

# ANYAGOK SZUBMIKROSKÓPIKUS ÉS MAKROSKÓPIKUS KRISZTALLOGRÁFIÁJA

**Dr. Bagyinszki Gyula – Tar Albert**

Budapesti Műszaki Főiskola - Bánki Donát Gépész és Biztonságtechnikai Mérnöki Kar  
Anyagtudományi és Gyártástechnológiai Intézet - Anyag- és Alakítástechnológiai Szakcsoport

*Az amorf anyagoknak rendszerint nincs határozott alakjuk, vagy ha igen, az véletlenszerű, esetleg mesterséges. Az ásványvilág jellemzően amorf anyaga az opál, amely kavasav-kocsonyából (gélből) alakul ki. Megjegyzendő, hogy már az opálban is találtak félszabályos szerkezetet, mely kavasav-kocsonyába ágyazott szilíciumoxid gömbsorokból állt. Az anyagnak az amorf állapota rendszerint nem stabil, az anyag kristályos állapotra törekszik, és a körülmények alakulásától függ, hogy ezt mikor éri el. A kristályos anyagokban az atomok, ionok, ill. molekulák szabályszerű, periodikus „hosszútávú” térbeli elrendeződésben, a kristályrácsban foglalnak helyet, ilyen módon a teret szakaszosan töltik ki. A kristályrács tömegpontjai egy-egy irányban pontsorok mentén helyezkednek el (vonallárcsot alkotva), majd ezek pedig rácssíkokba (síkrácso)ba), végül térrácsba rendeződnek. A kristályos állapot jellemzője az anizotrópia, ami azt jelenti, hogy olyan anyagi sajátságai is léteznek, amelyek irányfüggők, azaz számszerű értékük nem független attól, hogy milyen irányban mérjük (ilyen például a törésmutató, az elektromos vezetőképesség, a mechanikai tulajdonságok stb.). Az egyes tulajdonságok anizotróp viselkedése függ az adott kristályrács szimmetriájától.*

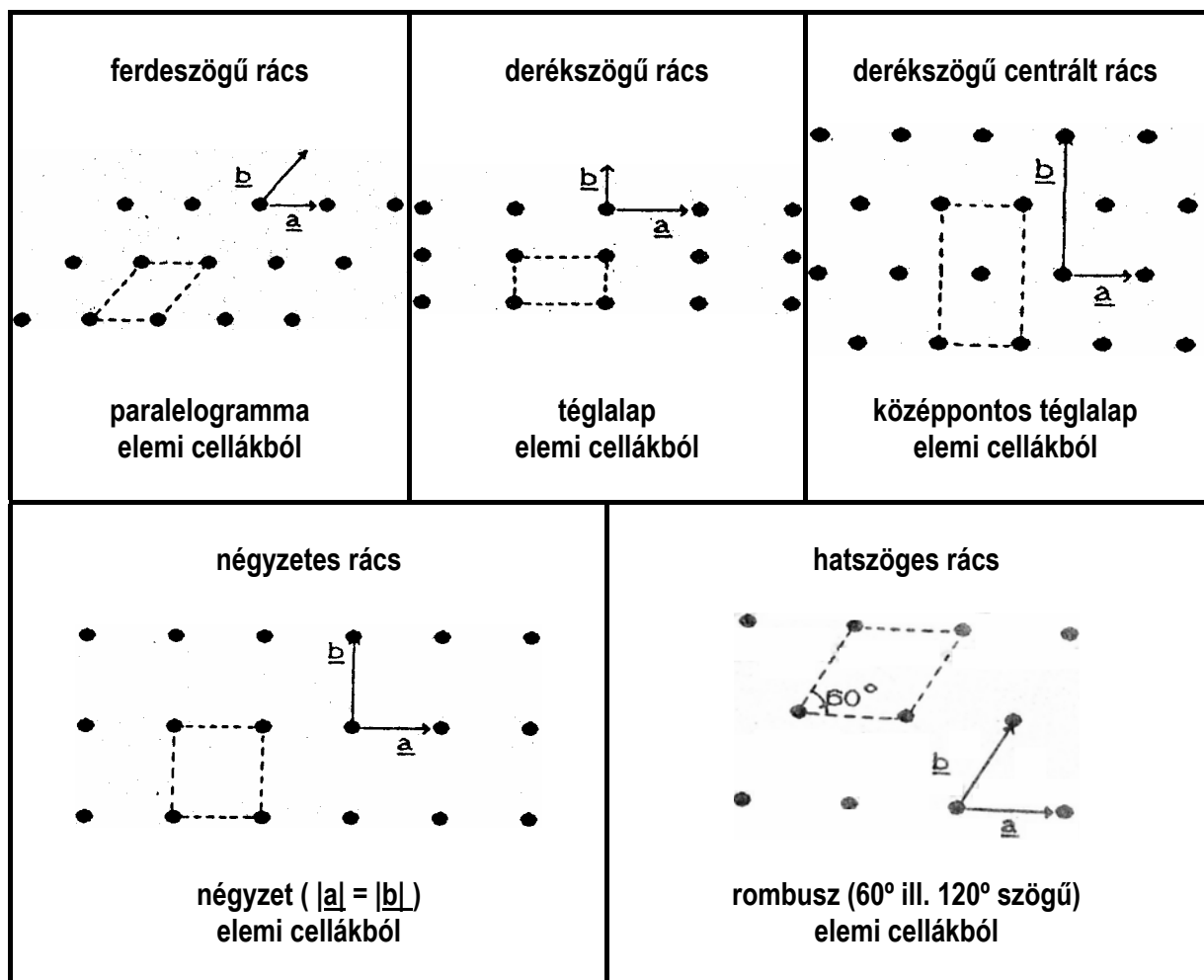
*Ma már eléggé ismertek a szerkezet és a kristályalak közötti összefüggések. Mintegy kétszáz éve, hogy a kristályok alakjával tudományos szinten is foglalkoznak. A geometriai kristálytan első törvénye ma is érvényes: „Egy bizonyos anyag kristályainak meghatározott lapjai és élei által bezárt szög az illető anyagra jellemző, állandó érték.” Ez a szögállandóság törvénye, s egyben azt is jelenti, hogy a kristályoknak - bár nem mindig ideálisak - a torzult lapok ellenére is mindig azonosak a lapszögeik. Egy kőskristály ideális esetben szabályos kocka, ez azonban torzulhat olyan módon, hogy a kockára jellemző négyzetlapok helyett minden oldalon téglalapokat látunk. A lapszögek azonban mégis derékszögek, vagyis az oldallapok 90°-ot zárnak be egymással.*

*Elsősorban ismeretterjesztési célból összeállított cikkünkkel ezen szerteágazó, igen érdekes, sőt esztétikai élményt is nyújtó szakterülethez kapcsolódva, a geometriai krisztallográfia számítógépes modelleket is alkalmazó bemutatását tűztük ki célul, természetesen a teljesség igénye nélkül, kivonatossan, szelektálva az ide vonatkozó ismerethalmazból. Érzékeltetni szeretnénk azt is, hogy a szemmel látható makroszkópikus és a legjobb felbontású (pl. alagút) elektronmikroszkópok segítségével „elérhető” szubmikroszkópikus szerkezet között milyen geometriai hasonlóságok, összefüggések fedezhetők fel. Olyan térbeli virtuális modellek készítésével is foglalkoztunk, amelyek jól használhatók a kristályszerkezetek szemléltető oktatásában, túllépve a tankönyvi lehetőségek keretein, viszont jól helyettesítve a költségesen építhető valós modelleket. Ezekről készített virtuális fényképeket is jelentős számban bemutatunk.*

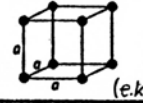
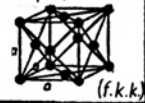
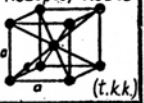
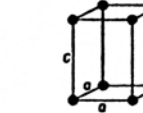
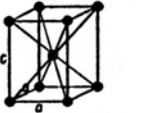
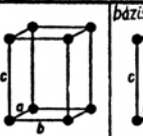
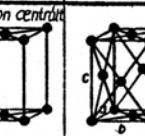
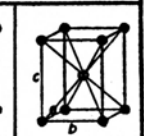


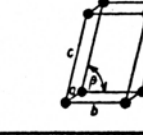
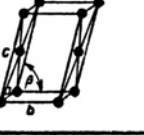
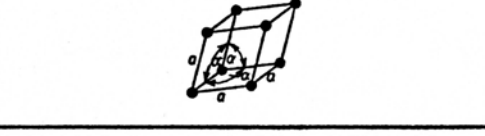
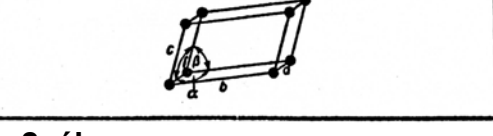
## A kristályrendszerek és geometriai jellemzőik

A kristályrácsokat translációk (eltolási) művelettel (jele: T) és más szimmetriaműveletekkel önmagukba vihetjük. Jellegzetes szimmetriaművelet a rácsponton áthaladó tengely körüli forgatás. Megadhatók olyan rácsok, melyek egy-, két-, három-, négy-, és hatfokúsú tengely körül - rendre  $2\pi$ ,  $2\pi/2$ ,  $2\pi/3$ ,  $2\pi/4$  és  $2\pi/6$  radiánnal, vagy ezek egész számú többszörösével - elforgatva önmagukba vihetők. Ezeket a forgástengelyeket 1-, 2-, 3-, 4-, és 6-os számmal jelöljük. Nincs azonban olyan rács, melyet  $2\pi/7$  vagy  $2\pi/5$  radiánnal elforgatva önmagára képezhetnénk.

Két dimenzióban öt rács típus (1. ábra) különböztethető meg, míg három dimenzióban 14 különböző (1 általános és 13 speciális) rács típus adható meg. Az általános rács típus az ún. háromhajlású rács. Alkalmassal csoportosítással e 14 rács típusot hét rendszerbe soroljuk, a szokásosan választott ún. Bravais-celláknak (Auguste Bravais-ról /1811-1863/ elnevezve) megfelelően: köbös (szabályos vagy izometrikus), tetragonális (négyzetes), ortorombos, hexagonális (hatszöges), monoklin (egyhajlású), romboéderes (trigonális vagy háromszöges) és triklin (háromhajlású) cellákat különböztetünk meg. Bravais 1849-ben geometriai úton vezette le, hogy ha a kristályrács felépítésében csak azonos tömegpontok vesznek részt, akkor 14 féle térbeli rács lehetséges (2. ábra).



1. ábra  
Az 5 síkbeli Bravais-cella

TRANSZLÁCIÓS VEKTOROKKAL KÉPZETT KRISZTÁLYRENDSZEREK		BRAVAIS RÁCSOK		
KÖBÖS	$ a_1 = a_2 = a_3 $ $a_1 \cdot a_2 = a_2 \cdot a_3 = a_1 \cdot a_3 = 0$	egyszerű köbös  (e.k.)	felületen középpontos (lapközepes) köbös  (f.k.k.)	térben középpontos (térközepes) köbös  (t.k.k.)
		TETRAONÁLIS		
ORTOROMBOS	$ a_1  \neq  a_2  \neq  a_3 $ $a_1 \cdot a_2 = a_2 \cdot a_3 = a_1 \cdot a_3 = 0$		bázislapon centrált 	
		HEXAGONÁLIS		
MONOKLIN	$ a_1  \neq  a_2  \neq  a_3 $ $a_2 \cdot a_3 \neq 0, a_1 \cdot a_3 = 0$			
ROMBOÉDERES	$ a_1 = a_2 = a_3 $ $a_1 \cdot a_2 = a_2 \cdot a_3 = a_1 \cdot a_3 \neq 0$			
TRIKLIN	$ a_1  \neq  a_2  \neq  a_3 $ $a_1 \cdot a_2 \neq a_2 \cdot a_3 \neq a_1 \cdot a_3 \neq 0$			

2. ábra  
A 14 térbeli Bravais-cella

Az egyes Bravais-cellák speciális tengelyviszonyain alapul a további rendszerezés. Az  $a_1$  vagy  $a$ ,  $a_2$  vagy  $b$ ,  $a_3$  vagy  $c$  elemi vektorok (transzlációs egységvektorok)  $|a_1| = a$ ,  $|a_2| = b$ ,  $|a_3| = c$  abszolút értékeket rácsparamétereknek nevezzük. Amennyiben két-két vektor skaláris szorzata ( $a_2 \cdot a_3$ ,  $a_1 \cdot a_3$ , ill.  $a_1 \cdot a_2$ ) nulla, a köztük lévő szög ( $\alpha$ ,  $\beta$  ill.  $\gamma$ ) derékszög. A 2. ábrán látható Bravais-cellák nem minden esetben egyeznek meg az ún. elemi cellákkal. Az elemi cella a kristályrács legkisebb egysége, ami magán viseli a rács jellegzetességeit. Esetenként a Bravais-cella sokkal szemléletesebben tükrözi a szimmetriákat, mint az elemi cella.

A 3. ábrán az elemek periódusos rendszerébe foglalva láthatók a jellemző kristályszerkezet típusok ill. az azokat jellemző rácsparaméter értékek. Az anyagok szerkezetében az atomok távolsága  $10^{-10}$  m nagyságrendű, ami anyagszerkezettani egységnek tekintendő:  $10^{-10}$  m = 0,1 nm = 1 Å (Ångström). A rácsparaméter-értékek ilyen egységben vannak megadva. Egyébként Anders Jonas Ångström (1814-1874) svéd fizikus az elemek spektrumát és a Nap színképét vizsgálta.

Az elemek kristályszerkezete																																												
H <sup>1</sup> 4K hcp 3.75 6.12															He <sup>4</sup> 2K hcp 3.57 5.83																													
Li 78K bcc 3.491	Be hcp 2.27 3.59	Az adatok a legelterjedtebb formára vonatkoznak, szobahőmérsékleten vagy a kelvinekben megjelölt hőmérsékleten. Az elemek további leírását lásd Wyckoff, Vol. 1, Chap. 2.; a komplexnek jelölt struktúrák leírását itt megtalálhatjuk. Az ABAC jelölés a szoros kitöltésű síkok sorrendjét adja meg.										B rombos	C gyémánt 3.567	N 20K kübös 5.66 (N <sub>2</sub> )	O komplex (O <sub>2</sub> )	F	Ne fcc 4.46																											
Na 5K bcc 4.225	Mg hcp 3.21 5.21	← Kristályszerkezet → ← a rácsparaméter, Å → ← c rácsparaméter, Å →										Al fcc 4.05	Si gyémánt 5.430	P komplex	S komplex	Cl komplex (Cl <sub>2</sub> )	Ar 4K fcc 5.31																											
K 5K bcc 5.225	Ca fcc 5.58	Sc hcp 3.31 5.27	Ti hcp 2.95 4.68	V bcc 3.03	Cr bcc 2.88	Mn kübös komplex	Fe bcc 2.87	Co hcp 2.51 4.07	Ni fcc 3.52	Cu fcc 3.61	Zn hcp 2.66 4.95	Ga komplex	Ge gyémánt 5.658	As rombos	Se hatszögös láncok	Br komplex (Br <sub>2</sub> )	Kr 4K fcc 5.64																											
Rb 5K bcc 5.585	Sr fcc 6.08	Y hcp 3.65 5.73	Zr hcp 3.23 5.15	Nb bcc 3.30	Mo bcc 3.15	Tc hcp 2.74 4.40	Ru hcp 2.71 4.28	Rh fcc 3.80	Pd fcc 3.89	Ag fcc 4.09	Cd hcp 2.98 5.62	In tetr. 3.25 4.95	Sn (α) gyémánt 6.49	Sb rombos	Te hatszögös láncok	I komplex (I <sub>2</sub> )	Xe 4K fcc 6.13																											
Cs 5K bcc 6.045	Ba bcc 5.02	La hatszögös 3.77 ABAC	Hf hcp 3.19 5.05	Ta bcc 3.30	W bcc 3.16	Re hcp 2.76 4.46	Os hcp 2.74 4.32	Ir fcc 3.84	Pt fcc 3.92	Au fcc 4.08	Hg rombos	Tl hcp 3.46 5.52	Pb fcc 4.95	Bi rombos	Po sc 3.34	At	Rn																											
Fr	Ra	Ac fcc 5.31	<table border="1"> <tr> <td>Ce fcc 5.16</td> <td>Pr hatszögös 3.67 ABAC</td> <td>Nd hatszögös 3.66</td> <td>Pm</td> <td>Sm komplex</td> <td>Eu bcc 4.58</td> <td>Gd hcp 3.63 5.78</td> <td>Tb hcp 3.60 5.70</td> <td>Dy hcp 3.59 5.65</td> <td>Ho hcp 3.58 5.62</td> <td>Er hcp 3.56 5.59</td> <td>Tm hcp 3.54 5.56</td> <td>Yb fcc 5.48</td> <td>Lu hcp 3.50 5.55</td> </tr> <tr> <td>Th fcc 5.08</td> <td>Pa négyzetes 3.92 3.24</td> <td>U komplex</td> <td>Np komplex</td> <td>Pu komplex</td> <td>Am hatszögös 3.64 ABAC</td> <td>Cm</td> <td>Bk</td> <td>Cf</td> <td>Es</td> <td>Fm</td> <td>Md</td> <td>No</td> <td>Lr</td> </tr> </table>														Ce fcc 5.16	Pr hatszögös 3.67 ABAC	Nd hatszögös 3.66	Pm	Sm komplex	Eu bcc 4.58	Gd hcp 3.63 5.78	Tb hcp 3.60 5.70	Dy hcp 3.59 5.65	Ho hcp 3.58 5.62	Er hcp 3.56 5.59	Tm hcp 3.54 5.56	Yb fcc 5.48	Lu hcp 3.50 5.55	Th fcc 5.08	Pa négyzetes 3.92 3.24	U komplex	Np komplex	Pu komplex	Am hatszögös 3.64 ABAC	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Lr
Ce fcc 5.16	Pr hatszögös 3.67 ABAC	Nd hatszögös 3.66	Pm	Sm komplex	Eu bcc 4.58	Gd hcp 3.63 5.78	Tb hcp 3.60 5.70	Dy hcp 3.59 5.65	Ho hcp 3.58 5.62	Er hcp 3.56 5.59	Tm hcp 3.54 5.56	Yb fcc 5.48	Lu hcp 3.50 5.55																															
Th fcc 5.08	Pa négyzetes 3.92 3.24	U komplex	Np komplex	Pu komplex	Am hatszögös 3.64 ABAC	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Lr																															

3. ábra  
Az elemek kristályszerkezete

A kristályokat három-, vagy a kristálytanban használatos négytengelyű koordináta-rendszer segítségével tájoljuk be. A legegyszerűbb esetben egy három (egymásra merőleges) tengelyű koordináta-rendszert helyezünk a kristály képzeletbeli középpontjába. A három tengely értelmezése:

- az „a” tengely, velünk szemben halad, és a + vége van hozzánk közelebb;
- a „b” tengely erre merőlegesen vízszintes és a + vége jobbra mutat;
- a „c” tengely függőleges és a felső vége a + oldal.

