2109101
Engineering Materials

ครั้งที่ ๒

โครงสร้างผลึกของวัสดุ

(Crystal Structure)

โครงสร้างผลึก (crystal structure)

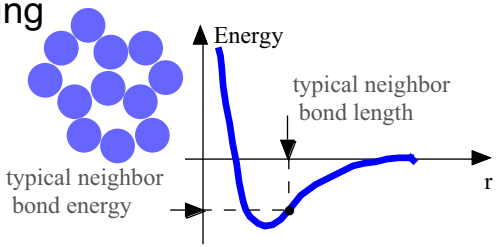
วัตถุประสงค์การศึกษา

- การจัดเรียงตัวของอะตอมในของแข็ง
- ลักษณะโครงสร้างผลึกของโลหะ
- ผลของการจัดเรียงตัวต่อความหนาแน่นของวัสดุ
- วัสดุผลึกเดี่ยวและวัสดุหลายผลึก (จะกล่าวถึงในบทเรียนครั้งต่อไป)
- ผลของผลึกต่อสมบัติของวัสดุ (จะกล่าวถึงในบทสมบัติทางกล)

การเรียงตัวของอะตอมในของแข็ง

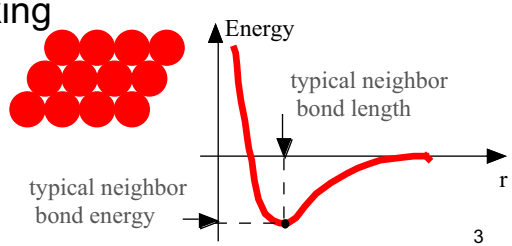
การเรียงตัวแบบ random packing

- เป็นการเรียงตัวที่ไม่แน่น
- ไม่เป็นสภาวะที่พลังงานต่ำสุด

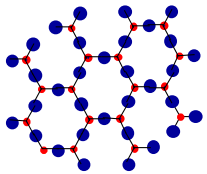


การเรียงตัวแบบ regular packing

- เป็นการเรียงตัวที่แน่น
- พลังงานต่ำที่สุด



<u>วัสดุที่มีโครงสร้างผลึก</u> คือ วัสดุที่เกิดจากอะตอมที่มีการจัดเรียงตัวอย่างเป็นระเบียบ มีแบบแผนของการเรียงตัวที่แน่นอนใน3มิติ พบในโลหะ เซรามิกส่วนใหญ่และพอลิเมอร์บางชนิด

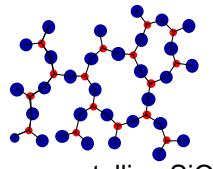


crystalline SiO_2

Adapted from Fig. 3.18(a), *Callister 6e.*

• Si ● Oxygen

<u>วัสดุที่ไม่มีโครงสร้างผลึก</u> คือ วัสดุที่อะตอมภายในไม่มีการจัดเรียงตัวอย่างมีแบบแผนที่แน่นอน อาจเกิดจากการเย็นตัวอย่างรวดเร็ว บางครั้งเรียกว่า อสัณฐาน หรือ amorphous



noncrystalline SiO_2

Adapted from Fig. 3.18(b), *Callister 6e.*

การเรียงตัวของอะตอมและหน่วยเซล

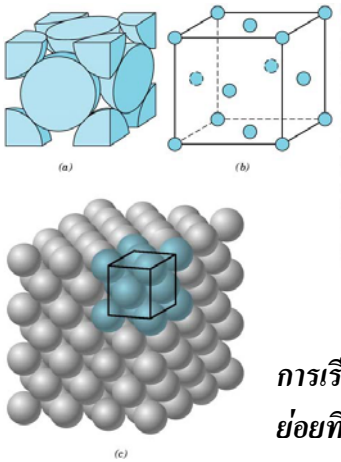


FIGURE 3.1 For the face-centered cubic crystal structure: (*a*) a hard sphere unit cell representation, (*b*) a reduced-sphere unit cell, and (*c*) an aggregate of many atoms. (Figure *c* adapted from W. G. Moffatt, G. W. Pearsall, and J. Wulff, *The Structure and Properties of Materials*, Vol. I, *Structure*, p. 51. Copyright © 1964 by John Wiley & Sons, New York. Reprinted by permission of John Wiley & Sons, Inc.)

