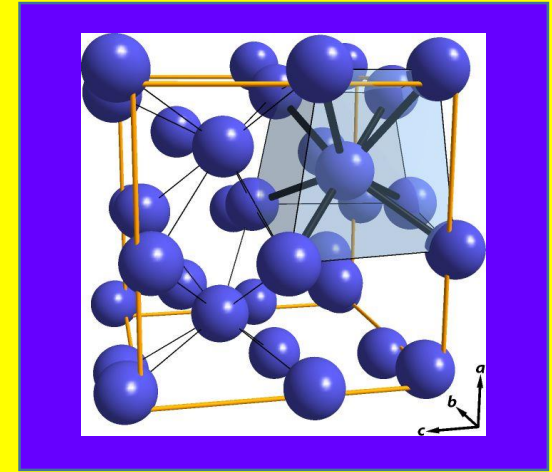


III. Crystal and Amorphous Structure in Materials



1. The Space Lattice and Unit Cells

2. Crystal System and Bravais Lattice

3. Principle Metallic Crystal Structures

4. Atom Positions in Cubic Unit Cells

5. Directions in Cubic Unit Cells

6. ดรรชนีมิลเลอร์ของระนาบผลึกในหน่วยเซลล์คิวบิก

7. ระนาบและทิศทางในโครงสร้างผลึก HCP

**8. การเปรียบเทียบโครงสร้าง FCC ,
BCC และ HCP**

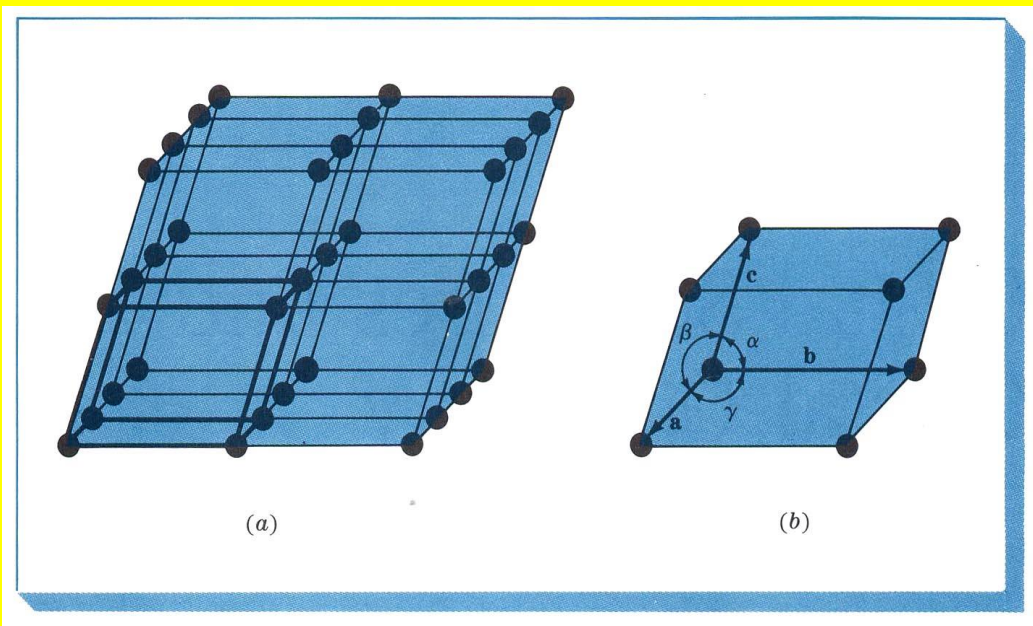
**9. การคำนวณหาความหนาแน่นใน
unit cell**