Ilyen tengelykereszthez viszonyítva egy-egy kristálylap 7 féle helyzetben lehet:

1. a-tengelyt metszi, b-vel és c-vel párhuzamos;
2. b-tengelyt metszi, a-val és c-vel párhuzamos;
3. c-tengelyt metszi, a-val és b-vel párhuzamos;
4. a- és b-tengelyt metszi, c-vel párhuzamos;
5. b- és c-tengelyt metszi, a-val párhuzamos;
6. a- és c-tengelyt metszi, b-vel párhuzamos;
7. mindhárom tengelyt metszi megegyező vagy eltérő arányban.

Kristályokon a következő szimmetriaelemek találhatóak:

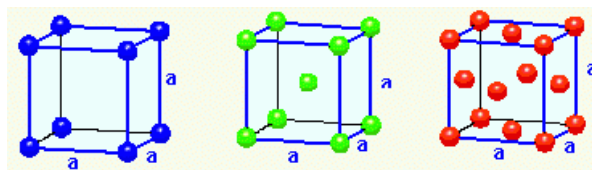
- szimmetriacentrum (szimmetriaközéppont) vagy inverziós centrum, jele T;
- szimmetriasíkok vagy tükörsíkok, jelük m;
- forgatási szimmetriatengelyek vagy gírek, jelük: 2, 3, 4, 6.

Kristályokon a szimmetriák mindig fedési műveletekkel ismerhetők fel. Például egy szimmetriatengely aszerint kapja nevét, hogy körülötte a kristály egy teljes ( $360^\circ$ -os) körbeforgatás során hányszor kerül önmagával fedésbe; kétszer, háromszor, négyszer vagy hatszor, és eszerint két-, három-, négy- vagy hatértékű a szimmetriatengely vagy más néven gír. (Egyértékű gírről beszélni értelmetlenség, mert ha bármilyen testet bármilyen tengely körül  $360^\circ$ -kal körbeforgatunk, az önmagával fedésbe kerül.) A kétértékű szimmetriatengely kristálytani elnevezése digír, a háromértékűé trigír, a négyértékűé tetragír és a hatértékűé hexagír. Ötértékű vagy hatnál nagyobb értékű szimmetriatengely - geometriai és kristálykémiai okok miatt - természetes kristályokon nem lehet, nem fér össze a kristály transzlációs szimmetriájával.

A szimmetriasík tükrözéses fedési művelet segítségével ismerhető fel. Ha a kristályt egy - a középpontján áthaladó - sík két tükörképi féltre osztja, akkor a kristálynak tükörsíkja vagy más néven szimmetriasíkja van. Egy kristályon több tükörsík is lehet. Szimmetriacentrum a kristály középpontja, ami egyben a pont szerinti szimmetriát is kifejezi. Ha a kristályon minden lapnak megtalálható a vele egybevágó, fordított állású, párhuzamos párja, akkor a kristályon szimmetriacentrum van, amit szokás inverziós centrumnak is nevezni (inverzió = megfordítás).

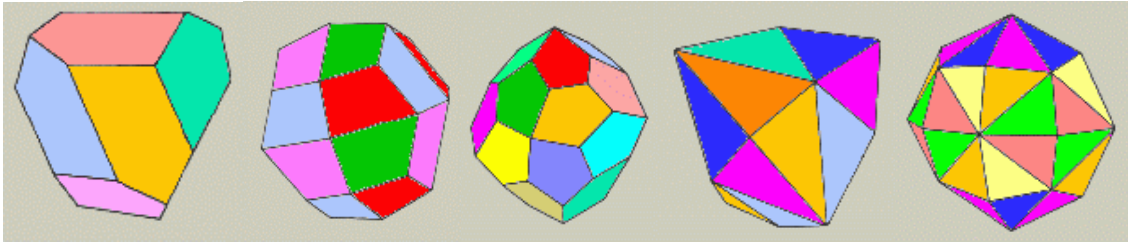
A felsoroltak egyszerű szimmetriaelemek. Abban az esetben, ha a kristályon olyan szimmetriaműveletek is végrehajthatók, amelyek forgatás + tükrözés vagy forgatás + inverzió eredményeképpen jönnek létre, akkor összetett szimmetriaelemről beszélünk. Bármilyen szimmetria-kombinációval kísérletezünk, a geometria szabályainak megfelelően mindössze kétféle összetett szimmetriaelem jöhet létre. Ezek: inverziós trigiroid és inverziós tetragiroid. Ha a lehetséges - egyszerű és összetett - szimmetriaelemeket valamennyi megvalósítható módon egymással kombináljuk, akkor ezekből mindössze 32 variációt lehet kialakítani. A hét kristályrendszer tehát összesen 32 kristályosztályt tartalmaz az alapján, hogy az elemi cellákból milyen geometriai formák hozhatók létre ill. valósulhatnak meg, a hézagmentes térkitöltést figyelembe véve.

I. A köbös (szabályos vagy izometrikus) rendszer egyszerű, tércentrált és lapcentrált Bravais-celláihoz (4. ábra)



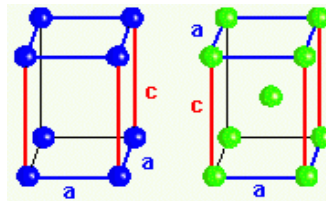
4. ábra  
A köbös rendszer Bravais-cellái

1. tetraédes pentagondodekaédes osztály,
  2. diakisdodekaédes osztály,
  3. pentagonkozitetraédes osztály,
  4. hexakisztetraédes osztály,
  5. hexakiszoktaédes osztály,
- rendelhető (5. ábra).



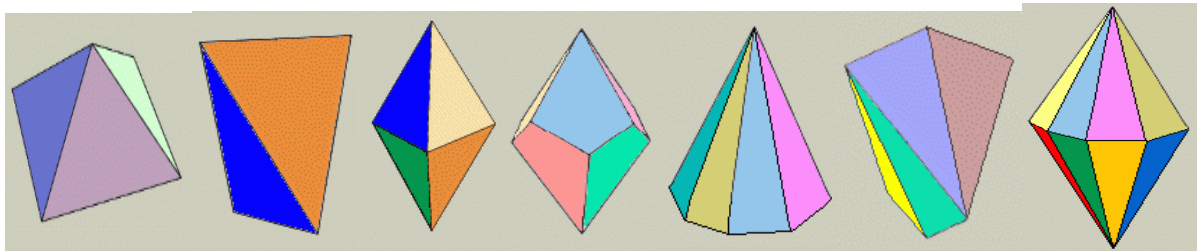
**5. ábra**  
**A köbös rendszer kristályosztályai**

II. A tetragonális (négyzetes) rendszer egyszerű és tércentrált Bravais-celláihoz (6. ábra)



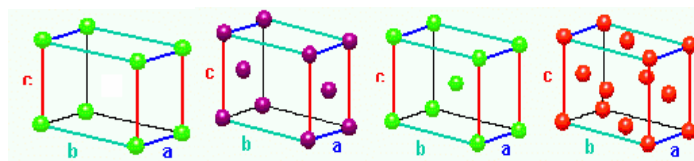
**6. ábra**  
**A tetragonális rendszer Bravais-cellái**

- 6. négyzetes piramosos osztály,
  - 7. négyzetes diszfenoidos osztály,
  - 8. négyzetes dipiramisos osztály,
  - 9. négyzetes trapezoéderez osztály,
  - 10. ditetragonális piramosos osztály,
  - 11. négyzetes szkalenoéderez osztály,
  - 12. ditetragonális dipiramisos osztály
- rendelhető (7. ábra)



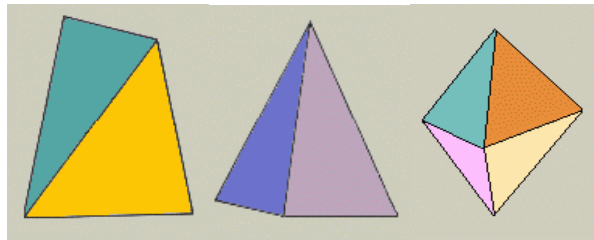
**7. ábra**  
**A tetragonális rendszer kristályosztályai**

III. Az ortorombos rendszer egyszerű, bázislapon centrált, tércentrált és lapcentrált Bravais-celláihoz (8. ábra)



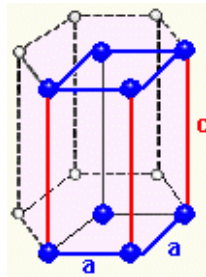
**8. ábra**  
**Az ortorombos rendszer Bravais-cellái**

- 13. ortorombos diszfenoidos osztály,
  - 14. ortorombos piramisos osztály,
  - 15. ortorombos dipiramisos osztály
- rendelhető (9. ábra).



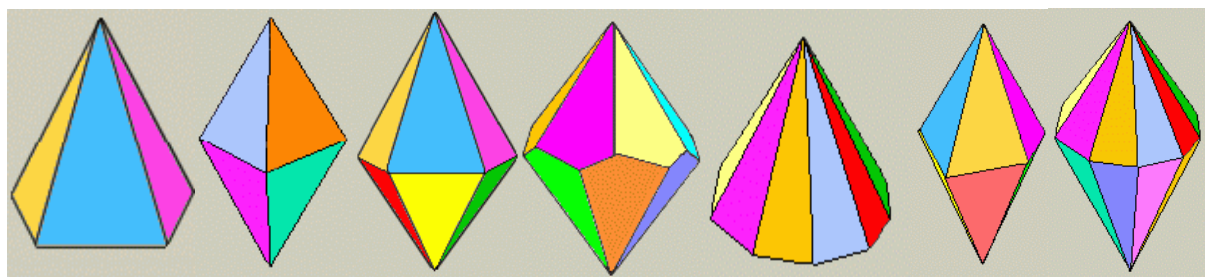
**9. ábra**  
**Az ortorombos rendszer kristályosztályai**

IV. A hexagonális (hatszögös) rendszer egyszerű Bravais-cellájához (10. ábra)



**10. ábra**  
**A hexagonális rendszer Bravais-cellája**

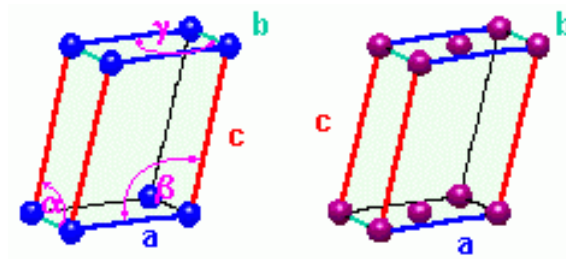
- 16. hexagonális piramisos osztály,
  - 17. trigonális dipiramisos osztály,
  - 18. hexagonális dipiramisos osztály,
  - 19. hexagonális trapezoéder osztály,
  - 20. dihexagonális piramisos osztály,
  - 21. ditrigonális dipiramisos osztály,
  - 22. dihexagonális dipiramisos osztály
- rendelhető (11. ábra).



**11. ábra**  
**A hexagonális rendszer kristályosztályai**

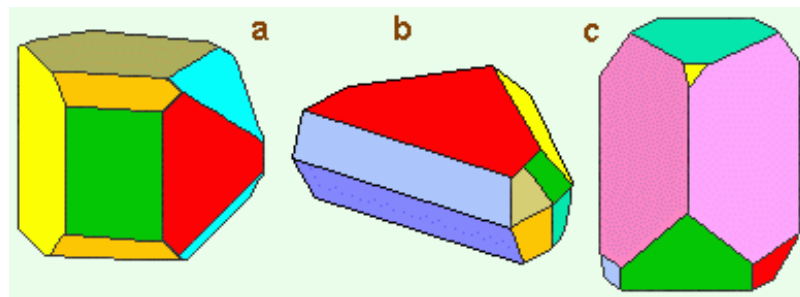
V. A monoklin (egyhajlású) rendszer egyszerű és bázislapon centrált Bravais-celláihoz (12. ábra)





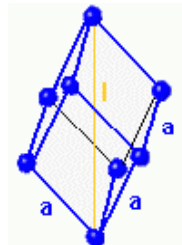
**12. ábra**  
**A monoklin rendszer Bravais-cellái**

23. egyhajlású szfenoidos osztály,  
 24. egyhajlású dómás osztály,  
 25. egyhajlású prizmás osztály  
 rendelhető (13. ábra).



**13. ábra**  
**A monoklin rendszer kristályosztályai**

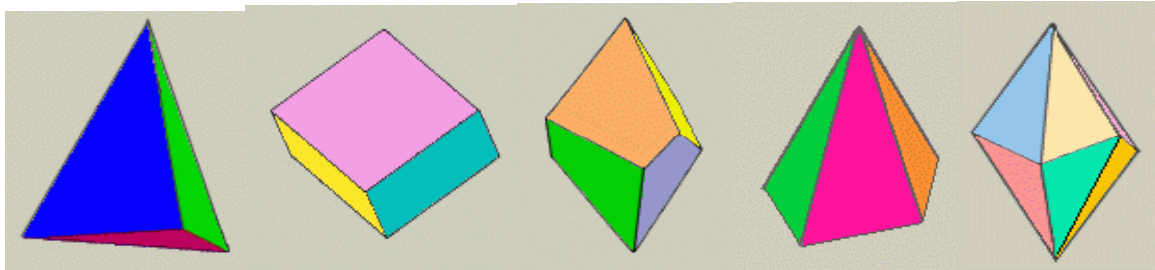
VI. A romboédres (trigonális vagy háromszöges) rendszer egyszerű Bravais-cellájához (14. ábra)



**14. ábra**  
**A romboédres rendszer Bravais-cellája**

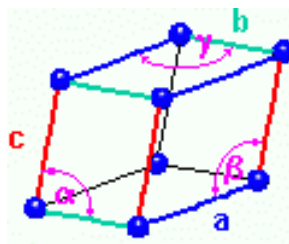
26. trigonális piramisos osztály,  
 27. trigonális romboédres osztály,  
 28. trigonális trapezoédres osztály,  
 29. ditrigonális piramisos osztály,  
 30. ditrigonális szkalenoédres osztály  
 rendelhető (15. ábra).





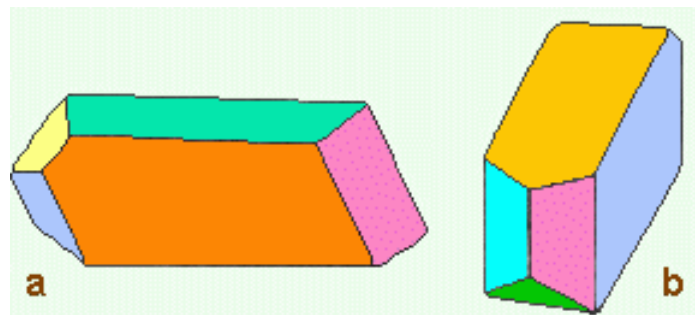
**15. ábra**  
**A romboédeses rendszer kristályosztályai**

VII. A triklin (háromhajlású) rendszer egyszerű Bravais-cellájához (16. ábra)



**16. ábra**  
**A triklin rendszer Bravais-cellája**

31. háromhajlású pedionos osztály,  
 32. háromhajlású véglapos osztály  
 rendelhető (17. ábra).



