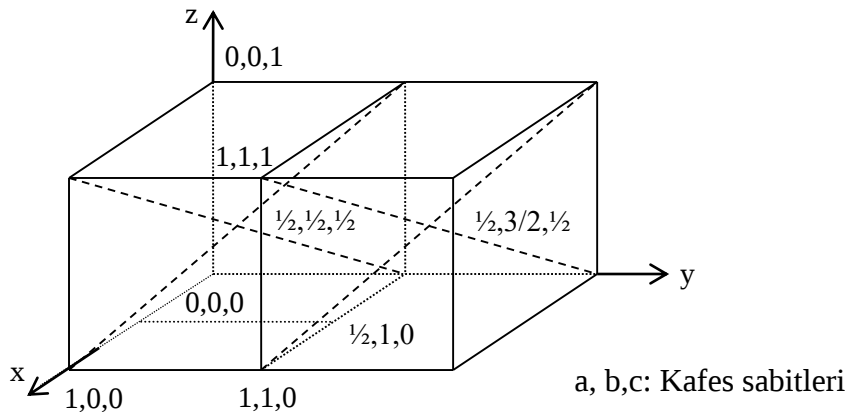


KRİSTAL GEOMETRİSİ

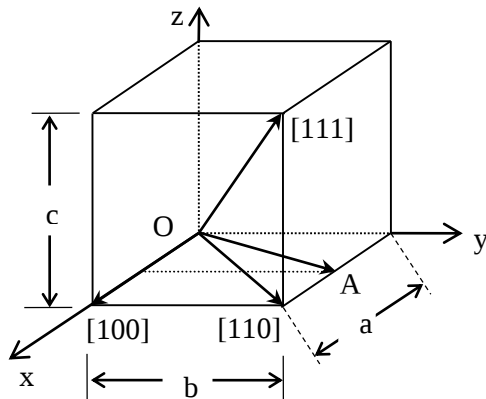
Kristallerde Doğrultu ve Düzlem Kavramları

Kristal yapının özelliklerini daha iyi anlamak için kristal içinde düzlem veya doğrultu kavramlarını tanımlamak gerekmektedir. Bu, birim hücre içinde her noktanın pozisyonunu belirlemeye yarayan koordinatlar vasıtasıyla olur. Koordinatlar eksenler üzerinde mesafeyi belirten ve virgülle birbirinden ayrılmış üç rakamdan ibarettir. Buna göre birim hücre orijininin koordinatları 0,0,0; merkezinin koordinatları $\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$ dir. Dolayısıyla, kristal yapıdan bağımsız olarak, birim hücrenin uzak köşesinin koordinatları 1,1,1 dir. Birim hücrenin kenar uzunlukları *kafes sabitleri* olarak tanımlanır.



Kristal Doğrultuları

Kristallerin birçok özelliği kristal doğrultusuna bağlı olarak farklılık gösterir. Herhangi bir kristal doğrultu, orijinden başlayan ve bir sonraki birim hücre köşesinde veya yüzeyinde sona eren doğrultu vektöründen yararlanılarak belirlenir. Bu doğrultu vektörünün eksenler üzerindeki izdüşümleri cinsinden ifade edilen en küçük tamsayılar dizisine *doğrultu indisleri* adı verilir. Doğrultular için Miller indislerini bulma prosedürü aşağıdaki gibidir:



OA doğrultusunun doğrultu (Miller) indisleri:

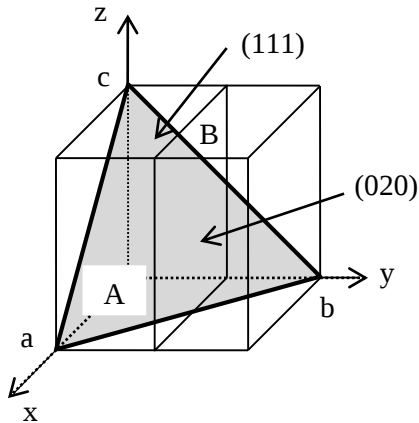
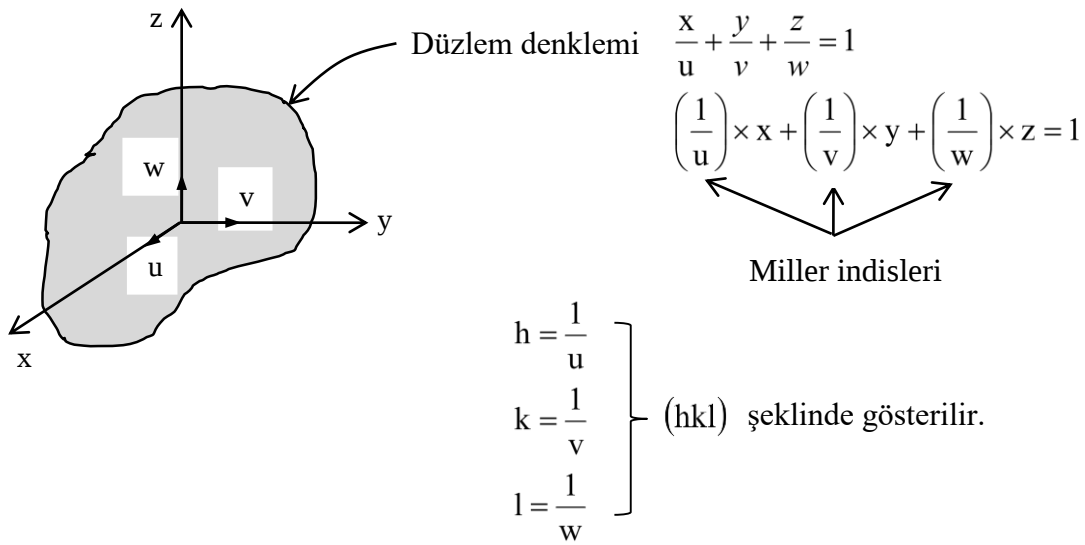
Eksenler	x	y	z
İzdüşümü	a/2	1b	0c
İzdüşümler			
(a, b, c cinsinden)	$\frac{1}{2}$	1	0
Ortak çarpan	1	2	0
Doğrultu indisleri	[120]		

Doğrultu indislerinin özellikleri:

- Tamsayıdırlar. Değilseler ortak bir çarpan ile çarpılarak tamsayıya dönüştürülürler.
- Doğrultu indisleri [hkl] şeklinde gösterilir.
- Negatif indislerde (-) işareti ilgili indisin üzerine konur.
- Paralel doğruların doğrultu indisleri aynıdır.

Kristal Düzlemleri

Kristallerde belli atom düzlemleri önemlidir. Örneğin, metaller atomların yoğun olarak yer aldığı düzlemler boyunca şekil değiştirir. Bu önemli düzlemleri belirlemek için aşağıda tanımlandığı biçimde *Miller indisleri* kullanılır.



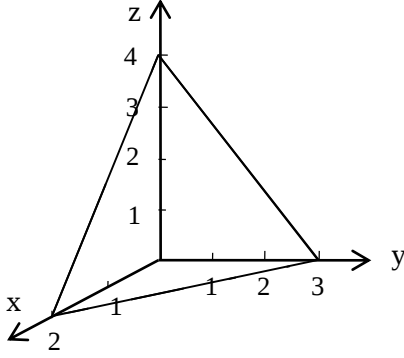
A düzleminin Miller indisleri:

Eksenler	x	y	z
Kesişim noktaları	1a	1b	1c
Kesişim noktaları (kafes sabitleri cinsinden)	1	1	1
Tersleri	1	1	1
Ortak çarpan (gereksiz)			
Miller indisleri		(111)	

Miller indislerinin özellikleri:

- Tamsayıdırlar. Değilseler ortak bir çarpan ile çarpılarak tamsayıya dönüştürülürler.
- Miller indisleri (hkl) ile gösterilir.
- Negatif indislerde ilgili indisin üzerine (-) işareti konur.
- Paralel düzlemlerin miller indisleri aynıdır.

Örnek: x,y,z eksenlerini sırasıyla 2, 3 ve 4`de kesen düzlemin Miller indislerini bulunuz.



Eksenler	x	y	z	
	↓	↓	↓	
	2	3	4	Tersleri alınır
	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{3}$	$\frac{1}{4}$	
	(6)	(4)	(3)	Ortak çarpan
		(643)		Miller indisleri

Örnek: x, y, z eksenlerini 3, -4 ve 6`da kesen düzlemin Miller indislerini bulunuz.

