

ÖRGÜ DOĞRULTULARI

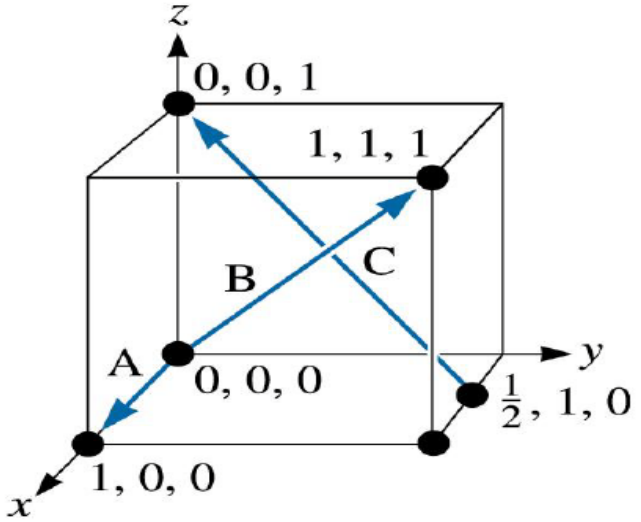
Kübik sistemde doğrultu ve düzlemler miller indisleri ile ifade edilir

- Birim hücrede başlangıç ve bitiş koordinatları belirlenir
- Başlangıç koordinatları, bitiş koordinatlarından aritmetik olarak çıkarılır

Miller indisleri **kesirli olamaz**, tam sayı olmalıdırlar. Gerekirse orantılı olarak en küçük tam sayıya dönüştürülür.

Köşeli parantez içine virgülsüz yazılır.

Düzlem yönelimi veya doğrultusu



Doğrultu *A* (Başlangıç)

1. Başlangıç ve bitiş: 1, 0, 0 ve 0, 0, 0
2. $1, 0, 0 - 0, 0, 0 = 1, 0, 0$
3. Kesir veya büyük tam sayı yok.
4. [100]

Doğrultu *B* (Başlangıç)

1. Başlangıç ve bitiş: 1, 1, 1 ve 0, 0, 0
2. $1, 1, 1 - 0, 0, 0 = 1, 1, 1$
3. Kesir veya büyük tam sayı yok.
4. [111]

Doğrultu *C* (Başlangıç)

1. Başlangıç ve bitiş: 0, 0, 1 ve 1/2, 1, 0
2. $0, 0, 1 - 1/2, 1, 0 = -1/2, -1, 1$
3. $2(-1/2, -1, 1) = -1, -2, 2$
4. $[\bar{1}\bar{2}2]$

Düzlem yönelimi

Kırmızı:

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

$$2 \times (1/2, 1, 1/2)$$

$$[1 \ 2 \ 1]$$

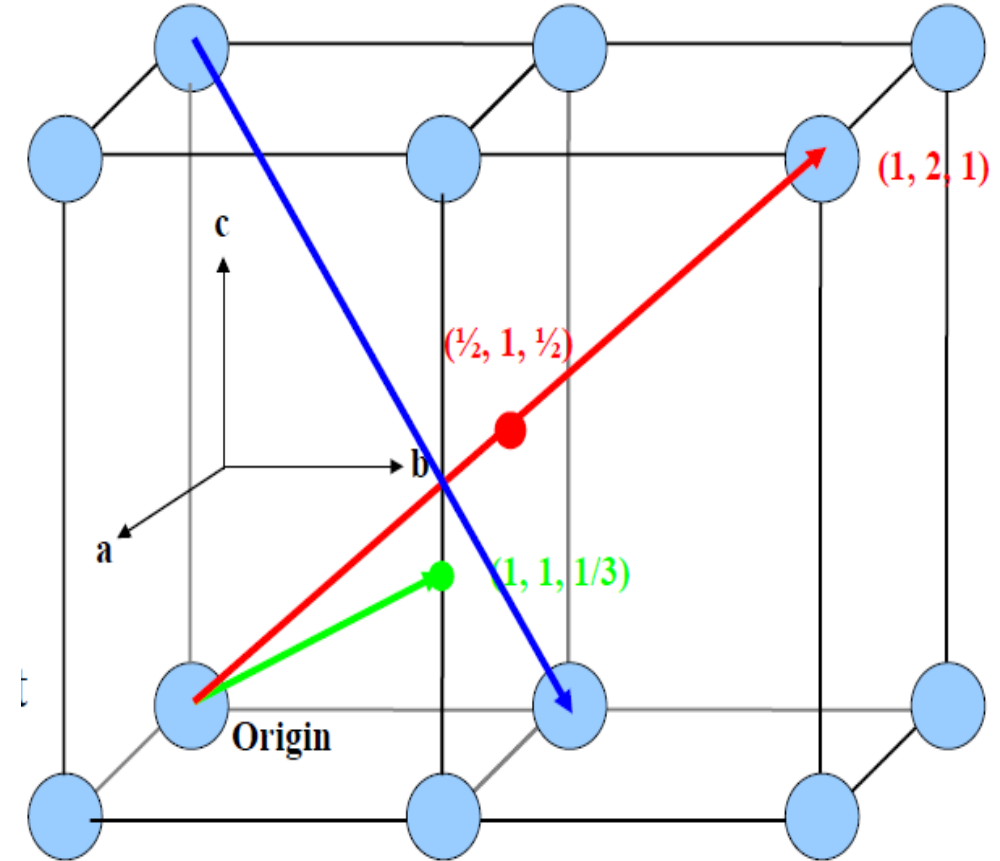
Mavi:

