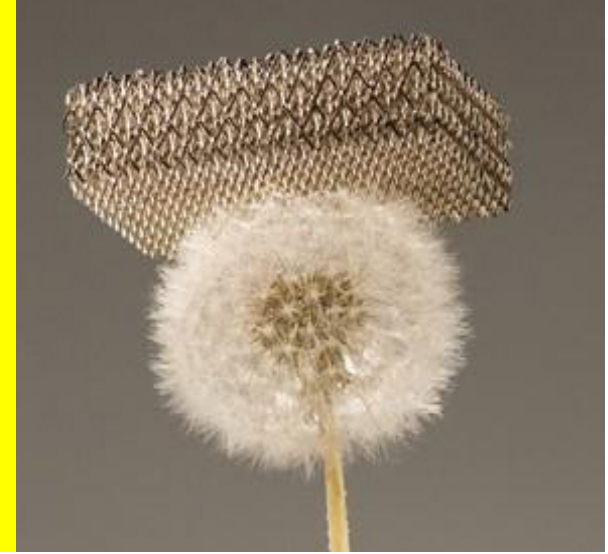
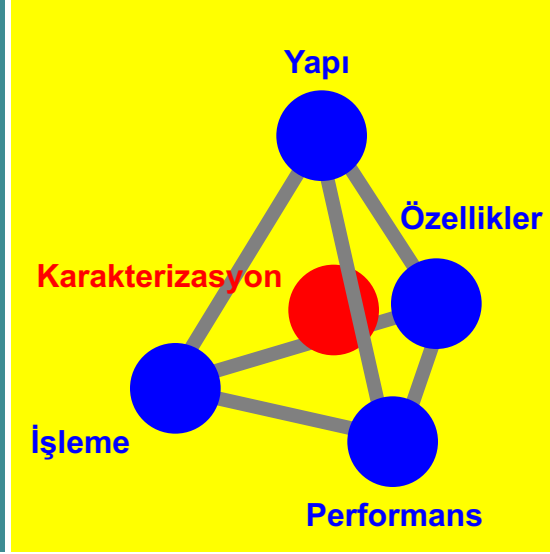
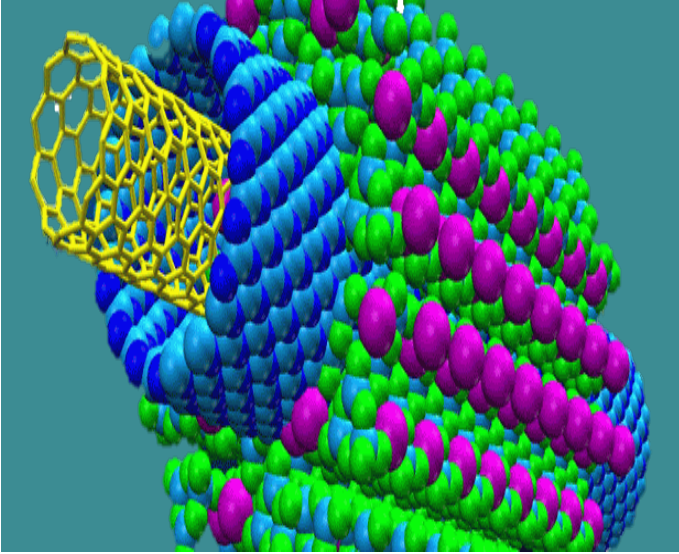


FZM 220

Malzeme Bilimine Giriş



Prof. Dr. İlker DİNÇER

Ankara Üniversitesi, Mühendislik Fakültesi,
Fizik Mühendisliği Bölümü

Ders Hakkında

FZM 220 Malzeme Bilimine Giriş Dersinin Amacı

Bu dersin amacı, fizik mühendisliği öğrencilerine, malzemelerin yapısal özellikleri ile mekanik, fiziksel ve kimyasal özellikleri arasındaki ilişkileri tanıtmak ve tasarımlarındaki malzeme seçiminin önemini lisans düzeyinde öğretmektir.

Dersin İçeriği

Hafta	Konu
1. Hafta	Giriş: Malzeme Bilimi ve Mühendisliğinin Önemi (<u>Ön Çalışma: Dersten önce ders kitabın ilgili kısımlarını okuyunuz.</u>)
2. Hafta	Atomal Yapı ve Atomlararası Bağ-1 (<u>Ön Çalışma: Önceki haftanın konusunu gözden geçirin ve dersten önce ders kitabın ilgili kısımlarını okuyunuz.</u>)
3. Hafta	Atomal Yapı ve Atomlararası Bağ-2 (<u>Ön Çalışma: Önceki haftanın konusunu gözden geçirin ve dersten önce ders kitabın ilgili kısımlarını okuyunuz.</u>)
4. Hafta	Katılarda Kristal Yapılar-1 (<u>Ön Çalışma: Önceki haftanın konusunu gözden geçirin ve dersten önce ders kitabın ilgili kısımlarını okuyunuz.</u>)
5. Hafta	Katılarda Kristal Yapılar-2 (<u>Ön Çalışma: Önceki haftanın konusunu gözden geçirin ve dersten önce ders kitabın ilgili kısımlarını okuyunuz.</u>)
6. Hafta	Katılarda Kusurlar (<u>Ön Çalışma: Önceki haftanın konusunu gözden geçirin ve dersten önce ders kitabın ilgili kısımlarını okuyunuz.</u>)
7. Hafta	Katılarda Kusurlar-2 (<u>Ön Çalışma: Önceki haftanın konusunu gözden geçirin ve dersten önce ders kitabın ilgili kısımlarını okuyunuz.</u>)
8. Hafta	Vize Sınavı (<u>Ön Çalışma: Önceki haftaların konularını gözden geçirip Vize Sınavına hazırlanınız.</u>)
9. Hafta	Yayınma-1 (<u>Ön Çalışma: Önceki haftanın konusunu gözden geçirin ve dersten önce ders kitabın ilgili kısımlarını okuyunuz.</u>)
10. Hafta	Yayınma-2 (<u>Ön Çalışma: Önceki haftanın konusunu gözden geçirin ve dersten önce ders kitabın ilgili kısımlarını okuyunuz.</u>)
11. Hafta	Metallerin Mekanik Özellikleri-1 (<u>Ön Çalışma: Önceki haftanın konusunu gözden geçirin ve dersten önce ders kitabın ilgili kısımlarını okuyunuz.</u>)
12. Hafta	Metallerin Mekanik Özellikleri-2 (<u>Ön Çalışma: Önceki haftanın konusunu gözden geçirin ve dersten önce ders kitabın ilgili kısımlarını okuyunuz.</u>)
13. Hafta	Dislokasyonlar ve Dayanım Arttırıcı Mekanizmalar (<u>Ön Çalışma: Önceki haftanın konusunu gözden geçirin ve dersten önce ders kitabın ilgili kısımlarını okuyunuz.</u>)
14. Hafta	Hasar (<u>Ön Çalışma: Önceki haftanın konusunu gözden geçirin ve dersten önce ders kitabın ilgili kısımlarını okuyunuz.</u>)

Ders Hakkında

FZM 220 Malzeme Bilimine Giriş Dersinin Amacı

Bu dersin amacı, fizik mühendisliği öğrencilerine, malzemelerin yapısal özellikleri ile mekanik, fiziksel ve kimyasal özellikleri arasındaki ilişkileri tanıtmak ve tasarımlarındaki malzeme seçiminin önemini lisans düzeyinde öğretmektir.

Değerlendirme

Ara sınav: % 40

Final sınavı: % 60

Kaynak

1. Malzeme Bilimi ve Mühendisliği, Yazarlar: W.D. Callister ve D.G. Rethwisch (Ç.E.: K. Genel), Nobel Akademik Yayıncılık

3. Katılarda Kristal Yapılar

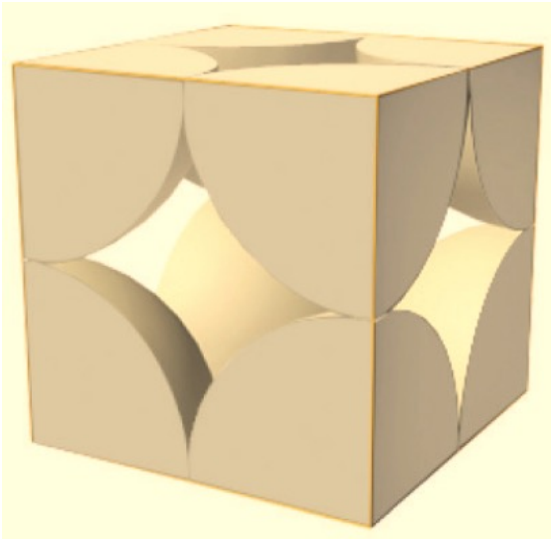
Temel Kavramlar

- Katı malzemeler, atomların ya da moleküllerin oluşturdukları düzene göre sınıflandırılırlar. Bir **kristal malzemedede** uzun menzilli düzen vardır. Yani atomlar, atomsal ölçekte uzun mesafelerde tekrar eden düzenli bir yapı oluştururlar. Uzun menzilli düzen olmayan malzemelere **amorft malzemeler** denir.
- Kristal malzemelerin bazı özellikleri, malzemelerin kristal yapılarına, yani atomların ya da moleküllerin üç boyutlu olarak meydana getirdikleri düzene bağlıdır.
- Metallerde bulunan nispeten basit düzenlerden, bazı seramik ve polimerlerde görülen son derece karmaşık düzenlere kadar uzun menzilli düzene sahip kristal yapılar söz konusudur.

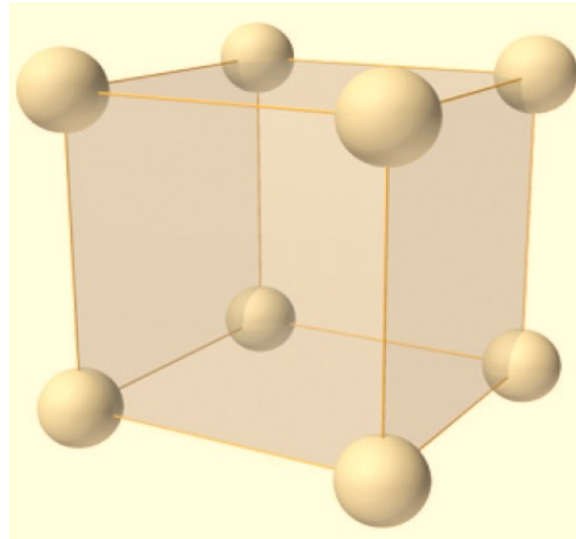
3. Katılarda Kristal Yapılar

Temel Kavramlar

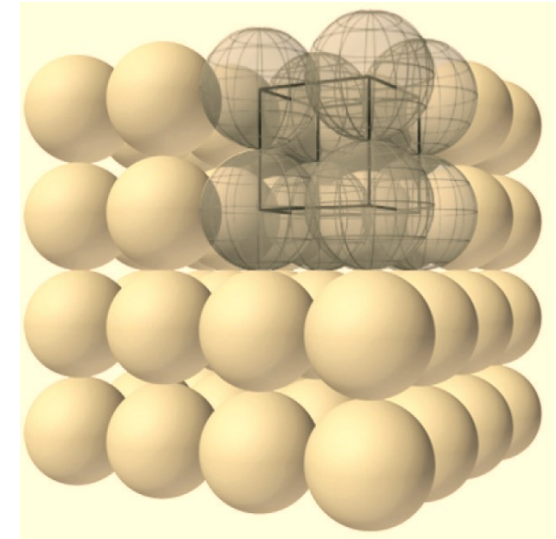
- Bazen kristal yapılardan bahsedilirken **kafes (örgü)** terimi kullanılır. **Kafes** ya da **kristal kafes** terimi, kristal yapılarda, atomların, üç boyutlu dizilişlerinde, buldukları yerlere (ya da küre merkezlerine) karşılık gelen noktaları ifade eder.



(a)



(b)



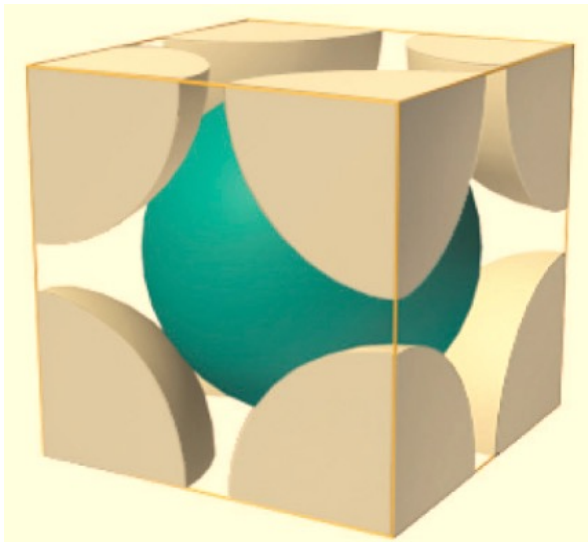
(c)

Basit kübik (BK) kristal yapı için (a) Katı küre birim hücre gösterimi, (b) Küçük küre birim hücre gösterimi ve (c) Bir grup atomun oluşturduğu bir hacim ve bu hacim içindeki birim hücrenin görünümü.

