

Cilt: 1 Sayı: 3 sh. 81-88 Ekim 1999

TEK KRİSTAL SİSTEMLERDE ESNEKLİK ÖZELLİKLERİN İNCELENMESİ

(AN INVESTIGATION ON ELASTIC PROPERTIES OF SINGLE CRYSTAL SYSTEMS)

Coşkun İŞÇİ, E. Mine İLK

Dokuz Eylül Üniversitesi, Fen-Edebiyat Fakültesi, Fizik Bölümü, Alsancak, İZMİR

ÖZET / ABSTRACT

Esneklik teorisinin tek kristal sistemlere uygulanmasıyla bulunan esneklik sabitleri ve ultrases hızları arasındaki bağıntılar kullanılarak ses hızının, Young modülünün ve sıkışabilirlik katsayısının, kristal doğrultularına bağlılıkları verilmiştir. Tek kristallerin esneklik özellikleri anizotropi gösterir. Örnek olarak, kübik simetriye sahip Ni tek kristali, nümerik hesaplamalarda kullanılmıştır. İkinci mertebeden gerilim ve deformasyon tensörleri ve dördüncü mertebeden esneklik sabitleri tensörü ile ilgili temel bilgi verildikten sonra, farklı doğrultulardaki hızlarla C_{ij} sabitleri arasındaki bağıntılar çıkarılmıştır. Nümerik hesaplamalarda Mathematica 2.2 paket programı kullanılarak, hız ve Young modülü yüzeyleri bulunmuş ve sonuçlar grafik olarak çizilmiştir.

By applying elasticity theory to single crystal systems, the relations between elastic constants and ultrasonic velocities, and the dependence of velocities, Young modulus and compressibility coefficient on crystallographic directions have been given. Elastic properties of single crystals show anisotropic character. As an example, Ni single crystal, which has a cubic symmetry, has been chosen for numerical calculations. After giving the theoretical background of second order stress, strain tensors and fourth order elastic constant tensor, the relations between velocities at different directions and C_{ij} constants have been derived. For numerical calculations Mathematica 2.2 packet program has been used to calculate velocity and Young modulus surfaces and the results have been plotted.

ANAHTAR KELİMELER / KEY WORDS

Tek kristaller, Esneklik, Ultrasonik ses hızı, Young modülü

Single crystals, Elasticity, Ultrasonic velocities, Young modulus

1. GİRİŞ

Katı cisimlerin esneklik özelliklerinin incelenmesi ile atomlar ve moleküller arasındaki bağlayıcı kuvvetler hakkında bilgi elde edilebilir. Özel koşullarda büyütülen tek-kristaller (mono-crystal), esneklik açısından anizotropik özellik gösterirler. Farklı kristal doğrultularında ultrases hızı ve esneklik sabitlerinin ölçülmesi ile, esneklik özellikleri ve bağlar hakkında yorumlar yapılabilir.

Daha önce yapılan deneyler sonucunda elde edilen veriler (Truell vd...,1969) analiz edilerek, farklı kristal yapıları için nümerik hesaplar yapılır ve akustik hız, Young modülü,

sıkışabilirlik gibi fiziksel parametrelerin farklı kristal doğrultuları için grafikleri oluşturulabilir.

2. ESNEKLİK TEORİSİ

Üzerine kuvvetler uygulanan bir katı cisim şekil değişikliğine uğrar. Bu kuvvetler kaldırıldığında bu şekil değişikliği yok olursa bu tür değişikliklere, esnek (elastik) şekil değişimi denir. Birim yüzeye etki eden kuvvete gerilim (stress) denir. Anizotropik ortamlarda bu ikinci dereceden bir gerilim tensörü olan T_{ij} ile gösterilir. Şekil değişikliği veya deformasyon (strain) de yine ikinci mertebeden bir tensörü olan E_{ij} ile gösterilir ve aşağıdaki gibi ifade edilir.

$$E_{ij} = \partial u_i / \partial x_j \quad (i, j = 1, 2, 3) \quad (1)$$

Burada u_i , yer değiştirme vektörü \mathbf{u} nun bileşenleridir. x_j , yer vektörü \mathbf{r} 'nin bileşenleridir. Hooke kanuna göre gerilim (zor), deformasyon (zorlanma) ile lineer olarak orantılıdır.

