

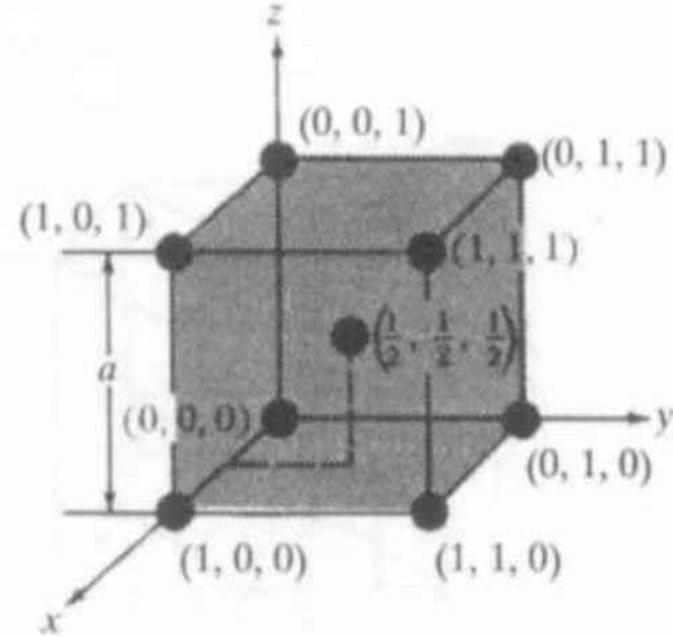
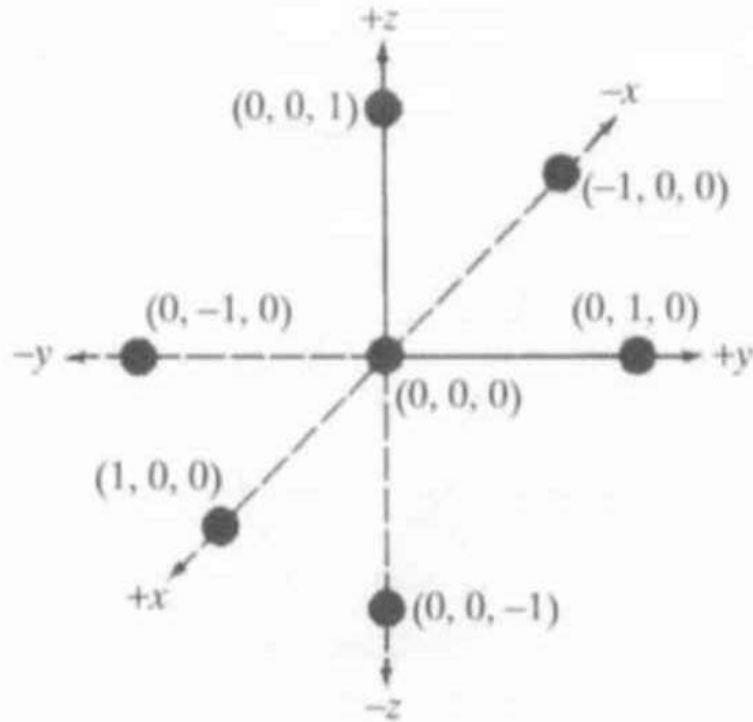
Malzeme Bilimi Dersi

Kristal Yapıları ve Kristal Geometrisi

Kaynaklar

- 1) Malzeme Bilimi ve Mühendisli i
William F. Smith
Çeviren: Nihat G. Kınıkolu
- 2) Malzeme Biliminin Temelleri
Hüseyin Uzun, Fehim Fındık, Serdar Salman
- 3) Fundamentals of Materials Science and Engineering
William D. Callister

Kristal Noktaları



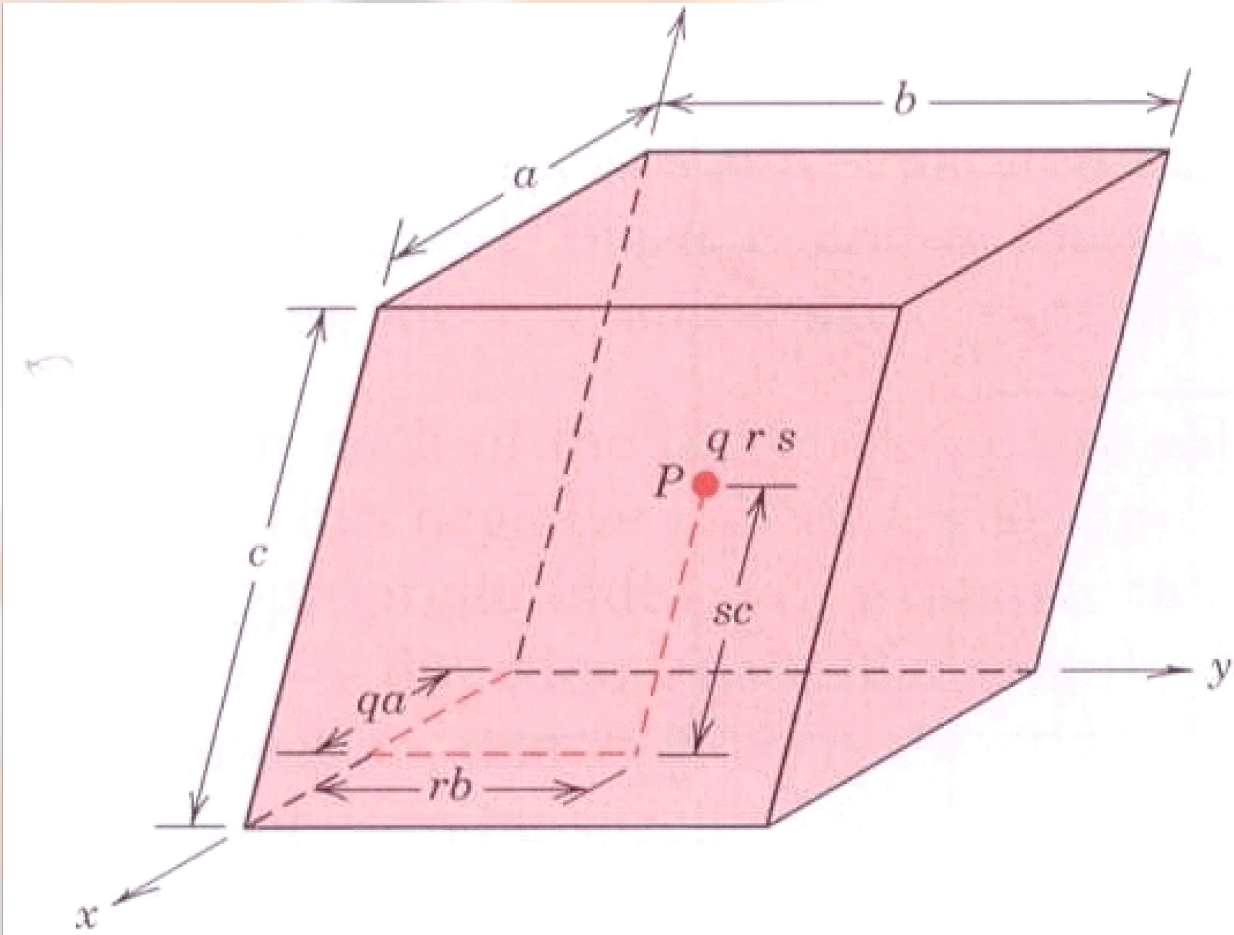
Hacim merkezli kübik birim hücrede atomların koordinatlarının gösterilmesi.

+ ve - koordinatların gösterilmesine dikkat edelim.

Kristal noktalarını niçin buluruz?

Kristal do rultularını ve düzlemlerini bulmak için. Çünkü her bir do rultu ve düzlemde kristalin yo unlu u farklı olmaktadır. Elemenlerin bulunmasına da yaramaktadır.

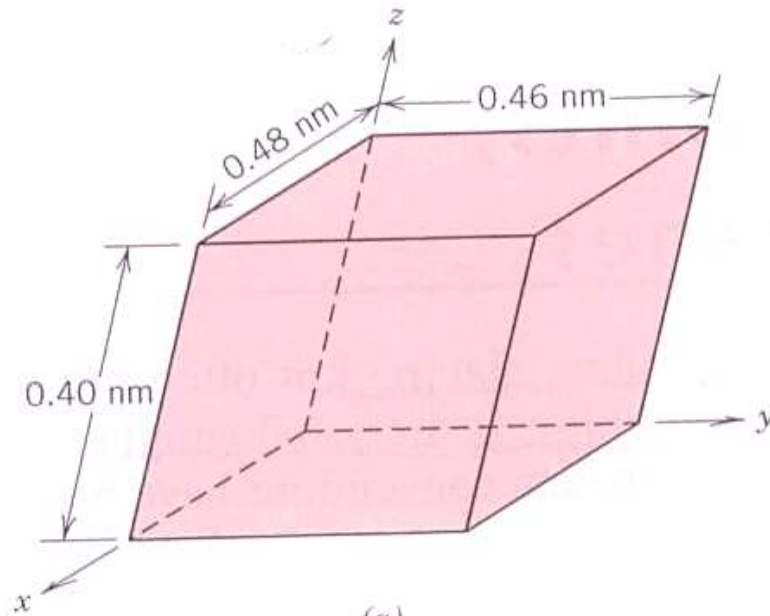
Kristal Noktaları



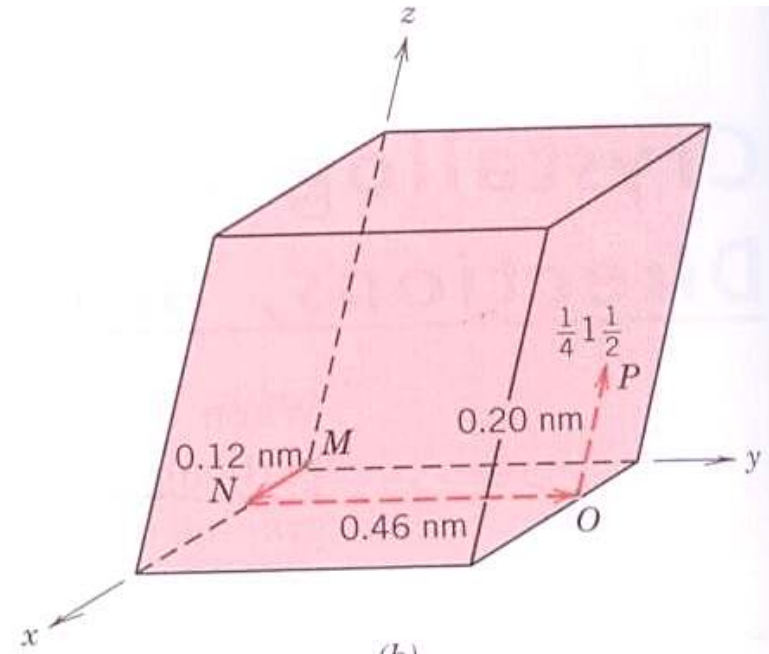
Kristal Noktaları

$$\frac{1}{4}, 1, \frac{1}{2}$$

koordinatlarının gösterilmesi,



(a)



(b)

Kristal Do rultuları

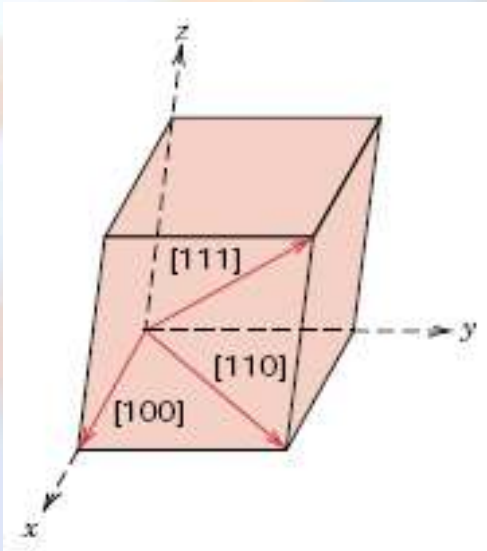
Kristal kafeslerde belirli yönleri tanımlamak gerekir. Çünkü, metal ve ala ımların özellikleri yönlere göre de i mektedir.

Kristallerin do rultu vektörlerini bulma i leminde u iki kurala dikkat edelim;

1) Vektörlerin paralelli ini koruyalım,

2) Vektörlerin eksenler üzerindeki izdü ümlerini do ru bir ekilde bulalım.

Kristal do rultuları Miller ndisleri yardımıyla bulunmaktadır.

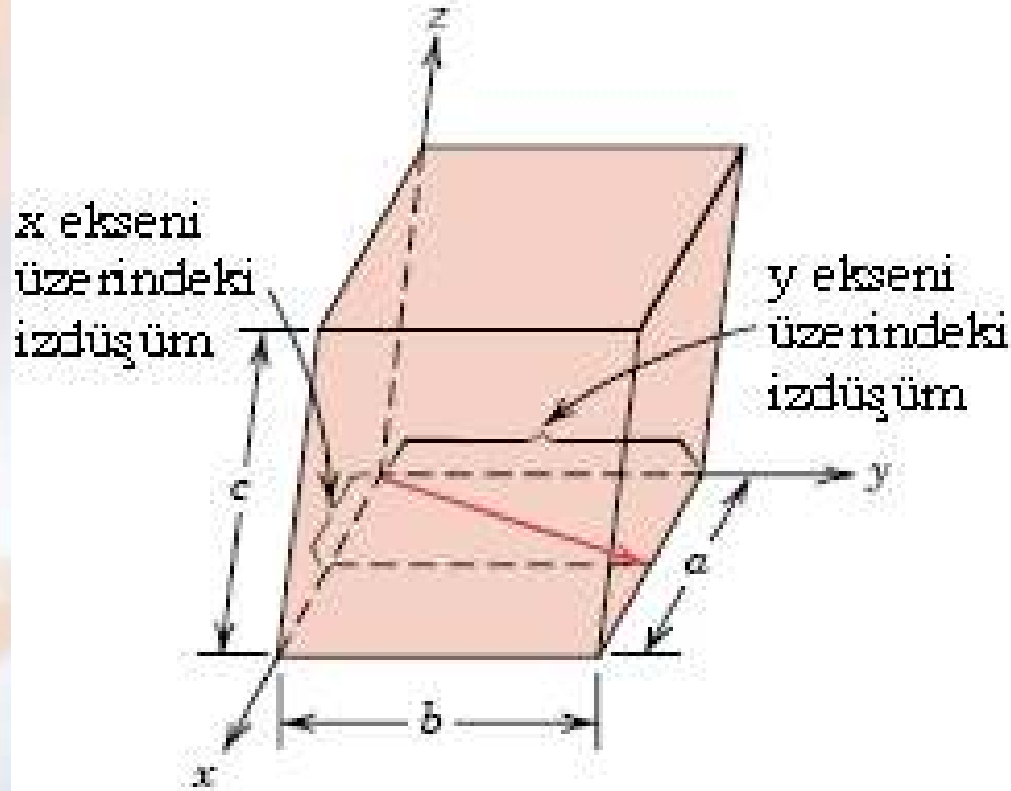


Kübik kristallerdeki yön i aretleri, her bir koordinat eksenini boyunca çözülmü ve en küçük tam sayıya indirgenmiş vektör bile enleridir.

Yön i aretleri kö eli parantez içinde gösterilir ve virgülle ayrılmaz.

