

3 KASIM 2014

(111) ve  $(11\bar{1})$  yüzeylerine ait olan zon ekseninin indisini bulunuz.

[100] ve [010] zonları arasında yer alan yüzeyin indisini bulunuz.

(100) Ve (010) yüzeyleri arasında yer alan yüzeyin indisini bulunuz.

Vida eksenini ve kayma düzlemi?

# BÖLÜM 4

# KRİSTALLERDE

# YAPILAR



# Yapı ve Yapıları tanımlama Yöntemleri

Yapı: Bir kristalde veya mineralde;

- kimyasal bileşim,
- bileşimdeki atomların yeri,
- atomlar arası bağların tipi ve konumları,
- uzay simetrilerinin tamamıdır.

Periyodik bir düzen ve dizilim çerçevesinde tanımlanır.

## Yapıları gösterme yöntemleri

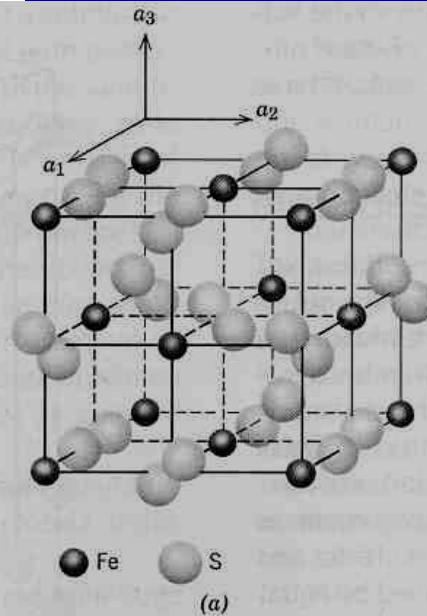
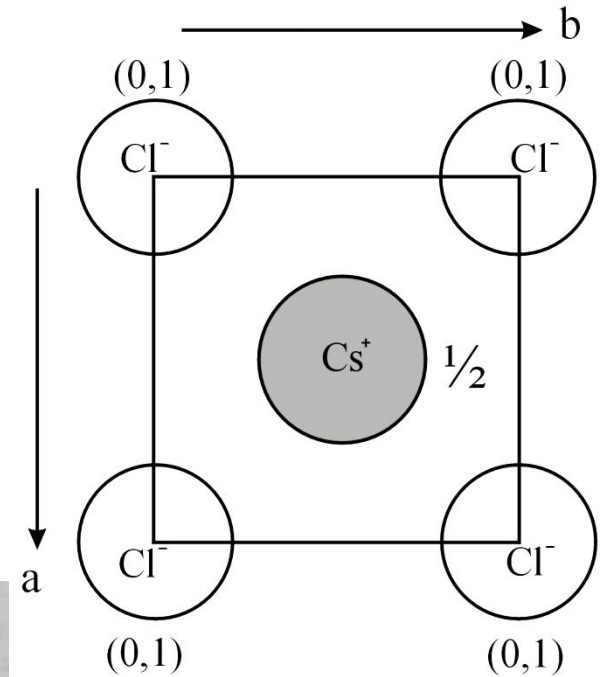
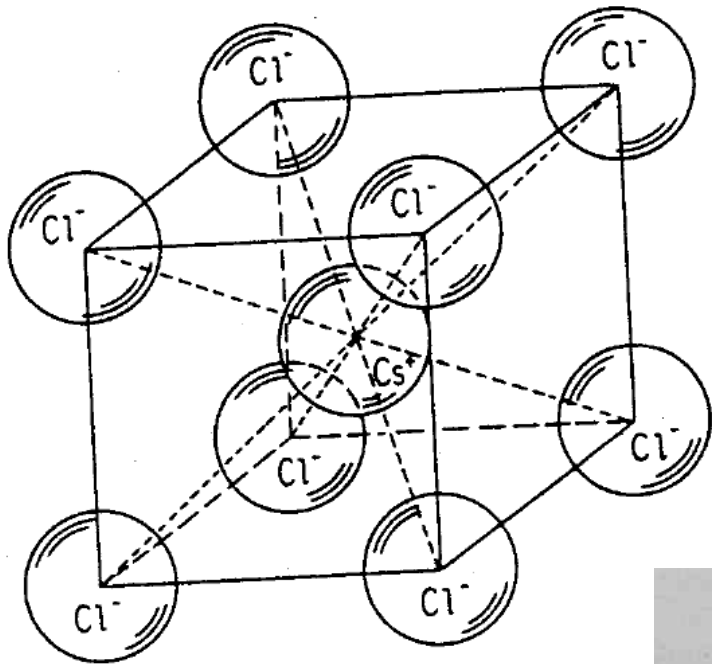
- Birim Hücre
- Paketlenme (dizininim)
- Koordinasyon çokgeni



## I) Birim Hücre Yöntemi:

Üç boyutlu yapı , birim hücre koordinatlarına(x, y,z) iz düşürülür ve üçüncü boyut fraksiyonlar olarak yazılır. Birim hücre perspektif olarak üç boyutlu çizilir.

# Birim Hücre örnekleri

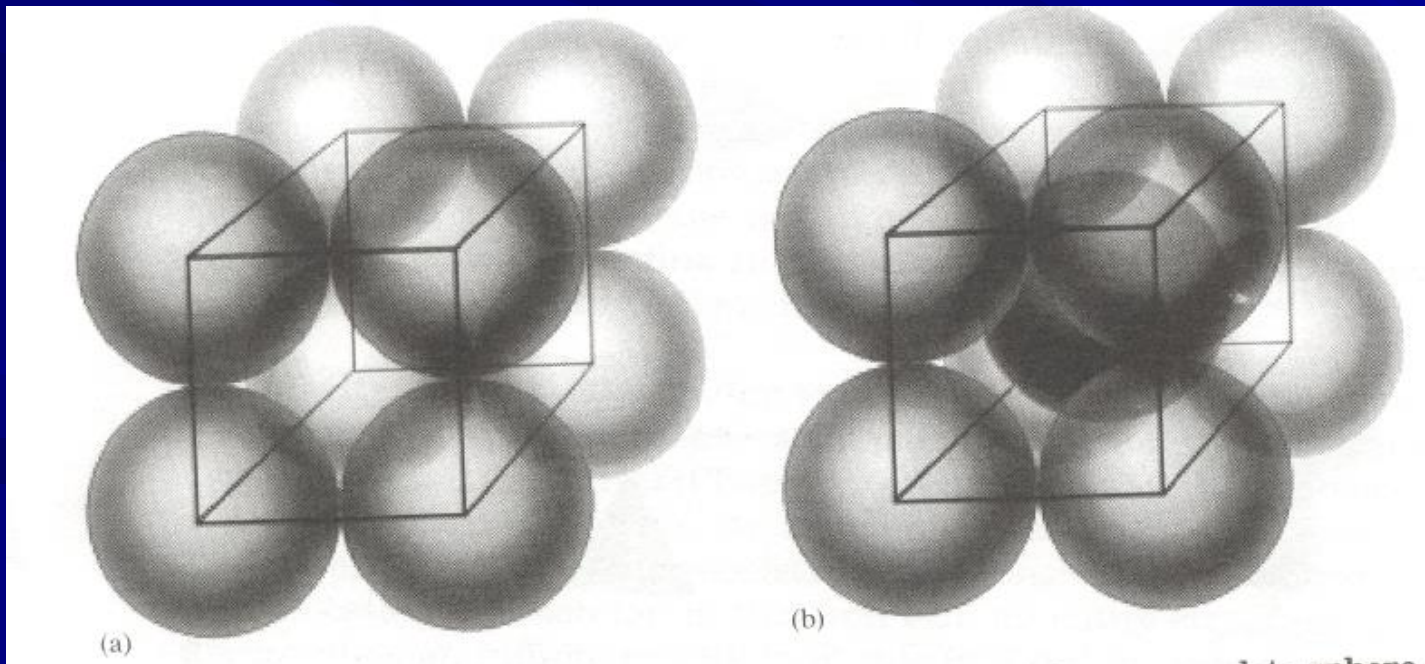


## II) Paketlenme (Dizinim):

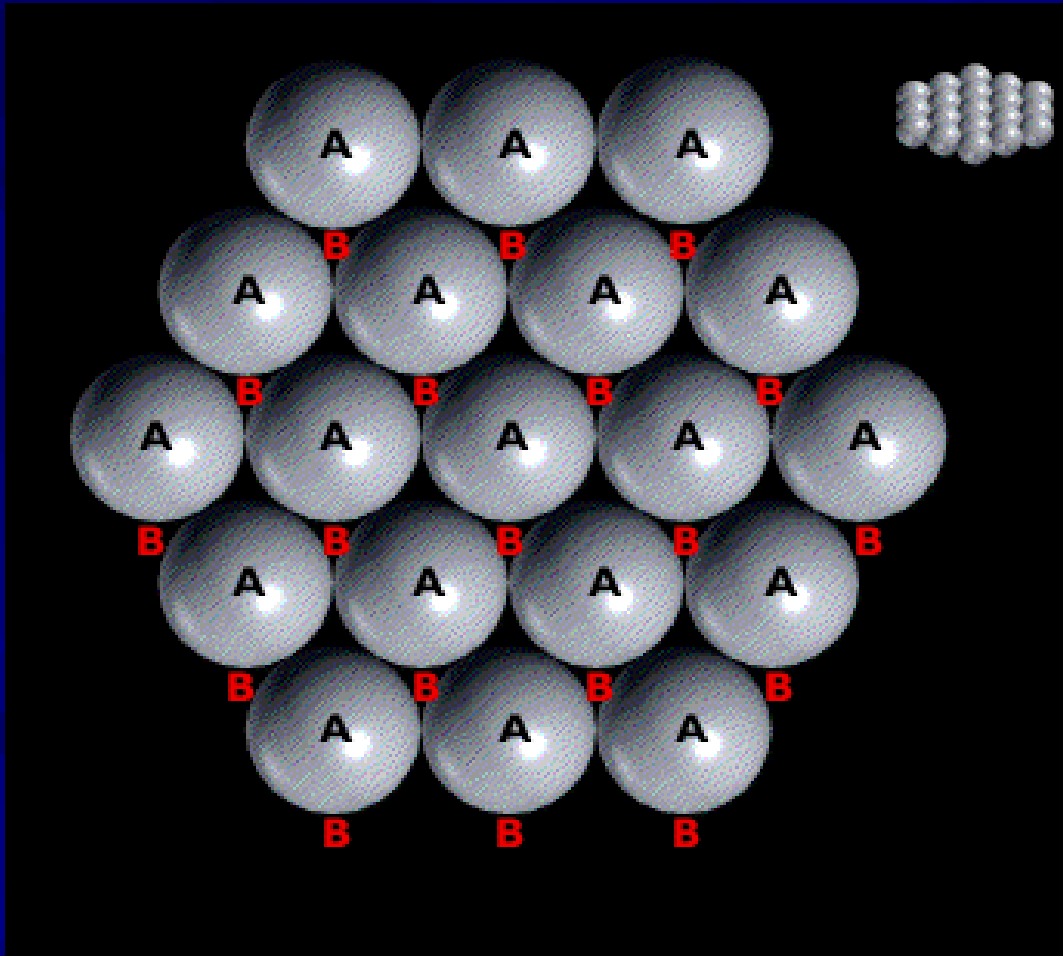
Anyonlar belli kurallara göre üst üste paketlenir veya dizilirler.

