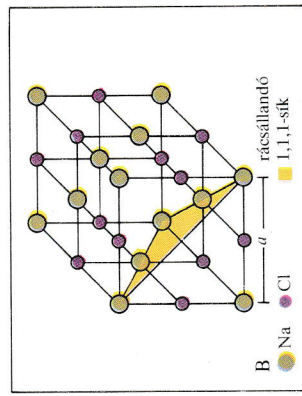


	nem lokális kötés	lokális kötés
homopoláris kötés	tiszta fémek	valenciakristályok
heteropoláris kötés	ötvözetek	ionkristályok

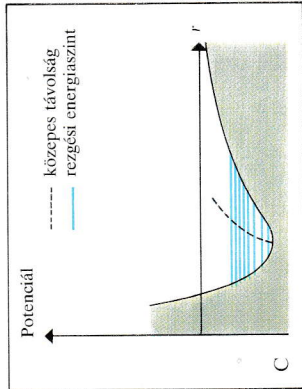
VAN DER WAALS-kristályok

A

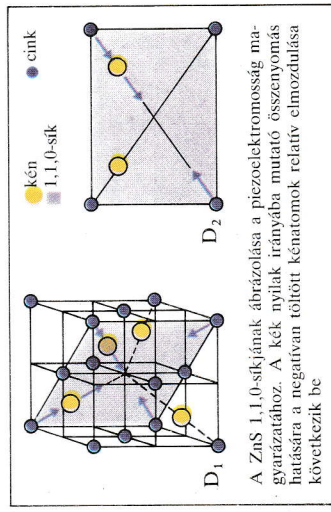
A kristályok vázlatos csoportosítása kötéstípusuk szerint



B Az NaCl elemi cellája



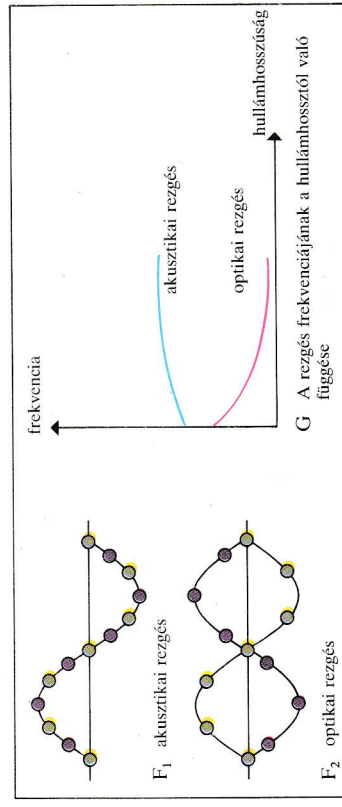
C Az atomok potenciálgörbéje és közepes távolsága a kristályban



A ZnS 1,1,0-síkjának a piezoelektronosság megváltoztatásához. A két nyílak irányába mutató összenyomó hatására a negatíván töltött kénatomok relatív elmozdulása következik be

ZnS-rács

Egy diszlokáció kétdimenziós ábrázolása



Optikai és akusztikai rezgés

Piezoelektronosság és elektrostríkcio

Kvarcál és számos más ionkristálnál bizonyos irányokban történő rugalmas összenyomó hatására felületi töltés alakul ki, ha pedig a kristályt elektromos térbe helyezzük, deformálódik. Ezt a jelenséget az elektrostríkcio, vagy az ionok elrendeződése a kristályban nem szimmetrikus (pl. kénatomok elhelyezkedése a cink-szulfidban) és az összenyomó hatására az atomok a potenciálgörbe aszimmetriájánál fogva a szomszédos atomokhoz közelednek. Ennek következtében a felületen kompenzálatlan töltés jelenik meg.

Ideális és reális kristályok

A természetben valóban előforduló kristályok általában nem pontosan az elemi cellák egymás mellé épülésével alakulnak ki, hanem sok apró kristályból állnak, amelyek csupán néhány száz vagy ezer elemi cellát tartalmaznak. Közöttük úgynevezett **vakanciák**, **idegen atomok** vagy **diszlokációk** (hibahelyek) lépnek fel, amelyek hatására a kristályban a hálózati síkok nem mind pontosan párhuzamosan fekszenek, hanem irányuk egy középérték körül szór.

