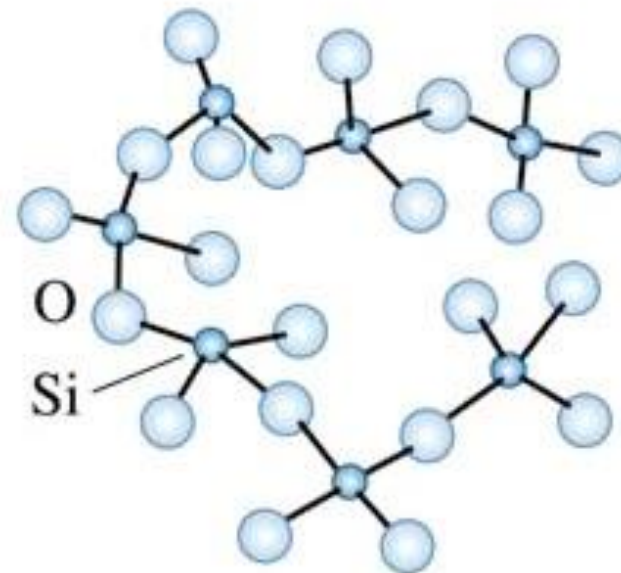
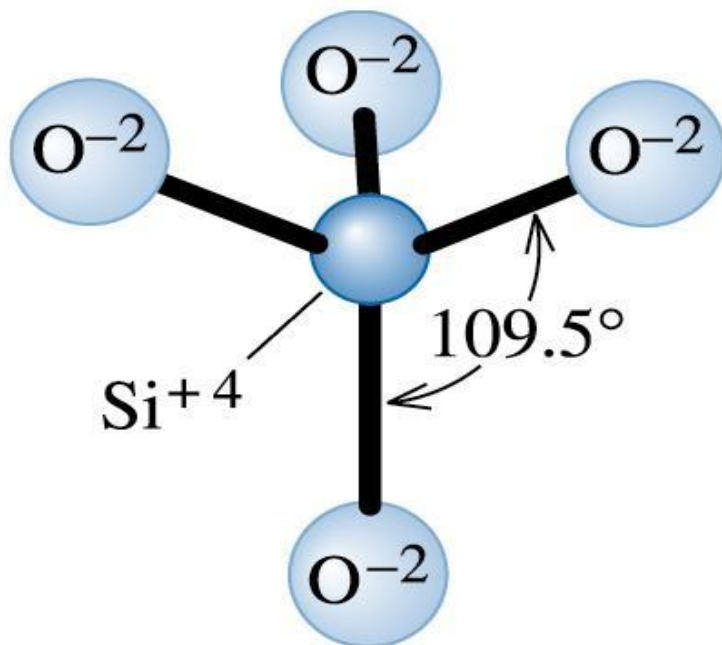


# Kristálytan

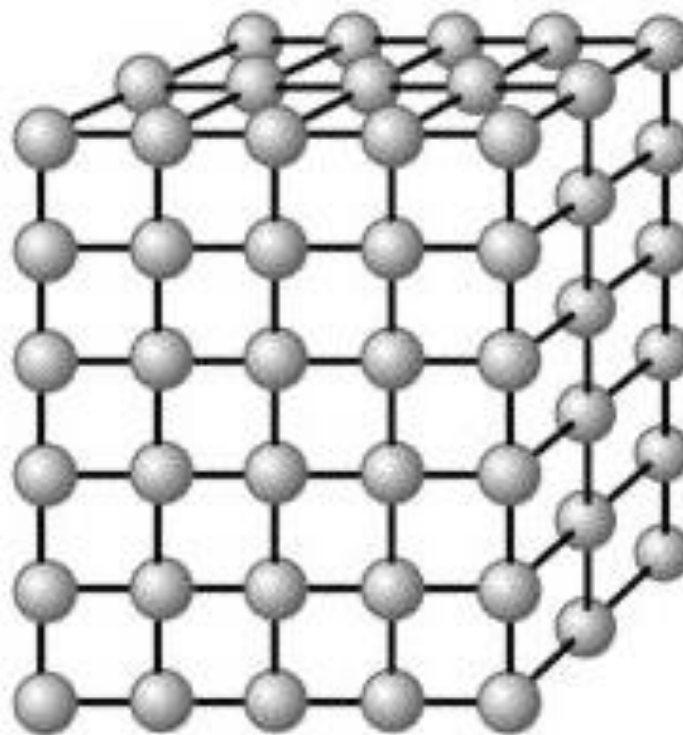
Dr. Szabó Péter János  
[szpj@eik.bme.hu](mailto:szpj@eik.bme.hu)

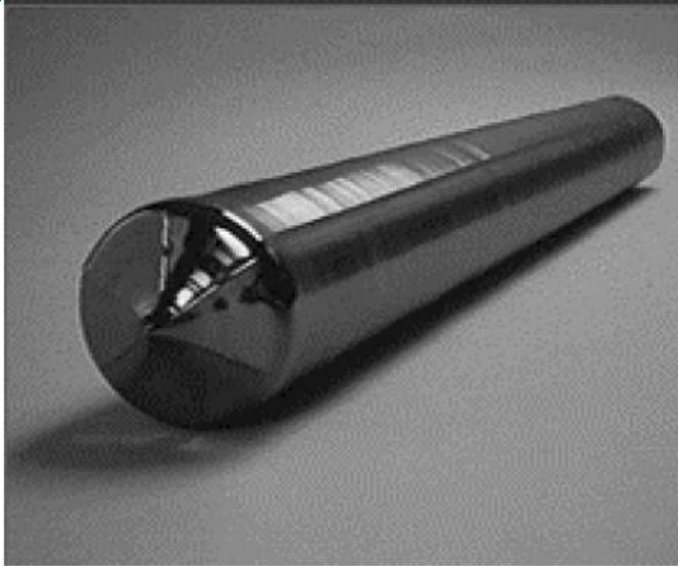
Elektronikai anyagtudomány  
BMEVIETAA01  
2022/2023/2

- Rövid távú rend (amorf anyagok)



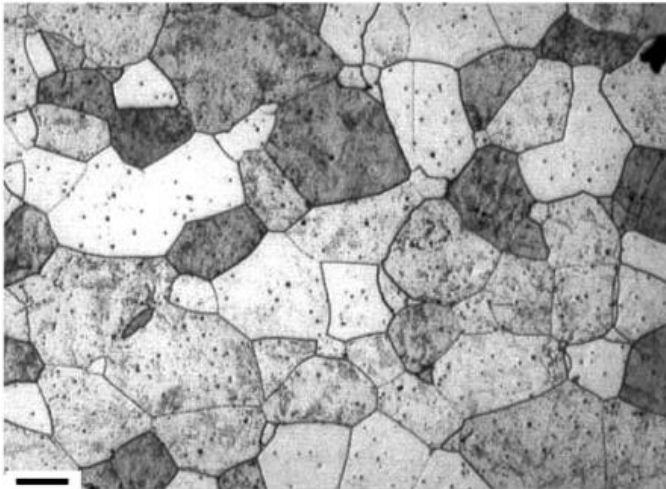
- Hosszú távú rend (kristályok)
- Az atomok elhelyezkedését jól definiált transzlációval írhatjuk le





