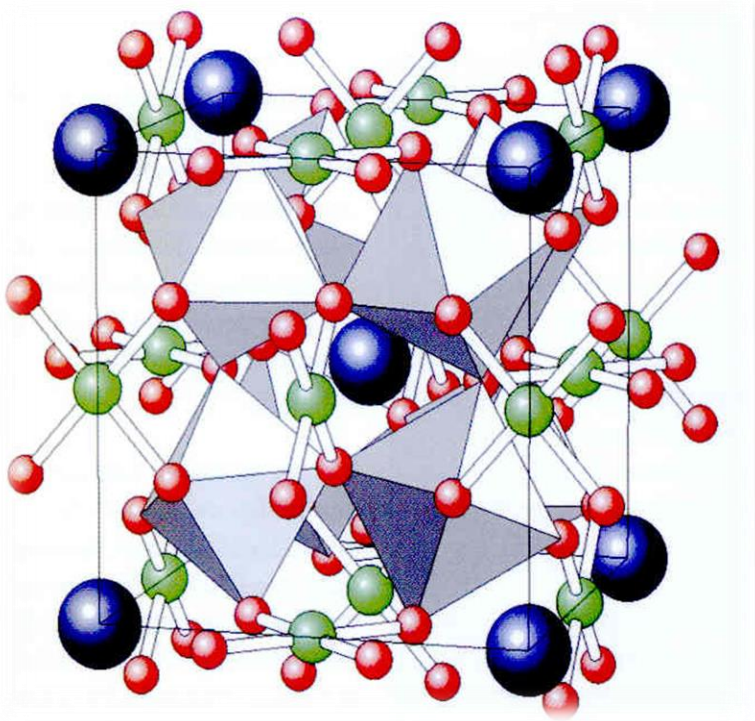
Solid State Physics I



บทที่ 2

ตำแหน่งอะตอม ทิศทาง และระนาบผลึก

อาจารย์ธีระวิทย์ พลโคกก่อง กลุ่มวิชา ฟิสิกส์ คณะวิทยาศาสตร์ มรภ. บุรีรัมย์

บทที่ 2

บทนำ

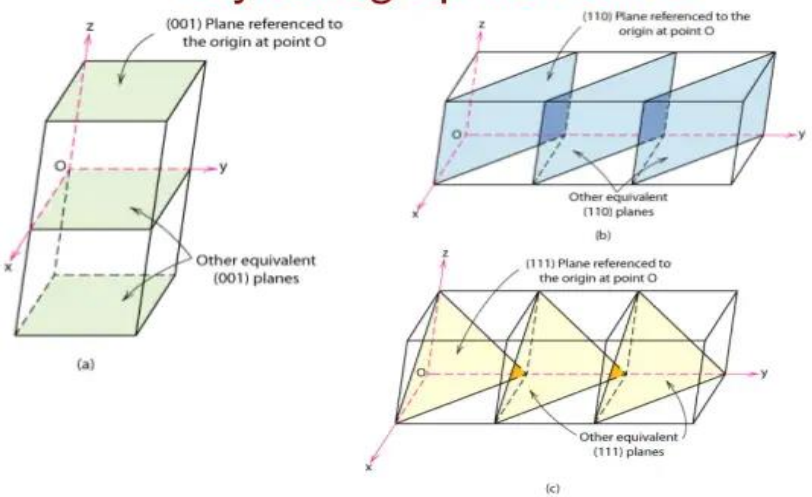
ตำแหน่งอะตอม

ทิศทางของผลึก

การระบุระนาบในผลึก

การระบุตำแหน่งบนพื้นผิวของแข็ง

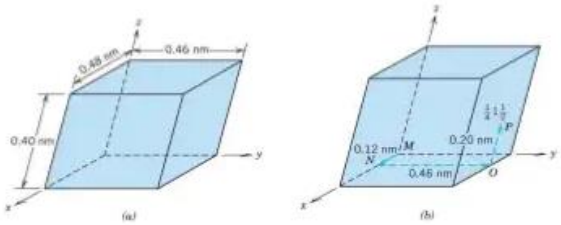
Crystallographic Planes



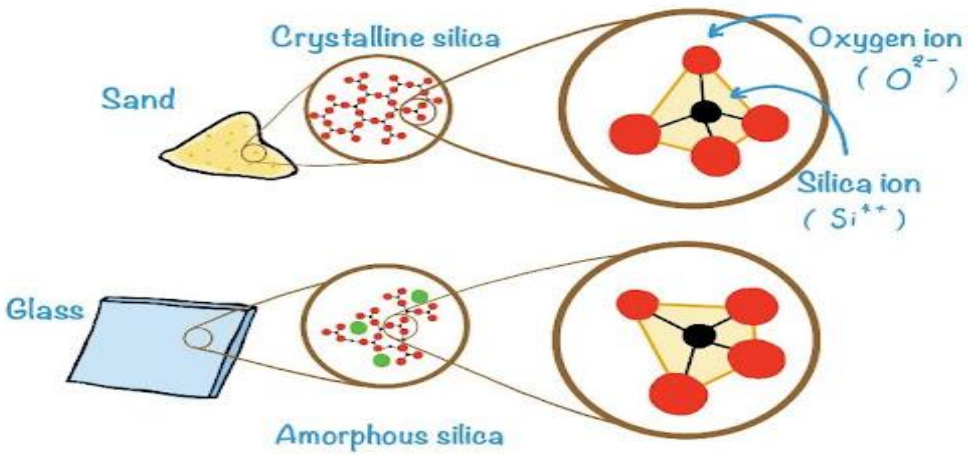
For cubic crystals, planes and directions having the same indices are perpendicular to one another.

Chapter 3 -

Locate the point (1/4 1 ½)



- Specify point coordinates for all atom positions for a BCC unit cell
  - Answer: 0 0 0, 1 0 0, 1 1 0, 0 1 0, ½ ½ ½, 0 0 1, 1 0 1, 1 1 1, 0 1 1



บทนำ

ตำแหน่งอะตอม

ทิศทางของผลึก

การระบุระนาบในผลึก

การระบุตำแหน่งบนพื้นผิวของแข็ง

การศึกษาโครงสร้างการจัดตัวของอะตอมในผลึกสามารถทำได้โดยอาศัยปรากฏการณ์การเลี้ยวเบนของคลื่นรังสีเอ็กซ์ การเลี้ยวเบนจะเกิดขึ้นได้เมื่อขนาดของความยาวคลื่นของรังสีตกกระทบใกล้เคียงกับขนาดของสิ่งกีดขวาง ทั้งนี้เราสามารถอาศัยการเลี้ยวเบนของรังสีเอ็กซ์เพื่อศึกษาการบ่งชี้ระนาบ ทิศทางการเรียงตัวของอะตอมในผลึก

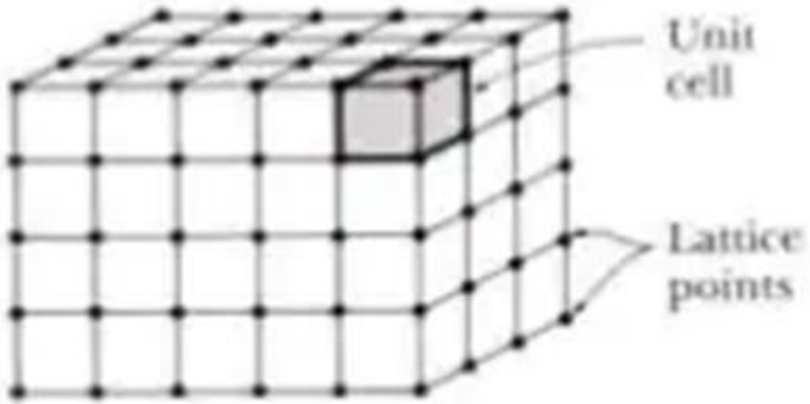
บทนำ

ตำแหน่งอะตอม

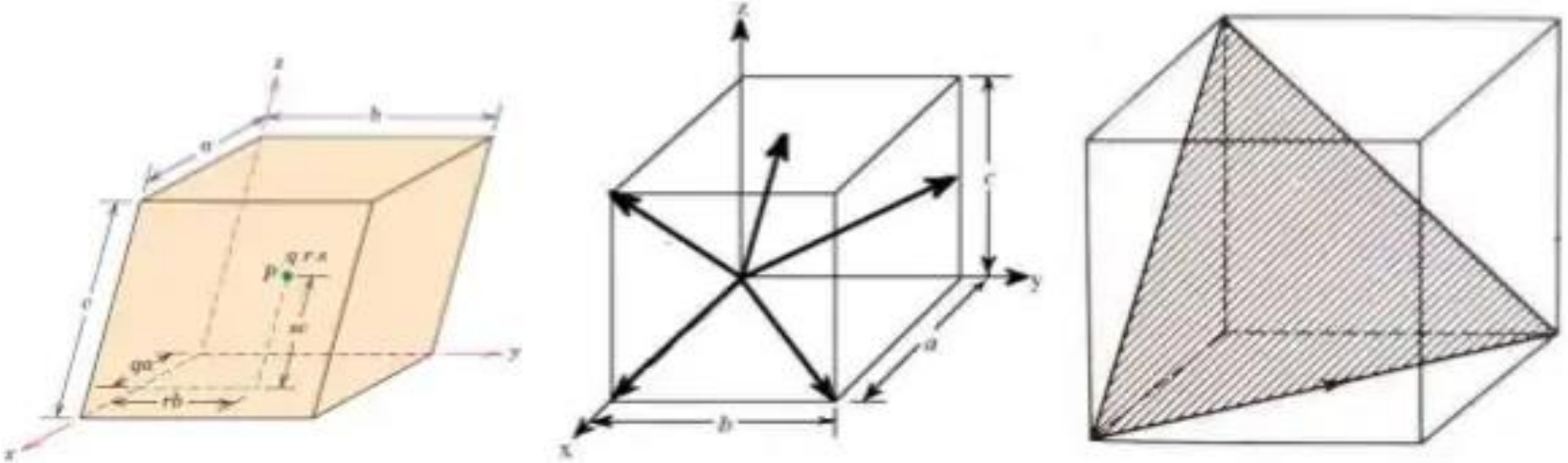
ทิศทางของผลึก

การระบุระนาบในผลึก

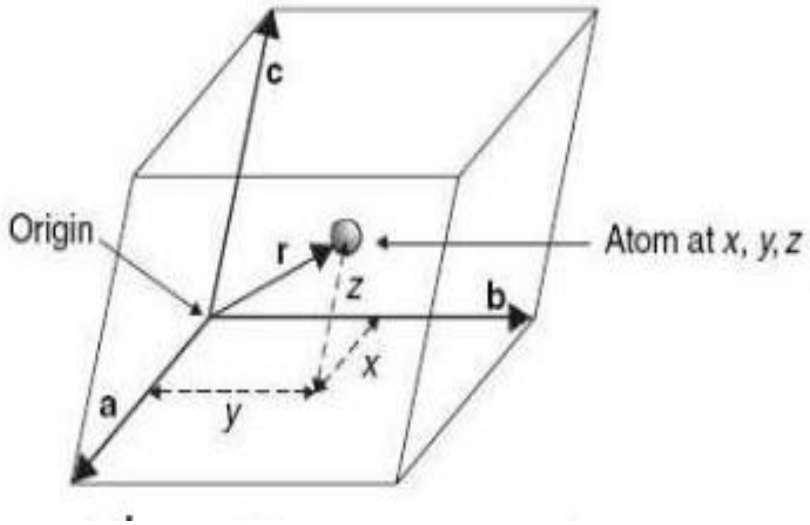
การระบุตำแหน่งบนพื้นผิวของแข็ง

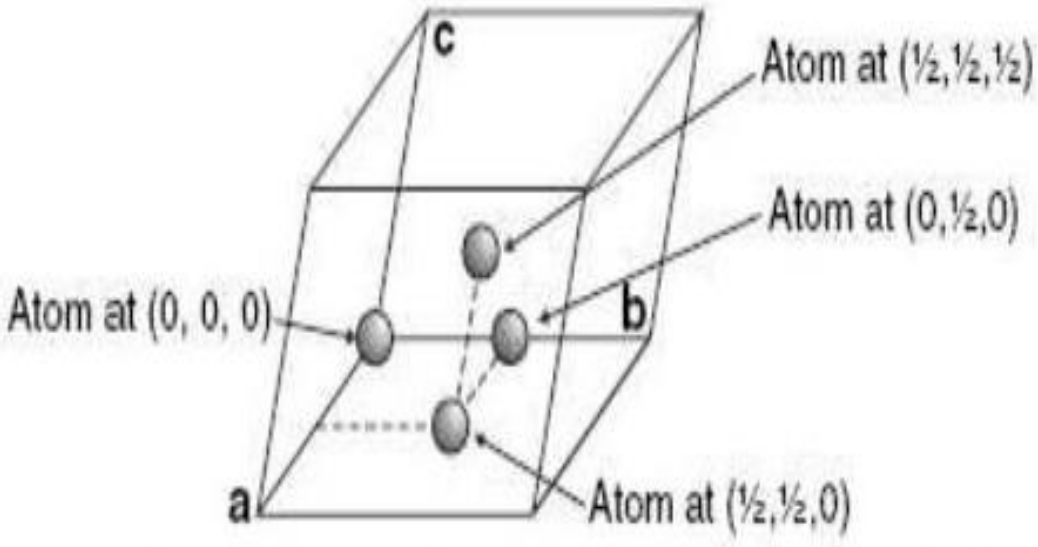


When dealing with crystalline materials, it often becomes necessary to specify a particular **point** within a unit cell, a crystallographic **direction**, or some crystallographic **plane** of atoms.



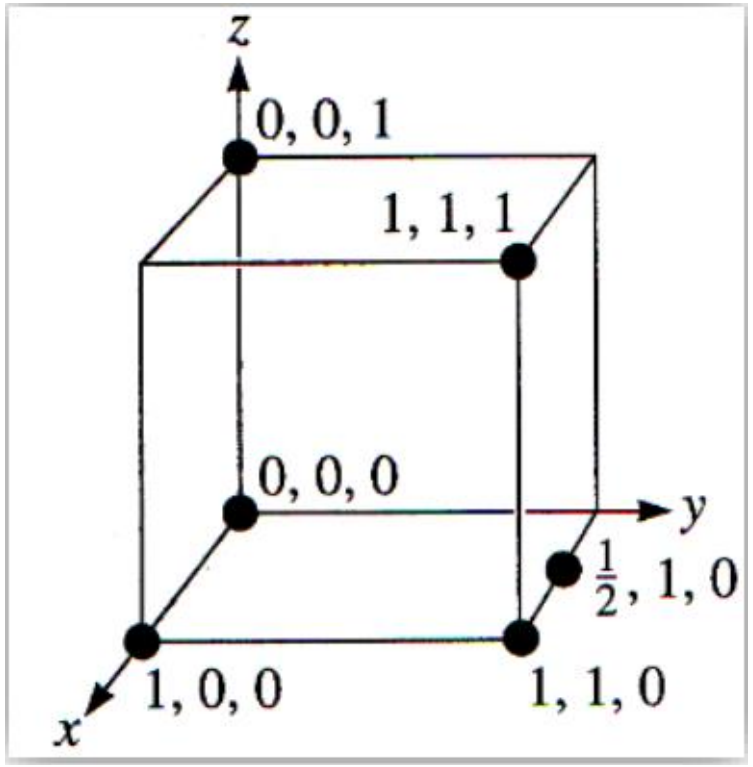
Three numbers or indices are used to designate point locations, directions, and planes.