Rácsrezgések

A kristály alkotórészait összekötő vonal mentén fellépő kötőerők miatt ezek az alkotórészek rezgést végezhetnek, amelyekben a kristály minden atomja részt vesz. Ezek a rezgések a kristályban álló hullámokat képeznek, amelyek a potenciálgörbe egy stationárius állapotának felelnek meg. A rezgés minden hullámhossza két különböző rezgésforma lehetséges, ezeket **optikai** és **akusztikai rezgéseknek** nevezzük.

Akusztikai rezgések esetén a szomszédos atomok azonos irányban mozognak, úgy, hogy még ionkristályban sem keletkezik dipólmomentum. Ilyen rezgéseket ezért nem lehet fényvel gerjeszteni, és az abszorpció szintjében sem jelennek meg. Az optikai rezgésekben a szomszédos atomok egymással szemben mozognak, ezáltal (különösen ionkristályok esetén) erős dipólmomentum jön létre. Ezek a rezgések megjelennek az abszorpció színképében. Mivel az optikai rezgésben a kötőerők sokkal nagyobb igénybevételnek vannak kitéve a szomszédos atomok közepes távolságától való nagyobb kitérés miatt, ezért azonos hullámhosszúság esetén az optikai rezgés frekvenciája az akusztikai rezgés frekvenciájánál mindig nagyobb.

Nem túl magas hőmérsékleten (az atomok kis-mértékű mozgásakor) az atomok közötti hatókötőerők hatására az egyensúlyi állapot (a potenciális energia minimuma) az atomok szabályos geometriai elrendeződésének felel meg. Az atomok ilyen szabályos elrendeződését **kristálynak** nevezzük.

A molekulák esetéhez hasonlóan a kötőerők az elektrontól származnak, amelyek nem lehet egyértelműen egyetlen atomhoz rendelni, hanem több atom körül, vagy akár az egész kristályban véges tartózkodási valószínűségük van. Az utóbbi tulajdonság elsősorban a fémekre és az ötvözetekre jellemző.

A kovalens és ionos kötést molekulákhoz hasonlóan léteznek kovalens- és ionkristályok is. Az alkáli-halogenid-kristályok (pl. konyhasó) az ionkristályok tipikus képviselői; a legismertebb kovalenskristály a gyémánt (szén). A molekulákhoz hasonlóan a két típus között valamennyi átmenet lehetséges.

Különösen gyenge kötést a VAN DER WAALS-kristály, amelynek kötőerejét két molekula elektromos dipólusa között fellépő vonzóerő szolgáltatja.

A kristályrács

A kristályban az atomok szabályos elrendeződésére többféle lehetőség is van. A kristályrács **elemi cellából** épül fel, amelyből a kristályt gondolatban úgy építhetjük fel, hogy ezeket a cellákat minden irányban ismételt egymás mellé helyezzük. Az elemi cella tartalmazó sík távolságát **hálózati távolságnak** nevezzük. Egy adott hálózati sík irányát a h, k, l **MILLER-indexek** írják le, ahol az $\frac{1}{h}, \frac{1}{k}, \frac{1}{l}$ értékek a h, k, l síkban fekvő egy atomnak azok a (rácsállandó egységeiben mért) távolságai, amelyekben a következő h, k, l sík az x, y, z tengelyeket metszi.

Mivel a kristály és a molekula kötőerői azonos típusúak, a potenciális energia görbéje, a kristály két alkotórésze közötti távolság függvényében felrajzolva azonos alakú: kis távolságoknál negatív értéket felvéve nagyon erősen csökken, majd növekvő távolságoknál lassan növekszik. A potenciálmínimumban a saját rezgések energiájúvá fekszenek. A görbe aszimmetriájából adódóan a kristály alkotórészeinek közepes távolsága magasabb rezgési energiaszinteken (azaz a kristály belső energiájának növekedésekor) nagyobb lesz. Ez az atomelméleti magyarázata annak, hogy a kristályok a hőmérséklet növekedésekor kitágulnak.