parantez ile gösterilir [hkl].
- Düzlemler parantez (hkl) ile gösterilir.
- Doğrultu aileleri <hkl> ile
- Düzlem aileleri {hkl} ile gösterilir.
- Negatif yönler sayılarının üzerine yerleştirilen çizgiler ile gösterilir.
- **Lineer yoğunluk** – Birim doğrultu boyunca görülen latis noktalarıdır.
- **Paketleme Faktörü/Atomik Dolgu Faktörü** – Bir doğrultu veya düzlemde atom veya iyonlar tarafından işgal edilmiş alanların miktarıdır.



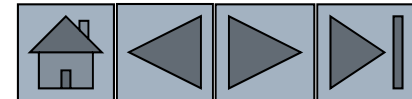


Birim hücrede seçilmiş noktaların koordinatları. Sayılar latis parametreleri cinsinden orijin noktalarından uzaklıkları temsil eder.

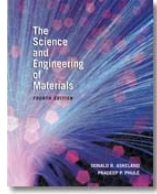


Bölüm 3.5. Doğrultuları Bulmak İçin Uygulanacak Prosedür:

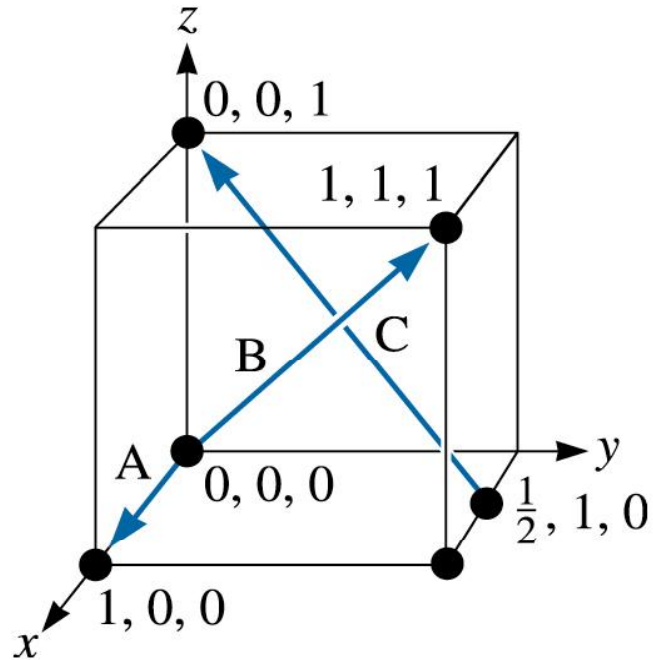
- ❑ Koordinat sistemini kullanarak doğrunun başlangıç ve bitiş koordinatlarını belirle
- ❑ Bitiş nokta koordinatlarından başlangıç nokta koordinatlarını çıkar.
- ❑ Kesirli değerleri tüm koordinat değerlerini tam sayı haline getirecek şekilde düzenle
- ❑ Köşeli parantezleri kullanarak doğrultuyu düzgün şekilde göster
- ❑ Negatif işaretler varsa sayıların üstüne yerleştir



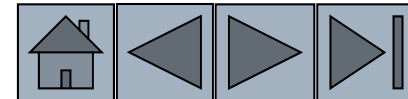
Örnek 3.7. Doğrultuların Miller İndislerinin Belirlenmesi

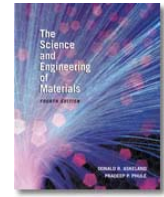


Şekilde verilmiş A, B ve C doğrultularının miller indislerini belirleyiniz?



(c) 2003 Brooks/Cole Publishing /
Thomson Learning™





ÇÖZÜM

A doğrultusu

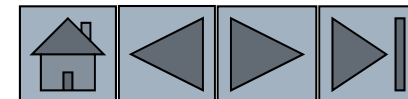
1. Bitiş 1, 0, 0, ve başlangıç 0, 0, 0
2. Bitiş noktaları – Başlangıç noktaları
 $1, 0, 0, -0, 0, 0 = 1, 0, 0$
3. Herhangi bir kesir yok
4. Gösterim [100]

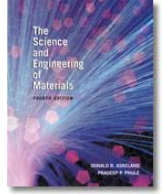
B doğrultusu

1. Bitiş 1, 1, 1 ve başlangıç 0, 0, 0
2. Bitiş noktaları – Başlangıç noktaları
 $1, 1, 1, -0, 0, 0 = 1, 1, 1$
3. Kesir yok
4. [111]

C doğrultusu

1. Bitiş 0, 0, 1 ve başlangıç 1/2, 1, 0
2. Bitiş noktaları – Başlangıç noktaları
 $0, 0, 1 - -1/2, 1, 0 = -1/2, -1, 1$
3. $2*(-1/2, -1, 1) = -1, -2, 2$
4. $[\bar{1}\bar{2}2]$





Doğrultuları gösteren Miller indislerinin $\langle hkl \rangle$ kullanımında dikkat edilecek notlar:

1. Bir doğrultunun negatifi ile pozitif birbirine eşit değildir.

$$[100] \neq [\bar{1}00]$$

Ayrı yönleri gösterirler.

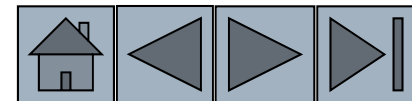
2. Bir doğrultu ve onun katları aynı yönü gösterirler.

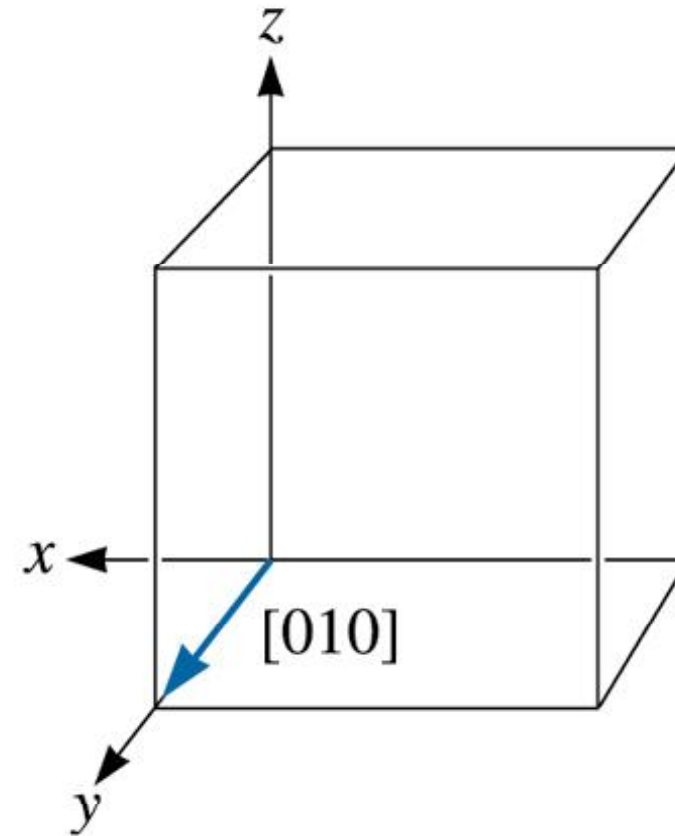
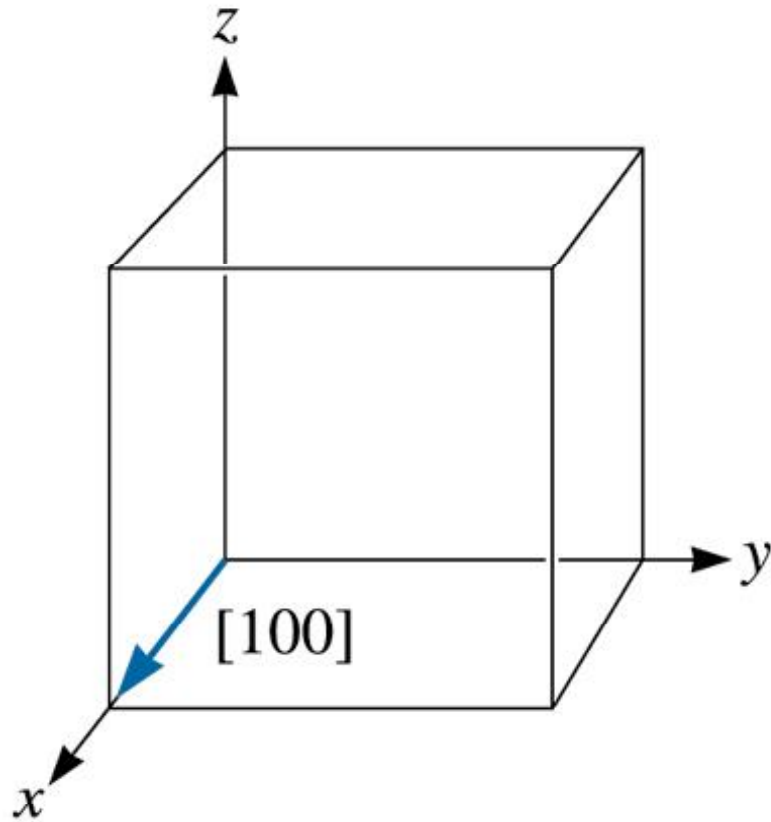
$[100]$ ile $[200]$ aynı yönü gösterir.

3. Bazı doğrultular eşdeğerdir.

$[100]$ ile $[010]$ sadece koordinat eksenini tekar tanımlanmıştır.

Eş doğrultular $\langle 110 \rangle$ olup içerisindeki doğrultular birbirine eşittir.





(c) 2003 Brooks/Cole Publishing / Thomson Learning™

Şekil. Kübik sistemde kristallografik doğrultuların eşdeğerleri.

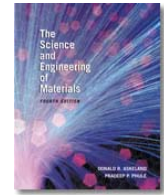
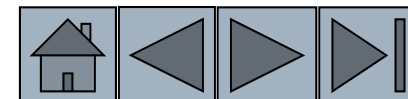
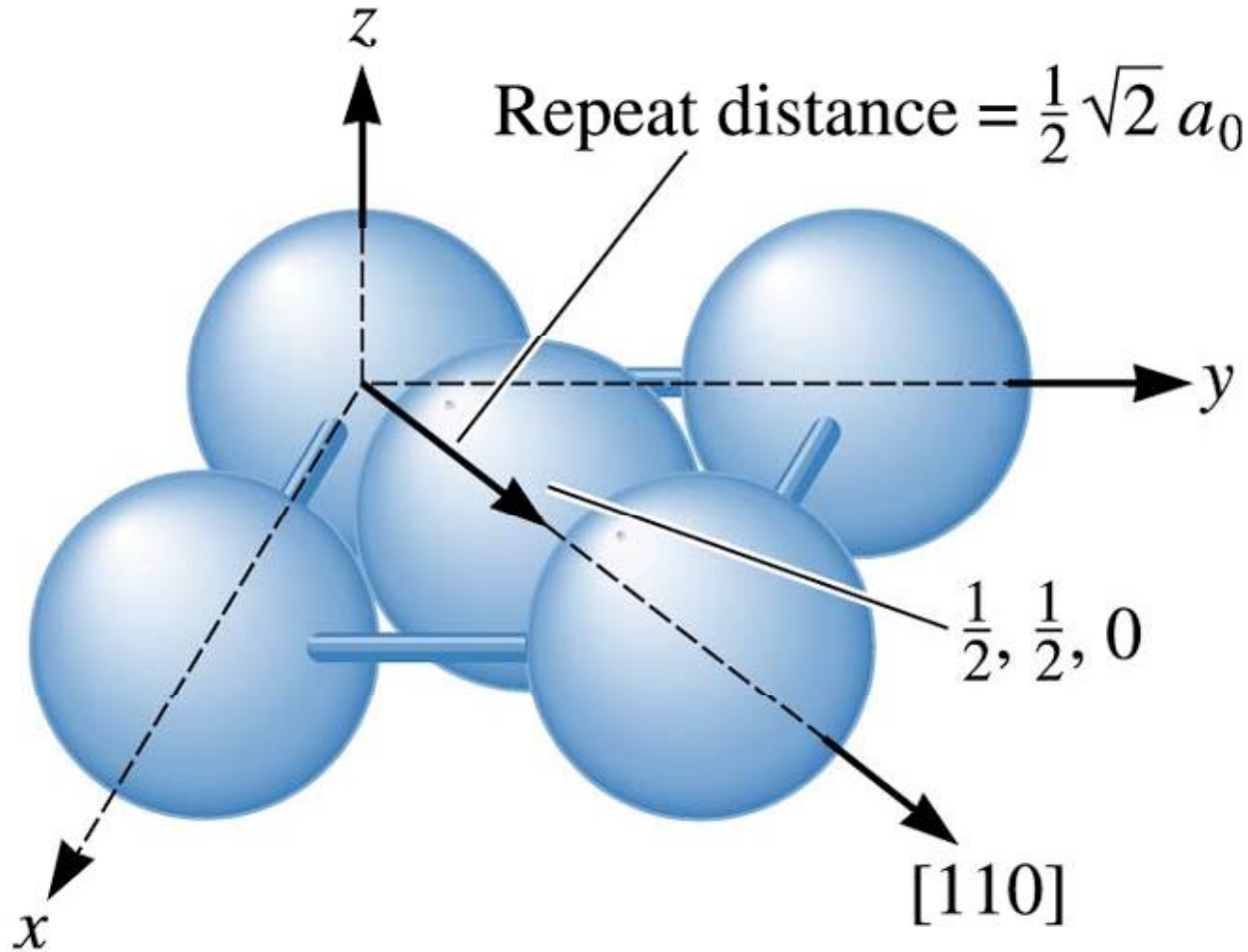
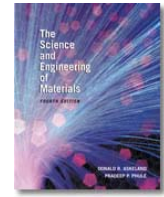


TABLE 3-3 ■ *Directions of the form $\langle 110 \rangle$ in cubic systems*

$$\langle 110 \rangle = \left\{ \begin{array}{ll} [110] & [\bar{1}\bar{1}0] \\ [101] & [\bar{1}0\bar{1}] \\ [011] & [0\bar{1}\bar{1}] \\ [1\bar{1}0] & [\bar{1}10] \\ [10\bar{1}] & [\bar{1}01] \\ [01\bar{1}] & [0\bar{1}1] \end{array} \right.$$

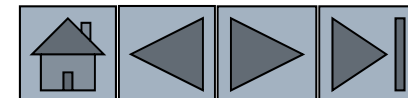


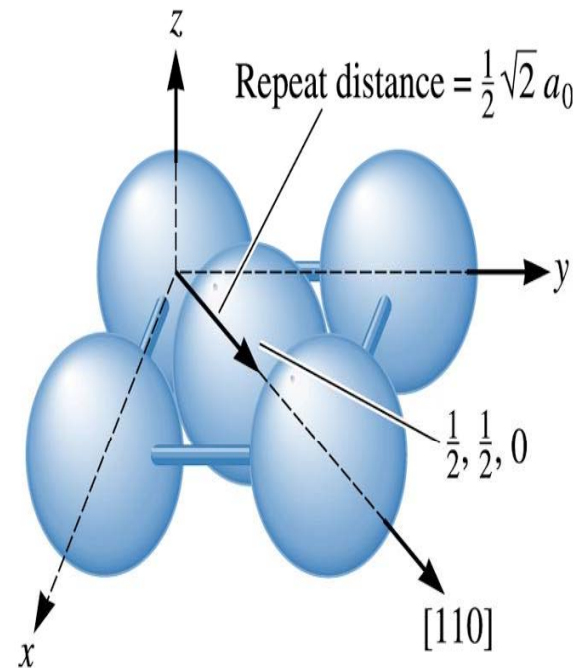
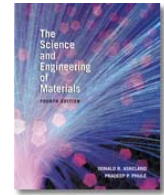


Tekrar edilen uzaklık, lineer yoğunluk ve atomik dolgu faktörünün tanımlanması. YMK bakır in $[110]$ doğrultusu.

Cu $a_0 = 3.6151 \cdot 10^{-8}$ cm
Tekrar edilen uzaklık = $2.556 \cdot 10^{-8}$ cm

(c) 2003 Brooks/Cole Publishing / Thomson Learning™





(c) 2003 Brooks/Cole
Publishing / Thomson
Learning™

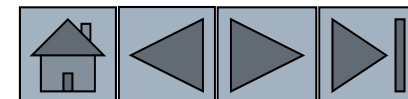
Lineer yoğunluk = $2 * (\text{tekrar edilen uzaklık}) / \text{doğrultunun uzunluğu}$

Lineer yoğunluk = $2 * (2.556 \cdot 10^{-8}) / 5.1125 \cdot 10^{-8}$

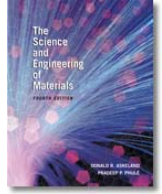
Lineer yoğunluk = $3.9 \cdot 10^7$ latis noktası/cm

ADF = (lineer yoğunluk) * $2r$

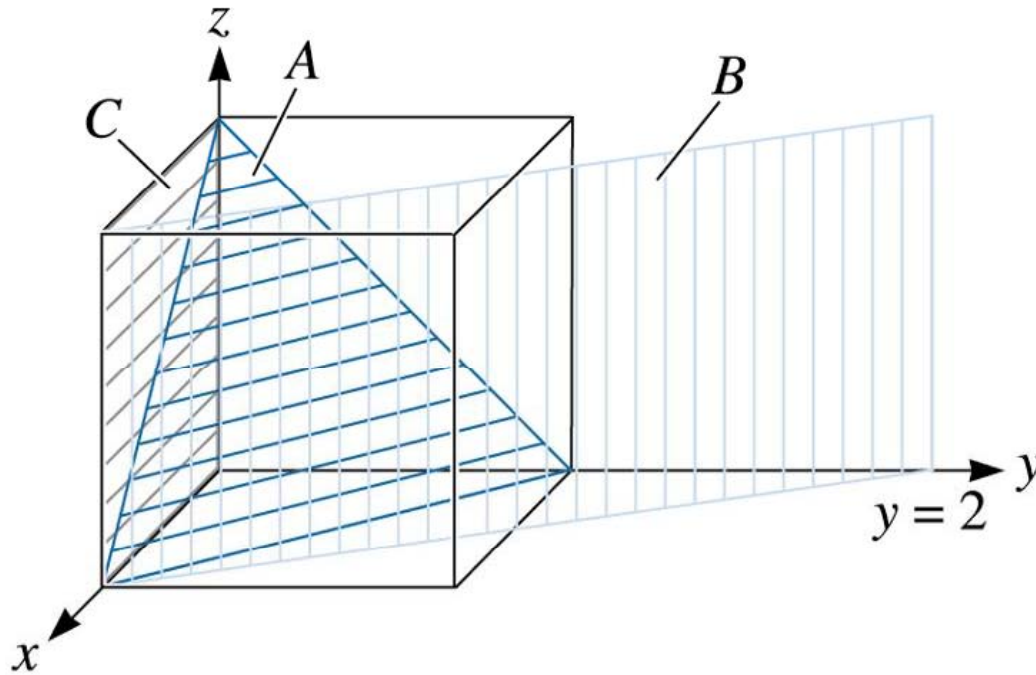
ADF = 1



Örnek 3.8. Düzlemlerin Miller İndislerinin (hkl) Tanımlanması

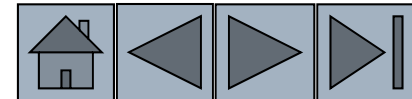


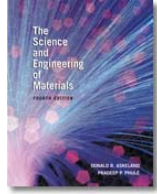
Şekilde verilen A, B ve C düzlemlerinin indislerini belirleyiniz.