Eksenler	x	y	z	
	↓	↓	↓	
	3	-4	6	Tersleri alınır
	$\frac{1}{3}$	$\frac{-1}{4}$	$\frac{1}{6}$	
	(4)	(3)	(2)	Ortak çarpan
	$\left(4, \bar{3}, 2\right) \equiv \left(4\bar{3}2\right)$			Miller indisleri

Örnek: Kristal eksenlerini $\frac{1}{2}$, $\frac{1}{3}$ ve 2`de kesen düzlemin miller indislerini bulunuz.

Eksenler	x	y	z	
	↓	↓	↓	
	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{3}$	2	
	$\frac{1}{1/2}$	$\frac{1}{1/3}$	$\frac{1}{2}$	Tersleri alınır
	2	3		
	2	3	$\frac{1}{2}$	
	(2)	(2)	(1)	Ortak çarpan
	$(4,6,1) \equiv (461)$			Miller indisleri

Kübik kristal sistemlere özgü olmak üzere aynı indislere sahip düzlem ve doğrultular birbirlerine diktir. Zira kübik kafes simetrik. Bütün doğrultularda benzer atom dizilişi vardır. Bunlara *eşdeğer doğru ailesi* adı verilir. Örneğin, [100], [010], [001] doğrultuları eşdeğerdir. Bununla beraber, diğer kristal sistemler için aynı indislere sahip düzlem ve doğrultular arasında benzer basit geometrik ilişkiler bulunmamaktadır.

İki kristal doğrultusu arasındaki açı:

Doğrultu indisleri $[h_1k_1l_1]$ ve $[h_2k_2l_2]$ olan iki doğrultu arasındaki açıyı belirlemek için aşağıdaki bağıntı kullanılır.

$$\cos\alpha = \frac{h_1h_2 + k_1k_2 + l_1l_2}{\sqrt{h_1^2 + k_1^2 + l_1^2} \sqrt{h_2^2 + k_2^2 + l_2^2}} \quad \text{Burada } \alpha \text{ iki doğrultu arasındaki açıdır.}$$

Örnek: $[001]$ ile $[010]$ doğrultuları arasındaki açı ne kadardır?

$$\cos\alpha = \frac{0+0+0}{\sqrt{0+0+1} \sqrt{0+1+0}} = 0 \Rightarrow \alpha = 90^\circ \text{ dir.}$$

İki düzlem arası mesafe:

Bir kristal düzlemi ile o düzlemin normali aynı Miller indislerine sahiptir. Buna göre örneğin, $(h_1k_1l_1)$ düzleminin normali, $[h_1k_1l_1]$ doğrultusudur. Benzer şekilde (111) düzleminin normali de $[111]$ doğrultusudur.

Kübik kafes sistemlerde birbirine komşu iki paralel düzlem arasındaki mesafeyi belirlemek için aşağıdaki bağıntı kullanılır.

$$d_{hkl} = \frac{a}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}} \quad \text{Burada } a \text{ kafes sabiti olup } h, k, l \text{ iki komşu düzlemin Miller indisleridir.}$$

Örnek: Kafes sabiti $4.0786 \text{ \AA}$ olan altın için d_{200} ve d_{111} değerlerini bulunuz.

Altın yüzey merkezli kübik (YMK) kristal yapıya sahiptir.

$$d_{200} = \frac{a}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}} = \frac{4.0786}{\sqrt{2^2 + 0^2 + 0^2}} = \frac{4.0786}{\sqrt{4}} = \frac{4.0786}{2} = 2.04 \text{ \AA} \text{ dür.}$$

$$d_{111} = \frac{4.0786}{\sqrt{1^2 + 1^2 + 1^2}} = \frac{4.0786}{\sqrt{3}} = 2.355 \text{ \AA} \text{ dür.}$$

ANİZOTROPİ

Kristal doğrultulara ve düzlemlere bağlı olarak atomsal diziliş farklılık gösterebilir. Bu nedenle malzeme özellikleri doğrultu ve düzlemlere göre değişir. Bu olaya *anizotropi* denir. Doğrultu ve düzlemlere bağlı olarak malzeme özelliklerinde değişim yoksa yani, bütün doğrultularda özellikler aynı ise cisim *izotropik* cisimdir denir.

