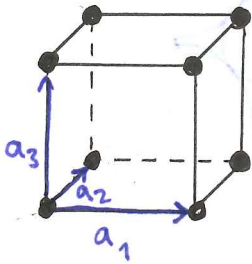


Kristallstruktur

Kubiska bravais-gitter

{ simple cubic }

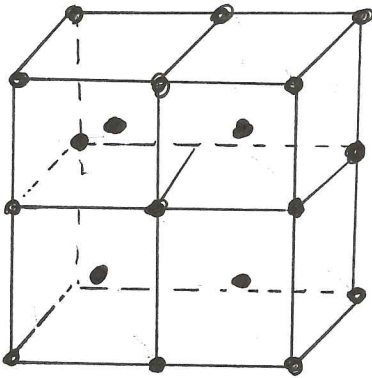


$$\begin{aligned} a_1 &= a \hat{x} \\ a_2 &= a \hat{y} \\ a_3 &= a \hat{z} \end{aligned}$$

{ Koordinationstal =
närmsta grannar }

$$CN = 6$$

Body-centered cubic (BCC)



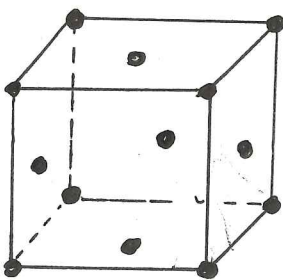
$$a_1 = \frac{a}{2} (-\hat{x} + \hat{y} + \hat{z})$$

$$a_2 = \frac{a}{2} (\hat{x} - \hat{y} + \hat{z})$$

$$a_3 = \frac{a}{2} (\hat{x} + \hat{y} - \hat{z})$$

$$CN = 8$$

Face-centered cubic (FCC) (CCP - cubic closed packed)



$$a_1 = \frac{a}{2} (\hat{x} + \hat{z})$$

$$a_2 = \frac{a}{2} (\hat{x} + \hat{y})$$

$$a_3 = \frac{a}{2} (\hat{y} + \hat{z})$$

$$CN = 12$$

Hexagonal closed packed

Packningsordning:

en nivå A

två --- AB

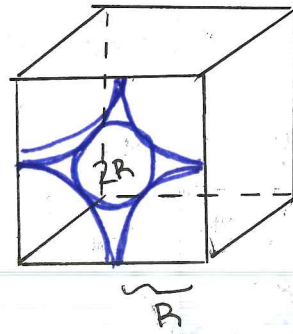
tre nivåer ABC eller ABA

{ HCP: ABABABAB
FCC: ABCABCABC }

Hur tätt är atomerna packade?

Packningskvot: $\frac{\text{Atomvolym}}{\text{Krivallvolym}}$

$$4R = \sqrt{2}a \rightarrow R = \frac{a}{\sqrt{8}}$$



FCC: antal atomer i cellen $\rightarrow 8\left(\frac{1}{8}\right) + 6\left(\frac{1}{2}\right) = 4$

Packningstäthet: $\frac{\# \text{ atomer/cell} \cdot \frac{4\pi R^3}{3}}{a^3} =$

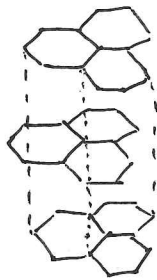
$$= \frac{4 \cdot 4\pi \left(\frac{a}{\sqrt{8}}\right)^3 \cdot \frac{1}{3}}{a^3} = 0.74$$

Diamantstruktur

FCC + bas, bas: (000)
 $\left(\frac{1}{4} \frac{1}{4} \frac{1}{4}\right)$ (se boken!)
CN = 4

Grafitstruktur (Polymorf)

Som HCP, men varannat lager är förskjutet i sidled!