จากรูปจะเห็นว่าตำแหน่งต่าง ๆ ของจุดในหน่วยเซลล์สามารถระบุโดยการบอกเป็นสัดส่วนของความยาวขอบของหน่วยเซลล์เช่นตำแหน่งอะตอมที่ 0,0,0 $0, \frac{1}{2}, 0$ $\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0$ และ $\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$

โคออร์ดิเนชันของจุด (Coordination of point) การระบุตำแหน่งที่แน่นอนของจุด เช่น ตำแหน่งของอะตอมในแลททิชหรือหน่วยเซลทำได้โดยการสร้างระบบโคออร์ดิเนชันไว้ทางด้านขวาดังแสดงใน รูปที่ การวัดระยะทางจะวัดในรูปของตัวเลขแลททิชพารามิเตอร์ที่มีระยะตามแนวแกน x y และ z โดย อ้างอิงจากจุดเริ่มต้น (0,0,0) การเขียนโคออร์ดิเนชันจะเขียนในสามมิติ และคั่นระหว่างตัวเลขด้วยเครื่องหมาย จุลภาค



ระนาบและทิศทางการเรียงตัวของผลึกจึงเป็นสิ่งสำคัญต่อการวิเคราะห์โครงสร้างผลึกเป็นอย่างมาก และ การบอกตำแหน่งอะตอมภายในโครงสร้างผลึกเป็นอีกสิ่งหนึ่งที่สำคัญเช่นกันการบอกทิศภายผลึกสามารถทำได้โดยหาตำแหน่งของจุด 2 จุดที่อยู่ในทิศทางที่กำหนด

สัญลักษณ์ที่ใช้ในการแทนระนาบและทิศทางในผลึก

ระนาบ(Plane)	( )
ชุดของระนาบ(Family of planes)	{ }
ทิศทาง(Direction)	[ ]
ชุดของทิศทาง(Family of directions)	⟨ ⟩

การบอกทิศภายผลึกสามารถทำได้โดยหาตำแหน่งของจุด 2 จุดที่อยู่ในทิศทางที่กำหนด และ

1. ใช้โคออร์ดิเนตของหัวลูกศรลบด้วยด้วยโคออร์ดิเนตของหางลูกศรจะได้ค่าคงที่แลตทิซ
2. ทำให้ตัวเลขที่ได้เป็นตัวเลขลงตัวน้อย ๆ
3. เขียนตัวเลขที่ได้ในข้อ 2 ในเครื่องหมาย [ ] โดยไม่ต้องมีเครื่องหมายแยก และหากตัวเลขนั้นมีค่าเป็นลบให้ขีดเส้นไว้เหนือตัวเลขนั้น ๆ

แนวคิดการหาทิศทางในผลึก

ทิศทางในโครงผลึก (Crystallographic Directions) คือ ทิศทางระหว่างจุด 2 จุด ในโครงผลึก เป็นเวกเตอร์ และสามารถบอกทิศทางของเวกเตอร์นี้โดยเขียนอยู่ในรูปของดัชนีทิศทาง ซึ่งสามารถหาได้โดย

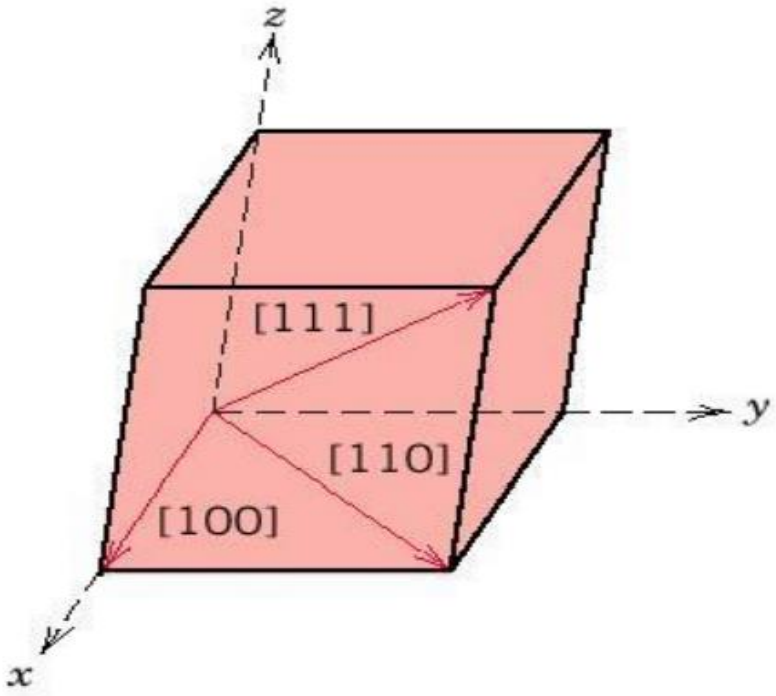
1) เวกเตอร์ (ระยะและทิศทางระหว่างจุด 2 จุด) ที่ต้องการหา ต้องผ่านจุดกำเนิดของแกน x, y, z ถ้าไม่ผ่าน ต้องเลื่อนเวกเตอร์นั้นมาที่จุดกำเนิด แต่ต้องให้เวกเตอร์ขนานกับเวกเตอร์เดิมด้วย

2) หาระยะโปรเจกชันของเวกเตอร์ ตามแนวแกนทั้ง 3 ในเทอม ของ a, b, c

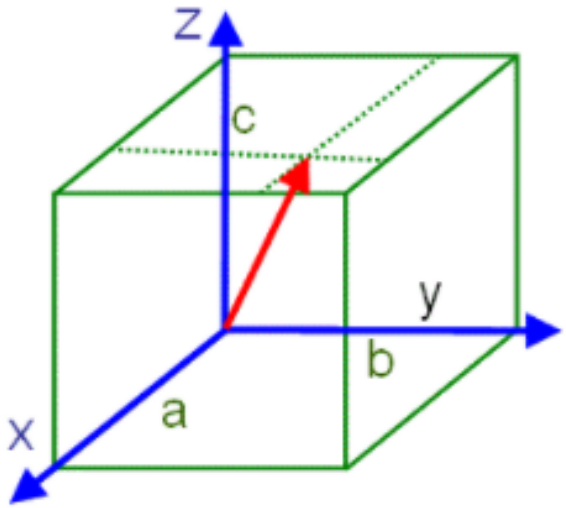
แนวคิดการหาทิศทางในผลึก

3) ทำให้ a, b, c เป็นเลขจำนวนเต็มที่น้อยที่สุด

4) เขียนตัวเลขจำนวนเต็มที่ได้ในวงเล็บใหญ่ [ ] โดยไม่มีเครื่องหมายใดๆ กั้นระหว่างตัวเลขเช่น [u v w] เมื่อ u, v, w เป็นระยะโปรเจกชันของเวกเตอร์ตามแกน x, y, z



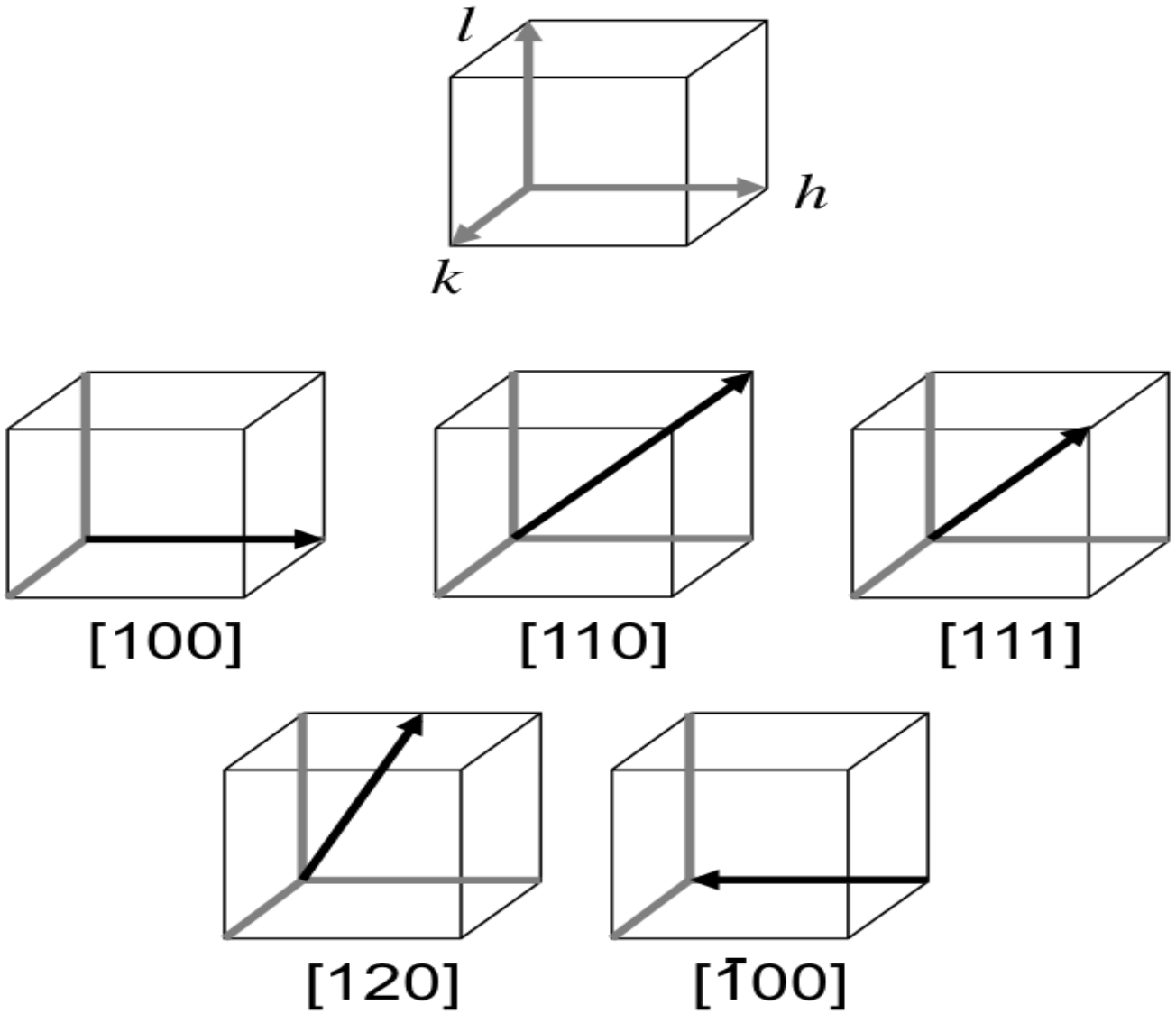
นอกจากใช้ชื่อระนาบในการบอกแลตทิซในผลึก บางครั้งอาจจะใช้เวกเตอร์ในการระบุทิศทางของระนาบได้ โดยใช้สัญลักษณ์ของเวกเตอร์ที่บอกทิศทางของระนาบชื่อ (hkl) คือ [hkl]



	x(a)	y(b)	z(c)
Point coordinates	4/5	3/5	1
Clear fractions	4	3	5
Crystal direction	[435]		

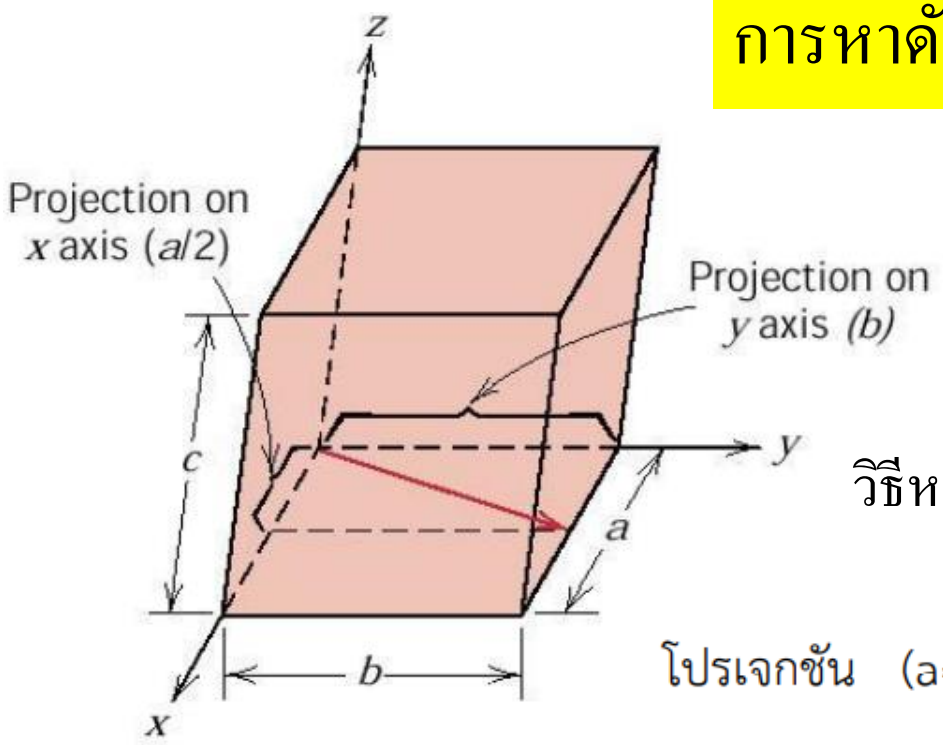
Figure 2504. Evaluation of the crystal direction in a cubic lattice.

เวกเตอร์ในการระบุทิศทางของระนาบ



แนวคิดการหาทิศทางในผลึก

การหาดัชนีทิศทางของเวกเตอร์

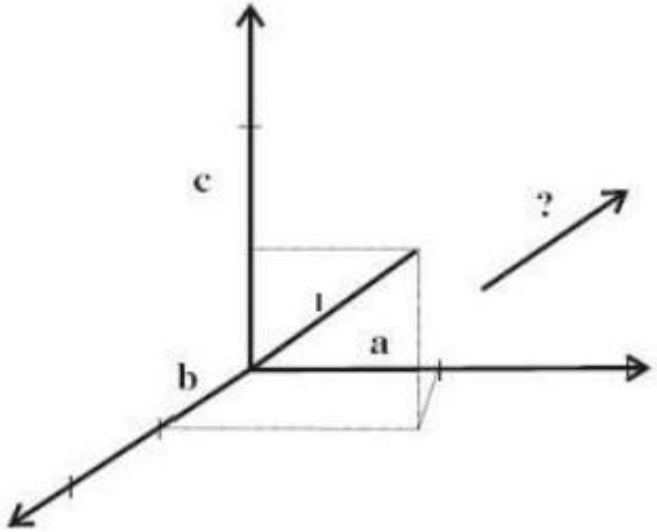


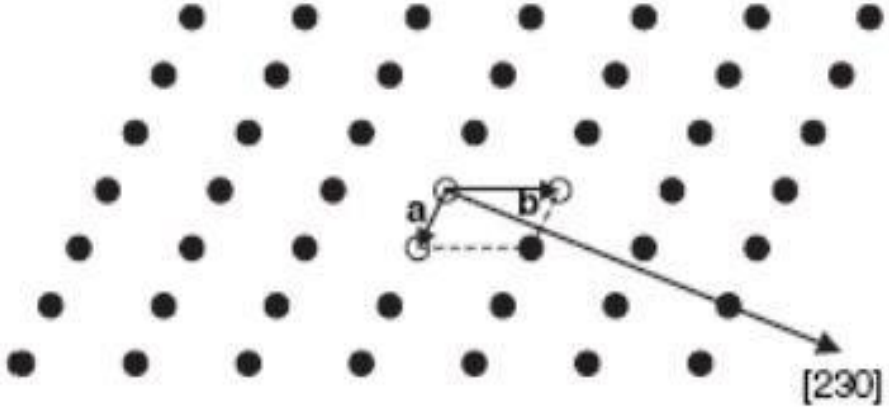
วิธีหา ทิศทางทำได้ดังนี้ แกนโคออร์ดิเนต

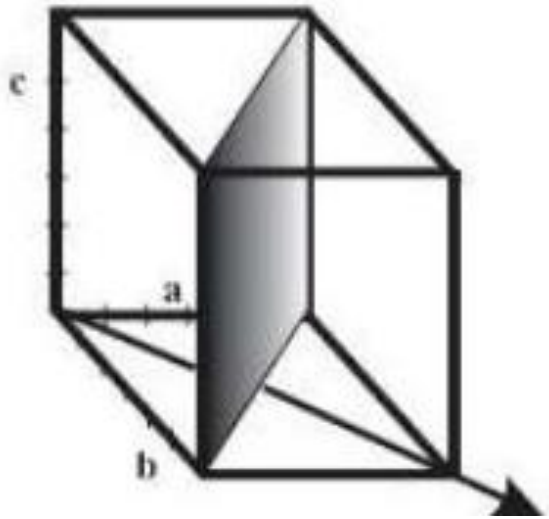
	x	y	z
โปรเจกชัน (a=b=c)	a/2	b	0 c
เมื่อตัด a, b, c	½	1	0
ทำให้เป็นเลขจำนวนเต็มที่น้อยที่สุด	1	2	0

ดัชนี มีค่า [120] ….. Ans.