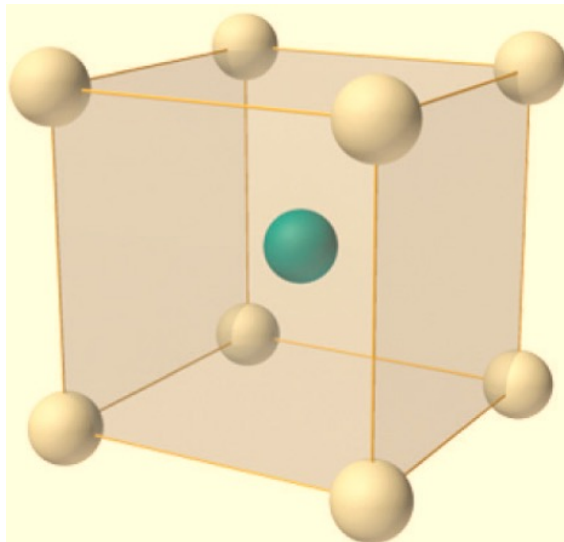
3. Katılarda Kristal Yapılar

Temel Kavramlar

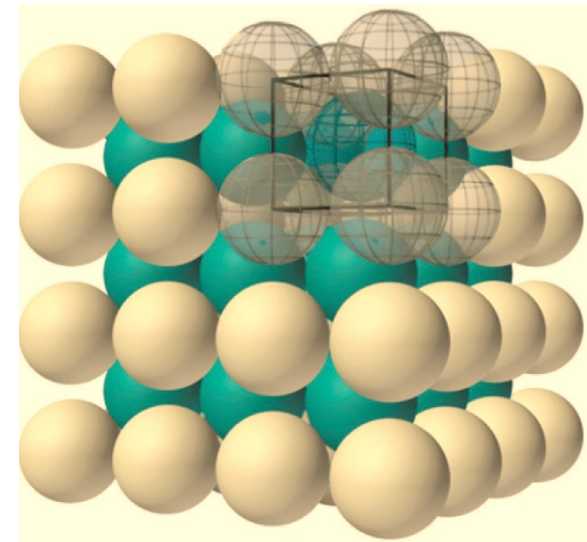
- Bazen kristal yapılardan bahsedilirken **kafes (örgü)** terimi kullanılır. **Kafes** ya da **kristal kafes** terimi, kristal yapılarda, atomların, üç boyutlu dizilişlerinde, buldukları yerlere (ya da küre merkezlerine) karşılık gelen noktaları ifade eder.



(a)



(b)



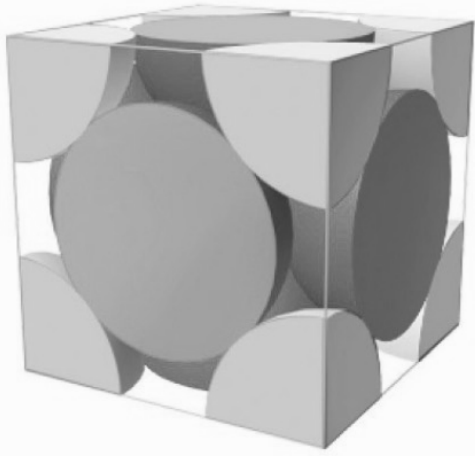
(c)

Hacim merkezli kübik (HMK) kristal yapı için (a) Katı küre birim hücre gösterimi, (b) Küçük küre birim hücre gösterimi ve (c) Bir grup atomun oluşturduğu bir hacim ve bu hacim içindeki birim hücrenin görünümü.

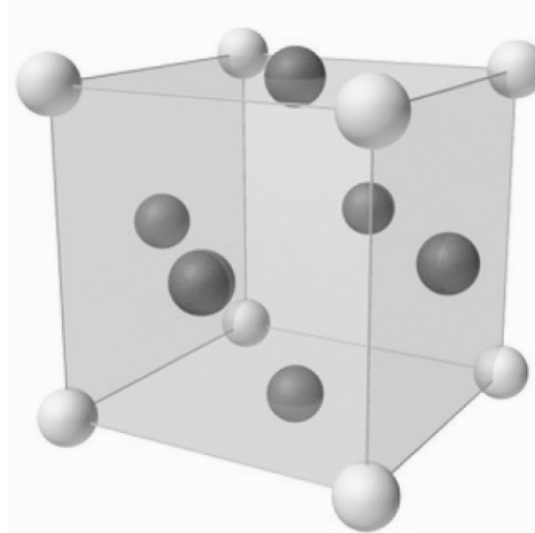
3. Katılarda Kristal Yapılar

Temel Kavramlar

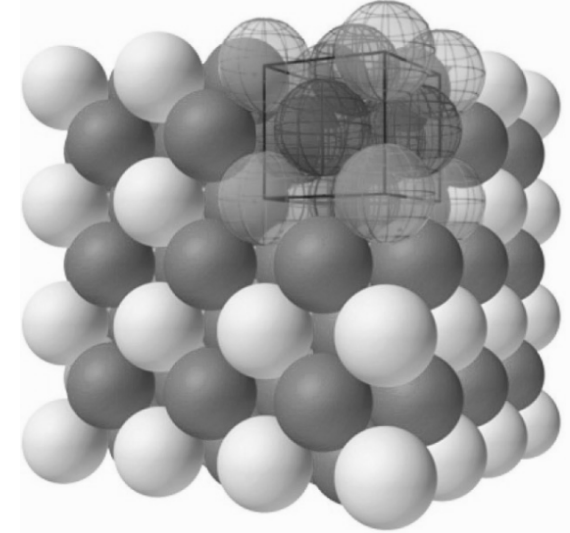
- Bazen kristal yapılardan bahsedilirken **kafes (örgü)** terimi kullanılır. **Kafes** ya da **kristal kafes** terimi, kristal yapılarda, atomların, üç boyutlu dizilişlerinde, buldukları yerlere (ya da küre merkezlerine) karşılık gelen noktaları ifade eder.



(a)



(b)



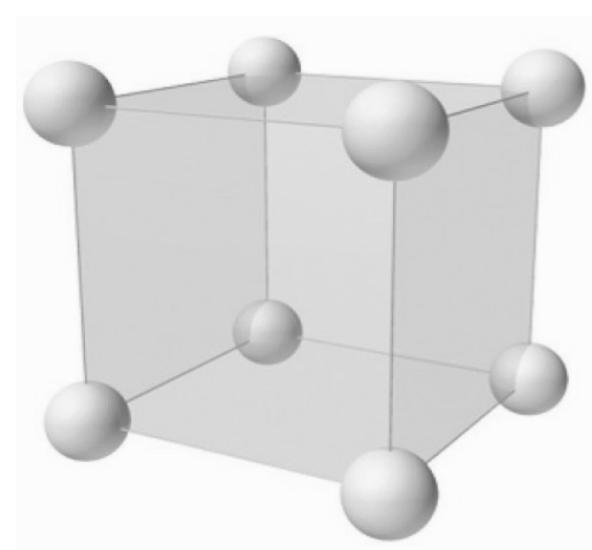
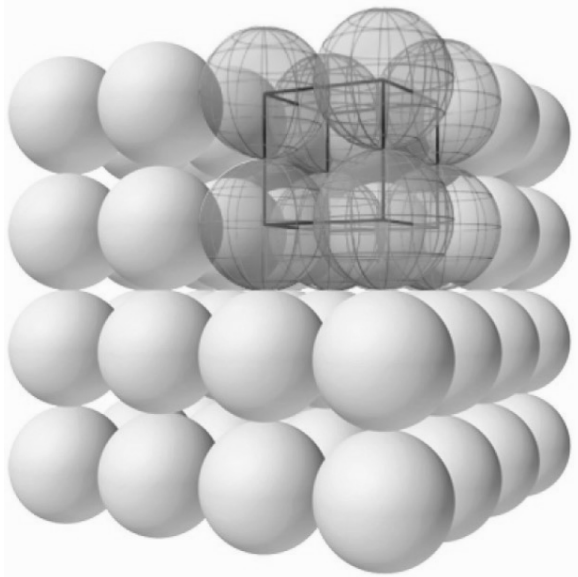
(c)

Yüzey merkezli kübik (YMK) kristal yapı için (a) Katı küre birim hücre gösterimi, (b) Küçük küre birim hücre gösterimi ve (c) Bir grup atomun oluşturduğu bir hacim ve bu hacim içindeki birim hücrenin görünümü.

3. Katılarda Kristal Yapılar

Birim Hücre

- Kristal yapılarda bulunan atomsal düzen, yapının bir grup atomdan oluşan küçük bir birimin tekrar etmesi ile oluştuğuna işaret eder. Bu açıdan kristal yapıları tanımlamak ve anlatmak için, **birim hücre** olarak adlandırılan, **kristalin tekrar eden bu en küçük ögesi**sinin kullanılması kolaylık sağlar.



3. Katılarda Kristal Yapılar

Metallerde Kristal Yapılar

- Yaygın olarak bilinen metallerin bir çoğu, **Yüzey Merkezli Kübik (YMK)**, **Hacim Merkezli Kübik (HMK)** ve **Sıkı Paketlenmiş Hekzagonal (SPH)** olmak üzere, nispeten basit 3 farklı kristal yapıda bulunur.

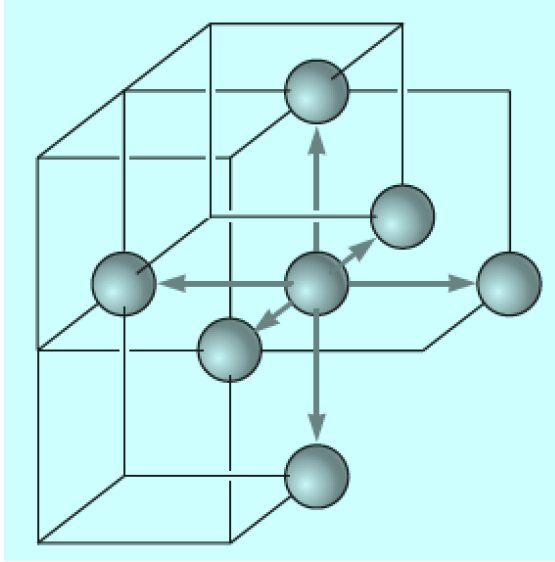
Bazı metallerin kristal yapıları ve atom yarıçapları.

Metal	Kristal Yapı	Atom Yarıçapı (nm)	Metal	Kristal Yapı	Atom Yarıçapı (nm)
Alüminyum	YMK	0.1431	Krom	HMK	0.1249
Molibden	HMK	0.1363	α -Demir	HMK	0.1241
Volfram	HMK	0.1371	Kobalt	SPH	0.1253
Platin	YMK	0.1387	Nikel	YMK	0.1246
Gümüş	YMK	0.1445	Bakır	YMK	0.1278
Kurşun	YMK	0.1750	Çinko	SPH	0.1332

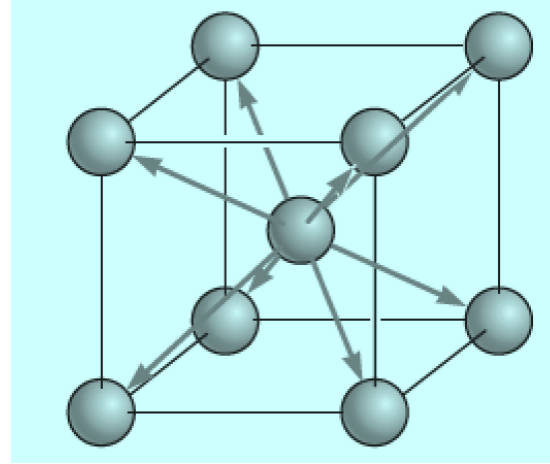
3. Katılarda Kristal Yapılar

Koordinasyon Sayısı

- Belirli bir atoma temas eden atomların sayısı veya en yakın komşuların sayısı koordinasyon sayısıdır ve atomların nasıl sıkı ve yoğun bir şekilde paklendiğini gösterir.



