



Biyoteknoloji

Nanoteknoloji

Tasarım

**BİYONANOTASARIM
LABORATUVARI**

BMM 205 Malzeme Biliminin Temelleri

Kristal Kusurları

Dr. Ersin Emre Ören

**Biyomedikal Mühendisliği Bölümü
Malzeme Bilimi ve Nanoteknoloji Mühendisliği Bölümü**

**TOBB Ekonomi ve Teknoloji Üniversitesi
Ankara - TÜRKİYE**

eeoren@etu.edu.tr
<http://eeoren.etu.edu.tr>

Kristal Kusurları Neden Önemlidir?

“Crystals are like people, it is the defects in them, which tend to make them interesting!”

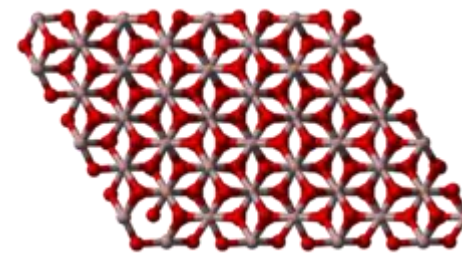
Colin Humphreys



Carat – Clarity – Color – Cut
Karat – Netlik – Renk – Kesim



Yakut - Safir



Aluminium oxide Al_2O_3

Yakut	Cr	Kırmızı
Safir	V	Mor
Safir	Ti	Renksiz
Safir	Fe	Sarı
Safir	Ti + Fe	Koyu Mavi

Kristal Kusurları Neden Önemlidir?

Elektronik Özellikler:

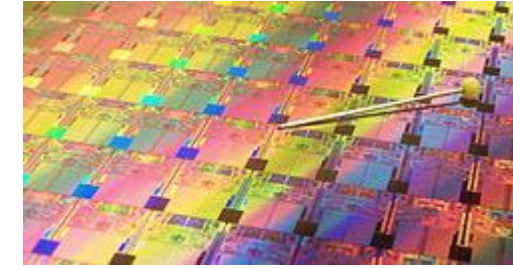
P-tipi yarıiletkenler

n-tipi yarıiletkenler

Silikon (Si)

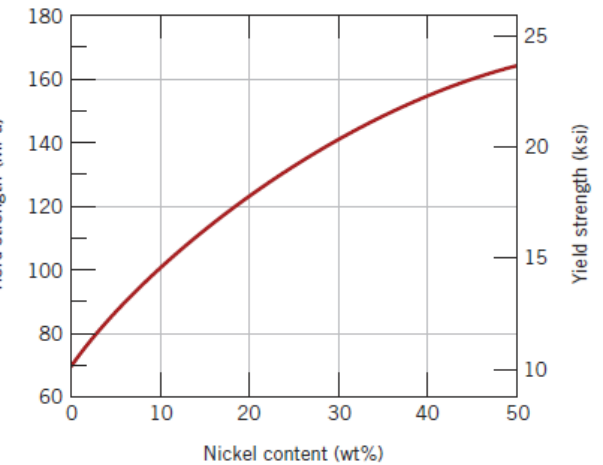
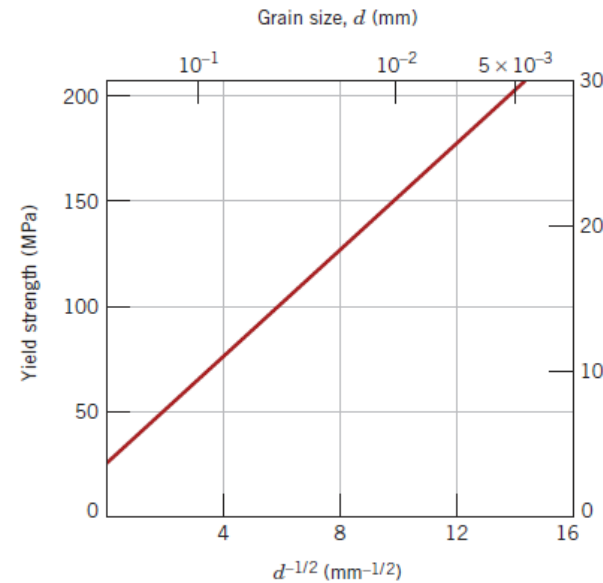
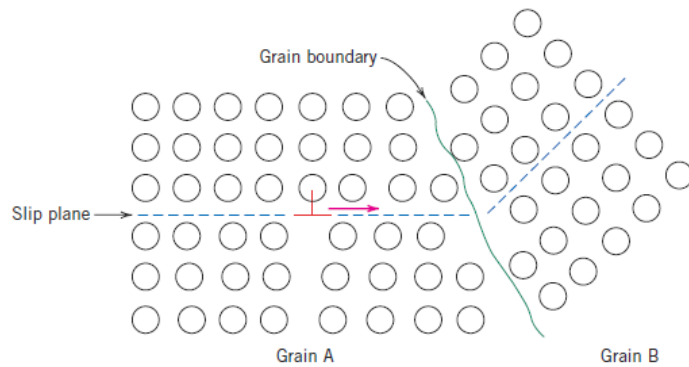
Bor (B)

Fosfor (P)