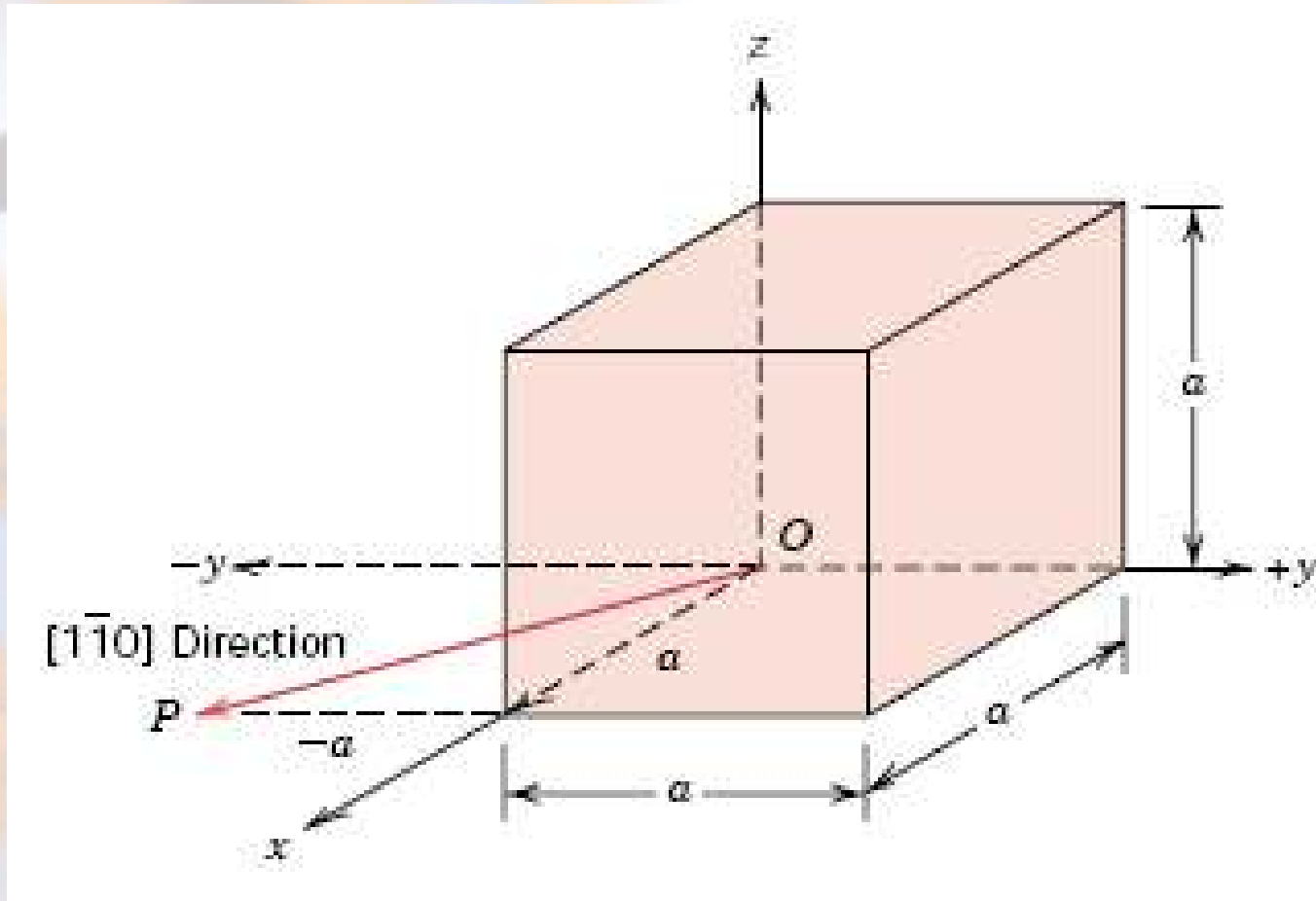
Yön vektörleri birim hücre içinde kalacak ekilde çizilir, hücrenin dı ında çizilmez.

Kristal Doğrultuları

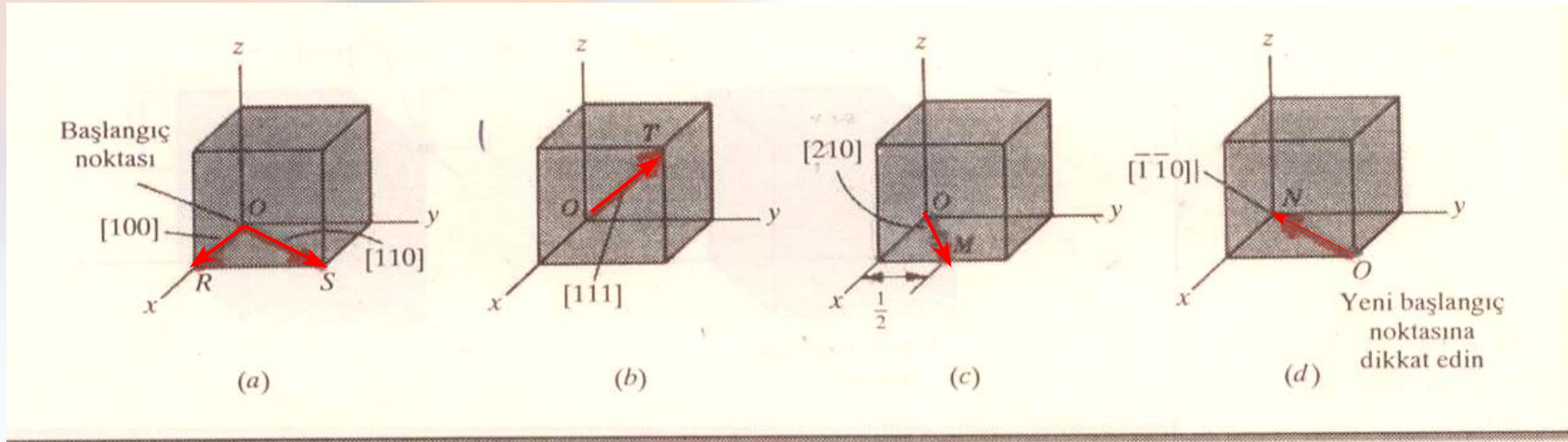


	x	y	z
Projections	$a/2$	b	$0c$
Projections (in terms of a, b, and c)	$\frac{1}{2}$	1	0
Reduction	1	2	0
Enclosure		$[120]$	

Kristal Doğrultuları



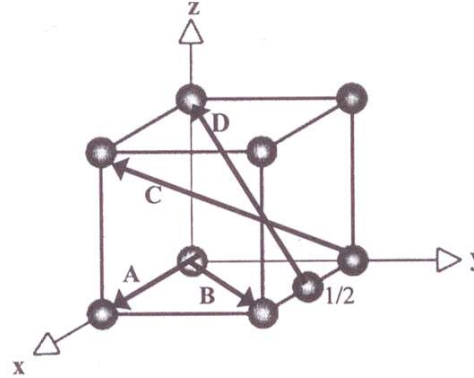
Kristal Doğrultuları



Kristal Doğrultuları

ORNEK Kristal kafesinde gösterilen kristal doğrultularının, Miller indislerini bularak tanımlayınız.

A, B, C, D
kristal doğrultuları



ÇÖZÜM 3.4

Kübik kafeste gösterilen kristal doğrultularının Miller indislerini bulabilmek için Şekil deki kafes noktaları koordinatlarına bakarak, kristal doğrultusunun başlangıç ve bitiş noktaları tayin edilir. Sonra uygulanan adımları takip ederek Miller indislerini bulunur.

A kristal doğrultusu için:

I. Adım: Başlangıç noktasının koordinatları : 0, 0, 0

Bitiş noktasının (ok işaretli nokta) koordinatları : 1, 0, 0

II. Adım: Bitiş ve başlangıç koordinat noktaları birbirlerinden çıkartılır :

$$(1, 0, 0) - (0, 0, 0) = (1, 0, 0)$$

III. Adım: Çıkartma sonucuna bakıldığında kesirli bir rakam yok.

IV. Adım: Çıkartma sonucu köşeli parantez içine yazılır [1 0 0]

B kristal doğrultusu için:

I. Adım: Başlangıç noktasının koordinatları : 0, 0, 0

Bitiş noktasının (ok işaretli nokta) koordinatları : 1, 1, 0

II. Adım: Başlangıç ve bitiş koordinat noktaları birbirlerinden çıkartılır :

$$(1, 1, 0) - (0, 0, 0) = (1, 1, 0)$$

III. Adım: Çıkartma sonucuna bakıldığında kesirli bir rakam yok.

IV. Adım: Çıkartma sonucu köşeli parantez içine yazılır: [1 1 0]

P. Turgut

www.turgutpaki.com

Kristal Doğrultuları

C kristal doğrultusu için:

I. Adım: Başlangıç noktasının koordinatları : 0, 1, 0

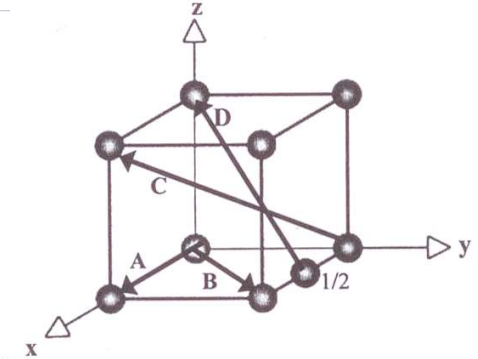
Bitiş noktasının (ok işaretli nokta) koordinatları : 1, 0, 1

II: Adım: Bitiş ve başlangıç koordinat noktaları birbirlerinden çıkartılır :

$$(1, 0, 1) - (0, 1, 0) = (1, -1, 1)$$

III. Adım: Çıkartma sonucuna bakıldığında kesirli bir rakam yok.

IV. Adım: Çıkartma sonucu köşeli parantez içine yazılır. Eksi işaretli rakamın eksi işareti, rakan üzerine yerleştirilir: $[1 \bar{1} 1]$



D kristal doğrultusu için:

I. Adım: Başlangıç noktasının koordinatları : 1/2, 1, 0

Bitiş noktasının (ok işaretli nokta) koordinatları : 0, 0, 1

II: Adım: Başlangıç ve bitiş koordinat noktaları birbirlerinden çıkartılır :

$$(0, 0, 1) - (1/2, 1, 0) = (-1/2, -1, 1)$$

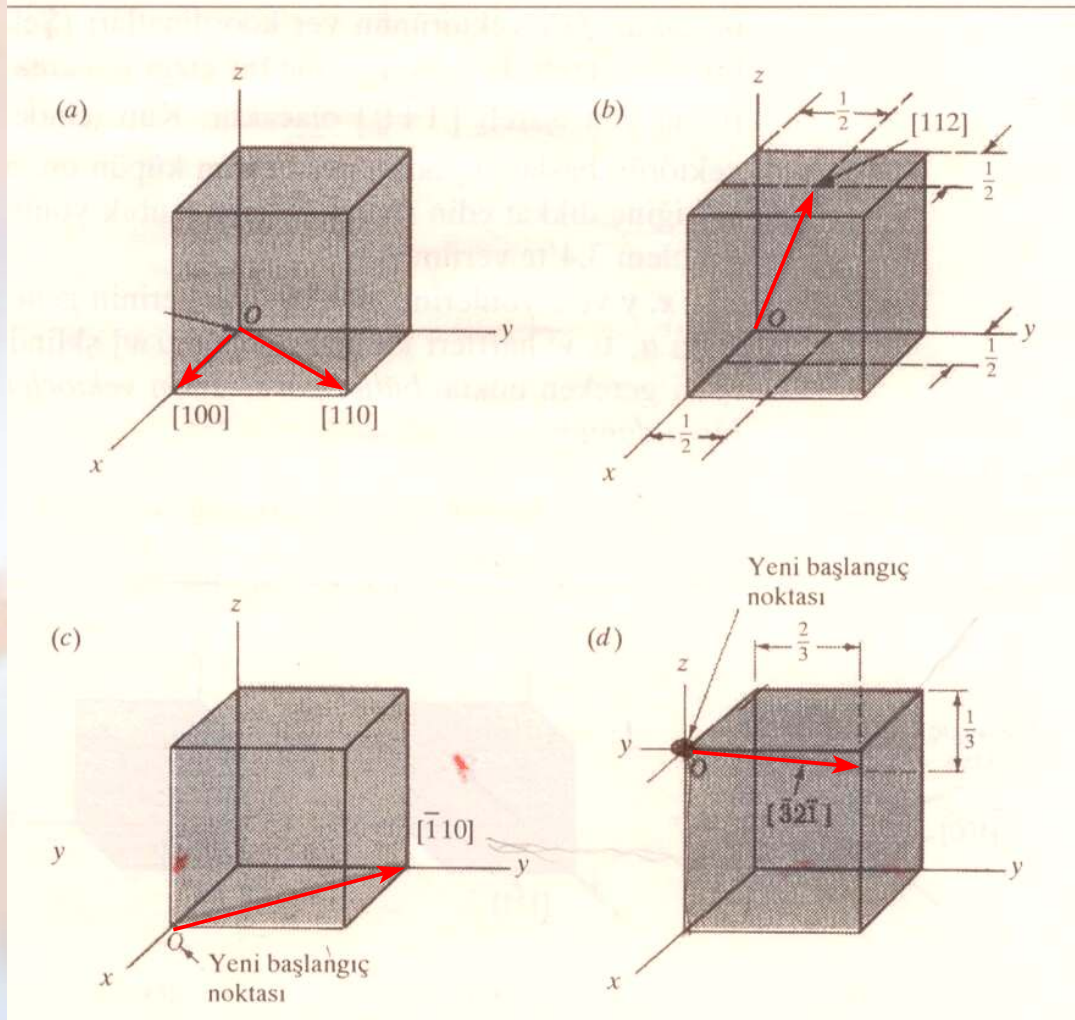
III. Adım: Çıkartma işlemi sonucunda kesirli bir rakam bulunduğu için uygun bir tam sayı ile çarpılarak paydalar eşit hale getirilir (burada 2 rakamı ile paydalar eşitlenebilir):

$$-\frac{1}{2}, -1, 1 = -\frac{1}{2}, -\frac{2}{2}, \frac{2}{2}$$

Paydaları eşit olan kesirin paylarındaki rakamlar alınır: (-1, -2, 2)

IV. Adım: Çıkartma sonucu köşeli parantez içine yazılır: $[\bar{1} \bar{2} 2]$

Kristal Doğrultuları



Yön vektörlerini, kübik birim hücre içinde çizelim.

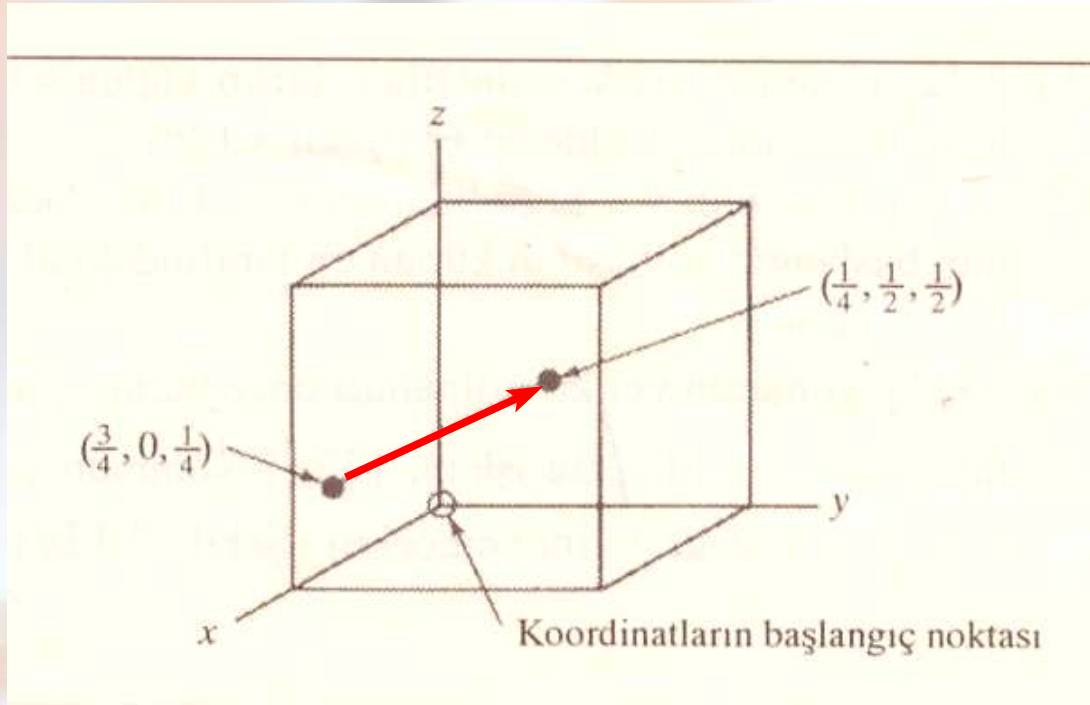
a) $[1\ 0\ 0]$, $[1\ 1\ 0]$

b) $[1\ 1\ 2]$

c) $[\bar{1}\ 1\ 0]$

d) $[\bar{3}\ \bar{2}\ \bar{1}]$

Kristal Doğrultuları



Koordinatları verilen vektörün yön iaretlerini bulalım.