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

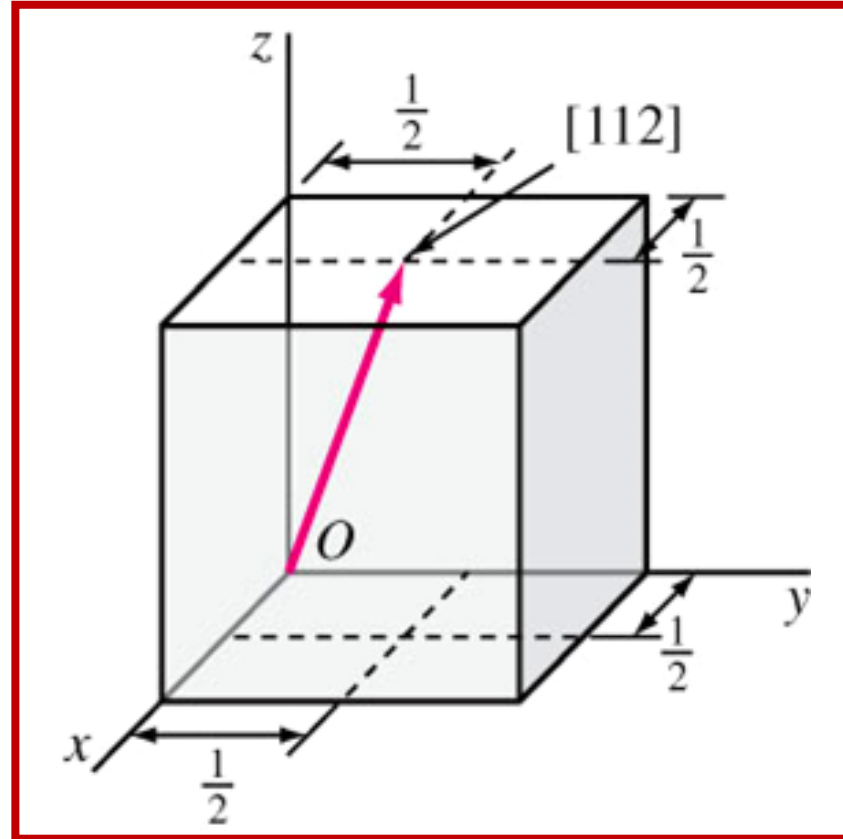
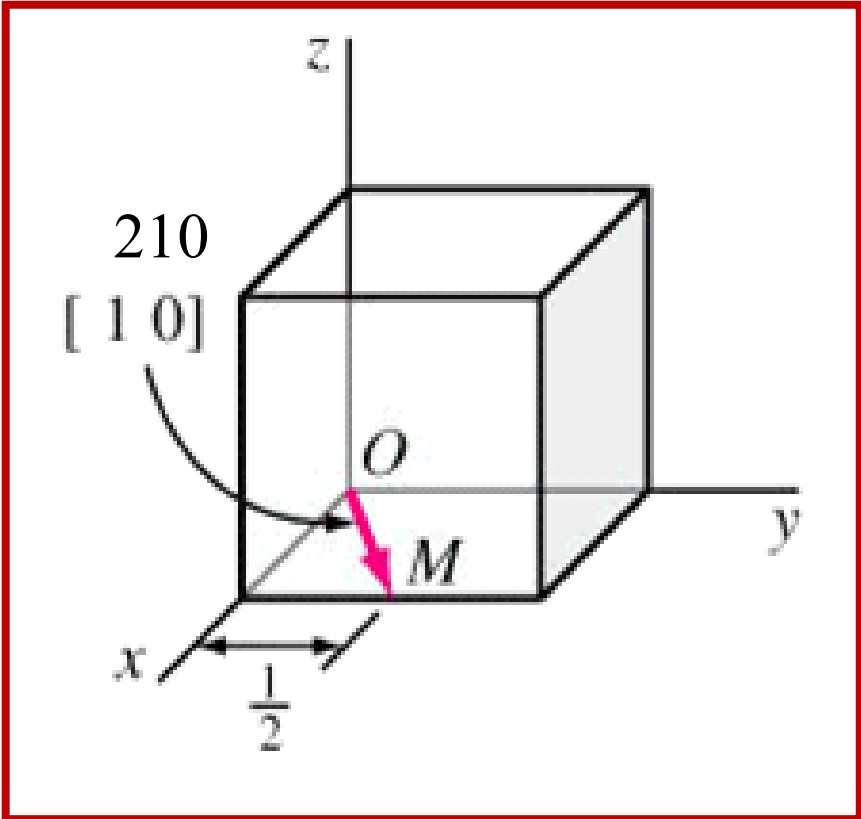
$$[0 \ 1 \ \bar{1}]$$

Yeşil:

$$[3 \ 3 \ 1]$$



Örnekler;



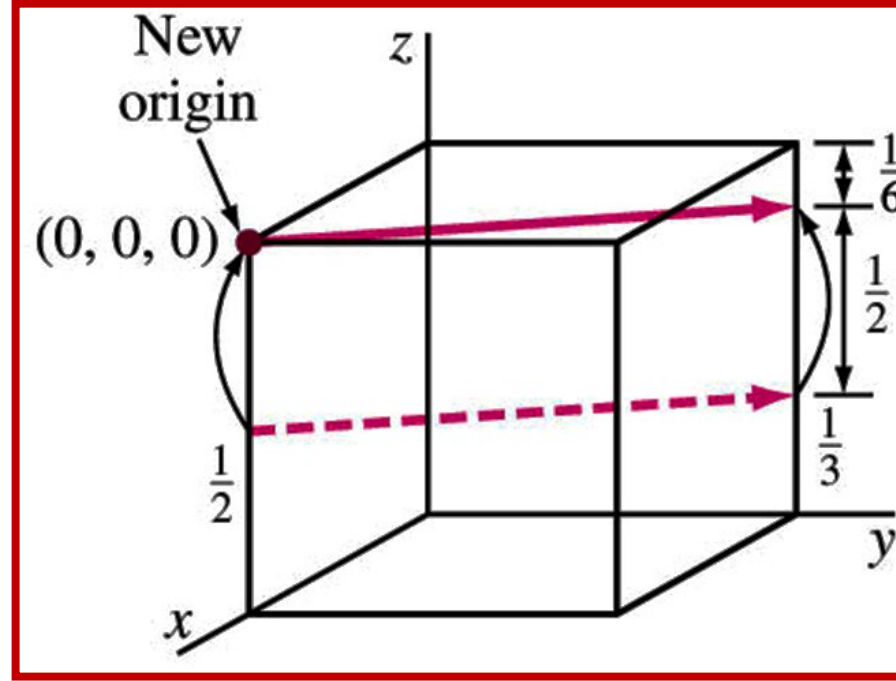
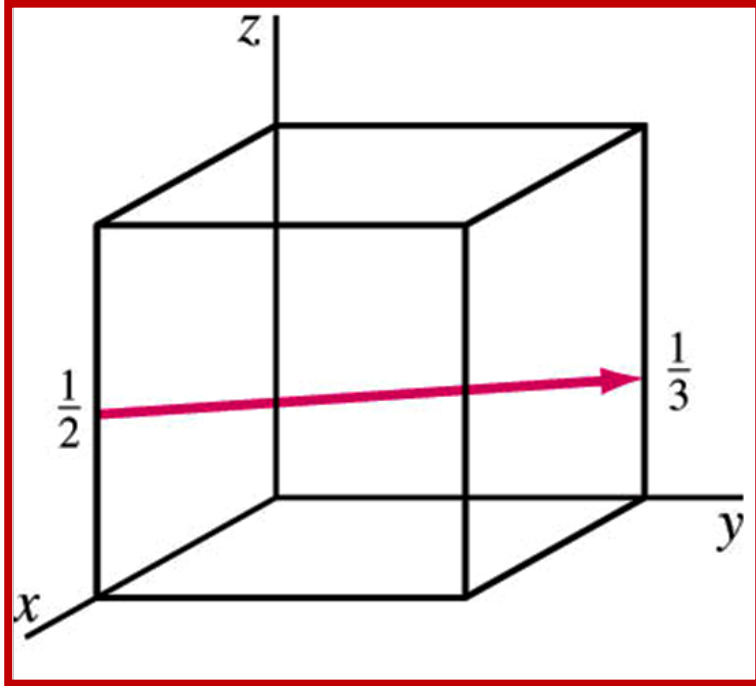
$$X = 1, Y = \frac{1}{2}, Z = 0$$

