

Kristallstrukturer

19 okt. 2026, 9 min läsning

UTKAST

#fysik #fasta-tillståndets-fysik #modell

Kurs: F0005T **Förkunskaper:** Metallisk bindning, Kovalent bindning

Varje grundämne i periodiska systemet i Fysika (T k3) har en kod för sin kristallstruktur: SC, BCC, FCC, HEX, DIA, TET, ORC, RHL, CUB eller MCL. Fem av dem räcker för nästan alla ämnen i kursen. De flesta metaller är bcc, fcc eller hcp, eftersom metallbindningen inte har någon riktning och atomerna därför packas så tätt som möjligt. Kol, kisel och germanium har diamantstruktur, eftersom den kovalenta bindningen är riktad och varje atom bara binder till fyra grannar. Den här noten går igenom alla strukturerna, de fem viktiga utförligt och de övriga kort.

Formeln, symbol för symbol

$$\underbrace{N}_{\substack{\text{atomer} \\ \text{per cell}}} = \frac{\overbrace{N_{\text{hörn}}^{\text{delas av 8}}}}{8} + \frac{\overbrace{N_{\text{sida}}^{\text{delas av 2}}}}{2} + \underbrace{N_{\text{inuti}}}_{\substack{\text{hela} \\ \text{atomer}}}$$

En atom räknas med den andel som ligger inne i cellen. Talen 8 och 2 gäller den kubiska cellen; i det hexagonala prismet (avsnitt 5) delas ett hörn av 6 prismor. Med N och gitterkonstanten a ur T k3 ger $\rho = NM/(N_A a^3)$ densiteten, se [Kristallgitter](#).

1. Varför strukturerna ser olika ut

Strukturen bestäms av bindningen. Två fall täcker nästan hela periodiska systemet:

- **Oriktad bindning** ([metaller](#), ädelgaser). I metallerna sitter jonerna i en elektrongas som binder lika bra åt alla håll, och ädelgaserna hålls ihop av [van der Waals-bindning](#), som inte heller har någon riktning. Energin blir lägst när varje atom har så många grannar som möjligt, så strukturen blir tätpackad: fcc eller hcp med 12 grannar, eller bcc med 8.

- **Riktad bindning** (**kovalenta** ämnen). Kol, kisel och germanium har fyra valenselektroner och bildar fyra bindningar mot hörnen av en tetraeder. Det ger diamantstrukturen med bara 4 grannar, trots att den lämnar två tredjedelar av rummet tomt.

Kod i T k3	Struktur	Exempel ur T k3
SC	enkel kubisk	Po
BCC	rymdcentrerad kubisk	Li, Na, K, Fe, Cr, W
FCC	ytcentrerad kubisk	Al, Cu, Ag, Au, Ni, Pb
HEX	hexagonal (för metallerna oftast hcp)	Mg, Zn, Ti, Co (Se och Te är HEX men inte hcp)
DIA	diamant	C, Si, Ge
TET, ORC, RHL, CUB, MCL	övriga, se avsnitt 7	In, Ga, As, Mn, Pu

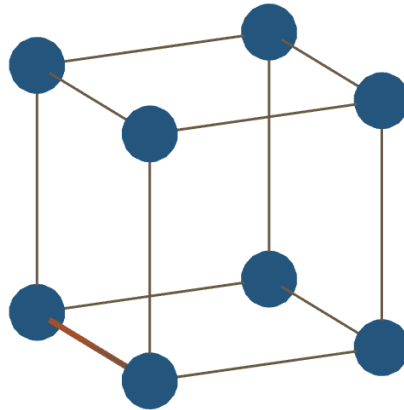
Fysika: T k3 (kristallstrukturen står i varje ruta i periodiska systemet)

Atomerna ritas i figurerna som små klot så att cellen syns. I verkligheten är de så stora att närmaste grannar rör vid varandra, se **Packningstäthet**.

