

Atomsal Yapı ve Atomlararası Bağ

Katılarda atomlararası bağların incelenmesinin en önemli nedenlerinden birisi, atomlararası bağ türünün bir malzemenin özelliklerini anlamamıza yardımcı olmasıdır.

✓ Örneğin; karbon

- hem grafit hem de elmas şeklinde bulunabilir.
- grafit, nispeten yumuşak ve yağlayıcı özelliğe sahip
- elmas, bilinen en sert malzeme

Atomsal Yapı ve Atomlararası Bağ

Malzemelerin işlem/yapı/özellik/performans ilişkilerini tanımlamada atomsal yapı ve atomlararası bağların önemini aşağıdaki örneklerle açıklayabiliriz.

- Silisyumun elektron dizilişi, elektron bant yapısı üzerinde önemli etkiye sahip birincil bağların oluşmasını sağlar.
- Polimer elyafı(fiberleri) oluşturan elementlerin(C, H) elektron dizilişi, polimer moleküllerin yapılarıyla yakından ilişkili olan birincil bağ tipini doğrudan etkilemektedir.

Atomsal Yapı ve Atomlararası Bağ

Katı malzemelerin bazı önemli özellikleri, atomların geometrik düzenine ve aynı zamanda atomların veya moleküllerin bileşenleri arasındaki etkileşime bağlıdır.

- atomlardaki elektron dizilişleri
- periyodik tablo
- atomları bir arada tutan birincil ve ikincil bağ tipleri

Atom Yapısı

- Malzemelerin temel yapı birimidir,
- Atomlar başlıca üç temel parçacıktan oluşur :
 - protonlar
 - nötronlar
 - elektronlar

** Her atom, proton ve nötronları barındıran bir çekirdek etrafında hareket halindeki elektronlardan oluşmaktadır.

Atom Yapısı

- Çekirdek çapı= 10^{-14} m
- Protonun kütlesi: 1.673×10^{-24} g
Birim yükü (elektrik yükü)= $+1.602 \times 10^{-19}$ C
- Nötronun kütlesi: 1.675×10^{-24} g
Elektriksel olarak nötr
- Elektronun kütlesi: 9.109×10^{-28} g (protonun $1/1836$ ' si)
Birim yükü (elektrik yükü)=- 1.602×10^{-19} C

Atom Yapısı

Dış yörüngedeki elektronlar;

- ✓ Elektrik
- ✓ Mekanik
- ✓ Kimyasal
- ✓ Isıl

Özellikleri belirler.

Atom numarası ($^Z X$) ve Atom kütlesi (kütle numarası, $_A X$)

- Her bir kimyasal element, atom çekirdeğindeki proton sayıları veya atom numarası (Z) ile karakterize edilirler.
- Bir **atomun kütlesi (A)**, çekirdekteki proton ve nötronların kütlelerinin toplamına eşittir.
- Bir atomun bağlı atom kütlesi o elementin $6,02 \times 10^{23}$ atomunun gram cinsinden kütlesine eşittir.

Atom Sayıları (Atom Numarası, $^Z X$)

[illegible]

Atomlarda Elektronlar

Atom modelleri :

19. Yüzyılın ikinci yarısında, katılardaki elektronlarla ilgili birçok olayın klasik mekaniğe göre açıklanamayacağı anlaşılmıştır.

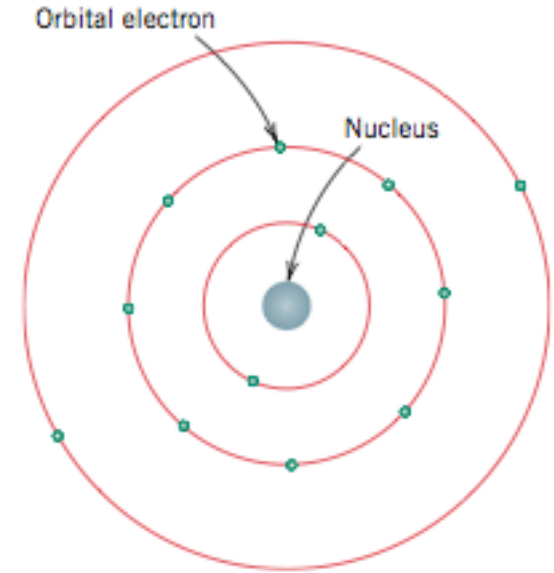
Daha sonra **kuantum mekaniği** olarak bilinen, atom ve atom altı sistemlerini kontrol eden bir prensip geliştirilmiştir.

Atomlarda ve kristal yapıya sahip katılardaki elektronların davranışının anlaşılabilmesi için kuantum mekaniğine ait kavramların bilinmesi gerekmektedir.

Atom Modelleri

Bohr Atom modeli :

Kuantum mekaniğinin ilk olarak ortaya koyduğu olgu basitleştirilmiş Bohr atom modelidir, burada elektronların atom çekirdeği etrafında farklı yörüngelerde döndükleri varsayılmakta ve bir elektronun konumu bulunduğu yörüngeye göre tanımlanmaktadır.



Atom Modelleri

Dalga-mekanik model :

Elektronlar ile ilgili bazı olayları açıklamada yetersiz kalan Bohr modelinin bazı önemli sınırlamalara sahip olduğu anlaşılmıştır. Bunun için elektronun hem dalga hem de parçacık özelliği gösterdiği dikkate alınarak, dalga-mekanik modeli ortaya atılmıştır.

Bu modelle, elektronun konumu, çekirdek etrafında değişik bölgelerde bulunma ihtimalinden daha çok, belirli bir yörüngede hareket eden bir parçacık olarak düşünülmüştür.

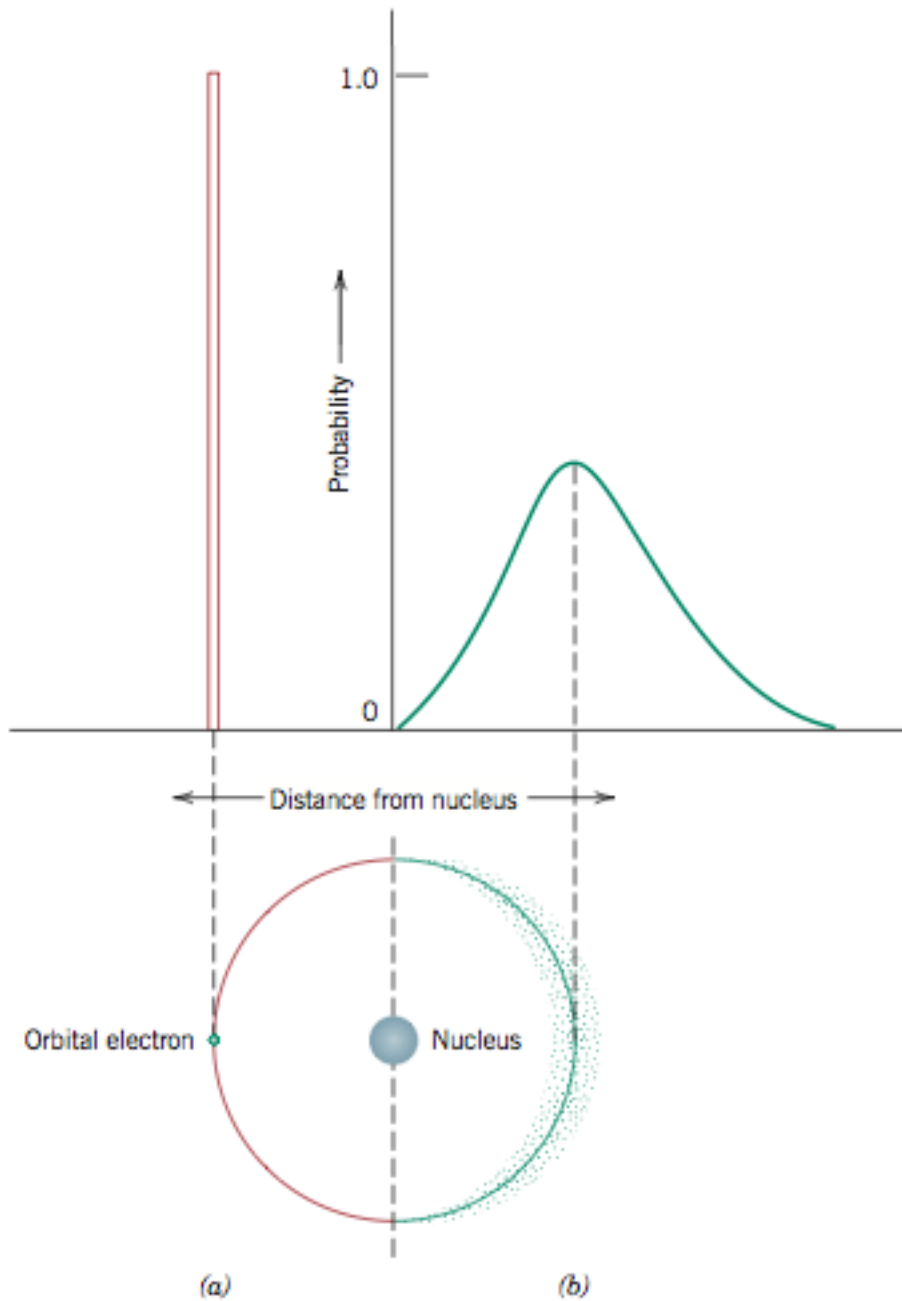
Bu modelle, bir elektronun konumu bir dağılıma ait olasılık veya elektron bulutu ile tanımlanmaktadır.

Bohr / Dalga mekanik

Dalga mekaniği modeline göre, bir atomda her bir elektron, kuantum sayısı olarak adlandırılan dört parametre ile belirtilir. Bir elektronun boyutu, şekli ve olasılık yoğunluğu dağılımının uzaydaki konumu bu kuantum sayılarının üçü tarafından belirtilir.

Bohr enerji seviyeleri, elektron alt yörüngelerini ayrı tutarken kuantum sayıları, her bir alt yörüngedeki enerji seviyelerinin sayısını belirtir.

Elektron dağılımına göre atom modellerinin karşılaştırılması (a) Bohr ve (b)dalgamekanik



Atomların Kuantum Sayıları

- Elektronların çekirdekleri etrafında hareketlerinin ve enerjilerinin sadece birincil kuantum sayısıyla değil dört ayrı kuantum sayısıyla tanımlanmaktadır,
 - 1) birincil kuantum sayısı n ,
 - 2) ikincil kuantum sayısı ℓ ,
 - 3) mıknatısal kuantum sayısı m_ℓ ,
 - 4) elektron dönüş kuantum sayısı m_s ,

Atomların Kuantum Sayıları

Table 2.1 The Number of Available Electron States in Some of the Electron Shells and Subshells

Principal Quantum Number n	Shell Designation	Subshells	Number of States	Number of Electrons	
				Per Subshell	Per Shell
1	K	s	1	2	2
2	L	s	1	2	8
		p	3	6	
3	M	s	1	2	18
		p	3	6	
		d	5	10	
4	N	s	1	2	32
		p	3	6	
		d	5	10	
		f	7	14	

Atomların Kuantum Sayıları

- Yörüngeler 1 ile başlayan tam sayılardan oluşan ana kuantum sayısı n ile belirtilir.
- Bu yörüngeler $n=1,2,3,4,5$ e karşılık gelen K,L,M,N,O gibi büyük harflerle ifade edilir.
- Bu kuantum sayısının sadece Bohr modeli ile ilişkili olduğu unutulmamalıdır.
- Kuantum sayısı, bir elektronun çekirdeğe uzaklığı veya konumu ile ilgilidir.

Elektronların Kuantum Sayıları için İzin Verilen Değerler

n	Birincil kuantum sayısı	$n = 1, 2, 3, 4, \dots$	Bütün artı tamsayılar
l	İkincil kuantum sayısı	$l = 0, 1, 2, 3, \dots, (n - 1)$	l 'nin n izin verilen değeri
m_l	Mıknatısal kuantum sayısı	sıfır dahil $-l$ 'den $+l$ 'ye kadar tam sayılar	$2l + 1$
m_s	Dönü kuantum sayısı	$+\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}$	2

Her bir kabukta bulunabilecek en yüksek elektron sayısı

Kabuk sayısı, n (birincil kuvantum sayısı)	Her bir kabukta bulunabilecek en yüksek elektron adedi ($2n^2$)	Yörüngemsilerde bulunabilecek en yüksek elektron adedi
1	$2(1^2) = 2$	s^2
2	$2(2^2) = 8$	$s^2 p^6$
3	$2(3^2) = 18$	$s^2 p^6 d^{10}$
4	$2(4^2) = 32$	$s^2 p^6 d^{10} f^{14}$
5	$2(5^2) = 50$	$s^2 p^6 d^{10} f^{14} \dots$
6	$2(6^2) = 72$	$s^2 p^6 \dots$
7	$2(7^2) = 98$	$s^2 \dots$

Valans Elektronları

- ✓ En dış yörüngede bulunan elektronlar
- ✓ Bu elektronlar çok önemli olup, atom ve molekül kümelerini oluşturmak için atomlararasıdaki bağların oluşmasını sağlar.
- ✓ Ayrıca, katıların fiziksel ve kimyasal özellikleri bu valans elektronlarına bağlıdır.

** Bazı atomlar kararlı elektron dizilişine sahiptirler yani en dış enerji seviyesi veya valans elektron yörüngesi tamamen dolmuştur. (Ne, Ar, Kr ve He)
-- kimyasal olarak aktif değildirler.

Elektron yapısı ve kimyasal tepkinlik

- ✓ Soygazlar
- ✓ Elektropozitif elementler
- ✓ Elektronegatif elementler

Elektronegatiflik:

Bir atomun elektronları kendine çekme derecesidir.

																<div style="border: 1px solid black; padding: 5px; display: inline-block;"> H 2.1 </div>	
Li 1.0	Be 1.5											B 2.0	C 2.5	N 3.1	O 3.5	F 4.1	
Na 1.0	Mg 1.3											Al 1.5	Si 1.8	P 2.1	S 2.4	Cl 2.9	
K 0.9	Ca 1.1	Sc 1.2	Ti 1.3	V 1.5	Cr 1.6	Mn 1.6	Fe 1.7	Co 1.7	Ni 1.8	Cu 1.8	Zn 1.7	Ga 1.8	Ge 2.0	As 2.2	Se 2.5	Br 2.8	
Rb 0.9	Sr 1.0	Y 1.1	Zr 1.2	Nb 1.3	Mo 1.3	Tc 1.4	Ru 1.4	Rh 1.5	Pd 1.4	Ag 1.4	Cd 1.5	In 1.5	Sn 1.7	Sb 1.8	Te 2.0	I 2.2	
Cs 0.9	Ba 0.9	La 1.1	Hf 1.2	Ta 1.4	W 1.4	Re 1.5	Os 1.5	Ir 1.6	Pt 1.5	Au 1.4	Hg 1.5	Tl 1.5	Pb 1.6	Bi 1.7	Po 1.8	At 2.0	
Fr 0.9	Ra 0.9	Ac 1.0	Lanthanides: 1.0-1.2 Actinides: 1.0-1.2														

[illegible]

Atomik ve Moleküler Bağlar

Bağlı durumda atomların potansiyel enerjilerinde net bir azalma olduğundan atomlar arasında kimyasal bağlar meydana gelir. Diğer bir deyişle bağlı atomlar bağımsız atomlardan daha kararlı enerji durumundadır.

- Birincil veya kuvvetli
 - İkincil veya zayıf

Atom ve Molekül Bağlarının Tipleri

Birincil Atom Bağları

1. İyonik bağlar
2. Ortaklaşım (kovalent) bağları
3. Metalik bağlar

İkincil Atom ve Molekül Bağları

1. Kalıcı çift kutup bağları
2. Değişken çift kutup bağları

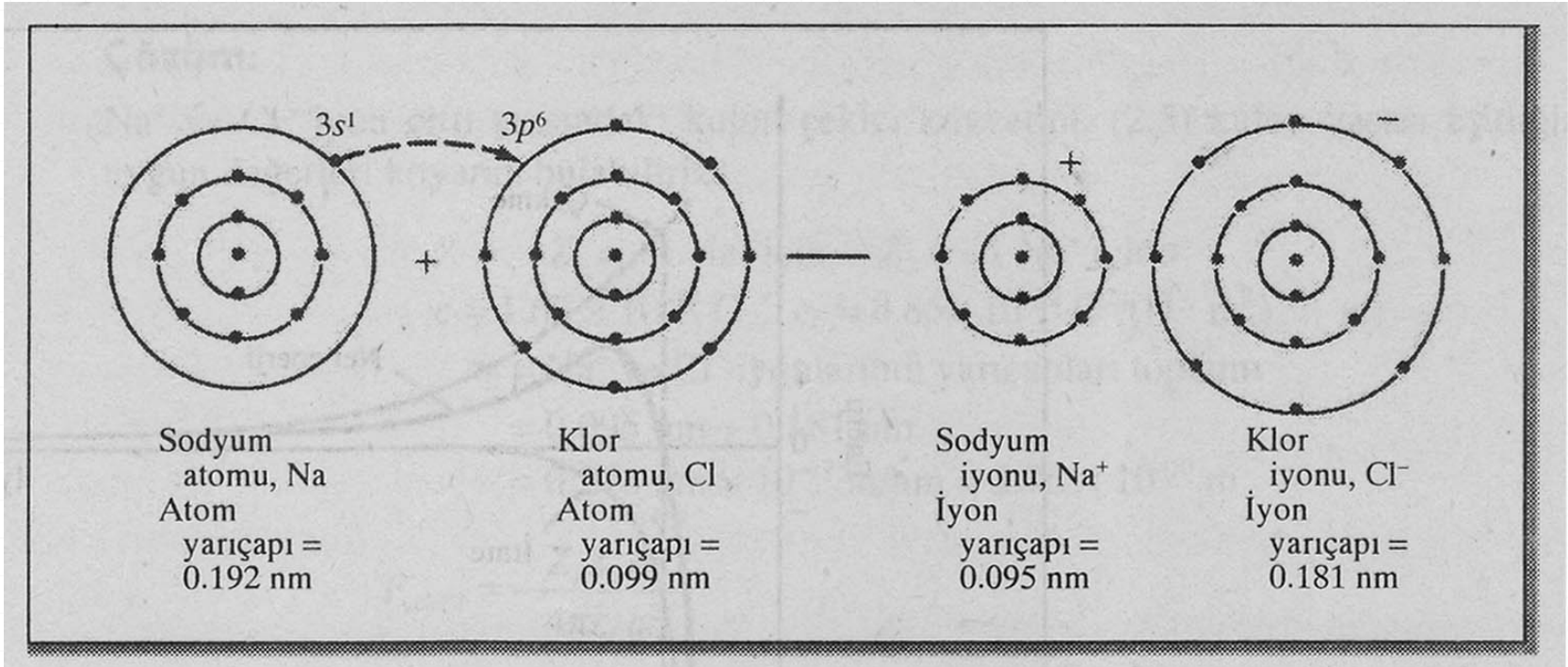
İyonik Bağ

Yüksek artı ilgili elementlerle (metal) yüksek eksi ilgili elementler arasında oluşan bağlardır.

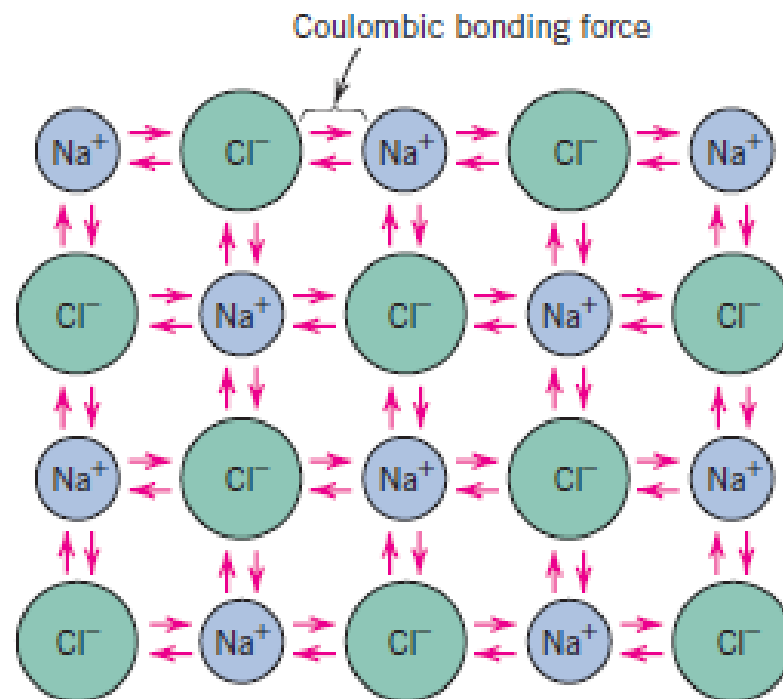
Iyonik bağda bağ kuvvetleri, karşıt yükteki iyonların elektrostatik kuvvet veya kulon kuvveti ile birbirlerini çekmeleri sonucudur.

- Elektron transferi
- *Neden:* bağlanmadan sonra net iyonik enerji potansiyelini azaltmak
- Na-Cl

İyonik Bağlar



Sodyum ve klor atomlarından bir sodyum klorür iyon çiftinin oluşması. İyonlaşma sürecinde sodyum atomunun bir $3s^1$ elektronu klor atomunun yarı boş $3p$ yörüngesine geçer.



İyonik bağlı katıların özellikleri

- Latis enerjileri ve kaynama noktaları yüksek
- İyon boyutu arttıkça latis enerjileri azalır
$$\text{LiCl} > \text{CsCl}$$
- İyonik yapıdaki birden fazla bağ latis enerjisiyi artırır.

Kovalent bağ

İyonik bağ yüksek artı ilgilive eksi ilgili atomlar arasında olduğu halde kovalent bağ eksi ilgililikteki farkları az olan elementler çizelgesinde birbirine yakın atomlar arasında meydana gelir.

Kovalent bağlanmada atomlar yaygın olarak dıştaki s ve p elektronlarını paylaşarak soy gaz kurulumunu alırlar.

- ✓ Elementler arası elektronegativite farkı azdır
- ✓ Atomlar elektron paylaşır (*s* ve *p*)
- ✓ Asal gaz atomu gibi davranır
- ✓ Tek bir atom kendi ve diğerleri ile çoklu elektron çiftleri de oluşturabilir.