$$T_{ij} = C_{ijkl} E_{kl} \quad (2)$$

veya

$$E_{ij} = S_{ijkl} T_{kl} \quad (3)$$

ile ifade edilir. Burada C_{ijkl} (elastic stiffness constants) ve S_{ijkl} (elastic compliance constants) esneklik sabitleri olup 4. mertebeden simetrik tensörlerdir.

$$C_{ijkl} = C_{klij} = C_{ikij} \quad (4)$$

Bu sabitler matris gösteriminde

$$T_i = C_{ij} E_j \text{ ve } E_i = S_{ij} T_j \quad (5)$$

olarak yazılabilir (İşçi, 1977 ve Nye, 1957). Simetrik özelliklerden ($C_{ij} = C_{ji}$) dolayı, en düşük simetrik kristallerde 21 bağımsız, C_{ij} esneklik sabiti vardır. Kübik kristallerde bu sayı 3'e, hexagonal simetriklerde 6'ya inmektedir. C_{ij} ve S_{ij} ler arasında

$$S_{ij} = (-1)^{i+j} \Delta^{-1} / C_{ij} \quad (6)$$

bağıntısı vardır (Truell vd...,1969). Burada Δ^{-1} , C_{ij} matrisinin determinantı, Δ^{-1} de, C_{ij} elemanın minörüdür.

Akustik dalga denklemi,

$$\rho (\partial^2 u_i / \partial t^2) = (\partial T_{ij} / \partial X_j) \text{ dir. } \quad (7)$$

Burada ρ cismin yoğunluğudur. Hooke kanununun ifadesi (7)'de yerine konular ve bazı ara işlemler yapılırsa, düzlem dalga için çözüm;

$$u_i = u_{0i} \exp [i(\omega t - \mathbf{k} \cdot \mathbf{r})] \quad (8)$$

olarak bulunur. Burada u_i , yer deęiřtirme vektörünün bileřenleri; u_{0i} , vektörün maksimum deęeri; w , açısıl frekans; \mathbf{k} yayılma vektörü ($\mathbf{k}=(2\pi/\lambda)\mathbf{n}$); \mathbf{r} , yer vektörü; \mathbf{n} , doęrultu kosinüsleri (n_1, n_2, n_3) dir. Dalga hızları için Christoffel denklemleri en uygun ifadelerdir (Akgöz vd..., 1976):

$$(L_{ik} - \rho v^2 \delta_{ik}) u_{ok} = 0 \quad (i, k = 1, 2, 3) \quad (9)$$

$$\delta_{ik} = \begin{cases} 1 & i = k \\ 0 & i \neq k \end{cases}$$

$$L_{ik} = C_{ijkl} n_j n_l \quad (10)$$

Burada L_{ik} 'lar, Christoffel sabitleridir. (9) denklemleri açık olarak yazılırsa;

$$(L_{11} - \rho v^2) u_{01} + L_{12} u_{02} + L_{13} u_{03} = 0$$

$$L_{12} u_{01} + (L_{22} - \rho v^2) u_{02} + L_{23} u_{03} = 0 \quad (11)$$

$$L_{13} u_{01} + L_{23} u_{02} + (L_{33} - \rho v^2) u_{03} = 0$$

denklemleri elde edilir. Bu denklemlerin çözümü için u_{ok} 'ların katsayılarının determinantı sıfır olmalıdır. Bu ifade, ρv^2 ye göre kübik bir denklemdir. Bir yayılma doęrultusu için üç farklı yayılma hızı vardır. Hızlar yerine konulduğunda 3 tane birbirine dik yayılma vektörü bulunur. Bir boyuna, iki enine dalga mevcuttur. Bazı özel doęrultularda iki enine dalga hızı birbirine eşit olabilir.

$\mathbf{u} \times \mathbf{n} = 0$ boyuna, $\mathbf{u} \cdot \mathbf{n} = 0$ enine dalgaları verir.