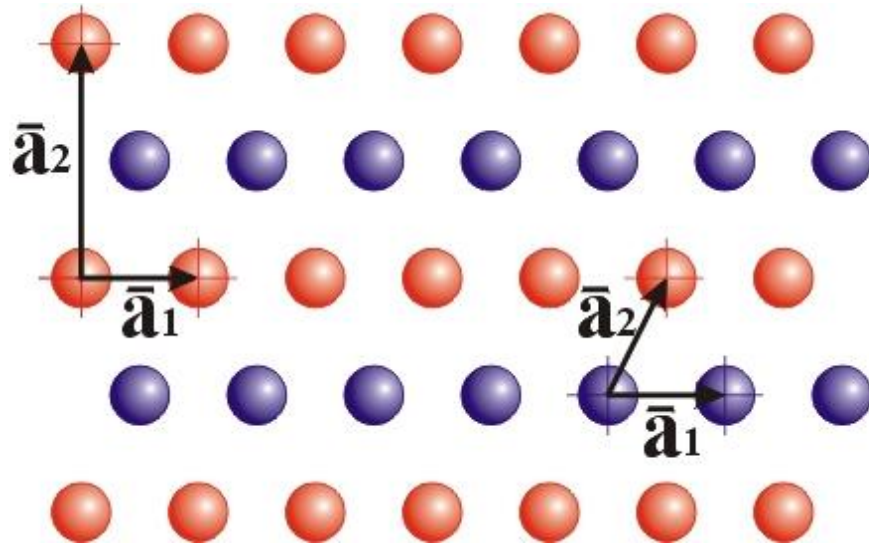
**(a)**

Egykristály



**(b)**

Polikristály



$$\vec{r} = m\vec{a}_1 + n\vec{a}_2$$

**$m; n$ : egész**

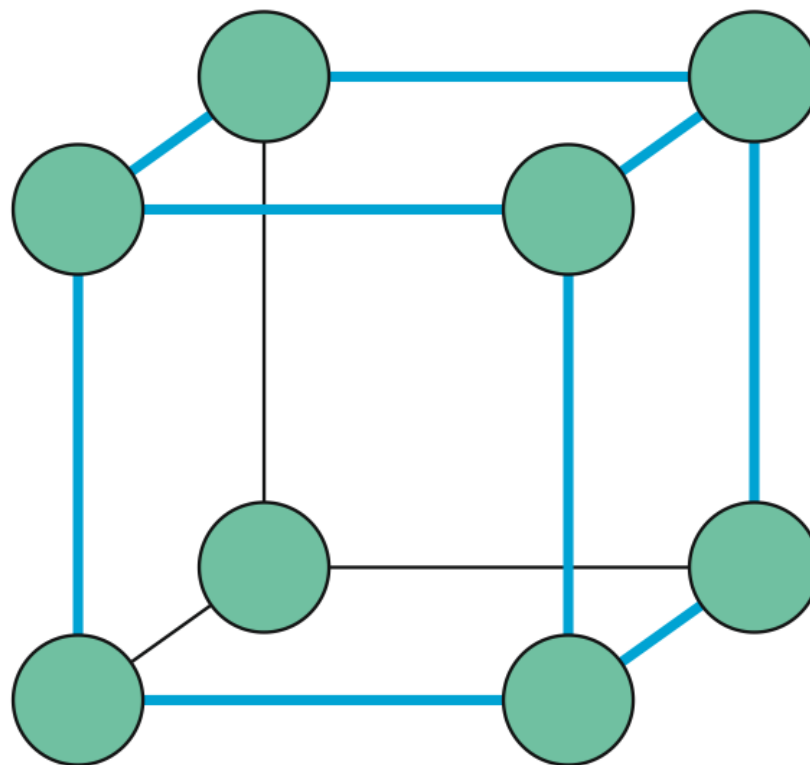
**$\vec{r}$ : transzlációs vektor**

**$\vec{a}_1; \vec{a}_2$ : bázis vektorok**

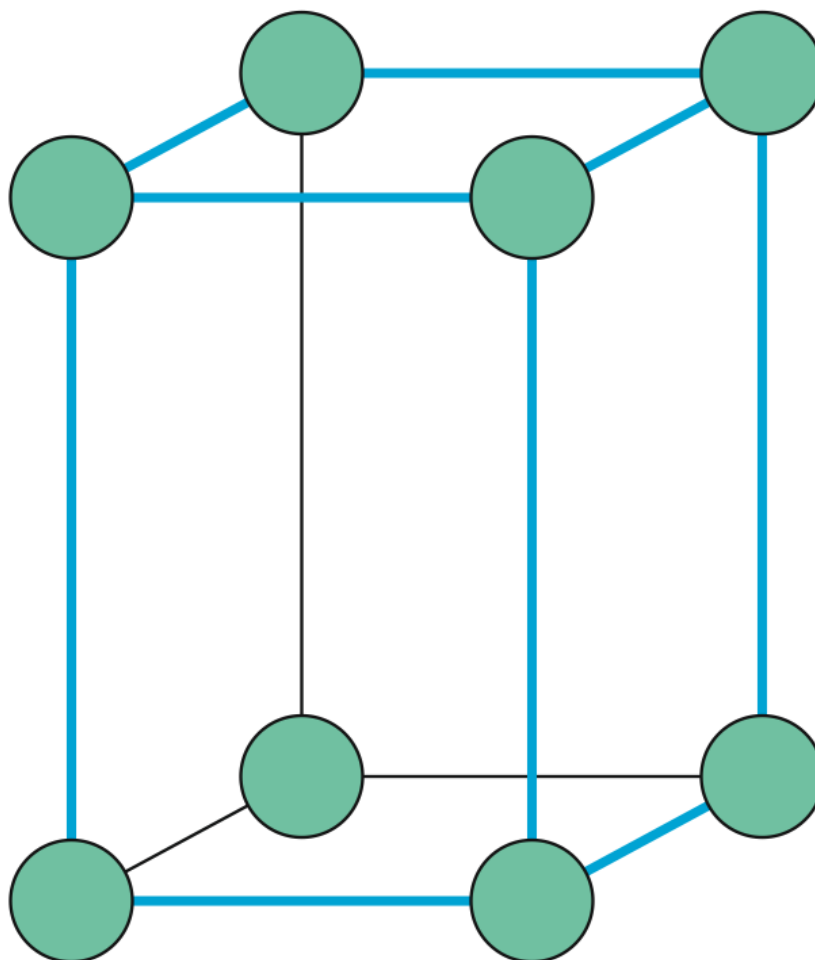
- Transzláció:  $\bar{r} = m\bar{a}_1 + n\bar{a}_2 + p\bar{a}_3$
- Primitív cella: a bázisvektorok által kifeszített térfogatelem. Csak a sarkain tartalmaz atomot, összesen egy atom található benne.
- Összetett rács: egyszerűbb geometriai leírás, több atomot tartalmaz.

Az összes rács besorolható a hét primitív ráctípus egyikébe.

- $a_1 = a_2 = a_3$
- $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
- $P_o$

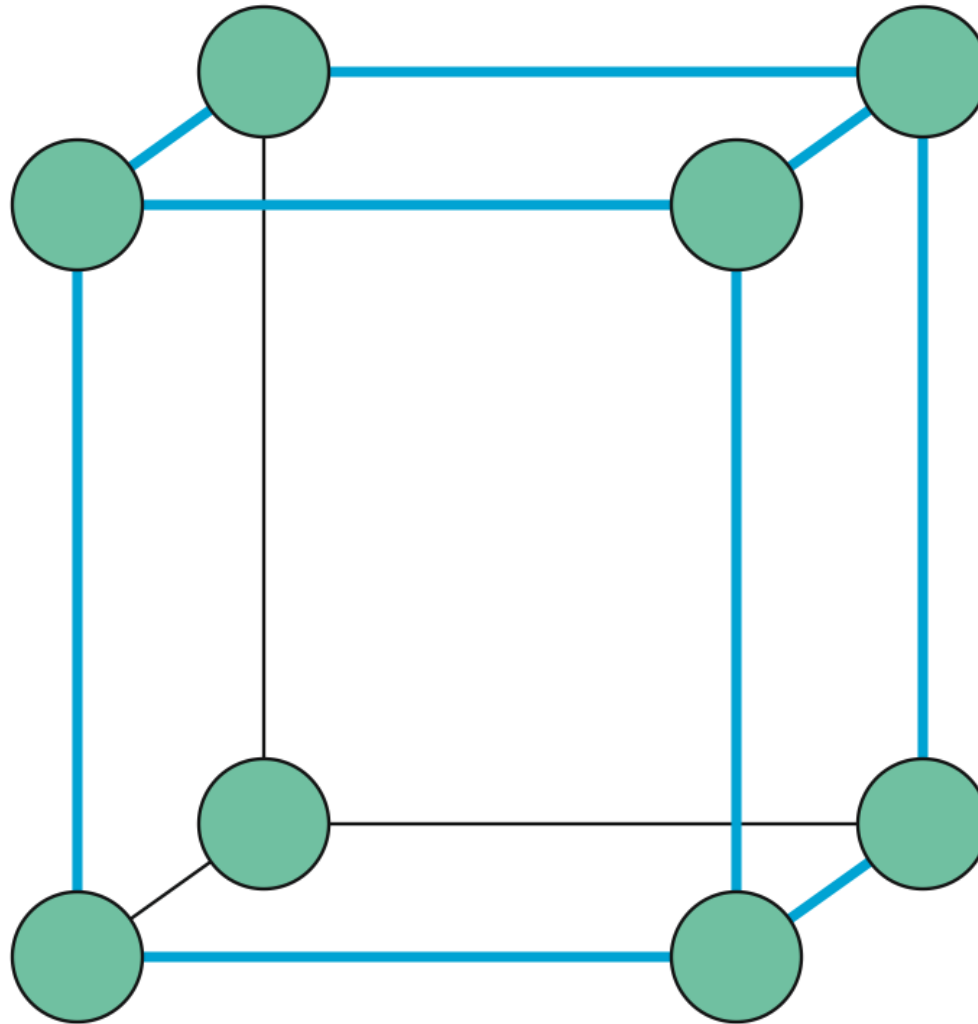


- $a_1 = a_2 \neq a_3$
- $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
- In, Sn (ha  $T > 13^\circ$ )

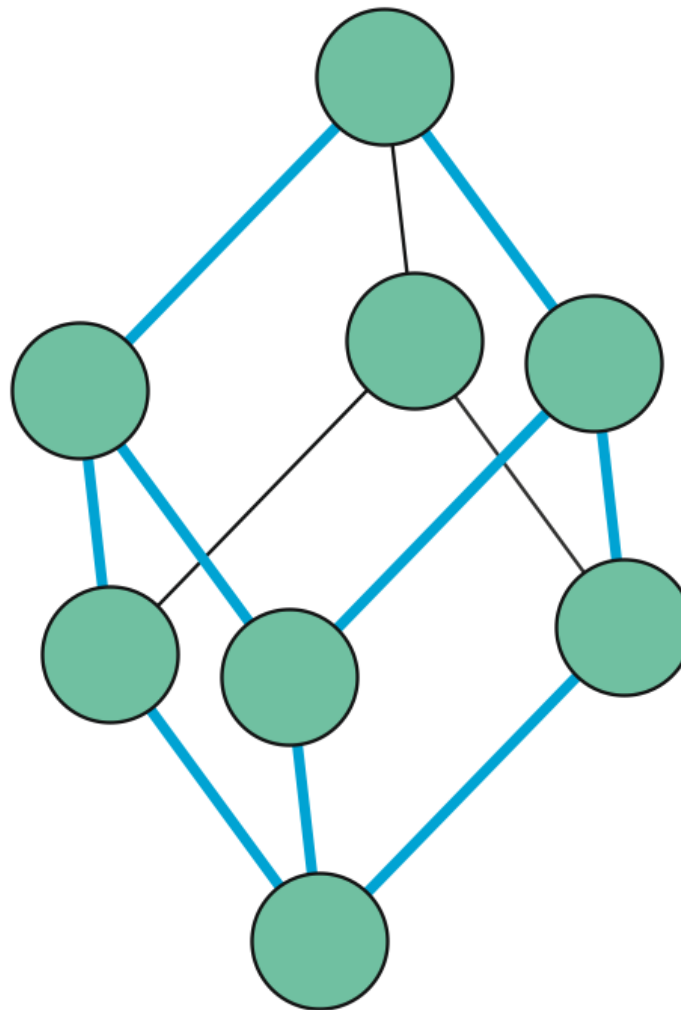




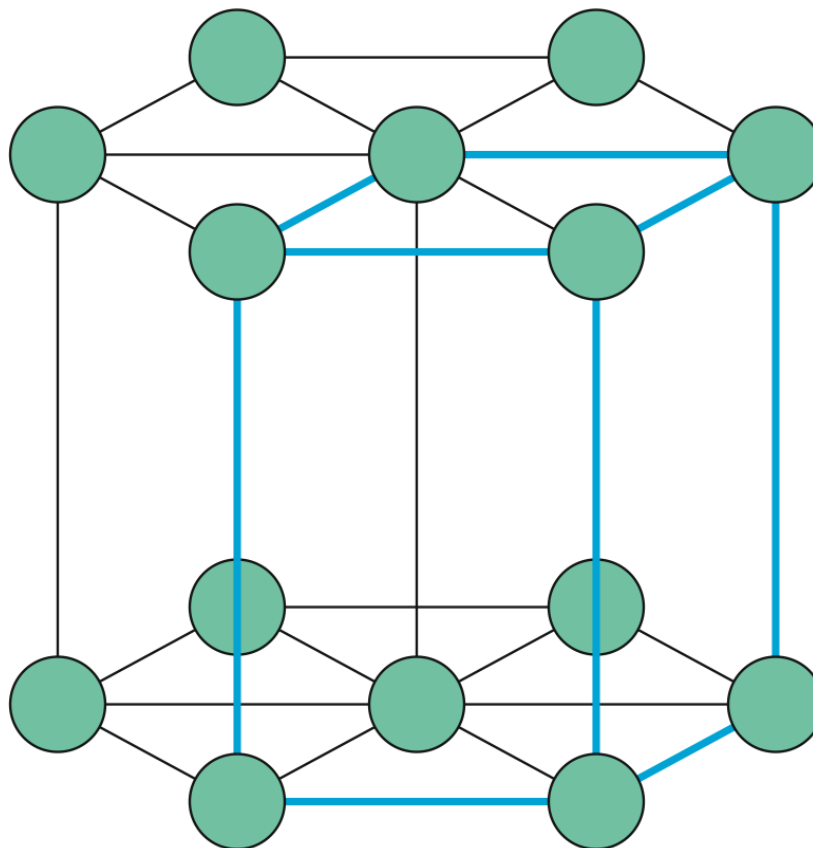
- $a_1 \neq a_2 \neq a_3$
- $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
- Ga, U



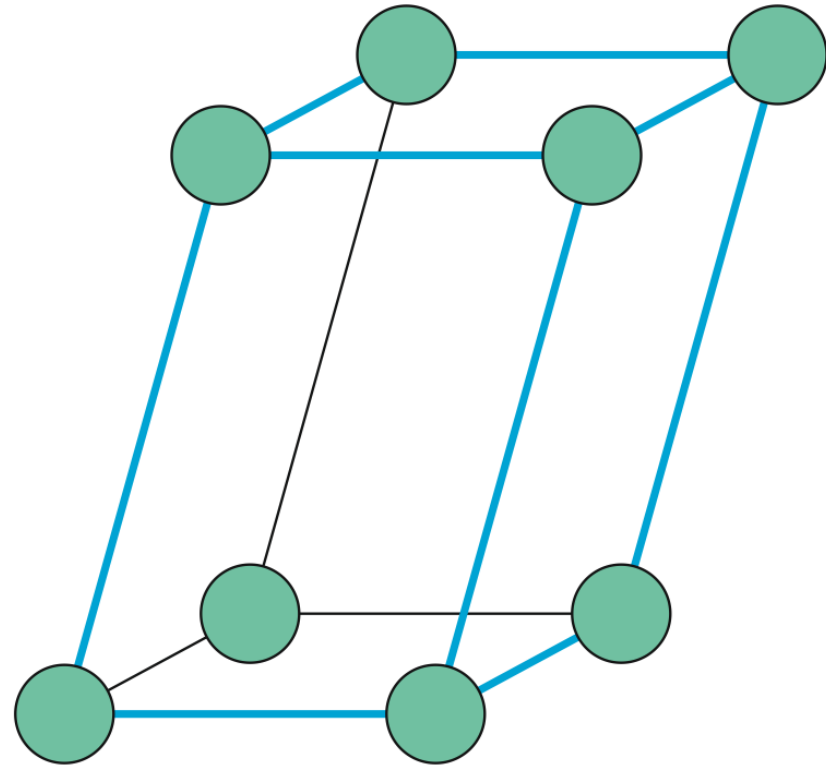
- $a_1 = a_2 = a_3$
- $\alpha \neq 90^\circ, \beta \neq 90^\circ, \gamma \neq 90^\circ$
- Hg, Bi, As



