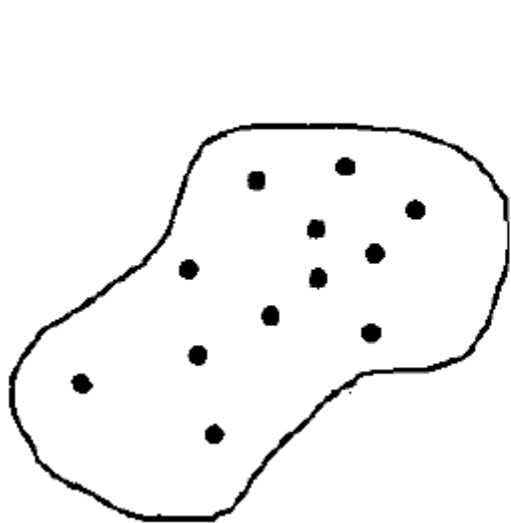


Kristálytani összefoglaló

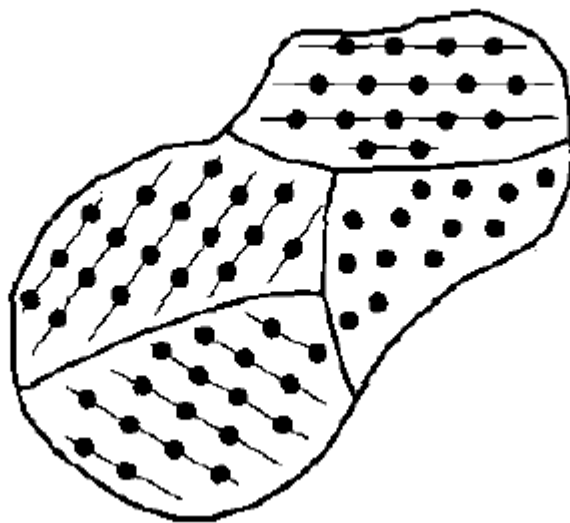
A négy ismert halmazállapot: plazma, gáz, folyadék, szilárd.

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

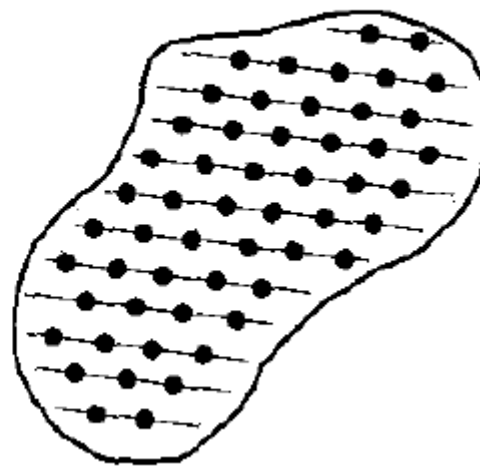
Kristály: az atomok szabályos periodikus térbeli elhelyezkedése -
kristályszerkezet.