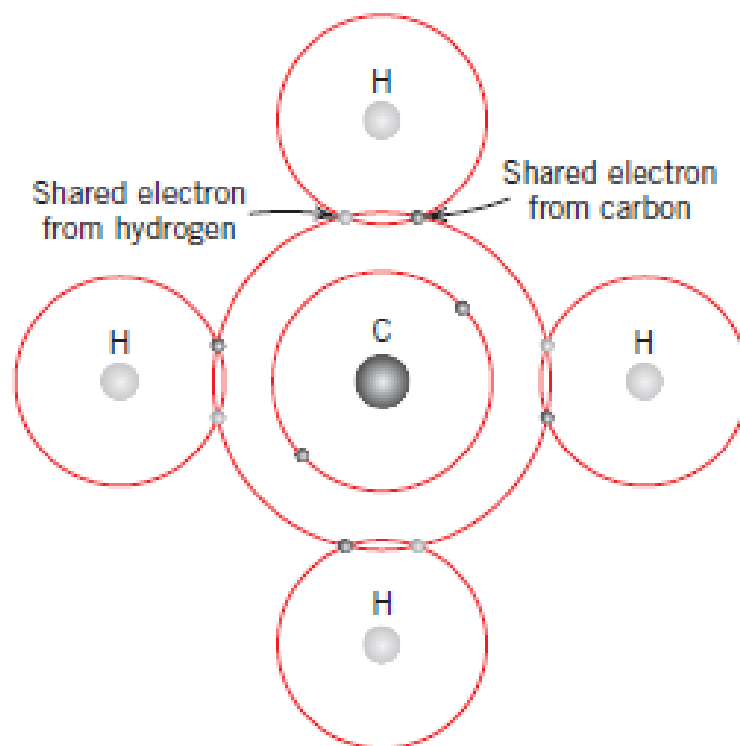


Figure 2.10 Schematic representation of covalent bonding in a molecule of methane (CH_4).

Metalik bağ

Elektron yük bulutu halindeki belirli bir yere bağlı olmayan dış elektronların metal atomları topluluğu tarafından paylaşılmasıyla oluşan yönsüz bağdır.

- ✓ Elektronlar serbest
- ✓ Elektrik ve ısı iletkenlik
- ✓ Kırılmadan deforme olabilir
- ✓ Yönsüz bağlanma
- ✓ Valans elektronları etraftaki bir çok elektron tarafından paylaşılır
- ✓ 1A ve 2A grupları arasında olur

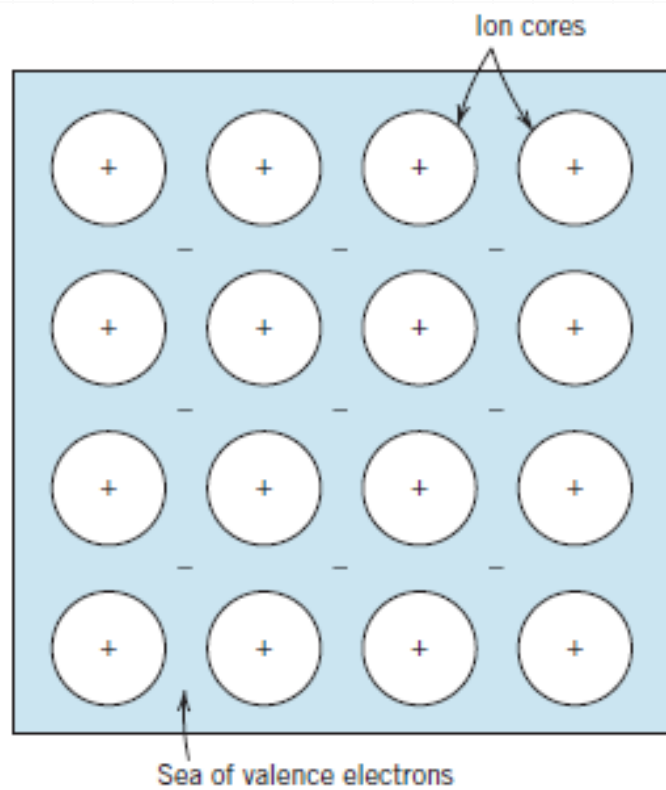
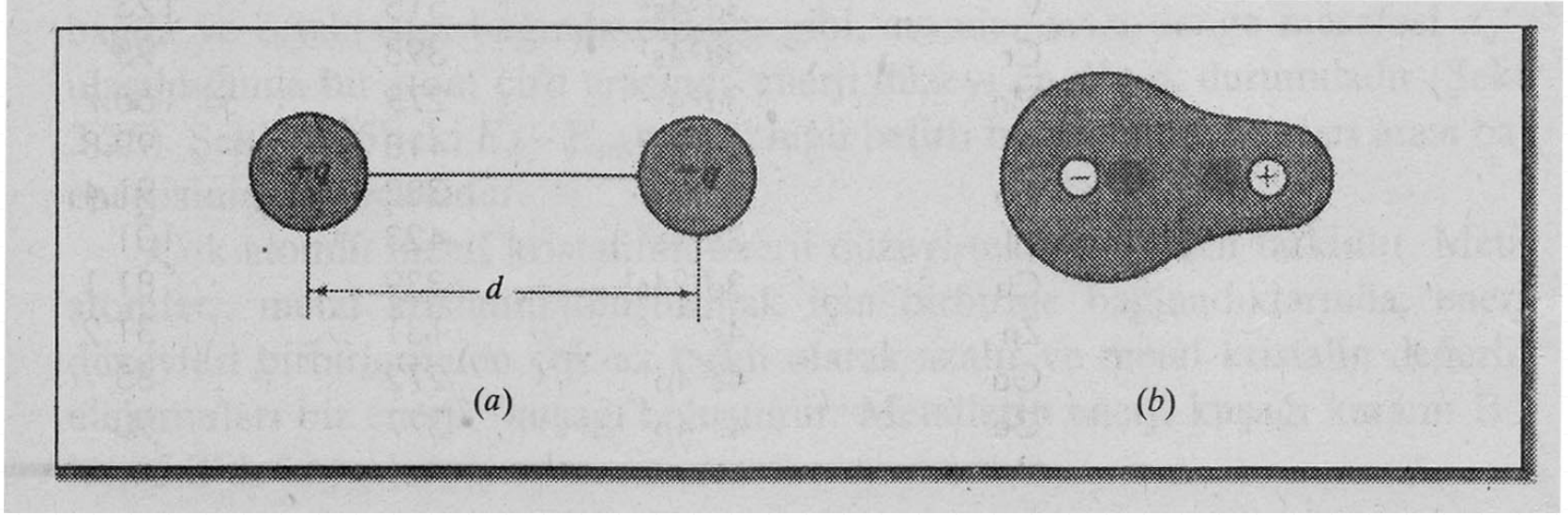


Figure 2.11 Schematic illustration of metallic bonding.

İkincil Bağlar

- ✓ Birincil atomsal bağlarda itici güç, bağlanan elektronların enerjilerinin azalmasıdır,
- ✓ İkincil bağlar birincil bağların aksine oldukça zayıftır,
- ✓ İkincil bağların oluşmasındaki itici güç atom ve moleküllerdeki elektrik çift kutuplarının birbirine çekmesidir.

İkincil Bağlar



(a) Bir elektrik çift kutubu. Çift kutup momenti qd' dir. (q =elektriksel yükün büyüklüğü, d =yük merkezleri arasındaki uzaklık)

(b) Ortaklaşım bağlı bir moleküldeki bir elektrik çift kutbu. Artı ve eksi yük merkezleri arasındaki mesafeye dikkat edilmelidir.

İkincil bağlar, enerjilerinin zayıf olmalarına rağmen atom ve molekülleri bir arada tutan tek bağ olduklarında önemlidir.

İkincil Bağlar

Değişken Çift Kutup Bağları :

Atomların çekirdekleri etrafındaki elektron yoğunluklarının bakışimsız dağılımları nedeniyle çok zayıf, çift kutuplu bağlar meydana gelebilir. Çünkü büyük bir ihtimalle her an herhangi bir noktada atomun bir tarafında diğer tarafından daha fazla elektron yükü olacaktır.

Bu cins bağa değişken denmesinin sebebi, elektron yoğunluğunun sürekli değişmesidir. (asal gazlar)

İkincil Bağlar :

Kalıcı Çift Kutuplar:

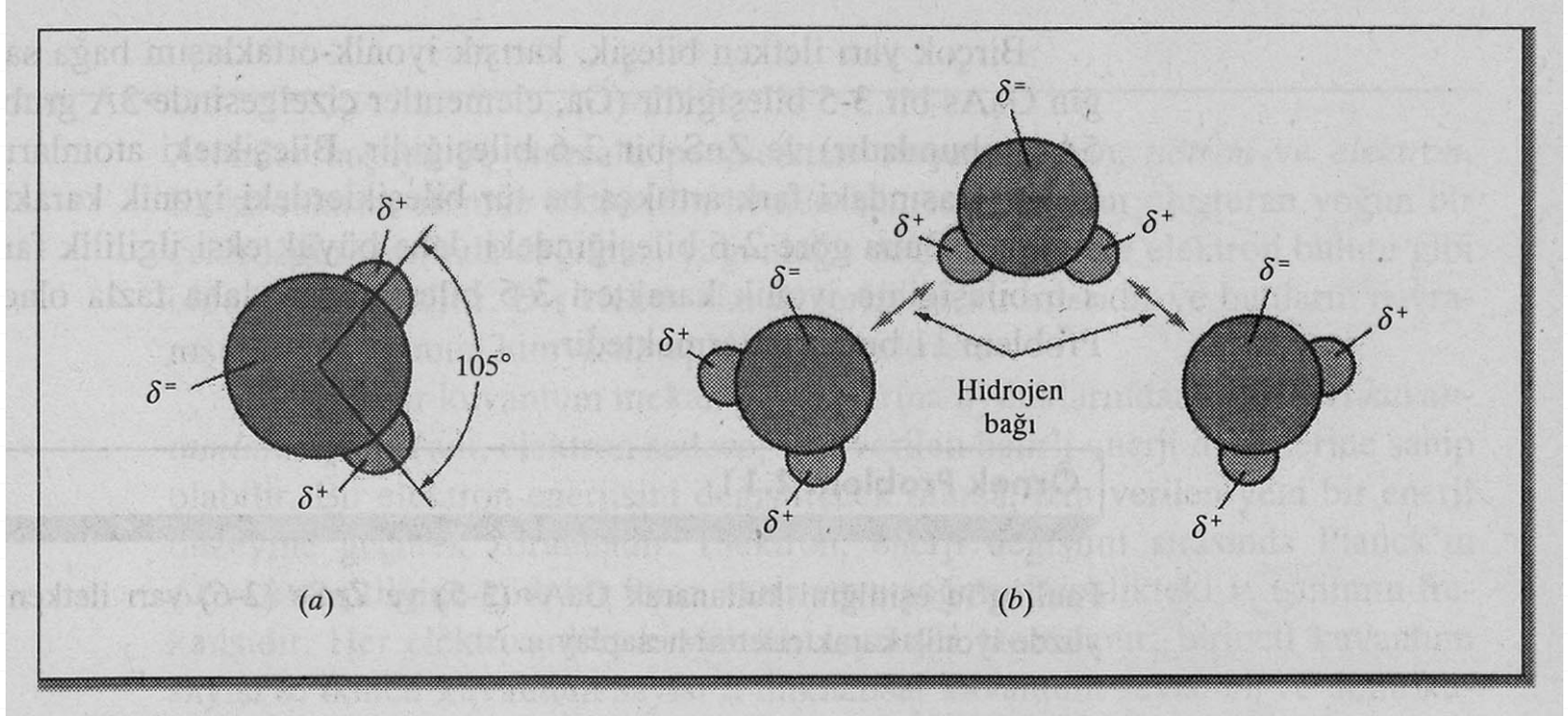
Ortaklaşım (kovalent) bağıyla bağlanmış moleküller arasında kalıcı çift kutuplar varsa zayıf bağ kuvvetleri oluşabilmektedir.

İkincil Bağlar : Kalıcı Çift Kutuplar

Ortaklaşım bağıyla bağlanmış moleküller arasında kalıcı çift kutuplar varsa zayıf bağ kuvvetleri oluşabilmektedir.

Kalıcı çift kutup bağları, su ve hidrokarbonlar gibi kutup oluşturan ortaklaşım bağlarına sahip moleküllerde etkili olan bağ kuvvetleridir.

İkincil Bağlar : Kalıcı Çift Kutuplar



(a) Su molekülünün kalıcı momentli yapısı. (b) Kalıcı çift kutup çekimi etkisiyle su moleküllerinde oluşan hidrojen bağı.

Table 2.3 Bonding Energies and Melting Temperatures for Various Substances

<i>Bonding Type</i>	<i>Substance</i>	<i>Bonding Energy</i>		<i>Melting Temperature (°C)</i>
		<i>kJ/mol</i>	<i>eV/Atom, Ion, Molecule</i>	
Ionic	NaCl	640	3.3	801
	MgO	1000	5.2	2800
Covalent	Si	450	4.7	1410
	C (diamond)	713	7.4	>3550
Metallic	Hg	68	0.7	-39
	Al	324	3.4	660
	Fe	406	4.2	1538
	W	849	8.8	3410
van der Waals	Ar	7.7	0.08	-189
	Cl ₂	31	0.32	-101
Hydrogen	NH ₃	35	0.36	-78
	H ₂ O	51	0.52	0

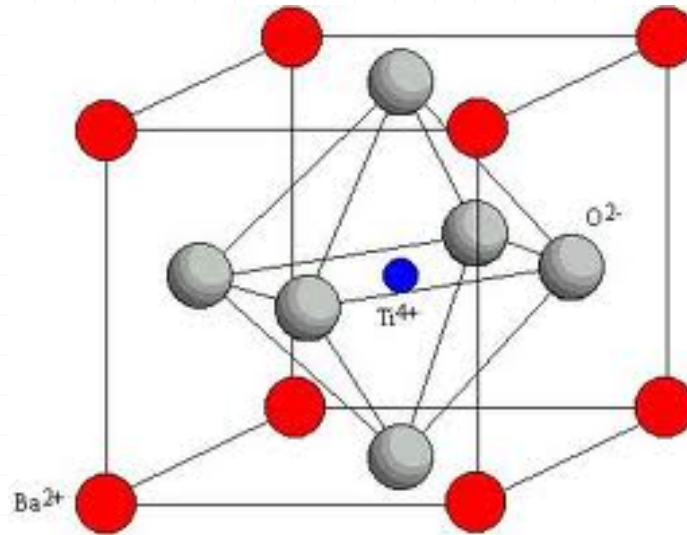
Karışık Bağ

Atom ve iyonların kimyasal bağları aynı zamanda birden fazla birincil bağı içereceği gibi ikincil bağları da içerebilir. Birincil bağlarda görülebilecek karışık bağ türleri :

- **İyonik – ortaklaşım**
- **Metalik – ortaklaşım**
 - **Metalik – iyonik**
- **İyonik – ortaklaşım - metalik**

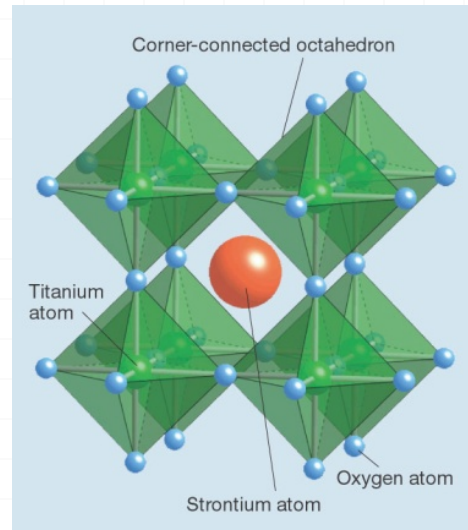
3.Bölüm-Kristal Yapıları ve Kristal Geometrisi

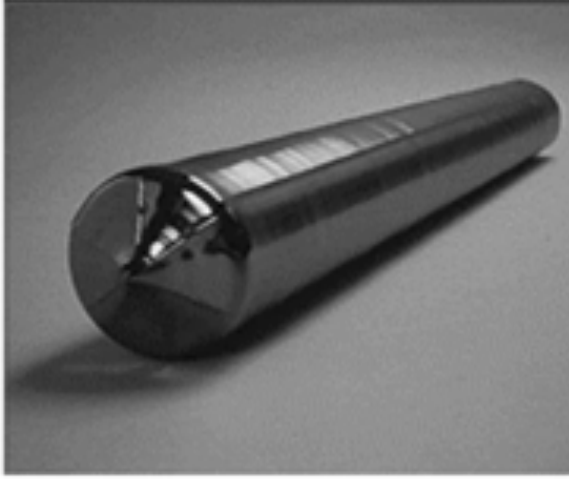
Malzeme tanımlamada önemli olan malzemelerin fiziksel yapısı, birinci derecede katıyı oluşturan atomların, iyonların veya moleküllerinin dizilimlerine ve aralarındaki bağ kuvvetine bağlıdır.



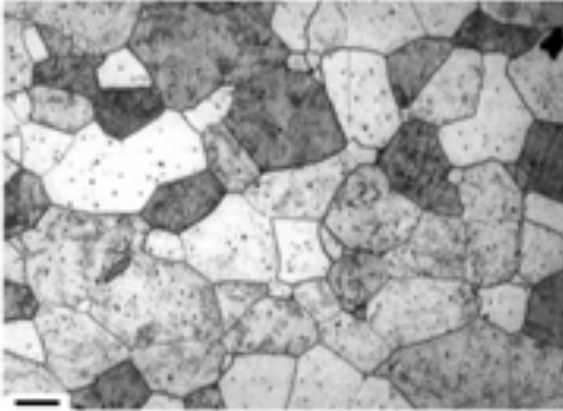
Kristal Yapıları ve Kristal Geometrisi

- Bir katının atomları veya iyonları kendini üç boyutta tekrar eden bir örüntü içinde dizilmişse, oluşturdukları yapıya «*kristalli yapı, katiya kristalli katı veya kristalli malzeme*» adı verilir,
- Kristalli malzemelere örnek olarak metalleri, alaşımları ve bazı seramik malzemeleri gösterebiliriz.



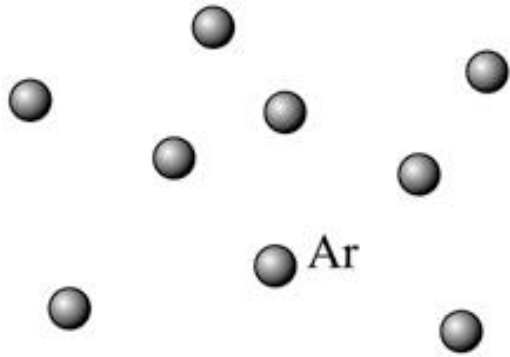


(a)

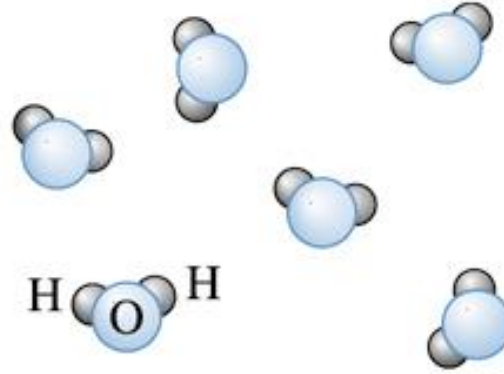


(b)

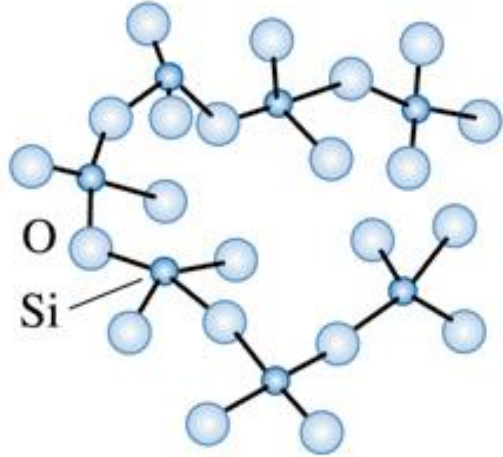
(a) Silisyum tek kristali.
(b) Tane ve tane
sınırlarını gösteren
polikristalin paslanmaz
çelik mikrografı



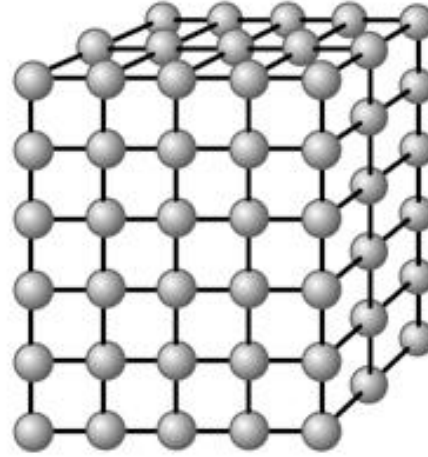
(a)



(b)



(c)

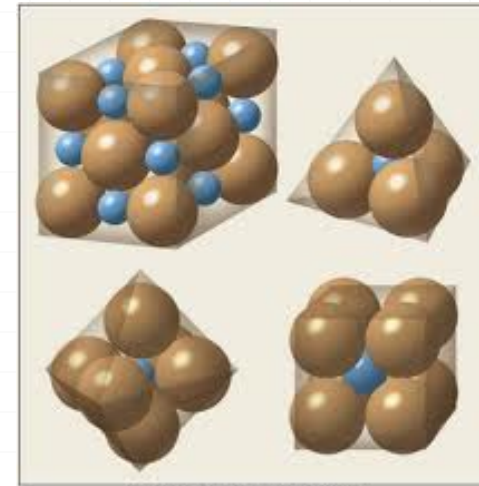
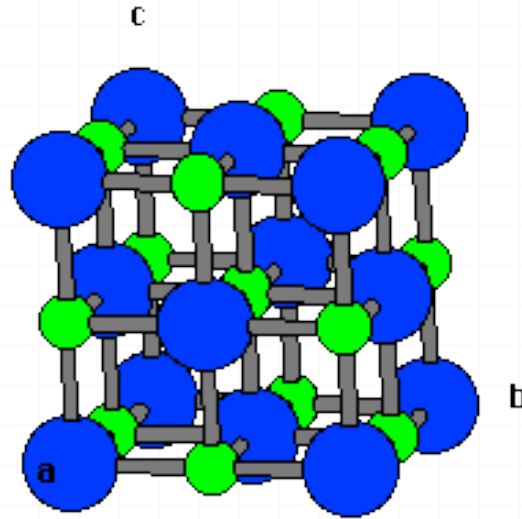


(d)

Malzemedeki atom dizilimleri (a) inert monoatomik gazlar, düzenli atom dizilimleri yoktur, (b,c) Su buharı, azot gazı, amorf silisyum ve silikat camları gibi bazı malzemelerin kısa mesafeli dizilimleri vardır. (d) Metaller, alaşımlar, pek çok seramik ve bazı polimerler malzemedeki düzenli atom/ion dizilimine sahiptirler.

Kristal Yapıları ve Kristal Geometrisi

- Kristalli katılarda atomların dizilimi, üç boyuttaki bir çizgiler ağının kesişme noktalarına atomlar yerleştirilerek gösterilebilir.
- Bu çizgiler ağına «*uzay kafesi*» adı verilir ve noktaların üç boyutta sonsuz dizilimi olarak tanımlanabilir.



Source: Earth, An Introduction to Physical Geology
Tarbuck, E.J. and Lutgens, F.K., Seventh Edition: Prentice Hall, Upper Saddle River,
New Jersey, 2003. Chapter 2: Minerals and Matter.

Kristal Yapıları ve Kristal Geometrisi

- Kristal yapılarda bulunan atomsal düzen, yapının bir gruptan oluşan küçük bir birimin tekrar etmesi ile oluştuğuna işaret eder.
 - Kristalin tekrar eden en küçük ögesi
 - Kristal yapıyı oluşturan temel yapı taşı
 - Geometrisi ve içerdiği atomların konumları kristal yapıyı tanımlar ve temsil eder.