**17. ábra**  
**A triklin rendszer kristályosztályai**

A hét kristályrendszer egyben önálló koordinátarendszer is, tengelykeresztjük meghatározó jelentőségű. Az egyes kristályrendszerek tengelykeresztje tartalmazza a rendszer összes lehetséges szimmetriaelemét. A rendszeren belül azt az osztályt, amely ugyanezt a maximális szimmetriát mutatja, holoédesnek (teljes lapszámúnak) nevezzük. Ez a teljes lapszám mindig az általános helyzetű - a tengelyeket különböző arányban metsző - összetartozó lapokra vonatkozik.

Ha az általános helyzetű forma fele lapot tartalmaz a holoédeshez képest, akkor a kristályosztály hemiédeses vagy más néven feles. Ennek a hemiédeses lapszámnak három lehetséges típusát ismerjük:

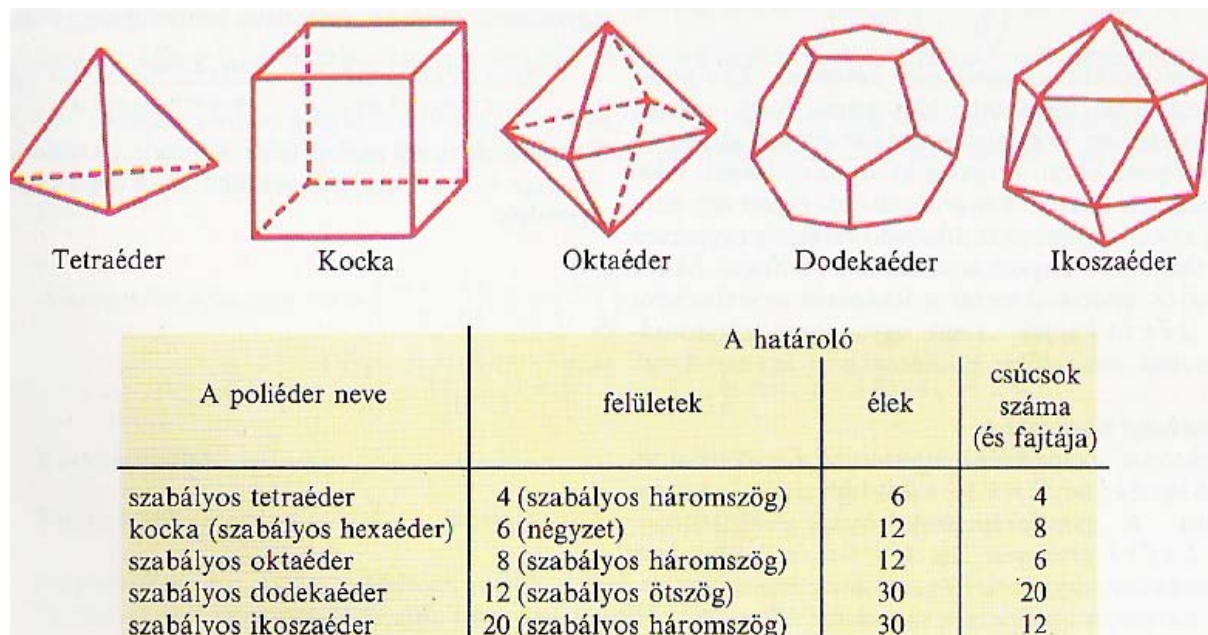
- a holoédeses osztály összes gírje megtalálható, tükörsík és inverzió nélkül: ez az enantiomorf osztály;

- a kristályon minden függőleges szimmetriaelem megvan, nincsenek vízszintes szimmetriaelemek: ez a hemimorf osztály;
- a rendszerre jellemző fő szimmetriasík és az inverziós centrum is megtalálható: ez a paramorf osztály.

Feles lapszámú osztályok előfordulnak inverziós feles formában is, amikor a rendszerre jellemző összetett szimmetriaelemek találhatóak az adott kristályosztályban; ezeket a nevezéktan másodfajúnak nevezi. A legkevesebb általános lapot tartalmazó kristályok a tetraédres vagy negyedes kristályosztályokba tartoznak. Ezekben az osztályokban csak a rendszerre jellemző gérek találhatóak meg.

### A köbös (szabályos) rendszer

Mint a neve is mutatja, a rendszer geometriai alapja a hexaéder (kocka). Az ilyen szubmikro-kristályráccsal rendelkező anyagok makrokristályai is szabályos testekként (poliéderekként) jelenhetnek meg (18. ábra), vagyis az elemi cella alakját követheti a makrokristály.



**18. ábra**  
**Az öt szabályos poliéder**

Platonikus testeknek nevezik a szabályos testeket, a konvex poliédereket, melyeknek élei, élszögei és lapszögei egyenlők. Az élek és élszögek egyenlőségéből következik, hogy a szabályos test lapjai egybevágó szabályos sokszögek. Az élszögek és a lapszögek egyenlőségéből következik, hogy a szabályos test szögletei egybevágó szabályos szögletek, tehát ugyanannyi élűek.

#### 1. Tetraéder (4 szabályos háromszöggel határolt test)

A cink vagy nyelvújításból származó nevéen horgany szulfidos ércásványát, a szfaleritet mutatja a 19. ábra.



**19. ábra**  
**Szfalerit kristály**

2. *Hexaéder (6 szabályos négyszöggel határolt test, vagyis kocka)*

A 20. ábrán a fluorit vagy másik elnevezéssel a folypát, míg a 21. ábrán a pirit, mint a legfontosabb szulfidos vasérc makrokristályai láthatók.



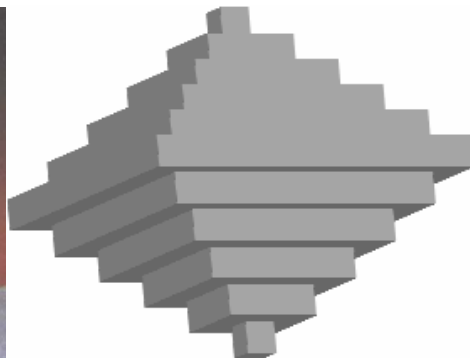
**20. ábra**  
**Fluorit kristályok**



**21. ábra**  
**Pirit kristályok**

3. *Oktaéder (8 szabályos háromszöggel határolt test)*

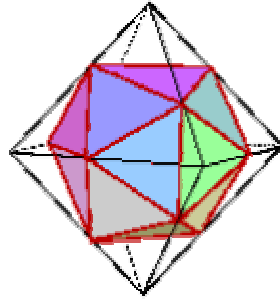
Egy oktaéderezes oxidos vasérc, a magnetit makrokristálya és szubmikroszkópikus rácselemekből való felépülési modellje látható a 22. ábrán.



**22. ábra**  
**Magnetit kristály és az oktaéder felépülése rácselemekből**

4. *Ikozaéder (20 szabályos háromszöggel határolt test)*

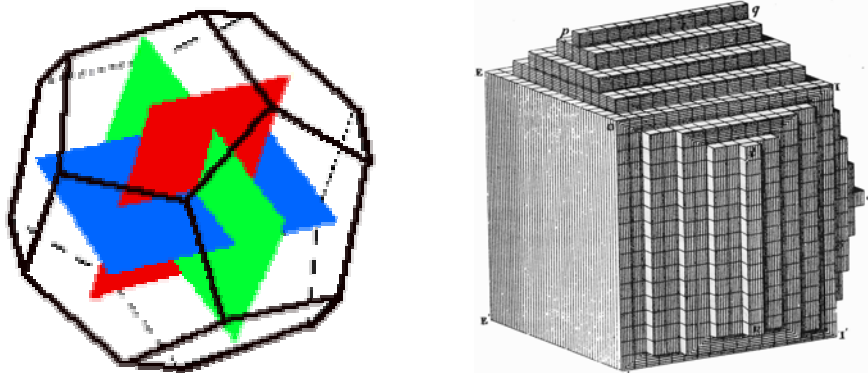
Az oktaéder éleinek arany metsző pontjait összekötve, egy ikozaédert kapunk eredményül (23. ábra). Az arany metszés (sectio aurea) szabálya szerint egy szakaszt úgy kell két részre osztani, hogy a kisebbik résznek a nagyobbikhoz való aránya megegyezzen a nagyobbik résznek az eredeti szakaszhoz való arányával:  
 $p : q = q : (p+q) = (5^{1/2}-1)/2 \approx 0,618$ .



**23. ábra**  
**Ikozaéder származtatása oktaéderből**

*5. (Pentagon)dodekaéder (12 szabályos ötszöggel határolt test)*

A dodekaéder és az ikozaéder között egy különleges kapcsolat van. Ez a két test egymásnak duálisa, ami azt jelenti, hogy az egyik lapközpontjai a másik csúcspontjait határozzák meg. Tehát az ikozaéder csúcspontjai egy dodekaéder lapközpontjait határozzák meg, ezért a három aranytéglalap csúcsai egy dodekaéder lapközpontjaival egyeznek meg (24. ábra bal oldalán piros, zöld és kék színekkel). Ezeknek az aranytéglalapoknak oldalélhosszai az aranymetszés szabálya szerint viszonyulnak egymáshoz. A dél-amerikai (pl. a perui) piritek eseténként dodekaédes kristályokat mutatnak (25. ábra).



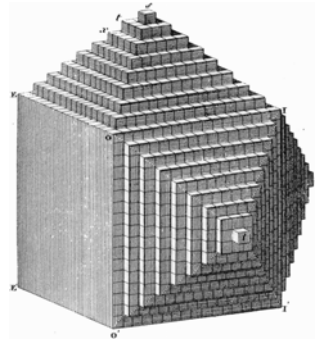
**24. ábra**  
**Dodekaéder felépülése ikozaéderből és ráscelemekből**



**25. ábra**  
**Dodekaédes pirít kristályok halmaza**

A *rombdodekaéder* félszabályos test, mivel lapjai nem szabályos sokszögek, hanem rombuszok. A magnetit egy másik, rombdodekaédes módosulata látható a 26. ábrán, a rombdodekaéder felépülésével együtt.



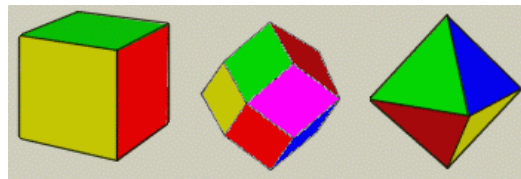


26. ábra

**Magnetit kristályok és a rombdodekaéder felépülése rácselemekből**

A *deltoiddikozitetraéder* lapjai szintén nem szabályos sokszögek, ugyanis 24 deltoid alakú lap határolja. A *tetrakiszhexaéder* olyan hexaédernek tekinthető, amelynek minden lapján egy négy lapból álló tető van, és e tetők lapjai egyenlőszárú háromszögek. A kristályok lehetnek még ezek kombinációi, „összenövésai” vagy torzult változatai is.

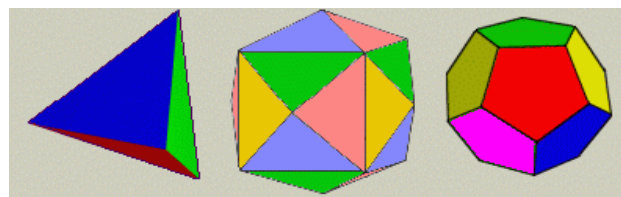
Köbös rendszerben háromféle térrács van: egyszerű köbös (sc = simple cubic), tércentrált köbös (bcc = body-centered cubic), és lapcentrált köbös (fcc = face-centered cubic). A köbös rendszer minden kristályosztályára jellemző formák a hexaéder, a rombdodekaéder és az oktaéder (27. ábra).



27. ábra

**A köbös rendszer minden kristályosztályára jellemző formák**






A köbös rendszer nem minden kristályosztályára jellemző, de gyakran előforduló formák a tetraéder, a tetrakiszhexaéder és a pentagondodekaéder (28. ábra).



28. ábra

**A köbös rendszer nem minden kristályosztályára jellemző formák**

A 29. ábrából olvashatók ki a három köbös rács jellemzői, a gyémántrács és a hexagonális rács fontosabb geometriai krisztallográfiai adataival összevethetően.

Kristályszerkezet és rácseleme	Anyagpéldák (periódusos rendszer elemei közül)	Koordinációs szám	Atomátmérő az „a” rácsparaméterrel kifejezve	Rácselemben foglalt atomok száma	Rácselem térkitöltési tényezője	Kristályrács legnagyobb hézagainak nagysága és helye	Legszorosabb illeszkedő síkok és irányok
 Egyszerű köbös	O, F	6	a	$8 \cdot 1/8 = 1$	$\pi/6 = 0,5236$ (52,36 %)	$(\sqrt{3}-1) \cdot a = 0,732 \cdot a$ méretű az $1/2, 1/2, 1/2$ helyen	{100} síkok (oldallapok), <100> irányok (oldalélek)
 Térközepes köbös	Li, Na, K, $\beta$ -Ti, V, Cr, Mn, $\alpha$ -Fe, $\delta$ -Fe, Rb, Nb, Mo, Cs, Ba, Eu	8	$(\sqrt{3}/2) \cdot a \approx 0,866 \cdot a$	$8 \cdot 1/8 + 1 = 2$	$\sqrt{3} \cdot \pi/8 = 0,6802$ (68,02 %)	$(\sqrt{5}-\sqrt{3}) \cdot a/2 = 0,252 \cdot a$ méretű az $1/2, 1/4, 0$ helyeken	{110} síkok (két testátlós síkok), <111> irányok (testátlók)
 Lapközepes köbös	Al, Ca, $\gamma$ -Fe, Ni, Cu, Sr, Rh, Pd, Ag, Ce, Yb, Ir, Pt, Au, Pb, Ac	12	$(\sqrt{2}/2) \cdot a \approx 0,707 \cdot a$	$8 \cdot 1/8 + 6 \cdot 1/2 = 4$	$\sqrt{2} \cdot \pi/6 = 0,7405$ (74,05 %)	$(1-[\sqrt{2}/2]) \cdot a = 0,293 \cdot a$ méretű az $1/2, 1/2, 1/2$ ill. $1/2, 0, 0$ helyek.	{111} síkok (három lapátlós síkok), <110> irányok (lapátlók)
 Gyémánt-rácsú köbös	C (gyémánt), Si, Ge, $\alpha$ -Sn	4	$(\sqrt{3}/4) \cdot a \approx 0,433 \cdot a$	$8 \cdot 1/8 + 6 \cdot 1/2 + 4 = 8$	$\sqrt{3} \cdot \pi/16 = 0,3401$ (34,01 %)	$(1-[\sqrt{3}/4]) \cdot a = 0,567 \cdot a$ méretű az $1/2, 1/2, 1/2$ ill. $1/2, 0, 0$ helyek.	{110} síkok (két testátlós és egy tetraéder oldalélű síkok), <110> irányok
 sűrűilleszkedésű Hexagonális	Be, C (grafit), Mg, Sc, $\alpha$ -Ti, Co, Zn, Se, Y, Zr, Ru, Cd, Te, La, Pr, Nd	12	a $c = (2 \cdot \sqrt{2}/\sqrt{3})a = 1,633 \cdot a$	$12 \cdot 1/6 + 2 \cdot 1/2 + 3 = 6$	$\sqrt{2} \cdot \pi/6 = 0,7405$ (74,05 %)	0,449-a méretű a tetraéderek közép-pontjaiban	{0001} síkok (hatszöges síkok), [1120] irányok (hatszögátlók)

29. ábra

### A legfontosabb kristályrácsok geometriai kristallográfiai adatai

A *koordinációs szám* egy rácspontbeli bázis legközelebbi szomszédainak száma, ami összefüggésbe hozható az anyag keménységével, részecskéi kötéserősségével. A kisebb koordinációs szám (pl. 4) rendszerint nagyobb keménységre, erősebb kötésre utal, míg a nagyobb érték (pl. 12) nagyobb alakváltozó-képességet takar.

Az *atom-* (vagy bázis-) *átmérő* egy relatív érték a radio-kristallográfiai (diffrakciós) úton meghatározható rácsparaméterhez viszonyítva, azaz nem a tényleges kiterjedése az atomnak, hanem a legközelebbi atomszomszédok távolsága. Ehhez feltételezzük, hogy a kristályrács atomjai merev gömbökként érintkeznek egymással. Az atomátmérő olyan jellemzője az anyagnak, mint a korábban már említett rácsparaméter, azaz anyagfajtaért értelmezhető és utal az anyagok szubsztitúciós (atomhelyettesítéses) ötvözhetőségére is.