2.1. Kübik simetriye sahip kristallerde (Ni, Cu gibi) Christoffel sabitleri ve hız ifadeleri

Kübik kristallerde Christoffel sabitleri:

$$L_{11} = n_1^2 C_{11} + n_2^2 C_{44} + n_3^2 C_{44}$$

$$L_{22} = n_1^2 C_{44} + n_2^2 C_{11} + n_3^2 C_{44}$$

$$L_{33} = n_1^2 C_{44} + n_2^2 C_{44} + n_3^2 C_{11}$$

$$L_{23} = n_2 n_3 (C_{12} + C_{44}) \quad (12)$$

$$L_{31} = n_3 n_1 (C_{12} + C_{44})$$

$$L_{12} = n_1 n_2 (C_{12} + C_{44})$$

ve [100] doęrultusu için ($n_1 = 1, n_2 = 0, n_3 = 0$) Christoffel denklemleri:

$$(C_{11} - \rho v^2) u_{01} = 0$$

$$(C_{44} - \rho v^2) u_{02} = 0 \quad (13)$$

$$(C_{44} - \rho v^2) u_{03} = 0$$

olarak verilir. Buradan v_B boyuna dalga ve v_E enine dalga hızları olmak üzere,

$$\rho v_B^2 = C_{11} \text{ ve } \rho v_E^2 = C_{44} \quad (14)$$

bulunur. Kübik kristallerde bazı özel doğrultularda ultrases hızı ile esneklik sabitleri arasında Çizelge 1'de verilen bağıntılardan ve ultrases hızı ölçümlerinden yararlanarak esneklik sabitleri hesaplanır.

Çizelge. 1. Kübik kristallerde ultrases hızı ile esneklik sabitleri arasındaki bağıntılar.

Yayıma Doğrultusu	Polarizasyon Doğrultusu	Bağıntı
[100]	[100]	$\rho v^2 = C_{11}$
[100]	(001) düzleminde	$\rho v^2 = C_{44}$
[110]	[110]	$\rho v^2 = 1/2(C_{11} + C_{12} + 2C_{44})$
[110]	[001]	$\rho v^2 = C_{44}$
[110]	[110]	$\rho v^2 = 1/2 (C_{11} - C_{12})$
[111]	[111]	$\rho v^2 = 1/3 (C_{11} + 2C_{12} + 4C_{44})$
[111]	(111) düzleminde	$\rho v^2 = 1/3 (C_{11} + C_{44} - C_{12})$

2.2. İzotropik Sistemlerde İlgili Bağıntılar

İzotropik sistemlerde (tüm polikristaller) iki bağımsız esneklik sabiti ve iki hız vardır. Aşağıdaki ifadelerde verilen v_B boyuna dalga hızı, v_E enine dalga hızıdır:

$$v_B = (C_{11} / \rho)^{1/2}, v_E = (C_{44} / \rho)^{1/2}$$

$$C_{44} = \frac{1}{2} (C_{11} - C_{12}) \quad (15)$$

Bu sistemlerde iki Lamé sabitinden λ ve μ söz edilir (Truett vd..., 1969).

$$C_{11} = \lambda + 2\mu, C_{44} = \mu, C_{12} = \lambda \quad (16)$$

2.3. Kübik ve İzotropik Sistemlerde Young Modülü, Hacim Modülü ve Sıkışabilirlik Katsayısı

Kübik kristallerde; Young Modülünün tersi n_i doğrultusunda,

$$(1/Y) = S_{11} - 2(S_{11} - S_{12} - 0.5 S_{44}) (n_1^2 n_2^2 + n_2^2 n_3^2 + n_3^2 n_1^2) \quad (17)$$

ile verilir (Nye, 1957). Burada,

$$S_{11} = (C_{11} + C_{12}) / ((C_{11} - C_{12}) (C_{11} + 2C_{12}))$$

$$S_{12} = -C_{12} / ((C_{11} - C_{12}) (C_{11} + 2C_{12})) \quad (18)$$

$$S_{44} = 1 / C_{44}$$

Sıkışabilirlik (linear compressibility), $\beta = S_{11} + 2S_{12}$ ve hacimsel sıkışabilirlik, 3β 'dır.

$$\text{İzotropik kristallerde bulk modülü, } K = (3\rho v_B^2 - 4\rho v_E^2) / 3 \quad (19)$$

$$\text{Enine (shear) modülü, } \mu = \rho v_E^2 \quad (20)$$

$$\text{Young modülü, } Y = \rho v_E^2 (3\rho v_B^2 - 4\rho v_E^2) / (\rho v_B^2 - \rho v_E^2) \quad (21)$$

$$\text{Poisson oranı, } \sigma = \frac{1}{2} (\rho v_B^2 - 2\rho v_E^2) / (\rho v_B^2 - \rho v_E^2) \quad (22)$$

bağıntıları ile verilir (İşçi, 1983).