(a)



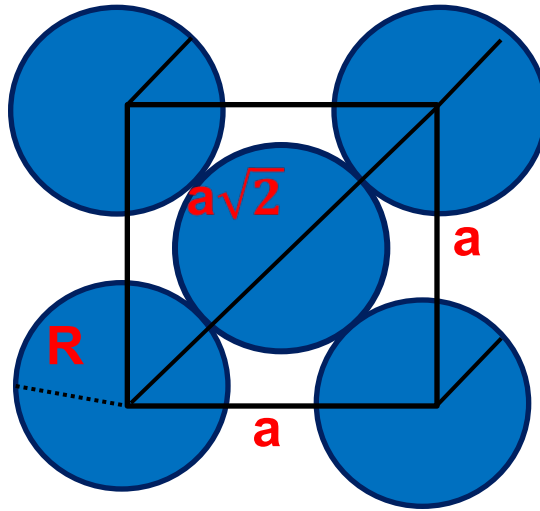
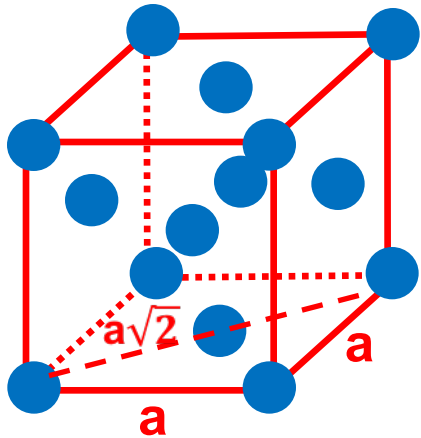
(b)

Koordinasyonların basit (a) ve hacim merkezli kübik (b) yapıda gösterimi. Basit küpteki her bir atomla 6 atom temas halinde, hacim merkezli kübik yapıda ise 8 atom temas halindedir.

3. Katılarda Kristal Yapılar

Metallerde Kristal Yapılar

- Birçok metalde bulunan bir kristal yapı, bütün köşelerinde ve yüzey merkezlerinde birer atomun bulunduğu, kübik geometride bir birim hücreye sahiptir. Bu kristal yapı **yüzey merkezli kübik (YMK)** kristal yapı olarak adlandırılmıştır. Bakır, alüminyum, gümüş ve altın gibi iyi bilinen bazı metaller YMK yapıya sahiptir. **YMK** yapının koordinasyon sayısı 4 ve **ADF** 0.74'tür.



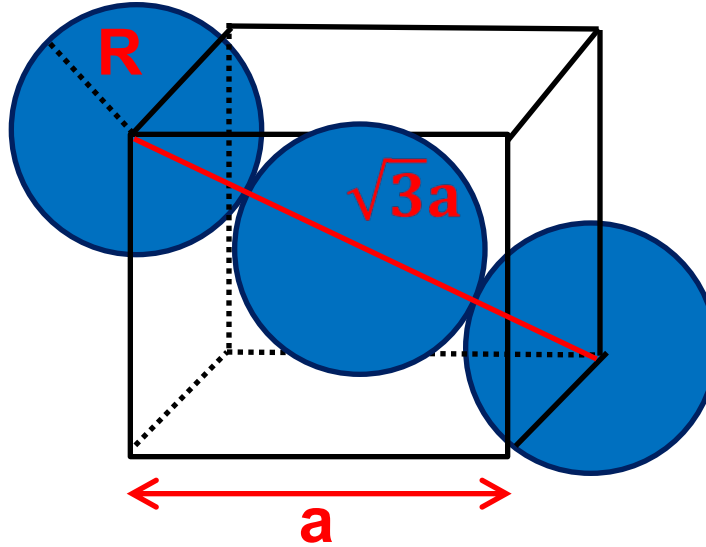
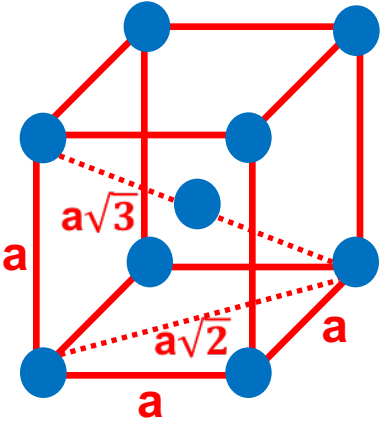
Yüzey merkezli kübik (YMK) kristal yapının birim hücre kenar uzunluğu

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

3. Katılarda Kristal Yapılar

Metallerde Kristal Yapılar

- Metallerde yaygın olarak bulunan bir diğer kristal yapı; hacim merkezinde bir ve köşelerinde sekiz atomun bulunduğu, kübik bir birim hücreye sahip olan **hacim merkezli kübik (HMK)** yapıdır. **HMK** yapının koordinasyon sayısı 8 ve **ADF** 0.68'dir.



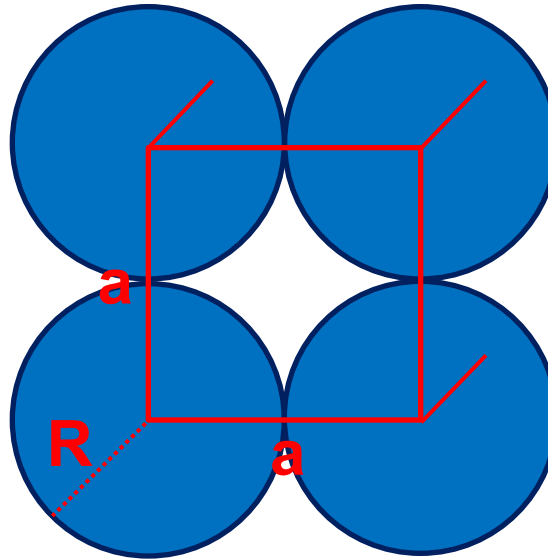
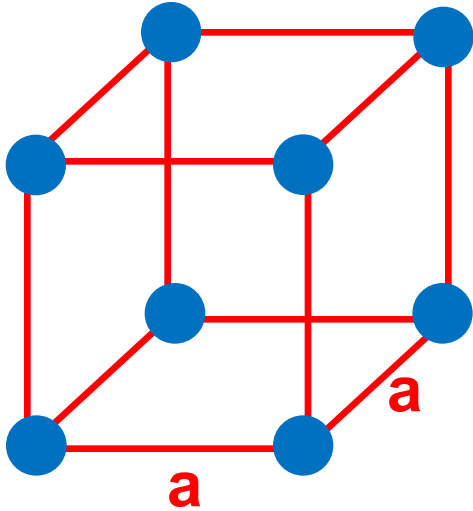
Hacim merkezli kübik (HMK) kristal yapının birim hücre kenar uzunluğu

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

3. Katılarda Kristal Yapılar

Metallerde Kristal Yapılar

- **Basit kübik (BK)** kristal yapının birim hücre kenar uzunluğu



$$a = 2R$$

3. Katılarda Kristal Yapılar

Metallerde Kristal Yapılar

- **Koordinasyon sayısı** ve **atomsal dolgu faktörü (ADF)** kristal yapılar için önemli diğer iki özelliktir. Metallerde her atomun koordinasyon sayısı aynıdır. **ADF**, birim hücredeki bütün atomların, katı-küre modeline göre, birim hücre içinde kalan toplam küresel hacimlerinin, birim hücre hacmine oranıdır.

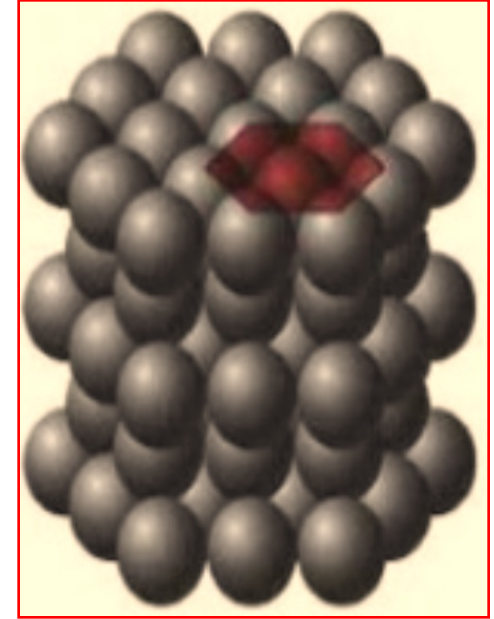
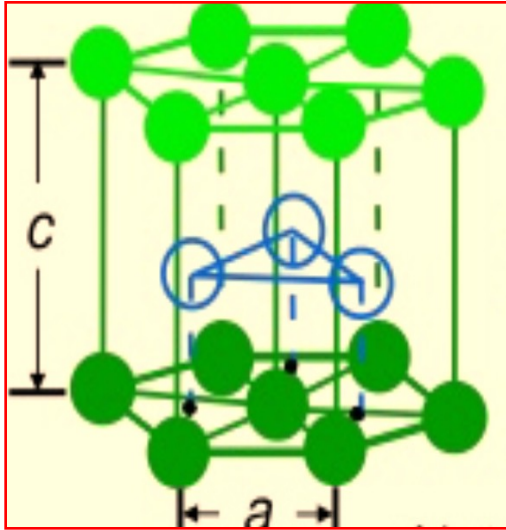
ADF'nin tanımı

$$ADF = \frac{\text{Birim hücredeki atomların hacmi}}{\text{Birim hücre hacmi}}$$

3. Katılarda Kristal Yapılar

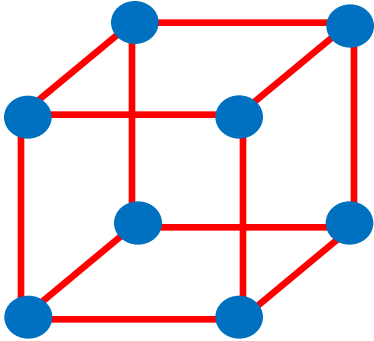
Metallerde Kristal Yapılar

- Bazı metallerin birim hücrelerinde kübik simetri bulunmaz. Ele alınacak son kristal yapı hekzagonal bir birim hücreye sahiptir. Şekil 3.3a'da **sıkı paket hekzagonal (SPH)** yapı olarak adlandırılan bu yapının birim hücresi küçük-küreler ile gösterilmiştir. Şekil 3.3b'de ise **SPH** birim hücrelerinden oluşmuş bir hacim gösterilmiştir. **YMK**'da olduğu gibi, **SPH** yapının koordinasyon sayısı 12 ve **ADF** 0.74'tür.



3. Katılarda Kristal Yapılar

Metallerde Kristal Yapılar



$$a = 2R$$

$$ADF = \frac{\text{Birim hücredeki atomların hacmi}}{\text{Birim hücre hacmi}}$$

$$ADF = \frac{n V_{\text{Küre}}}{V_{\text{BH}}} \quad n = 1 \text{ (Birim Hücredeki atom sayısı)}$$

$$V_{\text{BH}} = a^3 \text{ (Birim Hücrenin hacmi)}$$

$$V_{\text{Küre}} = \frac{4}{3} \pi R^3 \text{ (Birim Hücredeki atomun hacmi)}$$

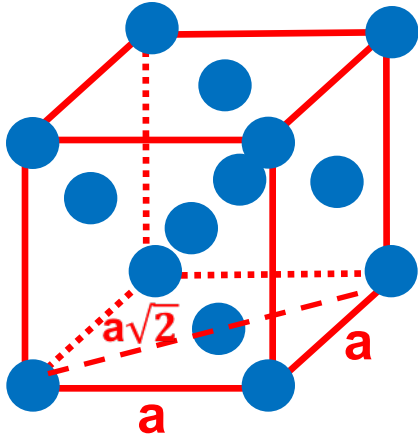
$$n = 1 \quad V_{\text{BH}} = a^3 = (2R)^3 = 8R^3$$

$$V_{\text{Küre}} = \frac{4}{3} \pi R^3$$

$$ADF = \frac{n V_{\text{Küre}}}{V_{\text{BH}}} = \frac{1 \cdot \frac{4}{3} \pi R^3}{8R^3} = \frac{\pi}{6} = 0.52$$

