

# KRISTÁLYTANI ALAPISMERETEK



ANYAGTUDOMÁNY ÉS  
TECHNOLÓGIA TANSZÉK  
Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem

Elektronikai technológia és anyagismeret – VIETAB00

## Kristálytan

---

---

---

---

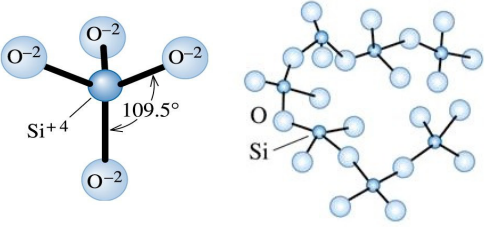
---

---

---

### AZ ATOMOK ELRENDEZŐDÉSE

- Rövid távú rend (amorf anyagok)



Kristálytan 2/40

---

---

---

---

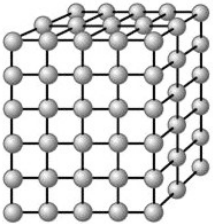
---

---

---

### AZ ATOMOK ELRENDEZŐDÉSE

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



Kristálytan 3/40

---

---

---

---

---

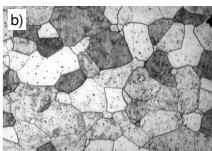
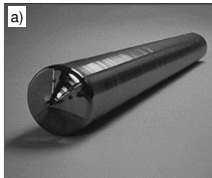
---

---

Ideális rács

# KRISTÁLYTANI ALAPISMERETEK

## KRISTÁLYOK



(a) egykristály, (b) polikristály



folyadékkristály

Kristálytan

4/40

---

---

---

---

---

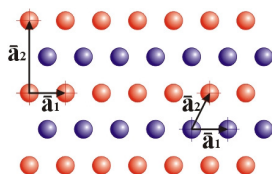
---

---

---

## TRANZLÁCIÓ

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

---

---

---

---

---

---

---

---

## 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

---

---

---

---

---

---

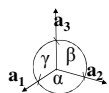
---

---

Ideális rács

# KRISTÁLYTANI ALAPISMERETEK

## KÖBÖS RÁCS



- $a_1 = a_2 = a_3$
- $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
- $P_0$

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

Kristálytan

7/40

---

---

---

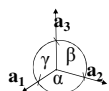
---

---

---

---

## 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

---

---

---

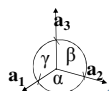
---

---

---

---

## 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

---

---

---

---

---

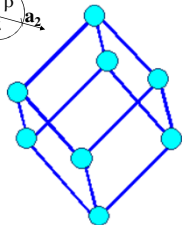
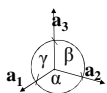
---

---

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

---

---

---

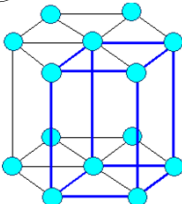
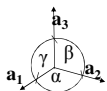
---

---

---

---

## 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

---

---

---

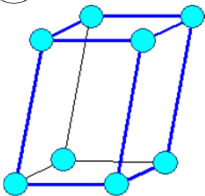
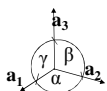
---

---

---

---

## 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

---

---

---

---

---

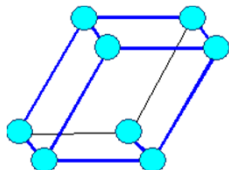
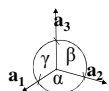
---

---

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

---

---

---

---

---

---

---

---

## BRAVAIS-RÁCSOK

**Köbös**

P

I

F

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

**Tetragonális**

P

I

**Ortorombos**

P

I

F

C

**Hexagonális**

P

I

P

**Romboéderez**

**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

---

---

---

---

---

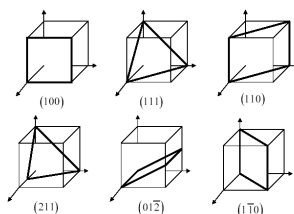
---

---

---

## MILLER-INDEXEK

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



Kristálytan

15/40

---

---

---

---

---

---

---

---

Ideális rács

## KRISTÁLYTANI ALAPISMERETEK

## 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 koordinátaiból tagonként levonjuk a kiindulási pont koordinátáit