Amorf



Polikristály

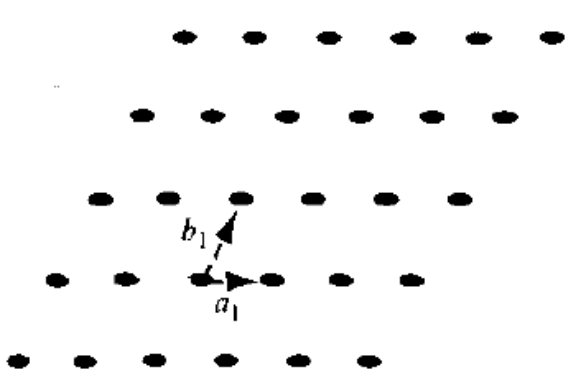


Egykristály

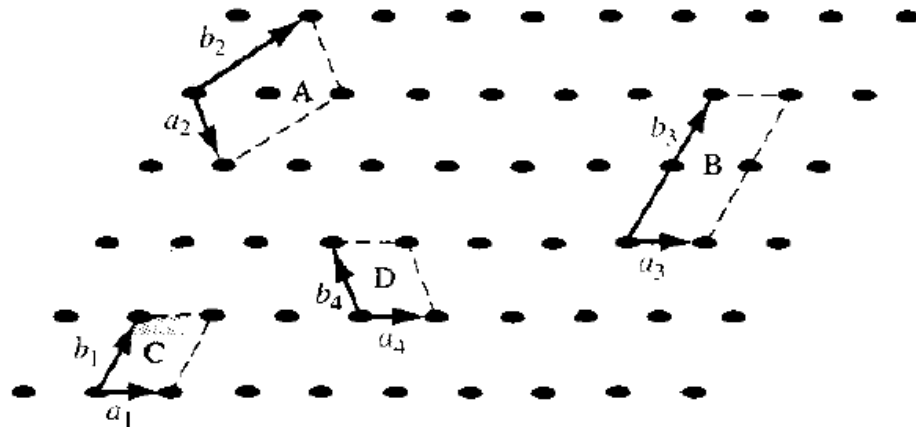
Rácsszerkezet

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 kiterjedési irányba összekötő vektorokat rácsvektoroknak vagy eltolási vagy transzlációs vektoroknak nevezzük. A három rácsvektor által határolt térfogat a kristálycella. A legkisebb kristálycellát elemi cellának hívjuk. A kristálycellák tetszőlegesen kiválaszthatók.

