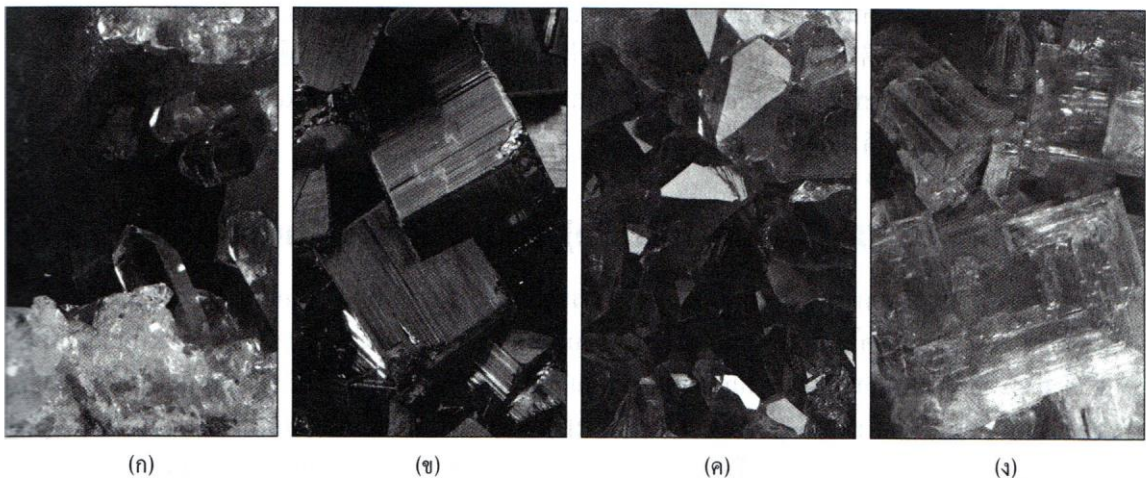


บทที่ 3

โครงสร้างของผลึก และอสัณฐานในวัสดุ



(Crystal and Amorphous Structure in materials)

ของแข็งอาจจะจัดเป็นประเภทกว้าง ๆ ได้เป็น ของแข็งที่มีผลึกกับของแข็งอสัณฐานของแข็งที่มีผลึก เนื่องมาจากการมีโครงสร้างของอะตอมโมเลกุลหรือไอออนเป็นระเบียบมีรูปร่างที่แน่นอนโลหะเป็นผลึก และประกอบด้วยผลึก หรือเกรน ที่ระบุแน่นอนเกรนนั้นมีขนาดเล็ก และเห็นไม่ชัดเจนเนื่องจากธรรมชาติของ โลหะมีลักษณะขุ่น (Opaque) ในแร่โดยทั่วไปจะขุ่นมัว ถึงใสและมีรูปร่างแน่นอนต่อไปนี้เป็นภาพของแร่ที่เป็นผลึกในธรรมชาติ เช่น (ก) Celestine เป็นแร่ที่อยู่ในรูป ของ SrSO_4 ซึ่งมีสีฟ้า (Celestial color) (ข) Pyrite เป็นแร่ที่มีอยู่ในรูปของ FeS_2 หรืออาจเรียกว่า ทองของคนโง่ (Fool's gold) เนื่องจาก FeS_2 มีสีเหลือง เหมือนทองเหลือง (ค) amethyst ซึ่งเป็นพลอยสีม่วงอยู่ในรูป ต่าง ๆ กันของควอร์ต (Quartz SiO_2) และ (ง) Halite หรือเรียกว่า Rock salt ซึ่งเป็นเกลือแกง (NaCl) ในทางตรงกันข้ามของแข็งที่เป็นอสัณฐานจะไม่มี การแข็งตัวเป็นผลึกที่มีการจัดตัวอย่างเป็นระเบียบ

วัตถุประสงค์ของการเรียนรู้

เมื่อนักศึกษาได้ศึกษาจนจบบทนี้แล้ว จะทำให้นักศึกษาสามารถ

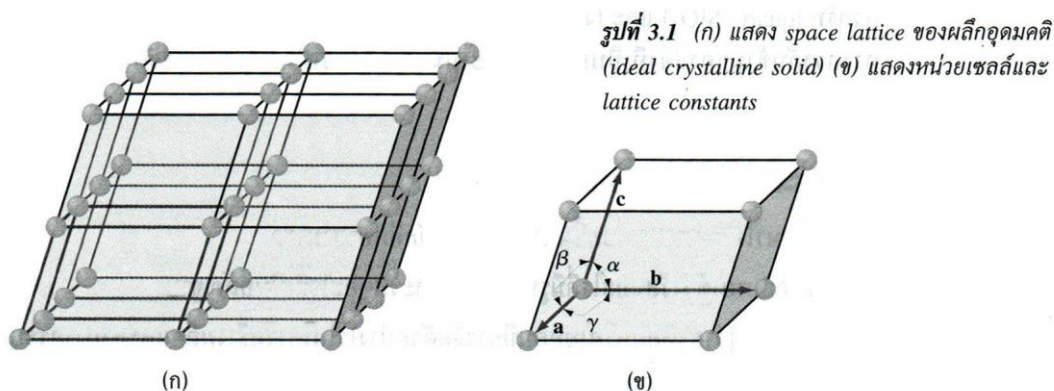
1. อธิบายได้ว่าวัสดุอะไรที่มีรูปร่างผลึกและวัสดุอะไรที่เป็นอสัณฐาน
2. เรียนรู้ว่าอะตอมหรือไอออนที่การจัดตัวอย่างไรในโครงสร้างผลึกและสามารถระบุได้ว่าของแข็ง นั้นเป็นผลึกอะไร
3. อธิบายความแตกต่างของ โครงสร้างอะตอม กับโครงสร้างผลึก สำหรับวัสดุที่เป็น ของแข็งได้

4. วิจัยออกกระหว่างโครงสร้างผลึกกับระบบผลึก (Crystal system)
5. อธิบายได้ว่าทำไมพลาสติกจึงไม่เป็นโครงสร้างผลึก 100%
6. อธิบายการมีภาวะพหุสัณฐาน (Polymorphism) หรือการมีอัญรูปหลายชนิดใน
7. คำนวณหาความหนาแน่นของโลหะที่มีโครงสร้างแบบ Body-centered และ Face-centered ของโครงสร้างคิวบิก (cubic structures) ได้
8. อธิบายลักษณะเฉพาะ (Characteristic) ของวัสดุได้โดยใช้วิธีทางเอ็กซ์เรย์ดิฟแฟรคชั่น
9. เขียนบอกตำแหน่งของอะตอม, ดัชนีบอกทิศทาง (direction indices), ดัชนีมิลเลอร์ (Miller indices) ของผลึกคิวบิก (Cubic crystals) ระบุว่าโครงสร้างที่อัดกันแน่นของโลหะส่วนมาก มี 3 ชนิดอะไรบ้าง หาดัชนี Miller-Bravais ของโครงสร้าง hexagonal-closed packed และเขียนทิศทางและระนาบในผลึกคิวบิกและเฮกซะโกนัล

3.1 สเปนแลตทิซ (Space lattice) และหน่วยเซลล์ (Unit cells)

โครงสร้างทางกายภาพของแข็งที่เป็นวัสดุวิศวกรรมเป็นสิ่งที่มีความสำคัญ โดยเฉพาะอย่างยิ่งการจัดตัวของอะตอม ไอออนหรือโมเลกุลที่เป็นองค์ประกอบของวัสดุนั้นและแรงของการเกิดพันธะระหว่างกันและกันด้วย ถ้าอะตอมหรือไอออนของแข็งนั้นมีการจัดตัวเป็นแบบ (Pattern) ที่ซ้ำ ๆ กันในลักษณะที่เป็นแบบสามมิติ เป็นของแข็งที่มีอันดับพิสัยยาว (long-range order, LRD) และอ้างถึงการเป็นผลึกของแข็ง หรือเป็นผลึกวัสดุ (crystalline material) ตัวอย่างของวัสดุที่เป็นผลึกได้แก่ พลาสติก โลหะ โลหะผสม และ วัสดุพอลิเมอร์ เป็นต้น ในทางตรงกันข้ามวัสดุที่เป็นผลึกบางชนิดอะตอม หรือ ไอออนของมันจะไม่มีการจัดตัวเป็นลักษณะ Long-range หรือเป็นช่วง ๆ และซ้ำกัน (repeatable manner) แต่จะเป็นลักษณะอันดับพิสัยสั้น (Short-range order, SRO) หมายความว่าอันดับของการเกิดกับอะตอมหรือโมเลกุลที่อยู่ใกล้ ๆ กันเท่านั้นเท่านั้น ตัวอย่างเช่น น้ำที่เป็นของเหลว โมเลกุลของมันซึ่งมี 1 อะตอมของออกซิเจนเกิดพันธะโคเวเลนต์กับอะตอมของไฮโดรเจน 2 อะตอม เป็นแบบอันดับพิสัยสั้น (Short-range order) และอันดับนี้จะหายไป เมื่อโมเลกุลเกิดพันธะกันเป็นพันธะทุติยภูมิซึ่งเป็นพันธะที่ไม่แข็งแรง วัสดุที่จัดตัวเป็นแบบ SRO จัดว่าเป็น วัสดุอสัณฐาน (amorphous) คือไม่มีรูปร่างผลึก (noncrystalline) คำอธิบายที่ละเอียดพร้อมตัวอย่างของคำว่าอสัณฐาน จะอยู่ที่หัวข้อ 3.12

การจัดตัวของอะตอมในผลึกแข็งนั้นสามารถอธิบายให้เข้าใจได้ง่ายๆโดยใช้จุดตัดของเส้นโครงข่าย (Network) ใน 3 มิติแสดงถึงอะตอมโครงข่าย (network) เรียกว่า space lattice (ดูรูปที่ 3.1 (ก)) ซึ่งประกอบด้วยจุดต่างๆเรียงกันเป็นแถวใน 3 มิติ แต่ละจุดใน Space lattice จะถูกห้อมล้อมด้วยจุดอื่นๆ ใน



ตารางที่ 3.1 การจำแนก space lattices ด้วยระบบผลึก

Crystal system	Axial lengths and interaxial angles	Space lattice
Cubic	Three equal axes at right angles $a = b = c, \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	Simple cubic Body-centered cubic Face-centered cubic
Tetragonal	Three axes at right angles, two equal $a \neq b \neq c, \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	Simple tetragonal Body-centered tetragonal
Orthorhombic	Three unequal axes at right angles $a \neq b \neq c, \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	Simple orthorhombic Body-centered orthorhombic Base-centered orthorhombic Face-centered orthorhombic
Rhombohedral	Three equal axes, equally inclined $a = b = c, \alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$	Simple rhombohedral
Hexagonal	Two equal axes at 120° , third axis at right angles $a = b \neq c, \alpha = \beta = 90^\circ, \gamma = 120^\circ$	Simple hexagonal
Monoclinic	Three unequal axes, one pair not at right angles $a \neq b \neq c, \alpha = \gamma = 90^\circ \neq \beta$	Simple monoclinic Base-centered monoclinic
Triclinic	Three unequal axes, unequally inclined and none at right angles $a \neq b \neq c, \alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$	Simple triclinic

ลักษณะที่เหมือนกันในผลึกอุดมคติ (Ideal crystal) ก็คือกลุ่มของ lattice points ซึ่งเป็นจุดตัดของโครงข่าย Space lattice แต่ละจุดจะบ่งบอกถึงตำแหน่งของอะตอมในหน่วยเซลล์ (unit cell) ที่ซ้ำๆ กัน ซึ่งแสดงด้วยเส้นทึบ (ดังรูปที่ 3.1 (ก)) กลุ่มของอะตอมที่มีการจัดตัวแน่นอนเหมือนกันซึ่งก็คือส่วนประกอบของ lattice points หรือ Motif สิ่งสำคัญที่ควรจะต้องระลึกไว้เสมอว่าอะตอมไม่ใช่ lattice Point เสมอไป ขนาดและรูปร่างของหน่วยเซลล์สามารถอธิบายได้โดย lattice vectors 3 ค่า คือ a , b และ c ซึ่งมาจากมุมหนึ่งของหน่วยเซลล์ (ดังรูปที่ 3.1 (ข)) เป็นหน่วยเซลล์ ความยาวของแต่ละด้าน a , b และ c ที่ประกอบกันเป็นมุม α , β และ γ เรียกว่าค่าคงตัวแลตทิซ (lattice constants) ของหน่วยเซลล์

3.2 ระบบผลึกและบราวส์แลตทิซ

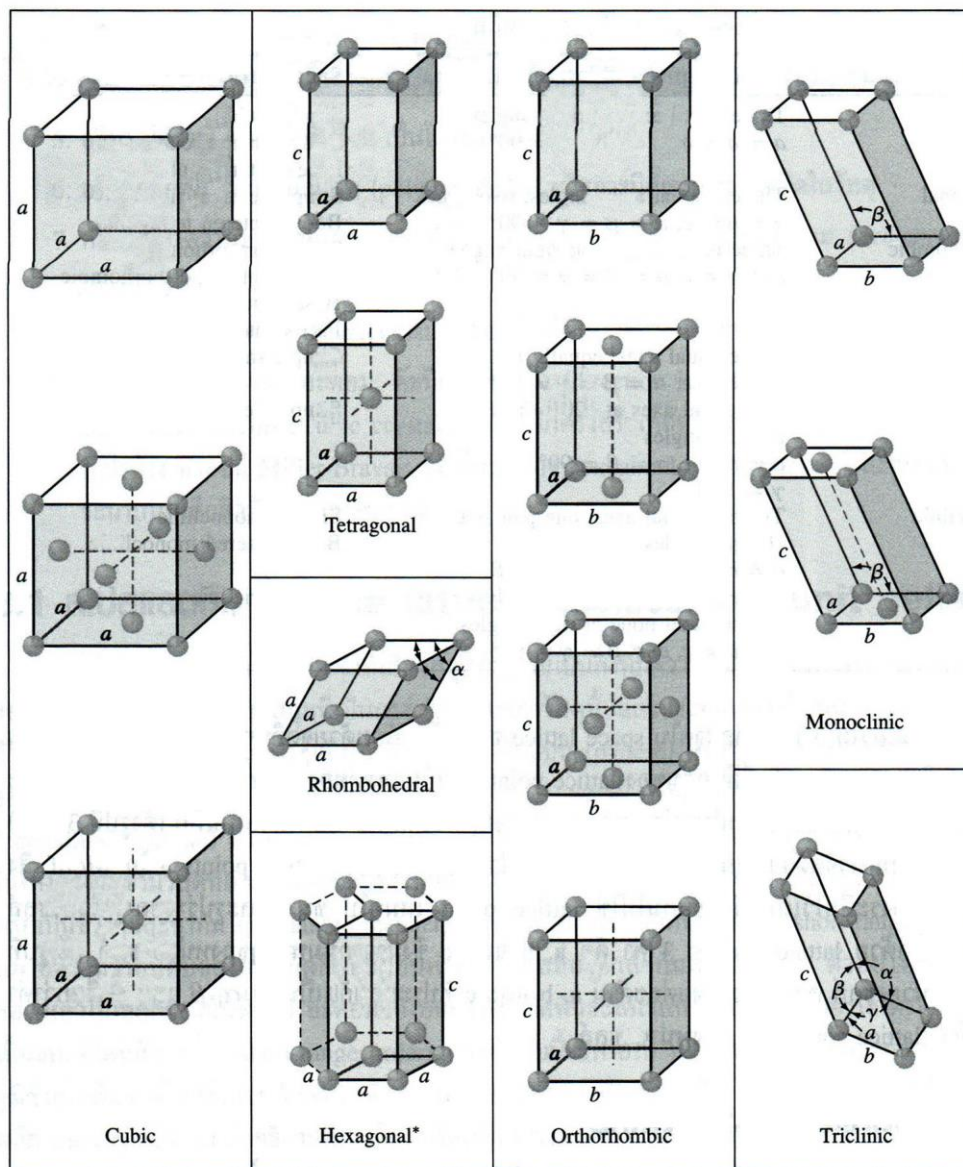
(Crystal Systems and Bravais Lattices)

ด้วยการกำหนดค่าเฉพาะของความยาวของด้านและมุมที่ด้านประกอบกันเป็นหน่วยเซลล์ออกมาเป็นแบบต่างๆ กัน นักผลึกวิทยาได้แสดงให้เห็นว่า หน่วยเซลล์แบบต่างๆ สามารถสร้างขึ้นได้มีเพียง 7 แบบเท่านั้น ดังแสดงในตารางที่ 3.1

ในระบบผลึก 7 แบบนี้มีความแตกต่างในหน่วยเซลล์พื้นฐาน A.J. Bravais¹ ได้แสดงให้เห็นว่าหน่วยเซลล์มาตรฐาน (Standard unit cells) 4 ชนิด คือ (1) ซิมเปิล (simple) (2) บอดีเซ็นเตอร์ (body-centered) (3) เฟสเซ็นเตอร์ (face-centered) และ (4) เบสเซ็นเตอร์ (Base centered)

ในระบบคิวบิก (Cubic system) ยังมีหน่วยเซลล์ได้อีก 3 ชนิดคือ Simple cubic, body-centered cubic และ face centered cubic ในระบบออร์โธโรมบิก (orthorhombic system) จะมี 4 ชนิด ระบบเททราโกนัล (Tetragonal system) มี 2 ชนิดคือ simple และ body-centered ระบบโมนอคลินิก (Monoclinic system)

¹August Bravais (1811–1863) เป็นนักผลึกวิทยาชาวฝรั่งเศสได้เสนอการจัดตำแหน่งของจุดใน space ได้ 14 แบบ

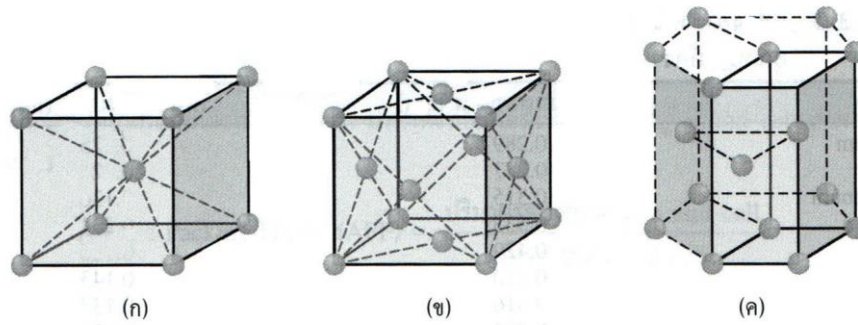


รูปที่ 3.2 แสดงหน่วยเซลล์ทั้ง 14 ชนิด ตาม Bravais กำหนดจุดแสดง lattice points ซึ่งจะอยู่ที่ด้านหรือมุมของหน่วยเซลล์ และจะต้องตรงกับหน่วยเซลล์อื่นๆที่เหมือนกัน (After W.G. Moffatt, G.W. Pearsall, and J. Wulff, "The structure and Properties of Materials", Vol.1: "Structure", Wiley, 1964, p.47)

มี 2 ชนิดคือ simple และ base-centered ส่วนระบบบรอมโบอีดรัล (rhombohedral system) ระบบเฮกซะโกนัล (Hexagonal system) และระบบไตรคลินิก (triclinic system) จะมีอย่างละ 1 ชนิด ดังแสดงตารางที่ 3.1

3.3 ความสำคัญของโครงสร้างผลึกของโลหะ

ในบทนี้จะได้กล่าวอย่างละเอียดถึงความสำคัญของโครงสร้างผลึกของธาตุต่างๆที่เป็นโลหะ และในบทที่ 10 จะได้กล่าวถึงความสำคัญของโครงสร้างผลึกที่เป็นพวกไอออนิกและพวกโคเวเลนต์ซึ่งเกิดขึ้นกับพวกวัสดุเซรามิก



รูปที่ 3.3 หน่วยเซลล์หลักของโครงสร้างผลึกของโลหะ (ก) body-centered cubic (ข) face-centered cubic (ค) hexagonal close-packed

โดยทั่วไปโลหะประมาณ 90% เมื่อเวลาแข็งตัวจะตกผลึกซึ่งส่วนมากจะเป็น Body-centered cubic (BCC) (รูปที่ 3.3(ก)), face-centered cubic (FCC) (รูปที่ 3.3(ข)) และ Hexagonal close-packed (HCP) (รูปที่ 3.3(ค)) สำหรับโครงสร้างของ Hexagonal close-packed จะมีความหนาแน่นมากกว่าโครงสร้างปกติของ Hexagonal เพราะเมื่อเวลาตกผลึกของโลหะ ส่วนมากจะมีการปล่อยพลังงานออกมา มากกว่า ทำให้อะตอมเข้าไปใกล้กันมากขึ้น พันธะก็จะแข็งแรงขึ้นด้วย ดังนั้นโครงสร้างแบบนี้จะมีความเสถียรมากขึ้น

ความจริงแล้วหน่วยเซลล์ของผลึกโลหะดังแสดงรูปที่ 3.3 มีขนาดเล็กมาก เช่น Body-centered cubic ของหน่วยเซลล์หลักที่อุณหภูมิห้องมีขนาด $0.287 \times 10^{-9} \text{ m}$ หรือ 0.287 nm ดังนั้นถ้านำหน่วยเซลล์ของเหล็กบริสุทธิ์มาจัดเรียงให้เป็นแถว ใน 1 มิลลิเมตร จะมีจำนวนเซลล์เรียงกันอยู่

$$1 \text{ mm} \times \frac{1 \text{ unit cell}}{0.287 \text{ nm} \times 10^{-6} \text{ mm/nm}} = 3.48 \times 10^6 \text{ unit cells}$$

