

การทดลองที่ 4

เรื่อง โครงสร้างผลึก

ทำการทดลอง วันพฤหัสบดี ที่ 16 เดือน กันยายน พ.ศ. 2564 เวลา 9:00 / บ่าย
ชื่อ ปณณวัฒน์ สุระเกียรติถาวร เลขประจำตัว 642106821 กลุ่มที่ 7 ลำดับที่ 42

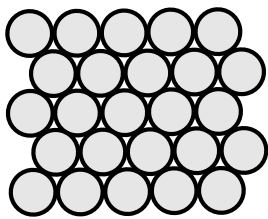
ตอนที่ 1 การจัดเรียงอะตอมในโครงสร้างผลึก

ก. การเปรียบเทียบการจัดเรียงอะตอม

	Closest packing	Simple cubic
• เลขโคออร์ดิเนชัน	6	4
• Packing efficiency	60.46%	52.36%
• เปอร์เซ็นต์ช่องว่างของการจัดเรียงอนุภาคชั้นเดียว	39.54%	47.64%
• ชนิดของช่องว่างที่เกิดขึ้นจากการจัดเรียงอนุภาค 2 ชั้น	Octahedral holes , tetrahedral holes	cubic holes

แสดงวิธีการคำนวณ packing efficiency และเปอร์เซ็นต์ช่องว่างของการจัดเรียงอนุภาคชั้นเดียว

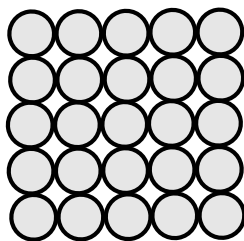
• โครงสร้างแบบ closest packing



วาดรูปประกอบ

$$\begin{aligned} \text{ปริมาตรลูกปิงปอง 1 ลูก (X)} &= \frac{4}{3} \pi r^3 \text{ cm}^3 \\ \text{ปริมาตรแท่งสี่เหลี่ยม ABCD (Y)} &= 4\sqrt{3} r^2 \text{ cm}^3 \\ \text{Packing efficiency } \left(\frac{X}{Y} \times 100 \right) &= 60.46 \% \\ \text{เปอร์เซ็นต์ช่องว่าง} &= 39.54 \% \end{aligned}$$

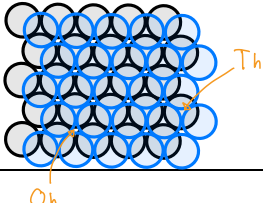
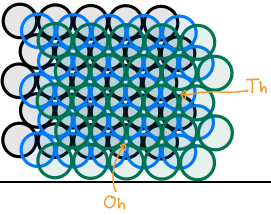
• โครงสร้างแบบ simple cubic



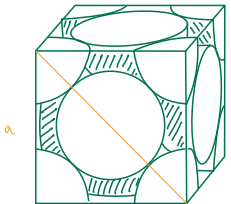
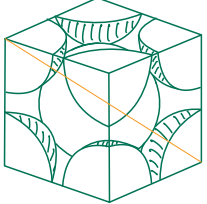
วาดรูปประกอบ

$$\begin{aligned} \text{ปริมาตรลูกปิงปอง 1 ลูก (X)} &= \frac{4}{3} \pi r^3 \text{ cm}^3 \\ \text{ปริมาตรแท่งสี่เหลี่ยม ABCD (Y)} &= 8r^2 \text{ cm}^3 \\ \text{Packing efficiency } \left(\frac{X}{Y} \times 100 \right) &= 52.36 \% \\ \text{เปอร์เซ็นต์ช่องว่าง} &= 47.64 \% \end{aligned}$$

ข. การเปรียบเทียบโครงสร้างผลึกแบบ closest packing

	Hexagonal closest packing	Face-centred cubic packing
<ul style="list-style-type: none"> การเรียงลูกปิงปองตามลำดับชั้นแบบ... ลูกปิงปองในชั้นที่ 1 จะตรงกับชั้นที่... จำนวนช่องออกตะฮีดรัลต่ออะตอมกลาง จำนวนช่องเททระฮีดรัลต่ออะตอมกลาง เลขโคออร์ดิเนชัน วาดภาพการจัดเรียงของช่องเททระฮีดรัลและช่องออกตะฮีดรัลรอบอะตอมกลางใน 2 มิติ 	<p>ABA₂BA₂...</p> <p>3</p> $\frac{6}{6} = 1$ $\frac{8}{4} = 2$ <p>12</p> 	<p>ABCA₂BCA₂BC...</p> <p>4</p> $\frac{6}{6} = 1$ $\frac{8}{4} = 2$ <p>12</p> 

ตอนที่ 2 โครงสร้างผลึกของโลหะที่มียูนิตเซลล์แบบ fcc และ bcc

	Face-centred cubic	Body-centred cubic
<ul style="list-style-type: none"> วาดแผนภาพยูนิตเซลล์และแสดงความสัมพันธ์ระหว่างด้านของยูนิตเซลล์ (a) กับรัศมีของอะตอม (r) เลขโคออร์ดิเนชัน จำนวนอะตอมในหนึ่งยูนิตเซลล์ (n) Packing efficiency เปอร์เซ็นต์ช่องว่าง 	 $a^2 + a^2 = (4r)^2$ $2a^2 = 16r^2$ $a^2 = 8r^2$ $a = \sqrt{8}r$ <p>12</p> <p>4</p> <p>74.05%</p> <p>25.95%</p>	 $a^2 + (\sqrt{2}a)^2 = (4r)^2$ $a^2 + 2a^2 = 16r^2$ $3a^2 = 16r^2$ $a^2 = \frac{16}{3}r^2$ $a = \frac{4\sqrt{3}}{3}r$ <p>8</p> <p>2</p> <p>68.02%</p> <p>31.98%</p>

