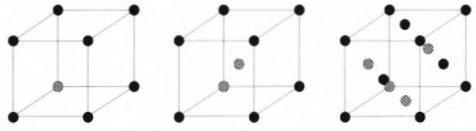
# Krystallografisk ABC

*Jørgen Friis Bak, redaktør*

Atomerne i et fast stof placerer sig sædvanligvis indbyrdes i en gitterstruktur, der er karakteristisk for det pågældende stof. I mange tilfælde er atomernes placering baseret på en terningeformet struktur. Det er dog kun meget få stoffer, der danner det simple kubiske gitter, hvor atomerne udelukkende sidder i hjørne-positionerne af en terning.

To ofte forekommende varianter kaldes for bcc, *body-centered cubic*, hvor der er et ekstra atom i midten af terningen, og fcc, *face-centered cubic*, hvor der er et ekstra atom på hver af terningens sider.



Kubisk bcc fcc

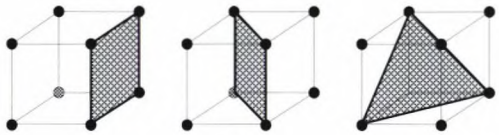
I gitterstrukturen er atomerne ordnede i en-dimensionale rækker, krystalakserne, og i to-dimensionale krystalplaner. Når man skal angive en krystalakse, anvendes et koordinatsystem, baseret på terningens sider: Rækken af atomer der fortsætter udover én af terningens sider kaldes for [100]-aksen, og [010]-aksen står vinkelret på denne. For at angive den modsatte retning, sættes der et minus *ovenover* tallet, så $[0\bar{1}0]$-retningen er modsat [010]-retningen. Der er mange mulige akser i en krystal. Langs én sides diagonal finder man [110]-aksen, og fra terningens ene hjørne gennem centrum til dens modstående hjørne findes [111]-retningen.

Krystalplanerne har en meget vigtig funktion i forbindelse med studiet af krystaller: en bølge, for eksempel en røntgenstråle, der sendes ind mod en krystalplan, kan blive reflekteret. Hvis der skal komme en bølge ud, må der være konstruktiv interferens fra de planer, der spejler bølgen: For at bevare fasen skal den ekstra vejlængde, som bølgen tilbagelægger i forbindelse med reflektionen fra en givet plan, være et helt antal bølgelængder i forhold til reflektionen fra en anden plan. Kaldes afstanden mellem planerne for $d$, betyder det at en bølge med bølgelængden $\lambda$, der falder ind mod en række planer under vinklen $\theta$, skal opfylde den såkaldte Bragg-betingelse: $2\,d\,\sin\theta = n\,\lambda$, hvor $n$ er et helt tal.

En bølge, karakteriseret ved en bølgelængde $\lambda$, der bevæger sig i retningen af en enhedsvektor $\mathbf{e}$, kan kort beskrives ved den såkaldte bølgevektor $\mathbf{k} = 2\pi/\lambda\,\mathbf{e}$. Når en sådan bølge falder ind mod en plan, kan man opløse den i komponenterne $k\cos\theta$ langs planen og $k\sin\theta$ vinkelret på planen. Ved spejlingen vendes den vinkelrette komponent, altså en total ændring på $2\,k\sin\theta = 4\pi\sin\theta / \lambda$. Bragg-betingelsen leder til at den reflekterede bølge skal opfylde betingelsen $n\,2\pi/d$.

Det viser sig herved at vektorer, vinkelrette på krystalplanerne, med længder $2\pi/d$ er særdeles nyttige. I kraft af at de er normalvektorer til planerne og med længder, der svarer til den reciprokke gitterafstand, er der samtidig givet en beskrivelse af krystalplanerne. Man har derfor valgt en notation for krystalplaner, der bygger på disse vektorer.

De planer, der danner siderne i et kubisk gitter, betegnes som (100), (010) og (001)-planer. Diagonalplanen, hvis ene side er en diagonal i terningen og med en terningekant som den anden side, betegnes som (110)-planen og siden, afgrænset af tre diagonaler, kaldes for (111)-planen.



(100) (110) (111)

På en overflade kan der opstå komplekse strukturer, der dækker over flere enhedsceller. For at beskrive disse skal man anvende større celler. På overfladen af silicium, dannet af en (111)-krystalplan, dannes der en meget omtalt struktur der dækker over 49 almindelige enhedsceller. Den kaldes for 7×7 strukturen eller mere præcist Si(111)7×7, for også at angive det materiale og den krystalretning som det handler om.