Kétdimenziós kristályrács



Elemi cella



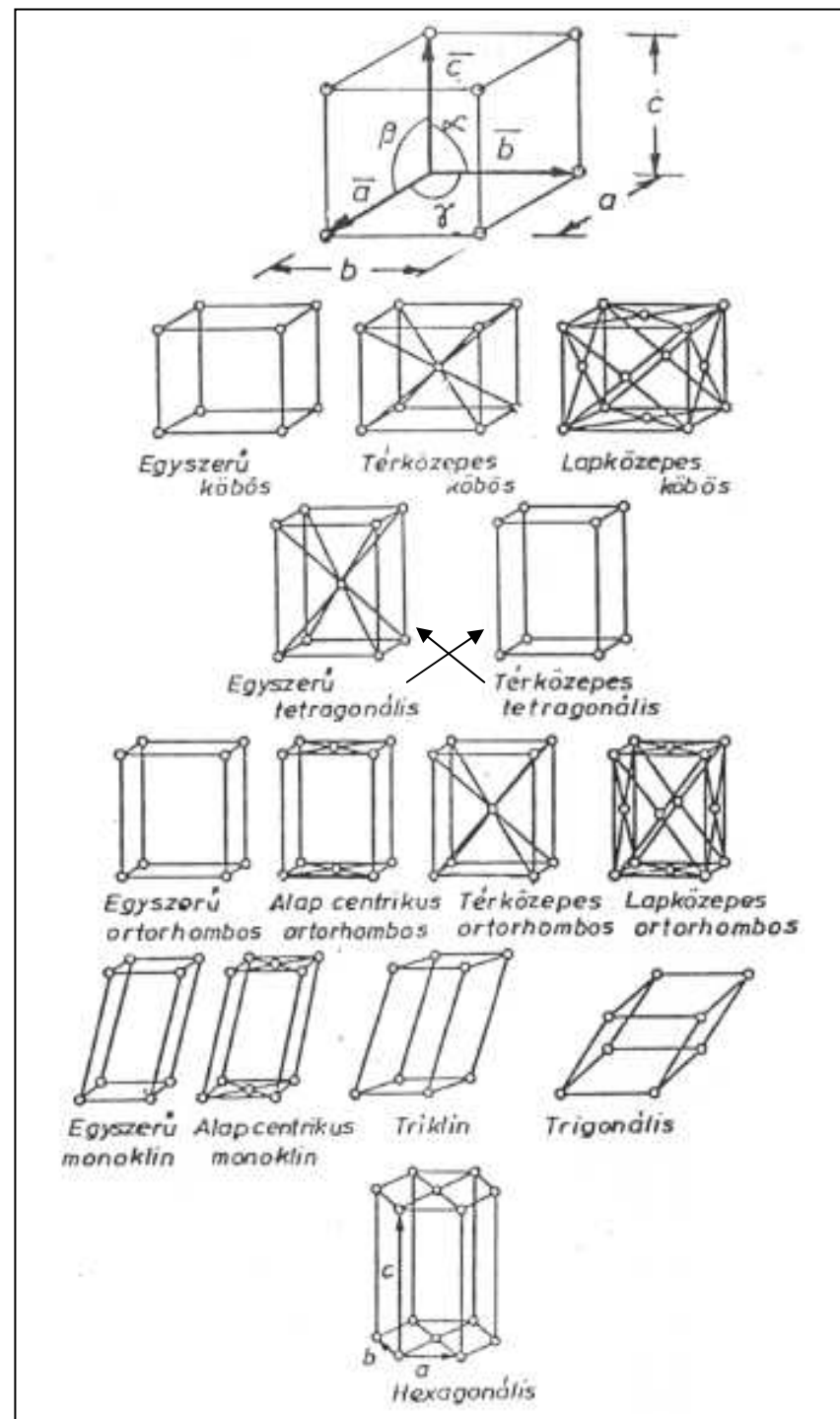
Különböző kristálycellák

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 irányba végtelen sokszor eltoljuk őket.

Vannak olyan rácsszerkezetek, amelyek nemcsak transzlációs szimmetriával, hanem tükrözési és/vagy forgatási szimmetriával is rendelkeznek. Ezeket hagyományos celláknak vagy Bravais rácsoknak nevezik. 14 Bravais rács ismert.

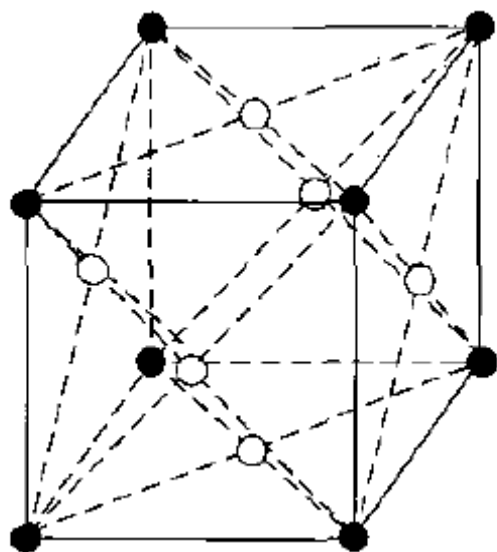
A háromdimenziós rácscella és a 14 hagyományos cella



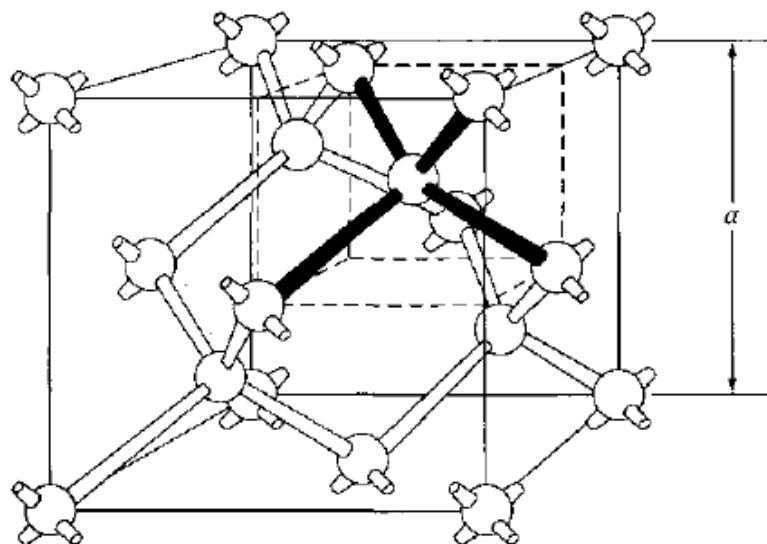
Kristályszerkezet

Minden rácsponthoz hozzárendelhető néhány atom adott térbeli elhelyezkedése, amit bázisnak nevezünk. A rácsszerkezet és a bázis együtt alkotják a kristályszerkezetet.