(1 nanometer = $1 \text{ nm} = 10^{-9} \text{ meter}$)

ในการตรวจสอบการจัดตัวของอะตอมในโครงสร้างของผลึกหลักของหน่วยเซลล์ ให้คิดว่าอะตอมของธาตุในโครงสร้างผลึกนั้นมีลักษณะเป็นทรงกลมแข็ง ระยะห่างระหว่างอะตอม (Interatomic distance) ในผลึกทราบได้จากการทดลองทาง X-ray diffraction analysis ตัวอย่างเช่น ระยะห่างระหว่างอะตอม 2 อะตอมของอะลูมิเนียมที่ 20°C เป็น 0.2862 nm รัศมีของอะตอมคิดว่าเป็นครึ่งหนึ่งของระยะทางระหว่างอะตอม หรือ 0.143 nm ดังแสดงในตารางที่ 3.2, 3.3 และตารางที่ 3.4

3.3.1 โครงสร้างผลึก Body-Centered cubic (BCC)

โลหะที่มีโครงสร้างเป็นแบบ BCC ดังรูปที่ 3.4 จะเห็นได้ว่าอะตอมที่อยู่ตรงกลางถูกล้อมรอบด้วยอะตอมข้างเคียง 8 อะตอมด้วยกันเรียกว่าอะตอมที่อยู่ตรงกลางมีโคออร์ดิเนชัน นัมเบอร์ (Coordination number) เท่ากับ 8

การหาความสัมพันธ์ระหว่างค่าคงตัวแลตทิซ (a) กับรัศมีของอะตอม (R) จากรูปที่ 3.5

$$\text{ใน } 1 \text{ unit cell จะมีจำนวนอะตอมอยู่} = 1 + \left(8 \times \frac{1}{8} \right) = 2 \text{ อะตอม}$$

$$a\sqrt{3} = 4R$$

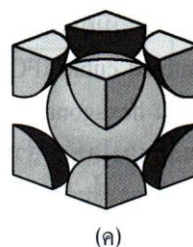
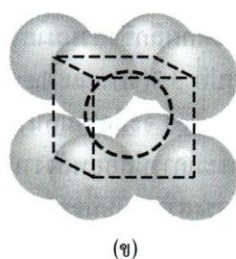
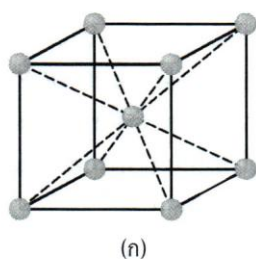
$$\text{lattice constant หรือ cell constant} = a$$

$$\therefore a = \frac{4R}{\sqrt{3}} \quad (3.1)$$

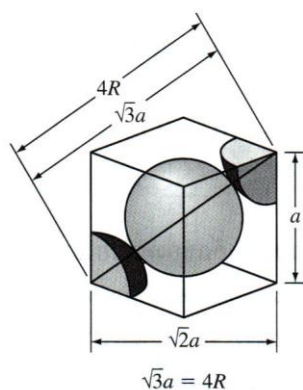
ตารางที่ 3.2 แสดงค่าคงตัวแลตทิซและรัศมีอะตอมของโลหะบางชนิดที่มีโครงสร้างแบบ BCC ที่อุณหภูมิห้อง

โลหะ	ค่าคงตัวแลตทิซ a (nm)	รัศมีอะตอม R^* (nm)
Chromium	0.289	0.125
Iron	0.287	0.124
Molybdenum	0.315	0.136
Potassium	0.533	0.231
Sodium	0.429	0.186
Tantalum	0.330	0.143
Tungsten	0.316	0.137
Vanadium	0.304	0.132

* คำนวณจากค่า lattice constants โดยใช้สมการ (3.1) $R = \sqrt{3}a/4$



รูปที่ 3.4 แสดง Body-centered cubic unit cell
(ก) อะตอมในหน่วยเซลล์
(ข) ทรงกลมแข็งของอะตอมในหน่วยเซลล์ (ค) หน่วยเซลล์ที่แยกออกมา



รูปที่ 3.5 เป็น BCC หน่วยเซลล์แสดงความสัมพันธ์ระหว่าง lattice constant และรัศมีอะตอม (R)

ตัวอย่างที่ 3.1

เหล็กที่ 20°C มีโครงสร้างเป็น BCC และมีรัศมีอะตอม 0.124 nm จงคำนวณหาค่าคงตัวแลตทิซ (a) ของเหล็ก

วิธีทำ จากรูปที่ 3.5 สมการที่ 3.1 $a = \frac{4R}{\sqrt{3}}$

ในที่นี้เหล็กมีรัศมี $= 0.124 \text{ nm}$

$$\therefore a = \frac{4(0.124 \text{ nm})}{\sqrt{3}} = 0.2864 \text{ nm}$$

Atomic Packing factor (APF) เป็นการคำนวณหาแฟกเตอร์ของปริมาตรที่อะตอมเข้าไปบรรจุใน Unit cell

ถ้าคิดว่าจะอะตอมมีลักษณะเป็นทรงกลม ปริมาตรที่อะตอมเข้าไปบรรจุใน Unit cell สามารถคำนวณหาได้จากสมการ

$$\text{Atomic Packing factor (APF)} = \frac{\text{ปริมาตรของอะตอมใน unit cell}}{\text{ปริมาตรของ unit cell}} \quad (3.2)$$

ตัวอย่างที่ 3.2

จงคำนวณหา atomic Packing factor (APF) ของ unit cell ที่เป็น BCC โดยถือว่าอะตอมเป็นทรงกลม
วิธีทำ จากสูตรในสมการที่ (3.2)

$$\begin{aligned} \text{(APF)} &= \frac{\text{ปริมาตรของอะตอมใน unit cell}}{\text{ปริมาตรของ unit cell}} \\ \text{ถ้าอะตอมมีรัศมี ใน 1 unit cell มี 2 อะตอม} \\ \therefore \text{ปริมาตรของอะตอม} \quad V_{\text{atoms}} &= 2 \times \frac{4}{3} \pi R^3 \\ &= 8.373 R^3 \\ \text{ปริมาตรของ unit cell} \quad V_{\text{unit cell}} &= a^3 \\ \text{แทนค่า } a &= \left(\frac{4R}{\sqrt{3}} \right)^3 \\ &= 12.32 R^3 \\ \therefore \text{APF ของ BCC unit cell} &= \frac{8.373 R^3}{12.32 R^3} = 0.68 \end{aligned}$$

นี้แสดงว่าใน BCC unit cell 68% ของปริมาตรจะบรรจุอะตอมและเหลือที่ว่างอยู่เพียง 32%
ถ้าเราแยกหน่วยเซลล์ออกมาเป็นทรงกลมเดี่ยว เราจะได้รูปแบบดังแสดงที่ 3.4 (ค) แต่ละเซลล์เหล่านี้จะมี 2 อะตอมเหมือนกันต่อหนึ่งหน่วยเซลล์ อะตอมหนึ่งจะเป็นทรงกลมสมบูรณ์อยู่ตรงกลางของ

ตารางที่ 3.3 แสดงค่าคงตัวแลตทิซกับรัศมีอะตอมของโลหะบางชนิดที่มีโครงสร้างแบบ FCC ที่อุณหภูมิห้อง (20°C)

โลหะ	ค่าคงตัวแลตทิซ a (nm)	รัศมีอะตอม R* (nm)
Aluminum	0.405	0.143
Copper	0.3615	0.128
Gold	0.408	0.144
Lead	0.495	0.175
Nickel	0.352	0.125
Platinum	0.393	0.139
Silver	0.409	0.144

* คำนวณจากค่าคงที่แลตทิซโดยใช้สมการที่ 3.3 $R = \sqrt{2}a / 4$

ตารางที่ 3.4 แสดงค่าคงตัวแลตทิซ รัศมีอะตอมและอัตราส่วนของ c/a ของโลหะชนิดต่างๆที่มีสูตรโครงสร้างเป็น HCP ที่อุณหภูมิห้อง (20°C)

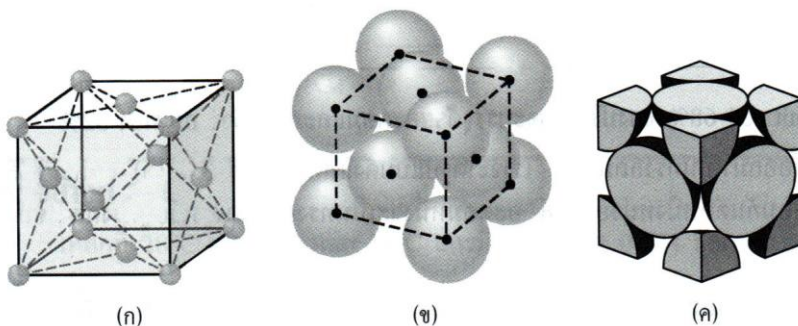
โลหะ	ค่าคงตัวแลตทิซ (nm)		รัศมีอะตอม R (nm)	c/a อัตราส่วน	% deviation from ideality
	a	c			
Cadmium	0.2973	0.5618	0.149	1.890	+ 15.7
Zinc	0.2665	0.4947	0.133	1.856	+ 13.6
Ideal HCP				1.633	0
Magnesium	0.3209	0.5209	0.160	1.623	- 0.66
Cobalt	0.2507	0.4069	0.125	1.623	- 0.66
Zirconium	0.3231	0.5148	0.160	1.593	- 2.45
Titanium	0.2950	0.4683	0.147	1.587	- 2.81
Beryllium	0.2286	0.3584	0.113	1.568	- 3.98

หน่วยเซลล์ ส่วนอีก 8 ชั้นจะอยู่ที่มุมของหน่วยเซลล์รวมกันแล้วก็จะเป็นหนึ่งหน่วยอะตอม ดังนั้นจะเห็นว่าใน 1 หน่วยเซลล์จะมี 2 อะตอมคือ 1 อะตอม (ตรงกลาง) กับอีก $8 \times \frac{1}{8}$ ที่มุม

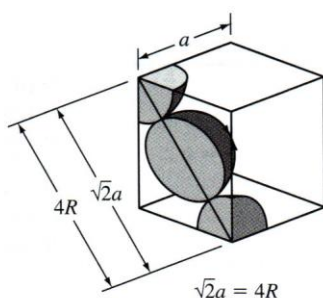
3.3.2 โครงสร้างผลึกแบบ Face-Centered Cubic (FCC)

เมื่อพิจารณาจากหน่วยเซลล์ FCC ดังรูป 3.6(ก) ในหน่วยเซลล์นี้จะมีหนึ่ง Lattice point อยู่ที่มุมของรูปลูกบาศก์ (Cube) และจะอยู่ที่จุดกึ่งกลางของด้านรูปลูกบาศก์อีก 1 อะตอม ดังแสดงในรูปที่ 3.6(ข) อะตอมจะเข้าไปบรรจุกันแน่นในโครงผลึก FCC เท่าที่จะเป็นไปได้ Atomic packing factor (APF) ในโครงสร้างนี้จะมีค่า 0.74 เมื่อเทียบกับโครงสร้าง BCC ซึ่งไม่บรรจุกันแน่นจะมีค่า 0.68 เท่านั้น

ใน FCC หน่วยเซลล์ดังแสดงในรูปที่ 3.6 (ค) อะตอมจะเข้าไปบรรจุแน่นกว่าคือในหน่วยเซลล์จะมีอะตอม ถ้าไปบรรจุ 4 อะตอมอีก 8 ชั้น ที่มุมรวมกันเป็นอีก 1 อะตอม ($8 \times \frac{1}{8} = 1$) และอีก 6 ชั้นของครึ่งอะตอมที่อยู่ด้านข้างของรูปลูกบาศก์รวมกันเป็นอีก 3 อะตอม ดังนั้นจำนวนอะตอมทั้งหมดจึงเป็น 4 อะตอม ดังรูปที่ 3.7 ดังนั้นความสัมพันธ์ระหว่างความยาวของด้าน a กับรัศมีอะตอม R จึงมีค่าเป็นสมการที่ (3.3)



รูปที่ 3.6 แสดง FCC หน่วยเซลล์ (ก) แสดงตำแหน่งของอะตอมที่อยู่ ที่มุมของหน่วยเซลล์ (ข) แสดงลักษณะของหน่วยเซลล์ที่เป็นทรงกลม (ค) แสดงลักษณะของหน่วยเซลล์ที่แยกออกมา



รูปที่ 3.7 แสดงหน่วยเซลล์ของ FCC ที่แสดงค่าคงที่ของแลตทิซและความสัมพันธ์ระหว่างค่าคงที่แลตทิซกับรัศมีอะตอม (R), $\sqrt{2}a = 4R$

$$a\sqrt{2} = 4R \quad \text{หรือ} \quad a = \frac{4R}{\sqrt{2}}$$

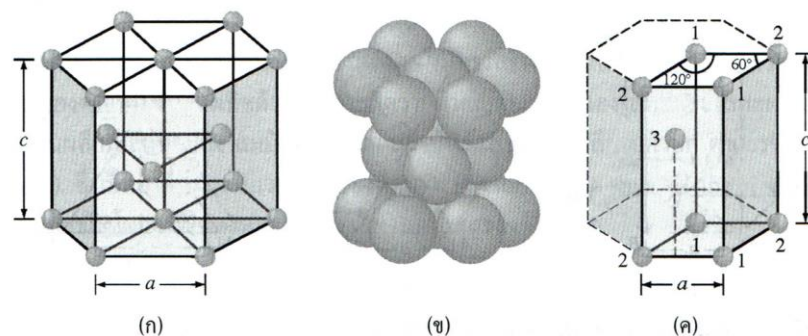
APF ของโครงสร้างผลึก FCC มีค่า 0.74 ซึ่งมากกว่า APF ของ BCC ซึ่งมีค่า 0.68 โลหะอีกหลายชนิด เช่น อะลูมิเนียม ทองแดง ตะกั่ว นิกเกิล และเหล็กที่ทำให้อุณหภูมิสูงขึ้น (จาก 912 ถึง 1394°C) จะมีโครงสร้างผลึกเป็น FCC ดังแสดงในตารางที่ 3.3

3.3.3 โครงสร้างผลึกแบบเฮกซะโกนัลโครส-แพค (HCP)

โครงสร้างผลึกของโลหะที่พบมากอีกชนิดหนึ่งเป็นชนิดที่สาม คือ เฮกซะโกนัลโครส-แพค(HCP) ดังแสดงในรูปที่ 3.8(ก) และ (ข) โลหะเวลาแข็งตัวเป็นผลึกแบบเฮกซะโกนัลธรรมดา ดังแสดงในรูปที่ 3.2 เพราะค่า APF จะต่ำเกินไป อะตอมสามารถรักษาให้มีพลังงานต่ำและเสถียรกว่าโดยการเกิดโครงสร้างเป็น HCP ดังแสดงในรูปที่ 3.8(ข) APF ของ HCP จะมีค่า 0.74 เหมือนกับโครงสร้างผลึกของ FCC ผลึกทั้งสองชนิดนี้อะตอมจะบรรจุกันแน่นเท่าที่จะบรรจุได้และแต่ละอะตอมจะถูกห้อมล้อมด้วยอะตอมอื่นอีก 12 อะตอม โครงสร้างผลึกนี้จึงมีค่าจำนวนโคออร์ดิเนชันเป็น 12 (Co-ordination number of 12) ความแตกต่างในการบรรจุของอะตอมของโครงสร้างผลึก FCC และ HCP จะได้อีกครั้งในหัวข้อที่ 3.8 ในหน่วยเซลล์ของ HCP จะมีจำนวนอะตอม 6 อะตอม คือ ตรงกลาง 3 อะตอม + ตรงมุม ($\frac{1}{6} \times 6 \times 2$ อะตอม) + ด้านบนและด้านล่าง ($\frac{1}{2} \times 2$ อะตอม) รวมเป็น 3+2+1 อะตอม ค่า c/a ratio มีค่าเท่ากับ 1.633 (ดูตารางที่ 3.4)

หน่วยเซลล์ของ HCP ที่แยกออกมาเดี่ยวๆเรียกว่า เซลล์ดั้งเดิม (primitive cell) ดังรูป 3.8 (ค) อะตอมที่อยู่ตำแหน่ง “1” ในรูปที่ 3.8 (ค) จะมีเพียง $\frac{1}{6}$ ของอะตอมในหน่วยเซลล์ อะตอมที่อยู่ตำแหน่ง “2” จะมีเพียง $\frac{1}{2} \times 2$ ของอะตอมในหน่วยเซลล์ ดังนั้นอะตอมที่อยู่มุมทั้ง 8 ของหน่วยเซลล์รวมกันแล้วจะมีค่าเพียง 1 อะตอม ($4(\frac{1}{6}) + 4(\frac{1}{12}) = 1$) อะตอมที่อยู่ตำแหน่งที่ “3” ซึ่งอยู่ตรงกลางของหน่วยเซลล์ แต่ถ้าเราต่อเซลล์ออกไป จำนวนอะตอมที่อยู่ภายใน *HCP หน่วยเซลล์จะมีค่าเท่ากับ 2 (1 อยู่ที่ยุ่ต่าง ๆ และ 1 อะตอมอยู่ตรงกลาง)

[*ในตำราบางเล่มหน่วยเซลล์ของ HCP แสดงในรูป 3.8(ก) ซึ่งเรียกว่าเซลล์ใหญ่กว่า (Larger cell) ในกรณีนี้จะพบว่าหนึ่งหน่วยเซลล์จะมี 6 อะตอมเพื่อความสะดวกและง่าย หน่วยเซลล์จริง ๆ แสดงในรูป 3.8 (ค) ด้วยเส้นทึบ เมื่อกล่าวถึงเรื่องทิศทางและระนาบของผลึกจะใช้ผลึกแบบ larger cell]



รูปที่ 3.8 แสดงโครงสร้างผลึก HCP (ก) เป็นแผนผังของโครงสร้างผลึก (ข) แสดงโครงสร้างที่เป็น hard sphere ของหน่วยเซลล์ (ค) เป็นหน่วยเซลล์ที่แยกออกมาเดี่ยว

อัตราส่วนของความสูง C ของผลึก HCP ต่อความกว้างของฐาน a (basal side) เรียกว่าอัตราส่วน c/a (ดังรูป 3.8(ก)) ค่าอัตราส่วนของ c/a สำหรับ ideal HCP crystal ที่บรรจุแน่นจะมีค่า 1.633 จากตารางที่ 3.4 ซึ่งเป็นรายการของธาตุสำคัญๆที่มีโครงสร้างเป็น HCP และค่าของอัตราส่วน c/a ในตารางนี้มีธาตุแคดเมียมและสังกะสีมีอัตราส่วน c/a สูงกว่าอุดมคติ (ideality) แสดงว่าจะตอมที่อยู่ในโครงสร้างนี้ ทำให้ความยาวของด้าน c ยาวกว่าปกติเล็กน้อย ส่วนธาตุแมกนีเซียม โคบอลต์ เซอร์โคเนียม ไทเทเนียมและเบริลเลียมมีค่า c/a น้อยกว่าอุดมคติ ดังนั้นอะตอมของธาตุเหล่านี้จะมีการอัดแน่นมากขึ้นเล็กน้อยตามแกน c (c axis) นั่นคือ ธาตุที่มีโครงสร้างเป็น HCP ตามตารางที่ 3.4 จะมีค่าเปลี่ยนแปลงไปเล็กน้อยจากโครงสร้างในอุดมคติ

ตัวอย่างที่ 3.3

จงคำนวณปริมาตรของ Unit cell ของผลึกสังกะสีจากข้อมูลต่อไปนี้ สังกะสีบริสุทธิ์รูปวางผลึกเป็น HCP ซึ่งมี lattice constants, $a = 0.2665$ nm และ $c = 0.4947$ nm

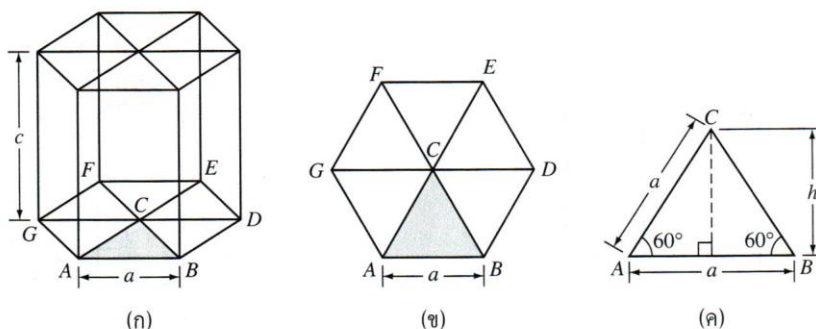
วิธีทำ ปริมาตรของสังกะสี HCP unit cell สามารถหาได้จากพื้นที่ฐานคูณด้วยความสูง (ดังรูปที่ 3.9) พื้นที่ฐานคือ พื้นที่ของ ABDEFG (ดูรูปที่ 3.9 (ก) และ (ข)) พื้นที่ทั้งหมดประกอบด้วยพื้นที่รูปสามเหลี่ยม ABC เท่ากัน 6 อัน (ดูรูปที่ 3.9 (ค))

$$\begin{aligned}\text{พื้นที่รูปสามเหลี่ยม ABC} &= \frac{1}{2} \times \text{ฐาน} \times \text{สูง} \\ &= \frac{1}{2} (a) (a \sin 60^\circ) \\ &= \frac{1}{2} a^2 \sin 60^\circ\end{aligned}$$

