

# Kristálytani (krisztallográfiai) összefoglaló

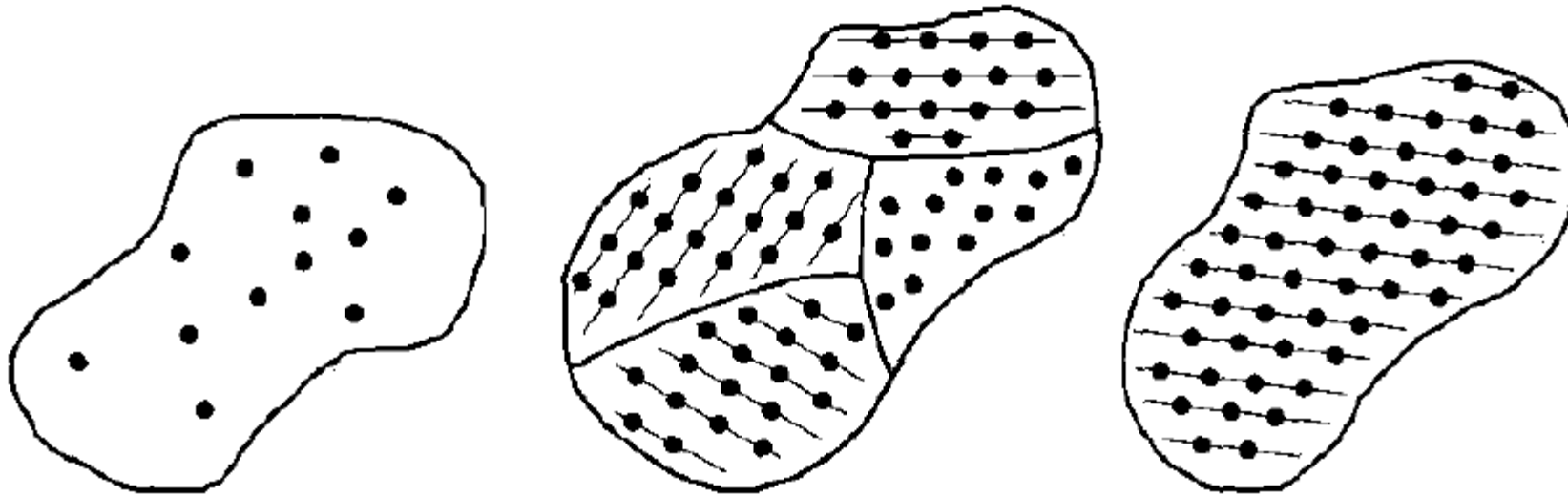
A négy ismert halmazállapot: plazma, gáz, folyadék, szilárd.

Szilárd anyag: amorf (rövid távú rend) és kristályos (hosszú távú rend).

Kristály: az atomok szabályos periodikus térbeli elhelyezkedése -

kristályszerkezet: egykristály (monokristály - egyetlen

kristályszemcse) vagy polikristály (több kristályszemcse).