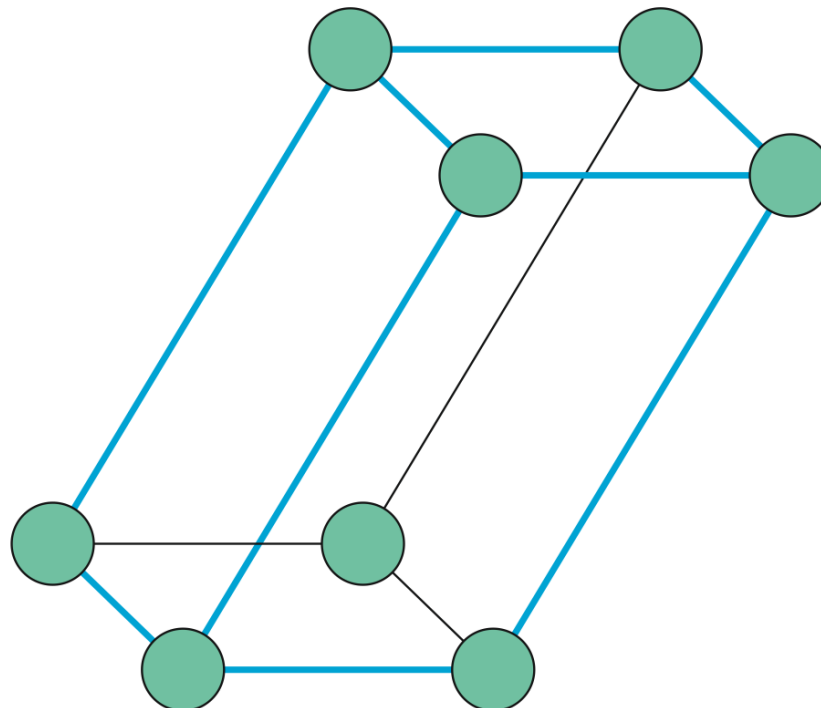
- $a_1 = a_2 \neq a_3$
- $\alpha = \beta = 90^\circ, \gamma = 120^\circ$
- Cd, Mg, Zn, grafit



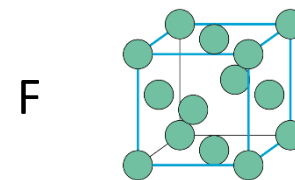
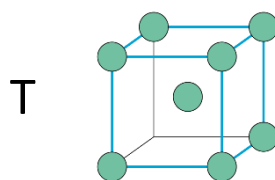
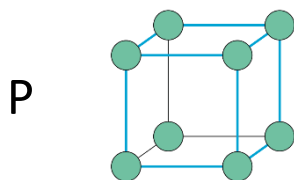
- $a_1 \neq a_2 \neq a_3$
- $\alpha \neq 90^\circ, \beta \neq 90^\circ, \gamma = 90^\circ$
- kén



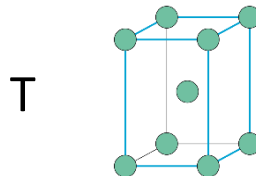
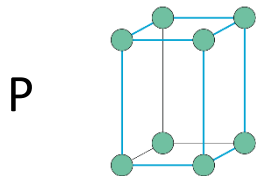
- $a_1 \neq a_2 \neq a_3$
- $\alpha \neq 90^\circ, \beta \neq 90^\circ, \gamma \neq 90^\circ$
- Se, Te



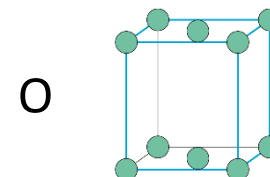
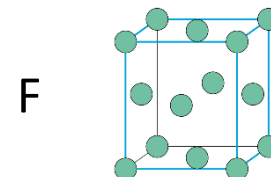
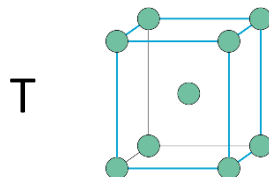
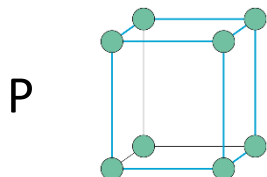
Köbös



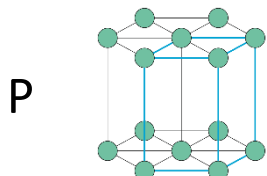
Tetragonális



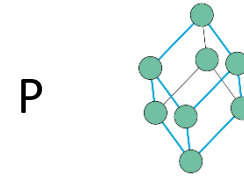
Ortorombos



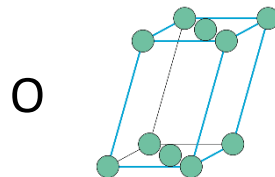
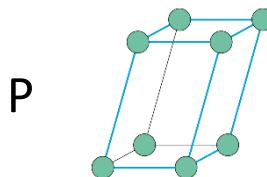
Hexagonális



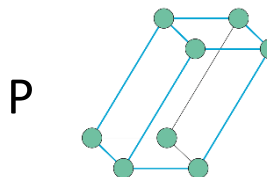
Romboédères



Monoklin

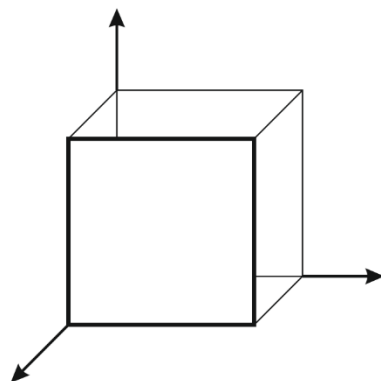


Triklin

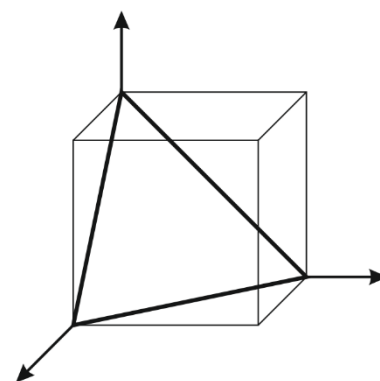


P – egyszerű  
T – térben középpontos  
F – felületen középpontos  
O – oldallapon középpontos  
p.k., t.k.k., f.k.k.

