

# KRISTÁLYTANI ALAPISMERETEK



ANYAGTUDOMÁNY ÉS  
TECHNOLÓGIA TANSZÉK

Pannonia Egyetem, Műszaki Tudományi Kar

Elektronikai technológia és anyagismeret – VIETAB00

## Kristálytan

1

---

---

---

---

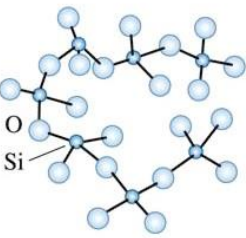
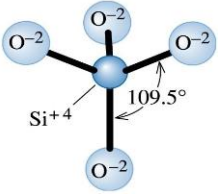
---

---

---

### AZ ATOMOK ELRENDEZŐDÉSE

- Rövid távú rend (amorf anyagok)



Kristálytan 2/40

2

---

---

---

---

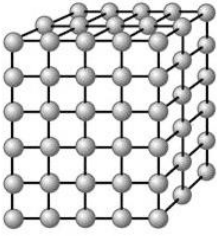
---

---

---

### AZ ATOMOK ELRENDEZŐDÉSE

- Hosszú távú rend (kristályok)
- Az atomok elhelyezkedését jól definiált transzlációval írhatjuk le, azaz egy olyan vektorral, amely a koordinátarendszer origójából az atomra mutat.



Kristálytan 3/40

3

---

---

---

---

---

---

---

Ideális rács

KRISTÁLYTANI ALAPISMERETEK

### KRISTÁLYOK

a)



b)



(a) egykristály, (b) polikristály

4/40



folyadékkristály

Kristálytan

4

---

---

---

---

---

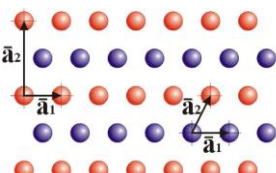
---

---

---

### TRANSLÁCIÓ

A rácspontok helyét a translációs egyenlet határozza meg. Két dimenzióban:



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

$m; n$ : egész  
 $\vec{r}$ : translációs vektor  
 $\vec{a}_1; \vec{a}_2$ : bázis vektorok

A koordinátarendszer középpontja tetszőlegesen megválasztható. A bázisvektorok határozzák meg a koordinátatengelyeket. A translációs vektor az origóból egy rácspontba mutat.

Kristálytan

5/40

5

---

---

---

---

---

---

---

---

### KRISTÁLYRÁCS

Három dimenzióban:  $\vec{r} = m\vec{a}_1 + n\vec{a}_2 + p\vec{a}_3$

*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 rácsstípus egyikébe.

Kristálytan

6/40

6

---

---

---

---

---

---

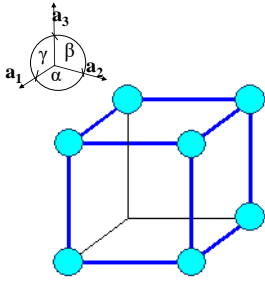
---

---

Ideális rács

# KRISTÁLYTANI ALAPISMERETEK

## KÖBÖS RÁCS



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

$a_1$ ,  $a_2$  és  $a_3$  a bázisvektorok hossza,  
 $\alpha$ ,  $\beta$  és  $\gamma$  a bázisvektorok közötti szög

Kristálytan

7/40

7

---

---

---

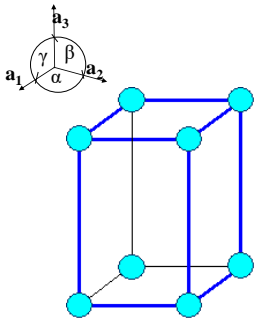
---

---

---

---

## TETRAGONÁLIS RÁCS



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

$a_1$ ,  $a_2$  és  $a_3$  a bázisvektorok hossza,  
 $\alpha$ ,  $\beta$  és  $\gamma$  a bázisvektorok közötti szög

Kristálytan

8/40

8

---

---

---

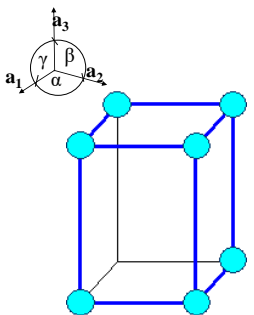
---

---

---

---

## ORTOROMBOS RÁCS



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

$a_1$ ,  $a_2$  és  $a_3$  a bázisvektorok hossza,  
 $\alpha$ ,  $\beta$  és  $\gamma$  a bázisvektorok közötti szög