3. Katılarda Kristal Yapılar

Metallerde Kristal Yapılar



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

$$ADF = \frac{\text{Birim hücredeki atomların hacmi}}{\text{Birim hücre hacmi}}$$

$$ADF = \frac{n V_{\text{Küre}}}{V_{\text{BH}}} \quad n = 4 \text{ (Birim Hücredeki atom sayısı)}$$

$$V_{\text{BH}} = a^3 \text{ (Birim Hücrenin hacmi)}$$

$$V_{\text{Küre}} = \frac{4}{3} \pi R^3 \text{ (Birim Hücredeki atomun hacmi)}$$

$$n = 4$$

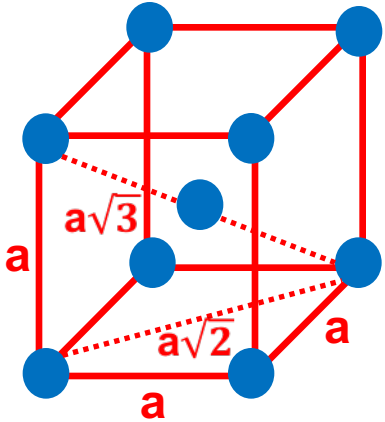
$$V_{\text{BH}} = a^3 = (2R\sqrt{2})^3 = 16R^3\sqrt{2}$$

$$V_{\text{Küre}} = \frac{4}{3} \pi R^3$$

$$ADF = \frac{n V_{\text{Küre}}}{V_{\text{BH}}} = \frac{4 \frac{4}{3} \pi R^3}{16R^3\sqrt{2}} = \frac{\pi}{3\sqrt{2}} = 0.74$$

3. Katılarda Kristal Yapılar

Metallerde Kristal Yapılar



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

$$ADF = \frac{\text{Birim hücredeki atomların hacmi}}{\text{Birim hücre hacmi}}$$

$$ADF = \frac{n V_{\text{Küre}}}{V_{\text{BH}}} \quad n = 2 \text{ (Birim Hücredeki atom sayısı)}$$

$$V_{\text{BH}} = a^3 \text{ (Birim Hücrenin hacmi)}$$

$$V_{\text{Küre}} = \frac{4}{3} \pi R^3 \text{ (Birim Hücredeki atomun hacmi)}$$

$$n = 2$$

$$V_{\text{BH}} = a^3 = \left(\frac{4R}{\sqrt{3}}\right)^3 = \frac{64R^3}{3\sqrt{3}}$$

$$V_{\text{Küre}} = \frac{4}{3} \pi R^3$$

$$ADF = \frac{n V_{\text{Küre}}}{V_{\text{BH}}} = \frac{2 \frac{4}{3} \pi R^3}{\left(\frac{64R^3}{3\sqrt{3}}\right)} = 0.68$$

3. Katılarda Kristal Yapılar

Yoğunluğun Hesaplanması

- Kristal yapı bilgisi sayesinde metallerin teorik yoğunlukları aşağıdaki gibi hesaplanabilir:

Metallerin teorik yoğunluğu

$$\rho = \frac{nA}{V_{BH}N_A}$$

Burada;

n = birim hücredeki toplam atom sayısı

A = atom ağırlığı

V_{BH} = birim hücre hacmi

N_A = Avagadro sayısıdır ($6,023 \times 10^{23}$ atom/mol)

3. Katılarda Kristal Yapılar

Örnek: Hacim Merkezli Kübik Demirin Yoğunluğunun Hesaplanması

- Birim hücre parametresi 0.2866 nm olan HMK Fe'in yoğunluğunu hesaplayınız?

$$\rho = \frac{nA}{V_{BH}N_A}$$

$$n = 2$$

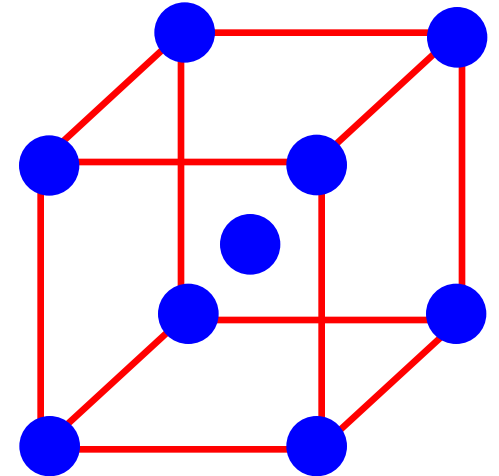
$$A = 55.847 \text{ g/mol}$$

$$R = 0.2866 \text{ nm}$$

$$V_{BH} = a^3 = (2.8644 \times 10^{-8} \text{ cm})^3 = 23.54 \times 10^{-24} \text{ cm}^3$$

$$N_A = 6.02 \times 10^{23} \text{ atom/mol}$$

$$\rho = \frac{2 \cdot 55.847 \left(\frac{\text{g}}{\text{mol}}\right)}{23.54 \times 10^{-24} (\text{cm}^3) \cdot 6.02 \times 10^{23} \left(\frac{\text{atom}}{\text{mol}}\right)} = 7.882 \frac{\text{g}}{\text{cm}^3}$$



3. Katılarda Kristal Yapılar

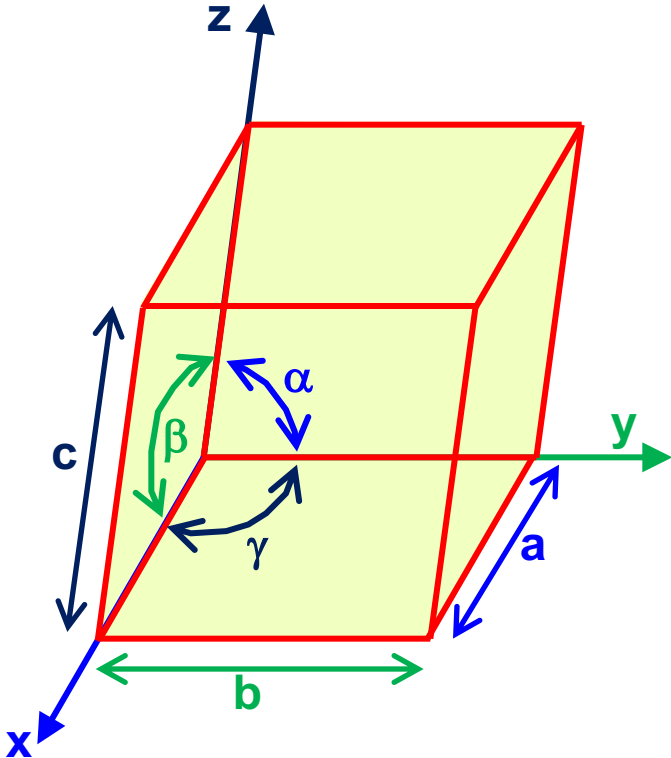
Polimorfizm ve Allotropi

- Bazı metaller ve metal dışı malzemeler birden fazla kristal yapıda bulunabilirler. Bu özelliğe **polimorfizm** denir.
- Örneğin normal koşullarda karbon-C kararlı grafit halinde bulunurken, aşırı yüksek basınç altında elmas oluşur. Oda sıcaklığında HMK kristal yapıda bulunan saf demir-Fe ise 912 °C'de YMK yapıya dönüşür. Genelde polimorfik dönüşümlerde malzemelerin yoğunlukları ve diğer fiziksel özellikleri değişir.
- Element halindeki katılar için, **allotropi** olarak adlandırılan bu özelliğe sahip malzemelerin hangi kristal yapıda bulunduğu, sıcaklığa ve dış basınca bağlıdır.

3. Katılarda Kristal Yapılar

Kristal Sistemler

- Birim hücre geometrisi, kenar uzunlukları a , b , c ve iç açıları α , β , γ 'dan oluşan altı parametre yardımıyla tam olarak tanımlanır. Kafes parametreleri olarak da adlandırılan bu parametreler aşağıdaki şekilde gösterilmiştir.

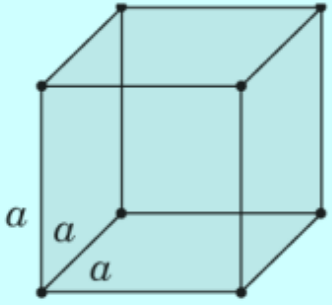


x , y , z koordinat eksenleri ile eksen uzunluklarının (a , b ve c) ve eksenler arasındaki açıların (α , β ve γ) gösterildiği birim hücre.

3. Katılarda Kristal Yapılar

Kristal Sistemler

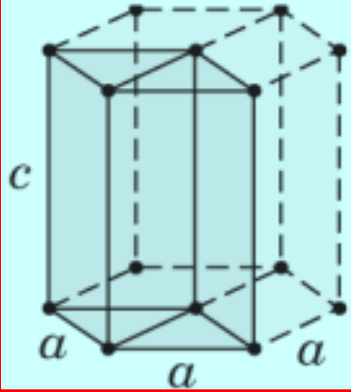
- a , b , c ve α , β , γ 'nın, her biri ayrı bir **kristal sistemi** temsil eden, yedi farklı kombinasyonu vardır (aşağıdaki şekil).



Kübik

$$a = b = c$$
$$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$$

Yedi Kristal sisteminin birim Hücre Geometri ve örgü parametreleri arasındaki ilişki.

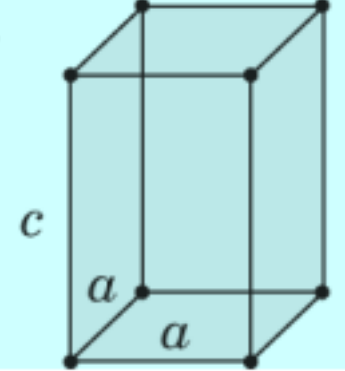


Hekzagonal

$$a = b \neq c$$
$$\alpha = \beta = 90^\circ,$$
$$\gamma = 120^\circ$$

Tetragonal

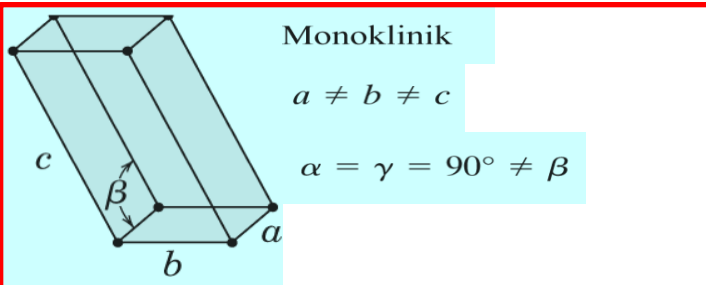
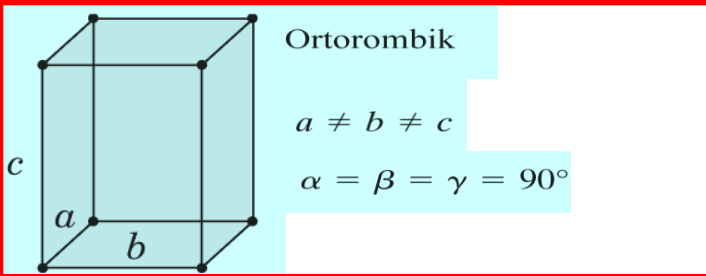
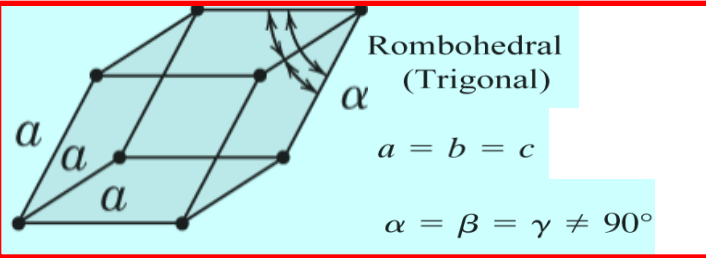
$$a = b \neq c$$
$$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$$



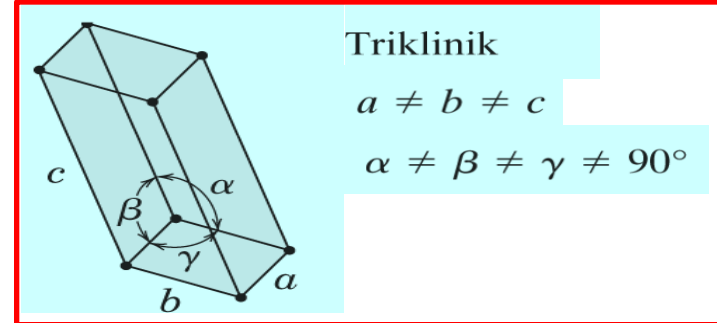
3. Katılarda Kristal Yapılar

Kristal Sistemler

- a , b , c ve α , β , γ 'nın, her biri ayrı bir **kristal sistemi** temsil eden, yedi farklı kombinasyonu vardır (aşağıdaki şekil).