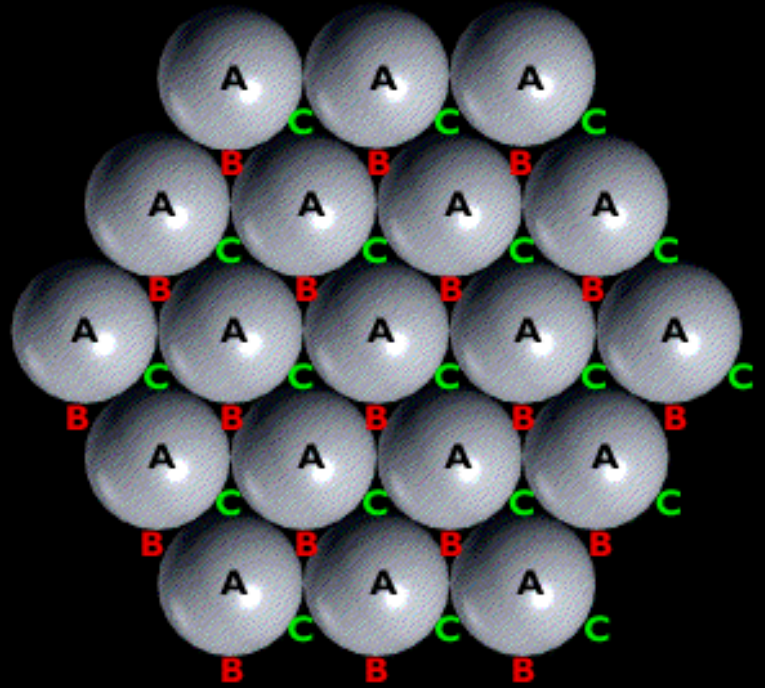
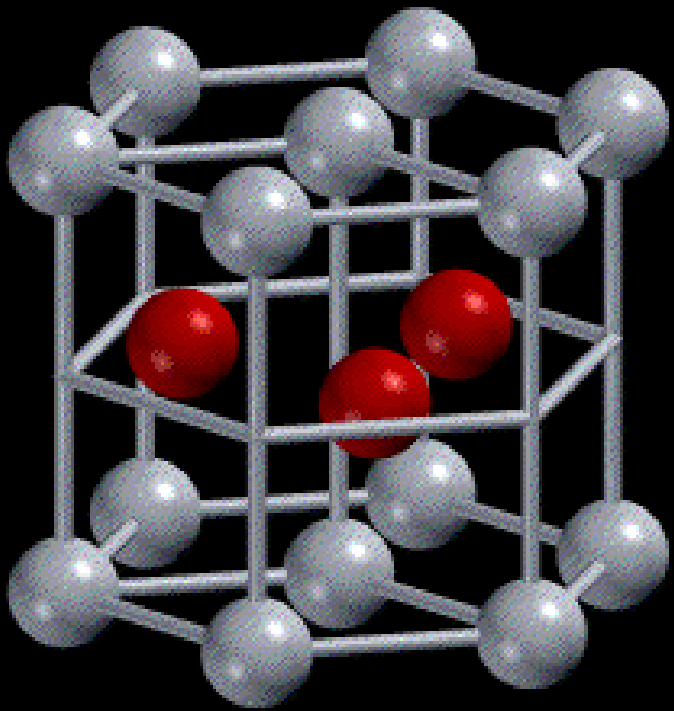
Anyonlar arasında kalan boşluğa katyonlar yerleşir:

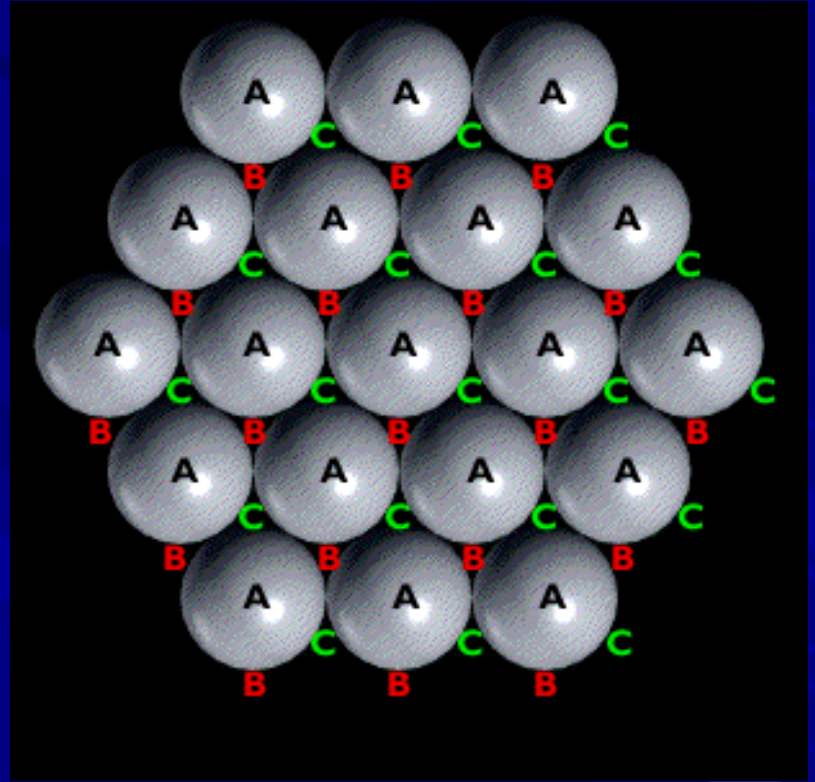
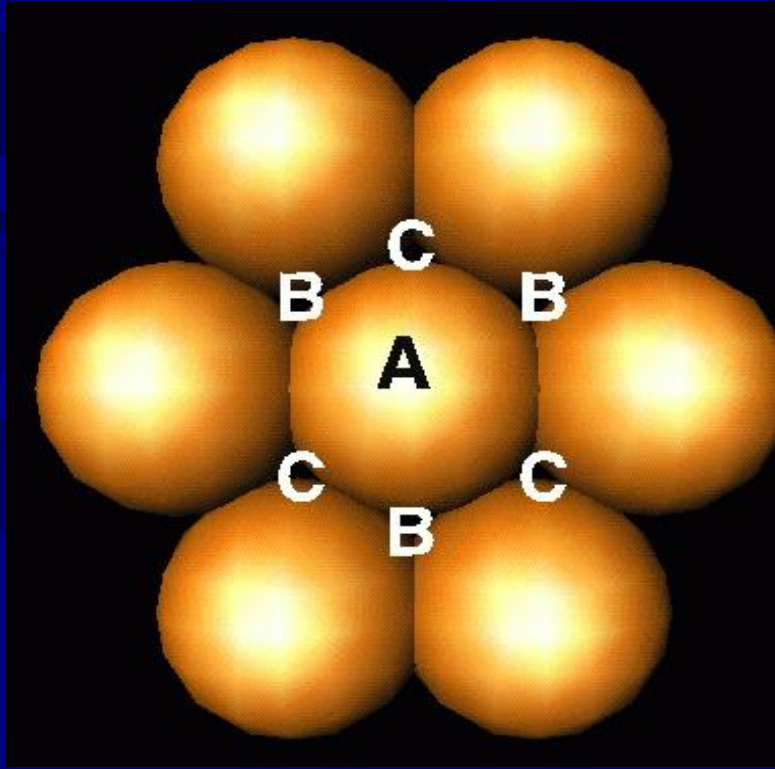
-1) Basit paketlenme: Bir anyon tabakasının üstüne(A) , uzayda aynı tabaka bir üçüncü boyut olarak tekrarlar. Arada kalan boşluklara katyon yerleşir. Anyonlar A A A A vb devam eder.



-2) Hekzagonal sıkı paketlenme: Anyonlar çok sıkı bir şekilde bir tabaka gibi dizilirler. İkinci anyon tabakası B'lerin olduğu yerlere yerleşir. Üçüncü tabaka tekrar A'ların konumuna yerleştirilir. Düzen A B A B A vb. gibi devam eder.