Az *elemi cellában* (rácselemben) *foglalt atomok* (bázisok) *száma* függ a kristályrendszer altípusától figyelembe véve azt, hogy pl. a köbös elemi cella sarkán helyet foglaló bázis nyolcad-, az élén illeszkedő negyed-, a felületén lévő pedig felerészben vehető számításba a szomszédos cellákkal való összeépülés miatt. Ilyen módon a primitív cella 1, az alaplapon középpontos és a térben középpontos 2, a felületen középpontos 4 részecskét (bázist) tartalmaz.

A *térkitöltési tényező* a kristályrendszerek összehasonlító jellemzője, ami a rácselemben (elemi cellában) a gömböknek feltételezett bázisrészecskék által kitöltött térfogatnak és a rácselem térfogatának a hányadosa.

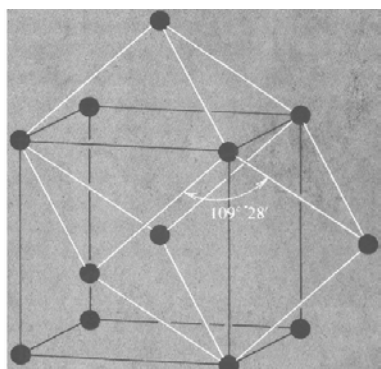
A kristályrács legnagyobb hézagainak helye és nagysága az interstíciós (atombeékelődéses) ötvözési, vagy szennyeződési lehetőségekről tájékoztat, ugyanis a kristályban lévő gömbszerűnek feltételezett bázisok között hézagok vannak. Ezek közül a legnagyobb "gömbreszecske" befogadni képes hézag középpontjának koordinátáit adjuk meg, ill. a hézag nagyságát a "beférő" gömb átmérőjével jellemezzük.

Definiálható a jellemző irányok egységnyi hosszúságára, a kristálysíkok egységnyi felületére és a rácselem térfogategységére eső atomok száma, ill. ezek alapján az iránymenti (vonalmonti), síkbeli és térbeli bázis- vagy atomsűrűség.

A legsűrűbb (legszorosabb) illeszkedésű síkok azok, amelyekben a felületegységre eső bázisok száma a legnagyobb, a szomszédokkal való illeszkedés (érintkezés) a legszorosabb. Ezek mentén valószínű a képlékeny alakváltozás, kellően nagy koordinációs szám esetén. Mivel sok azonos tulajdonságú síkról van szó, kapcsos zárójelbe foglalt Miller-indexekkel adhatók meg.

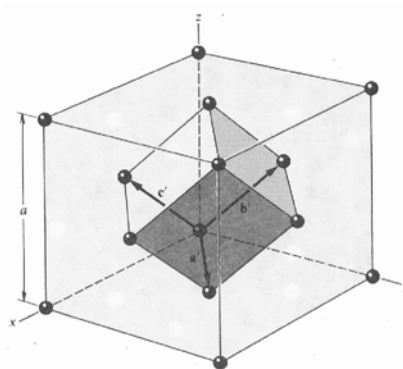
A legsűrűbb (legszorosabb) illeszkedésű irányok mentén a hosszegységre jutó bázisok száma a legnagyobb, a részecskek érintkezése hézagmentes. Ezen irányok benne vannak a legsűrűbb (legszorosabb) illeszkedésű síkokban. Megadásuk az összesítő csúcsos zárójelbe foglalt Miller-indexekkel történhet.

A 30. ábrán a tércentrált köbös rács elemi cellája látható, a 31. ábrán pedig a lapcentrált köbös rács elemi rácsvektorai. Az elemi cellák egyetlen bázist tartalmaznak, míg a köbös Bravais-cellákban két (tércentrált köbösnél), ill. négy (lapcentrált köbösnél) bázis van. A bázisok a kristályrácsot alkotó részecskek (atomok, ionok, molekulák) közös (általános) elnevezése. A cellabeli rácspontok helyzete az  $x, y, z$  koordinátákkal kifejezve, az egyes tengelyek menti koordináták az  $a, b$  és  $c$  vektorhosszak tört részei és a kezdőpont a cella egyik csúcsa. Így a cella középpontjának koordinátái:  $\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$ , a lapok középpontjaié pedig  $\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0$ ;  $0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$ ;  $\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}$ . A lapcentrált köbös és a tércentrált köbös rácsok bázisainak koordinátáit általában a Bravais-cellára vonatkoztatva adják meg.



30. ábra

A tércentrált köbös rács elemi cellája



31. ábra

A lapcentrált köbös rács romboédes elemi cellája az elemi rácsvektorokkal

A szabályos kristályrendszer képzeletbeli tengelykeresztje 3 egyenértékű, egymásra merőleges tengely, melyek egymással felcserélhetők. Az ilyen tengelykereszttel



jellemezhető kristályrendszer elnevezése is szabályos. A szabályos rendszerű kristályokon nem ritkán csak a legegyszerűbb formák (pl. kocka, oktaéder, rombdodekaéder) ismerhetők fel anélkül, hogy a kristályosztályra utaló, általános helyzetű formát találnánk. A szabályos rendszer legjellemzőbb szimmetriaeleme a 4 trigír, amely a kocka testátlóinak irányában keresendő. Osztályai a következők:

1. A kristálytani tengelyirányokban 3 digír, a kockatestátlók irányában 4 trigír vagy inverziós trigirioid jellemzi a szabályos rendszer negyeddes kristályosztályát. Itt kristályosodik a kobaltin és a gersdorfit.
2. A paramorf osztályban a tengelyirányokban 3 digírt, a testátlók mentén 4 inverziós trigirioidot, továbbá 3 tükörsíkot és inverziós centrumot találunk. Itt kristályosodik a pirit és a timsók egy része.
3. A szabályos rendszer enantiomorf osztályában megfigyelhető a tengelykereszt összes gírje (4 trigír, 3 tetragír és 6 digír), egyéb szimmetriája nincs.
4. A szabályos hemimorf osztály jellemzője a 4 trigír, 3 inverziós tetragirioid, továbbá 6 szimmetriasík. A fontosabb ásványok közül itt kristályosodik a szfalerit és a tetraedrit.
5. A holoéderes osztály szimmetriáját egy kockán is összeszámlálhatjuk: 4 inverziós trigirioid (a testátló irányokban), 3 tetragír (a kocka lapközepein, a kristálytani tengelyirányokban), 6 digír (a kocka élközepein), 3 fő- és 6 melléktükörsík, továbbá az inverziós centrum. Itt kristályosodnak a termésarany, a gyémánt, a galenit, a kősó és a gránát-csoport ásványai.

### Térben középpontos köbös rács

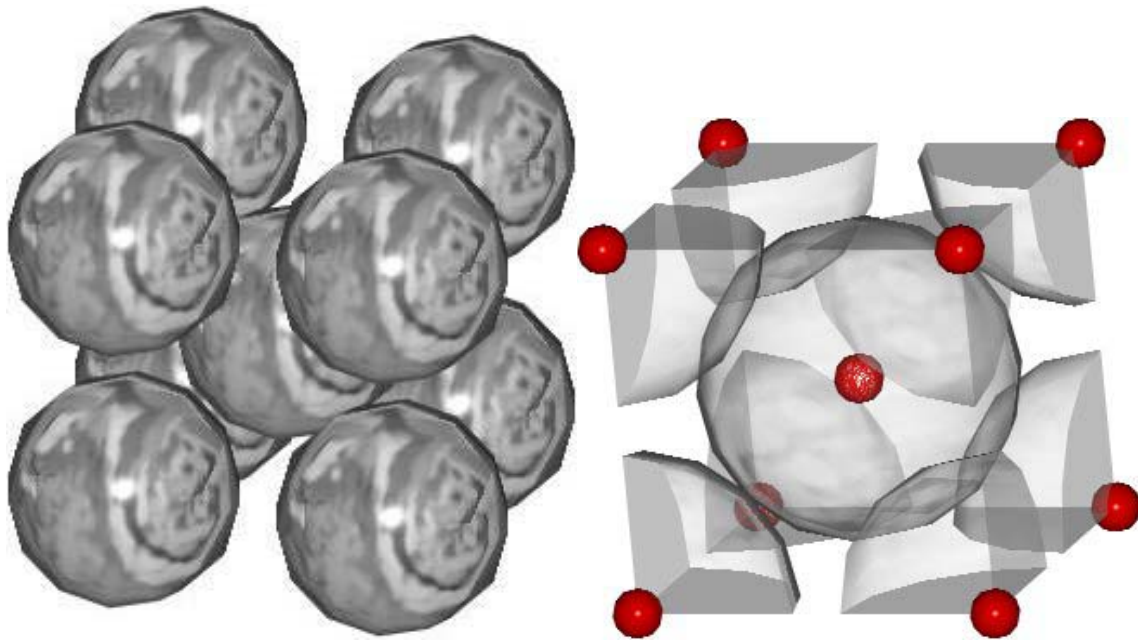
Térben középpontos köbös (t. k. k.) kristályrácsú fémek: Li, Na, K, Ba,  $\beta$ -Ti (1155 K = 882 °C < T < 1940 K = 1667 °C), V, Nb, Ta, Cr, Mo, W,  $\alpha$ -Fe (T < 1184K = 911 °C) és  $\delta$ -Fe (1665 K = 1392 °C < T < 1811 K = 1538 °C) stb. Egy példát a 32. ábra mutat be.



**32. ábra**

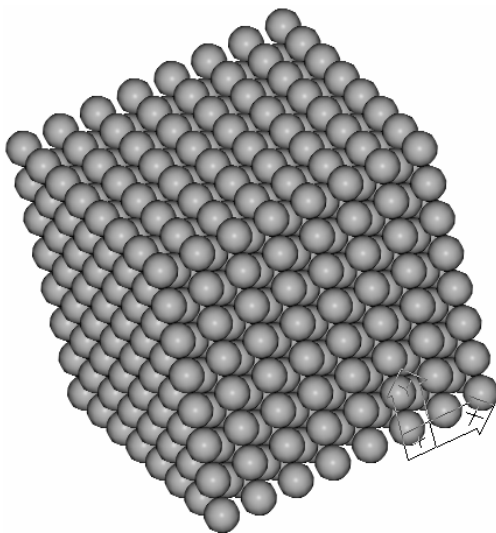
### Makrokristályok nélküli földi termésvas

Közös tulajdonságuk, hogy igen nagy az affinitásuk az oxigénhez. Bravais cellájuk olyan kocka, melynek nemcsak a sarkain, hanem a testátló közepén is van egy atom (33. ábra). Ez az ábra és a további ilyen virtuális fotók az általunk készített számítógépes modellekből származnak.

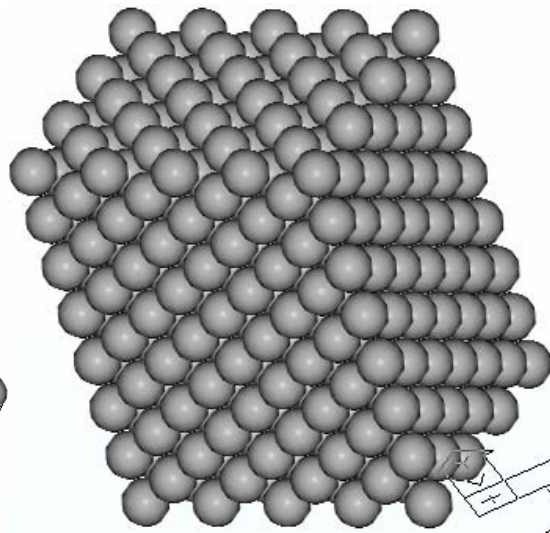


**33. ábra**  
**Térközepes köbös cella**

Az atomok a testátlón érintik egymást. Ebből következik, hogy az atomátmérő a testátló felével egyenlő, azaz  $d = 3^{1/2}a/2$ , ahol „a” a cella élhossza. Egy cellában két atom van, mert a kocka közepén elhelyezkedő atom csak az adott cellához tartozik, míg a csúcsain lévő további 7 cellához. Egy atom térfogata  $V_a = d^3\pi/6 = 0,34a^3$ . A két atom ennek kétszeresét, a cella térfogatának 68 %-át tölti ki. Ebben a rácsban az atomokkal be nem töltött térfogat több helyen oszlik el (34. ábra), ezért ezek a hézagok jóval kisebbek, mint pl. az egyszerű köbös rácsban.



**34. ábra**  
**Térközepes rács**



**35. ábra**  
**Torzult lapközepes rács a térközepes rácsban**

A legnagyobb rácshézag az  $\frac{1}{2}$ ,  $\frac{1}{4}$ , 0 típusú helyeken van. Ezeknek legkisebb mérete  $0,252a$ . Ennél kisebb üreg az  $\frac{1}{2}$ , 0, 0, valamint az  $\frac{1}{2}$ ,  $\frac{1}{2}$ , 0 helyeken található, amelyeknek a mérete  $0,134a$ . A rács legtöbb atomot tartalmazó síkja a rombdodekaéder {110} sík, a legsűrűbb illeszkedési irány pedig a testátló  $\langle 111 \rangle$ . A köbös rendszer hat síkja {110} egymással szabályos rombdodekaédert képez, innen

az elnevezés. (A köbös rendszer „szabályos” elnevezése abból adódik, hogy a makrokristályok szabályos testek, másrészt a Bravais cella is szabályos test). A négy testátló mentén két-két legközelebbi szomszéd van, így 8 a koordinációs szám. A 35. ábra a térközepes rácsban „található” torzult lapközepes rácsot mutatja.

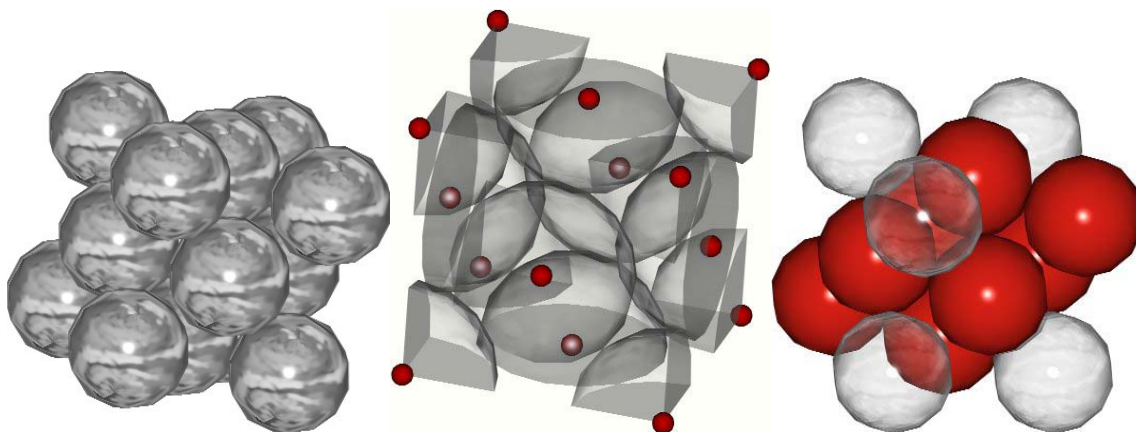
### Felületen középpontos köbös rács

Felületen középpontos köbös (f. k. k) rácsú fémek: Ca, Cu, Au (36. ábra), Ag, Al, Th, Pb,  $\gamma$ -Fe ( $1183\text{ K} = 910\text{ }^\circ\text{C} < T < 1665\text{ K} = 1392\text{ }^\circ\text{C}$ ), Ni, Rh, Pd, Ir, Pt, Th stb.



**36. ábra**  
**Termésréz és termésarany**

Bravais cellájukban a sarokpontokon kívül minden kockalap középpontjában is van egy-egy atom (37. ábra). Mivel így a felületen levő atomok két cellához tartoznak, egy cellán belül négy atom van. Az atomok a lapátlón érintik egymást, ezért az atomátmérő a lapátló felével egyenlő  $d = 2^{1/2}a/2$ . Egy atom térfogata  $V_a = d^3\pi/6 = 0,185a^3$ : Ennek négyszerese adja az atomokkal betöltött térfogat nagyságát, ami  $0,74a^3$ .