Amorf

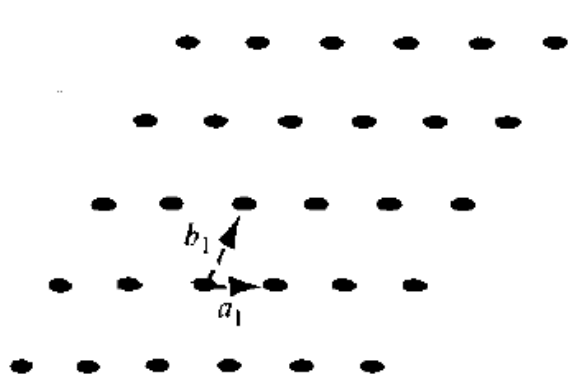
Polikristályos

Egykristályos

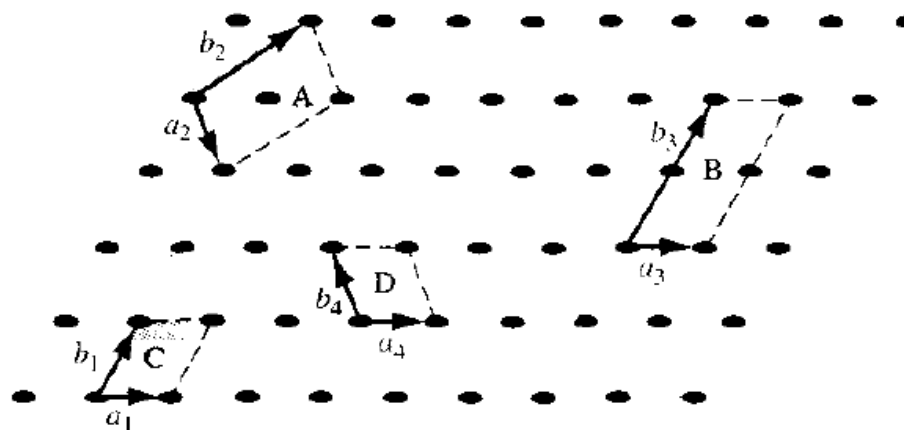
# Rácsszerkezet

A szabályos szerkezet következtében a kristályban végtelen sok ekvivalens pont van, amelyek elhelyezkedése a térbeli periodicitást jellemzi. Ezen pontok összességét rácsszerkezetnek nevezzük. A rácsszerkezet pontjait (az ekvivalens pontokat) a három térbeli irányban összekötő vektorokat rácsvektoroknak vagy eltolási, vagy translációs vektoroknak nevezzük. A három rácsvektor által határolt térfogat a rácscella. A rácscellák tetszőlegesen kiválaszthatóak. A legkisebb rácscellát elemi cellának hívjuk.