Kristal Yapıları ve Kristal Geometrisi

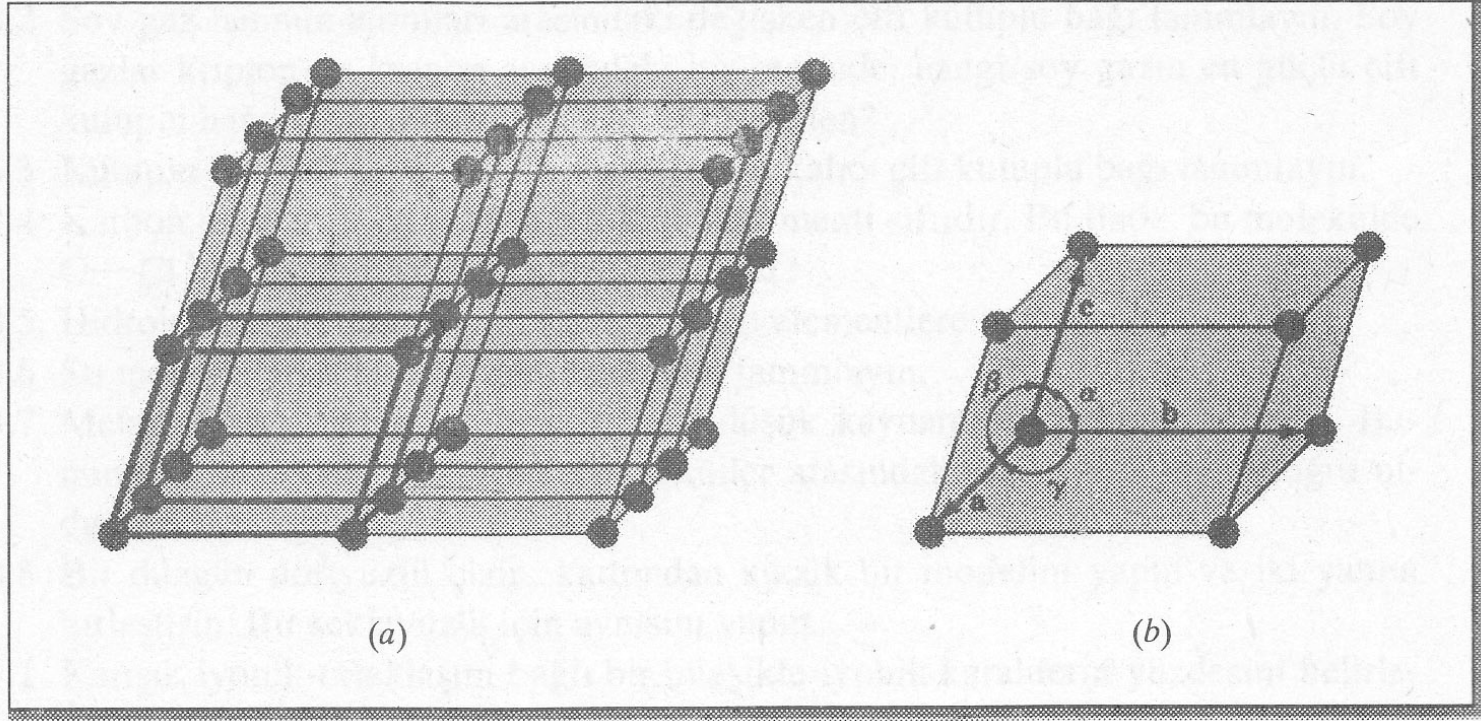
- Bir uzay kafesi tekrar eden birim hücredeki atomların yerleri tanımlanarak belirtilebilir.
- Birim hücrenin boyutu ve biçimi, birim hücrenin bir köşesinden çıkan üç kafes vektörü a, b, c ile tanımlanabilir.

$a, b, c \rightarrow$ aksenal uzunluklar

$\alpha, \beta, \gamma \rightarrow$ eksenler arasındaki açılar

**Birim hücrenin
kafes sabiteleri**

Kristal Yapıları ve Kristal Geometrisi



- a) Kusursuz bir katı kristalin uzay kafesi
- b) Bir birim hücre ve kafes sabitleri

Kristal Sistemleri ve Bravais Kafesleri

- Eksenel uzunluklara ve eksenler arası açılara belirli değerler verilerek farklı türlerde birim hücreler oluşturulabilir.
- Bütün nokta kafeslerini yaratmak için yedi farklı kristal sisteme gereksinim olduğunu göstermişlerdir.
- Dört temel birim hücre;
 1. Basit
 2. Hacim merkezli
 3. Yüzey merkezli
 4. Taban merkezli

Kristal Sistemleri ve Bravais Kafesleri

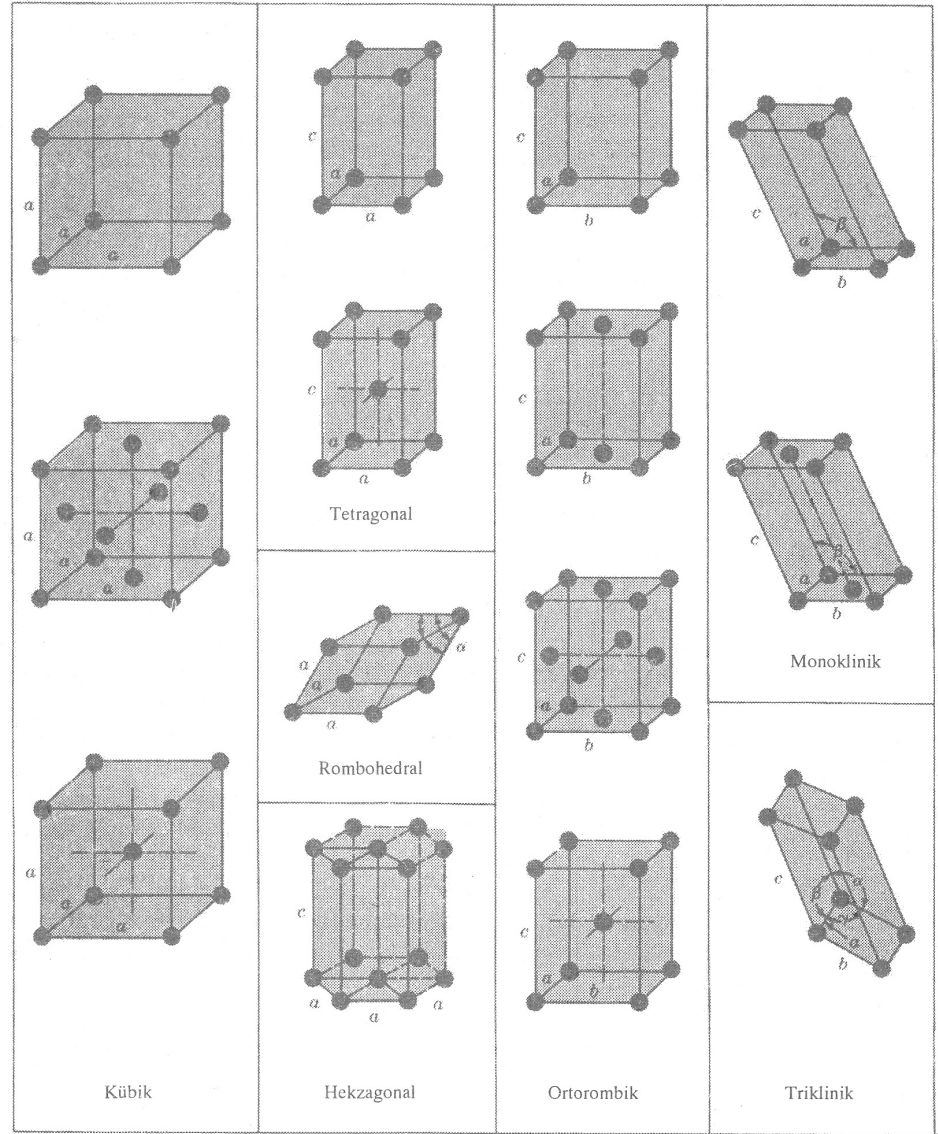
Uzay Kafeslerinin Kristal Sistemlerine Göre Sınıflandırılması

Kristal sistemi	Eksenel uzunluklar ve eksenler arası açılar	Uzay kafesleri
Kübik	Birbirine dik üç eşit eksen $a = b = c, \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	Basit kübik Hacim merkezli kübik Yüzey merkezli kübik
Tetragonal	Birbirine dik üç eksen, ikisi eşit $a = b \neq c, \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	Basit tetragonal Hacim merkezli tetragonal
Ortorombik	Birbirine dik, eşit olmayan eksen	Basit ortorombik Hacim merkezli ortorombik Taban merkezli ortorombik Yüzey merkezli ortorombik
Rombohedral	Üç eşit eksen, eş eğimli $a = b = c, \alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$	Basit rombohedral
Hekzagonal	İki eş eksen 120° , üçüncü eksen dik $a = b \neq c, \alpha = \beta = 90^\circ, \gamma = 120^\circ$	Basit hekzagonal
Monoklinik	Üç eşit olmayan eksen, bir çift dik değil $a \neq b \neq c, \alpha = \gamma = 90^\circ \neq \beta$	Basit monoklinik Taban merkezli monoklinik
Triklinik	Üç eşit olmayan eksen, eşit olmayan eğimli ve dik açılı değil $a \neq b \neq c, \alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$	Basit triklinik

Kristal Sistemleri ve Bravais Kafesleri

Kristal sistemlerine göre gruplanmış geleneksel 14 Bravais birim hücresi.

Yuvarlaklar kafes noktalarını göstermektedir, yüzeyde ve köşelerde yer aldıklarında diğer benzer birim hücrelerce paylaşılmaktadır.



The Atomic Mac™

Registered to:
GREGORY TETRAULT
For use only on a single machine

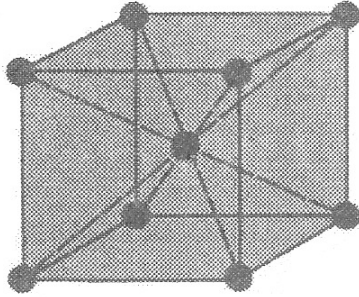
-  Hexagonal
-  Cubic face centered
-  Cubic body centered
-  Monoclinic
-  Rhombohedral
-  Orthorhombic
-  Cubic
-  Tetragonal

The Atomic Mac™

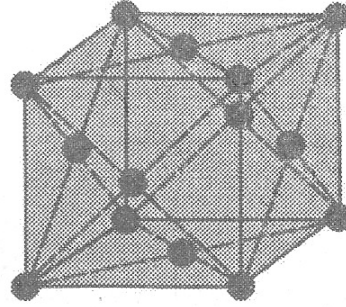
Registered to:
GREGORY TETRAULT
For use only on a single machine

- Hexagonal
- Cubic body centered
- Rhombohedral
- Cubic
- Cubic face centered
- Monoclinic
- Orthorhombic
- Tetragonal

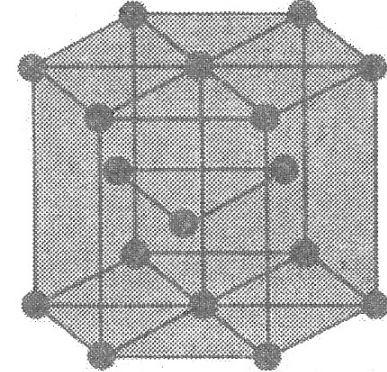
Başlıca Metalik Kristal Yapıları



(a)



(b)



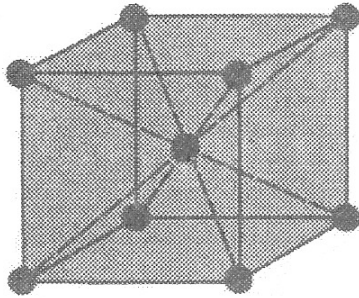
(c)

Başlıca metal kristali birim hücreleri:

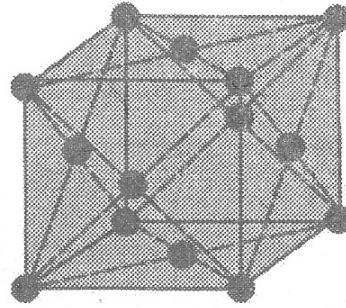
- a) hacim merkezli kübik (HMK)
- b) yüzey merkezli kübik (YMK)
- c) hegzagonal sıkı paket (SPH)

**Metallerin çoğunun
katılaşma sonucunda
yoğun şekilde
istiflenmiş atomların
oluşturduğu üç tür
kristal yapısı**

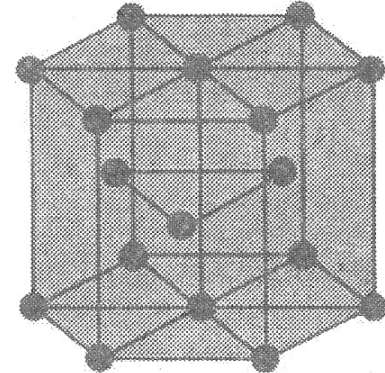
Başlıca Metalik Kristal Yapıları



(a)



(b)

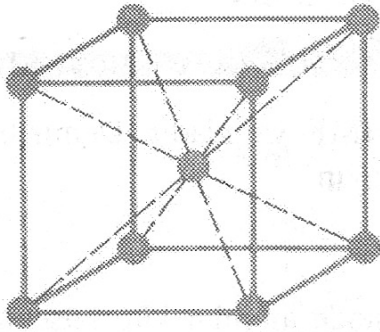


(c)

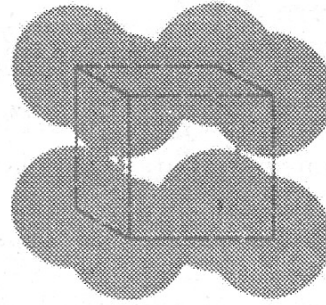
Atomlar bir araya yaklaşıarak birbirleriyle sıkı bir bağ oluşturdıklarında enerjileri azaldığından metallerin çoğu en yoğun atom düzeninde kristalleşirler. Yani;

✓Yoğun düzenli yapılar daha düşük ve kararlı enerji durumundadırlar.

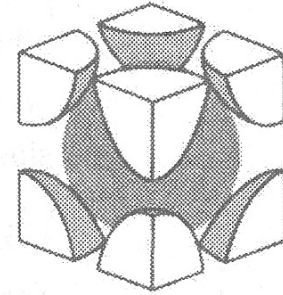
Hacim Merkezli Kübik Kristal Yapı



(a)



(b)



(c)

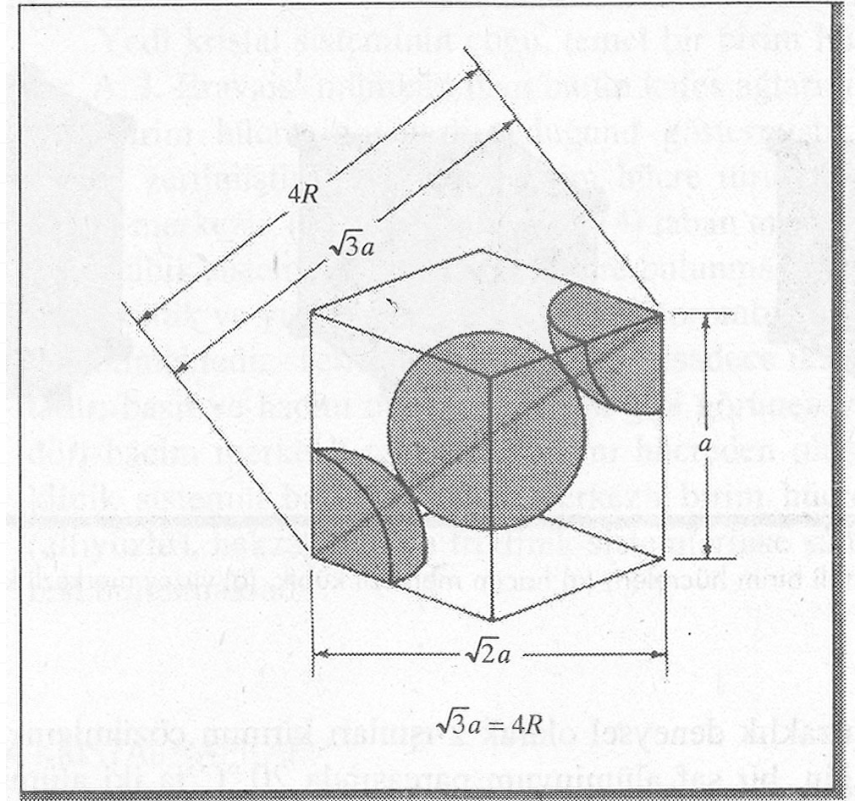
HMK birim hücreleri:

- a) atom yerleri birim hücresi,**
- b) sert küre birim hücresi,**
- c) tek başına birim hücre**

Hacim Merkezli Kübik Kristal Yapı

Bir birim hücrede
merkezdeki atomun en
yakın sekiz atomla
çevrilmesinden dolayı
 $KN=8$ (birliktelik sayısı)

$$1 \text{ merkez} + 8 \times 1/8 \text{ köşe} = 2 \text{ atom}$$



Kafes sabitesi a ile atom yarıçapı R arasındaki
bağıntıyı gösteren bir HMK birim hücre
 $\sqrt{3}a = 4R$

Hacim Merkezli Kübik Kristal Yapı

Örnek Problem:

20 °C'taki demir, atom yarıçapı 0.124 nm olan HMK yapıdadır. Demir birim hücre-sinde küpün kenarı olan kafes sabitesi a 'yı hesaplayın.

Çözüm:

Şekil 3.5'ten görüleceği gibi, HMK birim hücresinde atomlar küp köşegeni boyunca birbirine değmektedir. Buna göre, küpün bir kenarının uzunluğu

$$\sqrt{3}a = 4R \quad (3.1)$$

olur. Burada R , demir atomunun yarıçapıdır. Dolayısıyla:

$$a = \frac{4R}{\sqrt{3}} = \frac{4(0.124 \text{ nm})}{\sqrt{3}} = 0.2864 \text{ nm} \quad \blacktriangleleft$$

Hacim Merkezli Kübik Kristal Yapı
Atom doluluk oranı (ADO)=Atom Paketleme
Faktörü(APF)

HMK birim hücresinin atomları küre olarak kabul edilecek olursa;

$$\text{Atom dolum oranı} = \frac{\text{bir birim hücredeki atomların hacmi}}{\text{birim hücrenin hacmi}}$$

- HMK birim hücre için ADO = 0.68 olarak hesaplanır.
 - HMK birim hücrenin %68 i atomlarla doldurulmuş, kalan %32 si ise boşluktur.
 - Atomlar daha sıkı bir şekilde dizilemediklerinden dolayı HMK kristal yapısı sıkı düzen bir yapı değildir.
- *** Demir, krom, volfram ve vanadyumoda sıcaklığında HMK kristal yapısına sahiptirler.

Hacim Merkezli Kübik Kristal Yapı

HMK birim hücrenin hacmi

$$V_{\text{birim hücre}} = a^3$$

olacaktır. Burada a kafes sabitesidir. a ile R arasındaki bağıntı, HMK birim hücresinde atomların küp köşegeni boyunca birbirlerine temas ettiğini gösteren Şekil 3.5'ten elde edilmiştir. Buna göre,

$$\sqrt{3}a = 4R \quad \text{veya} \quad a = \frac{4R}{\sqrt{3}}$$

Böylece,

$$V_{\text{birim hücre}} = a^3 = 12.32R^3$$

Dolayısıyla HMK birim hücresi için atom dolum oranı:

$$\text{ADO} = \frac{V_{\text{atomlar}} / \text{birim hücre}}{V_{\text{birim hücre}}} = \frac{8.373R^3}{12.32R^3} = 0.68 \quad \blacktriangleleft$$

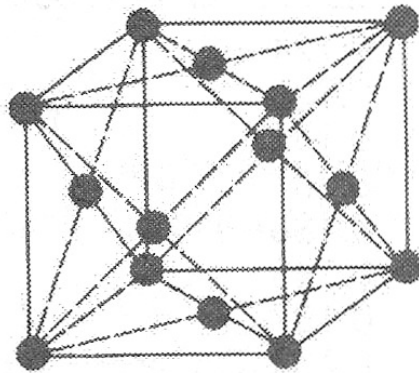
Hacim Merkezli Kübik Kristal Yapı

Oda Sıcaklığında (20 °C) HMK
Kristal Yapısına Sahip Bazı Metallerin
Kafes Sabiteleri ve Atom Yarıçapları

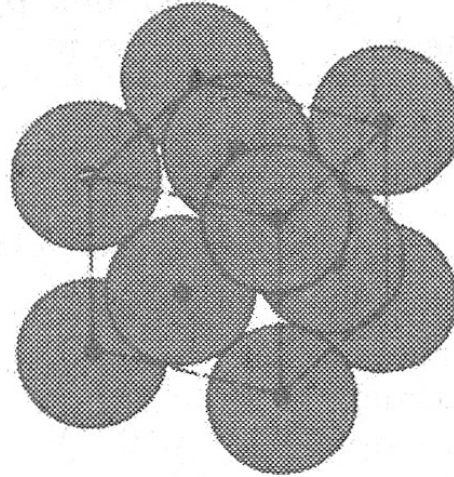
Metal	Kafes sabitesi a , nm	Atom yarıçapı R , * nm
Demir	0.287	0.124
Krom	0.289	0.125
Molibden	0.315	0.136
Potasyum	0.533	0.231
Sodyum	0.429	0.186
Tantal	0.330	0.143
Volfram	0.316	0.137
Vanadyum	0.304	0.132

*Eş. (3.1) kullanılarak kafes sabitelerinden
hesaplanmıştır.