İlk önce birinci noktasından, ikinci noktasının koordinatlarını çıkaralım.

$$x = \frac{1}{4} - \frac{3}{4} = -\frac{1}{2}$$

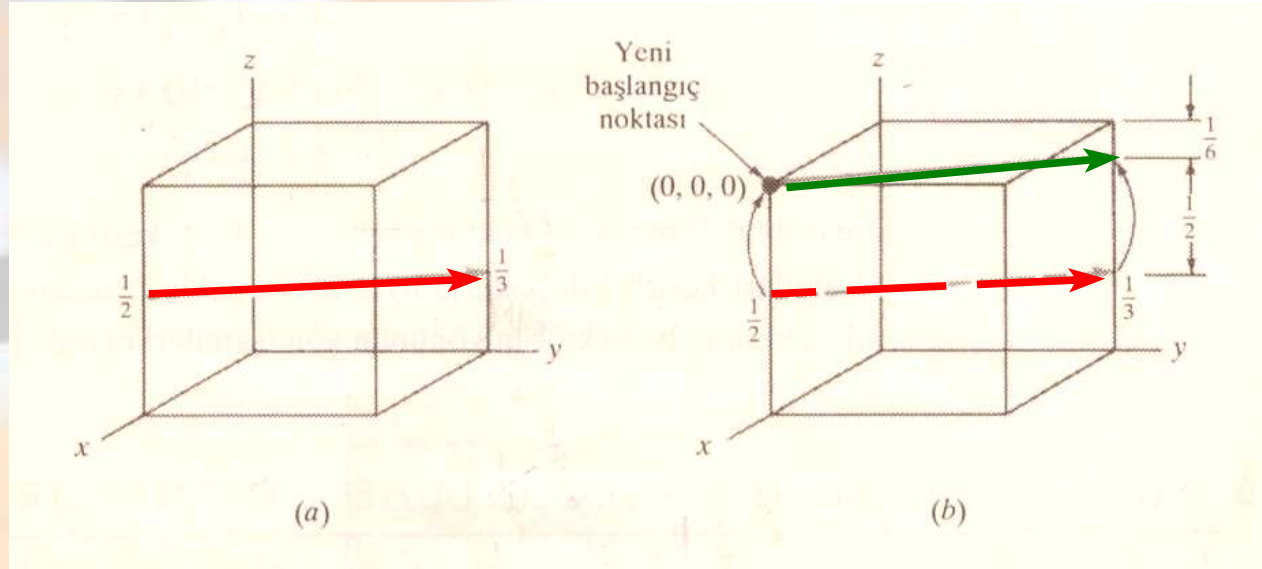
$$y = \frac{1}{2} - 0 = \frac{1}{2}$$

$$z = \frac{1}{2} - \frac{1}{4} = \frac{1}{4}$$

Daha sonra, en büyük payda olan 4 ile hepsini çarpıp vektörün yönünün iaretlerini bulalım.

$$[\bar{2} 2 1]$$

Kristal Do rultuları



a küpünde verilen vektörün yön i aretlerini bulalım.

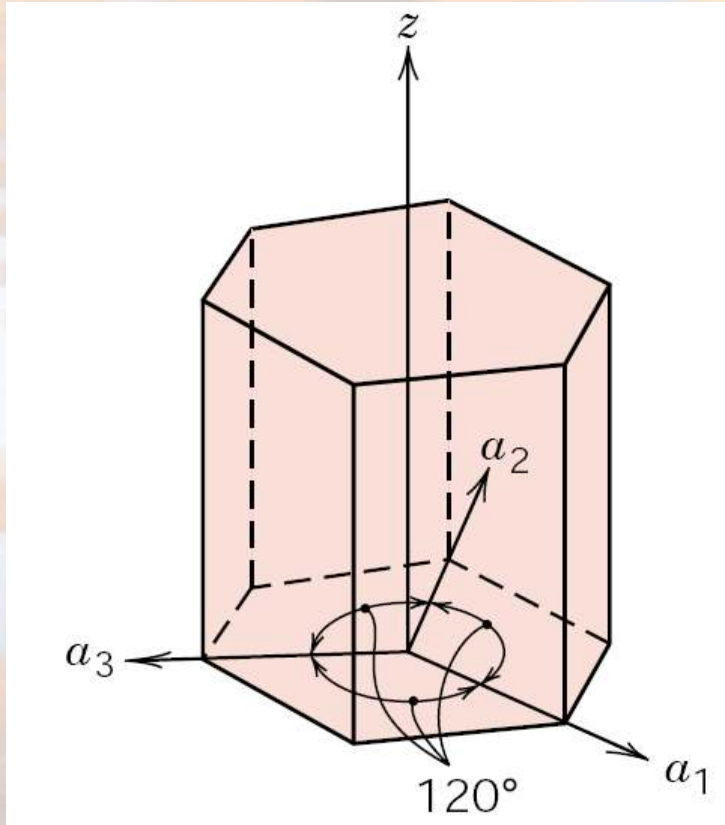
Paralel yönler aynı yön i aretlerine sahiptir. Dolayısıyla yön vektörünü küp içinde kalmak ko uluyla, kuyru u en yakın kö eye de inceye kadar hareket ettirelim. Bu durumda sol üst ön kö e yön vektörünün yeni ba langıç noktası olur. Yön vektörünün küpü terk etti i noktada yön koordinatlarını buluruz.

Bunlar $x= -1$; $y=+1$; $z= -1/6$ olur. Kesiri yok ederseniz, a ıdaki gibi buluruz.

$$[\bar{6}\bar{6}\bar{1}]$$

Kristal Doğrultuları

Hekzagonal birim hücrede kristal doğrultuları Miller-Bravais indeksleri yardımıyla bulunmaktadır.



Üç indeksli sistemden dört indeksli sisteme geçmek gerekmektedir.

$$[u' v' w'] \longrightarrow [u v t w]$$

Geçiş için aşağıdaki formüller kullanılır.

$$u = 1/3 (2u' - v')$$

$$v = 1/3 (2v' - u')$$

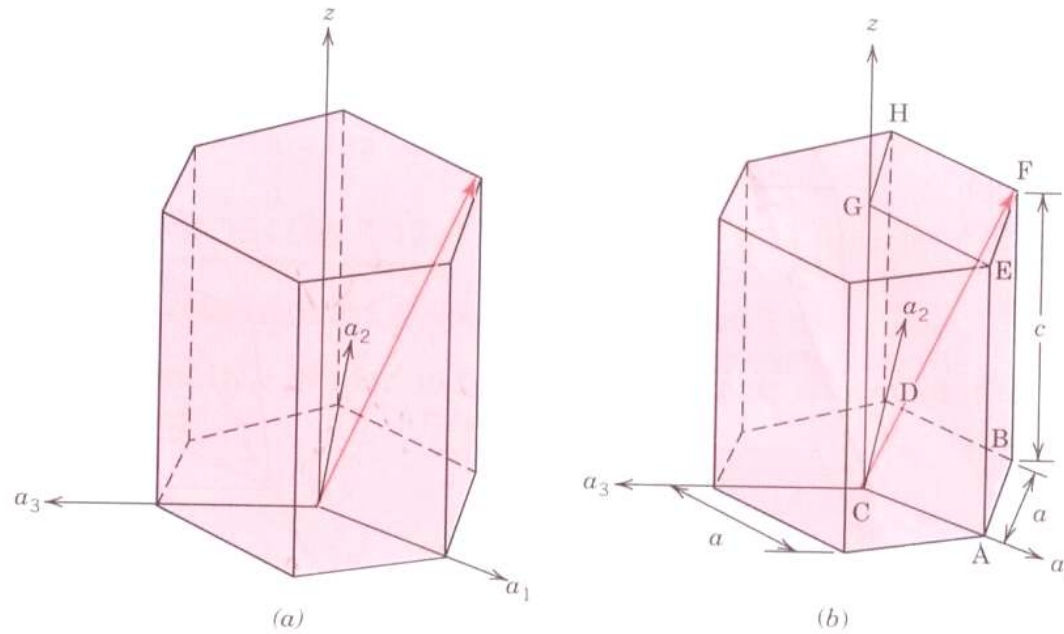
$$t = -(u+v)$$

$$w = w'$$

a_1 , a_2 , a_3 ve z olmak üzere 4 adet koordinat sistemi olduğundan, 3 indeksli sistemden 4 indeksli sisteme geçmek gerekmektedir.

Örnek

Kristal Doğrultuları



$$u' = 1 \quad v' = 1 \quad w' = 1$$

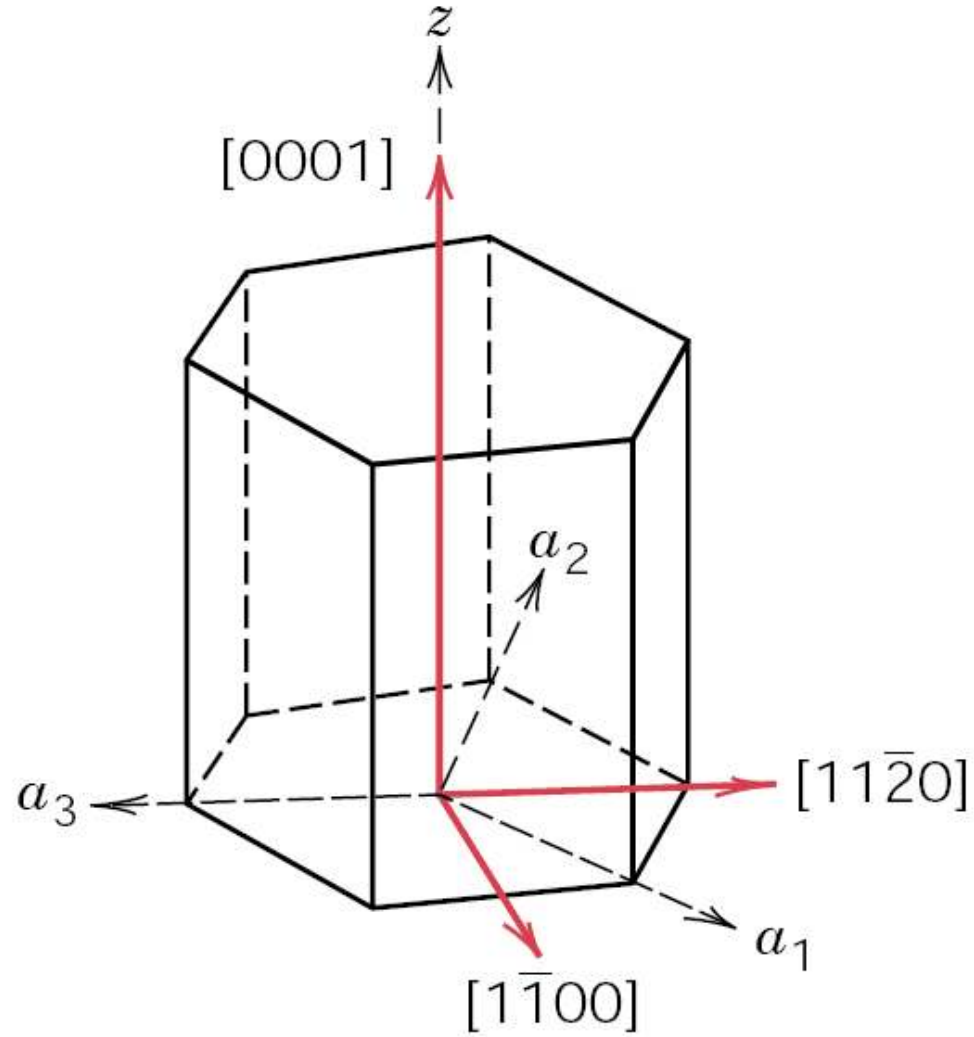
$$u = \frac{1}{3}(2u' - v') = \frac{1}{3}[(2)(1) - 1] = \frac{1}{3}$$

$$v = \frac{1}{3}(2v' - u') = \frac{1}{3}[(2)(1) - 1] = \frac{1}{3}$$

$$t = -(u + v) = -\left(\frac{1}{3} + \frac{1}{3}\right) = -\frac{2}{3}$$

$$w = w' = 1$$

Kristal Doğrultuları

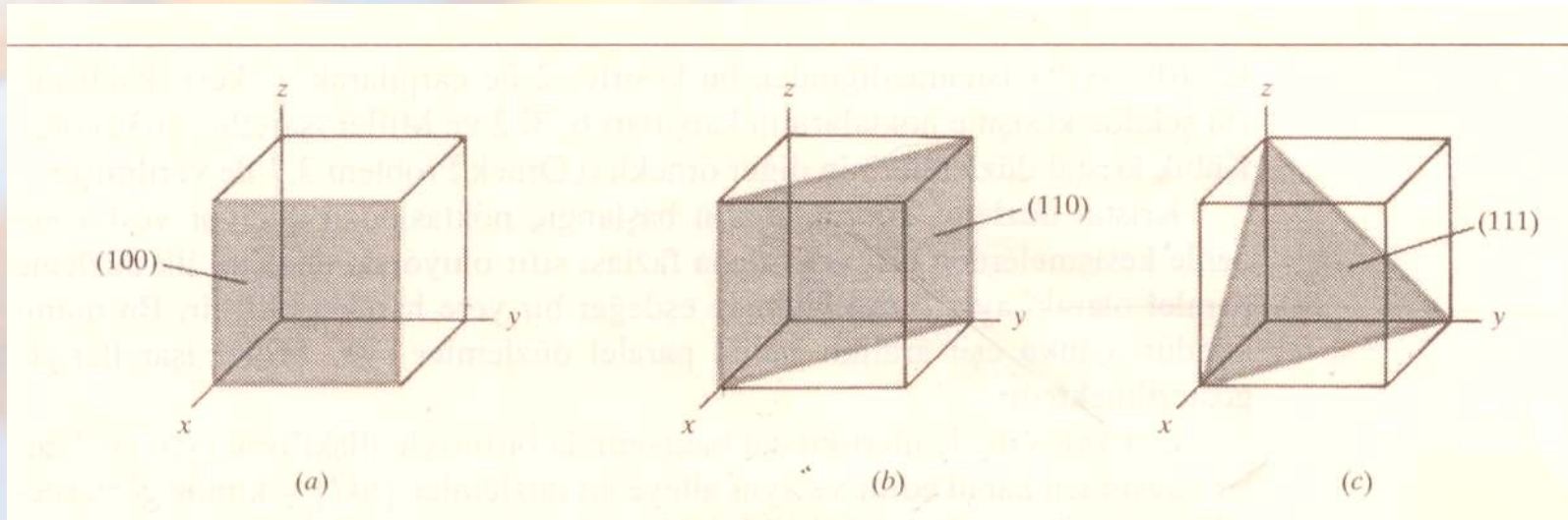


Kristal Düzlemleri

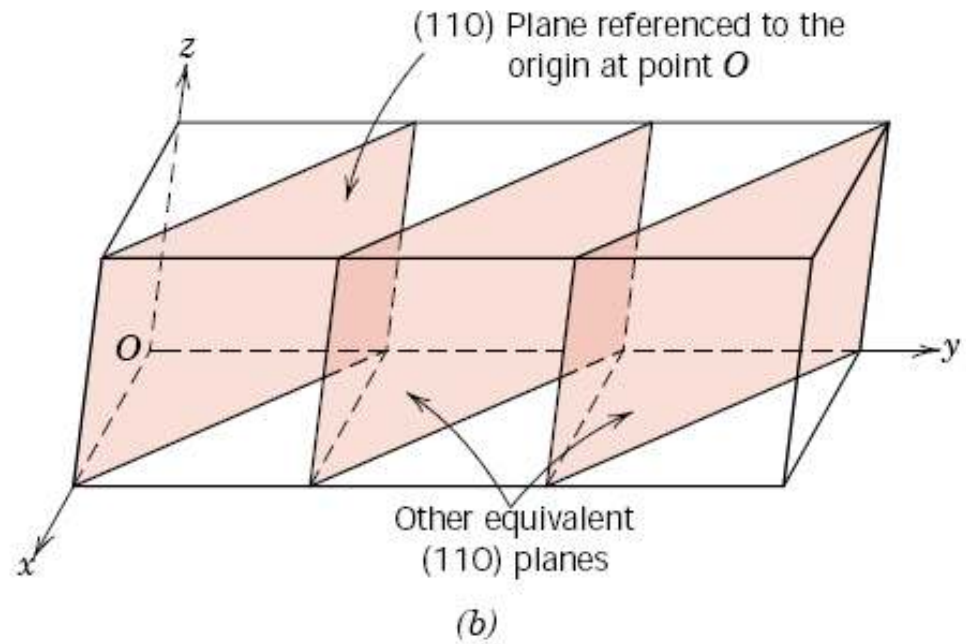
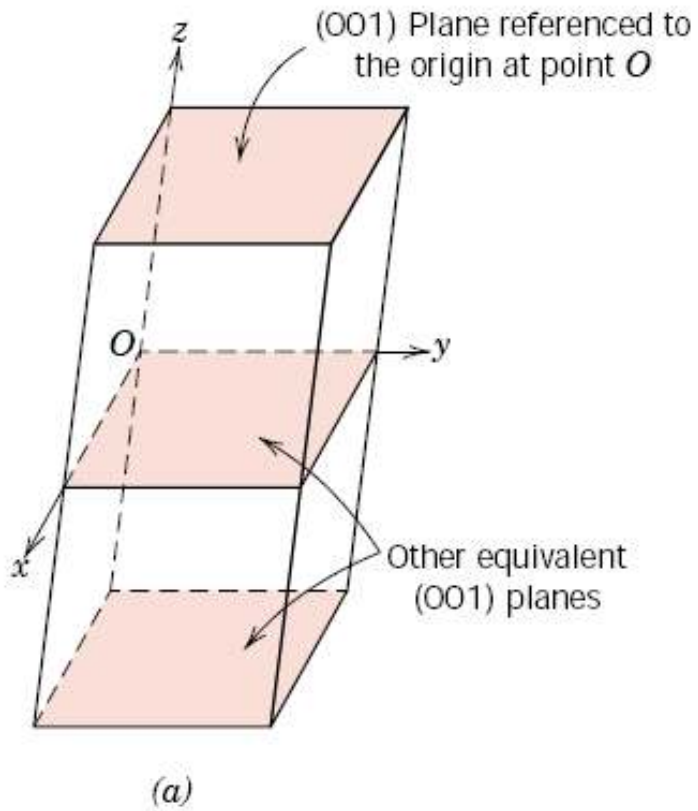
Bazen bir kristal yapıda belirli kafes atom düzlemlerini veya kristal kafesinde bir grup düzlemi belirtmek gerekebilir. Kübik kristal yapılarda kristal düzlemlerini göstermek için Miller i aret düzeni kullanılır.