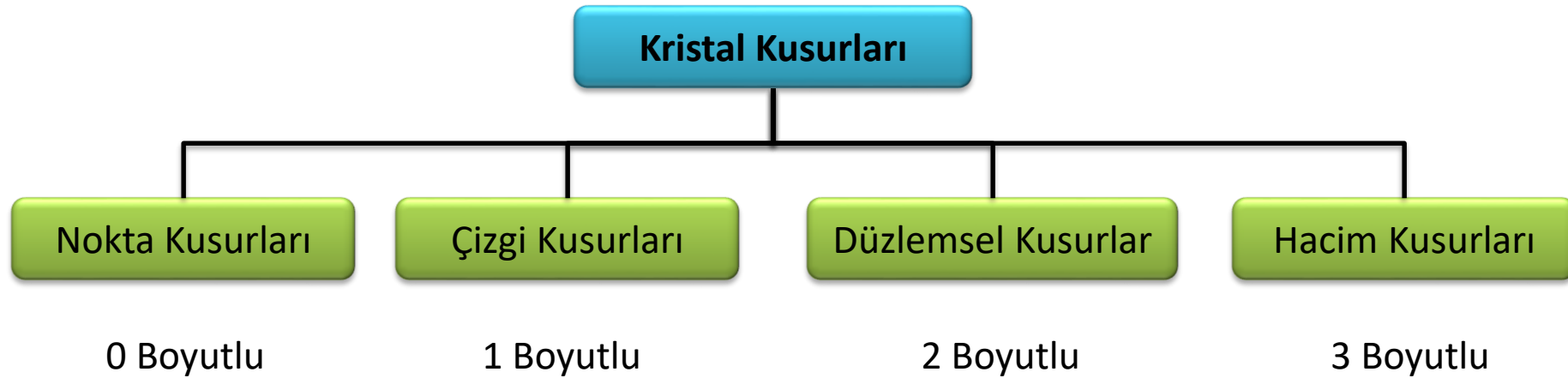


Mikroelektronik Devreler

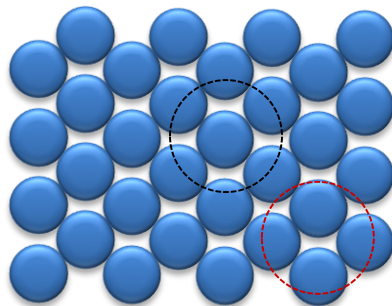
Mekanik Özellikler:



Kristaller hiçbir zaman mükemmel bir şekilde oluşmazlar ve içlerinde her zaman kusurlar bulunur.



Nokta Kusurları: En basit nokta kusuru **boşluk** (*vacancy*) olarak adlandırılır ve normalde olması gereken bir atomun eksikliğidir. Eksilen bu atom başka bir yerde sıkışma yaratabilir bu tip kusurlarada **öz arayer kusuru** (*self-interstitial*) denir.



Denge Boşluk Sayısı:
$$N_v = N \exp\left(-\frac{Q_v}{kT}\right)$$

Arrhenius Denklemi

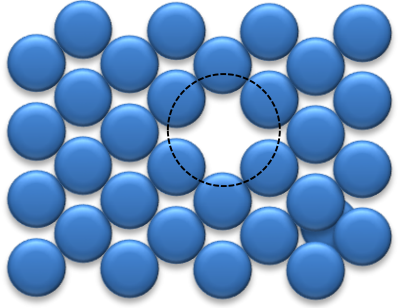
Sistemdeki toplam atom yeri

Boşluk oluşturmak için gerekli enerji

Sıcaklık (°K)

Boltzmann Sabiti

Arrhenius Denklemi



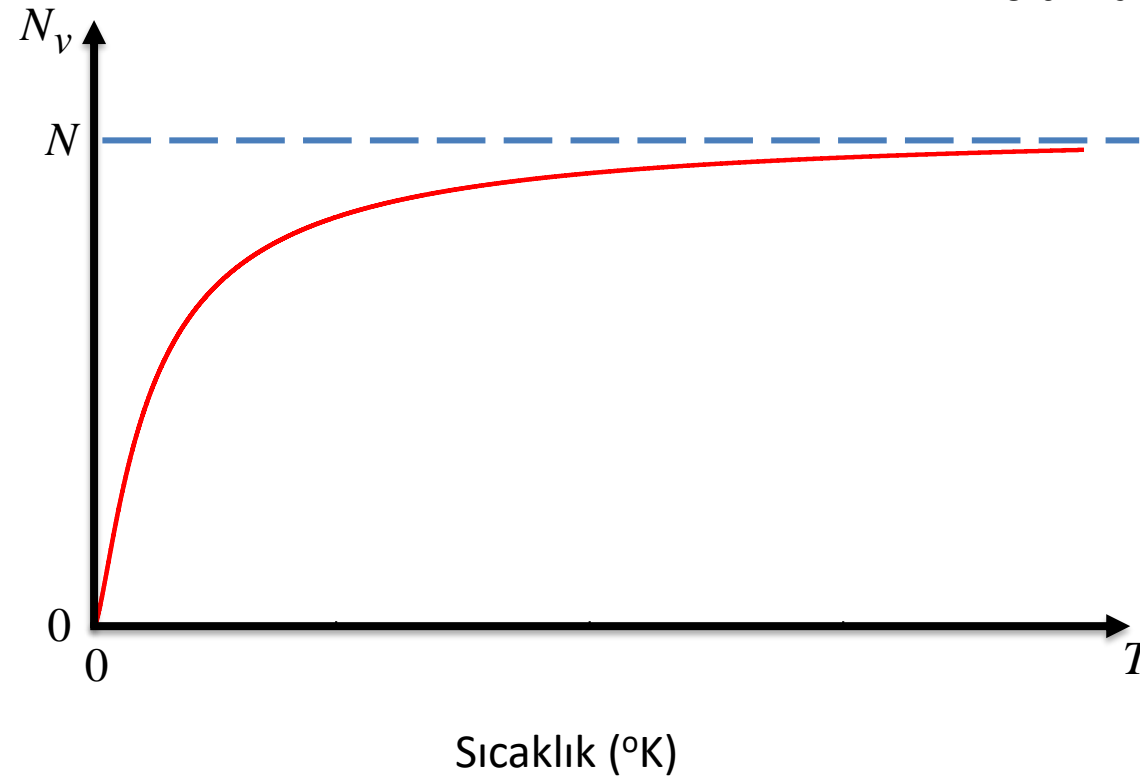
Denge Boşluk Sayısı: $N_v = N \exp\left(-\frac{Q_v}{kT}\right)$

Sistemdeki toplam atom yeri

Boşluk oluşturmak için gerekli enerji

Sıcaklık (°K)

Boltzmann Sabiti



Teorik ve Gerçek Yoğunluk

Demir: Hacim Merkezli Kübik $a_{Fe} = 2.866 \text{ \AA}$ $A_{Fe} = 55.847 \text{ g/mol}$ $\rho_{Fe} = 7.874 \text{ g/cm}^3$