- อะตอมเรียงตัวอย่างเป็นระเบียบ
- รูปล่างสุดแสดงการเรียงตัวของอะตอมเป็นโครงสร้างผลึกโดยให้ทรงกลมเป็นตัวแทนของอะตอม

การเรียงตัวที่เป็นแบบแผนนี้สามารถแบ่งเป็นหน่วยย่อยที่เล็กที่สุดซึ่งเรียงซ้ำๆกัน เรียกว่า หน่วยเซล (unit cell) รูปบนแสดงหน่วยเซลของผลึกในรูปล่าง

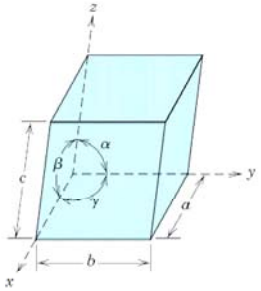
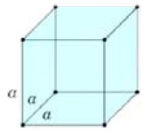
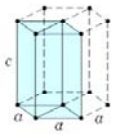
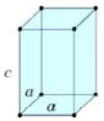
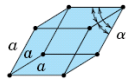
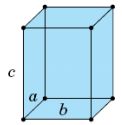
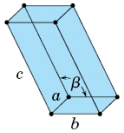
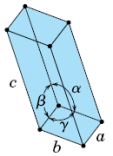
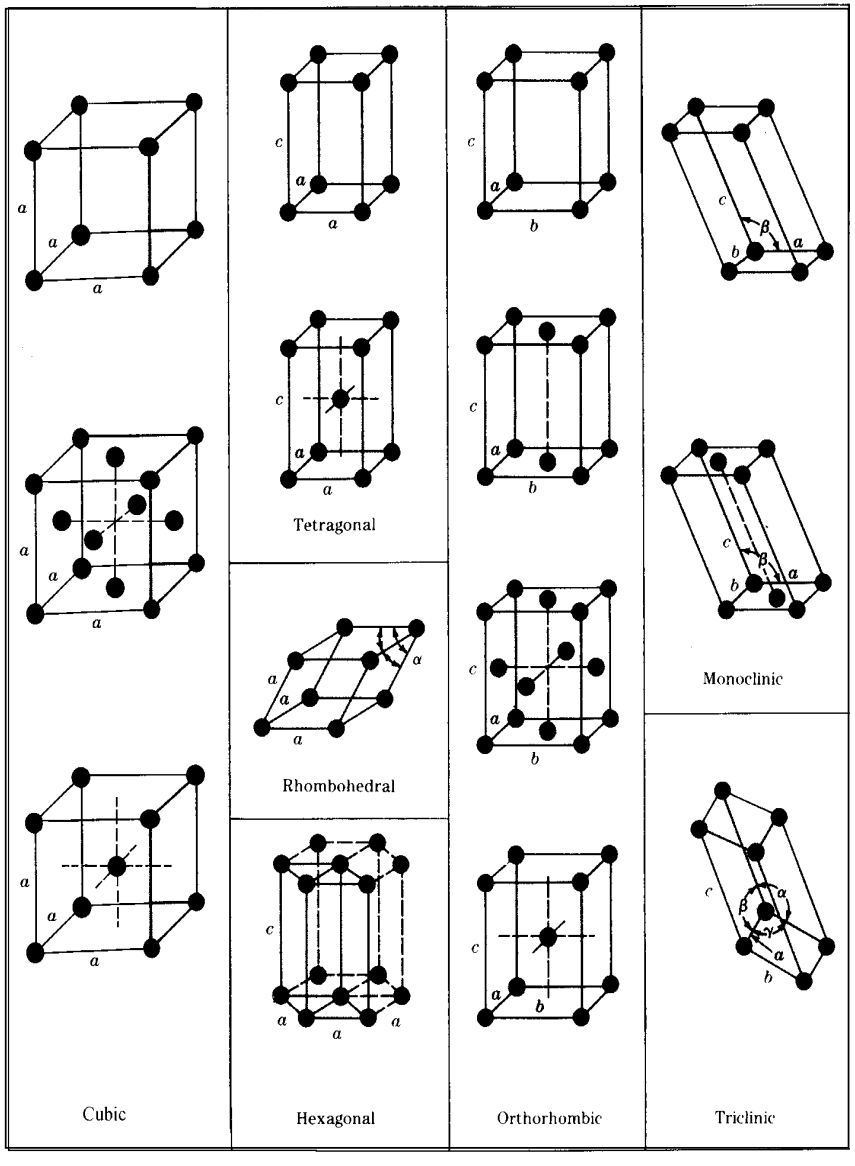