10. Polymorphism

11. การวิเคราะห์โครงสร้างผลึก

12. Amorphous Materials

1. THE SPACE LATTICE AND UNIT CELLS

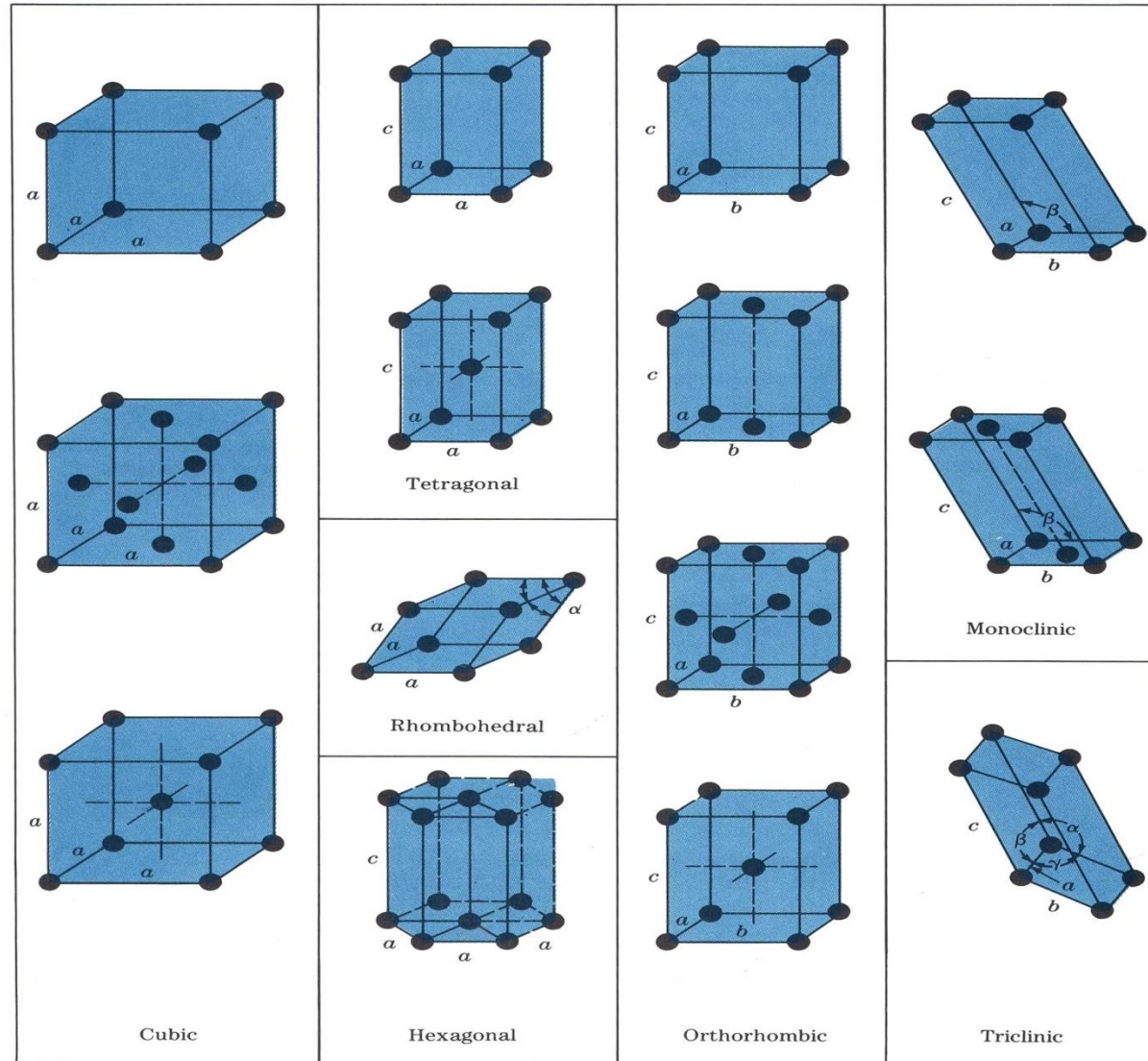


(a) Space Lattice ของโครงสร้างผลึก

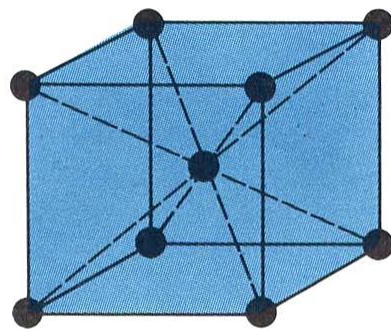
(b) Unit Cell อธิบายด้วย Lattice Vector a, b, c

- โครงสร้างของวัสดุที่เป็นผลึก
อะตอมจะเรียงตัวเป็นระเบียบ
- การจัดเรียงของอะตอม ใช้จุดตัดในโครง
ร่างสามมิติแทนอะตอม โดยไม่มีขีดจำกัด
ที่เรียกว่า Space Lattice
- การอธิบายโครงสร้างผลึกใช้ Unit Cell

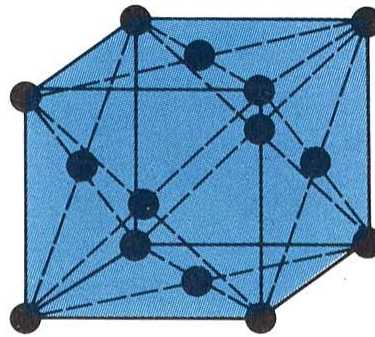
2. Crystal System and Bravais Lattice



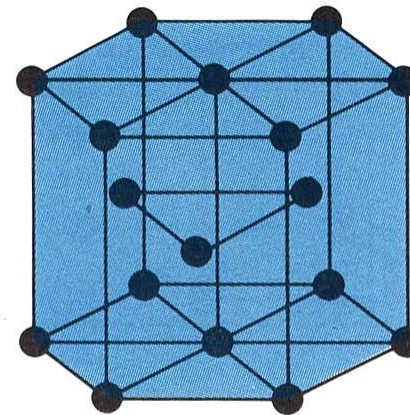
3. Principle Metallic Crystal Structures



(a)



(b)



(c)

Unit Cell ของโครงสร้างผลึก

(a) BCC

(b) FCC

(c) HCP

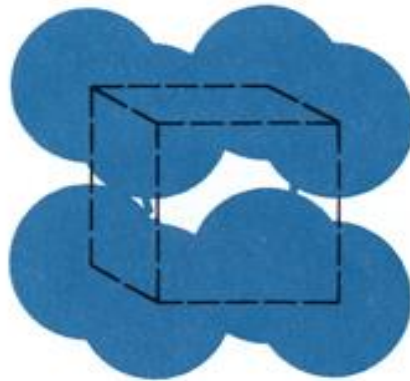
BODY CENTER CUBIC (BCC) CRYSTAL STRUCTURE