## Kétdimenziós kristályrác



Elemi cella



Különböző rácscellák

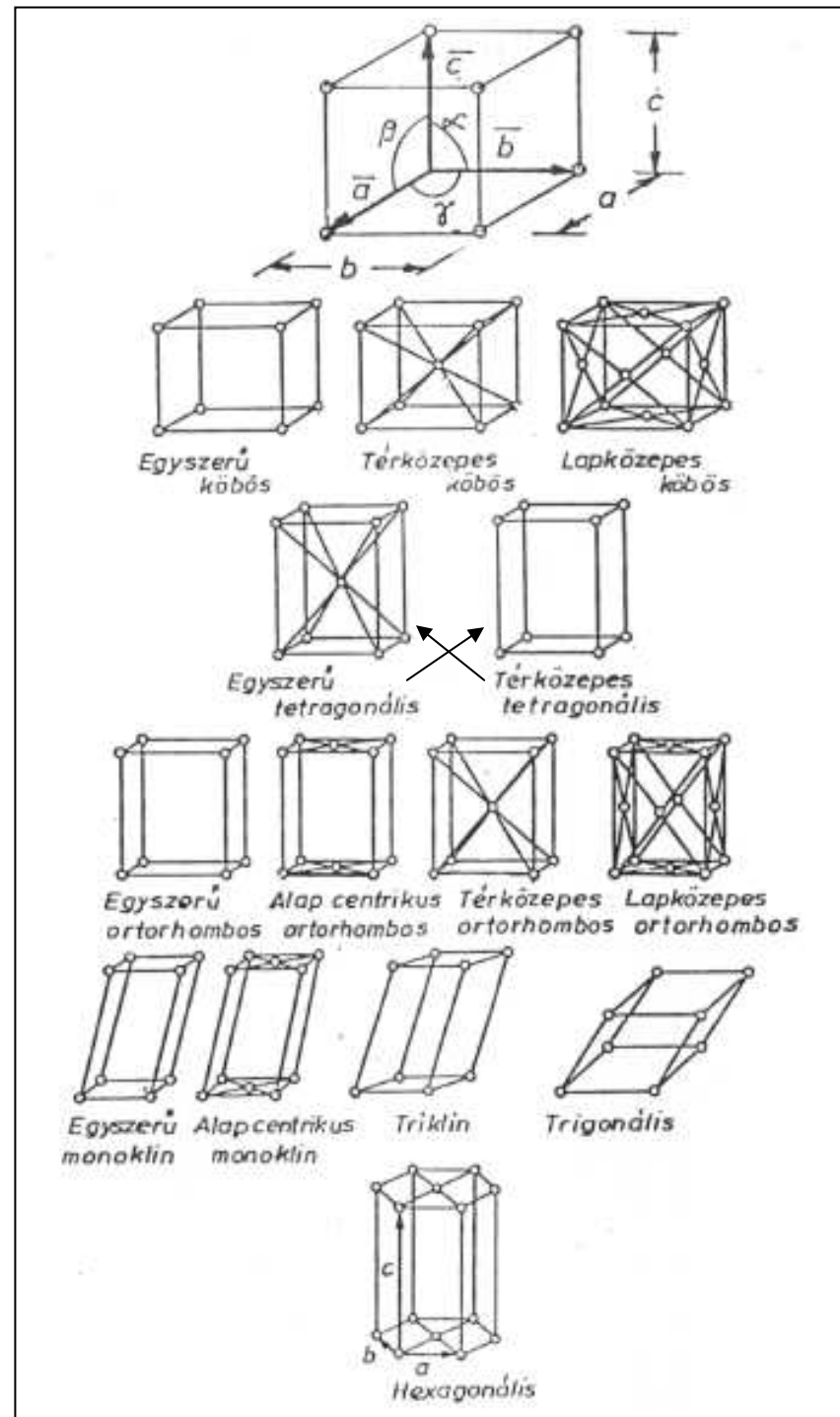
# Szimmetriák

A rácsszerkezet eltolási (transzlációs) szimmetriával rendelkezik: ha egy rácsvektornyi távolsággal arrébb toljuk a rácsot, ugyanazt a rácsszerkezetet kapjuk. A rácscellákból felépíthető a teljes rácsszerkezet, ha a transzlációs vektorokkal mindhárom kiterjedési irányban végtelen sokszor eltoljuk őket.

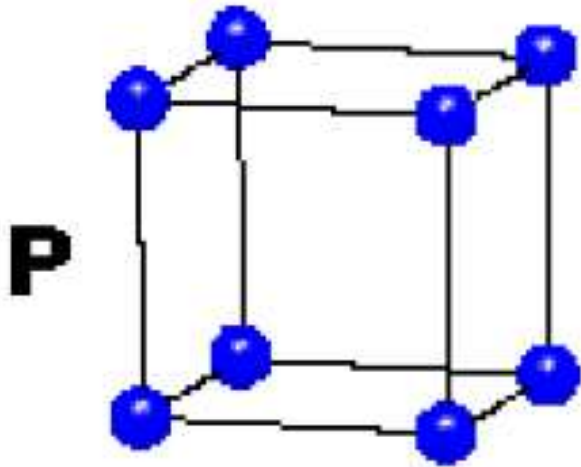
Vannak olyan rácsszerkezetek, amelyek nemcsak transzlációs szimmetriával, hanem tükrözési és/vagy forgatási szimmetriával is rendelkeznek.

3 dimenzióban 14 fajta rácsszerkezet létezik. Ezek celláit hagyományos celláknak vagy Bravais rácsoknak nevezik.

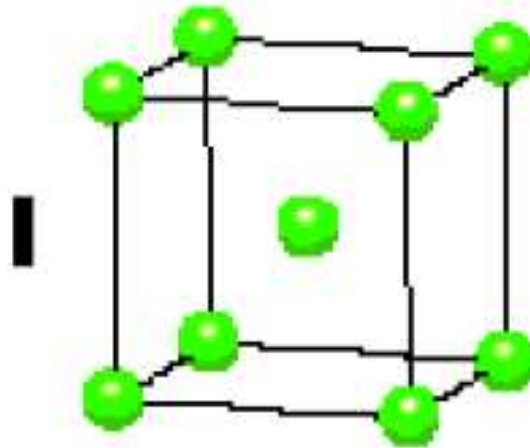
A háromdimenziós rácscella sematikus ábrája (fent) és a 14 hagyományos cella



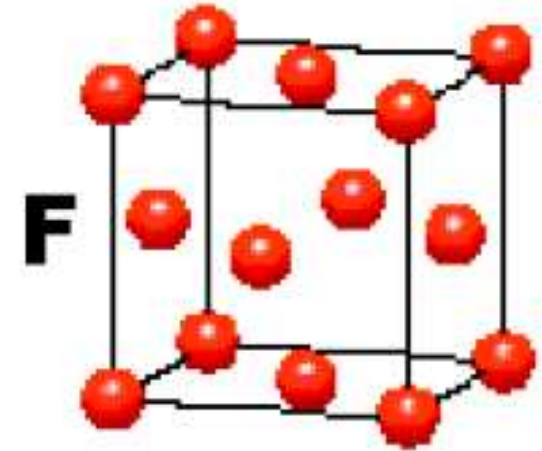
## Köbös rácscellák



Egyszerű köbös  
(Simple vagy Primitive  
cubic - SC)