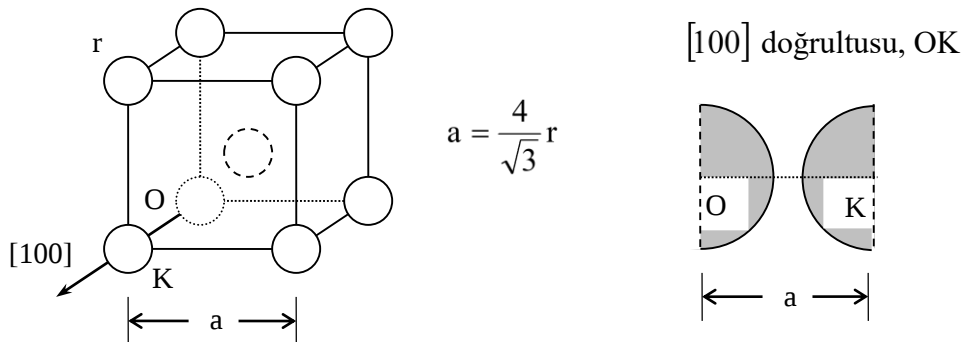
Kristal içinde atom merkezlerinden geçen belirli bir doğrultudaki birim uzunluğa düşen atom sayısına *lineer (doğrusal) atom yoğunluğu* denir. Kristal içinde belirli bir düzlemde birim alana düşen atom sayısına *düzlemsel atom yoğunluğu* denir. Atom yoğunlukları eşit olan düzlemlere *özdeş düzlemler* adı verilir. Bir atomun bir düzleme ait olması için düzlemin söz konusu atomun merkezlerinden geçmesi zorunludur. Birim hacme düşen atom sayısına *hacimsel atom yoğunluğu* denir.

Kristal içinde atom yoğunlukları birim hücre tipine, seçilen doğrultu veya düzleme göre değişir. Herhangi bir doğrultu veya düzlemdeki atom yoğunluğunu hesaplamak mümkündür.

Doğrusal ve Düzlemsel Atom Yoğunlukları

"Doğrusal atom yoğunluğu", belli bir kristal doğrultuya düşen atom sayısıdır. Atomun doğrultuya dâhil edilmesi için doğrultunun atomun merkezinden geçmesi gerekir. Benzer şekilde, "Düzlemsel atom yoğunluğu", belli bir düzleme düşen atom sayısıdır. Atomun düzleme dâhil edilmesi için düzlemin atomun merkezinden geçmesi gerekir. Birim hücrede yer alan atom sayısı "Hacimsel atom yoğunluğu" olarak bilinir.

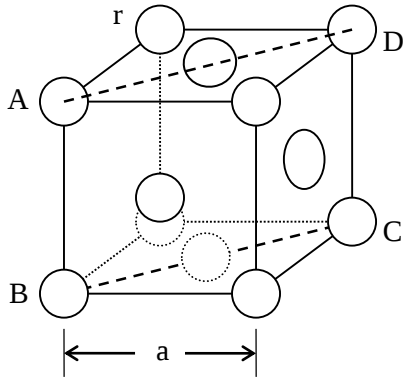
Örnek: HMK kristalde $[100]$ doğrultusunda lineer atom yoğunluğunu hesaplayınız.



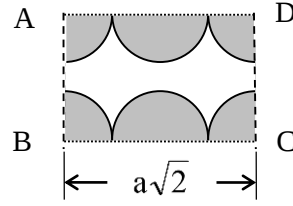
Doğrusal atom yoğunluğu OK doğrultusu üzerindeki $2 \times \frac{1}{2} = 1$ atomun OK uzunluğuna, yani

$a = \frac{4}{\sqrt{3}} \times r$ mesafesine oranı olarak belirlenir.

Örnek: YMK kristalde (110) düzleminde düzlemsel atom yoğunluğunu hesaplayın.



(110) düzlemi, ABCD düzlemi



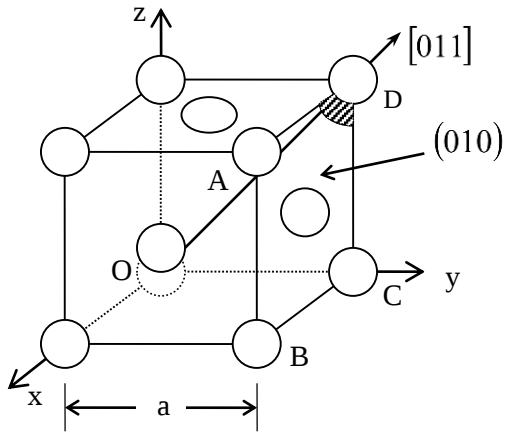
Dikdörtgende AB ve AD uzunlukları
 $AB = a$ $AD = a\sqrt{2}$ dir.