- อะตอมอยู่ที่มุมทั้ง 8 ของ Unit Cell และจะมีอะตอมอยู่ที่ตรงกลางของ Unit Cell

Unit Cell แบบ BCC



(a) ตำแหน่งอะตอมใน
Unit Cell



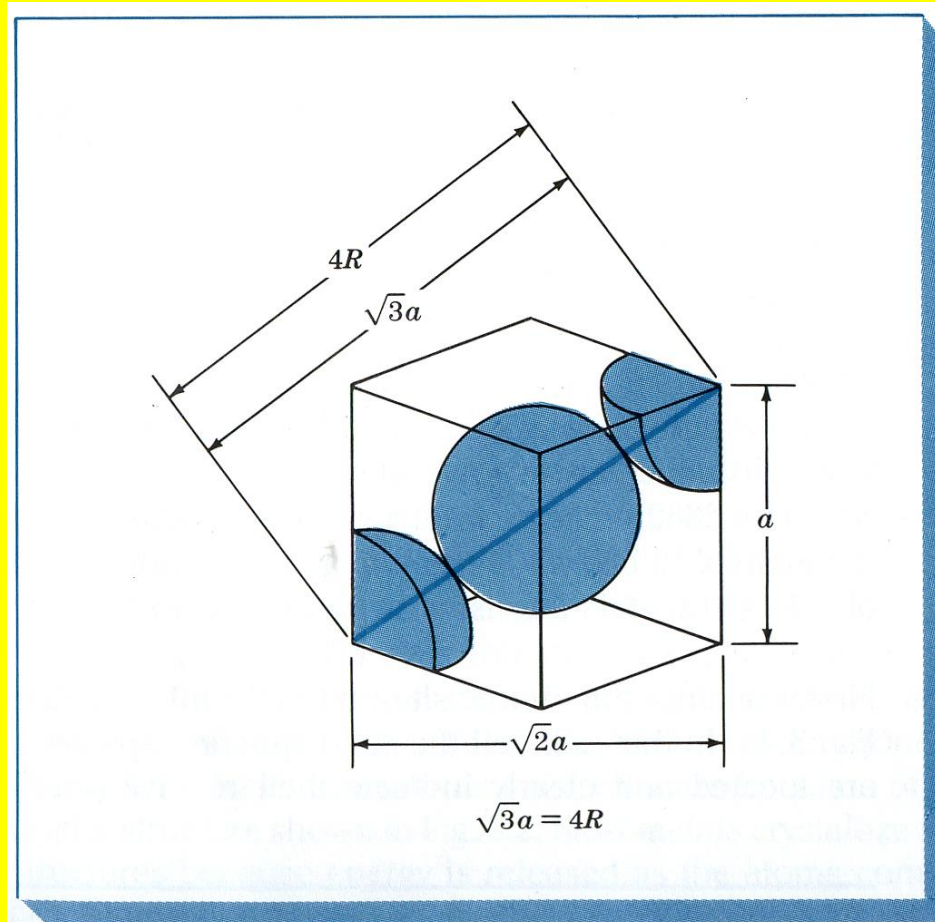
(b) Unit Cell ของอะตอม



(c) อะตอมใน
Unit Cell

BODY CENTER CUBIC (BCC) CRYSTAL STRUCTURE

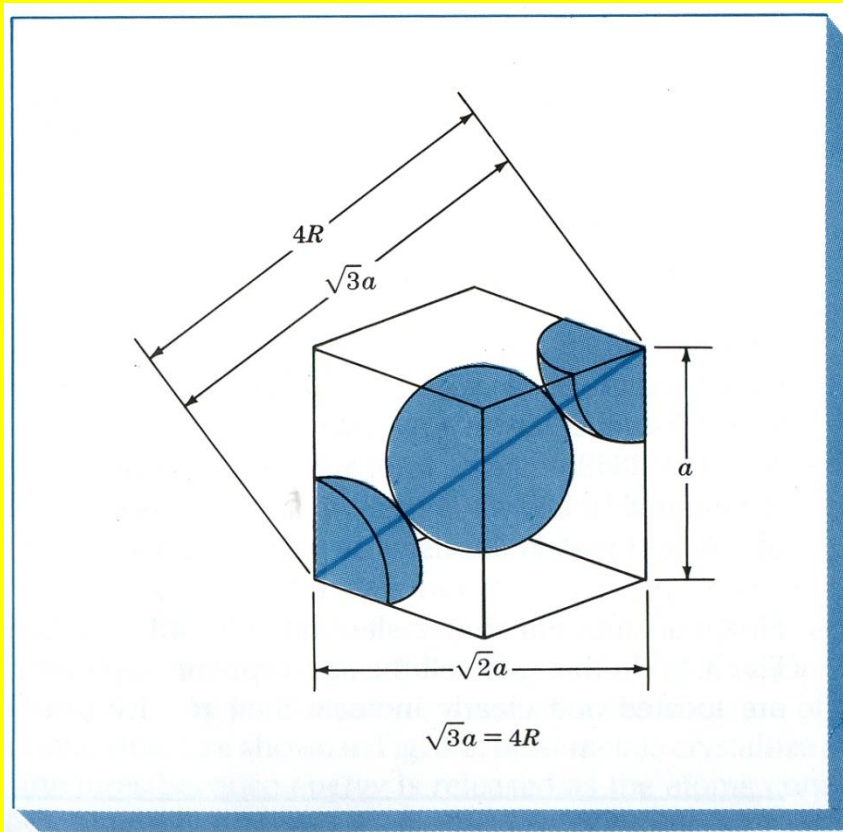
- ความสัมพันธ์ระหว่าง Lattice Constant (a) กับรัศมี R ของโครงสร้าง BCC



$$\sqrt{3} a = 4R \quad \text{หรือ} \quad a = \frac{4R}{\sqrt{3}}$$

1. เหล็กที่อุณหภูมิ 20 °C มีโครงสร้างแบบ BCC รัศมีของอะตอม มีขนาด 0.124 nm

ให้หา Lattice Constant (a) ใน Unit Cell ของเหล็ก



$$\sqrt{3} a = 4R \text{ หรือ } a = \frac{4R}{\sqrt{3}}$$

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

ค่าคงที่โครงร่างและรัศมีอะตอม ของโลหะบางชนิดซึ่งมีโครงสร้างผลึกแบบ BCC ที่อุณหภูมิห้อง 20 °C

Metal	Lattice	Atomic
	Constant	radius
	a, nm	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

$$APF = \frac{\text{ปริมาตรของอะตอมใน Unit Cell}}{\text{ปริมาตรของ Unit Cell}}$$

Ex. 2 ให้หา atomic packing factor (APF) ของโครงสร้างผลึกแบบ BCC ใน Unit Cell โดยสมมติให้อะตอมมีรูปทรงกลม

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

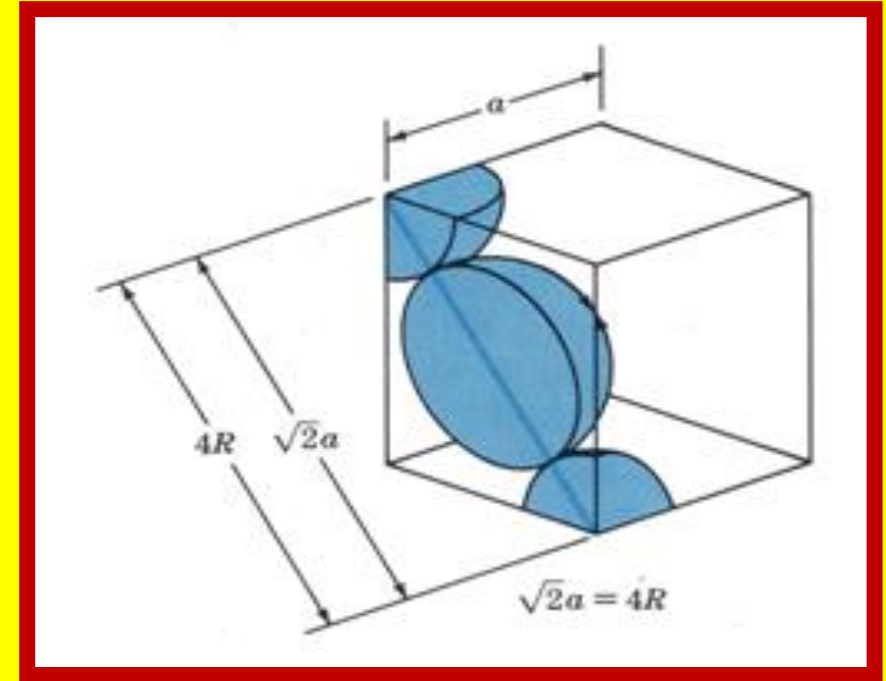
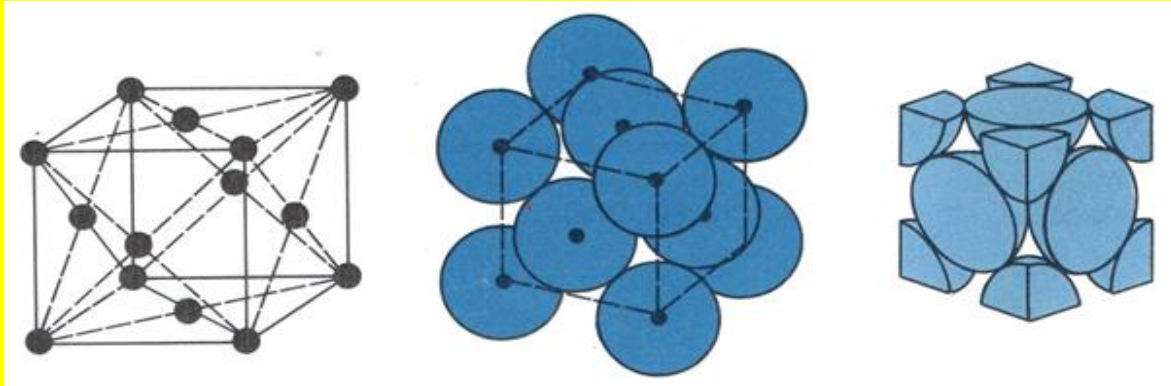
$$V_{UnitCell} = a^3 = 12.32R^3$$



