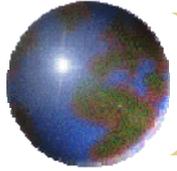


工程材料

第三章 結晶固體之結構

(The Structures of Crystalline Solid)



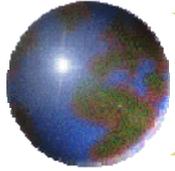
3.1 簡介(Introduction)

原子排列、結晶學（方向及平面）

晶體結構(Crystal Structures)

3.2 基本概念(Fundamental Concepts)

- 結晶（**crystalline**）材料的原子在大於原子間距離的範圍內重覆且週期的排列；也就是說**長程有序排列**。
- 在正常凝固情況下，所有的金屬、許多陶瓷材料以及某些特定的高分子材料將會形成**晶體結構**。非結晶材料（**noncrystalline**）則缺乏這種長程有序的排列。
- 結晶固體的某些性質取決於材料的**晶體結構**（**crystal structure**），亦即依原子、離子或分子在空間的排列是有規律地



- 當在描述晶體結構時，是以原子排列硬球模型，第一例是顯示於圖3.1c之一般基本金屬原子排列。可利用晶格

(lattice) 一詞來表示晶體結構的內涵，以此考量「晶格」(lattice) 意指具有原子位置 (或球心) 重疊之三度空間排列的點。

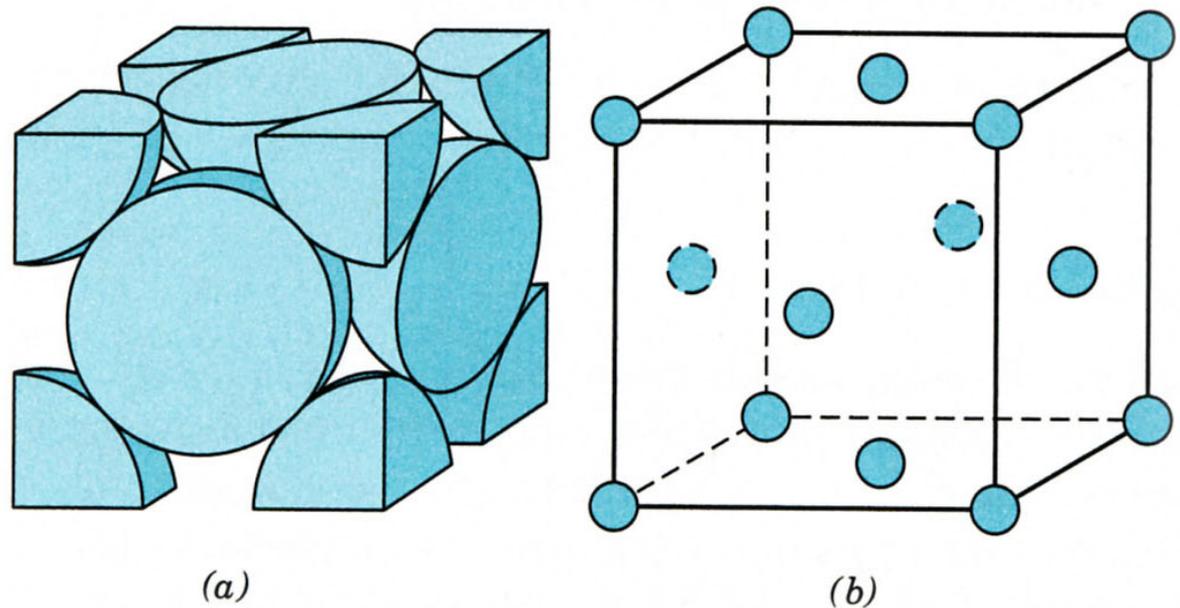
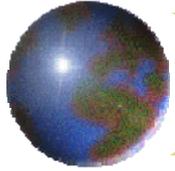
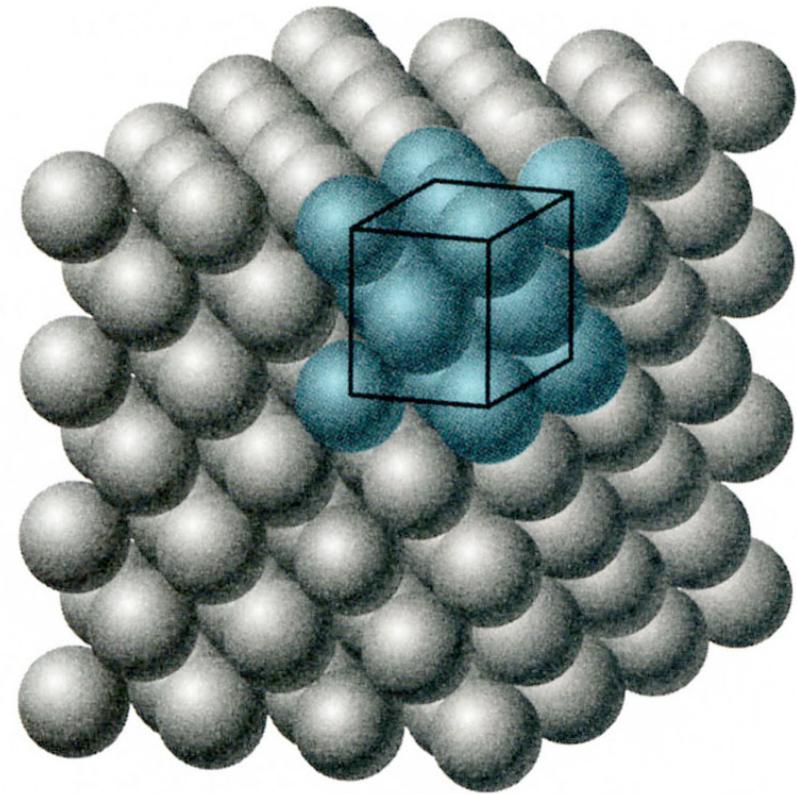


圖 3.1 面心立方晶體結構 (FCC) 之示意圖，(a)以硬球代表原子所呈現之單位晶胞 (b)以縮小硬球代表原子所呈現之單位晶胞 (c)許多原子原子集合



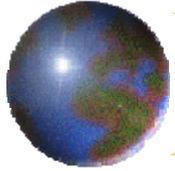
3.3 單位細胞(Unit Cells)

- 原子於結晶性固體中有規則排列，通常為了方便起見會將整個結構細分為更小的重覆單元，稱為單位晶胞 (unit cell)。
- 對大部分晶體結構而言，單位晶胞是具有三組平行面的平行六面體或稜柱體圖 3.1 (c)；單位晶胞是晶體結構的基本結構單元，且可藉由它的幾何形狀以及內部原子位置來定義晶體結構。



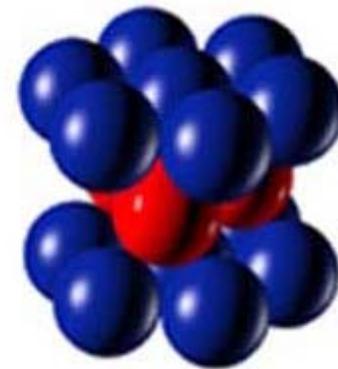
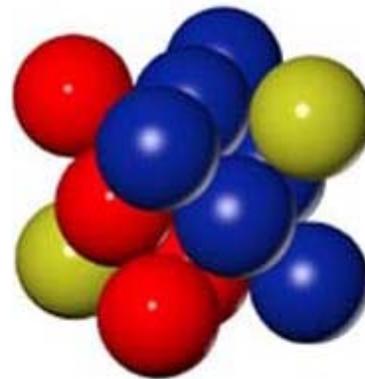
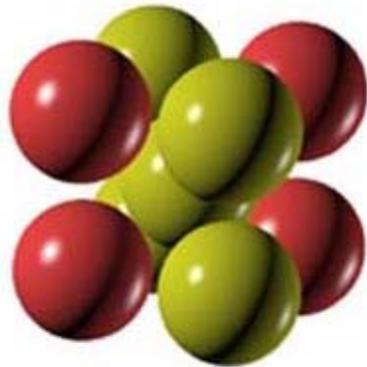
(c)

圖 3.1(c) 由許多原子組成的面心立方結構體



3.4 金屬之晶體構造 (Metallic Crystal structures)

- 材料原子的鍵結方式是金屬鍵，因此在本質上無方向性。所以最近相鄰原子的數目與位置就沒有限制。
- 大多數的金屬晶體結構具有相對大數目的最近相鄰原子和較緊密的原子堆積，對金屬而言使用硬球模型於晶體結構時，每一球代表一離子核心。
- 表 3.1 為數種金屬的原子半徑，三種最常見於一般金屬中且相對簡單的晶體結構為：面心立方、體心立方以及六方最密堆積。



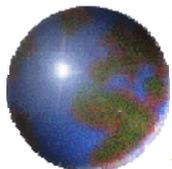
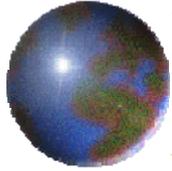


表 3.1 16 種金屬的原子半徑和晶體結構

金 屬	晶體結構 ^a	原子半徑 ^b (nm)	金 屬	晶體結構	原子半徑 (nm)
鋁	FCC	0.1431	鉬	BCC	0.1363
鎳	HCP	0.1490	鎳	FCC	0.1246
鉻	BCC	0.1249	鉑	FCC	0.1387
鈷	HCP	0.1253	銀	FCC	0.1445
銅	FCC	0.1278	鎢	BCC	0.1430
金	FCC	0.1442	鈦 (α)	HCP	0.1445
鐵 (α)	BCC	0.1241	鎢	BCC	0.1371
鉛	FCC	0.1750	鋅	HCP	0.1332

^a FCC = 面心立方；HCP = 六方緊密堆積；BCC = 體心立方

^b 一奈米 (nm) 等於 10^{-9} m；將奈米轉換成埃的單位 (Å) 需將奈米的值乘 10。



面心立方晶體結構(The Face-centered Cubic Crystal Structure)

- 其原子位於每一個角落和所有立方面中心，此結構稱為面心立方（face-centered cubic）（FCC）晶體結構。具有此種晶體結構的金屬有銅、鋁、銀和金（參看表3.1）。圖3.1a顯示FCC單位晶胞的硬球模型，

- 而在圖3.1b中則以小圓圈來表示原子中心，以提供對原子位置有一較好的透視。在圖3.1c中原子的集合體表示由許多FCC單位晶胞所組合而成晶體的一部份。

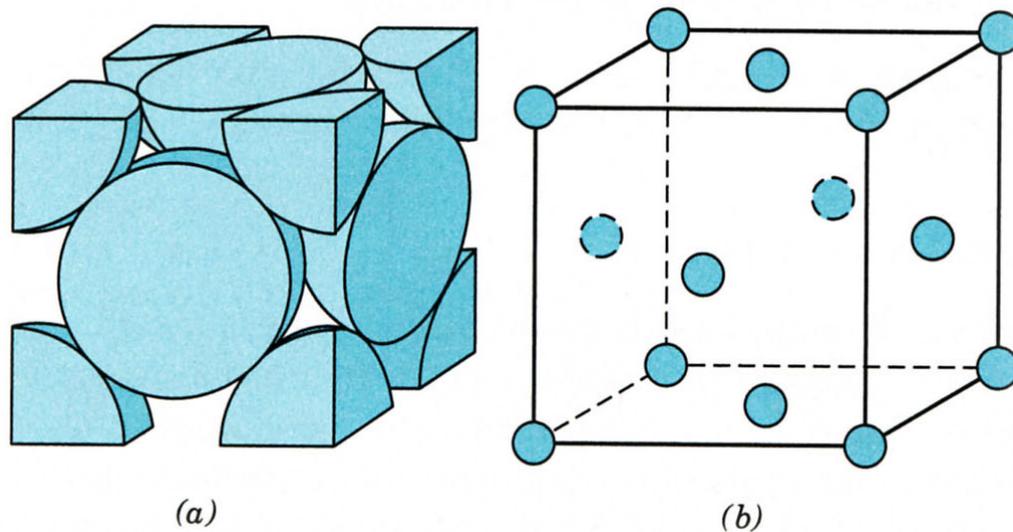
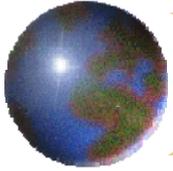


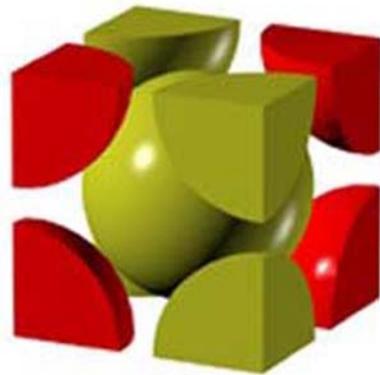
圖 3.1 面心立方晶體結構 (FCC) 之示意圖，(a)以硬球代表原子所呈現之單位晶胞 (b)以縮小硬球代表原子所呈現之單位晶胞



- 立方邊長 a 和原子半徑 R 間之關係為

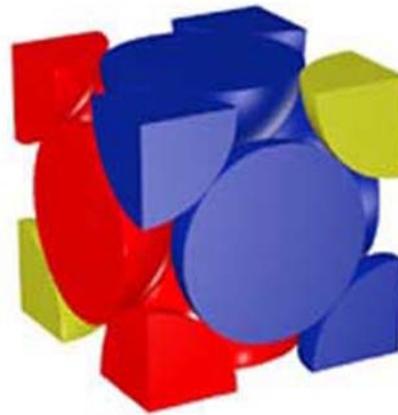
$$a = 2R\sqrt{2} \quad (3.1)$$

對 FCC 晶體而言，佔八分之一的 8 各角落原子與各佔二分之一的 6 個面原子，總共有四個原子被分配於已知的單位晶胞中。



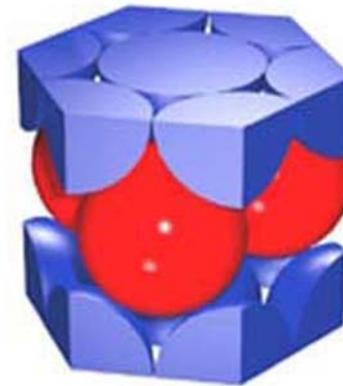
(a)

(a) BCC



(b)

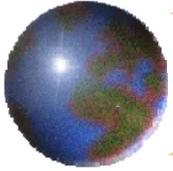
(b) FCC



(c)

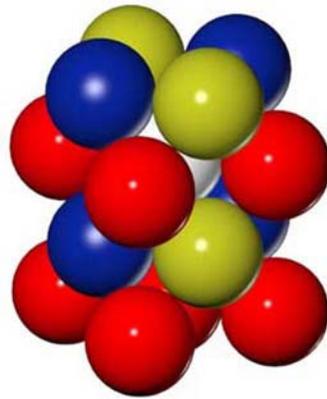
(c) HCP

- 晶體結構的兩個其他重要的特性是配位數(coordination number)和原子堆積因子(atomic packing factor)(APF)



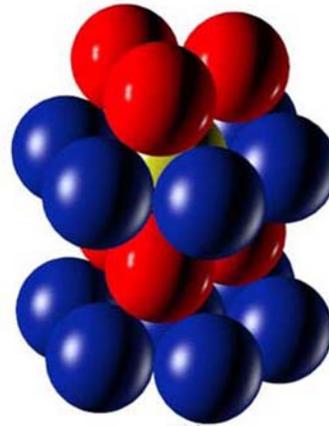
- 對金屬而言，每個原子具有相同鄰近或相接觸的原子數目，此即為配位數。對面心立方 FCC 晶體而言，配位數為12。

(a) FCC



(a)

(b) HCP

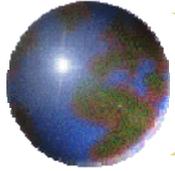


(b)

- 原子堆積因子 APF 是基於原子硬球模型，在單位晶胞中固態球所佔地體積分率。

$$APF = \frac{\text{單位晶胞中原子的體積}}{\text{單位晶胞總體積}} \quad (3.2)$$

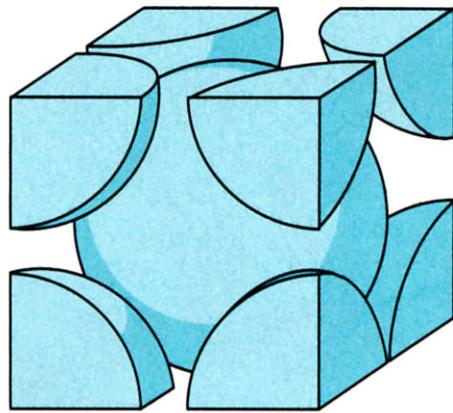
對FCC結構而言，其原子堆積因子為0.74



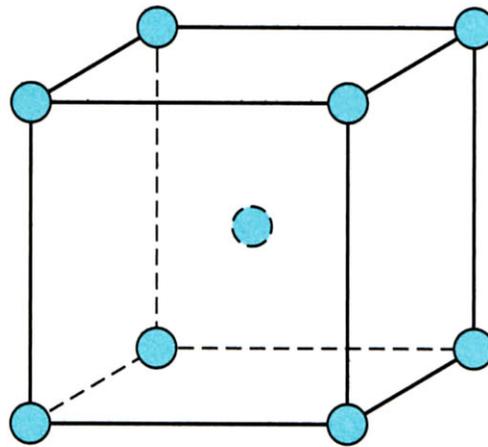
體心立方晶體結構

(The Body-centered Cubic Crystal Structure)

