

KATILARDA KRİSTAL YAPI

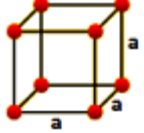
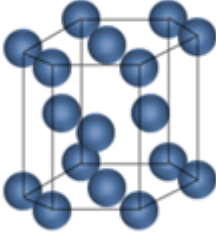
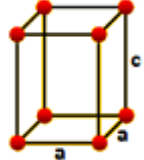
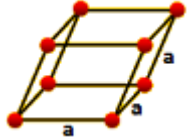
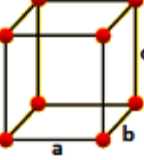
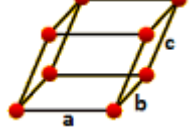
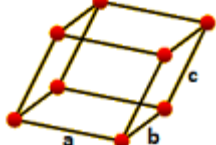
Kristal yapı atomun bir üst seviyesinde incelenen ve atomların katı halde oluşturduğu düzeni ifade eden birim hücre (kafes) geometrik parametreleri ve atom dizilimi ile tarif edilen kavramdır. Tek kristalli, çok kristalli ve kristal dışı yapılar bulunur. Çok sayıda farklı kristal yapı bulunduğundan sınıflandırma yapmak için kafes geometrik parametreleri denilen a , b ve c kenar uzunlukları ile α , β ve γ iç açıları cinsinden ifade edilen yedi farklı kristal sistem tanımlanmıştır.

KRİSTAL SİSTEMLER: Kübik, hekzagonal, tetragonal, rombohedral (trigonal), ortorombik, monoklinik ve triklinik sistemlerdir.

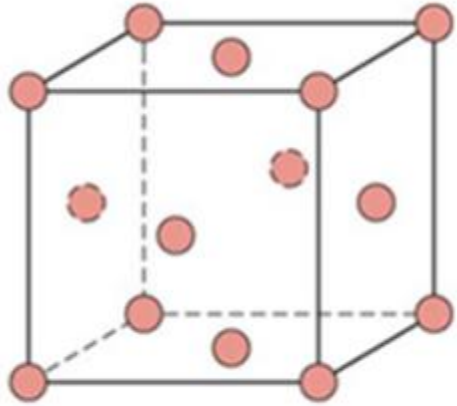
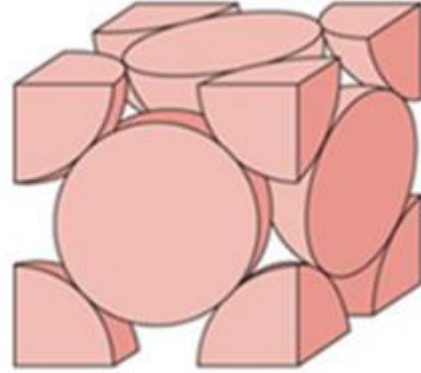
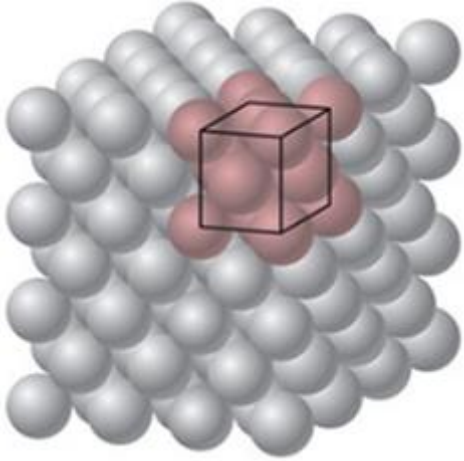
Metallerde görece basit kübik ve hekzagonal kristal yapılar ortaya çıkar. Metallerde yaygın olarak bulunan üç kristal yapı (YMK: yüzey merkezli kübik, HMK: hacim merkezli kübik, SPH: sıkı paket hekzagonal) kristal kafes noktaları, doğrultuları ve düzlemleri açısından ele alınır. Katılama sırasında atomlar en yakın komşu atomlara bağlanırken bütün metaller, çoğu seramikler ve bazı polimerler belirli bir ölçekte tekrar eden düzenli kristal yapı (kafes) oluşturur. Kristal yapılar ifade edilirken atomlar belirli çaplara sahip katı küreler şeklinde düşünülür ve komşu atomlar temas halinde gösterilir. Kristal yapının tekrar eden en küçük yapıtaşına birim hücre denir.