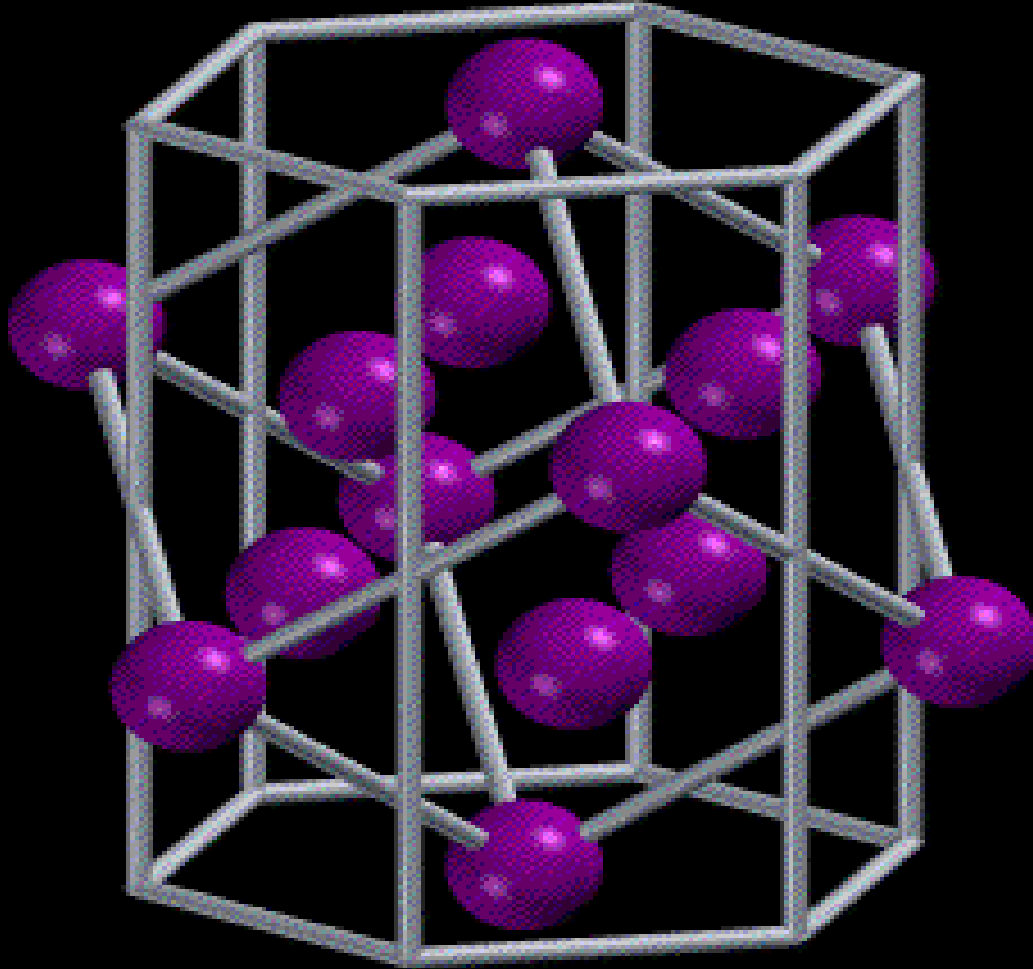




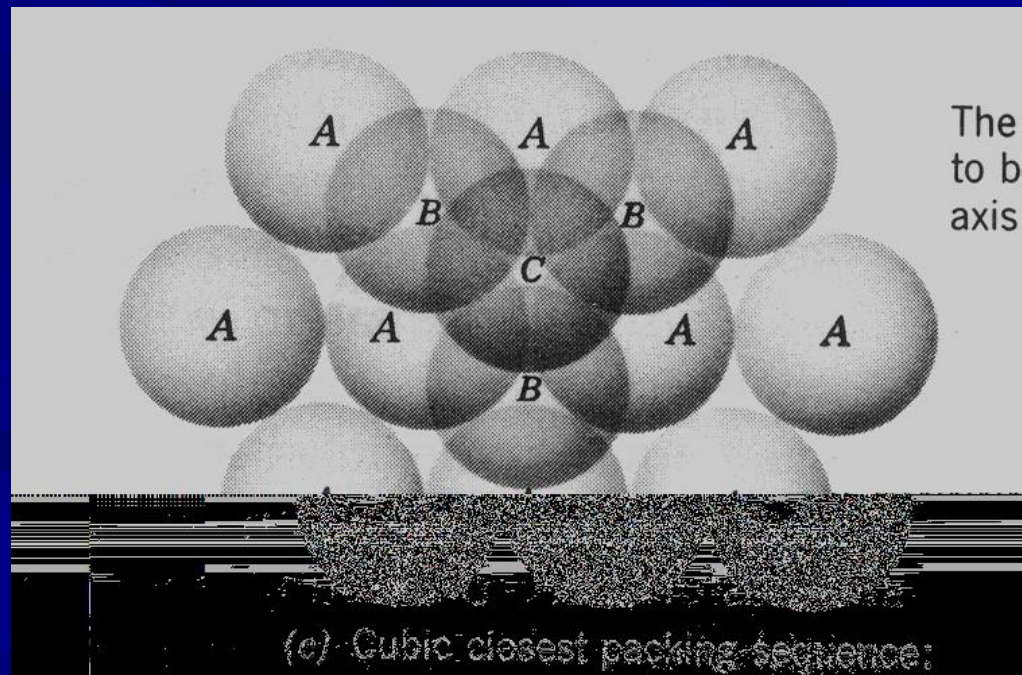
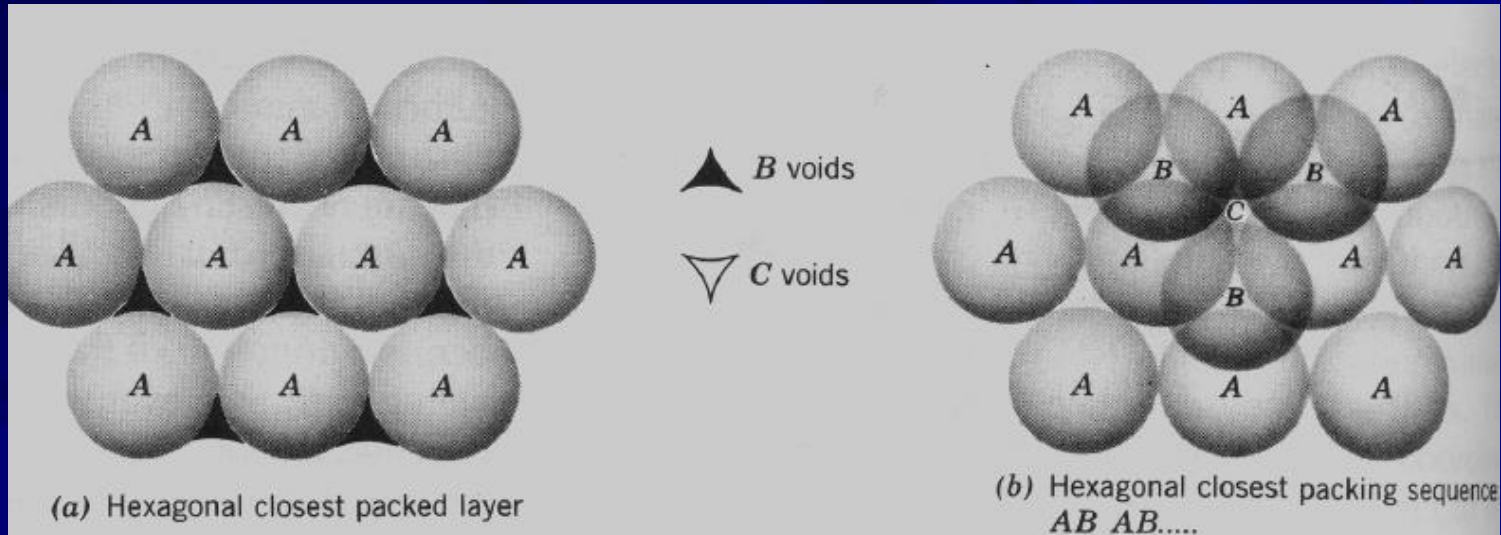


### 3) Kübik sıkı paketlenme:

Anyonların ilk tabakası A ,ikincisi B konumuna ve 3. sù ise C konumunda yer alır ve ABC ABC olarak uzayda tekrarlar ve aradaki boşluđa katyonlar yerleşir.