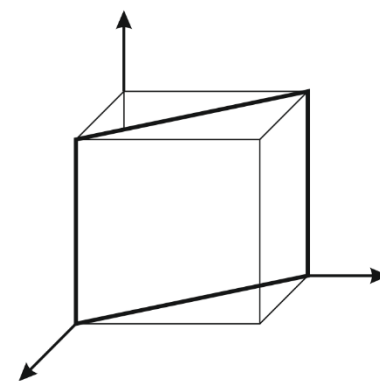
- Pontok
- Irányok
- Síkok



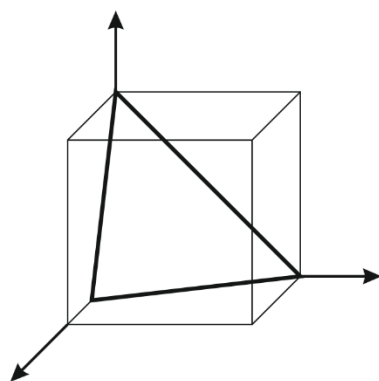
$(100)$



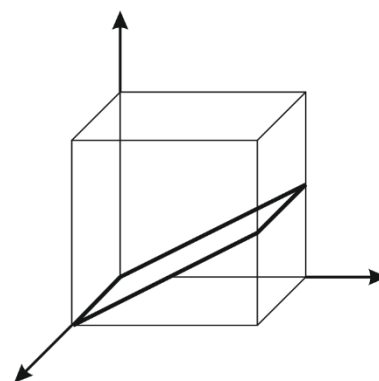
$(111)$



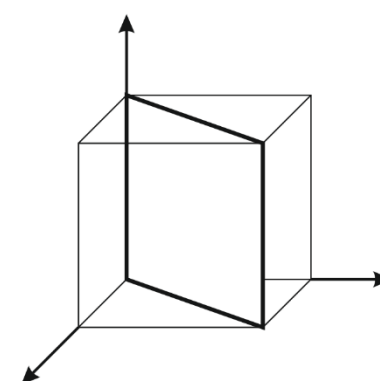
$(110)$



$(211)$

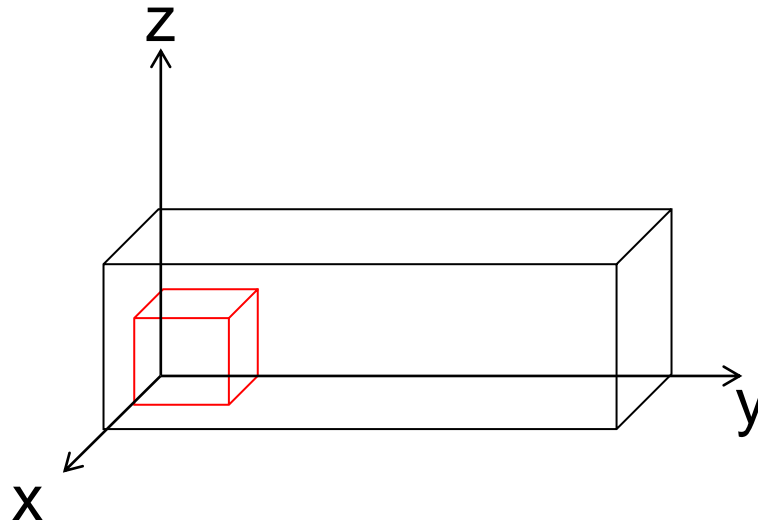


$(01\bar{2})$

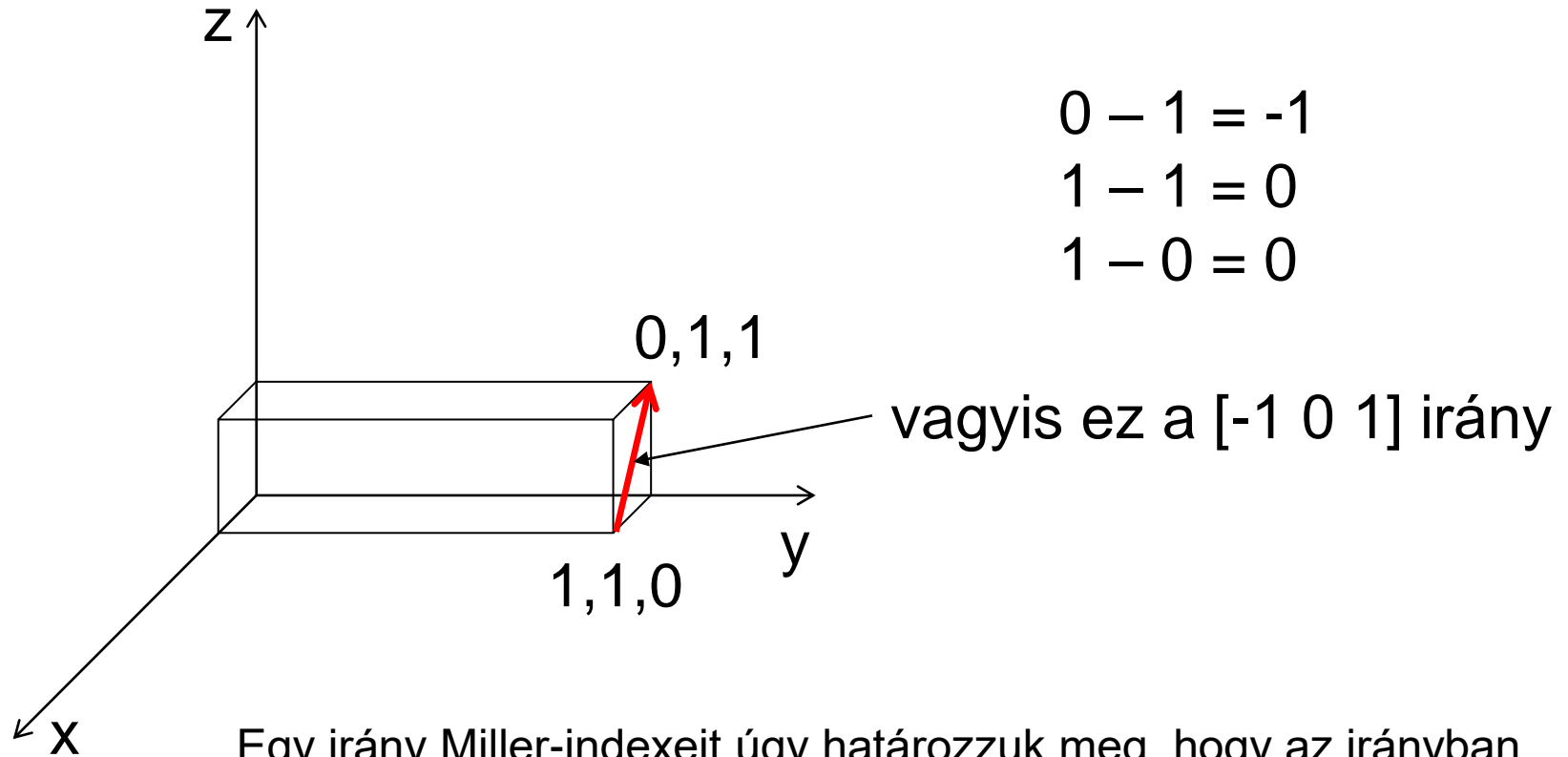


$(1\bar{1}0)$

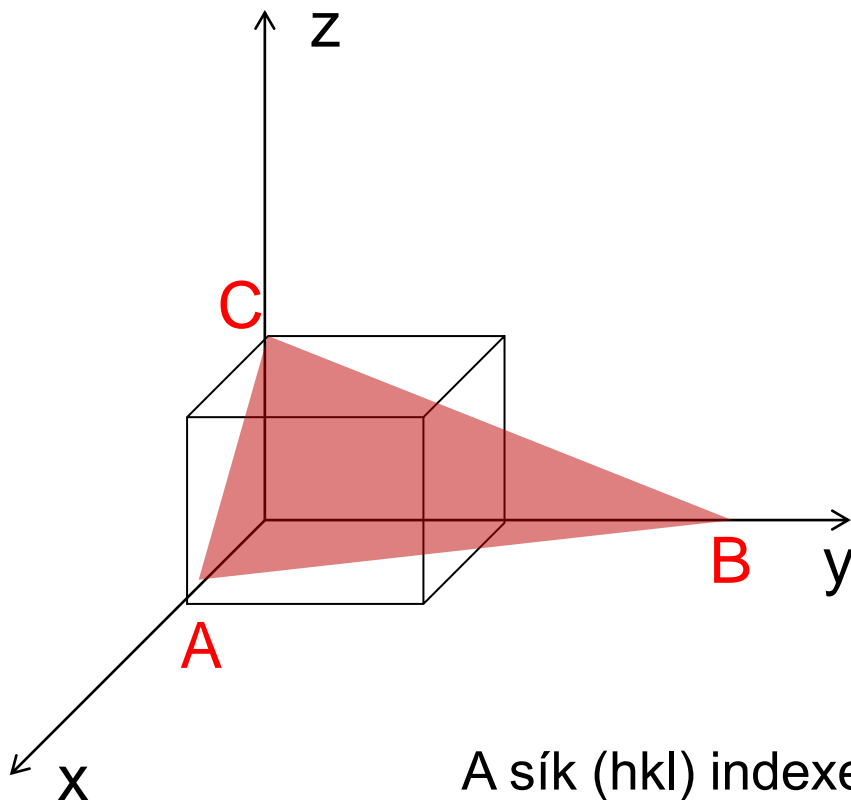
A koordinátatengelyeket normalizáljuk, azaz minden rajtuk mért távolságot elosztjuk az adott koordinátatengelyt definiáló bázisvektor hosszával. Így dimenzió nélküli számokkal tudjuk megadni az egyes pontok koordinátáit a térben.







Egy irány Miller-indexeit úgy határozzuk meg, hogy az irányban definiálunk egy vektort, amelynek végpontjai koordinátáiból tagonként levonjuk a kiindulási pont koordinátáit.



A sík tengelymetszetes egyenlete:

$$\frac{x}{A} + \frac{y}{B} + \frac{z}{C} = 1$$

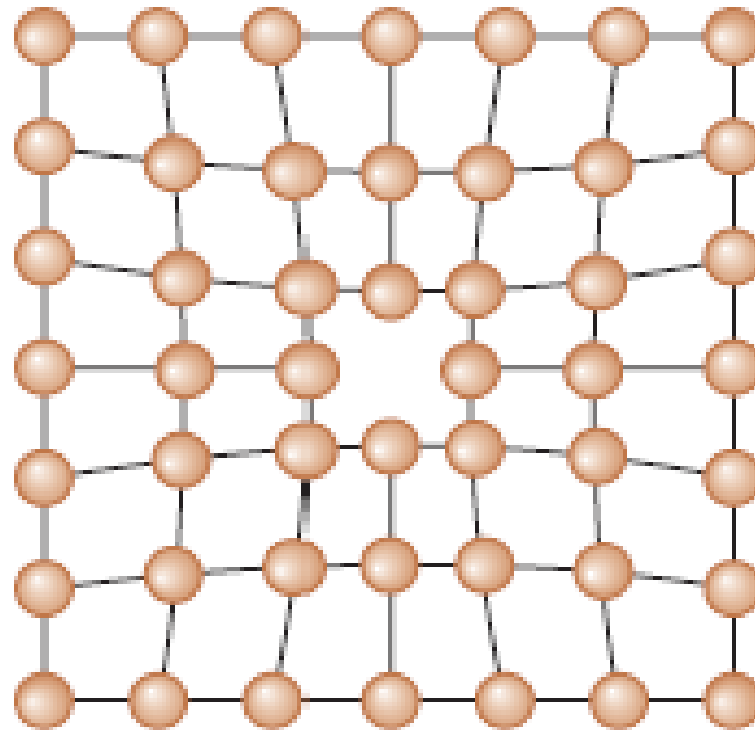
$$h' = \frac{1}{A}, k' = \frac{1}{B}, l' = \frac{1}{C}$$

A sík (hkl) indexeit úgy kapjuk meg, hogy a h', k' és l' számokat beszorozzuk egy alkalmas számmal úgy, hogy egész értéket vegyenek fel.

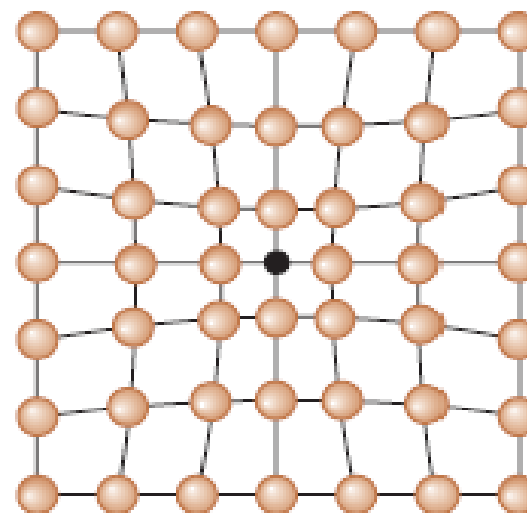
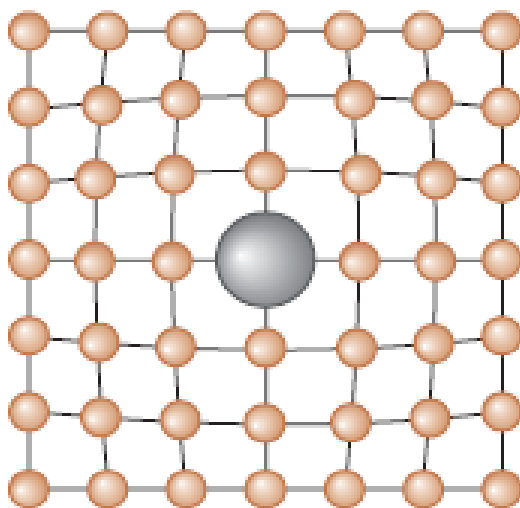
- Gyakorlati fémek szilárdsága kevesebb, mint 1 %-a az ideális modell alapján számítható szilárdságnak
- Tiszta Si villamos vezetőképességét  $10^{-8}$  tömegszázalék bór adalékolása a kétszeresére növeli
- KRISTÁLYHIBÁK

- Ponthibák (0 dim.)
- Vonalszerű hibák (1 dim.)
- Felületszerű hibák (2 dim.)
- Térfogati hibák (3 dim.)

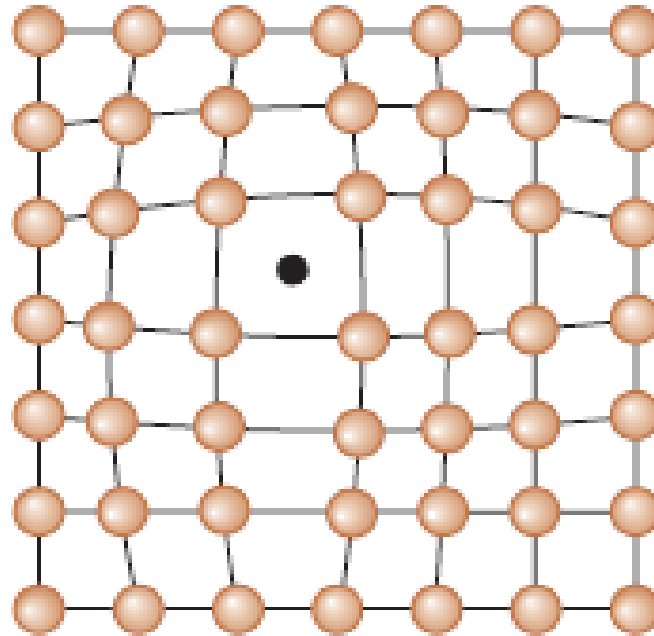
- Vakancia
- Szubsztitúciós atom
- Intersztíciós atom
  - saját
  - idegen



Az alaprács (mátrix) jelentős torzulását okozza.