Teorik Yoğunluk:
$$\rho_{Fe} = \frac{2 \text{ atom/BH} \times 55.847 \text{ g/mol}}{\left(2.866 \times 10^{-8} \text{ cm}\right)^3 \times 6.022 \times 10^{23} \text{ atom/mol}} = 7.879 \text{ g/cm}^3$$

Gerçek Yoğunluk:
$$\rho_{Fe} = \frac{X \text{ atom/BH} \times 55.847 \text{ g/mol}}{\left(2.866 \times 10^{-8} \text{ cm}\right)^3 \times 6.022 \times 10^{23} \text{ atom/mol}} = 7.874 \text{ g/cm}^3$$

$$X = 1.99878 \text{ atom/BH}$$

$$\text{Birim Hücre Boşluk Sayısı} = 2 - 1.99878 = 0.00122 \text{ boşluk/BH}$$

$$1 \text{ cm}^3 \text{ teki Boşluk Sayısı} = \frac{0.00122 \text{ boşluk/BH}}{\left(2.866 \times 10^{-8} \text{ cm}\right)^3 / \text{BH}} = 5.18 \times 10^{19} \text{ boşluk/cm}^3$$

Farklı Sıcaklıklarda Boşluk Konsantrasyonu

Bakır: Yüzey Merkezli Kübik $a_{Cu} = 3.6151 \text{ \AA}$ $Q_v = 20000 \text{ cal/mol}$ $T = 25 \text{ }^\circ\text{C}$

$$N_v = ?$$

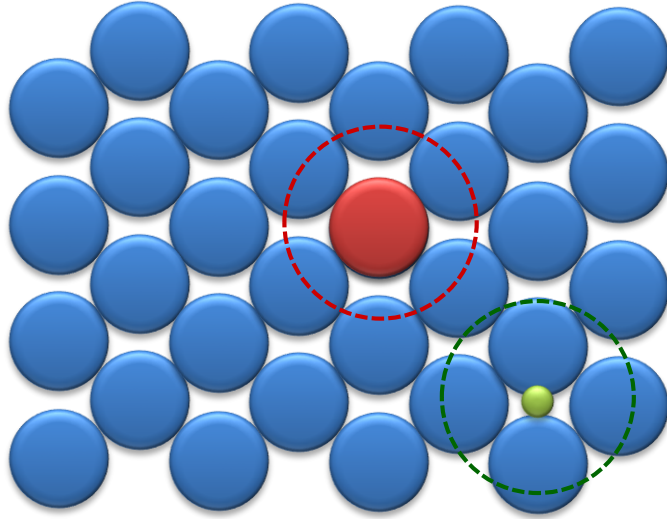
$$k = 1.987 \text{ cal/mol} \cdot \text{K} = 8.314 \text{ Joule/mol} \cdot \text{K} = 8.62 \times 10^{-5} \text{ eV/K}$$

$$N_v = N \exp\left(-\frac{Q_v}{kT}\right) \quad N = \frac{4 \text{ atom/BH}}{\left(3.6151 \times 10^{-8} \text{ cm}\right)^3 / \text{BH}} = 8.466 \times 10^{22} \text{ atom/cm}^3$$

$$N_v = 8.466 \times 10^{22} \text{ atom/cm}^3 \exp\left(-\frac{20000 \text{ cal/mol}}{1.987 \text{ cal/mol} \cdot \text{K} \times 298 \text{ }^\circ\text{K}}\right) = 1.814 \times 10^8 \text{ boşluk/cm}^3$$

Nokta Kusurları

Katılarda Safsızlıklar (Impurity):



Asal Yer Safsızlığı (Substitutional Impurity)

Ara Yer Safsızlığı (Interstitial Impurity)

Alaşım (Alloy): İki veya daha fazla metalin veya bir metal ile ametelin karışımıdır.

Katı Çözeltiler (Solid Solution):

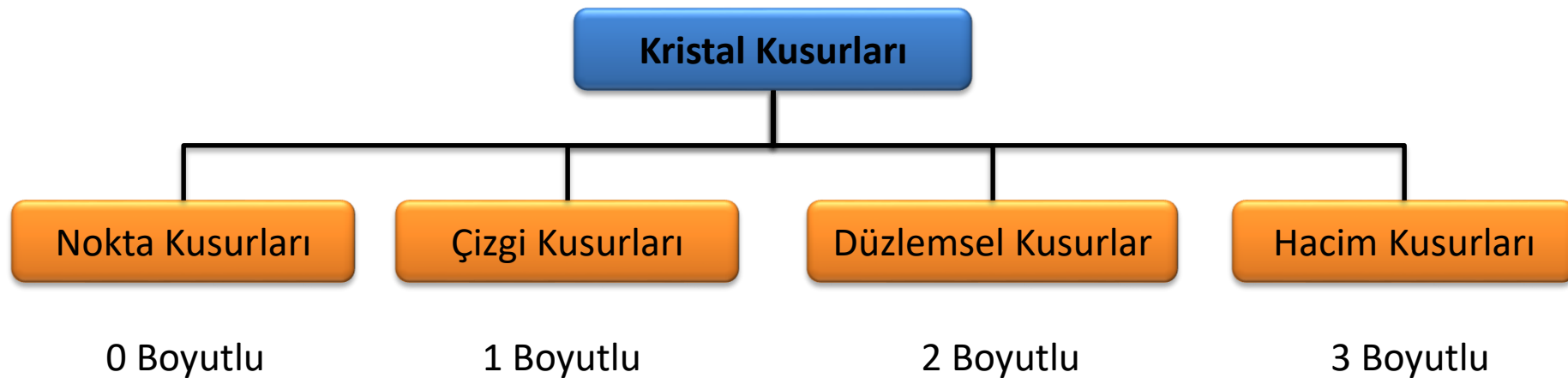
Çözünen (Solute): Az bulunan atom, impurity atom

Çözen (Solvent): Çok bulunan atom, ana atom

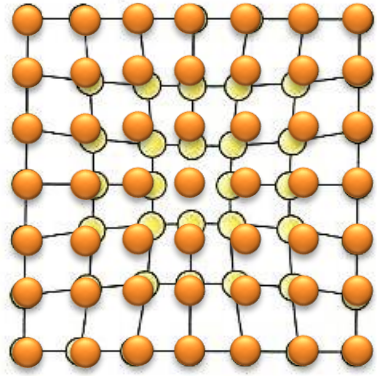
Kristal Kusurları Neden Önemlidir?