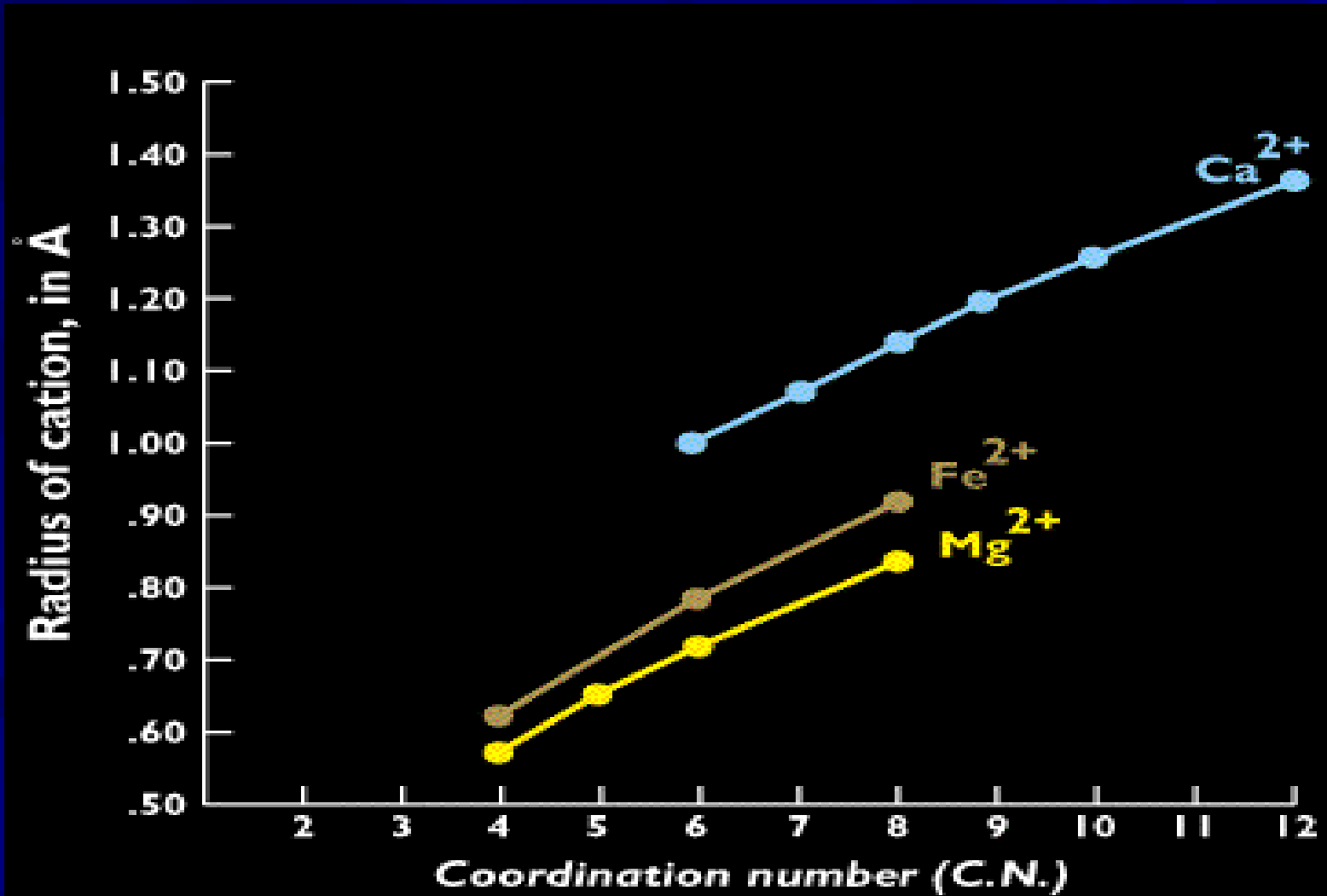
# Hekzagonal ve kübik sıkı paketlenme



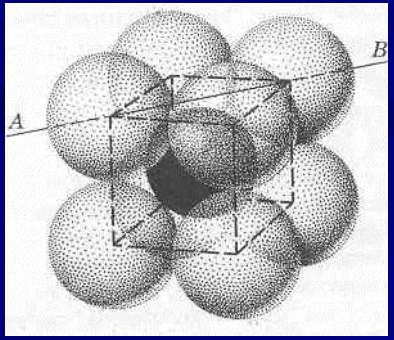
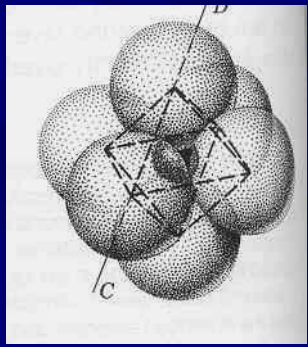
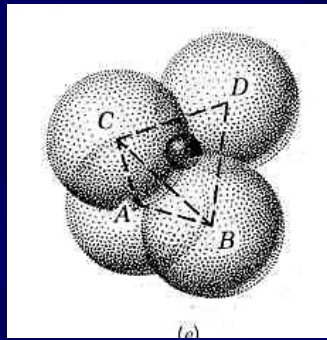
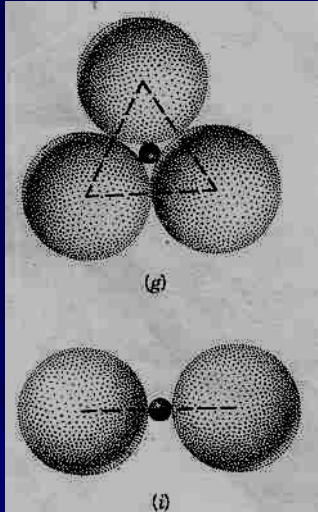


### III) Koordinasyon çokgenlerine göre:

Kasyon yarıçapına bağlı olarak etrafında anyonların oluşturduğu iki veya üç boyutlu bir çokgen oluşturur. Buna koordinasyon çokgeni denir. Merkezde kation etrafında anyon vardır.



# Koordinasyon çokgenleri



Minimum Radius Ratio  $R_A : R_X$  Coordination Number C. N.

<0.155

Linear

0.155

Corners of an equilateral triangle (triangular coordination)

0.255

Corners of a tetrahedron (tetrahedral coordination)

0.414

Corners of an octahedron (octahedral coordination)

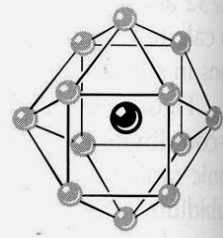
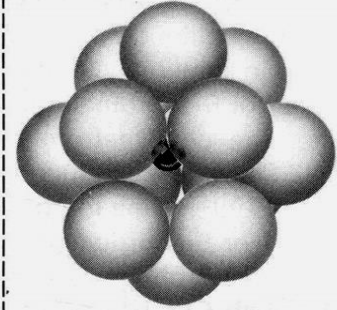
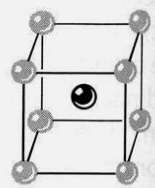
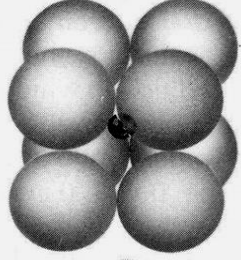
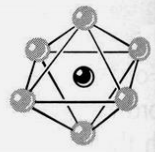
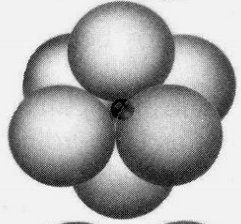
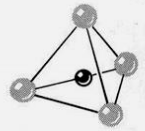
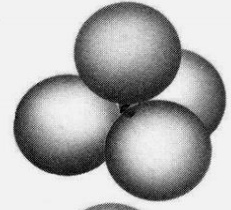
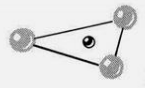
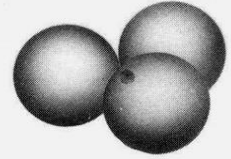
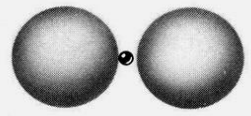
0.732

Corners of a cube (cubic coordination)

1.00

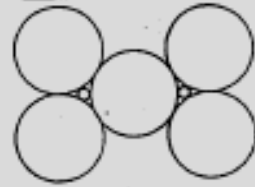
Corners of a cuboctahedron (close packing)

Packing Geometry



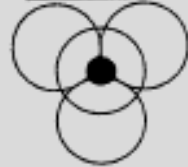
COORDINATION POLYHEDRA

Trigonal



Sharing corners

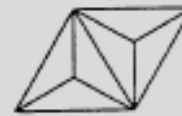
Tetrahedral



Sharing corners



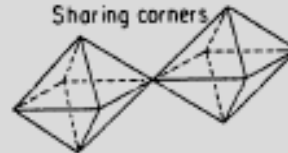
Sharing edges



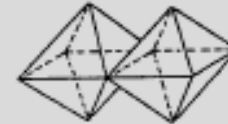
Octahedral



Sharing corners



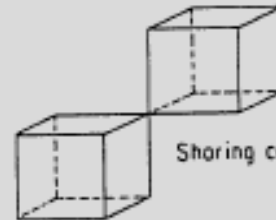
Sharing edges



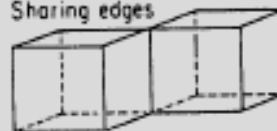
Cubic



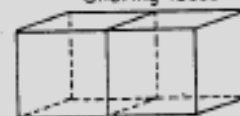
Sharing corners



Sharing edges



Sharing faces



## Minerallerde yapıların dağılımları;

- \* Farklı kimyalarda olan minerallerin herbiri, farklı yapılarda mi olurlar?
- \* Ve aynı kimyasal bileşim, tek bir yapıyla mı sonuçlanır?

## Minerallerde yapıların dağılımı;

- İzomorfizm (Eş şekillilik)
- Polimorfizm (Çok şekillilik)
- Psödomorfizm (Yalancı şekillilik)

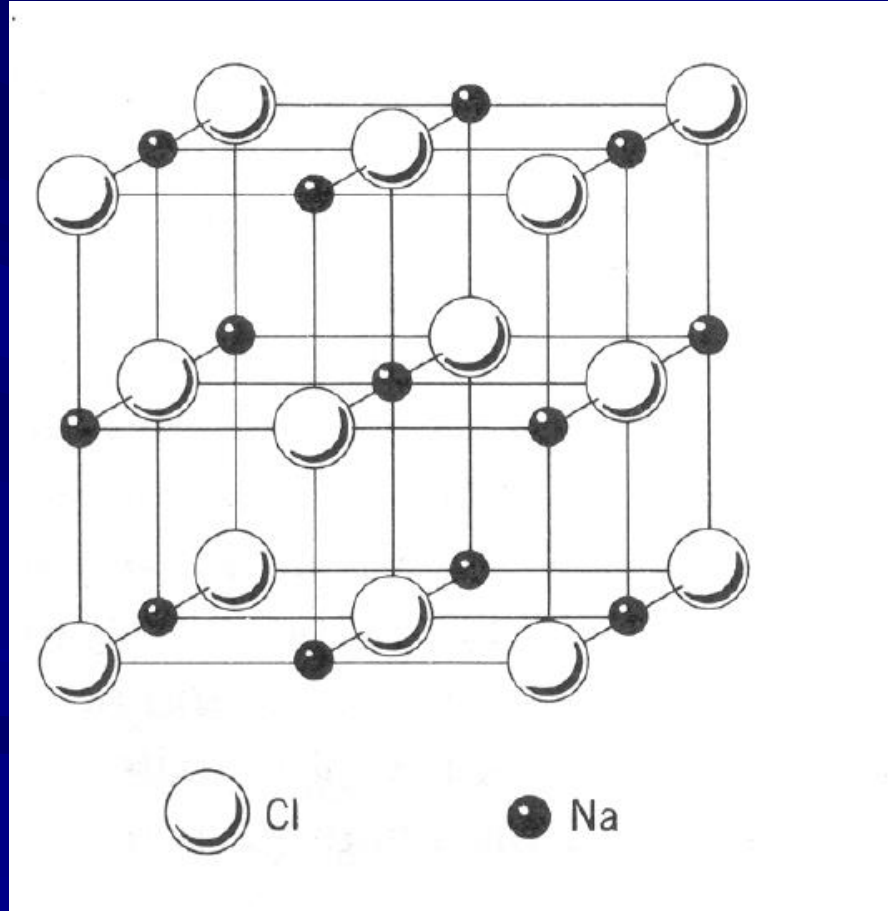
**İzomorfizm (Eş şekillilik)**: İki veya daha fazla sayıda mineral veya diğer kristalin maddeler aynı veya benzer kristalin formları gösterir. Bu tür mineraller analog kimyasal bileşim ve kristalografik yapıya sahiptirler. Plajiolaz(Albit= $\text{NaAlSi}_3\text{O}_8$  ve Anortit= $\text{CaAl}_2\text{Si}_2\text{O}_8$ ) ve olivin(Fayalit= $\text{Fe}_2\text{SiO}_4$  ve Forsterit= $\text{Mg}_2\text{SiO}_4$ ) mineralleri örnek olarak verilebilir.