$$[1 \ \frac{1}{2} \ 0] \longrightarrow [2 \ 1 \ 0]$$

$$X = \frac{1}{2}, Y = \frac{1}{2}, Z = 1$$

$$[\frac{1}{2} \ \frac{1}{2} \ 1] \longrightarrow [1 \ 1 \ 2]$$

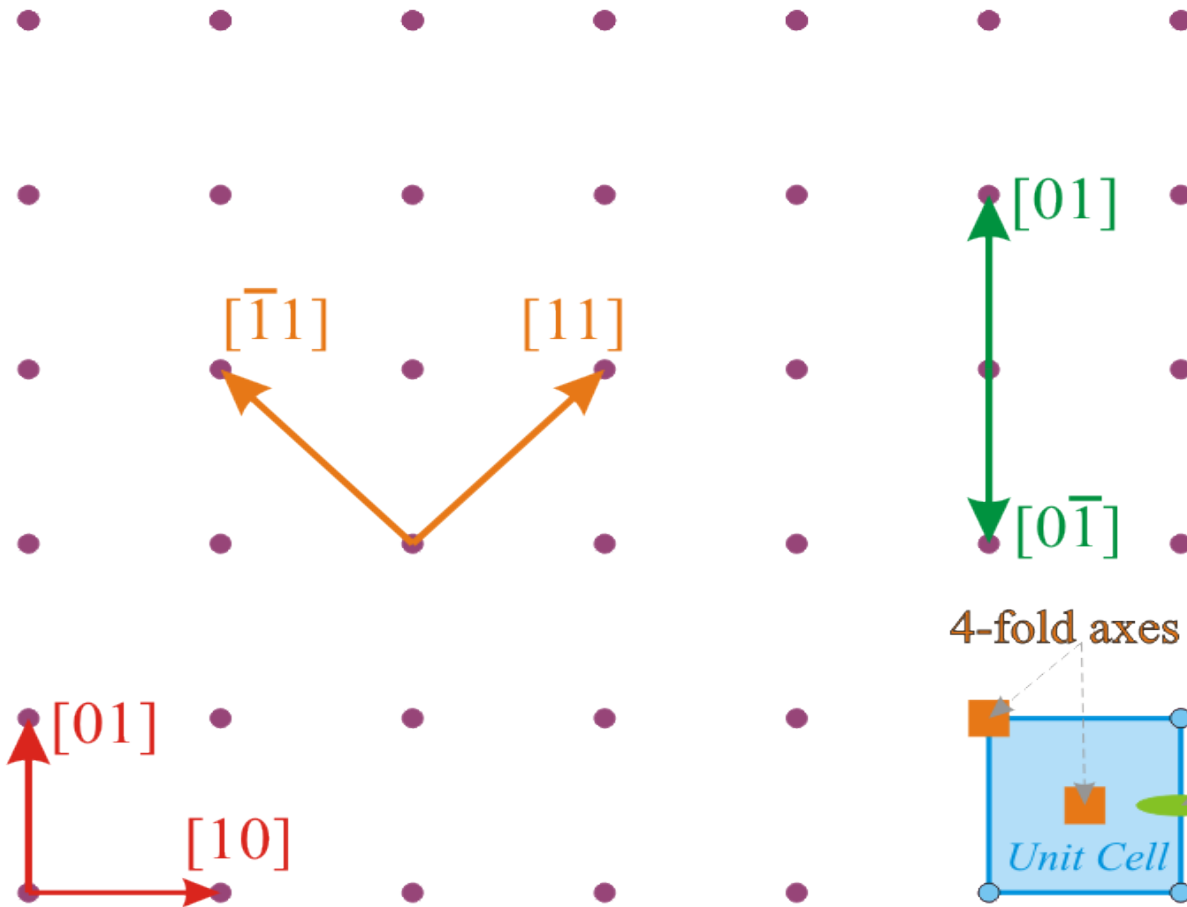
Bir Vektör Orijine Göre Hareket ettirilebilir



$$X = -1, Y = 1, Z = -1/6$$
$$[-1 \ 1 \ -1/6] \longrightarrow [\bar{6} \ \bar{6} \ \bar{1}]$$

Yönlerin Ailesi; Kare Örgü

[10] ve $[0\bar{1}]$ aynı aileye sahip, 4-kat dönme simetrisiyle ilişkili olarak
 [11] ve $[\bar{1}\bar{1}]$ aynı aileye sahip, 4-kat dönme simetrisiyle ilişkili olarak
 [01] ve $[0\bar{1}]$ aynı aileye sahip, 2-kat dönme simetrisiyle ilişkili olarak
Not: sadece simetri ile ilgili tüm yönler, bir aile oluşturur

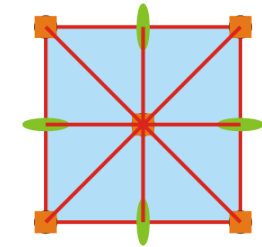


$$\langle 10 \rangle \rightarrow [10], [01], [\bar{1}0], [0\bar{1}]$$

$$\langle 11 \rangle \rightarrow [11], [\bar{1}\bar{1}], [1\bar{1}], [\bar{1}1]$$

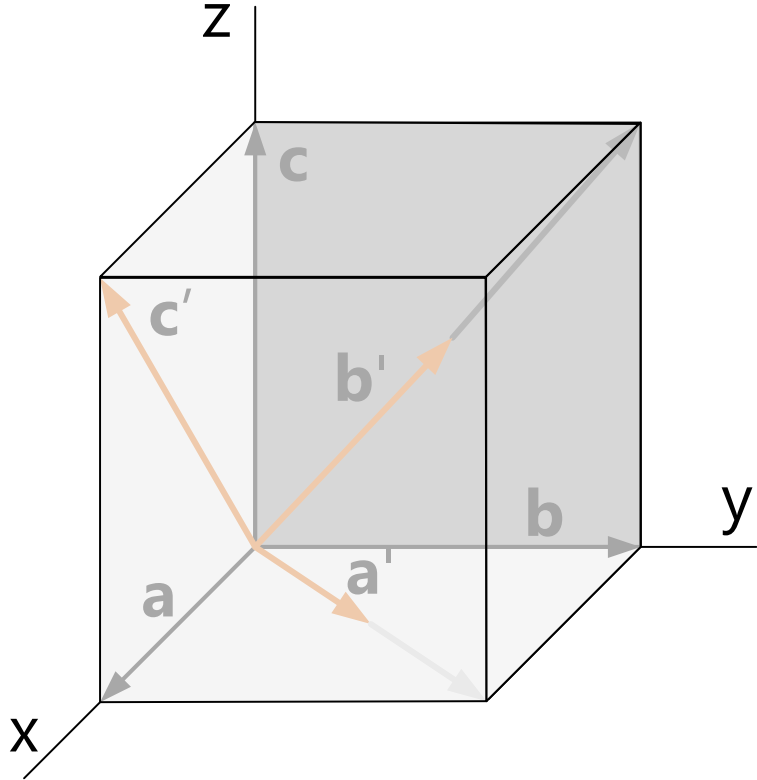
$$[100], [010], [100] \longrightarrow \langle 100 \rangle$$