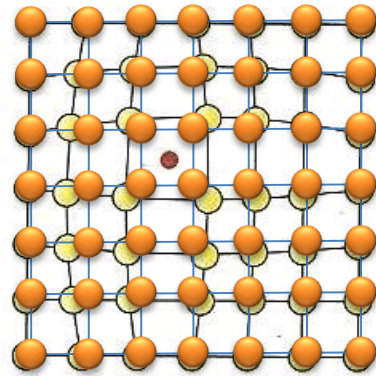
Kristaller hiçbir zaman mükemmel bir şekilde oluşmazlar ve içlerinde her zaman kusurlar bulunur.



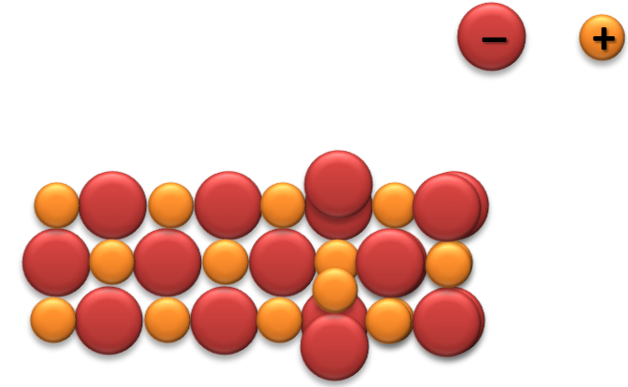
Nokta Kusurları



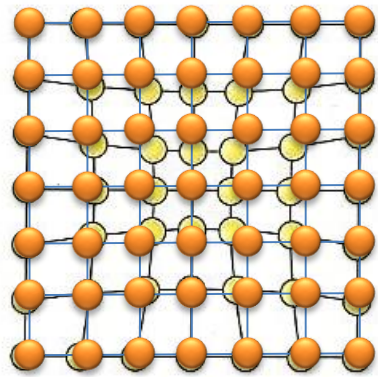
Boşluk



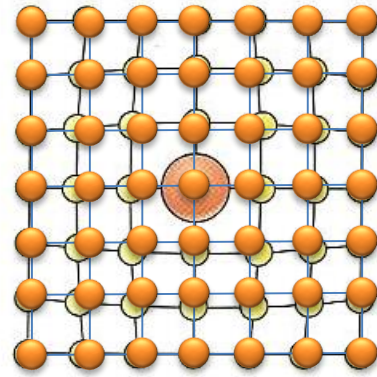
Arayer Atomu



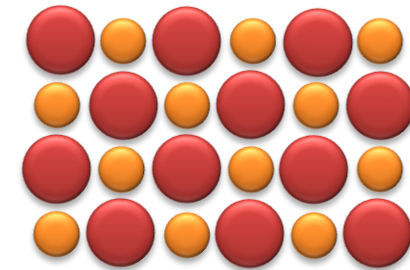
Frenkel Kusuru



Küçük Arayer Atomu



Büyük Arayer Atomu



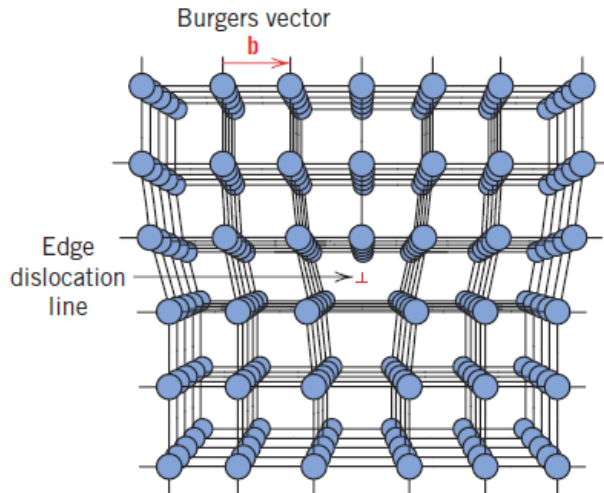
Schottky Kusuru

Çizgi Kusurları

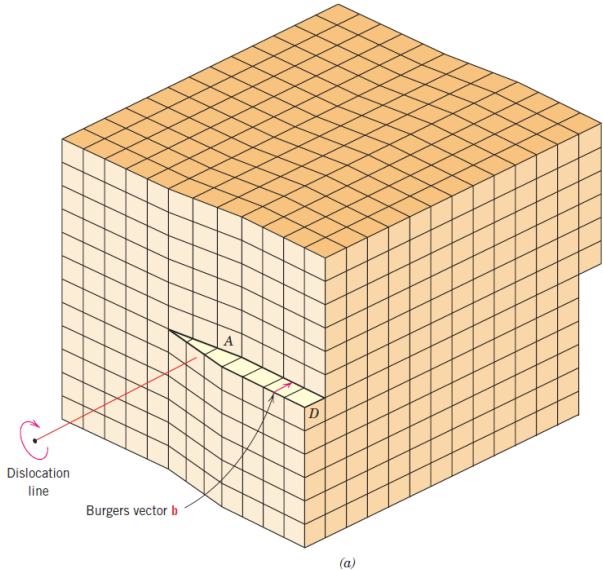
Dislokasyon (Aykırı yerleşim): çizgi veya 1 boyutlu kusur olarak adlandırılır ve çevresindeki atomların yanlış yerleşmesi / yerdeğiştirmesi sonucu oluşur. Bu kusurlar genellikle kristallerin büyümesi sırasında veya mekanik deformasyon nedeni ile olur.

Si, Ge gibi kristallerde: $10^6 - 10^7$ tane / cm^2 iken bazı kristallerde 10^{16} tane / cm^2 gibi değerlere çıkabilir...