Kristálytan

16/40

---

---

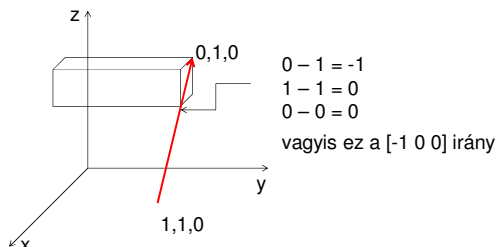
---

---

---

---

## IRÁNYOK MILLER-INDEXEI



Kristálytan

17/40

---

---

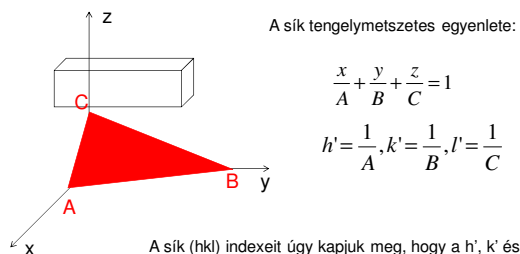
---

---

---

---

## SÍKOK MILLER-INDEXEI



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

18/40

---

---

---

---

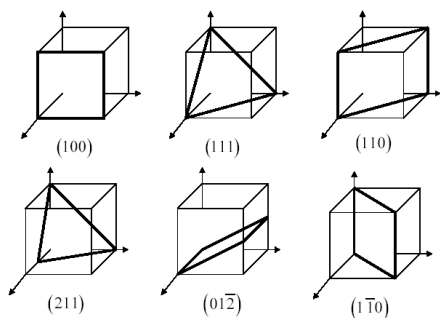
---

---

## Ideális rács

## KRISTÁLYTANI ALAPISMERETEK

### SÍKOK MILLER-INDEXEI - PÉLDÁK



Kristálytan

19/40

---

---

---

---

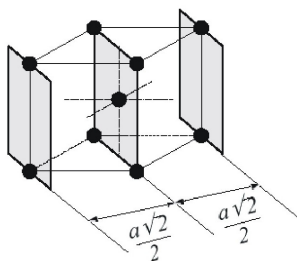
---

---

---

---

### 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

20/40

---

---

---

---

---

---

---

---

### KÖBÖS RÁCSOKRA

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

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

Kristálytan

21/40

---

---

---

---

---

---

---

---

Ideális rács

# KRISTÁLYTANI ALAPISMERETEK

## SÍKOK SZÖGE KÖBÖS RENDSZERBEN

Két sík által bezárt szög:

mivel

$$(h_1 k_1 l_1) \perp [h_1 k_1 l_1] \text{ és } (h_2 k_2 l_2) \perp [h_2 k_2 l_2],$$

valamint

$$\vec{r}_1 \cdot \vec{r}_2 = |\vec{r}_1| \cdot |\vec{r}_2| \cos \varphi,$$

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

Kristálytan

22/40

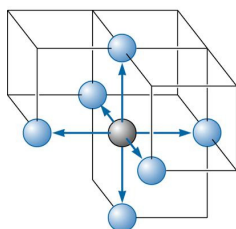
## KRISTÁLYTANI ADATOK

- 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

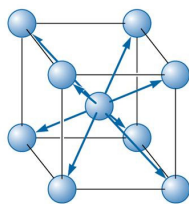
23/40

## KOORDINÁCIÓS SZÁM, PK, TTK



(a)

Primitív köbös



(b)

Térben középpontos köbös

Kristálytan

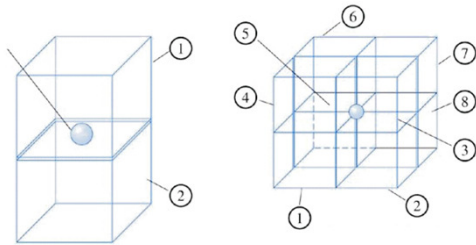
24/40

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

Kristálytan

25/40

---

---

---

---

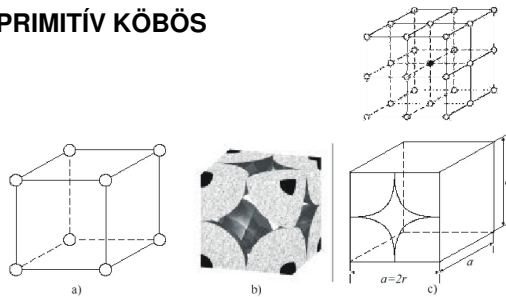
---

---

---

---

## 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>

Kristálytan

26/40

---

---

---

---

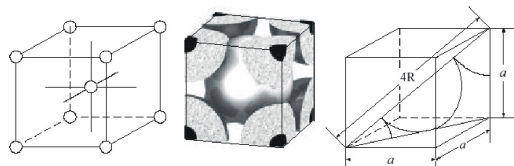
---

---

---

---

## TÉRBEN 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

Kristálytan

27/40

---

---

---

---

---

---

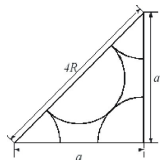
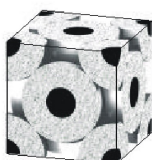
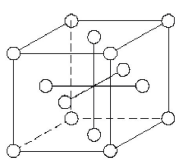
---

---

Ideális rács

# 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, γ-Fe	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

28/40

---

---

---

---

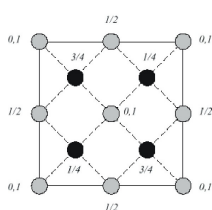
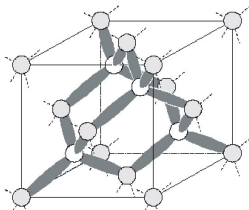
---

---

---

---

## GYÉMÁNTRÁCS (SZFALERIT, WURZIT)



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

Kristálytan

29/40

---

---

---

---

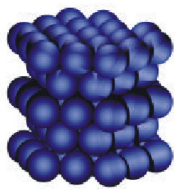
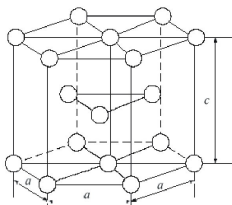
---

---

---

---

## SZOROSAN PAKOLT HEXAGONÁLIS RÁCS



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

Kristálytan

30/40

---

---

---

---

---

---

---

---

Ideális rács