METALLERDE KRİSTAL YAPI TÜRLERİ: Çoğu metal görece basit YMK, HMK ve SPH yapıdadır.

Metal	Kristal Yapı	Atom Yarıçapı [nm]
Alüminyum	YMK	0,1431
Krom	HMK	0,1249
Bakır	YMK	0,1278
Demir (α)	HMK	0,1241
Nikel	YMK	0,1246
Titanyum (α)	SPH	0,1445
Çinko	SPH	0,1332

Kristal Sistem	Eksenel İlişki	Açısal İlişki	Birim Hücre Geometrisi
Kübik	$a = b = c$	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	
Hekzagonal	$a = b \neq c$	$\alpha = \beta = 90^\circ, \gamma = 120^\circ$	
Tetragonal	$a = b \neq c$	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	
Rombohedral (Trigonal)	$a = b = c$	$\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$	
Ortorombik	$a \neq b \neq c$	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	
Monoklinik	$a \neq b \neq c$	$\alpha = \gamma = 90^\circ \neq \beta$	
Triklinik	$a \neq b \neq c$	$\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$	

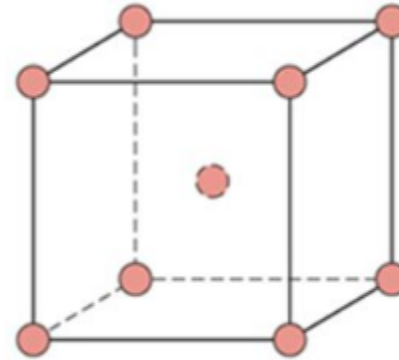
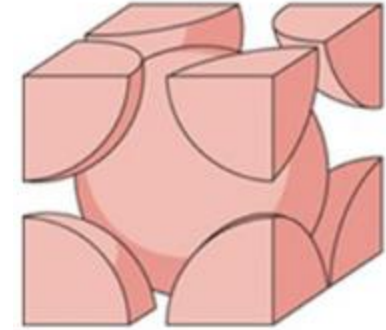
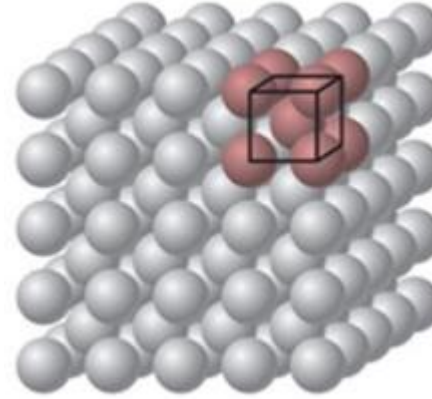
YMK: Bütün köşelerinde ve yüzey merkezlerinde birer atom bulunan kübik birim hücreye sahiptir.



İlk şekilde YMK kristal yapılı üç boyutlu atom yerleşiminde birim hücre gösterilmiştir. İkinci şekilde birim hücrede bulunan atomlar görülmektedir. Üçüncü şekilde ise birim hücrenin açık görünmesi için yalnızca atom merkezlerinin konumu gösterilmiştir. Burada küpün kenar uzunluğu (a) ile atom yarıçapı (R) arasında $a = 2R\sqrt{2}$ şeklinde bir ilişki bulunur.