2. Enkel kubisk, sc

Bilden. En kub med en atom i varje hörn, och kuberna staplade som tärningar i en låda. Varje atom har en granne rakt framför, bakom, till höger, till vänster, ovanför och under sig.

sc (Po): 1 atom/cell · 6 grannar · packning 0,52



dra för att vrida

● hörn (1/8) — grannar rör vid varandra: kanten

Enkel kubisk enhetscell (vrid med musen, hover på atomerna). Hörnatomerna delas av åtta celler, så cellen har $8 \cdot \frac{1}{8} = 1$ atom. Närmaste grannar rör vid varandra längs kanten.

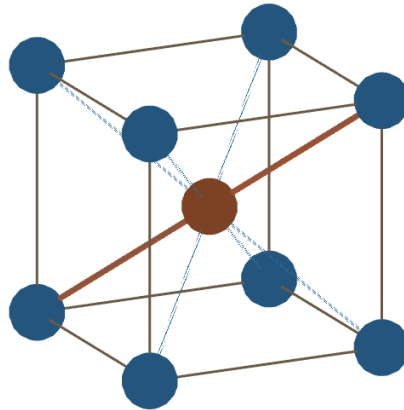
- **Atomer per cell:** $8 \cdot \frac{1}{8} = 1$.
- **Koordinationstal:** 6.
- **Närmaste granne:** a , längs kanten.
- **Packningstäthet:** $\pi/6 \approx 0,52$.
- **Exempel:** polonium, $a = 3,35 \text{ Å}$, det enda grundämnet med SC i T k3.

Nästan hälften av volymen är tom, och kubens åtta atomer har ett stort hål i mitten. Därför är sc nästan aldrig lönsamt för en oriktad bindning.

3. Rymdcentrerad kubisk, bcc

Bilden. En atom i mitten av en kub med åtta grannar i hörnen. Mittatomen fyller hålet som sc lämnar. Varje hörnatom är i sin tur mittatom i en annan kub, så alla atomer har det likadant.

bcc (Fe, Na, W): 2 atomer/cell · 8 grannar · packning 0,68



dra för att vrida

● hörn (1/8) ● mitt (1) — grannar rör vid varandra: rymddiagonalen

Bcc-cellen. Mittatomen har sina åtta närmaste grannar i hörnen (prickade linjer), och atomerna rör vid varandra längs rymddiagonalen (orange).

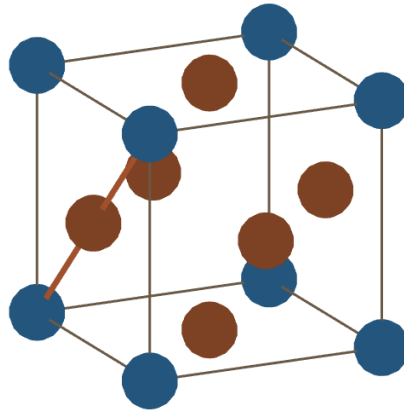
- **Atomer per cell:** $8 \cdot \frac{1}{8} + 1 = 2$.
- **Koordinationstal:** 8, och därtill 6 grannar bara lite längre bort, på avståndet a .
- **Närmaste granne:** $\sqrt{3}a/2$, en halv rymddiagonal.
- **Packningstäthet:** $\sqrt{3}\pi/8 \approx 0,68$.
- **Exempel:** alkalimetallerna Li, Na, K, Rb, Cs och Fe, Cr, V, Mo, W. Järn har $a = 2,87 \text{ \AA}$, så närmaste avståndet är $\sqrt{3} \cdot 2,87/2 = 2,49 \text{ \AA}$.

Bcc är inte tätpackad, men de sex grannarna på avståndet a ligger så nära att de också bidrar till bindningen. För flera metaller blir bcc därför ungefär lika gynnsam som fcc.