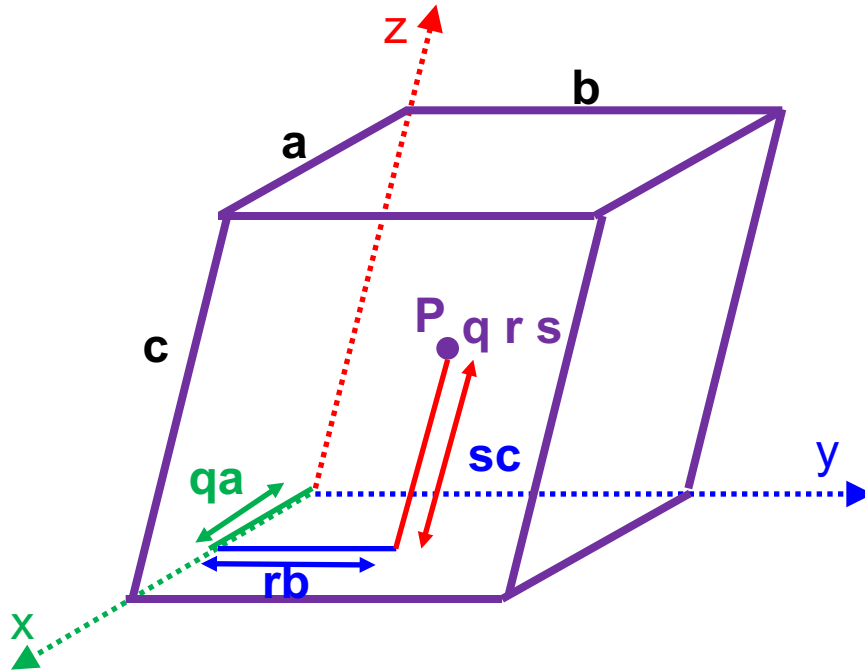
Yedi Kristal sisteminin birim Hücre Geometri ve örgü parametreleri arasındaki ilişki.



3. Katılarda Kristal Yapılar

Kristal Örgü (Kafes) Noktaları, Doğrultuları ve Düzlemleri

- Birim hücre içinde her hangi bir noktanın yeri birim hücre kenarları **a**, **b** ve **c** ile orantılı koordinatlara göre belirtilir (**aşağıdaki şekil**).
- Burada P'nin konumu genelleştirilmiş **q**, **r** ve **s** koordinatları ile verilir. **q**, **x** eksenin üzerinde **a** ile orantılı bir uzunluğu belirtir. Benzer şekilde **r**, **y** eksenini üzerinde **b** ile ve **s** ise **z** eksenini üzerinde **c** ile orantılı bir uzunluktur.

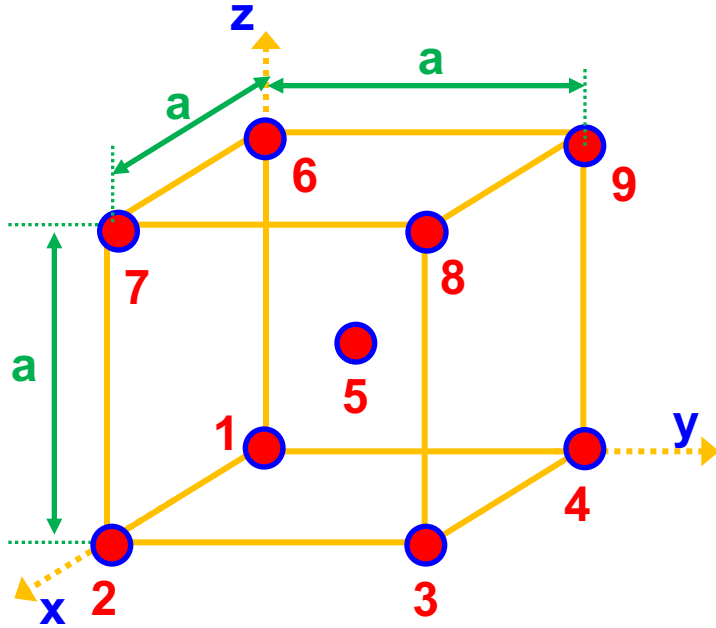


Birim hücredeki P noktasına ait **q**, **r** ve **s** koordinatının belirlenmesi.

3. Katılarda Kristal Yapılar

Örnek:

- HMK birim hücreesindeki bütün atom konumlarının nokra koordinatlarının belirleyiniz.



$$x=qa=(0)*(a)=0$$

$$y=rb=(0)*(b)=0$$

$$z=sc=(0)*(c)=0$$

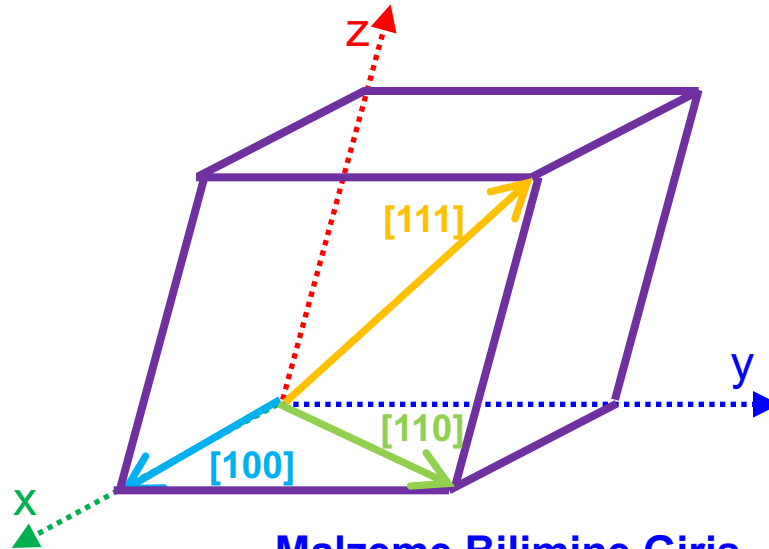
1 numaralı atom için

Nokta Numarası	Oransal Uzunluklar			Nokta Koordinatları
	x eksen	y eksen	z eksen	
1	0	0	0	0 0 0
2	1	0	0	1 0 0
3	1	1	0	1 1 0
4	0	1	0	0 1 0
5	1/2	1/2	1/2	1/2 1/2 1/2
6	0	0	1	0 0 1
7	1	0	1	1 0 1
8	1	1	1	1 1 1
9	0	1	1	0 1 1

3. Katılarda Kristal Yapılar

Kristal Kafes Doğrultuları

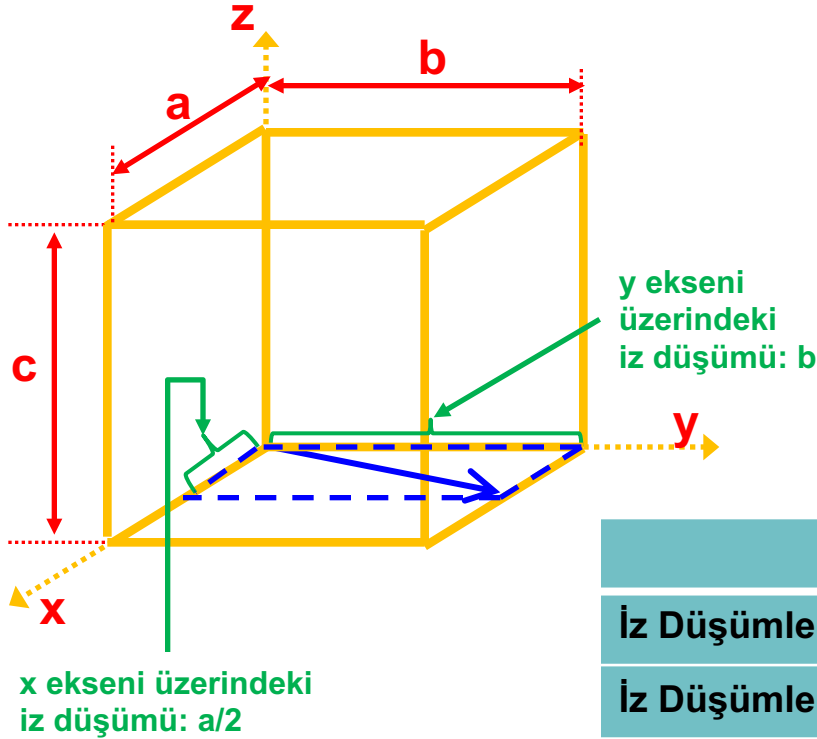
- Bir **kristal kafes doğrultusu** iki nokta arasında çizilen **bir doğru** ya da **vektör** ile tanımlanır. Bir doğrultuya ait üç indisinin belirlenmesi aşağıdaki sırayla olur:
 1. Uygun uzunlukta bir vektör, koordinat sisteminin orijininden geçecek şekilde yerleştirilir. Paralellik korunduğu sürece, bir vektör kristal kafes içinde istenilen noktaya taşınabilir.
 2. Vektörün üç eksen üzerindeki iz düşüm uzunlukları belirlenir. Bu uzunluklar birim hücre boyutları a, b ve c'ye bölünür.
 3. Gerekliğinde, bulunan sayıları **en küçük tam sayılara** dönüştürmek için, ortak bir sayı ile bölme ya da çarpma işlemi yapılır.
 4. Sayıları köşeli parantezin içine virgül koymaksızın alınır: **[u v w]**. **u, v ve w** tam sayıları vektörün **x, y ve z** eksenleri üzerindeki indirgenmiş (kafes (örgü) parametreleri ile orantılı) iz düşümleridir.



3. Katılarda Kristal Yapılar

Örnek:

- Aşağıdaki şekilde gösterilen doğrultunun indislerini belirleyiniz.



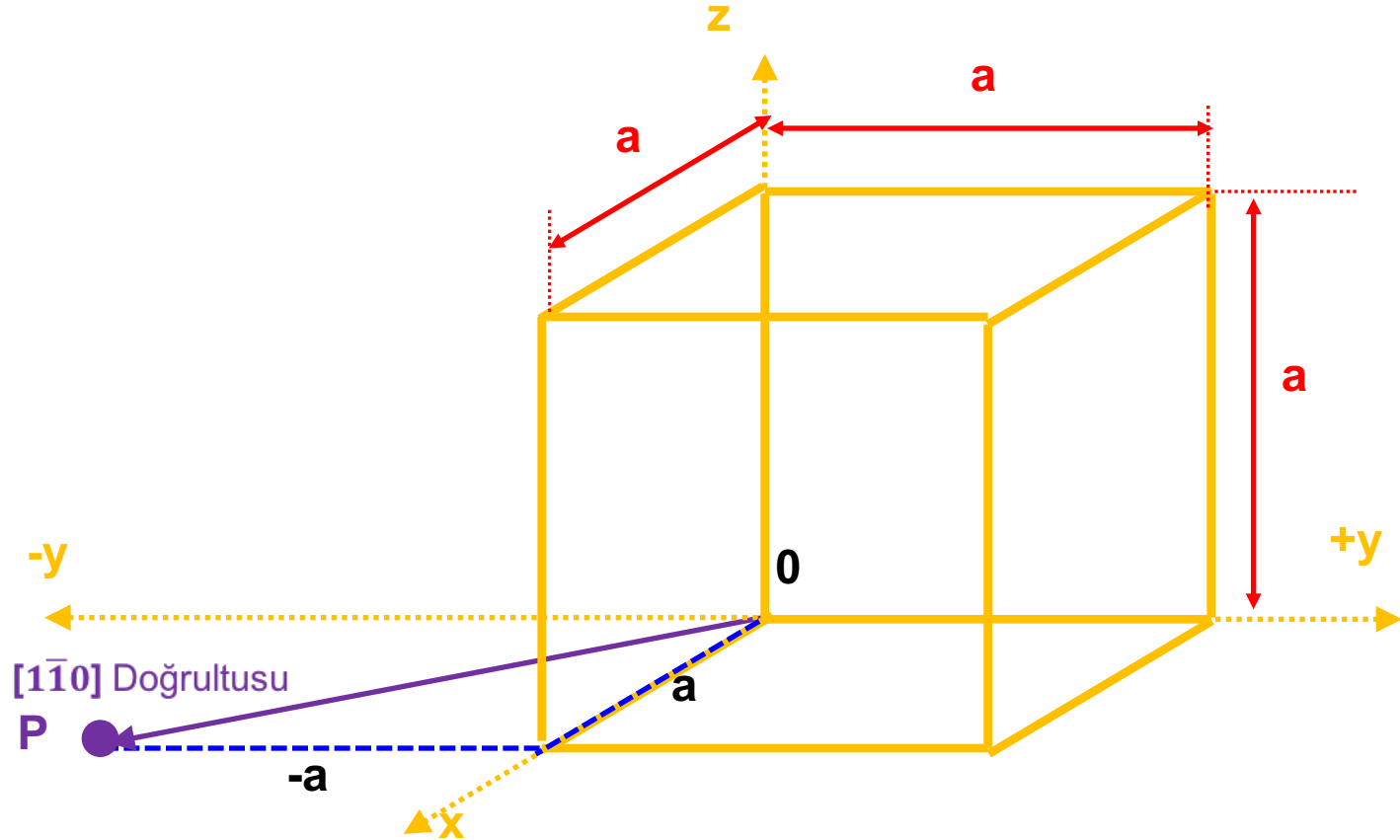
- Koordinat sistemi orijininden geçtiği için şekildeki vektörün taşınmasına gerek yoktur.
- Bu vektörün **x**, **y** ve **z** eksenleri üzerindeki **iz düşümleri** sırasıyla **a/2**, **1b** ve **0c (0)**'dir.
- Birim hücre parametrelerine oranlandıklarında, bu iz düşümleri $\frac{1}{2}$, **1** ve **0** haline gelir.
- Olası en küçük tam sayılara dönüştürülmeleri için bu sayılar **2** ile çarpılır: **1**, **2** ve **0** elde edilir.
- Elde edilen doğrultu indisleri: **[120]**

	x	y	z
İz Düşümler	a/2	1b	0c
İz Düşümler (a, b ve c'ye oranla)	1/2	1	0
İndirgeme	1	2	0
Parantez İçine Alma	[120]		

3. Katılarda Kristal Yapılar

Örnek:

- Birim hücre içerisinde $[1\bar{1}0]$ doğrultusunu gösteriniz.