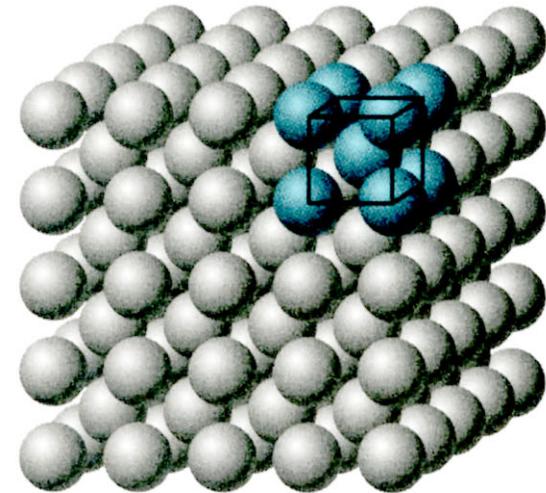
- 體心立方 (body-centered cubic) (BCC) 晶體結構。利用圓球集合體來表示此結構是於圖3.2c



(a)

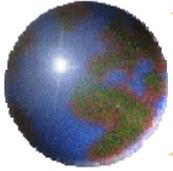


(b)



(c)

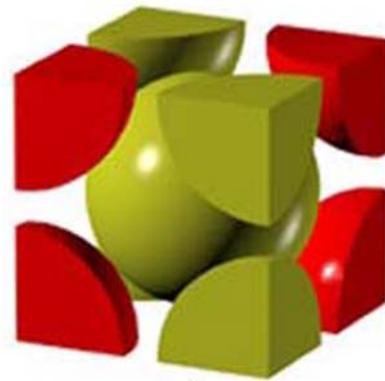
圖 3.2 體心立方晶體結構 (a) 以硬球代表原子所呈現之單位晶胞，(b) 以縮小硬球代表原子所呈現之單位晶胞，(c) 由許多原子組成體心立方結構體。



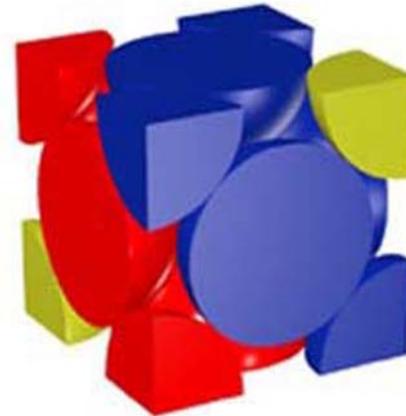
- 單位晶胞長度 a 和原子半徑 R 的關係為

$$a = \frac{4R}{\sqrt{3}} \quad (3.3)$$

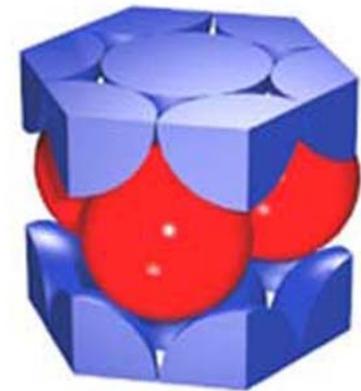
列於表3.1中鉻、鐵、鎢以及幾種其他金屬都顯示具有 BCC 結構。每一 BCC 單位晶胞體內有二個原子：BCC 晶體結構的配位數是 8



(a) BCC

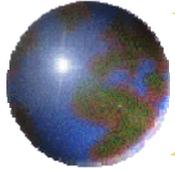


(b) FCC



(c) HCP

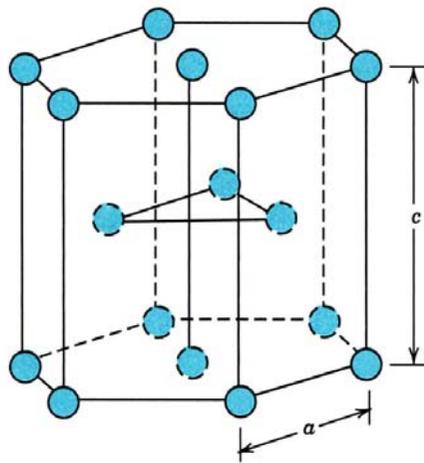
- 由於 BCC 的配位數低於 FCC，所以 BCC 的原子堆積因子也較低—0.68 對 0.74。



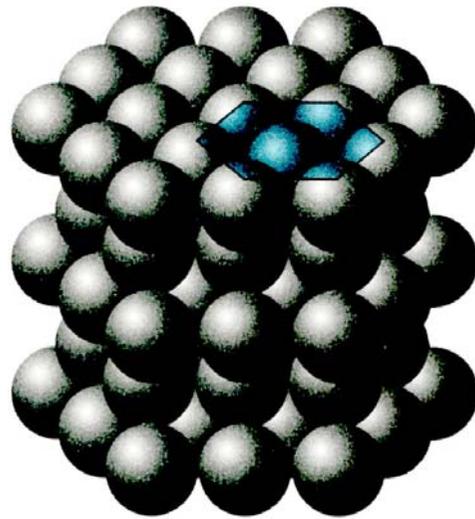
六方最密堆積晶體結構

(The Hexagonal Close-packed Crystal Structure)

- 六方最密堆積 (hexagonal close-packed (HCP)) ; 好幾個 HCP 單位晶胞的組合示圖 3.3b。在每個單位晶胞內包含有相當於六個原子。如果 a 與 c 分別代表圖 3.3a 中單位晶胞的短邊與長邊地尺寸，則 c/a 的比值應為 1.633。

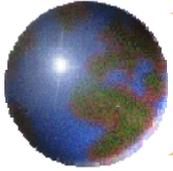


(a)

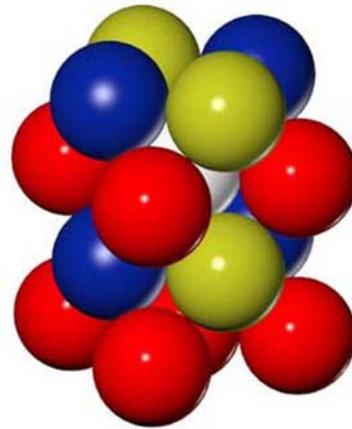


(b)

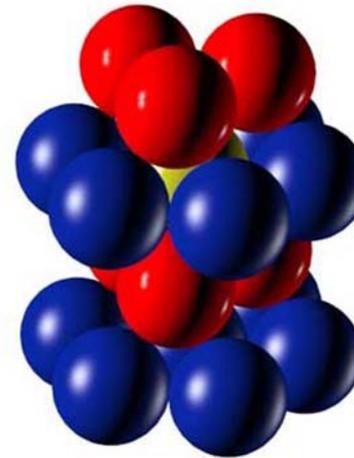
圖 3.3 六方緊密堆積晶體結構 (HCP) 之示意圖 (a) 以縮小硬球代表原子所呈現之單位晶胞，(b) 由許多原子所組成之 HCP 結構體。



- HCP 晶體結構的配位數與堆積因子與 FCC 相同；分別為 12 與 0.74。HCP 金屬包括鎳、鎂、鈦和鋅，某些金屬列於表 3.1。



(a) FCC



(b) HCP

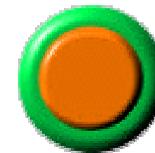
SC

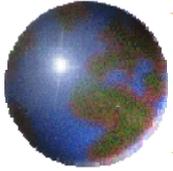


BCC



FCC



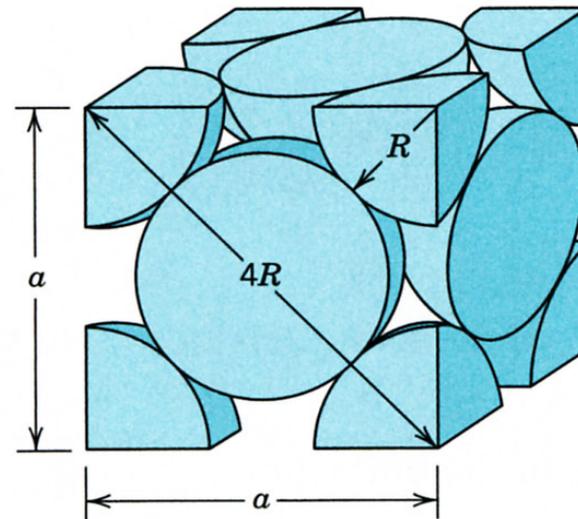


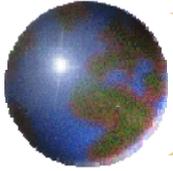
例題 3.1

依據原子半徑 R 來計算 FCC 單位晶胞的體積。

解：

FCC 單位晶胞之示意圖為





原子沿長度為 $4R$ 的面對角線相互接觸，由於單位晶胞是立方體，所以其體積為 a^3 ，其中 a 是晶胞的邊長，從面上的直角三角形得

$$a^2 + a^2 = (4R)^2$$

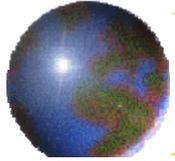
解出 a ，

$$a = 2R\sqrt{2} \quad (3.1)$$

FCC 單位晶胞的體積 V_C 可由

$$V_C = a^3 = (2R\sqrt{2})^3 = 16R^3\sqrt{2} \quad (3.4)$$

來計算。



例題 3.2

證實 FCC 晶體結構的原子堆積因子是 0.74。

解：

APF 的定義是在單位晶胞中固體球佔的體積分率或

$$\text{APF} = \frac{\text{球之總體積}}{\text{單位晶胞之總積}} = \frac{V_S}{V_C}$$

球和單位晶胞的總體積可利用原子半徑 R 來計算，球的體積是 $\frac{4}{3}\pi R^3$ ，且因每一 FCC 單位晶胞有 4 個原子，故 FCC 中球的總體積是

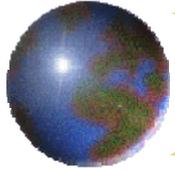
$$V_S = (4)\frac{4}{3}\pi R^3 = \frac{16}{3}\pi R^3$$

由例題 3.1 中知，單位晶胞總體積是

$$V_C = 16R^3\sqrt{2}$$

因此，原子堆積因子是

$$\text{APF} = \frac{V_S}{V_C} = \frac{(\frac{16}{3})\pi R^3}{16R^3\sqrt{2}} = 0.74$$



密度計算 (Density Computations – Metals)

金屬固體的晶體結構可由下式來計算它的理論密度

$$\rho = \frac{nA}{V_C N_A} \quad (3.5)$$

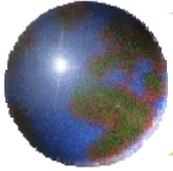
其中：

n = 每一單位晶胞中的原子數

A = 原子量

V_c = 單位晶胞體積

N_A = 亞佛加厥數 (6.023×10^{23} 原子/莫耳)



例題 3.3

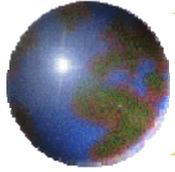
銅的原子半徑是 0.128 nm (1.28 Å)，晶體結構為 FCC，且原子量為 63.5 g/mol，計算它的理論密度並與其測量的密度比較。

解：

解此問題可使用式 (3.5)，因其晶體結構是 FCC，每單位晶胞的原子數目 n 是 4，此外，原子量 A_{Cu} 是 63.5 g/mol。FCC 的單位晶胞的體積 V_C 由例題 3.1 中得到為 $16R^3\sqrt{2}$ ，其中 R 是原子半徑為 0.128 nm。將各種參數代入式 (3.5) 中可得

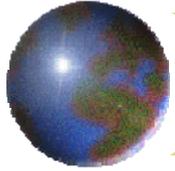
$$\begin{aligned}\rho &= \frac{nA_{\text{Cu}}}{V_C N_A} = \frac{nA_{\text{Cu}}}{(16R^3\sqrt{2})N_A} \\ &= \frac{(4 \text{ 原子 / 單位晶胞})(63.5 \text{ 克 / 莫耳})}{[16\sqrt{2}(1.28 \times 10^{-8} \text{ cm})^3 / \text{單位晶胞}](6.023 \times 10^{23} \text{ 原子 / 莫耳})} \\ &= 8.89 \text{ g/cm}^3\end{aligned}$$

文獻上銅密度的值是 8.94 g/cm³，此與先前的結果非常相近。



3.6 多形體(Polymorphism)和同素異形體(Crystal Systems)

- 某些金屬和非金屬具有一種以上的晶體結構，這種現象稱為多形體。在基本固體中。這種現象稱為同素異形體。晶體的結構取決於溫度和外在的壓力。
- 碳：在一般環境條件下石墨是一穩定的多形體，而鑽石則必須在非常高壓下形成。
- 純鐵：在室溫下具有 BCC 的晶體結構，而在 912 °C 時則轉變成 FCC 的鐵。
- 大部分的多形體的變態通常都會伴隨密度和其他物理性質的變化

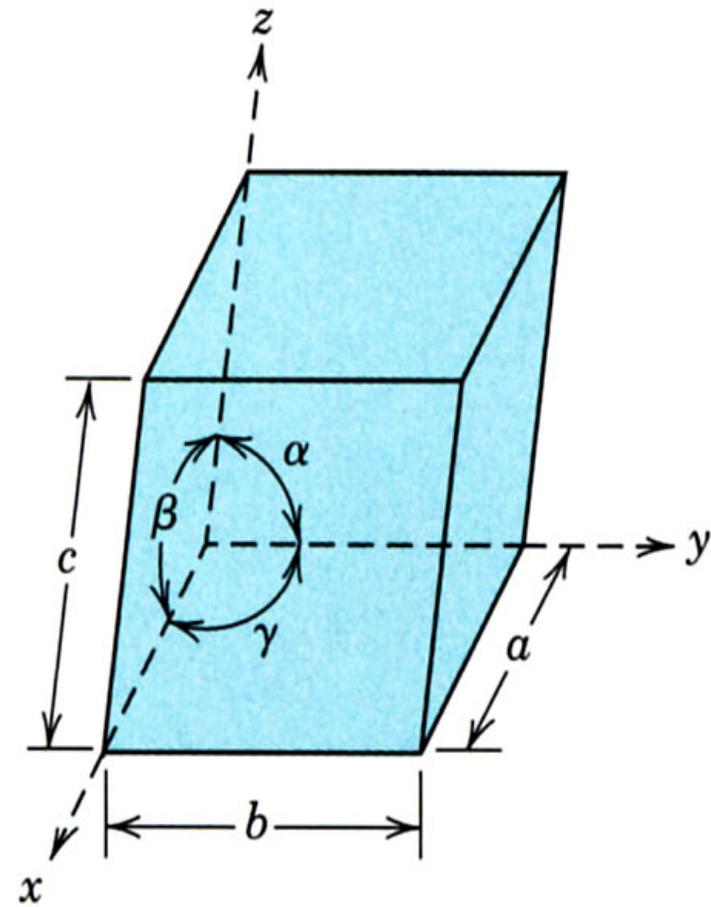


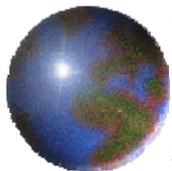
3.7 晶體系統

(Crystal Systems)

- 單位晶胞的幾何尺寸可依據六個參數來完全定義，分別標示於圖 3.14 中之三個邊長 a 、 b 和 c 以及三個軸的夾角 α 、 β 和 γ ，且有時候我們將其稱為**晶格參數** (lattice parameters)。

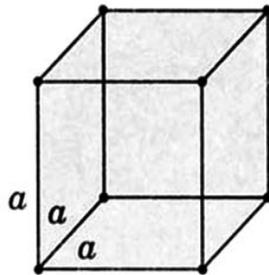
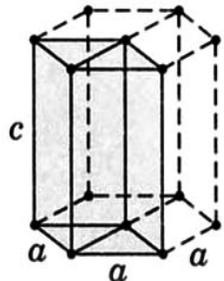
圖 3.4 單位晶胞各邊以 x ， y 和 z 座標軸表示，各邊邊長以 a ， b ， c 表示，邊與邊之間的夾角以 α ， β 和 γ 表示。





- 常見的七種晶體系統 (crystal system) 分別是立方、正方、六方、斜方、菱方、單斜和三斜。標示於表3.2中。

表 3.2 七個晶系的單位晶胞幾何學的顯示圖和晶格參數的關係

晶體系統	軸的關係	軸夾角	單位晶胞幾何學
立方	$a = b = c$	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	
六方	$a = b \neq c$	$\alpha = \beta = 90^\circ, \gamma = 120^\circ$	

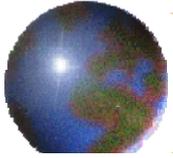
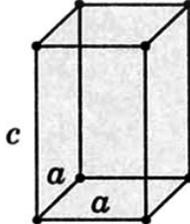
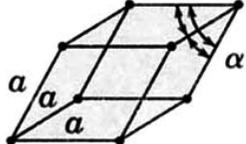
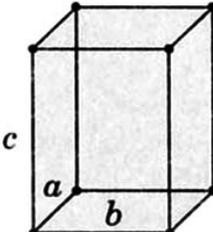