4. Ytcentrerad kubisk, fcc

Bilden. En kub med en atom i varje hörn och en mitt på varje sida. Lutar man kuben så att en rymddiagonal står lodrätt syns att atomerna ligger i tätpackade lager vinkelräta mot diagonalen, staplade ABCABC, se avsnitt 5.

fcc (Al, Cu, Ag, Au): 4 atomer/cell · 12 grannar · packning 0,74



dra för att vrida

● hörn (1/8) ● sida (1/2) — grannar rör vid varandra: sidodiagonalen

Fcc-cellen. Sidoatomerna (orange) delas av två celler, och atomerna rör vid varandra längs sidodiagonalen.

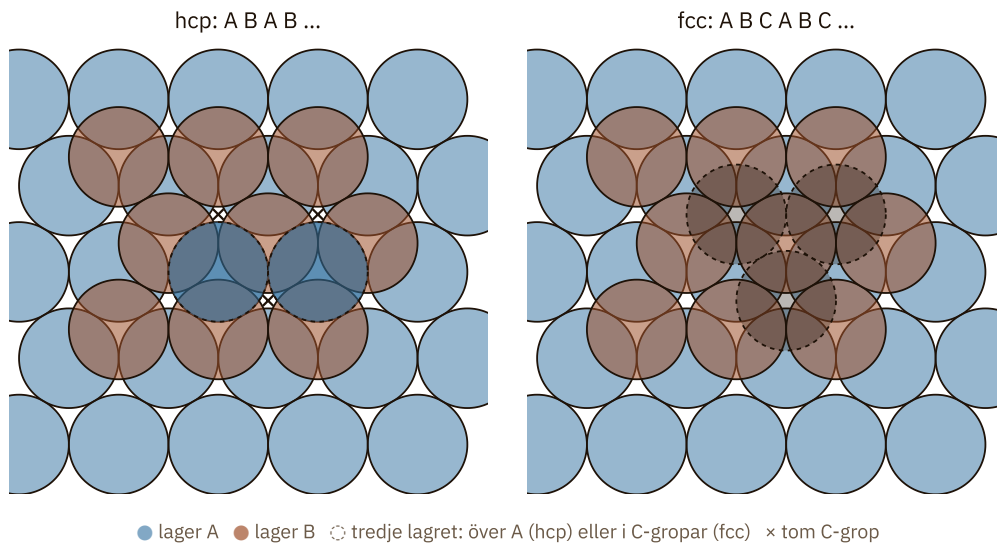
- **Atomer per cell:** $8 \cdot \frac{1}{8} + 6 \cdot \frac{1}{2} = 4$.
- **Koordinationstal:** 12.
- **Närmaste granne:** $\sqrt{2} a/2 = a/\sqrt{2}$, en halv sidodiagonal.
- **Packningstäthet:** $\pi/(3\sqrt{2}) \approx 0,74$, den största möjliga för lika stora klot.
- **Exempel:** Al, Cu, Ag, Au, Ni, Pt, Pb och ädelgaserna Ne, Ar, Kr, Xe. Koppar har $a = 3,61 \text{ Å}$ och närmaste avståndet $3,61/\sqrt{2} = 2,55 \text{ Å}$.

Fcc-metaller som koppar, guld och aluminium är mjuka och lätta att forma. De tätpackade lagren finns i fyra olika orienteringar, och i varje lager kan glidning ske i tre riktningar (12 glidsystem). Det är där **dislokationerna** rör sig. Hcp har bara en orientering av tätpackade lager.

