

Kristallgitter

19 okt. 2026, 5 min läsning

UTKAST

#fysik #fasta-tillståndets-fysik #modell

Kurs: F0005T Förkunskaper: Elektrondiffraktion

En kristall beskrivs av tre saker: gittret, som är de regelbundet ordnade punkterna; basen, som är atomen vid varje gitterpunkt; och enhetscellen, den minsta byggklossen som repeteras genom kristallen. Det finns fjorton generella typer av kristallgitter, och de som används i kursen är simple cubic, fcc och bcc.

Översikt över alla strukturer: [Kristallstrukturer](#).

Formeln, symbol för symbol

$$\underbrace{\rho}_{\text{densitet}} = \frac{\overbrace{N}^{\text{atomer/cell}} \cdot \overbrace{M/N_A}^{\text{massa/atom}}}{\underbrace{a^3}_{\text{cellens volym}}}$$

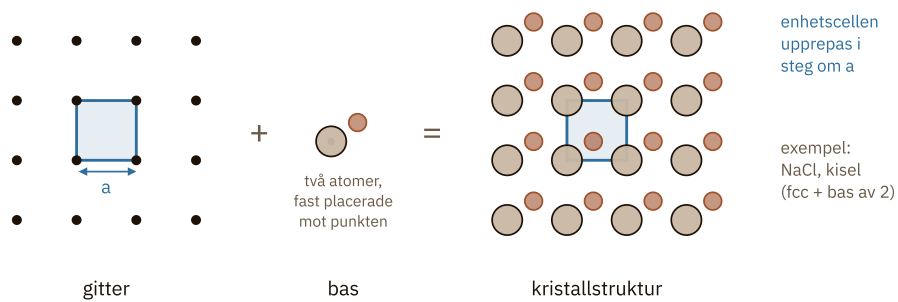
Densiteten är massan i en enhetscell delad med cellens volym. Hela kristallen är samma cell upprepad, så det räcker att räkna på en.

1. Gitter plus bas ger struktur

Gittret är ett rent geometriskt mönster av punkter som ser likadant ut från varje punkt. Basen är det som sitter vid varje punkt: en atom, två joner eller en hel molekyl. Först tillsammans beskriver de en verklig kristall:

$$\text{kristallstruktur} = \text{gitter} + \text{bas}$$

Enhetscellen är en låda som fyller rummet när den flyttas i steg om sin egen kantlängd. För de kubiska gittern är cellen en kub med kanten a , **gitterkonstanten**, som typiskt är några tiondels nanometer. Avstånd av den storleken mäts med röntgen- eller [elektrondiffraktion](#).

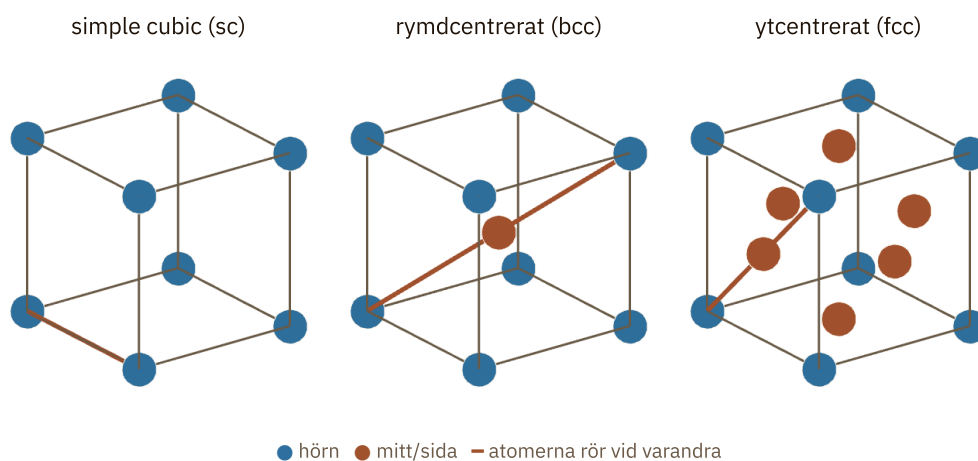


Kristallstruktur = gitter + bas. Gittret är bara punkter, och vid varje punkt sitter samma grupp atomer, basen. Den blå rutan är enhetscellen med kanten a .

2. De kubiska gittren

Gitter	Gitterpunkter	Närmaste grannar	Avstånd till närmaste granne	Exempel
Simple cubic (sc)	hörn	6	a	polonium
Rymdcentrerat (bcc)	hörn och kubens mitt	8	$\frac{\sqrt{3}}{2} a$	Fe, Na, W
Ytcentrerat (fcc)	hörn och sidornas mitt	12	$\frac{\sqrt{2}}{2} a$	Cu, Al, Au

Avståndet till närmaste granne följer av var atomerna rör vid varandra: längs kanten i sc, längs rymddiagonalen $\sqrt{3} a$ i bcc (två halva avstånd) och längs sidodiagonalen $\sqrt{2} a$ i fcc (två halva avstånd). Den hexagonala tätpackningen, **hcp** (Mg, Zn, Ti), är inte kubisk men har också 12 närmaste grannar. Skillnaden mot fcc är hur tätpackade lager staplas, se [Packningstäthet](#).



Enhetscellerna för sc, bcc och fcc (vrid med musen). Hörnatomerna är blå, atomerna i mitten eller på sidorna orange, och den orange linjen visar riktningen där atomerna rör vid varandra: kanten, rymddiagonalen och sidodiagonalen.