**Kristallografik
düzlemler**

(c) 2003 Brooks/Cole Publishing /
Thomson Learning™





ÇÖZÜM

A düzlemi

1. Düzlemlerin koordinat sistemlerini kesen noktalarını belirle

$$x = 1, y = 1, z = 1$$

2. Terslerini al

$$1/x = 1, 1/y = 1, 1/z = 1$$

3. Kesirli ise tamamla

4. Uygun gösterimde yaz

(111)

B düzlemi

1. z eksenini yi kesmez $x = 1, y = 2, \text{ and } z = \infty$

$$2. 1/x = 1, 1/y = 1/2, 1/z = 0$$

3. Kesiri düzenle

$$1/x = 2, 1/y = 1, 1/z = 0$$

4. (210)

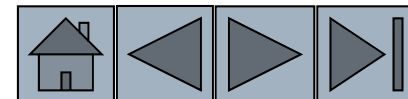
C düzlemi

1. Orijin noktasının yerini değiştirmeliyiz. Çünkü düzlem $0,0,0$ ı kesmekte. Y yönünde orijini bir birim değiştirelim. Böylece $x = \infty, y = -1, \text{ and } z = \infty$

$$2. 1/x = 0, 1/y = -1, 1/z = 0$$

3. Kesir yok

4. (0 $\bar{1}$ 0)



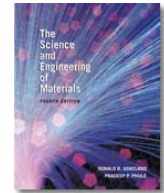
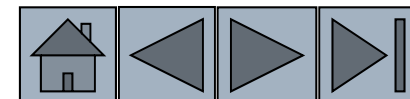
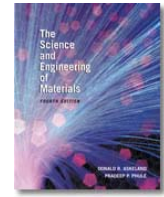


TABLE 3-4 ■ Planes of the form {1 10} in cubic systems

$$\{110\} \left\{ \begin{array}{l} (110) \\ (101) \\ (011) \\ (1\bar{1}0) \\ (10\bar{1}) \\ (01\bar{1}) \end{array} \right.$$

Note: The negatives of the planes are not unique planes.





Düzlemlerin ve düzlemleri gösteren Miller indislerinin kullanımında dikkat edilecek notlar:

Düzlemler ve negatifleri aynıdır. Bu özellik doğrultularda bu şekilde değildir.

$$(020) = (020)$$

2. Düzlemler ve düzlemlerin onların katları aynı düzlemi göstermezler.

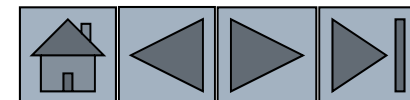
$$(100) \neq (200)$$

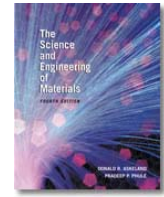
3. Düzlem ailesi eş düzlemleri içerir. $\{ \}$ ile gösterilir.

$$\{110\} = (110), (011), (101), (\bar{1}\bar{1}0), (10\bar{1}), (01\bar{1})$$

4. Kübik sistemlerde birbirine dik olan düzlem ve doğrultular aynı indislere sahiptirler.

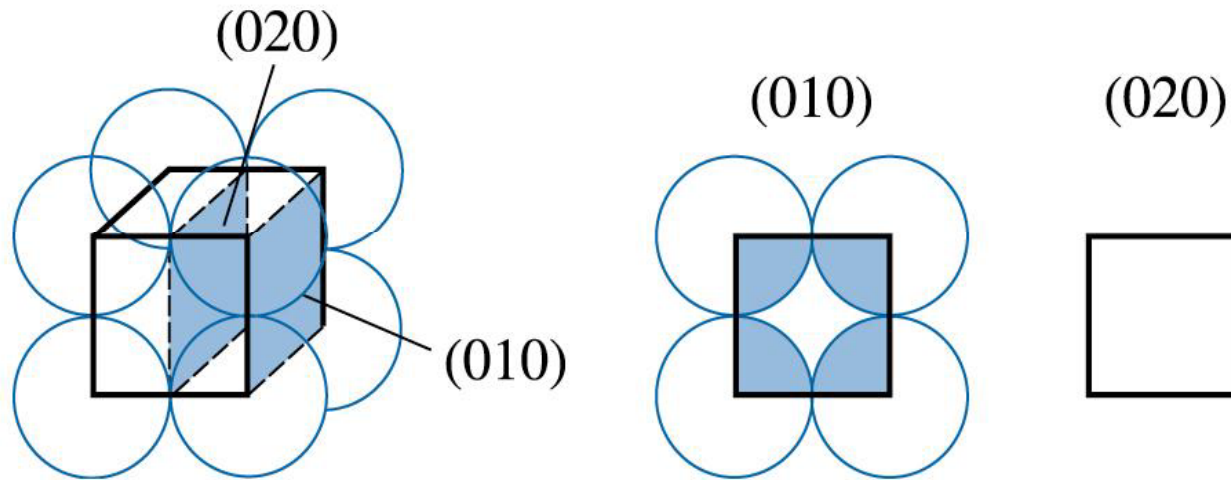
$$[100] \text{ ve } (100)$$





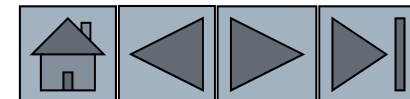
Örnek 3.9. Düzlem Yoğunluğunun ve Dolgu Faktörünün Hesaplanması

Basit küpte (010) Ve (020) düzlemleri için düzlem yoğunluğunu ve düzlem dolgu faktörünü hesaplayınız. Polonyumun latis parametresi 0.334 nm.

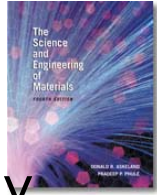


Basit küpte (010) ve (020)'ın düzlem yoğunlukları aynı değildir.

(c) 2003 Brooks/Cole Publishing / Thomson Learning™



ÇÖZÜM



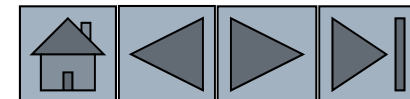
Her bir yüzeydeki toplam atom sayısı 1'dir. Yüzey yoğunluğu:

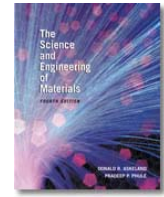
$$\begin{aligned}\text{Planar density (010)} &= \frac{\text{atom per face}}{\text{area of face}} = \frac{1 \text{ atom per face}}{(0.334)^2} \\ &= 8.96 \text{ atoms/nm}^2 = 8.96 \times 10^{14} \text{ atoms/cm}^2\end{aligned}$$

Atomik dolgu faktörü

$$\begin{aligned}\text{Packing fraction (010)} &= \frac{\text{area of atoms per face}}{\text{area of face}} = \frac{(1 \text{ atom}) (\pi r^2)}{(a_0)^2} \\ &= \frac{\pi r^2}{(2r)^2} = 0.79\end{aligned}$$

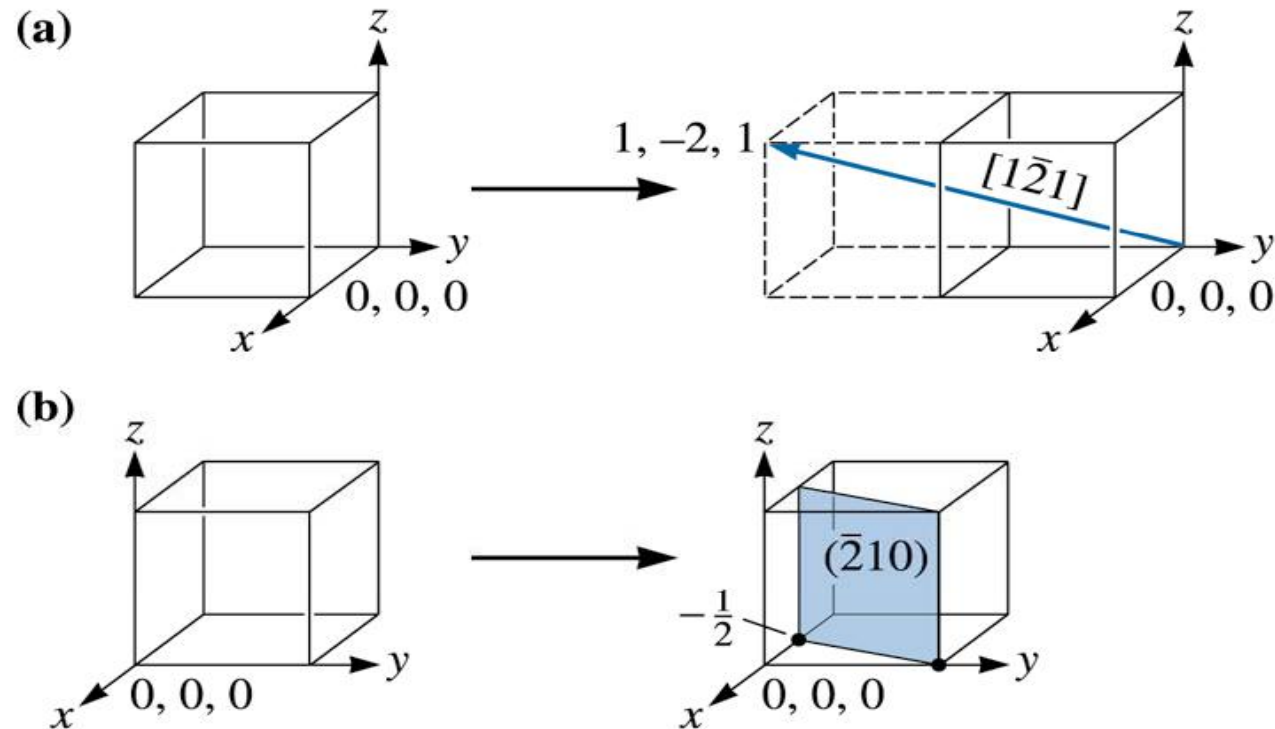
(020) Düzleminde hiç atom yoktur. Dolayısıyla hem düzlem yoğunluğu hem de atomik dolgu faktörü sıfırdır. Bu düzlemler eşdeğer değildir.



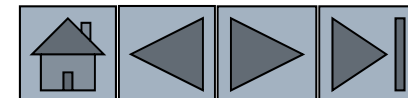


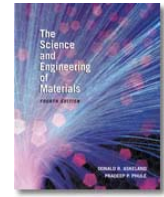
Örnek 3.10. Doğrultu ve Düzlem Çizimi

$[\bar{1}\bar{2}1]$ doğrultusu ve $(\bar{2}10)$ düzlemini gösteriniz?



(c) 2003 Brooks/Cole Publishing / Thomson Learning™





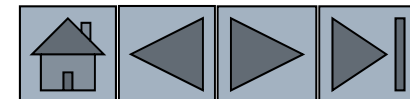
ÇÖZÜM

a. X yönünde 1 adım y yönünde -2 adım ve z yönünde bir adım gidip başlamış olduğumuz nokta ile ulaşılan nokta arasında ok yönü ulaşılmış noktayı işaret edecek şekilde bir doğru çizersiniz.

b. Düzlemi çizmek için önce verilen düzlem noktalarının tersleri alınır

$$x = 1/-2 = -1/2 \quad y = 1/1 = 1 \quad z = 1/0 = \infty$$

Bulunan değerler koordinat sisteminde işaretlenir ve verilen noktalardan geçen düzlem çizilir.

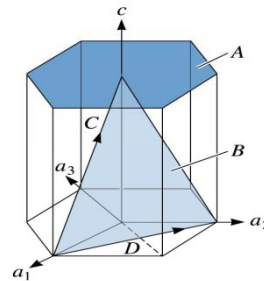


Hegzagonal Birim Hücrede Miller İndisleri (hkil)

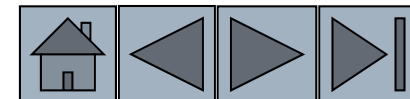


Hegzagonal sistemlerde Miller İndisleri 4 eksenli koordinat sistemi kullanır (hkil).

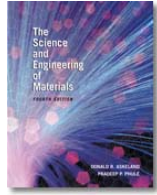
Hegzagonal sistemde doğrultular kübik sistemde olduğu gibi gösterilir. Ancak 4 indisliği hale geldiğinde ($h+k=-i$) kuralı geçerlidir.



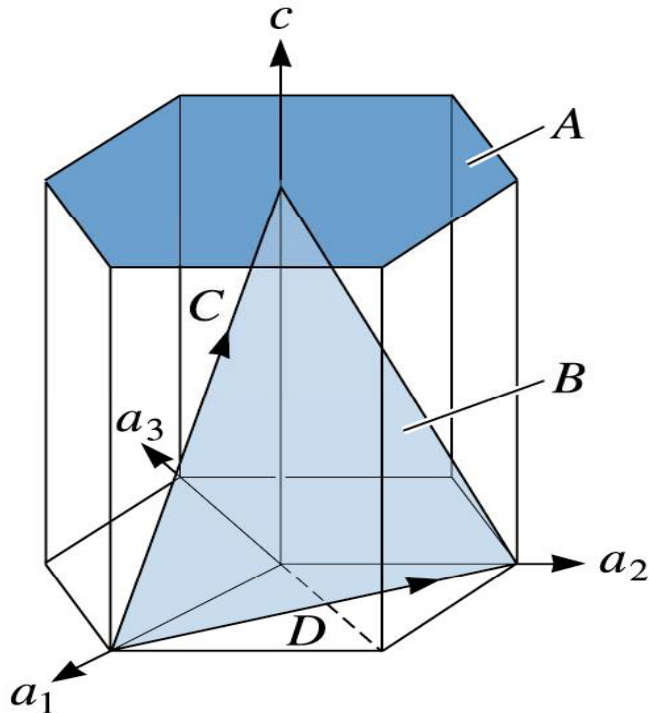
(c) 2003
Brooks/Cole
Publishing /
Thomson
Learning™



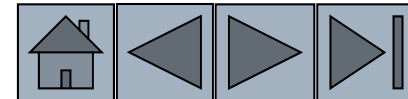
Örnek 3.11. Gösterilen düzlem ve doğrultular için Miller Bravais İndisleri

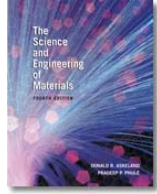


A, B ve C ve D için Miller-Bravais indislerini belirleyiniz?