$$APF = \frac{V_{atoms}}{V_{UnitCell}} = \frac{2\left(\frac{4}{3}\pi R^3\right)}{12.32R^3} = 0.68$$



FCC

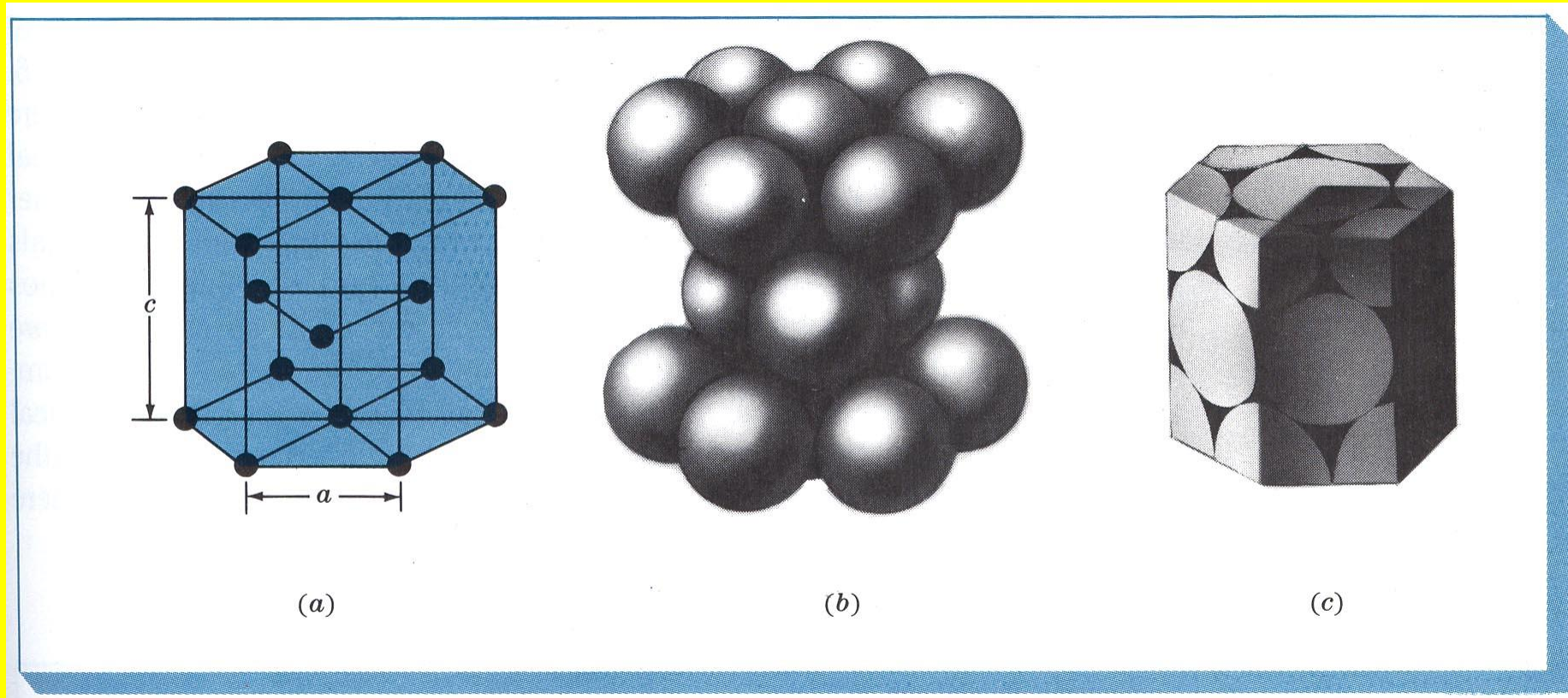


$$\sqrt{2}a = 4R$$

ตัวอย่าง ค่าคงที่โครงร่างและรัศมีอะตอม ของโลหะบางชนิดซึ่งมีโครงสร้างผลึกแบบ FCC ที่อุณหภูมิห้อง 20 °C

Metal	Lattice Constant a, nm	Atomic radius 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