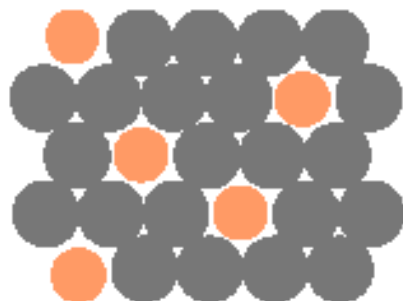
Az alaprács (mátrix) jelentős torzulását okozza.



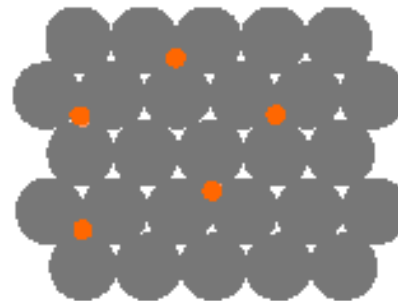
Az alaprács (mátrix) jelentős torzulását okozza.



- Szilárd oldat: alapfém (A) + oldott atom (B)



vagy



Szubsztitúciós szilárd oldat  
(pl. Ni-alapfém + Cu-ötvöző)

Intersztíciós szilárd oldat  
(pl. Fe-alapfém + C-ötvöző)

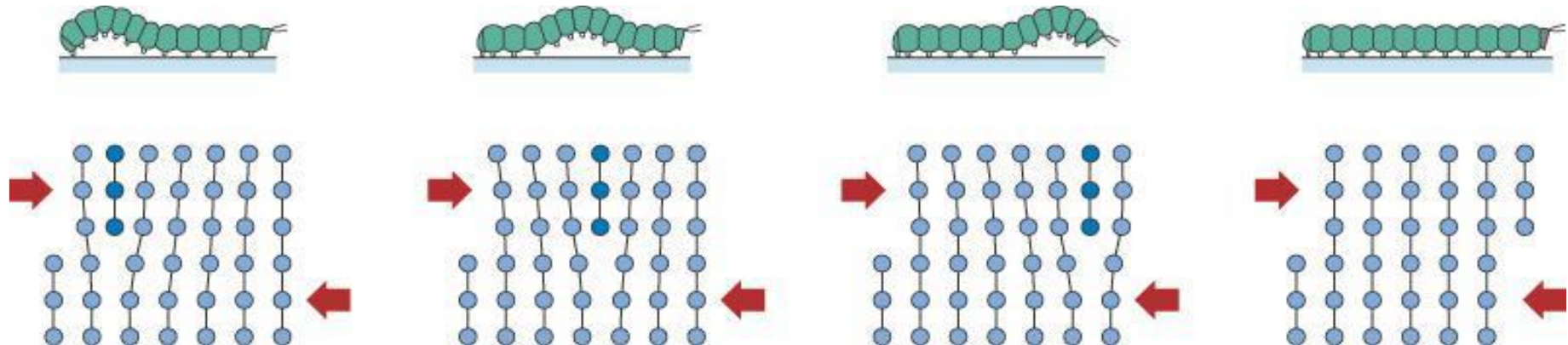
- Szilárd oldatban (A + B) új második fázis is keletkezhet



Második fázisú részecske  
– különböző összetétel  
– különböző szerkezet

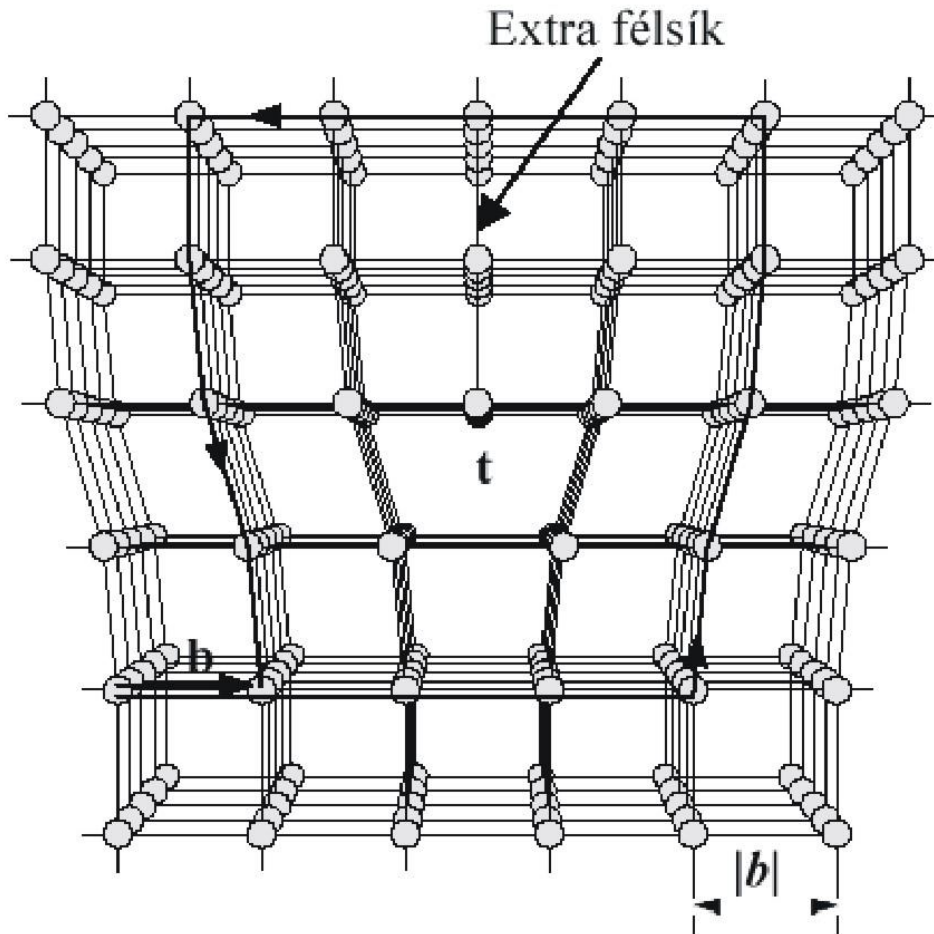
- Fémek elméleti és mért folyáshatára között óriási eltérés, nem magyarázható mérési hibával
- Diszlokációelmélet: az alakváltozás nem egy lépésben történik → diszlokációk mozgása

## A diszlokációk és a hernyó mozgásának analógiája



A diszlokáció Burgers-vektora (**b**) az egy diszlokáció által okozott elemi alakváltozás irányát és nagyságát mutatja meg.





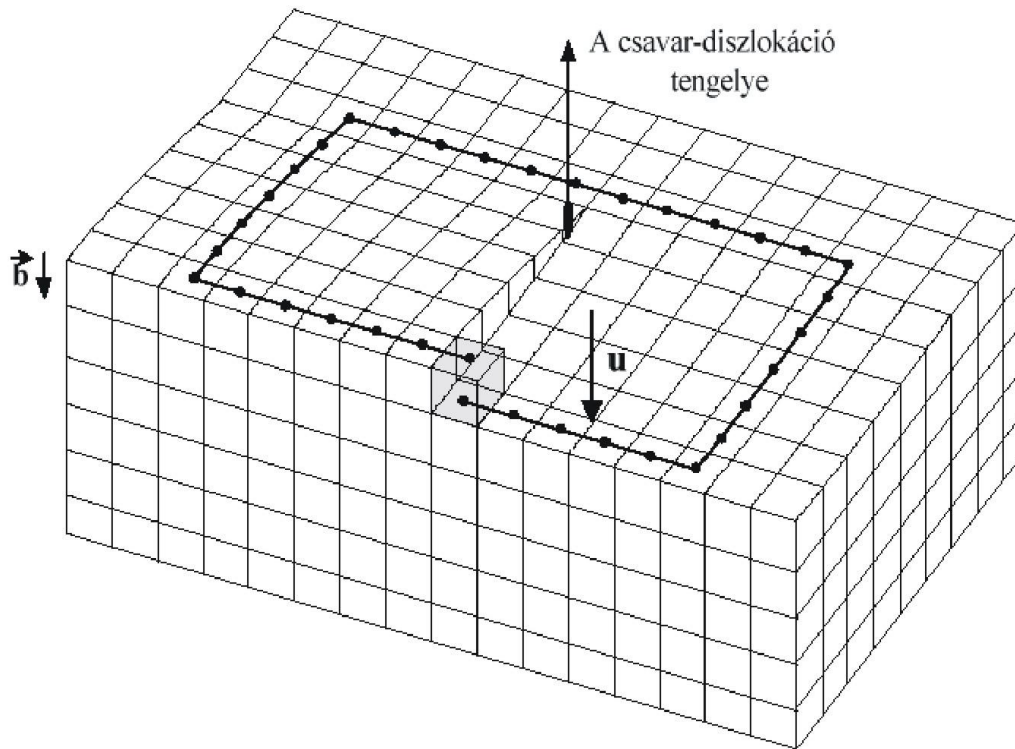
Diszlokáció vonala:  $l$

Csúszósík adott  
 $\Rightarrow$  nem mozgékony

Extra sík

Burgers vektor:  $b$

$$b \perp l$$



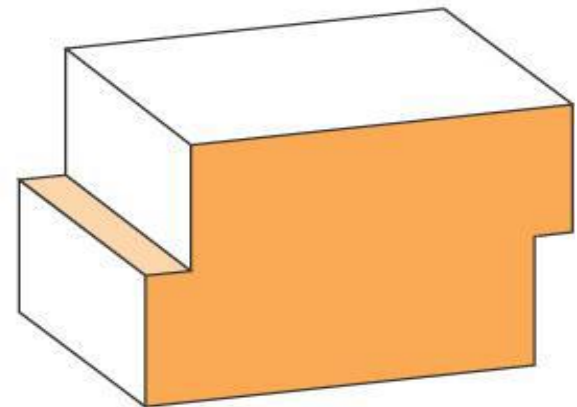
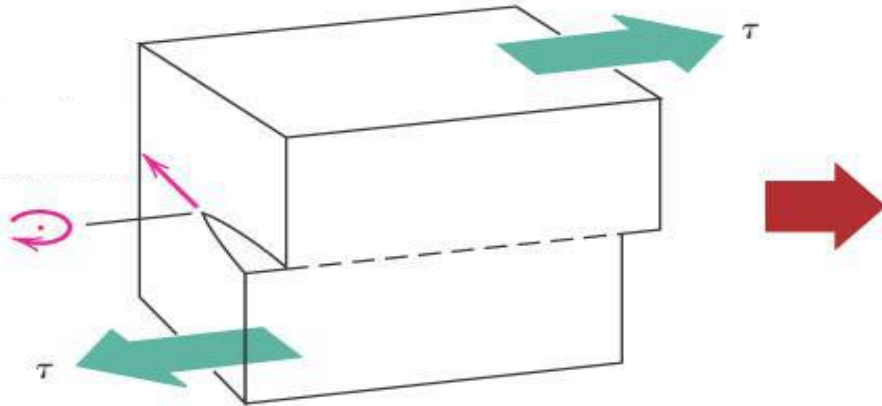
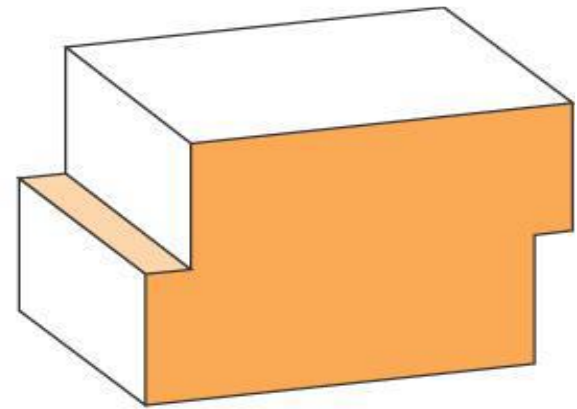
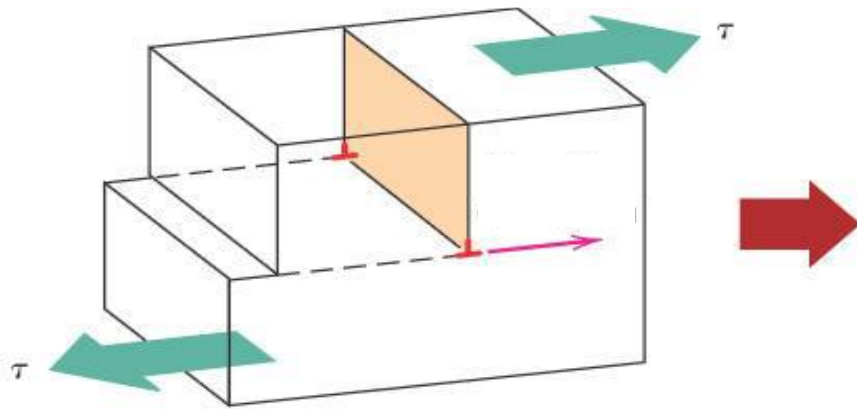
Diszlokáció vonala:  $\mathbf{l}$