3. YÖNTEM

Daha önce yapılan deneylerden elde edilen veriler değerlendirilerek (İşçi vd...,1978), farklı yapıya sahip kristaller için nümerik hesaplar yapıldı. Akustik hız, Young Modülü, sıkışabilirlik gibi fiziksel parametrelerin farklı kristal doğrultuları için haritaları oluşturulabilir.

Bazı özel doğrultularda nikel tek kristalinde yapılan ultrases hızı ölçümleri sonucu, kübik kristallerdeki 3 bağımsız esneklik sabiti, C_{11} , C_{12} ve C_{44} hesaplanmıştır (İşçi ,1983).

Çizelge 2 Nikel tek kristalinde farklı doğrultularda ölçülen ultrases hızları

Yayıma doğrultusu	Polarizasyon doğrultusu	Oda sıcaklığında hızın değeri (10^3 m/s)
[110]	[110]	5.97
[110]	[001]	3.73
[110]	[110]	2.32
[100]	[100]	5.24
[100]	(100) düzleminde	3.69
[111]	[111]	6.17
[111]	(111) düzleminde	2.84

Bu değerlerden hareket edilerek (001) ve (011) düzlemlerinde 5 derece aralıklarla, farklı doğrultuda 1 boyuna ve 2 enine dalga hızları hesaplanarak, grafikleri çizilmiştir. Bu grafikler

Şekil 1 ve 2'de verildiği gibi (001) düzleminde 4-katlı simetri, (011) düzleminde 2-katlı simetri göstermiştir. Fiziksel bir özellik olan esneklik, kristal simetrisi ile aynı simetriyi göstermiştir (Nye, 1957). Nümerik hesaplamalar Mathematica 2.2 da yapılmıştır (Wolfram, 1991). Sonuçlar ve programlar aşağıda verilmiştir. Grafikler ayrıca Mathematica'da PolarPlot ile çizilmiştir. Bu çalışmada iki ayrı program kullanılmıştır. İlk programla, kübik kristallerde (001) ve (011) düzlemlerinde ultrases hızı yüzeyleri oluşturulmuş; ikinci program ile, Young modülü, sıkışabilirlik katsayısı, bulk (hacim) modülü gibi esneklik sabitleri hesaplanmıştır.

4. SONUÇLAR VE ÖNERİLER

Bazı özel doğrultularda (Çizelge 1) yapılan ultrases hızı ölçümleri sonucu, kübik kristallerdeki 3 bağımsız esneklik sabiti, C_{11} , C_{12} ve C_{44} hesaplanmıştır. Ni için bu değerler aşağıya çıkarılmıştır:

$$\text{Yoğunluk } (\rho) = 8.90 \times 10^3 \text{ kg/m}^3$$

$$C_{11} = 24.65 \times 10^{10} \text{ N/m}^2$$

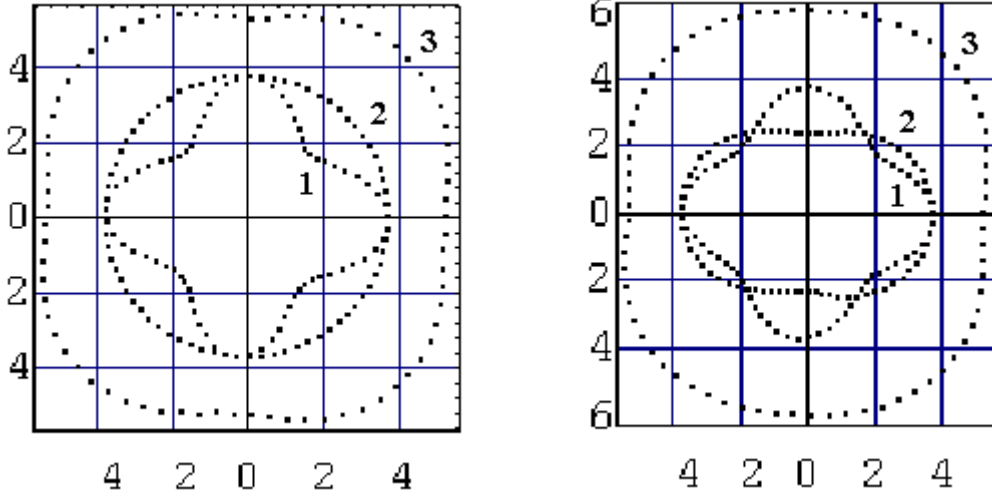
$$C_{12} = 14.73 \times 10^{10} \text{ N/m}^2$$