(c) 2003 Brooks/Cole Publishing /
Thomson Learning™





ÇÖZÜM

A düzlemi

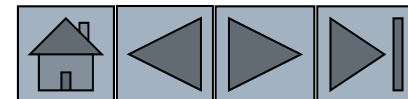
1. $a_1 = a_2 = a_3 = \infty$, da $c = 1$ de koordinatları kesmiştir.
2. Tersleri alınır $1/a_1 = 1/a_2 = 1/a_3 = 0, 1/c = 1$
3. Kesir tamamlamaya gerek yoktur.
4. (0001)

B düzlemi

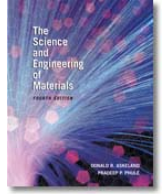
1. $a_1 = 1, a_2 = 1, a_3 = -1/2, c = 1$
2. $1/a_1 = 1, 1/a_2 = 1, 1/a_3 = -2, 1/c = 1$
3. Kesir tamamlamaya gerek yoktur.
4. $(11\bar{2}1)$

C doğrultusu

1. C için bitiş 0, 0, 1 ve başlangıç 1, 0, 0.
2. $0, 0, 1, -1, 0, 0 = -1, 0, 1$
3. No fractions to clear or integers to reduce.
4. $[\bar{1}01]$

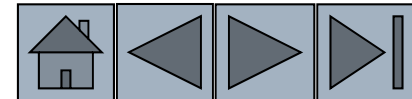


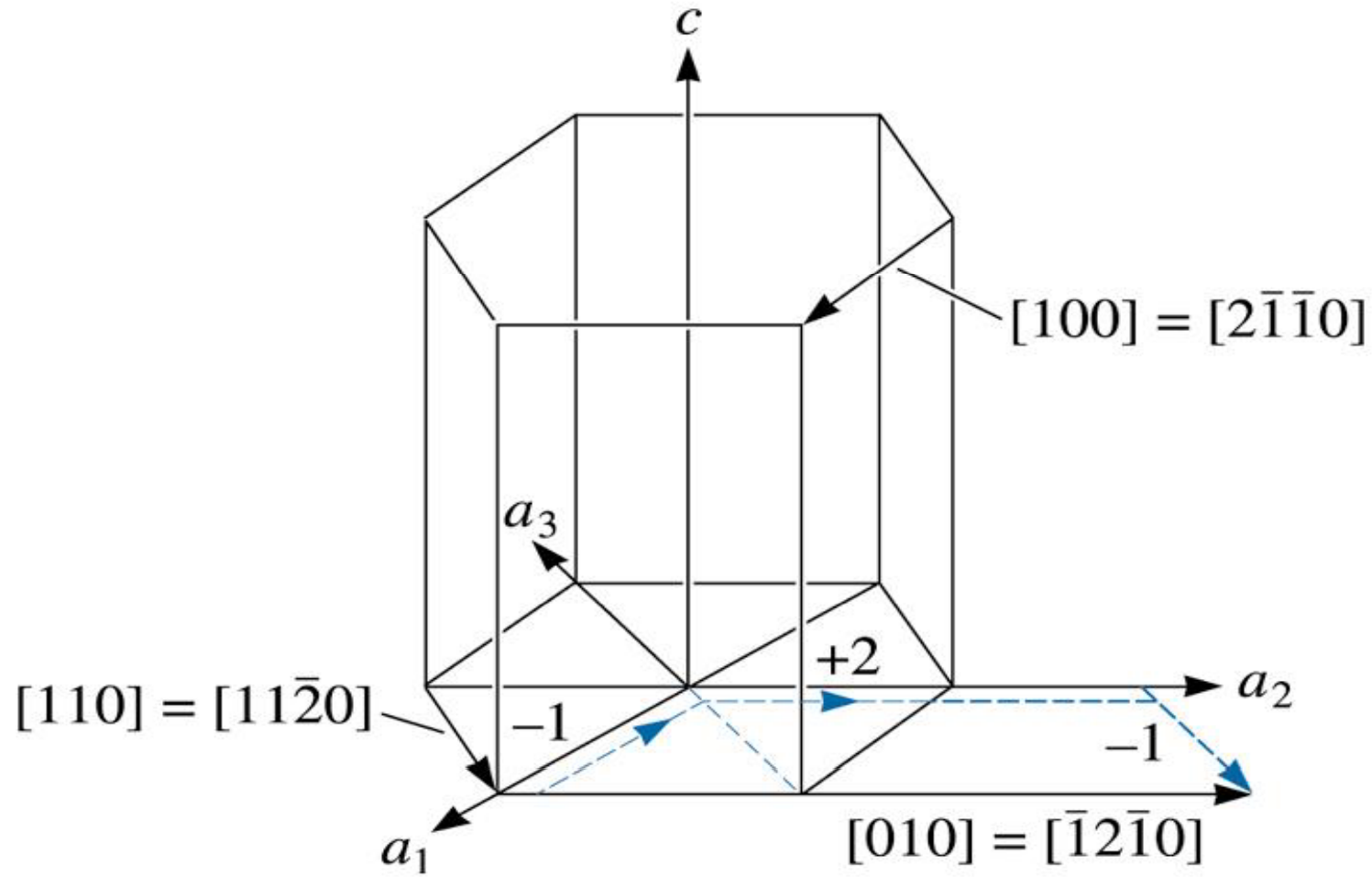
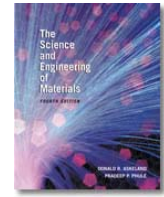
ÇÖZÜM



D doğrultusu

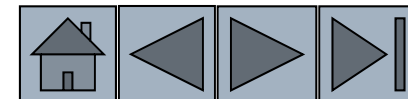
1. Bitiş 0,1,0 Başlangıç: 1,0,0
2. $0,1,0 - 1,0,0 = -1,1,0$
3. Kesir tamamlamaya gerek yoktur.
4. $[\bar{1}10]$

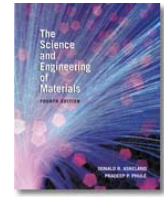




(c) 2003 Brooks/Cole Publishing / Thomson Learning™

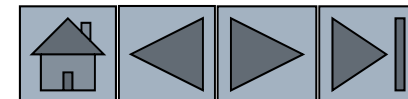
**HSP birim hücrelerde üç ve dört eksenli sistemlerin eşdeğeri.
Çizgili gösterilmiş $[\bar{1}2\bar{1}0]$ doğrultusu $[010]$ doğrultusu ile eşdeğeri.**

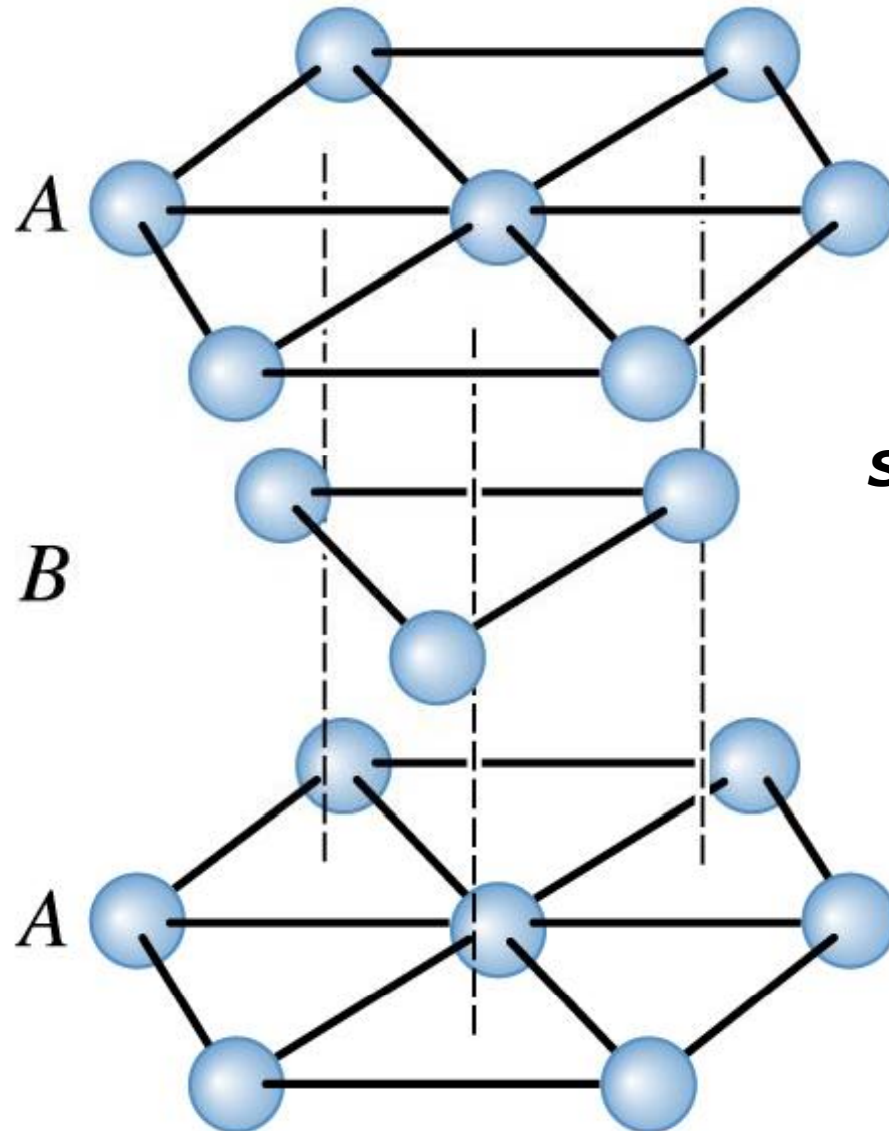
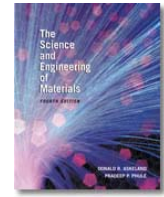




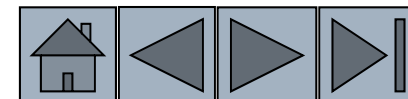
Sıkı paketlenmiş düzlem ve doğrultular

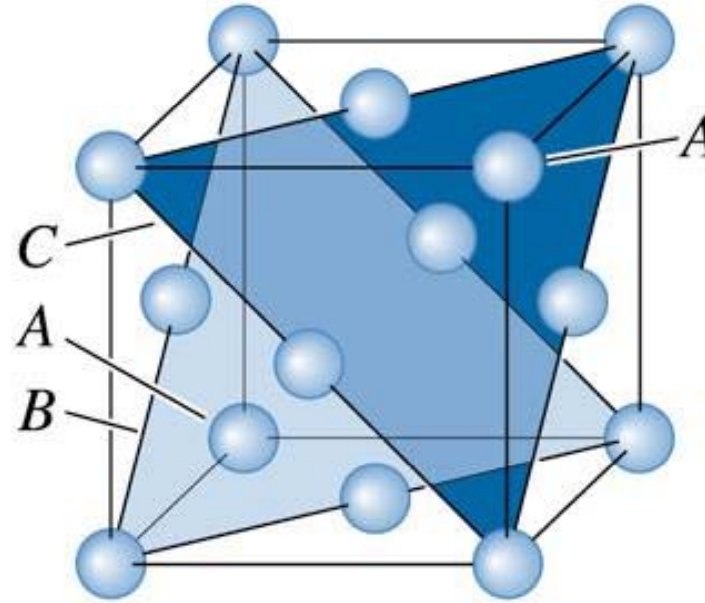
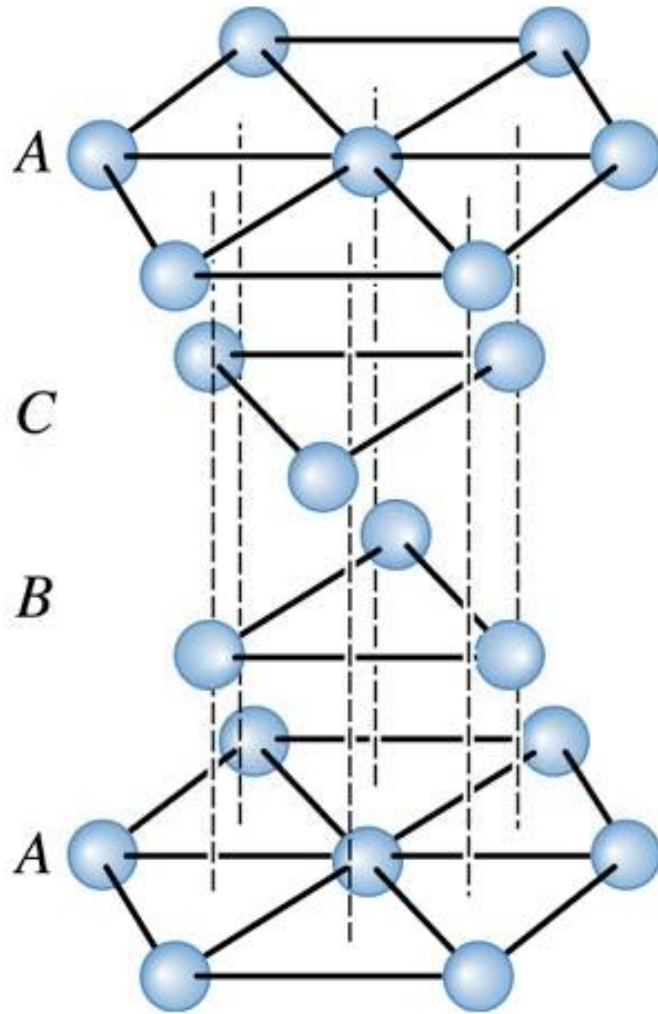
Yapı	Doğrultu	Düzlem
BK, Basit Kübik	$\langle 100 \rangle$	yok
Hacim Merkezli Kübik, HMK	$\langle 111 \rangle$	yok
Yüzey Merkezli Kübik, YMK	$\langle 110 \rangle$	$\{111\}$
Sıkı Paket Hegzagonal, SPH	$\langle 110 \rangle, \langle 100 \rangle$	(0001)





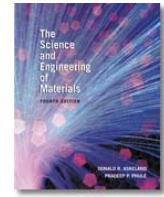
SPH yapıda ABABAB istifli.





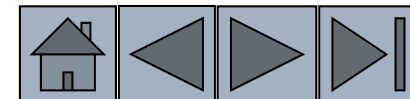
(c) 2003 Brooks/Cole Publishing / Thomson Learning™

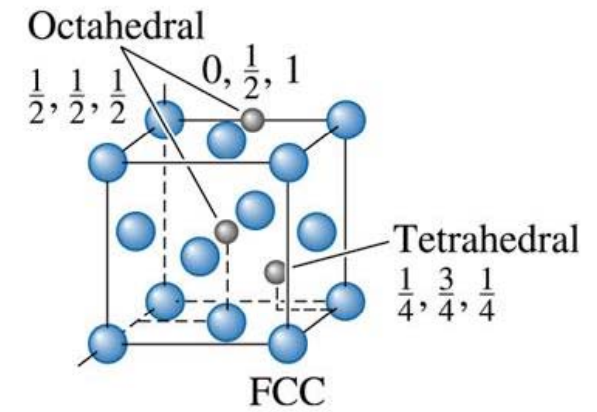
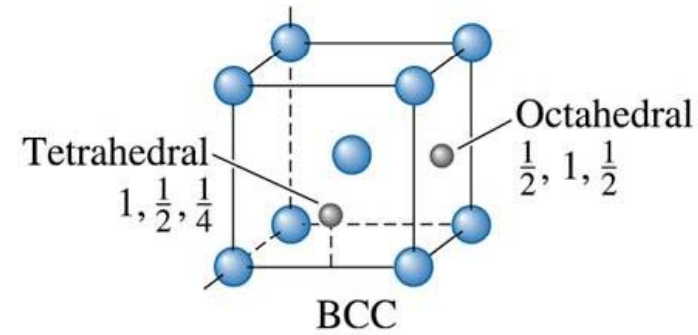
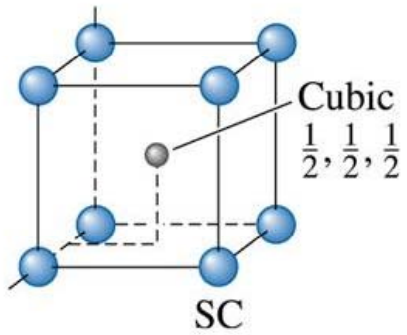
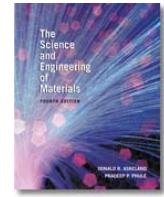
SPH sistemlerdeki $ABCABC$ istiflemesi YMK yapıyı ortaya çıkarır.



Bölüm 3.6. Arayerler

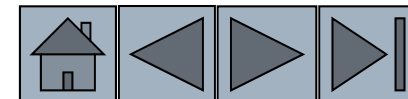
- **Arayerler** –Atomlar veya iyonlar arasındaki yerlere denir. Bu aralıklar çok küçük olduklarından değişik atom veya iyonlar yerleşirler.
- **Kübik bölge** – Koordinasyon sayısı 8 olan yerleşimler olup bir atom veya iyon 8 adet atom veya iyon ile yanyanadır.
- **Oktahedral bölge**- Koordinasyon sayısı 6 olan arayerdir.
- **Tetrahedral bölge** – Koordinasyon sayısı 4 olan arayer bölgesidir.

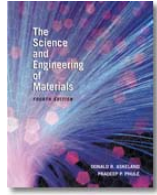




(c) 2003 Brooks/Cole Publishing / Thomson Learning™

Kübik birim hücrelerde arayerler.





Örnek 3.12. Oktahedral bölgelerin Hesaplanması

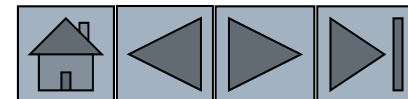
YMK birim hücredeki oktahedral bölgeleri belirleyiniz?

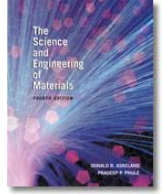
ÇÖZÜM

Oktahedral bölgeler birim hücrenin 12 kenarını içerir.

$$\begin{array}{cccc} \frac{1}{2}, 0, 0 & \frac{1}{2}, 1, 0 & \frac{1}{2}, 0, 1 & \frac{1}{2}, 1, 1 \\ 0, \frac{1}{2}, 0 & 1, \frac{1}{2}, 0 & 1, \frac{1}{2}, 1 & 0, \frac{1}{2}, 1 \\ 0, 0, \frac{1}{2} & 1, 0, \frac{1}{2} & 1, 1, \frac{1}{2} & 0, 1, \frac{1}{2} \end{array}$$

merkez, $\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$.



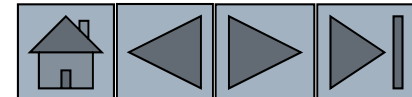


ÇÖZÜM (devam)

Birim hücrenin kenarındaki her bir bölge 4 birim hücre ile paylaşılır. Bu yüzden,

Sadece bir hücreye ait bölge sayısı:

(12 kenar) (1/4 hücre başına) + 1 merkez bölge = 4
oktahedral bölge



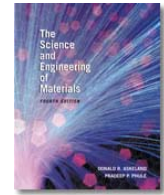

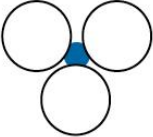
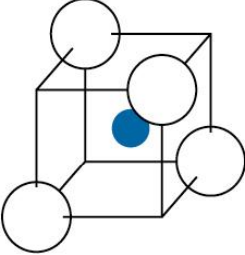

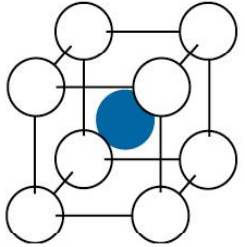
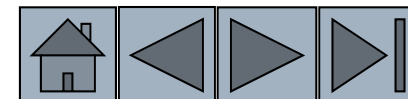
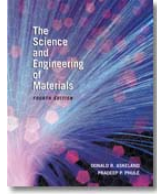


TABLE 3-6 ■ *The coordination number and the radius ratio*

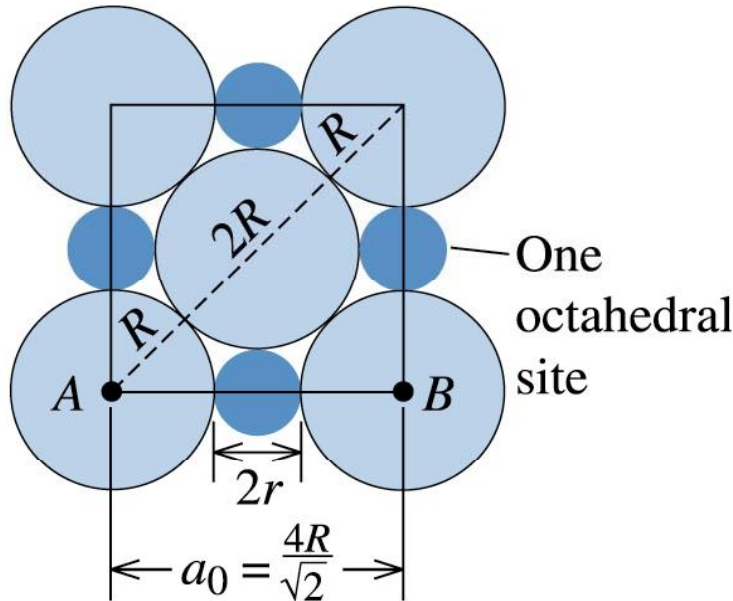
Coordination Location of Number	Interstitial	Radius Ratio	Representation
2	Linear	0–0.155	
3	Center of triangle	0.155–0.225	
4	Center of tetrahedron	0.225–0.414	
6	Center of octahedron	0.414–0.732	
8	Center of cube	0.732–1.000	



Örnek 3.13. Radyasyon Absorbe Eden Duvar Tasarımı

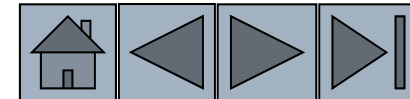


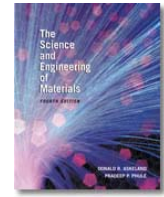
Her biri 3 cm'lik 10.000 adet kurşun bilyadan oluşan ve radyasyon absorbe eden bir duvar yapmak istenmektedir. Düzenlerinin YMK yapıya benzemesi sağlanacaktır. Eğer arayerler doldurulursa daha gelişmiş bir duvar yapılacağı bilindiğinden küçük bilyalar tasarlanacaktır. Bu bilyaların kaç adet olması gerektiği ve boyutlarını tahmin ediniz?