4mm



For sake of clarity all symmetry operators have not been marked

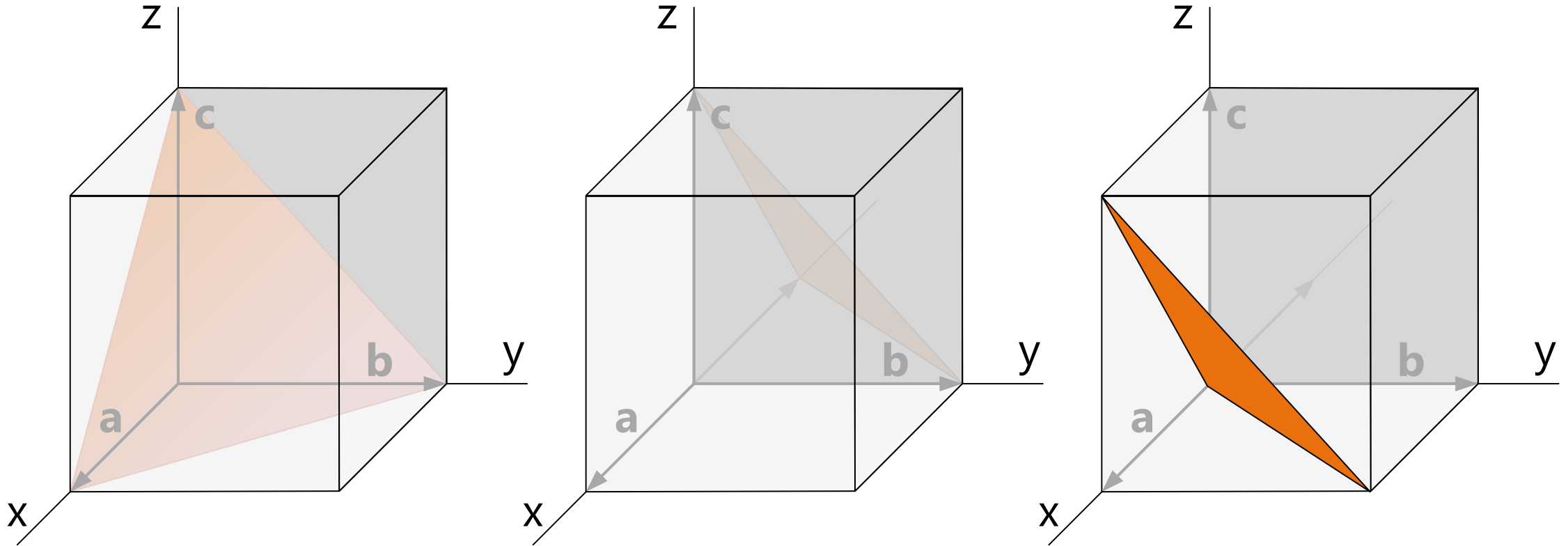
Örnek : (100) düzlemi verilmiş olsun. Bu düzlem x-eksenine dik, y ve z eksenlerine paraleldir. Bu düzlemin a' , b' , c' birim vektörlerine göre Miller indislerini bulunuz.



a' vektörü (100) düzlemini $2a''$ 'da, b vektörü (100) düzlemini kesmez, c vektörü $1c'$ düzleminde keser. Buna göre yeni birim vektörlere göre (100) düzlemi a vektörü tarafından (2 2 00)'de kesilir, b vektörü tarafından kesilmez, c vektörü ise (1 00 1)'de keser. Bu durumda düzlemin yeni vektörlere göre tanımı $x=2a$, $y=00$, $z=c$ ve buradan $x/a=2$, $y=00$, $z/c=1$ elde edilir. Bu sayısal değerlerin tersi alınır ve 2 ile çarpılırsa,

$$2(1/2, 1/00, 1/1) \rightarrow (1 \ 0 \ 2)$$

(111) ve (-111) düzlemi



Atomik Paketlenme Faktörü (Birim Hücre Doluluk Oranı)

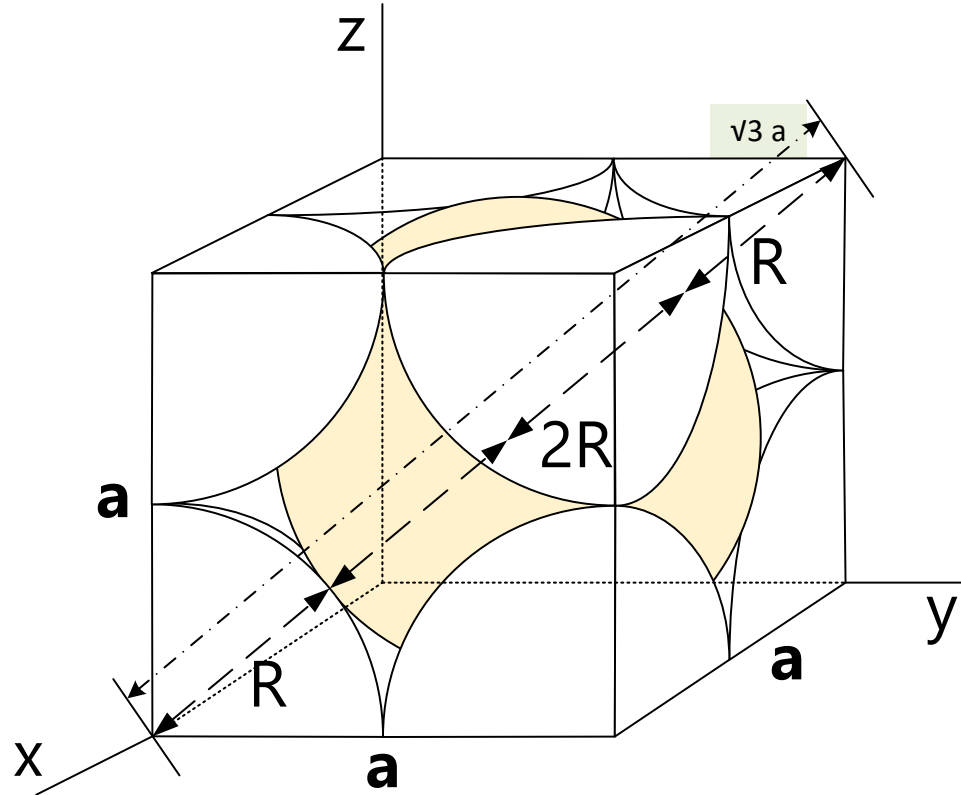
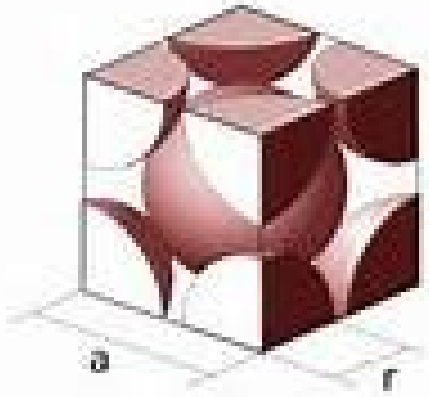
- Bir kübik yapıda küpün hacminin yüzde kaçının atomlarla işgal edildiğini bilmek atomik paketleme faktörü ve doluluk kavramı ile belirlenir.

- $$\text{APF} = \frac{(\text{Birim hücredeki atom sayısı}) \times (\text{Bir atomun hacmi})}{\text{Birim hücrenin hacmi}}$$

BCC-Atomik Paketlenme Faktörü

Örnek: BCC cisim veya hacim merkezli kübik yapının birim hücrelerinde toplamda iki tane atom bulunur. Atomlardan bir tanesi köşelerdeki parçalardan, diğer atom ise hacimsel köşegenlerin kesim noktasındaki tek atomdur. Bu durumda toplam

$$\text{Atom sayısı} = 1 + 8 \frac{1}{8} = 2$$



$$\sqrt{3} a = 4R$$

$$R = a\sqrt{3}/4$$

$$\text{APF} = 2 \times (4/3)\pi R^3 / (a^3) =$$

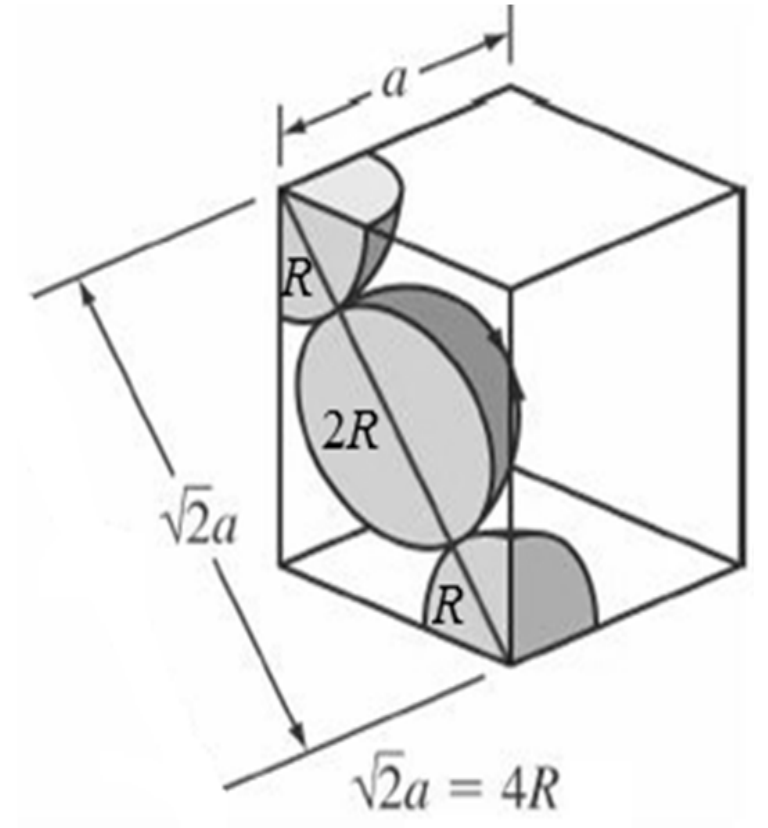
$$2 \times (4/3)\pi (a\sqrt{3}/4)^3 / (a^3)$$