Grafen - egenskaper

- Tunnt! $0.77 \frac{\text{mg}}{\text{m}^2}$
- starkt
- Böjligt/flexibelt
- Ogenomträngligt
- Genomskinligt
- Mkt. hög elektrisk ledn.förmåga

Polykristallin material

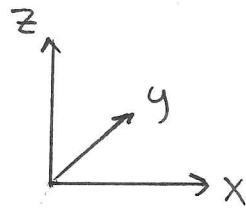
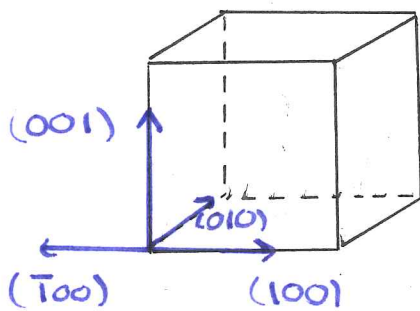
↳ Består av sammansatta kristaller

↳ Små kristaller: Korn

Fastfasrening \rightarrow blanda startreaktanter, låt baka i hög temp.

Namngivelse av riktningar / plan i kristaller

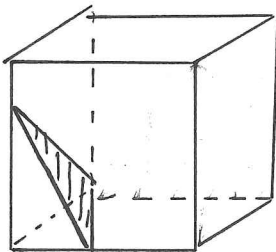
Miller index (h, k, l)



(Ekvivalenta riktningar
 $\langle 100 \rangle$
 $[531], [135], [513], \dots \langle 531 \rangle$)

Negativa riktningar betecknas med ett minustecken ovanför!

Kristallplan

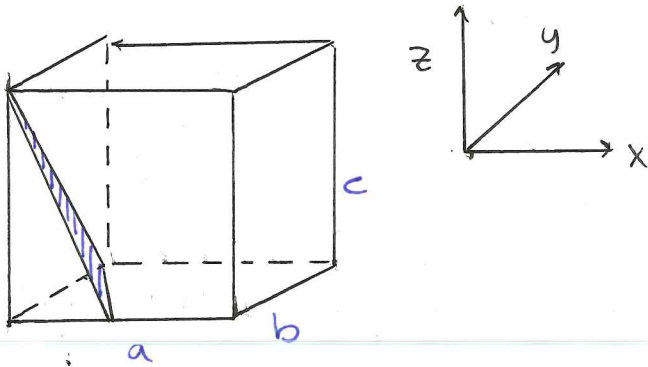


① Bestäm skärningar med koord. axlar
 $(\frac{1}{2}, 1, 1)$

② Invertera! $\rightarrow (2, 1, 1)$

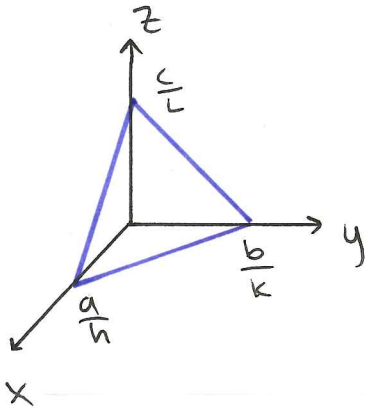
(om inversen \neq heltal \rightarrow multiplicera med minsta gemensamma nämnare:

$(124) \rightarrow (1 \frac{1}{2} \frac{1}{4}) \rightarrow (421)$



Definition: Avstånd från origo till närmsta plan med Millerindex hkl

$$= d_{hkl}$$



$$\cos \alpha_1 = \frac{d_{hkl}}{a/h}$$

$$\cos \alpha_2 = \frac{d_{hkl}}{b/k}$$

$$\cos \alpha_3 = \frac{d_{hkl}}{c/l}$$

$$\cos^2 \alpha_1 + \cos^2 \alpha_2 + \cos^2 \alpha_3 = 1$$

$$d_{hkl}^2 \left(\frac{h^2}{a^2} + \frac{k^2}{b^2} + \frac{l^2}{c^2} \right) = 1$$

$$d_{hkl} = \frac{1}{\sqrt{\frac{h^2}{a^2} + \frac{k^2}{b^2} + \frac{l^2}{c^2}}}$$

Kubisk struktur: $a = b = c$