Bu tür mineraller bazı fiziksel özellikleri yanı sıra kristalografik olarak çok benzerler ve benzer yapıda benzer morfoloji ve yüzeylere sahip olduklarından benzer X-ışın difraksiyonu verirler.

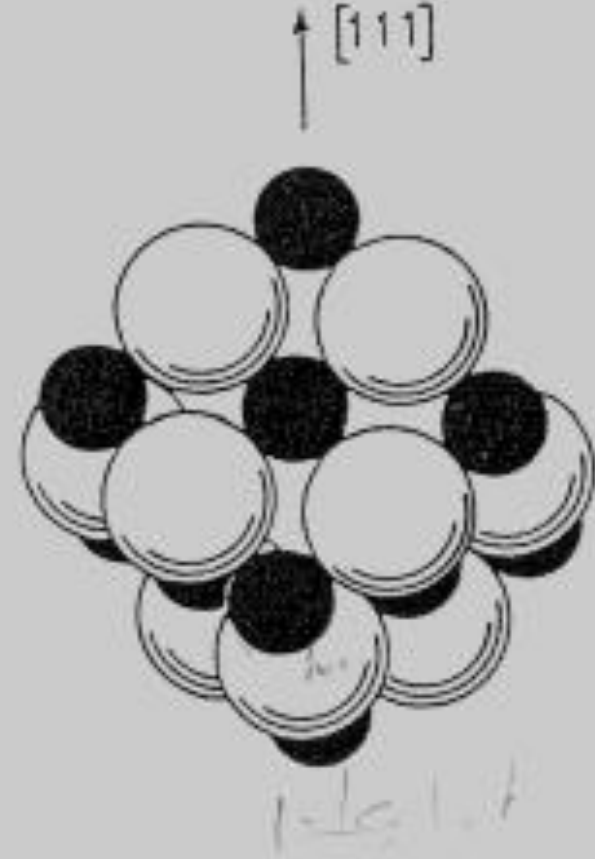
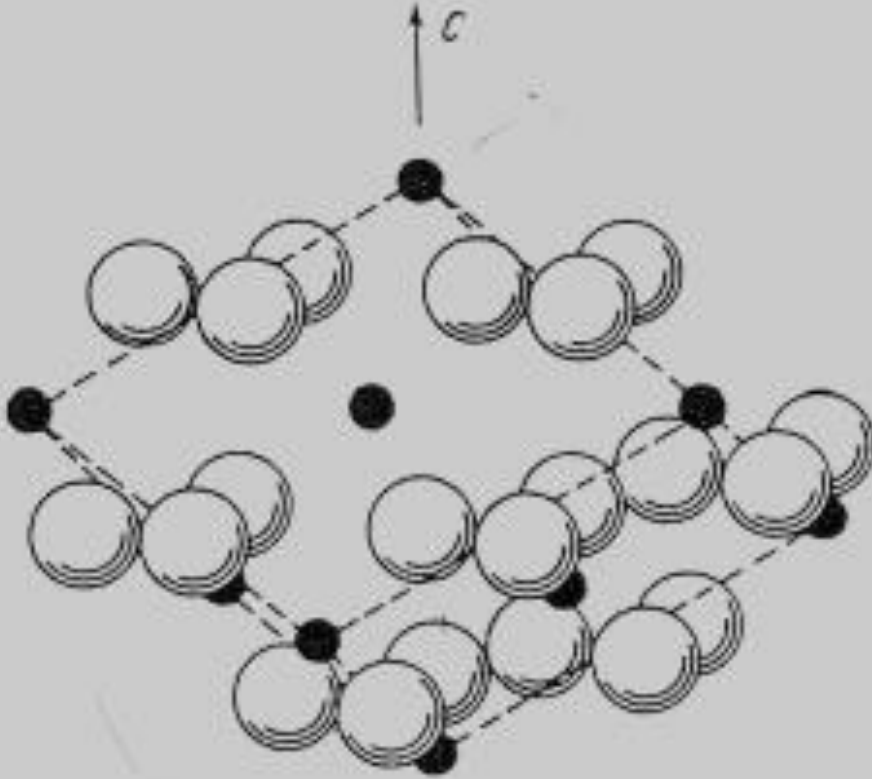
Si	Si	O <sub>4</sub>	Quartz
Al	P	O <sub>4</sub>	Berlinite
Al	Al	O <sub>3</sub>	Corundum
Fe	Ti	O <sub>3</sub>	Ilmenite
Si	Si	Si <sub>2</sub> O <sub>8</sub>	Coesite
K	Al	Si	Sanidine
Na	Al	Si	Albite
Ca	Al	Al	Anorthite

Eşyapısal (isostructural): Yapılar aynı ise bu adı alırlar.

Örnek: Halit (NaCl) ve galen (PbS), Berlinit (AlPO<sub>4</sub>) ve kuvars (SiO<sub>4</sub>) eşyapılı minerallerdir.



Eş tip (İsotype) Yapı tam bire bir aynı değil. Halit ve Kalsit gibi.





## Polimorfizm(Çok şekillilik):

İki veya daha fazla mineral aynı kimyasal bileşime, ancak farklı yapı ve kristal sistemine sahiptir.

Bu mineraller o bileşiğin polimorfu olarak bilinir.

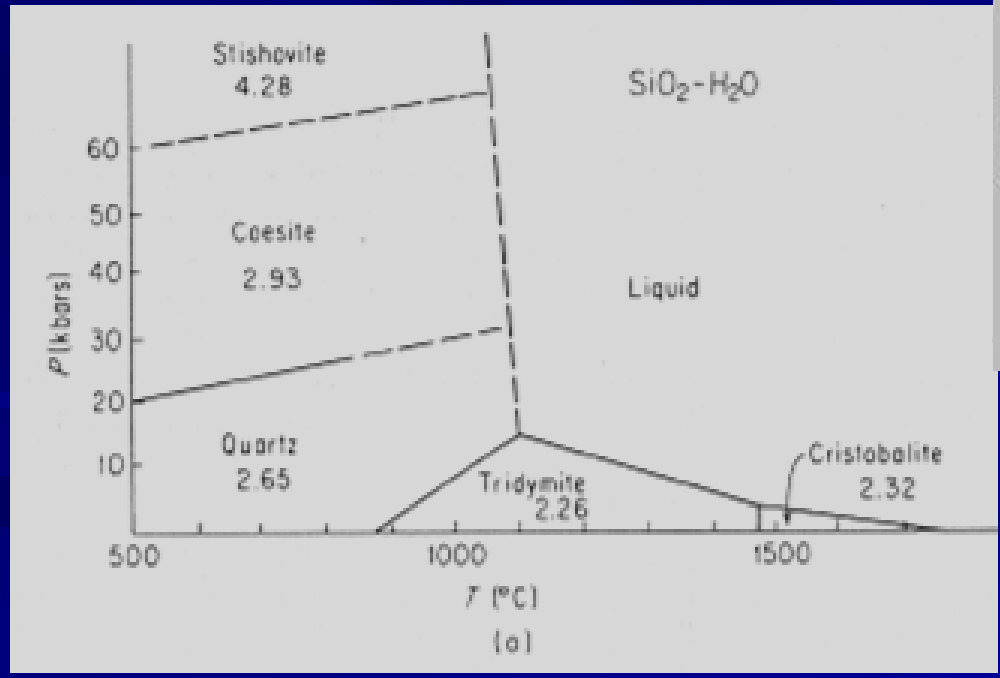
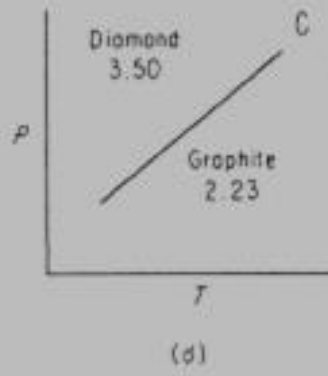
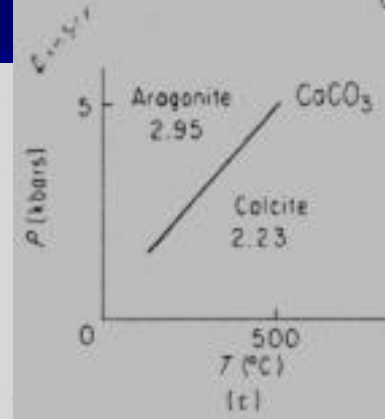
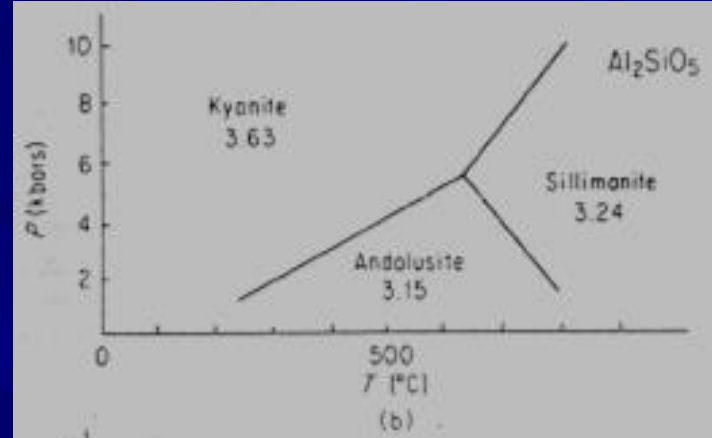
Örnek mineraller:

C (Elmas ve grafit),  $\text{CaCO}_3$  (Kalsit, Aragonit),  $\text{SiO}_2$  ( $\alpha$ -Kuars,  $\beta$ -Kuars,  $\alpha$ -kristobalit,  $\beta$ -kristobalit, tridimit, stişovit, cam) vs.