Düzlemsel atom yoğunluğu (DAY), ABCD düzlemindeki atom sayısı $4 \times \frac{1}{4} + 2 \times \frac{1}{2} = 2$, düzlemin alanına ($a \times a\sqrt{2}$) bölünerek bulunur.

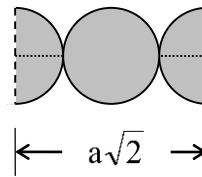
Örnek: Kurşun yüzey merkezli kübik (YMK) kristale sahip olup kafes sabiti $4.94 \text{ \AA}$ dür.

- $[011]$ doğrultusunda lineer (doğrusal) atom yoğunluğunu hesaplayınız.
- (010) düzleminde düzlemsel atom yoğunluğunu hesaplayınız.
- Birim hücrenin hacimsel atom yoğunluğunu hesaplayınız.

Çözüm:

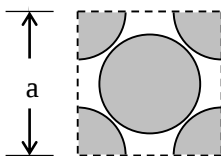


a) $[011]$ doğrultusu, OD doğrultusu



$$LAY = \frac{2 \times \frac{1}{2} + 1}{a\sqrt{2}} = \frac{2}{4.94\sqrt{2}} = 0.286 \text{ atom/\AA}$$

b) (010) düzlemi, ABCD düzlemi



$$DAY = \frac{4 \times \frac{1}{4} + 1}{a \times a} = \frac{2}{(4.94)^2} = 0.082 \text{ atom/\AA}^2$$

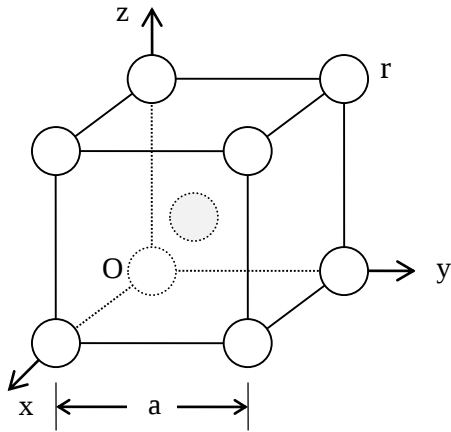
c) Hacimsel atom yoğunluğu (HAY)

$$\text{HAY} = \frac{8 \times \frac{1}{8} + 6 \times \frac{1}{2}}{a^3} = \frac{4}{(4.94)^3} = 0.033 \text{ atom/\AA}^3$$

Örnek: Potasyum. hacim merkezli kübik (HMK) kristale sahip olup atomsal ağırlığı 39.1 g, atom yarıçapı 2.31 Å dır. Avogadro sayısı 6.023×10^{23} , $1 \text{ Å} = 10^{-8} \text{ cm}$ dir.

- Potasyumun teorik özgül ağırlığını hesaplayınız.
- Potasyum için atomsal dolgu faktörünü, birim hücre boyutunu ve hacimsel atom yoğunluğunu hesaplayınız.
- [110] ve [111] doğrultularında doğrusal atom yoğunluğunu bulunuz.
- (110) ve (111) düzlemlerinde düzlemsel atom yoğunluğunu bulunuz.

Çözüm:



a) Birim hücre içindeki atom sayısı

$$n = 8 \times \frac{1}{8} + 1 = 2 \text{ atom}$$

Birim hücrenin hacmi, V

$$V = (a)^3 \quad a = \frac{4}{\sqrt{3}} \times r$$

$$V = \left(\frac{4}{\sqrt{3}} \times 2.31 \times 10^{-8} \right)^3 = 1.52 \times 10^{-21} \text{ cm}^3$$

$$\rho = \frac{n \times M}{V \times N_A} = \frac{2 \times 39.10}{1.52 \times 10^{-21} \times 6.023 \times 10^{23}} = 0.85 \text{ g/cm}^3$$

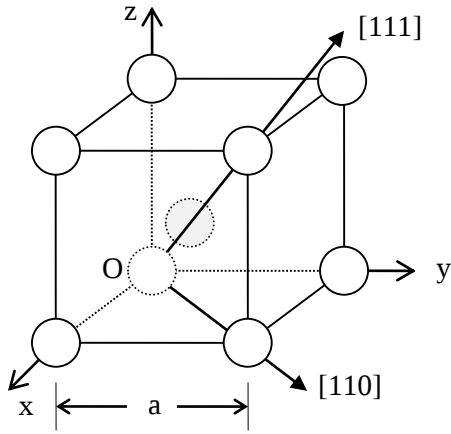
b) Atomsal dolgu faktörü

$$\text{ADF} = \frac{n \times V'}{V} = \frac{2 \times \frac{4}{3} \times \pi \times r^3}{1.52 \times 10^{-21}} = \frac{8 \times \pi \times (2.31 \times 10^{-8})^3}{3 \times 1.52 \times 10^{-21}} \cong 0.68$$