5. Hexagonal tätpackning, hcp

Bilden. Lägg kulor tätt i ett plant lager: varje kula får sex grannar i lagret, och mellan dem bildas gropar. Nästa lager läggs i hälften av groparna. Det tredje lagret har två val:

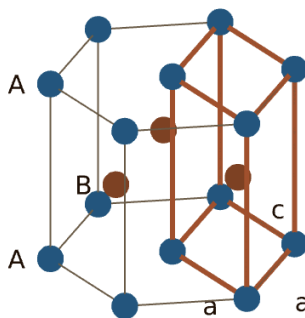
- **rakt över det första, ABAB..., vilket är hcp,**
- **i de gropar som ingen av de två första använt, ABCABC..., vilket är fcc.**



Tätpackade lager sedda uppifrån. Lager B (orange) ligger i groparna i lager A (blått). I hcp hamnar tredje lagret rakt över A, och C-groparna (×) står tomma genom hela kristallen. I fcc fyller tredje lagret C-groparna.

Båda staplingarna ger varje atom sex grannar i det egna lagret och tre i vart och ett av lagren ovanför och under, totalt 12. Packningstätheten blir densamma, 0,74. Skillnaden syns först i det tredje lagret.

hcp (Mg, Zn, Ti): 2 atomer/primitiv cell · 12 grannar · packning 0,74



dra för att vrida

● lager A ● lager B — primitiv cell, $\gamma = 120^\circ$

Hcp med Mg:s $c/a = 1,62$. Det hexagonala prismet innehåller tre primitiva celler. Den primitiva cellen i Tk_3 (orange) har $a = b$, höjden c och vinkeln $\gamma = 120^\circ$ mellan a och b , och innehåller 2 atomer: en i lager A och en i lager B.

- **Atomer per cell:** 2 i den primitiva cellen, 6 i det hexagonala prismet ($12 \cdot \frac{1}{6} + 2 \cdot \frac{1}{2} + 3$).

- **Koordinationstal:** 12.
- **Närmaste granne:** a , inom lagret.
- **Packningstäthet:** 0,74, samma som fcc, när c/a har det ideala värdet.
- **Exempel:** Mg, Zn, Ti, Co, Cd, Be.

Avståndet mellan lager A och B är höjden i en regelbunden tetraeder med kanten a , och c är två sådana lager:

$$c = 2\sqrt{\frac{2}{3}} a \approx 1,633 a$$

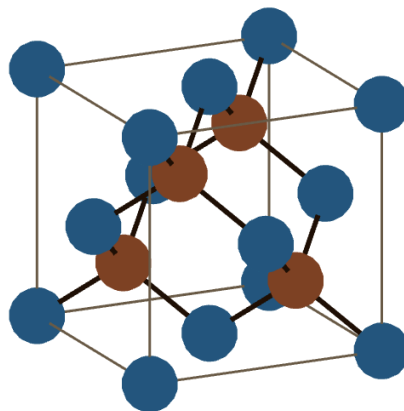
T k3 ger c/a för varje HEX-ämne. Magnesium (1,62) och titan (1,59) ligger nära idealet, medan zink (1,86) och kadmium (1,89) är utdragna längs c .

Fysika: T k3 (c/a för HEX)

6. Diamantstrukturen

Bilden. Två fcc-gitter inskjutna i varandra, det andra förskjutet en fjärdedel av rymddiagonalen, alltså $(\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4})a$. Varje atom sitter mitt i en tetraeder av fyra grannar från det andra gittret och binder till dem med var sin kovalent bindning.

diamant (C, Si, Ge): 8 atomer/cell · 4 grannar · packning 0,34



dra för att vrida

● fcc-gitter 1 ● fcc-gitter 2 ($\frac{1}{4}$ rymddiagonal bort) — bindning

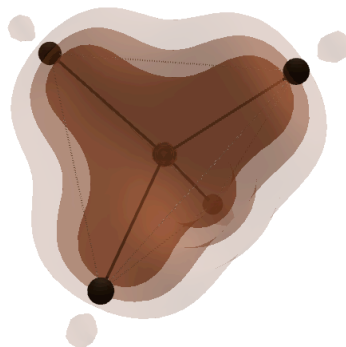
Diamantcellen. Det blå fcc-gittret ger 4 atomer, och de fyra orange atomerna inne i cellen hör till det förskjutna gittret. Varje atom har fyra bindningar (svarta) mot hörnen av en tetraeder.