YMK kristal yapıda köşe atomları 8, yüzey merkezi atomları ise 2 hücre tarafından paylaşılır. Bu nedenle bir hücrede 4 atom bulunur. Koordinasyon sayısı (KS), her atom için en yakın komşuluğunda bulunan (temasta olunan) atom sayısı olup metallerde aynıdır. YMK için bu değer 12'dir. Atomik dolgu faktörü (ADF) ise birim hücre içindeki atom hacminin birim hücre hacmine oranı olup YMK için 0,74 değerini alır.

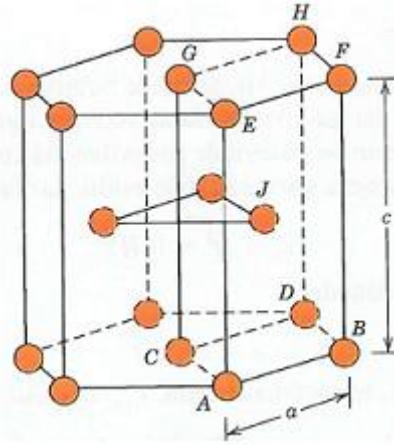
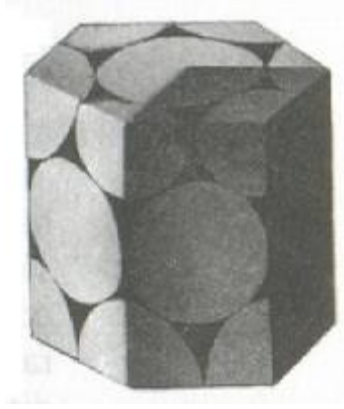
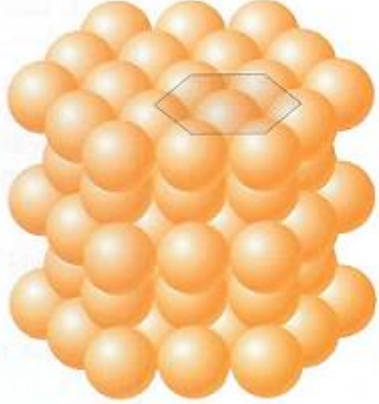
HMK: Bütün köşelerinde ve hacim merkezinde birer atom bulunan kübik birim hücreye sahiptir.



İlk şekilde HMK kristal yapılı üç boyutlu atom yerleşiminde birim hücre gösterilmiştir. İkinci şekilde birim hücrede bulunan atomlar görülmektedir. Üçüncü şekilde ise birim hücrenin açık görünmesi için yalnızca atom merkezlerinin konumu gösterilmiştir. Burada küpün kenar uzunluğu (a) ile atom yarıçapı (R) arasında $a = \frac{4R}{\sqrt{3}}$ şeklinde bir ilişki bulunur.

HMK kristal yapıda köşe atomları 8 hücre tarafından paylaşılırken merkezde 1 atom bulunur. Bu nedenle bir hücrede 2 atom bulunur. Koordinasyon sayısı HMK için 8'dir. Atomik dolgu faktörü ise HMK için 0,68 değerini alır.

SPH: Bütün köşelerinde, alt/üst yüzeylerinde ve yan yüzeylerinin içinde birer atom bulunan eşkenar altıgen prizma birim hücreye sahiptir. Üç tane hegzagonal (ikinci şekilde karartılmış olarak, üçüncü şekilde ABCDEFGH ile gösterilen) sistemin yan yüzeylerinin örtüştürülmesiyle elde edilir.



İlk şekilde SPH kristal yapılı üç boyutlu atom yerleşiminde birim hücre gösterilmiştir. İkinci şekilde birim hücrede bulunan atomlar görülmektedir. Üçüncü şekilde ise birim hücrenin açık görünmesi için yalnızca atom merkezlerinin konumu gösterilmiştir. Burada küpün kısa kenar uzunluğu (a) ile uzun kenar uzunluğu (c) arasında 1,633 şeklinde bir ilişki bulunur.