Oktahedral bölgelerinin hesaplanması.

(c) 2003 Brooks/Cole Publishing / Thomson Learning™





ÇÖZÜM

Okthedral bölgelerin çaplarının hesaplanması

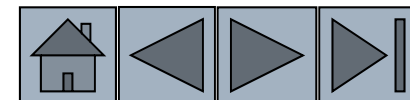
$$\text{Uzunluk } AB = 2R + 2r = 2R \cdot 2^{1/2}$$

$$r/R = 0.414$$

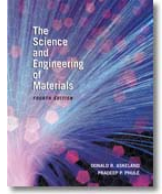
$$r = 0.414 * R = (0.414)(3 \text{ cm}/2) = 0.621 \text{ cm.}$$

YMK da her hücre için 4 oktahedral bölge bulunduğu bilinmektedir bu 4 latis noktası demektir.

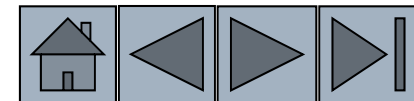
Dolayısıyla aynı sayıda küçük bilyalara ihtiyaç vardır.

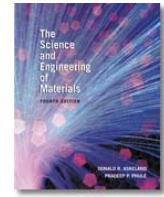


Bölüm 3.7. İyonik Malzemelerin Kristal Yapıları



- İyonik olarak bağlı katıların kristal yapılarının anlaşılması için:
 - İyonik yarıçapları
İyonik bağlı bileşiklerde katyonlar genelde latis noktalarında anyonlarda arayerde yerleşirler.
 - Elektriksel Nötrallikleri
Katyon ve anyonların yükleri aynı ise AX şeklinde bileşik oluştururlar. Bu durumda koordinasyon sayıları aynıdır. Katyon +2, anyon -1 yüklü olduğu durumda AX₂ olur ve bu durumda katyon anyondan iki kat fazla koordinasyon sayısına sahip olmalıdır.





Örnek 3.14. KCl için Yarıçap Oranı

KCl için a) Yapısının CsCl yapısına benzediğini, b) ADF'yi hesaplayınız?

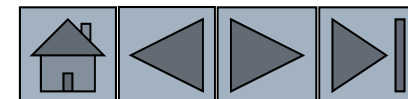
ÇÖZÜM

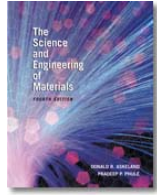
a. $r_{K^+} = 0.133$ nm and $r_{Cl^-} = 0.181$ nm, so:

$$r_{K^+}/r_{Cl^-} = 0.133/0.181 = 0.735$$

Tablo 3.6'dan bakıldığında $0.732 < 0.735 < 1.000$, olduğundan koordinasyon numarası 8 dir.

Bu da CsCl yapısının olması gerektiğini gösterir.



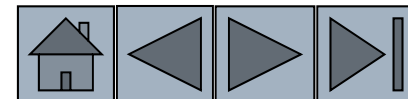


ÇÖZÜM

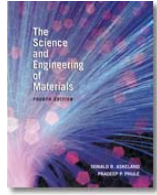
b. Birim hücrenin hacim diyagonalindeki iyonlar:

$$a_0 = 2r_{K^+} + 2r_{Cl^-} = 2(0.133) + 2(0.181) = 0628 \text{ nm}$$
$$a_0 = 0.363 \text{ nm}$$

$$\text{Packing factor} = \frac{\frac{4}{3} \pi r_{K^+}^3 (1 \text{ K ion}) + \frac{4}{3} \pi r_{Cl^-}^3 (1 \text{ Cl ion})}{a_0^3}$$
$$= \frac{\frac{4}{3} \pi (0.133)^3 + \frac{4}{3} \pi (0.181)^3}{(0.363)^3} = 0.725$$



Örnek 3.15. Kristal Yapının Gösterimi ve Yoğunluk Hesabı



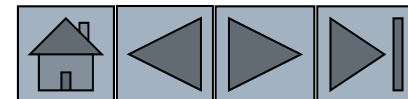
MgO'nun NaCl yapısında olup olmadığını gösterin ve yoğunluğu hesaplayın?

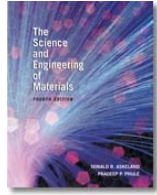
ÇÖZÜM

$$r_{\text{Mg}^{+2}} = 0.066 \text{ nm ve } r_{\text{O}^{-2}} = 0.132 \text{ nm,}$$

$$r_{\text{Mg}^{+2}} / r_{\text{O}^{-2}} = 0.066 / 0.132 = 0.50$$

Tablo 3.6'dan $0.414 < 0.50 < 0.732$, koordinasyon sayısı 6'dır. Yapı NaCl yapısıdır.





ÇÖZÜM

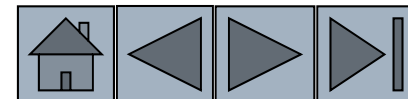
Mg'nin Atom ağırlığı: 24.312

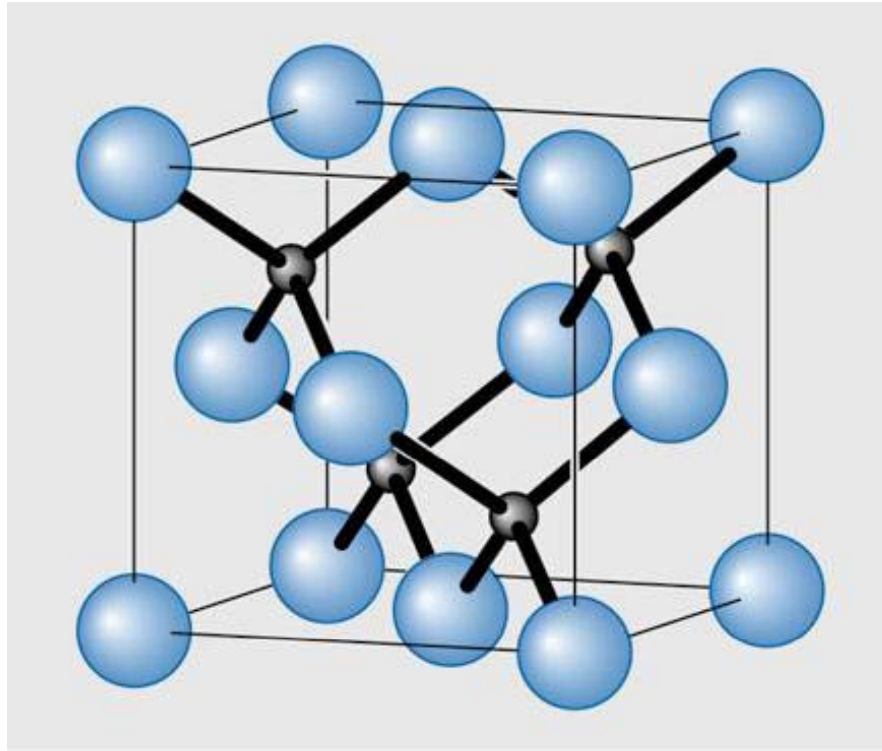
Oksijenin atom ağırlığı: 16 g/mol

Küp kenarları boyunca yerleşmiş iyonlar:

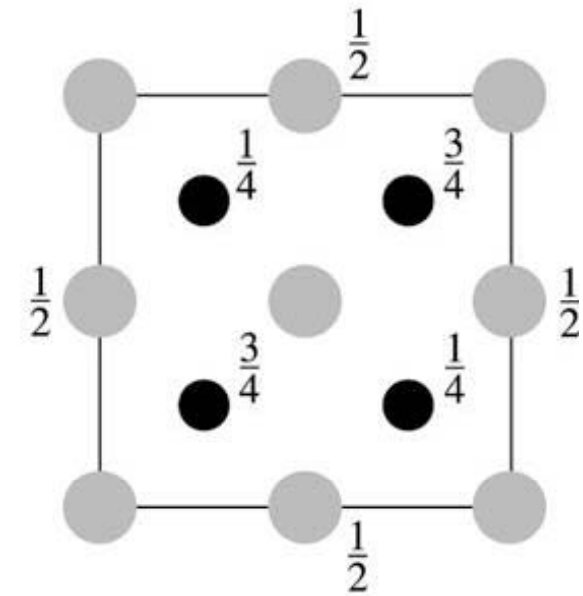
$$\begin{aligned} a_0 &= 2 r_{\text{Mg}^{+2}} + 2 r_{\text{O}^{-2}} = 2(0.066) + 2(0.132) \\ &= 0.396 \text{ nm} = 3.96 \times 10^{-8} \text{ cm} \end{aligned}$$

$$\rho = \frac{(4\text{Mg}^{+2})(24.312) + (4\text{O}^{-2})(16)}{(3.96 \times 10^{-8} \text{ cm})^3 (6.02 \times 10^{23})} = 4.31 \text{ g} / \text{cm}^3$$





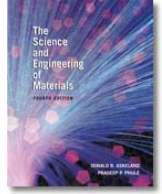
(a)



(b)

(c) 2003 Brooks/Cole Publishing / Thomson Learning™

(a) ZnS birim hücresi, (b) önden görünüş. Koordinasyon sayısı 4.



Örnek: GaAs için teorik yoğunluk hesabı

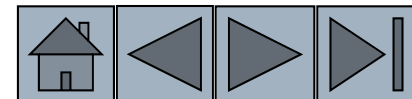
GaAs latis sabiti 5.65 \AA . Teorik yoğunluğu 5.33 g/cm^3 .

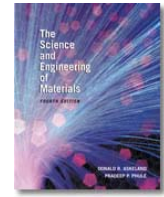
ÇÖZÜM

Koordinasyon sayısı: 4

Her mol (6.023×10^{23} atom) içerir ve atom ağırlığı Ga: 69.7 g.

4 adet koordinasyon sayısı ($4 * 69.7 / 6.023 \times 10^{23}$) g.





ÇÖZÜM (devam)

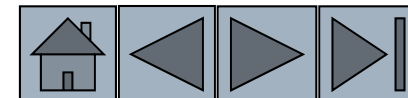
As in bir molunde (6.023×10^{23} atom) ve ağırlığı 74.9 g.

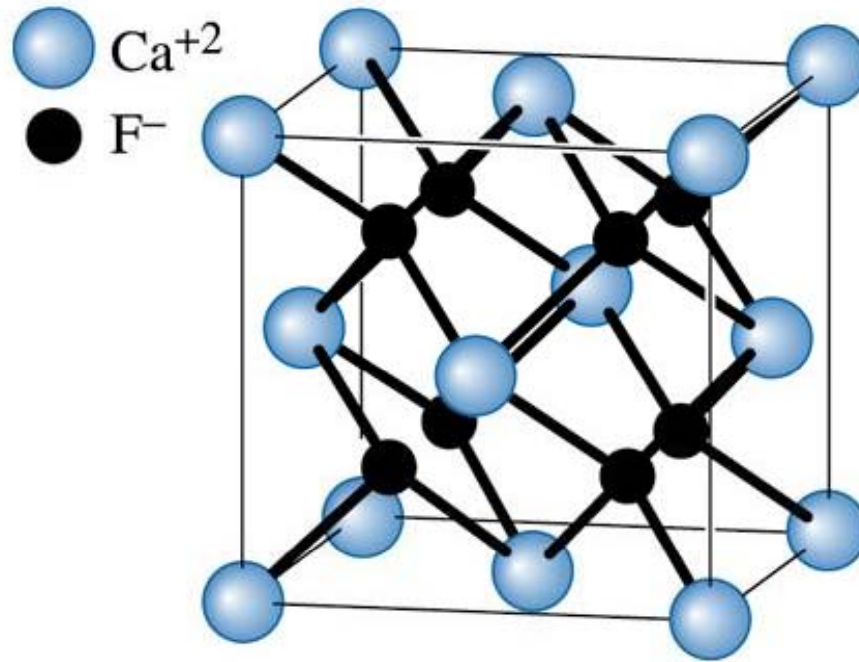
Bu yüzden ($4 * 74.9 / 6.023 \times 10^{23}$) g. Bu atomlar

$(5.65 \times 10^{-8})^3$ cm³lük hacime sahiptirler.

$$\text{density} = \frac{\text{mass}}{\text{volume}} = \frac{4(69.7 + 74.9) / 6.023 \times 10^{23}}{(5.65 \times 10^{-8} \text{ cm})^3}$$

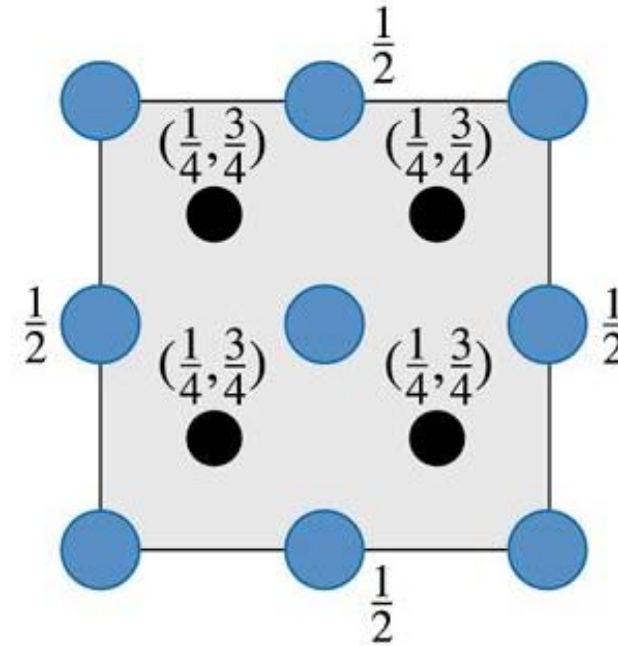
Bu yüzden GaAs teorik yoğunluğu 5.33 g/cm³.





Fluorite cell

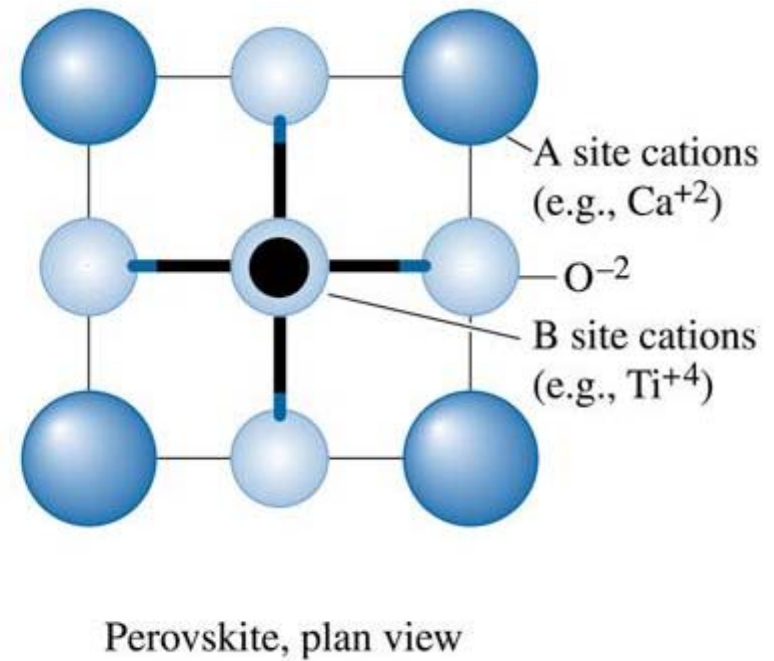
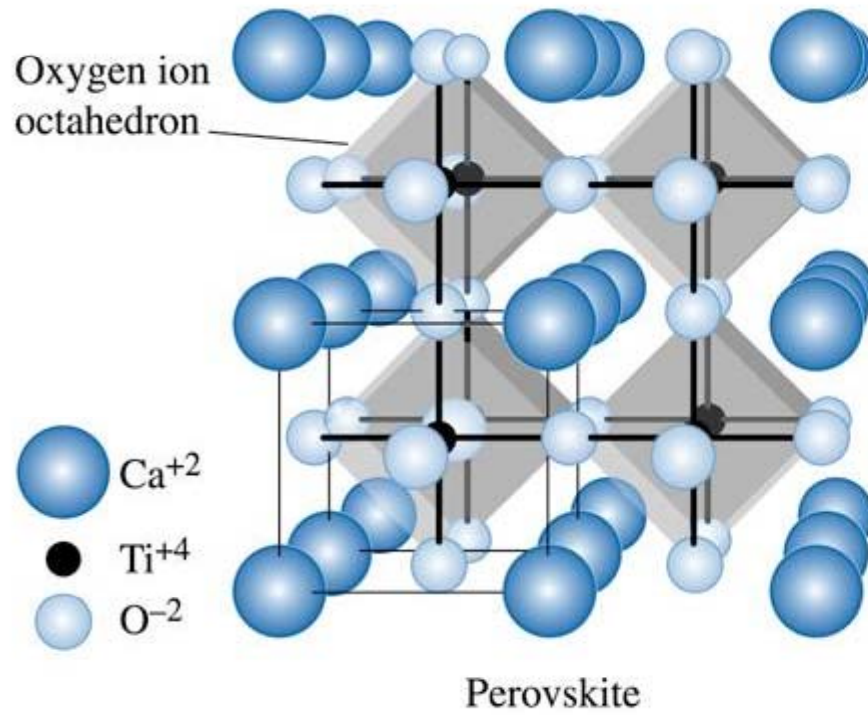
(a)