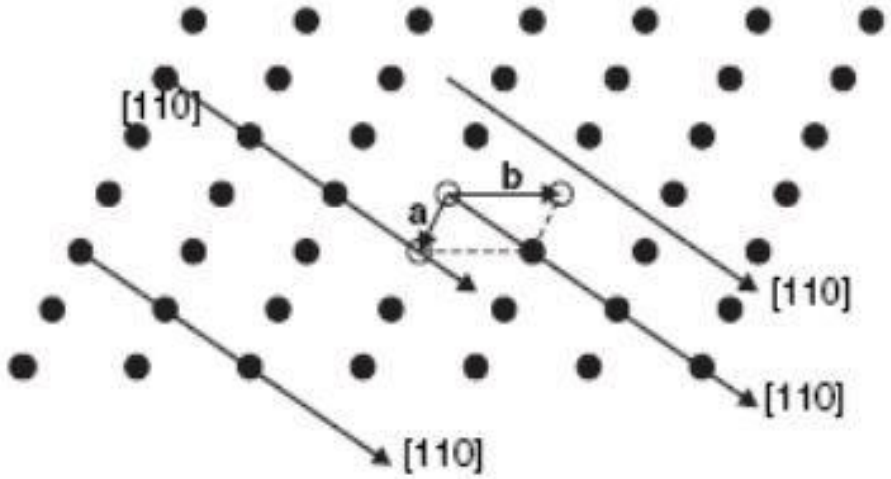
แนวคิดการหาทิศทางในผลึกลูกบาศก์



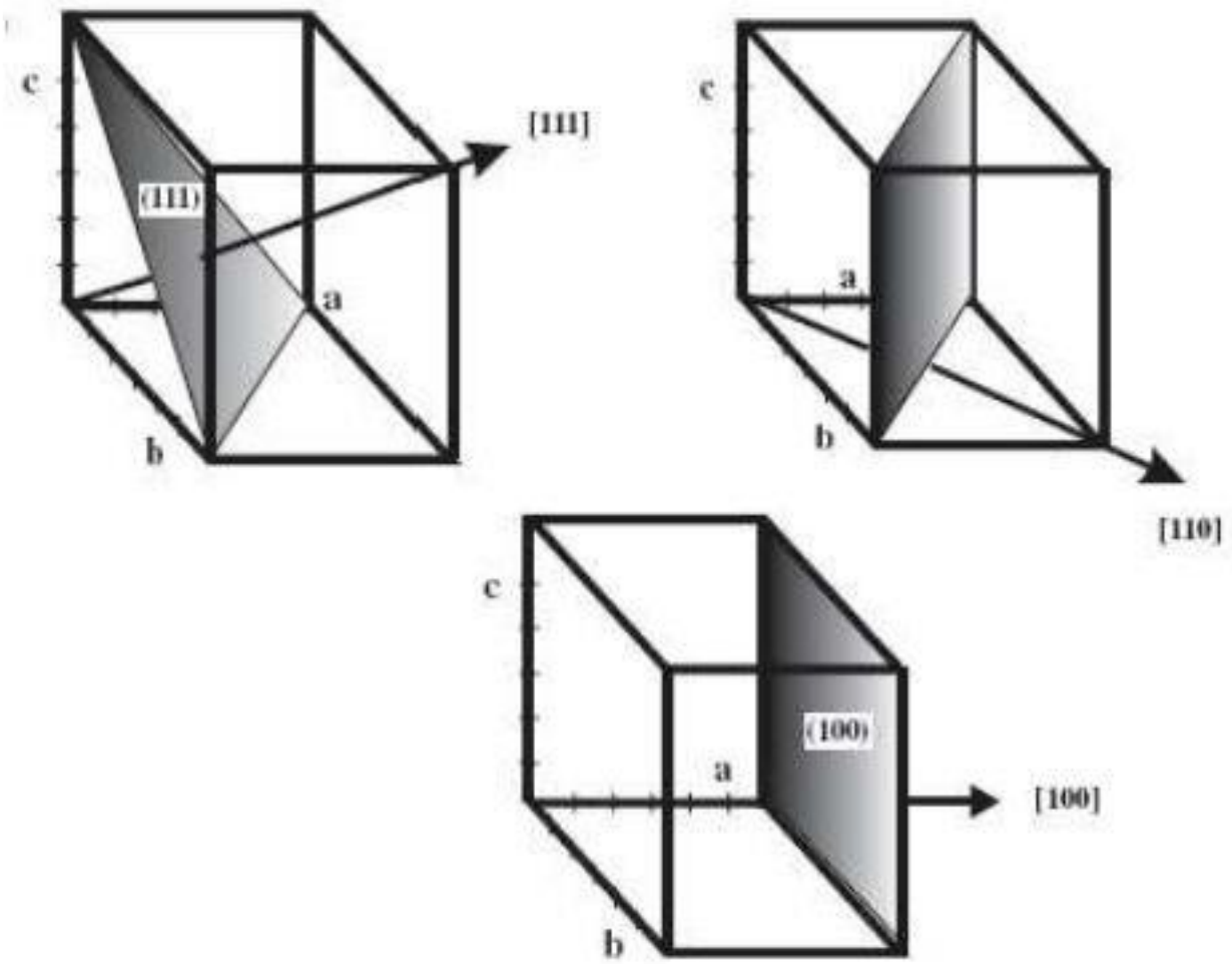




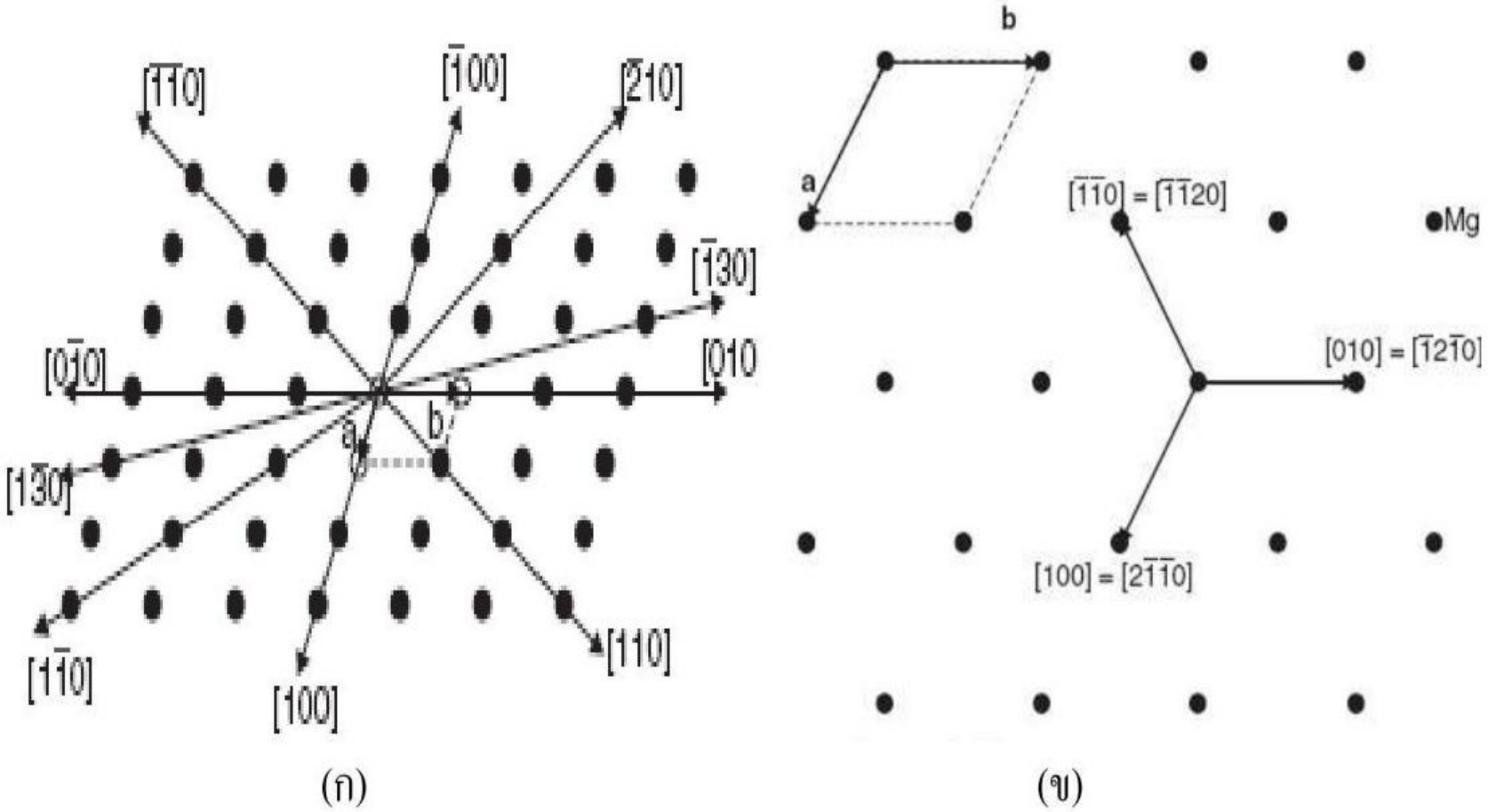
[110]



แนวคิดการหาทิศทางในผลึกลูกบาศก์



แนวคิดการหาทิศทางในผลึกลูกบาศก์



(ก) ทิศทางต่าง ๆ ในผลึกแบบลูกบาศก์ (ข) ผลึกแลตทิซแบบหกเหลี่ยม[Tilley R., 2006]