SPH kristal yapıda köşe atomları 6 hücre tarafından, alt/üst yüzeylerin merkezindeki atomlar ise 2 hücre tarafından paylaşılırken ortada 3 atom bulunur. Bu nedenle bir hücrede 6 atom bulunur. Koordinasyon sayısı SPH için 12'dir. Atomik dolgu faktörü ise SPH için 0,74 değerini alır.

SORU: YMK birim hücre hacmini atom yarıçapı (R) cinsinden hesaplayınız.

Birim hücrenin bir yüzeyinin köşegeni $4R$ uzunluğunda ve kübik birim hücrenin kenar uzunluğu a ise,

$$a^2 + a^2 = (4R)^2 \text{ yazılabilir. Bu durumda,}$$

$$a = 2\sqrt{2}R \text{ olur. Hücre hacmi ise,}$$

$$V = a^3 = 16\sqrt{2}R^3 \text{ olur.}$$

SORU: HMK birim hücre hacmini atom yarıçapı (R) cinsinden hesaplayınız.

SORU: YMK yapı için atomsal dolgu faktörünün 0,74 olduğunu gösteriniz.

ADF birim hücredeki atomların hacminin birim hücre hacmine oranıdır. YMK birim hücrede 4 atom bulunduğundan atom hacmi,

$$4 \times \frac{4}{3} \pi R^3 = \frac{16}{3} \pi R^3 \text{ olur. Hücre hacmi ise,}$$

$$16\sqrt{2}R^3 \text{ olduğundan,}$$

$$ADF = \frac{\frac{16}{3} \pi R^3}{16\sqrt{2}R^3} = 0,74 \text{ elde edilir.}$$

SORU: HMK yapı için atomsal dolgu faktörünün 0,68 olduğunu gösteriniz.

SORU: Atom yarıçapı 0,128 nm, kristal yapısı YMK ve atom ağırlığı 63,5 gr/mol olan bakırın teorik yoğunluğunu hesaplayarak deneysel (gerçek) yoğunluğu ile karşılaştırınız.

Teorik yoğunluk,

$$\rho = \frac{nA}{VN} \text{ bağıntısı ile hesaplanabilir. Burada;}$$

n , birim hücredeki atom sayısı

A , atom ağırlığı

V , birim hücre hacmi

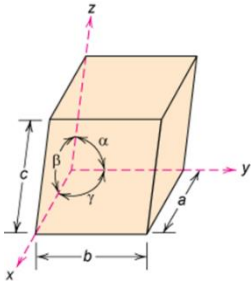
N , Avogadro sayısı ($6,023 \times 10^{23}$ atom/mol)'dır. Buna göre teorik yoğunluk,

$$\rho = \frac{4 \times 63,5}{16\sqrt{2}(1,28 \times 10^{-8})^3 \times 6,023 \times 10^{23}} = 8,89 \text{ gr/cm}^3 \text{ olup } 8,94 \text{ gr/cm}^3 \text{ olan gerçek}$$

yoğunluğuna çok yakındır.

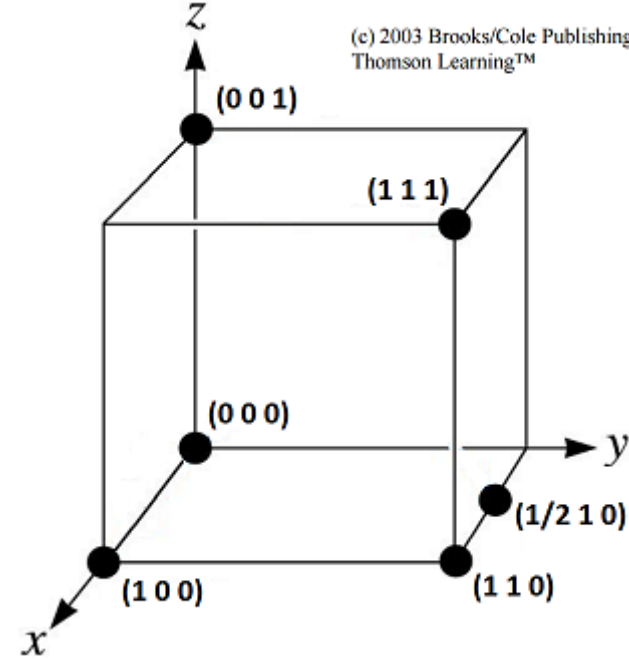
POLİMORFİZM VE ALLOTROPİ: Bazı malzemeler birden fazla kristal yapıda bulunabilirler. Sıcaklığa ve dış basınca bağlı olan bu özelliğe polimorfizm denir. Element halindeki katılar için bu özelliğe allotropi denir. Örneğin, oda sıcaklığında HMK yapıda olan saf demir 912 °C'de YMK yapıya dönüşürken başta yoğunluk olmak üzere fiziksel özellikleri değişir.