$$\text{APF (DO)} = 0.68$$

ya da

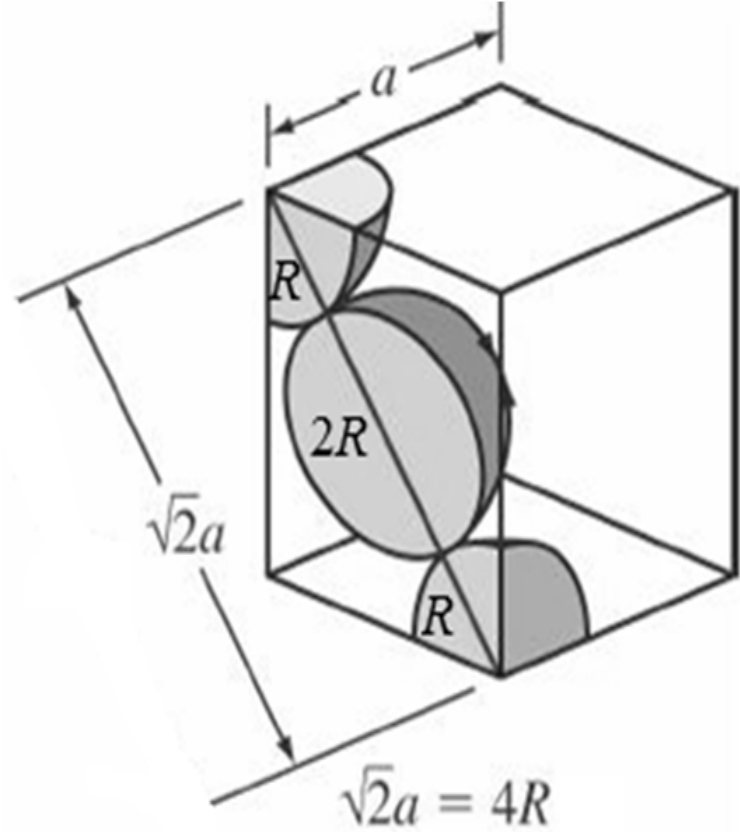
birim hücrenin %68'i doludur.

FCC - yüzey merkezli kübik yapıyı ele alalım

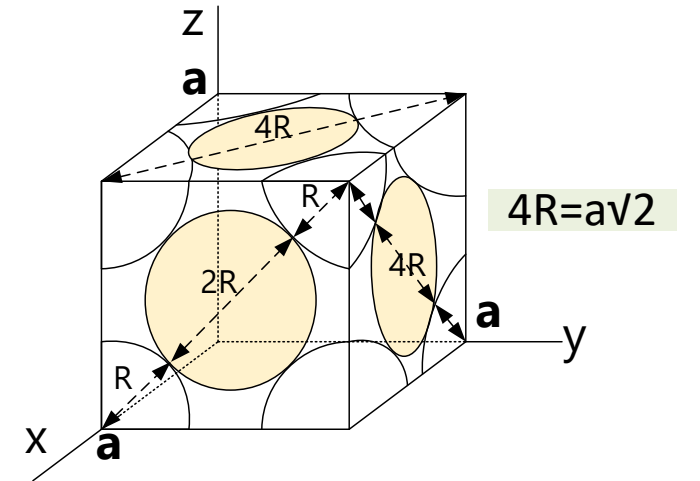


FCC-yüzey merkezli kübik yapı birim hücre doluluk oranı

- Birim içinde kalan atom sayısı;
8 köşeden atomların $1/8$ 'i kadar $8(1/8)$,
küpün altı yüzünden $1/2$ kadar yani yarım ($6 \cdot \frac{1}{2} = 3$),
birim hücre içinde toplamda 4 tanedir.

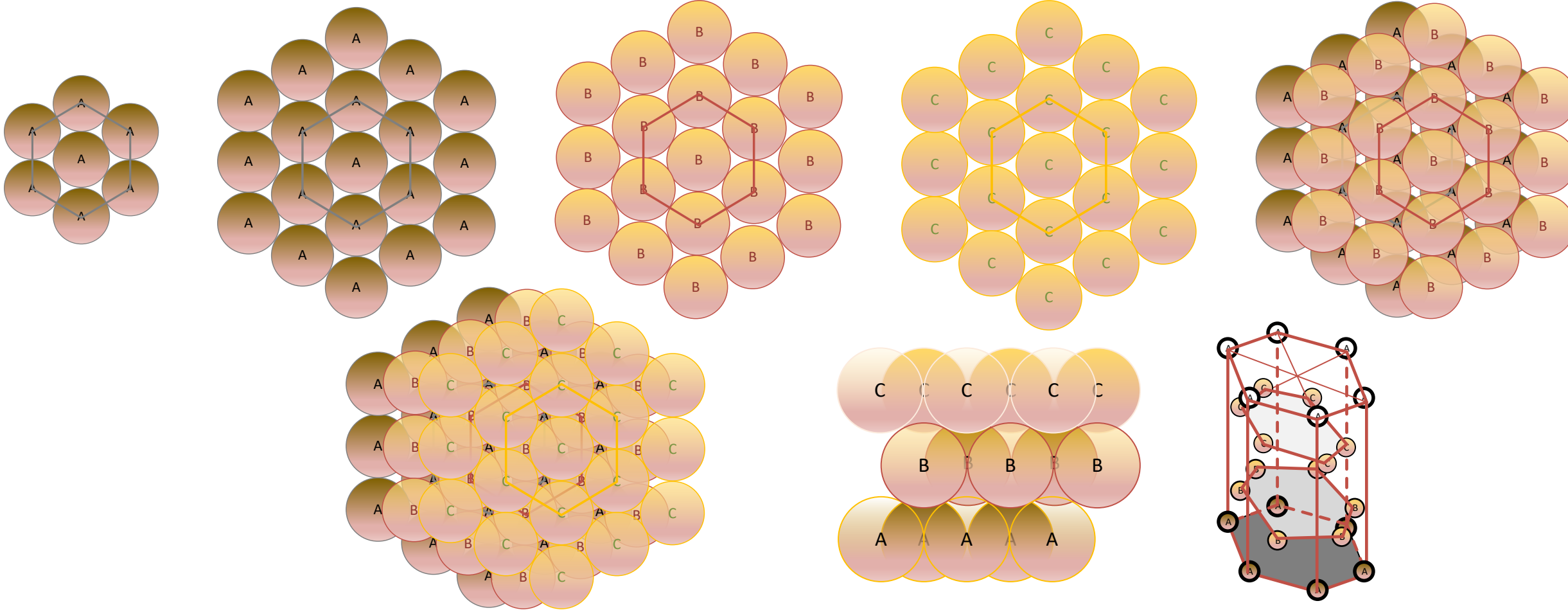


- bir atomun hacmi $V_a = \frac{4\pi}{3} R^3$; burada $4R = \sqrt{2}a$,
- Birim hücre hacmi $V_B = a^3$,
- Buradan $R = \left(\frac{a\sqrt{2}}{4}\right)$ bulunur.
- Birim hücre doluluk oranı $= \frac{4 \times \frac{4\pi}{3} \left(\frac{a\sqrt{2}}{4}\right)^3}{a^3} = \frac{\sqrt{2}}{6} \pi = 0.74$