บทนำ

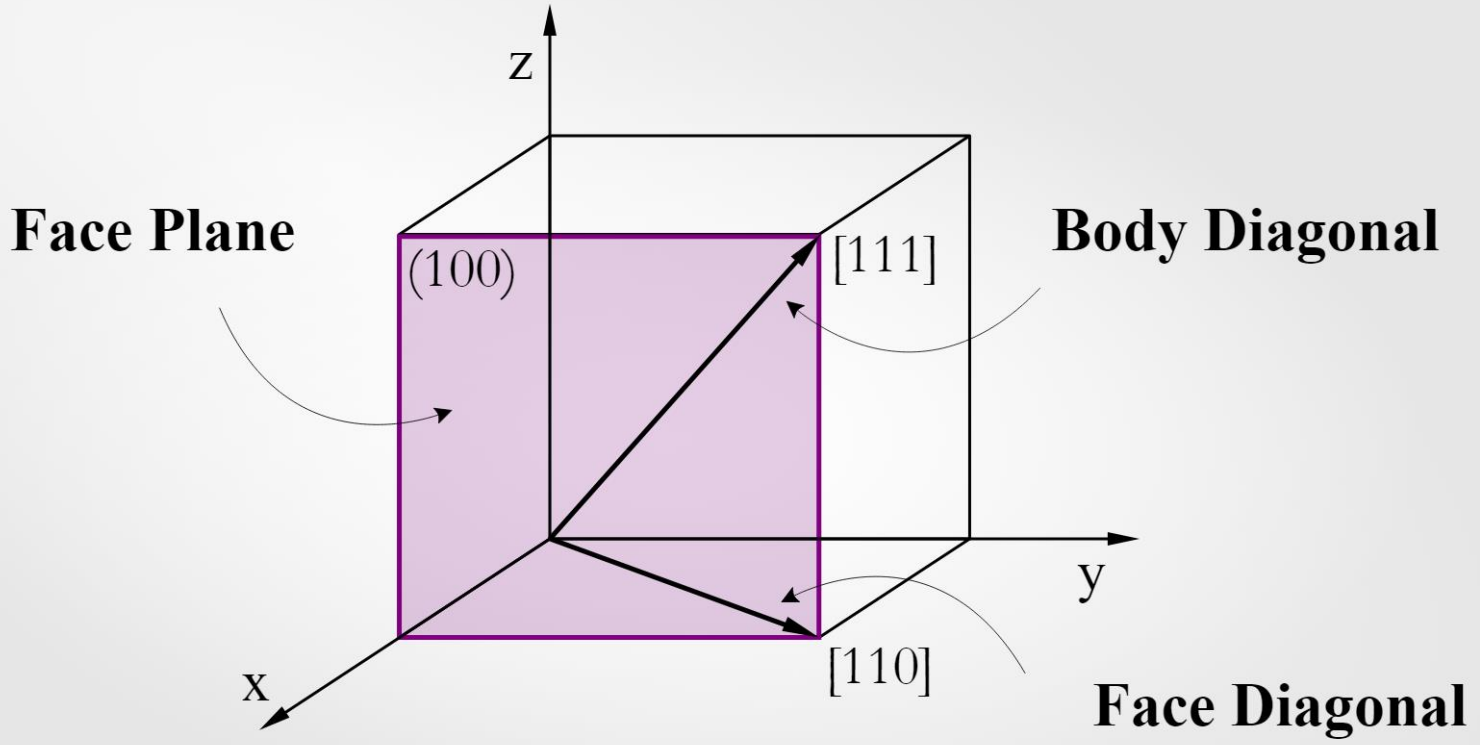
ตำแหน่งอะตอม

ทิศทางของผลึก

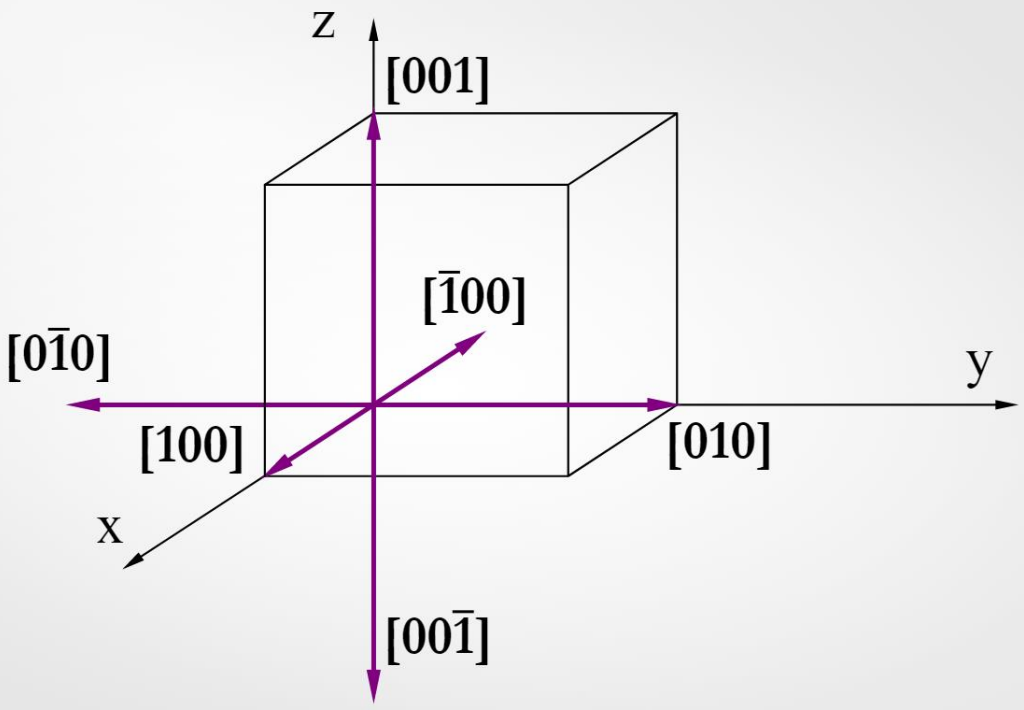
การระบุระนาบในผลึก

การระบุตำแหน่งบนพื้นผิวของแข็ง

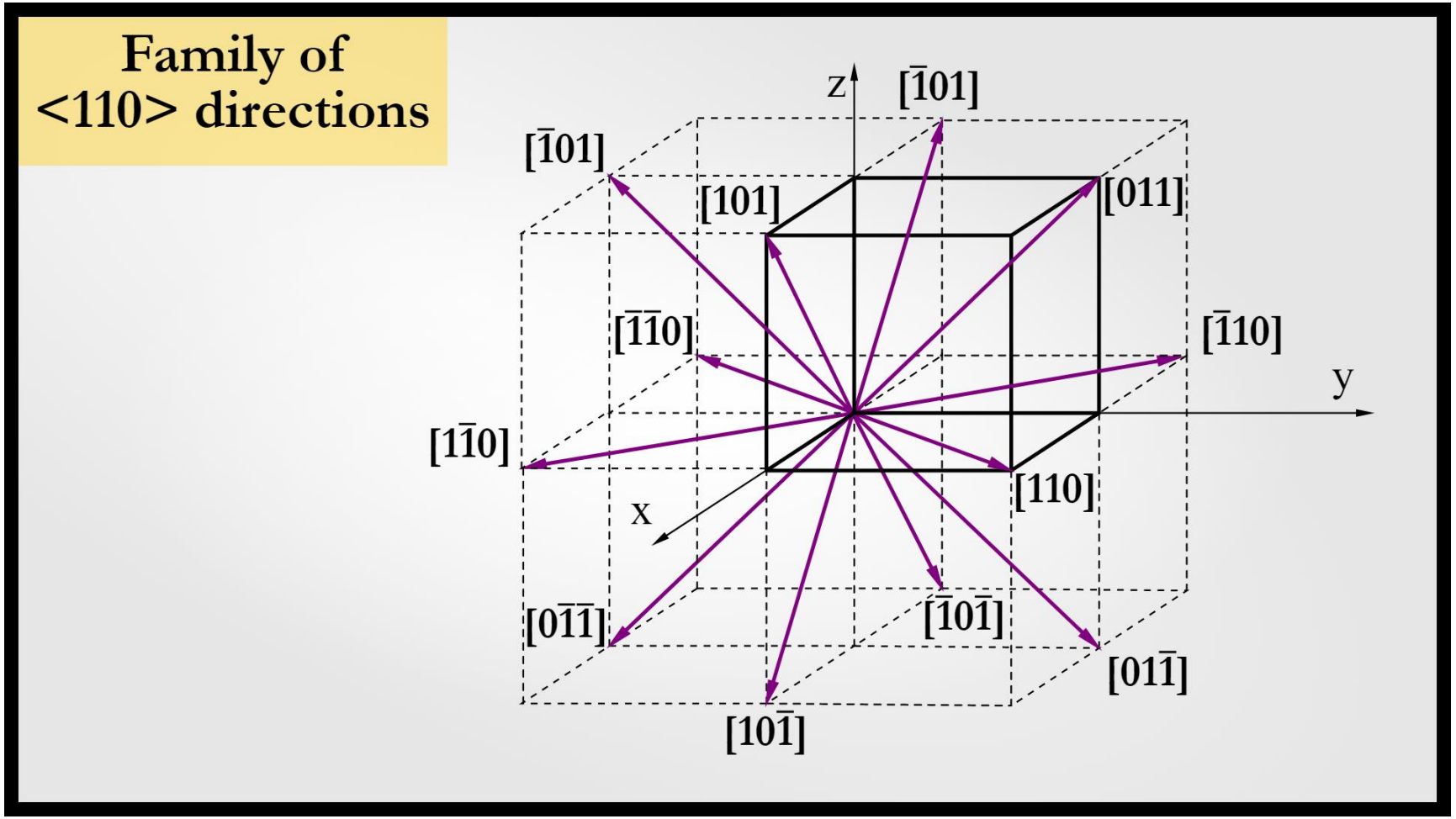
Common Examples of Miller Indices



Family of <100> directions

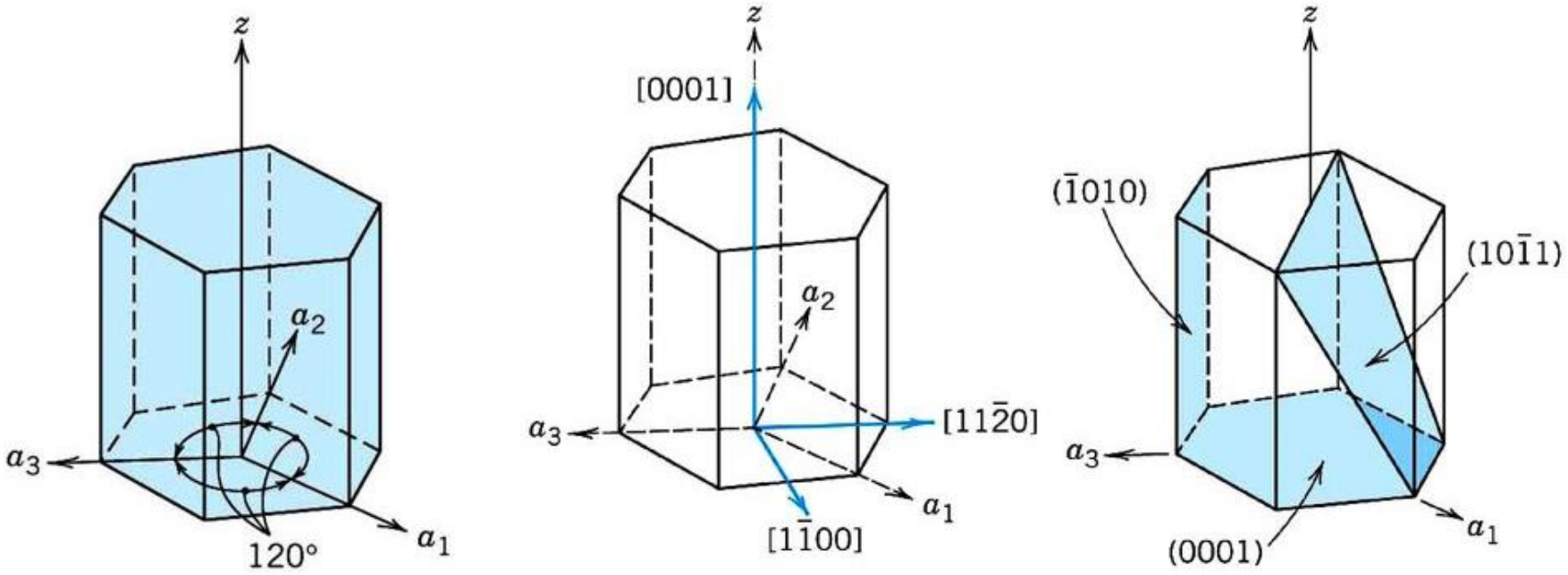


ดัชนีมิลเลอร์ (Miller indices)



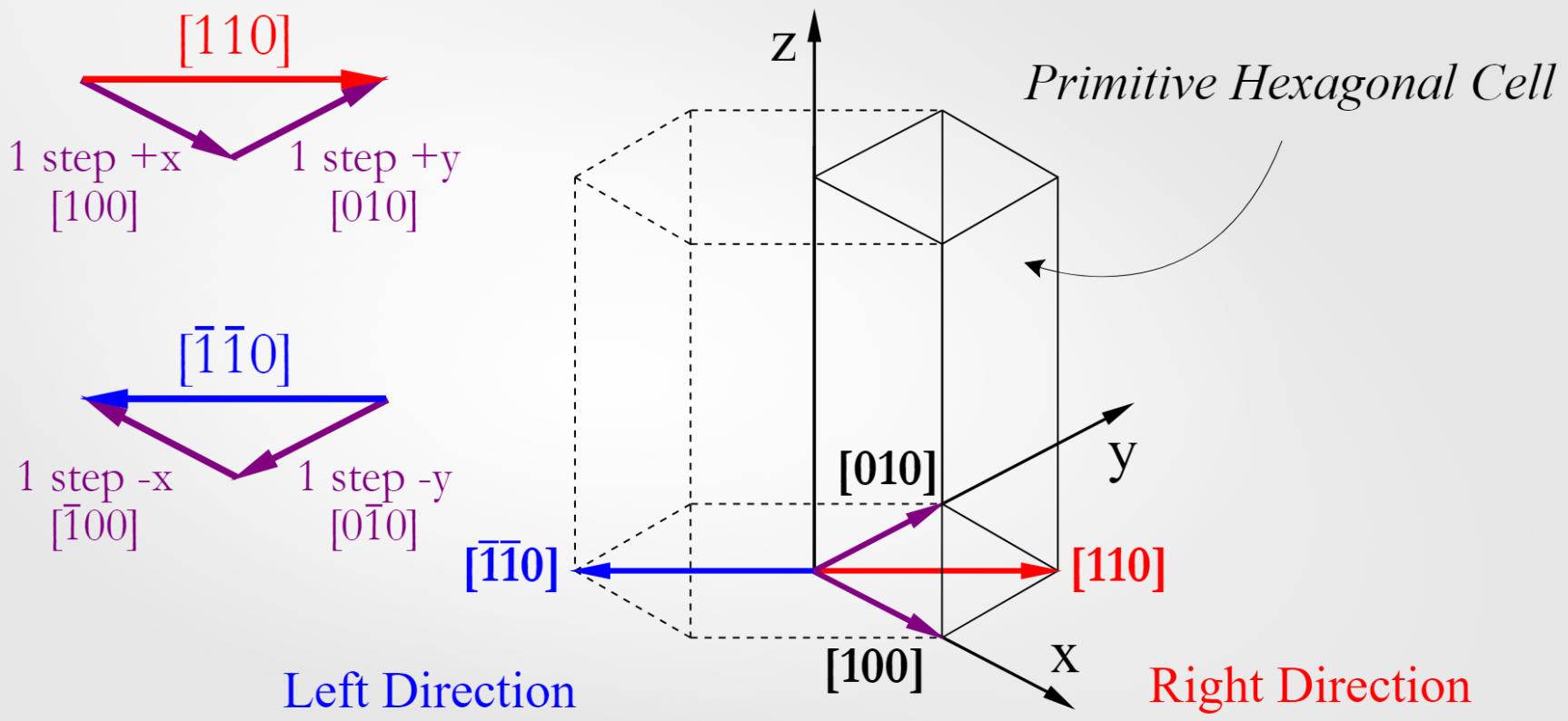
Crystallographic Directions

- **Hexagonal Crystal System**

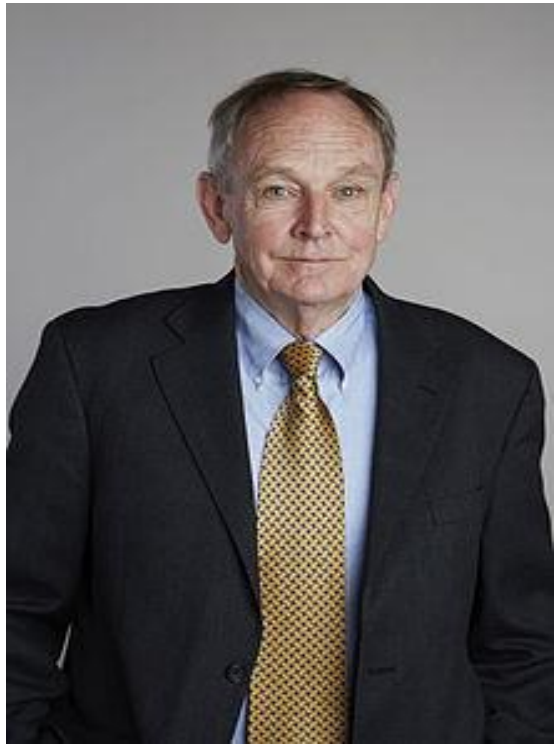


บทนำ
ตำแหน่งอะตอม
ทิศทางของผลึก
การระบุระนาบในผลึก
การระบุตำแหน่งบนพื้นผิวของแข็ง

Directions in a Hexagonal Crystal



ดัชนีมิลเลอร์ (Miller indices)

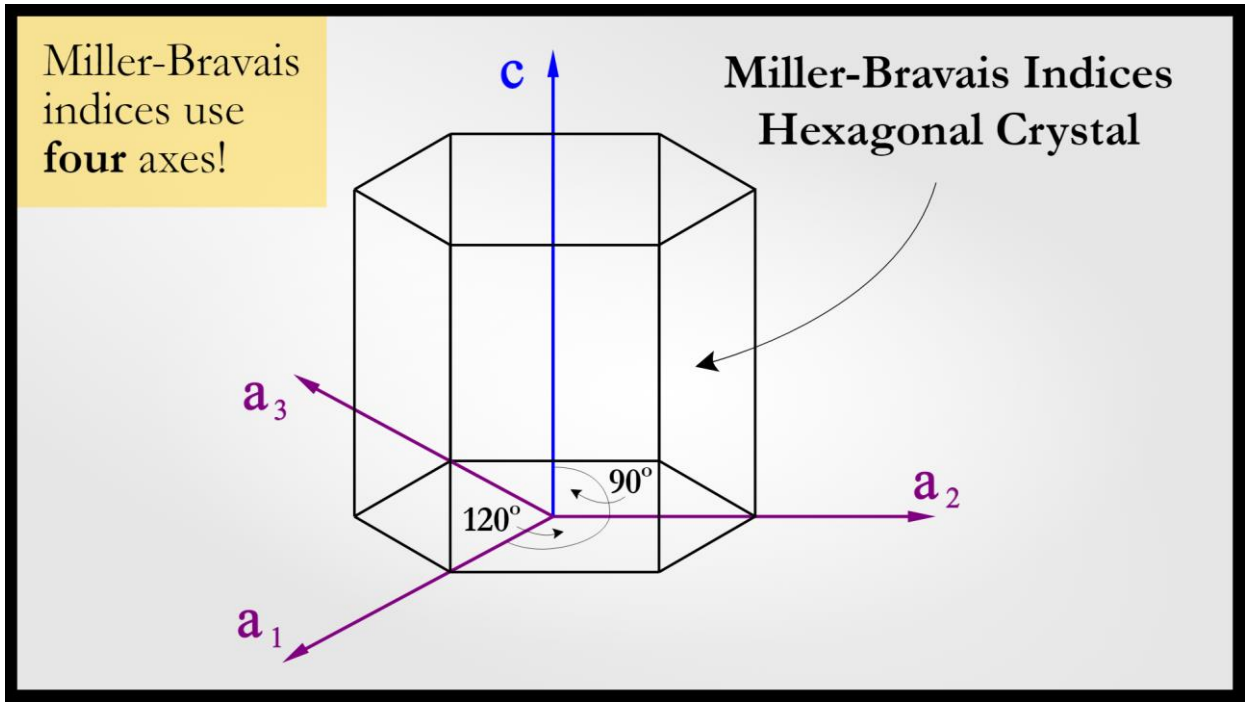


วิลเลียม ฮิวจ์ส มิลเลอร์

ศาสตราจารย์ ดร. วิลเลียม ฮิวจ์ส มิลเลอร์ นักผลึกศาสตร์ ชาวอังกฤษ ได้คิดค้นการระบุทิศทางในผลึกและระนาบในผลึก โดยอาศัย ตัวเลข จึงกำหนดตัวเลข นั้นว่า **ดัชนีมิลเลอร์ (Miller indices)**

ดัชนีมิลเลอร์ (Miller indices)