Térközepes köbös  
(Body centered  
cubic - BCC)

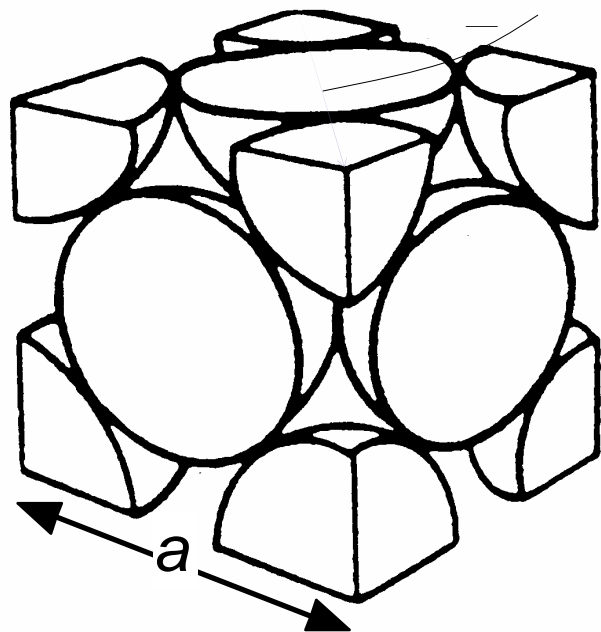


Lapközepes köbös  
(Face centered  
cubic - FCC)

## Kristályszerkezet

A kristályban minden rácsponthoz egy vagy több atom adott térbeli elhelyezkedése tartozik, amit bázisnak nevezünk. A rácsszerkezet és a bázis együtt alkotják a kristályszerkezetet.

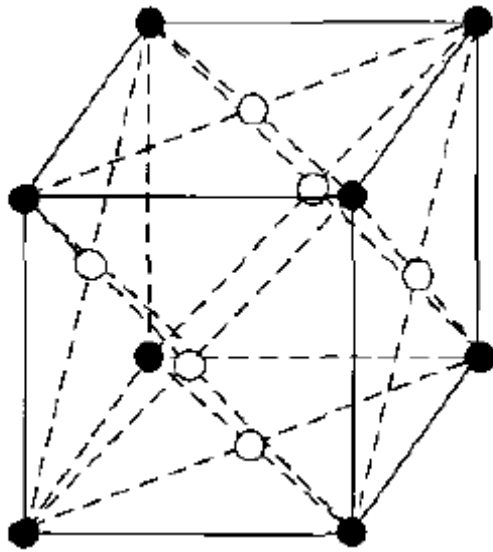
A fémek és félvezetők általában köbös rácsszerkezetben kristályosodnak. A fémek esetében mindig egyatomos a bázis, a többatomos bázis a nemfémekre és a vegyületekre jellemző. A félvezetők esetében általában kétatomos a bázis.



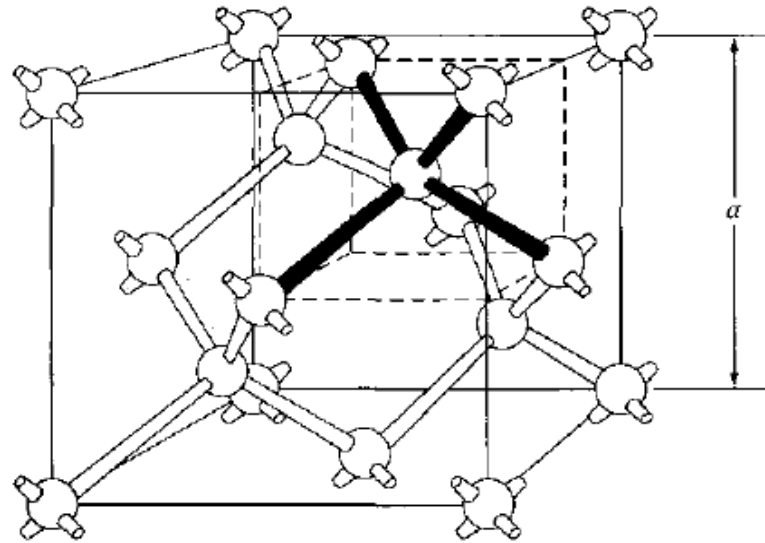
Egyatomos bázisú lapközepes köbös kristályszerkezet. Feltételezik, hogy az atomok szabályos gömbök és a legközelebbi atomok összeérnek.