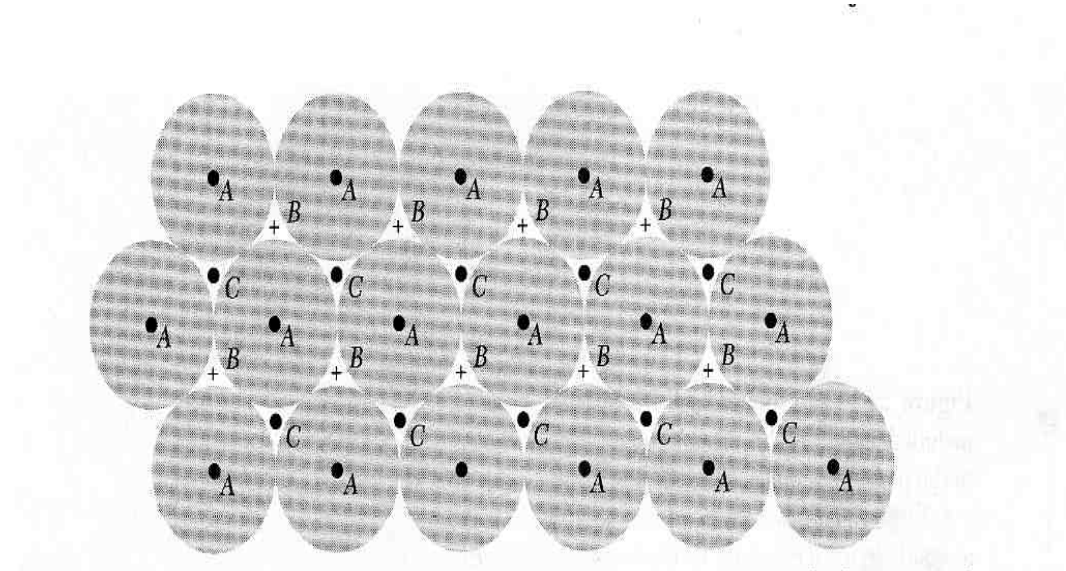
Sıkı Paket Yapılar ve Hekzagonal Sıkı Paket (hcp) Yapı:

- Özdeş küreler kullanılarak; her küre altı küreye dokunacak şekilde bir sıkı paket tabakası oluşturulur. Bu tabaka; hekzagonal (hcp) sıkı paket yapının taban düzlemi veya yüz merkezli kübik (fcc) yapının (111) düzlemi olur.



Hekzagonal sıkı paketlenme

Birinci tabakanın üstüne, ikinci tabaka, ikinci tabakadaki her küre birinci tabakadaki üç küreye değecek şekilde yerleştirilir. Bu tabaka fcc ve hcp yapıların her ikisi için de aynıdır.



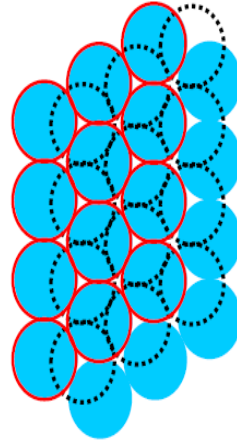
Üçüncü tabaka iki farklı şekilde yerleştirilebilir

- Üçüncü tabakadaki küreler, birinci tabakadaki kürelerin üstüne gelecek şekilde yerleştirilirse ABABA şeklinde bir diziliş elde edilir bu da hekzagonal sıkı paket (hcp) birim hücreyi oluşturur.
- Üçüncü tabakadaki küreler, ikinci tabaka oluşturulurken birinci tabakada işgal edilmemiş olan boşlukların üstüne gelecek ve üçüncü tabakadaki her küre ikinci tabakadaki üç küreye dokunacak şekilde yerleştirilir. Bunun sonucunda, yüz merkezli kübik (fcc) birim hücreler oluşur.
- Yüz merkezli kübik yapının ilkel birim hücresinde bir atom vardır.
- hcp ilkel birim hücrede iki atom bulunur.

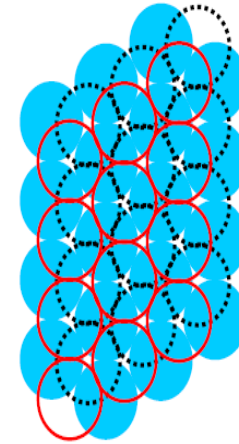
HCP ve FCC yapıda yığılma

1. Hcp en alt tabakaya atomlar altıgen oluşturacak şekilde yerleşir,
2. Bu tabakanın üstüne fakat boşluklar üstüne atomlar yerleşir,
3. Üçüncü tabakadaki küreler, birinci tabakadaki kürelerin üstüne gelecek şekilde yerleştirilir,
4. Üçüncü tabakadaki küreler, birinci tabakada olan boşlukların üstüne gelecek (üçüncü tabakadaki her küre ikici tabakadaki üç küreye dokunacak) şekilde yerleştirilirse yüz merkezli kübik (fcc) birim hücreler oluşur.
5. Yüz merkezli kübik yapının ilkel birim hücresinde bir atom vardır.
6. Hcp ilkel birim hücrede iki atom bulunur.

hcp



fcc

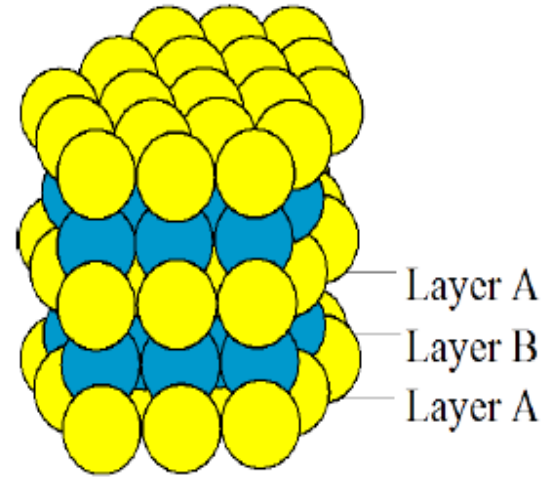


HCP Yapı

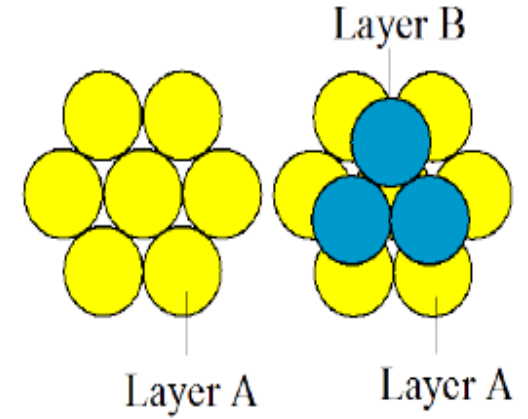
Bir diğer yapıda Şekil 1.32a
daki hegzagonal yapıdaki
dizilimdir.