表 3.2 七個晶系的單位晶胞幾何學的顯示圖和晶格參數的關係 (續)

晶體系統	軸的關係	軸 夾 角	單位晶胞幾何學
正 方 (四方)	$a = b \neq c$	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	
菱 方	$a = b = c$	$\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$	
斜 方	$a \neq b \neq c$	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	

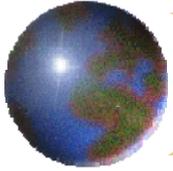
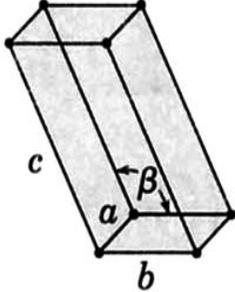
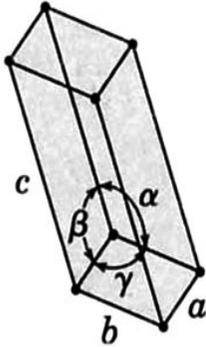
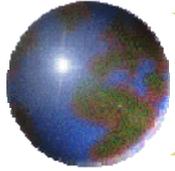


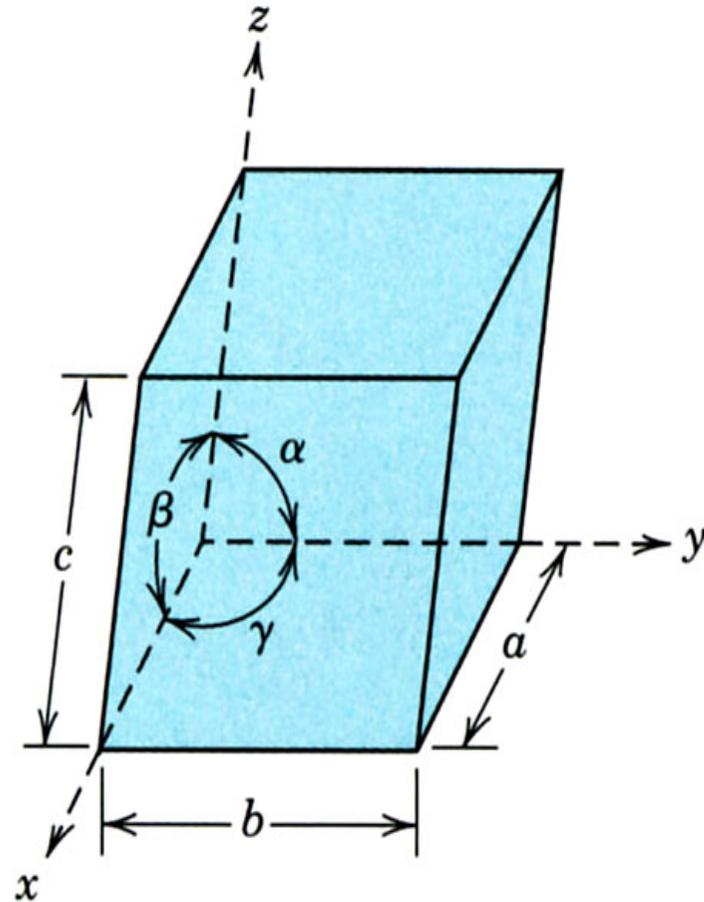
表 3.2 七個晶系的單位晶胞幾何學的顯示圖和晶格參數的關係 (續)

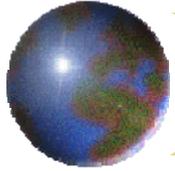
晶體系統	軸的關係	軸 夾 角	單位晶胞幾何學
單 斜	$a \neq b \neq c$	$\alpha = \gamma = 90^\circ \neq \beta$	
三 斜	$a \neq b \neq c$	$\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$	



結晶學方向與平面(Crystallographic directions and planes)

- 處理結晶材料時，通常需指明原子的某些特別的結晶學平面或結晶學方向
- 一般常用三個整數或指數來標示方向和平面，而決定數值的基礎是單位晶胞。
- 此單位晶胞的邊重合三個軸所組成的座標系統，如右圖所示





3.8 點座標 (POINT COORDINATES)

- 單位晶胞內任一點的位置可利用單位晶胞邊長(a, b, c)的分數座標值來標示。
- 利用一般座標 q, r, s 來標示 P 的位置，其中 q 是沿 x 軸 a 的分率長度， r 是沿 y 軸 b 的分率長度， s 亦同。 P 的位置可用小於或等於1的 q, r, s 的座標值來標示

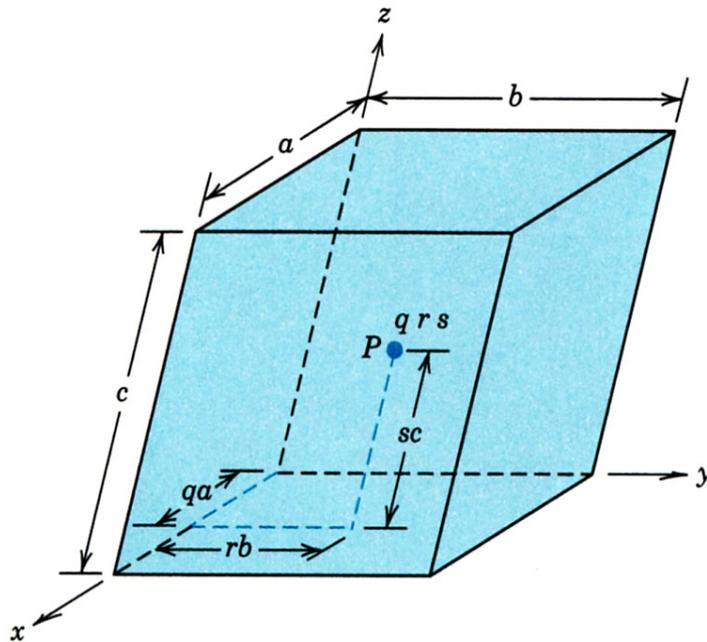
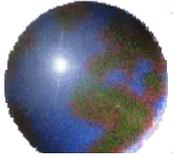
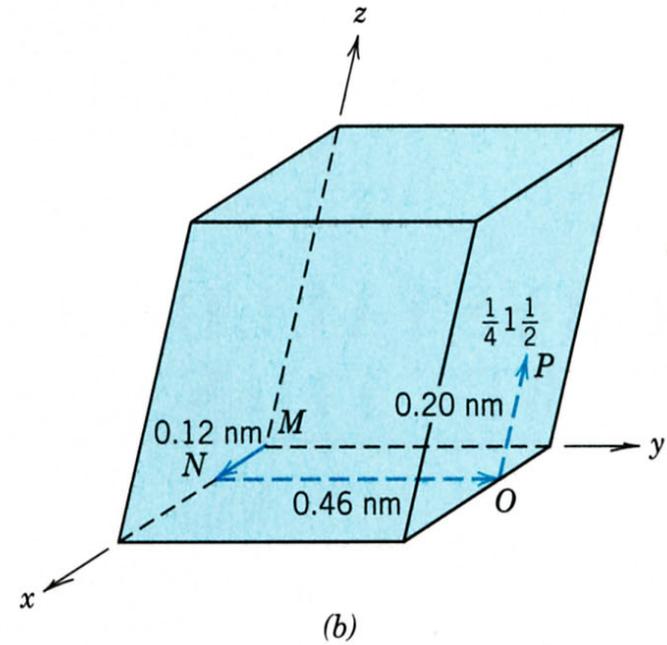
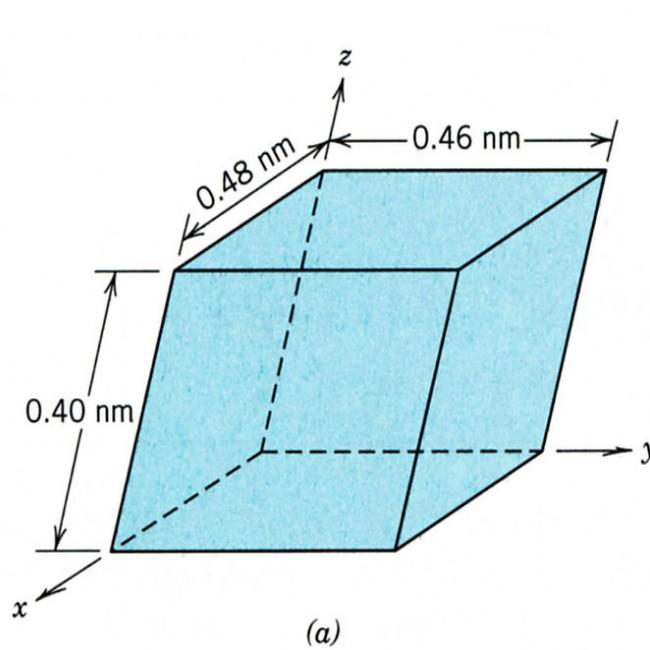


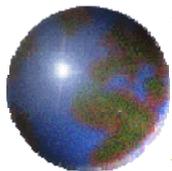
圖 3.5 單位晶胞內部 P 點的位置以一般座標 q 是沿 x 軸 a 的分率長度， r 是沿 y 軸 b 的分率長度， s 是沿 z 軸 c 的分率長度，其中 a, b, c 是單位晶胞的邊長。



例題 3.4

在 (a) 圖所示的單位晶胞中，找出具有座標 $\frac{1}{4}1\frac{1}{2}$ 點的位置。





解：

$$q = \frac{1}{4}, r = 1, s = \frac{1}{2}$$

$$qa = \frac{1}{4} \times 0.48 = 0.12 \text{ nm} , \text{ 由原點 } m \text{ 沿 } x \text{ 軸移動 } 0.12 \text{ nm (N)}$$

$$rb = 1 \times 0.46 = 0.46 \text{ nm} , \text{ 由 N 點沿 } y \text{ 軸移動 } 0.46 \text{ nm (O)}$$

$$sc = \frac{1}{2} \times 0.40 = 0.20 \text{ nm} , \text{ 由 O 點沿 } z \text{ 軸移動 } 0.20 \text{ nm (P)}$$

P 點即是 $(\frac{1}{4} | \frac{1}{2})$ 。

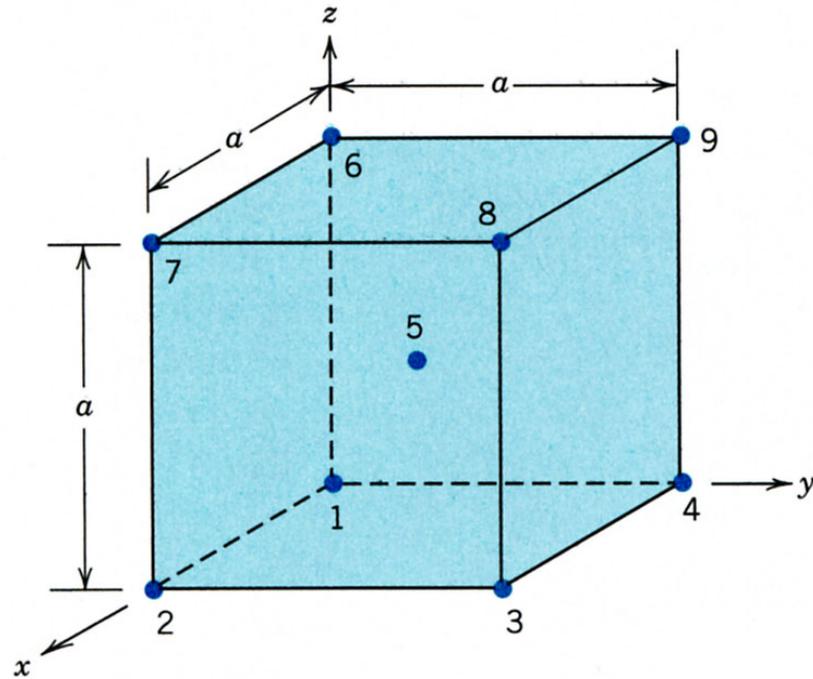


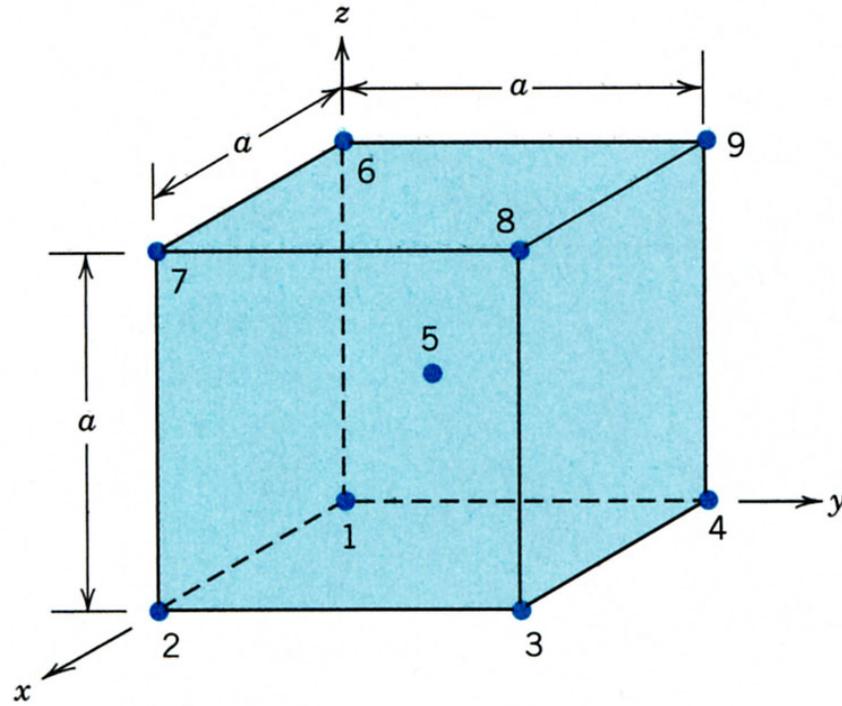
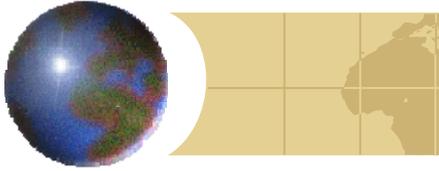
例題 3.5

對一 BCC 單位晶胞而言，標示所有原子位置的點座標。

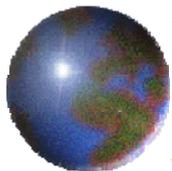
解：

對圖 3.2 的 BCC 單位晶胞而言，原子位置的座標相當於在單位晶胞中所有原子的中心位置——也就是說，8 個角隅原子與單一的中心原子。這些位置顯示（亦用數目顯示）在下圖中。



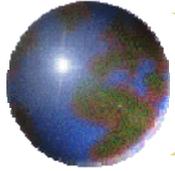


點的編號	長度分率			點座標
	x 軸	y 軸	z 軸	
1	0	0	0	0 0 0
2	1	0	0	1 0 0
3	1	1	0	1 1 0
4	0	1	0	0 1 0
5	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2} \frac{1}{2} \frac{1}{2}$



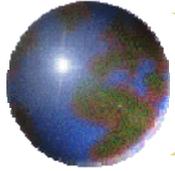
位置 1 的點座標是 $0\ 0\ 0$ ；此位置位於座標系統的原點，且其本身單位晶胞邊長沿 x, y 和 z 軸的分率分別是 $0a, 0a$ 和 $0a$ ，再者，對位置 2 而言，由於其位於單位晶胞沿 x 軸的一個單位邊長，它的分率邊長分別是 $a, 0a$ 和 $0a$ ，其產生出的點座標是 $1\ 0\ 0$ ，下表中表示出在單位晶胞中沿 x, y 和 z 軸的邊長分率，它們相當於上圖中 9 點的每一點的點座標。

點的編號	長度分率			點座標
	x 軸	y 軸	z 軸	
1	0	0	0	$0\ 0\ 0$
2	1	0	0	$1\ 0\ 0$
3	1	1	0	$1\ 1\ 0$
4	0	1	0	$0\ 1\ 0$
5	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\ \frac{1}{2}$
6	0	0	1	$0\ 0\ 1$
7	1	0	1	$1\ 0\ 1$
8	1	1	1	$1\ 1\ 1$
9	0	1	1	$0\ 1\ 1$



結晶學方向 (Crystallographic directions)

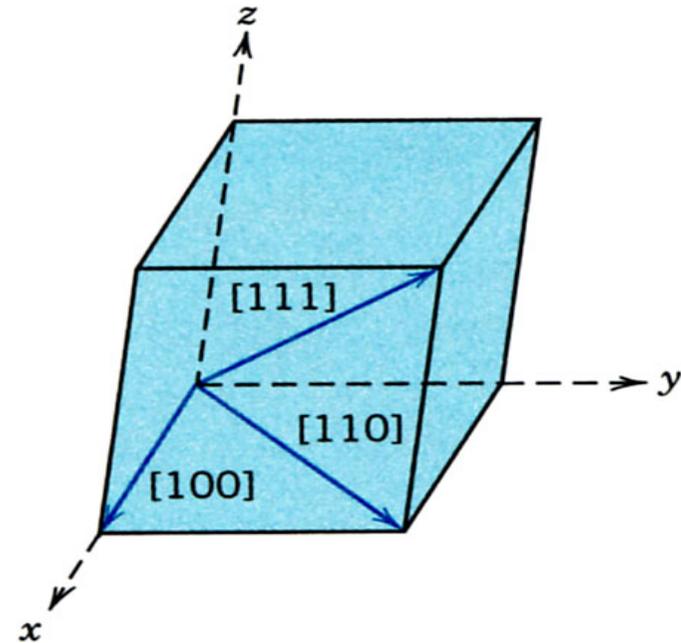
- 兩點間的線或一個向量，三個方向指數由下列步驟決定
 1. 利用一適當長度的向量使其置放通過座標系原點。
 2. 將向量投影在三軸上的長度決定出來，這是以單位晶胞邊長 a 、 b 和 c 為單為長度所量測。
 3. 將此三個數可乘或除以某一共同因子使其成為最小的整數值。
 4. 三個指標不必用逗點來分開，並將其置於中括弧中，如 $[uvw]$ 。