Kristálytan

9/40

9

---

---

---

---

---

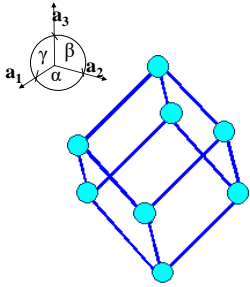
---

---

Ideális rács

# KRISTÁLYTANI ALAPISMERETEK

## ROMBOÉDERES RÁCS



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

$a_1, a_2$  és  $a_3$  a bázisvektorok hossza,  
 $\alpha, \beta$  és  $\gamma$  a bázisvektorok közötti szög

Kristálytan

10/40

10

---

---

---

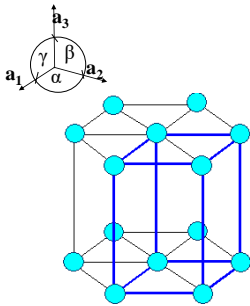
---

---

---

---

## HEXAGONÁLIS RÁCS



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

$a_1, a_2$  és  $a_3$  a bázisvektorok hossza,  
 $\alpha, \beta$  és  $\gamma$  a bázisvektorok közötti szög

Kristálytan

11/40

11

---

---

---

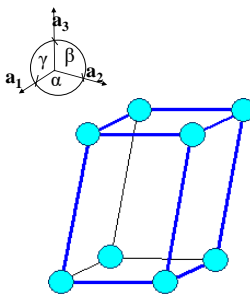
---

---

---

---

## MONOKLIN RÁCS



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

$a_1, a_2$  és  $a_3$  a bázisvektorok hossza,  
 $\alpha, \beta$  és  $\gamma$  a bázisvektorok közötti szög

Kristálytan

12/40

12

---

---

---

---

---

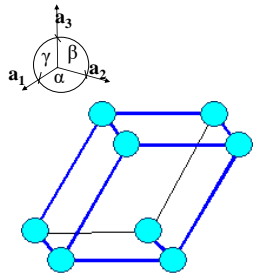
---

---

Ideális rács

KRISTÁLYTANI ALAPISMERETEK

TRIKLIN RÁCS



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

$a_1, a_2$  és  $a_3$  a bázisvektorok hossza,  
 $\alpha, \beta$  és  $\gamma$  a bázisvektorok közötti szög

Kristálytan

13/40

13

---

---

---

---

---

---

---

BRAVAIS-RÁCSOK

Köbös

P

I

F

p.k, t.k.k, f.k.k

Tetragonális

P

I

Ortorombos

P

I

F

C

Hexagonális

P

P

Romboédes

Monoklin

P

C

Triklin

P

P - Primitive (egyszerű)  
I - Body centered (térben középpontos)  
F - Face centered (felületen középpontos)  
C - Side centered (oldallapon középpontos)

Kristálytan

14/40

14

---

---

---

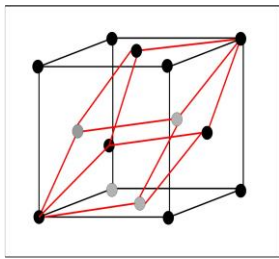
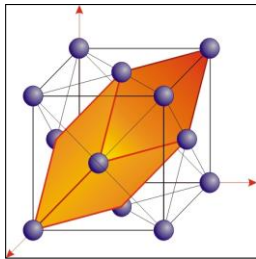
---

---

---

---

EGYSZERŰ ÉS ÖSSZETETT RÁCS: FKK MINT ROMBOÉDERES



Kristálytan

15/40

15

---

---

---

---

---

---

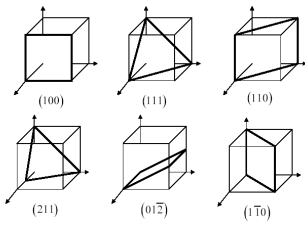
---

Ideális rács

KRISTÁLYTANI ALAPISMERETEK

MILLER-INDEXEK

A Miller-indexek a kristályrácsban lévő irányokat és síkokat definiáló számhármassok.