HEXAGONAL CLOSE-PACKED (HCP) CRYSTAL STRUCTURE

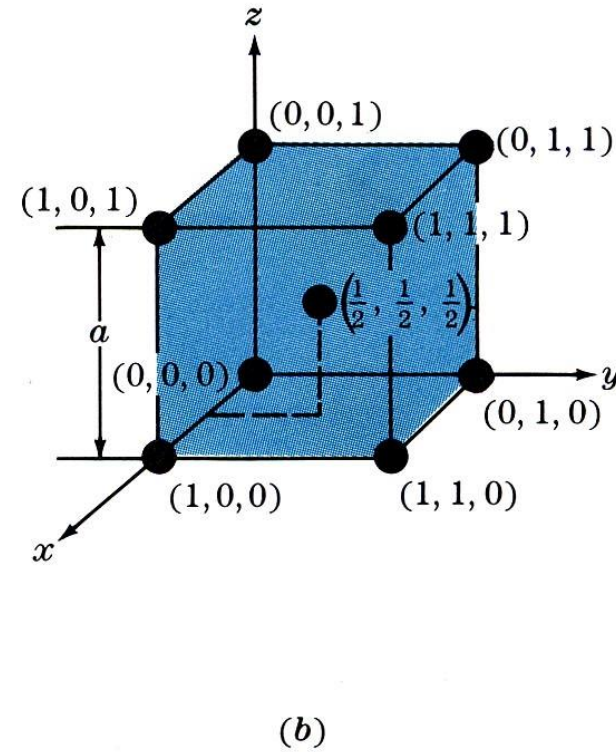
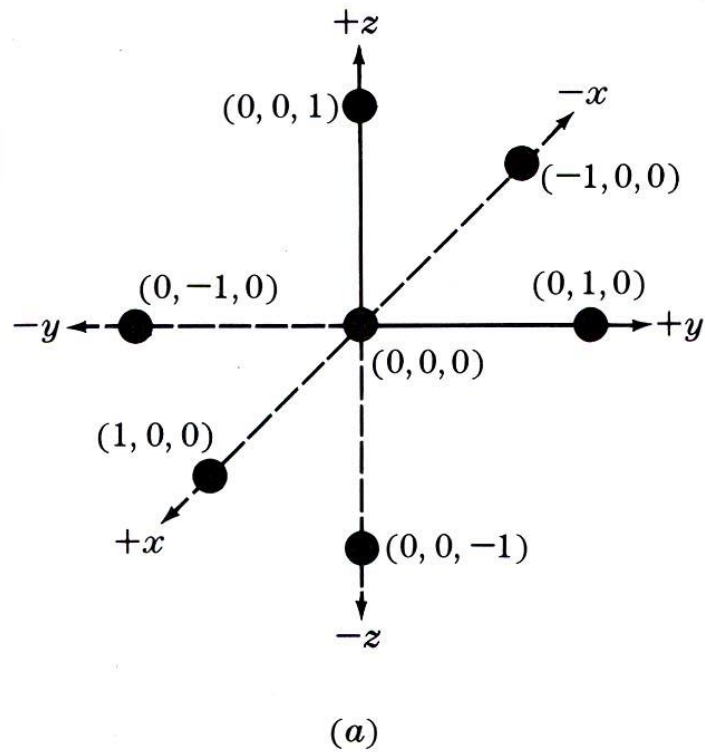


- * APF ของอะตอมที่เรียงตัวแบบ HCP มีค่า 0.74
- * Coordinate Number = 12
- * มี 6 อะตอม/Unit cell

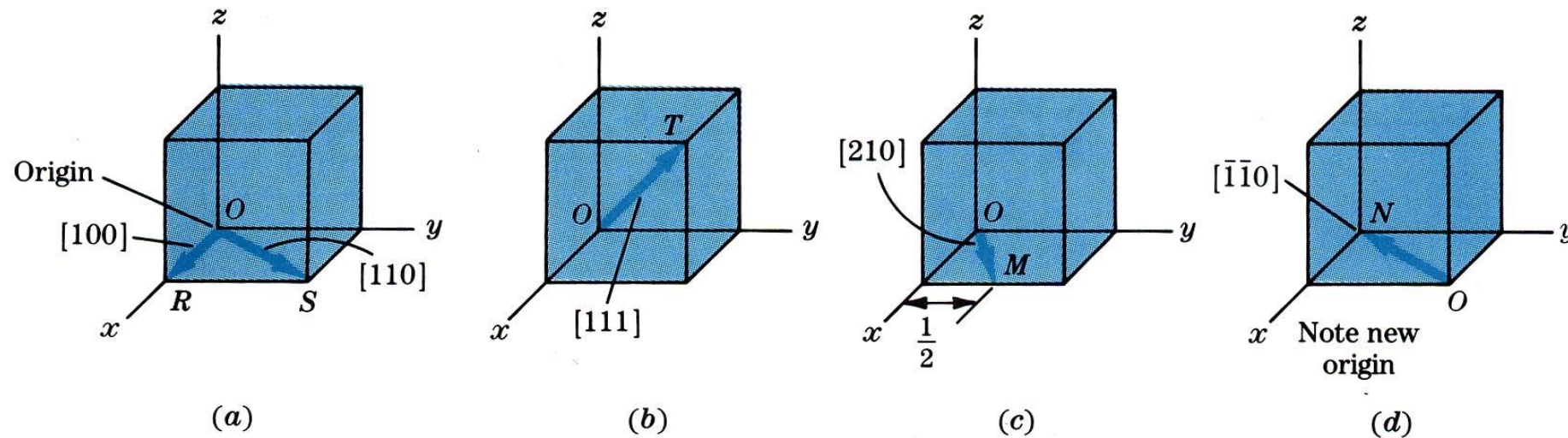
โลหะบางชนิดซึ่งมีโครงสร้างผลึกแบบ HCP ที่อุณหภูมิห้อง 20 °C

Metal	Lattice Constants, nm		Atomic radius R, nm	C/a ratio	% deviation from Ideallty
	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	0.4683	0.147	1.587	-2.81
Titanium	0.2950	0.4683	0.147	1.587	-2.81
Beryllium	0.2286	0.3584	0.113	1.568	-3.98