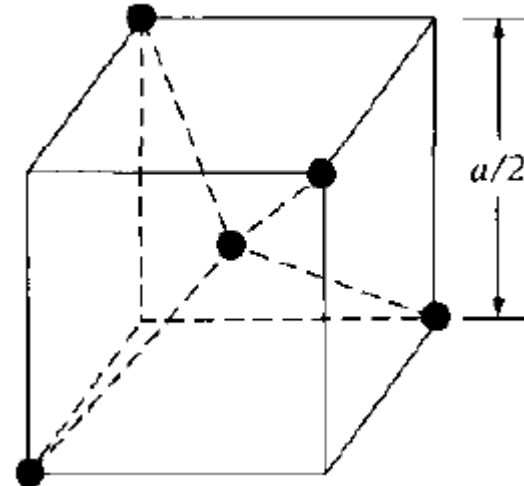
A gyémánt kristályszerkezete: lapközepes köbös, két atomos bázis, mely a testátló irányában áll, az atomok távolsága a testátló $1/4$ része.



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.

Térfogati atomsűrűség (koncentráció)

Feladat:

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

Megoldás:

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

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

A cella lapjain lévő atomok 2 rácscella 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 az egy cellára jutó atomok száma ennek kétszerese: 8.

A térfogati sűrűség az atomok száma osztva a cella térfogatával:

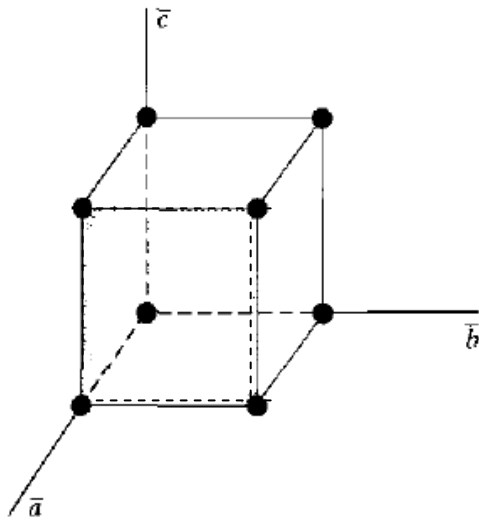
$$8/(5.43 \times 10^{-10})^3 \text{ m}^{-3} = 5,00 \times 10^{28} \text{ m}^{-3} = 5,00 \times 10^{22} \text{ cm}^{-3}$$

Kristálytani síkok és irányok

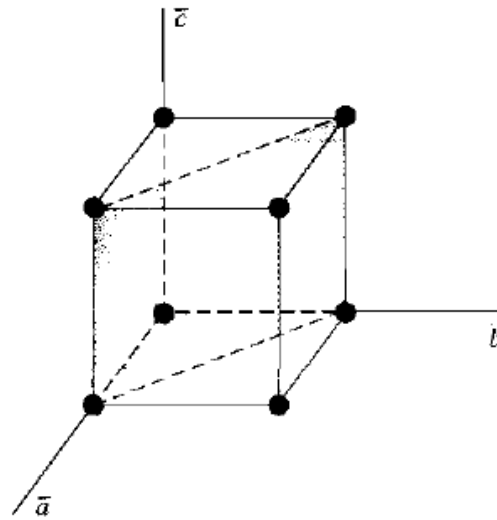
A kristály irányfüggő (anizotróp) tulajdonságokkal rendelkezik. Fontos az egyes síkok és irányok egyértelmű meghatározása.