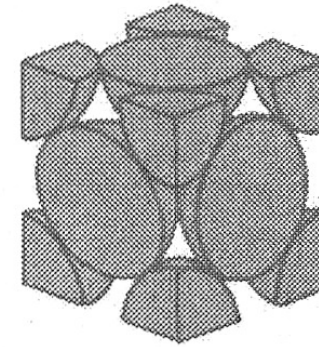
Yüzey Merkezli Kübik (YMK) Kristal Yapı



(a)



(b)



(c)

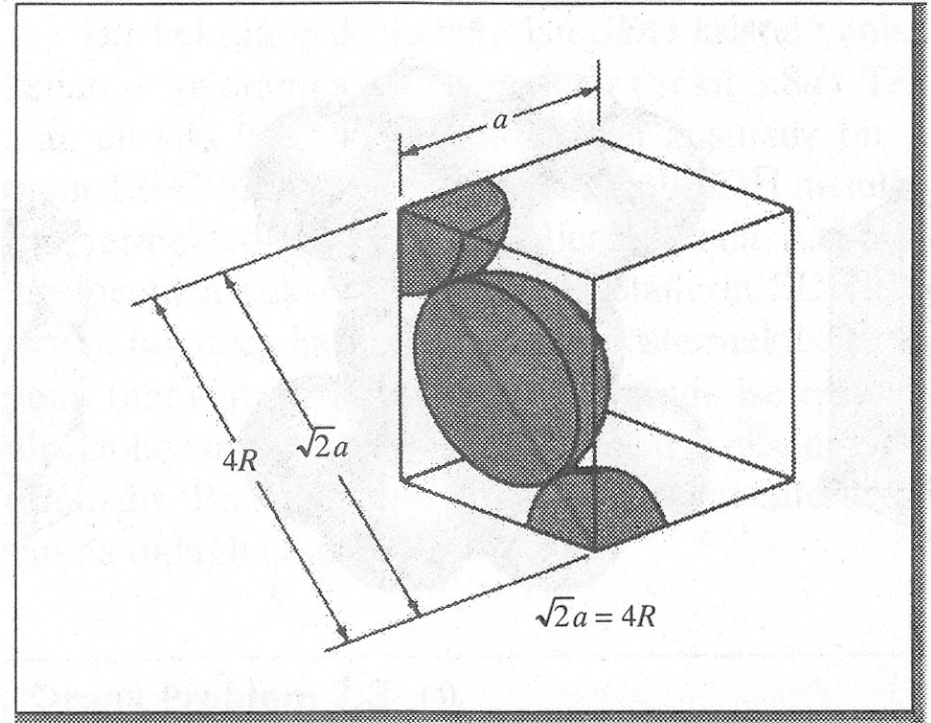
YMK birim hücreleri:

- a) Atom yerleri birim hücresi,
- b) sert küre birim hücresi,
- c) tek başına hücre

Yüzey Merkezli Kübik (YMK) Kristal Yapı

$$KN=12$$

$$8 \times \frac{1}{8} \text{ köşe} + 6 \times \frac{1}{2} \text{ yüzey} = 4 \text{ atom}$$



Kafes sabitesi a ile atom yarıçapı R arasındaki ilişkiyi gösteren YMK birim hücresi

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

Yüzey Merkezli Kübik (YMK) Kristal Yapı

Oda Sıcaklığında (20 °C) YMK
Kristal Yapısına Sahip Bazı Metallerin
Kafes Sabiteleri ve Atom Yarıçapları

Metal	Kafes sabitesi a , nm	Atom yarıçapı R , nm
Altın	0.408	0.144
Alüminyum	0.405	0.143
Bakır	0.3615	0.128
Gümüş	0.409	0.144
Kurşun	0.495	0.175
Nikel	0.352	0.125
Platin	0.393	0.139

*Eş. (3.3) kullanılarak kafes sabitelerinden
hesaplanmıştır.

Yüzey Merkezli Kübik (YMK) Kristal Yapı

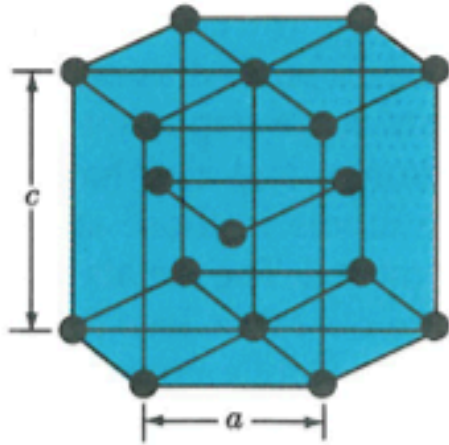
- YMK birim hücre için ADO = 0.74 olarak hesaplanır.
 - HMK birim hücrenin ADO değerinden daha büyüktür.
 - 0.74 ADO, küresel atomların mümkün olan en sıkı dizilimleriyle elde edilecek bir değerdir.
- *** Alüminyum, bakır, kurşun, nikel ve 912-1394 ° C sıcaklıkları arasında demir YMK yapısına sahiptir.

Metaller genellikle elektron bulutunun sağladığı koruma görevini maksimize edecek şekilde yüksek atomsal dolgu faktörüne sahiptirler.

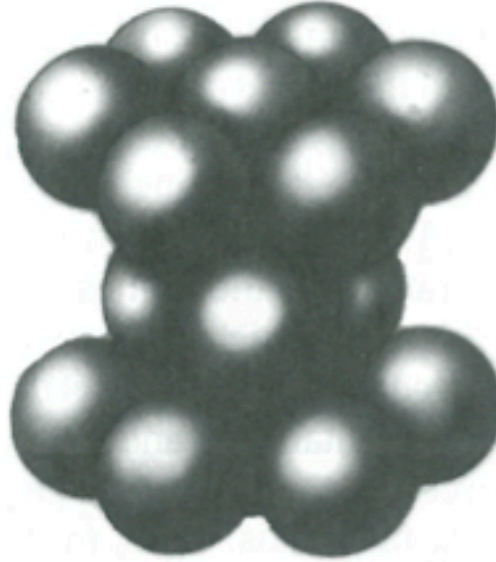
Sıkı Paket Hekzagonal (SPH) Kristal Yapısı

- Bazı metallerin birim hücrelerinde kübik simetri bulunmaz.
- Yaygın olarak rastlanılan üçüncü metalik kristal yapıdır.
- ADO çok küçük olduğundan metaller basit hekzagonal kristal yapıda katılaşmazlar.
- Atomlar SPH yapısını alarak daha düşük enerjili dolayısıyla daha kararlı bir konuma geçerler.

Sıkı Paket Hekzagonal (SPH) Kristal Yapısı



(a)



(b)



(c)

SPH birim hücreleri

a) Atom yerleri birim hücresi

b) Sert küre birim hücresi

c) Tek başına hücre

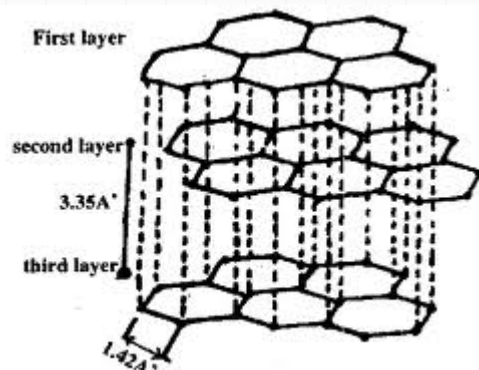


Fig. 9. 2 : Structure of graphite

Sıkı Paket Hekzagonal (SPH) Kristal Yapısı

- SPH' nin ADO' su 0,74 olup SPH gibi mümkün olan en sıkı doluma sahip YMK ile aynı değerdedir.
- Hem SPH hemde YMK yapılarında her bir atom 12 diğer atomla çevrilmiştir, $KN=12$

$2 \times 6 \times 1/6$ (üst ve alt tabakalarda) + $2 \times 1/2$ (üst ve alt tabakaların ortasında) + 3 (orta tabakada) = 6 atom

Sıkı Paket Hekzagonal (SPH) Kristal Yapısı

- Hekzagonal prizmadır.

a: kenar uzunluğu

c: yükseklik

- Tek biçimli kürelerin mümkün olan en sıkı bir şekilde doldurduğu kusursuz bir SPH kristali yapısında

c/a oranı 1.633

- Kadmiyum ve çinkonun c/a oranının idealden yüksek olması, bu metallerin SPH birim hücresinde atomların c eksenini boyunca hafifçe uzadığını göstermektedir.
- Mg, Co, Zr, Ti ve Be c/a oranı idealden düşüktür. Bu metallerde atomlar c eksenini boyunca biraz sıkıştırılmış durumdadır.

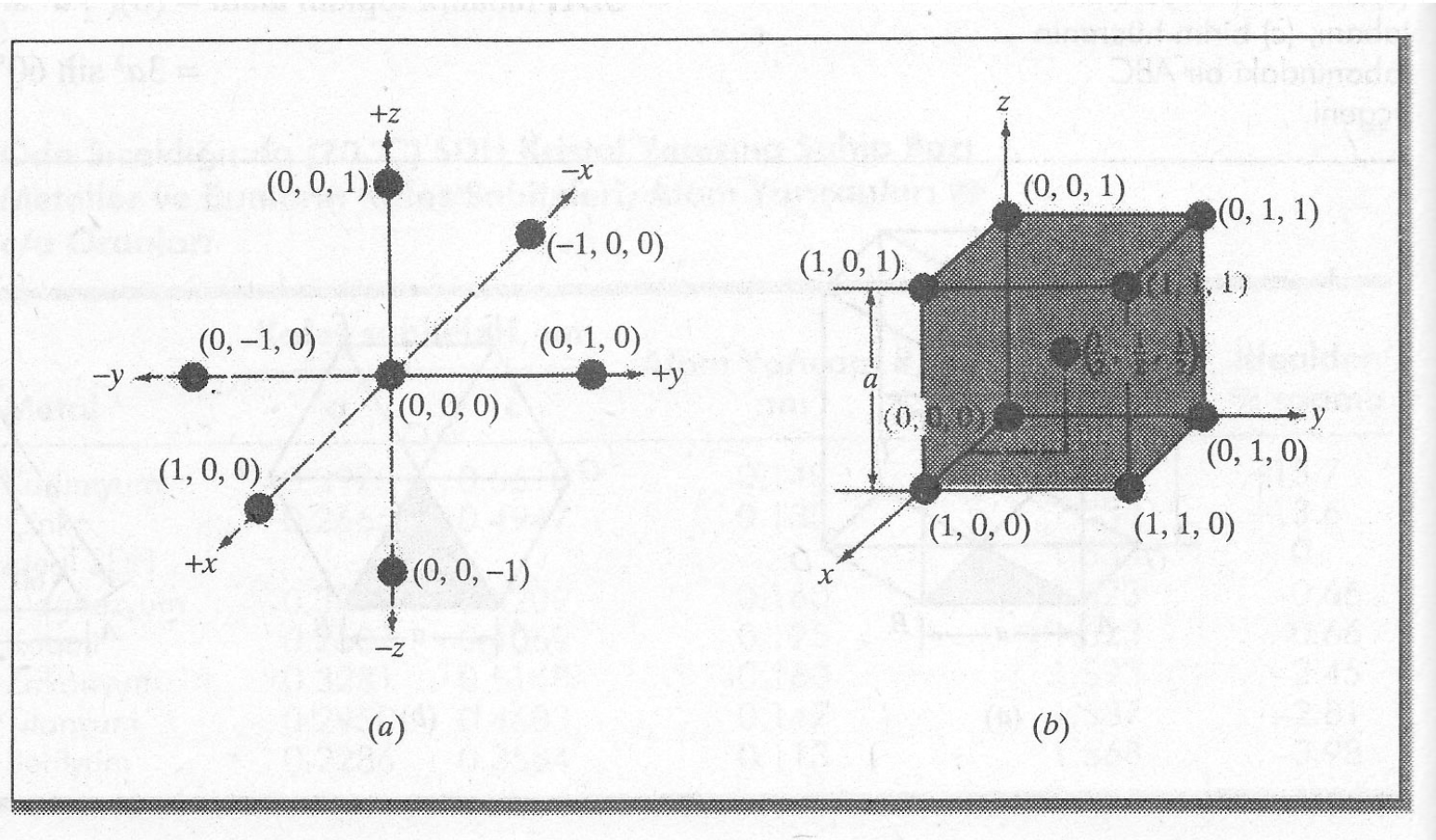
Kübik Birim Hücrede Atomların Yerleri

- Kübik birim hücrelerde atom yerlerini belirlemek için birbirine dik x , y ve z eksenlerinden yararlanılmaktadır,
- X eksenini genellikle kağıt yüzeyine dik,
- Y eksenini genellikle kağıt yüzeyinin sağına,
- Z eksenini genellikle kağıt yüzeyinin üst tarafına doğru olur,

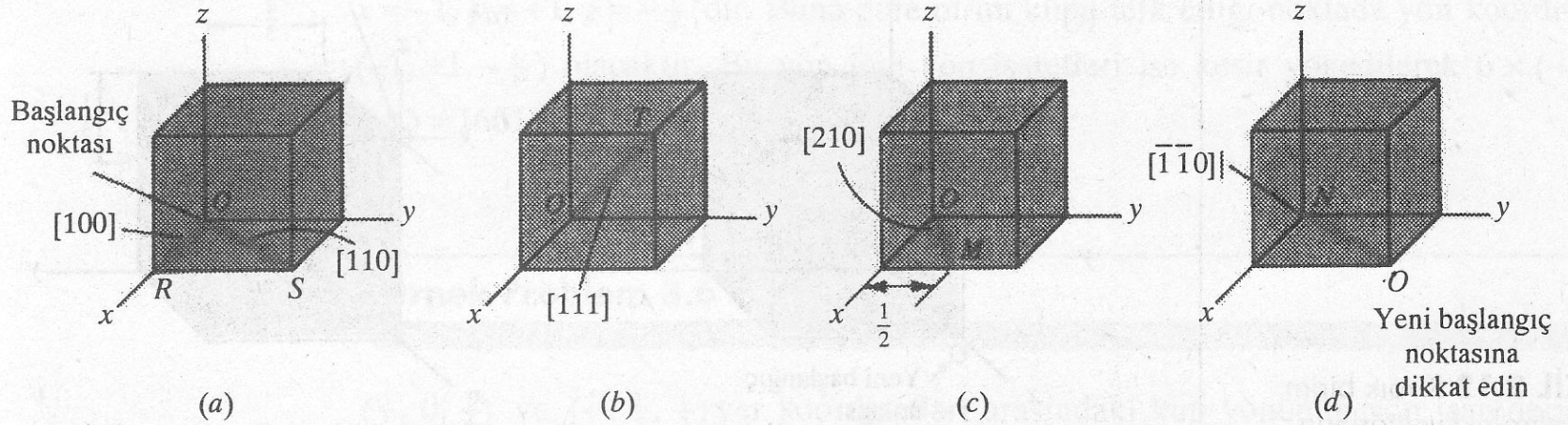
Kübik Birim Hücrede Atomların Yerleri

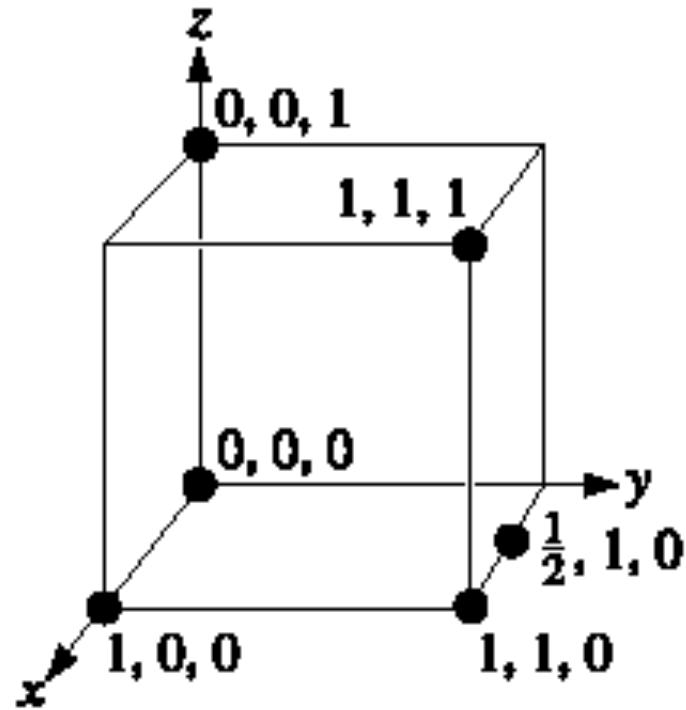
- HMK birim hücrede sekiz köşe atomunun koordinatları :
- $(0,0,0)$ $(1,0,0)$ $(0,1,0)$ $(0,0,1)$
- $(1,1,1)$ $(1,1,0)$ $(1,0,1)$ $(0,1,1)$

Kübik Birim Hücrede Atomların Yerleri



Kübik Birim Hücrede Atomların Yerleri





Birim hücrede yönler ve koordinatları

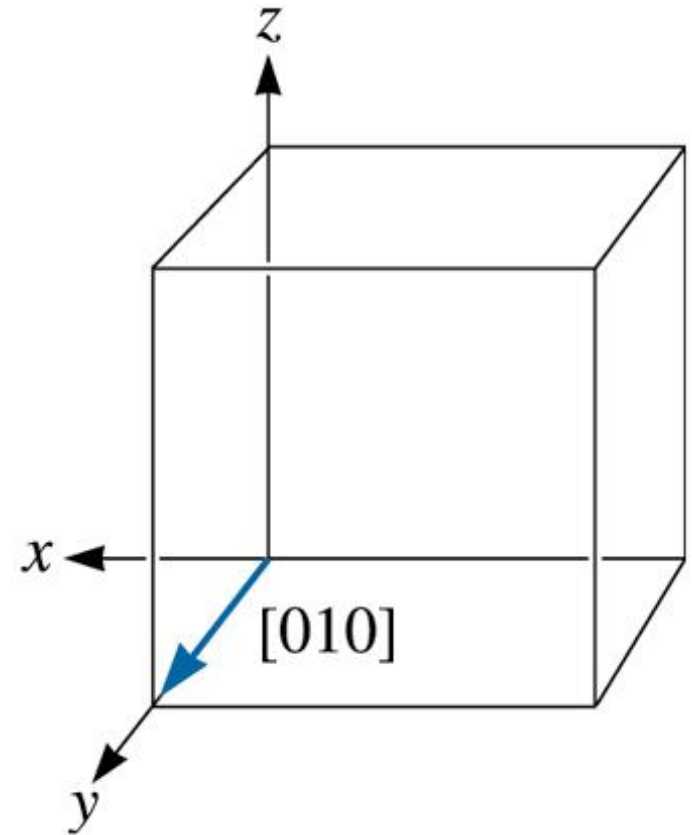
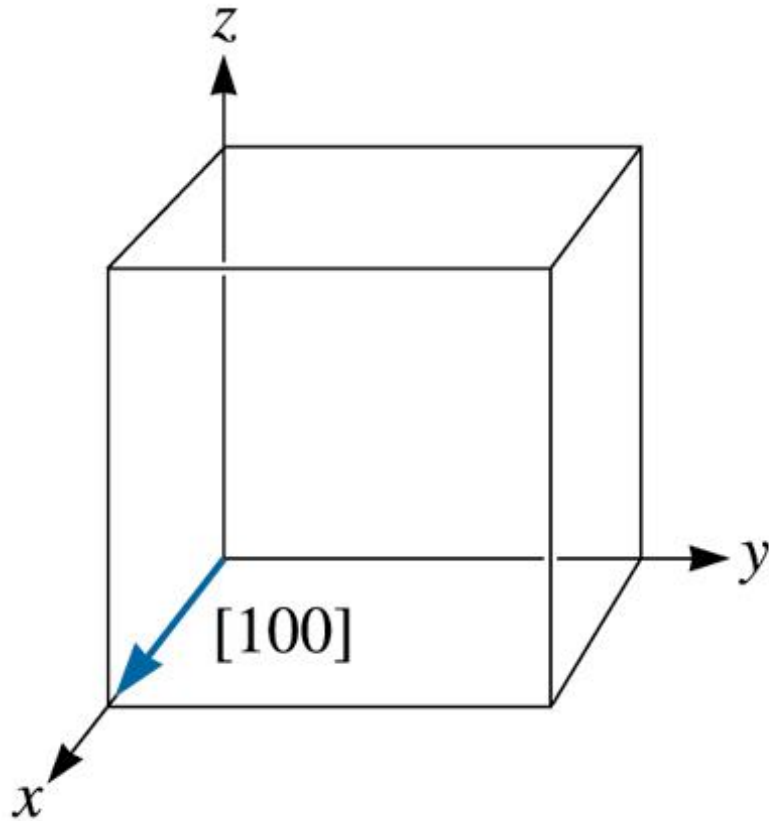
Kübik Birim Hücrede Yönler

Atomlar arası uzaklıkları aynı olan yönlerin kristalçizisel olarak eşit olduğu söylenir. Örneğin, aşağıdaki küp kenar yönleri kristalçizisel olarak eşit yönlerdir:

$$[100], [010], [001], [0\bar{1}0], [00\bar{1}], [\bar{1}00] \equiv \langle 100 \rangle$$

Eşit yönler bir *aile* veya *biçim işareti* ile belirtilir. $\langle 100 \rangle$ işareti küp kenar yönlerinin hepsini birlikte belirtir. Diğer biçim yönleri küpün hacimsel köşegenleri $\langle 111 \rangle$ ve küpün yüzey köşegenleri $\langle 110 \rangle$ 'dır.

Kübik Birim Hücrede Kristalografik Yönlerin Eş Değerliliği



Kübik Birim Hücrede Kristallografik Yönlerin Eş Değerliliği

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

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

Kübik Birim Hücrede Yönler

Örnek Problem 3.4

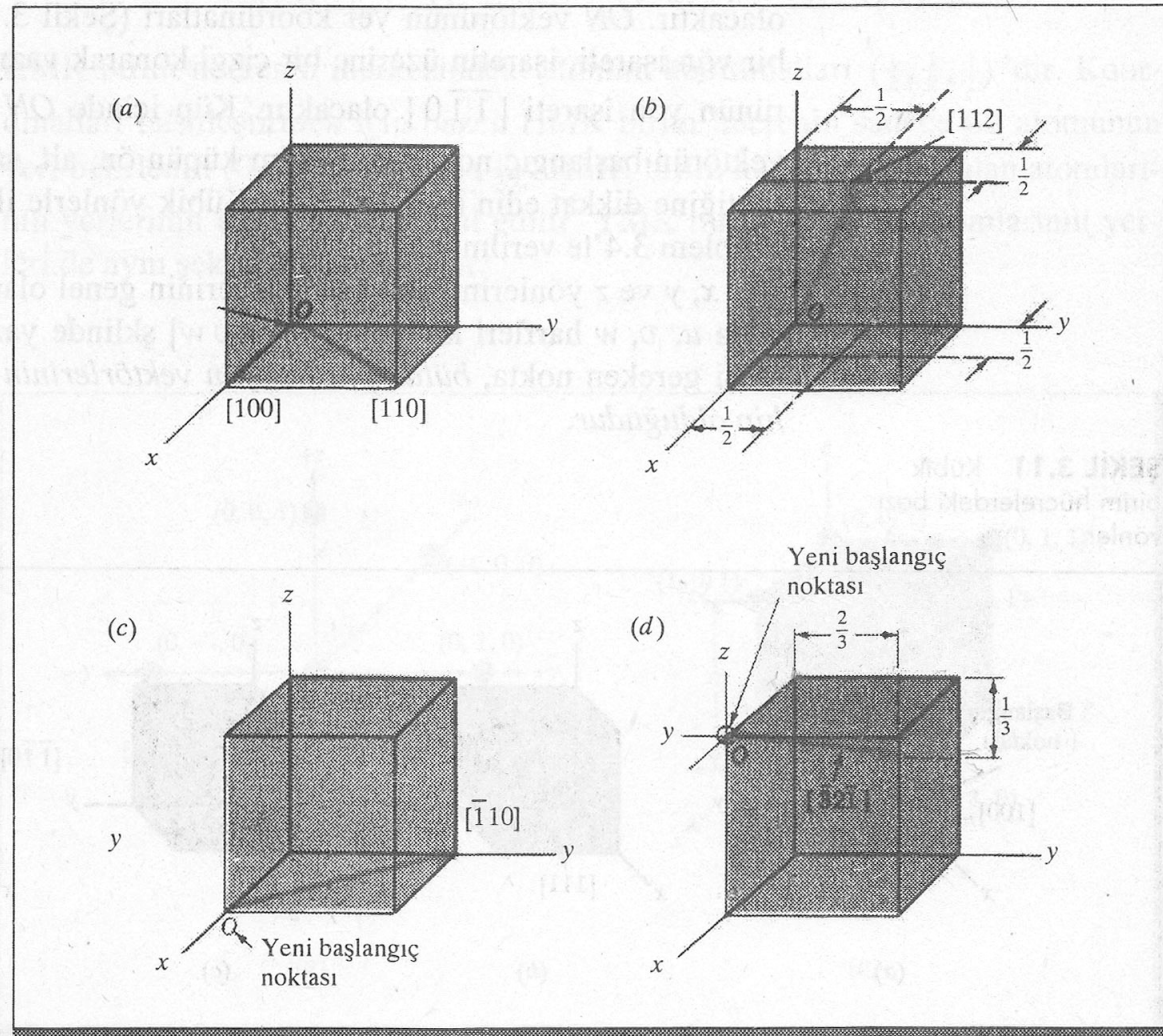
Kübik birim hücrelerde aşağıdaki yön vektörlerini çizin:

(a) $[100]$, $[110]$ (b) $[112]$ (c) $[\bar{1}10]$ (d) $[\bar{3}2\bar{1}]$

Çözüm:

(a) $[100]$ yönündeki yer koordinatları $(1, 0, 0)$ (Şekil 3.12a), $[110]$ yönündeki yer koordinatları ise $(1, 1, 0)$ (Şekil 3.12a) olacaktır.