16

---

---

---

---

---

---

---

IRÁNYOK MILLER-INDEXEI

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

17

---

---

---

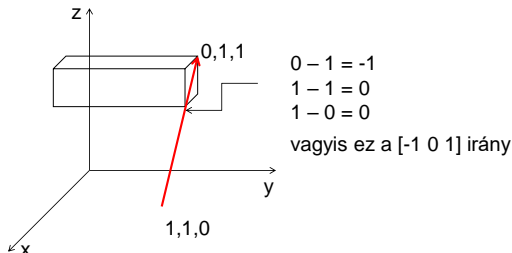
---

---

---

---

IRÁNYOK MILLER-INDEXEI



18

---

---

---

---

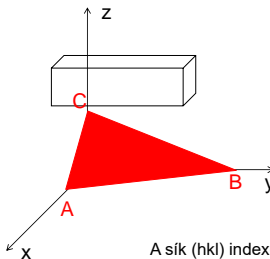
---

---

---

KRISTÁLYTANI ALAPISMERETEK

### SÍKOK MILLER-INDEXEI



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.

Kristálytan 19/40

---

---

---

---

---

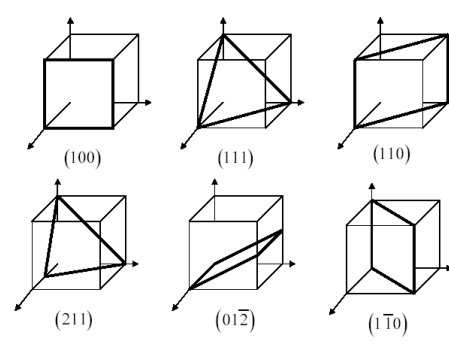
---

---

---

19

### SÍKOK MILLER-INDEXEI - PÉLDÁK



Kristálytan 20/40

---

---

---

---

---

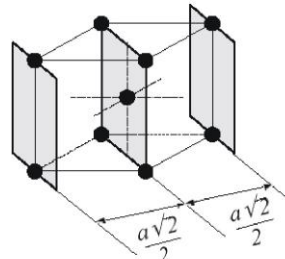
---

---

---

20

### RÁCSSÍKOK KÖZÖTTI TÁVOLSÁG


$$d = \frac{a}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}}$$

TKK ( $\bar{1}10$ )

$$d_{\bar{1}10} = \frac{a}{\sqrt{2}} = \frac{a\sqrt{2}}{2}$$

Kristálytan 21/40

---

---

---

---

---

---

---

---

21

KÖBÖS RÁCSOKRA

$[hkl] \perp (hkl) !!!$

azaz egy adott (hkl) Miller-indexekkel jellemzett sík normálisa az ugyanazzal a számhármassal jellemzett [hkl] irány.

22

---

---

---

---

---

---

---

SÍKOK SZÖGE KÖBÖS RENDSZERBEN

Két sík által bezárt szög:  
mivel  $(h_1k_1l_1) \perp [h_1k_1l_1]$  és  $(h_2k_2l_2) \perp [h_2k_2l_2]$ ,  
valamint  $\vec{r}_1 \cdot \vec{r}_2 = |\vec{r}_1| \cdot |\vec{r}_2| \cos \varphi$ ,

$$\cos \varphi = \frac{\vec{r}_1 \cdot \vec{r}_2}{|\vec{r}_1| \cdot |\vec{r}_2|} = \frac{h_1 \cdot h_2 + k_1 \cdot k_2 + l_1 \cdot l_2}{\sqrt{h_1^2 + k_1^2 + l_1^2} \cdot \sqrt{h_2^2 + k_2^2 + l_2^2}}$$

23

---

---

---

---

---

---

---

SÍKOK METSZÉSVONALA KÖBÖS RENDSZERBEN

Két sík metszésvonala a síkok normálisainak vektoriális szorzata:

$$\vec{r}_1 \times \vec{r}_2 = \begin{vmatrix} \vec{i} & \vec{j} & \vec{k} \\ h_1 & k_1 & l_1 \\ h_2 & k_2 & l_2 \end{vmatrix} = \vec{i}(k_1l_2 - l_1k_2) - \vec{j}(h_1l_2 - l_1h_2) + \vec{k}(h_1k_2 - k_1h_2)$$