KRİSTAL KAFES PARAMETRELERİ: Kristal malzemeler incelenirken birim hücre içinde belirli bir nokta, doğrultu veya düzlem üzerinde analiz yapmak gerekebilir. Bunun için bir koordinat sistemi kullanılarak üç rakam veya indisten oluşan tanımlama notasyonu kullanılır.



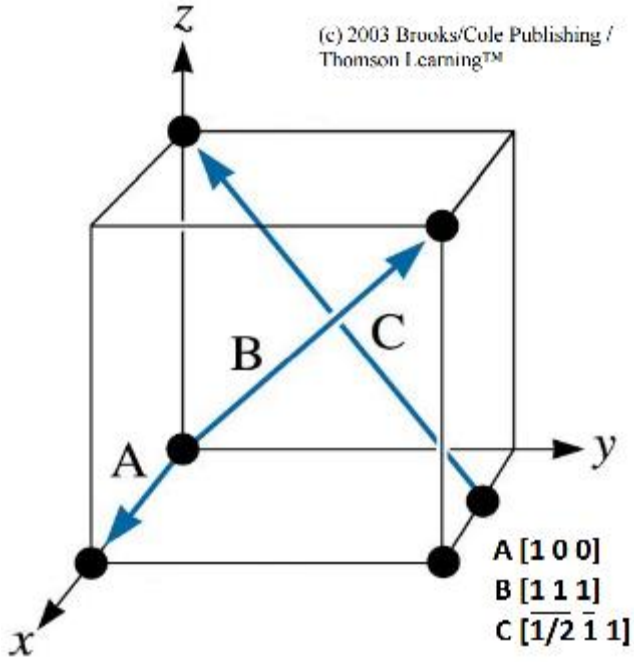
Burada; a , x eksenindeki birim hücre boyutunu; b , y eksenindeki birim hücre boyutunu; c , z eksenindeki birim hücre boyutunu; α , $y-z$ eksenleri arasındaki birim hücre açısını; β , $x-z$ eksenleri arasındaki birim hücre açısını; γ , $x-y$ eksenleri arasındaki birim hücre açısını ifade eder.

KRİSTAL KAFES NOKTALARI: Birim hücre içinde bulunan herhangi bir P noktasının yeri $P (q r s)$ şeklinde ifade edilir. Burada; q , r ve s sırasıyla x , y ve z eksenleri üzerinde a , b ve c ile orantılı uzunluklar olup bire eşit veya birden küçük değerler alırlar.