Nincs egyértelmű csúszósík  
 $\Rightarrow$  mozgékony

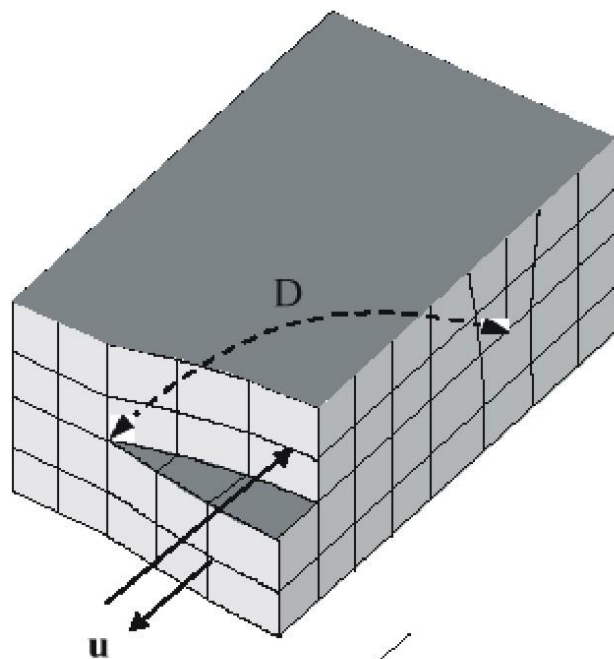
Extra sík nincs !

Burgers vektor:  $\mathbf{b}$

$\mathbf{b} \parallel \mathbf{l}$



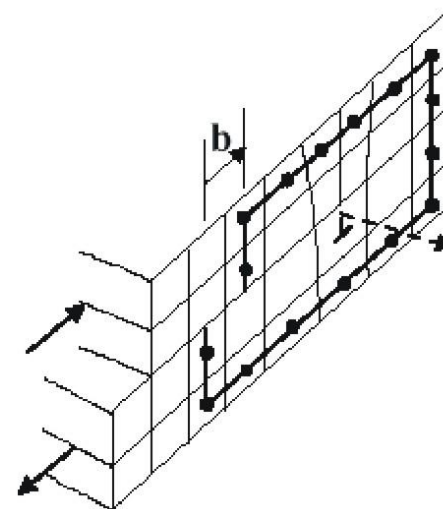
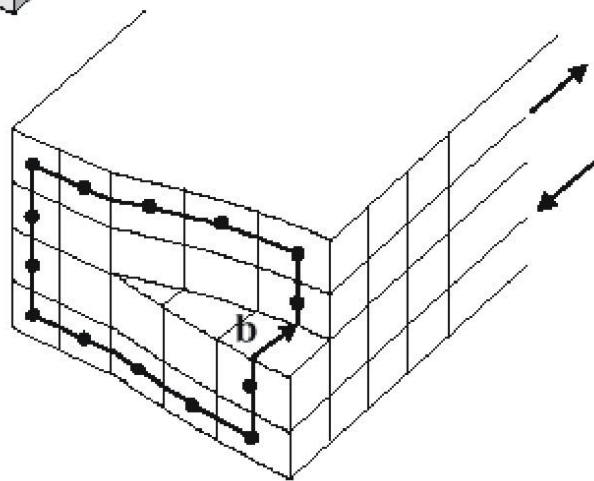




Részleges elcsúszás

Térgörbe hálózat

0 - 90°

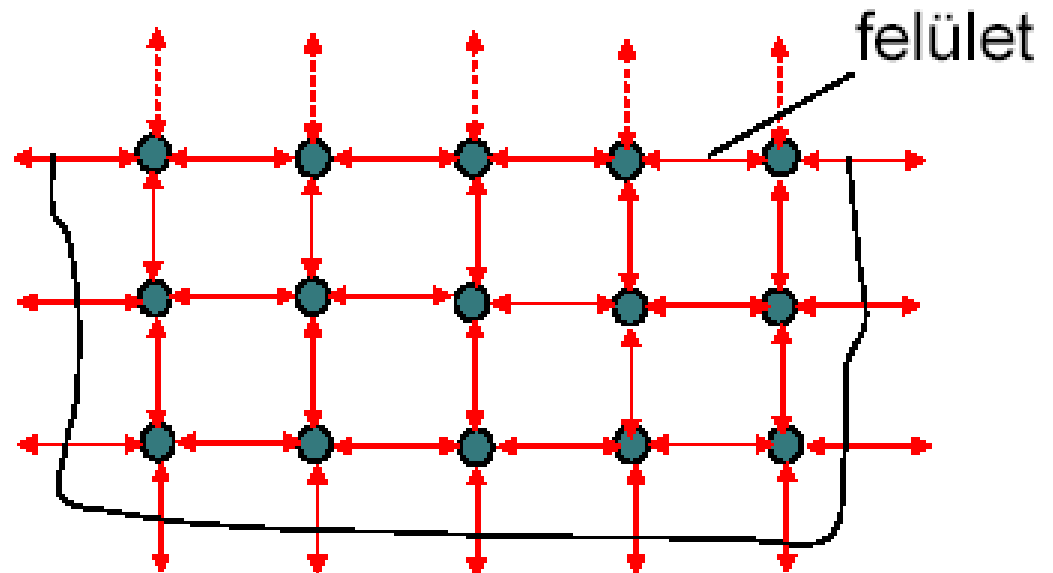


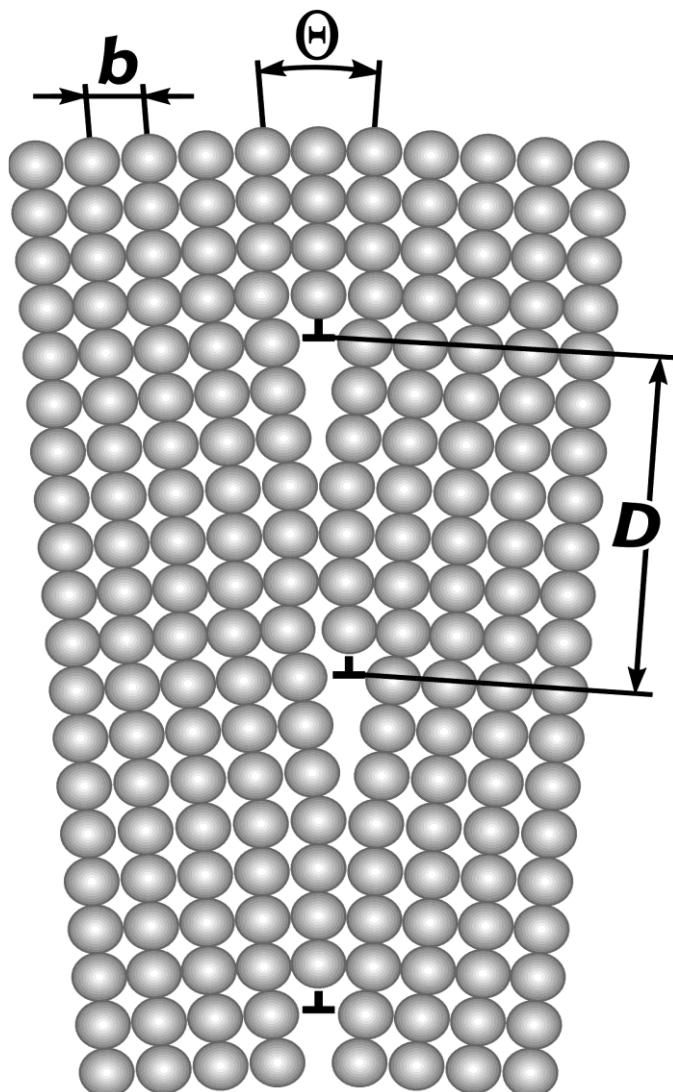


- Diszlokáció: elcsúszott és nem elcsúszott részek határa
- Lineáris (lehet görbe)
- Felületen kezdődik és végződik, vagy kristályban záródó görbe
- Az elmozdulás mértéke a diszlokáció egésze mentén állandó
- Burgers vektor a legsűrűbb irányban fekszik és  $|\mathbf{b}| = d$

- Makroszkopikus felület
- Szemcsehatárok
  - Kíszögű szemcsehatár
  - Nagyszögű szemcsehatár
- Fázishatárok
  - Koherens fázishatár
  - Szemikoherens fázishatár
  - Inkoherens fázishatár
- Ikerhatár
- Rétegződési hiba

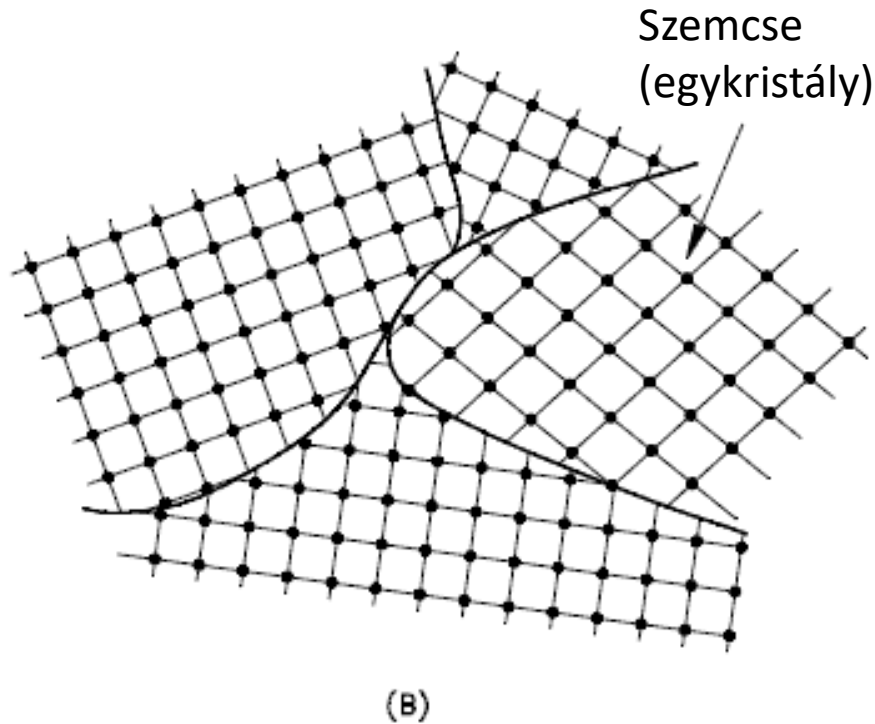
- A kristály felületén az atomok magasabb energiaszinten vannak, mint a kristály belsejében, mivel nem jön létre minden irányban atomi kötés.
- A felület energiaszintje csökken, ha a felülethez újabb atomok kapcsolódnak.
- Oxidrétegek kialakulása.
- Kémiai reakciók.