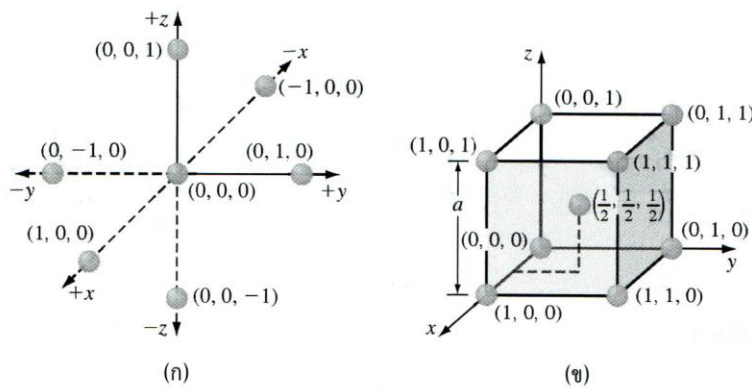
$$\begin{aligned}\therefore \text{จากรูปที่ 3.9 (ข) พื้นที่ทั้งหมดของฐาน HCP} &= 6 \left(\frac{1}{2} a^2 \sin 60^\circ \right) \\ &= 3a^2 \sin 60^\circ\end{aligned}$$

จากรูปที่ 3.9 (ก)

$$\begin{aligned}\therefore \text{ปริมาตรของสังกะสี HCP unit cell} &= (3a^2 \sin 60^\circ) (c) \\ &= (3) (0.2665 \text{ nm})^2 (0.8660)(0.4947) \text{ nm} \\ &= 0.0913 \text{ nm}^3\end{aligned}$$



รูปที่ 3.9 แสดงไดอะแกรมสำหรับคำนวณหาปริมาตรของ HCP unit cell (ก) เป็น HCP unit cell (ข) เป็นฐานของ HCP unit cell (ค) เป็นรูปสามเหลี่ยม ABC ที่แบ่งจากฐานของ unit cell



รูปที่ 3.10 (ก) แสดงแกนที่ตั้งฉากของ x , y และ z สำหรับบอกตำแหน่งของอะตอมในหน่วยเซลล์คิวบิก (ข) แสดงตำแหน่งของอะตอมในหน่วยเซลล์คิวบิก

3.4 ตำแหน่งของอะตอมต่างๆในหน่วยคิวบิก

การบอกตำแหน่งของอะตอมต่างๆในหน่วยเซลล์คิวบิก เราใช้แกนตั้งฉากซึ่งกันและกันเป็น แกน x , y และ z

ในวิชาผลึกวิทยา (Crystallography) แกน x ที่เป็นบวกจะเป็นแกนที่มีทิศทางออกมาจากกระดาษ แกน y ที่เป็นบวกเป็นแกนที่มีทิศทางไปทางขวาของกระดาษ แกน z ที่เป็นบวกเป็นแกนที่มีทิศทางขึ้นไปข้างบน (ดูรูปที่ 3.10) แต่ถ้ามีทิศทางตรงข้ามจากที่กล่าวมาแล้วจะมีทิศทางเป็นลบ

ตำแหน่งของอะตอมในหน่วยเซลล์แสดงด้วยระยะทางตามแกน x , y และ z (ดังรูปที่ 3.10 (ก)) ตัวอย่างตำแหน่งโคออร์ดิเนตสำหรับอะตอมในหน่วยเซลล์ BCC ดังแสดงในรูปที่ 3.10(ข) ตำแหน่งของอะตอมอยู่ที่มุมทั้ง 8 ของหน่วยเซลล์ BCC เป็นดังนี้

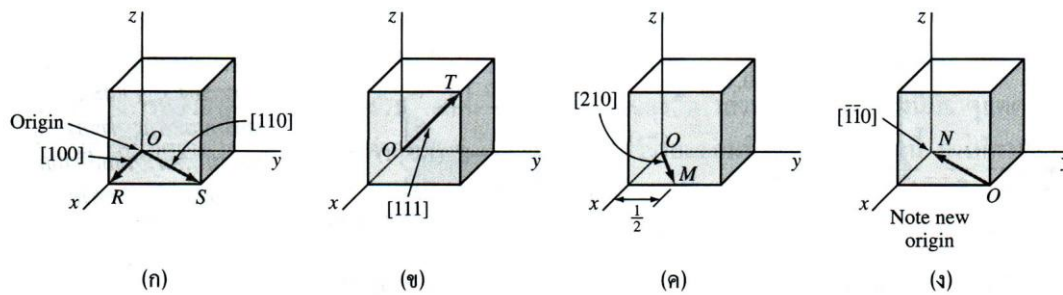
$$(0,0,0) \quad (1,0,0) \quad (0,1,0) \quad (0,0,1) \\ (1,1,1) \quad (1,1,0) \quad (1,0,1) \quad (0,1,1)$$

อะตอมที่อยู่ตรงกลางจะมีตำแหน่งโคออร์ดิเนต $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$ ในบางครั้งเพื่อความง่ายจะมีอะตอมอยู่เพียง 2 อะตอม ใน BCC ที่มีตำแหน่งเฉพาะคือตำแหน่ง $(0, 0, 0)$ และ $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$ ส่วนตำแหน่งที่เหลืออื่นๆก็คงจะกำหนดได้ในทำนองเดียวกัน ตำแหน่งของอะตอมในหน่วยเซลล์ FCC ก็สามารรถกำหนดได้เช่นเดียวกัน

3.5 ทิศทางในหน่วยเซลล์คิวบิก

เราจะพบเสมอว่าการบอกตำแหน่งของอะตอมในโครงสร้างผลึก แล้วบางครั้งยังมีความจำเป็นที่จะต้องบอกทิศทางของตำแหน่งในแลตทิซด้วย เพราะมีความสำคัญต่อสมบัติของโลหะและโลหะผสม ถ้าการจัดตัวของอะตอมในผลึกเปลี่ยนแปลง สมบัติจะเปลี่ยนแปลงไปด้วย สำหรับผลึกรูปคิวบิก ค่าดัชนีทิศทาง (direction indices) ซึ่งเป็นองค์ประกอบเวกเตอร์ของทิศทาง (vector components of the direction) ซึ่งได้จากการติดตามแกนของโคออร์ดิเนตแต่ละแกน แล้วทำให้เป็นเลขลงตัวน้อยๆ

ในหน่วยเซลล์คิวบิกการเขียนไดอะแกรม เพื่อแสดงเวกเตอร์บอกทิศทาง ให้เริ่มต้นจากจุดเริ่มต้น (Origin) ซึ่งตามปกติจะอยู่ที่มุมของเซลล์คิวบิก จนกระทั่งให้ผ่านด้าน (ดูรูปที่ 3.11) ตำแหน่งโคออร์ดิเนตของหน่วยเซลล์ที่เวกเตอร์ผ่านนั้น ทำให้เป็นตัวเลขที่ลงตัวน้อยๆจะได้ค่าดัชนีทิศทาง (direction indices) ให้เขียนดัชนีทิศทางลงในวงเล็บ เช่น $[100]$ โดยไม่มีเครื่องหมายคอมมา (,)



รูปที่ 3.11 แสดงทิศทางในหน่วยเซลล์คิวบิก

ตัวอย่างเช่น ตำแหน่งโคออร์ดิเนตของเวกเตอร์ทิศทาง OR (ตามรูปที่ 3.11(ก)) ซึ่งเวกเตอร์นี้จะออกจากจุดที่โคออร์ดิเนต (1,0,0) ดังนั้นดรรชนีทิศทางของเวกเตอร์ทิศทาง OR เขียนได้เป็น [100] ตำแหน่งโคออร์ดิเนตของเวกเตอร์ทิศทาง OS (ดูรูปที่ 3.11(ก)) คือ (1,1,0) ดังนั้นดรรชนีทิศทาง OS คือ [110] ในทำนองเดียวกันเวกเตอร์ทิศทาง OT (รูปที่ 3.11(ข)) คือ (1,1,1) และดรรชนีทิศทาง OT คือ [111]

ตำแหน่งโคออร์ดิเนตของเวกเตอร์ทิศทาง OM คือ $(1, \frac{1}{2}, 0)$ (ดูรูปที่ 3.11(ค)) แต่เวกเตอร์ทิศทางต้องเป็นเลขจำนวนเต็มจึงต้องเอา 2 เข้าไปคูณดรรชนีทิศทาง OM จึงกลายเป็น $2(1, \frac{1}{2}, 0) = [210]$ ตำแหน่งโคออร์ดิเนตของเวกเตอร์ทิศทาง ON (รูปที่ 3.11(ง)) คือ $(-1, -1, 0)$ เมื่อเขียนดรรชนีทิศทางให้เอาเครื่องหมายลบ (-) ไปใส่ไว้ข้างบนของเลขดรรชนีทิศทาง เป็น $[\bar{1}\bar{1}0]$ สิ่งที่ต้องควรระวัง คือ การเขียนทิศทาง ON ให้อยู่ในรูปลูกบาศก์ต้องมีการเปลี่ยนจุดเริ่มต้นเสียใหม่ เพื่อให้เขียนเวกเตอร์ทิศทางได้ (ดูรูปที่ 3.11(ง)) เขียนเวกเตอร์ทิศทางให้ดูตัวอย่างเพิ่มเติมที่ตัวอย่าง 3.4

ตัวอักษร u, v, w จะใช้เขียนแทนดรรชนีทิศทางของ x, y และ z เป็น $[uvw]$ สิ่งที่ต้องทราบอีกอย่างหนึ่งก็คือเวกเตอร์ทิศทางที่ขนานกันและไปในทิศทางเดียวกัน จะมีค่าดรรชนีทิศทางเหมือนกัน เราเรียกทิศทางเหล่านั้นว่าเป็น Crystallographic equivalent และให้เขียนเป็น $\langle \rangle$ เช่น

$$[100], [010], [001], [0\bar{1}0], [00\bar{1}], [\bar{1}00] \equiv \langle 100 \rangle$$

ซึ่งเป็นทิศทางที่ไปยังมุมของลูกบาศก์ (Cubic edge direction) equivalent direction เรียกว่า indices of family หรือ form หรือทิศทางที่อยู่ในฟอร์ม $\langle 110 \rangle$

$$[110], [101], [011], [1\bar{1}0], [10\bar{1}], [01\bar{1}], [\bar{1}\bar{1}0], [\bar{1}0\bar{1}], [0\bar{1}\bar{1}], [\bar{1}10], [0\bar{1}1]$$

ถ้าเป็น Cubic body diagonal จะเป็น $\langle 111 \rangle$ และ Cubic face diagonal เป็น $\langle 110 \rangle$

สรุป การหาทิศทางในหน่วยเซลล์คิวบิก สามารถทำได้ดังนี้

การหาดรรชนีทิศทางจากทิศทางที่กำหนดให้

1. ให้ใช้ระบบโคออร์ดิเนตหาโคออร์ดิเนตของ 2 จุด ที่อยู่ในทิศทางที่กำหนด
2. ให้ใช้โคออร์ดิเนตของหัวลูกศรลบด้วยโคออร์ดิเนตของหางลูกศรจะได้ค่า lattice parameters
3. ทำให้ตัวเลขที่ได้จากผลลบเป็นตัวเลขน้อยๆ
4. เขียนตัวเลขนั้นไว้ในวงเล็บ [] โดยไม่มีเครื่องหมายจุลภาค (,) ถ้าตัวเลขที่ได้ติดลบ ให้เขียนเส้นเล็กๆไว้เหนือตัวเลขนั้น จะได้ดรรชนีทิศทาง

ตัวอย่างที่ 3.4

จงเขียนเวกเตอร์ทิศทางในหน่วยเซลล์คิวบิก ต่อไปนี้

(ก) $[100]$ และ $[110]$

(ข) $[112]$

(ค) $[\bar{1}10]$

(ง) $[\bar{3}2\bar{1}]$

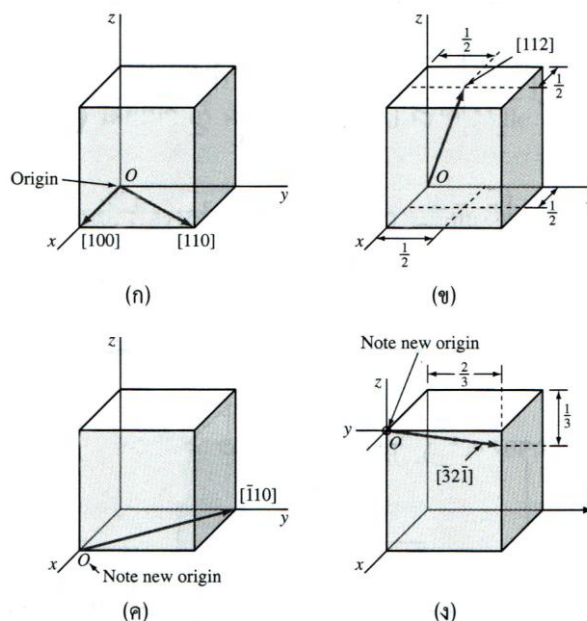
วิธีทำ

(ก) หาดำแหน่งโคออร์ดิเนตของทิศทาง $[100]$ คือ $(1,0,0)$ แล้วเขียนลูกศรบอกทิศทางจากจุด origin $(0,0,0)$ ไปยังตำแหน่ง $(1,0,0)$ ดังรูป 3.12 (ก) หาดำแหน่งโคออร์ดิเนตของทิศทาง $[110]$ คือ $(1,1,0)$ แล้วเขียนลูกศรบอกทิศทางจากจุด origin $(0,0,0)$ ไปยังตำแหน่ง $(1,1,0)$ จะได้เวกเตอร์ทิศทาง $(1,1,0)$

(ข) หาดำแหน่งโคออร์ดิเนตของทิศทาง $[112]$ ให้หารดรรชนีทิศทางก่อนด้วย 2 เพราะตำแหน่งโคออร์ดิเนตจะเกิน 1 ไม่ได้ คือต้องอยู่ใน cubic cell ดังนั้นตำแหน่งโคออร์ดิเนตจะเป็น $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 1)$ ให้เขียนเวกเตอร์ทิศทางจากจุด origin ไปยังตำแหน่ง โคออร์ดิเนต $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 1)$ ดังรูป 3.12 (ข)

(ค) หาดำแหน่งโคออร์ดิเนตของทิศทาง $[\bar{1}10]$ ได้เป็น $(-1, 1, 0)$ เมื่อมีเครื่องหมายลบ ดังนั้นจุด origin $(0,0,0)$ ต้องย้ายใหม่ให้มาอยู่มุมล่างด้านซ้ายมือของ cubic cell เพื่อตำแหน่งของ x เป็น -1 จะเขียนได้ดังรูป 3.12 (ค)

(ง) หาดำแหน่งโคออร์ดิเนตของทิศทาง $[\bar{3}2\bar{1}]$ ได้โดยหารดรรชนีทิศทางด้วยค่าที่มากที่สุดคือ 3 เสียก่อนเพื่อให้อยู่ใน cubic cell จะได้โคออร์ดิเนตเป็น $(-1, \frac{2}{3}, -\frac{1}{3})$ ดังนั้นจะต้องย้ายจุด origin ใหม่ให้ไปอยู่มุมซ้ายด้านบนเพื่อให้เขียนค่าโคออร์ดิเนตของตำแหน่ง $x = -1$ และ $z = -\frac{1}{3}$ ได้ดังรูปที่ 3.12 (ง)



รูปที่ 3.12 แสดงเวกเตอร์ทิศทางในหน่วยเซลล์คิวบิก

ตัวอย่างที่ 3.5

จงหาค่าดัชนีทิศทางของทิศทางในรูปลูกบาศก์ที่แสดงอยู่ในรูปที่ EP 3.5 (ก)

วิธีทำ

วิธีที่ 1 หาจุด Origin ใหม่โดยการเลื่อนลูกศรให้จุดเริ่มต้นไปอยู่ที่มุมและปลายลูกศรจะต้องไม่ออกนอกรูปลูกบาศก์โดยให้ถือว่า ทิศทางที่ขนานกันจะมีดัชนีทิศทางเหมือนกัน เมื่อได้จุด origin แล้ว หาโคออร์ดิเนตของเวกเตอร์ทิศทางใหม่ นั่นคือจะได้ $x = -1, y = 1, z = -\frac{1}{6}$ ดังรูป EP 3.5 (ข) แล้วทำให้เป็นเลขจำนวน

เต็มโดยคูณด้วย 6 จากโคออร์ดิเนต $(-1, 1, -\frac{1}{6})$ จะได้ดัชนีทิศทางเป็น $[\bar{6} 6 \bar{1}]$

วิธีที่ 2 เป็นวิธีหาดัชนีทิศทางง่ายๆ คือ

1. หาดำแหน่งโคออร์ดิเนตของจุดเริ่มต้นและปลายลูกศรให้ได้เสียก่อน ซึ่งจะได้เวกเตอร์ทิศทางระหว่าง

โคออร์ดิเนต $(0, 1, \frac{1}{3})$ กับ $(1, 0, \frac{1}{2})$

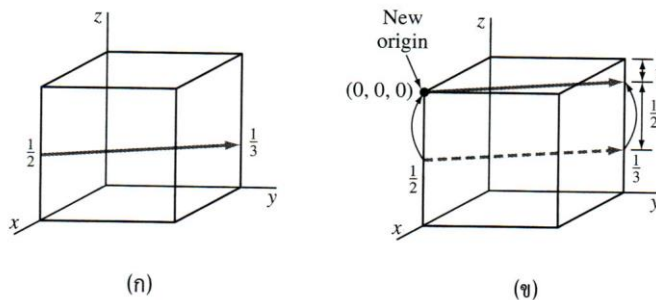
2. ให้เอาโคออร์ดิเนตของหัวลูกศรลบด้วยโคออร์ดิเนตของหางลูกศรคือ

$$(0, 1, \frac{1}{3}) - (1, 0, \frac{1}{2}) = (-1, 1, -\frac{1}{6})$$

3. ทำให้เป็นเลขจำนวนเต็มโดยคูณด้วย 6

$$6(-1, 1, -\frac{1}{6}) = -6, 6, -1$$

4. ดัชนีทิศทางจะได้เป็น $[\bar{6} 6 \bar{1}]$



รูป EP 3.5

ตัวอย่างที่ 3.6

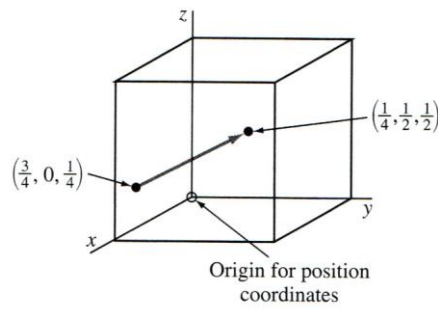
จงหา Direction indices ของ cubic direction ระหว่าง coordinates $(\frac{3}{4}, 0, \frac{1}{4})$ กับ $(\frac{1}{4}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$ ดังรูป EP 3.6

วิธีทำ

1. เมื่อทราบ Coordinates แล้ว นำมาลบกันคือ $(\frac{1}{4}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}) - (\frac{3}{4}, 0, \frac{1}{4}) = (-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{4})$

2. ทำให้เป็นจำนวนเต็ม โดยคูณด้วย 4 $4(-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{4}) = -2, 2, 1$

3. direction indices เป็น $[2 \bar{2} 1]$



รูป EP 3.6

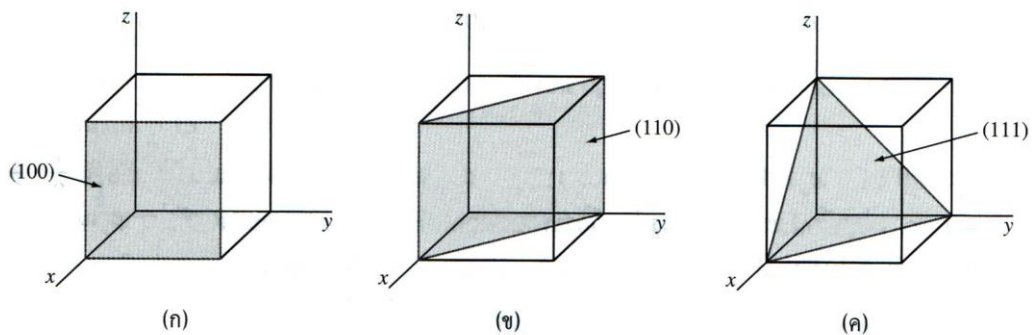
3.6 ดรรชนีมิลเลอร์ของระนาบผลึกในหน่วยเซลล์คิวบิก