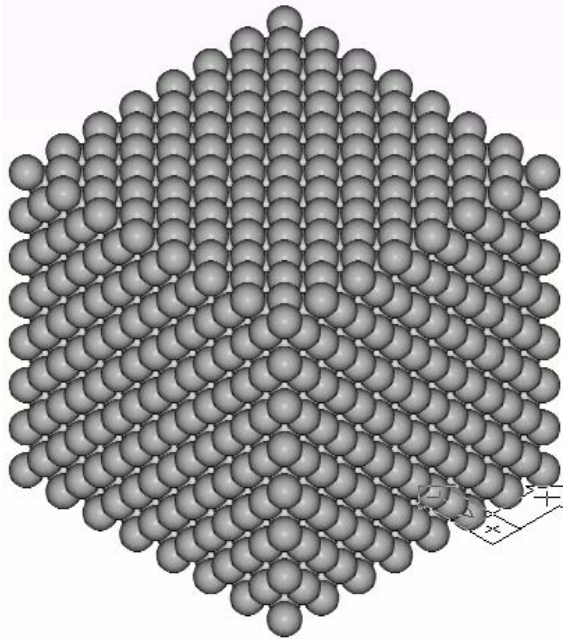


**37. ábra**  
**Lapközepes köbös cella**

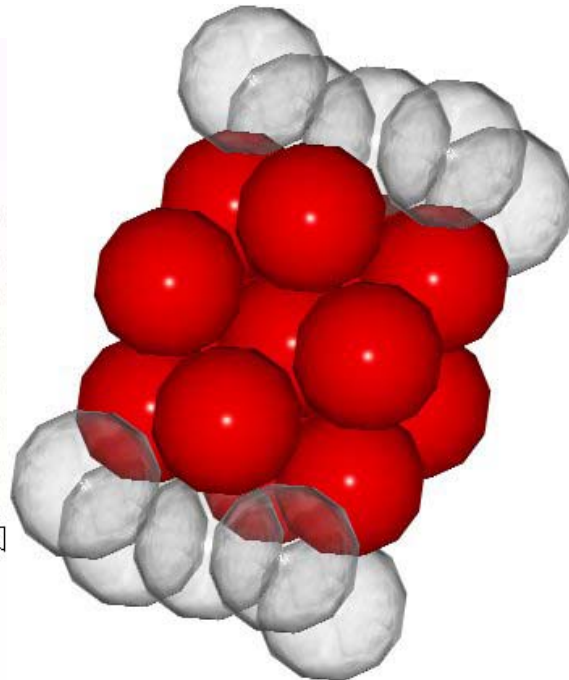
Ebben a szerkezetben tehát az atomok az összes tér 74 %-át töltik ki. Ha az atomokat merev gömböknek tekintjük, akkor ez az a térrész, amit az atomok maximálisan kitölthetnek. Ezért nevezik ezt a rácsot a legszorosabb illeszkedésű rácsnak (38. ábra). Minden atomnak tizenkettő legközelebbi szomszédja van, így a koordinációs szám 12. A legtöbb atom az ún. oktaédersíkokon  $\{111\}$  illeszkedik, ezeken pedig a legszorosabb illeszkedésű irányok az  $\langle 110 \rangle$  lapátlók. A legnagyobb rácshézagot az  $\frac{1}{2}, 0, 0$  ill. az  $\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$  helyeken találjuk. Ezeknek nagysága  $0,293a$ . Érdekes összevetni ezt az eredményt a térben középpontos szerkezetre



megállapított értékkel. Annak ellenére, hogy ez a rács nagyobb térkitöltésű, mint a térben középpontos köbös rács, az elemi celláiban nagyobb az atomok közötti rácshézag. Itt néhány helyre korlátozódik csupán, ott viszont jóval több helyen oszlik meg a rácshézag.



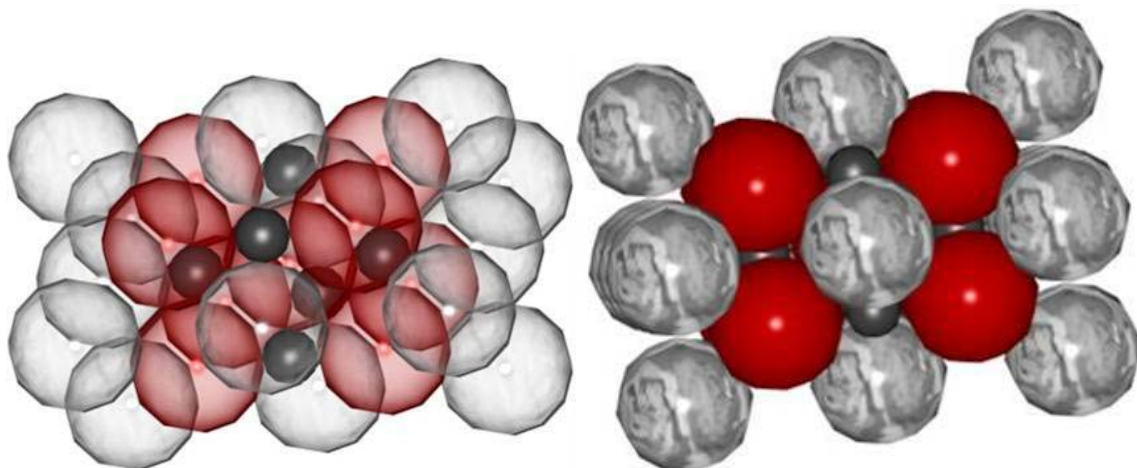
**38. ábra**  
**Lapközepes rács**



**39. ábra**  
**Torzult hexagonális cella a lapközepes rácsban**

A  $\{111\}$  síkokban - az ún. oktaédersíkokban - az atomok a legszorosabb illeszkedésben rendeződnek, ami azt jelenti, hogy egy atomnak egy ilyen síkban hat legközelebbi szomszédja van, és mind a hatot érinti. Ezen felül még három atomot érint a szóban forgó sík felett és ugyanannyit az alatt. A felületen középpontos köbös fémeket tehát úgy is elképzelhetjük, hogy ezek ilyen legsűrűbb illeszkedésű síkok rétegeiből állnak. Előfordulhat a felületen középpontos köbös és a hexagonális kristályrács esetében (39. ábra), hogy a jellegzetes atomrétegek (rácssíkok) nem szabályos sorrendben követik egymást (felületen középpontosban ABCABC helyett pl. ABABCA, hexagonálisban ABABAB helyett pl. ABCABA), amit kristálytani rétegződési hibának neveznek.

Az acélokban edzéskor - a kritikus hűtési sebesség felett - az allotróp átalakulás dominál a diffúzióval szemben. A karbonnak nincs ideje kiválni a lapközepes köbös rácsból cementit ill. más karbid formájában, ezért a fémionok közé „szorul” C atomok „elakasztják” az allotróp átalakulást is. (A karbon a 6-os rendszámú szén ötvözőként való jelenlétére utaló elnevezés, megkülönböztetésül pl. a szilárd tüzelőanyag nevéből.) Így egy metastabil lapcentrált köbös rács jön létre, benne egy túltelített, tetragonálissá torzult térközepes köbös ráccsal (40. ábra). Az egész struktúra - a keletkező martenzit tűk nyomásának hatására - feszített állapotban van. Mivel a kiinduló ausztenit maximális C-tartalma 2,14% lehet, ezért a modellel ellentétben csak kb. negyed C atom jut egy cellára.

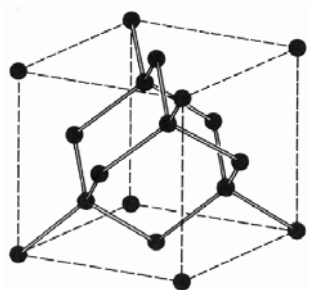


40. ábra

Martenzites átalakulást szemléltető, tetragonálissá torzult térközepes köbös cella a lapközepes köbös rácsban.

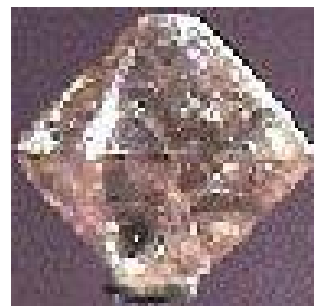
### Gyémánt rács

A tetraédes kötés szerkezetű (41. ábra) gyémánt (42. ábra) térrácsa olyan lapcentrálts köbös (43. ábra), amelyben minden atomnak négy közvetlen és 12 közeli szomszédja van. Az egységkockában nyolc atom foglal helyet. A gyémántrács viszonylag üres, a merev gömbök a térnek legfeljebb 34 %-át töltik ki, ez a legszorosabb illeszkedés kitöltési arányának 46%-a. Gyémántszerkezetű (44. ábra) a szén, a szilícium, a germánium és a szürke ón ( $\alpha$ -ón) kristálya, rácsállandójuk rendre 3,56, 5,43, 5,65 és 6,46 Å. A gyémántrács az irányított kovalens kötés velejárója.



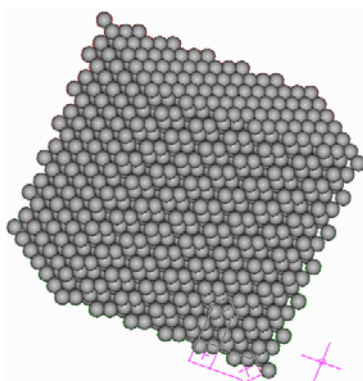
41. ábra

Gyémánt tetraédes kötés szerkezete



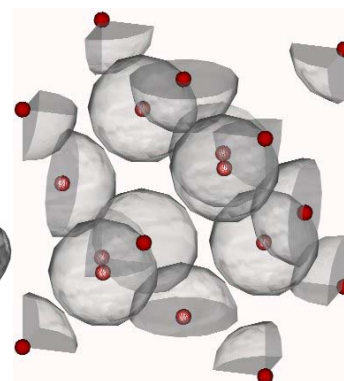
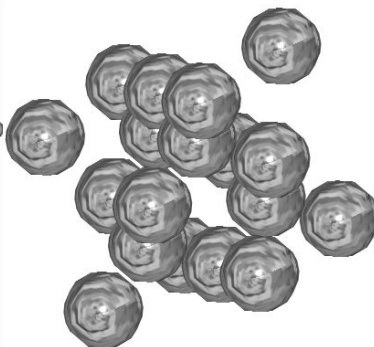
42. ábra

Gyémánt kristály



43. ábra

Gyémántrács

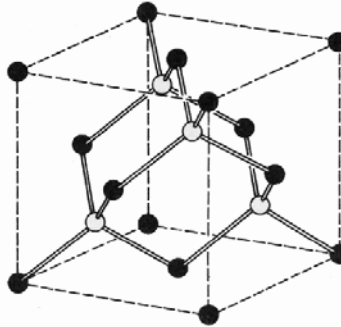


44. ábra

Gyémánt cella

## Szfalerit rács

A gyémántszerkezetet tekinthetjük két, egymáshoz képest negyed testátlónyival eltolt lapcentrált köbös szerkezet együttesének, eredőjének is. A köbös cinkszulfid (cinkblende) szerkezetét ebből úgy kapjuk, hogy az egyik lapcentrált köbös rácsba cink-, a másikba kénatomokat helyezünk, ahogyan azt a 45. ábra mutatja.



45. ábra

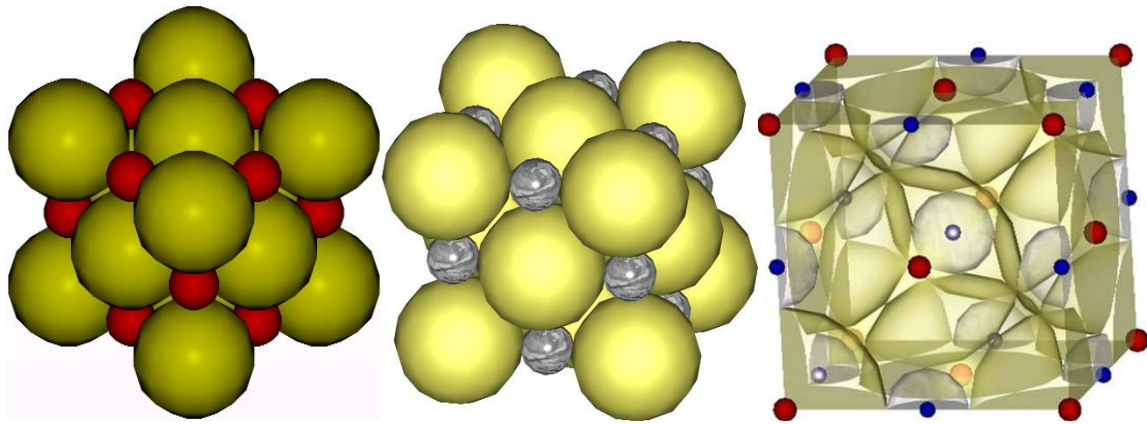
### Kübös cinkszulfid tetraédes szerkezete

A kocka geometriájú Bravais-cellában a Zn-atomok koordinátái:  $0,0,0$ ;  $0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$ ;  $\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}$ ;  $\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0$ , a S-atomoké pedig:  $\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4}$ ;  $\frac{1}{4}, \frac{3}{4}, \frac{3}{4}$ ;  $\frac{3}{4}, \frac{1}{4}, \frac{3}{4}$ ;  $\frac{3}{4}, \frac{3}{4}, \frac{1}{4}$ , így a cellákban négy-négy Zn-S pár helyezkedik el. Minden atomot négy ellentett fajtájú atom vesz körül azonos távolságban, szabályos tetraédert alkotva. A gyémántszerkezetben a közvetlenül szomszédos atomokat összekötő szakasz felezőpontjában inverziós szimmetria-középpontok vannak, de a cinkszulfid szerkezetnek nincs inverziós szimmetriája. Az inverzió az  $r$  pontot  $-r$ -be viszi. A tetraéder nem vihető önmagába a középpontja körüli inverzióval. Ha megfigyeljük az atomok elrendeződését a testátló mentén, a gyémántban  $CC \cdot \cdot CC \cdot \cdot CC$  a sorrend (a pontok üres helyeket jelölnek), a cinkszulfidban pedig  $ZnS \cdot \cdot ZnS \cdot \cdot ZnS$ , ami pedig inverzióval a  $SZn \cdot \cdot SZn \cdot \cdot SZn$  sorrendbe megy át, tehát nem invariáns. Néhány köbös cinkszulfid szerkezetben kristályosodó anyag Ångström-ben megadott rácsparaméterei:

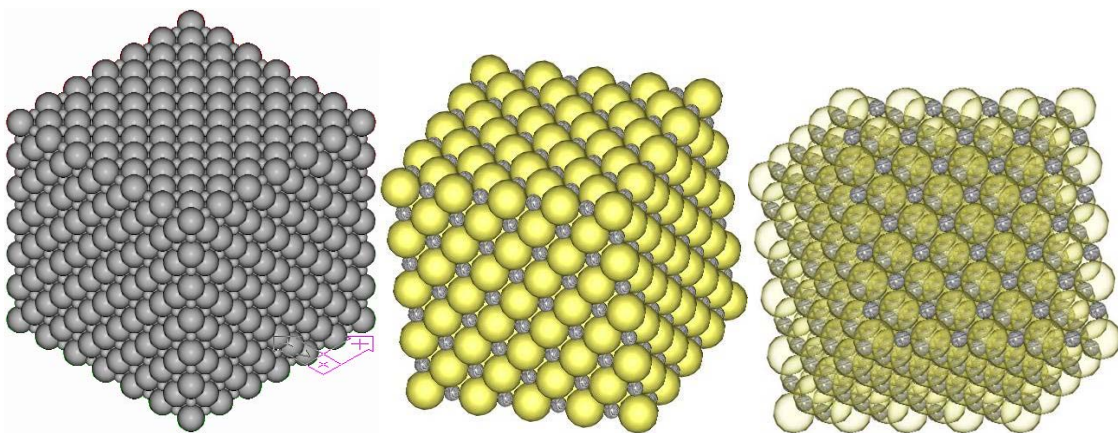
anyag	a [Å]	anyag	a [Å]
CuF	4,26	CdS	5,82
CuCl	5,41	InAs	6,04
AgI	6,47	InSb	6,46
ZnS	5,41	SiC	4,35
ZnSe	5,65	AlP	5,42

## Halit rács

Az NaCl cella a 46. ábrán, a rács a 47. ábrán látható. A Bravais-rács lapcentrált köbös, egyetlen Na- és egyetlen Cl-atomot tartalmaz, a két atom közötti távolság egyenlő az egységkocka fél testátlójának hosszával. Minden egységkockában négy Na-Cl páros van, atomjaik koordinátái: Cl:  $0,0,0$ ;  $\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0$ ;  $\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}$ ;  $0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$ ; Na:  $\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$ ;  $0, 0, \frac{1}{2}$ ;  $0, \frac{1}{2}, 0$ ;  $\frac{1}{2}, 0, 0$ .