Miller indexek

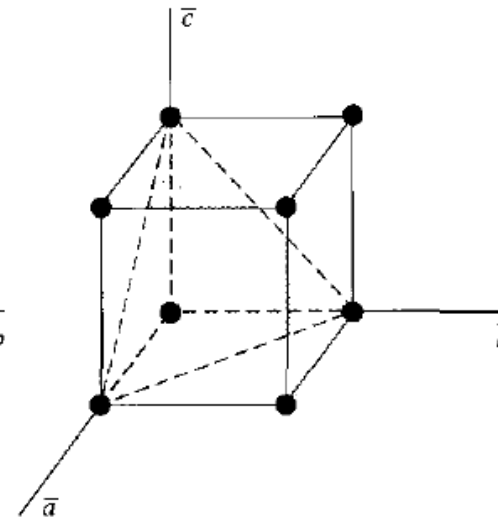
Síkok: $(s/h, s/k, s/l)$, ahol h , k és l a rácsvektorok irányában képzett koordinátarendszer és a sík tengelymetszeteinek és az adott rácsvektoroknak az aránya, s 1 vagy a h , k és l érték legkisebb közös többszöröse.



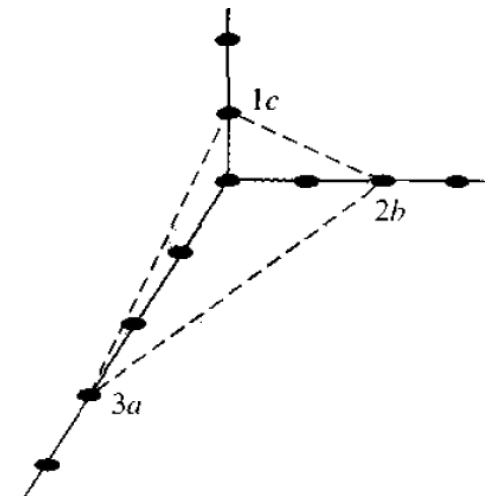
(100)



(110)