4. Atom Positions in Cubic Unit Cells



5. Directions in Cubic Unit Cells

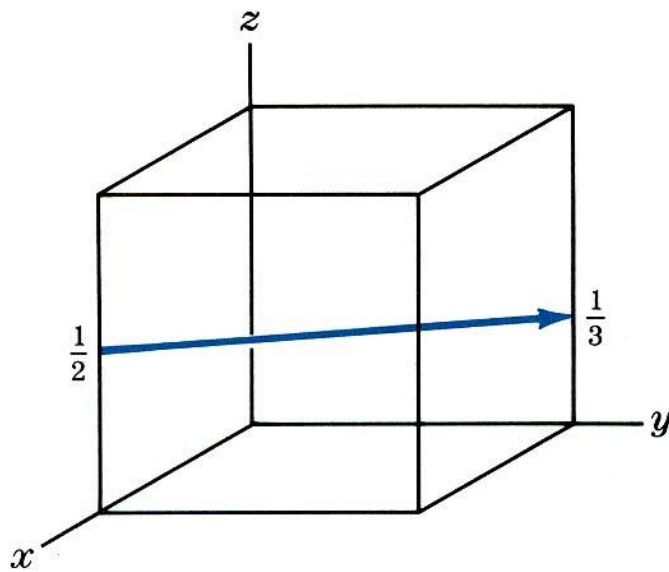


* ดัชนีทิศทาง X , Y และ Z แทนด้วย $[UVW]$

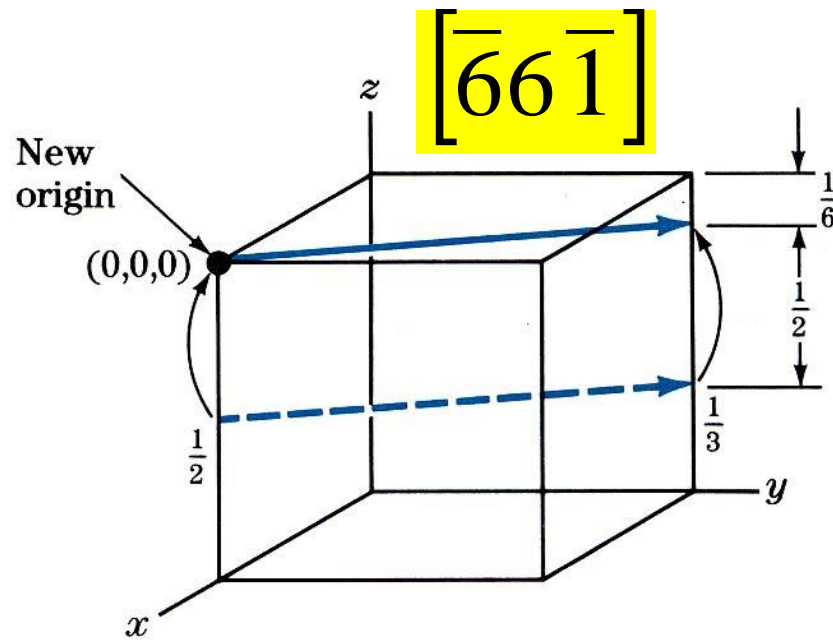
* Family ของทิศทาง แทนด้วย $\langle UVW \rangle$ เช่น

$$\langle 100 \rangle = [100, 010, 001, 010, 001, 100]$$

Ex. 5 ให้ออกดัชนีทิศทางที่แสดงในรูปลูกบาศก์ (จากภาพ)

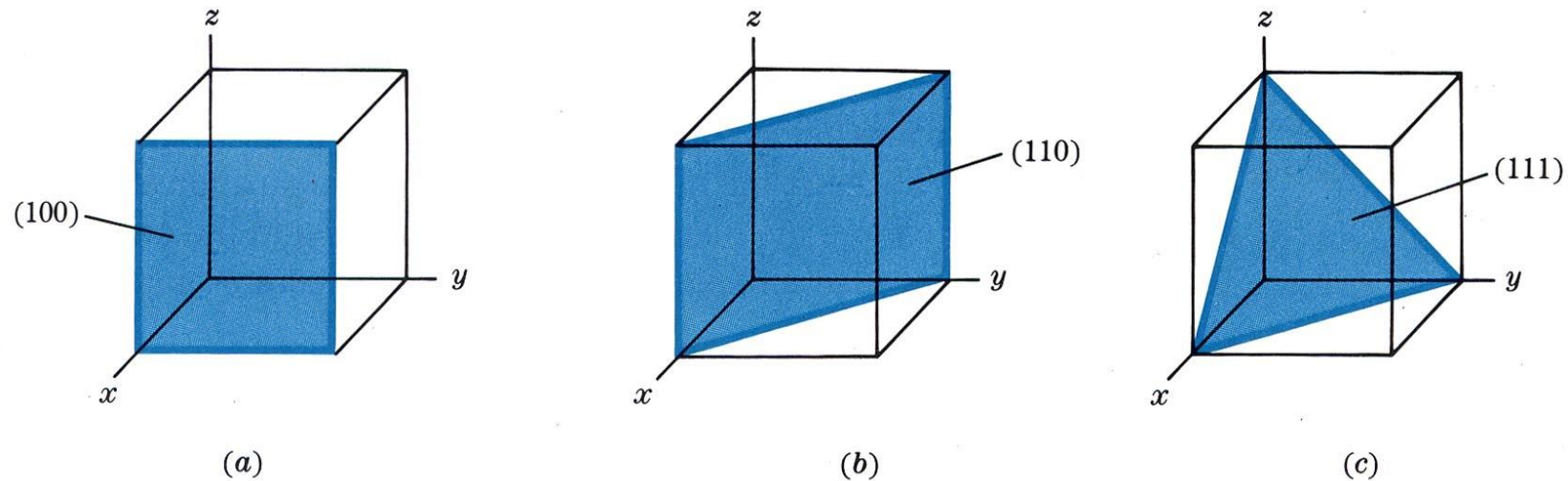


(a)



(b)

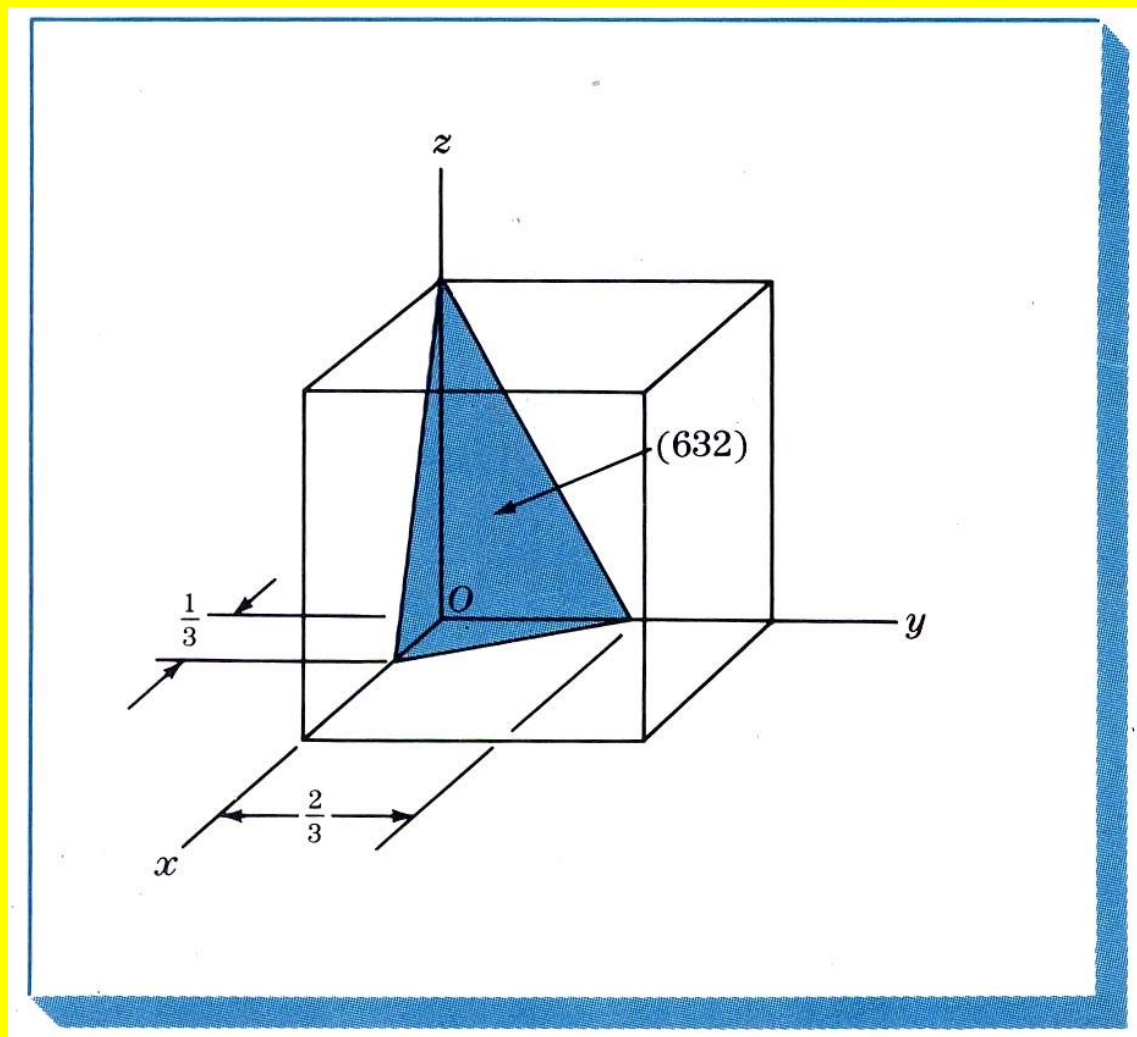
6. ครรชนีมิลเลอร์ของระนาบผลึกในหน่วยเซลล์คิวบิก