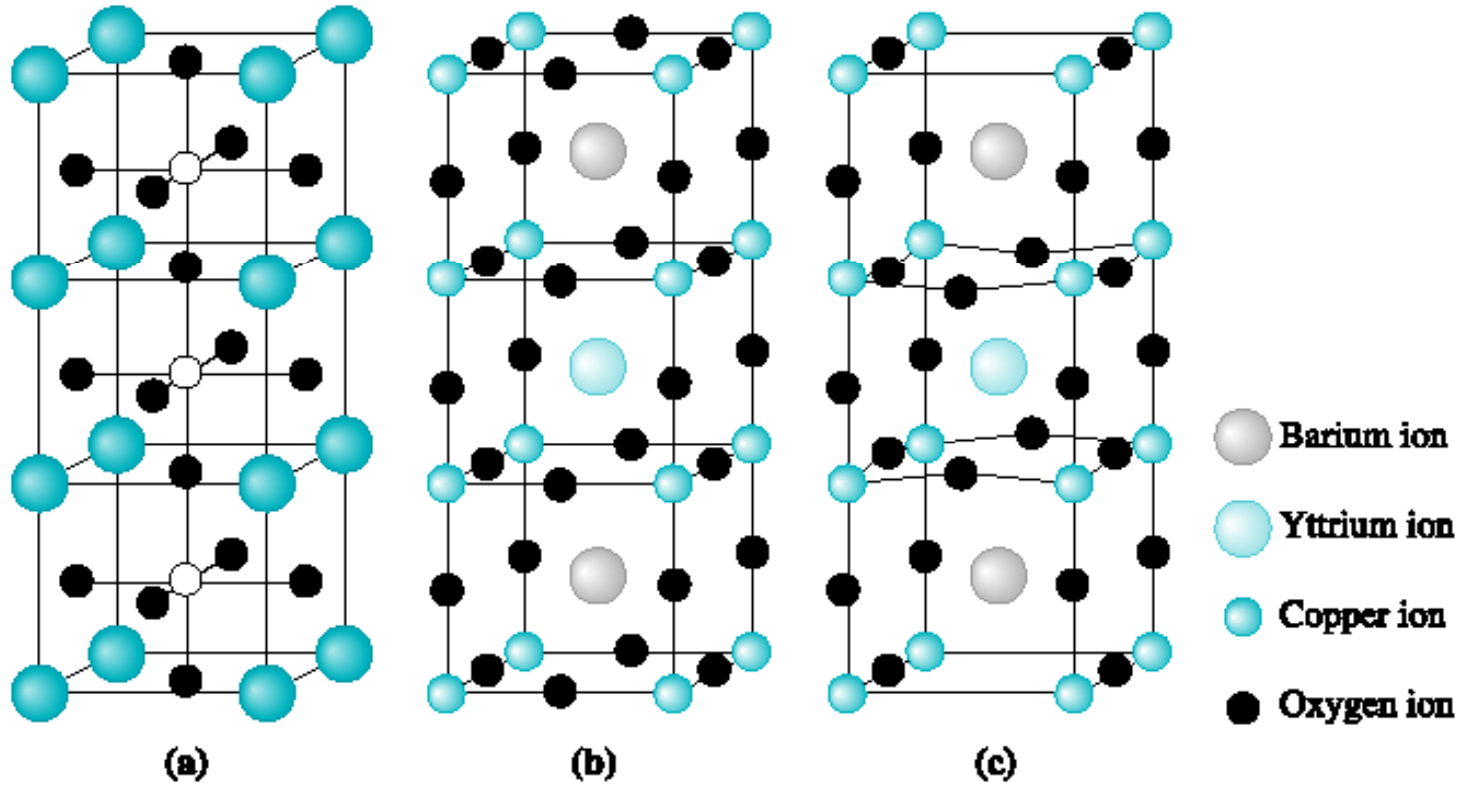
Plan view

(b)

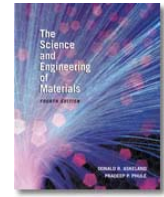
(a) Florit birim hücresi, (b) önden görünüş. (c) 2003 Brooks/Cole Publishing / Thomson Learning™
CaF₂ olduğundan Ca⁺ iyonları 8, F⁻ iyonları 4 koordinasyon sayısına sahiptir.



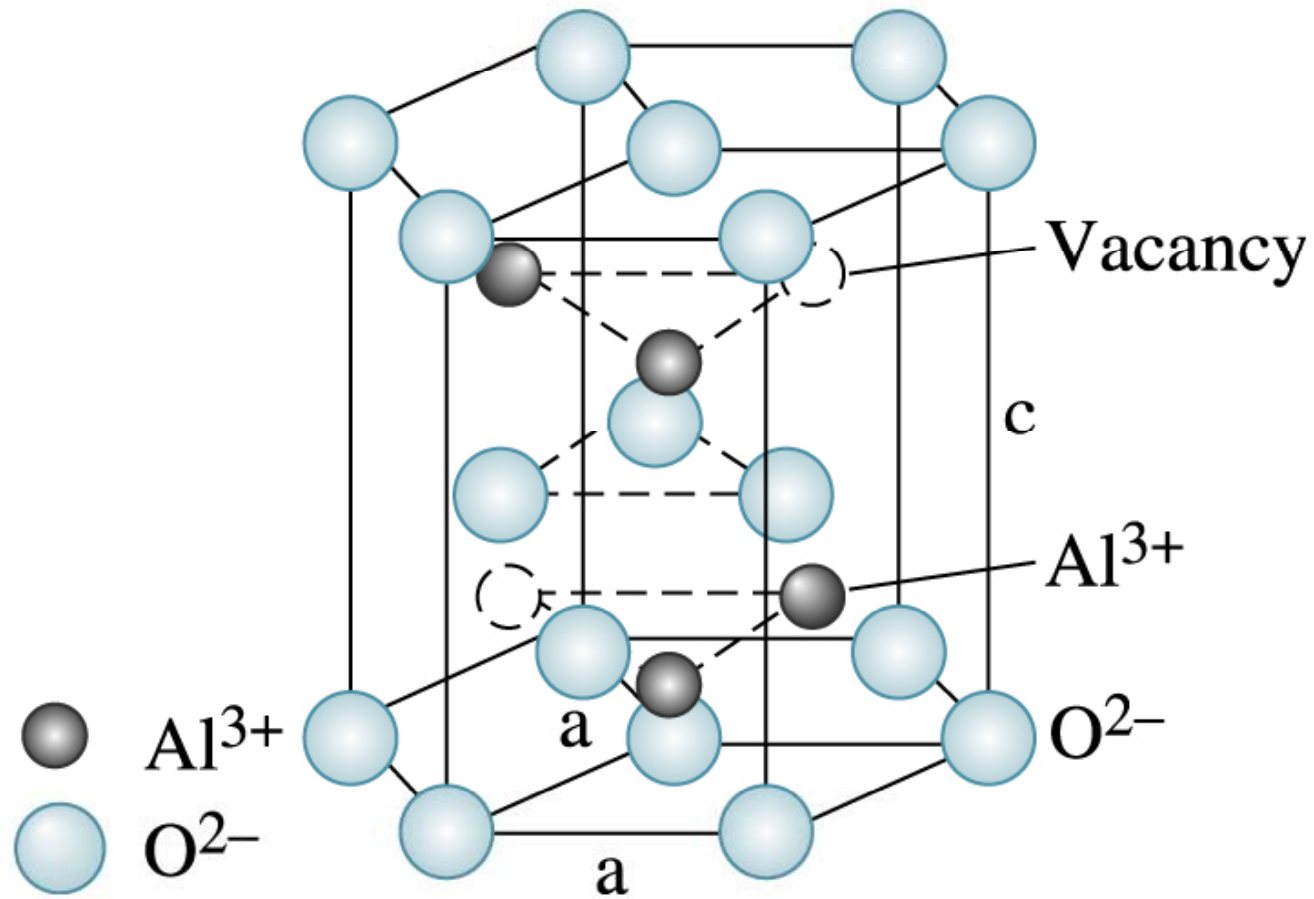
Kalsiyum titanat'ın yapısı



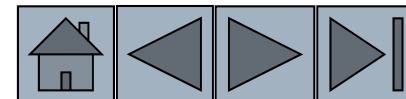
Yüksek sıcaklık seramik süper iletkenlerin yapısı.

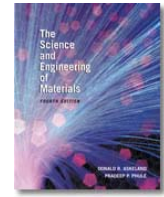


(c) 2003 Brooks/Cole Publishing / Thomson Learning



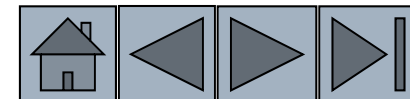
Korundum yapısı ($\alpha-Al_2O_3$).

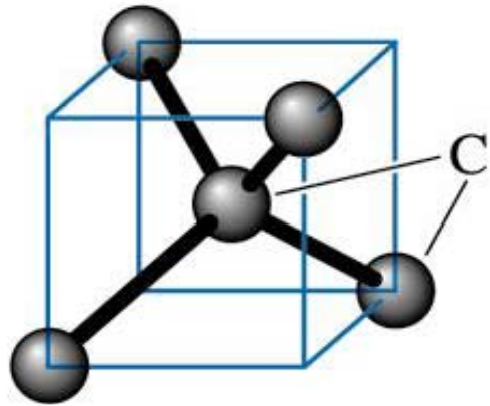




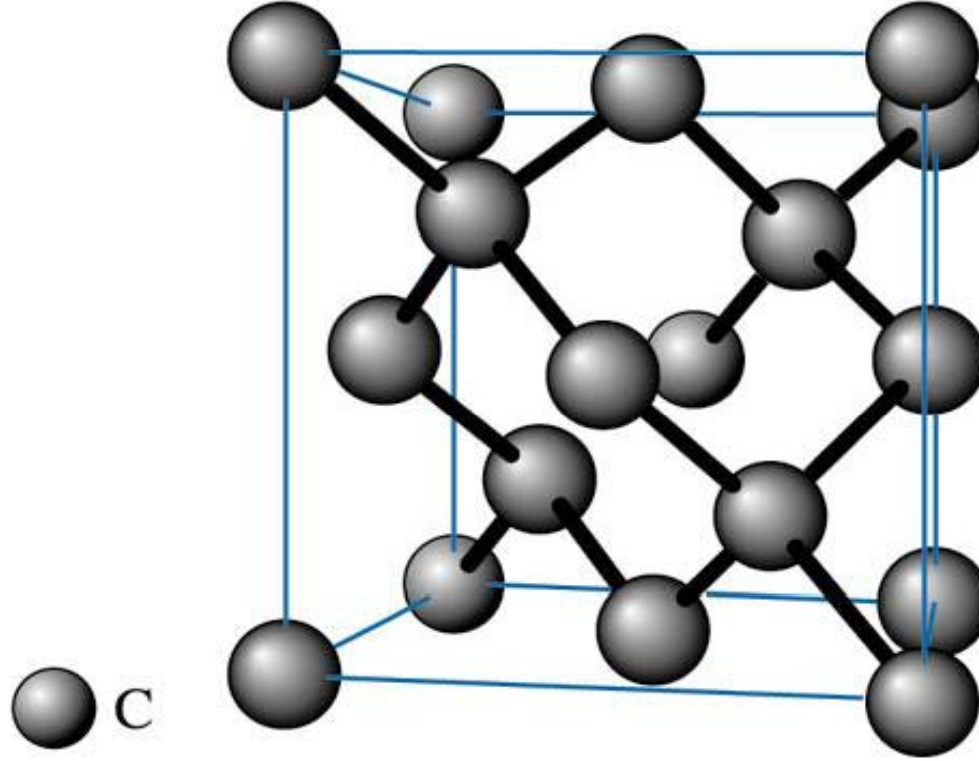
Bölüm 3.8. Kovalent Yapılar

- **Kovalent Bağlı Malzemeler** yönlenmiş bağ yapılarını yerine korumak için/ sağlayabilmek için oldukça karmaşık yapılara sahiptirler.
- **Kübik Elmas** – Karbon, silisyum ve diğer kovalent bağlı malzemelerde görülen özel bir tür yüzey merkezli kübik yapıdır.





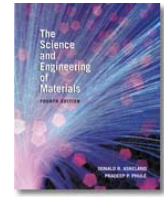
(a)



Diamond

(b)

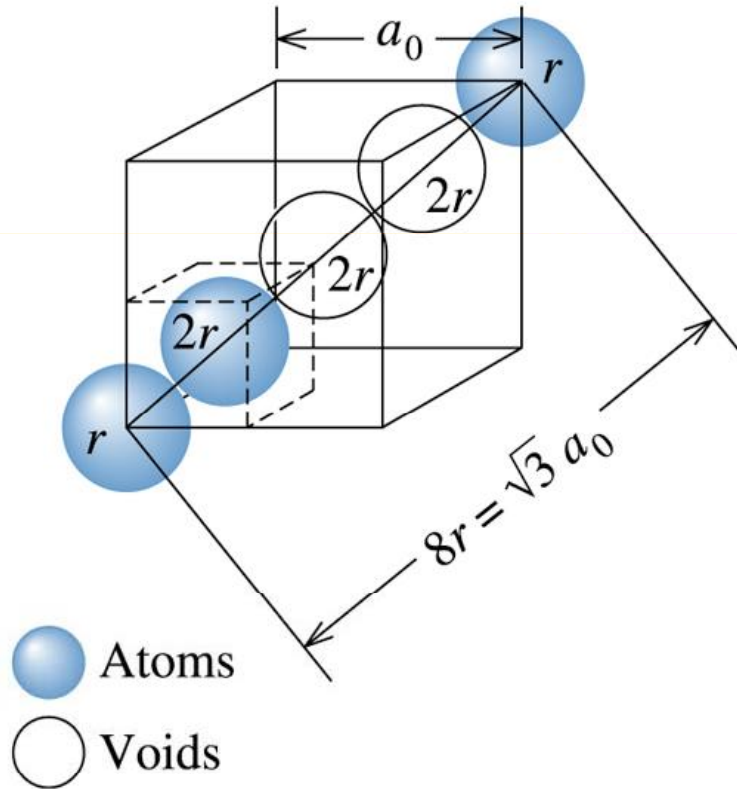
(a) Tetrahedron ve (b) kübik elmas birim hücre.



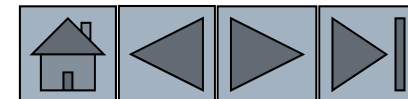
Örnek 3.17. Elmas Kübik Silisyum'un ADF

Elmas Kübik Silisyum'un atomik dolgu faktörünü hesaplayınız?

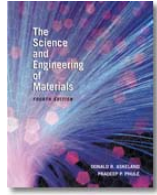
(c) 2003 Brooks/Cole Publishing /
Thomson Learning



**Elmas Kübik Hücrede
atomik yarıçap ve latis
parametreleri
arasındaki ilişki.**



ÇÖZÜM



Hacim köşegeninde atomlar birbirine temas etmekte ancak atom çaplarında boşluklar da bulunmaktadır. Sonuç olarak:

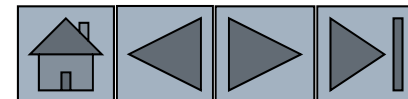
$$\sqrt{3}a_0 = 8r$$

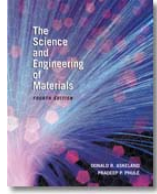
$$\text{Packing factor} = \frac{(8 \text{ atoms/cell})\left(\frac{4}{3} \pi r^3\right)}{a_0^3}$$

$$= \frac{(8)\left(\frac{4}{3} \pi r^3\right)}{(8r / \sqrt{3})^3}$$

$$= 0.34$$

Sıkı paket yapılara göre oldukça açık bir yapıdır.





Silisyumun Yarıçapı, Yoğunluğu ve Kütlesinin Hesabı

Si latis sabiti 5.43 \AA . Silisyum atomunun yarıçapı nedir? Teorik yoğunluğunu hesaplayınız? Atomik ağırlığı 28.1 g/mol .