Hexagonal Closed-Packed
(HCP) yapı.

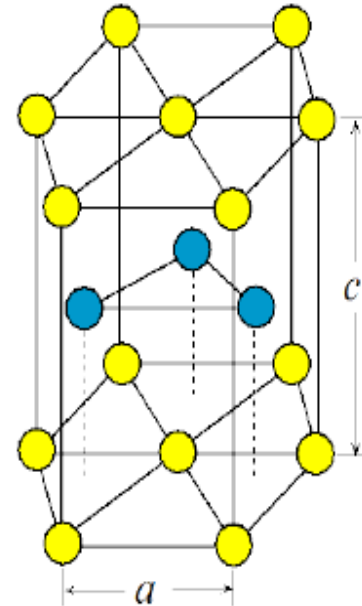
Bu yapıda doluluk oranı da
%74 dür.



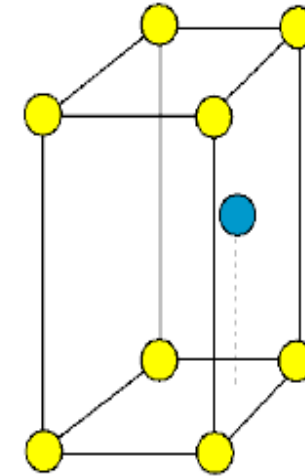
(a)



(b)

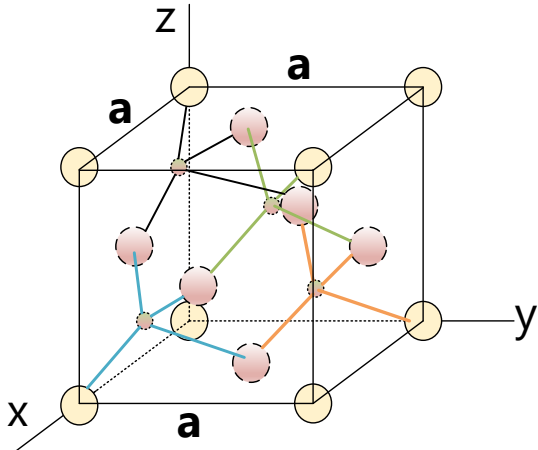
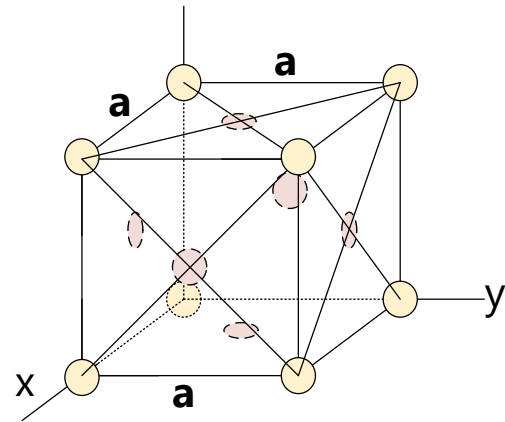
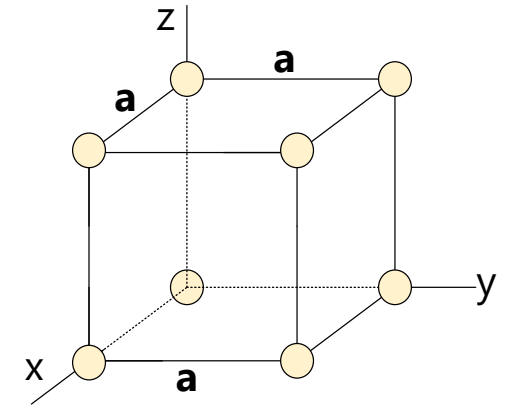


(c)



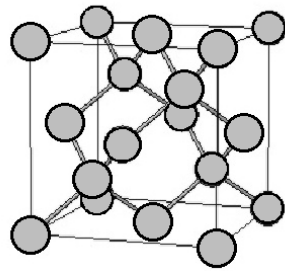
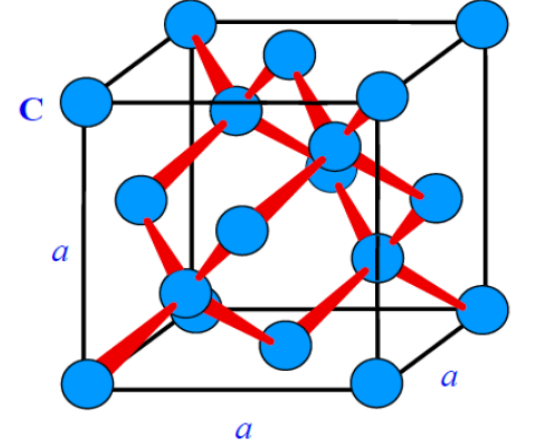
(d)

ELMAS KRİSTAL YAPI VE ZINC BLEND



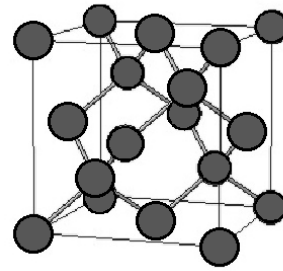
Kovalent bağa sahip silisyum ve germanyum gibi kristaller elmas kübik yapıdadır. Her bir köşede ve yüzey merkezinde atom olmasına rağmen FCC yapısı görünse de birim hücre içinde dört atom daha vardır.

Si : $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3(p_x^1 p_y^1)$ Silisyum komşuluk yaptığı 4 silisyumun 1'er elektronunu alarak 3p yörüngesini 6'ya tamamlar.



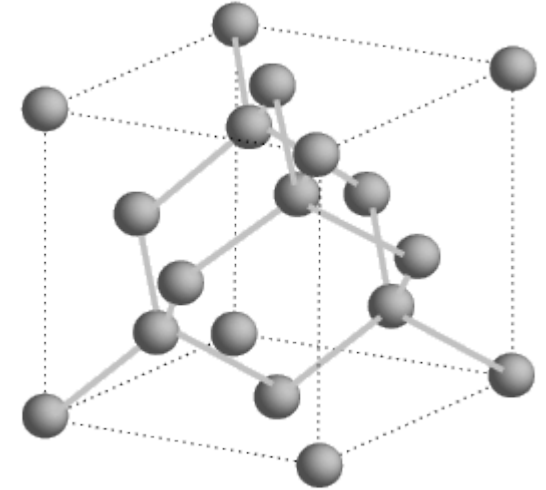
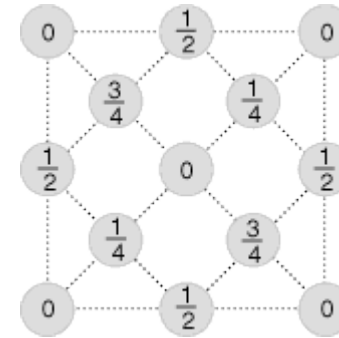
SILICON