FIGURE 3.4 A unit cell with x, y, and z coordinate axes, showing axial lengths (a, b, and c) and interaxial angles (α, β, and γ).

Table 3.2 Lattice Parameter Relationships and Figures Showing Unit Cell Geometries for the Seven Crystal Systems

Crystal System	Axial Relationships	Interaxial Angles	Unit Cell Geometry
Cubic	$a = b = c$	$\alpha = \beta = \gamma = 90°$	
Hexagonal	$a = b \neq c$	$\alpha = \beta = 90°, \gamma = 120°$	
Tetragonal	$a = b \neq c$	$\alpha = \beta = \gamma = 90°$	

Rhombohedral	$a = b = c$	$\alpha = \beta = \gamma \neq 90°$	
Orthorhombic	$a \neq b \neq c$	$\alpha = \beta = \gamma = 90°$	
Monoclinic	$a \neq b \neq c$	$\alpha = \gamma = 90° \neq \beta$	
Triclinic	$a \neq b \neq c$	$\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90°$	



โครงสร้างผลึก ๗ ประเภท

1. Cubic
2. Tetragonal
3. Rhombohedral
4. Hexagonal
5. Orthorhombic
6. Monoclinic
7. Triclinic

สามารถแบ่งย่อยเป็น bravais lattice (บราเวส์ แลททิส) ได้ ๑๔ ประเภท

Atomic Packing Factor -- อัตราการบรรจุอะตอมต่อหนึ่งหน่วยเซล

$$APF = \frac{\text{Volume of atoms in unit cell*}}{\text{Volume of unit cell}}$$

*assume hard spheres

Coordination number จำนวนอะตอมข้างเคียงที่อยู่ติดกับอะตอมที่สนใจ

โครงสร้างผลึกของโลหะ -- แนวโน้มที่จะมีความหนาแน่นสูง เนื่องจาก

- มีอะตอมหลักเพียงชนิดเดียวทำให้รัศมีอะตอมเท่ากันหมด
- พันธะโลหะเป็นพันธะที่ไม่มีทิศทาง
- เมื่ออะตอมเรียงชิดติดกันให้มีความหนาแน่นสูงทำให้พลังงานมีค่าต่ำ

การเรียงตัวของอะตอมสำหรับโลหะ ส่วนมากจะเรียงตัวกันอย่างง่าย ซึ่งแตกต่างจากวัสดุพวกพอลิเมอร์และเซรามิกซึ่งจะมีโครงสร้างซับซ้อน

โครงสร้างผลึกอย่างง่ายที่พบมากในโลหะอาจแบ่งออกได้เป็น

- บอดีเซ็นเตอร์คิวบิก body-centered cubic, BCC
- เฟสเซ็นเตอร์คิวบิก face-centered cubic, FCC
- เฮกซะโกนอลโคลสแพก hexagonal close-packed, HCP