**EXAMPLES OF  
POLYMORPHOUS  
MINERALS**

Composition	Mineral Name	Crystal System and Space Group	Hardness	Specific Gravity
C	Diamond	Isometric— $Fd\bar{3}m$	10	3.52
	Graphite	Hexagonal— $P6_3/mmc$	1	2.23
FeS <sub>2</sub>	Pyrite	Isometric— $Pa\bar{3}$	6	5.02
	Marcasite	Orthorhombic— $Pnmm$	6	4.89
CaCO <sub>3</sub>	Calcite	Rhombohedral— $R\bar{3}c$	3	2.71
	Aragonite	Orthorhombic— $Pnam$	3½	2.94
SiO <sub>2</sub>	Low quartz	Hexagonal— $P3_121$	7	2.65
	High quartz	Hexagonal— $P6_222$		2.53
	High tridymite	Hexagonal— $P6_3/mmc$	7	2.20
	High cristobalite	Isometric— $P2_13(?)$	6½	2.20
	Coesite	Monoclinic— $C2/c$	7½	3.01
	Stishovite	Tetragonal— $P4/mnm$		4.30

Polimorfizm: Bir bileşimin kristalleşmesi sırasında farklı koşulların etkisinde büyümesinden kaynaklanır. Bu değişkenler basınç(P) ve sıcaklıktır(T).



# POLİMORFİZM MEKANİZMALARI

## I. HIZLI

- a) Genişlemeli  
(dilatational)
- b) Yerdeğiştirmeli  
(displacive)
- c) Yapısal olmayan  
(nonstructural)

## II. YAVAŞ

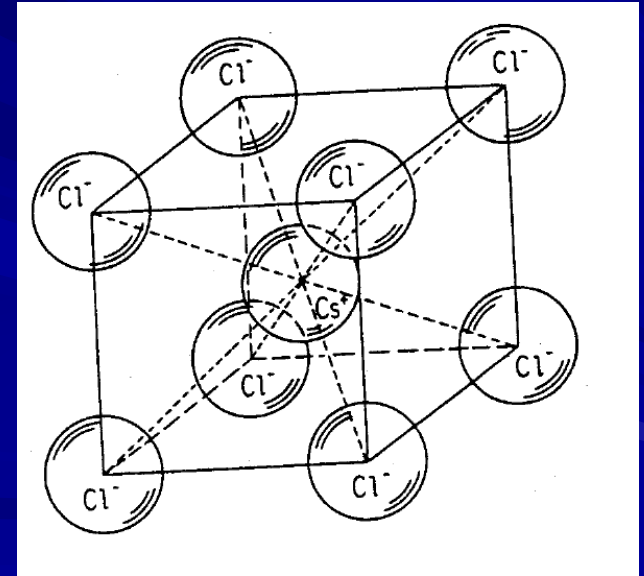
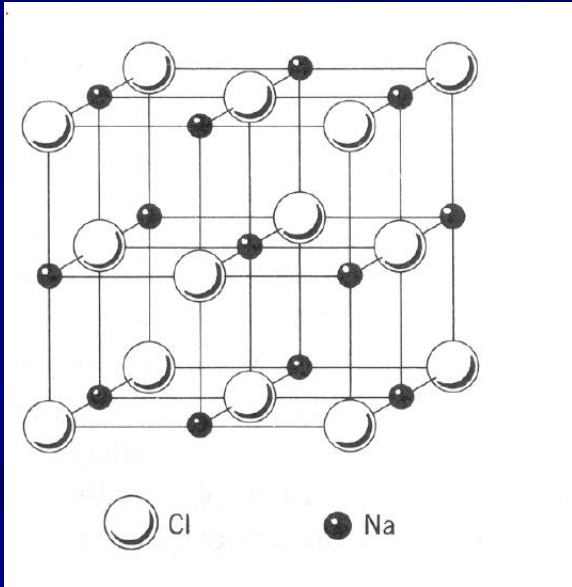
- a) Yeniden yapılanma  
(reconstructive)
- b) Çok tipli  
(polytypic)
- c) Düzen-Düzensizlik  
(order-disorder)

Polimorfizm tipleri ve mekanizmaları: Bir fazdan diğesine dönüşüm faz dönüşümü olarak adlandırılır.

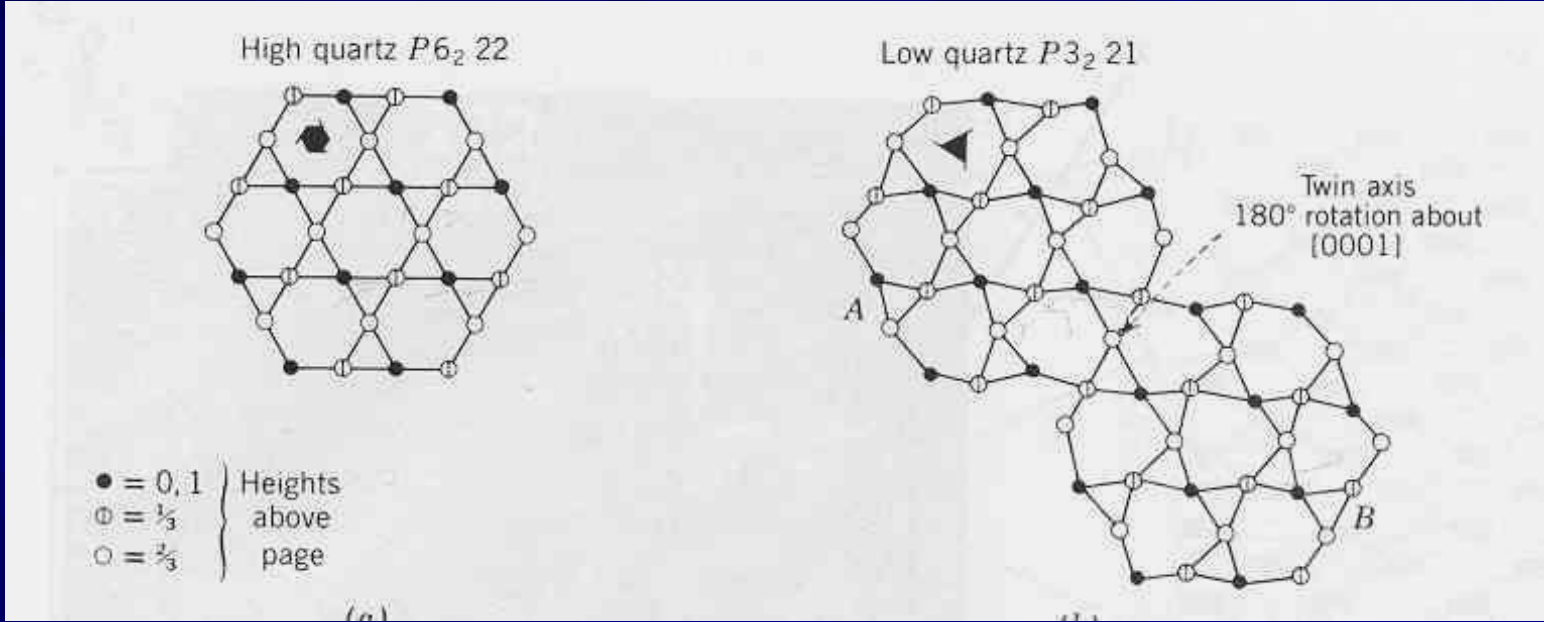
## DÖNÜŞÜM

### I. Hızlı

a) Genişlemeli(dilational); (NaCl CsCl yapısına dönüşür) NaCl yüksek basınçta (P) CsCl yapısında yani 8'li koordinasyonda, düşük basınçta ise 6'lı koordinasyonda.



b)Yerdeğİstirmeli(diplacive)  
( $\alpha$ -kuvars,  $\beta$ -kuvars)



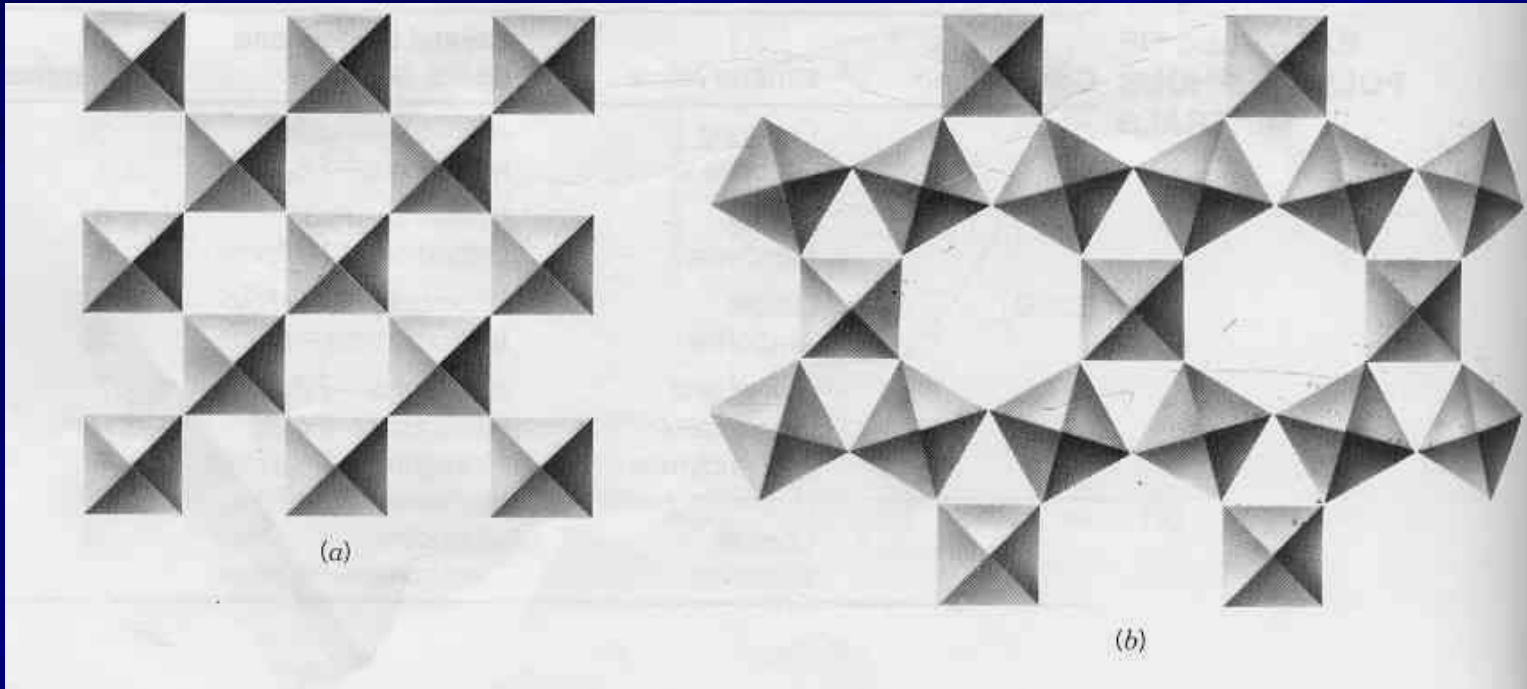
c)Yapısal olmayan(nonstructural):

Kritik sıcaklıkta oluşan manyetik özellik gibi, Dönüşüm sıcaklığı (T) ferrimagnetik mineraller için Curie noktası. Bu noktanın üstünde magnetik özellik gözlenir, altında ise gözlenmez.