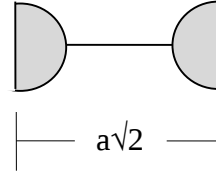
Birim hücre boyutu $a = \frac{4}{\sqrt{3}} \times r = \frac{4}{\sqrt{3}} \times 2.31 = 5.33 \text{ Å}$ olarak bulunur.

$$\text{Hacimsel atom yoğunluğu} \quad \text{HAY} = \frac{2}{(5.33)^3} = 0.013 \text{ atom/\AA}^3 = 1.321 \times 10^{22} \text{ atom/cm}^3$$

c) [110] ve [111] doğrultularında doğrusal atom yoğunlukları



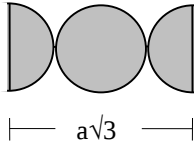
[110] doğrultusu



Atom sayısı, $n = 2 \times \frac{1}{2} = 1$ atom

$$\text{LAY} = \frac{1}{a\sqrt{2}} = \frac{1}{5.33\sqrt{2}} = 0.13 \text{ atom/\AA}$$

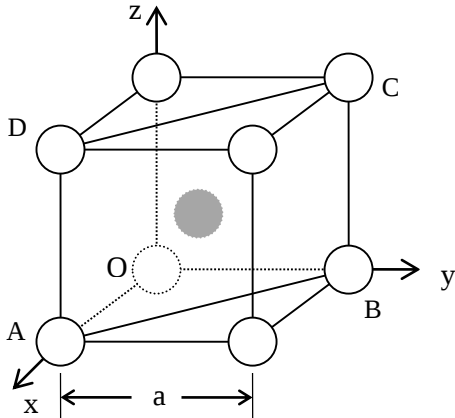
[111] doğrultusu



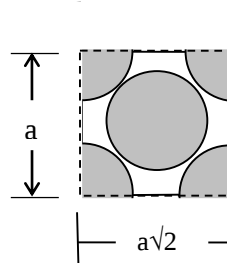
Atom sayısı, $n = 2 \times \frac{1}{2} + 1 = 2$ atom

$$\text{LAY} = \frac{2}{a\sqrt{3}} = \frac{2}{5.33 \times \sqrt{3}} = 0.22 \text{ atom/\AA}$$

d) (110) ve (111) düzlemlerinde düzlemsel atom yoğunlukları

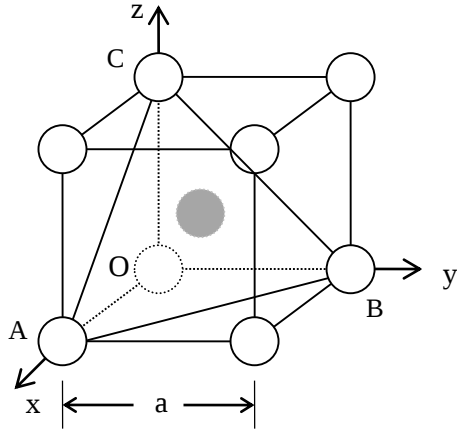


(110) düzlemi, ABCD düzlemi

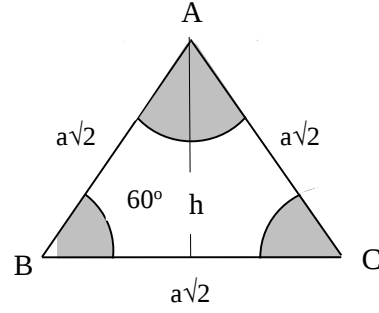


Atom sayısı, $n = 4 \times \frac{1}{4} + 1 = 2$ atom

$$\text{DAY} = \frac{2}{a \times a\sqrt{2}} = \frac{2}{(5.33)^2 \times \sqrt{2}} = 0.05 \text{ atom/\AA}^2$$