โครงสร้างผลึกแบบบอดีเซ็นเตอร์คิวบิก body-centered cubic, BCC

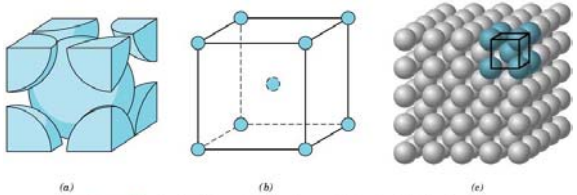
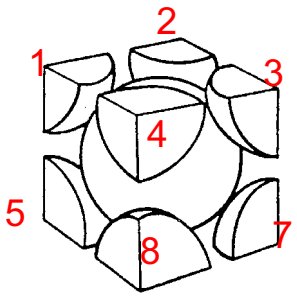


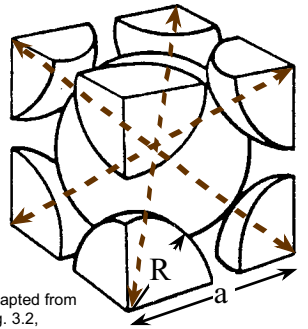
FIGURE 3.2 For the body-centered cubic crystal structure, (*a*) a hard sphere unit cell representation, (*b*) a reduced-sphere unit cell, and (*c*) an aggregate of many atoms. (Figure *c* from W. G. Moffatt, G. W. Pearsall, and J. Wulff, *The Structure and Properties of Materials*, Vol. I, *Structure*, p. 51. Copyright © 1964 by John Wiley & Sons, New York. Reprinted by permission of John Wiley & Sons, Inc.)



- Coordination # = 8

APF: BCC

- APF ของโครงสร้าง body-centered cubic = 0.68



Adapted from Fig. 3.2, *Callister 6e.*

Close-packed directions:
length = 4R
$= \sqrt{3}\,a$

Unit cell contains:
1 + 8 x 1/8
= 2 atoms/unit cell

$$APF = \frac{\text{atoms}}{\text{unit cell}} \cdot \frac{\text{volume}}{\text{atom}} \Big/ \frac{\text{volume}}{\text{unit cell}} = \frac{2 \cdot \frac{4}{3}\pi\left(\frac{\sqrt{3}a}{4}\right)^3}{a^3}$$

โครงสร้างผลึกแบบเฟสเซ็นเตอร์คิวบิก face-centered cubic, FCC

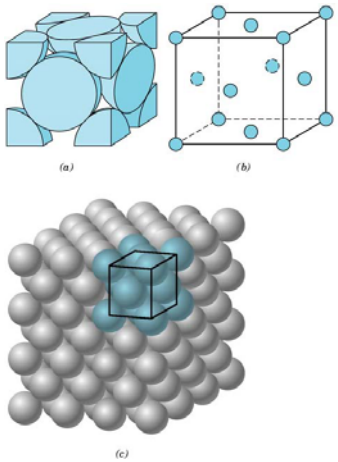
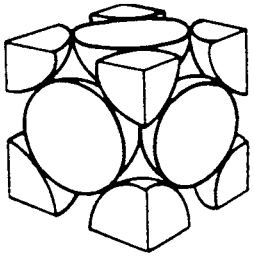


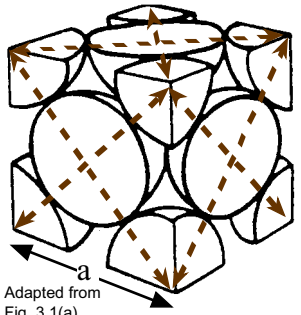
FIGURE 3.1 For the face-centered cubic crystal structure: (*a*) a hard sphere unit cell representation, (*b*) a reduced-sphere unit cell, and (*c*) an aggregate of many atoms. (Figure *c* adapted from W. G. Moffatt, G. W. Pearsall, and J. Wulff, *The Structure and Properties of Materials*, Vol. I, *Structure*, p. 51. Copyright © 1964 by John Wiley & Sons, New York. Reprinted by permission of John Wiley & Sons, Inc.)