Azonos előjelű diszlokációk egymás alá rendeződése

$$\Theta < 5^\circ$$

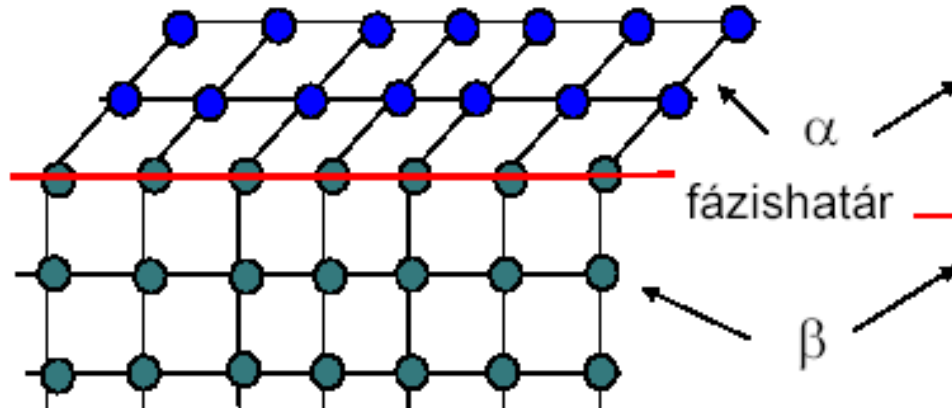


A dermedés során a véletlen orientációjú kristálycsírák összenőnek.

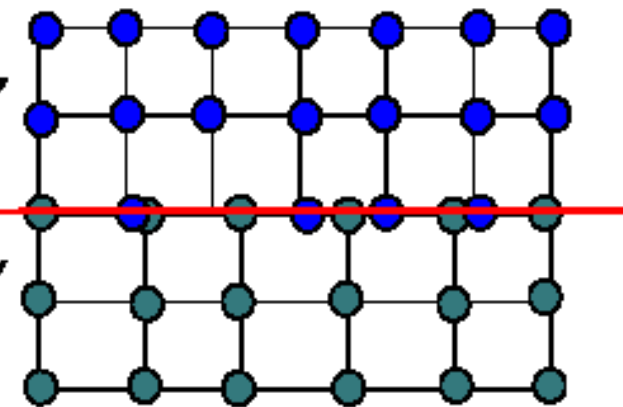
Az egyes szemcsék csak orientációjukban különböznek.

## Koherens

Kis felületi energiájú hiba

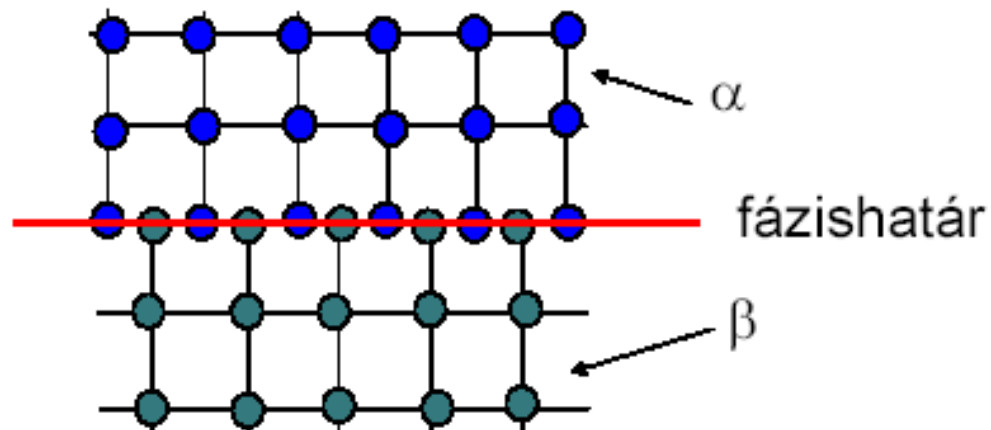


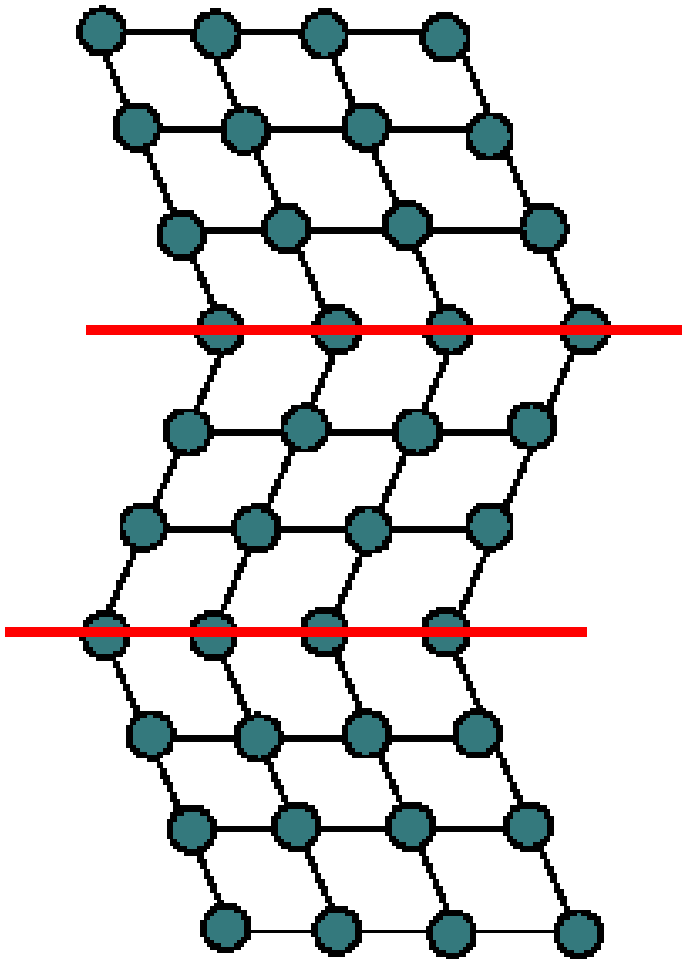
## Szemikoharens



## Inkoharens

Nagy felületi energiájú hiba





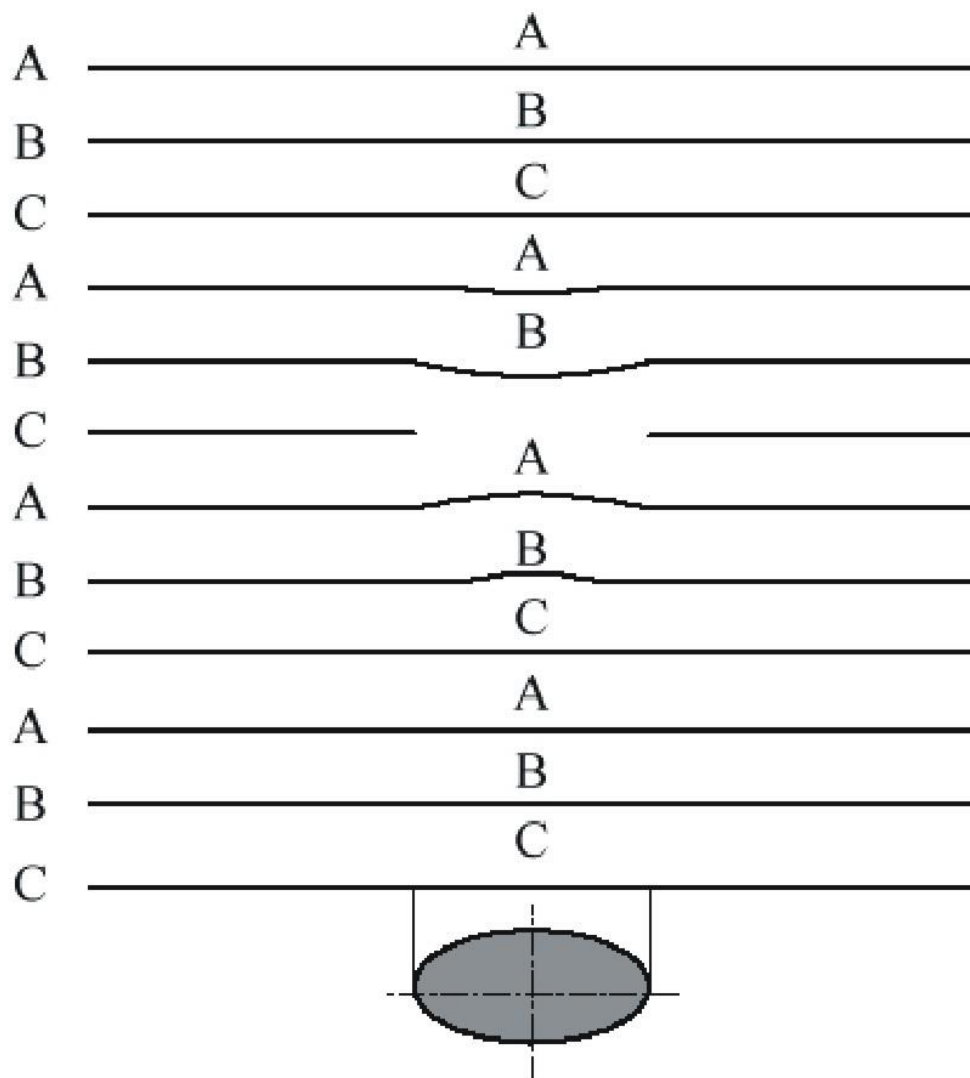
- Koherens határ, mindkét oldalon azonos fázis van
- A határ két oldala egymás tükörképe
- Keletkezhet kristályosodáskor és képlékeny alakváltozáskor, elsősorban az FKK és HCP kristályokban