ค่าดัชนีมิลเลอร์ (Miller indices) เป็นตัวบอกลักษณะของระนาบ โดยเรียกเป็นค่าตัวเลขที่ได้มาจากส่วนกลับของจุดตัด (Intercept) ของระนาบนั้นกับแกนอ้างอิงของผลึก (Crystal Axes) ที่กำหนดขึ้นการหาค่าดัชนีมิลเลอร์ของระนาบทำได้ตามขั้นตอนดังนี้



ดัชนีมิลเลอร์ (Miller indices)

1. กำหนดแกนอ้างอิงขึ้น 3 แกน โดยเลือกจุดกำเนิด (Origin) ของแกนอ้างอิงไม่ให้ระนาบที่ต้องการหาดัชนีมิลเลอร์

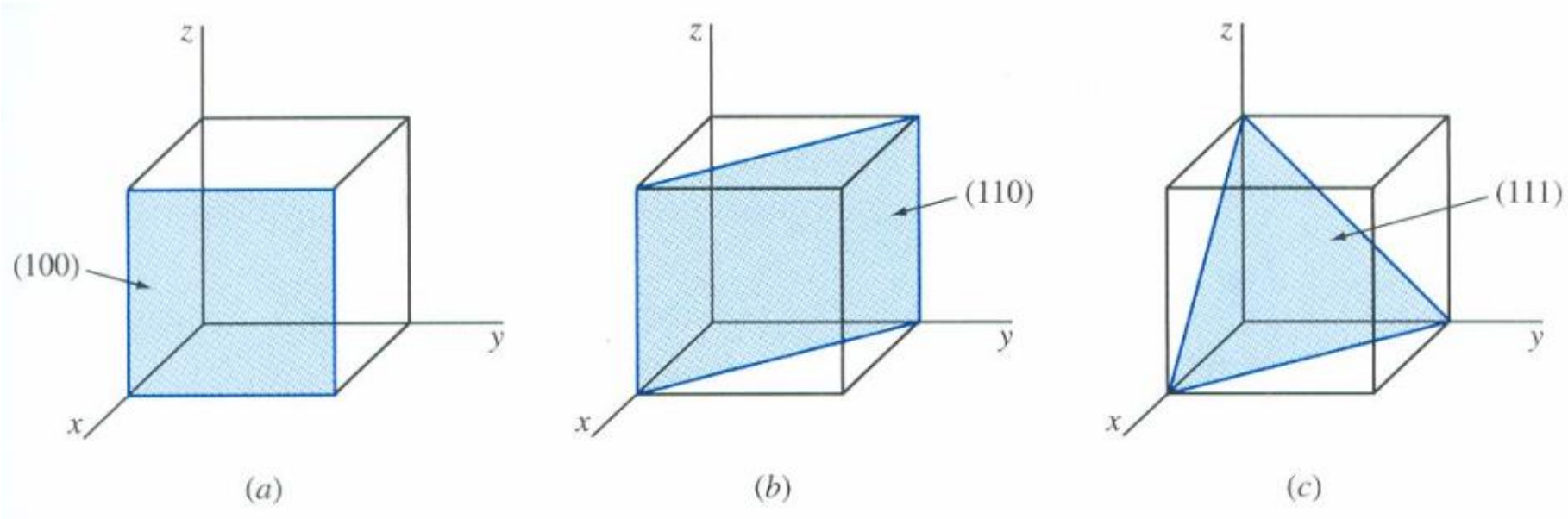
2. หาจุดตัดของระนาบนี้บนแกนอ้างอิงทั้งสาม และหาค่าขนาดระยะจุดตัดที่ห่างจากจุด เป็นที่ห่างจากจุดกำเนิด เป็นค่าตามสัดส่วนของหน่วยความยาวของแต่ละแกน สมมุติว่าค่าที่อ่านได้เป็น x,y, z ตามลำดับ

3. หาเศษส่วนกลับ (Reciprocals) ของระยะจุดตัดดังกล่าว จะได้เป็น $\frac{1}{x}, \frac{1}{y} \frac{1}{z}$

4. แปลงค่าเศษส่วนที่ได้จากข้อ 3 ให้เป็นเลขจำนวนเต็มค่าน้อยที่สุด โดยที่สัดส่วน (ratio) ระหว่างค่าทั้งสามยังคงเดิม สมมุติว่าได้ค่า h, k, l ตามลำดับ

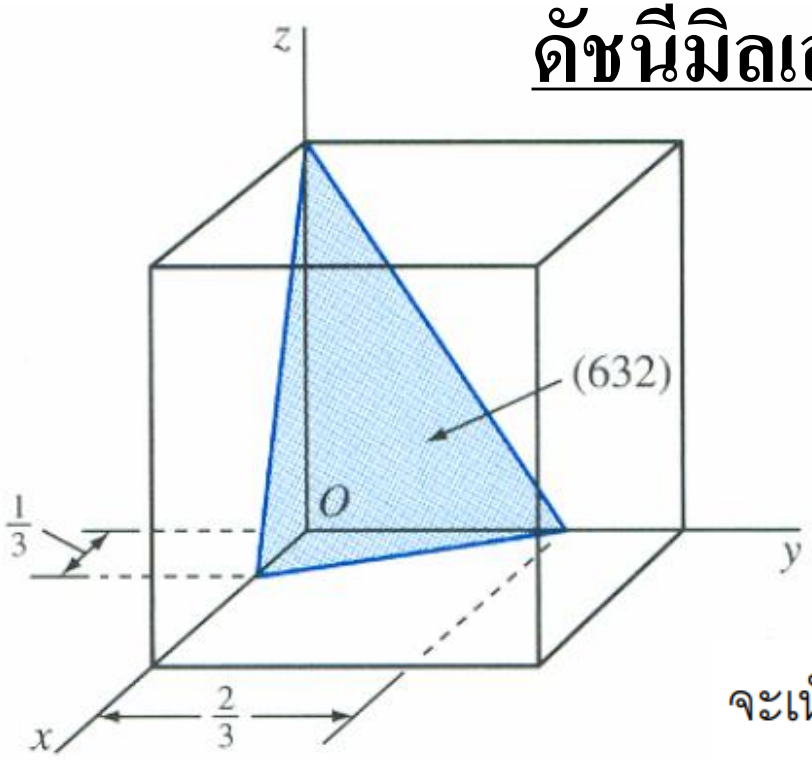
5. เขียนค่าดัชนีมิลเลอร์ของระนาบนี้ด้วยสัญลักษณ์ในวงเล็บคือ (h k l)

ดัชนีมิลเลอร์ (Miller indices)



ซึ่งใน ภาพ a นั้นจุดตัดแกนจะเป็น 1, ∞,∞ ที่แกน X, Y, Z ตามลำดับ เมื่อนำค่าจุดตัดแกนที่ได้ไปกลับเศษส่วนจะได้เป็น $\frac{1}{1},\frac{1}{\infty},\frac{1}{\infty}$ ซึ่งมีค่าเท่ากับ 1, 0, 0 ดังนั้นค่าดัชนีมิลเลอร์จึงเป็น (100) และสำหรับ ภาพ b จุดตัดแกนเป็น 1,1, ∞ ดังนั้นค่าดัชนีมิลเลอร์จึงเป็น (110) ในทำนองเดียวกันใน ภาพ c ค่าดัชนีมิลเลอร์เป็น (111)

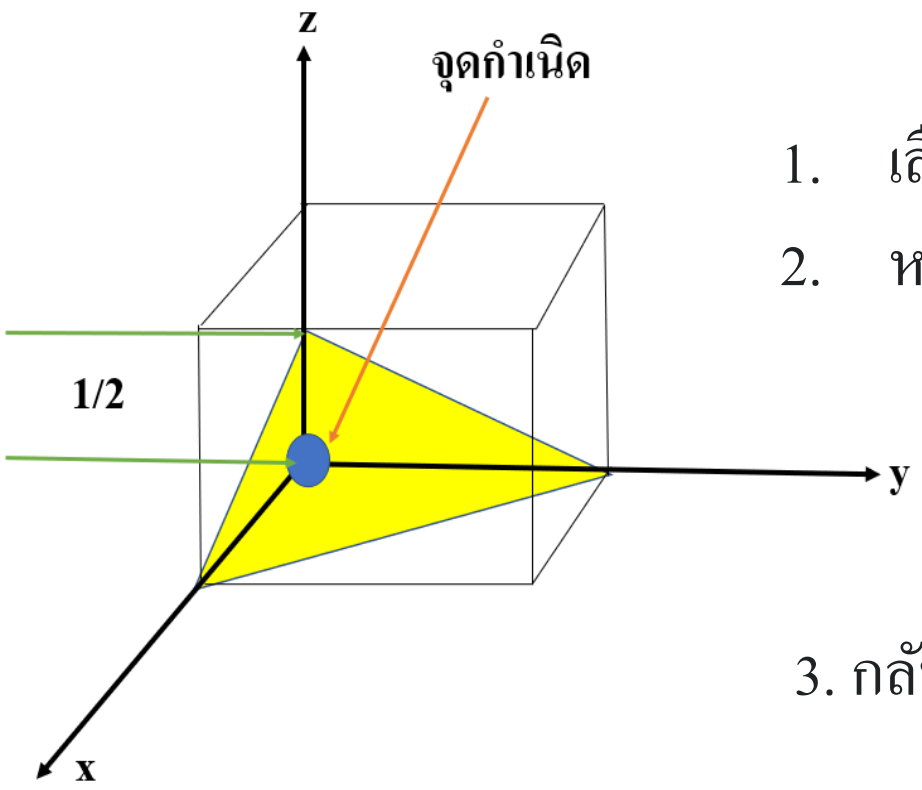
ดัชนีมิลเลอร์ (Miller indices)



จะเห็นว่าจุดตัดแกนจะเป็น $\frac{1}{3},\frac{2}{3},1$ เมื่อกลับเศษส่วนแล้ว จะได้ค่าเป็น $3,\frac{3}{2},1$ จะเห็นว่าไม่เป็นเลขจำนวนเต็ม ดังนั้นจึงต้องคูณด้วย 2 เพื่อจะได้เป็นเลขจำนวนเต็ม ทำให้ค่าที่ได้เป็น 6, 3, 2 และดัชนีมิลเลอร์เป็น (632)

ที่น่าสังเกตอีกประการหนึ่งก็คือ เราสามารถเลือกตำแหน่งอะตอมใด ๆ ก็ได้ภายในหน่วยเซลให้เป็นจุดเริ่มต้น (Origin) ของแกนอ้างอิง ดังนั้นค่าของจุดตัดที่ได้จึงอาจเป็นได้ทั้ง

ดัชนีมิลเลอร์ (Miller indices)



1. เลือกจุดกำเนิด
2. หาจุดตัดแกน นับจากจุดกำเนิด

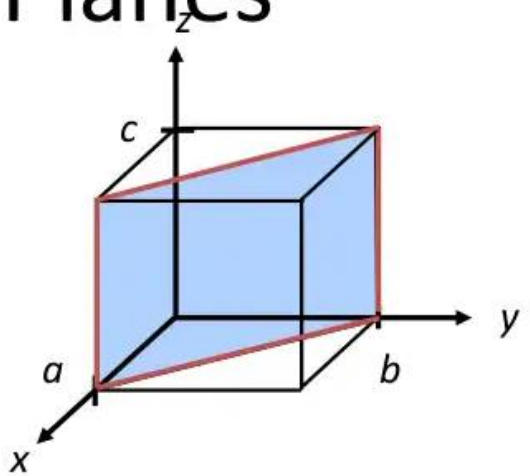
	x	y	z
	a	b	c
	1	1	½
3. กลับส่วน	1/1	1/1	2/1
	h	k	l
4. ชื่อระนาบ	1	1	2

ระนาบนี้คือ (h k l) = (112)

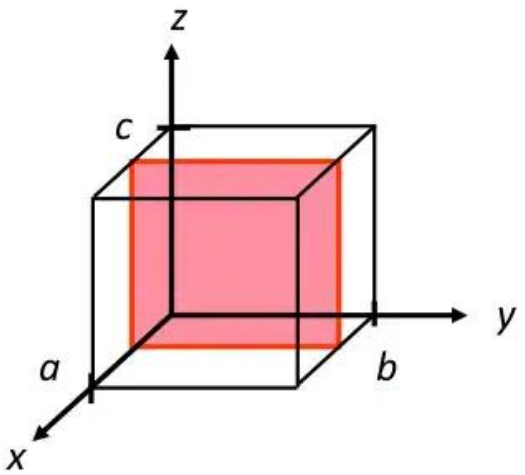
ดัชนีมิลเลอร์ (Miller indices)

Crystallographic Planes

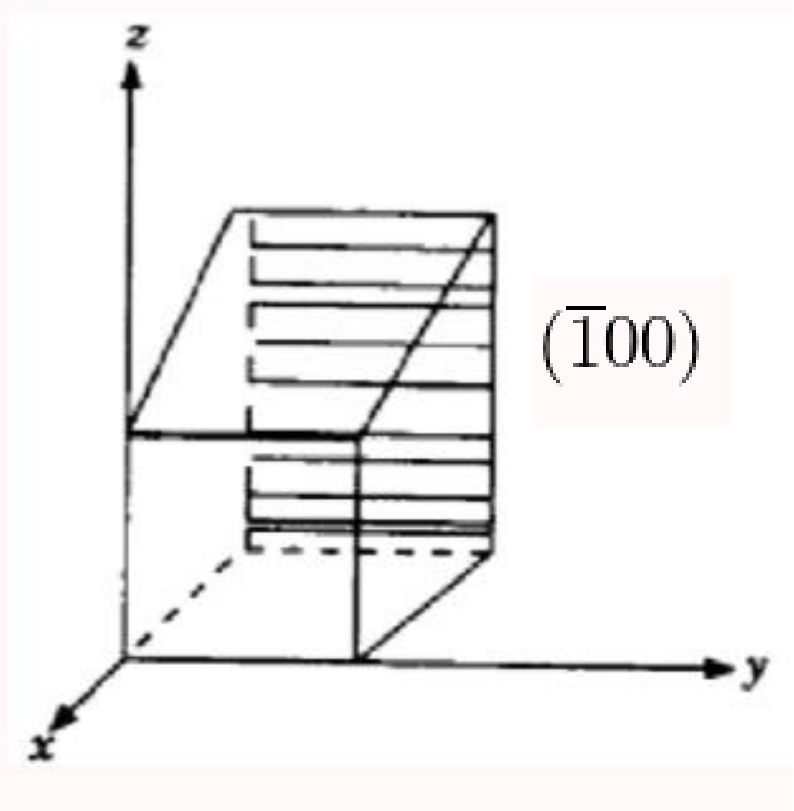
example		a	b	c
1.	Intercepts	1	1	∞
2.	Reciprocals	1/1	1/1	1/∞
		1	1	0
3.	Reduction	1	1	0
4.	Miller Indices	(110)		

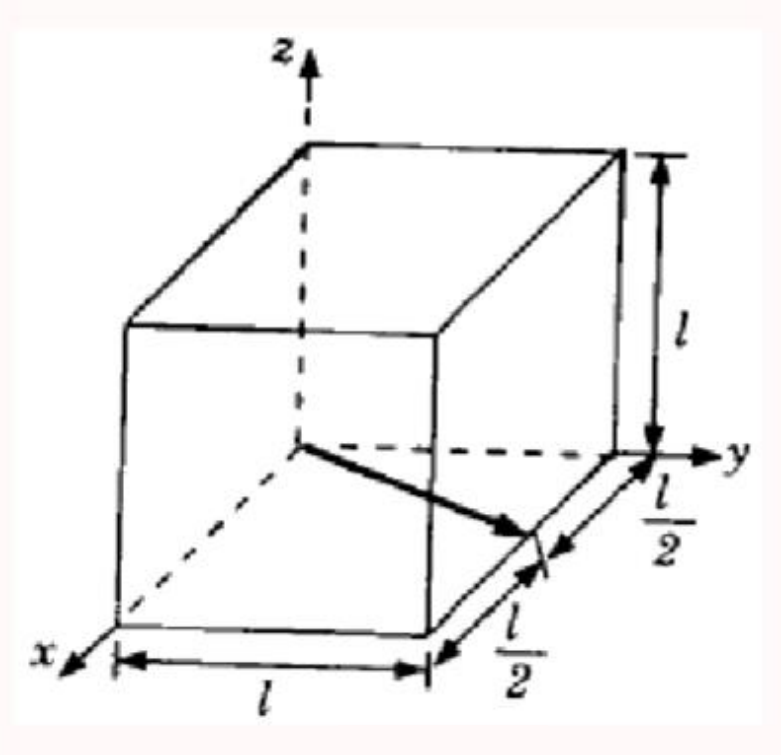


example		a	b	c
1.	Intercepts	1/2	∞	∞
2.	Reciprocals	1/½	1/∞	1/∞
		2	0	0
3.	Reduction	2	0	0
4.	Miller Indices	(200)		