- Coordination # = 12



APF: FCC

- APF for a face-centered cubic structure = 0.74



Adapted from Fig. 3.1(a), *Callister 6e.*

Close-packed directions:
length = 4R
$= \sqrt{2}\, a$

Unit cell contains:
6 x 1/2 + 8 x 1/8
= 4 atoms/unit cell

$$APF = \frac{\frac{\text{atoms}}{\text{unit cell}} \cdot \frac{\text{volume}}{\text{atom}}}{\frac{\text{volume}}{\text{unit cell}}} = \frac{4 \cdot \frac{4}{3}\pi\left(\frac{\sqrt{2}a}{4}\right)^3}{a^3}$$

โครงสร้างผลึกแบบเฮกซะโกนอลโคลสแพก
hexagonal close-packed, HCP

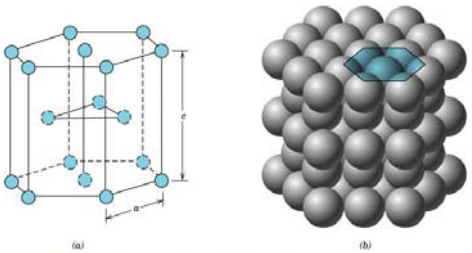


FIGURE 3.3 For the hexagonal close-packed crystal structure, (*a*) a reduced-sphere unit cell (*a* and *c* represent the short and long edge lengths, respectively), and (*b*) an aggregate of many atoms. (Figure *b* from W. G. Moffatt, G. W. Pearsall, and J. Wulff, *The Structure and Properties of Materials*, Vol. I, *Structure*, p. 51. Copyright © 1964 by John Wiley & Sons, New York. Reprinted by permission of John Wiley & Sons, Inc.)

- Coordination # = 12
- APF = 0.74

ระบบผลึกที่พบในโลหะส่วนใหญ่ (90%)

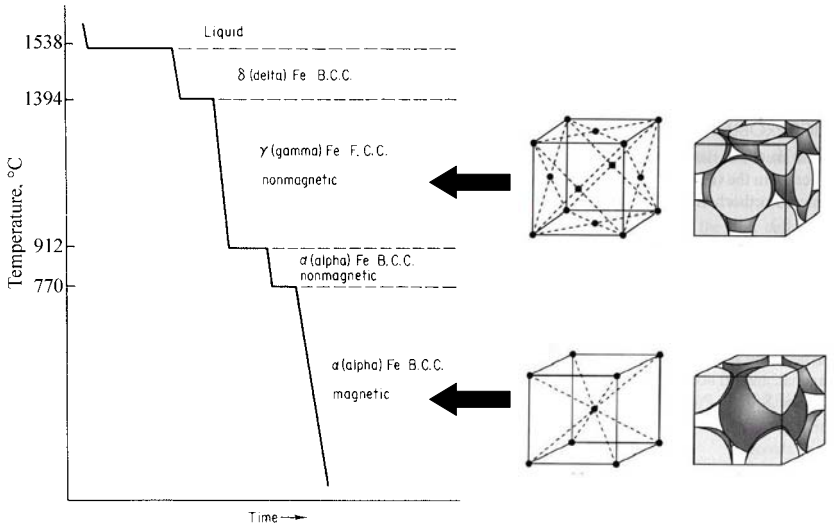
- BCC (Body-Centered Cubic)
  เช่น Fe (α), Mo, V, Cr
- FCC (Face-Centered Cubic)
  เช่น Fe (γ), Al, Cu, Ag, Au, Ni
- HCP (Hexagonal Close-Packed)
  เช่น Zn, Ti (α), Mg, Be