ÇÖZÜM

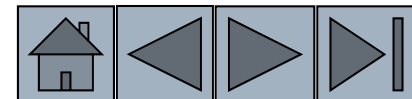
Elmas kübik yapıda,

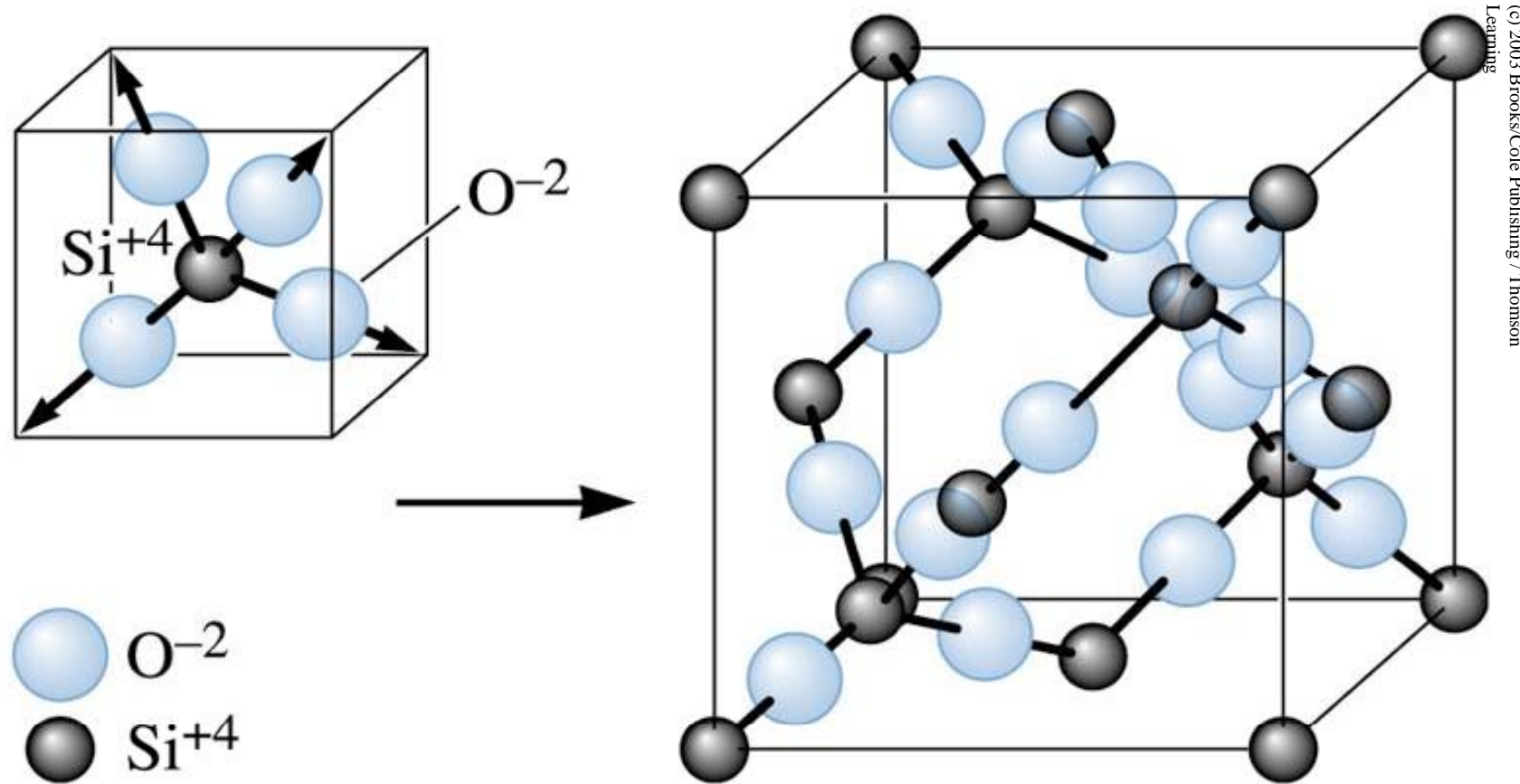
$$\sqrt{3}a_0 = 8r$$

Bu nedenle $a = 5.43 \text{ \AA}$,
Si un yarıçapı= 1.176 \AA .

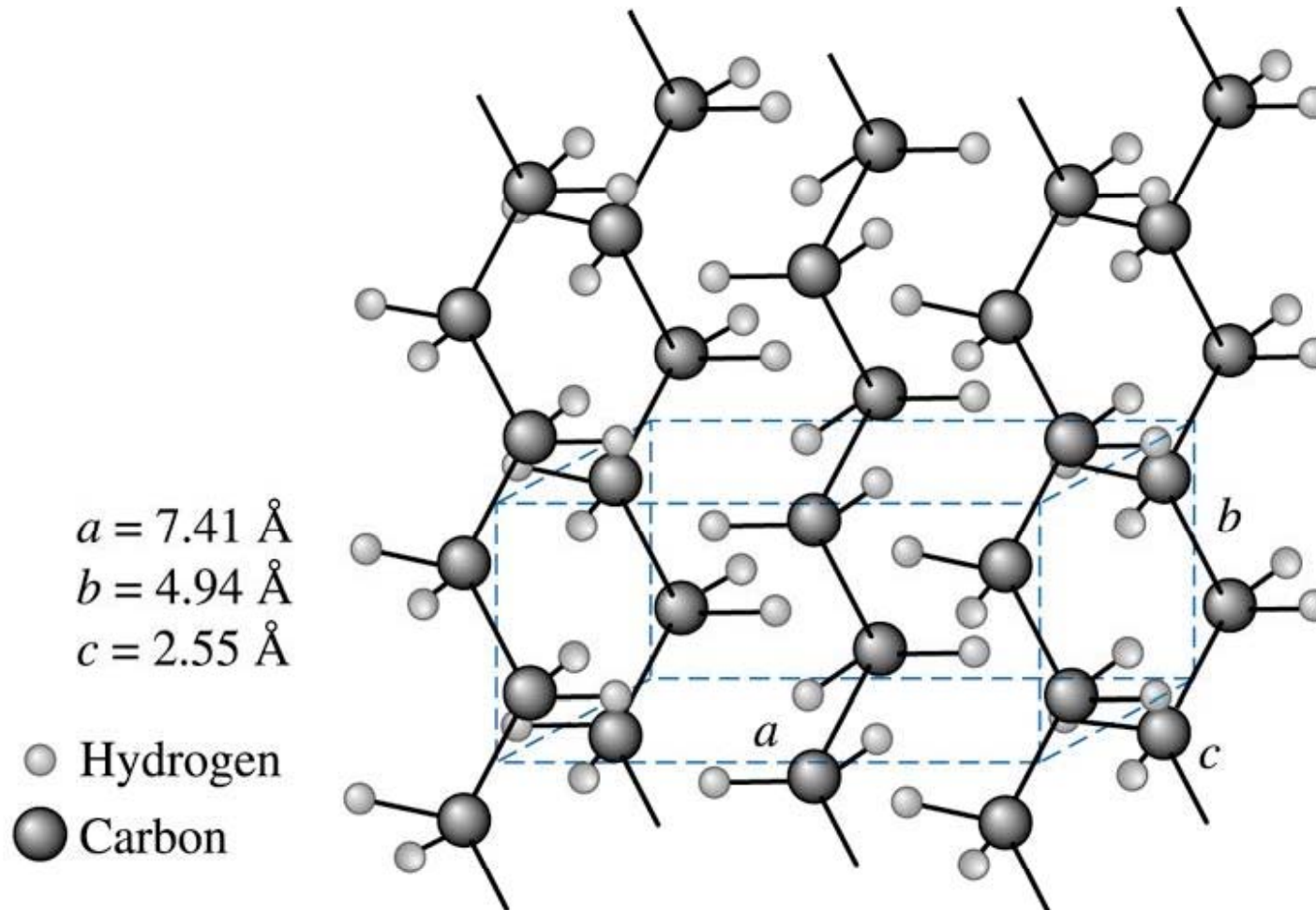
Bir birim hücrede 8 atom var dır..

$$\text{density} = \frac{\text{mass}}{\text{volume}} = \frac{8(28.1) / 6.023 \times 10^{23}}{(5.43 \times 10^{-8} \text{ cm})^3} = 2.33 \text{ g} / \text{cm}^3$$



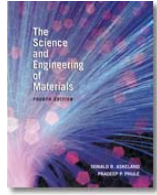


Si-O tetrahedronu ve silikanın β -kristobalit formu



Kristalin Polietilen birim hücresi.

Örnek 3.19. Polietilendeki C ve H atomlarının Sayısının Belirlenmesi



Kristalin polietilen birim hücresinde ne kadar C ve H atomu vardır? H atomları C2lardan iki kat daha fazladır. Polietilenin yoğunluğu 0.9972 g/cm^3 .

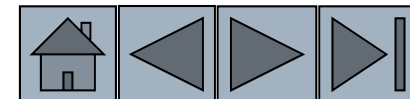
ÇÖZÜM

Karbon x adet ise H hidrojen $2x$ dir.

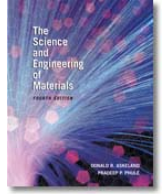
$$\rho = \frac{(x)(12 \text{ g / mol}) + (2x)(1 \text{ g / mol})}{(7.41 \times 10^{-8} \text{ cm})(4.94 \times 10^{-8} \text{ cm})(2.55 \times 10^{-8} \text{ cm})(6.02 \times 10^{23})}$$

$x = 4$ karbon atomu/birim hücre

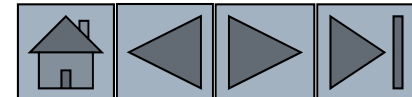
$2x = 8$ hidrojen atomu/birim hücre

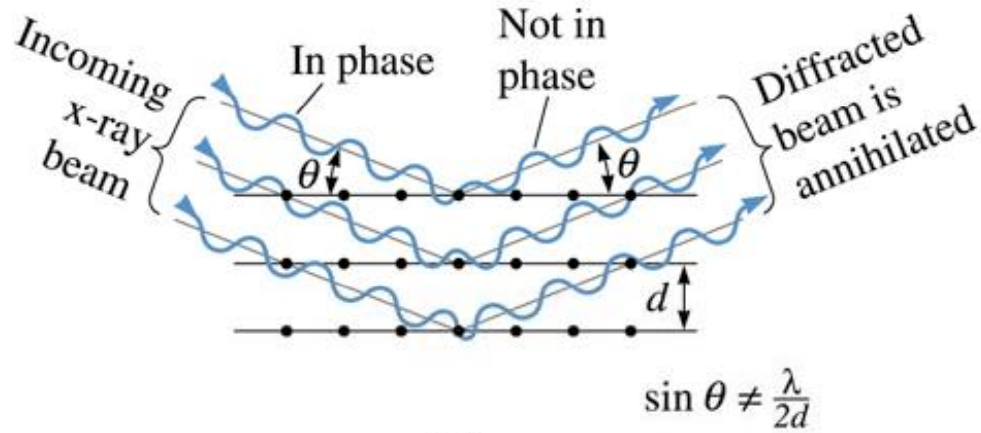
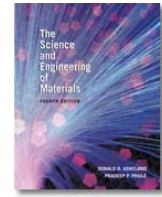


Bölüm 3.9.Kristal Yapı Analizine Yönelik Difraksiyon Teknikleri



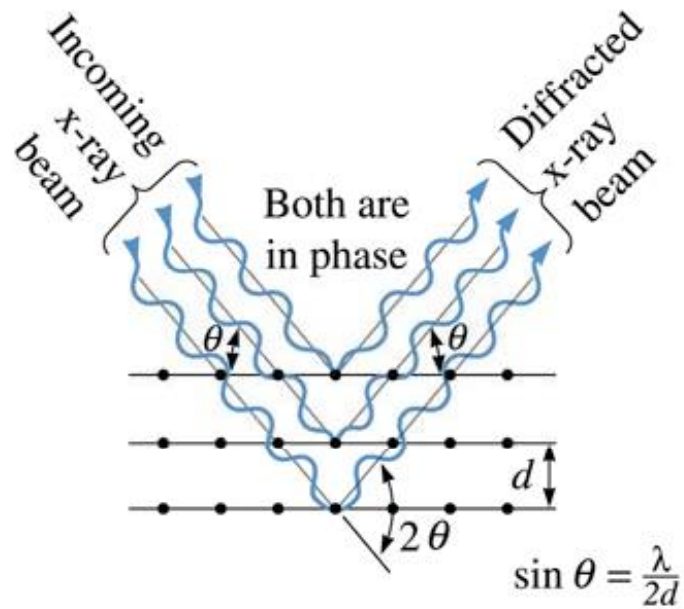
- **Difraksiyon** – X ışınları veya elektronların malzeme ile etkileşimidir. Yansıyan/difraksiyona uğrayan ışın yararlı bilgiler içerir.
- **Bragg kanunu** –Gönderilen X ışınının dalga boyu ile belirli bir düzlemler arası aralığa sahip kristallografik düzlemlerden yansıyan ışının açısı arasındaki ilişkidir.
- **Difraktometrelerde** hareketli X- ışını dedektörü açılı kaydederek karakteristik bir difraksiyon paterni oluşturulur.



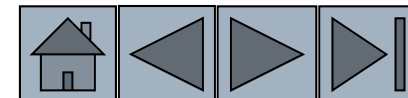


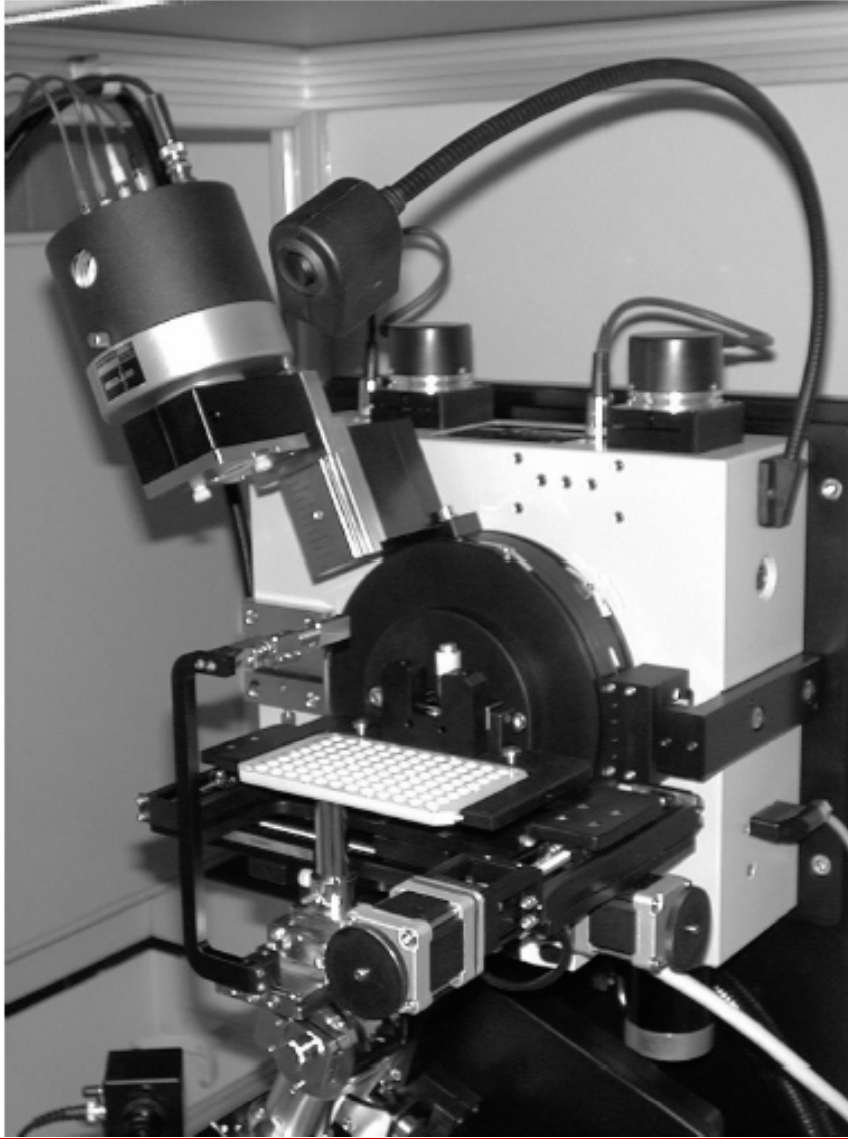
(a)

(a) Bragg kanuna uymaz (b) Bragg kanununa uyar.

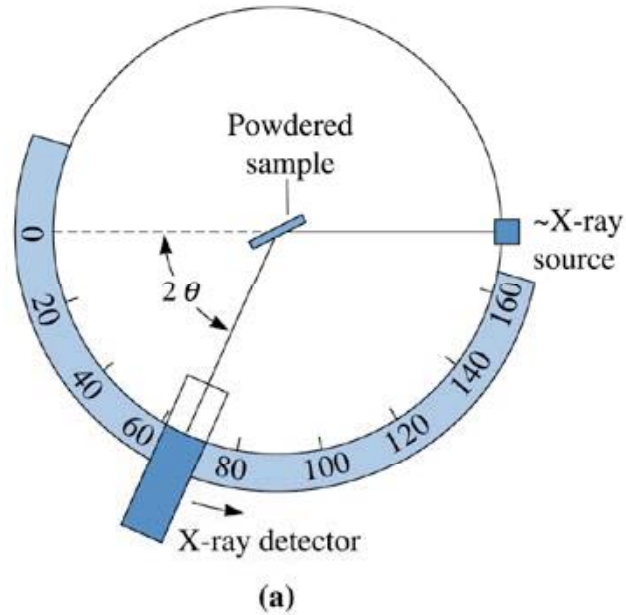


(b)

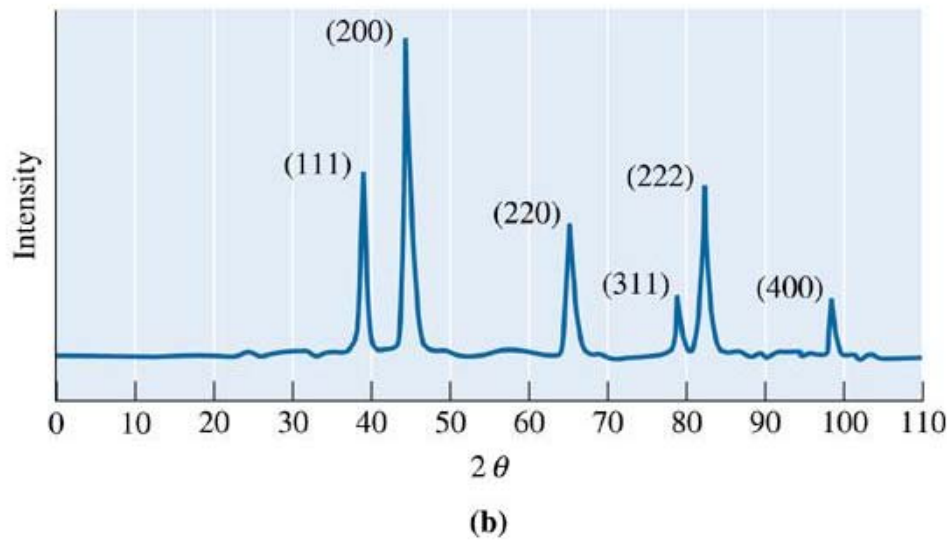




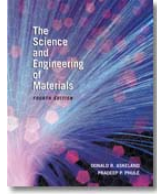
**X-Işını Difraktometresinin
fotoğrafı.**



(a) Toz numunededirfraktometrenin gelen ve yansıyan ışınları. (b) Altın dan elde edilen difraksiyon paterni.