- **Atomer per cell:** $4 + 4 = 8$.

- **Koordinationsstal:** 4.
- **Närmaste granne:** $\sqrt{3}a/4$, en fjärdedel av rymddiagonalen.
- **Packningstäthet:** $\sqrt{3}\pi/16 \approx 0,34$.
- **Exempel:** C (diamant, $a = 3,57 \text{ Å}$), Si ($5,43 \text{ Å}$), Ge ($5,66 \text{ Å}$).

Kol, kisel och germanium har konfigurationen s^2p^2 ytterst. I kristallen blandas s - och p -orbitalerna till fyra likvärdiga sp^3 -orbitaler som pekar mot tetraederns hörn med vinkeln $109,5^\circ$ mellan sig. Varje sp^3 -orbital delar ett elektronpar med en granne. Bindningarna kan inte vridas, och därför bestämmer de grannarnas läge och inte packningen.

fyra riktade σ -bindningar mot hörnen av en tetraeder



dra för att vrida

De fyra σ -bindningarna kring en kolatom i diamant som elektronmoln (vrid med musen). Kvalitativ modell: sp^3 -hybrider ($s + \sqrt{3}p)/2$ med Slaterorbital (ζ ur Slaters regler), en bindningsorbital per granne. De små molnen bakom grannarna är baklobber av grannarnas hybrider.

7. Övriga strukturer i T k3

Resten av koderna gäller ämnen med mer komplicerad bindning eller många atomer per cell.

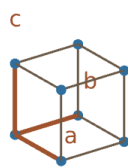
Detaljerna ingår inte i kursen, men koderna står i T k3 och beskriver cellens form:

Kod	Namn	Cellens form	Exempel ur T k3
CUB	komplex kubisk	$a = b = c$, alla vinklar 90° , många atomer per cell	Mn, O, P

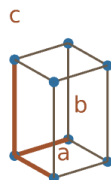
Kod	Namn	Cellens form	Exempel ur T k3
TET	tetragonal	$a = b \neq c$, alla vinklar 90°	In, Sn, B
ORC	ortorombisk	$a \neq b \neq c$, alla vinklar 90°	Ga, S, Cl, Br, I
RHL	romboedrisk	$a = b = c$, $\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$	As, Sb, Bi, Hg
MCL	monoklin	$a \neq b \neq c$, en vinkel $\neq 90^\circ$	F, Pu

Fysika: T k3

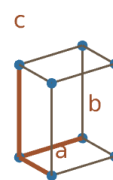
CUB (Mn)
 $a = b = c$, alla vinklar 90°



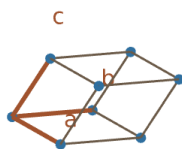
TET (In, Sn)
 $a = b \neq c$, alla vinklar 90°



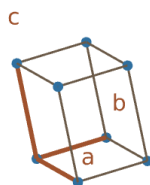
ORC (Ga, S, I)
 $a \neq b \neq c$, alla vinklar 90°



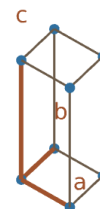
RHL (As, Sb, Bi, Hg)
 $a = b = c$, $\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$



MCL (Pu, F)
 $a \neq b \neq c$, $\beta \neq 90^\circ$



HEX (Mg, Zn, Ti)
 $a = b \neq c$, $\gamma = 120^\circ$



dra för att vrida

Cellformerna bakom koderna, med HEX som jämförelse (vrid med musen). Orange kanter är cellaxlarna a , b och c . Proportionerna är valda för att visa formen, inte ett bestämt ämne.

Tenn är ett exempel på att strukturen kan bero på temperaturen. Vitt tenn är tetragonalt (TET i T k3), men under 13°C övergår det långsamt till grått tenn med diamantstruktur, som kisel.