สภาพอัญรูป

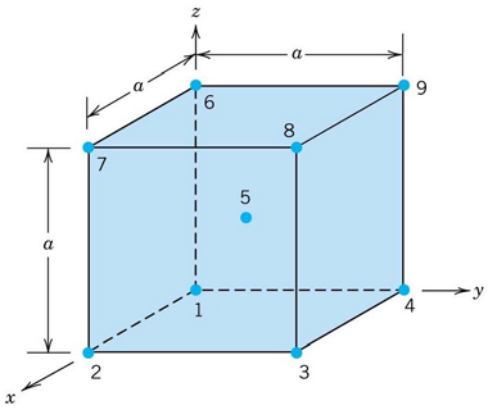
- สภาพอัญรูป
  (Polymorphism or Allotropy)
  คือ สภาพที่โลหะหนึ่ง มีระบบผลึกได้หลายระบบ ขึ้นกับอุณหภูมิ

เช่น

- Ti HCP→BCC 234°C
- Zr HCP→BCC 872°C
- Na BCC→HCP -233°C



การบอกตำแหน่งในโครงสร้างผลึกที่มีแกนหลัก 3 แกน



จุด **1** ตรงกับ **<000>**

จุด **2** ตรงกับ **<100>**

จุด **3** ตรงกับ **<110>**

จุด **4** ตรงกับ **<010>**

จุด **5** ตรงกับ **<½ ½ ½>**

จุด **6** ตรงกับ **<001>**

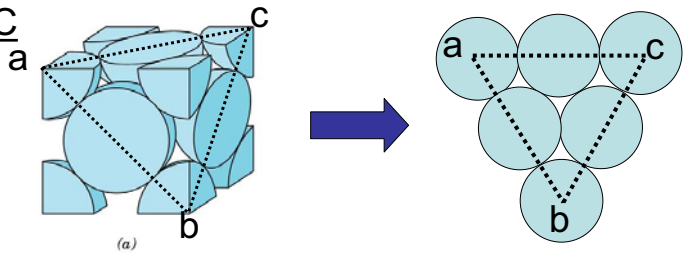
จุด **7** ตรงกับ **<101>**

จุด **8** ตรงกับ **<111>**

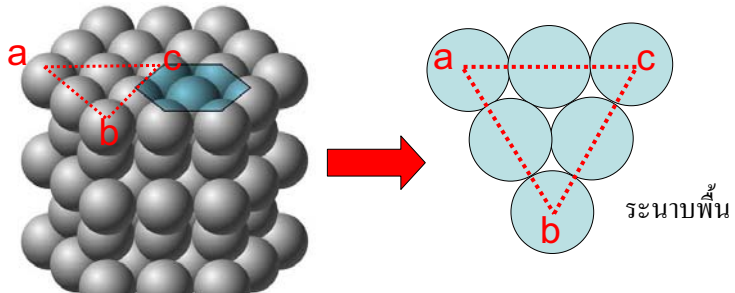
จุด **9** ตรงกับ **<011>**

ระนาบโคลสแพก (close packed plane) เกิดในโครงสร้างแบบFCCและHCP

FCC



HCP

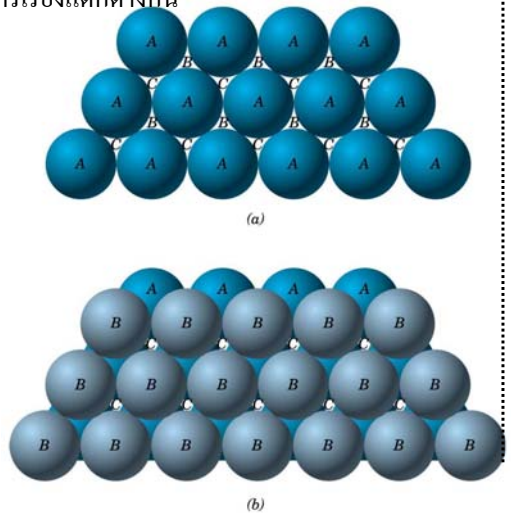


ระนาบพื้น

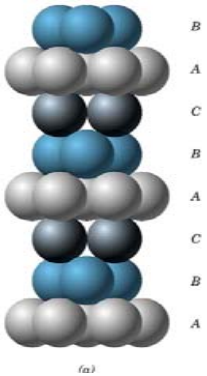
ระนาบโคลสแพกของ FCC และ HCP มีการจัดเรียงตัวอะตอมในสองมิติ (ระนาบ) ที่เหมือนกัน