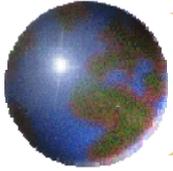


- 負指數在指數上方畫一橫來表示，又改變所有指數的符號將產生反平行方向 $[\bar{1}\bar{1}\bar{1}]$ 與 $[111]$ 方向相反。
- 常見方向有 $[100]$ 、 $[110]$ 和 $[111]$ 方向之如圖 3.6 單位晶胞所示

圖 3.6 單位晶胞方向有 $[100]$ 、 $[110]$ 和 $[111]$ 方向之示意圖

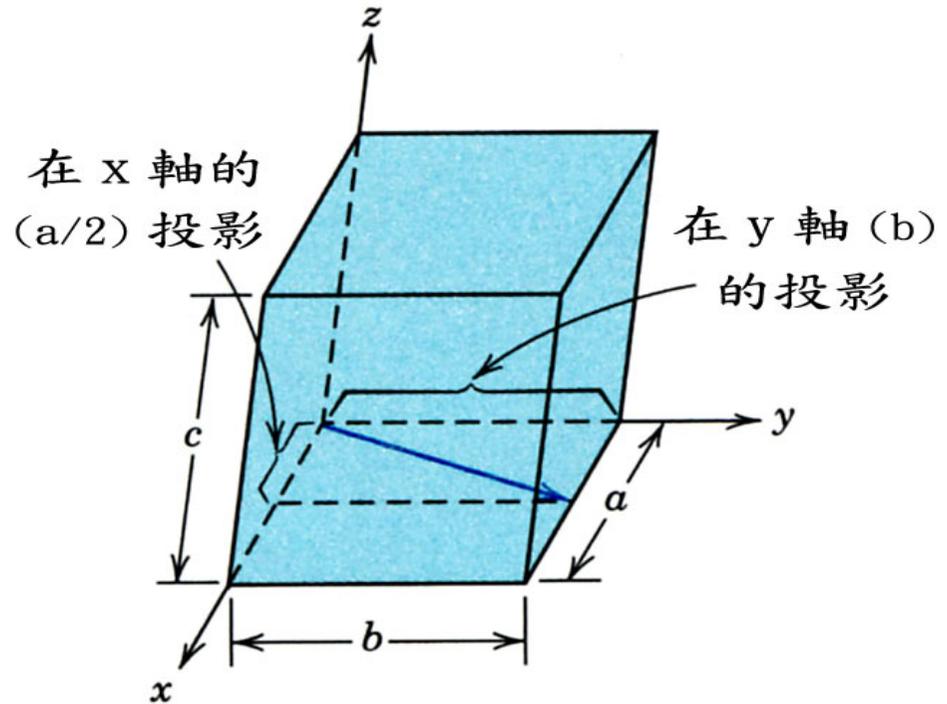
- 對某些晶體結構而言，具有不同指標的幾組不平行方向，實際上是對等的。例如，在立方晶體中： $[100]$ ， $[\bar{1}00]$ ， $[010]$ ， $[0\bar{1}0]$ ， $[001]$ ， $[00\bar{1}]$ 。將所有對等的方向集合在一起而形成一**家族 (family)**，如 $\langle 100 \rangle$ 。



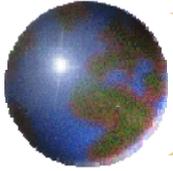


例題 3.6

決定示於下圖中方向的指數。



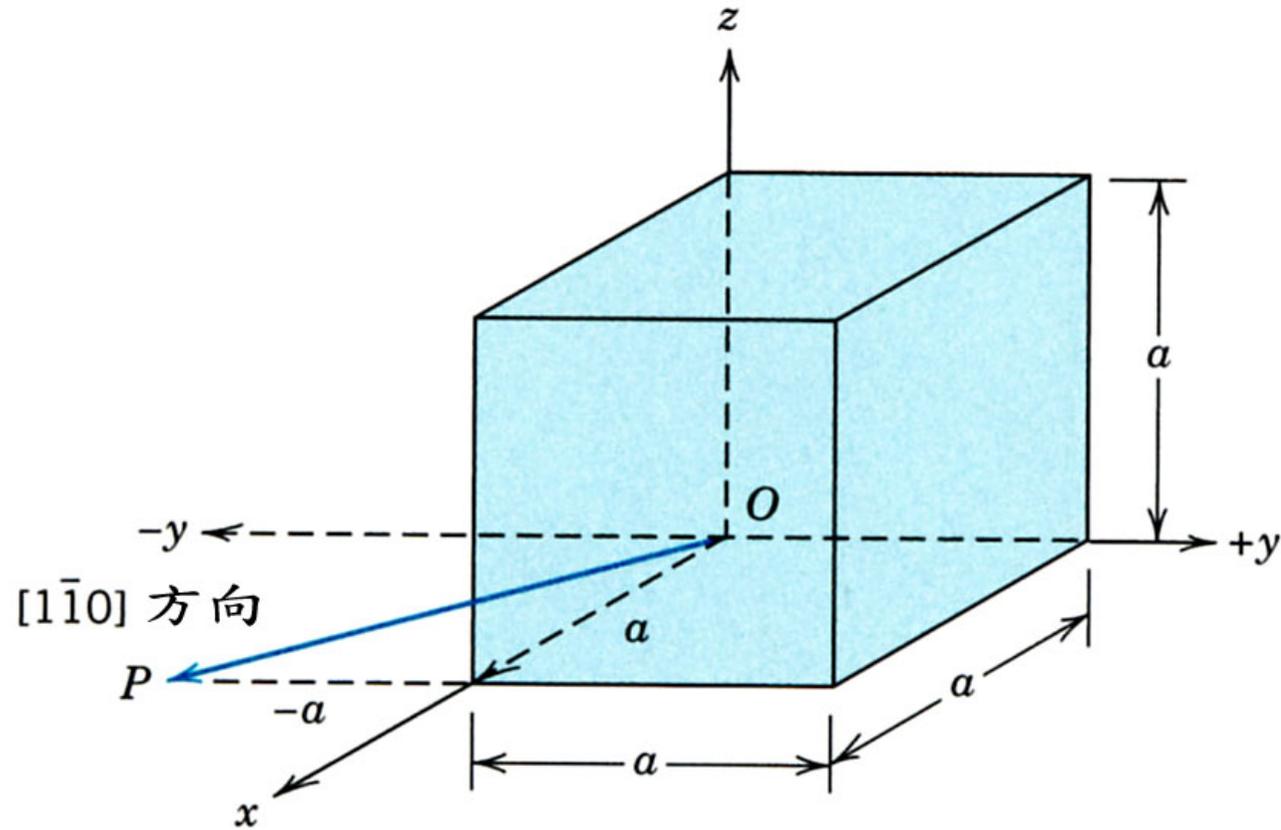
	x	y	z
投 影	$a/2$	b	$0c$
投影 (根據 a, b 和 c)	$\frac{1}{2}$	1	0
簡 化	1	2	0
圈起來		[120]	

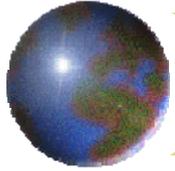


例題 3.7

在一立方晶胞中劃一 $[1\bar{1}0]$ 的方向。

解：

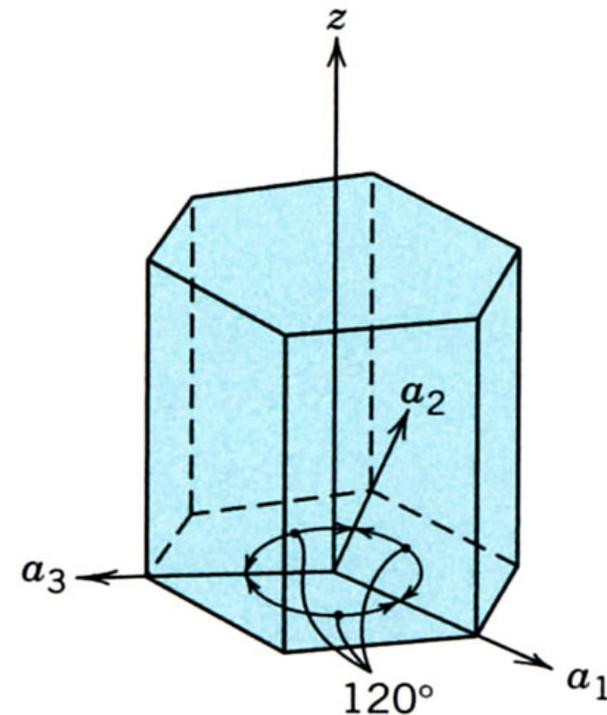


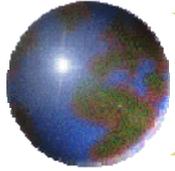


六方晶體 (Hexagonal Crystals)

- 利用如圖3.16所示之座標系統4軸或米勒－布拉維斯 (Miller-Bravais) 指標來解決，如圖 3.7所示，三個 a_1 , a_2 , 和 a_3 都在基面內，且彼此成 120° 角， z 軸則垂直於此基面，以4個指數來表示，如 $[\mu \nu t w]$ 。

圖 3.7 利用 4 軸或米勒 - 布拉維斯 (Miller-Bravais) 的指數來表達六方單位晶胞之座標系統。





- 將三個指數指標轉換成四個指標系統。

$$[\mu' \nu' w'] \rightarrow [\mu \nu t w]$$

可依據下列的公式來完成：

$$u = \frac{n}{3}(2u' - v') \quad (3.7a)$$

$$v = \frac{n}{3}(2v' - u') \quad (3.7b)$$

$$t = -(u + v) \quad (3.7c)$$

$$w = nw' \quad (3.7d)$$

n 是可以使 μ 、 ν 、 t 和 w 簡化成最小整數的因子。例如
[010] 方向變成 $[\bar{1}2\bar{1}0]$

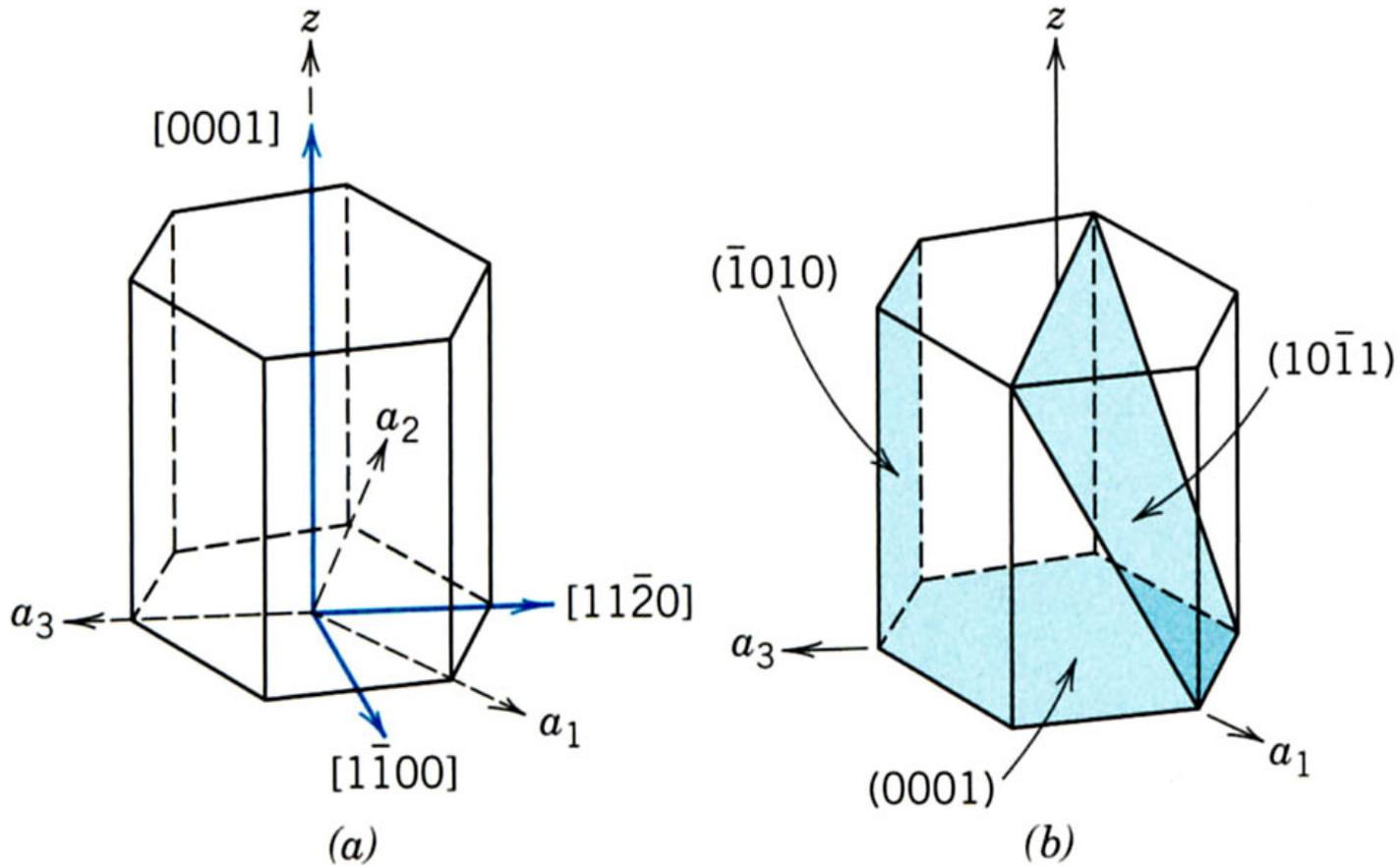
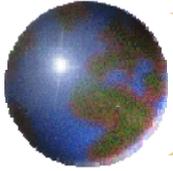
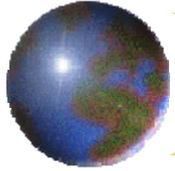


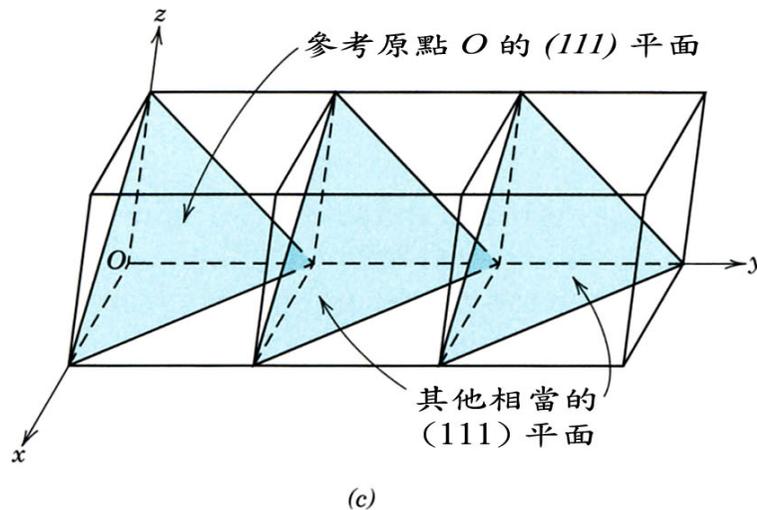
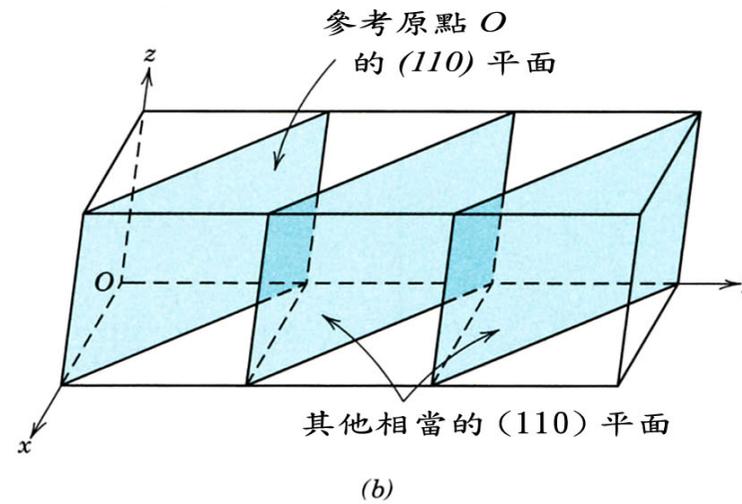
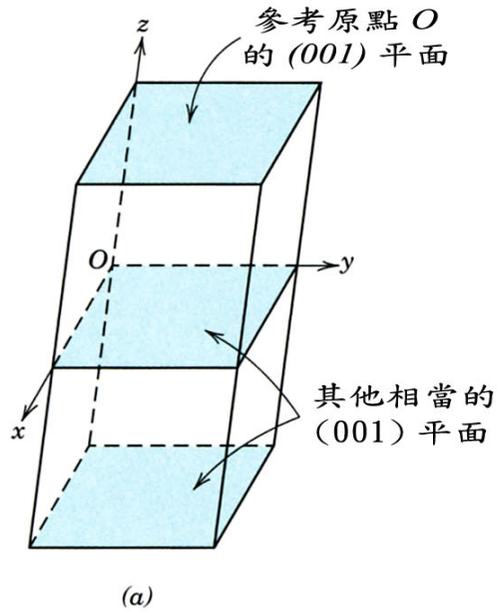
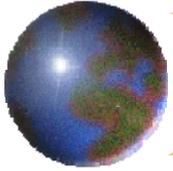
圖3.8 在六方晶系中 (a) $[0001]$ ， $[1100]$ 和 $[11\bar{2}0]$ 方向之示意圖，(b) (0001) ， $(10\bar{1}1)$ 和 $(\bar{1}010)$ 平面之示意圖。