3. Katılarda Kristal Yapılar

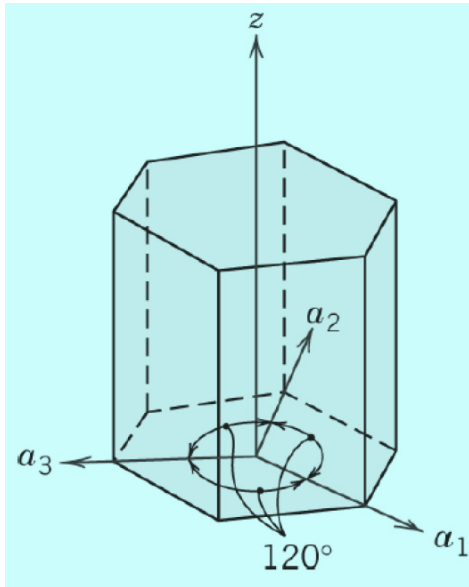
Kristal Kafes Doğrultuları

- Kristal yapılarda, paralel olmayan ve dolayısıyla miller indisleri farklı bazı doğrultular, birbirlerine eşdeğerdir. Bu atom dizilişlerinin ya da atomlar arası mesafenin, bu doğrultularda aynı olduğu anlamına gelir.
- Örneğin kübik kristallerde $[100]$, $[\bar{1}00]$, $[010]$, $[0\bar{1}0]$, $[001]$ ve $[00\bar{1}]$ doğrultuları birbirlerine eşdeğerdir ve $\langle 100 \rangle$ doğrultu ailesini oluşturur.
- Kübik sistemlerde aynı indislere sahip doğrultular, indislerin sıralamasına ve eksi ya da artı işaretli olmasına bakılmaksızın birbirine eşdeğerdir. Örneğin: $[123]$ ve $[\bar{2}1\bar{3}]$ doğrultuları.
- Bu şekilde bir denklik bütün kristal sistemlerde yoktur. Örneğin tetragonal simetriye sahip kristallerde, $[100]$ ve $[010]$ doğrultuları birbirlerine eşdeğer oldukları halde $[100]$ ve $[001]$ doğrultuları eşdeğer değildir.

3. Katılarda Kristal Yapılar

Hekzagonal Kristaller

- Hekzagonal (altıgen) simetriye sahip kristallerde eşdeğer doğrultuların aynı indislere sahip olmamaları nedeniyle ortaya çıkan bir problem vardır.
- Bu problem **aşağıdaki şekilde** gösterilen **dört eksenli** veya **Miller-Bravais** koordinat sisteminin kullanılmasıyla çözülür.
- Taban (bazal) düzlemi olarak adlandırılan, tek bir düzlem üzerinde bulunan a_1 , a_2 ve a_3 eksenleri arasındaki açılar 120° 'dir. z eksenini taban düzlemine dik olarak uzanır.
- Elde edilen doğrultu indisi, **[uvtw]** şeklinde dört indis ile belirtilir. Bun indilerden ilk üçü taban düzlemindeki a_1 , a_2 ve a_3 eksenleri üzerindeki iz düşümleri gösterir.



$$[u'v'w'] \longrightarrow [uvtw]$$

Üç indis sisteminden dört-indis sistemine dönüşüm aşağıdaki denklemlerle gerçekleştirilir:

$$\begin{aligned}u &= \frac{1}{3}(2u' - v') \\v &= \frac{1}{3}(2v' - u') \\t &= -(2u - v) \\w &= w'\end{aligned}$$

Buradaki, u' , v' , w' üç-indis sistemine ve u , v , t , w ise **Miller-Bravais dört-indis** sistemine ait indilerdir. Örneğin: **[010]** doğrultusu **$[\bar{1}2\bar{1}0]$** haline gelir.

3. Katılarda Kristal Yapılar

Hekzagonal kristal için [111] doğrultusunu 4-indisli sisteme dönüştürünüz.

$$u' = 1, v' = 1, w' = 1$$

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

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

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

$$w = w' = 1$$

$$[111] \longrightarrow [11\bar{2}3]$$

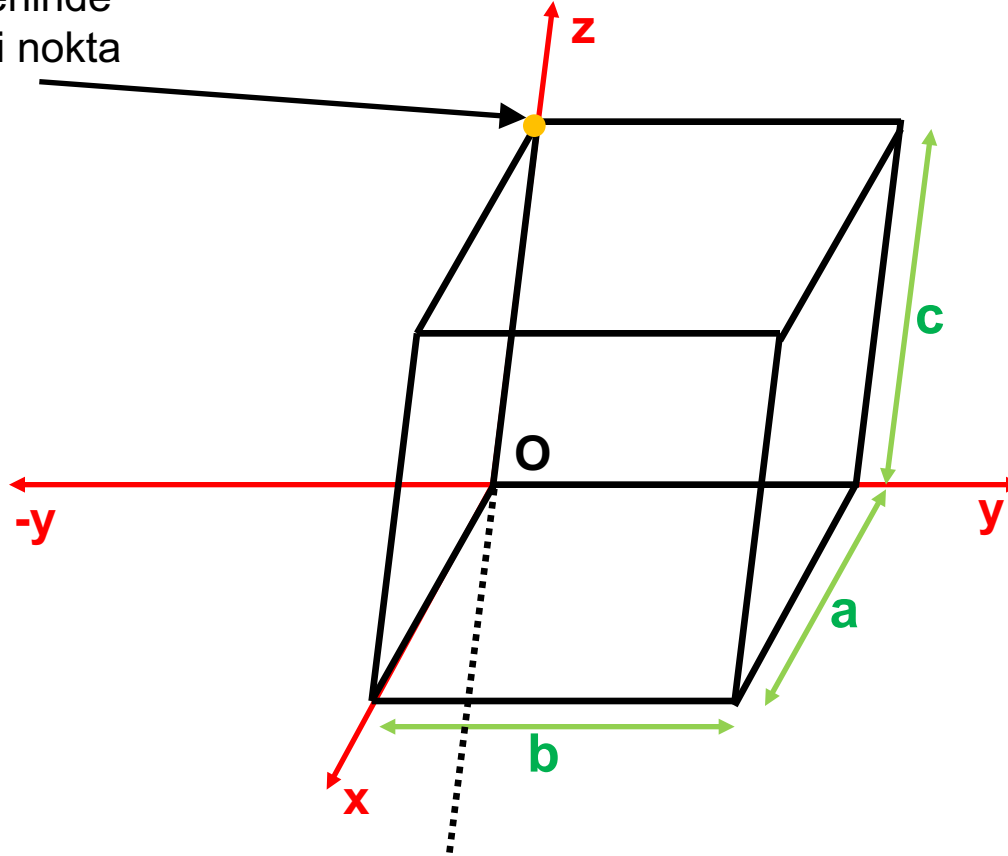
3. Katılarda Kristal Yapılar

Kristal Kafes Düzlemleri

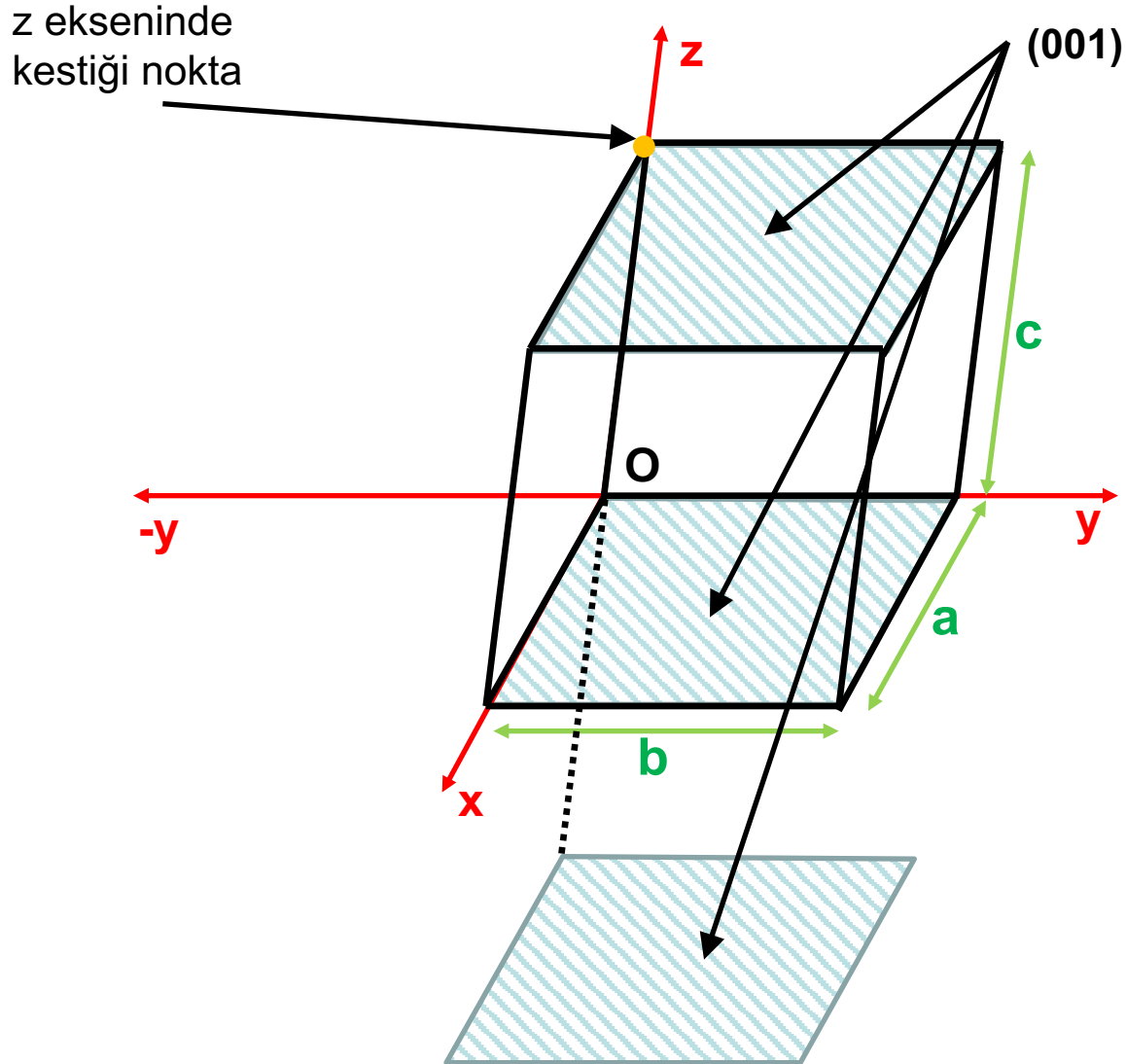
- Kristal yapılarda düzlemler benzer bir şekilde gösterilir. Hegzagonal kristal sistemi dışında bütün düzlemler (**hkl**) şeklinde üç Miller İndisi ile belirtilir.
- Birbirine paralel olan herhangi iki kristal kafes düzlemi, birbirine eşdeğerdendir ve aynı indislerle gösterilir.
- **h**, **k** ve **l** indislerinin belirlenmesi için uygulanan işlemler aşağıda sıralanmıştır:
 1. Düzlem orijinden geçiyorsa düzlem uygun bir şekilde paralel olarak taşınır veya orijin başka bir birim hücrenin köşesine taşınır.
 2. Bu noktada kristal kafes düzlemi tüm eksenleri ya da en azından bir eksenini keser. Kesemediği eksenler var ise bu eksenlere paralel uzanıyor demektir. Düzlemin eksenleri kestiği noktaların orijine uzaklıkları **a**, **b** ve **c** kafes parametreleri cinsinden belirlenir.
 3. Bu sayıların çarpmaya göre tersleri alınır. Düzlemin herhangi bir eksene paralel olarak uzanması durumunda, **0** eksenini sonsuzda kestiği düşünülür ve çarpmaya göre tersi olarak **0** sayısı alınır.
 4. Gerektiğinde bu üç sayı, en küçük tamsayıları verecek bir sayı ile çarpılır ya da bölünür.
 5. Son olarak indisler virgül ile ayrılmaksızın (**hkl**) şeklinde parantez içine alınarak yazılır.