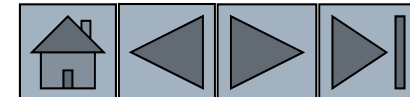
Örnek 3.20. X-Işını Difraksiyonu İncelmesi

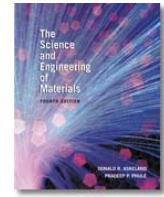


X-ışını difraksiyon deneyi $\lambda = 0.7107 \text{ \AA}$ (radyasyonu ile) Mo den elde edilen radyasyon 2θ açılarında aşağıda verildiği şekilde gözlenmiştir.

Peak	2θ	Peak	2θ
1	20.20	5	46.19
2	28.72	6	50.90
3	35.36	7	55.28
4	41.07	8	59.42

Kristal yapıyı, pik üretmiş düzlemleri ve latis parametresini belirleyiniz?

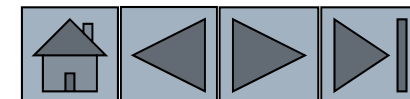


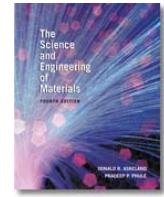


ÇÖZÜM

Her pik için $\sin^2 \theta$ değerini bul ve en düşük paydaya böl (0.0308)

Peak	2θ	$\sin^2 \theta$	$\sin^2 \theta / 0.0308$	$h^2 + k^2 + l^2$	(hkl)
1	20.20	0.0308	1	2	(110)
2	28.72	0.0615	2	4	(200)
3	35.36	0.0922	3	6	(211)
4	41.07	0.1230	4	8	(220)
5	46.19	0.1539	5	10	(310)
6	50.90	0.1847	6	12	(222)
7	55.28	0.2152	7	14	(321)
8	59.42	0.2456	8	16	(400)





ÇÖZÜM (Devamı)

2θ vdeğerlerini kullanarak düzlemler arası mesafeyi ve latis parametresini hesaplayabiliriz.

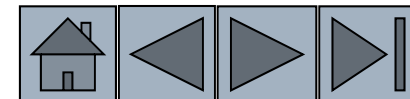
Sekizinci pik :

$$2\theta = 59.42 \text{ or } \theta = 29.71$$

$$d_{400} = \frac{\lambda}{2 \sin \theta} = \frac{0.7107}{2 \sin(29.71)} = 0.71699 \text{ \AA}$$

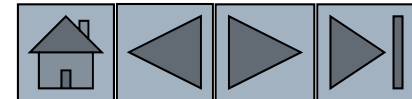
$$a_0 = d_{400} \sqrt{h^2 + k^2 + l^2} = (0.71699)(4) = 2.868 \text{ \AA}$$

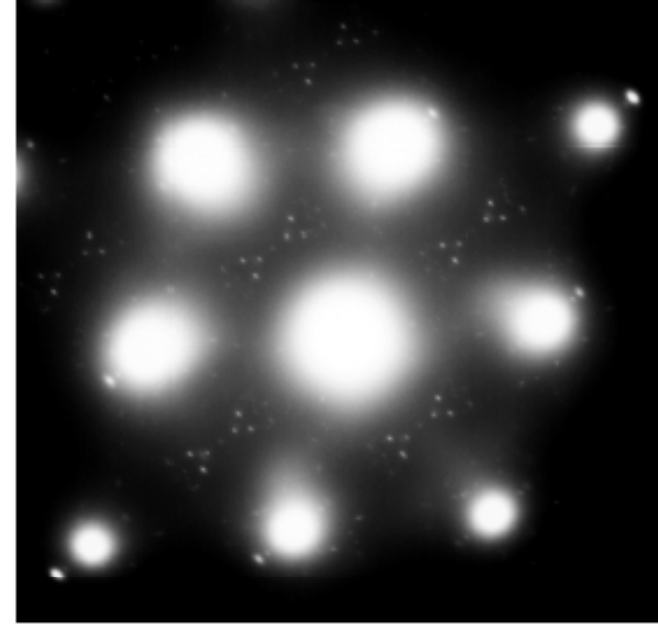
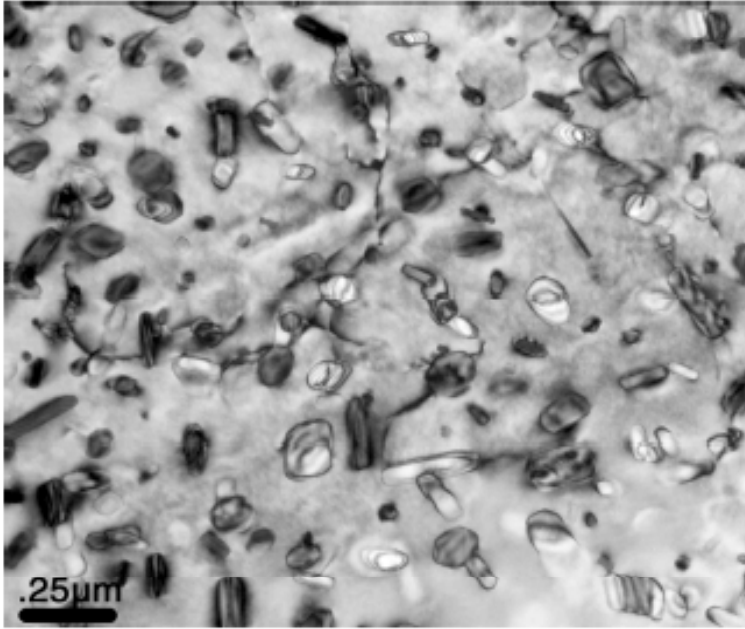
Bu HMK demir in latis parametresidir.



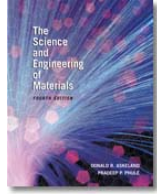


Geçirimli Elektron Mikroskobu

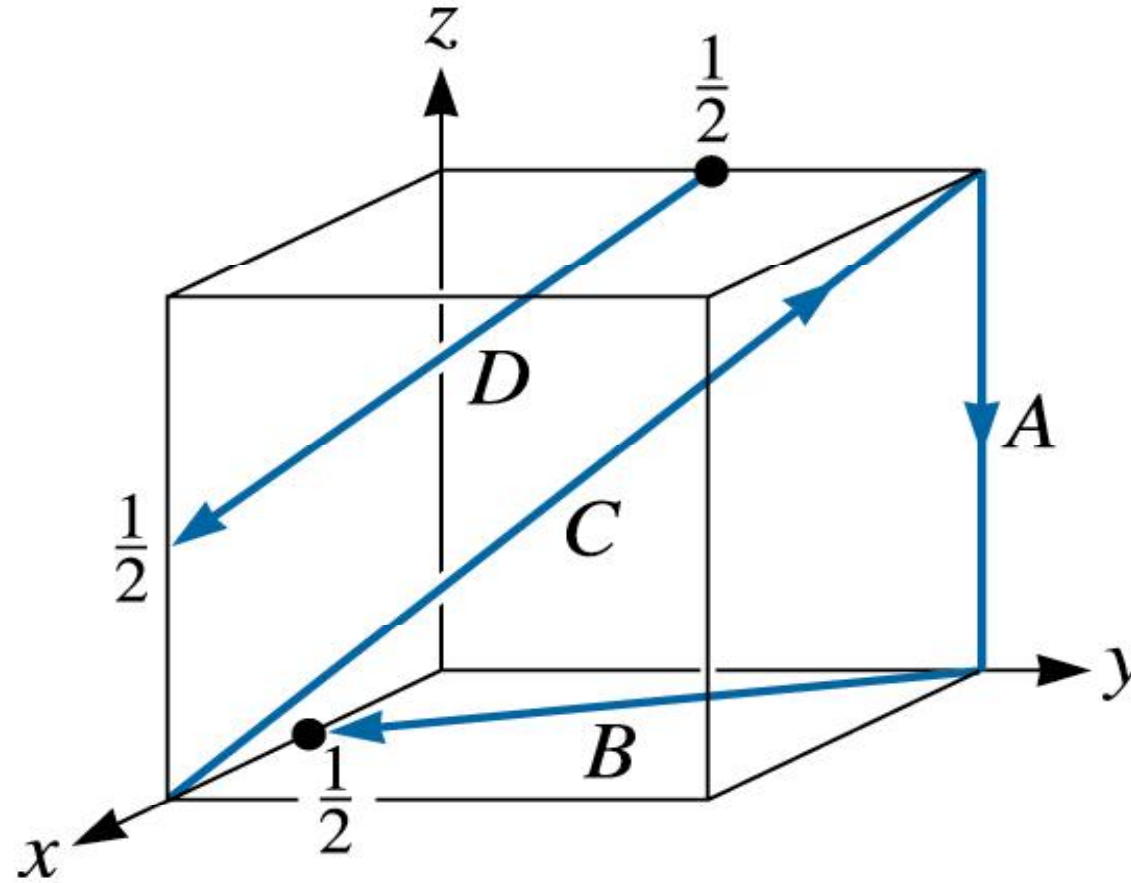




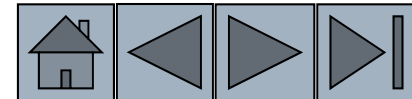
Şekil. Geçirimli elektron mikroskobu ile elde edilen Al-7055 in mikroyapısı.

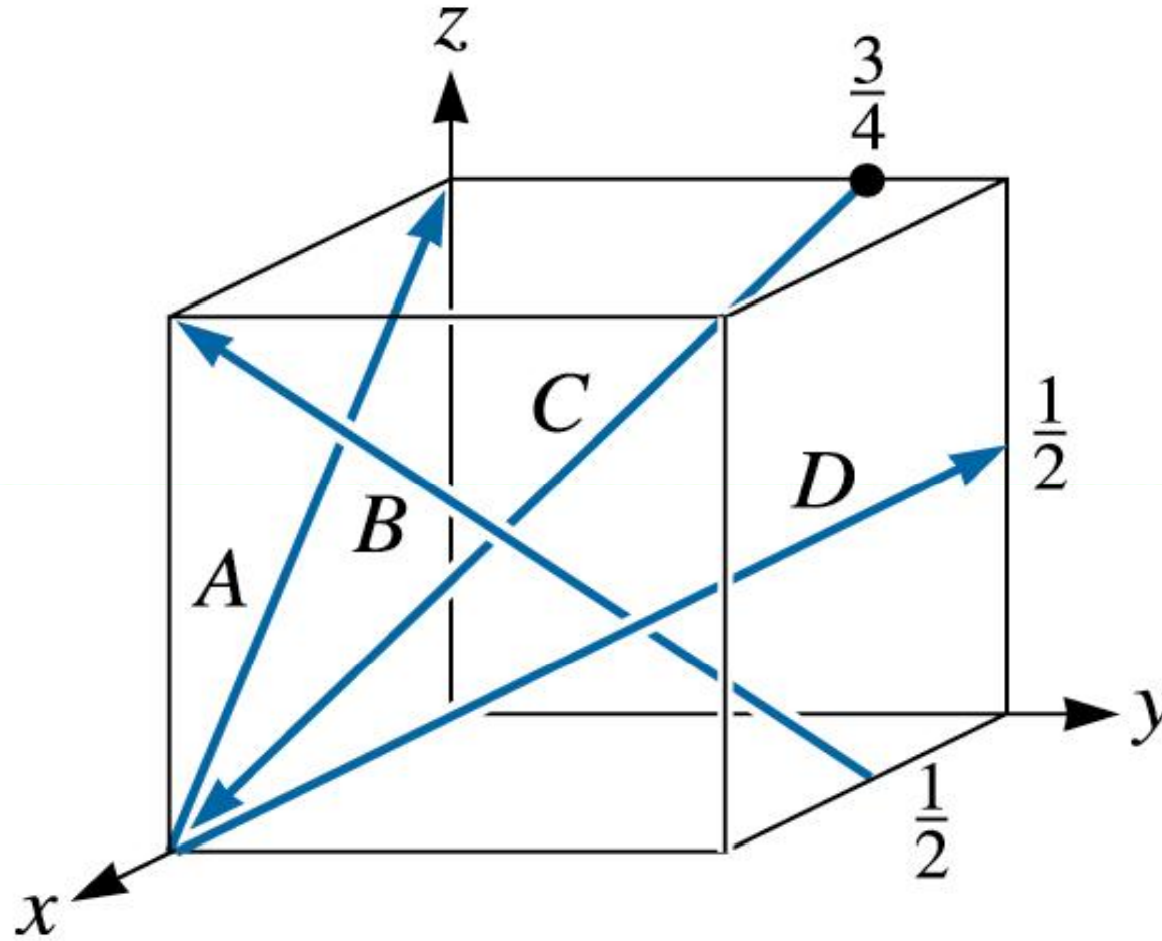
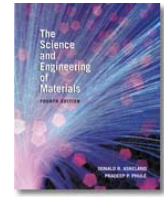


(c) 2003 Brooks/Cole Publishing / Thomson Learning

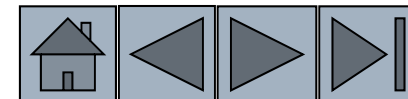


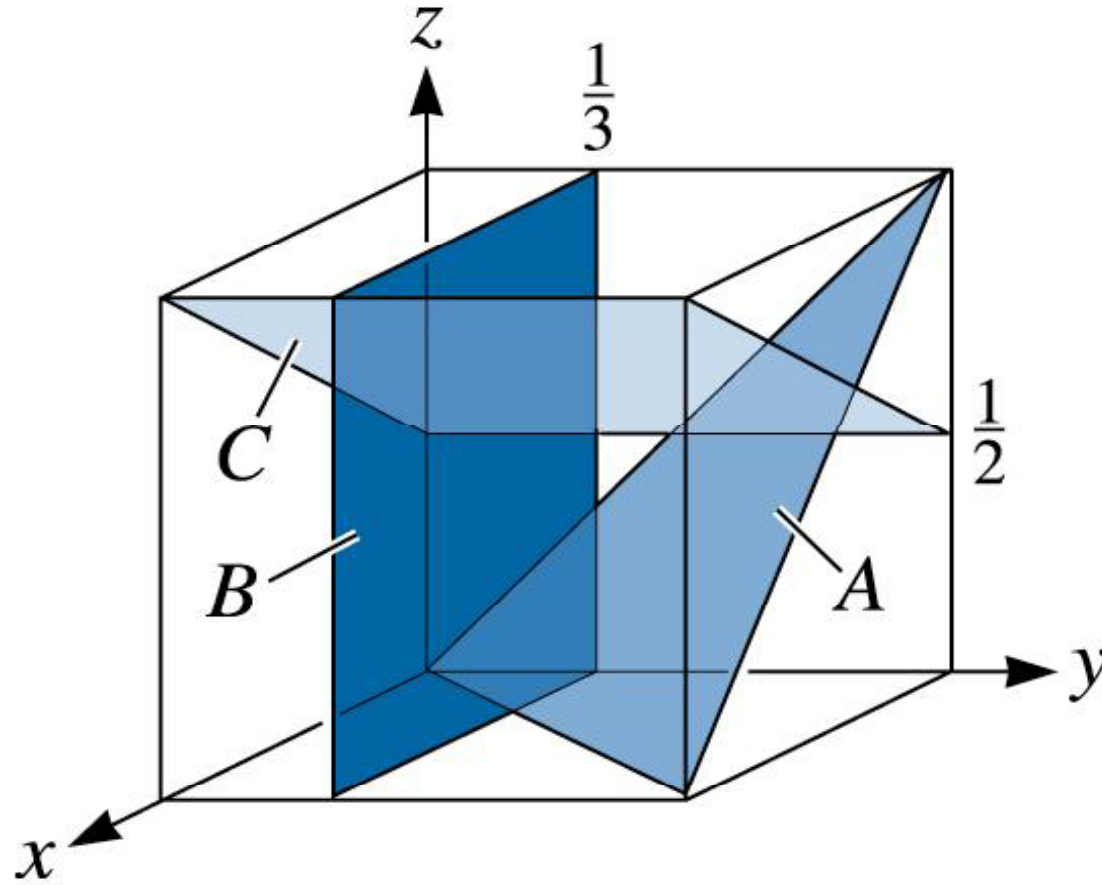
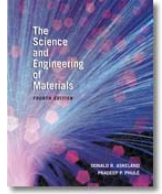
Doğrultuları hesaplayınız.





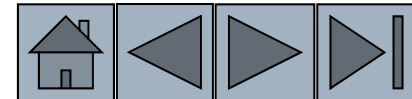
Doğrultuları Miller indislerini gösteriniz.