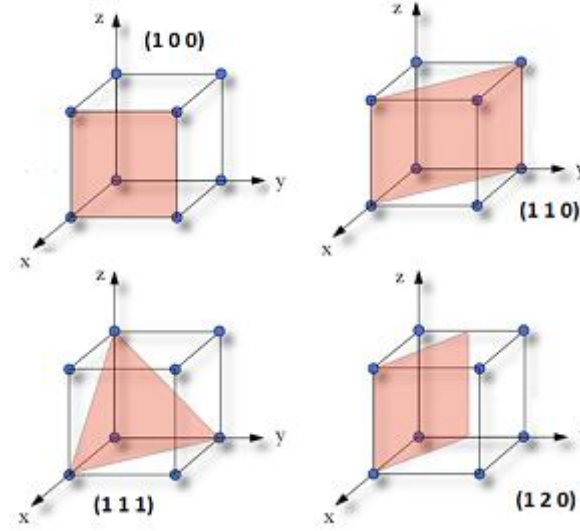
KRİSTAL KAFES DOĞRULTULARI: Bir kristal kafes doğrultusu bir koordinat sisteminin orijininde bulunan iki nokta arasında çizilen bir vektör ile tanımlanır ve bu vektör $[u v w]$ şeklinde gösterilir. Burada; u , v ve w sırasıyla vektörün x , y ve z eksenleri üzerindeki indirgenmiş izdüşümleri olup Miller indisleri olarak adlandırılır. Vektör, doğrultusu değiştirilmeden birim hücre içinde taşınabilir. İndislerin tamamı uygun bir sayı ile çarpılarak tamsayı olarak ifade edilirler. Negatif işaretli indisler üstlerinde bir çizgi ile gösterilir (Örneğin, $[1 \bar{2} 0]$). Kristal yapılarda Miller indisleri farklı (paralel olmayan) bazı doğrultularda atom dizilişleri veya atomlar arası mesafe aynı olup eşdeğerdirler ve doğrultu ailesi olarak adlandırılırlar. Örneğin; kübik kristallerde $[1 0 0]$, $[\bar{1} 0 0]$, $[0 1 0]$, $[0 \bar{1} 0]$, $[0 0 1]$ ve $[0 0 \bar{1}]$ doğrultuları eşdeğer olup $\langle 1 0 0 \rangle$ doğrultu ailesini oluştururlar.

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

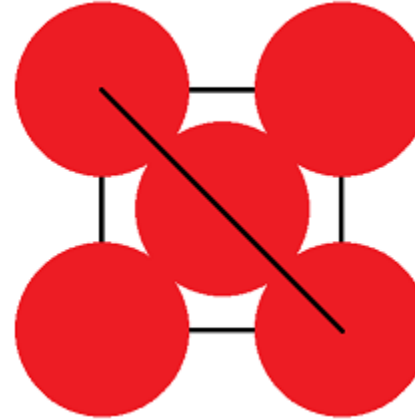


KRİSTAL KAFES DÜZLEMLERİ: Kristal kafes düzlemleri üç Miller indisi ile $(h k l)$ şeklinde belirtilir. Burada; h , k ve l sırasıyla düzlemin x , y ve z eksenlerine ait indisleridir. Düzlem orijinden geçiyorsa paralel olarak taşınır. Düzlem en azından bir eksenini keser. Kesmediği eksenler varsa ilgili eksenlere ait indisler 0 olur. Düzlemin eksenleri kestiği noktaların orijine uzaklıkları a , b ve c kafes parametreleri cinsinden belirlenerek çarpmaya göre tersleri alınır. İndislerin tamamı uygun bir sayı ile çarpılarak tamsayı olarak ifade edilirler. Negatif işaretli indisler üstlerinde bir çizgi ile gösterilir. Birbirine paralel olan kristal kafes düzlemleri eşdeğer olup aynı indislerle gösterilir. Aynı atomsal dizilişe sahip eşdeğer düzlemler düzlem ailesi olarak adlandırılır ve $\{h k l\}$ şeklinde gösterilir. Kübik sistemde indislerin irası ve işaretinden bağımsız olarak aynı indislere sahip düzlemler eşdeğerdir. Örnek olarak $(2 \bar{4} 1)$ ve $(4 2 \bar{1})$ düzlemleri eşdeğerdir.

Kübik kristallerde aynı indisli doğrultu ve düzlemler birbirlerine diktir.