Bir kübik kristal düzlemin Miller i areti u ekilde bulunur.

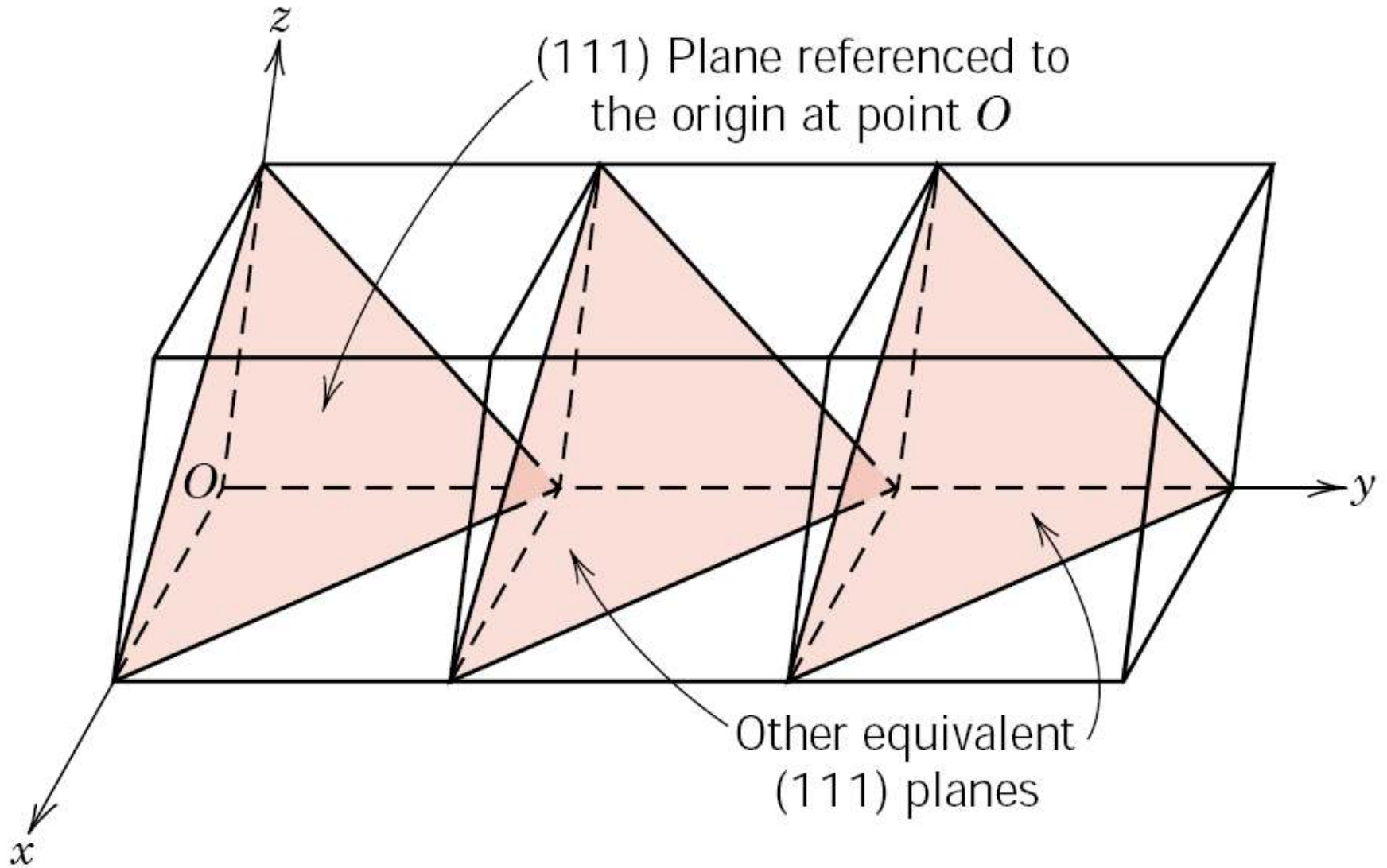
- 1) $(0, 0, 0)$ ba langıç noktasından geçmeyen bir düzlem seçin,
- 2) Düzlemin x, y, z eksenlerini kesti i noktaları bulun,
- 3) Kesi me sayılarının kar ıtlarını bulun,
- 4) Kesirleri tamsayıya çevirin. Parentez içerisinde (hkl) ekinde gösterin.