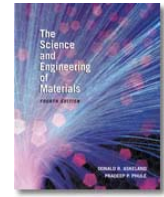




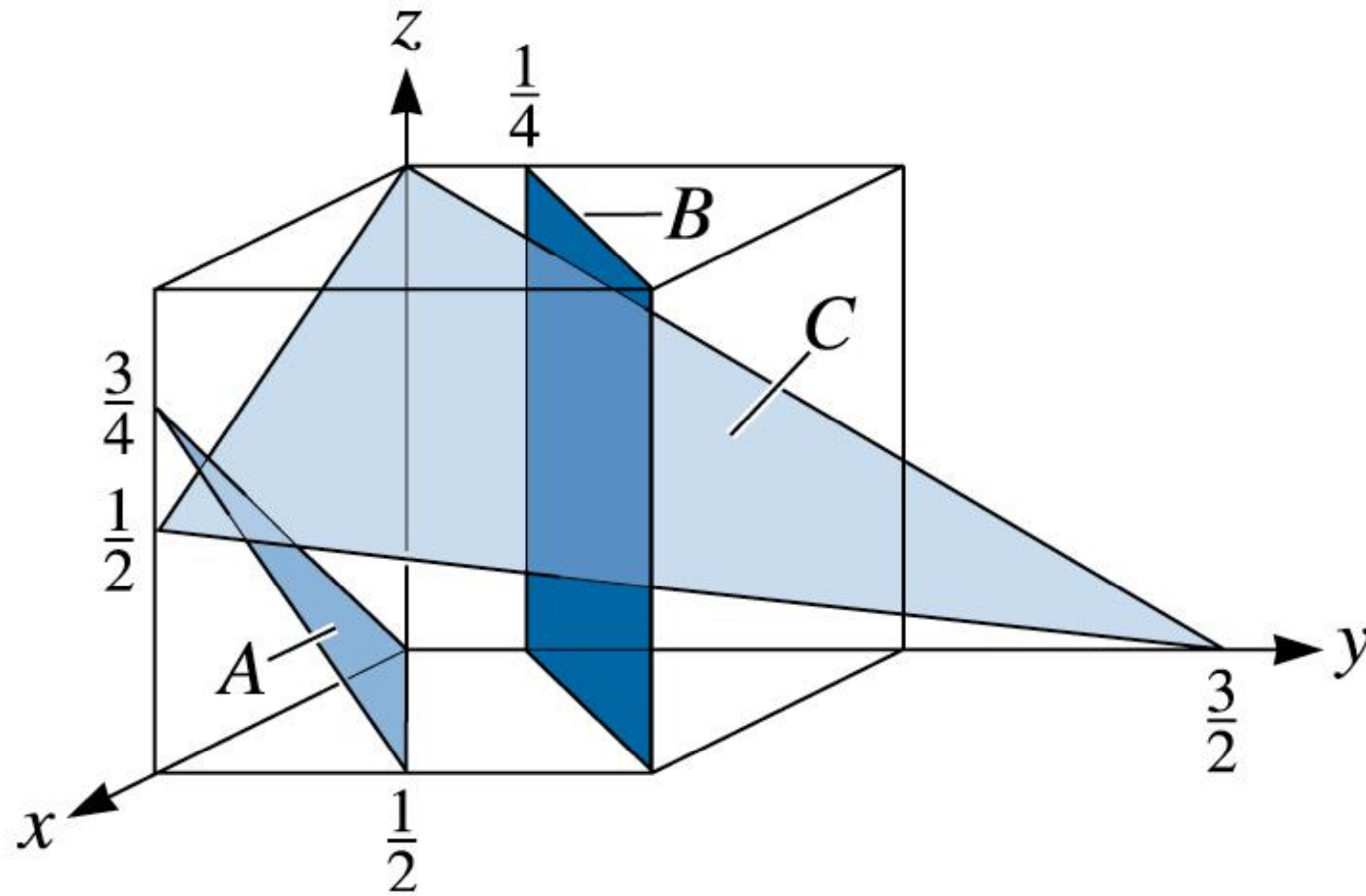
(c) 2003 Brooks/Cole Publishing / Thomson Learning

Birim hücredeki düzlemleri Miller indisleri ile gösteriniz

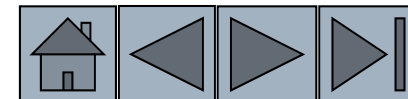


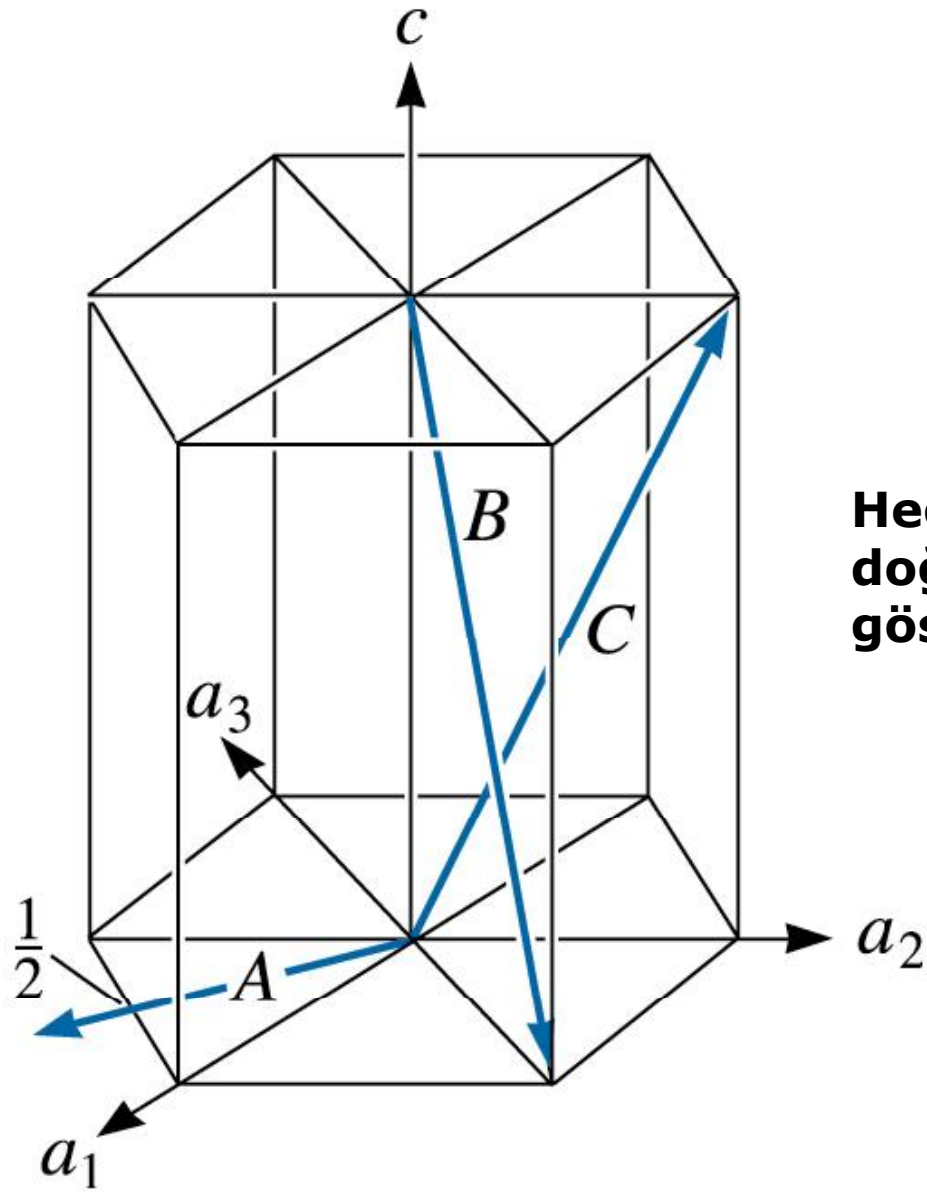
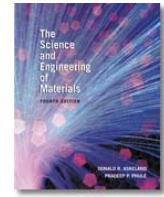


(c) 2003 Brooks/Cole Publishing / Thomson Learning

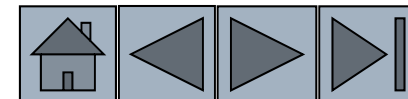


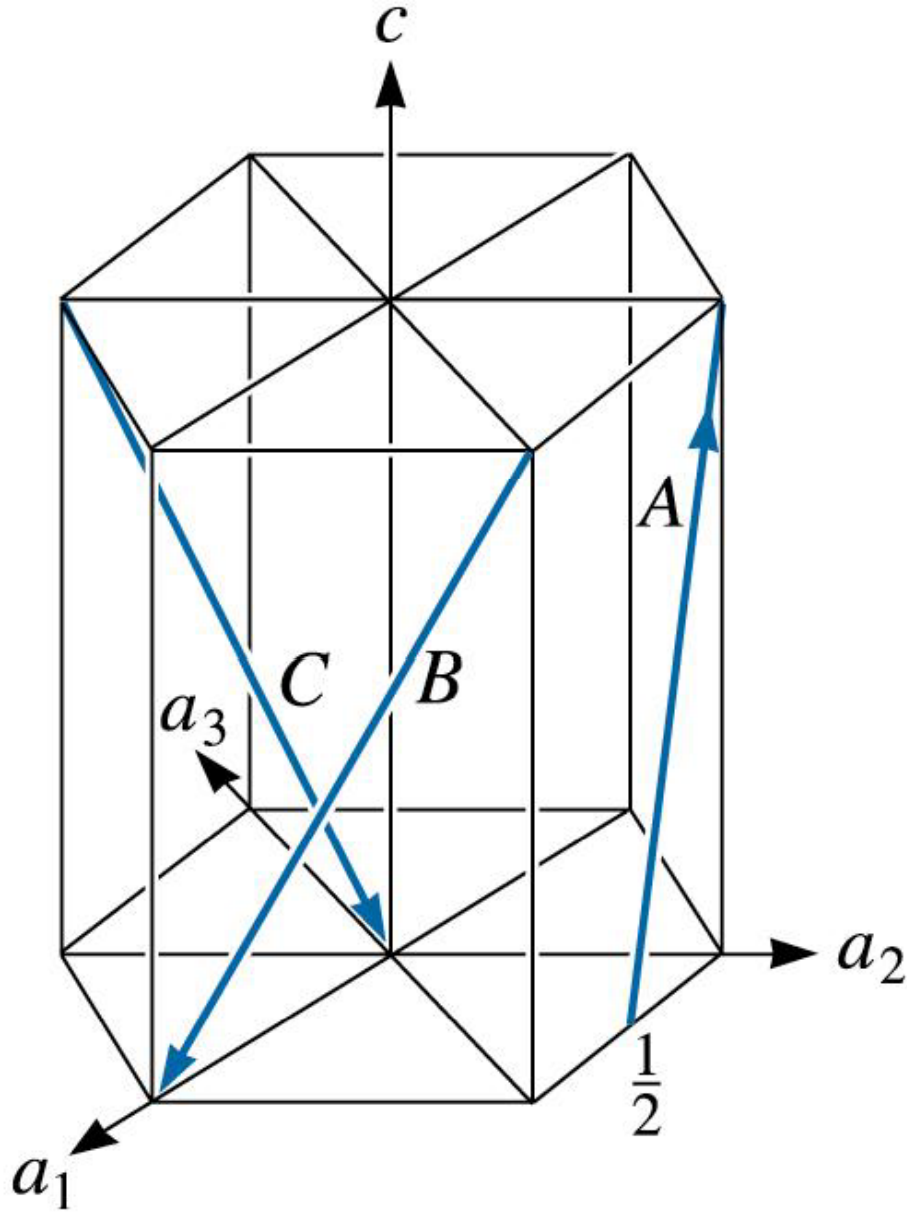
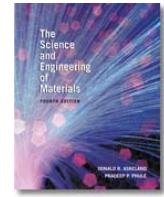
Miller indisleri ile düzlemleri gösteriniz.



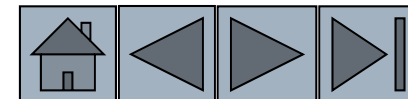


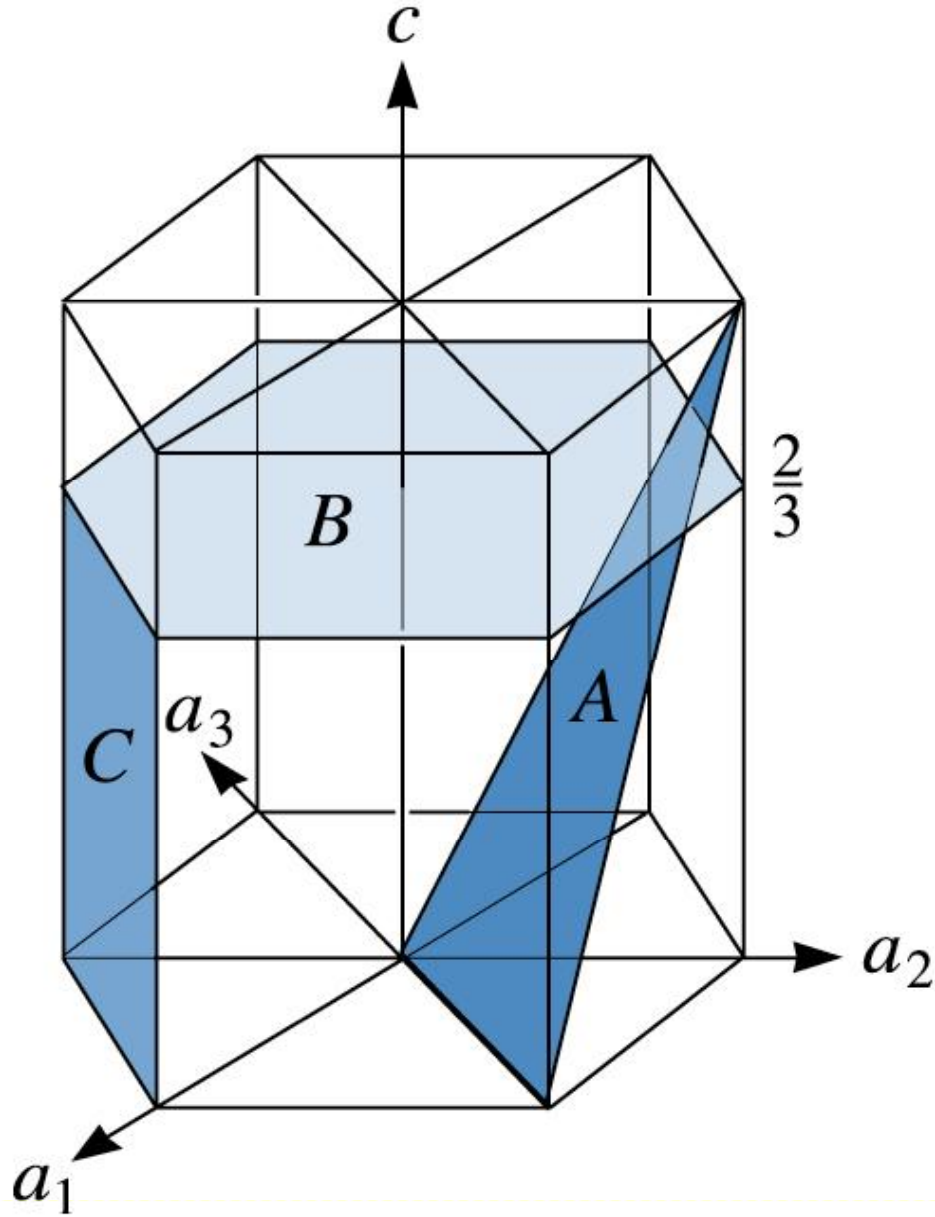
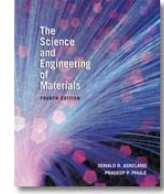
**Hegzagonal latisteki
doğrultuları miller indisleri ile
gösteriniz.**



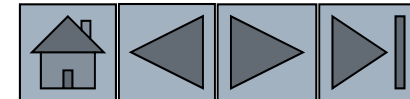


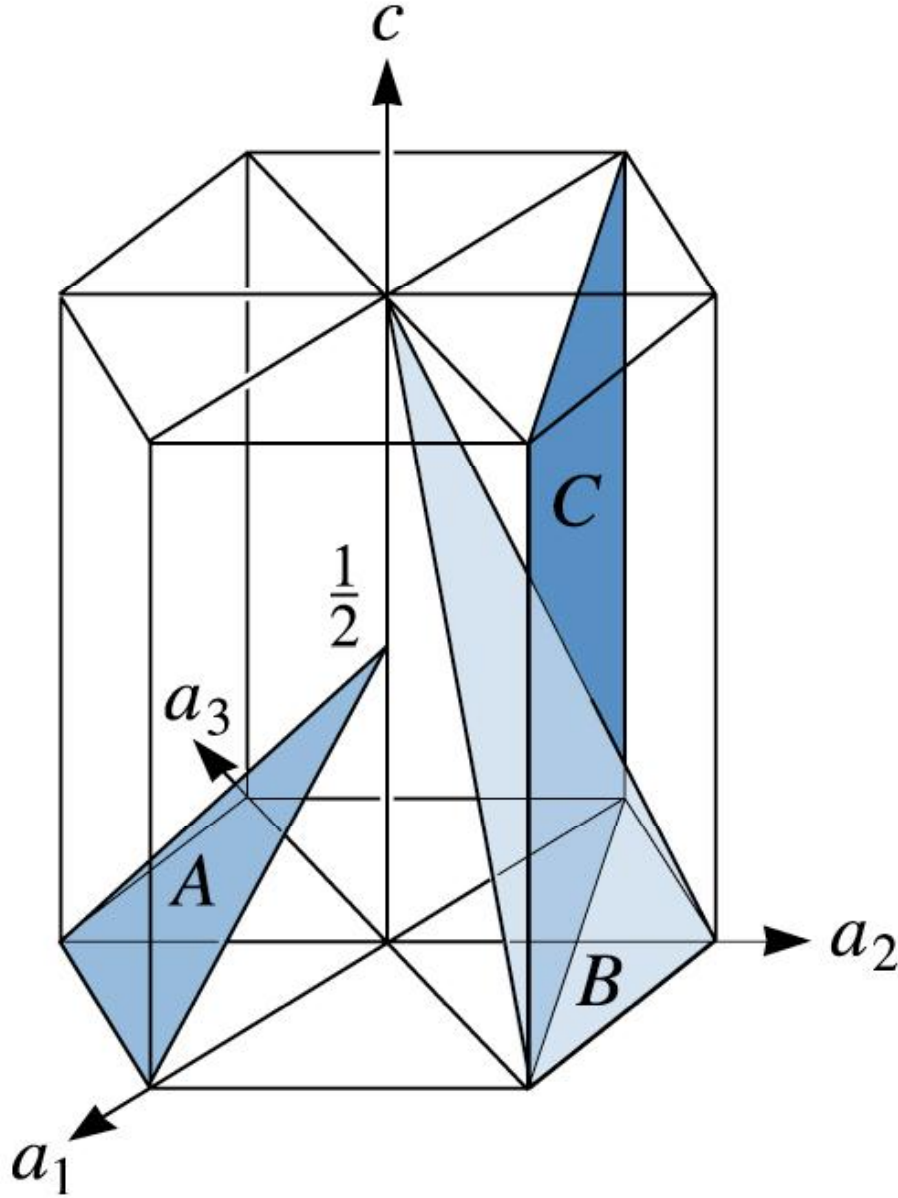
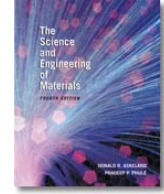
**Hegzagonal latisteki
doğrultuları miller
indisleri ile
gösteriniz.**





Hegzagonal latisteki düzlemleri Miller indisleri ile gösteriniz.





Hegzagonal latisteki düzlemleri Miller indisleri ile gösteriniz.