ในบางครั้งเรามีความจำเป็นที่จะต้องกล่าวถึงระนาบแลตทิซ (lattice planes) ที่เฉพาะของอะตอมในผลึกหรือบางครั้งเรามีความสนใจที่อยากทราบการจัดระนาบหรือกลุ่มของระนาบในผลึกอย่างหนึ่ง ทำให้ต้องรู้ระนาบของผลึก (Crystal plane) ของโครงสร้างผลึก ซึ่งกำหนดให้เป็นค่าดรรชนีมิลเลอร์ ค่าดรรชนีมิลเลอร์ของระนาบของผลึกนี้ หมายถึงเศษส่วนกลับ (reciprocal) ของจุดที่ระนาบไปตัดแกน x, y และ z ใน cubic unit cell

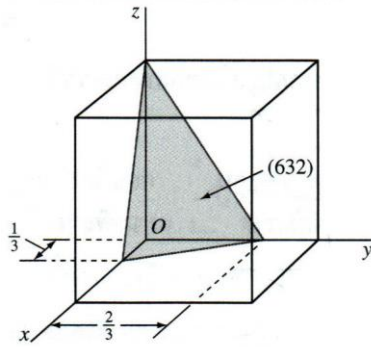
วิธีหาดรรชนีมิลเลอร์ (Miller indices)

1. เลือกระนาบที่ไม่ผ่านจุด origin (0,0,0)
2. หาจุดที่ระนาบตัดแกน x, y, z จุดตัดอาจเป็นเศษส่วนได้
3. ทำเป็นเศษส่วนกลับ โดยเอาไปหาร 1 (reciprocals)
4. ทำให้ผลหารเป็นจำนวนเต็มทีลงตัวน้อยๆ
5. ให้เขียนค่าที่ได้ไว้ใน () โดยไม่มีเครื่องหมายจุลภาค (,) จะได้ Miller indices ซึ่งเป็นค่าเดียวกับค่า (h k l)

รูปที่ 3.13 แสดงถึงระนาบของโครงสร้างผลึกคิวบิกที่มีความสำคัญที่สุด 3 ระนาบ เริ่มต้นให้พิจารณาระบบที่มีสี่เหลี่ยม ตามรูป 3.13 (ก) ซึ่งระนาบนี้จะตัดแกน x, y และ z ที่ 1, ∞, ∞ ตามลำดับ เมื่อทำให้



รูปที่ 3.13 แสดงดรรชนีมิลเลอร์ของระนาบของผลึกคิวบิก



รูปที่ 3.14 แสดงระนาบของผลึกคิวบิก (632) ซึ่งมีจุดตัดแกนเป็นเศษส่วน

เป็นเศษส่วนกลับ (Reciprocals) จะได้ผลลัพธ์เป็น 1,0,0 นั่นคือระนาบนี้มีค่าดรรชนีมิลเลอร์เป็น (100)ให้อ่านว่าระนาบหนึ่ง-ศูนย์-ศูนย์ สำหรับระนาบที่สอง รูปที่ 3.11 (ข) ระนาบจะตัดแกน x, y และ z ที่ 1,1 และ ∞ เมื่อทำให้เป็นเศษส่วนกลับจะได้ 1,1,0 ค่าดรรชนีมิลเลอร์ของระนาบนี้เป็น (110) และระนาบที่ 3 ตามรูป 3.11(ค) ระนาบจะตัดแกน x, y และ z ที่ 1, 1 และ 1 ระนาบนี้จึงมีค่าดรรชนีมิลเลอร์เป็น (111)

ถ้าพิจารณาระนาบของผลึกคิวบิกตามรูปที่ 3.14 จะเห็นว่าระนาบตัดแกน x, y และ z ที่ $\frac{1}{3}$, $\frac{2}{3}$ และ 1 ตามลำดับ

เมื่อทำเป็นเศษส่วนกลับโดยเอาไปหาร 1 จะได้จุดตัดเป็น 3, $\frac{3}{2}$ และ 1 แต่ค่าดรรชนีมิลเลอร์ต้องเป็นเลขจำนวนเต็ม จึงต้องคูณด้วย 2 ทำให้ค่าดรรชนีมิลเลอร์เป็น (632)

ถ้าระนาบของผลึกที่พิจารณานั้นผ่านจุดเริ่มต้น (origin) ดังนั้นจะมีจุดตัดอันหนึ่งหรือหลายจุดตัดเป็นศูนย์ได้ ระนาบนั้นจะต้องย้ายไปที่ยังตำแหน่งเป็นที่สมมูล (equivalent) กันในหน่วยเซลล์เดียวกันและระนาบยังจะต้องขนานกันกับระนาบเดิม ระนาบที่มีระยะห่างกันเท่ากันและขนานกัน จะมีดรรชนีมิลเลอร์เท่ากัน ถ้าระนาบที่ equivalent กันของระบบผลึกหนึ่งเราเรียกว่า planes of family หรือ form ดรรชนีของระนาบหนึ่งของ family ให้เขียนเป็น {hkl} เพื่อแสดงดรรชนีของ family ที่ระนาบสมมาตรกัน (symmetrical planes) เช่น ดรรชนีมิลเลอร์ของ cubic surface planes (100), (010) และ (001) จะเขียนเป็น family planes หรือ form ได้เป็น {100}

ตัวอย่างที่ 3.7

จงเขียนระนาบของผลึกในหน่วยเซลล์คิวบิก

ก. (101) ข. ($1\bar{1}0$) ค. (221) ง. เขียนระนาบ (110) ที่ผ่านอะตอมใน BCC และบอกโคออร์ดิเนตของอะตอมที่ระนาบตัดมาด้วย

วิธีทำ

ก. จาก Miller indices (101) หาจุดตัดแกน x, y, z ของระนาบโดยทำเศษส่วนกลับจะได้เป็น

$$\frac{1}{1}, \frac{1}{0}, \frac{1}{1} = 1, \infty, 1 \text{ จะเขียนระนาบได้เป็นรูป a คือระนาบตัดแกน } x = 1, z = 1 \text{ และขนาน}$$

กับแกน y หรือ ตัดแกน y ที่ ∞ (ดังรูป a)

ข. เศษส่วนกลับของ Miller indices ($1\bar{1}0$) จะได้เป็น $\frac{1}{1}, -\frac{1}{1}, \frac{1}{0} = 1, -1, \infty$

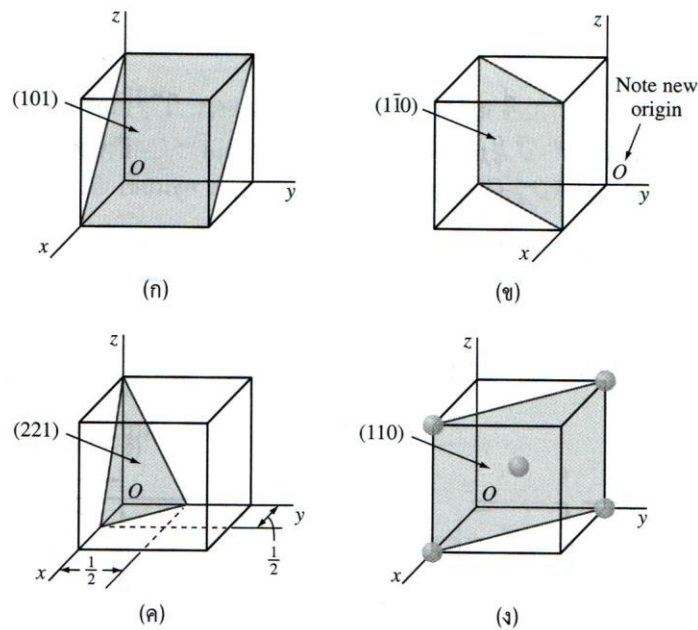
นั่นคือระนาบนี้ตัดแกน $x = 1$, $y = -1$ ขนานกับแกน z ดังรูป (ข) $y = -1$ จึงต้องมีการเปลี่ยนจุด origin (ดังรูป ข) ไปทางขวาด้านหลังของผลึก

ค. เศษส่วนกลับของ Miller indices (221) จะได้เป็น $\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{1} = \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 1$

นั่นคือระนาบนี้ตัดแกน $x = \frac{1}{2}$ $y = \frac{1}{2}$ $z = 1$ จะได้ดังรูป (ค)

ง. หาจุดตัดของระนาบ (110) โดยทำเศษส่วนกลับได้เป็น $\frac{1}{1}, \frac{1}{1}, \frac{1}{0} = 1, 1, \infty$

นั่นคือระนาบนี้ตัดแกน $x = 1$, $y = 1$ ขนานกับแกน z ตำแหน่งของอะตอมที่ระนาบตัดคือจุดดำซึ่งมี coordinates (1,0,0), (0,1,0), (1,0,1), (0,1,1) และ $\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$ (ดังรูป ง)



รูป EP 3.7 แสดงถึงระนาบต่างๆ

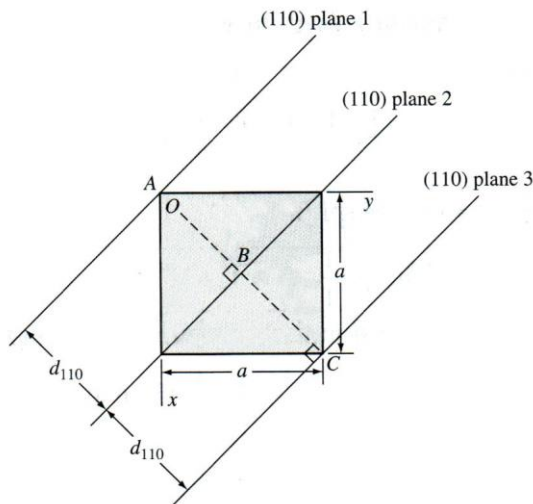
ความสัมพันธ์ที่สำคัญของระบบผลึกคิวบิกเท่านั้น คือดัชนีทิศทางของทิศทางที่ตั้งฉากกับระนาบของผลึกที่มีค่าดัชนีมิลเลอร์เหมือนกันกับระนาบ ตัวอย่างเช่น ทิศทาง [100] จะตั้งฉากกับระนาบของผลึก (100)

ในโครงสร้างที่เป็น Cubic system ระหว่างระนาบ (interlunar spacing) ที่อยู่ใกล้กันและขนานกันจะมีค่า Miller indices เหมือนกัน และกำหนดให้เป็น d_{hkl} เมื่อ $h k l$ เป็น Miller indices ของระนาบดังแสดงในรูปที่ 3.15

ตัวอย่างเช่น ระยะห่างระหว่าง (110) ระนาบ 1 และระนาบ 2 d_{110} ตามรูป 3.15 คือระยะ AB เช่นเดียวกัน ระยะห่างระหว่าง (110) ระนาบ 2 และระนาบ 3 คือ d_{110} หรือระยะ BC ในรูป

จากเลขคณิตต่างๆสามารถแสดงให้เห็นว่าโครงสร้างผลึกคิวบิก

$$d_{hkl} = \frac{a}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}} \quad (3.4)$$

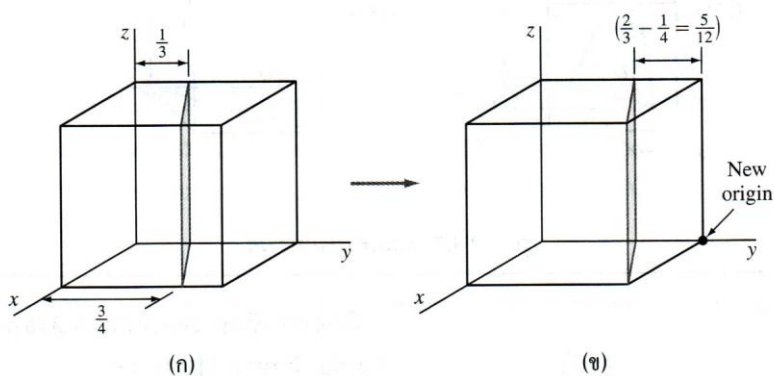


รูปที่ 3.15 แสดง Top view ของ cubic unit cell ที่มีระนาบ (110) 3 ระนาบขนานกัน ระยะระหว่างระนาบจึงเขียนเป็น d_{110} เหมือนกัน

เมื่อ d_{hkl} = ระยะระหว่างระนาบที่อยู่ติดกันและขนานกัน มีค่าดรรชนีมิลเลอร์เป็น h , k และ l
 a = เป็นค่าคงที่แลตทิซ (lattice constant) (ความกว้างจากขอบถึงขอบของรูปลูกบาศก์)
 h, k, l = ดรรชนีมิลเลอร์ของระนาบคิวบิก (cubic planes)

ตัวอย่างที่ 3.8

จงหาค่าดรรชนีมิลเลอร์ของระนาบในผลึกรูปลูกบาศก์ที่รูป EP 3.8 ก



รูปที่ EP 3.8

วิธีทำ ย้ายระนาบที่ขนานกับแกน z ไปทางขวาตามแกน y อีก $1/4$ ดังรูป 3.8 ข จนระนาบนี้ ตัดแกน $x = 1$ และมุมขวาข้างล่างเป็นจุด origin ใหม่ แล้วหาจุดตัดของระนาบกับแกน y และ z จะได้ดังนี้คือระนาบจะตัดกับแกน $x = 1$

$$\begin{aligned} y &= -\left(\frac{2}{3} - \frac{1}{4}\right) \\ &= -\frac{5}{12} \\ z &= \infty \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\therefore \text{เศษส่วนกลับ} &= \frac{1}{1}, \frac{1}{-\frac{5}{12}}, \frac{1}{\infty} \\ &= 1, -\frac{12}{5}, 0\end{aligned}$$

คูณด้วย 5 ทำให้เป็นจำนวนเต็ม = 5, -12, 0

\therefore Miller indices ของระนาบเป็น $(5 \overline{12} 0)$

ตัวอย่างที่ 3.9

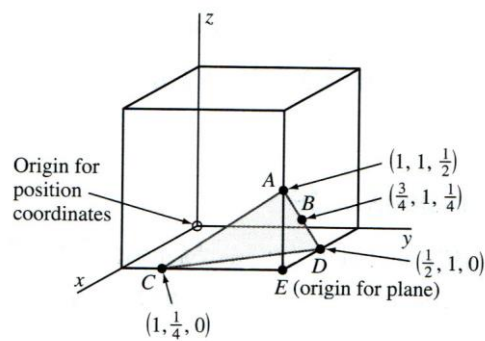
จงหาค่า Miller indices ของ cubic crystal plane ที่จุดตัดมี $(1, \frac{1}{4}, 0)$, $(1, 1, \frac{1}{2})$, $(\frac{3}{4}, 1, \frac{1}{4})$ และ coordinate ทุกจุดที่ตัดแกน

วิธีทำ เริ่มต้นหาดำแหน่งของ coordinate ต่าง ๆ จะได้ดังรูป EP 3.9 ที่จุด A, B และ C ลากเส้นเชื่อมจุด A และ B แล้วต่อไปถึงจุด D เชื่อมจุด A และ C จะได้ระนาบ ACD จุด origin ของระนาบนี้สามารถเลือกได้ อาจใช้จุด E ดังนั้นระนาบ ACD จะตัดแกน $x = -\frac{1}{2}$, $y = -\frac{3}{4}$ และ $z = \frac{1}{2}$

$$\therefore \text{เศษส่วนกลับจะได้ } -2, -\frac{4}{3}, 2$$

ทำให้เป็นเลขจำนวนเต็มโดยคูณด้วย 3 จะได้ -6, -4, 6

\therefore Miller indices ของระนาบคือ $(\overline{6} \overline{4} 6)$



รูปที่ EP 3.9

ตัวอย่างที่ 3.10

ทองแดงมีโครงสร้างของผลึกเป็น FCC unit cell มีค่า lattice constant 0.361 nm จงหาระยะห่างระหว่างระนาบ d_{220} (interplanar spacing)

วิธีทำ จากสูตร

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

$$d_{220} = \frac{0.361 \text{ nm}}{\sqrt{(2)^2 + (2)^2 + (2)^2}} = 0.128 \text{ nm}$$

3.7 ระบบและทิศทางในโครงสร้างผลึกเฮกซะโกนัล

3.7.1 ดรรชนีของระนาบผลึกในหน่วยเซลล์ HCP

ระนาบของผลึกใน HCP หน่วยเซลล์นั้นกำหนดให้ใช้ 4 ดรรชนี แทนที่จะเป็น 3 ดรรชนี และเรียกว่า ดรรชนีมิลเลอร์-บราว (Miller-Bravais indices) และแสดงด้วยตัวอักษร h k i และ l อยู่ในวงเล็บเป็น $(h \ k \ i \ l)$ ซึ่งเป็น coordinates ของ 4 แกน ดังแสดงในรูปที่ 3.16 ใน HCP หน่วยเซลล์จะมี 3 basal axes คือ a_1 , a_2 และ a_3 ซึ่งจะทำมุม 120° ซึ่งกันและกันสำหรับแกนที่ 4 คือ แกน c ซึ่งเป็นแกนที่ตั้งฉากอยู่ตรงกลางของหน่วยเซลล์ ระยะห่างระหว่างอะตอมที่วัดตามแกน a_1 , a_2 และ a_3 มีค่าเป็น a หน่วย แต่ถ้าวัดตามแนวแกน c จะมีความสูงเป็น c ของหน่วยเซลล์ ค่าเศษส่วนกลับของจุดตัดเหล่านี้จะเป็น h k i และ l ซึ่งเป็นค่าดรรชนี

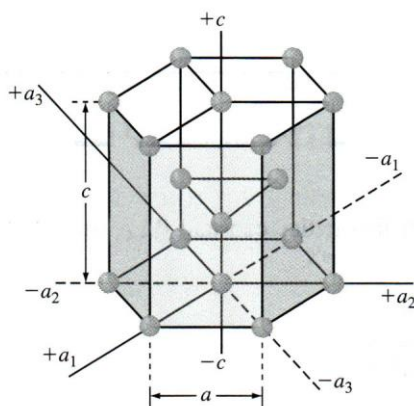
ระนาบเบซัล (Basal planes) เป็นระนาบด้านบนและด้านล่างที่สำคัญมากของ HCP unit cell ดังแสดงในรูปที่ 3.17 (ก) basal plane ที่อยู่ด้านบนจะขนานกับแกน a_1 , a_2 และ a_3 ดังนั้นจุดตัด $a_1 = \infty$, $a_2 = \infty$ และ $a_3 = \infty$ และแกน $c = 1$ เมื่อทำเป็นเศษส่วนกลับจะได้ Miller-Bravais indices ของ HCP basal plane นั่นคือ $h = 0$, $k = 0$, $i = 0$ และ $l = 1$ ดังนั้นดรรชนีของ HCP basal plane เป็น (0001)

ระนาบปริซึม (Prism planes) เป็นระนาบที่อยู่ด้านข้างของ unit cell จากการใช่วิธีการอย่างเดียวกัน จุดตัดของ prism plane ด้านหน้า (ABCD) ดังรูปที่ 3.17(ข) จะตัดแกน $a_1 = +1$, $a_2 = \infty$ และ $a_3 = -1$ และ $c = \infty$ เมื่อทำ reciprocals ของจุดตัดจะได้ $h = 1$, $k = 0$, $i = -1$ และ $l = 0$ plane ABCD มี indices เป็น $(10\bar{1}0)$ ในทำนองเดียวกัน plane ABEF จะมี indices เป็น $(1\bar{1}00)$ และ plane DCGH มี indices เป็น $(01\bar{1}0)$ ดังนั้นผลึก HCP จะมี family of planes เป็น $\{01\bar{1}0\}$ ดังรูปที่ 3.17 (ข)

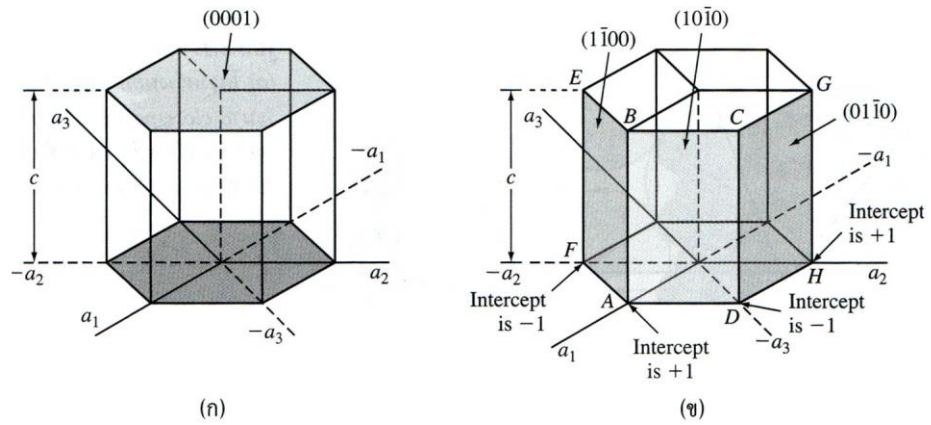
บางครั้งระนาบของ HCP ใช้ดรรชนีเพียง 3 ค่าคือ $(h \ k \ l)$ เพราะ $h + k = -i$ อย่างไรก็ตามโดยทั่วไปจะใช้ดรรชนี 4 ค่าคือ $(h \ k \ i \ l)$

3.7.2 ดรรชนีทิศทางในหน่วยเซลล์ HCP

ทิศทาง (Directions) ใน HCP unit cell จะแสดงได้ด้วยดรรชนี 4 ค่า คือ u v t และ w อยู่ในวงเล็บเป็น $[uvtw]$ u , v และ t indices เป็น lattice vector ของ a_1 , a_2 และ a_3 directions ตามลำดับ