46. ábra  
Halit cella



47. ábra  
Halit rács

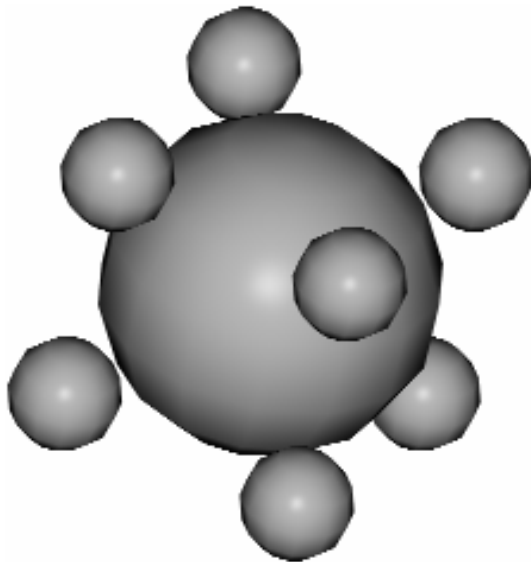
A kristályban minden egyes iont hat ellentétes töltésű közvetlen szomszéd vesz körül. A  $\text{Na}^+$  ionnak egységnyi pozitív töltése van, így elektron-konfigurációja azonos a neonéval. A  $\text{Cl}^-$  ionnak egységnyi, negatív töltése van, tehát konfigurációja megegyezik az argon konfigurációjával. A NaCl-szerkezetben kristályosodó anyagok közül néhányat az alábbi táblázat ismertet:

anyag	a [Å]	anyag	a [Å]
LiH	4,08	AgBr	5,77
NaCl	5,63	MgO	4,20
KCl	6,29	MnO	4,43
PbS	5,92	KBr	6,59

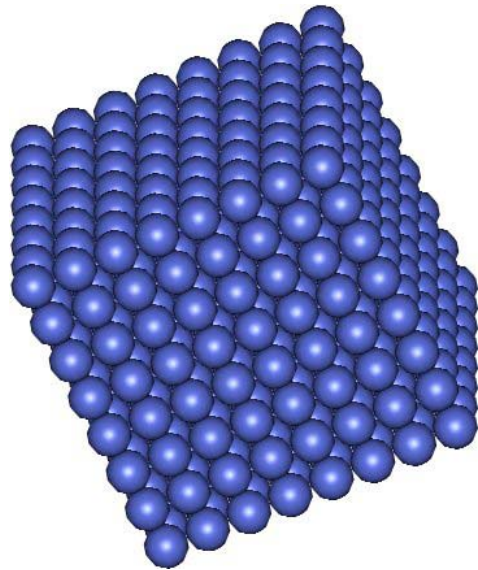
### Egyszerű köbös rács

A céziumklorid-szerkezetben a cella (48. ábra) egy Cs-Cl párt tartalmaz, amelynek atomjai az egyszerű köbös rács (49. ábra) 0,0,0 koordinátájú csúcaiban és  $\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$  helyzetű középpontjában helyezkednek el. A kristály minden atomját nyolc ellentétes fajtájú, együttesen kockaformát alkotó atom fogja közre, a koordinációs szám így nyolc.





**48. ábra**  
**CsCl cella**

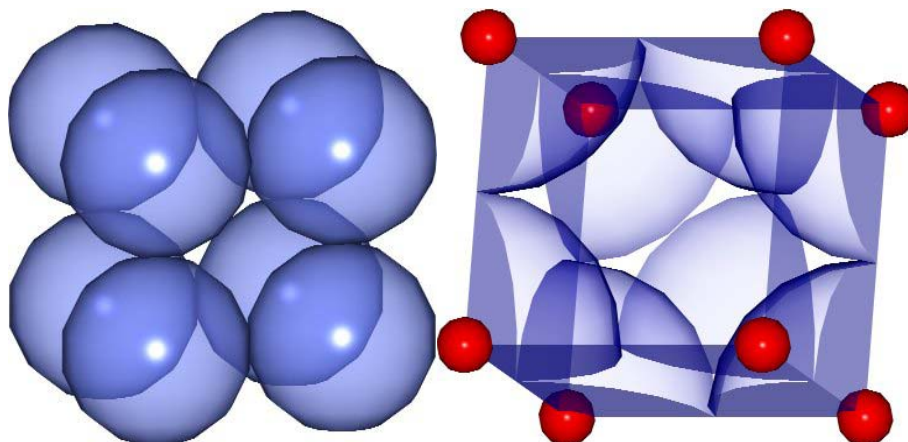


**49. ábra**  
**Az egyszerű köbös rács**

Néhány CsCl-elrendezésű kristályos anyag a rácsparaméterével:

anyag	a [Å]	anyag	a [Å]
CsCl	4,11	CuZn	2,94
TlBr	3,97	AgMg	3,28
TlI	4,20	LiHg	3,29
NH <sub>4</sub> Cl	3,87	AlNi	2,88
CuPd	2,99	BeCu	2,70

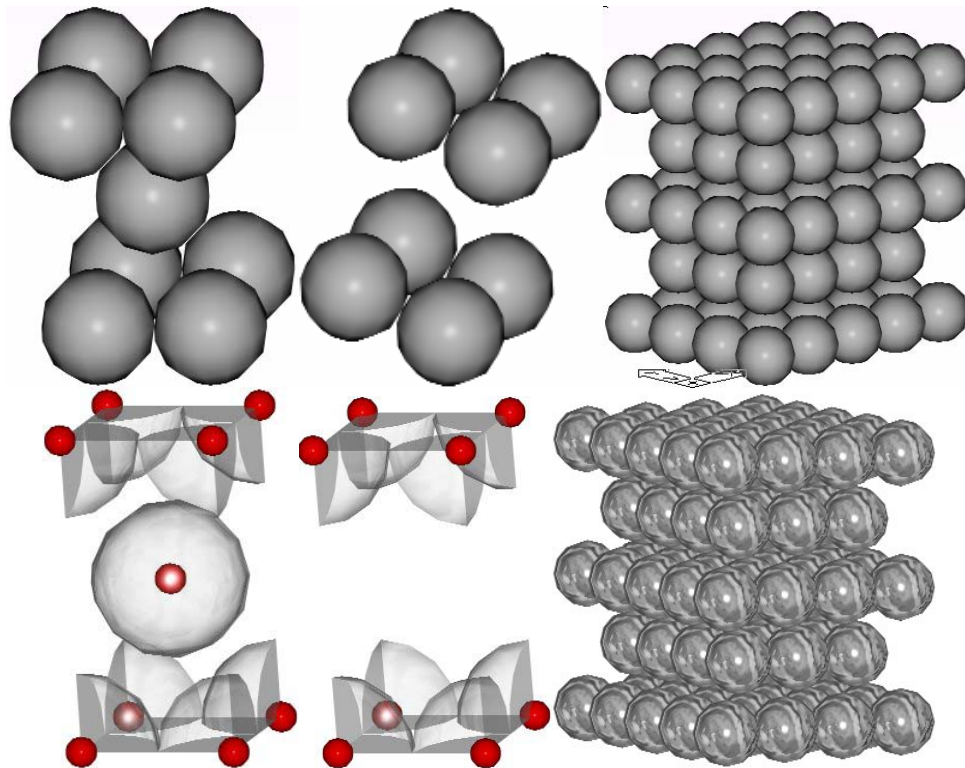
Nem ritka az egyszerű köbös Bravais-rácsra épülő kristályszerkezet, azonban egyetlen ismertebb elem sem kristályosodik egyszerű köbös szerkezetben. Ezek közé tartozik az oxigén, a fluor, a polónium, a mangán (a Periodic Library szerint ez térközepes) és az aktínium (a Periodic Library szerint ez felületen középpontos). Tehát csak a fluor és az oxigén rendelkezik valódi egyszerű köbös ráccsal (50. ábra), ugyanis az egyszerű köbösnek tartott polónium rácsa valójában egy igen kis hajlásszögű monoklin rács.



**50. ábra**  
**Egyszerű köbös rácselem**

## A tetragonális (négyszöges) rendszer

A rendszer (51. ábra) geometriai alapja a négyzetes oszlop (négyzet alapú egyenes hasáb).



51. ábra

### Térközepes és egyszerű tetragonális cella és a térközepes rács

Három egymásra merőleges tengely jellemzi, melyekből a két vízszintes azonos, a függőleges ettől eltérő hosszúságú, így a tengelykereszt és a kristályrendszer megnevezése négyzetes vagy tetragonális. A tetragonális tengelykereszt lehetséges szimmetriája: inverziós centrum, 4 függőleges + vízszintes szimmetriasík, függőleges tetragír és 4 vízszintes digír. A tetragonális rendszer bizonyos értelemben különbözik a korábban felsorolt kristályrendszerektől. Itt ugyanis a c tengely kitüntetett azáltal, hogy ez egyben tetragír. A tetragonális rendszert és a c tengely irányában nagyobb értékű gíreket (trigír, hexagír) tartalmazó rendszereket együttesen főtengelyes kristályrendszereknek is nevezzük. A tetragonális rendszer 7 kristályosztályt tartalmaz:

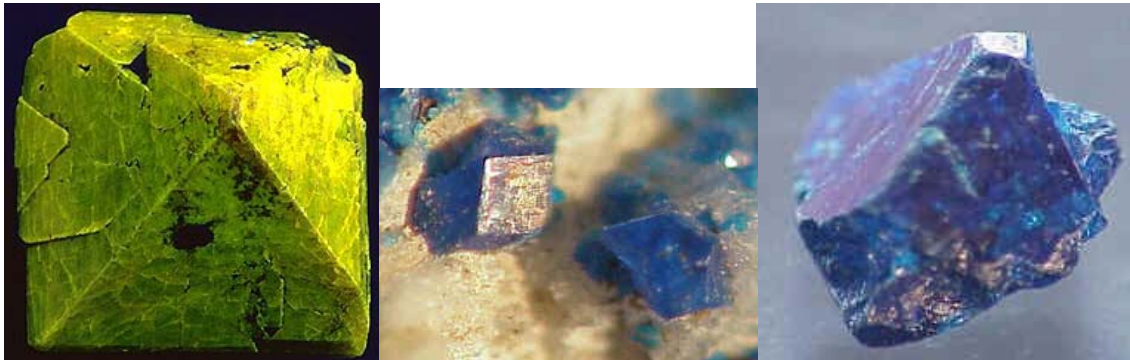
1. A tetragonális negyed-es osztályban a c tengelyirányban tetragír található, egyéb szimmetriaeleme nincs.
2. A tetragír mellett vízszintes tükörsík és inverziós centrum van a tetragonális paramorf osztályban. Itt kristályosodik a scheelit, powellit.
3. A főtengely irányában tetragírt, vízszintesen összesen 4 digírt találunk a tetragonális enantiomorf osztályban.
4. A c-tengely irányában tetragír és 4 függőleges tükörsík található a hemimorf osztályban.
5. A tetragonális tengelykeresztnek maximális szimmetriája van (inverzió, tetragír, 4 digír, 4+1 tükörsík) a holoéderes osztályban. Mint minden kristályrendszerben, itt is a legtöbb ásvány a holoéderes osztályban kristályosodik, így a rutil, kassziterit,

cirkon (52. ábra) stb.

6. A tetragonális másodfajú negyed-es osztályban a c tengely irányában mindössze egy inverziós tetragiroid figyelhető meg.

7. A tetragonális másodfajú feles kristályosztályban a c tengely irányában inverziós tetragiroid található, a melléktengelyek digírek, és függőlegesen a tengelyfelező irányokban 2 tükörsík is felfedezhető. Az ismertebb ásványok közül ebben kristályosodik a kalkopirit és a melilitcsoport.

Tetragonális rendszerben kristályosodik az elemek közül az indium, az ón és a protaktínium.



Cirkon

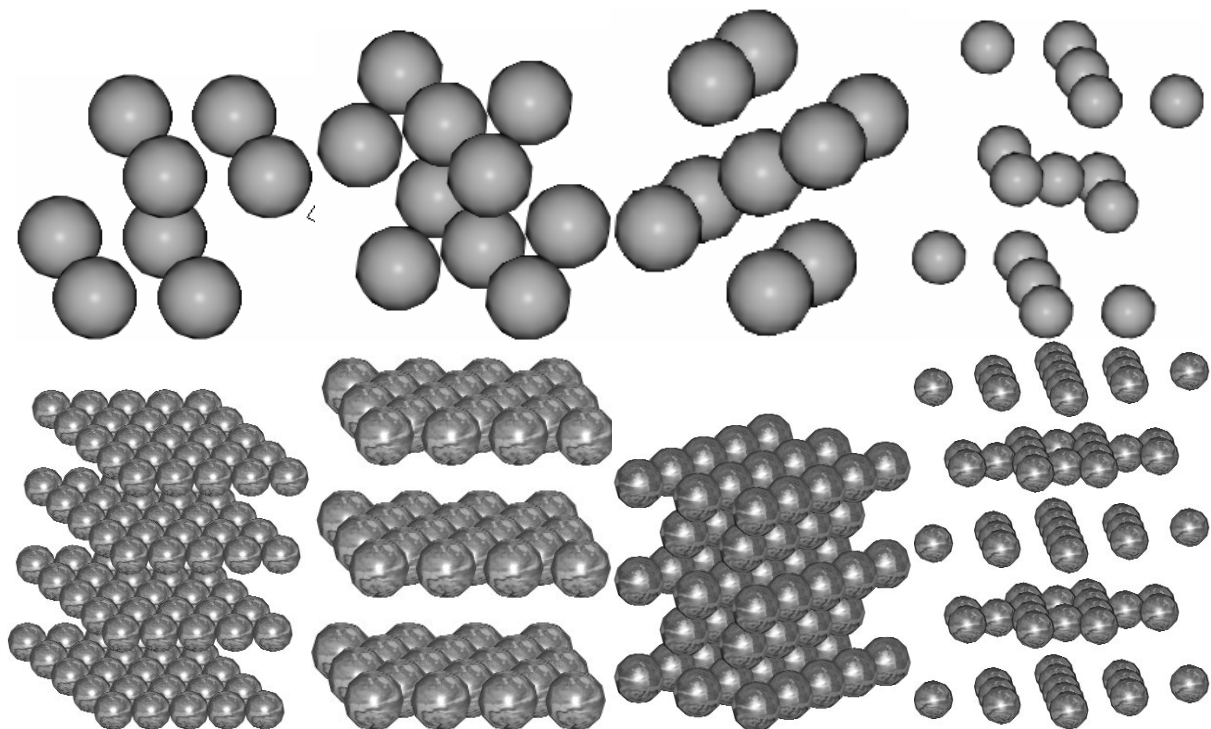
Cumengéit

52. ábra

Tetragonális kristályrácsú ásványok

### Az ortorombos (rombos) rendszer

A rendszer geometriai alapja (53. ábra) a téglalap alapú egyenes hasáb.



53. ábra

Egyszerű, alaplapon közepes, térközepes és lapközepes ortorombos cellák



Három, egymásra merőleges, de különböző egységű tengelykereszt ( $a$ ,  $b$ ,  $c$ ) képezi koordináta-rendszerét a rombos rendszernek, amelynek lehetséges szimmetriaelemei: inverziós centrum, 3 tengelyirányú digír és 3 (két-két tengely metszési síkjában fekvő) tükörsík. Három rombos kristályosztály létezik:

1. Tengelyirányokban 1-1 digírt tartalmaz, egyéb szimmetriaeleme nincs a rombos enantiomorf osztálynak.
2. Két függőleges (az  $a$ - $c$  és  $b$ - $c$  tengelysíkban fekvő) tükörsík van, és a  $c$  tengelyirány egyben digír is a hemimorf kristály osztályban.
3. A rombos tengelykereszt lehetséges szimmetriáját:  $m$ -verziós centrumot, 3 digírt és 3 tükörsíkot tartalmazza a holoéderes osztály.

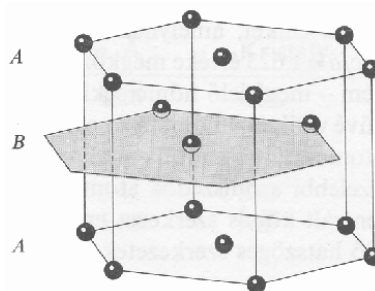
Ortorombos rendszerben kristályosodó ásványokat mutat a 54. ábra. Az elemek közül a jód, a bróm, a gallium, a klór, az  $\alpha$ -kén, az urán, és a neptúnium ortorombos kristályszerkezetű.



**54. ábra**  
Ortorombos kristályszerkezetű ásványok

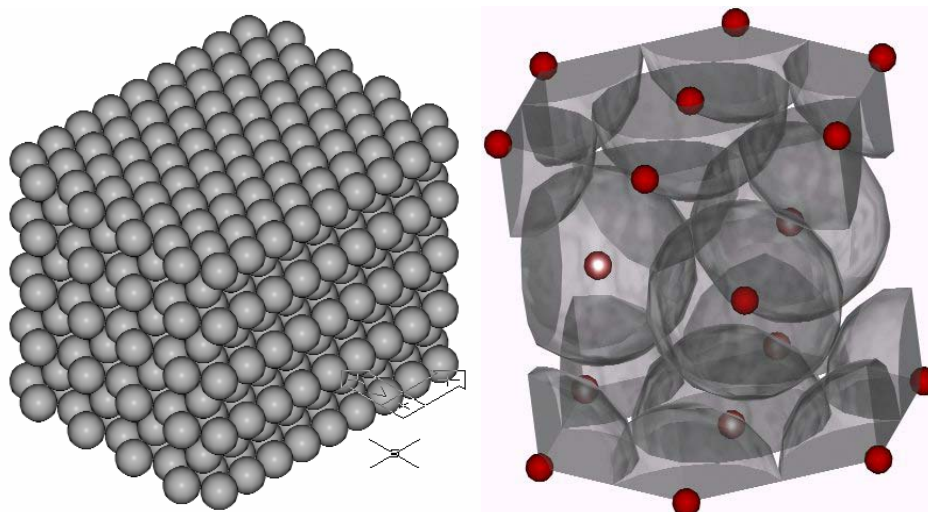
### A hexagonális (hatszöges) rendszer

A rendszer geometriai alapja a szabályos hatszög alapú egyenes hasáb (55. ábra), ami három,  $60^\circ$ -os rombuszra helyezett derékszögű hasábot tartalmaz.