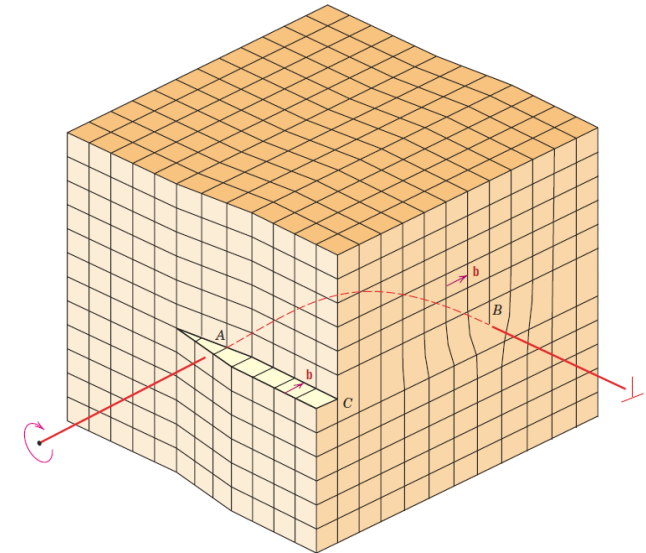
Kenar Dislokasyonu
(Edge dislocation)



Burgu Dislokasyonu
(Screw dislocation)

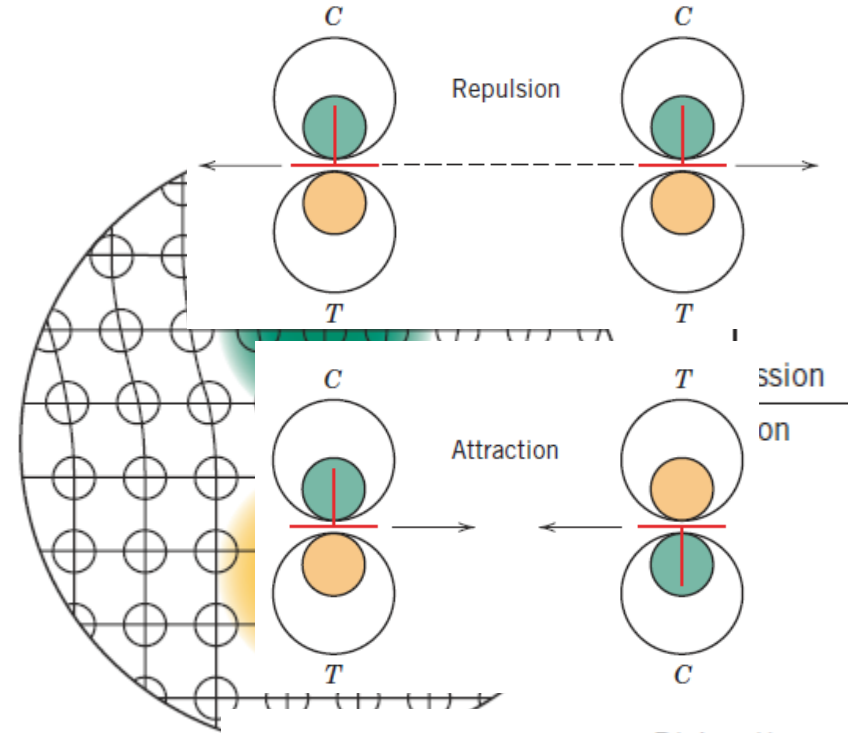
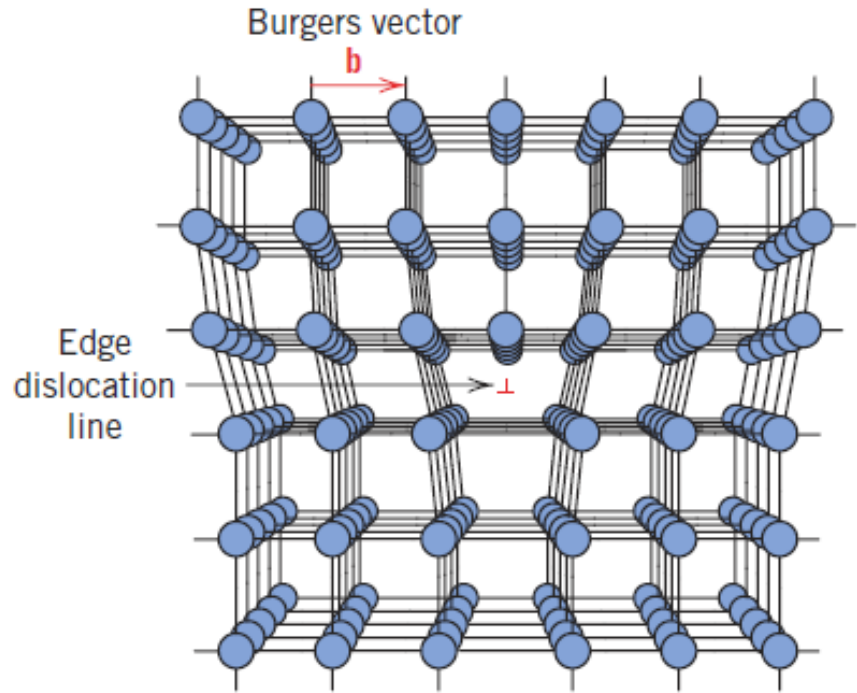


Karışık dislokasyon
(Mixed dislocation)