Kübik Birim Hücrede Yönler



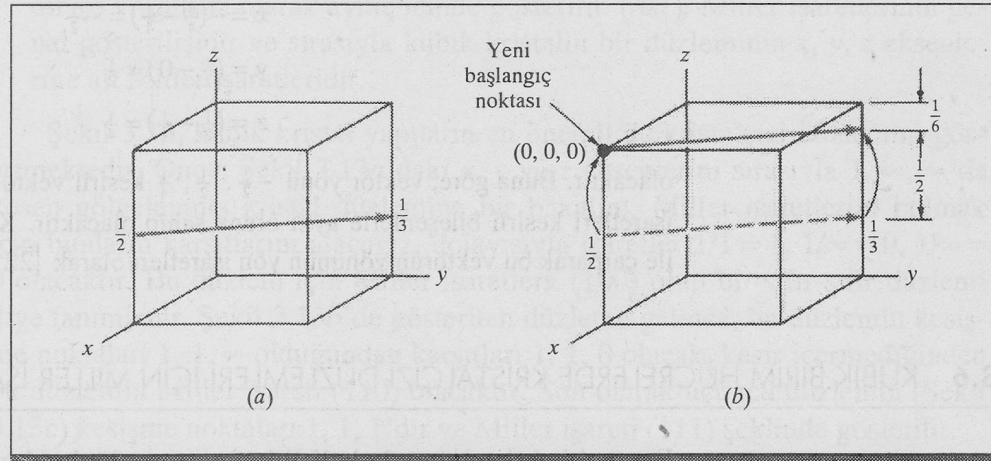
Kübik Birim Hücrede Yönler

- (b) $[112]$ yönünün yer koordinatları, birim küpün içinde yer almaları için, yön işaretlerini 2'ye bölerek elde edilir (Şekil 3.12b).
- (c) $[110]$ yönünün yer koordinatları $(-1, 1, 0)$ olacaktır (Şekil 3.12c). Yön vektörünün başlangıç noktasının küpün ön tarafındaki alt sol köşeye taşınması gerektiğine dikkat edin.
- (d) $[\bar{3}2\bar{1}]$ yönünün yer koordinatları önce bütün işaretler en büyük işaret olan 3'e bölünerek elde edilir. Bu işlem, $[\bar{3}2\bar{1}]$ yönünün çıkış noktasının koordinatları olan $-1, \frac{2}{3}, -\frac{1}{3}$ değerlerini verecektir (Şekil 3.12d).

Kübik Birim Hücrede Yönler

Örnek Problem 3.5

Şekil ÖP 3.5a'da gösterilen kübik yönlerin yön işaretlerini belirleyin.



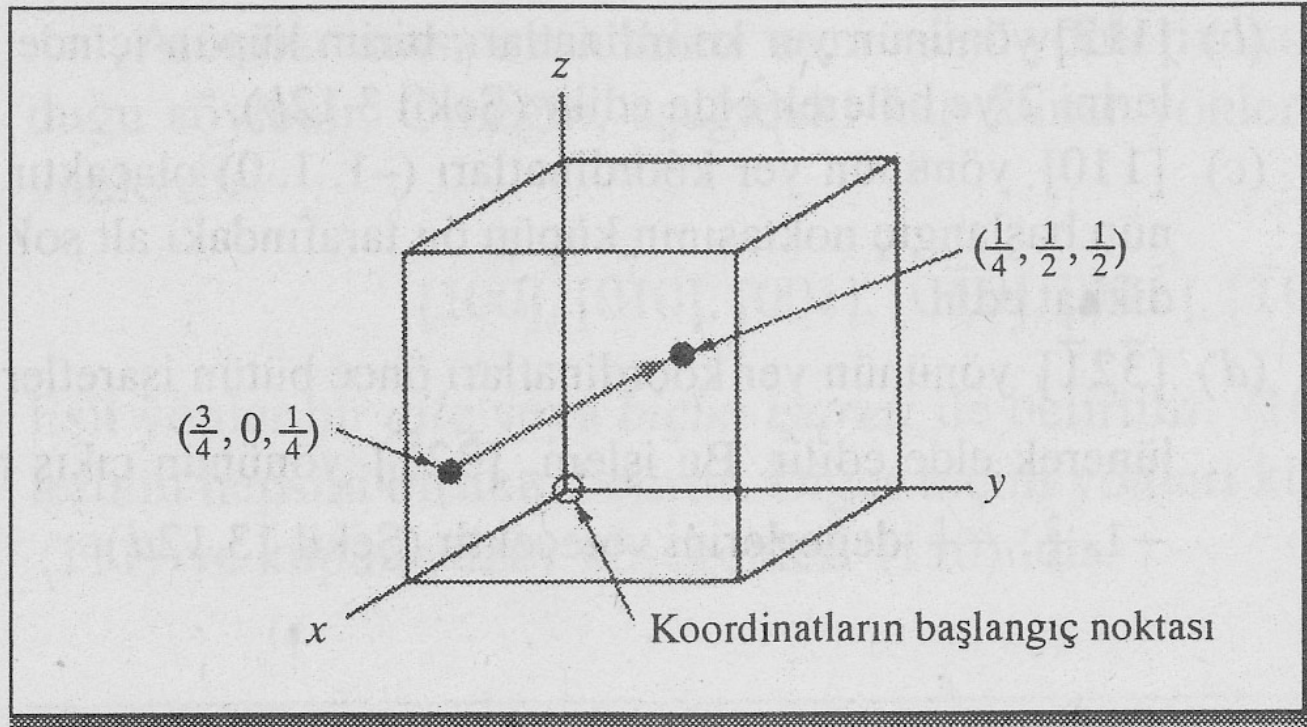
Çözüm:

Paralel yönler aynı yön işaretlerine sahiptir, dolayısıyla yön vektörünü, paralel olarak ve küp içinde kalmak koşuluyla, kuyruğu en yakın köşeye değinceye kadar hareket ettiririz. Bu durumda üst sol ön köşe yön vektörünün yeni başlangıç noktası olur (Şekil ÖP3.5b). Yön vektörünün küpü terk ettiği noktada yön koordinatlarını buluruz. Bunlar $x = -1$, $y = +1$, $z = -\frac{1}{6}$ 'dır. Buna göre birim küpü terk ettiği noktada yön koordinatları $(-1, +1, -\frac{1}{6})$ olacaktır. Bu yön için yön işaretleri ise kesir yok edilerek $6 \times (-1, +1, -\frac{1}{6}) = [6\bar{6}1]$ olarak bulunacaktır.

Kübik Birim Hücrede Yönler

Örnek Problem 3.6

$(\frac{3}{4}, 0, \frac{1}{4})$ ve $(\frac{1}{4}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$ yer koordinatları arasındaki küp yönünün yön işaretlerini belirtin.



Kübik Birim Hücrede Yönler

Çözüm:

Önce Şekil ÖP 3.6'da gösterildiği gibi birim küpte yön vektörünün başlangıç ve terketme noktalarını belirleriz. Bu yön için kesirli vektör bileşenleri

$$x = -\left(\frac{3}{4} - \frac{1}{4}\right) = -\frac{1}{2}$$

$$y = \left(\frac{1}{2} - 0\right) = \frac{1}{2}$$

$$z = \left(\frac{1}{2} - \frac{1}{4}\right) = \frac{1}{4}$$

olacaktır. Buna göre, vektör yönü $-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{4}$ kesirli vektör bileşenlerine sahiptir. Yön işaretleri kesirli bileşenlerle aynı orana sahip olacaktır. Kesirli vektör bileşenlerini 4 ile çarparak bu vektörün yönünün yön işaretleri olarak $[\bar{2}21]$ buluruz.

Kübik Birim Hücrelerde Kristal Düzlemleri için Miller İşaretleri

- Bazen kristal yapıda belirli kafes atom düzlemelerini veya kristal kafesinde bir grup düzlemi belirtmek gerekebilir,
- Kübik kristal yapılarda kristal düzlemlerini göstermek için Miller işaret düzeni kullanılır.

Kübik Birim Hücrelerde Kristal Düzlemleri için Miller İşaretleri

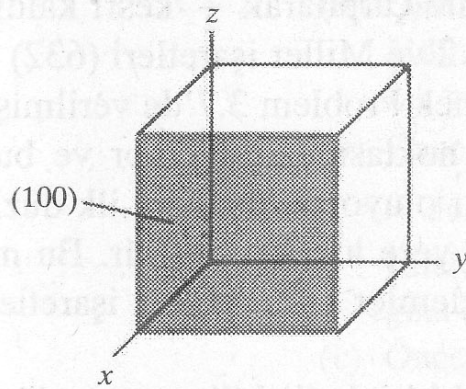
- Bir kristal düzleminin Miller işareti, düzlemin, küpün birim hücresinin paralel olmayan x, y ve z kristal çizgi eksenlerini kestiği kesirli kesişme noktalarının kesirler tam sayıya çevrilerek bulunan tam sayı karşıtlarıdır,
- Birim hücrenin küp kenarları birim uzunlukları belirler ve kafes düzlemlerinin kesişme noktaları bu birim uzunluklar cinsinden belirlenir,

Kübik Birim Hücrelerde Kristal Düzlemleri için Miller İşaretleri

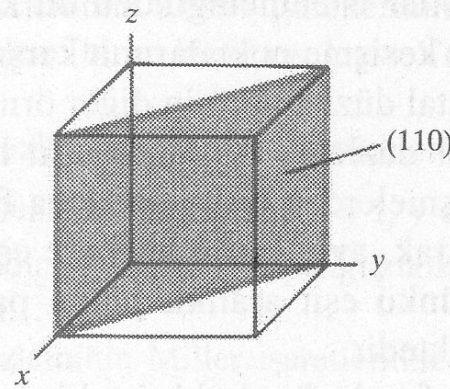
Bir kübik kristalin düzleminin Miller işaretini belirlemenin yöntemi aşağıdaki gibidir:

1. $(0, 0, 0)$ 'daki başlangıç noktasından geçmeyen bir düzlem seçin.
2. Düzlemin, birim küpün x, y, z kristalçizi eksenlerini kestiği noktaları bulun. Kesişmeler kesirli olabilir.
3. Bu kesişme sayılarının karşıtlarını bulun.
4. Kesirleri tamsayıya çevirin ve kesişme sayılarıyla aynı oranda en küçük tamsayıları bulun. Bu tamsayılar bir kristalçizi düzleminin Miller işaretleridir ve virgülsüz olarak ayraç içinde gösterilir. (hkl) , Miller işaretlerinin genel gösterilişidir ve sırasıyla kübik kristalin bir düzleminin x, y, z eksenlerine ait Miller işaretleridir.

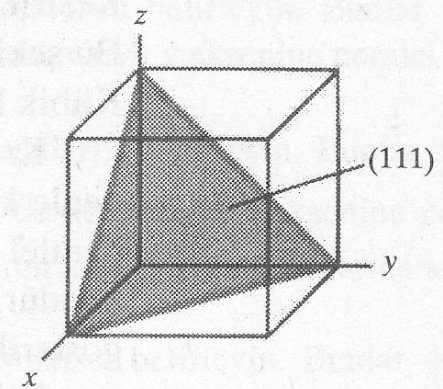
Kübik Birim Hücrelerde Kristal Düzlemleri için Miller İşaretleri



(a)



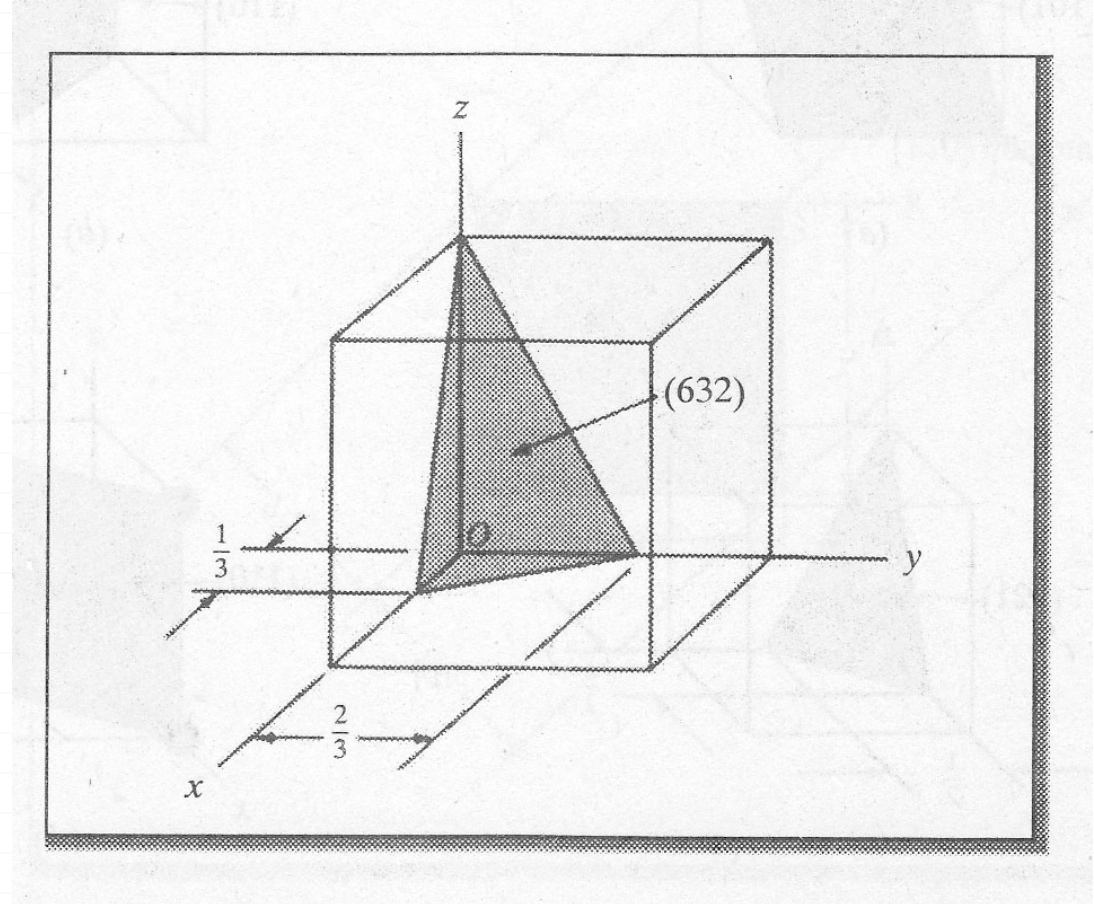
(b)



(c)

Kübik Birim Hücrelerde Kristal Düzlemleri için Miller İşaretleri

**Kesirli
kesişmeye
sahip kübik
kristal düzlemi**



Kübik Birim Hücrelerde Kristal Düzlemleri için Miller İşaretleri

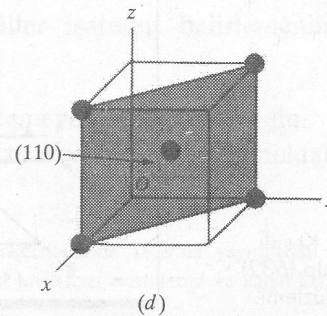
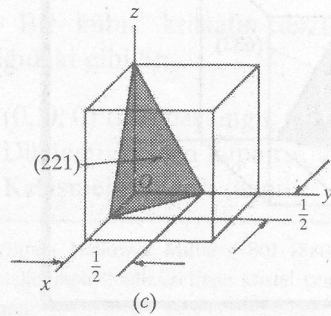
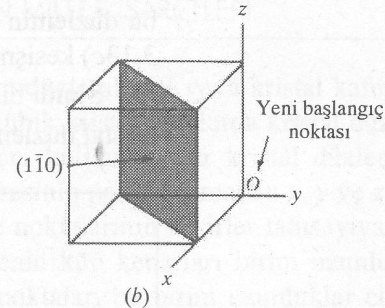
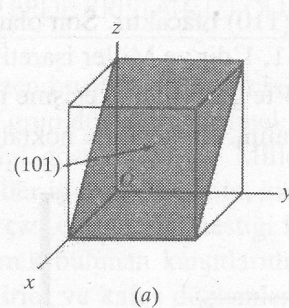
Örnek Problem 3.7

Kübik birim hücrede aşağıdaki kristalçizi düzlemlerini çizin:

(a) (101) (b) ($1\bar{1}0$) (c) (221)

(d) Bir BBC atom yeri birim hücreinde bir (110) düzlemi çizin ve merkezleri bu düzlem tarafından kesilen atomların yer koordinatlarını belirleyin.

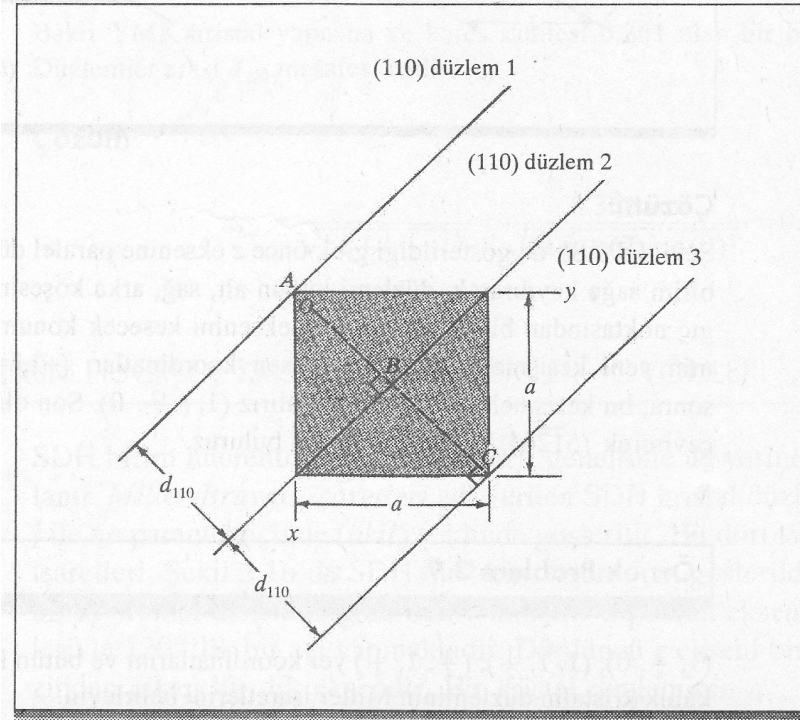
Çözüm:



Kübik Birim Hücrelerde Kristal Düzlemleri için Miller İşaretleri

- (a) Önce, (101) düzleminin Miller işaretlerinin karşılıklarını belirleyin. Bunlar 1, ∞ , 1'dir. (101) düzlemi birim küpü $x = 1$, $z = 1$ 'de keserek ve y eksenine paralel kalarak geçmelidir.
- (b) Önce, $(1\bar{1}0)$ düzleminin Miller işaretlerinin karşılıklarını belirleyin. Bunlar 1, -1, ∞ 'dur. $(1\bar{1}0)$ düzlemi birim küpü $x = 1$, $y = -1$ 'de keserek ve z eksenine paralel kalarak geçmelidir. Eksenlerin başlangıç noktasının küpün sağ alt kenarına kaydığına dikkat edin.
- (c) Önce, (221) düzleminin Miller işaretlerinin karşılıklarını belirleyin. Bunlar $\frac{1}{2}$, $\frac{1}{2}$, 1'dir. (221) düzlemi birim küpü $x = \frac{1}{2}$, $y = \frac{1}{2}$ ve $z = 1$ 'de keserek geçmelidir.
- (d) Merkezleri (110) düzlemi tarafından kesilen atomların yerleri (1, 0, 0), (0, 1, 0), (1, 0, 1), (0, 1, 1) ve $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$ 'dir. Bu yerler içi dolu dairelerle belirtilir.

Kübik Birim Hücrelerde Kristal Düzlemleri için Miller İşaretleri



Kübik birim hücrenin (110) düzlemleri arasındaki uzaklığın (d_{110}) üstten görünüşü.

Kübik Birim Hücrelerde Kristal Düzlemleri için Miller İşaretleri

Basit bir geometriyle, kübik kristaller için aşağıdaki bağıntının varlığı gösterilebilir:

$$d_{hkl} = \frac{a}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}} \quad (3.4)$$

Burada, d_{hkl} = Miller işaretleri h , k ve l olan, birbirine paralel en yakın iki düzlem arasındaki düzlemler arası uzaklık

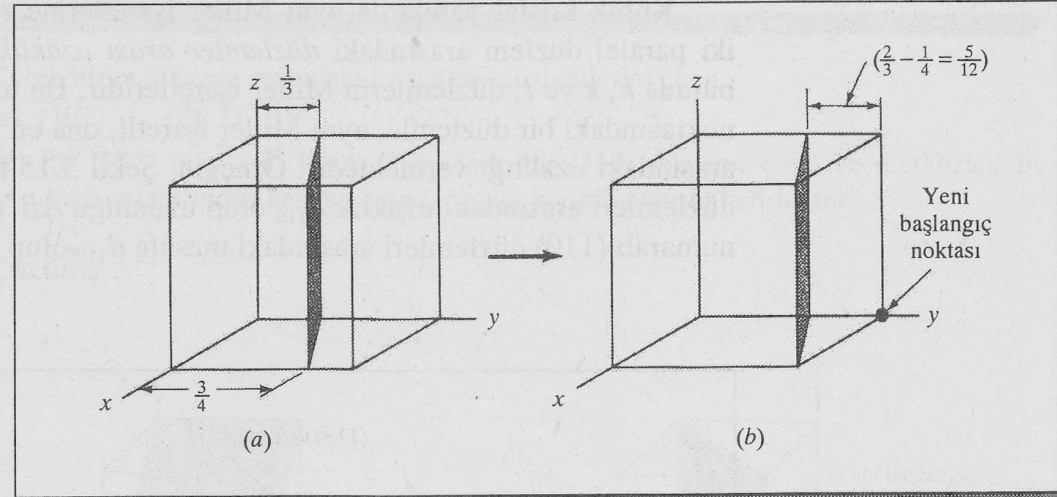
a = kafes sabitesi (birim küpün kenarı)

h, k, l = ilgili küp düzlemlerinin Miller işaretleridir.