結晶學平面 (Crystallographic Planes)

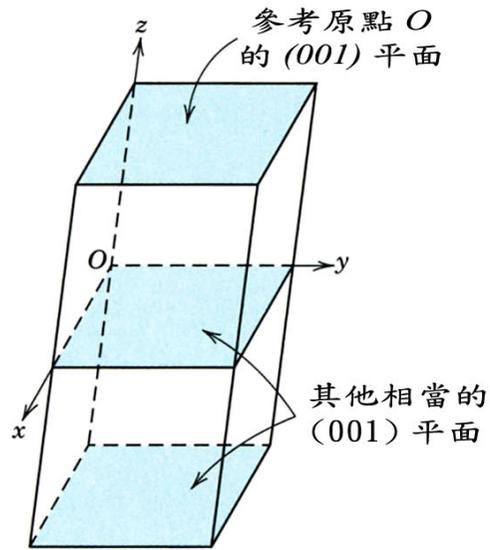
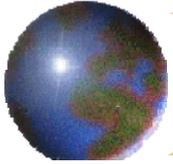
除六方晶系外，結晶學平面可以三個 米勒指標 (Miller indices) 來如 (hkl) 表示。 h 、 k 和 l 指標數值的決定依下列的程序得到：

1. 如果平面通過所選擇的原點，則應在單位晶胞內移動一適當距離來建立另一平行的平面，或者是在另一單位晶胞的角落建立一新原點。
2. 此時，結晶平面會與三軸的每一軸相交或平行；平面在每一軸所截取的長度可以晶格參數 a ， b 和 c 來表示。
3. 取這些數值的倒數，若平面與軸平行則可視為具有無限的截距，因此指標為零。
4. 若有需要，此三個數目可乘或除以一共同因子，使其變成具有最小的整數組。
5. 最後，整數指標不需要以逗點分開，並將其置於小括弧內，如 (hkl) 。

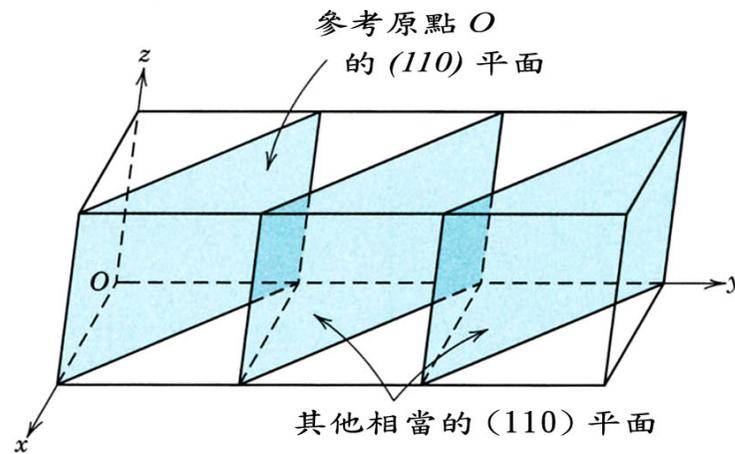


- 若截距是在原點的負邊，則可利用一橫或負號置於指標的上方來表示。

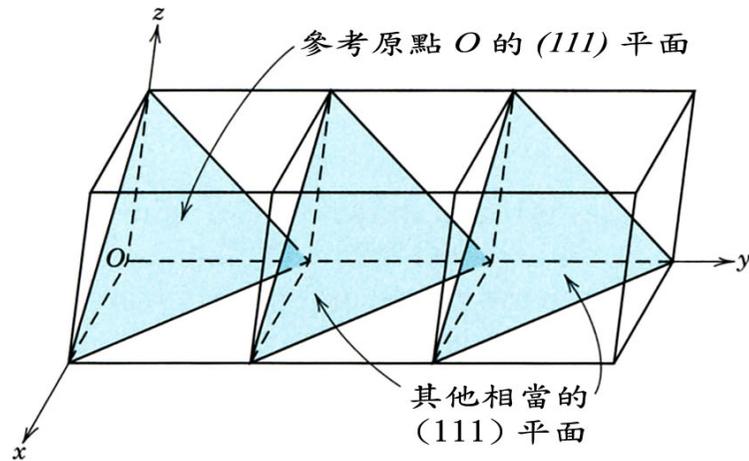
圖 3.9 參考原點之平面及其他相當的平面示意圖(a) (001) (b) (110) ; (c) (111)



(a)



(b)

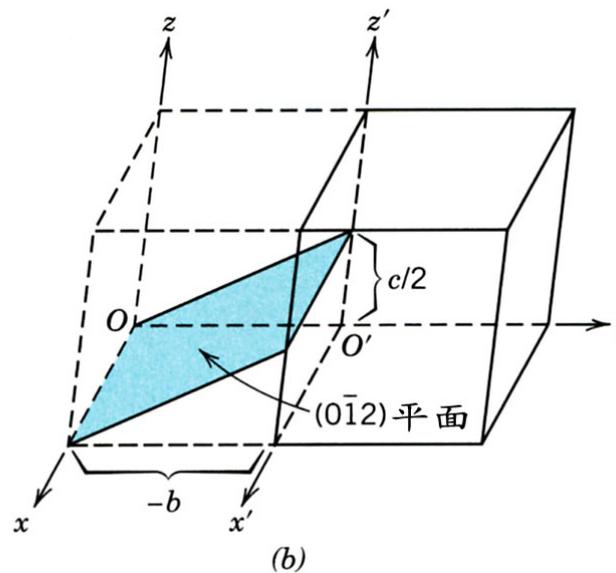
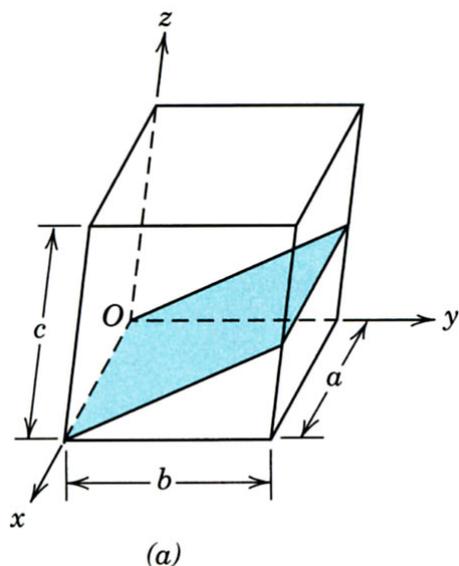


(c)

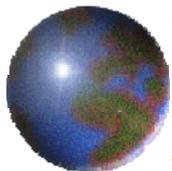
- 所有指標相反的平面(相差負號)表示此平面是平行於原平面且在原點另一側並等距，如圖3.9
- 立方體中一個有趣且唯一的特性，當平面與方向具有相同指標時，表示此平面與此方向是互相垂直的。

例題 3.8

決定 (a) 圖中所示的平面的米勒指數。



	x	y	z
截 距	∞a	$-b$	$c/2$
截距 (依據晶格參數)	∞	-1	$\frac{1}{2}$
倒 數	0	-1	2
簡化 (不需要)			
放入小括號		$(0\bar{1}2)$	

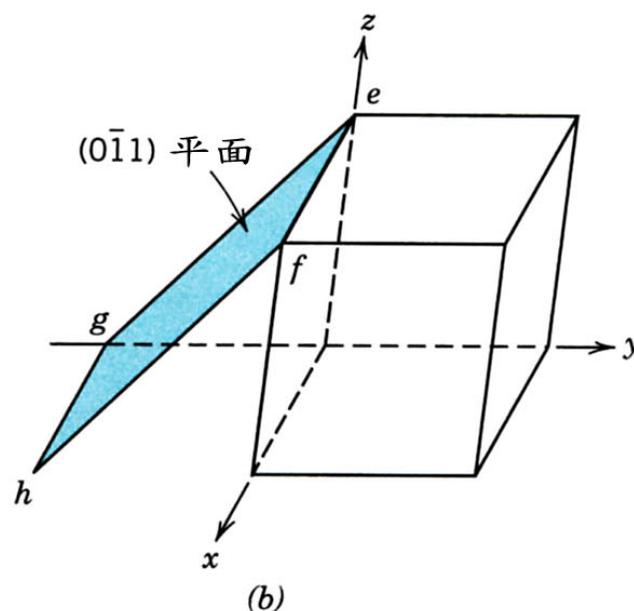
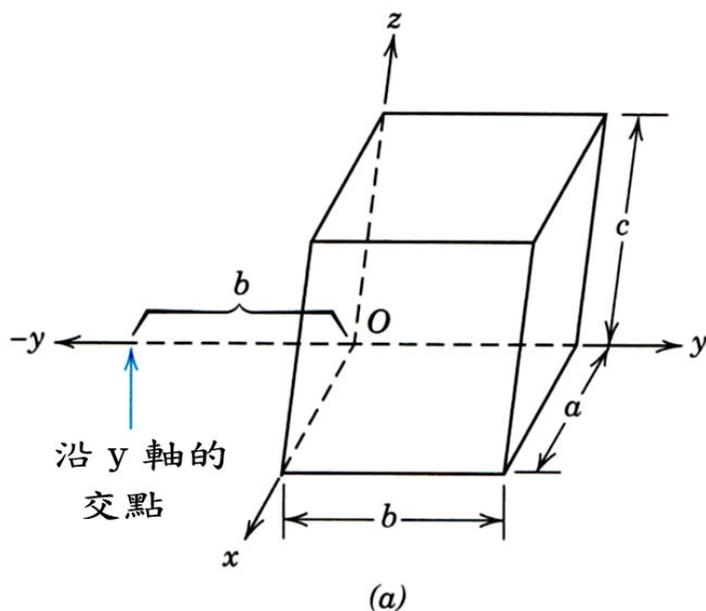


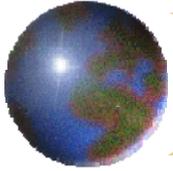
例題 3.9

在一立方單位晶胞中劃出 $(0\bar{1}1)$ 平面。

解：

解此問題的步驟可使用上一例題的反向順序，首先去除小括號並取倒數，得到 $\infty, -1$ 和 1 ，此意味著此特定平面平行於 x 軸而與 y 軸和 z 軸分別交截於 $-b$ 和 c ，如附圖 (a) 所示，此平面已畫於 (b) 圖中，一平面可經由線來表示，其代表平面與單位晶胞的組成面或它們的延伸的交截。例如，在此圖中，線 ef 是 $(0\bar{1}1)$

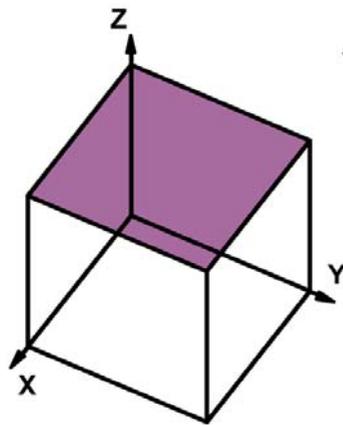




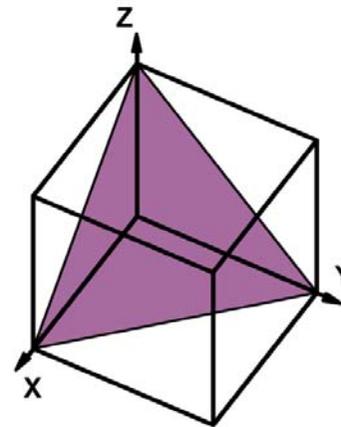
立方晶系的晶面指數

(1) 晶面指數的確定方法

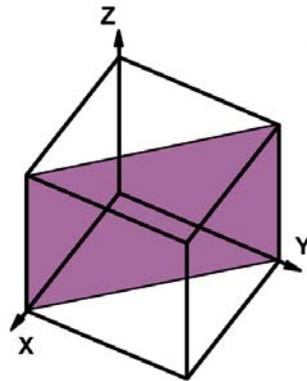
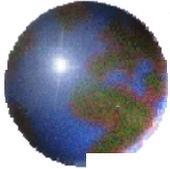
- 在以晶胞邊長做為單位長度的右旋座標係中取該晶面在各座標軸上的截距。
- 取截距地倒數。
- 將倒數約成互質整數，加一圓括號。



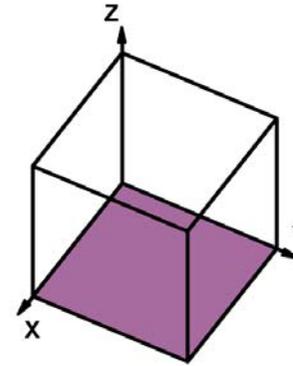
Plane	Intercepts	Indices
A	$\infty, \infty, 1$	(001)



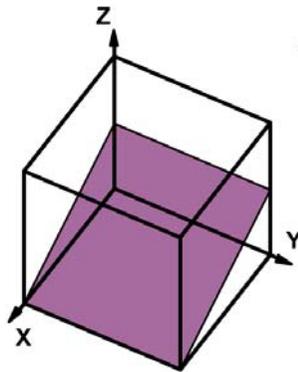
Plane	Intercepts	Indices
A	$\infty, \infty, 1$	(001)
B	1, 1, 1	(111)



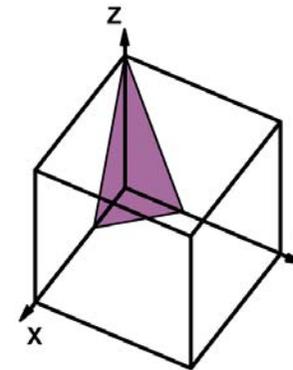
Plane	Intercepts	Indices
A	$\infty, \infty, 1$	(001)
B	1, 1, 1	(111)
C	1, 1, ∞	(110)



Plane	Intercepts	Indices
A	$\infty, \infty, 1$	(001)
B	1, 1, 1	(111)
C	1, 1, ∞	(110)
D	$\infty, \infty, -1$	(00 $\bar{1}$)



Plane	Intercepts	Indices
A	$\infty, \infty, 1$	(001)
B	1, 1, 1	(111)
C	1, 1, ∞	(110)
D	$\infty, \infty, -1$	(00 $\bar{1}$)
E	1, $\infty, 1/2$	(102)

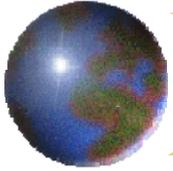


Plane	Intercepts	Indices
A	$\infty, \infty, 1$	(001)
B	1, 1, 1	(111)
C	1, 1, ∞	(110)
D	$\infty, \infty, -1$	(00 $\bar{1}$)
E	1, $\infty, 1/2$	(102)
F	1/3, 1/3, 1	(221)

立方晶面指數



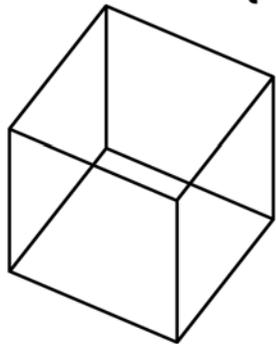
所有指標相反的平面，表示此平面是平行於原平面且在原點另一側並等距，如圖中之(001)及(00 $\bar{1}$)



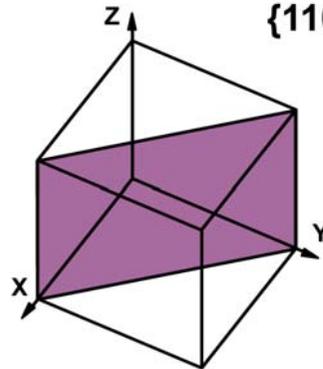
平面族 (Plane family)

包含所有對等的所有平面，例如{100}來表示。在立方系統中，不管其順序或符號為何，只要具有相同指標都是對等。

{110} Family

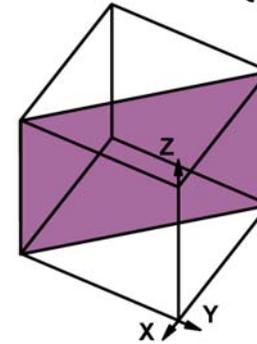


{110} Family



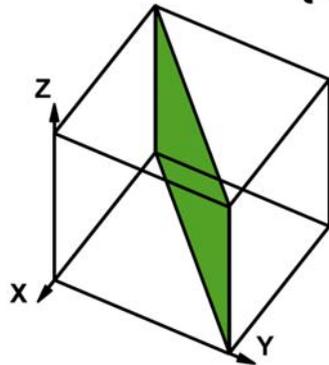
(110)