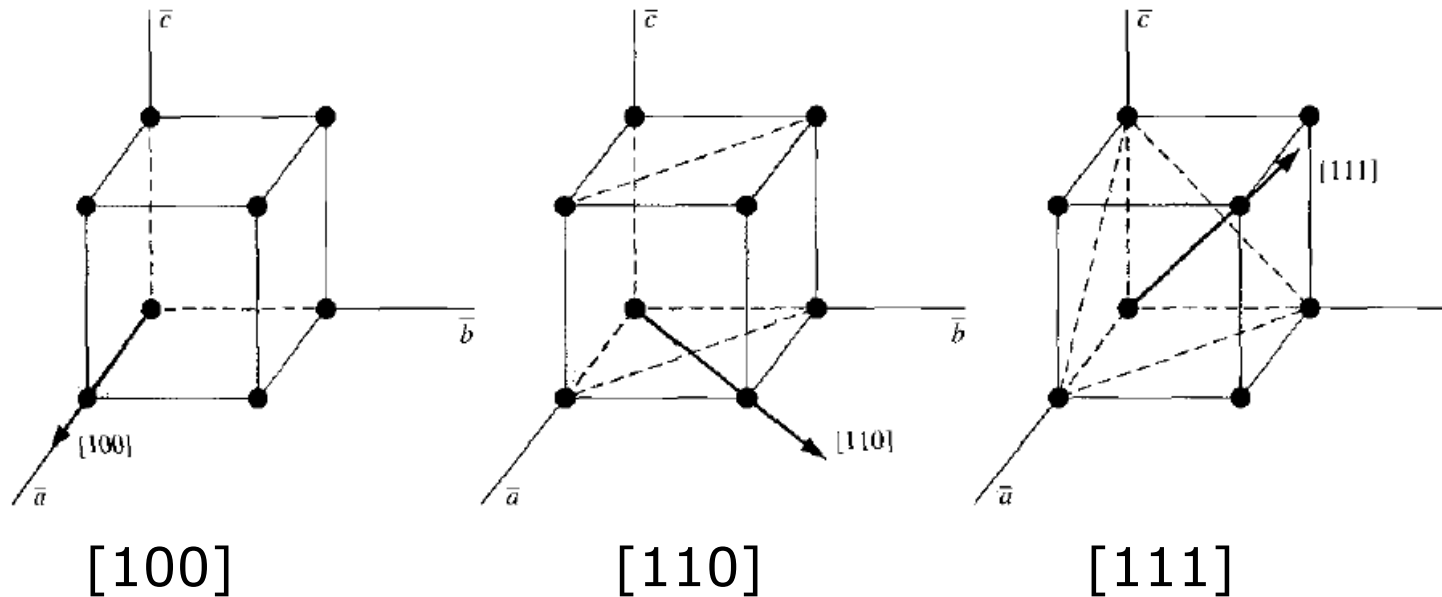


(111)



(236)

Irányok: $[h, k, l]$, ahol h , k és l az adott irányú vektornak a rácsvektorok irányaira való vetületeinek aránya.



Ellentétes irányok: $[\bar{1}00]$, $[\bar{1}\bar{1}0]$ 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 rácscella [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:

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

Valós kristályok

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

Kristályhibák

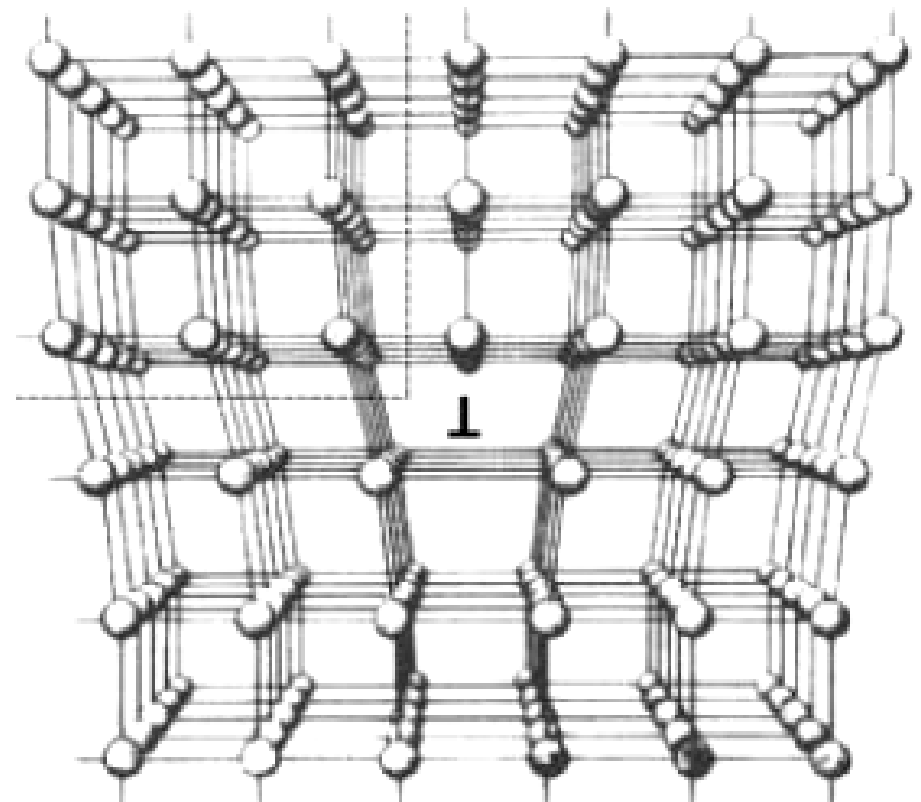
A valós kristály kristályhibákat tartalmaz.

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 - a szomszédos atomok ellenkező irányban térnek ki.

Pl. ionos kristályokban elektromágneses gerjesztés hatására.

Akusztikus - a 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 rácsrezgések leggyakoribb oka?

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

Mi a transzlációs 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?