## Gyémánt és cinkblende kristályszerkezet

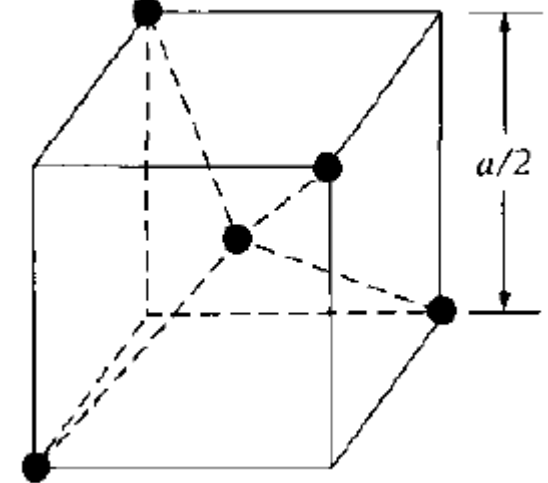
A gyémánt kristályszerkezete: lapközepes köbös, két atomos bázis, mely a kocka térátlója irányában áll, az atomok távolsága a térátló 1/4 része.



Lapközepes köbös  
rácsszerkezet



A gyémánt  
kristályszerkezete

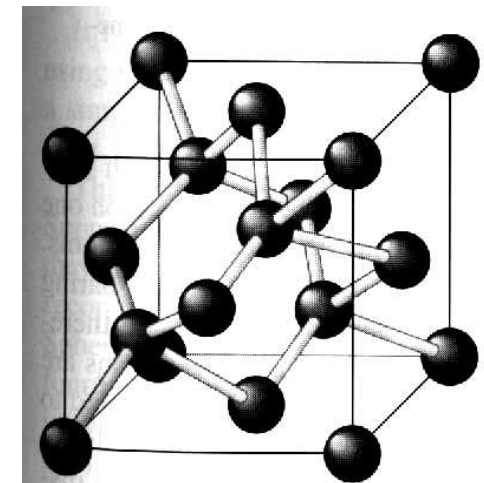


A négy legközelebbi  
szomszédos atom

Ez a kristályszerkezete a Ge-nak és a Si-nak is.

Ha a bázis két különböző atomból áll,  
cinkblende szerkezet: ZnO, GaAs, GaP, InSb,  
InP kristályszerkezete.

A gyémánt kristályszerkezet más szögből nézve



## *Térfogati atomsűrűség (koncentráció)*

### *Feladat:*

A Si rácsállandója 0,543 nm. Mekkora az atomok térfogati sűrűsége?

### *Megoldás:*

Lapcentrált köbös rács, egy atomos bázis esetén a kristálycellára jutó atomok száma:

A cella csúcsában lévő atomok 8 kristálycella között oszlanak meg, 8 csúcs van, egy cellára 1 atom jut.

A cella lapjain lévő atomok 2 kristálycella között oszlanak meg, 6 lap van, egy cellára 3 atom jut.

Az összes egy cellára jutó atomok száma  $1+3=4$

Két atomos bázis esetén (gyémánt rács!) az egy cellára jutó atomok száma ennek kétszerese: 8.

A térfogati sűrűség az atomok száma osztva a cella térfogatával (a rácsállandó köbével):

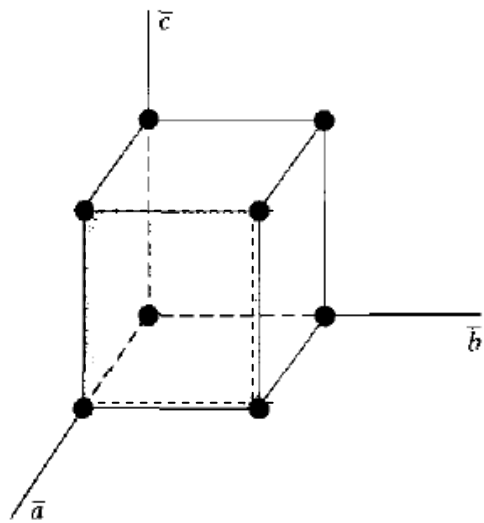
$$8/(5.43 \times 10^{-10})^3 \text{ m}^{-3} = 5,00 \times 10^{28} \text{ m}^{-3} = 5,00 \times 10^{22} \text{ cm}^{-3}$$