ดัชนีมิลเลอร์ (Miller indices)





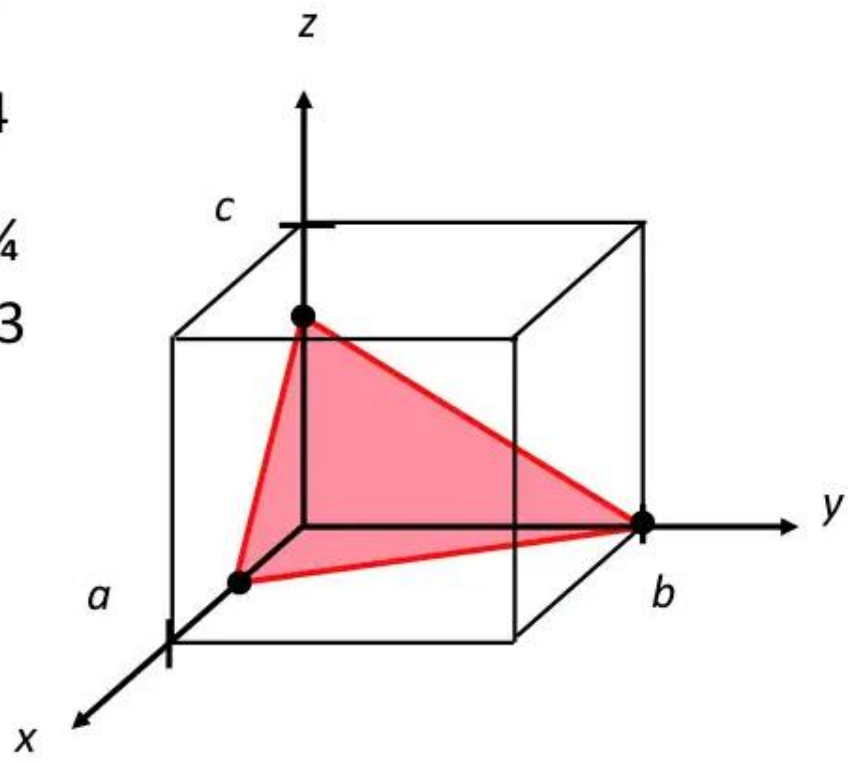
[1 2 0]

ดัชนีมิลเลอร์ (Miller indices)

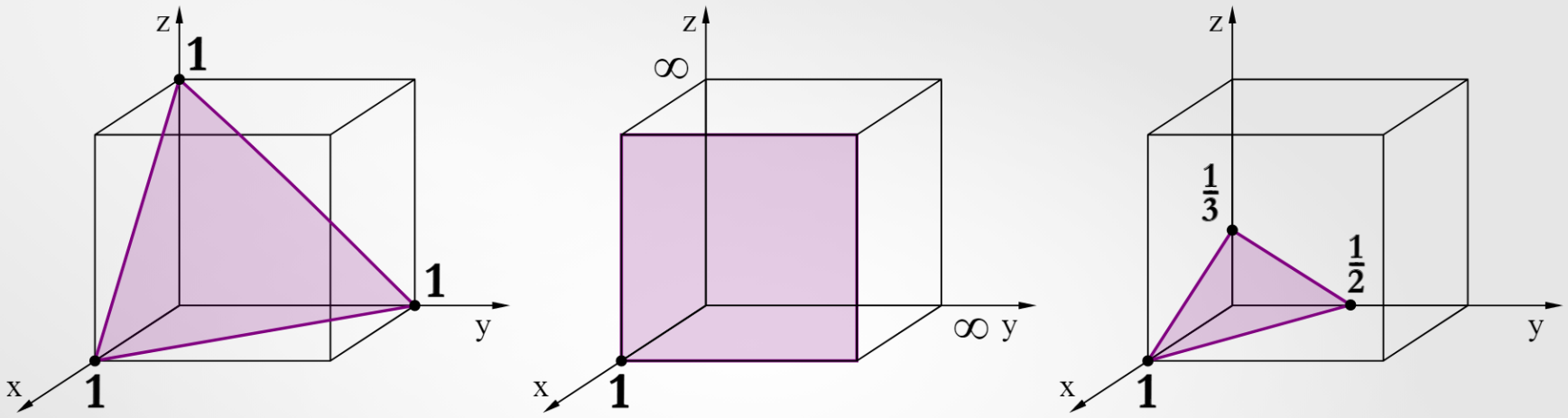
Crystallographic Planes

example

		a	b	c
1.	Intercepts	1/2	1	3/4
2.	Reciprocals	1/½	1/1	1/¾
		2	1	4/3
3.	Reduction	6	3	4
4.	Miller Indices	(634)		



How to Find Miller Indices for Planes?

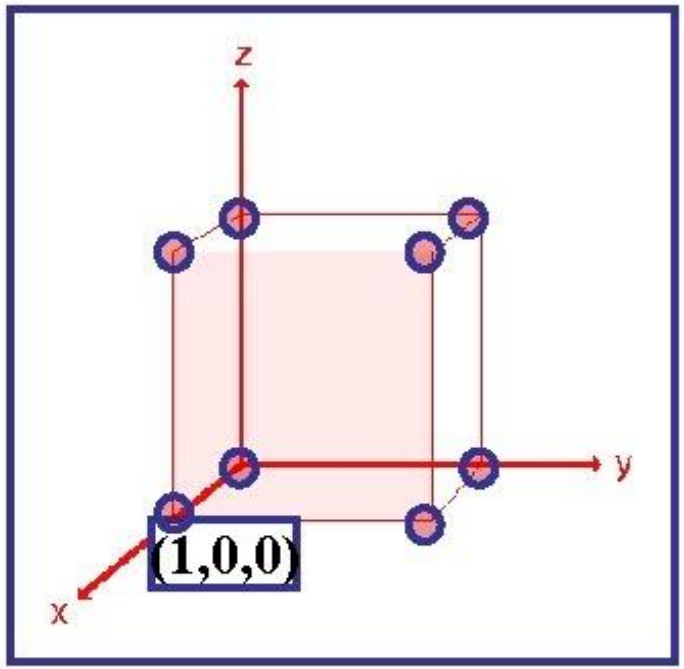


1. 111
2. $\frac{1}{1}\frac{1}{1}\frac{1}{1} = 111$
3. (111)

1. $1\infty\infty$
2. $\frac{1}{1}\frac{1}{\infty}\frac{1}{\infty} = 100$
3. (100)

1. $1\frac{1}{2}\frac{1}{3}$
2. $\frac{1}{1}\frac{2}{1}\frac{3}{1} = 123$
3. (123)

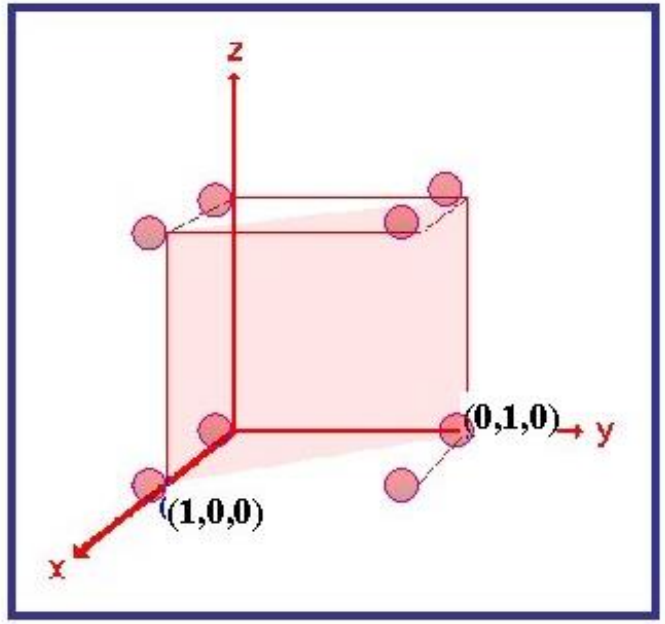
(100) Plane



Axis	x	y	z
Intercept points	1	∞	∞
Reciprocals	1/1	1/ ∞	1/ ∞
Smallest Ratio	1	0	0
Miller Indices (100)			

12

(110) Plane



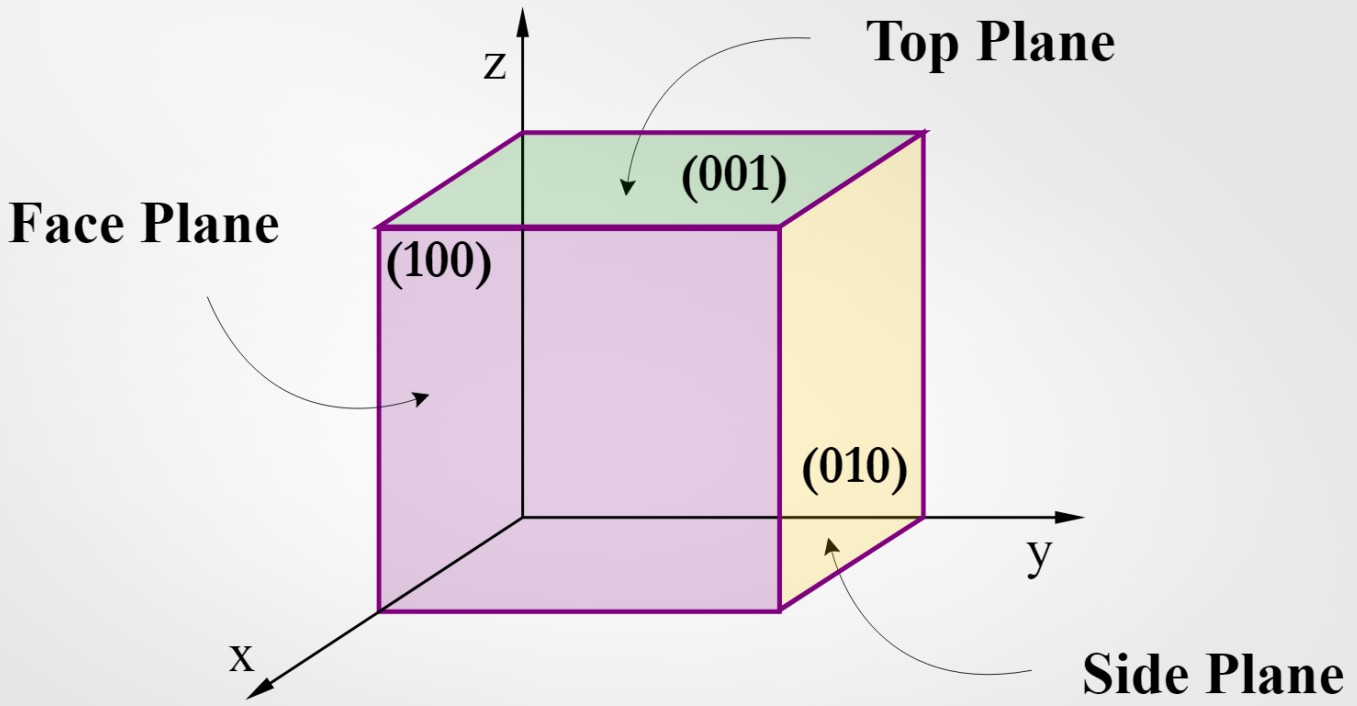
Axis	x	y	z
Intercept points	1	1	∞
Reciprocals	1/1	1/ 1	1/ ∞
Smallest Ratio	1	1	0
Miller Indices (110)			

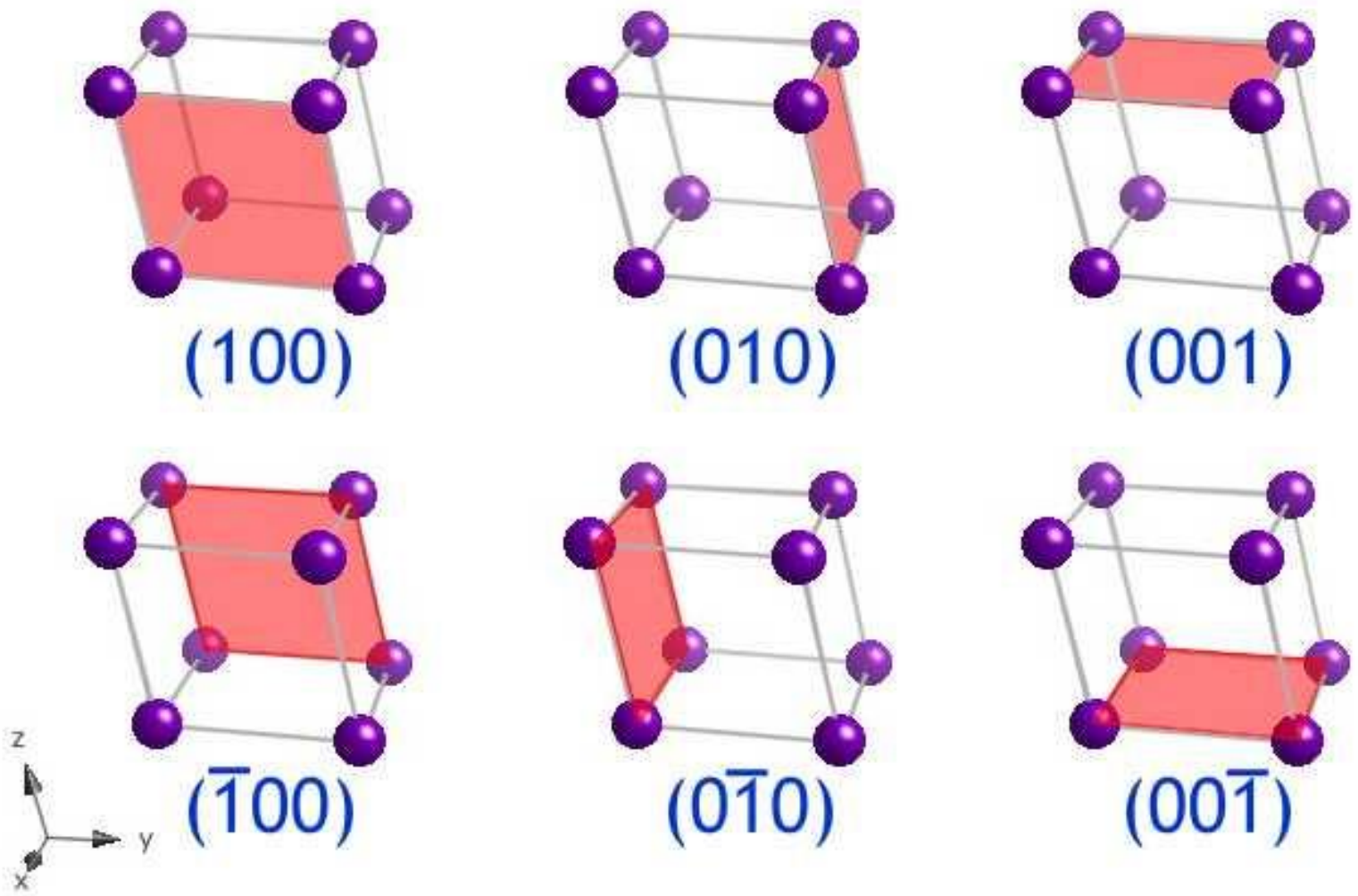
13

ดัชนีมิลเลอร์ (Miller indices)