DOĞRUSAL VE DÜZLEMSEL ATOM YOĞUNLUKLARI: Doğrusal atom yoğunlukları aynı olan doğrultular ve düzlemsel atom yoğunlukları aynı düzlemler eşdeğerdir. Doğrusal atom yoğunluğu, merkezleri doğrultu vektörünün üzerinde bulunan atom sayısının doğrultu vektörü uzunluğuna; düzlemsel atom yoğunluğu ise merkezleri düzlem üzerinde bulunan atom sayısının düzlem alanına oranı şeklinde ifade edilir.



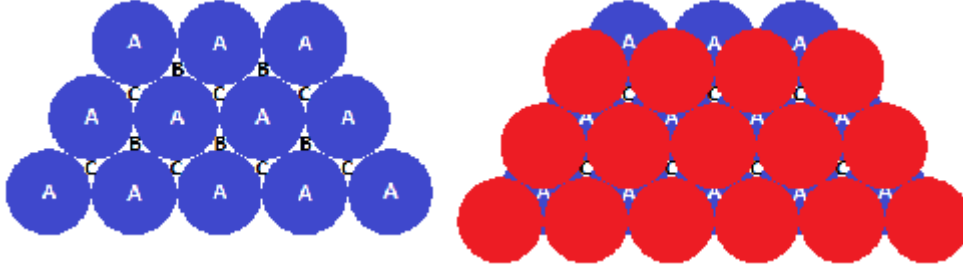
Buna göre yandaki YMK birim hücrenin [1 1 0] doğrultusu ve bir yüzey düzlemi üzerindeki (örneğin (0 0 1)) atom yoğunlukları:

$$\text{Doğ.}AY_{110} = \frac{\frac{1}{2} + 1 + \frac{1}{2}}{4R} = \frac{1}{2R} [m^{-1}]$$

$$\text{Düz.}AY_{001} = \frac{4 * \frac{1}{4} + 1}{(2\sqrt{2}R)^2} = \frac{1}{4R^2} [m^{-2}]$$

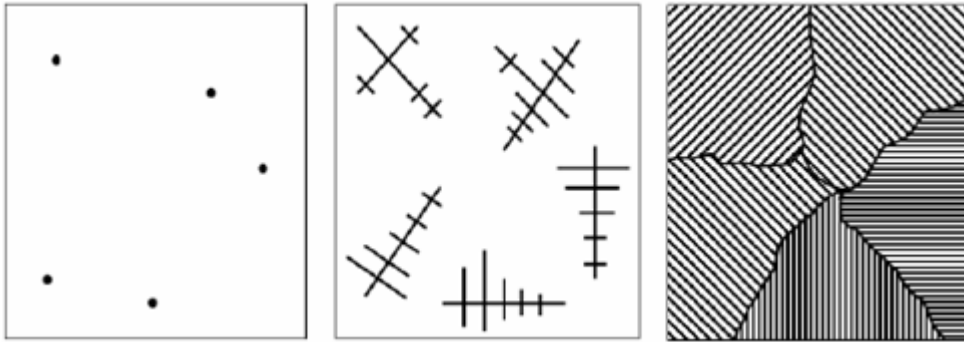
Doğrusal ve düzlemsel atom yoğunlukları metallerin plastik olarak şekil değiştirmesini sağlayan kayma mekanizması açısından önemlidir. Kayma, en yoğun düzlemlerde ve bu düzlemler üzerindeki en yoğun doğrultularda gerçekleşir.

ADF, YMK ve SPH metalik kristallerde 0,74 iken HMK metalik kristallerde 0,68 değerini alır. Bu nedenle, YMK ve SPH birim hücreye sahip yapılar sıkı paket kristaller olarak adlandırılır ve sıkı paket düzlemlerin üst üste farklı şekilde yerleştirilmesi ile elde edilirler.