3. Atomer per enhetscell

En atom i ett hörn delas av de åtta celler som möts där, en atom mitt på en sida av två celler och en atom inne i cellen tillhör bara den. Antalet atomer N som hör till en cell blir

$$N_{\text{sc}} = 8 \cdot \frac{1}{8} = 1$$

$$N_{\text{bcc}} = 8 \cdot \frac{1}{8} + 1 = 2$$

$$N_{\text{fcc}} = 8 \cdot \frac{1}{8} + 6 \cdot \frac{1}{2} = 4$$

Fysika: T k3 (atomer per cell och gitterkonstanter)

4. Densiteten ur gitterkonstanten

Cellen innehåller N atomer med molmassan M , och varje atom väger M/N_A . Cellens volym är a^3 :

$$\rho = \frac{m_{\text{cell}}}{V_{\text{cell}}} = \frac{N \cdot M/N_A}{a^3}$$

$$\boxed{\rho = \frac{N M}{N_A a^3}}$$

Omvänt ger antalet atomer per volymenhet N/a^3 direkt, vilket vi behöver för elektronkoncentrationen i **Ferminivån** och dopkoncentrationen i **Dopning**.

5. Strukturer med bas

Natriumklorid. Na^+ och Cl^- växlar längs varje kant, så om vi bortser från vilken jon som är vilken ser det ut som ett sc-gitter med kanten $a/2$. Men gittret ska se likadant ut från varje punkt, och det gör det bara om vi tar med sorten. Strukturen är ett **fcc-gitter med en bas av två joner**: en Na^+ i gitterpunkten och en Cl^- ett halvt kantavstånd bort. Cellen innehåller fyra Na^+ och fyra Cl^- .

Diamantstrukturen (C, Si, Ge) är också ett fcc-gitter med en bas av två atomer, men den andra atomen sitter en fjärdedel längs rymddiagonalen. Cellen innehåller $4 \cdot 2 = 8$ atomer, och varje atom har bara fyra närmaste grannar i en tetraeder, som i en **kovalent bindning** med fyra valenselektroner.

⚠ Vanliga fel

- **Gitter och struktur blandas.** Fcc är ett gitter. Koppar är en fcc-*struktur* (en atom per gitterpunkt), och NaCl och kisel är fcc-gitter med en bas av två.
- **NaCl tas för sc.** Na^+ och Cl^- är olika, så grannpunkterna ser inte likadana ut. Gittret är fcc med kanten a , och varje gitterpunkt bär ett jonpar. Gitterkonstanten är alltså a , inte avståndet $a/2$ mellan närmaste joner.
- **Hörn- och sidoatomer räknas hela.** Ett hörn ger $\frac{1}{8}$, en sida $\frac{1}{2}$. Fcc har 4 atomer per cell, inte 14.
- **a tas för atomavståndet.** Det gäller bara i sc. I bcc och fcc är närmaste grannen närmare än a .

6. Lösta exempel

☰ Exempel – Koppars densitet

Koppar har fcc-struktur med gitterkonstanten $a = 0,3615 \text{ nm}$ och molmassan $63,55 \text{ g/mol}$. Bestäm densiteten och avståndet mellan närmaste grannar.

✎ Lösning

Atomer per cell. Fcc ger $N = 4$.

Densiteten.

$$\rho = \frac{N M}{N_A a^3} = \frac{4 \cdot 63,55 \cdot 10^{-3}}{6,022 \cdot 10^{23} \cdot (0,3615 \cdot 10^{-9})^3} = \boxed{8,94 \cdot 10^3 \text{ kg/m}^3}$$

Fysika: Te

Närmaste granne. Atomerna rör vid varandra längs sidodiagonalen $\sqrt{2} a$, som rymmer två grannavstånd:

$$d = \frac{\sqrt{2} a}{2} = \frac{0,3615}{\sqrt{2}} \text{ nm} = \boxed{0,256 \text{ nm}}$$

Rimlighetskontroll. Tabellvärdet för koppar är 8,96 g/cm³, så gittermodellen ger densiteten på några promille när.

Ej kontrollerat mot facit – två oberoende lösningar stämmer överens.

☰ Exempel – Atomtäteten i kisel

Kisel har diamantstruktur med $a = 0,357 \text{ nm}$ och molmassan 28,09 g/mol. Bestäm antalet atomer per kubikmeter, densiteten och avståndet till närmaste granne, som ligger en fjärdedel av rymddiagonalen bort.

Lösning

Atomer per cell. Fcc-gitter med två atomer i basen ger $N = 8$.

Atomtäteten.

$$n_{\text{Si}} = \frac{N}{a^3} = \frac{8}{(0,357 \cdot 10^{-9})^3} = \boxed{4,99 \cdot 10^{28} \text{ m}^{-3}}$$

Densiteten.

$$\rho = \frac{n_{\text{Si}} M}{N_A} = \frac{4,99 \cdot 10^{28} \cdot 28,09 \cdot 10^{-3}}{6,022 \cdot 10^{23}} = \boxed{2,33 \cdot 10^3 \text{ kg/m}^3}$$

Närmaste granne.

$$d = \frac{\sqrt{3} a}{4} = \frac{\sqrt{3} \cdot 0,357}{4} \text{ nm} = \boxed{0,235 \text{ nm}}$$

Koppar har $4/a^3 = 8,47 \cdot 10^{28}$ atomer per m³. Kisel har alltså bara drygt hälften så många, trots att grannavståndet är kortare. Det beror på att de riktade bindningarna bara ger fyra grannar i stället för tolv.

Ej kontrollerat mot facit – två oberoende lösningar stämmer överens.

Läsning

- 42.3 Structure of Solids