## II. Yavaş

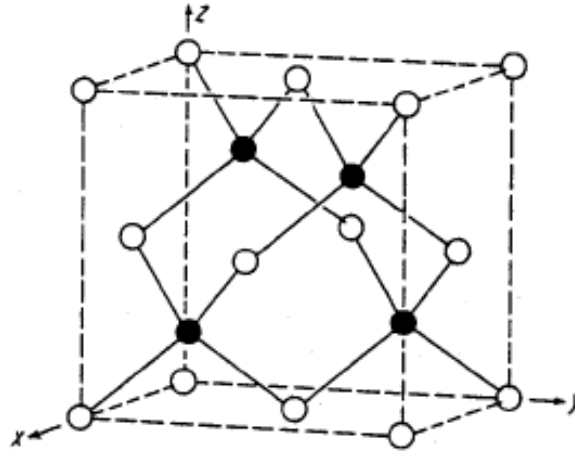
a) Yeniden yapılanma (reconstructive)

(aragonit-kalsit, pirit-markazit, tridimit-kristobalit)

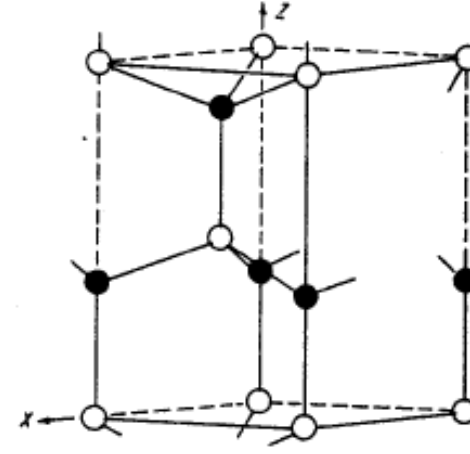


b)Çok tipli(polytypic)

(iki boyutta yapı aynı,  
üçüncü boyutta  
paketlenme farklı)  
ZnS (Sfalarit-wurtzit)  
Sfalaritte ccp (cubic  
closest packed)  
(ABCABC)  
paketlenme, wurtzit  
de hcp (hexagonal  
closest packed) (ABAB)  
paketlenme.



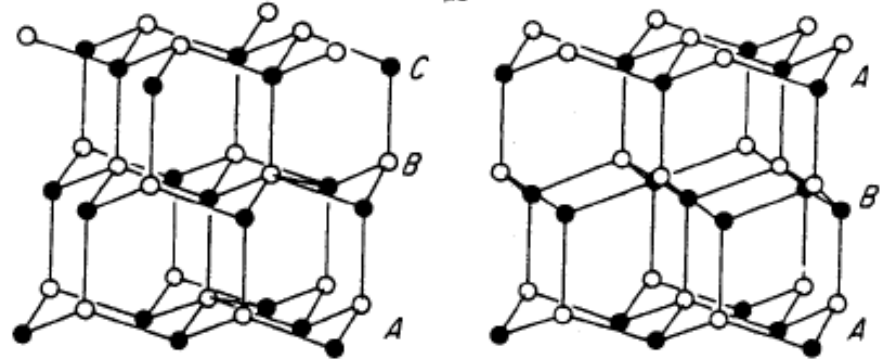
(a)



(b)

?

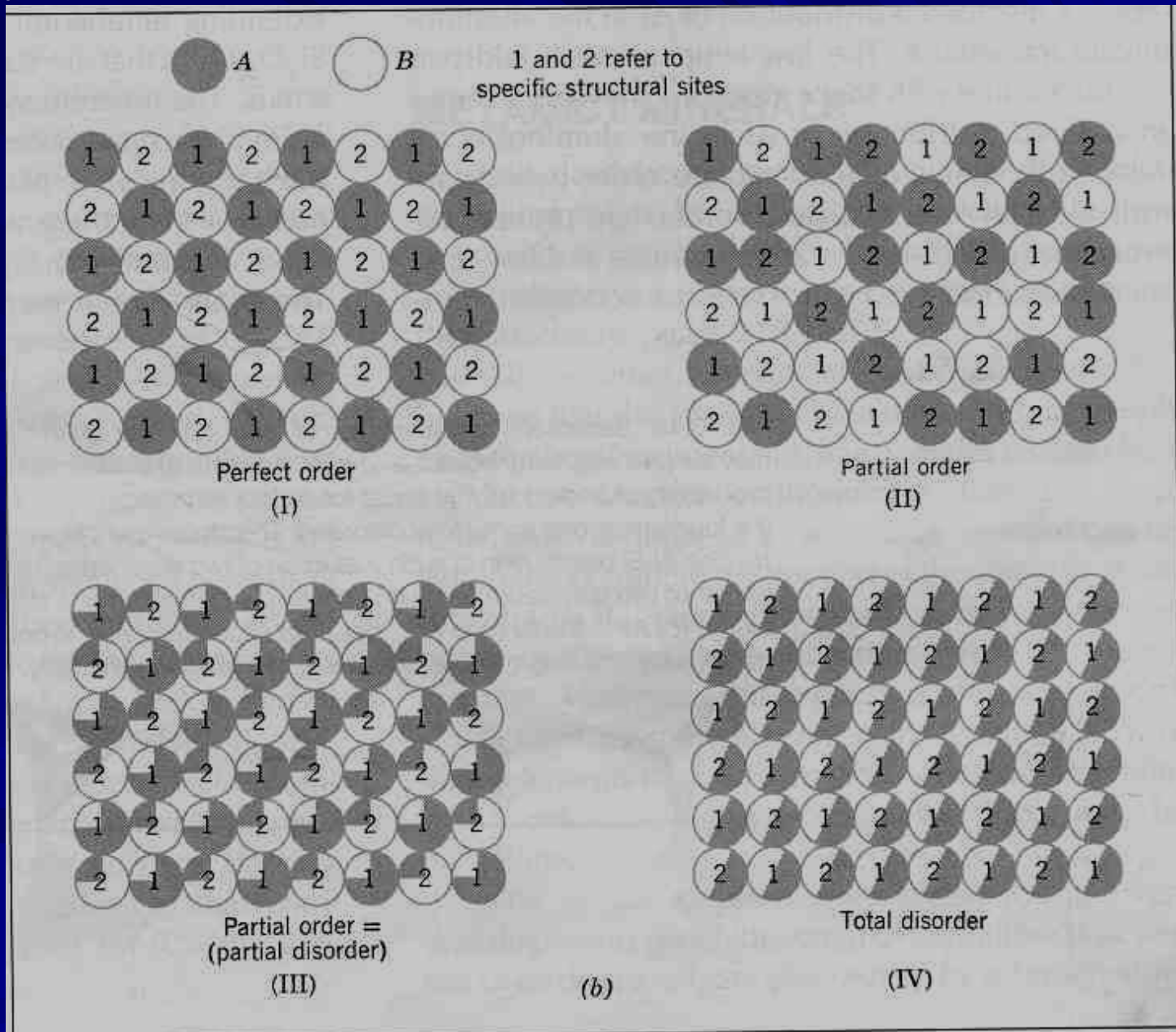
● : Zn or S  
○ : S or Zn



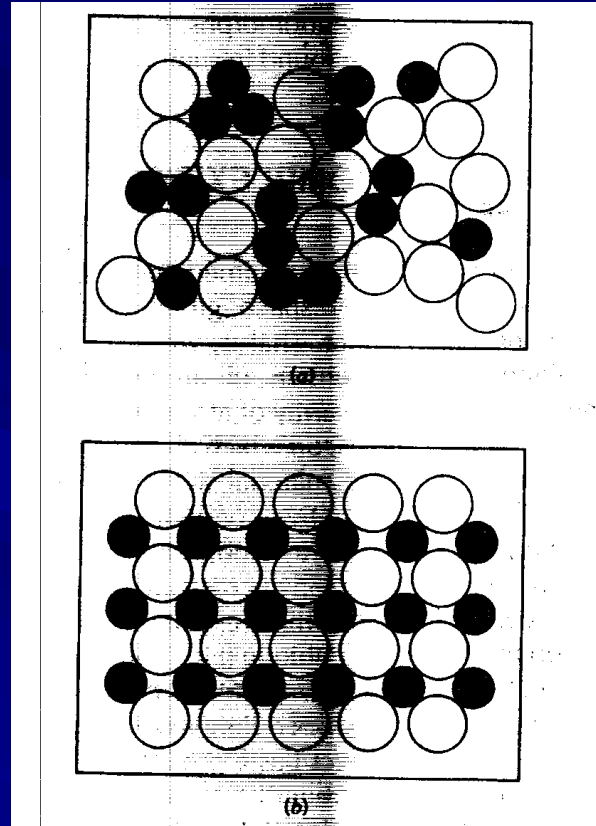
(c)



c) Düzen-Düzensizlik (order-disorder): Al, Si ornatmasının olduğu tüm silikatlarda)



İnorganik maddeler kristal ve kristalin olmayan diye 2 ye ayrılır. Kristal olmayan maddeler *amorfo* olarak adlandırılır.



Amorf bir alaşım

Kristalin yapıda bir alaşım

Amorf maddelerde düzgün ve periyodik atom düzlemleri olmadığından, buna bağlı X-ışın difraksiyonu vermezler.

## Mineraloid

Doğada , doğal olarak inorganik işley sonucu oluşan katı homojen oluşumlar vardır.