# Kristálytani síkok és irányok

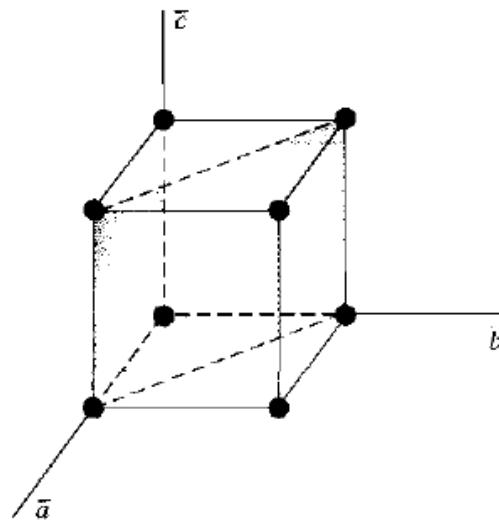
A kristály irányfüggő (anizotróp) tulajdonságokkal rendelkezik. Fontos az egyes síkok és irányok egyértelmű meghatározása.

*Miller indexek*

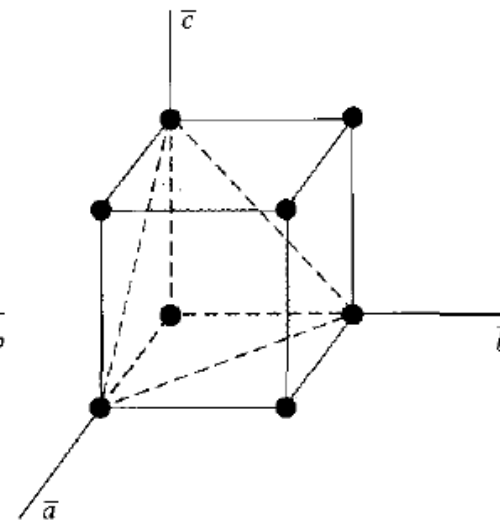
*Síkok:*  $(s/h \ s/k \ s/l)$ , ahol  $h$ ,  $k$  és  $l$  értéke a rácsvektorok irányában képzett koordinátarendszer és a sík tengelymetszeteinek és az adott rácsvektoroknak az aránya,  $s$  értéke pedig 1 vagy a  $h$ ,  $k$  és  $l$  érték legkisebb közös többszöröse.



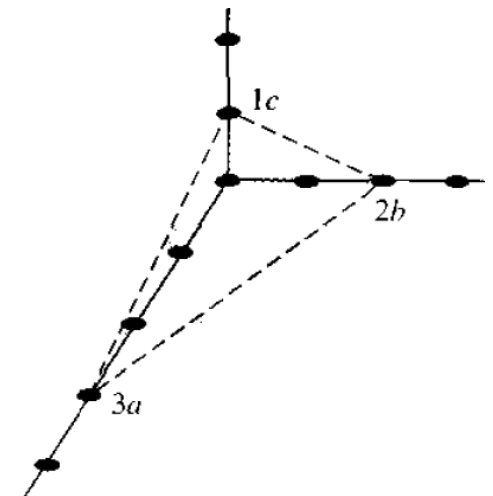
(100)



(110)