{110} Family



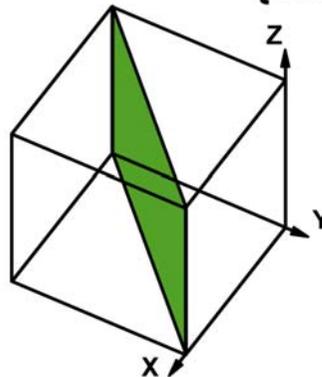
(110) ($\bar{1}\bar{1}0$)

{110} Family



(110) ($\bar{1}\bar{1}0$)
($\bar{1}10$)

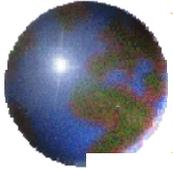
{110} Family



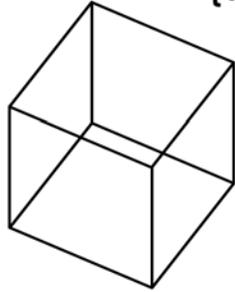
(110) ($\bar{1}\bar{1}0$)
($\bar{1}10$) ($1\bar{1}0$)

{110} 平面族

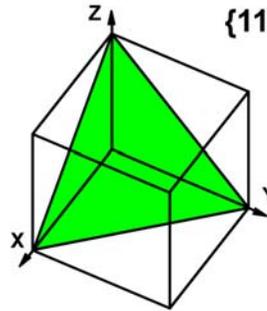




{111} Family

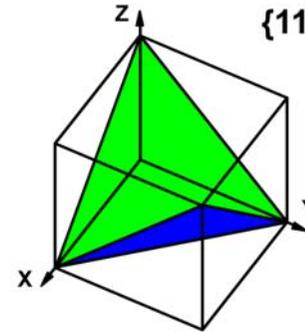


{111} Family



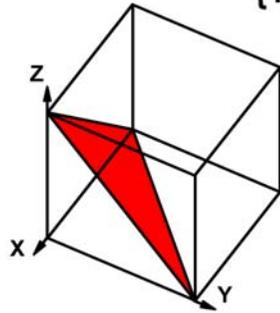
(111)

{111} Family



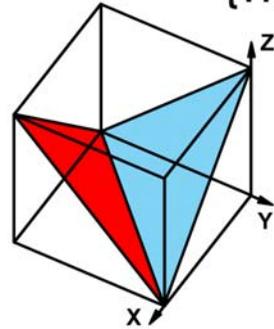
(111)
(111)

{111} Family



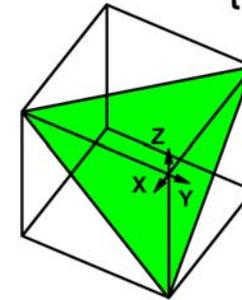
(111)
(111)
(111)

{111} Family



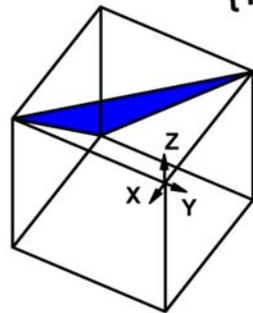
(111)
(111)
(111)
(111)

{111} Family



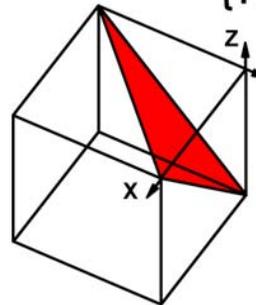
(111) (111)
(111)
(111)
(111)

{111} Family



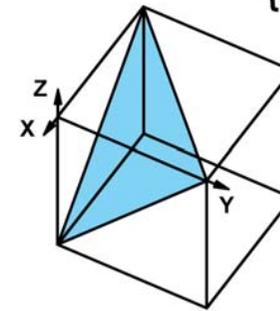
(111) (111)
(111) (111)
(111)
(111)

{111} Family



(111) (111)
(111) (111)
(111) (111)
(111)

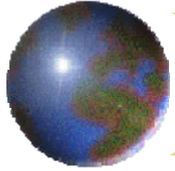
{111} Family



(111) (111)
(111) (111)
(111) (111)
(111) (111)

{111}平面族

["Click here"](#)



原子的排列 (Atomic Arrangements)

- 結晶平面的原子排列與晶體結構有關，FCC 和 BCC 晶體結構的原子平面分別示於圖 3.10 和圖 3.11 中。

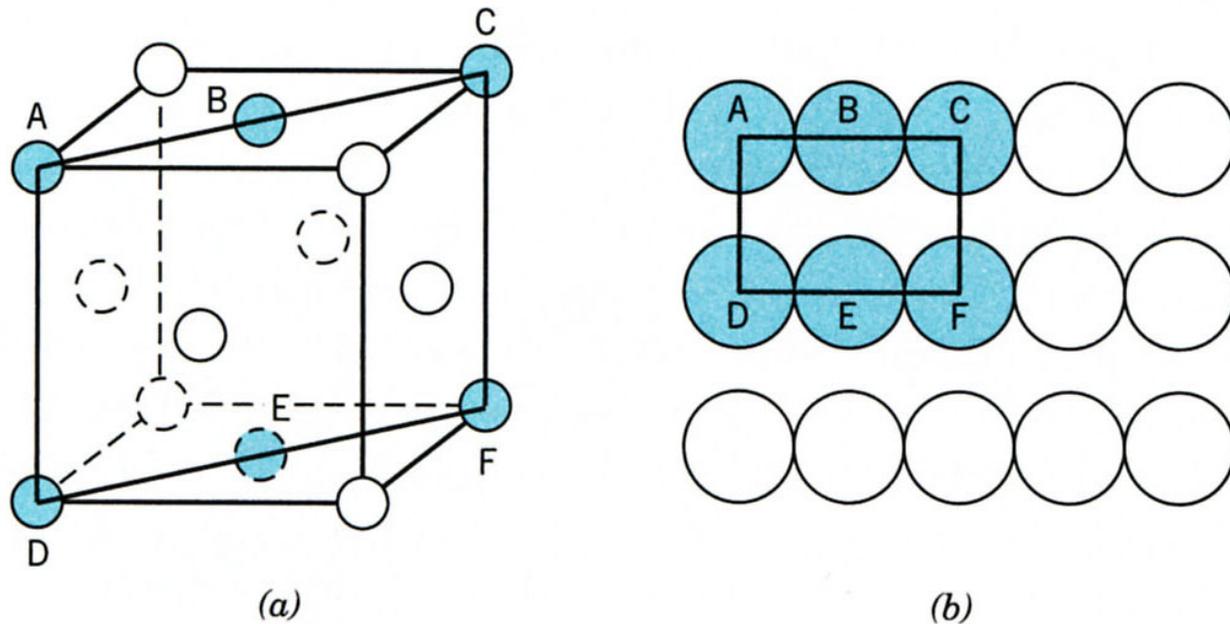


圖 3.10 (a) 具有 (110) 平面縮小球之 FCC 單位晶胞 (b) FCC 之 (110) 平面的原子堆積，原子相對位置如 (a) 所示

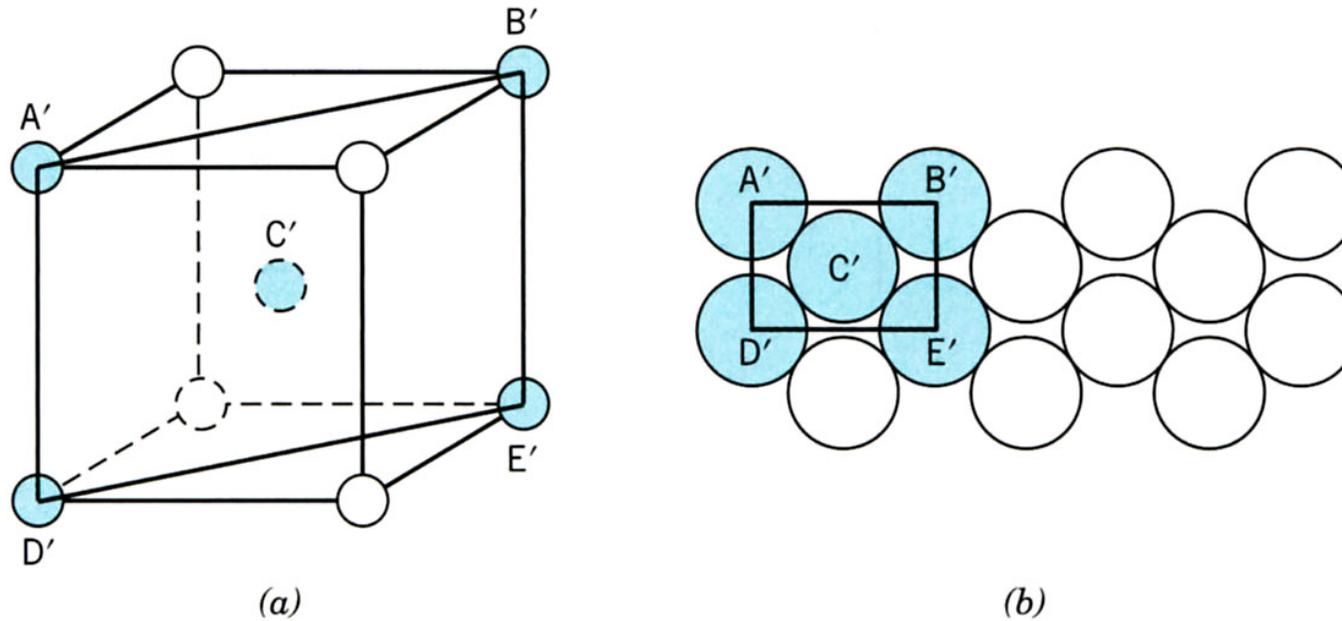
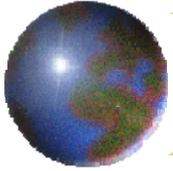
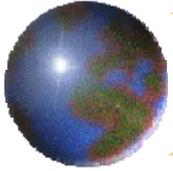


圖 3.11 (a)具有 (110) 平面縮小球之 BCC 單位晶胞(b) BCC 之 (110) 平面的原子堆積，原子相對位置如(a)所示

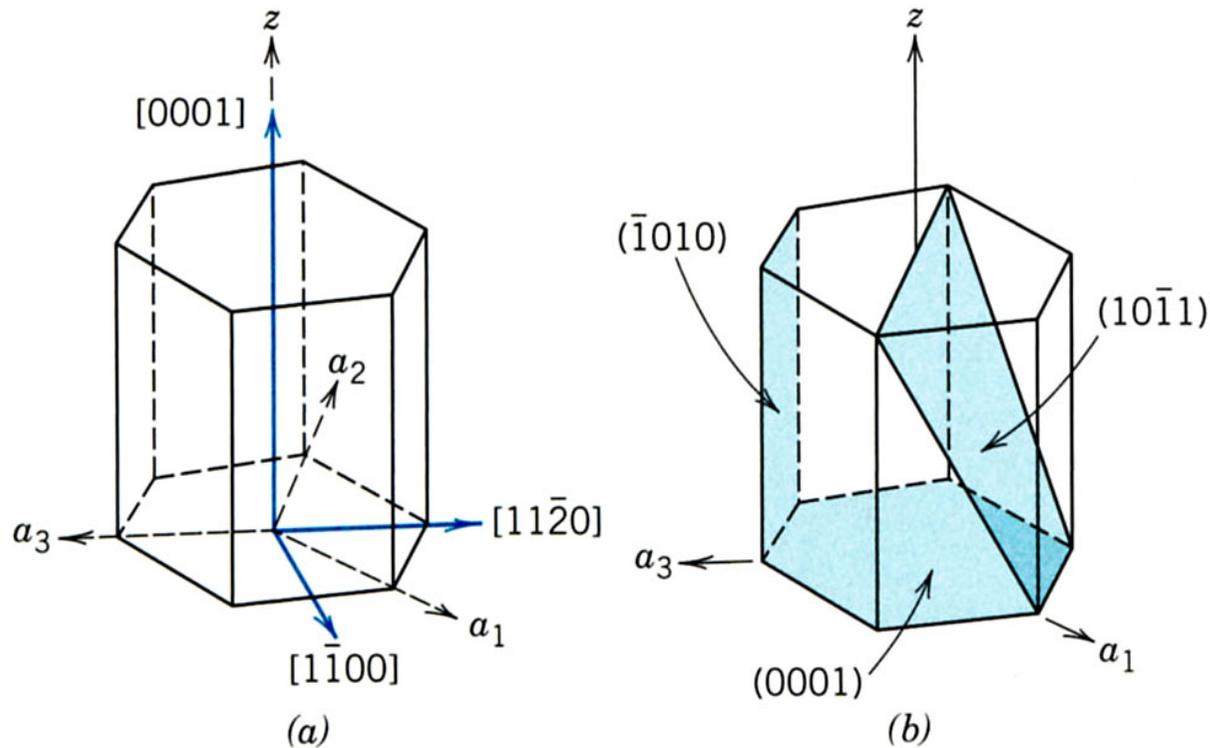
- 「平面族」是包含結晶學對等的所有平面，例如{100}族，對**正方晶體結構**則不包括(001)及(00 $\bar{1}$)。
- 在**立方晶體系統**中，{100}族不管其順序或符號為何，只要具有相同指標都是對等，例如(1 $\bar{2}$ 3)和(3 $\bar{1}$ 2)是屬於{123}族

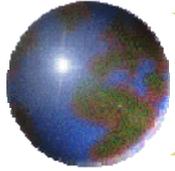


六方晶體 (Hexagonal Crystals)

- 使用圖 3.8 所示的米勒-布拉維斯系統，此方法可得到四個指標 $(hkil)$ 。其中 i 可由 h 和 k 的和來決定。

$$i = -(h+k) \quad (3.8)$$





3.11 線性和平面的密度 (Linear and Planar density)

- 對一特定材料而言，相當方向具有相同的線性密度 (linear density, LD)，對晶體的平面，相對的參數是平面密度 (planar density, PD)，具有相同平面密度值的平面亦是相當
- 線性密度 (LD) 定義每單位長度的原子數，

$$\text{線性密度 (LD)} = \frac{\text{原子中心位於方向向量上的原子數}}{\text{方向向量之長度}}$$

線密度的單位是長度的倒數 (nm^{-1} 或 m^{-1})

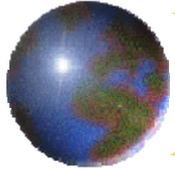
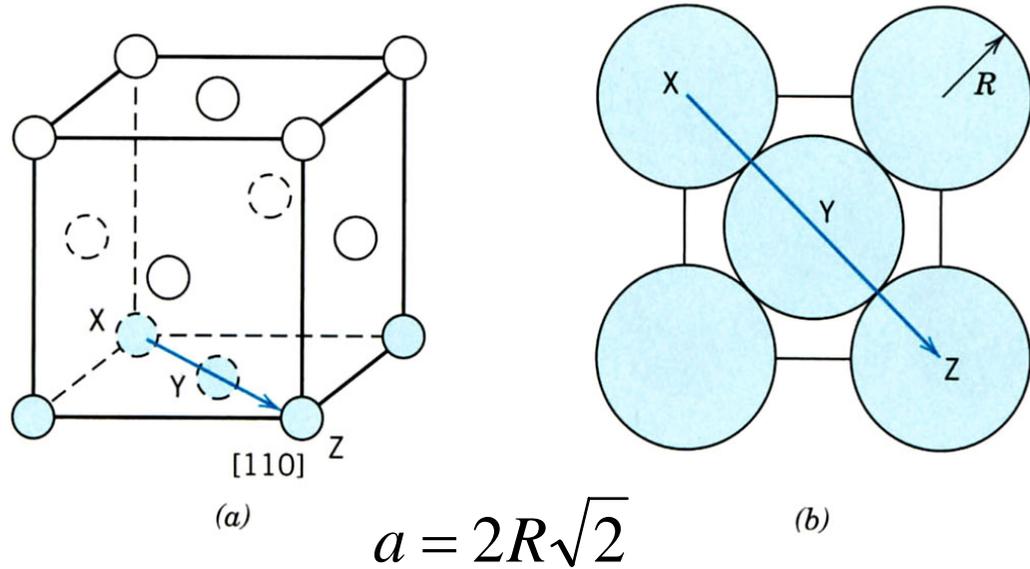


圖 3.12(a) 在縮小球模型的 FCC 單位晶胞中標示出 [110] 平面之示意圖；(b) 位於此單位晶胞底面的 5 個原子，並標示出在 [110] 方面的



- FCC 在 [110] 方向的線密度

$$\text{線性密度(LD)}_{110} = \frac{2\text{個原子}}{\sqrt{2} a_F} = \frac{2\text{個原子}}{4R} = \frac{1}{2R}$$