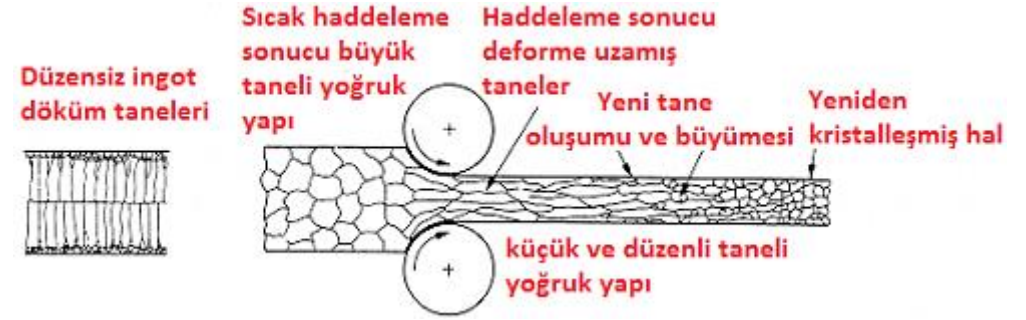


SPH yapılarında düzlemler ABABAB... (veya ACACAC...) şeklinde iken YMK yapılarında ABCABC... şeklindedir.

KATILARDA KRİSTAL YAPI OLUŞUMU: Sıvı eriyiklerde katılaşmanın başlangıcında çeşitli bölgelerde küçük kristaller çekirdeklenir. Farklı yönlere sahip bu taneciklere katılan diğer atomların eklenmesiyle taneler büyür ve birbirine temas ederek tane sınırlarını oluştururlar. Kristal yapı bir katıda tekrar eden atom düzeni numunenin tamamı boyunca aynı yönde kesintisiz devam ediyorsa tek kristal yapı meydana gelir. Tek kristaller doğal veya yapay olabilir. Tek kristaller mikro devrelerde kullanılan yarıiletken teknoloji gibi modern uygulamalar için önemli olup geliştirilirler.



Kristal yapılarda birim hücrede farklı doğrultularda ve düzlemlerde atom yoğunluklarının farklı olması malzeme özelliklerinin yöne bağlı olmasına neden olur. Bu özelliğe anizotropi denir. Kristal yapının simetrisi azaldıkça anizotropi artar. Örneğin demirin elastisite modülü (E); $[1\ 0\ 0]$ doğrultusunda 125 GPa, $[1\ 1\ 0]$ doğrultusunda 210,5 GPa ve $[1\ 1\ 1]$ doğrultusunda 272,7 GPa değerini alır. Özellikleri yöne bağlı olmayan malzemelere izotrop denir. Her ne kadar mikro ölçekte (birim hücrelerde, farklı yönlere sahip tanelerde) anizotropi olsa da, birçok taneden meydana gelen makroyapı genellikle ortalama özellikler gösteren izotropik yapıda olur. Ancak haddeleme, ısıl işlem, yönlendirilmiş katılaşma, fiber kompozit üretimi gibi imalat işlemleri neticesinde anizotropik yapılar meydana gelebilir.



Bazı malzemeler katılaşırken düzenli bir atom dizilişi oluşturamadıklarından kristal dışı (amorf) malzeme olarak adlandırılırlar. Katılaşmada soğuma hızının yüksek olması da kristal olmayan amorf yapı oluşumuna neden olabilir. Metaller kristal yapıda katılaşırken, seramikler amorf ya da kristal, polimerler amorf ya da yarı kristal yapı oluştururlar.

Kristal yapıların incelenmesinde X-ışını kırınımı (X-RD: X-Ray Diffraction) yöntemi çok kullanışlıdır. X ışınlarının bir yapıya gönderilerek atomlara çarpıtılması ile atomlardan saçılan ikincil dalgaların girişimi neticesinde dalgalar farklı açılarda birbirini yok eder veya kuvvetlendirir. Bu şekilde malzemelerin tanımlanmaları, kafes yapılarının ve parametrelerinin belirlenmesi mümkün olur (Bragg yansıma denklemi: $n\lambda = 2d_{hkl} \sin \theta$).