* การกำหนดระนาบของผลึกใช้ระบบสัญกรณ์ของมิลเลอร์ ($h k l$)

* ขั้นตอนการหาดัชนีมิลเลอร์ของระนาบผลึก

1. เลือกจุดกำเนิดระนาบที่ไม่ผ่าน $(0, 0, 0)$
2. หาจุดตัดแกน X , Y และ Z ของระนาบ
3. หาส่วนกลับของจุดตัด
4. ทำเศษส่วนให้เป็นจำนวนเต็ม ซึ่งเป็นอัตราส่วนน้อยสุด



$$x, y, z \Rightarrow \frac{1}{3}, \frac{2}{3}, 1$$

$$\frac{1}{x}, \frac{1}{y}, \frac{1}{z} \Rightarrow 3, \frac{3}{2}, 1$$

$$2 \times \left(3, \frac{3}{2}, 1 \right) \Rightarrow (632)$$

ระนาบ (632)

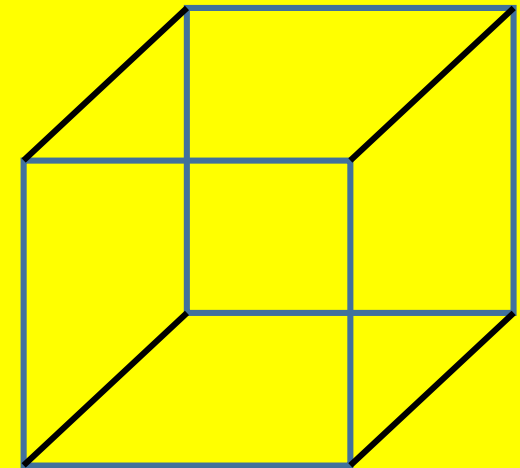
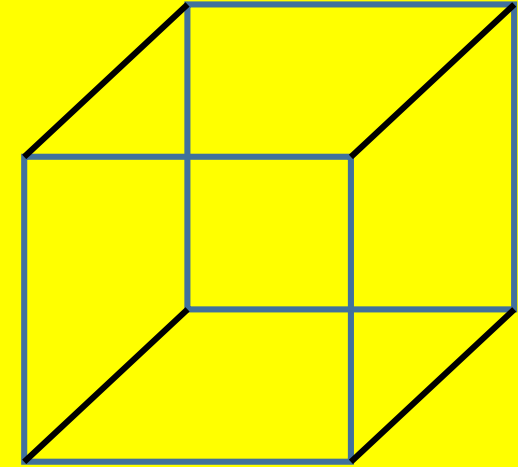
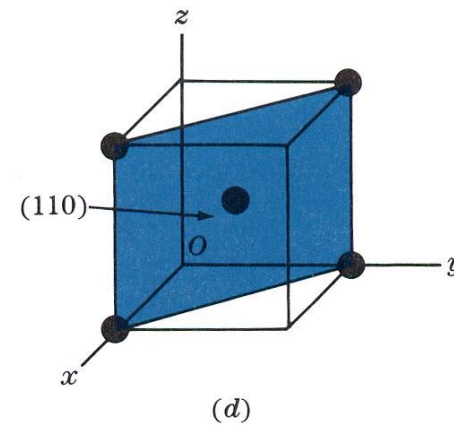
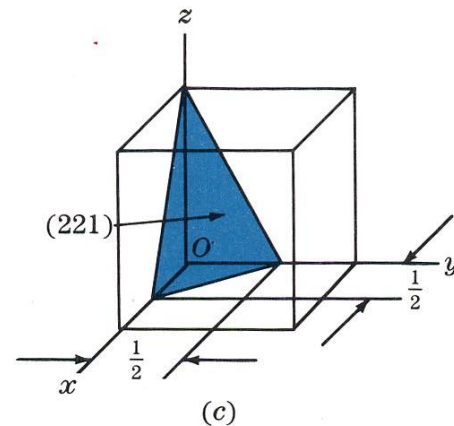
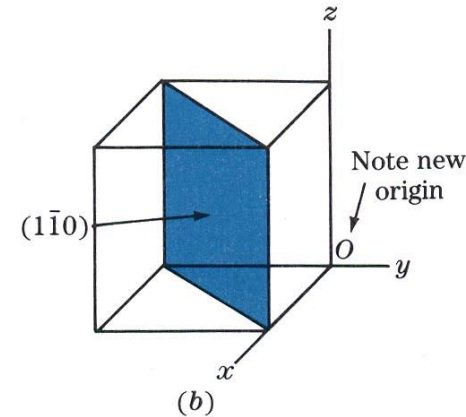
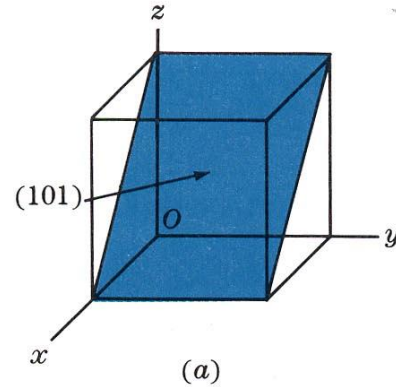
Ex. 7 ให้เขียนระนาบของผลึก ในUnit Cell ต่อไปนี้