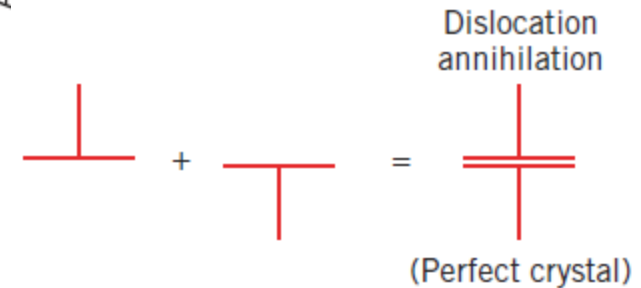


Çizgi Kusurları

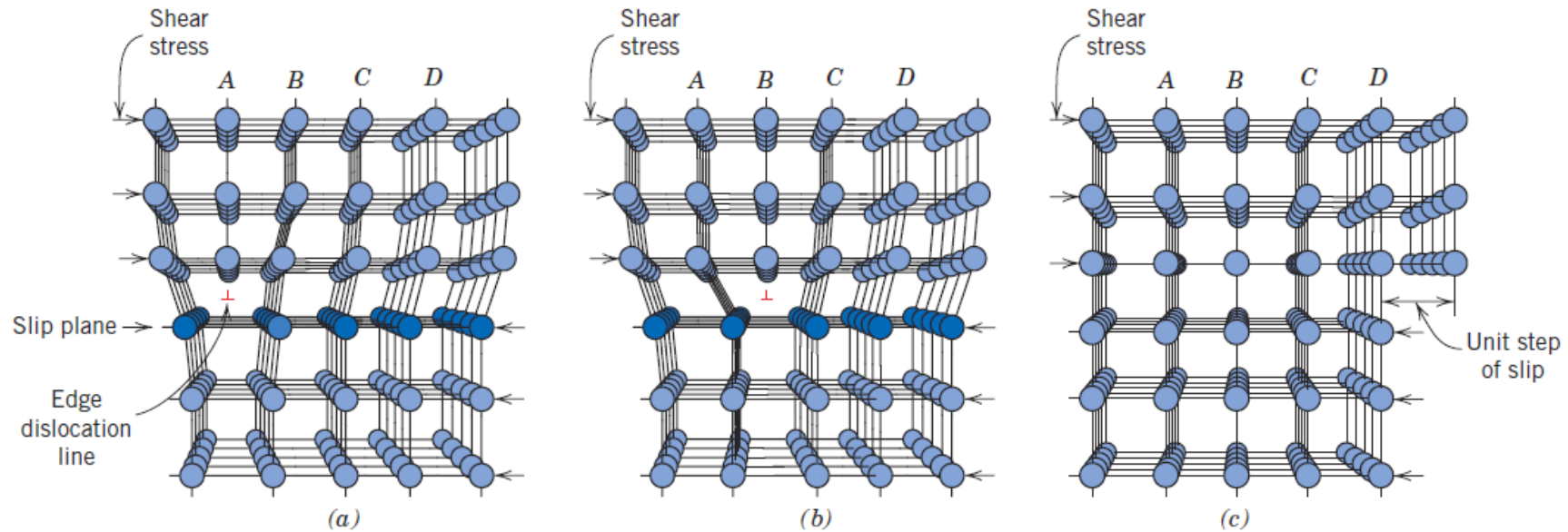
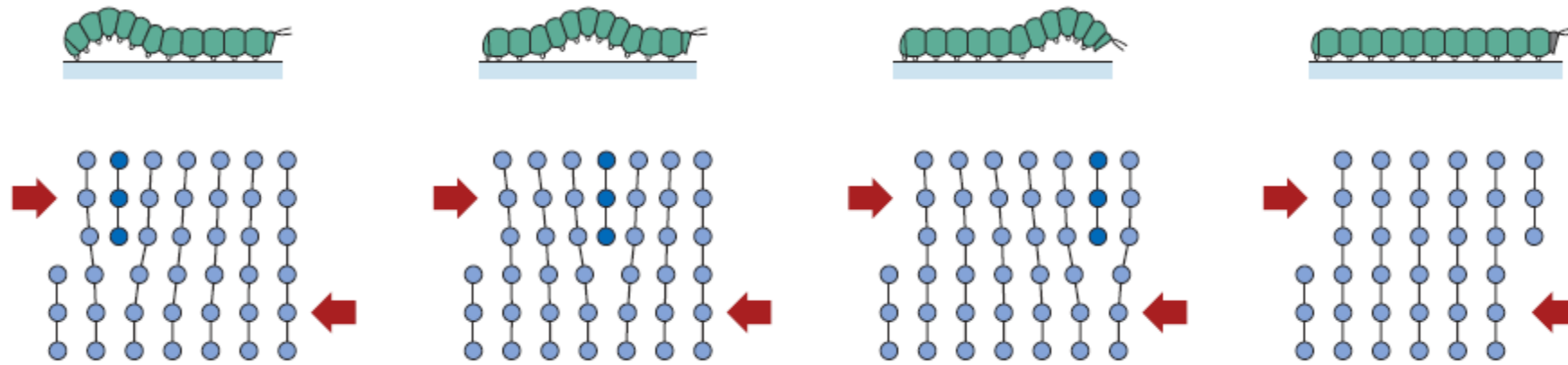
Kenar Dislokasyonu (Edge dislocation): kristal içerisinde fazladan bir yarım atom düzlemi varsa bu tip dislokasyonlara kenar dislokasyonu denir.



Kayma vektörü (Burgers vector): bir dislokasyonun her adımda ilerlediği yönü ve mesafeyi belirtir.