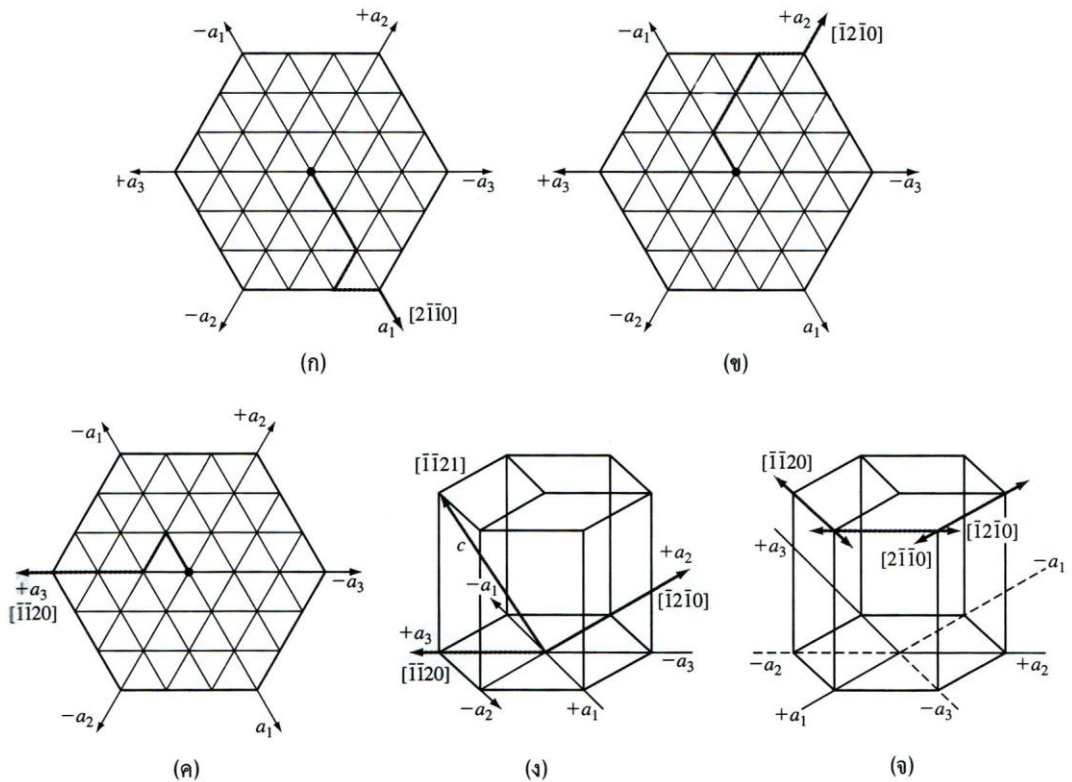


รูปที่ 3.16 แสดงแกนโคออร์ดิเนตทั้ง 4 แกน คือ a_1 , a_2 , a_3 และ c ของโครงสร้าง HCP

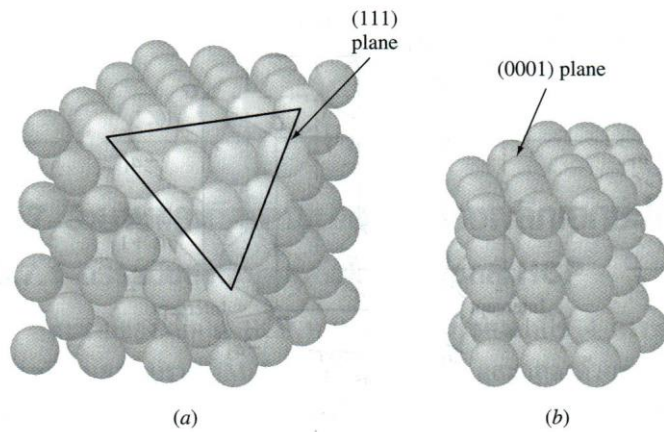


รูปที่ 3.17 แสดง Miller-Bravais indices ของ hexagonal crystal planes (ก) basal planes (ข) prism planes

ดังรูป 3.16 และ w เป็นดรรชนีของ lattice vector ใน c directions เพื่อให้คงสภาพเดิม ทั้งดรรชนีของระนาบ และทิศทางของ HPC ได้ตกลงกันว่าทิศทาง $u + v = -t$



รูปที่ 3.18 แสดงดรรชนีทิศทางมิลเลอร์-บราวน์ ของโครงสร้างผลึกเฮกซะโกนัลที่มีความสำคัญ (ก) ทิศทางตามแกน $+a_1$ บน basal plane (ข) ทิศทางตามแกน $+a_2$ บน basal plane (ค) ทิศทางตามแกน $+a_3$ บน basal plane และ (ง) ทิศทางตามแกน $+a_3$ ร่วมกับแกน c (จ) ทิศทางมิลเลอร์-บราวน์ที่เป็นบวกและลบได้แสดงในโครงสร้างผลึกเฮกซะโกนัลอย่างง่ายอยู่บน basal plane ด้านบน



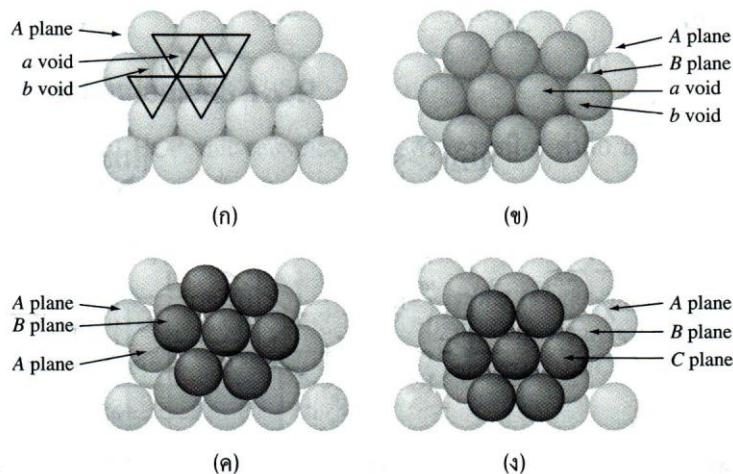
รูปที่ 3.19 แสดงการเปรียบเทียบของ
(ก) โครงสร้างผลึก FCC ที่แสดง
ระนาบ close-packed (111)
(ข) โครงสร้างผลึก HCP ที่แสดง
ระนาบ close-packed (0001)

ให้เราหาตรรกะนี้มิลเลอร์-บราวน์ สำหรับทิศทาง ของ a_1 , a_2 และ a_3 ของหน่วยเซลล์เฮกซะโกนัลซึ่ง แกน basal เป็นบวก (+) ตรรกะนี้ทิศทาง a_1 ดังแสดงในรูปที่ 3.18 (ก) ตรรกะนี้ทิศทาง a_2 ดังแสดงในรูปที่ 3.18 (ข) และตรรกะนี้ทิศทาง a_3 แสดงในรูปที่ 3.18 (ค) ถ้าเราต้องการแสดงทิศทาง c รวมทั้งทิศทาง a_3 ดูได้จากรูปที่ 3.18 (ง) และรูปที่ 3.18 (จ) ได้รวมทิศทางเป็นบวกและลบของ basal plane ด้านบนของ โครงสร้างผลึกเฮกซะโกนัลอย่างง่ายไว้แล้ว

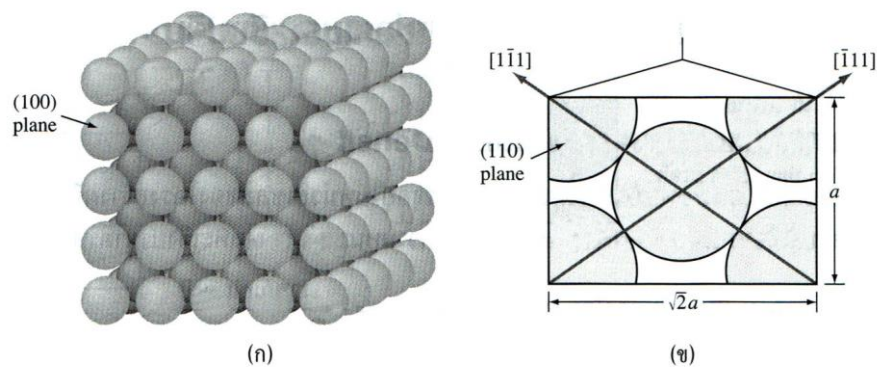
3.8 เปรียบเทียบโครงสร้างของผลึกของ FCC, HCP และ BCC

3.8.1 โครงสร้างผลึกของ FCC และ HCP

จากที่ได้กล่าวมาแล้ว ทั้งโครงสร้างของ HCP และ FCC ต่างก็เป็นโครงสร้างที่บรรจุกันแน่น (closed-packed) ยังถือว่าอะตอมเป็นทรงกลมอยู่แต่เข้าไปชิดกันเท่าที่จะเป็นไปได้ ค่า atomic packing factor



รูปที่ 3.20 การเกิดโครงสร้างผลึก HCP และ FCC จากการซ้อนกันของระนาบอะตอม (ก) ระนาบ A แสดงให้เห็นช่องว่าง a และ b (ข) ระนาบ B ถูกวางอยู่ในช่องว่างของระนาบ A (ค) ระนาบที่สามถูกวางในช่องว่าง b ของระนาบ B ทำให้เกิดระนาบ A ขึ้นมาอีกและเกิดโครงสร้างผลึก HCP (ง) ระนาบที่สามถูกวางในช่องว่าง a ของระนาบ B ทำให้ได้ระนาบ c ใหม่ขึ้นและเกิด โครงสร้างผลึก FCC (ปรับปรุงจาก P.Ander and A.J.Sonnessa, "Principles of chemistry", Macmillan, 1965, p.661)



รูปที่ 3.21 โครงสร้างผลึก BCC แสดงให้เห็น (ก) ระนาบ (100) และ (ข) แสดงภาพตัดขวางของระนาบ (110) ภาพนี้ไม่ใช่โครงสร้างโครส-แพค แต่เป็นทิศทางทแยงมุมของทิศทาง โครส-แพค

ยังคงเป็น 0.74 ดูตารางที่ 3.4 จะเห็นว่าโครงสร้าง HCP อะตอมอาจจะมีการเปลี่ยนแปลงจากทรงกลมไปบ้างตามแกน c เพราะถูกอัด (compressed) ระนาบ (111) ของโครงสร้างผลึก FCC ดังแสดงในรูปที่ 3.19 (ก) จะมีการจัดตัวของอะตอมเหมือนกับระนาบ (0001) ของ HCP ดังรูป 3.19(ข) อย่างไรก็ตามโครงสร้างของผลึก FCC และ HCP ที่เป็น 3 มิติ จะไม่เหมือนกันเพราะมีการซ้อนกันของ atomic planes แตกต่างกัน

ให้พิจารณาที่รูป 3.20(ก) อะตอมที่เข้ามาเรียงตัวกันแน่นเป็นระนาบ A จะเห็นว่ามีช่องว่างระหว่างอะตอมแตกต่างกันเป็น 2 แบบ ช่องว่างที่อยู่ข้างบนของหน้า กำหนดให้เป็นช่องว่าง a และช่องว่างที่อยู่ด้านล่างของหน้า กำหนดให้เป็นช่องว่าง b ระนาบที่สองของอะตอมสามารถอยู่บนช่องว่าง a หรือ b และทำให้เกิดโครงสร้างใน 3 มิติเหมือนกัน เมื่อให้ระนาบ B อยู่บนช่องว่าง a ดังรูปที่ 3.20(ข) ถ้าระนาบที่ 3 ของอะตอมอยู่บนระนาบ B ทำให้เกิดโครงสร้างที่เป็นแบบ close-packed อาจเป็นไปได้อีกอย่างหนึ่งคือ ให้จัดอะตอมของระนาบที่ 3 ลงในช่องว่าง b ของระนาบ B แล้วอะตอมของระนาบที่ 3 จะเรียงตรงกันอยู่ตามระนาบ A และสามารถกำหนดให้เป็นระนาบ A ใหม่ดังรูปที่ 3.20(ค) ถ้าระนาบของอะตอม ต่อมาถูกวางซ้อนให้สลับกันไปในแบบเดียวกัน ดังนั้นโครงสร้างที่เป็นแบบ 3 มิติถูกวางซ้อนกันขึ้นมาตามลำดับแสดงได้เป็น ABABAB..... คือเป็นลักษณะของโครงสร้างผลึก HCP ดังรูปที่ 3.19(ข)

ความเป็นไปได้ที่สองของการเกิดโครงสร้างโครส-แพคอย่างง่าย คือ ให้วางระนาบที่สามลงในช่องว่าง a ของระนาบ B (รูปที่ 3.2 (ง)) ระนาบที่สามนี้กำหนดให้เป็นระนาบ c โดยที่อะตอมของมันไม่อยู่ในแนวเดียวกันเหนือระนาบ B หรือระนาบ A ในโครงสร้างโครส-แพคนี้ ระดับของการวางซ้อนกันจึงกำหนดให้เป็น ABCABCABC..... และเกิดเป็นโครงสร้าง FCC ดังแสดงในรูป 3.19 (ก)

3.8.2 โครงสร้างผลึก BCC (BCC Crystal Structure)

โครงสร้าง BCC ไม่ใช่โครงสร้างแบบโครส-แพค ทำให้ไม่มีระนาบโครส-แพค เหมือนกับระนาบ {111} ในโครงสร้าง FCC และระนาบ {0001} ในโครงสร้าง HCP ระนาบที่มีการบรรจุกันแน่นที่สุดในโครงสร้าง HCP ระนาบที่มีการบรรจุกันแน่นที่สุดในโครงสร้าง BCC คือระนาบของ family {110} ของระนาบ (110) ตามรูปที่ 3.21(ข) อย่างไรก็ตามอะตอมในโครงสร้าง BCC มีทิศทางโครส-แพค ตามเส้นทแยงมุมซึ่งเป็นทิศทาง $\langle 111 \rangle$

3.9 การคำนวณหาความหนาแน่นของหน่วยเซลล์เชิงปริมาตร พื้นที่และเชิงเส้น

3.9.1 ความหนาแน่นเชิงปริมาตร (Volume Density)

โดยถือว่าอะตอมของโลหะเป็นทรงกลมแข็งที่บรรจุอยู่ในหน่วยเซลล์ของโครงสร้างผลึก รัศมีอะตอมของธาตุสามารถหาได้จาก X-ray diffraction analysis ความหนาแน่นของโลหะเชิงปริมาตรหาได้จากสมการ

$$\text{ความหนาแน่นของโลหะเชิงปริมาตร} = \rho_v = \frac{\text{มวล/unit cell}}{\text{ปริมาตร/unit cell}} \quad (3.5)$$

ตัวอย่างที่ 3.11

ทองแดงมีโครงสร้างผลึกเป็น FCC และรัศมีอะตอม 0.1278 nm ถ้าอะตอมเป็นทรงกลมแข็งซึ่งอะตอมจะสัมผัสกันตามแนวเส้นทแยงมุมของ FCC unit cell ดังแสดงในรูปที่ 3.7 จงคำนวณหาความหนาแน่นของทองแดง ทางทฤษฎี ในหน่วยเมกะกรัมต่อคิวบิกเมตร มวลอะตอมของทองแดงเท่ากับ 63.54 กรัม/โมล

วิธีทำ

ใน FCC unit cell

$$a\sqrt{2} = 4R$$

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

a = lattice constant ของ unit cell

R = รัศมีของอะตอมทองแดง

$$\therefore a = \frac{4R}{\sqrt{2}} = \frac{4(0.1278 \text{ nm})}{\sqrt{2}} = 0.361 \text{ nm}$$

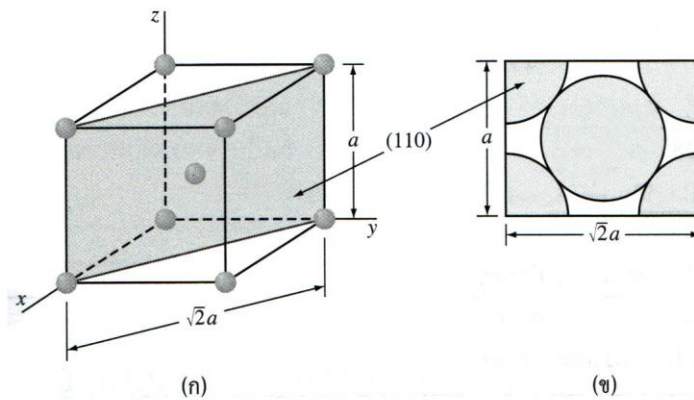
$$\therefore \text{ความหนาแน่นของทองแดง} = \rho_v = \frac{\text{มวล/unit cell}}{\text{ปริมาตร/unit cell}}$$

ใน FCC unit cell จะมีอะตอมอยู่ = 4 อะตอม/ unit cell

$$\begin{aligned} \therefore \text{มวลของ Cu อะตอม, } m &= \frac{(4 \text{ atoms})(63.54 \text{ g/mol})}{6.02 \times 10^{23} \text{ atom/mol}} \left(\frac{10^{-6} \text{ Mg}}{\text{g}} \right) \\ &= 4.22 \times 10^{-28} \text{ Mg (Megagrams)} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \text{ปริมาตรของ unit cell, } V &= a^3 = (0.361 \text{ nm} \times 10^{-28} \text{ m/nm})^3 \\ &= 4.7 \times 10^{-29} \text{ m}^3 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \therefore \text{ความหนาแน่นของทองแดง} &= \rho_v = \frac{m}{V} = \frac{4.22 \times 10^{-28} \text{ Mg}}{4.70 \times 10^{-29} \text{ m}^3} \\ &= 8.98 \text{ Mg/m}^3 \text{ หรือ } 8.98 \text{ g/cm}^3 \end{aligned}$$



รูปที่ 3.22 (ก) แสดงระนาบ (110) ตัดผ่าน atoms ใน BCC unit cell
(ข) แสดงพื้นที่อะตอมที่ระนาบ (110) ตัดใน BCC unit cell

จากตัวอย่างที่ 3.11 ความหนาแน่นของทองแดง 8.98 Mg/m^3 (8.98 g/cm^3) แต่จาก Handbook ซึ่งได้จากการทดลองความหนาแน่นของทองแดงมีค่า 8.96 Mg/m^3 (8.96 g/cm^3) ซึ่งน้อยกว่าจากการคำนวณเล็กน้อย ทั้งนี้เพราะในโครงสร้างอาจจะมีบางอะตอมหายไป คือ เกิด vacancies หรืออาจเกิด defects ขึ้นในโมเลกุลก็ได้ และที่เกี่ยวข้องอีกอย่างหนึ่งก็คือ เกิดจากการที่อะตอมมีลักษณะที่เป็นทรงกลมที่ไม่สมบูรณ์

3.9.2 ความหนาแน่นของอะตอมเชิงพื้นที่หรือ ρ_p (Planar Atomic Density)

ในบางครั้งจะเห็นว่ามันมีความจำเป็นที่จะต้องหาความหนาแน่นของอะตอมในระนาบต่าง ๆ กัน ซึ่งเรียกว่า planar atomic density โดยคำนวณได้จากสูตรนี้

$$\text{Planar atomic density} = \rho_p = \frac{\text{equiv. no. of atoms (ที่ plane ตัด)}}{\text{พื้นที่ที่เลือก}} \quad (3.6)$$

$$\text{หรือ} \quad = \frac{\text{จำนวนอะตอมที่จุดกึ่งกลางถูกผ่านโดยพื้นที่ที่เลือก}}{\text{พื้นที่ที่เลือก}}$$

เพื่อความสะดวก พื้นที่ของระนาบที่ตัดผ่านหน่วยเซลล์ มักจะถูกเลือกใช้ในการคำนวณ ดังรูปที่ 3.22 ในระนาบ (110) ของ BCC unit cell เพื่อที่จะให้พื้นที่อะตอมที่ใช้ในการคำนวณถูกต้อง ระนาบที่ตัดผ่านตรงจุดกึ่งกลางของอะตอม ดังตัวอย่างที่ 3.12 ระนาบ (110) จะตัดผ่านจุดกึ่งกลางของ 5 อะตอม แต่เมื่อคิดเป็นอะตอมจะมีเพียง 2 อะตอมเท่านั้นในการคำนวณ อะตอมที่อยู่มุมจะมีพื้นที่เพียง $1/4$ ของอะตอมเท่านั้น

ตัวอย่างที่ 3.12

จงคำนวณหา planar atomic density ρ_p ที่ระนาบ (110) ตัดผ่าน α iron BCC lattice เป็น atoms/mm^2 โดยให้ lattice constant ของ α iron เป็น 0.287 nm

วิธีทำ หา equivalent number of atoms ที่ถูกตัดด้วย plane (110) โดยคิดเป็นพื้นที่ใน BCC unit cell ดังรูปที่ 3.22 (ข) จะได้ 2 อะตอม คือ

$$1 \text{ อะตอมที่ตรงกลาง} + 4 \times \frac{1}{4} \text{ อะตอมที่มุมทั้งสี่} = 2 \text{ อะตอม}$$

$$\text{พื้นที่ที่ระนาบ (110) ตัดใน unit cell} = a \times a \sqrt{2} = a^2 \sqrt{2}$$

$$\begin{aligned}
 \therefore \text{ Planar atomic density } \rho_p &= \frac{2 \text{ atom}}{a^2 \sqrt{2}} \\
 &= \frac{2 \text{ atom}}{(0.287 \text{ nm})^2 \sqrt{2}} \\
 &= \frac{17.2 \text{ อะตอม}}{\text{nm}^2} \\
 &= \frac{17.2 \text{ อะตอม}}{\text{nm}^2} \times \frac{10^{12} \text{ nm}^2}{\text{mm}^2} \\
 &= 1.72 \times 10^{13} \text{ อะตอม/mm}^2
 \end{aligned}$$