(a) $(1\ 0\ 1)$

(b) $(1\ \bar{1}\ 0)$

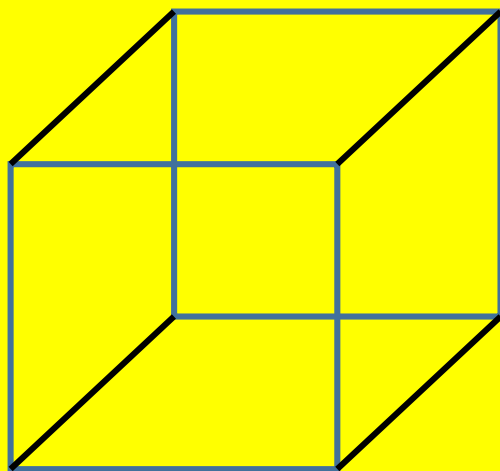
(c) $(2\ 2\ 1)$

(d) $(1\ 1\ 0)$ และเขียน
พิกัดอะตอมที่ระนาบ $(1\ 1\ 0)$ ตัดผ่านจุดศูนย์กลาง
อะตอม

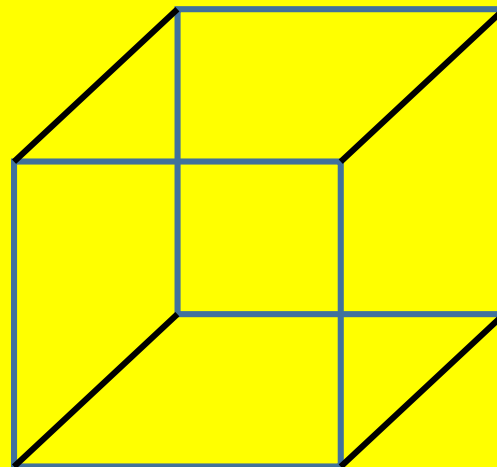


(101)

ระนาบ(hkl)

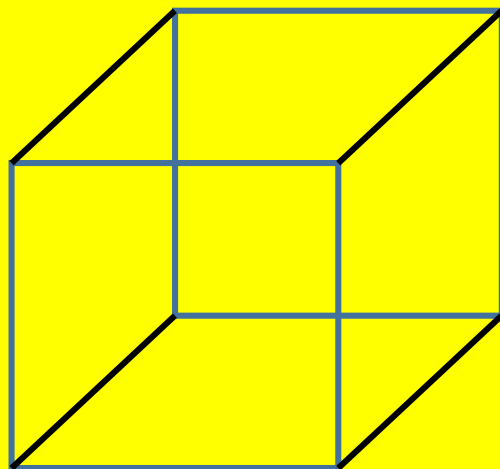


($\bar{1}02$)

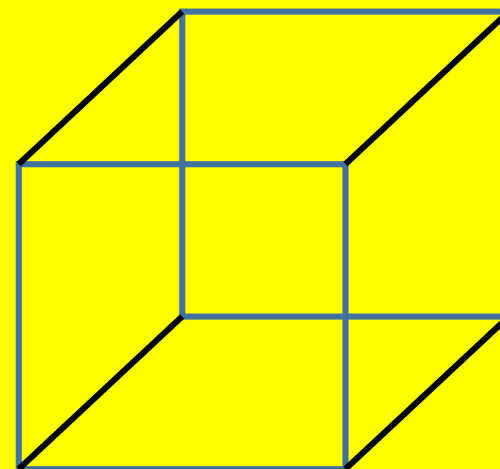


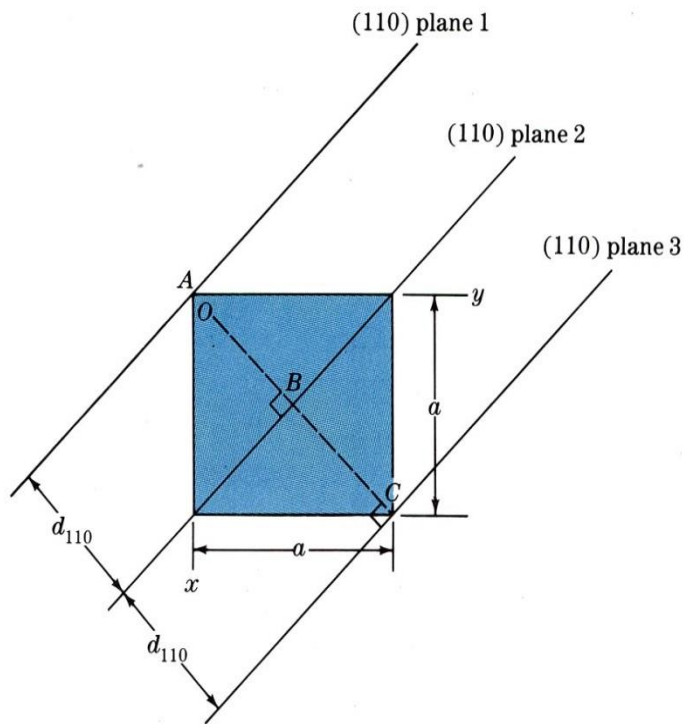
[123]

ทิศทาง [*UVW*]



[$\bar{2}01$]





* ในระบบลูกบาศก์ ดัชนีทิศทางจะตั้งฉากกับระนาบเมื่อตัวเลขที่แสดงดัชนีทิศทางเหมือนกันกับดัชนีมิลเลอร์ของระนาบ เช่น ทิศทาง $[1\ 1\ 0]$ จะตั้งฉากกับระนาบ $(1\ 1\ 0)$

* ระยะห่างระหว่างระนาบที่ขนานกันและอยู่ติดกัน

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

Ex. ทองแดงมีโครงสร้างผลึกแบบ *FCC* ค่า *lattice constant* เท่ากับ 0.361 nm ให้หา ระยะห่างระหว่างระนาบ d_{220}

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

$$d_{220} = \frac{0.361 \text{ nm}}{\sqrt{2^2 + 2^2 + 0^2}} = 0.128 \text{ nm} \quad \blacksquare$$