Kübik Birim Hücrelerde Kristal Düzlemleri için Miller İşaretleri

Örnek Problem 3.8

Şekil ÖP3.8a'da gösterilen kübik kristal düzlemlerinin Miller işaretlerini belirleyin.



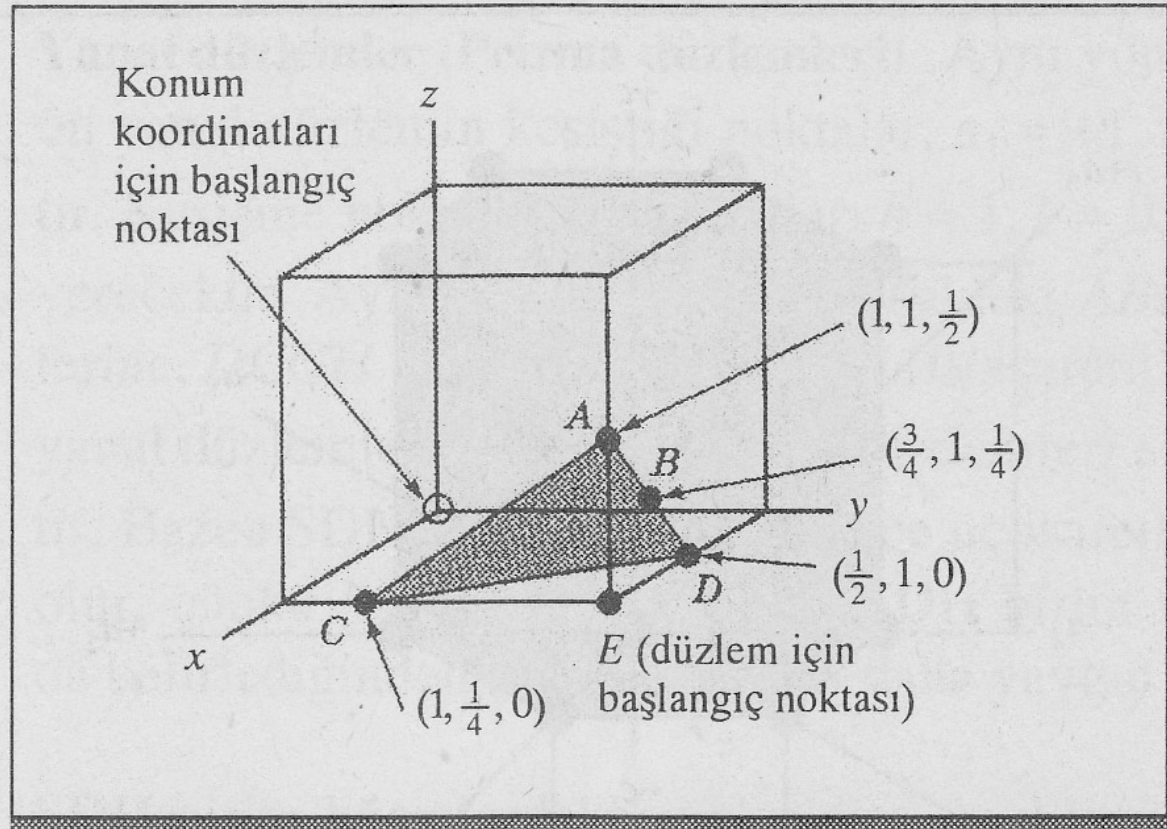
Çözüm:

Şekil ÖP3.8b'de gösterildiği gibi, önce z eksenine paralel düzlemi y eksenini boyunca $\frac{1}{4}$ birim sağa kaydırarak, düzlemi küpün alt, sağ, arka köşesinde belirlenen yeni başlangıç noktasından birim uzaklıkta, x eksenini kesecek konuma getirin. Taşınmış düzlemin yeni kesişme noktalarının eksen koordinatları $(+1, -\frac{5}{12}, \infty)$ olacaktır. Bundan sonra, bu kesişmelerin karşılarını alırsanız $(1, -\frac{12}{5}, 0)$. Son olarak $\frac{12}{5}$ kesrini tam sayıya çevirerek $(5\bar{1}20)$ Miller işaretlerini buluruz.

Kübik Birim Hücrelerde Kristal Düzlemleri için Miller İşaretleri

Örnek Problem 3.9

$(1, \frac{1}{4}, 0)$, $(1, 1, \frac{1}{2})$, $(\frac{3}{4}, 1, \frac{1}{4})$ yer koordinatlarını ve bütün koordinat eksenlerini kesen kübik kristalin düzleminin Miller işaretlerini belirleyin.



Kübik Birim Hücrelerde Kristal Düzlemleri için Miller İşaretleri

Çözüm:

Önce Şekil ÖP3.9 A, B ve C 'de gösterilen üç yer koordinatını saptarız. Sonra, A ile B 'yi birleştirerek bulunan AB 'yi D 'ye, daha sonra A 'yı C 'ye uzatırız. Son olarak, C 'yi D ile birleştirerek ACD düzlemini tamamlarız. Küp içindeki bu düzlemin tanımlanması için başlangıç noktası olarak E seçilebilir ki, bu durumda ACD düzleminin eksenel kesişme noktaları $x = -\frac{1}{2}$, $y = -\frac{3}{4}$, $z = \frac{1}{2}$ olacaktır. Eksenel kesişmelerin karşıtları -2 , $-\frac{4}{3}$ ve 2 'dir. Kesişmeleri 3 ile çarparak kesri kaldırır ve bu düzlemin Miller işaretleri olarak $(\bar{6}\bar{4}6)$ buluruz.

Kübik Birim Hücrelerde Kristal Düzlemleri için Miller İşaretleri

Örnek Problem 3.10

Bakır YMK kristal yapısına ve kafes sabitesi 0.361 olan bir birim hücreye sahiptir. Düzlemler arası d_{220} mesafesi nedir?

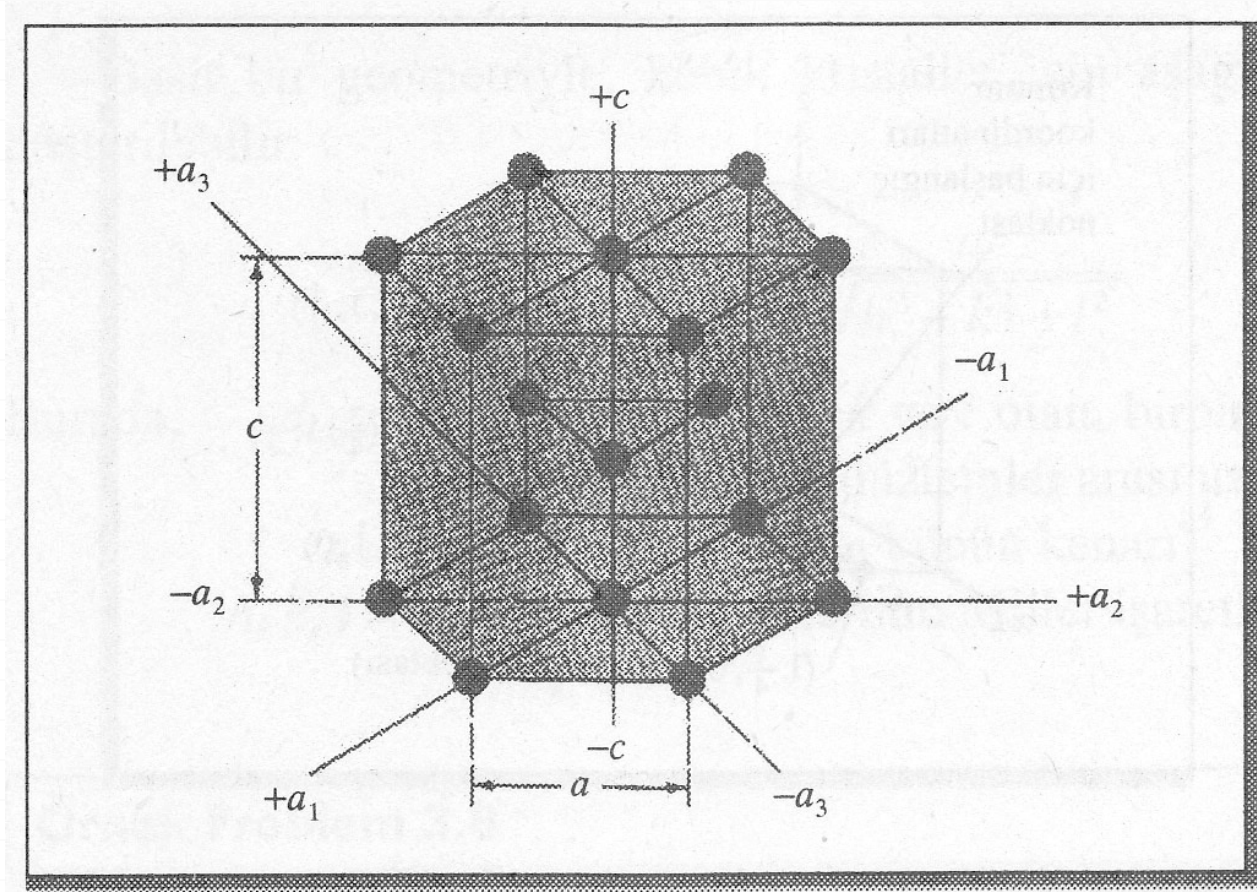
Çözüm:

$$d_{hkl} = \frac{a}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}} = \frac{0.361 \text{ nm}}{\sqrt{(2)^2 + (2)^2 + (0)^2}} = 0.128 \text{ nm} \blacktriangleleft$$

Hekzagonal Birim Hücrede Kristal Düzlemleri ve Yönleri

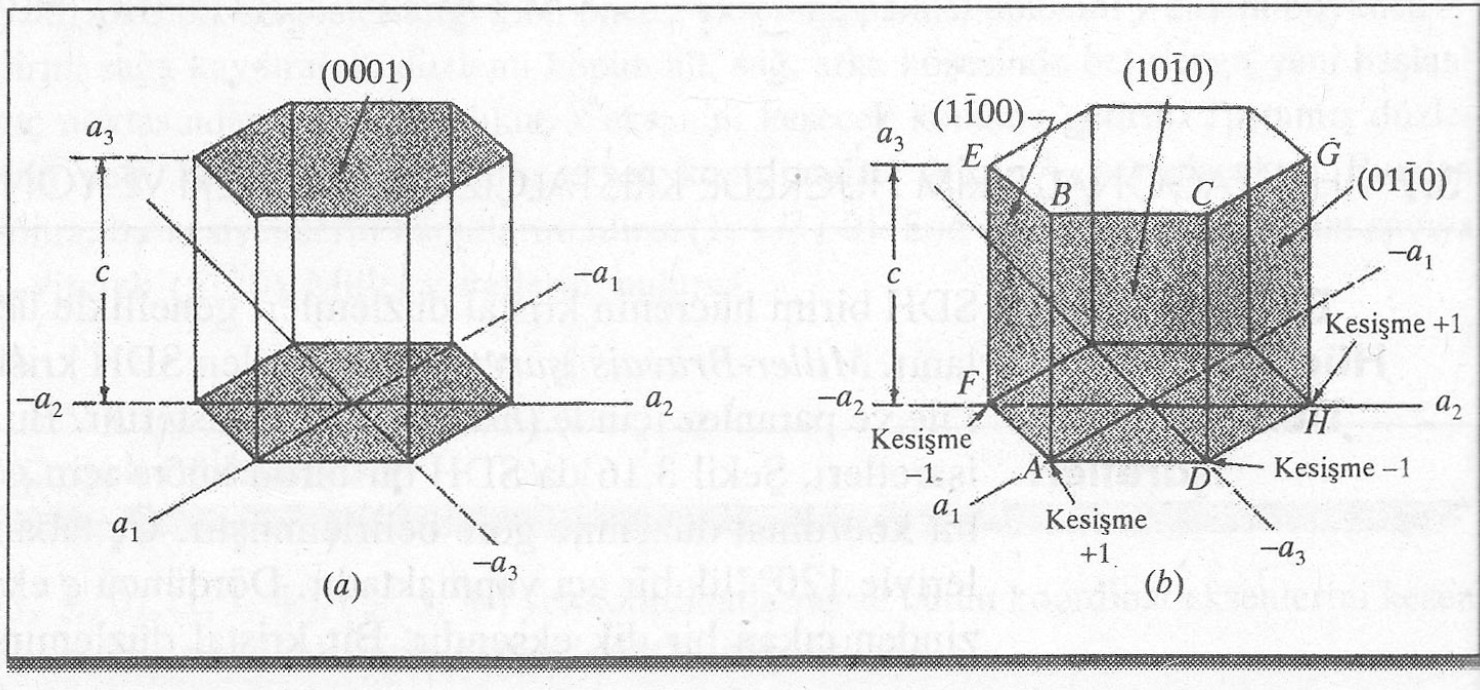
SDH birim hücrenin kristal düzlemleri genellikle üç yerine dört işaretle tanımlanır. *Miller-Bravais işaretleri* adı verilen SDH kristal düzlemi işaretleri h, k, i, l ile ve parantez içinde $(hkil)$ şeklinde gösterilir. Bu dört tam sayılı hekzagonal işaretleri, Şekil 3.16'da SDH bir birim hücre için gösterildiği gibi dört eksenli bir koordinat düzenine göre belirlenmiştir. Üç taban eksen a_1, a_2 ve a_3 birbirleriyle 120° 'lik bir açı yapmaktadır. Dördüncü c eksen birim hücrenin merkezinden çıkan bir dik eksenidir. Bir kristal düzleminin a_1, a_2 ve a_3 eksenlerini

Hekzagonal Birim Hücrede Kristal Düzlemleri ve Yönleri



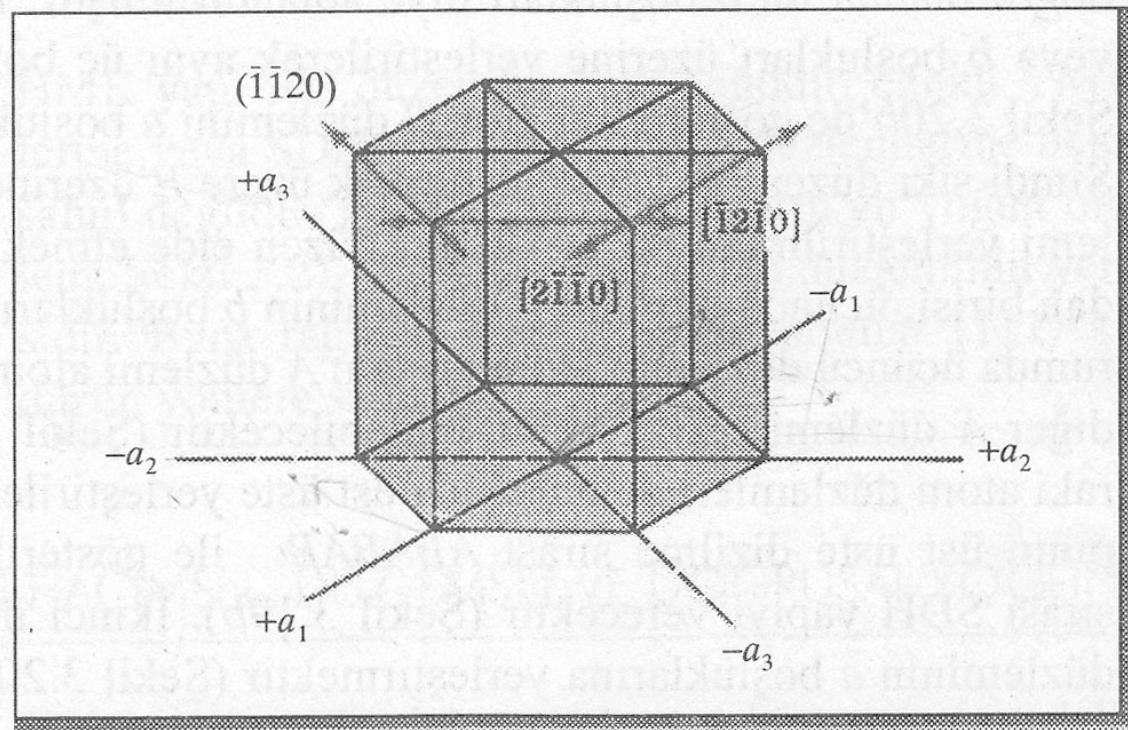
SPH birim hücrenin kristal yapısında dört koordinat eksenini:
 a_1 , a_2 , a_3 ve c

Hekzagonal Birim Hücrede Kristal Düzlemleri ve Yönleri



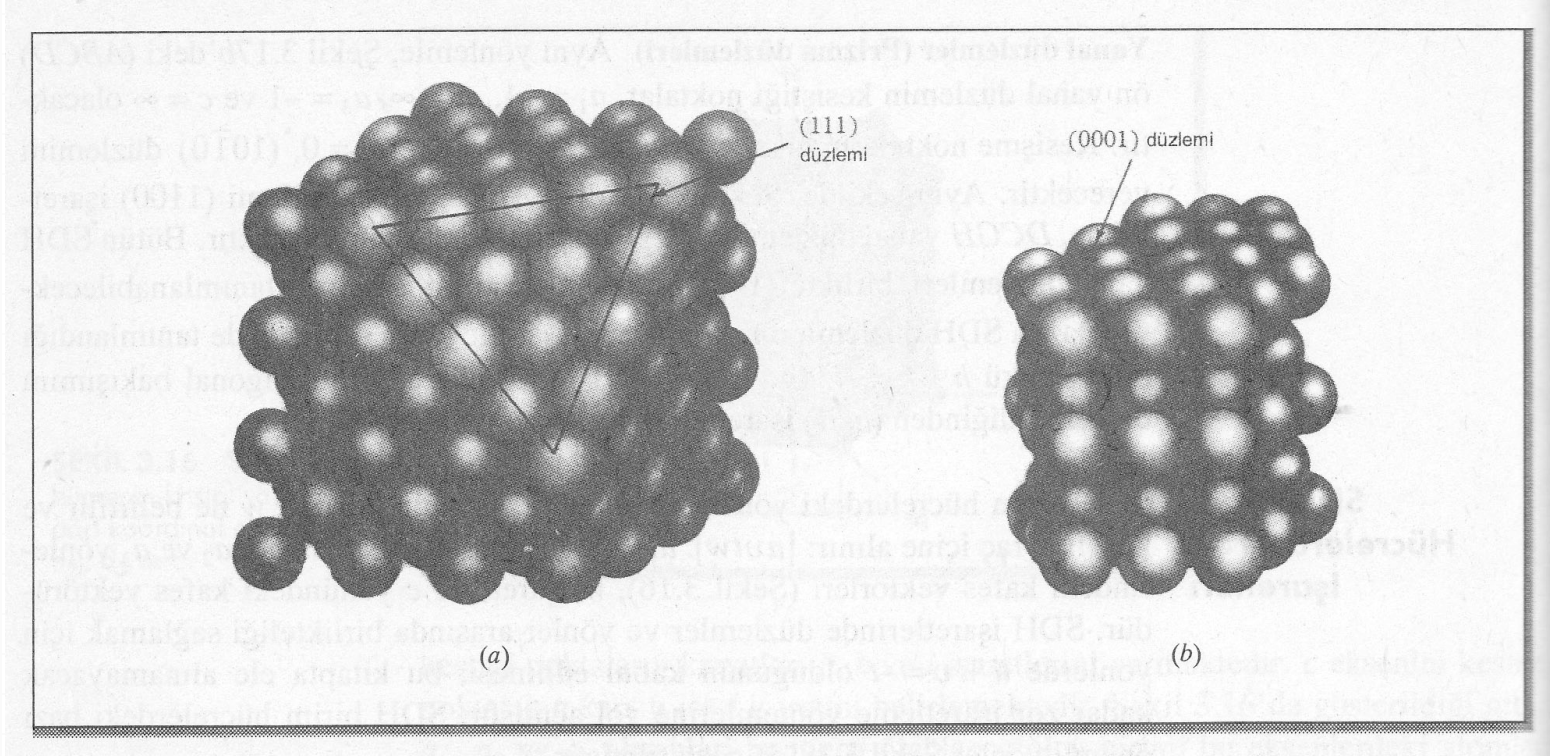
**Hekzagonal kristal düzlemlerinin
Miller-Bravais işaretleri**
a) taban düzlemleri
b) yanal düzlemler