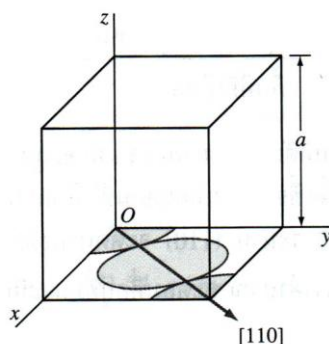
3.9.3 ความหนาแน่นของอะตอมเชิงเส้นหรือ ρ_ℓ (Linear Atomic Density)

ในทำนองเดียวกัน บางครั้งมีความสำคัญที่จะต้องหา atomic densities ในทิศทางต่างๆในโครงสร้างของผลึกค่าที่หาได้นี้เรียกว่า linear atomic density โดยหาได้จากความสัมพันธ์

$$\text{Linear atomic density } (\rho_\ell) = \frac{\text{จำนวน atom diam. ที่ถูกตัดผ่านในทิศทางที่ต้องการ}}{\text{ความยาวของเส้น}} \quad (3.7)$$

ตัวอย่างที่ 3.13

จงคำนวณหา linear atomic density (ρ_ℓ) ตาม direction [110] ใน crystal lattice ของทองแดงบริสุทธิ์ atoms/mm ใน FCC unit cell ทองแดงมี lattice constant 0.361 nm



รูปที่ 3.23 แสดงไดอะแกรมเพื่อการคำนวณหา atomic linear density ตามทิศทาง [110] ใน FCC unit cell

วิธีทำ จากรูปที่ 3.23 จะเห็นได้ว่าจำนวนอะตอมในทิศทาง [110] ซึ่งเป็นเส้นทแยงมุมของด้าน ใน FCC unit cell ที่ผ่านนั้นจะมีอยู่เท่ากับ $\frac{1}{2} + 1 + \frac{1}{2} = 2$ อะตอม ($\frac{1}{2} \text{ diam.} + 1 \text{ diam.} + \frac{1}{2} \text{ diam.} = 2 \text{ diam.}$)

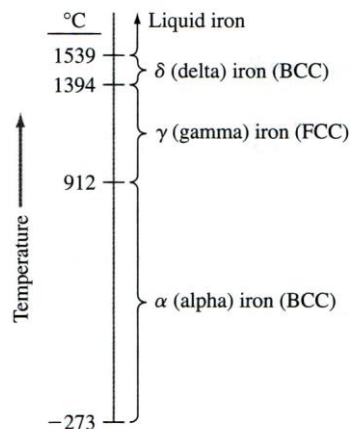
$$\text{ความยาวของเส้นทแยงมุม} = a\sqrt{2}$$

$$\begin{aligned}
 \text{linear atomic density } (\rho_l) &= \frac{2 \text{ atom}}{a\sqrt{2}} \\
 &= \frac{2 \text{ atoms}}{(0.361 \text{ nm})\sqrt{2}} \\
 &= \frac{3.92 \text{ atoms}}{\text{nm}} \\
 &= \frac{3.92 \text{ atoms}}{\text{nm}} \times \frac{10^6 \text{ nm}}{\text{mm}} \\
 &= 3.92 \times 10^6 \text{ atoms/mm}
 \end{aligned}$$

3.10 ภาวะพหุสัณฐานหรือการมีอณูรูป

(Polymorphism or Allotropy)

ธาตุและสารประกอบหลาย ๆ ชนิดสามารถมีรูปร่างผลึกได้มากกว่าหนึ่งรูป โดยมีสภาวะทั้งอุณหภูมิและความดันแตกต่างกันปรากฏการณ์ดังกล่าวนี้เรียกว่า ภาวะพหุสัณฐาน (Polymorphism) หรือการมีอณูรูป (Allotropy) โลหะที่มีความสำคัญทางอุตสาหกรรมหลายชนิด เช่น เหล็ก ไทเทเนียม และโคบอลต์ สามารถเปลี่ยนรูปร่างผลึกได้ เมื่อทำให้อุณหภูมิเพิ่มขึ้นที่ความกดดันของบรรยากาศ ตารางที่ 3.5 แสดงรายชื่อของโลหะบางชนิดที่สามารถเปลี่ยนอณูรูปและโครงสร้างได้ เหล็กมีโครงสร้างผลึกเป็นได้ทั้ง BCC และ FCC ที่



รูปที่ 3.24 แสดงอณูรูปต่างๆ
ของเหล็กในช่วงอุณหภูมิต่างๆที่
ความกดดันบรรยากาศ

ตารางที่ 3.5 แสดงอณูรูปของผลึกต่างๆกันของโลหะบางชนิด

Metal	Crystal structure at room temperature	At other temperature
Ca	FCC	BCC (> 447°C)
Co	HCP	FCC (> 427°C)
Hf	HCP	BCC (> 1742°C)
Fe	BCC	FCC (912–1394°C) BCC (> 1394°C)
Li	BCC	HCP (< – 193°C)
Na	BCC	HCP (< – 233°C)
Tl	HCP	BCC (> 234°C)
Ti	HCP	BCC (> 883°C)
Y	HCP	BCC (> 1481°C)
Zr	HCP	BCC (> 872°C)

ช่วงอุณหภูมิหนึ่งจากอุณหภูมิห้องถึงอุณหภูมิของจุดหลอมเหลวของมัน คือ ที่ 1539°C ดังแสดงในรูปที่ 3.24 เหล็กที่อยู่ในรูปของแอลฟา (Alpha, α) ในช่วงของอุณหภูมิ -273 ถึง 912°C และจะมีโครงสร้างผลึกเป็น BCC เป็นรูปเหล็กแกมมา (Gamma, γ) ในช่วงอุณหภูมิจาก 912 ถึง 1394°C และมีโครงสร้างผลึกเป็น FCC ในรูปของเหล็กเดลตา (Delta, δ) เกิดขึ้นในช่วงอุณหภูมิ 1394 ถึง 1539°C ซึ่งเป็นจุดหลอมเหลวของเหล็กและมีโครงสร้างผลึกเป็น BCC โดยที่มี Lattice constant ใหญ่กว่าเหล็กแอลฟา

ตัวอย่างที่ 3.14

จงคำนวณหาปริมาตรที่เปลี่ยนแปลงไปตามทฤษฎี เมื่อโลหะบริสุทธิ์เปลี่ยนโครงสร้างผลึกจาก FCC เป็น BCC โดยถือว่าอะตอมเป็นทรงกลมแข็งและไม่มีการเปลี่ยนแปลงปริมาตรของอะตอมทั้งก่อนและหลังการเปลี่ยนแปลงโครงสร้างผลึก

วิธีทำ จากโครงสร้างผลึกเป็น FCC unit cell อะตอมจะมีการสัมผัสกันตามแนวทแยงมุม ดังแสดงในรูปที่ 3.7

$$\begin{aligned}\therefore a\sqrt{2} &= 4R \\ a &= \frac{4R}{\sqrt{2}}\end{aligned}$$

และถ้าโครงสร้างผลึกเป็น BCC unit cell อะตอมจะสัมผัสกันตามเส้นทแยงมุม unit cell ดังแสดงในรูปที่ 3.5

$$\begin{aligned}\therefore a\sqrt{3} &= 4R \\ a &= \frac{4R}{\sqrt{3}}\end{aligned}$$

แต่ใน FCC crystal lattice จะมี 4 อะตอม ใน 1 unit cell

$$\begin{aligned}\therefore \text{ปริมาตรต่ออะตอม } V_{FCC} &= \frac{a^3}{4} \\ &= \left(\frac{4R}{\sqrt{2}}\right)^3 \left(\frac{1}{4}\right) \\ &= 5.66R^3\end{aligned}$$

แต่ถ้าเป็น BCC crystal lattice จะมีจำนวนอะตอมใน 1 unit cell เท่ากับ 2 อะตอม

$$\begin{aligned}\therefore \text{ปริมาตรต่ออะตอม } V_{BCC} &= \frac{a^3}{2} \\ &= \left(\frac{4R}{\sqrt{3}}\right)^3 \left(\frac{1}{2}\right) \\ &= 6.16R^3\end{aligned}$$

\therefore ปริมาตรที่เปลี่ยนแปลงไปจากการเปลี่ยนแปลงโครงสร้าง ของ FCC เป็น BCC โดยถือว่าขนาดของอะตอม (รัศมี) ไม่มีเปลี่ยนแปลง

$$\therefore \frac{\Delta V}{V_{FCC}} = \frac{V_{BCC} - V_{FCC}}{V_{FCC}}$$

$$\begin{aligned}
 &= \frac{6.16 R^3 - 5.66 R^3}{5.66 R^3} \times 100\% \\
 &= +8.8 \%
 \end{aligned}$$

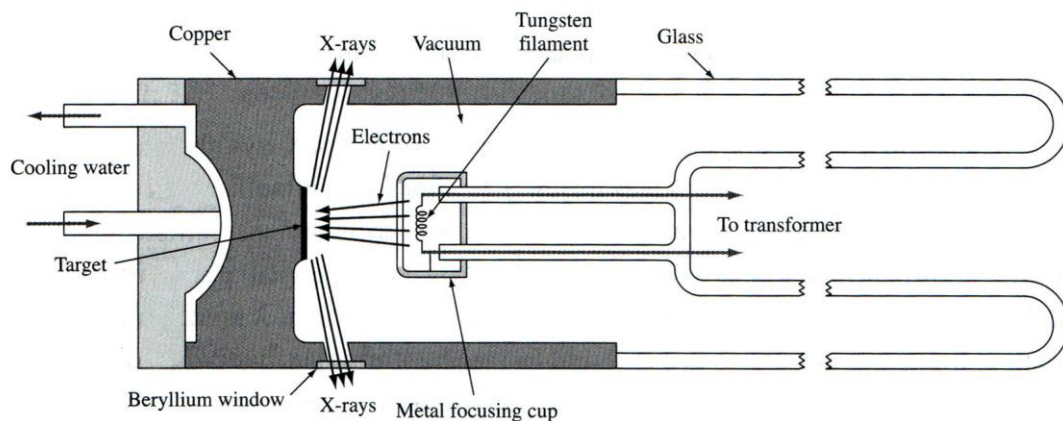
3.1.1 การวิเคราะห์โครงสร้างผลึก (Crystal Structure Analysis)

ในปัจจุบันการหาโครงสร้างของผลึกนั้นสามารถหาได้จากการใช้เทคนิคทาง X-ray diffraction ซึ่งใช้ X-ray ที่มีความยาวคลื่นเท่ากับระยะทางระหว่าง lattice planes ของผลึก ก่อนที่จะได้กล่าวถึงการเลี้ยวเบนของ X-rays เมื่อเกิดการชนกันกับผลึกหรืออะตอมที่เป็นองค์ประกอบของผลึก เราควรจะได้ทราบเสียก่อนว่า X-rays เกิดขึ้นได้อย่างไร มีลักษณะอย่างไร และส่วนไหนที่จะใช้ในการทดลอง

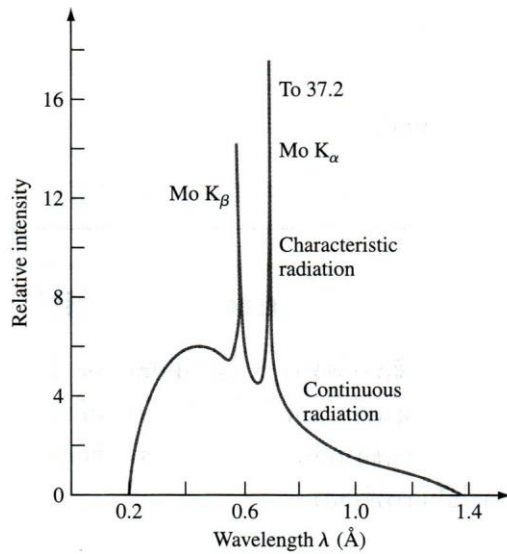
3.1.1.1 แหล่งกำเนิด X-ray (X-Ray Sources)

X-rays ที่ใช้ในการศึกษาเกี่ยวกับการเลี้ยวเบนของรังสี (diffraction) นั้นจัดว่าเป็นพวก electromagnetic waves หรือ radiations ซึ่งมีความยาวคลื่นอยู่ระหว่าง 0.05 ถึง 0.25 nm (0.5–205 Å) ถ้าจะเทียบกับความยาวคลื่นของแสงที่ตาเรามองเห็นซึ่งมีความยาวคลื่นอยู่ในช่วง 600 nm (6000 Å) เพื่อที่จะทำให้เกิด X-rays จำเป็นจะต้องใช้แรงเคลื่อนไฟฟ้าถึง 35 kV ต่อเข้ากับขั้วบวกและขั้วลบที่ทำด้วยโลหะและอยู่ในสุญญากาศ ดังรูปที่ 3.25 เมื่อใช้ขดลวดทังสเตน (tungsten filament) เป็นขั้วลบ (cathode) แล้วผ่านกระแสไฟฟ้าเข้าไปทำให้ลวดทังสเตนร้อนขึ้นอิเล็กตรอนจะถูกปล่อยมาโดย Thermionic emission และอิเล็กตรอนนี้จะถูกเร่งให้มีพลังงานสูงขึ้น ด้วยการใช้ความต่างศักย์ระหว่างขั้วลบและขั้วบวกมากๆ เมื่ออิเล็กตรอนวิ่งเข้าชนเป้า (target) ที่ทำด้วยโลหะต่างๆ กัน เช่น โมลิบดีนัม ทองแดง หรือโครเมียม เป็นต้น จะทำให้เกิด X-rays ขึ้น โดยใช้พลังงานไปส่วนหนึ่ง พลังงานอีก 98% โดยประมาณจะถูกเปลี่ยนเป็นพลังงานความร้อน ดังนั้นตัวเป้าจึงต้องทำให้เย็นลงโดยการผ่านน้ำเย็นเข้าไปหล่อตลอดเวลาจากภายนอก

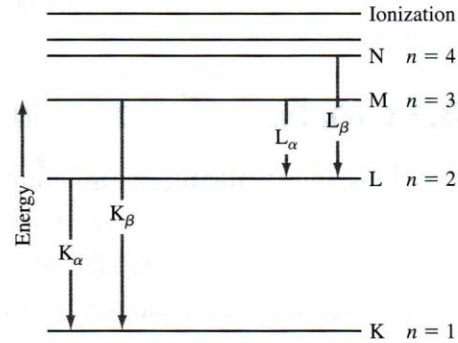
สเปกตรัมของ X-rays ที่เกิดขึ้นจากการใช้แรงไฟฟ้า 35 kV กับเป้าโลหะโมลิบดีนัม ดังแสดงในรูปที่ 3.26 ซึ่งประกอบด้วย continuous X-rays ที่มีความยาวคลื่นอยู่ในช่วงประมาณ 0.2–1.4 Å (0.02–0.14 nm) และ line spectrum 2 เส้น คือ $K\alpha$ และ $K\beta$ ซึ่งเป็นลักษณะเฉพาะของโลหะแต่ละชนิดที่ใช้ทำเป้า สำหรับ



รูปที่ 3.25 แสดงภาพตัดขวางของหลอด X-ray (After B.D. Cullity, "Elements of X-ray Diffraction", 2d ed., Addison-Wesley, 1978, p.23)



รูปที่ 3.26 แสดงลักษณะของสเปกตรัม X-ray ที่เกิดขึ้นจากการใช้โลหะโมลิบดีนัม (Mo) เป็นเป้าที่ 35 kV



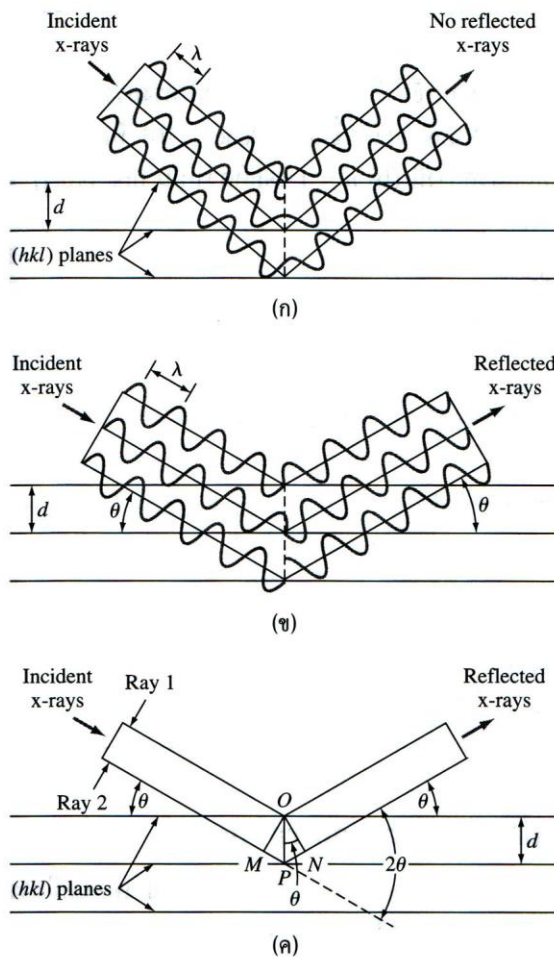
รูปที่ 3.27 แสดงระดับของพลังงานของอิเล็กตรอนในธาตุโมลิบดีนัมที่เป็นจุดเริ่มต้นของการเกิดรังสี K_{α} และ K_{β}

โลหะโมลิบดีนัม K_{α} line จะมีความยาวคลื่น 0.7 Å (0.07 nm) ทั้งนี้เนื่องมาจากการที่อิเล็กตรอนใน K-shell ($n = 1$) ถูกทำให้หลุดออกไปจากอะตอมด้วยการชนของอิเล็กตรอนจากขั้วลบ และทำให้อะตอมของเป้าอยู่ในภาวะกระตุ้น เมื่ออิเล็กตรอนใน K-shell ว่างลง อิเล็กตรอนที่อยู่ในเชลล์อื่นๆ ($n = 2$ หรือ 3) จะเข้ามาแทนที่และจะต้องปล่อยพลังงานที่เกินออกมามีความยาวคลื่นเฉพาะเป็น K_{α} line จาก X-ray ที่เกิดจากการเปลี่ยนระดับพลังงานของอิเล็กตรอนจาก L ($n = 2$) ไปยัง K-shell ($n = 1$) จะได้พลังงานที่มีความยาวคลื่นของ K_{α} line ดังแสดงในรูปที่ 3.27

3.11.2 X-ray ดิฟแฟรกชัน (X-Ray Diffraction)

เมื่อให้ลำแสงของ X-rays ที่ได้จากหลอด X-ray ซึ่งมีความยาวคลื่นเท่ากับระยะห่างระหว่างระนาบของอะตอมในผลึกผ่านเข้าไปในผลึกของแข็ง X-rays จะชนเข้ากับอะตอมที่เป็นองค์ประกอบของผลึก แล้วทำให้ X-rays นั้นเกิดการเลี้ยวเบนขึ้น มีความเข้มต่างๆ กัน และมีมุมต่างๆ กัน ซึ่งสามารถนำข้อมูลเหล่านี้ไปใช้ในการวิเคราะห์โครงสร้างของผลึกได้

ก่อนอื่นมาพิจารณาว่า X-rays เกิดการเลี้ยวเบนได้อย่างไร ถ้าให้ลำแสง X-rays เป็น monochromatic (ความยาวคลื่นเดียว) ผ่านเข้าไปในผลึกดังแสดงในรูปที่ 3.28 เพื่อทำให้ง่ายขึ้นโดยให้ crystal planes ของจุดศูนย์กลางของอะตอมที่กระจายอยู่ถูกแทนด้วย crystal planes ซึ่งเหมือนกับกระจกเพื่อสะท้อนลำแสง X-rays ที่เข้ามาตกกระทบเส้นที่ขนานกันตามแนวราบนั้นแสดงถึงชุดของ crystal planes ที่ขนานกันกับ Miller indices ($h k l$) เมื่อลำแสง monochromatic X-rays ซึ่งมีความยาวคลื่น λ ตกกระทบกับ planes ที่ทำมุมอันหนึ่งแล้วลำแสงที่สะท้อนออกมาไม่อยู่ในเฟส (not in phase) หรือลำแสงไม่เสริมกัน (no reinforced beam) ดังรูปที่ 3.28 (ก) แต่จะเกิดรบกวนกันและหักล้างกัน (destructive interference) แสดงว่า X-rays จะไม่เกิดการเลี้ยวเบน แต่ถ้า X-rays ที่เลี้ยวเบนออกมาอยู่ในเฟสจะก่อให้เกิดการเสริมกัน (constructive interference) ดังรูปที่ 3.28 (ข)