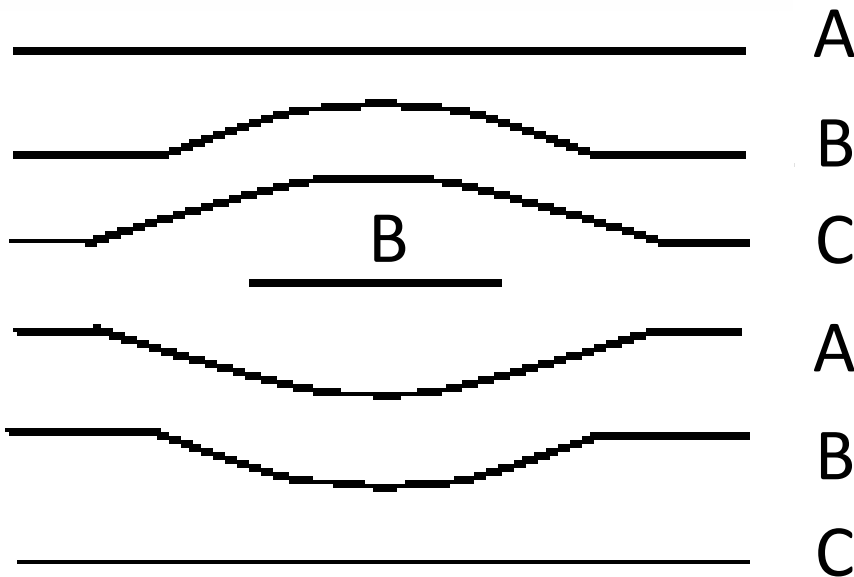


Mikroszkópi  
csiszolatokon  
párhuzamos  
egyenesekként  
jelenik meg



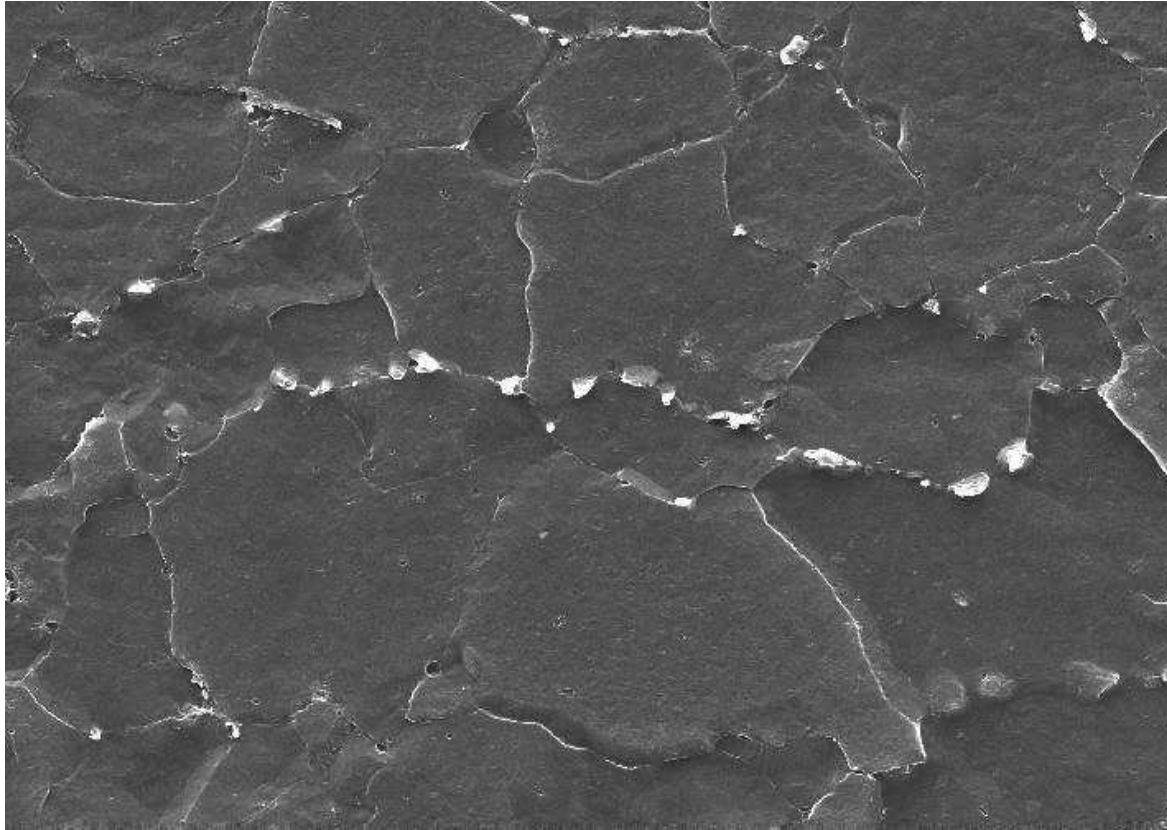


Atomok hiánya miatt jött  
létre  
(belső rétegződési hiba)

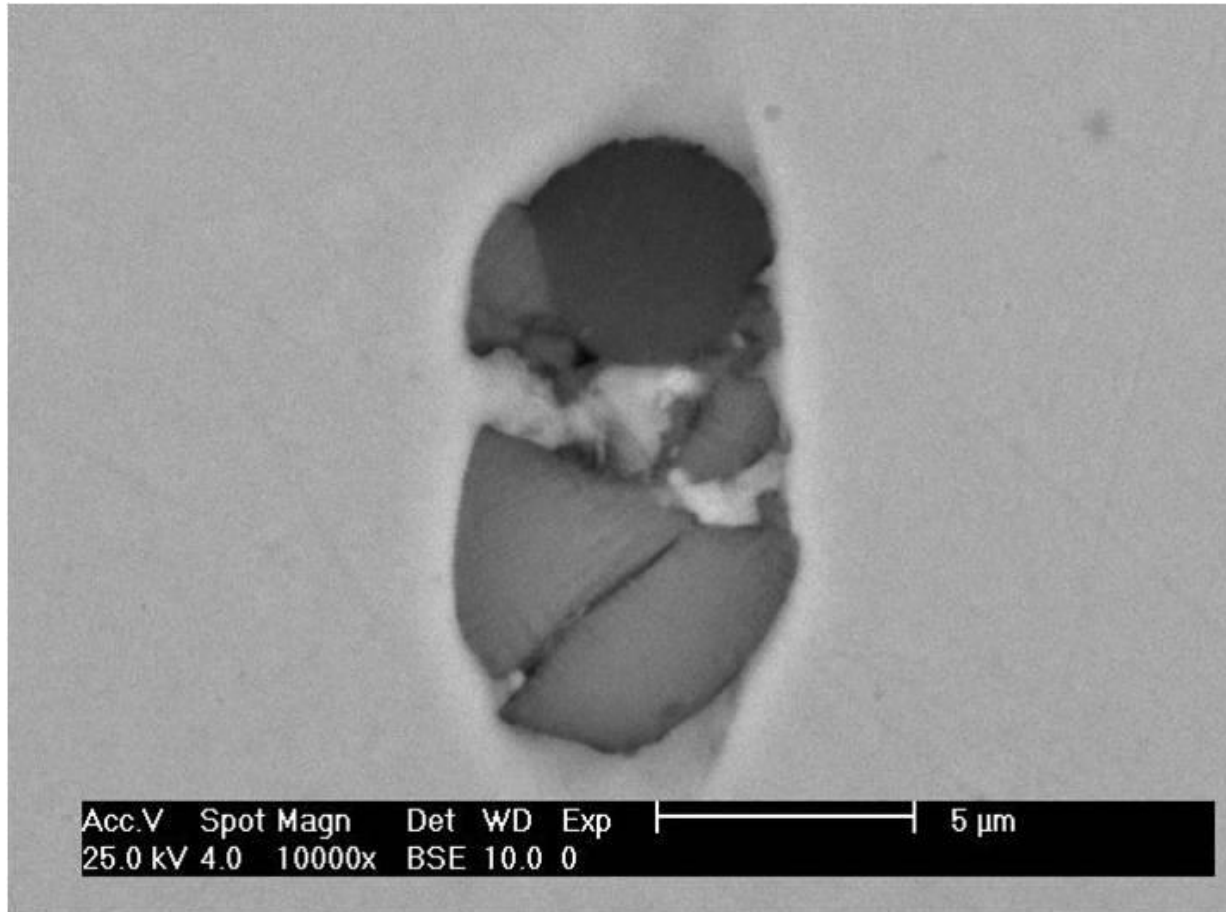


Beékelődött atomok  
miatt jött létre  
(külső rétegződési hiba)

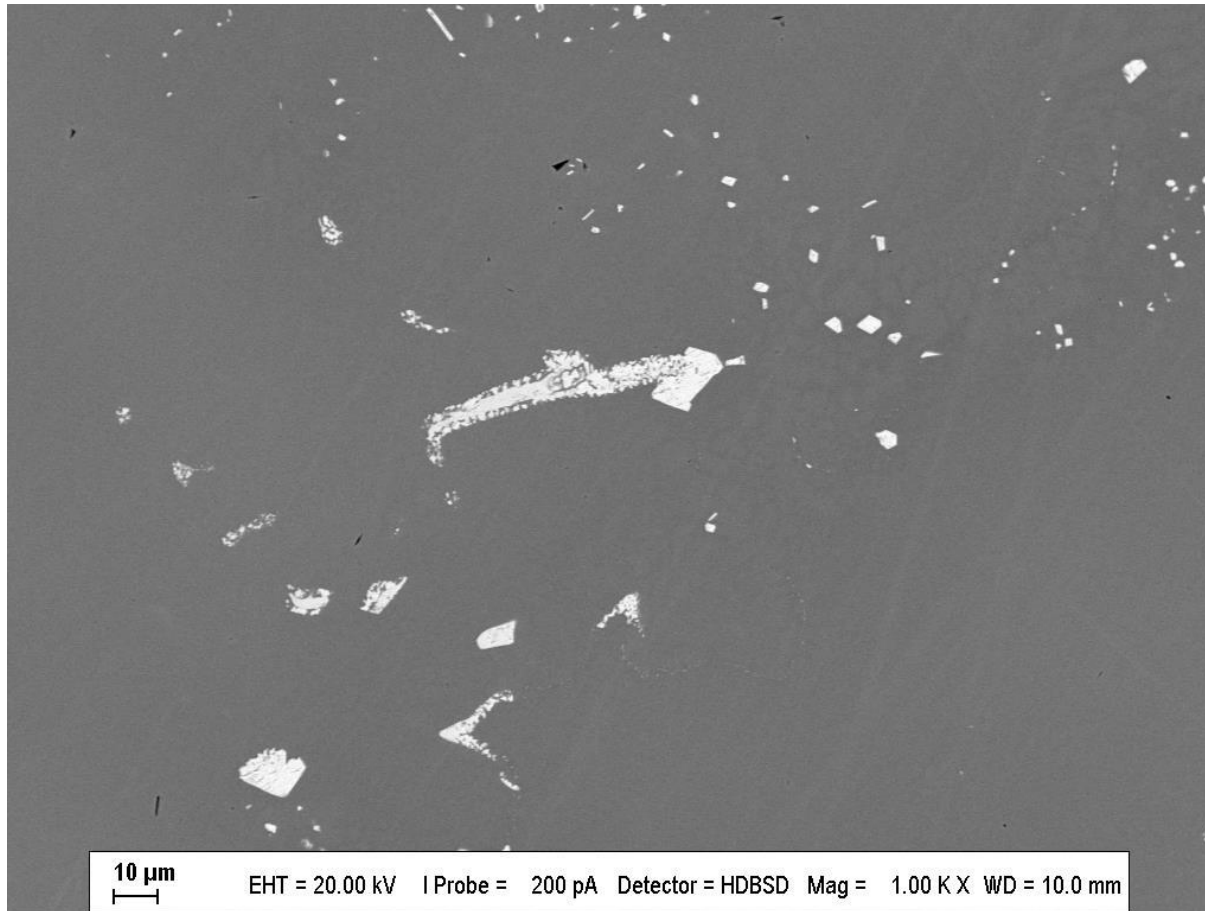
- Üregek
- Zárványok
- Kiválások
- Gázbuborékok



Szemcsehatármenti üregek erőművi főgőzvezetékben  
(replika-minta)



$\text{Al}_2\text{O}_3$  – CaS komplex zárvány



Hf-ban és Ta-ban gazdag kiválások nikkelbázisú öntvényben

- Alapfogalmak definiálása:
  - egykristály, polikristály
  - primitív rácsok típusai (7 db)
  - irányok és síkok Miller-indexei
  - vakancia, szubsztitúciós atom, interstíciós atom
  - diszlokáció definíciója
  - Burgers-vektor definíciója
  - él- és csavardiszlokáció definíciója
  - felületszerű rács hibák (makrofelület, kis- és nagyszögű szemcsehatár, fázishatár, ikerhatár) definíciója

- A síkok Miller-indexeit a tengelymetszetek reciprokából számíthatjuk ki. (I)
- Az FKK elemi cella középpontjában van egy atom. (H)
- A diszlokáció vonala mindig párhuzamos a Burgers-vektorával. (H)
- Az ón atom (Sn) mindig intersztíciós helyre épül be. (H)
- A kisszögű szemcsehatár egymás alá rendeződött éldiszlokációkból épül fel. (I)
- Az ikerhatár két eltérő fázist választ el. (H)