ดัชนีมิลเลอร์ของระนาบเดียวกันนั้นแตกต่างกันไป เช่นระนาบ (100) ใน cubic system อาจเขียนเป็นอื่นได้คือ (100), (010), (010), (100), (010) และ (001) เป็นต้น แต่อย่างไรก็ดีทางด้านของวิชาผลึกวิทยา (Crystallographic) แล้วจะไม่ถือว่าเรื่องนี้เป็นปัญหาสำคัญนำเพราะจะสนใจเรื่องลักษณะการเรียงตัวของอะตอมในระนาบมากกว่า โดยปกติแล้วระนาบที่ต่างกันเฉพาะเครื่องหมาย และลำดับของตัวเลขนั้น ย่อมมีลักษณะการเรียงตัวของอะตอมเหมือนกัน ดังนั้นในแง่ของการศึกษาที่เกี่ยวกับระนาบซึ่งมีรูปแบบเทียบเท่ากันเช่นนี้ จึงจัดให้เป็นระนาบที่อยู่ในเครือของระนาบ (Family of Planes) เดียวกัน และเขียนแทนด้วยค่าดัชนีในวงเล็บปีกกา { }

Family of {100} planes




(100)
(010)
(001)
$(\bar{1}00)$
$(0\bar{1}0)$
$(00\bar{1})$
z
y
x

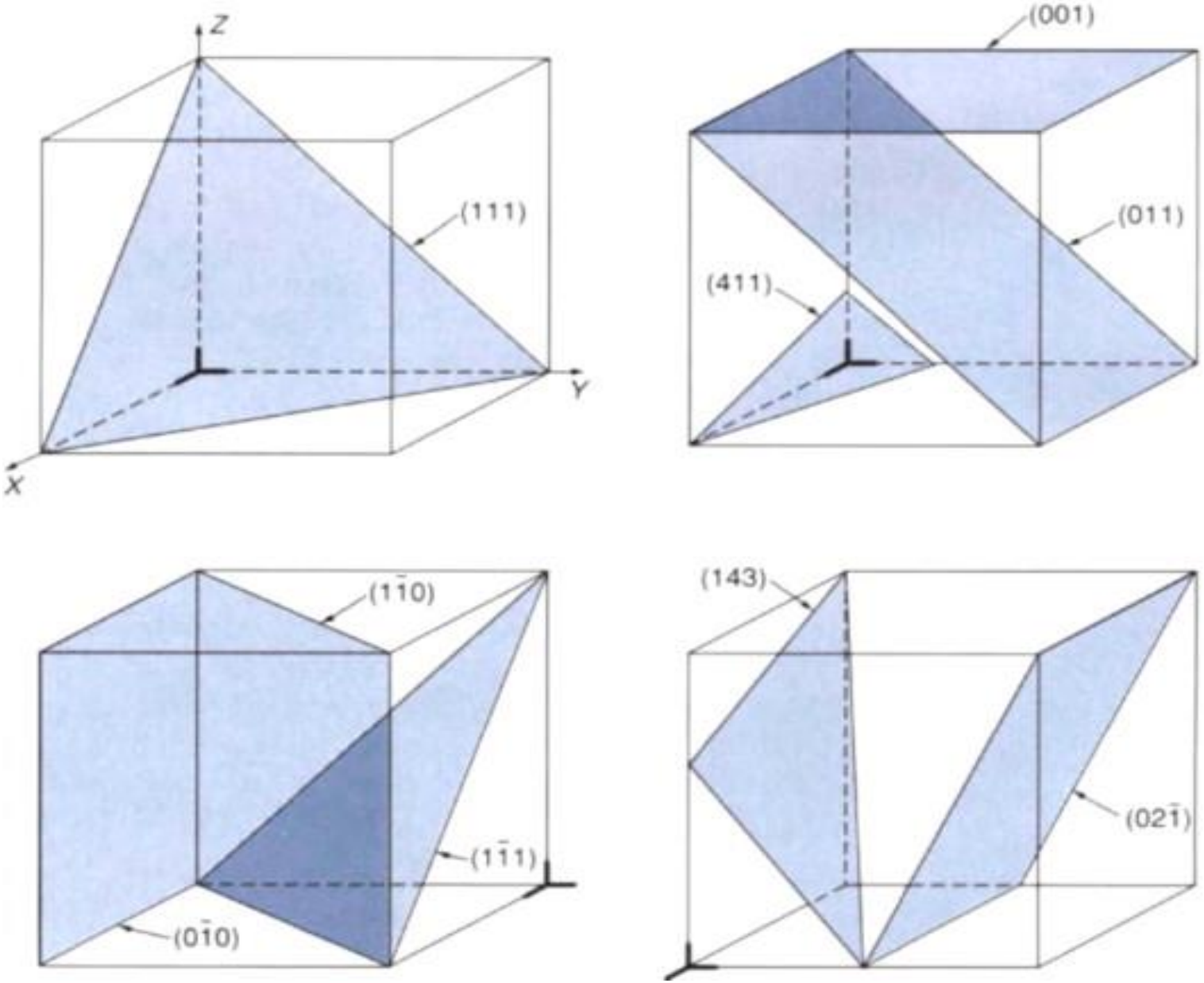
บทนำ

ตำแหน่งอะตอม

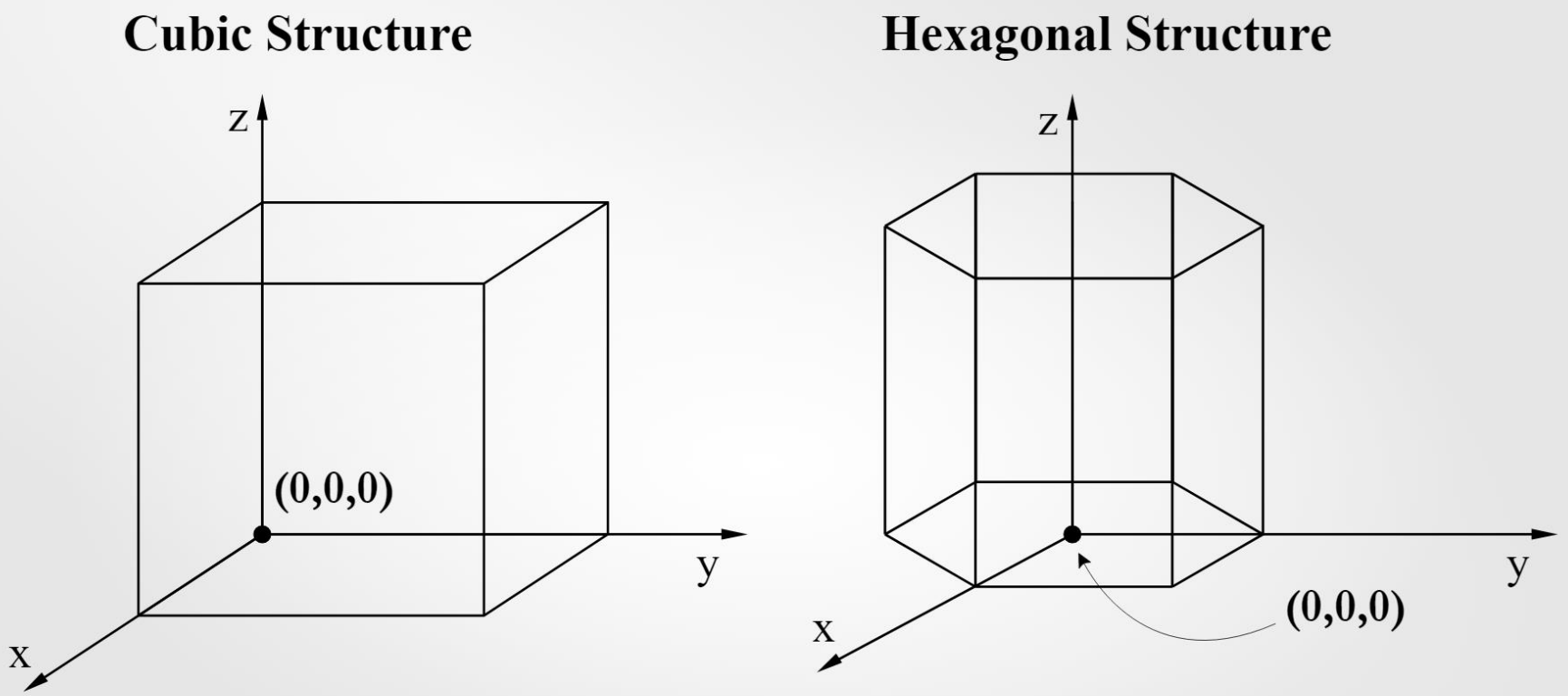
ทิศทางของผลึก

การระบุระนาบในผลึก

การระบุตำแหน่งบนพื้นผิวของแข็ง



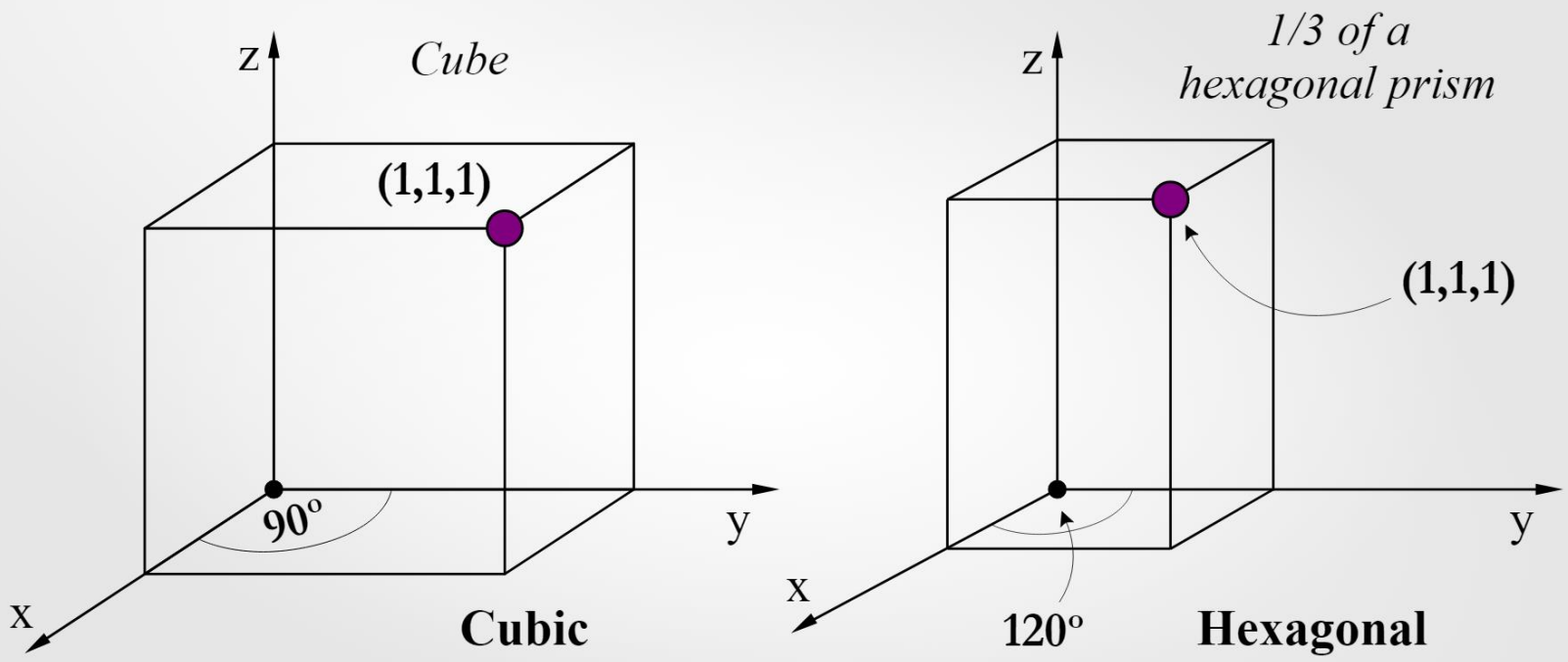
Origin in Crystals



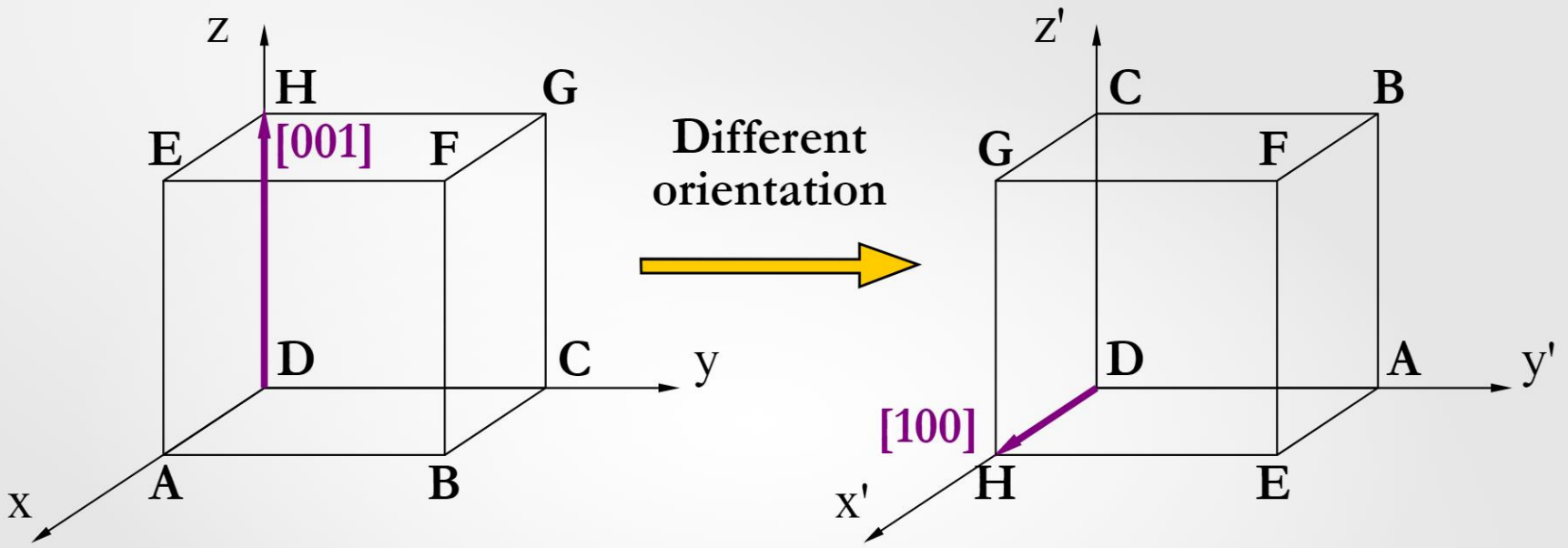
The origin can be anywhere, but this is the conventional choice

บทนำ
ตำแหน่งอะตอม
ทิศทางของผลึก
การระบุระนาบในผลึก
การระบุตำแหน่งบนพื้นผิวของแข็ง

As you can see below, the point (1, 1, 1) looks a bit different depending whether you have a **cubic** or **hexagonal** crystal structure.