24

---

---

---

---

---

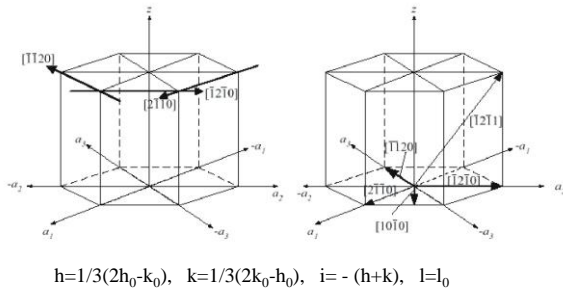
---

---



# KRISTÁLYTANI ALAPISMERETEK

## HEXAGONÁLIS INDEXEK



Kristálytan

25/40

25

## KRISTÁLYTANI ADATOK

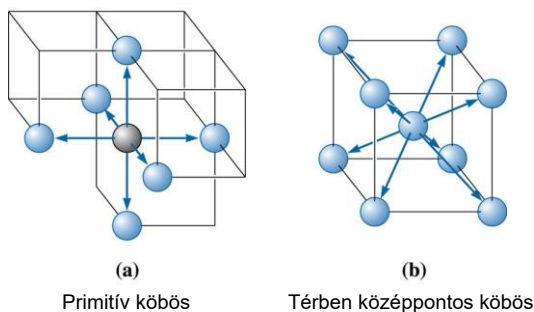
- koordinációs szám (legközelebbi szomszédok száma)
- atomok száma az elemi cellában
- atomátmérő (rácsállandó)
- térkitöltési tényező (APF)
- legnagyobb rácshézag (nagyság, hely)
- legszorosabb illeszkedésű irány, sík
- síkbeli kitöltési tényező (PD)
- iránymenti kitöltési tényező (LD)

Kristálytan

26/40

26

## KOORDINÁCIÓS SZÁM, PK, TKK



Kristálytan

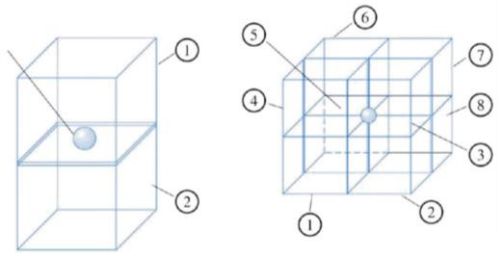
27/40

27

Ideális rács

KRISTÁLYTANI ALAPISMERETEK

ATOMOK SZÁMA AZ ELEMI CELLÁBAN



Ha egy atom  $n$  darab cellához tartozik, akkor egy cellához csak az atom  $1/n$ -ed része tartozik

28

---

---

---

---

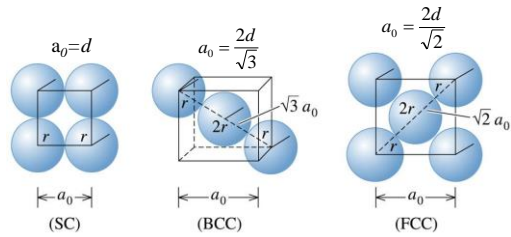
---

---

---

---

ATOMÁTMÉRŐ ÉS RÁCSÁLLANDÓ KAPCSOLATA



SC = Simple Cubic = primitív köbös  
BCC = Body Centered Cubic = térben középpontos köbös  
FCC = Face Centered Cubic = felületen középpontos köbös

29

---

---

---

---

---

---

---

---

TÉRKITÖLTÉSI TÉNYEZŐ

TT= atomok össztérfogata / cella térfogata

$a$  = rácsállandó = elemi cella élhosszúsága  
 $d$  = atomátmérő

PI. TKK  $\rightarrow$  2 atom a cellában

$$TT = \frac{2 \left( \frac{d^3 \pi}{6} \right)}{a^3} = \frac{\left( \frac{a \sqrt{3}}{2} \right)^3 \pi}{3a^3} = \frac{a^3 \pi \sqrt{3}}{8a^3} = \frac{\pi \sqrt{3}}{8} \approx 0.68$$