CRYSTAL: DIAMOND CUBIC
BONDING: COVALENT



GERMANIUM

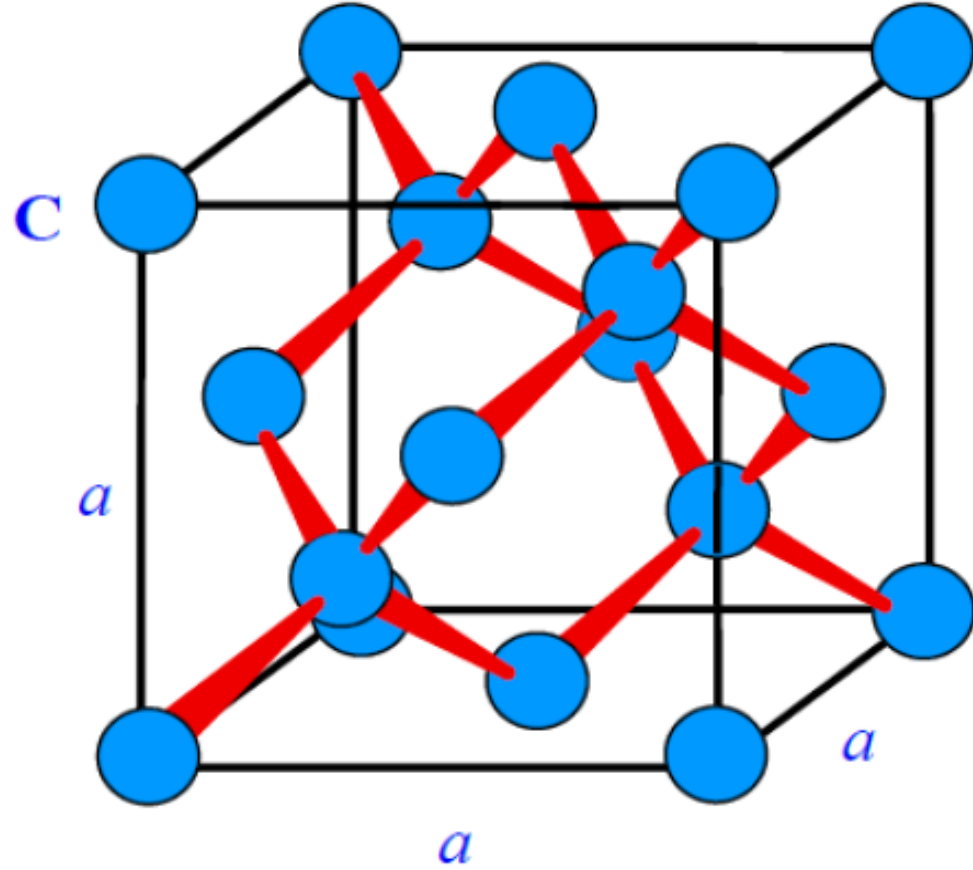
CRYSTAL: DIAMOND CUBIC
BONDING: COVALENT



ELMAS KRİSTAL YAPI VE ZINC BLEND

Kovalent bağına sahip silisyum ve germanyum gibi kristaller elmas kübik yapıdadır.

Her bir köşede ve yüzey merkezinde atom olmasına rağmen FCC yapısı görünse de hücre içinde dört atom daha vardır.



ELMAS KRİSTAL YAPI VE ZINC BLEND

- Elmas yapının uzay-örgüsü yüzey-merkezli kübiktir. Elmas yapının ilkel bazı fcc yapının her noktası ile ilişkilendirilen $0,0,0$ ve $1/4,1/4,1/4$ koordinatlarında bulunan iki özdeş atoma sahiptir. fcc örgünün konvansiyonel birim hücrede 4 örgü noktası bulunduğundan, elmas yapının konvansiyonel birim hücrelerinde $2 \times 4 = 8$ atom içerir. Şekilde gösterilen a , konvansiyonel birim hücrenin kenarıdır.

ELMAS KRİSTAL YAPI VE ZINC BLEND

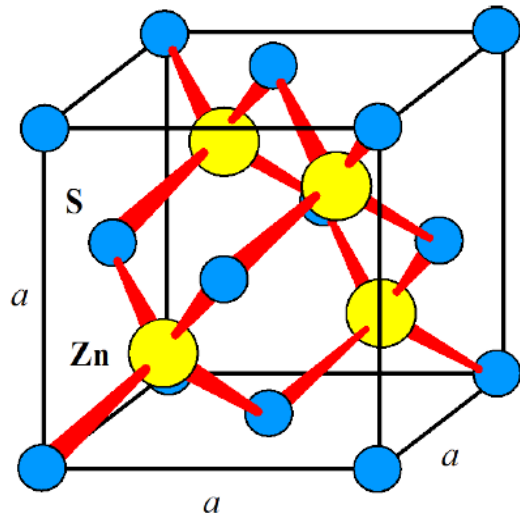


Fig. 1.34: The Zinc blende (ZnS) cubic crystal structure. Many important compound crystals have the zinc blende structure. Examples: AlAs, GaAs, GaP, GaSb, InAs, InP, InSb, ZnS, ZnTe.

NaCl Kristal Yapısı

- Na^+ iyonu (atom numarası 11, atomik yarıçapı 0.191 nm) Cl^- iyonunun (atom numarası 17, atomik yarıçapı 0.099 nm) yarısı boyuttadır,
- Cl iyonuna en yakın altı iyon bulunur,
- İyonik katılarda katyonlar (Na^+) ve anyonlar (Cl^-) her doğrultuda bir birleri ile etkileşir, çekim kuvveti ortaya çıkar,
- Kristal yapı karşıt yüklerin bir araya nasıl geleceği ve benzer iyonların birbirlerinden nasıl uzakta olacağı bir simetrinin ortaya çıkması ile oluşur,
- Bu iyonların bağlı yüklerine bağlıdır.



Simple Crystal Structures

- NaCl
- NaCl: interpenetrating fcc structures
 - One atom at (0,0,0)
 - Second atom displaced by (1/2,0,0)
 - Majority of ionic crystals prefer NaCl structure despite lower coordination (fewer NN)
 - Radius of cations much smaller than anions typically
 - For very small cations, anions can not get too close in the other typical structure (CsCl)
 - This favors NaCl structure where anion contact does not limit structure as much
-

NaCl Kristal Yapısı

- Na^+ iyonları $1/2, 1/2, 1/2$; $0, 0, 1/2$; $0, 1/2, 0$; $1/2, 0, 0$ konumlarındadır,
- Cl^- iyonları $0, 0, 0$; $1/2, 1/2, 0$; $1/2, 0, 1/2$; $0, 1/2, 1/2$ konumlarındadır,

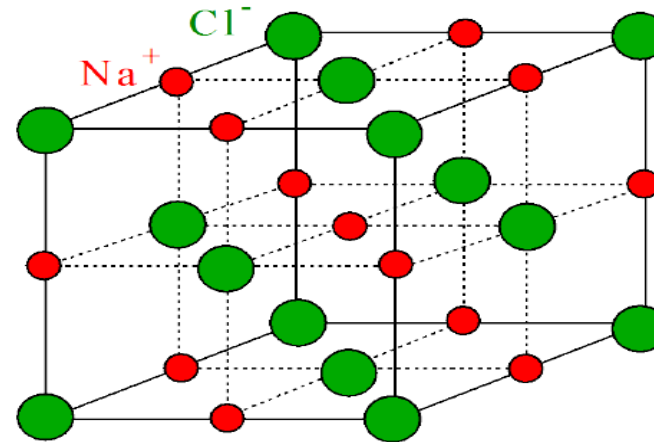


Fig. 1.36: A possible reduced sphere unit cell for the NaCl (rock salt) crystal. An alternative unit cell may have Na^+ and Cl^- interchanged. Examples: AgCl, CaO, CsF, LiF, LiCl, NaF, NaCl, KF, KCl, MgO

CsCl Kristal Yapısı

CsCl Yapısı

Anyon ve katyon aynı boyuta sahip olduğunda ortaya çıkan yapıdır.

Bu yapı gerçek BCC yapısı değildir çünkü değişik BCC yapıda örgü noktaları farklıdır.