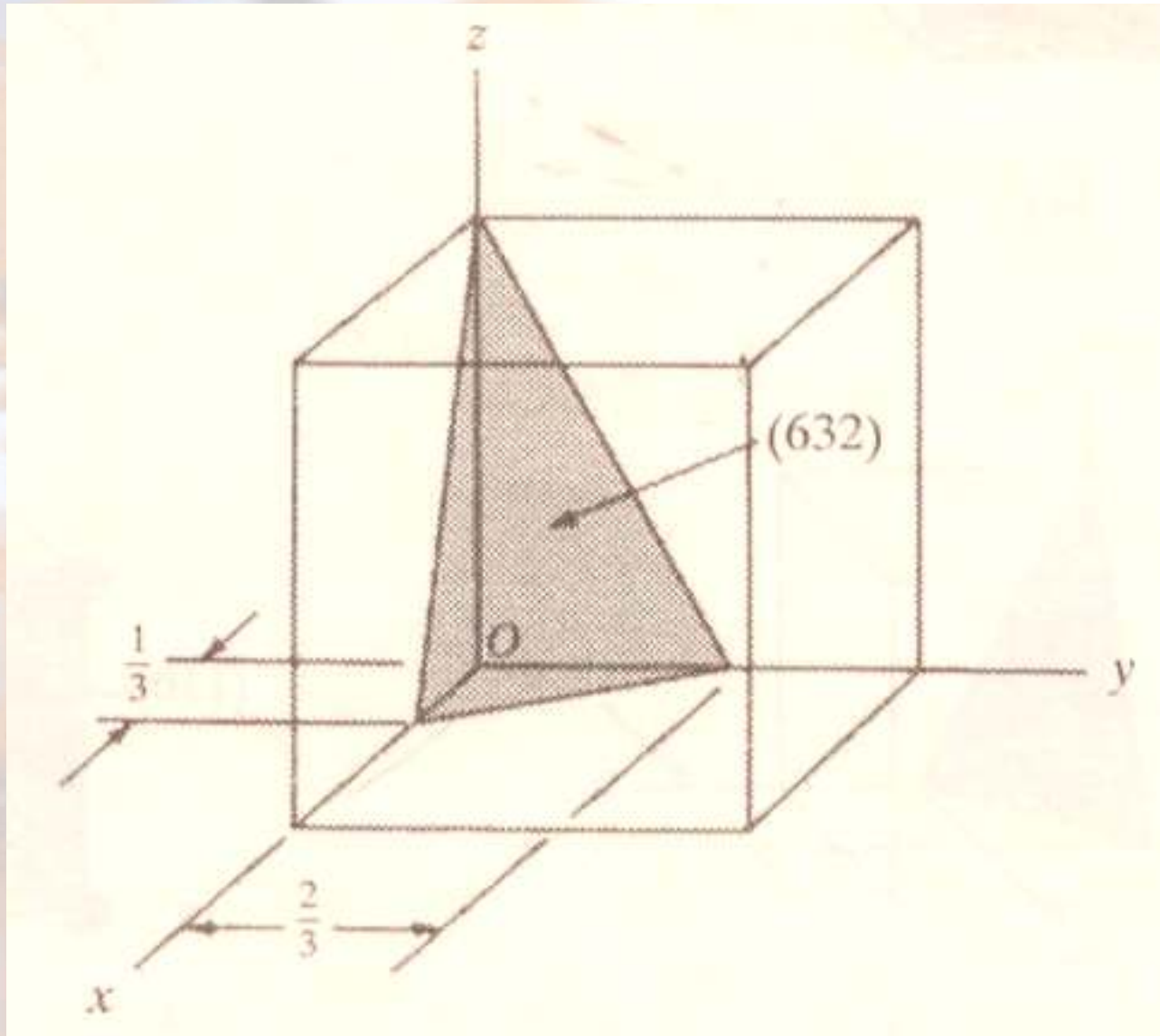
Kristal Düzlemleri



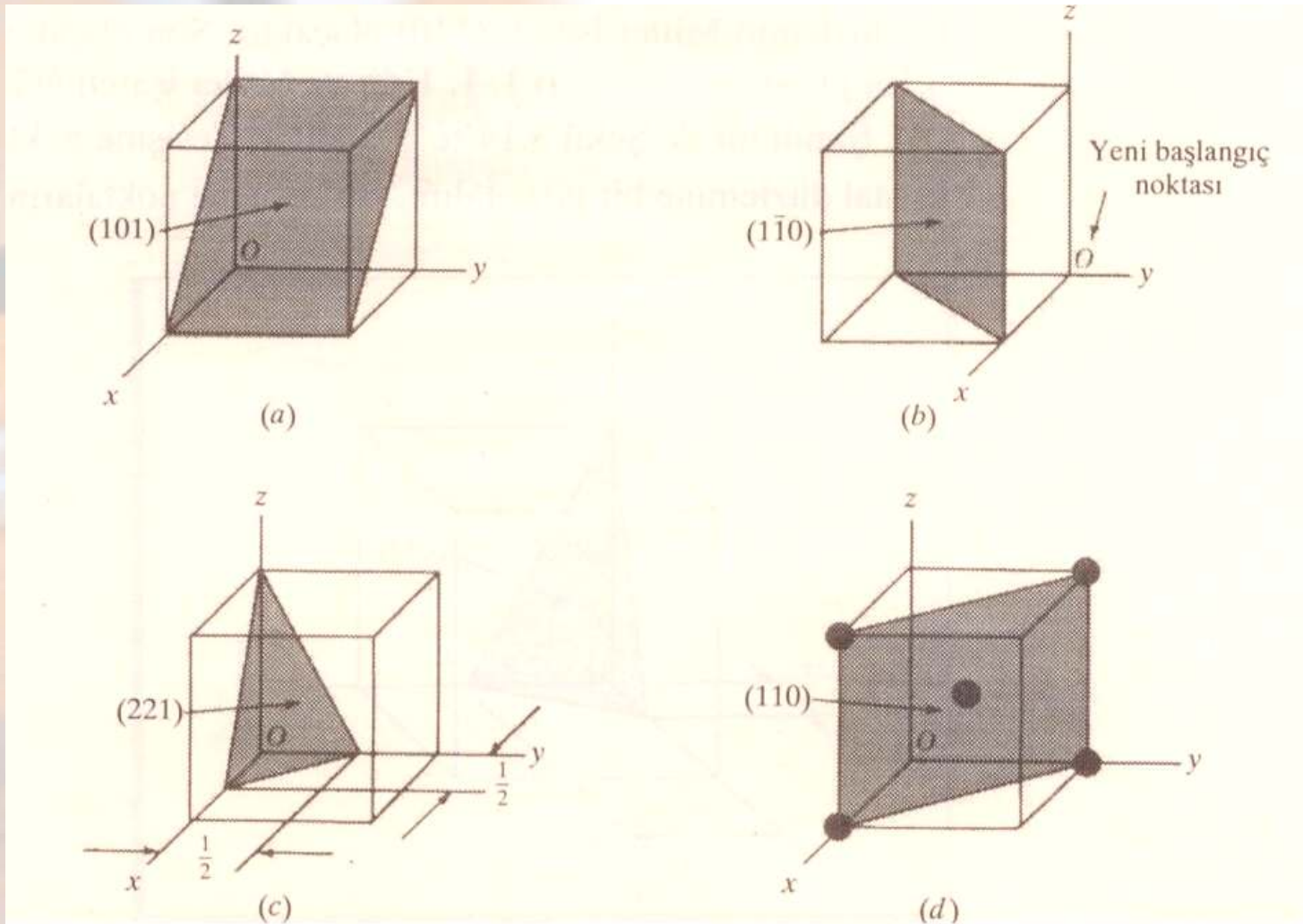
Kristal Düzlemleri



Kristal Düzlemleri

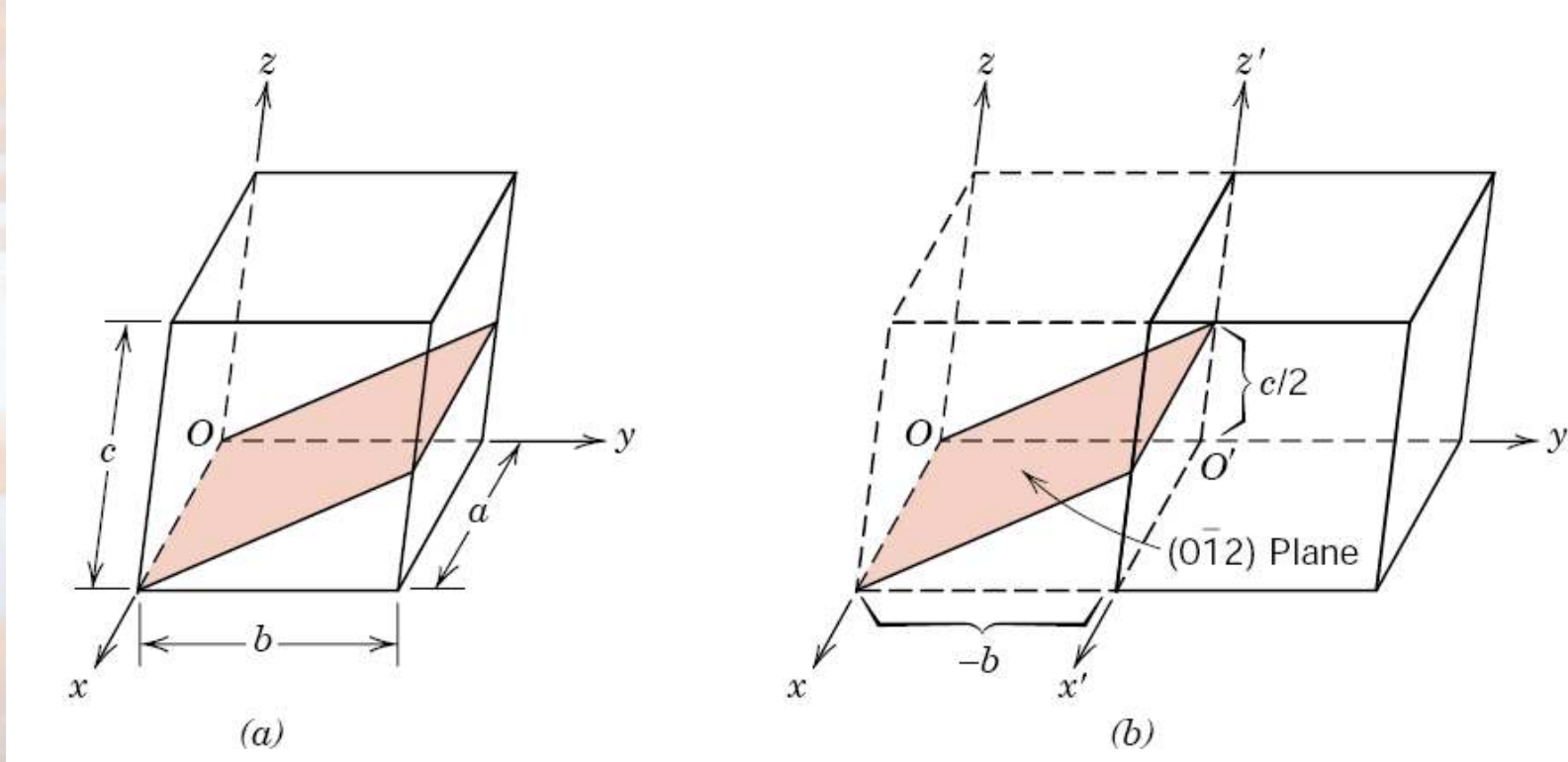


Kristal Düzlemleri



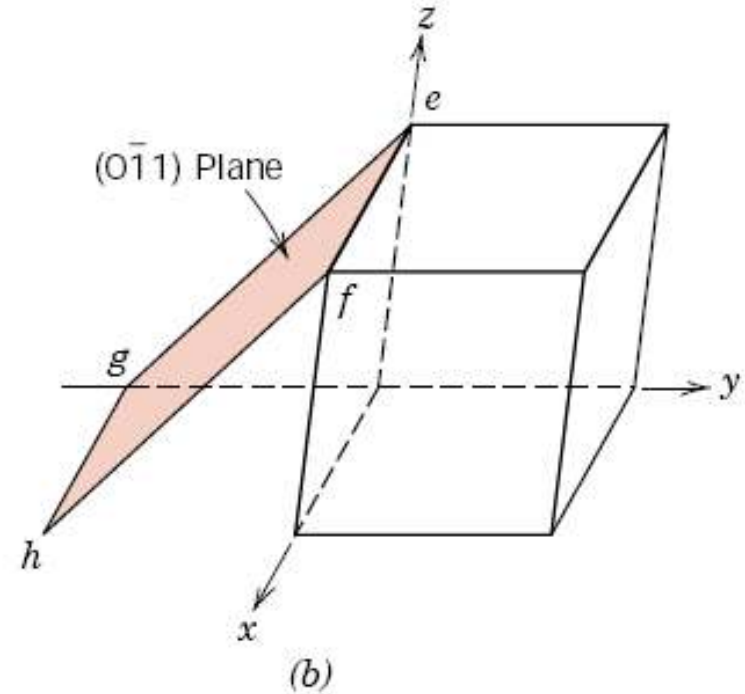
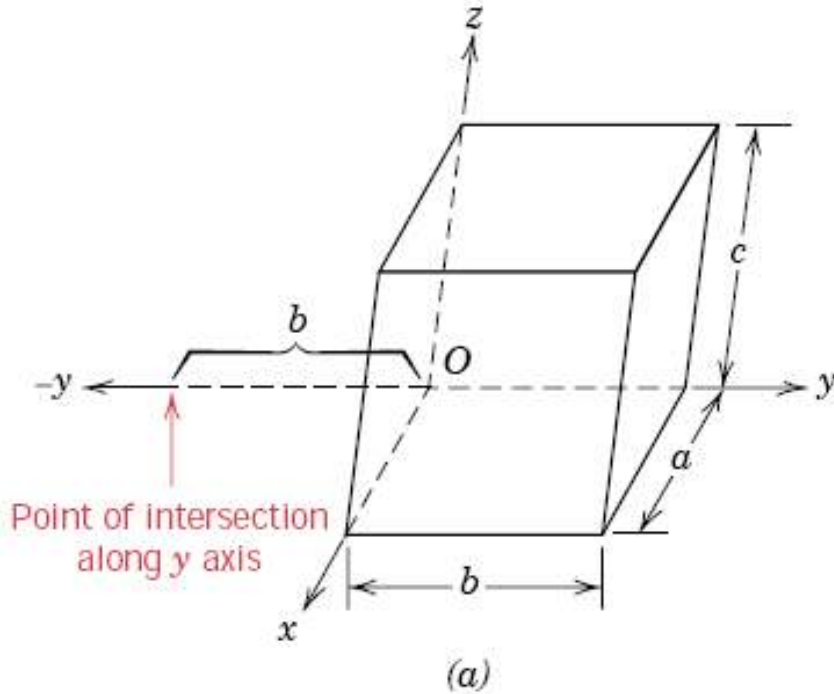
Kristal Düzlemleri

ekil (a)'da verilen düzlemin Miller indisini bulalım.
Düzlem orijinden geçti inden, düzlemin orijinden geçmedi i yeni bir eksen takımını aa ederiz. Bu yeni eksen takımına göre Miller indisini buluruz.



Kristal Düzlemleri

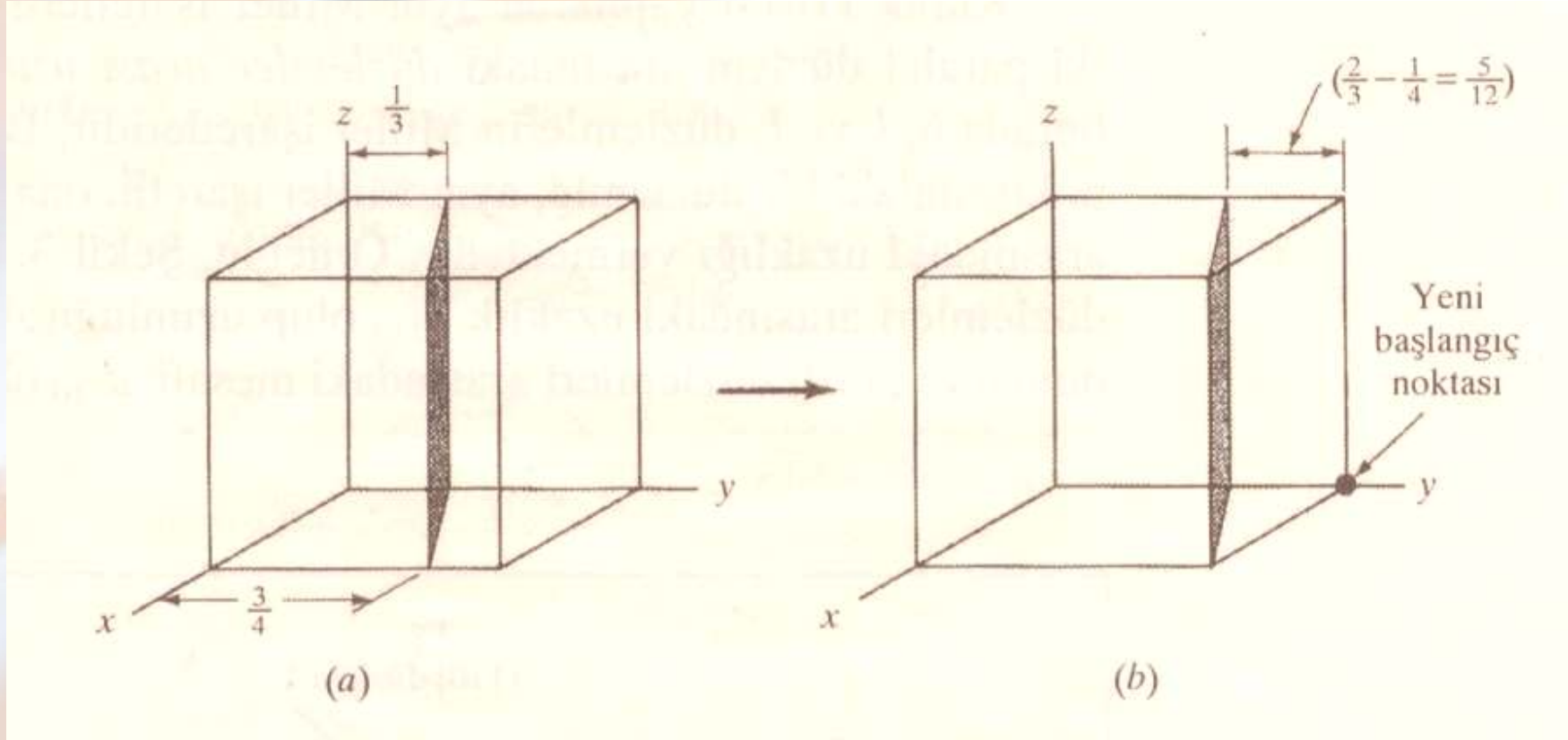
Birim kübik hücrede, $(0\bar{1}1)$ düzlemini gösterelim.



Daha sonra bu düzlemi kübik birim hücre içerisine alalım.

Kristal Düzlemleri

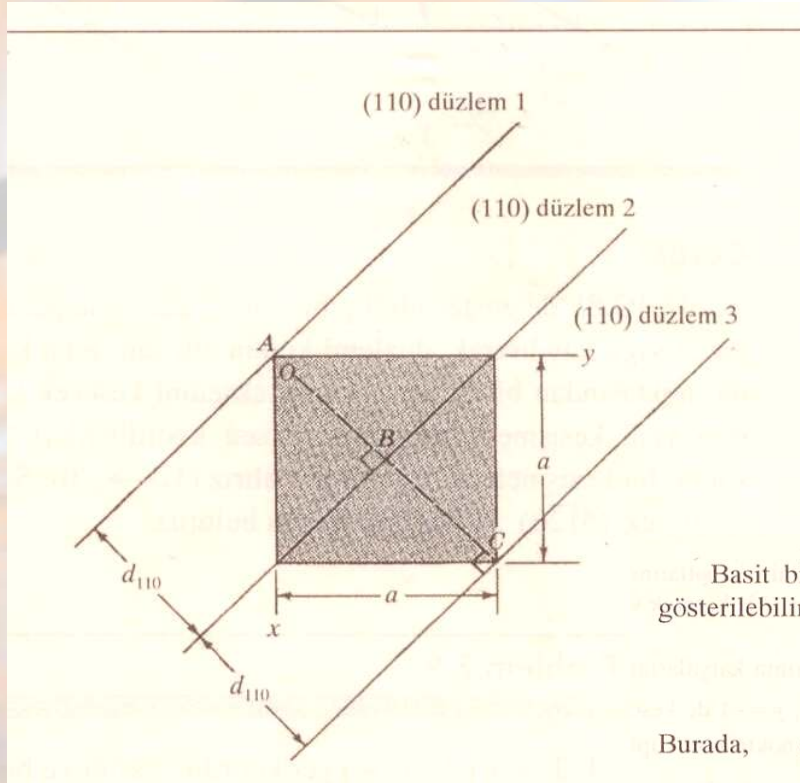
A a ıda verilen düzelemin Miller indisini bulalım.



(5 $\bar{12}$ 0)

Kristal Düzlemleri

Kübik kristal yapılarda aynı Miller i aretlerine sahip birbirlerine en yakın iki paralel düzlem arasındaki **düzlemler arası uzaklık** d_{hkl} ekinde gösterilir.



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

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

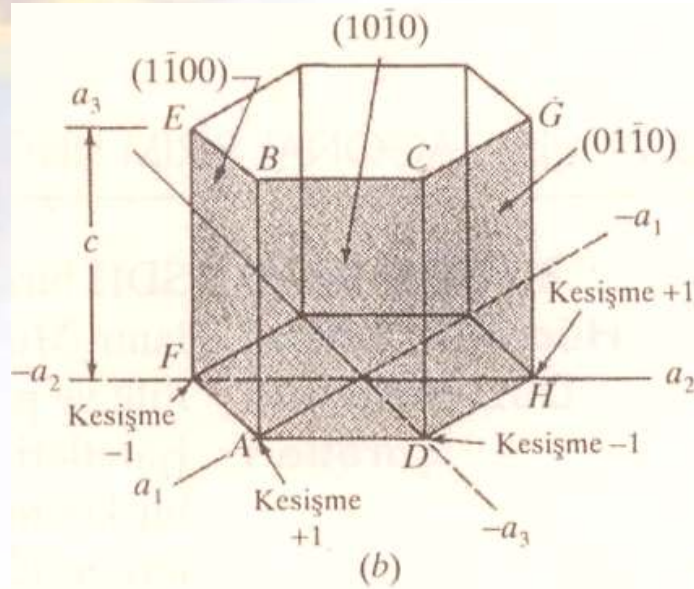
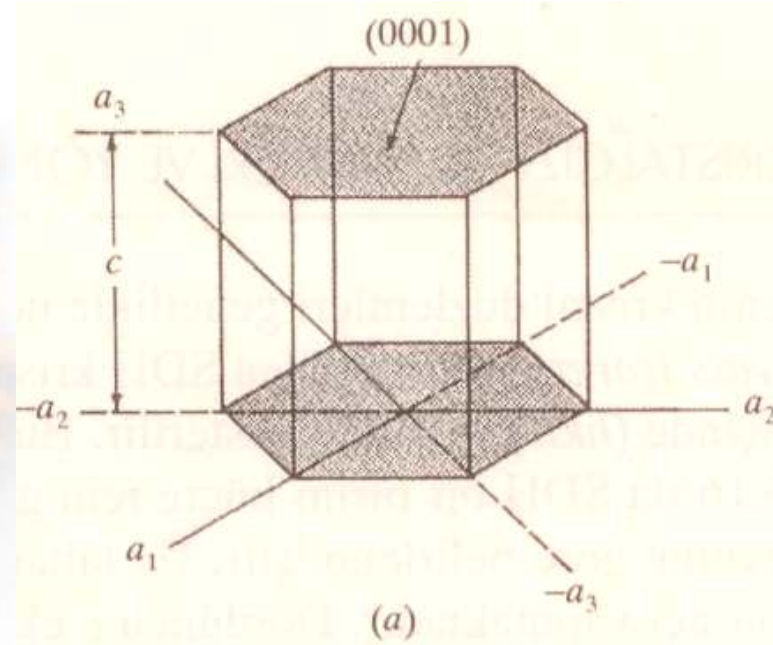
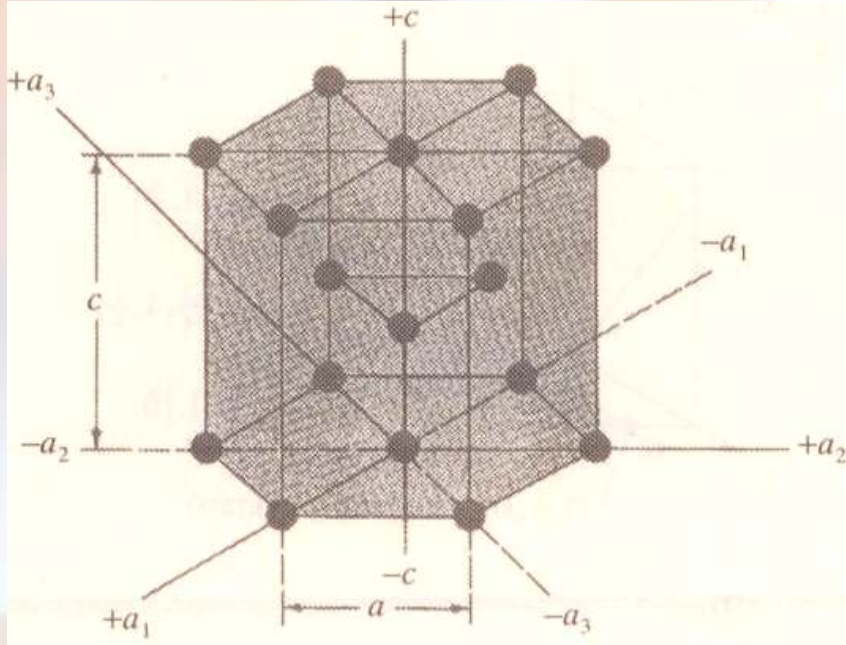
Burada, d_{hkl} = Miller işaretleri h , k ve l olan, birbirine paralel en yakın iki düzlem arasındaki düzlemler arası uzaklık
 a = kafes sabitesi (birim küpün kenarı)
 h , k , l = ilgili küp düzlemlerinin Miller işaretleridir.