- 線性密度等於重複距離 (r) 的倒數，在兩鄰近間之線密度為

$$\text{LD}_{110} = \frac{1}{r}$$

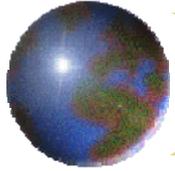
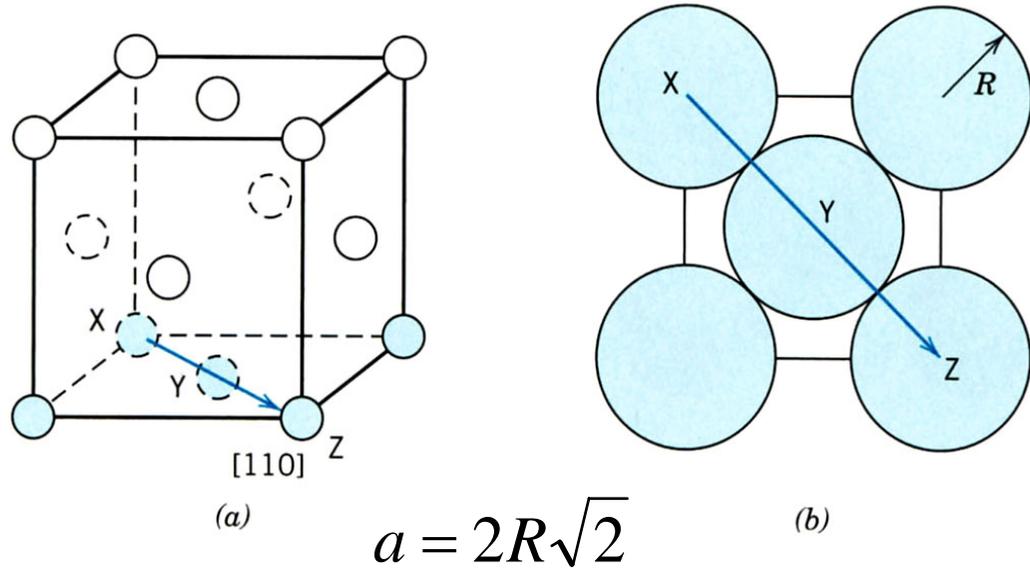


圖 3.12(a) 在縮小球模型的 FCC 單位晶胞中標示出 [110] 平面之示意圖；(b) 位於此單位晶胞底面的 5 個原子，並標示出在 [110] 方面的

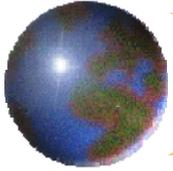


- FCC 在 [110] 方向的線密度

$$\text{線密度(LD)}_{110} = \frac{2\text{個原子}}{\sqrt{2} a_F} = \frac{2\text{個原子}}{4R} = \frac{1}{2R}$$

- 線性密度等於重複距離 (r) 的倒數，在兩鄰近間之線密度為

$$\text{LD}_{110} = \frac{1}{r}$$



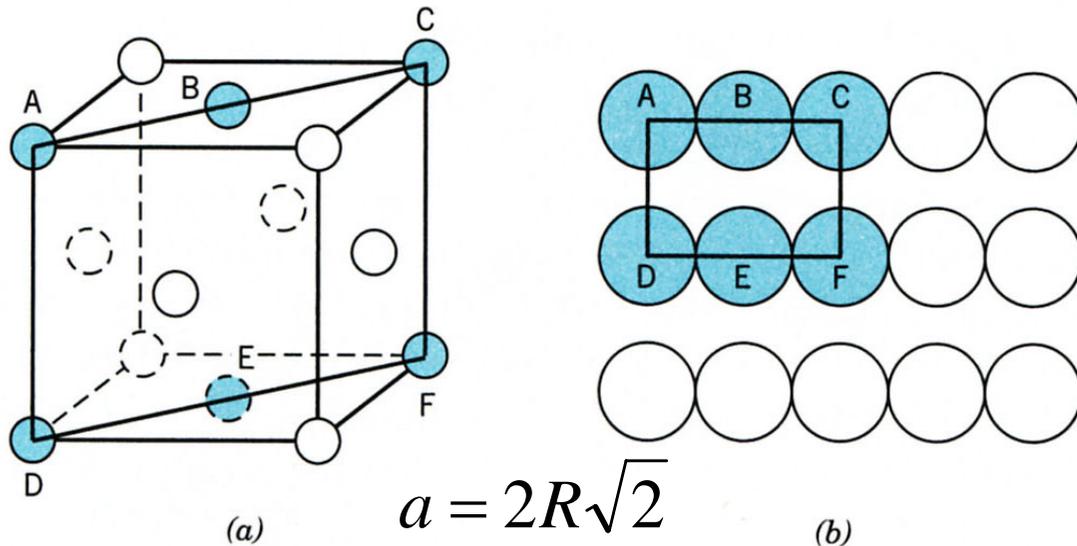
- 平面密度 (PD) 定義為每單位面積的原子數目，單位是面積的倒數

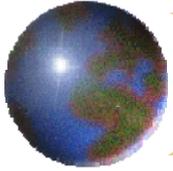
$$\text{平面密度 (PD)} = \frac{\text{原子中心位於平面的原子數目}}{\text{結晶平面的面積}}$$

平面密度的單位是面積的倒數(例如 nm^{-2} ， m^{-2})

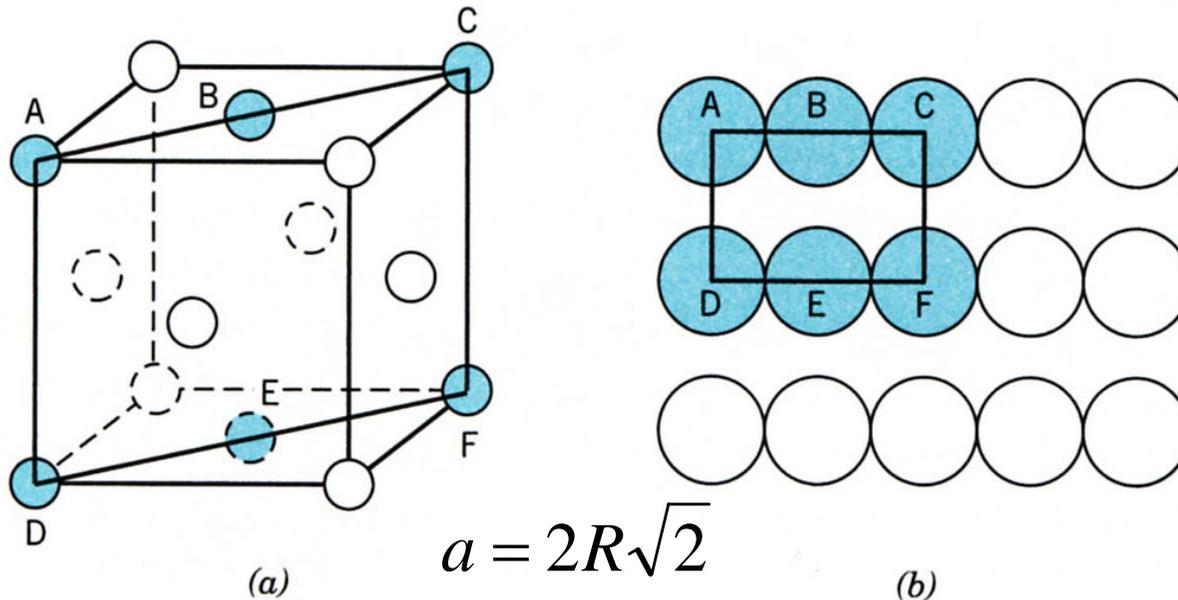
- (110)平面截面內原子 A，C，D 和 F 各只有1/4，原子 B，E，各只有1/2，此平面有 2 個原子。

- 此長方形截面面積的長等於 $4R$ ，而寬等於 $2R\sqrt{2}$ 。此平面的面積是 $8R^2\sqrt{2}$ 。

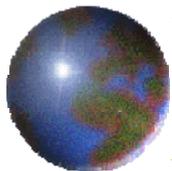




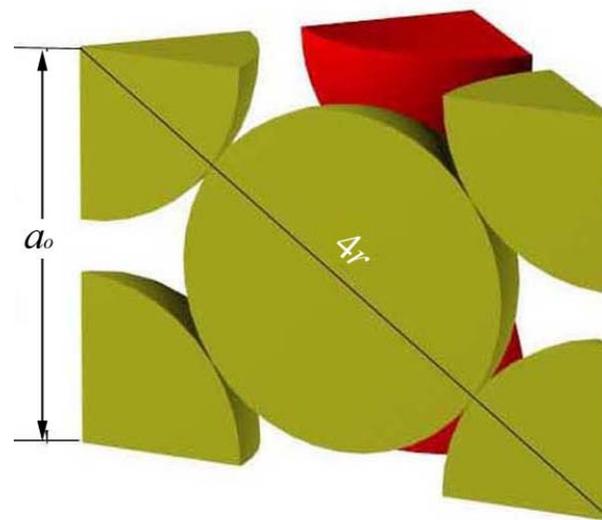
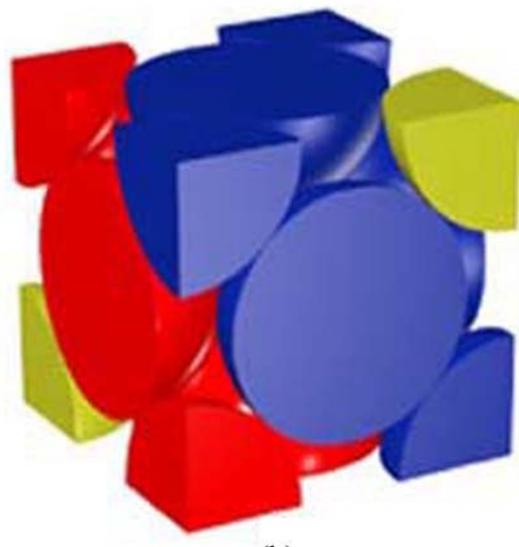
● 平面密度 (PD)₁₁₀ = $\frac{2\text{個原子}}{\sqrt{2} a_F \cdot a_F} = \frac{2}{8R^2\sqrt{2}} = \frac{1}{4R^2\sqrt{2}}$



- 在滑移過程也就是金屬塑性變形的機構上，線和平面密度是重要參數。滑移發生在**最密堆積的結晶學平面上**，且在這些平面上，滑移是沿著具有**最大原子堆積方向**上

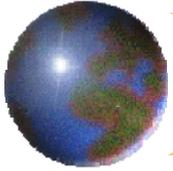


例題1：試求出 FCC 其 (1) 配位數，(2) 單位晶胞原子數，(3) 單位晶胞參數 a 與原子半徑 r 之關係，(4) 原子堆積因子，(5) (020)及(110)平面密度。



解：(1) 配位數：12

(2) 單位晶胞原子數： $(1/8) \times 8 + (1/2) \times 6 = 4$

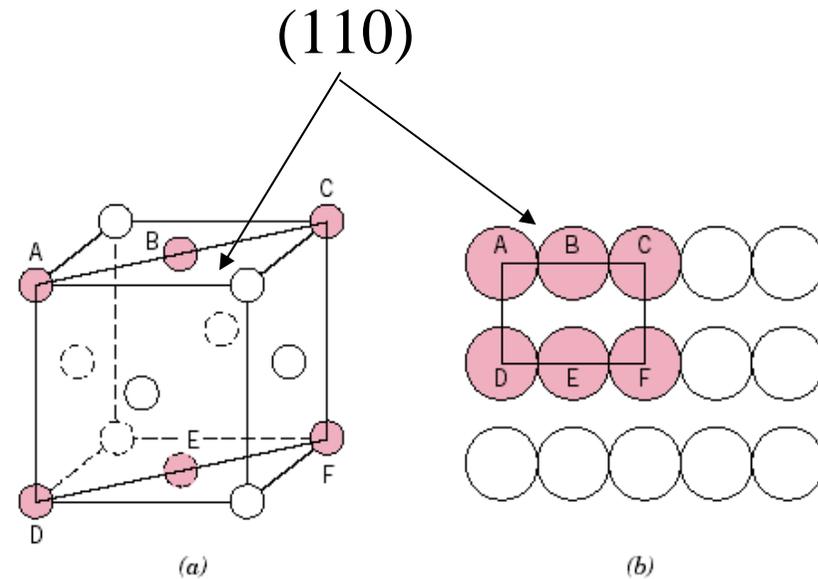


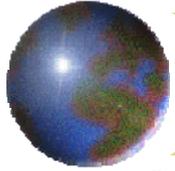
$$(3) \quad a^2 + a^2 = (4r)^2, \quad a_F = \frac{4r}{\sqrt{2}}$$

$$(4) \quad APF = \frac{4 \times \frac{4}{3} \pi \cdot r^3}{\left[\frac{4r}{\sqrt{2}}\right]^3}$$

$$(5) \quad (020) \text{ of } PD = \frac{\frac{1}{2} \times 4}{a_F \cdot a_F} = \frac{1}{4R^2}$$

$$(110) \text{ of } PD = \frac{\frac{1}{4} \times 4 + \frac{1}{2} \times 2}{\sqrt{2} \cdot a_F \cdot a_F} = \frac{1}{4R^2\sqrt{2}}$$





緊密堆積之結晶構造 (Close-packed Crystal Structures)

金屬 (Metals)

- 面心立方和六方最密堆積晶體結構二者都具有 0.74 的原子堆積因子，除了以單位晶胞來表示原子堆積因子之外，可利用原子最密堆積平面（即平面具有最大或球堆積密度）來描述；示於圖 3.13a。兩種晶體結構可由這些緊密堆積平面在其上堆積而成；兩種結構間的差別在於堆積序上的差異。

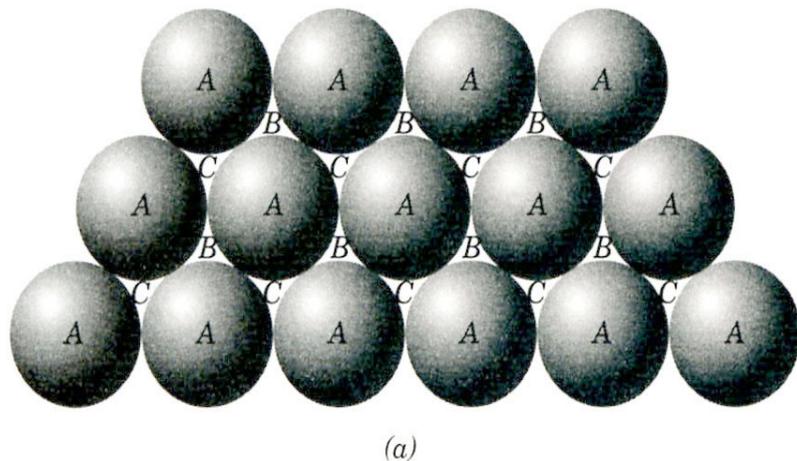
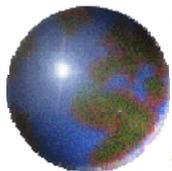
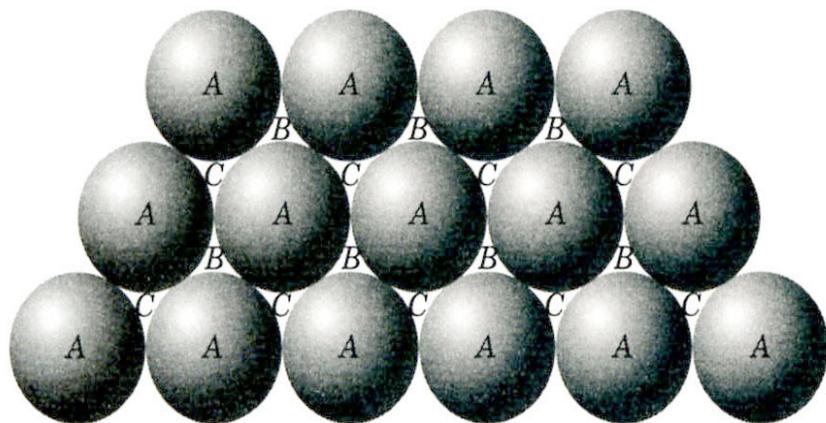


圖 3.13(a) 面心立方和六方緊密堆積之晶體結構中具有最大原子堆積密度的平面示意圖，將所有位於緊密堆積平面上的原子的中心標為 A，伴隨在此平面上有兩組相同的三角形，是由三個鄰近原子間的凹陷所形成，三角形頂點向上者標為 B，向下者為 C。