การคำนวณหา packing efficiency ของโลหะที่มีโครงสร้างแบบ fcc

$$\begin{aligned}
 \text{ปริมาตรของอะตอมในหนึ่งยูนิตเซลล์} &= n \times \frac{4}{3} \pi r^3 \text{ cm}^3 \\
 &= 4 \times \frac{4}{3} \pi r^3 = \frac{16\pi r^3}{3} \text{ cm}^3 \\
 \text{ปริมาตรของยูนิตเซลล์ (a}^3\text{)} &= \frac{16\sqrt{2}}{3} r^3 \text{ cm}^3 \\
 \text{Packing efficiency} &= \left(\frac{16\pi r^3}{16\sqrt{2} r^3} \right) \times 100 = 74.05\% \\
 \text{เปอร์เซ็นต์ช่องว่าง} &= 25.95\%
 \end{aligned}$$

การคำนวณหา packing efficiency ของโลหะที่มีโครงสร้างแบบ bcc

$$\begin{aligned}
 \text{ปริมาตรของยูนิตเซลล์} &= \frac{64}{3\sqrt{3}} r^3 \text{ cm}^3 \\
 \text{Packing efficiency} &= 68.02\% \\
 \text{เปอร์เซ็นต์ช่องว่าง} &= 31.98\%
 \end{aligned}$$

ตอนที่ 3 โครงสร้างผลึกของสารประกอบ

	Rock salt NaCl	Zinc blende ZnS	Fluorite CaF ₂	Cesium chloride CsCl
• แบบโครงสร้างของไอออนลบ	FCC	FCC	อยู่ใน Th ทุกช่อง	SC
• แบบโครงสร้างของไอออนบวก	อยู่ใน Oh ทุกช่อง	อยู่ใน Th ครึ่งล่าง	FCC	อยู่ใน cubic hole
• เลขโคออร์ดิเนชันของไอออนบวก : ไอออนลบ	6:6	4:4	8:4	8:8
• จำนวนไอออนบวก : ไอออนลบในหนึ่งยูนิตเซลล์	4:4	4:4	4:8	1:1
• อัตราส่วนอย่างง่ายของไอออนบวก : ไอออนลบ	1:1	1:1	1:2	1:1
• จำนวนหน่วยสูตรในหนึ่งยูนิตเซลล์ (n)	4	4	4	1

ตอบคำถามท้ายการทดลอง

1. คำนวณความหนาแน่นผลึกของสารประกอบ NaCl และ CsCl ที่มีหน่วยเซลล์แบบลูกบาศก์ยาว 5.64 และ 4.11 Å ตามลำดับ (มวลอะตอม Na = 22.99, Cl = 35.45, Cs = 132.90)

- NaCl

$$\rho = \frac{nM}{N_A V} : \frac{4 \text{ atom} \times (22.99 + 35.45) \frac{\text{g}}{\text{mol}}}{6.02 \times 10^{23} \text{ atom/mol} \times (5.64 \times 10^{-8})^3 \text{ cm}^3} \approx 2.16 \text{ g/cm}^3$$

- CsCl

$$\rho = \frac{nM}{N_A V} : \frac{1 \text{ atom} \times (132.90 + 35.45) \frac{\text{g}}{\text{mol}}}{6.02 \times 10^{23} \text{ atom/mol} \times (4.11 \times 10^{-8})^3 \text{ cm}^3} \approx 4.05 \text{ g/cm}^3$$

คำถามข้อ 2-4 นิสิตควรใช้การสืบค้นข้อมูลทางอินเทอร์เน็ตในการหาคำตอบ

2. โลหะมีตระกูลและมีค่า (noble and precious metals) ชอบที่จะมีโครงสร้างผลึกแบบใด

เพราะเหตุใด... โครงสร้างแบบ closest packing โดยที่ Cu, Ag, Au มีโครงสร้างแบบ fcc และ Pt, Pd, Rh, Ir มีโครงสร้างแบบ hcp เนื่องจากทั้ง 2 โครงสร้างนี้มีโครงสร้างสมมาตรสูง และมีเสถียรภาพในระบกกึ่งตัวนำ ซึ่งตรงกับสมบัติของ noble metals ที่มีพลังงานไอออไนเซชันสูง และเกิดปฏิกิริยาได้ยาก

3. นอกจากผลึกของโลหะและสารประกอบอนินทรีย์อย่างง่ายที่ศึกษาในการทดลองนี้ ให้ยกตัวอย่างผลึกของสารประกอบอื่นๆ อีก 2 ชนิดพร้อมระบุแรงยึดเหนี่ยวระหว่างโมเลกุลในผลึก

1 เพชร ผลึกโควาเลนต์อย่างง่าย covalent bond

2 น้ำแข็ง ผลึกโมเลกุล covalent bond

4. เทคนิคการทดลองอะไรที่ใช้ในการหาโครงสร้างผลึก อธิบายโดยย่อ

เทคนิค X-ray diffraction เป็นกรณีของ X-ray ไปที่ผลึกของสาร กระตุ้นระนาบของผลึกและกระเจิงออกมา

และนำข้อมูลที่ได้จากการแปรผันของ X-ray จะแสดงความสัมพันธ์ระหว่างความเข้มของ X-ray และมุมเลี้ยวเบน

ใช้ค่าฟังก์ชันเลี้ยวเบน ซึ่งแต่ละสารประกอบจะมีรูปแบบเลี้ยวเบนแตกต่างกัน สังเกตได้จากฟังก์ชันของกราฟเลี้ยวเบน สามารถหาตำแหน่งของโครงสร้างผลึกได้ โดยการนำค่าฟังก์ชันของโครงสร้าง