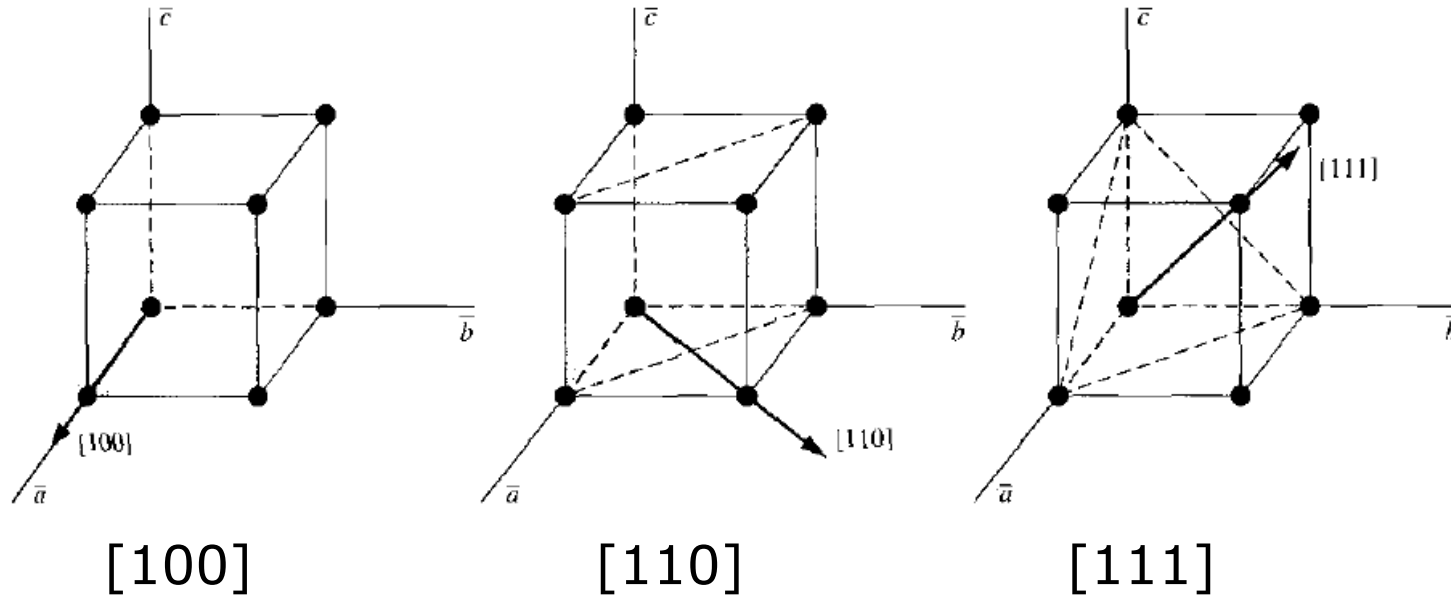
(111)



(236)



*Irányok:*  $[h k l]$ , ahol  $h$ ,  $k$  és  $l$  az adott irányú vektornak a rácsvektorok irányaira való vetületeinek aránya. (Tört vetületek esetében megszorozzuk a törtek nevezőjének legkisebb többszörösével.)



Ellentétes irányok:  $[\bar{1} 0 0]$ ,  $[\bar{1} \bar{1} 0]$  és  $[\bar{1} \bar{1} \bar{1}]$

A kristálytani irányok és síkok csak köbös rács esetében merőlegesek egymásra.

A hétköznapi életben nem tapasztaljuk az anizotrópiát, mert az anyagok polikristályosak, a véletlenszerűen orientálódott szemcsék együttes tulajdonságai nem irányfüggőek.

## *Felületi atomsűrűség*

### *Feladat:*

A Si rácsállandója 0,543 nm. Mekkora az atomok felületi sűrűsége az [100] síkon?

### *Megoldás:*

Lapcentrált köbös rács, az [100] síkra jutó atomok száma:

A cella csúcsában lévő atomok 4 szomszédos kristálycella [100] síkja között oszlanak meg, 4 csúcs van, egy cellára 1 atom jut.

A cella lapján lévő 1 atom teljes egészében az [100] síkra jut.

Az [100] síkra jutó összes atomok száma  $1+1=2$

A felületi sűrűség a síkra jutó atomok száma osztva a sík felületével ([100] sík esetében a rácsállandó négyzetével):

$$2/(5.43 \times 10^{-10})^2 \text{ m}^{-3} = 6,48 \times 10^{18} \text{ m}^{-2} = 6,48 \times 10^{14} \text{ cm}^{-2}$$

## Valós kristályok

Az ideális kristály végtelen kiterjedésű, a valós kristályok véges méretűek: megszűnik a periodicitás, a felületen mások a tulajdonságok.