8. Sammanfattning

Struktur	Atomer/cell	Koordinationstal	Närmaste granne	Packningstäthet	Exempel
sc	1	6	a	0,52	Po
bcc	2	8	$\sqrt{3}a/2$	0,68	Na, Fe, K
fcc	4	12	$\sqrt{2}a/2$	0,74	Al, Cu, Ag, Au
hcp	2 (primitiv)	12	a	0,74	Mg, Zn, Co
diamant	8	4	$\sqrt{3}a/4$	0,34	C, Si, Ge

Fysika: T k3 (strukturer, atomer per cell 1, 2, 4, 2 och gitterkonstanter)

⚠ Vanliga fel

- **Hcp tas för kubisk.** HEX har två gitterkonstanter, a och c , och cellvolymen är inte a^3 . Den primitiva cellen har volymen $\frac{\sqrt{3}}{2}a^2c$.
- **Prismat och den primitiva cellen blandas.** Det hexagonala prismat har 6 atomer, den primitiva cellen i T k3 har 2. Båda ger samma densitet, så länge volymen hör till samma cell.
- **Diamant tas för fcc.** Gittret är fcc, men basen har två atomer. Cellen har 8 atomer, inte 4.
- **Fel diagonal.** Närmaste granne ligger längs rymddiagonalen i bcc ($\sqrt{3}a/2$), längs sidodiagonalen i fcc ($\sqrt{2}a/2$) och en fjärdedels rymddiagonal bort i diamant ($\sqrt{3}a/4$).
- **Tät packning tolkas som stark bindning.** Diamant har den lägsta packningstätheten i tabellen men är hårdast. Packningen speglar bindningens riktning, inte dess styrka.

9. Löst exempel

☰ Exempel – Densiteten hos järn och aluminium ur T k3

Enligt T k3 är järn BCC med $a = 2,87 \text{ Å}$ och molmassan $55,845 \text{ g/mol}$, och aluminium FCC med $a = 4,05 \text{ Å}$ och molmassan $26,98 \text{ g/mol}$. Bestäm densiteten för båda. Varför är aluminium så mycket lättare, trots att det packas tätare?

 Lösning

Järn. Bcc ger $N = 2$:

$$\rho_{\text{Fe}} = \frac{N M}{N_A a^3} = \frac{2 \cdot 55,845 \cdot 10^{-3}}{6,022 \cdot 10^{23} \cdot (2,87 \cdot 10^{-10})^3}$$

$$\rho_{\text{Fe}} = \boxed{7,85 \cdot 10^3 \text{ kg/m}^3}$$

Fysika: T k3, Te

Aluminium. Fcc ger $N = 4$:

$$\rho_{\text{Al}} = \frac{4 \cdot 26,98 \cdot 10^{-3}}{6,022 \cdot 10^{23} \cdot (4,05 \cdot 10^{-10})^3}$$

$$\rho_{\text{Al}} = \boxed{2,70 \cdot 10^3 \text{ kg/m}^3}$$

Jämförelsen. Antalet atomer per volym är

$$\frac{N}{a^3} : \quad 8,46 \cdot 10^{28} \text{ m}^{-3} (\text{Fe}), \quad 6,02 \cdot 10^{28} \text{ m}^{-3} (\text{Al})$$

Aluminiumatomerna är större, så trots den tätare packningen får det färre atomer per volym än järn. Dessutom väger varje atom bara hälften så mycket (27 mot 56 g/mol). Densiteten bestäms alltså främst av atommassan och atomstorleken, inte av packningstätheten.

Rimlighetskontroll. Typiska värden för järn och aluminium är $7,87 \cdot 10^3$ och $2,70 \cdot 10^3 \text{ kg/m}^3$.

Ej kontrollerat mot facit – två oberoende lösningar stämmer överens.

Läsning

- 42.3 Structure of Solids