

Kristallvõre

Rait Rand

YAFM

Kood: 960737

Mis on kristall ja kristalliline struktuur:

- Kristallideks nimetatakse hulktahkkujulisi tahkeid kehasid mille aatomid on korrastatud ning kordavad oma korrastatust perioodiliselt kolmes mõõtnes.
- Kristalloleku iseloomulik joon on tema anisotroopsus. See tähendab füüsikaliste, mehhaaniliste, optiliste, soojuslike omaduste sõltuvus sihist.
- Keha tervikuna ei ole anisotroopne. Anisotroopsus esineb iga väikse kristalli ulatuses.
- Kristallilised kehad esinevad tavaliselt polükristallidena, s.t. koosneb suurest hulgast korrapäraselt orienteeritud väikestest kristallidest.



Polükristall



Tööstuslikult kasvatatud monokristall

Kristallide kuju ja olulised füüsikalised/optilised omadused on tingitud kristallide keemilisest koostisest ning kristallvõre ehitusest. Kristalli korrapärane struktuur väljendub tema väliskuju sümmeetrias - tahkude, servade ja nurkade seaduspärases paiknemises ja kordumises.

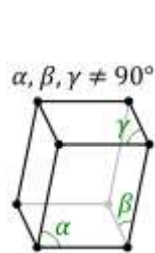
Kristalli iseloomustavaks elemendiks on veel ühikrakk, see on kristallvõre

elementaarne esindaja mis kordab ennast perioodiliselt kristalli ulatuses. Kristalli väliskuju korrapärasust iseloomustatakse nn. sümmentrialelementide kaudu. Tähtsamateks sümmentrialelementideks on:

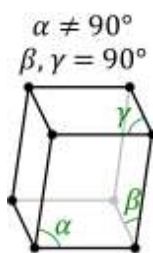
- Sümmentriapind – Kujutletav pind mis jagab kristalli kaheks üksteise suhtes peegelpildis olevaks pooleks
- Sümmeetriatelg – Telg ümber mille kristalli keerates kattuvad perioodiliselt tema elemendid (tahud, nurgad, servad)
- Sümmeetriakese – Punkt mis poolitab kristalli läbiva sirge.

Kristallvõret iseloomustavad nii nimetatud võre parameetrid, mis kirjeldavad ühikraku kuju ning asetust.

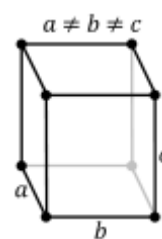
Vastavalt ühikrakus asetsevate aatomite asukohtade järgi klassifitseeritakse ühikrakk seitsmeks klassiks.



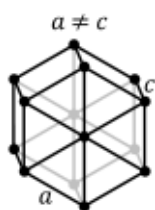
1. Trikliinne



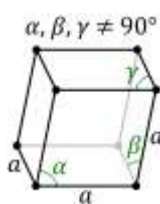
2. Monokliinne



3. Rombiline



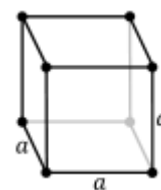
4. Heksagonaalne



5. Rombeedriline



6. Tetragonaalne

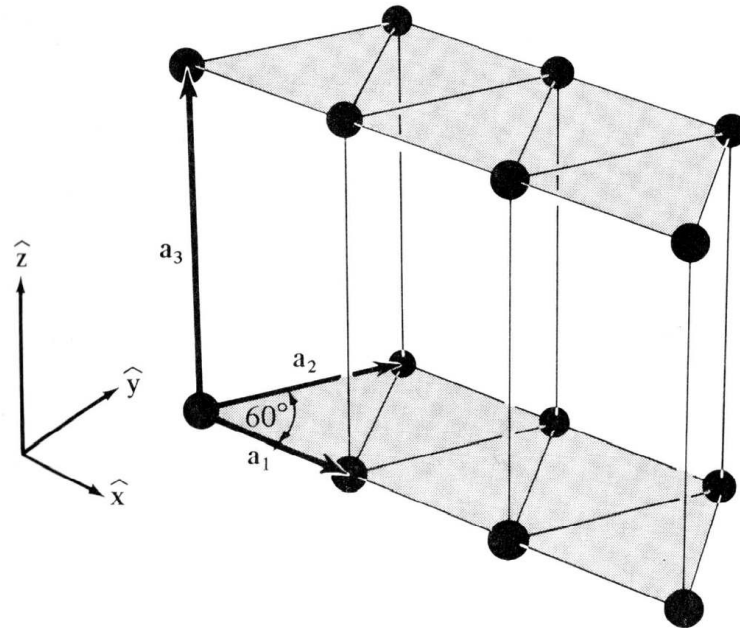


7. Kuubiline

Vastavalt sümmetriakesele saab loetletud seitse ühikraku jaotada veel kokku neljateistkümneks nii nimetatud Braviase võreks.