3. Katılarda Kristal Yapılar

z ekseninde
kestiği nokta



3. Katılarda Kristal Yapılar



3. Katılarda Kristal Yapılar

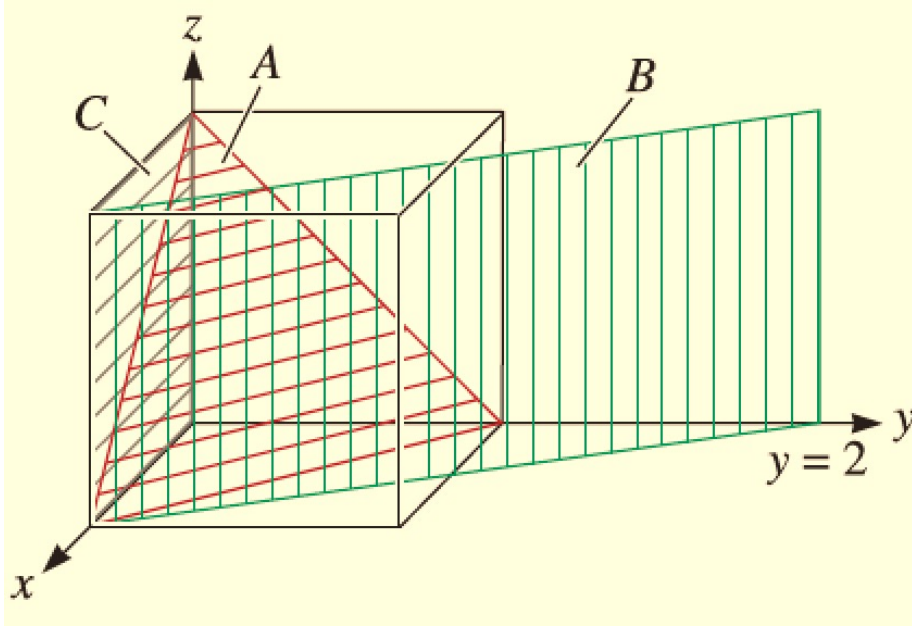
Kristal Kafes Doğrultuları

- Birim hücredeki atomların pozisyonları koordinat sistemi $(x \ y \ z)$ kullanılarak gösterilir.
- **Miller İndisleri**: İngiliz mineralci **William Hallowes Miller**'in geliştirdiği Millerian sistemi malzemedeki belirli kristallografik doğrultu ve düzlemleri göstermek için kullanılan işaretlerdir.
- Tekrar edilen uzaklık- Latis noktaları arasındaki uzaklık.
- Doğrultular köşeli parantez ile gösterilir $[hkl]$.
- Düzlemler parantez (hkl) ile gösterilir.
- Doğrultu aileleri $\langle hkl \rangle$ ile
- Düzlem aileleri $\{hkl\}$ ile gösterilir.
- Negatif yönler sayılarının üzerine yerleştirilen çizgiler ile gösterilir.
- Paketleme Faktörü/Atomik Dolgu Faktörü – Bir doğrultu veya düzlemde atom veya iyonlar tarafından işgal edilmiş alanların miktarıdır.

3. Katılarda Kristal Yapılar

Örnek: Düzlemlerin Miller İndislerinin (hkl) Tanımlanması

- Şekilde verilen A, B ve C düzlemlerinin indislerini belirleyiniz.



A düzlemi

- Düzlemlerin koordinat sistemlerini kesen noktalarını belirle
 $x = 1, y = 1, z = 1$
- Terslerini al
 $1/x = 1, 1/y = 1, 1/z = 1$
- Kesirli ise tamamla
- Uygun gösterimde yaz
(111)

B düzlemi

- z eksenini yi kesmez $x = 1, y = 2, \text{ and } z = \infty$
- $1/x = 1, 1/y = 1/2, 1/z = 0$
- Kesiri düzenle
 $1/x = 2, 1/y = 1, 1/z = 0$
- (210)

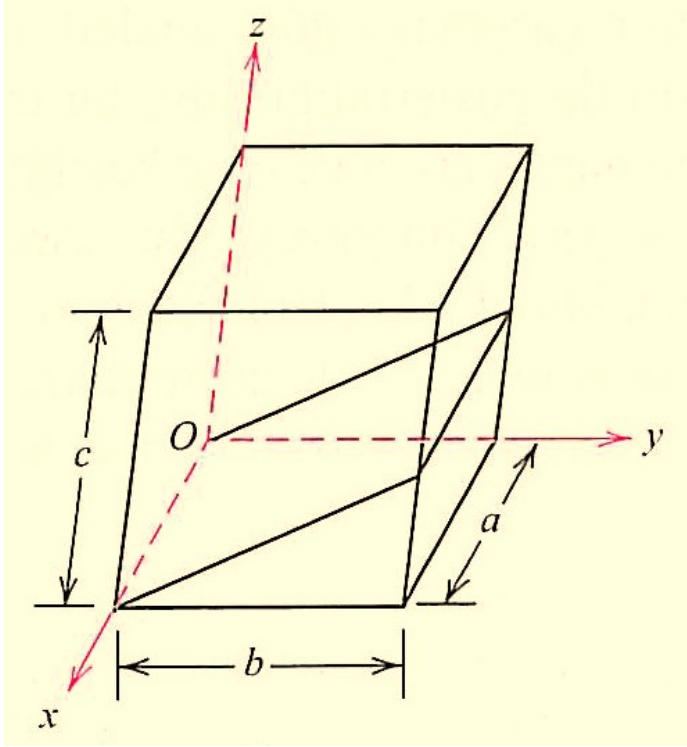
C düzlemi

- Orijin noktasının yerini değiştirmeliyiz. Çünkü düzlem 0,0,0 ı kesmekte. Y yönünde orijini bir birim değiştirelim. Böylece $x = \infty, y = -1, \text{ and } z = \infty$
- $1/x = 0, 1/y = -1, 1/z = 0$
- Kesir yok
- (0 $\bar{1}$ 0)

3. Katılarda Kristal Yapılar

Örnek Problem 3. 10: Düzlem (Miller) İndislerinin Belirlenmesi

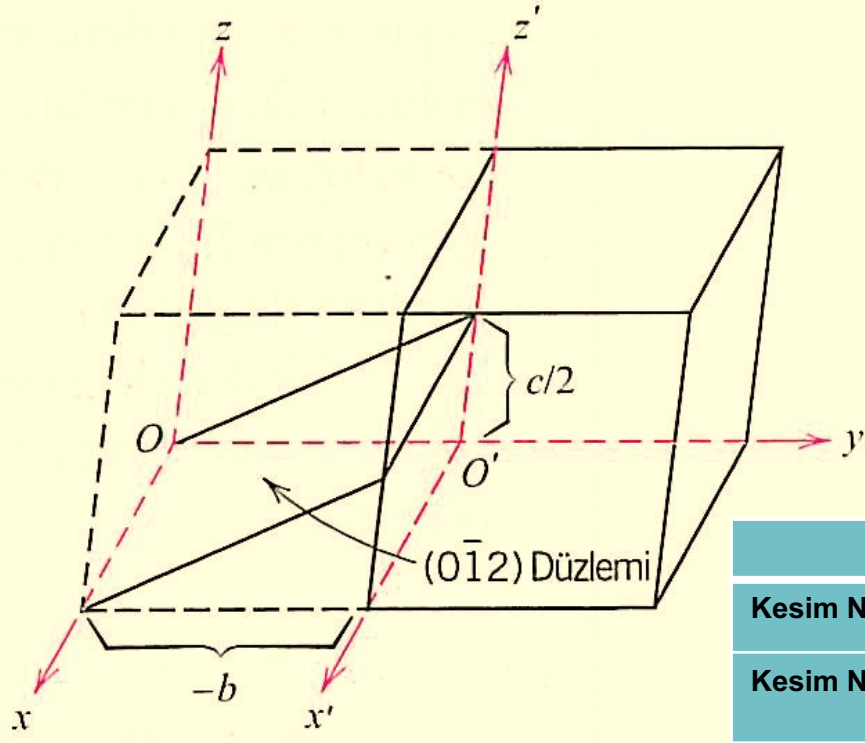
- Aşağıdaki şekilde gösterilen düzlemin Miller indislerini belirleyiniz.



3. Katılarda Kristal Yapılar

Örnek Problem 3. 10: Düzlem (Miller) İndislerinin Belirlenmesi

- Aşağıdaki şekilde gösterilen düzlemin Miller indislerini belirleyiniz.



Düzlem orijinden geçtiği için, bitişik hücrenin O' ile belirtilen köşesi yeni orijin olarak seçilir.

Bu düzlem **x eksenine** paraleldir ve **x eksenini** ∞a keser.

Yeni orijine O' göre düzlem **y ve z eksenlerini** $-b$ ve $c/2$ 'de keser.

Yani kesim noktaları: ∞ , -1 ve $1/2$ 'dir.

Bu sayıların çarpıma göre tersleri: 0 , -1 ve 2 'dir.

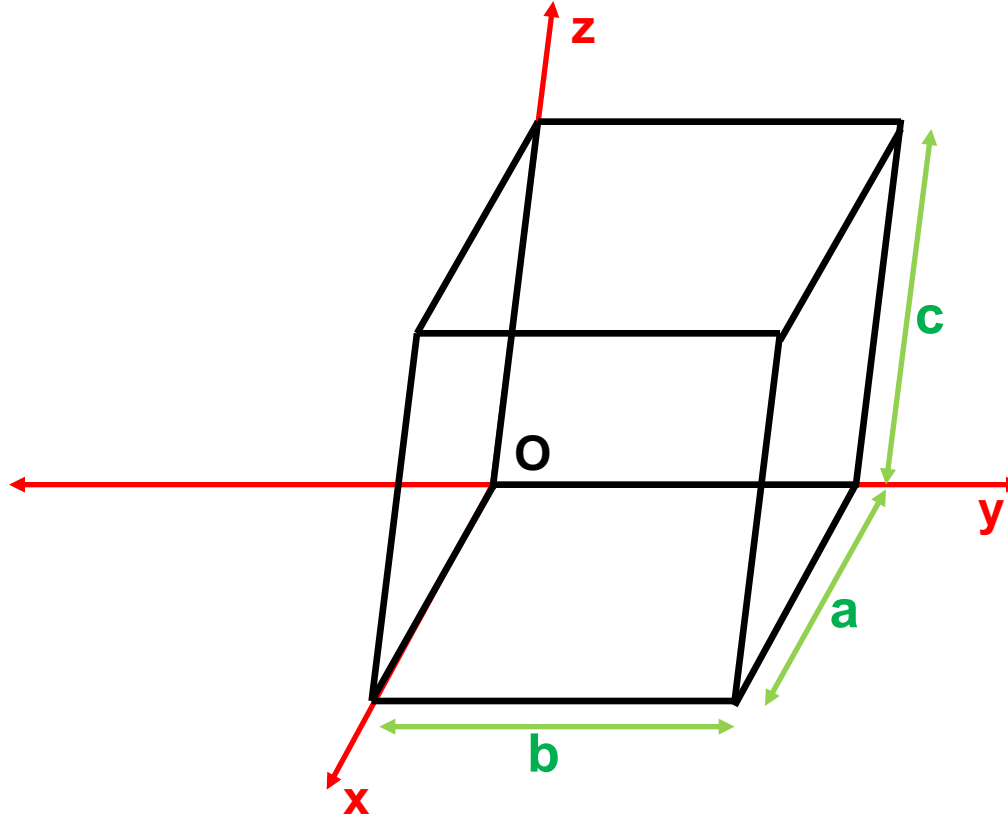
Tam sayı oldukları için herhangi bir sayı ile çarpılmaya gerek yoktur. Bu durumda düzlemin Miller indisleri: $(0\bar{1}2)$ 'dir.