(111) düzlemi, ABC düzlemi



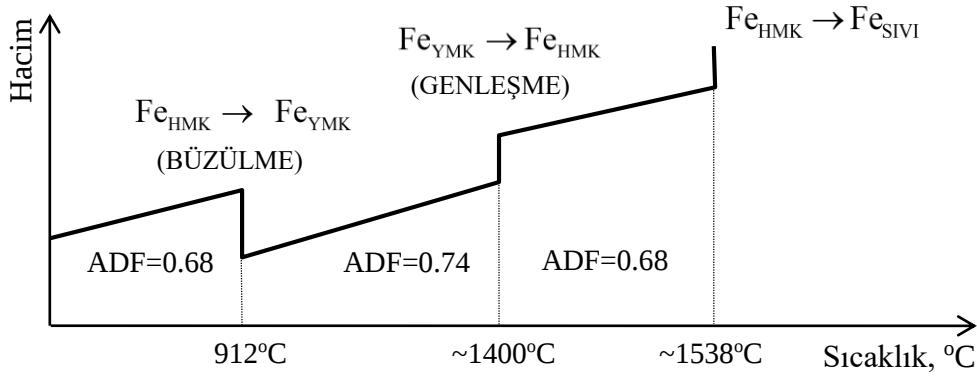
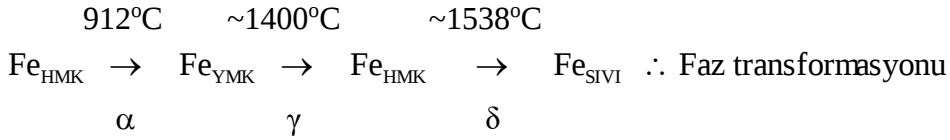
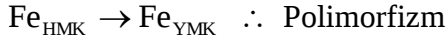
Atom sayısı, $n = 3 \times \frac{1}{6} = \frac{1}{2}$ atom

ABC üçgeninde Pisagor bağıntısı, $h^2 = (a\sqrt{2})^2 - \left(\frac{a\sqrt{2}}{2}\right)^2 = \frac{3}{2}a^2$ $h = \sqrt{\frac{3}{2}} \times a$ olur.

$$\text{DAY} = \frac{1/2}{a\sqrt{2} \times \sqrt{\frac{3}{2}} \times a} \times 2 = \frac{1}{(5.33)^2 \times \sqrt{3}} = 0.02 \text{ atom/\AA}^2 \text{ bulunur.}$$

POLİMORFİZM

Cisimlerin birden fazla kristal yapıya sahip olmasına *polimorfizm* veya *alotropi* denir. Metaller içinde buna en iyi örnek demirdir. Demir düşük sıcaklıklarda HMK, 912°C üstünde YMK, 1400°C üstünde HMK kristal yapı gösterir. Yaygın olarak bilinen diğer bir polimorfik cisim karbondur. Karbon, ortam sıcaklığında grafit formunda iken yüksek sıcaklıkta elmas yapısındadır. Polimorfik transformasyona bağlı olarak genellikle yoğunluk ve diğer bazı fiziksel özelliklerde değişim görülür.



Örnek: HMK kristale sahip demir ısıtılıp YMK kristale dönüştüğünde hacminde meydana gelen değişimi hesaplayınız. Transformasyon sıcaklığında, HMK kristal yapıda demirin kafes sabiti 2.863Å ve YMK kristal yapıda 3.591Å dır.

Çözüm:

$$\text{HMK kristal yapıda birim hücre hacmi} \quad a^3 = (2.863)^3 = 23.467 \text{ Å}^3$$

$$\text{YMK kristal yapıda birim hücre hacmi} \quad a^3 = (3.591)^3 = 46.307 \text{ Å}^3$$

YMK kristal yapıda birim hücrede 4 atom ve HMK kristal yapıda birim hücrede 2 atom bulunur. Başka bir deyişle, HMK kristalde birim hücrede atom başına düşen hacim 23.467/2 iken YMK kristalde birim hücre başına düşen hacim 46.307/4 kadardır. Dolayısıyla her iki durum için hacim değişimi aşağıdaki gibi hesaplanabilir.

$$\Delta V = \frac{\frac{46.307}{4} - \frac{23.467}{2}}{\frac{23.467}{2}} \times 100 = \frac{11.577 - 11.734}{11.734} \times 100 \cong -\%1.34 \text{ şeklinde hesaplanabilir.}$$

Negatif işaret, kristal yapı değişimi sonucu demirde oluşan büzülmeyi ifade etmektedir.