Kasutatakse ka baasvektoreid ühikrakus asuvate aatomite kirjeldamiseks.

Baasvektorid on vektorid mille kaudu saab kirjeldada suvalise tüvirakus oleva aatomi asukohta.



$$\mathbf{a}_1 = a\hat{x}, \quad \mathbf{a}_2 = a/2\hat{x} + \sqrt{3}a/2\hat{y}, \quad \mathbf{a}_3 = c\hat{z}$$

Baasvektorid ja kuidas nende abil avaldada aatomi asukohta ühikrakus

Kuidas kristallid moodustuvad?

- Tarvilik iooniline side – ja + ionide vahel
- Vajalik elektroni ümberpaigutumine
- Vajalik suur elektron-negatiivsuste erinevus.

Kristallivõre mõju materjali elektrilistele omadustele

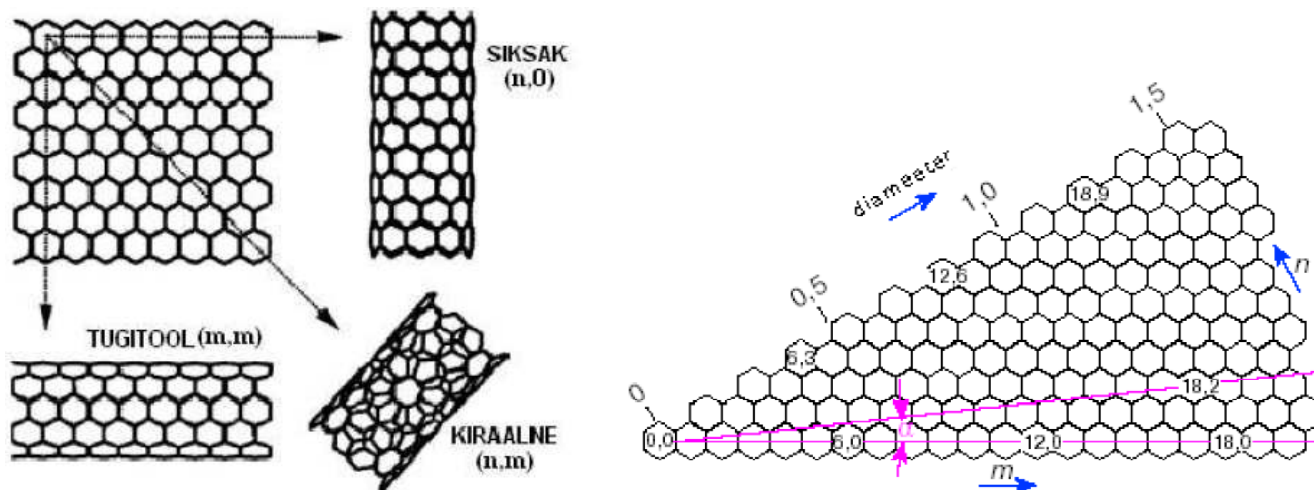
Lisaks leheküljel nr. 1 märgitud mõjudele, mõjutab võre ka kristalli elektrilisi omadusi. Põhjustades näiteks võre võnkumisel elektronide hajumist.

Vähendades mõõtmeid nanomõõtmeteni ning kasutades ära kristallivõre omadusi on võimalik tekitada erinevaid struktuure mis on kas pooljuhid või metallilise juhtivusega.

Näiteks üheseinalise süsiniknanotoru elektrilised omadused sõltuvad tema diameetrist ning 'kokkurullimise' meetodist.

Järgneval joonisel on pildiline selgitus süsiniktoru kokkurullimise ideest.

lisaks omapärastele elektrilistele omadustele on võimalik saavutada ka erakordseid mehhaanilisi omadusi, kasutades ära süsiniku kristallstruktuuri ning tema töötlemise meetodeid nanomeetrite tasemel.



Pildiline selgitus süsiniknanotoru kokkurullimise meetoditest.

Kasutatud materjalid:

http://en.wikipedia.org/wiki/Crystal_structure

Ainetes Tahke keha füüsika (M.Klopov) ning Pooljuhtide Füüsika (J.Krustok)
omandatud teadmised ning eelnevalt tehtud ettekanded..