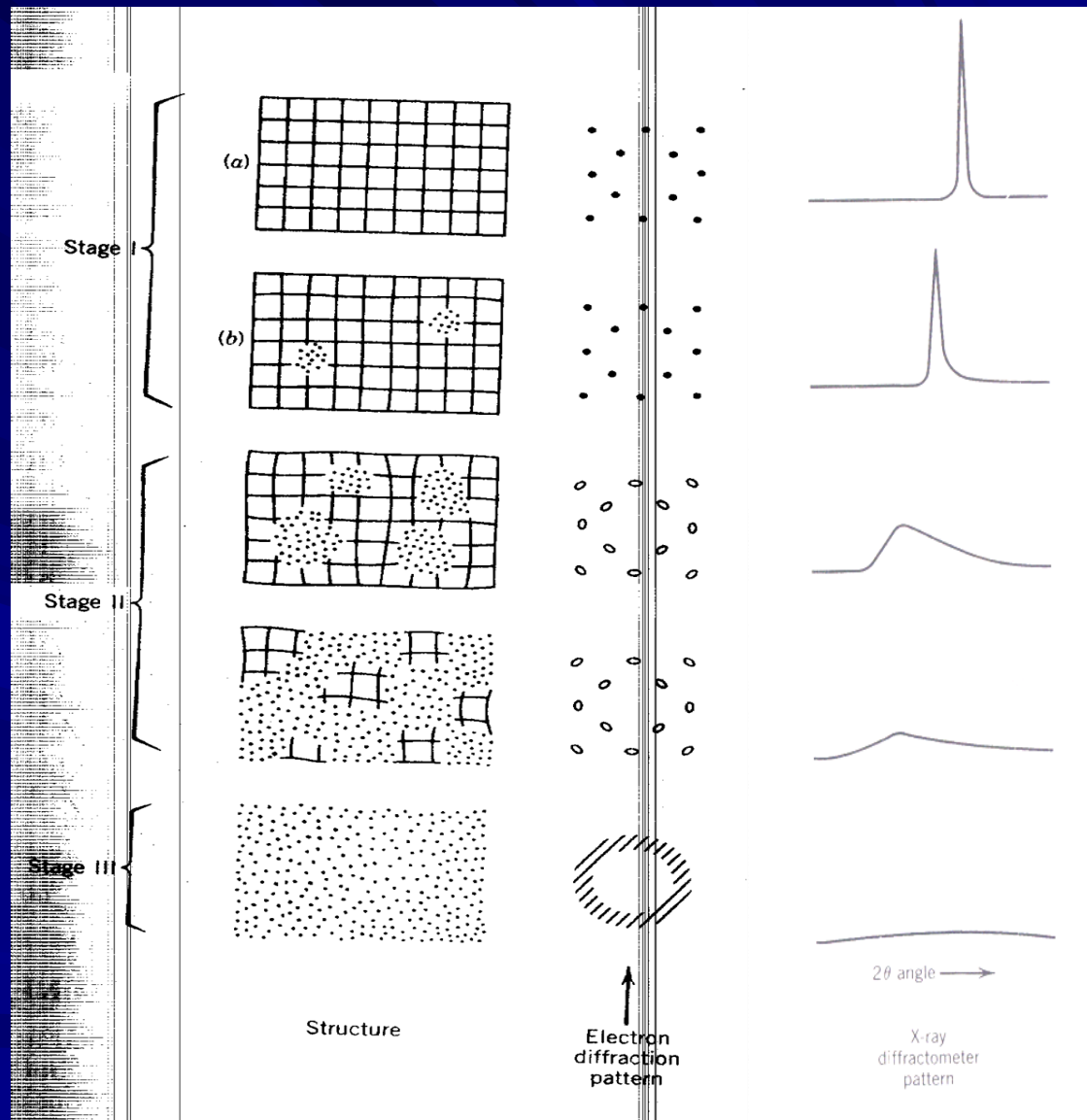
Bunlar kayaç yapıcı olarak kayaçlarda ve toprakta yer alırlar. Ancak mineral olarak adlandırılmazlar.

Bunların kristal yapıları ya yoktur, ya da kısmen vardır. Bu tür oluşumlar *mineraloid* olarak adlandırılır. Opal( $\text{SiO}_2 \cdot n\text{H}_2\text{O}$ ), limonit ( $\text{FeO} \cdot \text{OH} \cdot n\text{H}_2\text{O}$ ) ve allofan(hidrous aluminum silikat) örnektir.

## Metamikt mineral

Başlangıçta kristalin olarak oluşan , ancak daha sonra bu özelliğini değişik derecelerde kaybetmiş minerallere denir. Bunların tamamı radyoaktif madde (Th ve U) içeren minerallerdir.

# Metamikt mineral



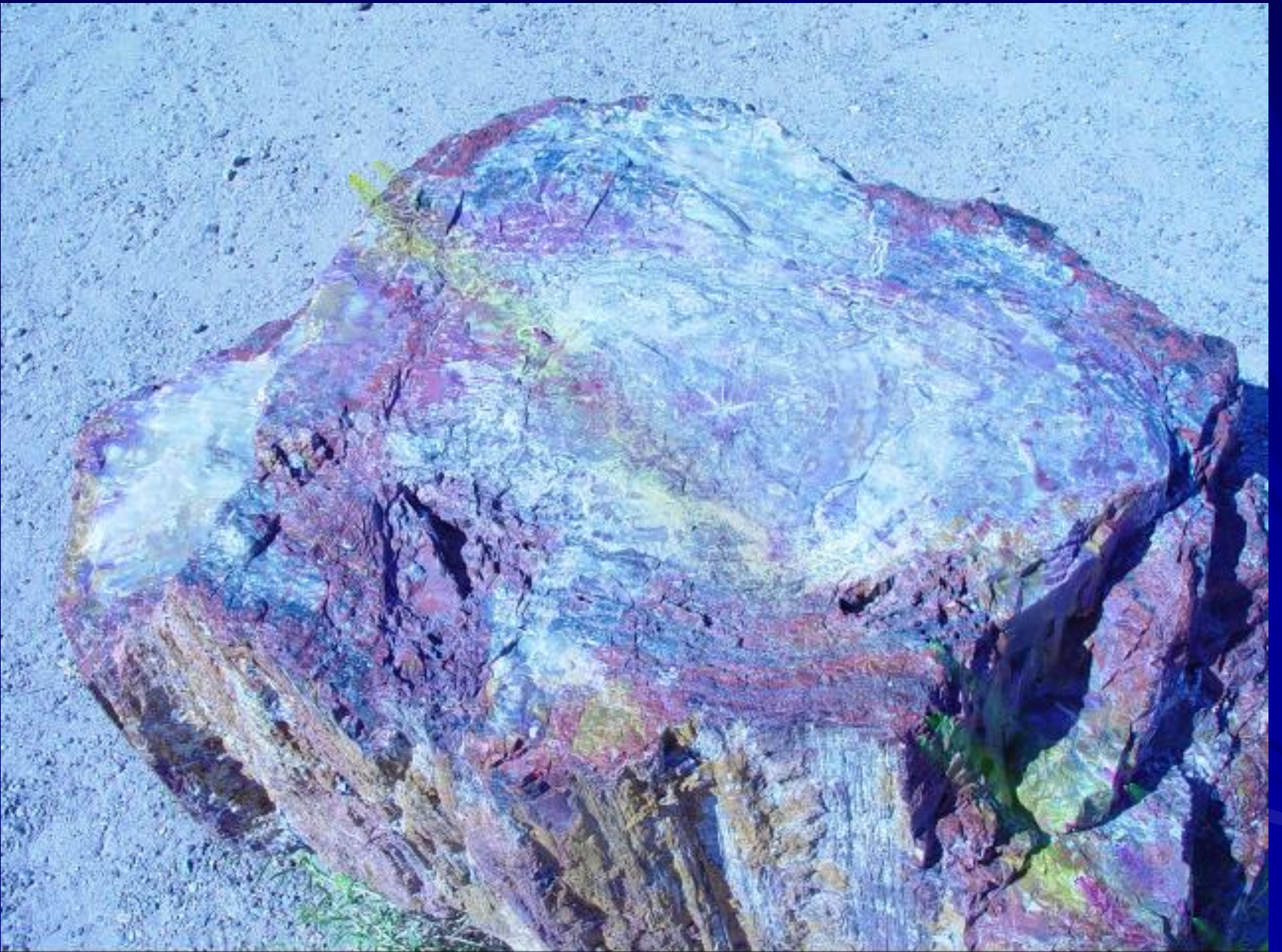
Yalancı şekillilik(Pseudomorfizm): Bir mineral diğerk bir mineralin yerine dış şeklini koruyarak geçer. Yeni mineral eskisinin psödomorfu adını alır.

I.Ornatma(Substitution): Dereceli olarak ornatma ve aynı anda yerine geçme ile olur.  $\text{SiO}_2$ ,  $\text{CaF}_2$  ornatır.  $\text{SiO}_2$  ağacı ornatır ve ağacın psödomorfu olur.

II. Kabuklaşma (Encrustation): Bir mineral diğerkinin üzerinde kabuk yapar.  $\text{SiO}_2$ ,  $\text{CaF}_2$  üzerinde kübik kabuk oluşturur.

III. Ayrışma (Alteration): Bir mineralin madde kaybına veya madde kazanımına uğraması sonucu oluşur.

$\text{CaSO}_4$  (anhidrit) su alarak  $\text{CaSO}_4 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$  (Jips) olur. Ancak anhidritin formundadır.  $\text{Cu}_2\text{O}$ , Cu (püsödomorftur).



Ağacın püsödomorfu Amorf silika .



Aragonitin püsömorfu bakır

# SONUÇLAR

- 1) Minerallerde yapılar kimyasal bileşim ve kristalografik özelliklerin ortaya çıkardığı iç düzendir.
- 2) Yapılar 3 yöntemle gösterilir; Birim hücre, dizinim, koordinasyon çokgenleri
- 3) Benzer veya eş kimya farklı yapı gösterebilir veya farklı kimya , benzer veya eş yapı gösterebilir.
- 4) Benzer veya eş kimyanın farklı yapı sunması, Farklı basınç ve sıcaklıkta oluşmalarından kaynaklanır. Farklı kimyasal bileşimlerin benzer veya eş yapı göstermesi ise yapıdaki elementlerin kimyasal olarak çok benzemelerinden kaynaklanır.