**55. ábra**  
Hexagonális szerkezet

Azonos méretű gömböket kétféleképpen lehet szabályosan elrendezni, ha azt kívánjuk hogy a gömbök közti térfogat minimális legyen. Az egyik lehetőség a lapcentrált köbös (szorosan illeszkedő köbös) szerkezet, a másik mód a hatszöges szimmetriát mutató szerkezet. Ez utóbbit szorosan illeszkedő hatszöges (hcp = hexagonal close-packed) szerkezetnek (56. ábra) nevezzük.

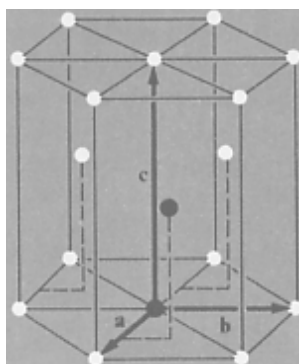


**56. ábra**  
**Szoros illeszkedésű hatszöges rács és cella**

A gömbök által kitöltött térfogat és a teljes térfogat aránya mindkét esetben 0,74. Ha a síkon egymás mellé helyezett gömbök mindegyike hat másikkal érintkezik akkor a réteg is szorosan illeszkedő szerkezetű. Ez a réteg vagy a hcp-szerkezet alapsíkja vagy a lapcentrált köbös szerkezet (111) síkja lehet. Újabb, hasonló szerkezet jön létre, ha a gömböket úgy helyezzük az alaprétegre, hogy annak három gömbjével érintkezzék. Két lehetőségünk van a harmadik réteg felépítésére:

- I. ha a harmadik réteg gömbjeit az első rétegnek a második réteg gömbjeivel nem fedett lyukai fölé tesszük, lapcentrált köbös szerkezetet kapunk;
- II. ha a harmadik réteg gömbjeit közvetlenül az első réteg gömbjei fölé helyezzük, hatszöges szerkezethez jutunk.

Kifejezhetjük ezt úgy is, hogy a lapcentrált köbös szerkezetben a rétegek ABCABC... sorrendben, a hcp-szerkezetben pedig ABABAB... sorrendben követik egymást. A hcp-szerkezet elemi cellájában (57. ábra) kettő, a lapcentrált köbös rács elemi cellájában egy atom van.



**57. ábra**  
**Hexagonális rendszer elemi cellája**

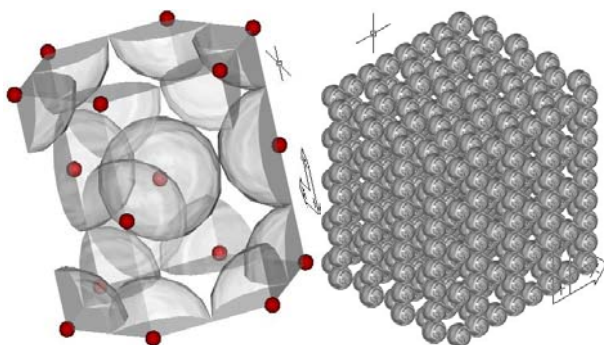
A primitív cellában  $a = b$ , a közbezárt szög  $120^\circ$ ,  $c$  merőleges az  $a$  és  $b$  síkjára. A legszorosabban elhelyezett hatszöges illeszkedésű gömbök alkotta szerkezetben a  $c/a$  hányados  $(8/3)^{1/2} = 1,633$ . Az egyik atom a  $0,0,0$  pontbeli origóban van, a másik  $2/3, 1/3, 1/2$  pontban.

Azokat a kristályokat is hcp-szerkezetűnek tekintjük, amelyekben a  $c/a$  értéke valamelyest eltér az elméleti értéktől. Ilyen pl. a cink, amelynek  $c/a$  értéke  $1,86$  ( $a = 2,66 \text{ \AA}$ ,  $c = 4,94 \text{ \AA}$ ). A magnézium  $c/a = 1,623$  értéke megközelíti az ideális hcp-szerkezetre jellemző értéket. Több fém - megfelelő hőmérsékleten - lapcentrálalt köbös szerkezetűből hcp-szerkezetűvé válik és viszont. A koordinációs szám - melyen a legközelebbi szomszédos atomok számát értjük - e szerkezetekben  $12$ . Néhány példa szorosan illeszkedő hatszöges kristályszerkezetű elemre:

elem	$c/a$	elem	$c/a$	elem	$c/a$
Be	1,581	Cd	1,886	Gd	1,592
Mg	1,623	Co	1,622	Lu	1,586
Ti	1,586	Y	1,570		

A hexa- és trigonális tengelykeresztben a függőleges  $c$  tengelyre merőlegesen nem kettő, hanem három vízszintes melléktengely található, és ezek egymással  $120^\circ$ -os szöget zárnak be. Ez egyben azt is jelenti, hogy ugyanaz a tengelykereszt adja a vázát a háromszöges vagy trigonális és a hatszöges vagy hexagonális kristályrendszereknek. A főbb hatszöges osztályok:

1. Csak hexagírje van a hexagonális tetartoédes osztálynak. A legismertebb itt kristályosodó ásvány a nefelin.
2. A főtengety irányában hexagír, vízszintesen tükörsík, valamint inverziós centrum van a hexagonális paramorf osztályban. Ebben kristályosodnak az apatit-csoport ásványai.
3. A hexagonális rendszer összes gírjét (1 hexagír és 6 vízszintes digír) tartalmazza a hexagonális enantiomorf osztály. Itt kristályosodik az ismertebb ásványok közül a  $\beta$ -kvarc.
4. Hexagír - benne metsződve 6 függőleges tükörsík - van a hexagonális hemimorf osztályban. Ebben kristályosodik a wurtzit és a greenockit.
5. A négytengetyű tengelykereszt szimmetriáját mutatja (1 hexagír, 6 digír, 6+1 tükörsík, inverziós centrum), és az általános helyzetű formája 24 lapból áll a hexagonális holoédes osztálynak. Itt kristályosodik a grafit (58. ábra), covellin, molibdenit, berill és a pirrotin.



**58. ábra**  
**Grafit cella és rács**

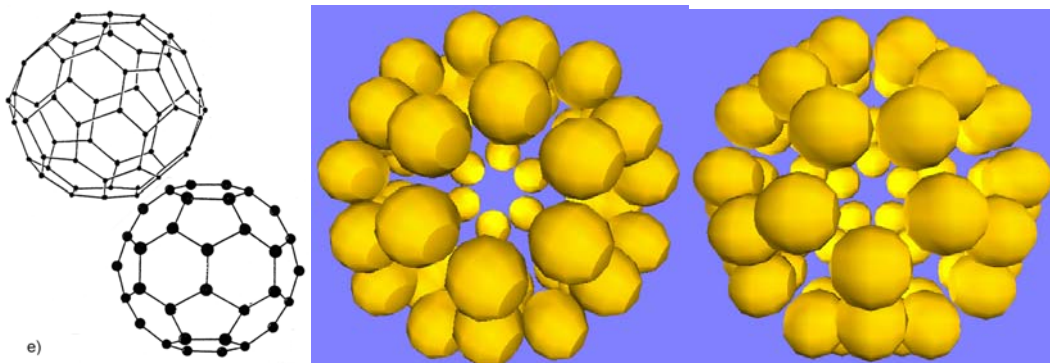
Hexagonális rendszerben kristályosodik a hidrogén, a magnézium, a berillium, a ruténium, az ozmium, a kobalt, a horgany, a kadmium, a hélium, a nitrogén, a szelén, a tellúr, a tallium is, a 59. ábrán látható ásványok mellett.



**59. ábra**

**Hexagonális rendszerben kristályosodó ásványok**

A karbon - gyémánton és grafiton kívüli - módosulatai a zárt gömbkosaras felépítésű fullerének, amelyeket Buckminster Fuller amerikai építész emlékére "kereszteltek el", aki hasonló rácsszerkezetű geodéziai gömböket épített. Ilyen háromdimenziós, gömb alakú, páros atomszámú „karbonmolekulák” egész családja létezik  $C_{20}$ -tól  $C_{300}$ -ig. Legismertebb a  $C_{60}$  karbonszerkezet, amelynek a hagyományosan varrt futball-labdához hasonlító csonka ikozaéderez szerkezete van. Geometriája 20 hatszögből áll, amelyeket 12 ötszög köt össze úgy, hogy az ötszögek nem kapcsolódnak egymáshoz és minden hatszög váltakozva öt- és hatszögekhez kapcsolódik (60. ábra).



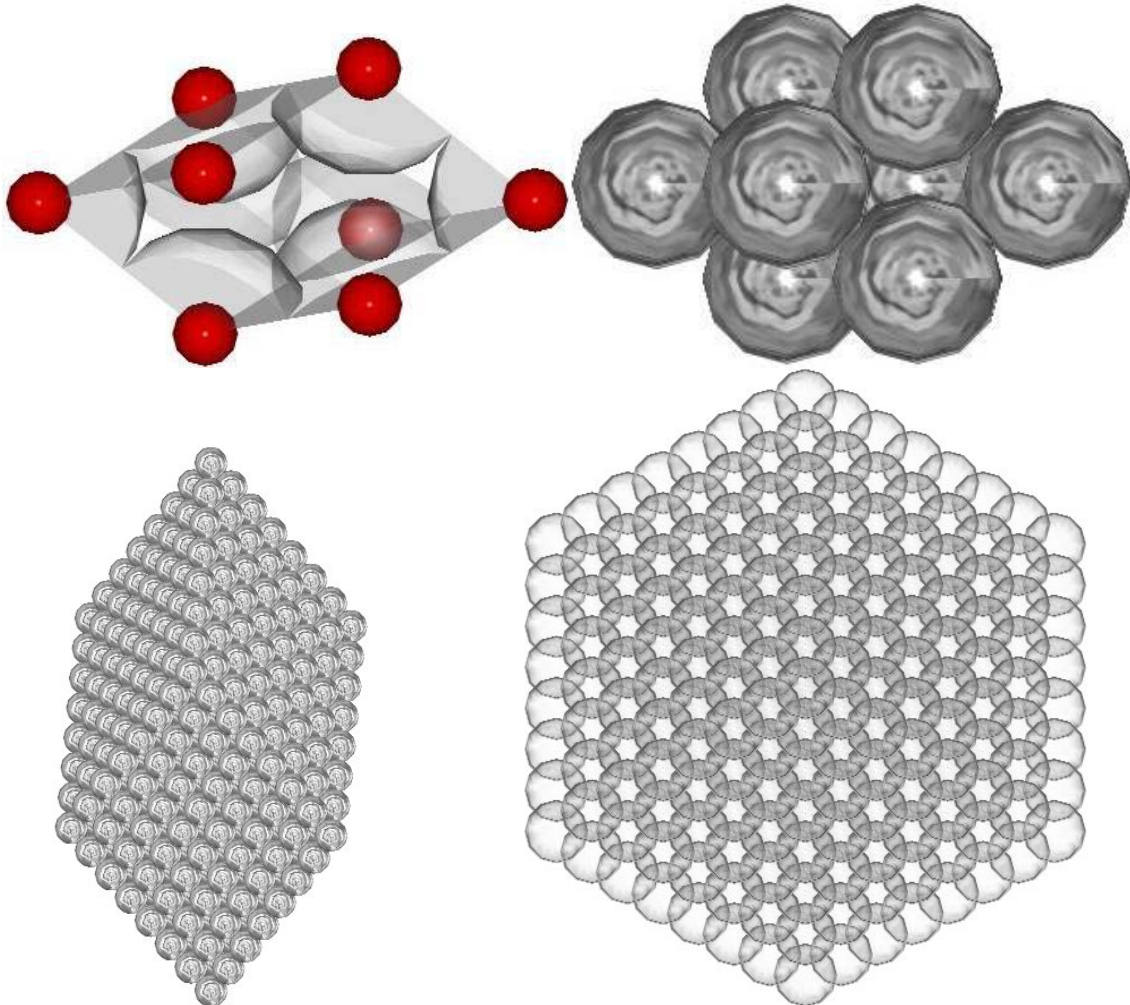
**60. ábra**

**Fullerén gömbkosaras szerkezete**



## A romboédres (trigonális, háromszöges) rendszer

A rendszer Bravais-cellája (61. ábra) olyan paralelepipedon, amelynek lapjai egybevágó rombuszok.



**61. ábra**  
**Trigonális cella és rács**

Trigonális kristályosztályok:

1. A c tengely irányában trigír van a trigonális tetartoédres osztályban.
2. A trigonális paramorf osztályban csak inverziós centrum és trigiroid van. Itt kristályosodik például a dolomit, ilmenit, dioptáz.
3. A c tengely irányában trigír, vízszintesen 3 digír van, egyéb szimmetriaelem nincs. Ez a trigonális enantiomorf osztály, ebben kristályosodik az egyik leggyakoribb ásvány, az  $\alpha$ -kvarc is.
4. Ha a trigír egyben 3 függőleges tükörsík metszéspontja egyéb szimmetriaelem nélkül, akkor ez a trigonális hemimorf osztály.
5. A trigonális rendszer holoédres osztálya különleges szimmetriaelem-kombinációt tartalmaz: inverziós trigiroid, inverziós centrum, 3 vízszintes digír és 3 függőleges tükörsík jellemzi.

A 62. ábrán néhány romboédres rendszerben kristályosodó ásvány látható.



Hematit

Korund (Zafir)

Turmalin

62. ábra

### Romboédes rendszerben kristályosodó ásványok

A következő két osztály besorolása nem egyértelmű. A szakkönyvek egy része ezeket a hexagonális rendszerhez sorolja, mert az általános helyzetű formáik lapszáma megegyezik a hexagonális negyedes (6 lap) és feles (12 lap) lapszámmal. A trigonális rendszerhez való besorolást a  $c$  tengely irányában található trigír indokolja, ami alapján egyszerűbb is a felismerése.

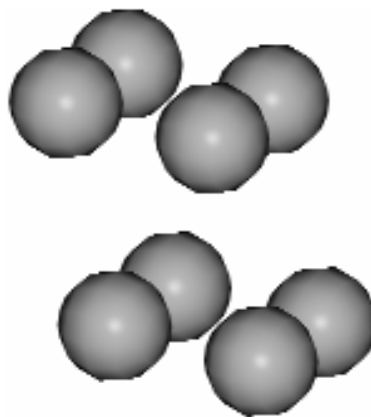
6. A  $c$  tengely irányában trigír, vízszintesen 1 tükörsík található a másodfajú hexagonális tetartoédes osztályban, amelyet trigonális „dipiramisos”-nak is neveznek.

7. Trigír, 3 digír, függőlegesen 3+1 vízszintes sík jellemzi a ditrigonális „dipiramisos” osztályt.

Ebben a rendszerben kristályosodik az elemek közül a higany, a bór, az arzén, az antimon, a bizmut és a szamárium.

### A monoklin (egyhajlású) rendszer

A rendszer geometriai alapja (63. ábra) a paralelogramma alapú egyenes hasáb.



63. ábra

Egyszerű monoklin cella

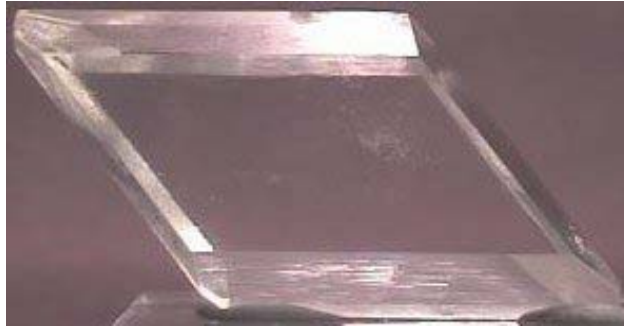
A monoklin tengelykereszt esetében a tengelyarányok különbözők ( $a$ ,  $b$ ,  $c$ ), az  $a$  és  $c$  tengely közötti hajlásszög nem  $90^\circ$ , de a két másik hajlásszög derékszög. Monoklin kristályosztályok:

1. A tengelykereszt maximális szimmetriája: inverziós centrum, 1 digír és a digírre

merőlegesen 1 tükörsík. Ez egyben a holoéderes kristályosztály. Ebben az osztályban kristályosodik az ortoklász és a gipsz (64. ábra) is.

2. Egyetlen digírt találunk a  $b$  tengely irányában a monoklin enantiomorf kristályosztályban.
3. Egyetlen tükörsík van az  $a$ - $c$  tengelyek síkjában a monoklin kristályrendszer hemimorf osztályában.