### *Kristályhibák*

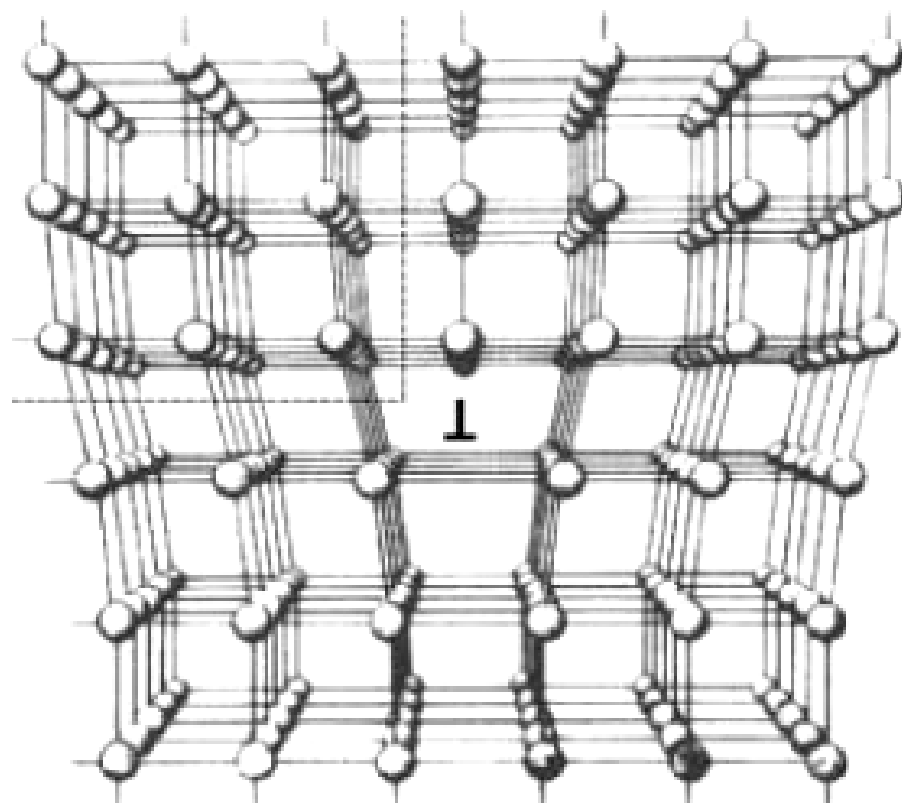
A valós kristály kristályhibákat tartalmaz.

Ponthibák: idegen atom, atomhiány (vakancia), az atom nem a rácspontban van (intersticiális) - a kristályszerkezet eltorzul.

Vonalhibák: diszlokációk.

Felületi hibák: szemcsehatár, repedés.

Térfogati hibák: zárványok, üregek.



2. ábra. Egyszerű kristályos anyag atomjainak sematikus képe egy többlet betölt atomsíkkal. A betölt atomsík határoló éle, amit a fordított T jelez, egy éldiszlokáció. A szaggatott vonallal jelölt bal felső rész hibátlan, tökéletes kristály.

## *Rácsrezgések*

Az atomok nincsenek nyugalmi helyzetben, harmonikus rezgőmozgást végeznek. Ez átadódik egyik atomról a másikra - hullámok. Fő oka a hőmozgás, de egyéb rezgések is lehetnek, pl. hangterjedés.

Módusok:

Optikai – fél perióduson belül a szomszédos atomok ellenkező irányban térnek ki.

Pl. ionos kristályokban elektromágneses gerjesztés hatására.

Akusztikus - fél perióduson belül szomszédos atomok azonos irányban térnek ki.

Mind az optikai, mind az akusztikus rezgések lehetnek longitudinálisak és transzverzálisak.

Az anyagnak kettős természete van: hol hullámként, hol részecskeként viselkedik. A rácsrezgésekhez is hozzárendelhetők részecskék, amiket *fononnak* neveznek.

## Ellenőrző kérdések:

Mi a különbség a kristályszerkezet és a rácsszerkezet között?

Mi az összefüggés a bázis és a kristályszerkezet között?

Mi az elemi cella?

Mi a fonon?

Mi a rácсреzgések leggyakoribb oka?

Köbös rácsszerkezet esetén merre mutat az  $[111]$  irány?

Mi a translációs vektor a kristálytanban?

Mi a különbség az optikai és az akusztikus fononok között?

Miért izotrópok általában a fémek tulajdonságai?

Mit mutatnak meg a Miller-indexek?

Mi a kristály?

Milyen szimmetriával rendelkezik minden kristály?

Miben tér el a valós kristály az ideálistól?

Mi a különbség a Si és a GaAs rácsszerkezete között?

Mi a különbség a gyémánt és a szilícium rácsszerkezete között?

Milyen kristályszerkezetben kristályosodik a szilícium?

Mi a különbség a Si és a GaAs kristályszerkezete között?

Mi a különbség a GaAs és a gyémánt kristályszerkezete között?

Mi a különbség a longitudinális és transzverzális hullám között?

Hogy határozzák meg a térfogati és felületi atomsűrűségeket?