$$C_{44} = 12.47 \times 10^{10} \text{ N/m}^2$$

İlk programın sonuçları aşağıda verilmiştir. Grafik 5'er derece aralıklarla hesaplanarak çizdirilmiştir. Nümerik sonuçlardan 30 derece aralıklı olanlar aşağıda listelenmiştir.

Çizelge 3. Nikel tek kristalinde farklı doğrultularda hesaplanan ultrases hızları (10^3 m/s)

Açı	v_1	v_2	v_3	v_{a1}	v_{a2}	v_{a3}
0	5.26	3.74	3.74	5.26	3.74	3.74
30	5.87	3.74	2.68	5.94	3.45	2.91
60	5.87	3.74	2.68	6.23	3.04	2.77
90	5.26	3.74	3.74	6.01	3.74	2.36
120	5.87	3.74	2.68	6.23	3.04	2.77
150	5.87	3.74	2.68	5.94	3.45	2.91
180	5.26	3.74	3.74	5.26	3.74	3.74
210	5.87	3.74	2.68	5.94	3.45	2.91
240	5.87	3.74	2.68	6.23	3.04	2.77
270	5.26	3.74	3.74	6.01	3.74	2.36
300	5.87	3.74	2.68	6.23	3.04	2.77
330	5.87	3.74	2.68	5.94	3.45	2.91
360	5.26	3.74	3.74	5.26	3.74	3.74



(a) (b)

Şekil 1. Ni tek kristalde ultrases hız yüzey kesitleri (10^3 m/s).

(a) (100) düzleminde: 1, enine dalga (v_3); 2, enine dalga (v_2); 3, boyuna dalga (v_1).

(b) (110) düzleminde: 1, enine dalga (v_{a3}); 2, enine dalga (v_{a2}); 3, boyuna dalga (v_{a1}).

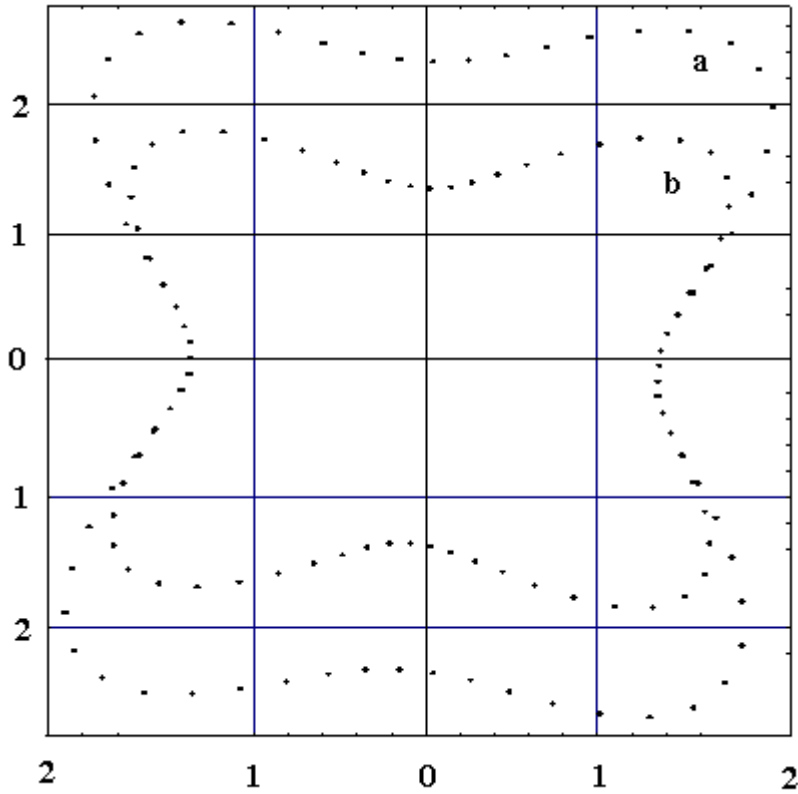
İkinci programdan elde edilen sonuçlar aşağıda listelenmiş ve grafikleri çizilmiştir:

$$S_{44} = 8.02 \cdot 10^{-13} \text{ m}^2 / \text{N} , S_{11} = 7.35 \cdot 10^{-13} \text{ m}^2 / \text{N} , S_{12} = -2.75 \cdot 10^{-13} \text{ m}^2 / \text{N}$$

$$\text{Lineer Sıkışabilirlik} = 1.85 \cdot 10^{-13} \text{ (SI)}, \text{ Hacim Sıkışabilirliği} = 5.55 \cdot 10^{-13} \text{ (SI)}$$

Çizelge 4. Nikel tek kristalinde farklı doğrultularda hesaplanan Young modülü değerleri (10^{12} N/m²)

Açı	YA	YB
0	1.36	1.36
30	1.97	2.05
60	1.97	2.98
90	1.36	2.32
120	1.97	2.98
150	1.97	2.05
180	1.36	1.36
210	1.97	2.05
240	1.97	2.98
270	1.36	2.32
300	1.97	2.98
330	1.97	2.05
360	1.36	1.36



Şekil 2. Ni tek kristalinde Young modülü yüzeyleri (10^{12} N/m²). (a) (100) düzleminde, (b) (110) düzleminde.

Young modülü Şekil.2'deki grafiğikte görüleceği üzere [111] doğrultusunda, Young modülü en büyük değere sahiptir. Yani Ni gibi kübik kristallerde, bu doğrultuda atomlar arası bağlar daha kuvvetlidir. Cisim bu doğrultuda gerilim ve basınca daha fazla dayanmaktadır. Bu sabitin küçük olduğu doğrultularda, maddenin deformasyonu daha kolaydır (Smile, 1995).

Bu konuda en tipik örnek HCP yapıya sahip grafitir. Grafitin erime noktası (3000 °C civarı) çok yüksek olmasına rağmen, belirli düzlemler arası bağlar çok zayıf olması nedeni ile kolayca işlenip pota veya elektrotlar yapılabilir (İşçi, 1978).

Katı cisimlerin esneklik özelliklerinin incelenmesi ile atomlar ve moleküller arasındaki bağlayıcı kuvvetler hakkında bilgi elde edilebilir. Tek-kristaller esneklik açısından anizotropik özellik gösterirler. Farklı doğrultularında ultrases hızı ve esneklik sabitlerinin ölçülmesi ile, esneklik özellikler ve bağlar hakkında yorumlar yapılabilir.

5. KAYNAKLAR

AKGÖZ, Y.C.; İŞÇİ, C; SAUNDERS, G.A. (1976): "The Elastic Constants of Sb-As Alloy Single Crystals", J. Material Science, V.11, p.297.

İŞÇİ, C; PALMER, S.B. (1978): "An Ultrasonic Study of the Magnetic Phases of Dy", J.Physics F: Metal Physics, V.8, p.247.

İŞÇİ, C.(1977): "Doktora Tezi", Hull University, England .

İŞÇİ, C. (1978): " Hexagonal Kristallerin Esneklik Özellikleri", E.Ü. Fen Fak. Dergisi, V.3, p.279, İzmir.

İŞÇİ, C (1983) : " Ni ve Ni-V Alaşımlarının Magnetik ve Esneklik Özellikleri",

Doçentlik Tezi, Ege Üniv. Fizik Bölümü, İzmir.

NYE, J.F. (1957): "Physical Properties of Crystals: Their representation by Tensors and Matrices", Oxford Universty Press, London.

SMILE, R.W. (1995): "None Destructive Testing" PH Diversfield Inc., New York.

TRUELL, R.; ELBAUM, C; CHICK, B.B. (1969): "Ultrasonic Methods in Solid State Physics", Academic Press, New York.

WOLFRAM, S. (1991): "Mathematica" 2nd ed.; Addison-Wesley Com. Inc., New York.