YMK, SPH ve HMK Kristal Yapıları



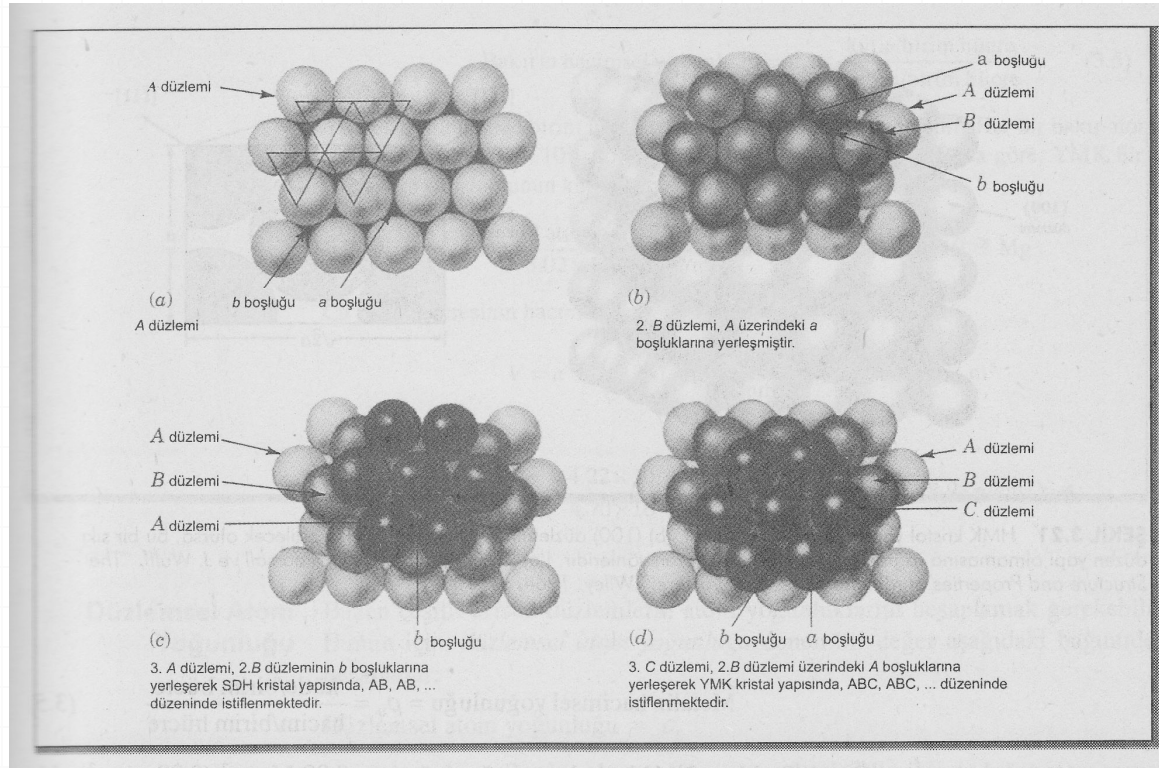
SPH birim hücredeki bazı önemli yönler

YMK, SPH ve HMK Kristal Yapıları



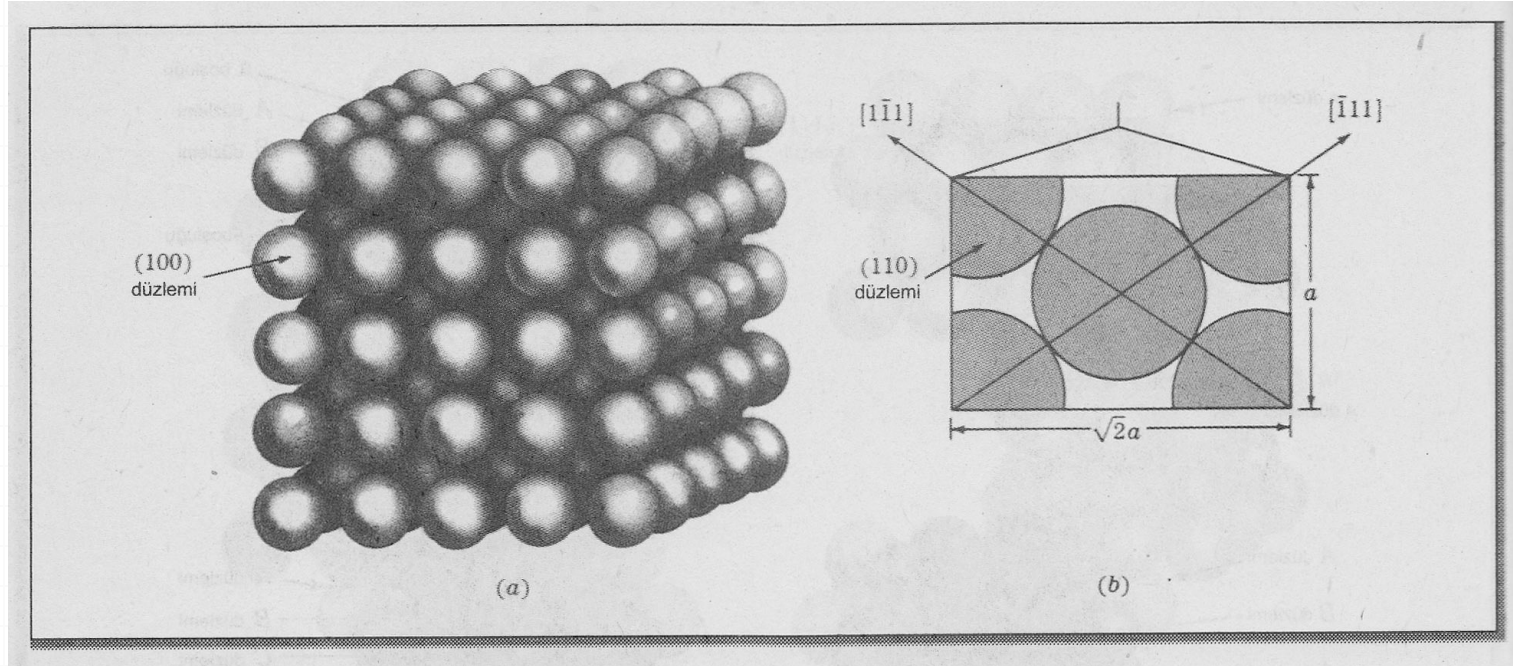
**YMK kristal yapısının sıkı düzen (111) düzlemlerinin,
b) SPH kristal yapısının sıkı düzen (0001) düzlemlerinin
kıyaslanması**

YMK, SPH ve HMK Kristal Yapıları



Sıkı düzen atom düzlemlerinin üst üste gelme sırasının değişmesiyle oluşan SPH ve YMK kristal yapılar. a) Atomların arasında a ve b boşluklarının yer aldığı A düzlemi. b) A düzleminin a boşluklarına yerleşmiş b düzlemi. c) B düzleminin b boşluklarına yerleşmiş üçüncü düzlem bir diğer A düzlemini meydana getirerek SPH kristal yapısını oluşturur. d) Üçüncü düzlem bu düzleminin a boşluklarına yerleşirken yeni bir C düzlemi meydana getirmekte ve bu defa YMK kristal yapısını oluşturmaktadır.

Hacim Merkezli Kübik Kristal Yapı



HMK kristal yapısı. A) (100) düzlemi, b) (100) düzleminde bir kesit. Dikkat edilecek olursa, bu bir sıkı düzen yapı olmamasına rağmen köşegenler sıkı düzen yönleridir.

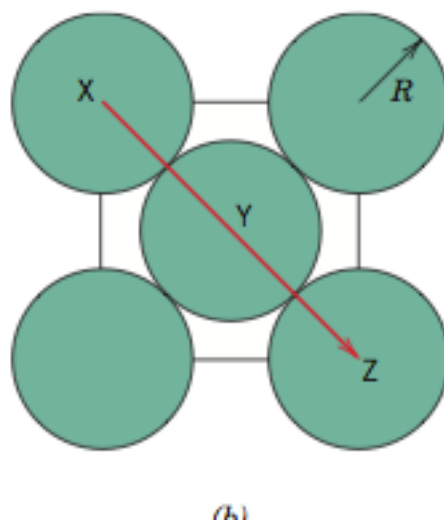
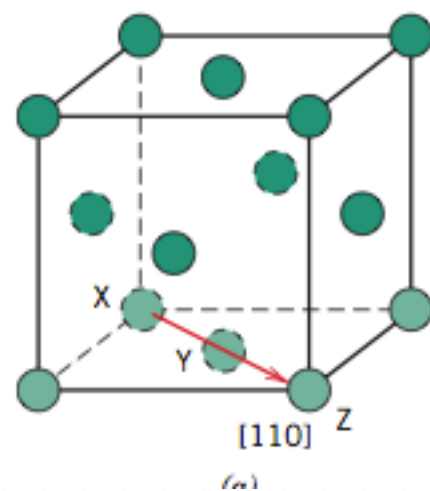


Figure 3.12 (a) Reduced-sphere FCC unit cell with the $[110]$ direction indicated. (b) The bottom face-plane of the FCC unit cell in (a) on which is shown the atomic spacing in the $[110]$ direction, through atoms labeled X, Y, and Z.

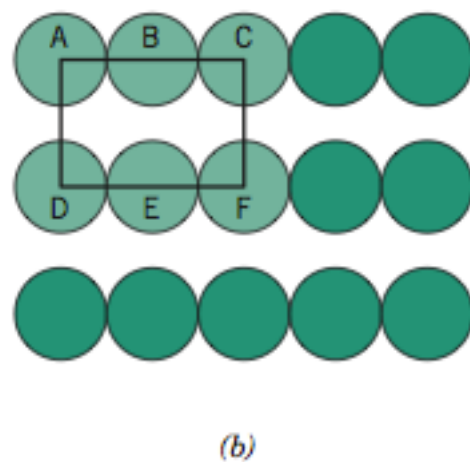
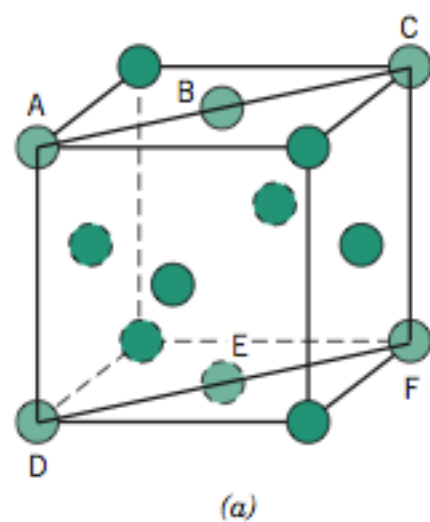
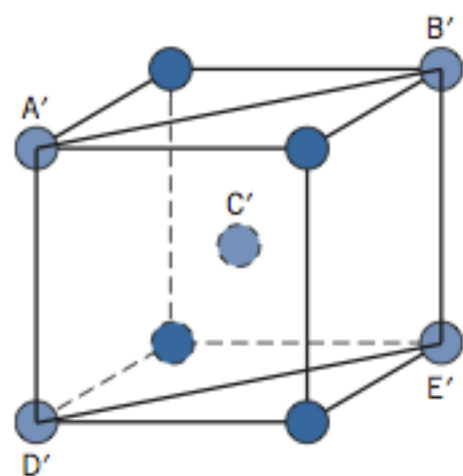
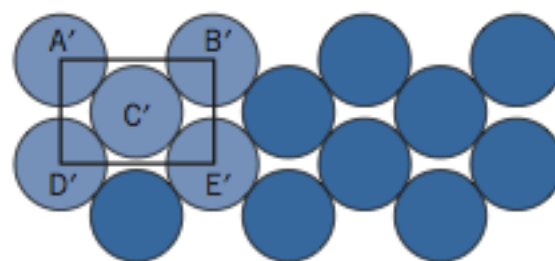


Figure 3.10 (a) Reduced-sphere FCC unit cell with (110) plane. (b) Atomic packing of an FCC (110) plane. Corresponding atom positions from (a) are indicated.



(a)



(b)

Figure 3.11

(a) Reduced-sphere BCC unit cell with (110) plane.
 (b) Atomic packing of a BCC (110) plane. Corresponding atom positions from (a) are indicated.

Yoğunluk Hesaplamaları

❖ *Hacimsel Yoğunluk*

Metalin hacimsel yoğ.= $\frac{\text{Kütle/birim hacim}}{\text{hacim/birim hacim}}$

❖ *Düzlemsel atom yoğunluğu*

Düzlemsel atom yoğ.= $\frac{\text{Seçilen bir alan tarafından merkezleri kesilen eşdeğer atom sayısı}}{\text{seçilen alan}}$

Doğrusal atom yoğunluğu

Doğrusal at.Yoğ.= $\frac{\text{Belirli bir yönde seçilen uzunlukta bir çizgi tarafından kesilen atom sayısı}}{\text{seçilen çizginin uzunluğu}}$

Çok yapılılık(Polimorfizm)

- Polimorf veya allotropi
- Elementlerin veya bileşiklerin çoğu, farklı sıcaklık ve basınç koşulları altında birden fazla kristal yapıya sahiptir. Bu olaya çok yapılılık denir.
- Fe, Ti ve Co yüksek sıcaklık ve basınçlarda dönüşüm göstermektedir.
 - ✓ α -Fe -273°C-912°C HMK
 - ✓ γ -Fe 912°C-1394°C YMK
 - ✓ δ -Fe 1394°C-1539°C HMK

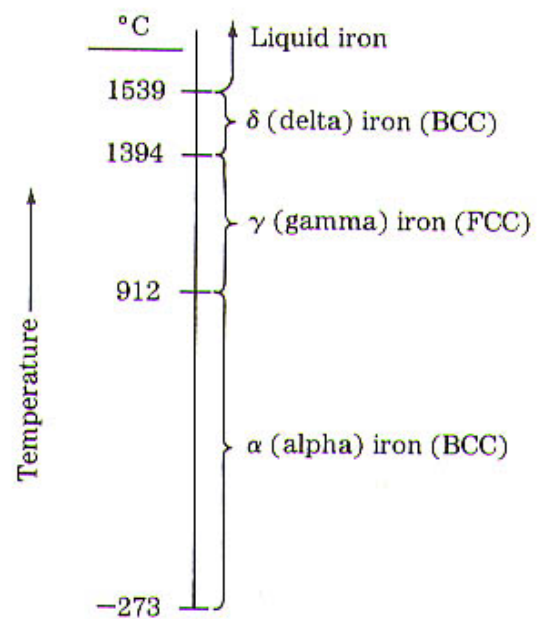


FIGURE 3.24 Allotropic crystalline forms of iron over temperature ranges at atmospheric pressure.

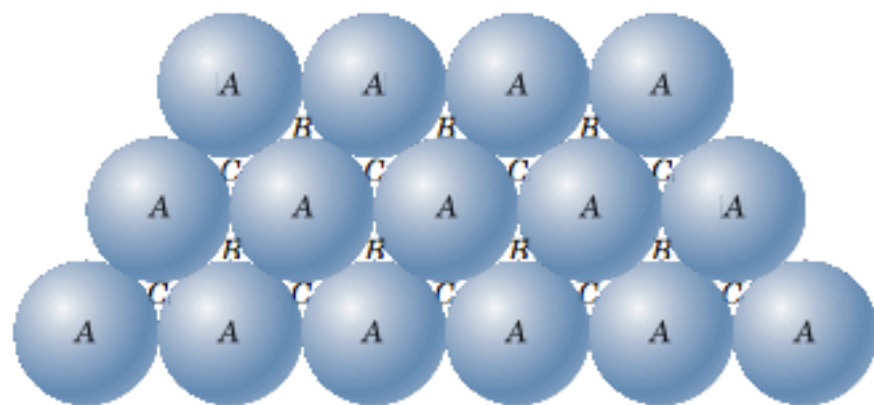
Örnek 3.14

YMK yapıdan HMK yapıya çok yapılı dönüşüm yapan bir saf metalde meydana gelen kuramsal hacim değişimini hesaplayınız. Sert küre atom modelini ve atomsal hacimde dönüşümden önce ve sonra bir değişim olmadığını kabul edin.

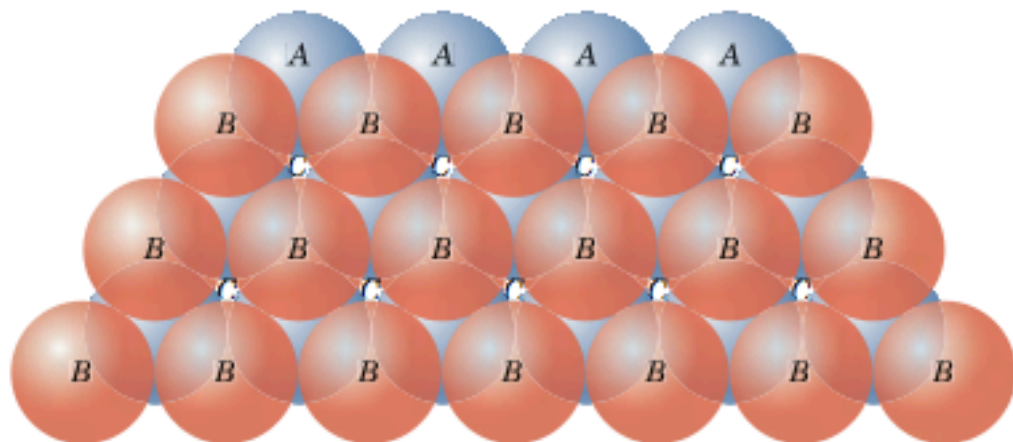
$$V_{\text{YMK}} = \frac{a^3}{4} = \left(\frac{4r}{\sqrt{2}}\right)^3 \times \frac{1}{4} = 5.66R^3 \quad (\text{1birim hücresinde 4 atom var})$$

$$V_{\text{HMK}} = \frac{a^3}{2} = \left(\frac{4r}{\sqrt{3}}\right)^3 \times \frac{1}{2} = 6.16R^3 \quad (\text{1birim hücresinde 2 atom var})$$

$$\Delta V/V_{\text{YMK}} = (V_{\text{YMK}} - V_{\text{HMK}})/V_{\text{YMK}} = (5.66 - 6.16)R^3 / 5.66R^3 * 100 = \% 8.18$$



(a)



(b)

Figure 3.13 (a) A portion of a close-packed plane of atoms; A, B, and C positions are indicated. (b) The AB stacking sequence for close-packed atomic planes. (Adapted from W. G. Moffatt, G. W. Pearsall, and J. Wulff, *The Structure and Properties of Materials*, Vol. I, *Structure*, p. 50. Copyright © 1964 by John Wiley & Sons, New York. Reprinted by permission of John Wiley & Sons, Inc.)

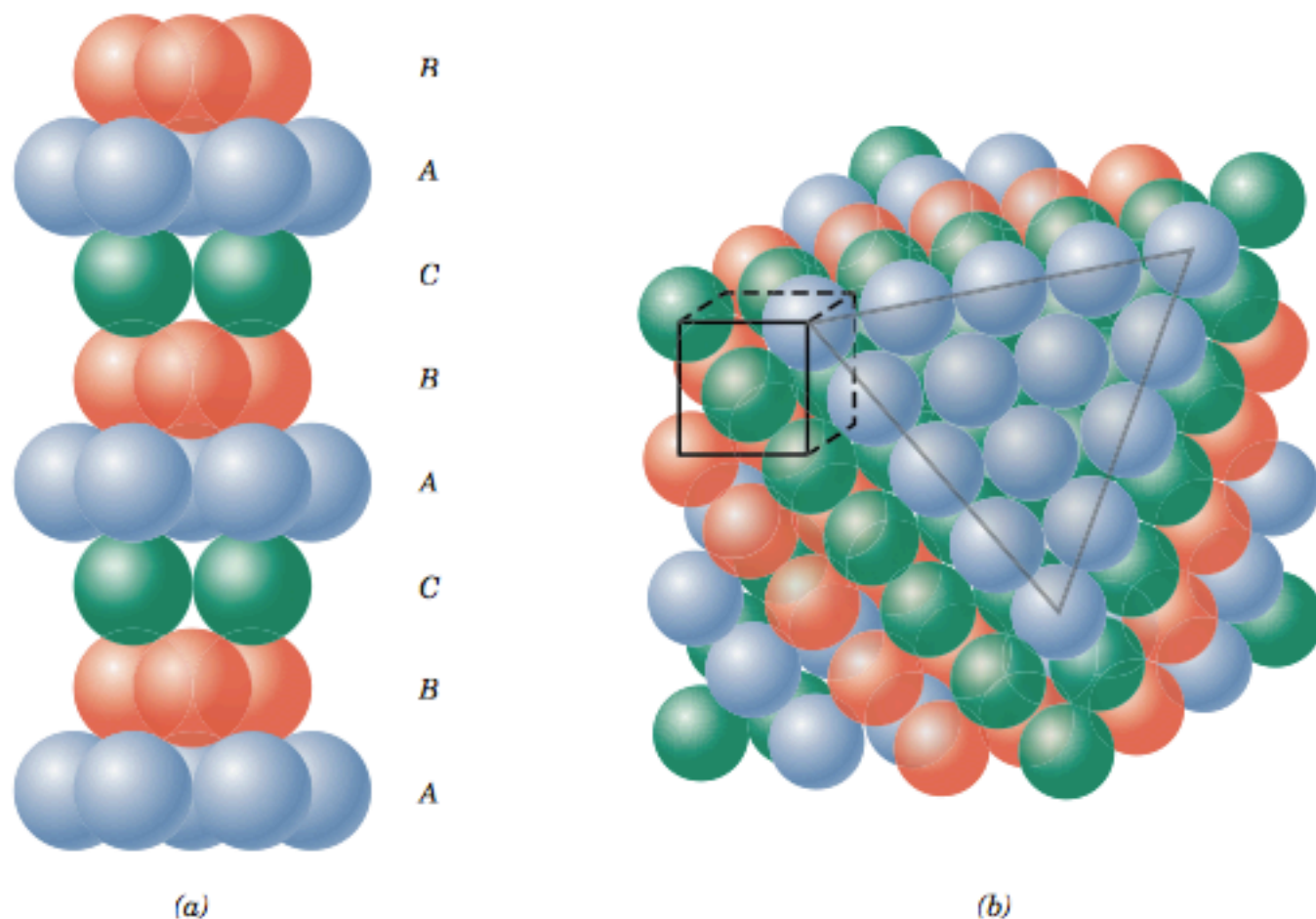


Figure 3.15 (a) Close-packed stacking sequence for face-centered cubic. (b) A corner has been removed to show the relation between the stacking of close-packed planes of atoms and the FCC crystal structure; the heavy triangle outlines a (111) plane. [Figure (b) from W. G. Moffatt, G. W. Pearsall, and J. Wulff, *The Structure and Properties of Materials*, Vol. I, *Structure*, p. 51. Copyright © 1964 by John Wiley & Sons, New York. Reprinted by permission of John Wiley & Sons, Inc.]

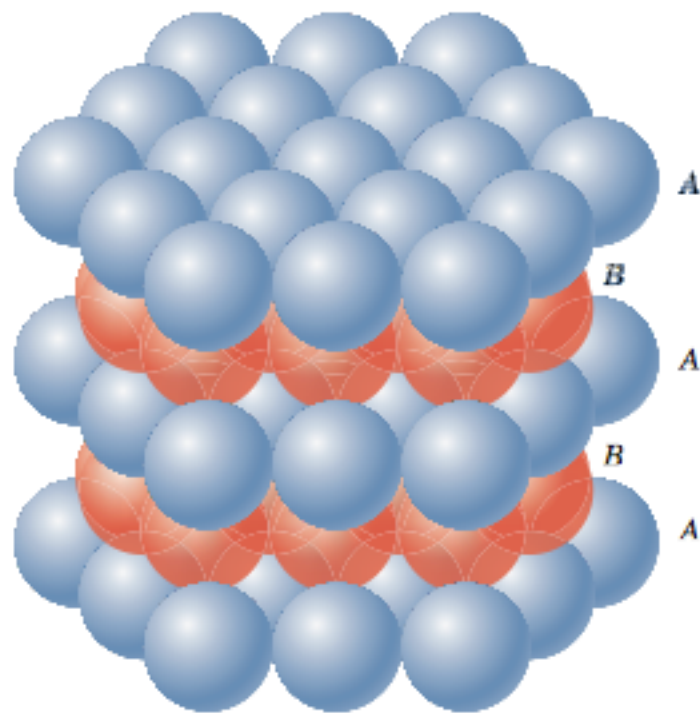
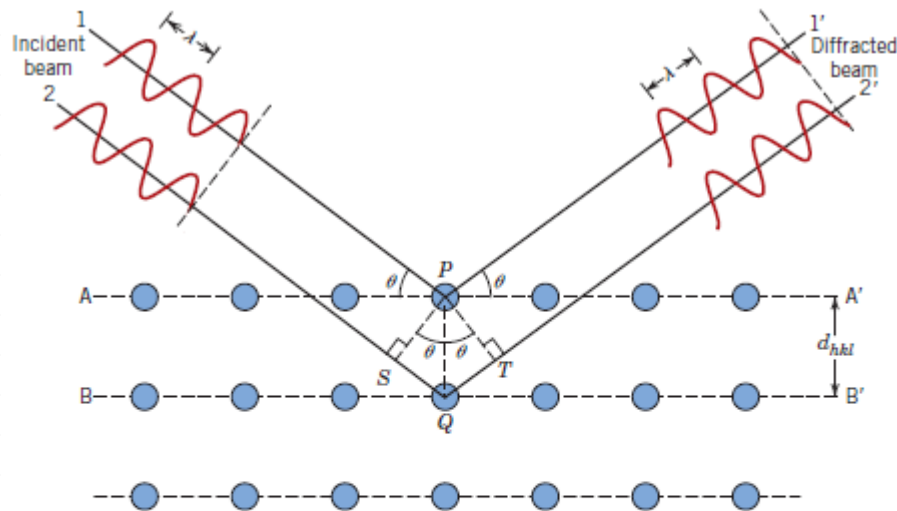


Figure 3.14 Close-packed plane stacking sequence for hexagonal close-packed. (Adapted from W. G. Moffatt, G. W. Pearsall, and J. Wulff, *The Structure and Properties of Materials*, Vol. I, *Structure*, p. 51. Copyright © 1964 by John Wiley & Sons, New York. Reprinted by permission of John Wiley & Sons, Inc.)