30

---

---

---

---

---

---

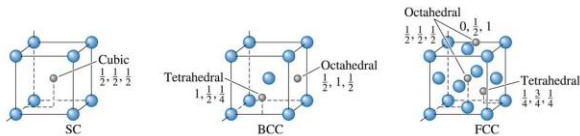
---

---

Ideális rács

KRISTÁLYTANI ALAPISMERETEK

LEGNAGYOBB RÁCSHÉZAG



A legnagyobb rácshézag ott van, ahová a legnagyobb átmérőjű merev gömböt tudnánk behelyezni a szomszédos atomok elmozdulása nélkül. A legnagyobb rácshézag mérete ennek a gömbnek az átmérője.

31

---

---

---

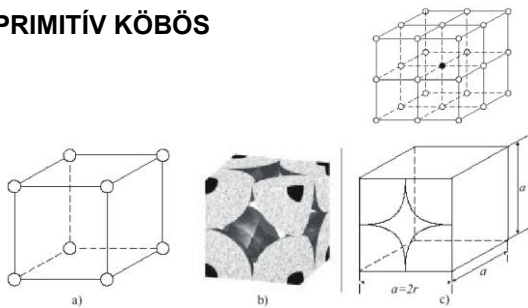
---

---

---

---

PRIMITÍV KÖBÖS



Rácstípus	Fémek	Koord. szám	Atomátmérő	Atomok száma	Térkitöltés	Legnagyobb üres rácshely	Legszorosabb illeszkedések
PK	Po	6	a	1	0,52	0,73 a középen	{100} <100>

32

---

---

---

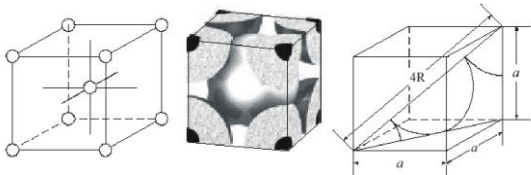
---

---

---

---

TÉRBE KÖZÉPPONTOS KÖBÖS



Rácstípus	Fémek	Koord. szám	Atomátmérő	Atomok száma	Térkitöltés	Legnagyobb üres rácshely	Legszorosabb illeszkedések
TKK	Na, K, Cr, Mo, W, $\beta$ Ti, $\alpha$ Fe	8	$\frac{\sqrt{3}}{2}a$	2	0,68	0,252 a $\frac{1}{2} \frac{1}{2} 0$	{110} <111>

Kismértékű alakíthatóság, oxidációs hajlam, gyenge vezetőképesség, rideg-képlékeny átmenet

33

---

---

---

---

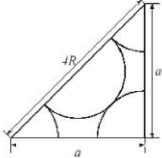
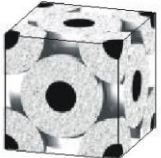
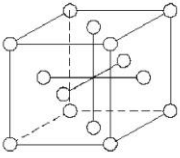
---

---

---

KRISTÁLYTANI ALAPISMERETEK

### FELÜLETEN KÖZÉPPONTOS KÖBÖS



Rácstípus	Fémek	Koord. szám	Atomátmérő	Atomok száma	Térkitöltés	Legnagyobb üres rácshely	Legszorosabb illeszkedések
FKK	Cu, Au, Ag, Pb, Ni, Pt, γFe	12	$\frac{\sqrt{2}}{2}a$	4	0,74 Maximális!	0,293 a $\frac{1}{2}$ 0 0 $\frac{1}{2}$ $\frac{1}{2}$ $\frac{1}{2}$	{111} <110>

Jól alakítható, kémiaiilag stabil, jó hő- és elektromos vezető

Kristálytan

34/40

34

---

---

---

---

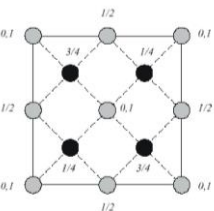
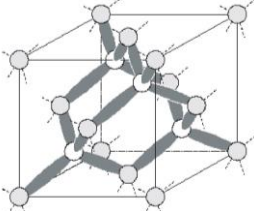
---

---

---

---

### GYÉMÁNTRÁCS (SZFALERIT, WURZIT)



Rácstípus	Fémek	Koord. szám	Atomátmérő	Atomok száma	Térkitöltés	Legszorosabb illeszkedések
Gyémánt	C, Si, Ge, αSn	4	$\frac{\sqrt{3}}{4}a$	8	0,34	{111} <110> Nem érintik egymást!