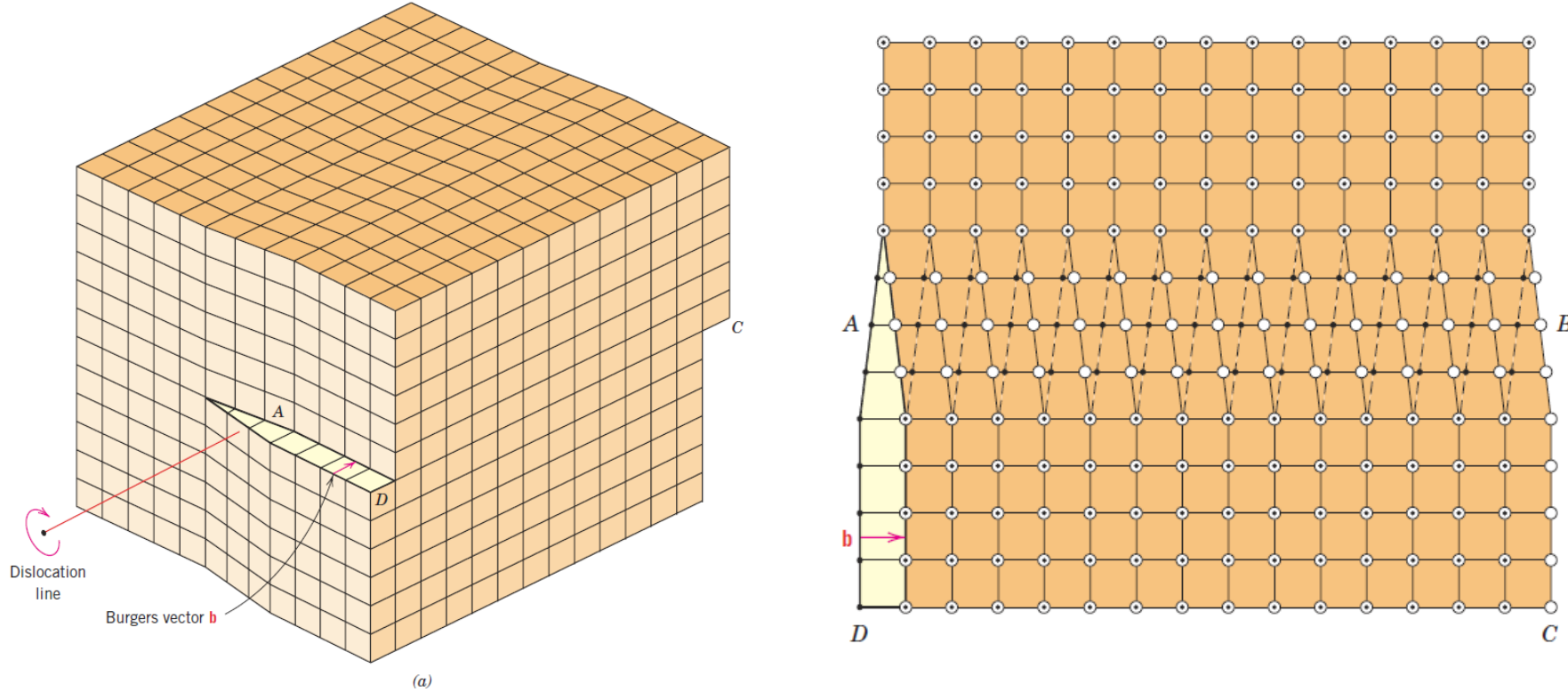


Çizgi Kusurları



Çizgi Kusurları

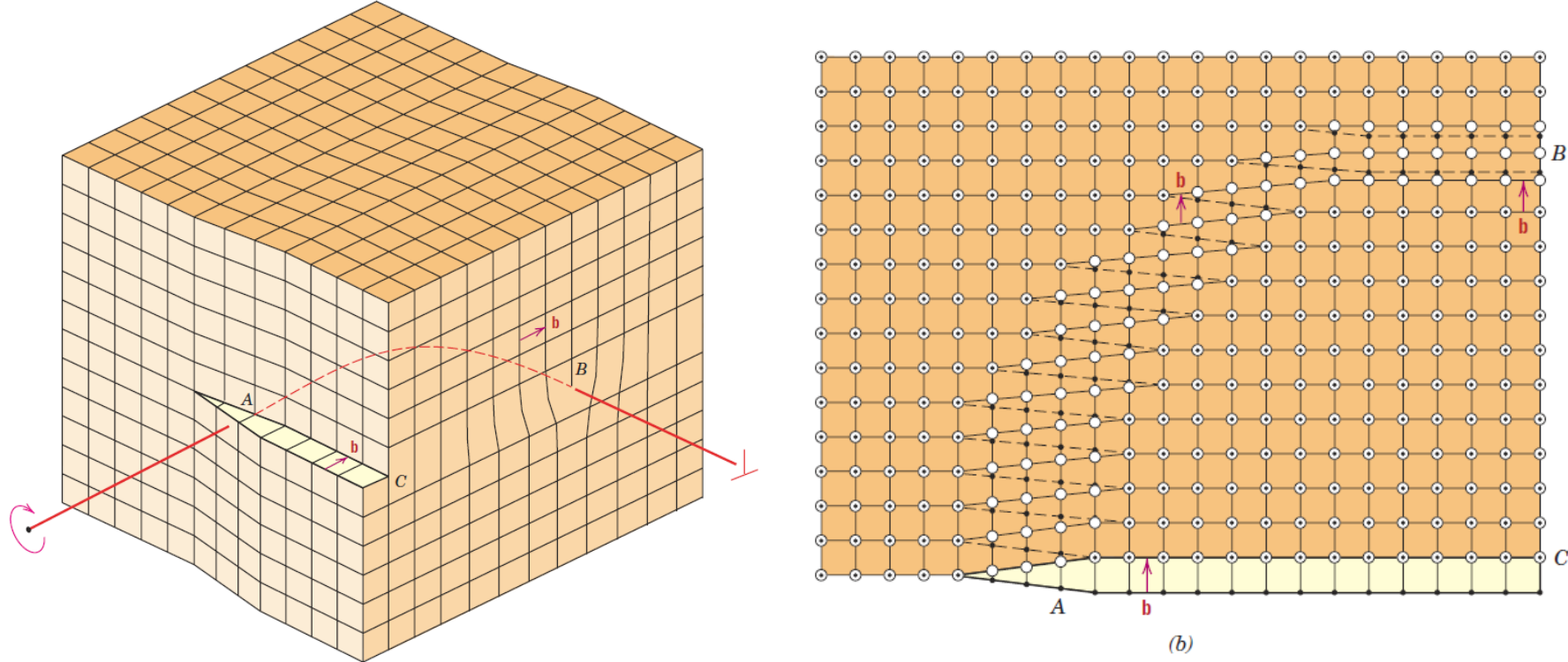
Burgu dislokasyonu (Screw dislocation): kristalin alt ve üst katmanlarına uygulanan kayma gerilmesi (shear stress) sonucu kristalin üst ön bölümü alt ön bölümüne göre bir atom uzaklığı kayarsa oluşur.



Kayma vektörü (Burgers vector): bir dislokasyonun her adımda ilerlediği yönü ve mesafeyi belirtir.

Çizgi Kusurları

Karışık dislokasyon (Mixed dislocation): kristal malzemeler içerisindeki dislokasyonları çoğunluğu ne tek kenar ne de tek burğu dislokasyonudur. Daha çok her iki tip dislokasyonun da özelliklerini belirli bölgelerde gösterirler.