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

Çözüm:

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

Kristal Düzlemleri



P. Turgut

www.turgutpaki.com

Birim Hücrede Hacimsel Atom Yo unlu u

Bir metalin birim hücrelerinde sert küre atom modeli ve metalin x-1 ınları kırınımı çözümlenmesinden elde edilen atom yarıçapı kullanılarak metalin hacimsel yo unlu u u formülle bulunur;

$$\text{Metalin hacimsel yoğunluğu} = \rho_v = \frac{\text{kütle/birim hücre}}{\text{hacim/birim hücre}}$$

Bir sonraki slaytta , bakırın yoğunluğu için 8.98 Mg/m³ (8.98 g/cm³) elde ediliyor. Bakır için deneylerle bulunan el kitaplarındaki değer 8.96 Mg/m³ (8.96 g/cm³) olup deneylerle bulunan değer biraz küçük olmasının nedeni, bazı atom yerlerinde, çizgi kusurlarında, tane sınırlarında atomların bulunmamasıdır. Bu kristal kusurları ileride anlatılacaktır . Aradaki farkın bir diğer nedeni olarak atomların tam bir küre olmaması gösterilebilir.

Birim Hücrede Hacimsel Atom Yo unlu u

Bakırın YMK kristal yapısında atom yarıçapı 0.1278 nm'dir. Atomların Şekil 'de görüldüğü gibi YMK birim hücresinin yüzey köşegenleri boyunca birbirine değen sert küreler olduklarını kabul ederek, bakırın kuramsal yoğunluğunu metreküpte megagram cinsinden hesaplayın. Bakırın atomsal kütlesi 63.54 g/mol'dür.

Çözüm:

YMK birim hücrede $\sqrt{2}a = 4R$ olup burada a = birim hücrenin kafes sabiti, R = bakır atomunun yarıçapıdır. Böylece,

$$a = \frac{4R}{\sqrt{2}} = \frac{(4)(0.1278)}{\sqrt{2}} = 0.361 \text{ nm}$$

$$\text{Bakırın hacimsel yoğunluğu} = \rho_v = \frac{\text{kütle/birim hücre}}{\text{hacim/birim hücre}}$$

YMK birim hücrede birim hücre başına dört atom bulunmaktadır. Her bir bakır atomu (63.54 g/mol)/(6.02 × 10²³ atom/mol) kütleyle sahip olacaktır. Buna göre, YMK birim hücredeki Cu atomunun kütlesi (m),

$$m = \frac{(4 \text{ atom})(63.54 \text{ g/mol})}{6.02 \times 10^{23} \text{ atom/mol}} \left(\frac{10^{-6} \text{ Mg}}{\text{g}} \right) = 4.22 \times 10^{-28} \text{ Mg}$$

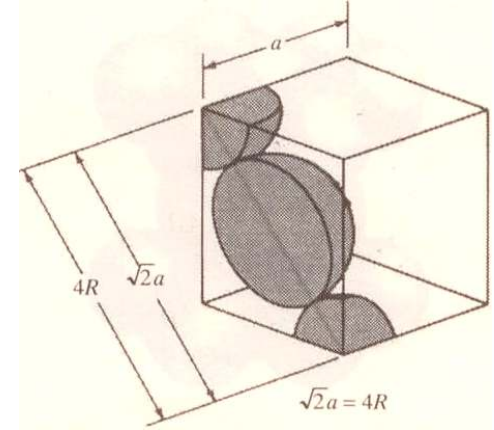
Cu birim hücresinin hacmi,

$$V = a^3 = \left(0.361 \text{ nm} \times \frac{10^{-9} \text{ m}}{\text{nm}} \right)^3 = 4.70 \times 10^{-29} \text{ m}^3$$

Bakırın yoğunluğu,

$$\rho_v = \frac{m}{V} = \frac{4.22 \times 10^{-28} \text{ Mg}}{4.70 \times 10^{-29} \text{ m}^3} = 8.98 \text{ Mg/m}^3 \quad (8.98 \text{ g/cm}^3) \blacktriangleleft$$

olacaktır.



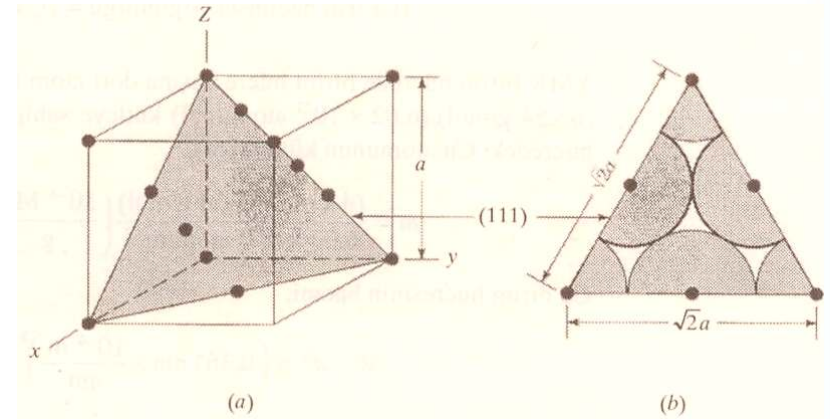
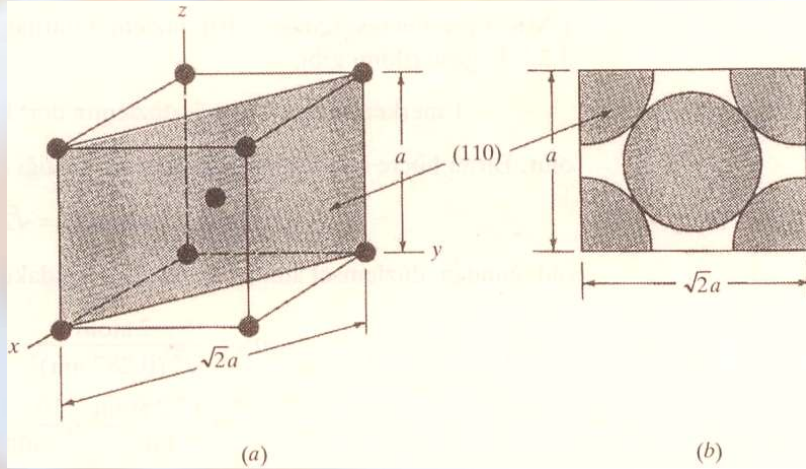
Birim Hücrede Düzlemsel Atom Yoğunluğu

Bazen çeşitli kristal düzlemlerin atom yoğunluklarını hesaplamak gerekebilir. Bunun için, *düzlemsel atom yoğunluğu* denen bir değer aşağıdaki bağıntıdan hesaplanır:

$$\text{Düzlemsel atom yoğunluğu} = \rho_p$$

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

Kolaylık için bu hesaplamalarda, Şekil 1'de HMK birim hücrenin (110) düzlemi için gösterildiği gibi, birim hücreyi kesen alan kullanılır. Bir atomun bu hesaplama katılması için düzlemin atomun merkezinden geçmesi gerekir. Örnek Problem 1'de, (110) düzlemi beş atomun merkezinden geçmesine rağmen, dört köşe atomunun sadece çeyrekleri bu alan içinde olduğundan, toplam olarak eşdeğer iki atom hesaba katılmıştır. YMK kafesindeki (111) düzleminin kesitinde yer alan atomların kapladığı alan Şekil 2'de görülmektedir.



Birim Hücrede Düzlemsel Atom Yo unlu u

HMK α demirinin (110) düzleminin ρ_p düzlemsel atom yoğunluğunu milimetreye dü-
şen atom cinsinden hesaplayın. α demirinin kafes sabitesi 0.278 nm'dir.

Çözüm:

$$\rho_p = \frac{\text{seçilen alan tarafından merkezleri kesilen atomların eşdeğer sayısı}}{\text{seçilen alan}}$$

HMK birim hücresi içinde (110) düzlemi tarafından kesilen eşdeğer atom sayısı, Şekil
'de gösterildiği gibi,

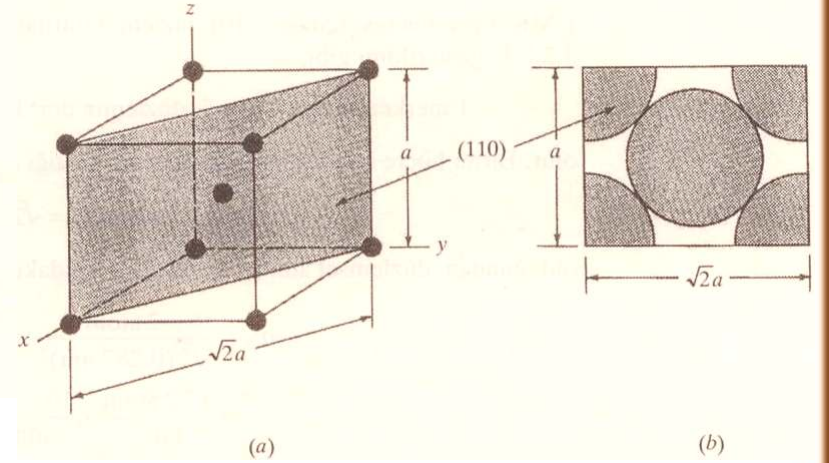
$$1 \text{ merkez atomu} + 4 \times \frac{1}{4} \text{ düzlemin dört köşesindeki atomlar} = 2 \text{ atom}$$

olur. Birim hücre içinde (110) düzleminin kestiği alan (seçilen alan)

$$(\sqrt{2}a)(a) = \sqrt{2}a^2$$

olduğundan, düzlemsel atom yoğunluğu aşağıdaki gibi bulunur:

$$\begin{aligned} \rho_p &= \frac{2 \text{ atom}}{\sqrt{2}(0.287 \text{ nm})^2} = \frac{17.2 \text{ atom}}{\text{nm}^2} \\ &= \frac{17.2 \text{ atom}}{\text{nm}^2} \times \frac{10^{12} \text{ nm}^2}{\text{mm}^2} \\ &= 1.72 \times 10^{13} \text{ atom/mm}^2 \end{aligned}$$



Birim Hücrede Doğrusal Atom Yoğunluğu

Bazen kristal yapıda çeşitli kristal yönlerinin atomsal yoğunluğunu bilmek önemli olabilir. Bu amaçla, aşağıdaki bağıntı kullanılarak, *doğrusal atom yoğunluğu* denen bir değer hesaplanır:

Doğrusal atom yoğunluğu = ρ_l

$$= \frac{\text{belirli bir yönde, seçilen uzunlukta bir çizgi tarafından kesilen atomların sayısı}}{\text{seçilen çizginin uzunluğu}}$$

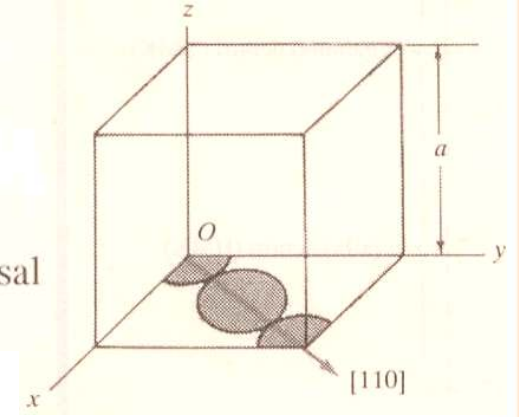
Örnek Problem , saf bakır kristal kafesinin [110] yönündeki doğrusal atom yoğunluğunun nasıl hesaplandığı gösterilmiştir.

Bakır atom kristal kafesinde [110] yönünde doğrusal atom yoğunluğunu milimetreye düşen atom cinsinden hesaplayın. Bakırın YMK kristal yapısının kafes sabiti 0.361 nm'dir.

Çözüm:

Merkezleri [110] yönü ile kesişen atomlar Şekil gösterilmiştir. Çizgi boyu olarak YMK birim hücresi yüzey köşegeninin boyu olan $\sqrt{2}a$ değerini alacağız. Bu boy ile kesişen atom çapları sayısı $\frac{1}{2} + 1 + \frac{1}{2} = 2$ 'dir. Eşitlik kullanarak doğrusal atom yoğunluğu olarak

$$\begin{aligned}\rho_l &= \frac{2 \text{ atom}}{\sqrt{2}a} = \frac{2 \text{ atom}}{\sqrt{2}(0.361 \text{ nm})} = \frac{3.92 \text{ atom}}{\text{nm}} \\ &= \frac{3.92 \text{ atom}}{\text{nm}} \times \frac{10^6 \text{ nm}}{\text{mm}} \\ &= 3.92 \times 10^6 \text{ atom/mm} \leftarrow\end{aligned}$$



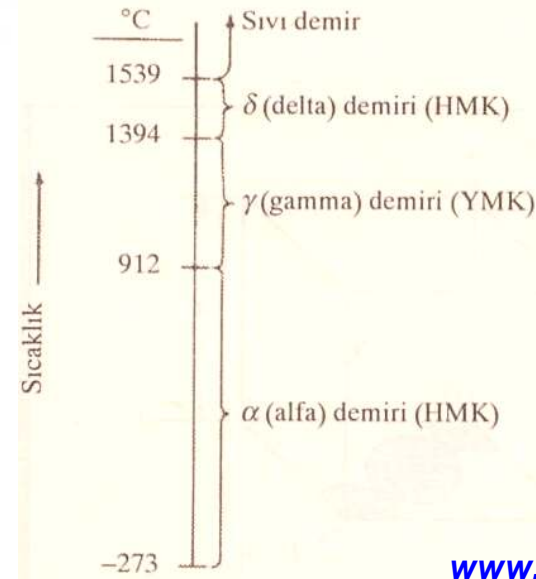
Çok Yapılilik

Elementlerin veya bileşiklerin çoęu, farklı sıcaklık ve basınç koşulları altında birden fazla kristal yapısına sahiptir. Bu olaya *çokyapılılık* denir. Sanayide kullanılan önemli birçok metal, örneęin demir, titanyum ve kobalt yüksek sıcaklık ve basınçlarda çokyapı dönüşümü gösterir. bazı metallerde meydana gelen çokyapılı dönüşümleri ve yapı deęişimlerini vermektedir.

Şekil 'te gösterildięi gibi, demir oda sıcaklığından erime sıcaklığı 1539 °C'a kadar hem HMK hem de YMK halinde bulunur. Alfa demiri (α), -273 °C'tan 912 °C'a kadar HMK yapıdadır. Gamma demiri (γ), 912 °C'tan 1394 °C'a kadar YMK kristal yapıdadır. Delta demiri (δ), 1394 °C'tan, demirin erime noktası 1539 °C'a kadar yine HMK yapıdadır. δ demirinin kristal yapısı da HMK olmakla birlikte, kafes sabitesi α demirinden daha büyüktür.

Bazı Metallerin Çokyapılı Kristal Biçimleri

Metal	Oda sıcaklığında kristal yapısı	Dięer sıcaklıklarda
Ca	YMK	HMK (> 447 °C)
Co	SDH	YMK (> 427 °C)
Hf	SDH	HMK (> 1742 °C)
Fe	HMK	YMK (912-1394 °C) HMK (> 1394 °C)
Li	HMK	SDH (< -193 °C)
Na	HMK	SDH (< -233 °C)
Tl	SDH	HMK (> 234 °C)
Ti	SDH	HMK (> 883 °C)
Y	SDH	HMK (> 1481 °C)
Zr	SDH	HMK (> 872 °C)



Atmosfer basıncında

P. Turgut

www.turgutpaki.com

Çok Yapılılık

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

Çözüm:

YMK birim kristal yapısında atomlar birim hücrenin yüzey köşegeni boyunca birbirine Şekil 'de gösterildiği gibi temas eder:

$$\sqrt{2}a = 4R \quad \text{veya} \quad a = \frac{4R}{\sqrt{2}}$$

HMK birim hücre kristal yapısında atomlar hacim köşegeni boyunca birbirlerine Şekil 'te gösterildiği gibi temas eder.