รูปที่ 3.28 แสดงการเลี้ยวเบนของ X-ray beam ด้วย planes (h k l) ของผลึก (ก) แสดงความไม่เกิดการเลี้ยวเบนของลำแสง X-ray (ข) แสดงการเลี้ยวเบนของลำแสง X-ray ที่ทำมุมตกกับ plane เป็น Bragg angle θ และมีการเสริมกัน (ค) แสดงการเกิดเหมือนข้อ (ข) โดยใช้เส้นตรงแทนคลื่น (After A.G. Guy and J.J. Hren "Elements of Physical Metallurgy", 3d ed., Addison-Wesley, 1974, p.201)

จากรูปที่ 3.28 (ค) X-rays 1 และ 2 ตกกระทบกับ planes ของอะตอม เมื่อเกิดการเลี้ยวเบนและอยู่ในเฟส ลำแสง 2 ที่ต้องเดินทางเพิ่มขึ้นจะเท่ากับ $MP + PN$ ซึ่งจะมีค่าเท่ากับจำนวนเต็มของความยาวคลื่น นั่นคือ

$$n\lambda = MP + PN \quad (3.8)$$

เมื่อ $n = 1, 2, 3, \dots$ และเรียกว่าอันดับของการเลี้ยวเบน (order of the diffraction)

$$\text{เมื่อ} \quad MP = PN = d_{hkl} \sin \theta$$

เมื่อ d_{hkl} = interplanar spacing ของ crystal planes ซึ่งมีค่าตรรกะนี้เป็น (h k l) สภาวะที่เกิด constructive interference (นั่นคือ การเกิด diffraction peak ซึ่งเป็นความเข้มของรังสี) จะต้องเป็น

$$n\lambda = 2 d_{hkl} \sin \theta \quad (3.9)$$

สมการนี้เรียกว่า Bragg's law ซึ่งให้ความสัมพันธ์ระหว่าง diffracted beam ของ X-rays ที่มีความยาวคลื่น λ กับ interplanar spacing d_{hkl} ของ Crystal planes โดยทั่วไป $n = 1$ Bragg's law จึงเขียนได้เป็น

$$\lambda = 2 d_{hkl} \sin \theta \quad (3.10)$$

ตัวอย่างที่ 3.15

เมื่อใช้ X-rays ที่มีความยาวคลื่น $\lambda = 0.1541 \text{ nm}$ ผ่านเข้าไปในเหล็กตัวอย่างที่มีโครงสร้างผลึกเป็น BCC ในเครื่อง X-ray diffractometer การเลี้ยวเบนของ X-ray จะเกิดขึ้นกับ plane $\{110\}$ ที่มุม $2\theta = 44.704^\circ$ จงคำนวณหาค่า lattice constant a ของเหล็กตัวอย่างนี้ (ให้ $n = 1$ โดยคิดว่าเป็น first order)

วิธีทำ

$$2\theta = 44.704^\circ$$

$$\theta = 22.35^\circ$$

จากสมการที่ (3.10) $\lambda = 2 d_{hkl} \sin \theta$

$$\begin{aligned} d_{110} &= \frac{\lambda}{2 \sin \theta} = \frac{0.1541 \text{ nm}}{2(\sin 22.35^\circ)} \\ &= \frac{0.1541 \text{ nm}}{2(0.3803)} = 0.2026 \text{ nm} \end{aligned}$$

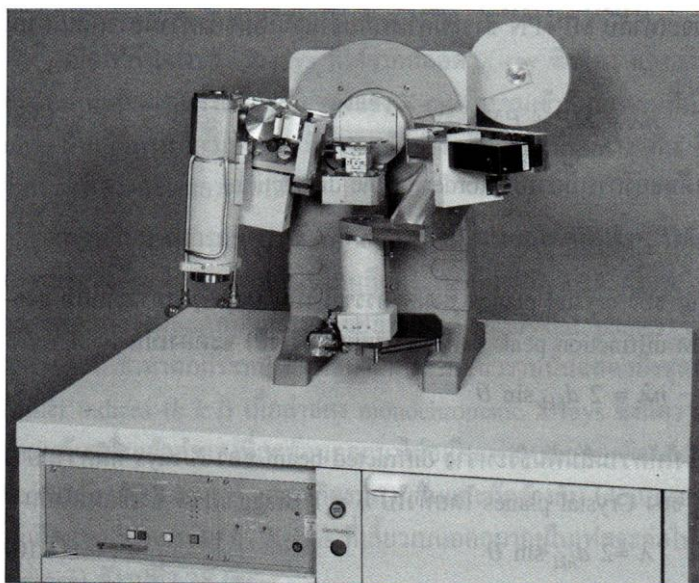
จากสมการที่ (3.4) $a = d_{hkl} \sqrt{h^2 + k^2 + l^2}$

$$\therefore a \text{ ของ Fe} = d_{110} = \sqrt{1^2 + 1^2 + 0^2}$$

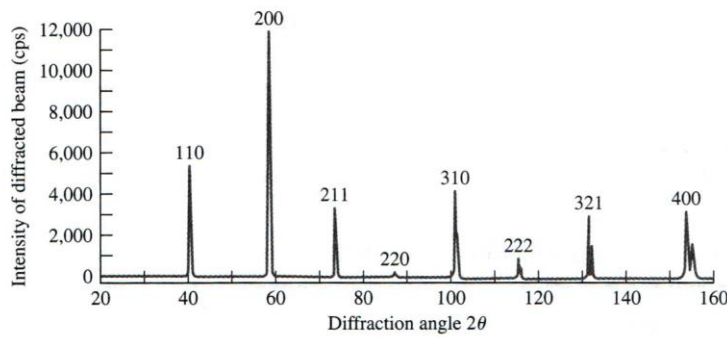
$$\therefore \text{lattice constant ของ Fe} = (0.2026 \text{ nm})(1.414) = 0.287 \text{ nm}$$

3.11.3 การหาโครงสร้างของผลึกโดยใช้เทคนิคทาง X-ray diffraction

วิธีการวิเคราะห์ที่ใช้กันทั่วไปของเทคนิคทาง X-ray diffraction คือ powder method เทคนิคนี้สารตัวอย่างที่จะวิเคราะห์จะถูกบดให้ละเอียด (powder) และใช้ได้อย่างดีกับสถานะของ Bragg's law ในการวิเคราะห์สมัยใหม่จะใช้ X-ray diffractometer ที่มีหัวฉีด (detector) X-ray เพื่อหาค่ามุมเลี้ยวเบนและความเข้มของ X-ray ที่เลี้ยวเบนออกมา ดังรูปที่ 3.29 และมี recorder ที่จะทำหน้าที่ plot ความเข้มของลำแสง X-rays ที่เลี้ยวเบนออกมาเทียบกับมุมที่เลี้ยวเบน (2θ) แบบอัตโนมัติ ดังรูปที่ 3.30



รูปที่ 3.29 แสดงเครื่อง X-ray diffractometer ที่ใช้หาโครงสร้างของผลึก (โดยเอาส่วนป้องกันรังสี x ออก)



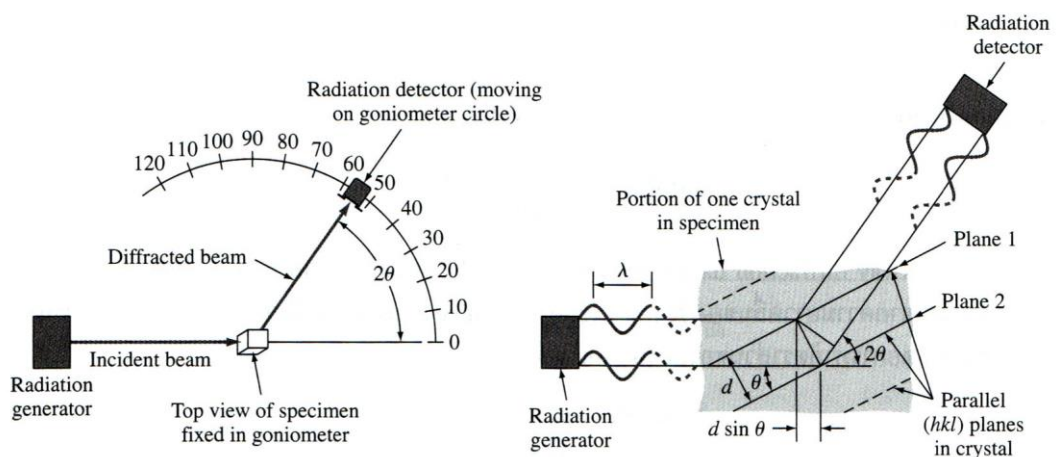
รูปที่ 3.31 แสดง X-ray diffraction pattern ของตัวอย่าง ทั้งสแตนเลสใช้หลอดทองแดงเป็น X-ray source (After A.G. Guy and J.J. Hren, "Elements of Physical Metallurgy", 3d ed., Addison-Wesley, 1974, p. 208)

สภาวะการเลี้ยวเบนสำหรับหน่วยเซลล์คิวบิก (cubic unit cells) เทคนิคทาง X-ray diffraction สามารถใช้หาโครงสร้างผลึกของของแข็งได้ ความจริงการวิเคราะห์โครงสร้างผลึกของสารต่าง ๆ นั้นค่อนข้างยุ่งยากและซับซ้อนซึ่งจะไม่ขอกล่าวในที่นี้ แต่จะขอแสดงถึงการหาโครงสร้างผลึกที่ง่าย ๆ เช่น การหาโครงสร้างของโลหะที่เป็น cubic unit cell โดยให้รวมสมการและทำให้สมการ (3.4) ง่ายขึ้นกับ Bragg equation เป็น

$$\begin{aligned} d_{hkl} &= \frac{a}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}} \\ \lambda &= 2 d \sin \theta \\ \lambda &= \frac{2 a \sin \theta}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}} \end{aligned} \quad (3.11)$$

สมการนี้สามารถใช้คู่กับ X-ray diffraction data สำหรับหาโครงสร้างผลึก ถ้าเป็น cubic crystal ซึ่งอาจเป็น BCC หรือ FCC สามารถหาได้ดังต่อไปนี้

การใช้สมการ (3.11) ในการวิเคราะห์ข้อมูลจาก diffraction data เราจะต้องทราบ crystal planes ที่เกิด diffraction ถ้าเป็น simple cubic lattice จะทำให้ planes ($h k l$) ต่าง ๆ เกิดการเลี้ยวเบนได้ อย่างไรก็ตาม ถ้าโครงสร้างผลึกเป็น BCC planes ที่ จะเกิดการเลี้ยวเบนได้จะต้องเป็น planes ที่ผลรวมของ Miller indices



รูปที่ 3.30 แสดงการหาโครงสร้างของผลึกด้วยวิธี diffractometer method (After A.G. Guy, "Essentials of Materials Science", McGraw-Hill, 1976)

ตารางที่ 3.6 เป็นกฎที่ใช้หา planes ที่เกิดการเลี้ยวเบน $\{h\ k\ l\}$ ของผลึกรูปลูกบาศก์ (cubic crystals)

Bravais lattice	Reflections present	Reflections absent
BCC	$(h + k + l)$ even	$(h + k + l)$ odd
FCC	(h, k, l) all odd or all even	(h, k, l) not all odd or all even

ตารางที่ 3.7 แสดง Miller indices ของ planes ที่เลี้ยวเบนได้ของ BCC และ FCC lattices

Cubic planes $\{hkl\}$	h^2	k^2	l^2	Sum $[h^2 + k^2 + l^2]$	Cubic diffracting planes $\{hkl\}$	
					FCC	BCC
$\{100\}$	$1^2 + 0^2 + 0^2$			1		
$\{110\}$	$1^2 + 1^2 + 0^2$			2	...	110
$\{111\}$	$1^2 + 1^2 + 1^2$			3	111	
$\{200\}$	$2^2 + 0^2 + 0^2$			4	200	200
$\{210\}$	$2^2 + 1^2 + 0^2$			5		
$\{211\}$	$2^2 + 1^2 + 1^2$			6	...	211
...				7		
$\{220\}$	$2^2 + 2^2 + 0^2$			8	220	220
$\{221\}$	$2^2 + 2^2 + 1^2$			9		
$\{310\}$	$3^2 + 1^2 + 0^2$			10	...	310

คือ $h + k + l$ จะต้องเป็นเลขคู่ (even number) (ดูตารางที่ 3.6) ดังนั้นสำหรับโครงสร้างผลึก BCC planes ที่เกิดการเลี้ยวเบนได้ คือ plane $\{110\}$, $\{200\}$, $\{211\}$ เป็นต้น ดังแสดงในตารางที่ 3.7 แต่ถ้าเป็นโครงสร้าง FCC planes ที่เกิดการเลี้ยวเบนได้จะต้องมีค่า Miller indices เป็นเลขคู่หรือเลขคี่ทั้งหมด (ถ้าเป็น 0 ให้ถือว่าเป็นเลขคู่) ดังนั้น โครงสร้างผลึกเป็น FCC จะพบว่า planes ที่เลี้ยวเบนได้คือ plane $\{111\}$, $\{200\}$, $\{220\}$ เป็นต้น ดังแสดงในตารางที่ 3.7

การแปลความหมายของข้อมูลจาก X-ray diffraction ที่ได้จากการทดลองสำหรับโลหะที่มีโครงสร้างผลึกเป็นรูปลูกบาศก์ (cubic structure) เช่น ในการวิเคราะห์เพื่อแสดงให้เห็นความแตกต่างของโครงสร้างผลึกที่เป็น BCC กับ FCC ของโลหะนั้นเป็นตัวอย่างที่ทำได้ง่าย ๆ โดยสมมติว่าโลหะนั้นมีโครงสร้างผลึกเป็น BCC หรือไม่ก็เป็น FCC อย่างใดอย่างหนึ่ง และสามารถบอกได้ว่ามี plane ไตบ้างที่เลี้ยวเบนออกมาตามมุม 2θ เช่นดังรูปที่ 3.31 ซึ่งเป็นโลหะทั้งสแตน

จากการยกกำลังสองสมการที่ 3.11 เพื่อหาค่า $\sin^2\theta$ จะได้เป็น

$$\sin^2\theta = \frac{\lambda^2(h^2 + k^2 + l^2)}{4a^2} \quad (3.12)$$

และจาก X-ray diffraction data เราสามารถหาค่ามุม 2θ ต่าง ๆ ที่เกิดจาก planes ต่าง ๆ $(h\ k\ l)$ เลี้ยวเบนเกิดขึ้นเนื่องจากความยาวคลื่นของ X-ray ที่ใช้และค่า lattice constant a ทั้งสองค่านี้คงที่ เราสามารถตัดค่าเหล่านี้ทิ้งได้โดยการหาอัตราส่วนของสองค่า $\sin^2\theta$ ดังนี้

$$\therefore \frac{\sin^2\theta_A}{\sin^2\theta_B} = \frac{h_A^2 + k_A^2 + l_A^2}{h_B^2 + k_B^2 + l_B^2} \quad (3.13)$$

เมื่อ θ_A และ θ_B เป็นมุมที่ X-ray เลี้ยวเบนเกิดจาก planes $\{h_A k_A l_A\}$ และ $\{h_B k_B l_B\}$ ตามลำดับจากตารางที่ 3.7 ถ้าผลึกนั้นเป็น BCC planes ที่เลี้ยวเบนเกิดขึ้น 2 ชุดแรกคือ $\{110\}$ และ $\{200\}$ เมื่อเอาไปแทนค่าในสมการ (3.13) จะได้

$$\therefore \frac{\sin^2 \theta_A}{\sin^2 \theta_B} = \frac{1^2 + 1^2 + 0^2}{2^2 + 0^2 + 0^2} = 0.5 \quad (3.14)$$

นั่นคือ ถ้าโลหะที่เป็นสารตัวอย่างมีโครงสร้างผลึกเป็น BCC อัตราส่วนของ $\sin^2 \theta$ ของ 2 planes ชุดแรกจะได้เท่ากับ 0.5

สำหรับผลึกที่มีโครงสร้างเป็น FCC planes ที่เลี้ยวเบนเกิดขึ้น 2 ชุดแรกคือ $\{111\}$ และ $\{200\}$ เมื่อนำไปแทนค่าในสมการ (3.13) จะได้

$$\therefore \frac{\sin^2 \theta_A}{\sin^2 \theta_B} = \frac{1^2 + 1^2 + 1^2}{2^2 + 0^2 + 0^2} = 0.75 \quad (3.15)$$

ดังนั้นถ้าโลหะเป็นสารตัวอย่างมีโครงสร้างเป็น FCC อัตราส่วนของ $\sin^2 \theta$ ที่ได้จาก planes ที่เลี้ยวเบนเกิดขึ้น จะมีค่าเท่ากับ 0.75

ในการหาโครงสร้างของโลหะที่เป็น BCC หรือ FCC โดยใช้การวิเคราะห์ทาง X-ray diffraction จริง ๆ นั้นอาจยุ่งยากซับซ้อนกว่าตัวอย่างที่ 3.16 แต่หลักการยังคงเหมือนกัน

ตัวอย่างที่ 3.16

ธาตุชนิดหนึ่งจะมีโครงสร้างเป็น BCC หรือ FCC โดยที่นำไปวิเคราะห์ด้วยเทคนิคทาง X-ray diffraction เมื่อใช้ X-ray ที่มีความยาวคลื่น 0.154 nm จะปรากฏว่ามี peaks ของ X-ray ที่เลี้ยวเบนเกิดขึ้นที่มุม 2θ ที่ 40, 58, 73, 86.8, 100.4 และ 114.7

(ก) จงหาว่าธาตุนี้มีโครงสร้างอะไร

(ข) จงหาค่า lattice constant ของธาตุนี้

(ค) ธาตุนี้คือธาตุอะไร

วิธีทำ (ก) หาค่า $\sin^2 \theta$ จากข้อมูลที่กำหนดมุม 2θ ให้ดังตารางข้างล่างนี้

$2\theta(\text{deg})$	$\theta(\text{deg})$	$\sin \theta$	$\sin^2 \theta$
40	20	0.3420	0.1170
58	29	0.4848	0.2350
73	36.5	0.5948	0.3538
86.8	43.4	0.6871	0.4721
100.4	50.2	0.7683	0.5903
114.7	57.35	0.8420	0.7090

ขั้นต่อไปหาอัตราส่วนของ $\sin^2 \theta$ จากค่าแรกและค่าที่สองจะได้

$$\therefore \frac{\sin^2 \theta_A}{\sin^2 \theta_B} = \frac{0.1170}{0.2350} = 0.4998 \approx 0.5$$

แสดงว่าโครงสร้างของผลึกของธาตุนี้เป็น BCC เพราะอัตราส่วนได้ประมาณ 0.5 แต่ถ้าได้ 0.75 ก็จะเป็น FCC

(ข) หาค่า lattice constant จากสมการ (3.12) จัดเสียใหม่เพื่อหาค่า a จะได้

$$a^2 = \frac{\lambda^2}{4} \frac{(h^2 + k^2 + l^2)}{\sin^2 \theta}$$

$$a = \frac{\lambda}{2} \sqrt{\frac{(h^2 + k^2 + l^2)}{\sin^2 \theta}}$$

แทนค่าในสมการ (3.17) ด้วย $h = 1$, $k = 1$ และ $l = 0$ โดยที่ทราบแล้วว่าโครงสร้างของผลึกเป็น BCC plane ที่เลี้ยวเบนแรกจึงเป็น $\{110\}$ ซึ่งจะมีค่า $\sin^2 \theta = 0.1170$ และค่า $\lambda = 0.154 \text{ nm}$

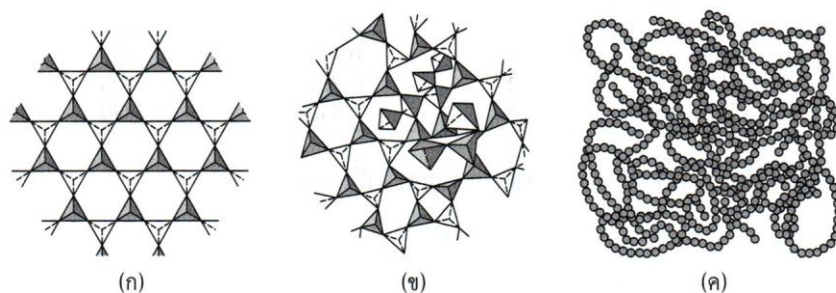
$$\text{ดังนั้น } a = \frac{0.154 \text{ nm}}{2} \sqrt{\frac{(1^2 + 1^2 + 0^2)}{0.117}} = 0.318 \text{ nm}$$

(ค) จากค่า $a = 0.318 \text{ nm}$ และเป็น BCC จากตารางที่ 3.2 ค่า a ที่ใกล้เคียงที่สุดคือ 0.316 nm ซึ่งเป็นธาตุทั้งสแตน

3.12 วัสดุอสัณฐาน (Amorphous Materials)