Kristálytan

35/40

35

---

---

---

---

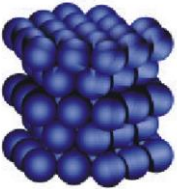
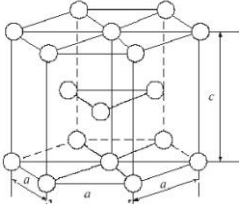
---

---

---

---

### SZOROSAN PAKOLT HEXAGONÁLIS RÁCS



Rácstípus	Fémek	Koord. szám	Atomátmérő	Atomok száma	Térkitöltés	Legnagyobb üres rácshely	Legszorosabb illeszkedések
LIH	Be, Mg, Zn, Cd, αTi	12	$c/a=1,63$	6	0,74 Maximális!	0,235 a	{0001} <1120>

Kristálytan

36/40

36

---

---

---

---

---

---

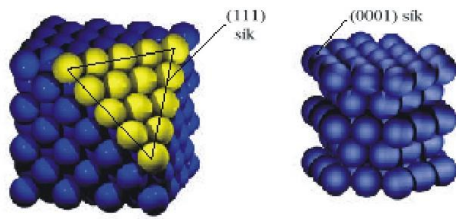
---

---

Ideális rács

# KRISTÁLYTANI ALAPISMERETEK

## FKK ÉS SZOROSAN PAKOLT HEXAGONÁLIS RÁCS ÖSSZEHASONLÍTÁSA



ABCABC

ABABAB

Kristálytan

37/40

37

---

---

---

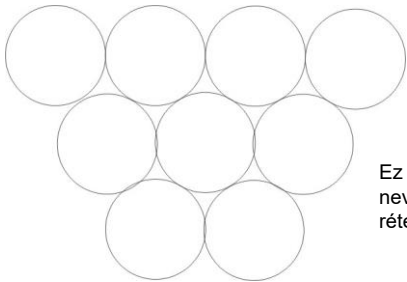
---

---

---

---

## RÉTEGZÖDÉS



Az FKK rács  
{111} síkjának  
atomi  
elrendeződése.

Ez az alapréteg,  
nevezzük A  
rétegnek.

Kristálytan

38/40

38

---

---

---

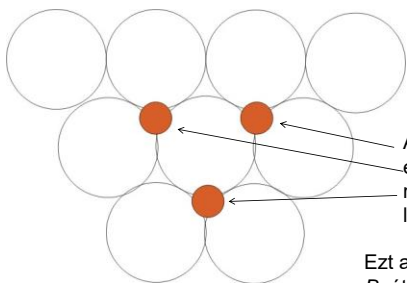
---

---

---

---

## RÉTEGZÖDÉS



Az alaprétegre  
épülő második  
réteg atomjainak  
lehetséges helyei.

Ezt a réteget nevezzük  
B rétegnek.

Kristálytan

39/40

39

---

---

---

---

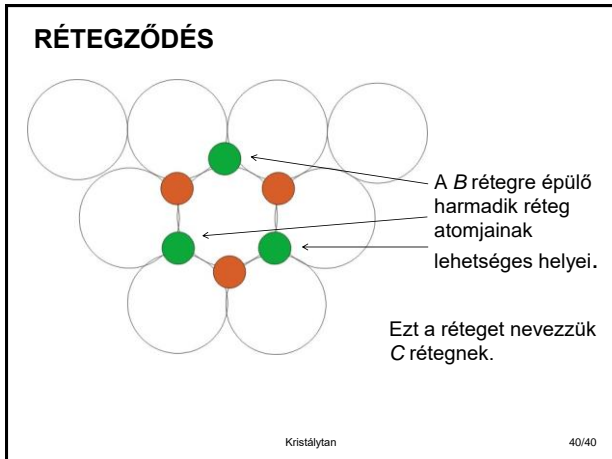
---

---

---

Ideális rács

# KRISTÁLYTANI ALAPISMERETEK



40

---

---

---

---

---

---

---