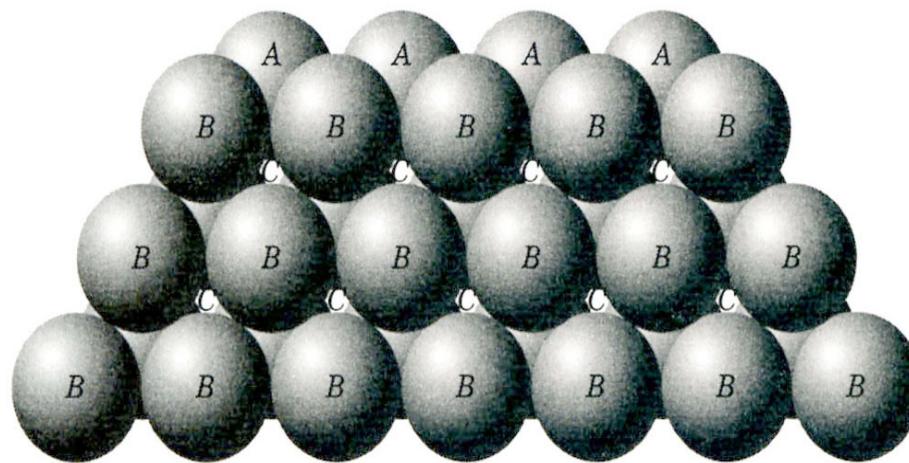


- 第一個緊密堆積平面上的原子如圖3.13(a)。第二個緊密堆積平面上的原子，可將其原子的中心位置至於 B 或 C 的位置上，在此兩者是**等同**的。假設選擇 B 位置，則其堆疊順序以 AB 來稱呼，說明如圖 3.13(b)。



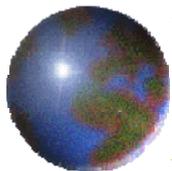
(a)

圖 3.13(a) 第一層緊密堆積平面的原子



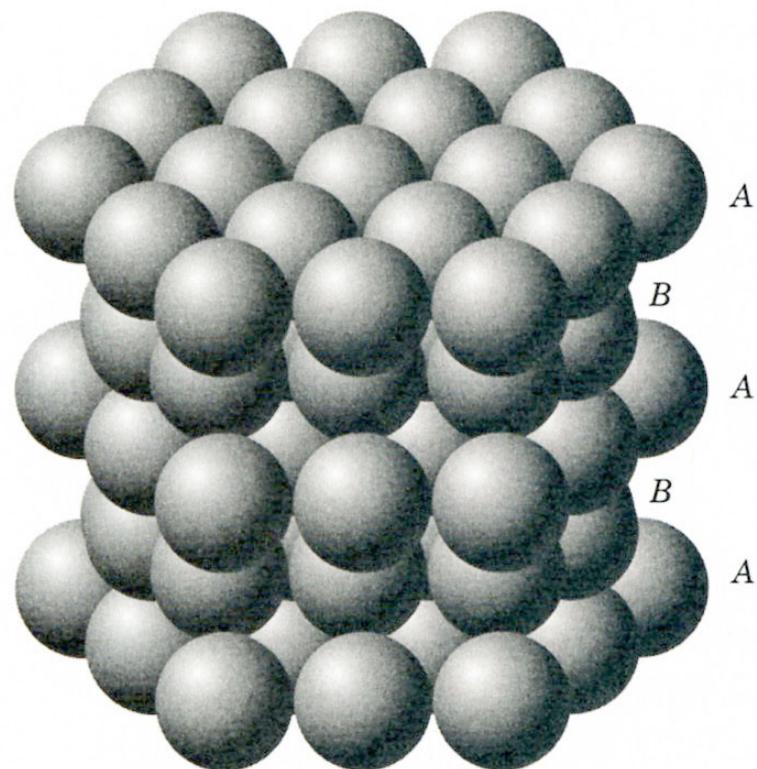
(b)

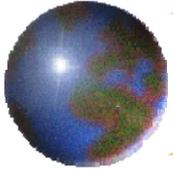
圖 3.13(b) 將第二層緊密堆積平面的原子中心置於 B 上，而得到 ABAB 之堆積結構。



- FCC 和 HCP 間真正的差別在於第三層緊密堆積所堆放的位置。對 HCP 而言，第三層的中心直接至於原來的位置上而且與其對齊。這樣的堆積方式為 $ABABAB\dots$ 一直重複，當然 $ACACAC\dots$ 的排列也是等同的。
- 這些緊密的堆積平面對 HCP 而言是 (0001) 型的平面，這種堆積與單位晶胞間的相對關係顯示於圖 3.14 中。

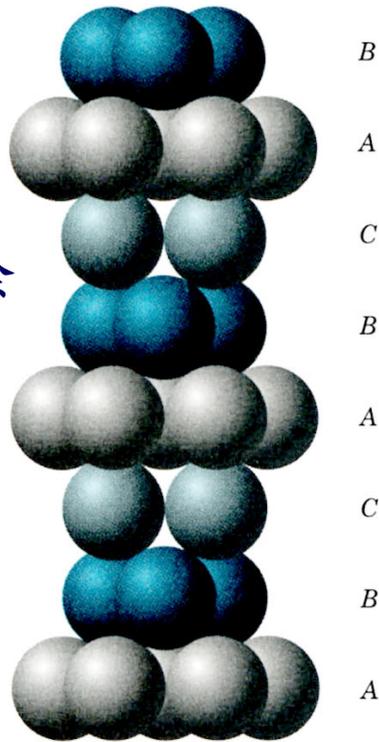
圖 3.14 六方緊密堆積結構是緊密堆積平面以 $ABABAB$ 或 $ACAC, ACAC\dots$ 的方式堆疊。





- 對 FCC 面心立方體結構而言，**第三層**平面原子的中心被置放於**第一層**平面**C**位置上(如圖3.15(a))，造成 *ABCABCABC...* 順序的堆積方式；緊密堆積平面與 FCC 單位晶胞間的關係可以圖3.15(b)來證明；這些平面是 (111) 型。

圖15 (a) 面心立方結構是緊密堆積平面以 *ABCABCABC...* 之方式堆疊；**(b)** 已被去除一角的FCC結構，以此顯示原子的緊密堆積平面的堆疊順序和FCC晶體結構間的關係；實線的三角形畫出(111)平面之輪廓。



(a)

B

A

C

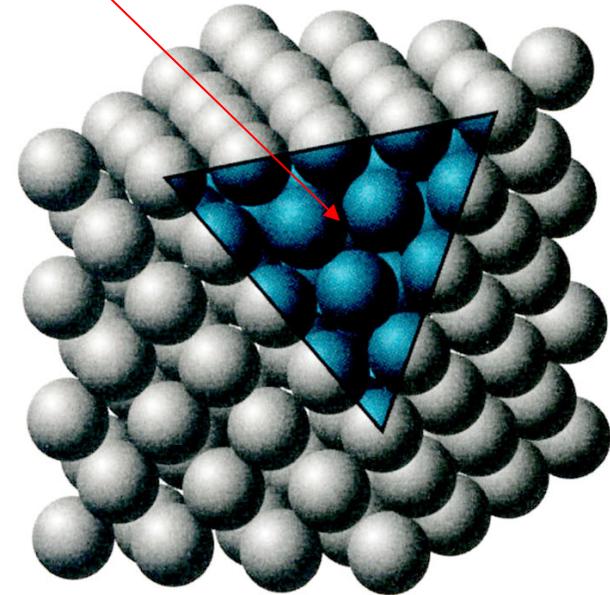
B

A

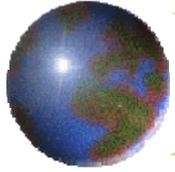
C

B

A



(b)



結晶材料 (Crystalline materials)

3.13 單晶(single crystals)

- 對一結晶固體來說，當其原子排列為週期且重覆排列完美的或延伸到整個試片而不中斷時，此試片就稱之為 **單晶** (single crystal)，單晶的照片示於圖3.16中。
- 單晶在現在技術中變得相當重要，尤其是在電子為電路上，其使用矽和其他半導體的單晶

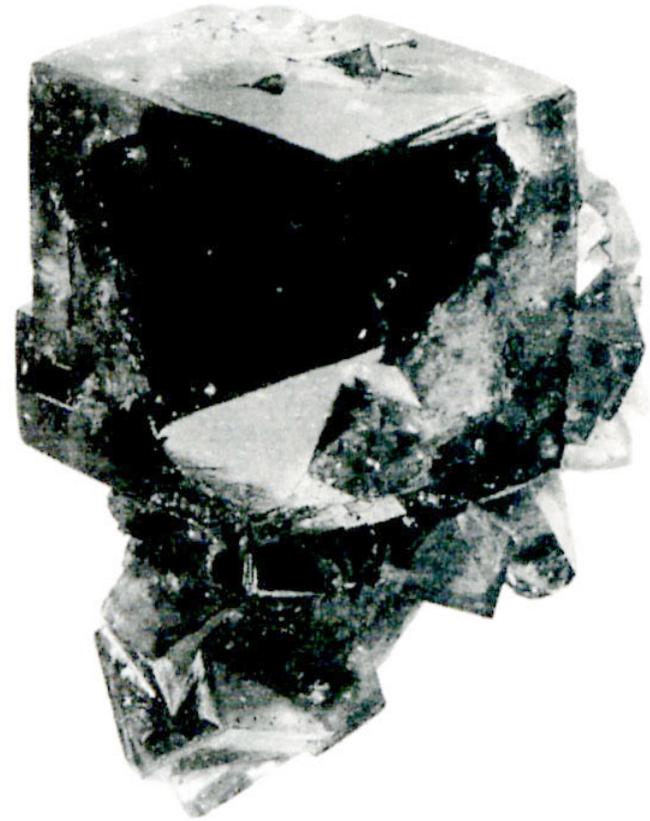
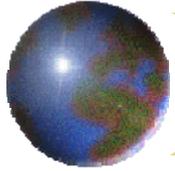
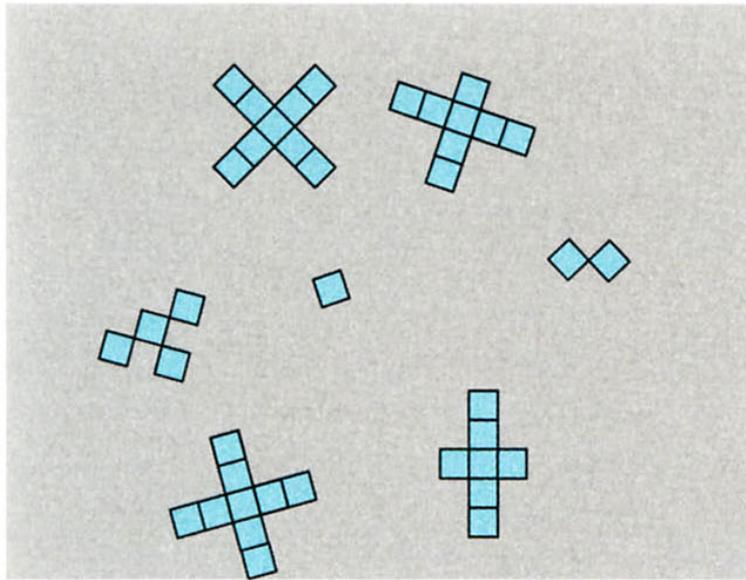


圖3.16 數個氟化鈣 (CaF_2)
之單晶照片

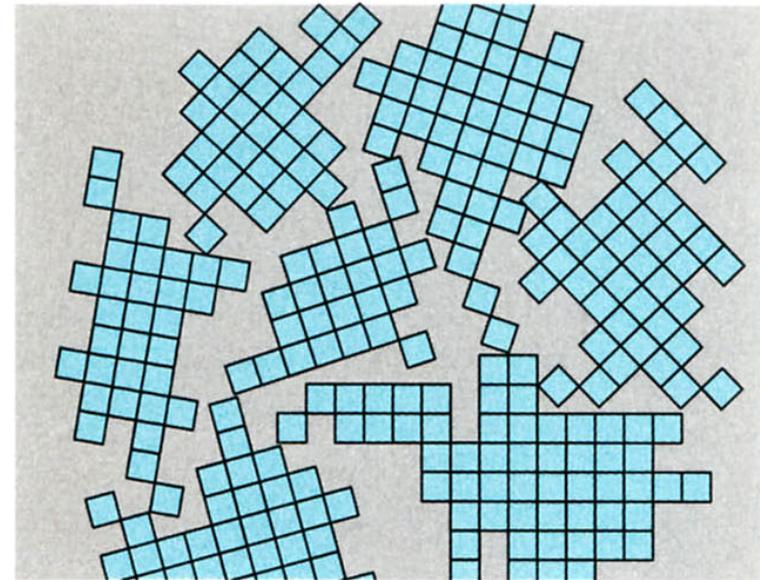


3.14 多晶材料 (Polycrystalline Materials)

- 許多結晶固體是由許多小晶體或晶粒集合而成的；這種材料稱為多晶。多晶試片在固化過程中的各種階段顯示於圖3.17

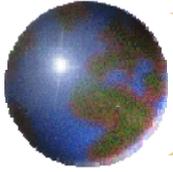


(a)

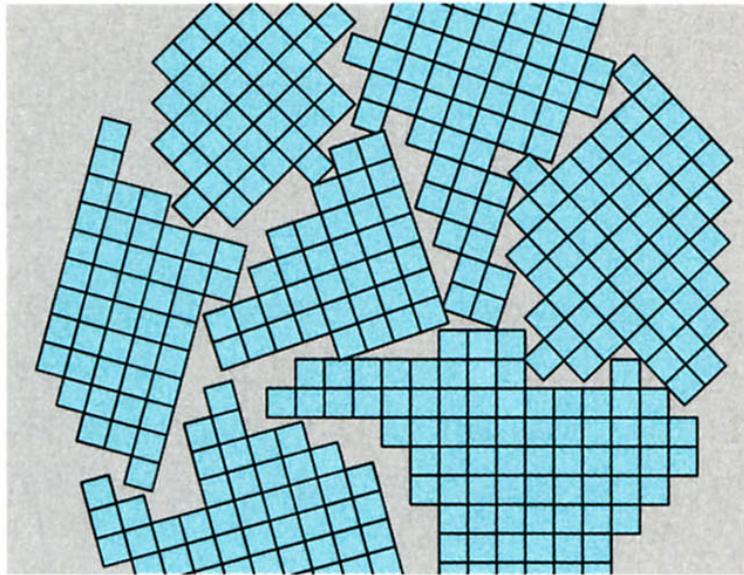


(b)

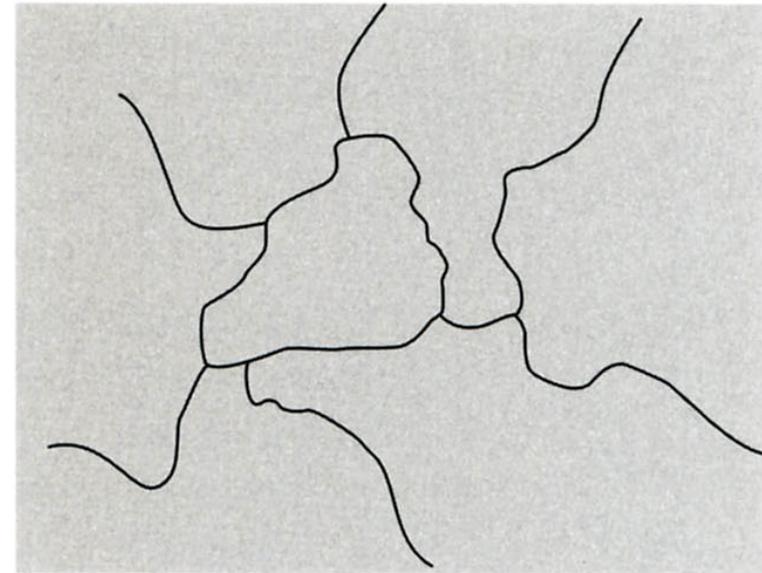
圖 3.17 多晶材料在凝固過程中各種階段的示意圖，圖中正方格子代表單位晶胞。(a) 小結晶成核；(b) 結晶的成長



- 當凝固接近完成時，相近的晶粒會彼此撞擊。晶粒與晶粒之間的結晶學方向並不相同，同時在兩晶粒相遇的區域存有某些原子的錯誤匹配，此區域稱為晶界 (grain boundary)。

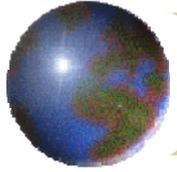


(c)



(d)

圖 3.17 (c) 凝固完成時的晶粒形成不規則的形狀；(d) 在光學顯微鏡下所呈現的晶粒結構，暗線代表晶界。



3.15 異向性 (Anisotropy)

- 某些單晶物質的**物理性質**和量測的**結晶學方向**有關。例如彈性模數、導電度、折射率在〔100〕和〔111〕方向上具有不同的值，這種與方向取向有關的性質稱為**異向性** (anisotropic)。若物質量測的性質與量測方向無關則稱為**等向性的** (isotropic)；結晶材料的異向性的大小與程度是晶體結構對稱性的函數；異向性程度隨著結構對稱降低而增加，數種材料在[100], [110], [111]方向的彈性模數值列於表3.3中
- 多晶材料中的個別晶粒的結晶學方向全部是雜亂，在此情況下，即使每一晶粒都是**異向性**，但是由晶粒聚集而組成的試片是**等向性的行為**。量測性質的大小代表著某些方向值的平均，有時後在多晶材料中的晶粒會具有擇優的結晶學方向，在此情況下，稱材料具有**織構(texture)**組織。

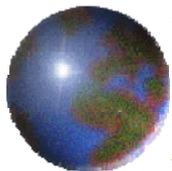


表 3.3 數種金屬在不同結晶學方向之彈性模數值

金屬	彈性模數 (GPa)		
	[100]	[110]	[111]
鋁	63.7	72.6	76.1
銅	66.7	130.3	191.1
鐵	125.0	210.5	272.7
鎢	384.6	384.6	384.6