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

Her bir birim hücrede dört atom bulunan YMK kristal kafesinde atom başına hacim:

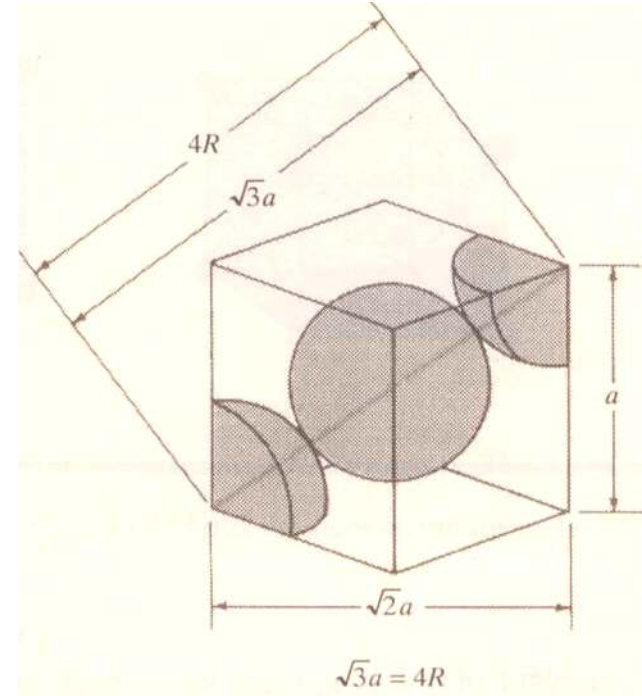
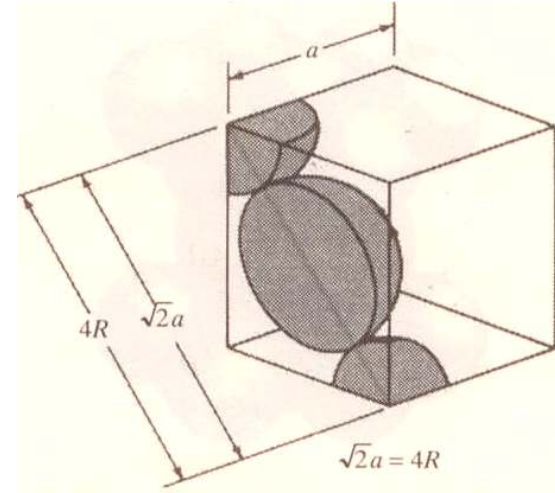
$$V_{\text{YMK}} = \frac{a^3}{4} = \left(\frac{4R}{\sqrt{2}}\right)^3 \left(\frac{1}{4}\right) = 5.66R^3$$

Her bir birim hücrede iki atom bulunan HMK kristal kafesinde atom başına hacim:

$$V_{\text{HMK}} = \frac{a^3}{2} = \left(\frac{4R}{\sqrt{3}}\right)^3 \left(\frac{1}{2}\right) = 6.16R^3$$

Atom yarıçaplarının değişmediği varsayılarak, YMK'den HMK kristal yapısına dönüşme sonucu hacimde meydana gelen değişme:

$$\frac{\Delta V}{V_{\text{YMK}}} = \frac{V_{\text{HMK}} - V_{\text{YMK}}}{V_{\text{YMK}}} = \left(\frac{6.16R^3 - 5.66R^3}{5.66R^3}\right) \%100 = +\%8.8 \blacktriangleleft$$



P. Turgut

www.turgutpaki.com

Metallerde izotropluk ve Anizotropluk (Yöne Ba lılık)

Metallerin fiziksel özellikleri kristal do rultusuna ve düzlemlerine ba lı olarak de i ebilir. Kristal do rultu üzerindeki atomik yada iyonik mesafe farklılı ından kaynaklanmaktadır. Bir malzemenin özellikleri yöne ba lı olarak de i iyorsa, bu tür malzemelere **anizotropik** (yöne ba lı) malzeme adı verilir. E er bir malzemenin özellikleri yöne ba lı olmayıp bütün kristal do rultularında aynı özelliklere sahip ise, bu tür malzemelere **izotropik** malzeme adı verilir.

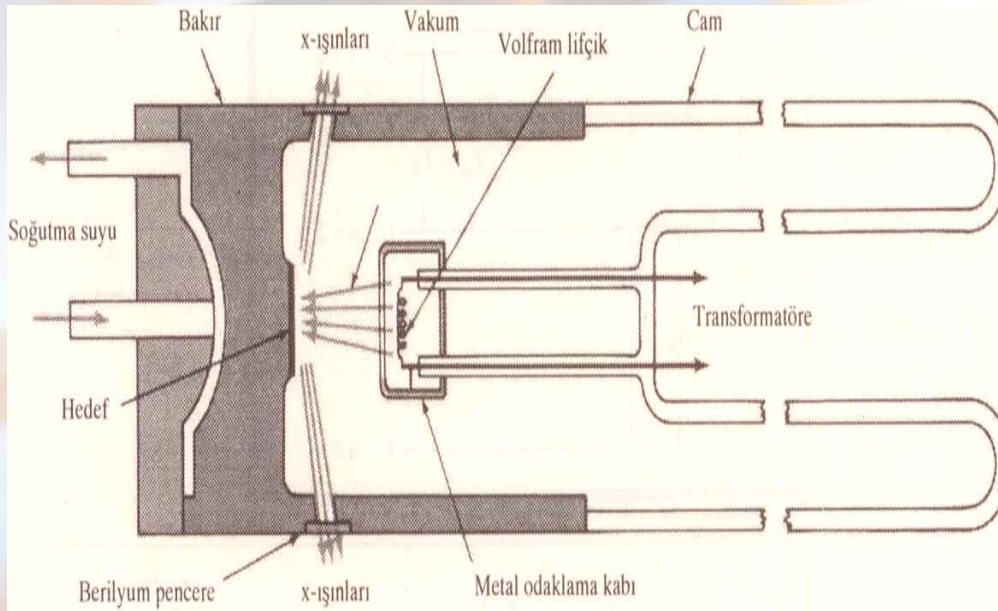
Anizotrop malzemelerin elastisite modülleri ve elektrik iletkenlikleri büyük ölçüde de i ir. Örne in $[100]$ ve $[111]$ do rultularındaki elastisite modülü, elektrik ve ısı iletkenlik de erleri farklı olabilir. Kristalik malzemelerdeki anizotroplu un büyüklü ü, yapısal simetrikli in azalmasıyla artmaktadır.

Metal	<i>Modulus of Elasticity (GPa)</i>		
	$[100]$	$[110]$	$[111]$
Aluminum	63.7	72.6	76.1
Copper	66.7	130.3	191.1
Iron	125.0	210.5	272.7
Tungsten	384.6	384.6	384.6

Kristal Yapısının Bulunması X-I ınları Analizi

X-1 ınları analizi bir metalin kristal yapısını, kristal parametrelerini ve düzlemler arası mesafeleri belirlemek için kullanılan bir tekniktir. Ayrıca bilinmeyen bir malzemenin X-1 ınları analizi yapılarak hangi malzeme oldu u bulunur.

Kırınımında kullanılan X-1 ınları dalga boyları 0.05 ile 0.25 nm (0.5-2.5 Å) arasında de i en elektromıknatıslı dalgalardır.



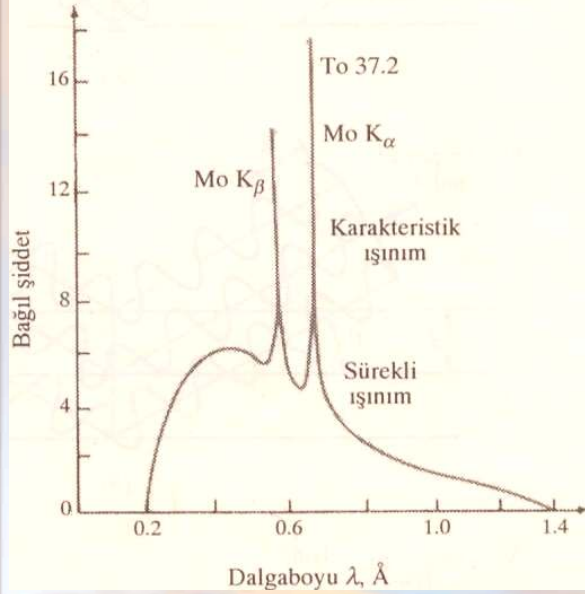
X-1 ını üretmek için her ikisinde vakumda bulunan, katot ile anot hedef metal arasına 35 kV civarında bir voltaj uygulanır. Katotun volfram ipçisi ısıtıldığında, ısı iyonlaşma yayınıyla açığa çıkan elektronlar, büyük voltaj farklığı etkisiyle, vakumdaki anot ile katot arasında hızlanarak kinetik enerji kazanır.

Elektronlar hedefteki metale (örneğin molibden) hızla çarparak X-1 ını açığa çıkarırlar. Fakat kinetik enerjinin çoğu (%98'i) ısıya dönüşümünden, hedef metalin dışarıdan soğutulması gerekmektedir. Dalga boyu 0.02 ile 0.14 nm arasında olan X-1 ınımı demeti olmaktadır ve Ka ve Kb çizgileri diye adlandırılan iki karakteristik ınım diki ortaya çıkmaktadır.

P. Turgut

www.turgutpaki.com

Kristal Yapısının Bulunması X-I ınları Analizi

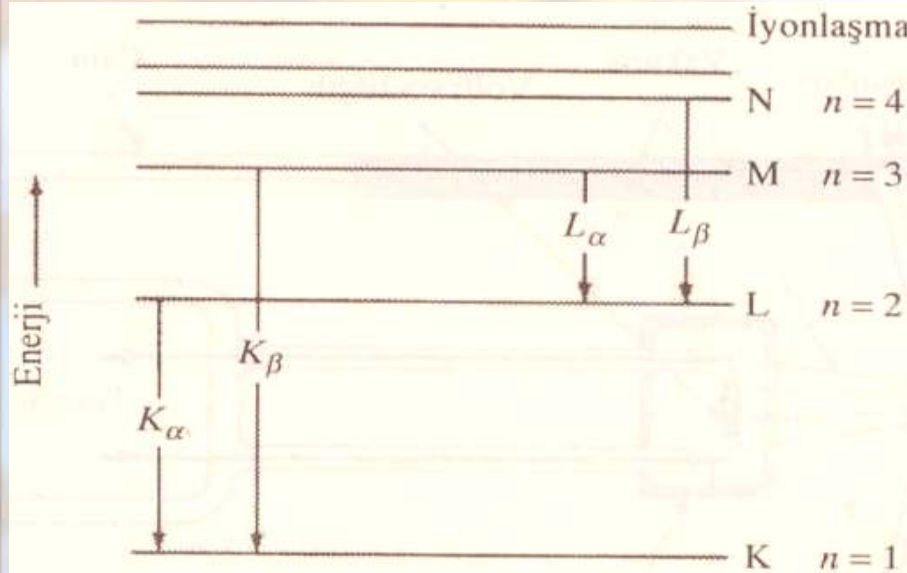


K α ve K β çizgileri elemente özgü çizgilerdir. Molibden için K α çizgisi 0.07 nm civarındadır. Karakteristik ışınımın meydana gelmesi şöyle açıklanır;

Önce, K elektronları (n=1 kabu undaki elektronlar) hedefi bombalayan yüksek enerjili elektronlar tarafından yerlerinden uzakla tırılarak atomu uyarılmış hale getirir.

Daha sonra, yüksek kabuklardaki bazı elektronlar (n=2 veya 3) daha alttaki enerji düzeylerine düşerek K elektronlarının yerini alır ve bu sırada hedef metale özgü dalga boyunda enerji açığa çıkarırlar.

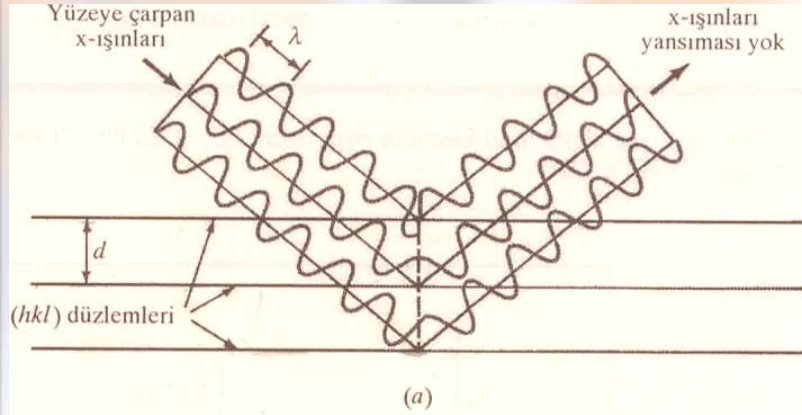
Elektronların L (n=2) kabu undan K (n=1) kabu una geçmeleri ekilde gösterildi i gibi , K α çizgisi dalga boyunda enerji açığa çıkarır.



P. Turgut

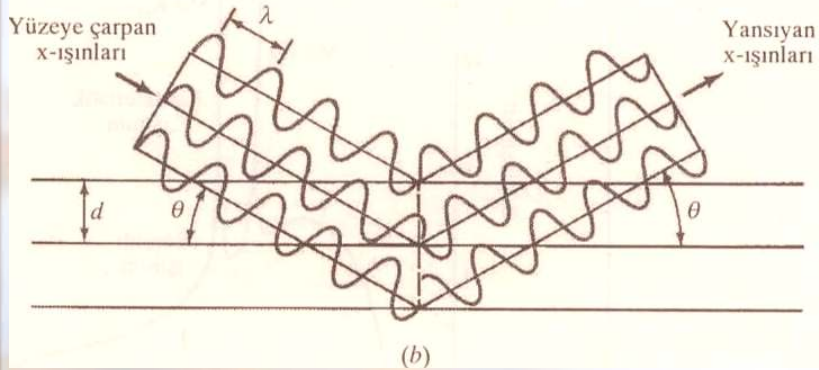
www.turgutpaki.com

Kristal Yapısının Bulunması X-I ınları Analizi



Yandaki ekilde gösterildi i gibi, kristalin kalınlı ını d olarak ve alt alta dizilmi kristal düzlemlerini (hkl) bir ayna gibi dü ünelim. X-1 ınlarının dalga boyu katı kristaldeki atom düzlemleri arasındaki mesafeye e it oldu undan, X-1 ınları demeti bir kristale çarptı ında de i ik 1 ınım iddetlerinde güçlenmi kırınım dikenleri meydana gelir.

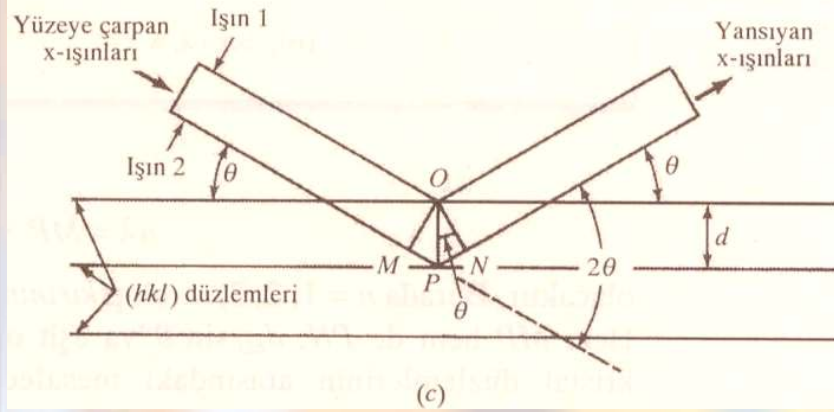
ekildeki yatay çizgileri Miller i aretleri (hkl) bir dizi kristal düzlemini tanımlamaktadır.



ekil a'da tek dalga boyulu bir X-1 ını demeti bir düzlem dizisine birbirini güçlendirmeden ve aynı fazda olmadan yansımasına yol açacak bir açıda çarptı ını dü ünelim. Bu durumda zayıflatıcı giri im meydana gelmektedir.

ekil b'de ise, dalgalar aynı fazda oldu undan güçlendirici giri im meydana gelecektir.

Kristal Yapısının Bulunması X-I ınları Analizi



Yandaki ekilde 1 ve 2 ı ınlarına bakalım; Bu ı ınların aynı fazda olmaları için 2'nin fazladan alması gereken mesafe l 'nın tamsayılı bir katı olan MP+PN mesafesidir. Buna göre,

$$n\lambda = MP + PN$$

Burada, $n=1,2,3,\dots$ olup kırınım basama ı olarak adlandırılmaktadır. Hem MP hem de PN, a ıdaki ba ıntıya e ittir.

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

d_{hkl} , i aretleri hkl olan kristal düzlemlerinin arasındaki mesafedir. Yukarıdaki ba ıntı güçlendiren giri imin ko uludur. Yani, iddetli bir ı ınımın yüksek kırınım dikenini elde edebilme ko uludur.

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

olmalıdır. Bragg yasası adı verilen bu eşitlik, yüzeye çarpan x-ışınının λ dalgaboyu ve d_{hkl} kristal düzlemleri arası mesafe cinsinden, kırınıma uğrayan ışınların birbirini güçlendirmesi için gerekli açısal bağıntıyı vermektedir. Çözümlemede çoğunlukla $n = 1$ olan birinci basamak kırınımı kullanıldığından, Bragg yasası

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

şeklini alacaktır.