X-ışını karakterizasyonu

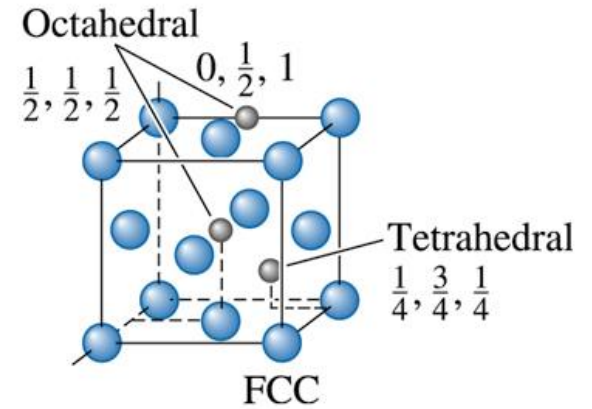
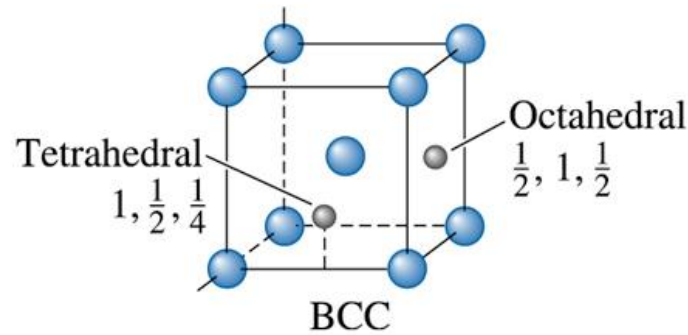
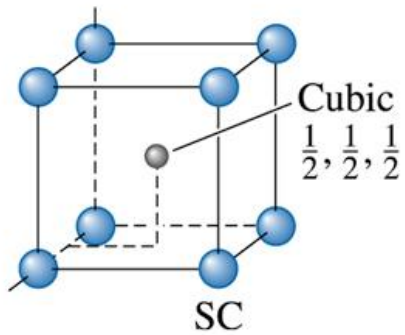


or

$$n\lambda = d_{hkl} \sin \theta + d_{hkl} \sin \theta$$

$$= 2d_{hkl} \sin \theta$$

Arayer Boşluklarının Kübik Birim Hücrede Gösterimi



Katılarda Kusurlar

- Bu bölüme kadar, açıkça ifade edilmese de kristal malzemelerde, atomsal ölçekte mükemmel bir düzenin bulunduğu varsayımı yapılmıştır.
- Ancak gerçekte böyle mükemmel bir kristal yoktur ve bütün kristallerde çeşitli türde çok sayıda kusur bulunur.
- Bu kusurların varlığı, malzemelerin birçok özelliğinde önemli değişiklikler meydana getirmektedir.

Katılarda Kusurlar

- Kristal yapı kusuru kavramı bir veya daha fazla boyutu atom çapı mertebesinde olan kafes düzensizlikleri için kullanılır.
- Bu kusurlar genellikle geometrilerine ya da boyutlarına göre sınıflandırılırlar.
 - ✓ Noktasal (bir ya da iki atom konumu ile ilgili olan)
 - ✓ Çizgisel (bir boyutlu)
 - ✓ Arayüz ya da sınır kusurları (iki boyutlu)

Noktasal Kusurlar

- Bir atomun bulunması gerekirken boş kalan **atomsal boşluk** veya boş kafes noktaları en basit noktasal kusurlardır.
- Atomsal boşluk bütün kristal malzemelerde bulunur ve aslında bu kusurun bulunmadığı bir malzeme üretimi imkansızdır.
- Kristali oluşturan atomlardan biri, normal şartlarda atomların bulunmadığı arayer boşluklarına girebilir. Bu tip atomlara **arayer atomu** denir.

Noktasal Kusurlar

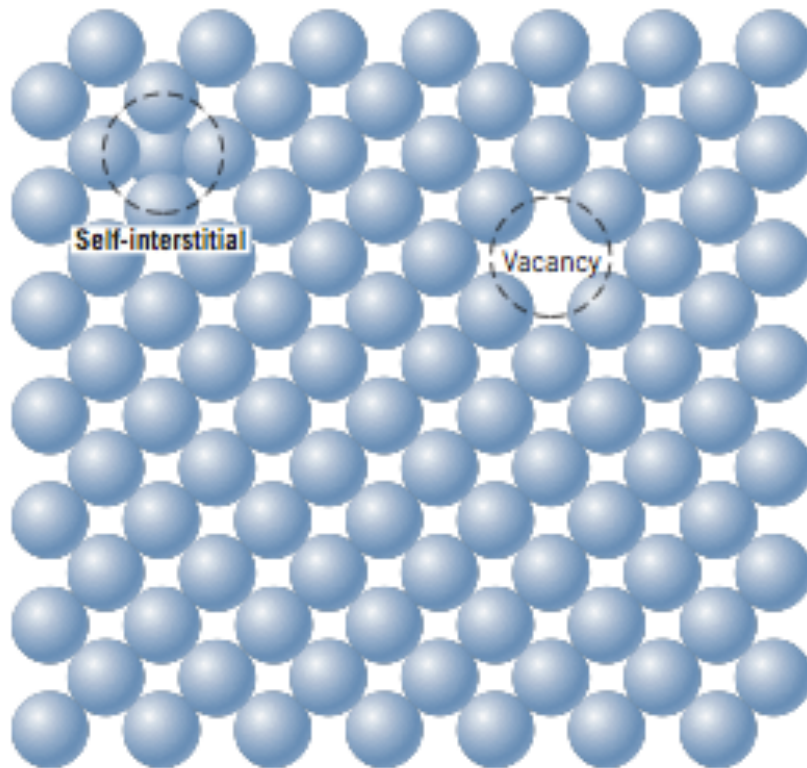
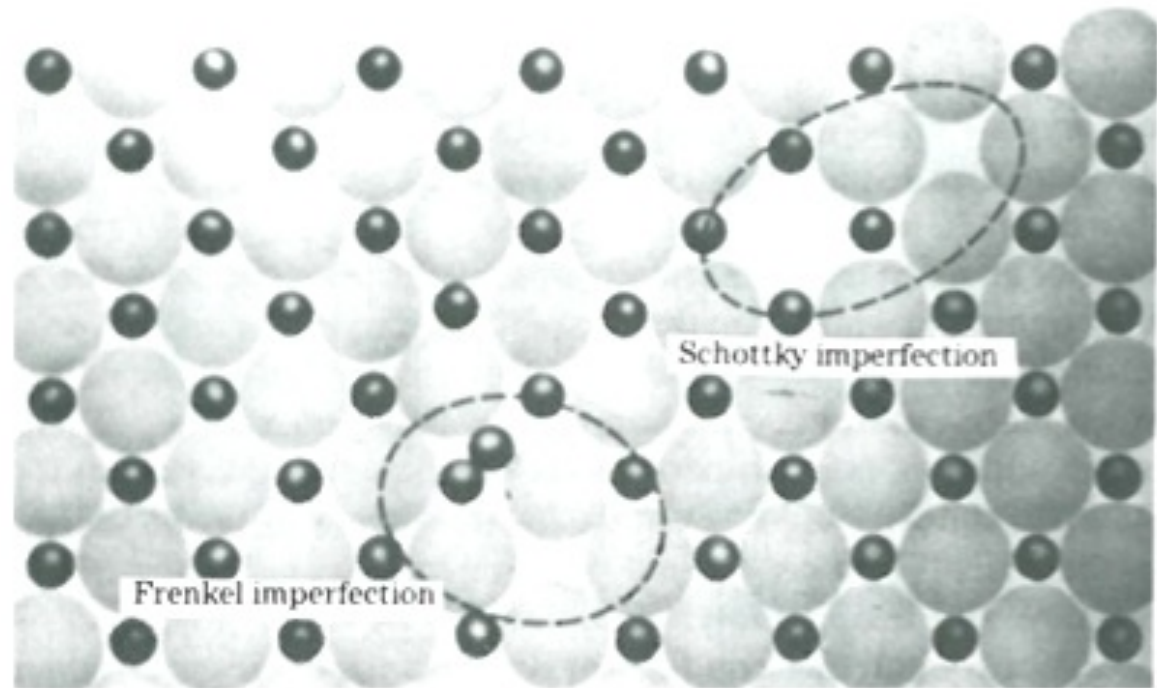


Figure 4.1 Two-dimensional representations of a vacancy and a self-interstitial. (Adapted from W. G. Moffatt, G. W. Pearsall, and J. Wulff, *The Structure and Properties of Materials*, Vol. I, *Structure*, p. 77. Copyright © 1964 by John Wiley & Sons, New York. Reprinted by permission of John Wiley & Sons, Inc.)

Noktasal Kusurlar

FIGURE 4.17 Two-dimensional representation of an ionic crystal illustrating a Schottky defect and a Frenkel defect. (After Wulff et al., "Structure and Properties of Materials," vol. 1: "Structure," Wiley, 1964, p. 78.)



Katılarda Empüriteler

- Yalnız tek bir element atomlarından oluşan, empürite veya yabancı atomların bulunmadığı tamamen saf bir metalin bulunması imkansızdır.
- Nispeten gelişmiş tekniklerle üretilen bir metalde %99,9999 dan daha yüksek saflığa sahip olması çok zordur. Bu saflık derecesinde bile bir metreküp malzemedede $10^{22} - 10^{23}$ mertebelerinde empürite atomu bulunur.
- Yaygın olarak kullanılan metallerin çoğunda belirli özellikler kazandırmak üzere empürite atomları bilerek ilave edilir.

Çizgisel Kusurlar - Dislokasyonlar

- Dislokasyonlar, çevrelerindeki bazı atomların kristal içindeki düzene bir miktar aykırı olarak konumlandıkları çizgisel veya tek boyutlu kusurlardır.

✓ Kenar dislokasyonu

(ilave yarı düzlemin kenarı boyunca meydana gelen kafes çarpımları)

✓ Vida dislokasyonu

(etrafında helisel bir düzlem meydana getirir)

✓ Karışık dislokasyon

Çizgisel Kusurlar - Dislokasyonlar

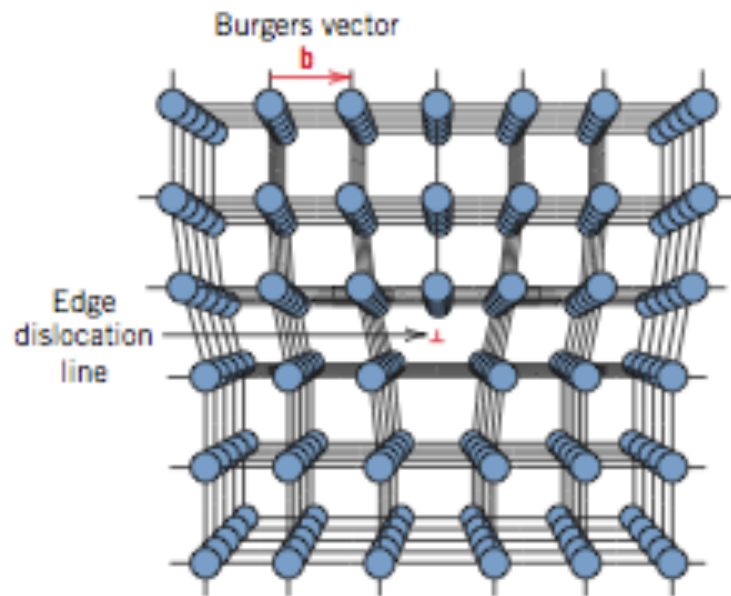
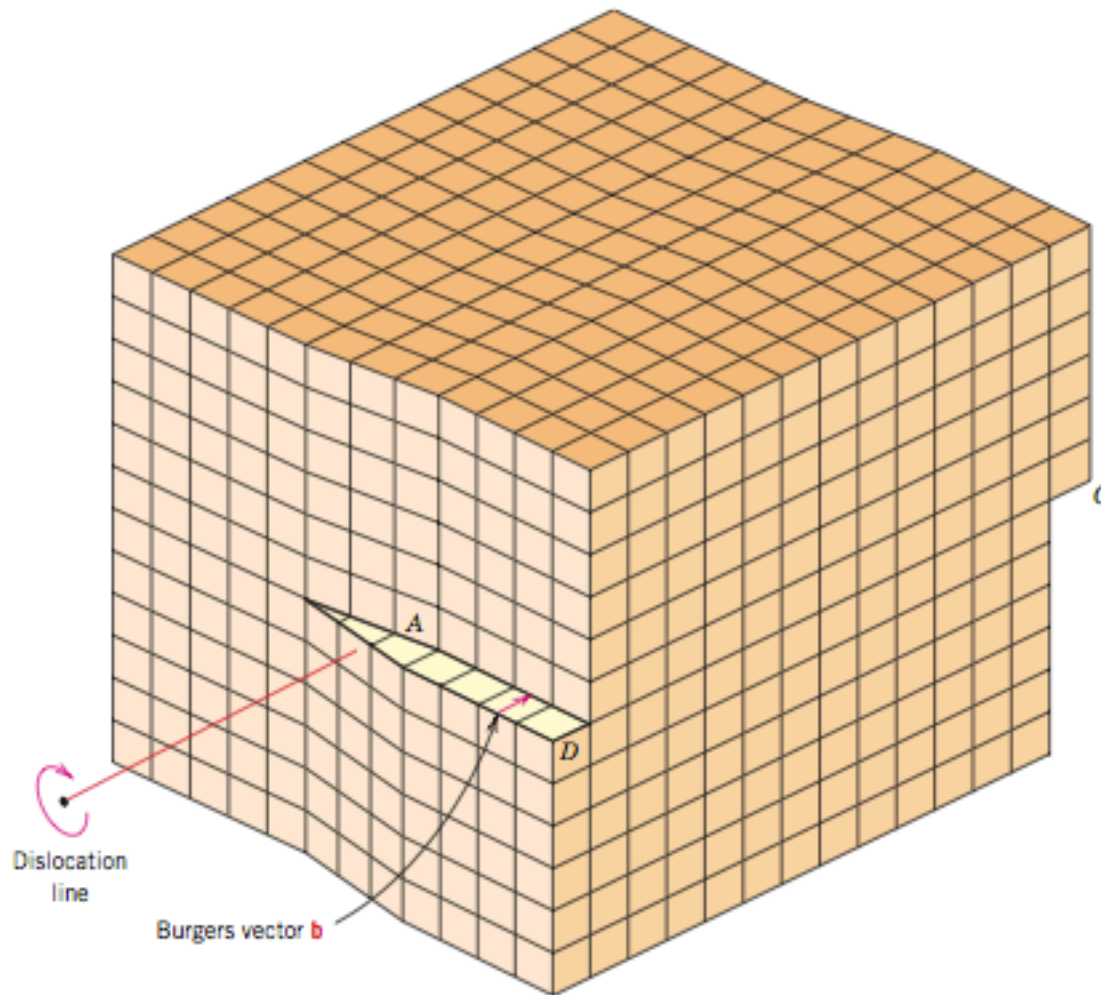


Figure 4.3 The atom positions around an edge dislocation; extra half-plane of atoms shown in perspective. (Adapted from A. G. Guy, *Essentials of Materials Science*, McGraw-Hill Book Company, New York, 1976, p. 153.)

Çizgisel Kusurlar - Dislokasyonlar

Figure 4.4 (a) A screw dislocation within a crystal.
(b) The screw dislocation in (a) as viewed from above. The dislocation line extends along line *AB*. Atom positions above the slip plane are designated by open circles, those below by solid circles. [Figure (b) from W. T. Read, Jr., *Dislocations in Crystals*, McGraw-Hill Book Company, New York, 1953.]



7.1 DISLOCATIONS—LINEAR DEFECTS 71

Schematic

(b) Top view, where open circles denote atom positions above the slip plane.

For regions in between where there is curvature in the dislocation line, the character is mixed edge and screw.

[Figure (b) from
W. T. Read, Jr.,
*Dislocations in
Crystals*, McGraw-
Hill Book Company,
New York, 1953.]



Çizgisel Kusurlar - Dislokasyonlar

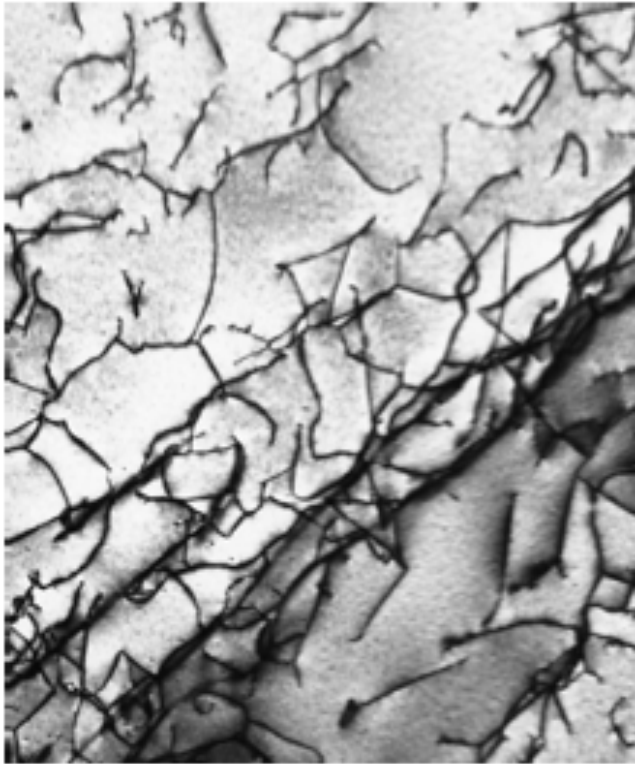


Figure 4.6 A transmission electron micrograph of a titanium alloy in which the dark lines are dislocations. 51,450 \times . (Courtesy of M. R. Plichta, Michigan Technological University.)

Arayüz Kusurları

- Farklı kristal yapılara veya farklı kristal yönlenmelere sahip bölgeleri ayıran iki boyutlu sınırlardır.
- Malzemelerin dış yüzeyleri, tane sınırları, faz sınırları, ikiz sınırları ve dizi hataları düzlemsel kusurları oluşturur.

Arayüz Kusurları

- Genişliği birkaç atom mertebesinde olan tane sınırı bölgelerinde değişik kristal yönlenmelerine sahip bitişik taneler arasında atomların dizilişinde bir süreksizlik ya da uyumsuzluk söz konusudur.
- Büyük açılı tane sınırlarında, tanelerin yönlenme farkından dolayı açı nispeten büyüktür, küçük açılı tane sınırları için ise bu açı küçüktür.
- Bir ikiz sınırın bir tarafında bulunan atomlar diğer tarafta bulunan atomların aynadaki görüntülerinin bulunduğu noktalarda yer alır.

Arayüz Kusurları

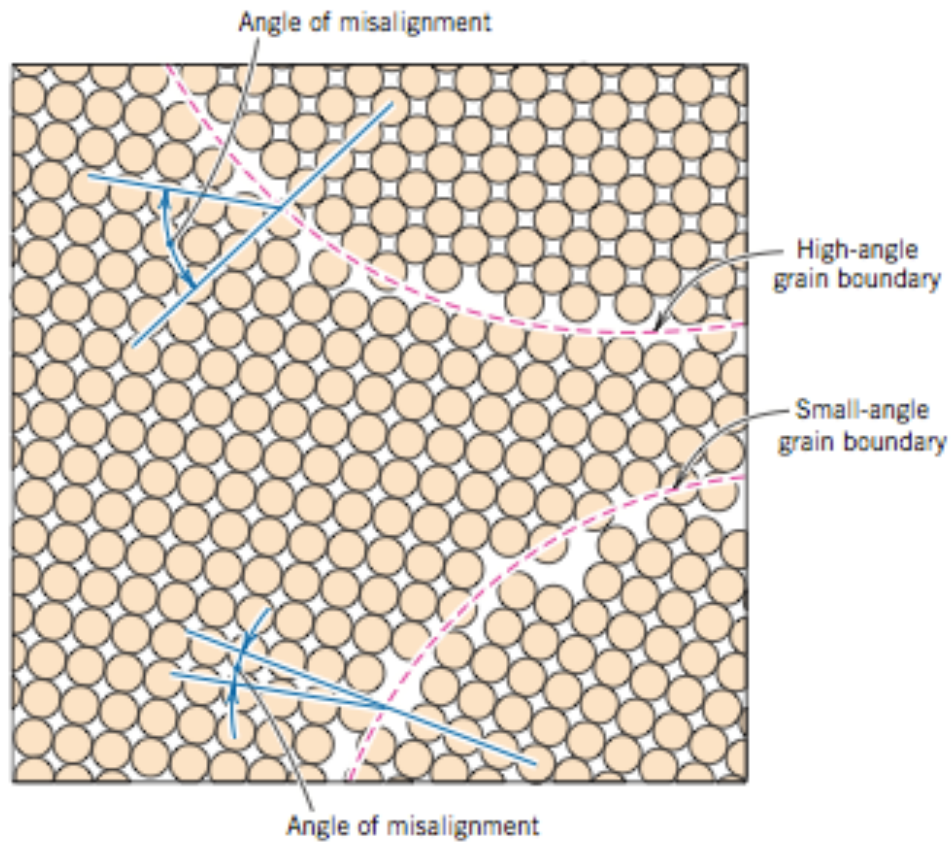


Figure 4.7 Schematic diagram showing small- and high-angle grain boundaries and the adjacent atom positions.

Arayüz Kusurları

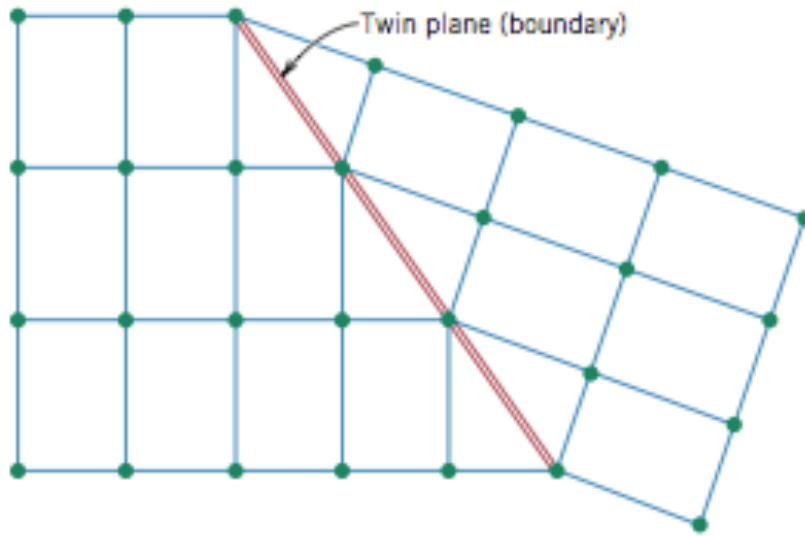


Figure 4.9 Schematic diagram showing a twin plane or boundary and the adjacent atom positions (colored circles).

Arayüz Kusurları