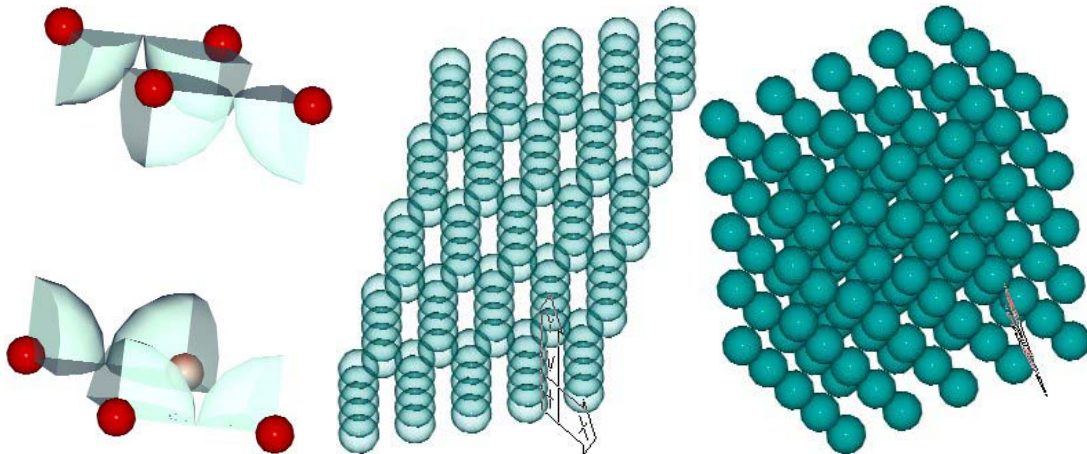
Ebben a rendszerben kristályosodik a  $\beta$ - és  $\gamma$ -kén, a polónium és a plutónium.



**64. ábra**  
**Gipszkristály**

### A triklin (háromhajlású) rendszer

A rendszer (65. ábra) geometriai alapja a paralelogramma alapú ferde hasáb.



**65. ábra**  
**Triklin cella és rács**

Legkevesebb szimmetriaelemet tartalmazza ez a tengelykereszt ( $a$ ,  $b$ ,  $c$ ), amelynek egységvektorai egymástól különböznek, és egymással különböző szögeket zárnak be:  $\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$ , ahol

$\alpha$  a  $b$  és  $c$  tengely közötti,  
 $\beta$  az  $a$  és  $c$  tengely közötti,  
 $\gamma$  az  $a$  és a  $b$  tengely közötti szög.

Ennek a tengelykeresztnek mindössze egyetlen szimmetriacentruma van. Ebben a kristályrendszerben két kristályosztály található:

1. Nincs szimmetria az osztályban, minden lap különálló, egyedi. Nincs két olyan lap a kristályon, amely összetartozna.

2. Ha a háromhajlású rendszerben a kristály a tengelykereszt szimmetriáját mutatja, azaz inverziós centruma van, akkor az osztály holoéderes. Ebben a kristályosztályban kristályosodik például a kaolinit, cianit, axinit és a plagioklászcsoport.

Elem nem kristályosodik ilyen formában, az ásványok közül is csak kevés (66. ábra).



Kalkantit

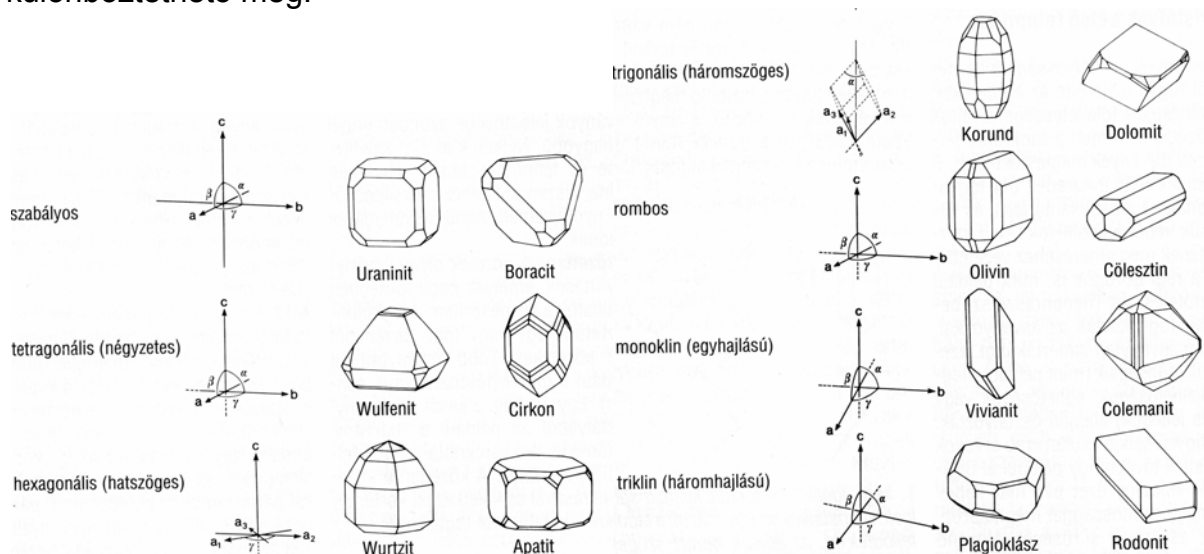
Albit

Henmilit

66. ábra

### Triklin rendszerben kristályosodó ásványok

A 67. ábra az egyes rendszereket és tengelykeresztjeiket foglalja össze. Ha a belső szerkezet szimmetriaviszonyait is figyelembe vesszük, akkor 230 tércsoport különböztethető meg.



67. ábra

### A hét kristályrendszer néhány jellemző példája

A kristályszerkezetek felépítő részecskéitől (atom, ion, molekula) függően beszélhetünk atomrácsról, fémrácsról, ionrácsról. E részecskék közvetlen szomszédaikkal való kapcsolata, vagyis az anyagban túlsúlyban lévő kötések módja szerint megkülönböztethetünk kovalens-, ionos- és fémes kötést. Ezen kötés szerkezetek és az anyagok kötésmódtól függő tulajdonságai összefüggését általános megközelítésben az 68. ábra mutatja, a van der Waals kötéssel együtt.



Kötésszerkezet	Kovalens kötés (homöopoláros kötés)	Ionos kötés (heteropoláros kötés)	Fémes kötés (delokalizálódott kötés)	van der Waals kötés (láncmolekulák közötti)
Anyagcsoport	Kerámiák		Fémek (egyensúlyi állapotúak)	Polimerek (hőre lágyulók)
Anyagtulajdonságok				
Sűrűség (– kötésben résztvevő elemek rendszáma)	kicsi - közepes		nagy - közepes	kicsi
Merevség, szilárdság (– kötési energia, kötéserősség)	nagy		közepes - kicsi	kicsi
Alakíthatóság, szívósság (– kötésben résztvevő részecs- kék koordinációs száma)	kicsi		nagy	közepes
Olvadási hőmérséklet (– kötési energia, kötéserősség)	nagy		közepes - kicsi	kicsi
Hővezető képesség (– kötésben résztvevő elektro- nok elmozdulási lehetősége)	kicsi		nagy	kicsi
Elektromos vezetőképesség (– kötésben résztvevő elektro- nok elmozdulási lehetősége)	kicsi		nagy	kicsi
Hőállóság (– kötés termikus stabilitása)	nagy		közepes	kicsi
Korrózióállóság (– kötés vegyi stabilitása)	nagy		kicsi	közepes

**68.ábra**  
**Kötésszerkezet és anyagtulajdonságok összefüggése**

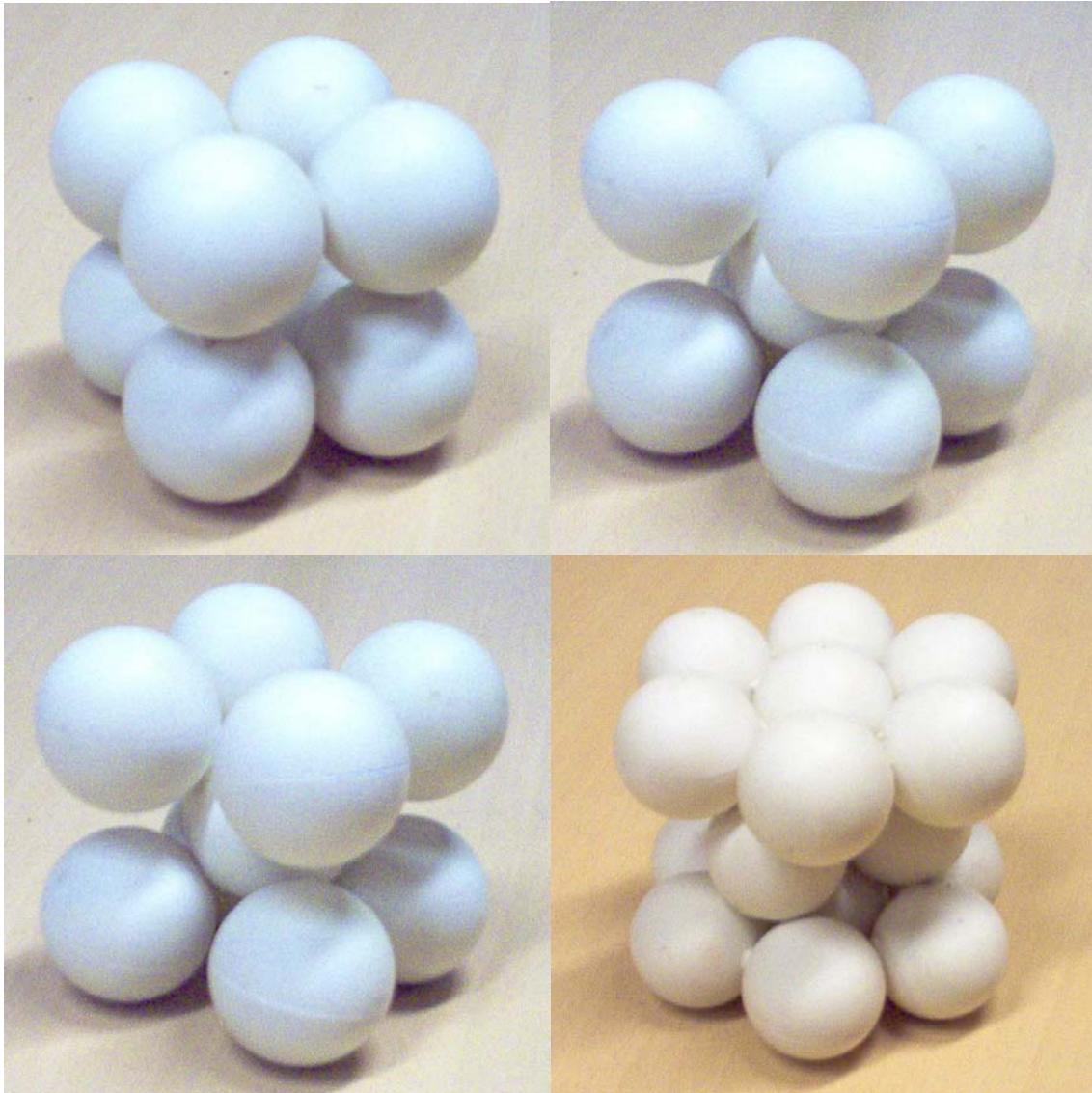
## A geometriai krisztallográfia szemléltetési lehetőségei

### **Síkbeli grafikus modellek (ábrák)**

A geometriai krisztallográfiát leggyakrabban (pl. tankönyvekben) kétdimenziós axonometrikus drótváz, húr-csomópont vagy golyó ábrákkal szemléltetik. Jelen cikkben is találhatóak ilyen ábrák. Előnyük az olcsó „előállítás”, a kis helyigény és a nagyfokú mobilitás. De bármilyen szépek és térhatásúak is ezek az ábrák, főleg az összetettebb celláknál és rácsoknál nem áttekinthetőek és nem mindig adnak egyértelmű választ a térbeli elhelyezkedésre, az allotróp átalakulások lehetőségére.

### **Térbeli épített modellek (makettek)**

Az előbbi csoport továbbfejlesztett térbeli változatai a gyárilag előállított (rendszerint műanyagból készült) demonstrációs modellek és építőkészletek (amik inkább a bonyolultabb szerves kémiai struktúrák, fehérjék, DNS, stb. makettjei). Ezek borsos árát a házilag „barkácsolt” golyó-drótváz (általában fém, műanyag és fa alapanyagú) vagy ragasztott ping-pong labda modellekkel (69. ábra) igyekeznek kiváltani. Előnyük az igényes megjelenés és az, hogy a diákok fizikailag is megfoghatják, közelről megnézhetik. Hátrányuk a sérülékenység, a viszonylag magas költségek, a reprodukálhatatlanság (a diák nem tudja bármikor „megvizsgálni”).



**69. ábra**  
**Ragasztott krisztallográfiai modellek ping-pong labdából**

### ***Háromdimenziós számítógépes statikus modellek***

A harmadik csoport a számítógépes statikus modelleké, melyek ötvözik az előző két csoport tulajdonságait és a kétdimenziós monitoron, háromdimenziós objektumokként, felületekként jelennek meg. Jelen cikkben szereplő merev gömbös ábrák is ilyen saját készítésű virtuális modellekből származnak. Nem megfoghatók ugyan, de térben elforgathatók, kicsinyíthetők, nagyíthatók. Nagy előnyük, hogy tetszőleges beállítású kétdimenziós kép menthető el róluk, így az első csoport létrehozásához is felhasználhatók. Adathordozón korlátlanul sokszorosíthatók, hálózaton keresztül is eljuttathatók bárhová, ami nagy fokú mobilitást biztosít. Viszonylag kis helyet foglalnak és prezentációkban is felhasználhatók, remek lehetőségeket nyújtva az oktatásban. Általában kiinduló pontjai a negyedik csoport; vagyis az animációk létrehozásának. Hátrányuk, hogy a sok felületelemből álló objektumok renderelése esetenként igen erős hardvert igényel.

### ***Háromdimenziós számítógépes animációk***

A negyedik kategória a számítógépes animációké, melyek a leglátványosabbak, de a legfejlettebb hardver és szoftver hátteret igénylik. Segítségükkel a legbonyolultabb rácsátalakulások és torzulások is szemléletesen bemutatathatók. Szintén „hordozható” (pl. pendrive-on), bár több tárhelyet foglalnak, mint a statikus modellek.

### **A számítógépes szemléltető modellek előállításának és alkalmazhatósága**

A számítógépes 3D modelleket AutoCAD-ben, Windows környezetben készítettük. Először a cellának megfelelő drótváz készült el egyenesekből, majd a megfelelő metszéspontokba kerültek az atomokat szimbolizáló szilárdtest gömbök. A cellák a SZEL paranccsal, majd további gömbök hozzáadásával készültek. A rácok az elemi cellákból a NÉGYZETES KIOSZTÁS és a MÁSOLÁS parancsokkal készültek. A kész modelleket exportáltuk .3ds formátumba, amelyek a Frog3d nézegető programmal egyszerűen megtekinthetők, térben forgathatók, közelíthetők, távolíthatók, tetszőleges beállításban „lefotózhatók”.

Ezen módszer előnye: nem kell hogy telepítve legyen az aktuális számítógépen az AutoCAD, vagy a 3dStudioMAX. A professzionális, több formátumot támogató nézegetőkkel szemben a Frog3d-t nem kell telepíteni, tömörítve akár floppy-lemezen is elfér, és nem igényel különösebb szakértelmet. Az AutoCAD-dal szemben a renderelt ábrák mozgathatók (nemcsak a drótvázak), miközben nem foglalnak annyi memóriát.

### **Felhasznált és ajánlott szakirodalom**

1. Bagyinszki Gyula: *Anyagismeret és minősítés* Budapesti Műszaki Főiskola, Bánki Donát Gépészmérnöki Főiskolai Kar, Budapest, 2004
2. Bagyinszki Gyula - Kovács Mihály: *Gépipari alapanyagok és félkész gyártmányok - Anyagismeret*, Nemzeti Tankönyvkiadó - Tankönyvmester Kiadó, Budapest, 2001
3. Prohászka János: *Bevezetés az anyagtudományba I.* Tankönyvkiadó, Budapest, 1988
4. Káldor Mihály: *Fizikai metallurgia*; Műszaki Könyvkiadó, Budapest, 1990
5. Charles Kittel: *Bevezetés a szilárdtest-fizikába*; Műszaki Könyvkiadó, Budapest, 1981
6. Giber János és szerzőtársai: *Szilárdtestek felületfizikája*; Műszaki Könyvkiadó, Budapest
7. Olaf Medenbach - Cornelia Sussieck Fornefeld: *Ásványok*; Magyar Könyvklub, Budapest, 1995
8. Bognár László: *Ásványhatározó*; Gondolat Kiadó, Budapest, 1987
9. Chris Pellant: *Határozó Kézikönyvek Kőzetek és ásványok*; GraFo, Panem, Budapest 1993
10. Fritz Reinhardt – Heinrich Soeder: *SH Atlasz – Matematika*, Springer-Verlag Budapest, 1995