P. Turgut

www.turgutpaki.com

Kristal Yapısının Bulunması X-I ınları Analizi

HMK demirden bir numune $\lambda = 0.1541$ nm dalga boyunda x-ışınlarını kullanan bir x-ışını kırınım ölçerine yerleştirilmiştir. $\{110\}$ düzlemlerinden kırınım $2\theta = 44,704^\circ$ 'de elde edilmiştir. HMK demirin a kafes sabitesini hesaplayın (birinci basamak kırınımının $n = 1$ olduğunu kabul edin).

Çözüm:

$$2\theta = 44.704^\circ \quad \theta = 22.35^\circ$$

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

$$d_{110} = \frac{\lambda}{2 \sin \theta} = \frac{0.1541 \text{ nm}}{2(\sin 22.35^\circ)}$$
$$= \frac{0.1541 \text{ nm}}{2(0.3803)} = 0.2026 \text{ nm}$$

Eşitlik yeniden düzenleyerek,

$$a = d_{hkl} \sqrt{h^2 + k^2 + l^2}$$

buluruz. Buradan da aşağıdaki sonucu elde ederiz:

$$a(\text{Fe}) = d_{110} \sqrt{1^2 + 1^2 + 0^2}$$
$$= (0.2026 \text{ nm})(1.414) = 0.287 \text{ nm} \quad \blacktriangleleft$$

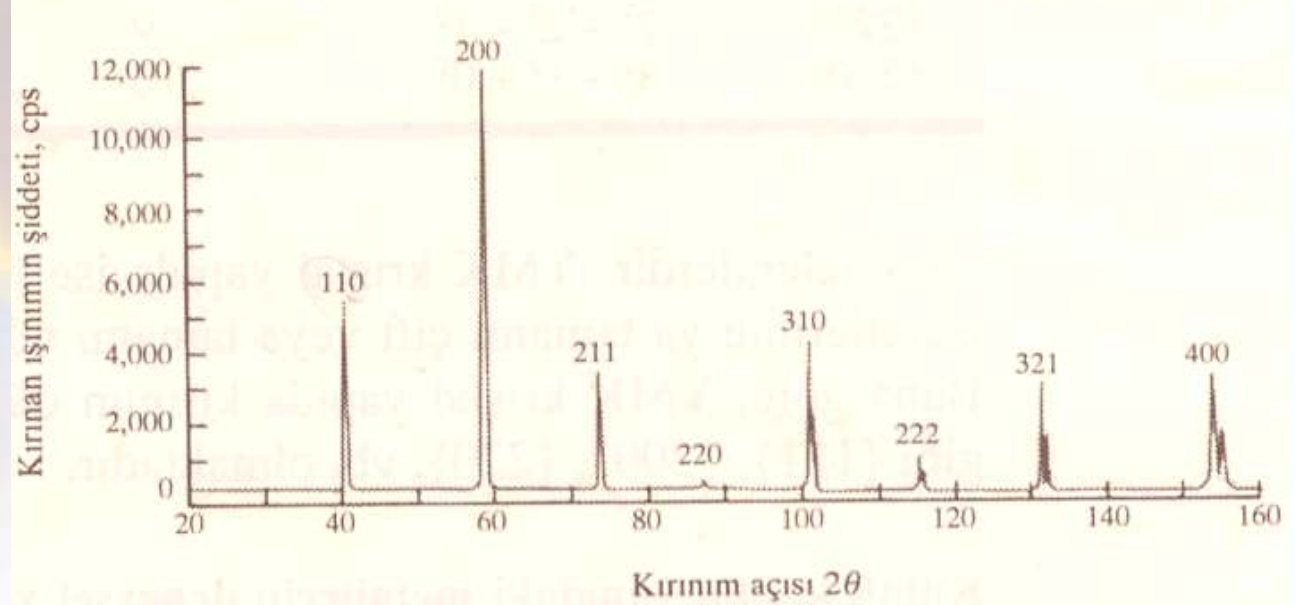
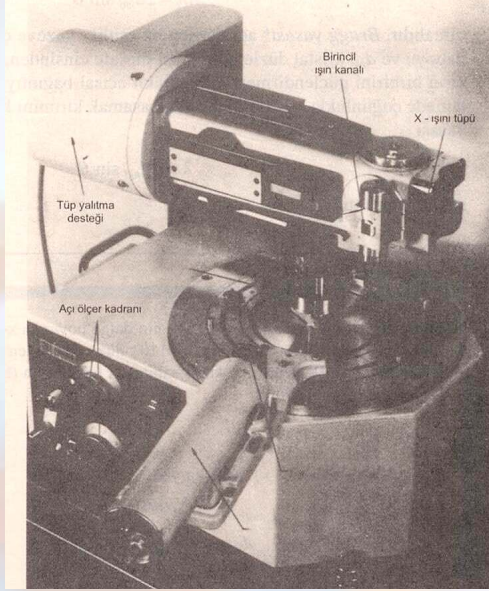
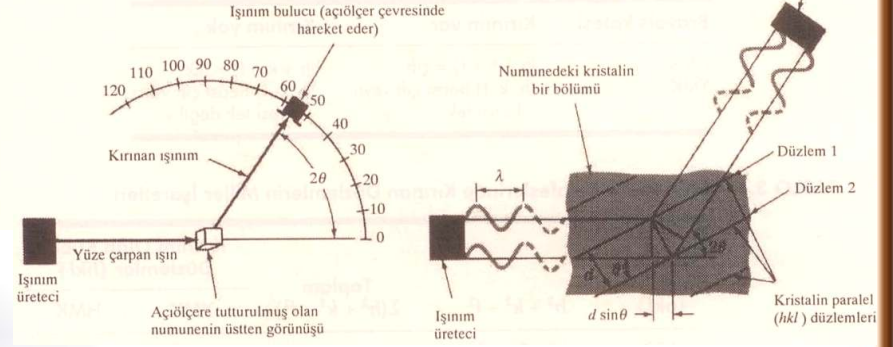
P. Turgut

www.turgutpaki.com

Kristal Yapısının Bulunması X-I ınları Analizi

X-I ını Çözümlemesinde Toz Yöntemi

En yaygın kullanılan x-ışını kırınım tekniği *toz yöntemi*dir. Bu yöntemde, bazı parçacıkların Bragg yasası koşullarını karşıladığından emin olmak için, rastgele yönlenimde birçok kristalin yer aldığı toz numune kullanılır. Modern x-ışını kristal çözümleyiciler kırınımına uğrayan ışının açısını ve şiddetini ölçecek ışınım sayıcılar kullanırlar. Kaydedici, bir açıölçer çevresinde 2θ aralığındaki değerlerde numuneyle hareket ederken kırınım demetinin şiddetini kendiliğinden kaydeder



Volfram elementinin kırınım açıları

P. Turgut

www.turgutpaki.com

Kristal Yapısının Bulunması X-I ınları Analizi

Kübik Birim Hücrelerde Kırınım Ko ulları

X-ışını kırınım teknikleri kristalli katıların yapısını belirlememize yardımcı olmaktadır. Birçok kristal yapının x-ışını kırınım verilerinin yorumlanması karmaşık ve bu kitabın amacı dışındaki bir iş olduğundan, burada sadece basit kübik metallerdeki kırınım ele alınacaktır. Kübik hücrelerin x-ışını kırınım verilerinin çözülmesi için,

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

Bragg eşitliği $\lambda = 2d \sin \theta$ ile birleştirilir:

$$\lambda = \frac{2a \sin \theta}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}}$$

Bu eşitlik x-ışını kırınım verileriyle birlikte kullanılarak kristal yapısının hacim merkezli kübik mi yoksa yüzey merkezli kübik mi olduğu bulunur. Aşağıda bunun nasıl yapıldığı anlatılmaktadır.

Eşitlik 'i kırınım çözümlemesinde kullanabilmek için her kristal türünde hangi kristal düzlemlerinin kırınım düzlemleri olduğunu bilmemiz gerekir. Basit kübik kafes için bütün (hkl) düzlemlerinden kırınım mümkündür. Fakat, HMK yapıda sadece Miller işaretleri toplandığında $(h + k + l)$ çift sayı olan düzlemler üzerinde kırınım olmaktadır Yani HMK kristal yapıda temel kırınım düzlemleri, Tablo 'de sıralanan $\{110\}$, $\{200\}$, $\{211\}$,

Kristal Yapısının Bulunması X-I ınları Analizi

Kübik Birim Hücrelerde Kırınım Ko ulları

Kübik Kristallerin Kırınım Olan $\{hkl\}$ Düzlemlerini Belirleme Kuralları				
Bravais kafesi	Kırınım var	Kırınım yok		
HMK	$(h + k + l) = \text{çift}$	$(h + k + l) = \text{tek}$		
YMK	(h, k, l) hepsi çift veya hepsi tek	(h, k, l) hepsi çift veya hepsi tek değil		

HMK ve YMK Kafeslerinde Kırınan Düzlemlerin Miller İşaretleri				
Kübik Düzlemler $\{hkl\}$	$h^2 + k^2 + l^2$	Toplam $\Sigma(h^2 + k^2 + l^2)$	Kırınım Olan Kübik Düzlemler $\{hkl\}$	
			YMK	HMK
{100}	$1^2 + 0^2 + 0^2$	1		
{110}	$1^2 + 1^2 + 0^2$	2	...	110
{111}	$1^2 + 1^2 + 1^2$	3	111	
{200}	$2^2 + 0^2 + 0^2$	4	200	200
{210}	$2^2 + 1^2 + 0^2$	5		
{211}	$2^2 + 1^2 + 1^2$	6	...	211
...		7		
{220}	$2^2 + 2^2 + 0^2$	8	220	220
{221}	$2^2 + 2^2 + 1^2$	9		
{310}	$3^2 + 1^2 + 0^2$	10	...	310

Kristal Yapısının Bulunması X-I ınları Analizi

vb. düzlemlerdir. YMK kristal yapıda ise temel kırınım düzlemlerinin Miller işaretlerinin ya tamamı çift veya tamamı tektir (sıfır, çift kabul edilmektedir). Buna göre, YMK kristal yapıda kırınım düzlemleri Tablo 'de gösterildiği gibi $\{111\}$, $\{200\}$, $\{220\}$, vb. olmaktadır.

Kübik kristal yapıdaki metallerin deneysel x-ışını kırınım verilerinin yorumlanması Kristal yapılarını belirlemek için x-ışını kırınım ölçülerini kullanabiliriz. Bu çözümlenmelerin HMK ve YMK kristal yapılarını birbirinden ayırmada nasıl kullanılabileceğini basit bir örnek üzerinde görelim. Şimdi, Şekil 'deki volfram metalinde olduğu gibi, HMK veya YMK kristal yapısında bir metalimiz olduğunu ve temel kırınım düzlemlerinin hangileri olduğunu ve bunlara karşılık gelen 2θ değerlerini bildiğimizi kabul edelim.

Eşitlik 'in her iki tarafının karesini alarak ve $\sin^2 \theta$ 'yı çözerek

$$\sin^2 \theta = \frac{\lambda^2 (h^2 + k^2 + l^2)}{4a^2}$$

elde ederiz. X-ışını kırınım verilerinden temel kırınım $\{hkl\}$ düzlemleri dizini için deneysel 2θ değerlerini elde edebiliriz. Gelen ışınının dalgaboyunun ve kafes sabitelerinin her ikisi de sabit olduğundan, iki $\sin^2 \theta$ oranı oluşturarak bu değerleri ortadan kaldırabiliriz:

Kristal Yapısının Bulunması X-I ınları Analizi

$$\frac{\sin^2 \theta_A}{\sin^2 \theta_B} = \frac{h_A^2 + k_A^2 + l_A^2}{h_B^2 + k_B^2 + l_B^2}$$

Burada θ_A ve θ_B sırasıyla $\{h_A k_A l_A\}$ ve $\{h_B k_B l_B\}$ temel kırınım düzlemleri içindeki iki kırınım açısıdır.

Eşitlik 'ü ve Tablo 'de sıralanan iki takım temel kırınım düzleminin Miller işaretlerini kullanarak, hem HMK hem de YMK yapıların $\sin^2 \theta$ oranlarının değerlerini bulabiliriz.

HMK yapı için temel kırınım düzlemlerinin ilk iki takımı $\{100\}$ ve $\{200\}$ düzlemleridir (Tablo). Bu düzlemlerin Miller $\{hkl\}$ işaretlerini Eşitlik 'e yerleştirerek

$$\frac{\sin^2 \theta_A}{\sin^2 \theta_B} = \frac{1^2 + 1^2 + 0^2}{2^2 + 0^2 + 0^2} = 0.5$$

elde ederiz. Bu durumda, eğer kristal yapısı bilinmeyen metal HMK ise, ilk iki temel kırınım düzlemine ait $\sin^2 \theta$ değerlerinin oranı 0.5 olacaktır.

YMK kristal yapısında temel kırınım düzlemlerinin ilk iki takımı $\{111\}$ ve $\{200\}$ düzlemleridir (Tablo 3.7). Bu düzlemlerin Miller işaretlerini Eşitlik 'e koyarak

$$\frac{\sin^2 \theta_A}{\sin^2 \theta_B} = \frac{1^2 + 1^2 + 1^2}{2^2 + 0^2 + 0^2} = 0.75 \quad (3.15)$$

elde ederiz. Buna göre, eğer bilinmeyen kübik metalin kristal yapısı YMK ise ilk iki temel kırınım düzlemlerinin $\sin^2 \theta$ değerlerinin oranı 0.75 olacaktır.

Kristal Yapısının Bulunması X-I ınları Analizi

Örnek Problem 'da, bilinmeyen kübik metalin HMK mi yoksa YMK mi olduğunu belirlemek için, Eşitlik ve temel kırınım düzlemlerinin 2θ değerlerine ait deneysel veriler kullanılmıştır. Aslında x-ışınları kırınım çözümlemesi Örnek Problem 'dan çok daha karmaşık olmakla birlikte, çözümleme esasları aynıdır. Hem deneysel hem de kuramsal x-ışını çözümleme yöntemleri, malzemelerin kristal yapılarının belirlenmesinde önemli bir araç olmaya devam edecektir.

Örnek Problem

HMK mi YMK mi olduğu bilinmeyen bir kristal yapısına sahip bir elementin x-ışınları kırınım ölçeri kaydedicisi şu 2θ açısında dikenler vermektedir: 40, 58, 73, 86.8, 100.4 ve 114.7. Çözümlemede kullanılan ışının dalgaboyu 0.154 nm'dir.

- Elementin kübik yapısını belirleyin.
- Elementin kafes sabitesini belirleyin.
- Elementi belirleyin.

Çözüm:

- Elementin kristal yapısının belirlenmesi. Önce 2θ kırınım açılarından $\sin^2 \theta$ değerleri hesaplanır.

Kristal Yapısının Bulunması X-I ınları Analizi

2θ , derece	θ , derece	Sin θ	Sin ² θ
40	20	0.3420	0.1170
58	29	0.4848	0.2350
73	36.5	0.5948	0.3538
86.8	43.4	0.6871	0.4721
100.4	50.2	0.7683	0.5903
114.7	57.35	0.8420	0.7090

Sonra birinci ve ikinci açların $\sin^2 \theta$ değerlerinin oranı hesaplanır:

$$\frac{\sin^2 \theta}{\sin^2 \theta} = \frac{0.117}{0.235} = 0.498 = 0.5$$

Oran ≈ 0.5 olduğunda kristal yapısı HMK'dir. Eğer oran ≈ 0.75 olsaydı yapı YMK olacaktı.

(b) Kafes sabitesinin bulunması. Eşitlik yeniden düzenlenip a^2 çözümlenerek

$$a^2 = \frac{\lambda^2}{4} \frac{h^2 + k^2 + l^2}{\sin^2 \theta}$$

veya

$$a = \frac{\lambda}{2} \sqrt{\frac{h^2 + k^2 + l^2}{\sin^2 \theta}} \quad (3.17)$$

bulunur. Eşitlik e HMK kristal yapısının {110} birinci takım temel kırınım düzlemlerinin h , k ve l Miller işaretleri için $h = 1$, $k = 1$ ve $l = 0$ değerlerini, buna karşılık gelen $\sin^2 \theta$ değeri 0.117'yi ve gelen ışının $\lambda = 0.154$ değerini koyarak

$$a = \frac{0.154 \text{ nm}}{2} \sqrt{\frac{1^2 + 1^2 + 0^2}{0.117}} = 0.318 \text{ nm}$$

elde edilir.

(c) Elementin belirlenmesi. Elementin kafes sabitesi 0.316 nm ve yapısı HMK olduğundan element volframdır.

P. Turgut

www.turgutpaki.com