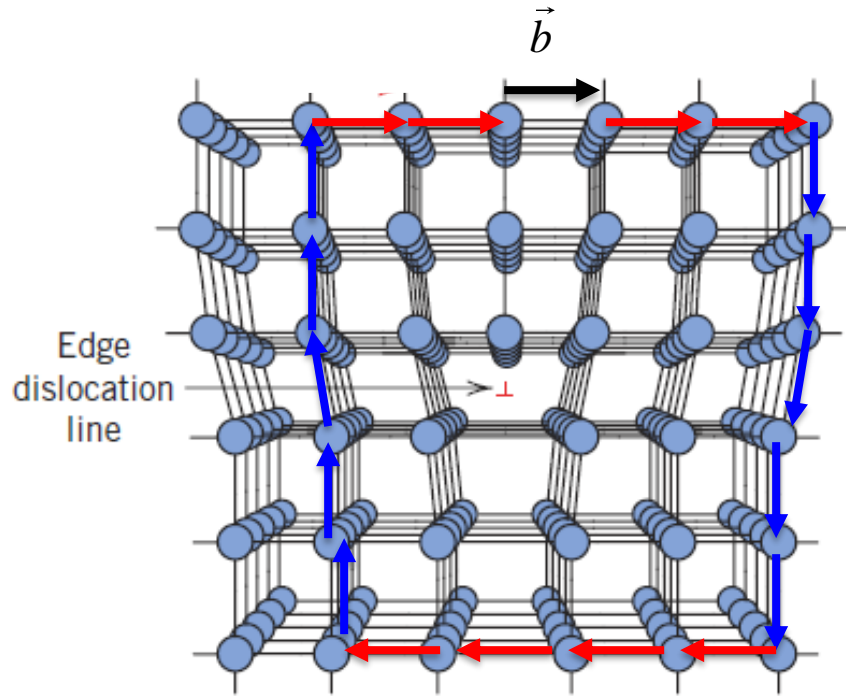


Kayma vektörü (Burgers vector): bir dislokasyonun her adımda ilerlediği yönü ve mesafeyi belirtir.

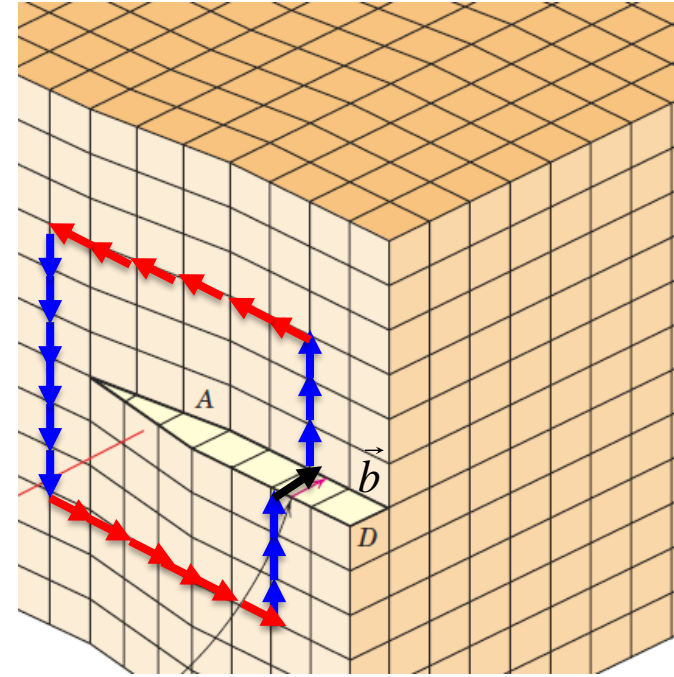
Çizgi Kusurları

Kayma vektörü (Burgers vector): bir dislokasyonun her adımda ilerlediği yönü ve mesafeyi belirtir.

Kayma vektörü'nü bulmak için atomdan atoma her yönde eşit miktar giderek kapalı bir devre kurmaya çalışılır. Devrenin kapanması için gereken vektör kayma vektörüdür.



\vec{b} dislokasyon hattına diktir.



\vec{b} dislokasyon hattına paraleldir.

Düzlemsel Kusurlar

Arayüzey kusurları (Interfacial defects) iki boyutlu sınırlardır ve farklı kristal yapıları ve/veya kristalografik yönelimleri birbirlerinden ayırırlar.

Bu kusurlar:

Dış yüzeyler
(External surfaces)

Tane sınırları
(Grain boundaries)

İkizleme sınırları
(Twin boundaries)

İstif hataları
(Stacking faults)

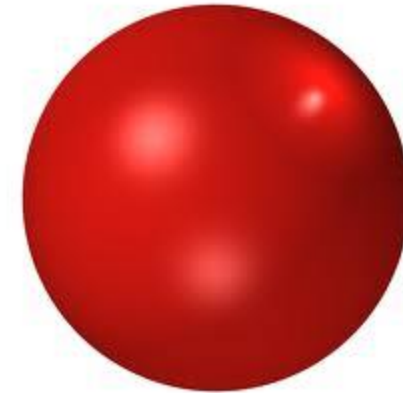
Faz sınırları
(Phase boundaries)

Dış yüzeyler (External surfaces): En belirgin sınırlardır ve kristal yapının sona erdiği dış yüzey olarak tanımlanır.

Yüzey atomları yapabilecekleri bağ sayısını tamamlayamazlar ve bu nedenle içteki atomlara göre daha yüksek bir enerji seviyesindedirler.

Yüzey enerjisi (Surface energy): J/m^2 .

Malzemeler bu enerjiyi azaltmak için toplam yüzey alanlarını mümkün olduğunca küçültme eğilimindedirler.



Önümüzdeki Ders Saatinde

Ders Kitabımızın 4. Bölümündeki

KRİSTAL KUSURLARI

adlı konuya devam edeceğiz!

ve

Ders Kitabımızın 5. Bölümündeki

KATILARDA YAYINIM (DİFÜZYON)

adlı konuya başlayacağız!