จากที่ได้กล่าวมาแล้ววัสดุบางชนิดเรียกว่า ออสัณฐาน หรือไม่มีรูปร่างผลึก (non-crystalline) เพราะในโครงสร้างอะตอมของสารเหล่านั้นไม่มีการเรียงตัวกันเป็นอันดับระยะยาว (long range order) ขอให้เป็นข้อสังเกตไว้ว่าโดยทั่วไปวัสดุมีแนวโน้มที่จะมีสภาพเป็นผลึกอยู่แล้ว เพราะเป็นสภาวะที่เสถียรที่สุดซึ่งจะมีระดับพลังงานต่ำที่สุด อย่างไรก็ตามอะตอมในวัสดุอสัณฐานจะเกิดพันธะกันในลักษณะที่ไม่เป็นระเบียบ เนื่องจากมีปัจจัยที่ไปกีดขวางการจัดการที่จะทำให้เกิดความเป็นระเบียบ อะตอมในวัสดุอสัณฐานจะมีช่องว่างเกิดขึ้นในบางตำแหน่ง ทำให้เป็นการต้านการเกิดผลึกแข็งได้ เพื่อให้เกิดความชัดเจน ระดับต่างๆของการเกิดความเป็นระเบียบ (หรือไม่เป็นระเบียบ) ได้แสดงในรูปที่ 3.32

พอลิเมอร์ แก้ว และโลหะบางชนิดส่วนมากจะเป็นประเภทวัสดุอสัณฐาน ในพอลิเมอร์การเกิดพันธะทุติยภูมิระหว่างโมเลกุลจะไม่ยอมให้เกิดความเหมือน หรือคล้ายคลึงกัน และห่วงโซ่ที่อัดกันแน่นในขณะแข็งตัว ดังนั้นพอลิเมอร์ เช่น พอลิไวนิลคลอไรด์ (PVC) จึงประกอบด้วยห่วงโซ่ (chain) โมเลกุลที่ยาว และ



รูปที่ 3.32 เป็นแผนผังแสดงระดับต่างๆของความเป็นระเบียบในวัสดุ (ก) ระยะยาว (long-range) ของความเป็นระเบียบในผลึกซิลิกา (crystalline silica) (ข) แก้วซิลิกาที่ไม่มีระยะยาวของความเป็นระเบียบ (ค) โครงสร้างอสัณฐานในพอลิเมอร์

เบี้ยว (Twisted) ซึ่งทำให้ยุ่งยากในการเกิดของแข็ง โครงสร้างอสัณฐาน คล้ายกับรูปที่ 3.32 (ค) ในพอลิเมอร์บางชนิด เช่น พอลิเอทิลีน โมเลกุลจะมีความสามารถและเข้ามาบรรจุกันแน่นในบางช่วงของวัสดุ และทำให้เกิดระดับความยาวที่เป็นระเบียบมากขึ้น ดังนั้นพอลิเมอร์ชนิดนี้จึงจัดอยู่ในพวกกึ่งผลึก (Semicrystalline) รายละเอียดของพวกกึ่งผลึกพอลิเมอร์จะได้กล่าวโดยละเอียดในบทที่ 10

แก้วที่เป็นพวกสารอนินทรีย์นั้น ออกไซด์ที่ใช้เป็นหลัก ในการทำแก้ว (Glass-Forming oxide) คือ ซิลิกา (SiO_2) โดยทั่วไปแก้วมีลักษณะเฉพาะคล้ายวัสดุเซรามิก (ceramic glass) และจัดว่าเป็นวัสดุตัวอย่างอีกชนิดหนึ่งที่มีโครงสร้างอสัณฐาน แก้วชนิดนี้ในโมเลกุลจะมีหน่วยย่อยหลัก คือ SiO_4^{4-} เทตระฮีดรอน โครงสร้างผลึกในอุดมคติของแก้วชนิดนี้ แสดงอยู่ในรูปที่ 3.32 (ก) แผนภาพแสดงถึง Si-O รูปเทตระฮีดรอนมีการเชื่อมต่อกัน มุมต่อมุมเกิด long-range Order ในสภาวะที่แก้วเป็นของเหลวหนืด (viscous) โมเลกุลของมันจะเคลื่อนไหวได้จำกัด และเกิดการตกผลึกอย่างช้า ๆ แต่ถ้ามีการทำให้เย็นด้วยอัตราเร็วปานกลางจะไปยับยั้งการเกิดโครงสร้างของผลึกและแทนที่โครงสร้างเทตระฮีดรอนจะมีการเชื่อมต่อกันเป็นโครงข่ายที่ไม่มี long-range order คือไม่เกิดเป็นผลึก ดังรูปที่ 3.32 (ข)

ในส่วนที่เพิ่มเติมของพอลิเมอร์และแก้วคือ โลหะบางชนิดมีความสามารถที่จะมีโครงสร้างอสัณฐานได้ (Metallic glass) ภายใต้ภาวะที่จำกัดและมีความยุ่งยาก โลหะไม่เหมือนแก้วเนื่องจากโลหะมีส่วนที่จะประกอบเป็นโครงสร้างมีขนาดเล็กและเคลื่อนไหวได้เมื่ออยู่ภายใต้สภาวะหลอมเหลว ดังนั้นจึงเป็นการยากที่จะป้องกันไม่ให้โลหะเกิดเป็นผลึก อย่างไรก็ตามโลหะที่มีการผสมเหล็ก 78% ซิลิกอน 9% และโบรอน 13% จะมีส่วนที่เป็นกึ่งโลหะสูง Si และ B อาจเกิดเป็น metallic glass จากการที่มันแข็งตัวเร็ว เมื่อใช้อัตราการทำให้เย็นเกินกว่า 10°C ต่อวินาที จากการทำให้อัตราการเย็นตัวลงเร็วมากเช่นนี้จะยอมไม่มีเวลาพอที่จะเกิดโครงสร้างผลึก แต่จะเกิดโลหะอสัณฐานซึ่งเป็นโครงสร้างที่ไม่เป็นระเบียบมาก ในทางทฤษฎีวัสดุใดที่มีรูปร่างผลึกสามารถเกิดโครงสร้างอสัณฐานได้ ถ้าทำให้แข็งตัวมาก ๆ จากสภาพที่หลอมเหลว

เนื่องจากวัสดุอสัณฐานที่มีโครงสร้างและสมบัติพิเศษ จึงทำให้มันเป็นวัสดุที่ยอดเยียม เช่น metallic glass เป็นวัสดุที่มีความแข็งแรงสูง ทนต่อการกัดกร่อนได้ดีและมีคุณสมบัติทางแม่เหล็กที่ดี เมื่อเทียบกับของคู่กันที่เป็นผลึก

สุดท้ายนี้วัสดุอสัณฐานยังมีความสำคัญอีกอย่างหนึ่งคือ เมื่อนำไปวิเคราะห์ด้วยเทคนิค X-ray diffraction วัสดุอสัณฐานจะไม่ให้ X-ray diffraction pattern ที่เด่นชัด เนื่องจากโครงสร้างของอะตอมขาดความเป็นระเบียบ ในบทหลัง ๆ จะได้กล่าวถึงโครงสร้างและสมบัติของวัสดุให้มีรายละเอียดมากขึ้น

3.13 สรุป

การจัดตัวของอะตอมในผลึกของแข็งสามารถอธิบายได้ด้วย การเชื่อมโยงระหว่างอะตอม ด้วยเส้นตรงเป็นตาข่าย (Network) เรียกว่า Space lattice Space lattice แต่ละอันจะแสดงถึงตำแหน่งของอะตอมในหน่วยเซลล์ โครงสร้างประกอบด้วย Space lattice และ motif (หรือพื้นฐาน) วัสดุที่มีรูปร่างผลึก เช่น โลหะส่วนมากจะประกอบด้วยการจัดตัวของอะตอมเป็นแบบ Long-range order แต่วัสดุบางชนิด เช่น พอลิเมอร์และแก้ว จะมีการจัดตัวแบบ short-range order เท่านั้น วัสดุดังกล่าวนี้เรียกว่าวัสดุกึ่งผลึก (Semicrystalline) หรือวัสดุอสัณฐาน (Amorphous) ระบบผลึกมีด้วยกัน 7 แบบ (7 systems) โดยถือการจัดตัวทางเรขาคณิตคือจัดตัวตามความยาวของแกนและมุมระหว่างแกนของหน่วยเซลล์ในผลึก 7 แบบนี้มีอยู่ 14 หน่วยเซลล์หรือแลตทิซย่อย (Sub-lattices) ซึ่งขึ้นอยู่กับการจัดตัวของอะตอมในหน่วยเซลล์

โครงสร้างผลึกของโลหะส่วนมากมีหน่วยเซลล์เป็น Body-centered Cubic (BCC), face-centered cubic (FCC) และ hexagonal Close-packed (HCP) (ซึ่งมีความหนาแน่นต่างจากโครงสร้าง hexagonal อย่างง่าย)

ทิศทางของผลึก (Crystal directions) ในผลึกคิบิกเป็นองค์ประกอบของเวกเตอร์ (Vector components) ที่คิดจากแต่ละแกนแล้วทำให้เป็นตัวเลขน้อยๆเป็น $[u \ v \ w]$ family of direction ซึ่งเป็นดรรชนีทิศทางให้เขียนอยู่ในวงเล็บเป็น $\langle u \ v \ w \rangle$ ระนาบของผลึก (crystal planes) ของคิบิกเป็นค่าที่ได้จากเศษส่วนกลับ (Reciprocals) ที่ระนาบไปตัดแกนแล้วทำให้เป็นเลขจำนวนเต็มเป็นค่า $(h \ k \ l)$ ถ้าเป็น family indices ให้เขียนเป็น $\{h \ k \ l\}$ สำหรับระนาบของผลึกในผลึก เฮกซะโกนัล จะมีดรรชนี 4 ค่า คือ $h \ k \ i \ l$ และ l อยู่ในวงเล็บ $(h \ k \ i \ l)$ ซึ่งเป็นค่าที่ได้จากเศษส่วนกลับของระนาบที่ตัดแกน $a_1 \ a_2 \ a_3$ และแกน c แล้วทำให้เป็นเลขจำนวนเต็มเช่นเดียวกัน ทิศทางของผลึกในผลึกเฮกซะโกนัลเป็นองค์ประกอบของเวกเตอร์ที่ได้จากโคออร์ดิเนต 4 จุด แล้วทำให้เป็นเลขลงตัวน้อยๆคือ $[u \ v \ t \ w]$

จากการให้อะตอมเป็นทรงกลมแข็ง (Hard sphere model) ทำให้สามารถคำนวณหาความหนาแน่นเชิงปริมาตร (ρ_v) ความหนาแน่นเชิงพื้นที่ (ρ_p) และความหนาแน่นเชิงเส้น (ρ_l) ของหน่วยเซลล์ได้ ระนาบที่อะตอมเข้าไปบรรจุกันแน่นที่สุดเท่าที่จะบรรจุได้ เรียกว่า close-packing planes ถ้าเป็นทิศทางเรียกว่า close-packing directions นอกจากนี้ยังสามารถคำนวณค่า atomic packing factor (APF) ของโครงสร้างต่างๆ ได้อีกด้วยโลหะที่มีโครงสร้างผลึกแตกต่างกันที่อุณหภูมิและความดันต่างกัน ปรากฏการณ์เช่นนี้เรียกว่า ภาวะพหุสัณฐาน (Polymorphism)

โครงสร้างผลึกที่เป็นของแข็งสามารถหาได้โดยใช้เทคนิคทาง X-ray diffraction X-ray จะเกิดการเลี้ยวเบนได้ผลึกตามกฎของแบร็ก (Bragg's law) คือ $n\lambda = 2d \sin \theta$ เครื่องที่ใช้หาโครงสร้างผลึก เรียกว่า X-ray diffractometer และใช้ powder method ในการหาโครงสร้างผลึกที่มีรูปร่างต่างๆกัน

3.14 คำนิยาม

Amorphous (อสัณฐาน) หมายถึงโครงสร้างที่ไม่มี long-rang order

Crystal (ผลึก) เป็นของแข็งที่ประกอบด้วยอะตอม ไอออนหรือโมเลกุลที่มีการจัดตัวเป็นรูปแบบแน่นอนและซ้ำกันใน 3 มิติ

Crystal Structure (โครงสร้างผลึก) เป็นรูปแบบการจัดตัวของอะตอมหรือไอออนใน Space อย่างเป็นระเบียบใน 3 มิติ

Space lattice เป็นจุดที่เรียงกันเป็นแถวใน 3 มิติ ซึ่งแต่ละจุดจะถูกล้อมรอบด้วยจุดที่เหมือนกัน

Lattice point เป็นจุดๆหนึ่งจากจุดต่างๆ ที่เรียงกันเป็นแถวแต่ละจุดเหล่านี้ถูกล้อมรอบด้วยจุดที่เหมือนกัน

Unit cell เป็นหน่วยที่ซ้ำๆกันของ space lattice โดยให้ความยาวตามแกนและมุมระหว่างแกน เป็นค่า Lattice constants ของหน่วยเซลล์ทั้งนี้เพื่อความเข้าใจง่ายและสะดวกเท่านั้น

Body-centered cubic (BCC) unit cell เป็นหน่วยเซลล์ที่อะตอมเข้าไปบรรจุอยู่โดยมีการจัดตัวของอะตอมหนึ่งจะสัมผัสกับอีก 8 อะตอมที่เหมือนกันที่อยู่ที่มีมุมของรูปลูกบาศก์ (ดังรูปที่ 3.3(ก))

Face-centered cubic (FCC) unit cell เป็นหน่วยเซลล์ที่อะตอมหนึ่งเข้าไปบรรจุอยู่ตรงกลางโดยจัดตัวให้มีอะตอมอื่น ๆ อยู่ล้อมรอบ 12 อะตอมลำดับชั้นของ close-packed planes ที่ซ้อนกันอยู่ในโครงสร้างผลึก FCC เป็น ABCABC..... (ดังรูปที่ 3.3 (ข))

Hexagonal close-packed (HCP) unit cell เป็นหน่วยเซลล์ที่อะตอมเข้าไปบรรจุอยู่ มีการจัดตัวที่อะตอมอยู่ตรงกลางถูกล้อมรอบด้วยอะตอม 12 อะตอมลำดับชั้นของ Close-packed planes ที่เรียงกันอยู่ในโครงสร้างผลึก HCP เป็น ABCABC..... (ดังรูปที่ 3.3 (ค))

Atomic packing factor (APF) เป็นปริมาตรของอะตอมที่บรรจุอยู่ในหน่วยเซลล์หนึ่งๆหารด้วยปริมาตรของหน่วยเซลล์

Indices of direction แสดงด้วยเวกเตอร์ที่ลากจากจุด origin ในหน่วยเซลล์ไปยังด้านของหน่วยเซลล์ การเขียน direction Indices เขียนได้เป็น $[u \ v \ w]$ ถ้า Indices เป็นลบให้เขียนเส้นบนค่า Indices นั้นๆ

Indices for cubic crystal planes (Miller indices) เป็นค่าเศษส่วนกลับของจุดตัดของ planes กับแกน $x \ y$ และ z ของผลึก cubic เรียกว่า Miller indices แสดงด้วย $(h \ k \ l)$ โดยที่ plane จะต้องไม่ผ่านจุด origin

Volume density (ρ_v) เป็นค่าของมวลต่อหนึ่งหน่วยปริมาตร นิยมวัดเป็น Mg/m^3 หรือ g/cm^3

Planar density (ρ_p) เป็นค่า equiv. no of atoms ที่ถูกตัดด้วยพื้นที่อันหนึ่งหารด้วยพื้นที่ที่ใช้ตัด

Linear density (ρ_l) เป็นจำนวนอะตอมที่ทิศทางอันหนึ่งผ่าน หารด้วยความยาวของเส้นของทิศทางนั้นในผลึก cubic

Polymorphism (การมีผลึกหลายแบบ) เป็นลักษณะหรือสมบัติพิเศษของโลหะที่มีโครงสร้างผลึกได้หลายแบบ เช่น เหล็กสามารถมีโครงสร้างเป็น FCC หรือ BCC โดยขึ้นอยู่กับอุณหภูมิ

Metallic glass เป็นโลหะที่มีโครงสร้างอะตอมเป็นแบบสัณฐาน

3.15 แบบฝึกหัด

- 3.1 โครงสร้างผลึกของโลหะที่พบเสมอๆมีอะไรบ้าง จงบอกชื่อของโลหะที่มีโครงสร้างดังกล่าวมา 5 ชื่อ
- 3.2 Bravais unit cell มี 14 ชนิด ได้แก่อะไรบ้าง
- 3.3 โลหะแทนทาลัมที่ 20°C เป็น BCC ซึ่งมีรัศมีอะตอม 0.143 nm จงคำนวณหาค่า Lattice constant (a) เป็น nm
- 3.4 ทังสแตนที่ 20°C เป็น BCC มี lattice constant 0.3165 nm จงคำนวณหาค่ารัศมีอะตอมของโลหะทังสแตนในหน่วย nm
- 3.5 โลหะอะลูมิเนียมมีโครงสร้างผลึกเป็น FCC และมีค่า lattice constant 0.405 nm จงคำนวณหาค่ารัศมีอะตอมของอะลูมิเนียมในหน่วย nm
- 3.6 ตะกั่วมีโครงสร้างผลึกเป็น FCC และรัศมีอะตอม 0.175 nm จงคำนวณหาค่า Lattice constant (a) เป็น nm
- 3.7 จงคำนวณหาค่า Atomic packing factor (APF) ของ FCC Structure
- 3.8 ในโครงสร้าง HCP มีจำนวนอะตอมอยู่เท่าไรใน unit cell
- 3.9 จงเขียน directions ใน BCC unit cell และบอกตำแหน่ง coordinates ของอะตอมที่ direction vector ผ่าน
(ก) $[100]$ (ข) $[110]$ (ค) $[111]$

- 3.10 จงเขียน direction vector ในหน่วยเซลล์ cubic สำหรับ direction ต่อไปนี้
 (ก) $[1\bar{1}\bar{1}]$ (ข) $[1\bar{1}0]$
 (ค) $[\bar{1}2\bar{1}]$ (ง) $[\bar{1}\bar{1}3]$
- 3.11 Direction vector อันหนึ่งผ่านจากตำแหน่ง $(1, 0, \frac{3}{4})$ ไปยังตำแหน่ง $(\frac{1}{4}, 1, \frac{1}{4})$ ในหน่วยเซลล์ cubic จะมี direction Indices อย่างไร
- 3.12 จงเขียน Crystal planes ซึ่งมี Miller indices ต่อไปนี้ใน unit cell
 (ก) $(1\bar{1}\bar{1})$ (ข) $(10\bar{2})$ (ค) (321)
 (ง) $(\bar{3}3\bar{1})$ (จ) $(2\bar{3}2)$
- 3.13 จงเขียน Crystallographic planes ใน BCC unit cell และบอกตำแหน่งอะตอมที่ planes ผ่านมาด้วย
 (ก) (100) (ข) (110) (ค) (111)
- 3.14 จงเขียน Crystallographic planes ใน FCC unit cell และบอกตำแหน่ง coordinates ของอะตอมที่ planes ตัดผ่านมาด้วย
 (ก) (100) (ข) (110) (ค) (111)
- 3.15 จงหา Miller indices ของ cubic plane ที่ตัดแกนโดยมี $a = \frac{1}{2}$ $b = \frac{3}{4}$ $c = \frac{1}{2}$
- 3.16 จงหา Miller indices ของ cubic plane ที่ตัดแกนโดยมี $a = 1$ $b = -\frac{2}{3}$ $c = -\frac{1}{2}$
- 3.17 จงหา Miller indices ของ cubic crystal plane ที่จุดตัดมี coordinates $(1, 0, 0)$, $(1, \frac{1}{2}, \frac{1}{4})$, $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0)$
- 3.18 ทองแดงมีโครงสร้างเป็น FCC มี lattice constant (a) เท่ากับ 0.3615 nm จงหาค่า interplanar spacing ของ
 (ก) d_{111} (ข) d_{200} (ค) d_{220}
- 3.19 ถ้า d_{321} interplanar spacing ในโลหะที่มีโครงสร้างเป็น BCC มีค่าเท่ากับ 0.08411 nm
 (ก) Lattice constant (a) มีค่าเท่าใด
 (ข) รัศมีอะตอมของโลหะมีค่าเท่าใด
 (ค) โลหะนั้นน่าจะเป็นโลหะใด
- 3.20 จงหา density ของทองที่มีโครงสร้าง FCC เป็น g/cm^3 จากค่า lattice constant (a) = 0.40788 nm และค่า atomic mass ของทอง = 196.67 g/mol
- 3.21 จงหาค่า Planar atomic density เป็นอะตอม/ mm^2 สำหรับ crystal planes ต่อไปนี้ ในโลหะแทนทาลัมที่มีโครงสร้างเป็น BCC และมี lattice constant 0.33026 nm
- 3.22 จงคำนวณหาค่า Linear atomic density เป็นอะตอม/mm ของ directions ต่อไปนี้ ในโมลิบดีนัม (Mo) โครงสร้าง BCC และมีค่า lattice constant 0.31468 nm
 (ก) $[100]$ (ข) $[110]$ (ค) $[111]$

- 3.23 จากผลการวิเคราะห์ด้วยเครื่อง X-ray diffractometer ของธาตุชนิดหนึ่งซึ่งอาจมีโครงสร้างเป็น BCC หรือ FCC ปรากฏว่าได้ diffraction peaks ที่มุม 2θ คือ 38.184° , 44.392° , 64.576° และ 72.547° ความยาวคลื่นของ X-ray ที่ใช้เป็น 0.1541 nm
- (ก) จงหาโครงสร้างผลึกของธาตุนี้
 - (ข) จงหาค่า Lattice constant ของธาตุนี้
 - (ค) ธาตุนี้อะไร