การเรียงของระนาบโคลสแพก

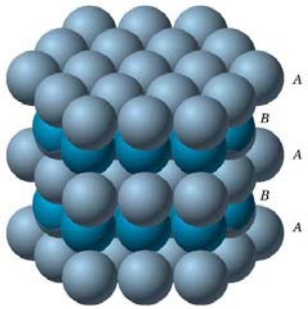
เมื่อชั้นแรกเรียงตัวตามตำแหน่ง A ชั้นที่2อาจเรียงตามตำแหน่งBหรือC ถ้าชั้นที่2เรียงตามตำแหน่ง B ชั้นที่3อาจเรียงได้ที่ตำแหน่ง AหรือCซึ่งจะให้การเรียงแตกต่างกัน



FCC



HCP



FCC

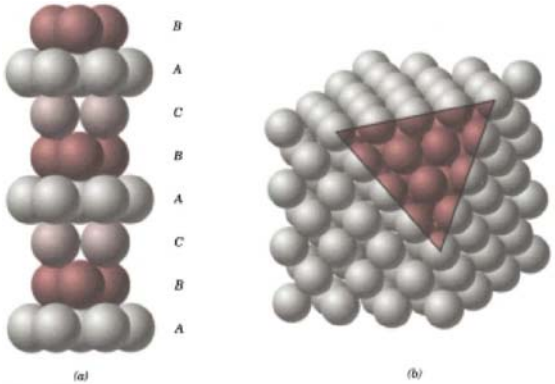


FIGURE 3.29 (*a*) Close-packed stacking sequence for face-centered cubic. (*b*) A corner has been removed to show the relation between the stacking of close-packed planes of atoms and the FCC crystal structure; the heavy triangle outlines a (111) plane. (Figure (*b*) from W. G. Moffatt, G. W. Pearsall, and J. Wulff, *The Structure and Properties of Materials*, Vol. I, *Structure*, p. 51. Copyright © 1964 by John Wiley & Sons, New York. Reprinted by permission of John Wiley & Sons, Inc.)

HCP

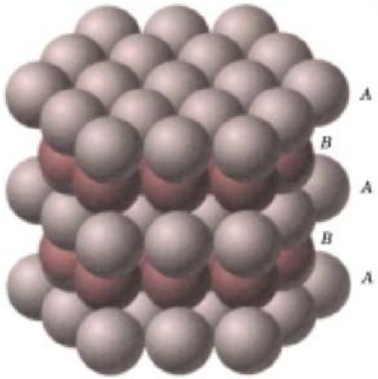


FIGURE 3.28 Close-packed plane stacking sequence for hexagonal close-packed. (Adapted from W. G. Moffatt, G. W. Pearsall and J. Wulff, *The Structure and Properties of Materials*, Vol. I, *Structure*, p. 51. Copyright © 1964 by John Wiley & Sons, New York. Reprinted by permission of John Wiley & Sons, Inc.)

THEORETICAL DENSITY, ρ

atoms/unit cell → n A ← Atomic weight (g/mol)

$$\rho = \frac{n A}{V_c N_A}$$

Volume/unit cell (cm^3/unit cell) → V_c

N_A ← Avogadro's number (6.023×10^{23} atoms/mol)

ตัวอย่าง ทองแดง
- โครงสร้างผลึก = FCC: 4 atoms/unit cell
- น้ำหนักอะตอม = 63.55 g/mol (1 amu = 1 g/mol)
- รัศมีอะตอม R = 0.128 nm (1 nm = 10^{-7} cm)

$V_c = a^3$; For FCC, $a = 4R/\sqrt{2}$; $V_c = 4.75 \times 10^{-23}\ cm^3$

Result: theoretical $\rho_{Cu} = 8.89\ g/cm^3$

Compare to actual: $\rho_{Cu} = 8.94\ g/cm^3$