	x	y	z
Kesim Noktaları	∞a	$-b$	$c/2$
Kesim Noktaları (kafes parametreleri)	∞	-1	$1/2$
Çarpıma göre tersleri	0	-1	2
İndirgeme (Gerekmiyor)			
Parantez içine alma	$(0\bar{1}2)$		

3. Katılarda Kristal Yapılar

Örnek Problem 3. 11: Miller İndisleri Bilinen Bir Düzlemin Çizimi

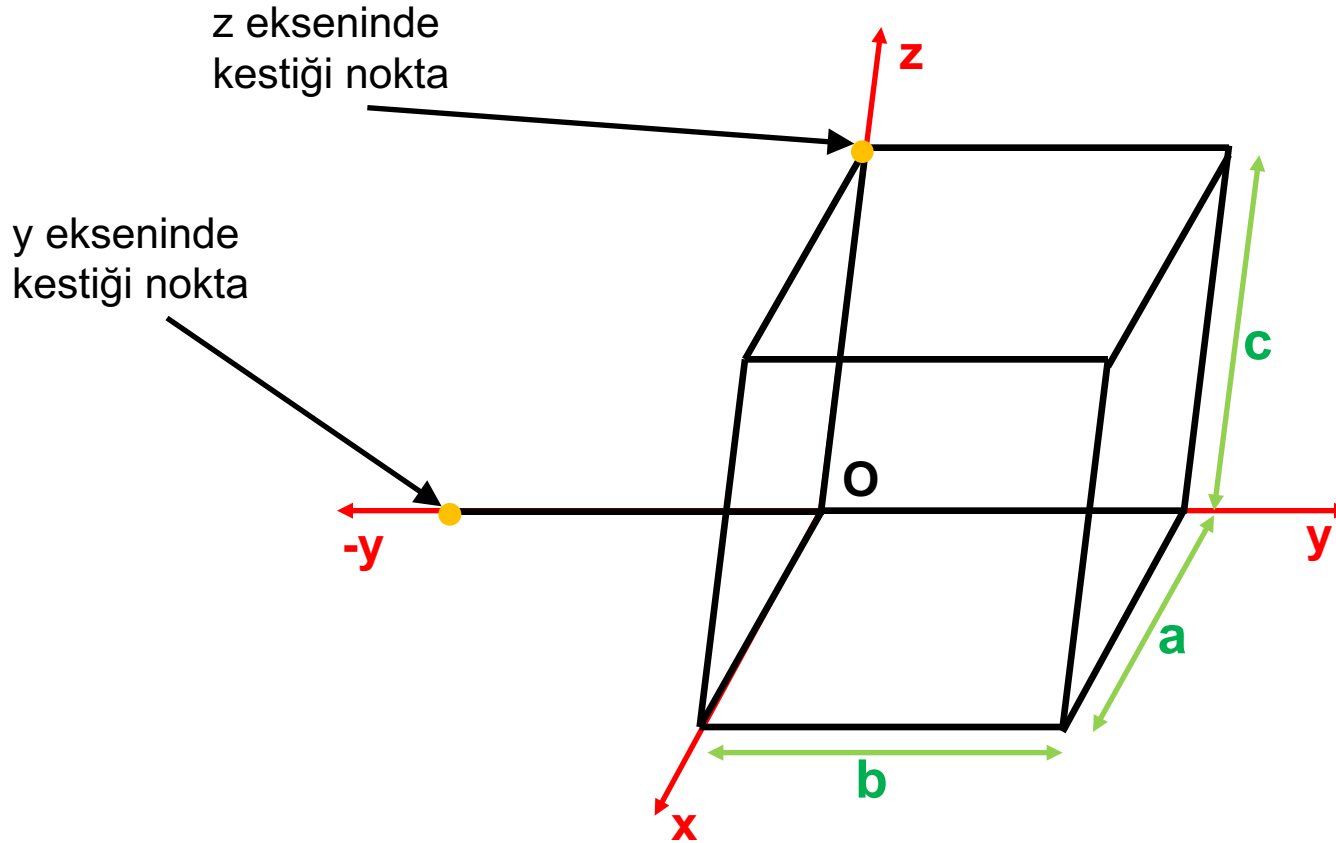
- $(0\bar{1}1)$ düzlemini kübik bir birim hücrede gösteriniz.



3. Katılarda Kristal Yapılar

Örnek Problem 3. 11: Miller İndisleri Bilinen Bir Düzlemin Çizimi

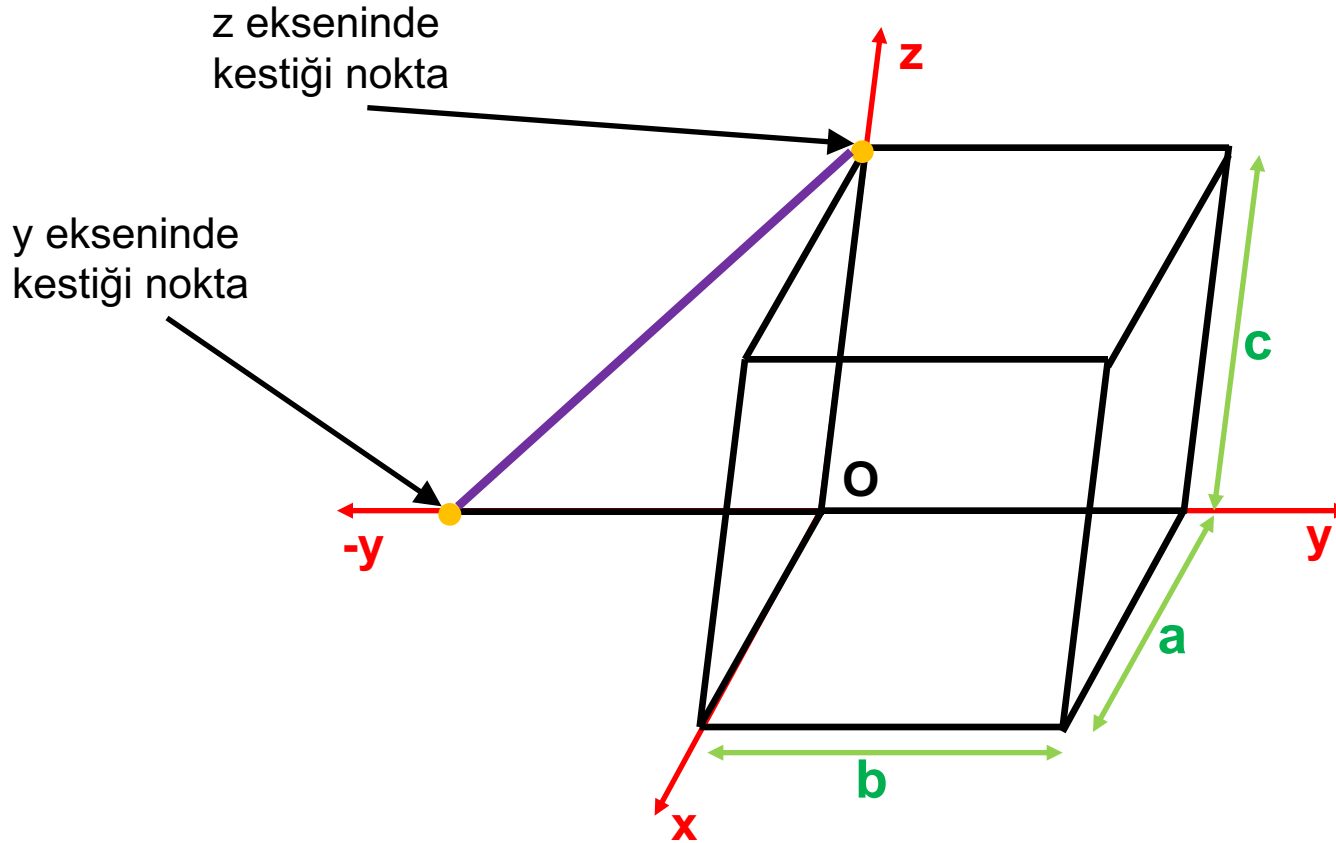
- $(0\bar{1}1)$ düzlemini kübik bir birim hücrede gösteriniz.



3. Katılarda Kristal Yapılar

Örnek Problem 3. 11: Miller İndisleri Bilinen Bir Düzlemin Çizimi

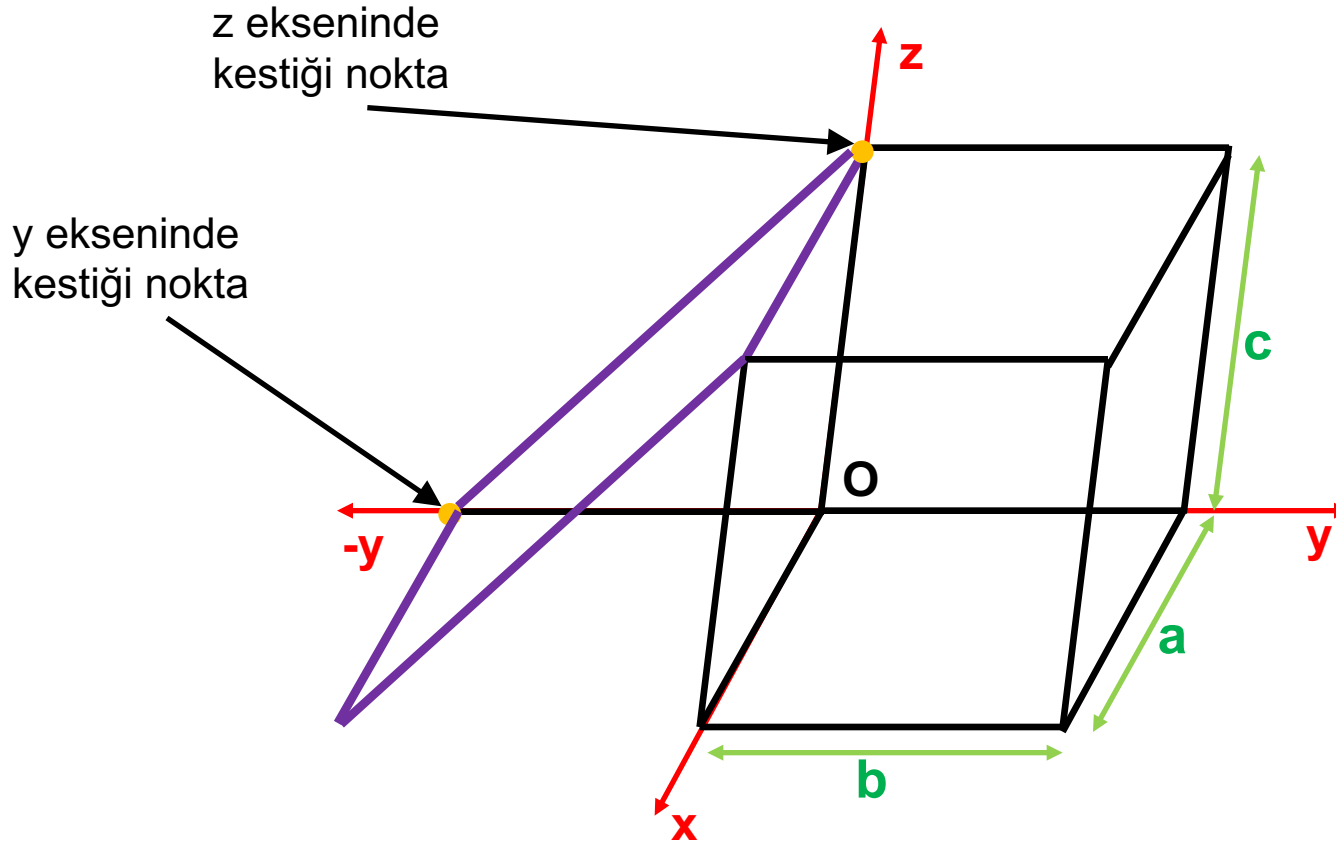
- $(0\bar{1}1)$ düzlemini kübik bir birim hücrede gösteriniz.



3. Katılarda Kristal Yapılar

Örnek Problem 3. 11: Miller İndisleri Bilinen Bir Düzlemin Çizimi

- $(0\bar{1}1)$ düzlemini kübik bir birim hücrede gösteriniz.



3. Katılarda Kristal Yapılar

Örnek Problem 3. 11: Miller İndisleri Bilinen Bir Düzlemin Çizimi

- $(0\bar{1}1)$ düzlemini kübik bir birim hücrede gösteriniz.