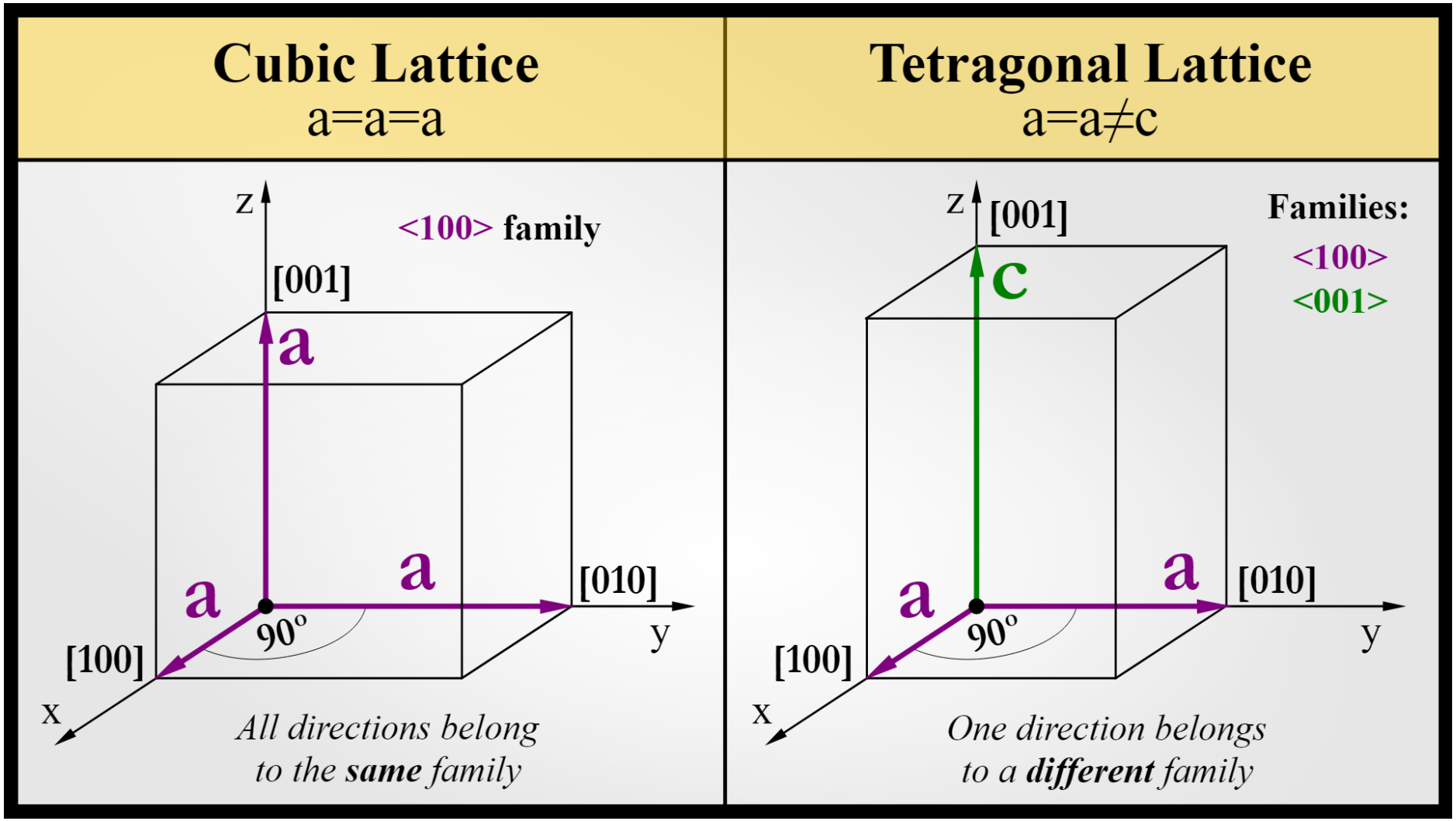
Directional Family



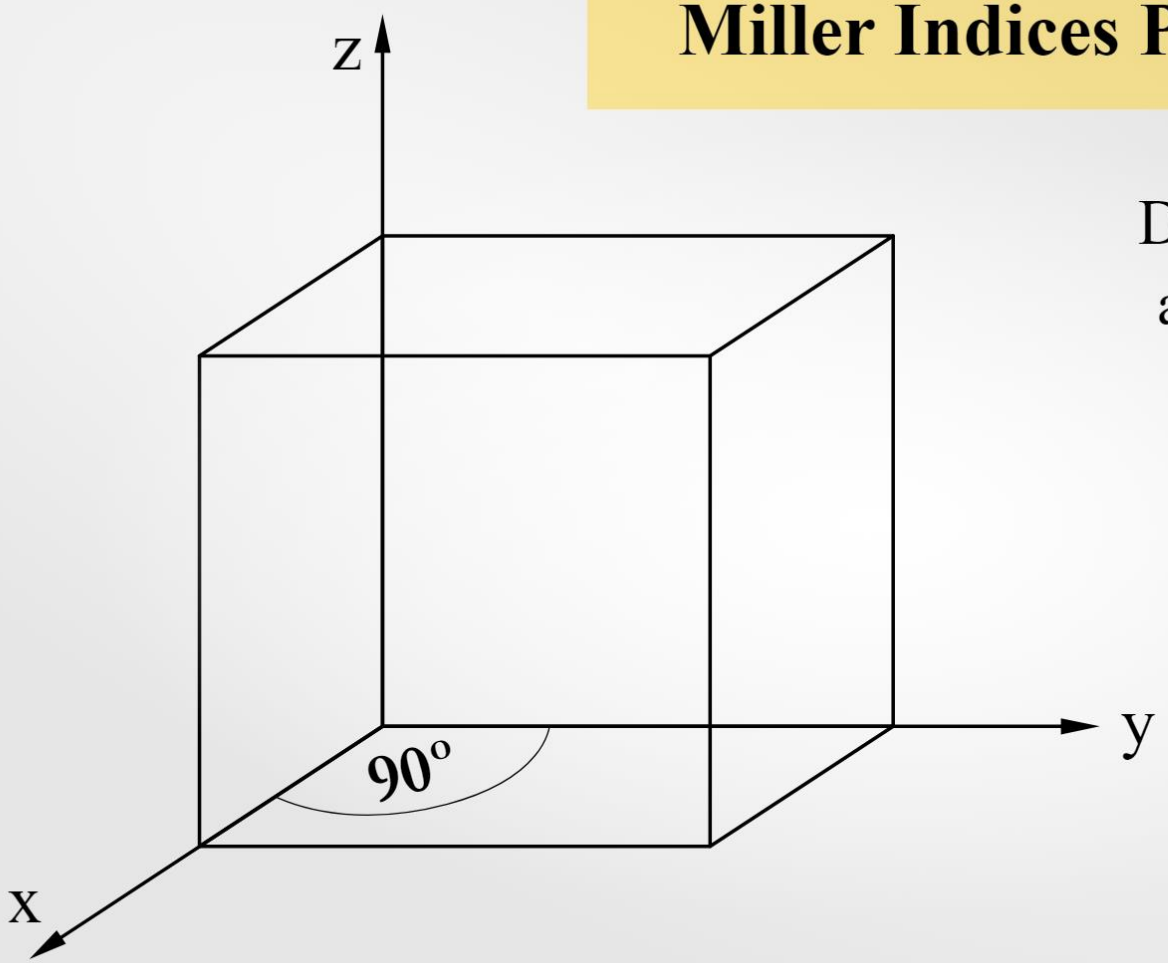
Once we arrange the same cube in a different frame of reference, we can see that **[001]** direction in xyz corresponds to **[100]** in x'y'z'. Hence, **both directions belong to the same directional family <100>**.

Index	Members in family for cubic lattice
<100>	*6 different directions belong to <100> family:* $[100], [\bar{1}00], [010], [0\bar{1}0], [001], [00\bar{1}]$
<110>	*12 different directions belong to <110> family:* $[110], [\bar{1}10], [1\bar{1}0], [\bar{1}\bar{1}0], [101], [\bar{1}01], [10\bar{1}], [\bar{1}0\bar{1}], [011], [0\bar{1}1], [01\bar{1}], [0\bar{1}\bar{1}]$
<111>	*8 different directions belong to <111> family:* $[111], [\bar{1}11], [1\bar{1}1], [11\bar{1}], [\bar{1}\bar{1}1], [\bar{1}1\bar{1}], [1\bar{1}\bar{1}], [\bar{1}\bar{1}\bar{1}]$

บทนำ
ตำแหน่งอะตอม
ทิศทางของผลึก
การระบุระนาบในผลึก
การระบุตำแหน่งบนพื้นผิวของแข็ง

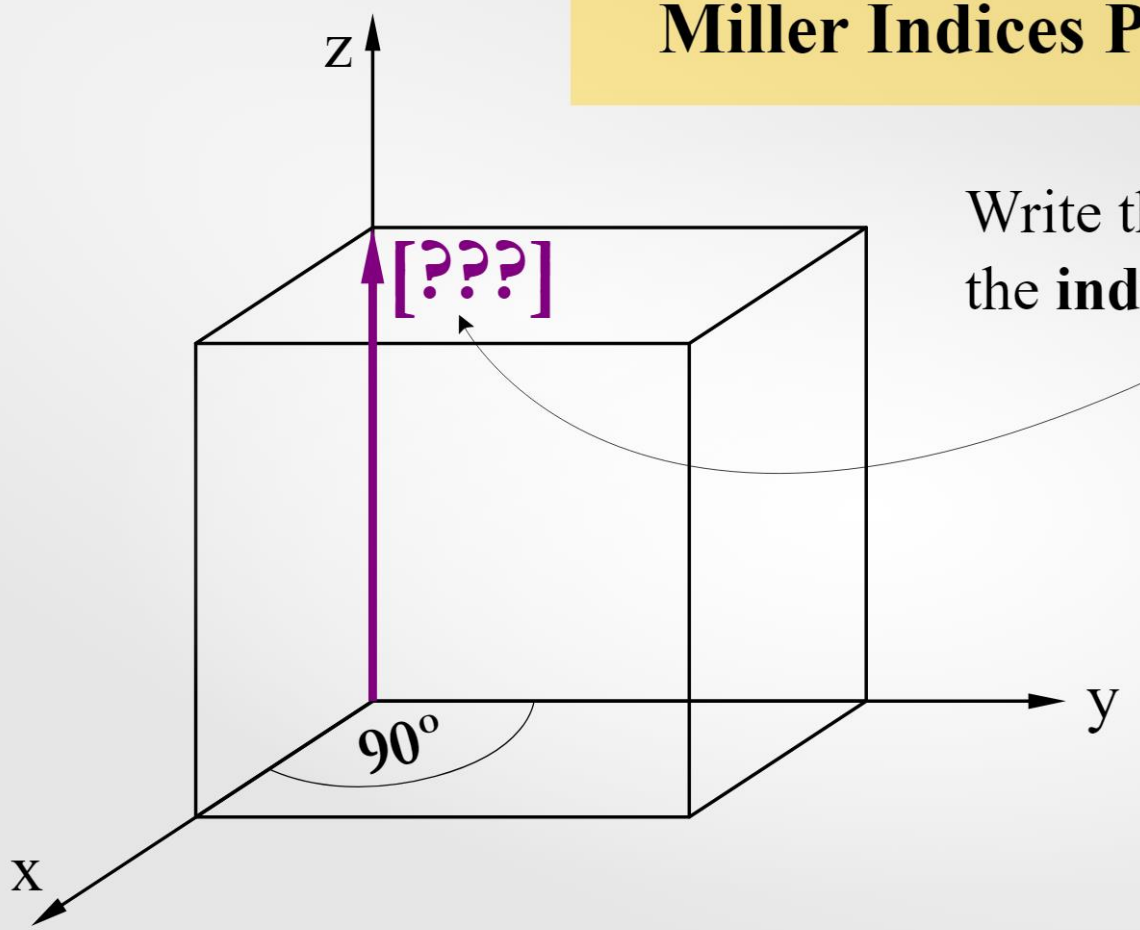


Miller Indices Practice: Directions



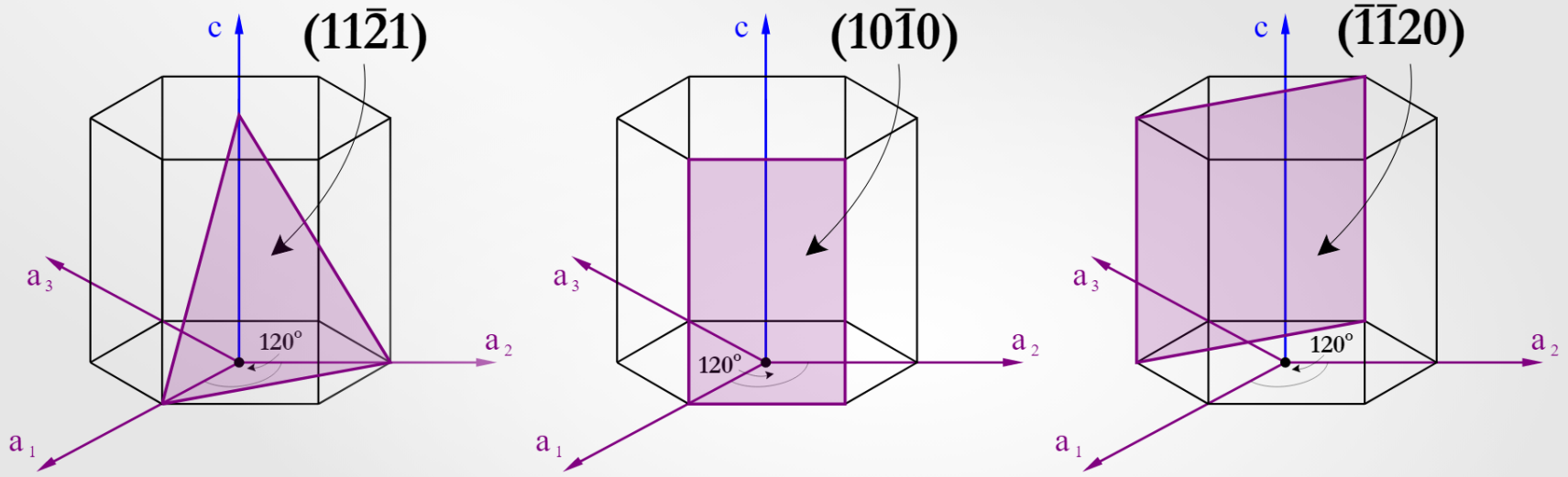
Draw the **[100]**, **[111]**, and **[010] directions** in a cubic crystal.

Miller Indices Practice: Directions



Write the Miller Indices for the **indicated** direction.

Hexagonal Miller-Bravais Indices for Planes



บทนำ

ตำแหน่งอะตอม

ทิศทางของผลึก

การระบุระนาบในผลึก

การระบุตำแหน่งบนพื้นผิวของแข็ง

Let's use "u," 'v," and "w," to represent the distance along the a_1, a_2, and c vectors in the 3-axis system. When we add a_3, we can use capital "U," "V," "T," and "W" to represent the distance along the a_1, a_2, a_3, and c vectors.

If we want to translate from [uvw] to [UVTW], we need this equation to be true:

$$ua_1 + va_2 + wc = Ua_1 + Va_2 + Ta_3 + Wc$$

We also know that $a_1 + a_2 + a_3$ will return to the starting point, so summing those vectors gives us zero.

$a_1 + a_2 + a_3 = 0$, or $a_1 + a_2 = -a_3$

We can then substitute this into the equation to get rid of a_3:

$$Ua_1 + Va_2 + T(-a_1 - a_2) + Wc = (U - T)a_1 + (V - T)a_2 + Wc$$

To reduce this to one "correct" solution, we need to introduce one more constraint. Just like $a_1 + a_2 + a_3 = 0$, we can require $U + V + T = 0$. If we do this, we get a unique solution which

We can rewrite u, v, and w without "T" because $T = -(U + V)$

$$u = 2U + V$$

$$v = 2V + U$$

$$w = W$$

This converts $[hkl]$ to $[hkil]$, but what about the reverse?

Rearranging a few terms gives us the answer.

Therefore, the final equation to convert from $[uvw]$ to $[UVTW]$ is

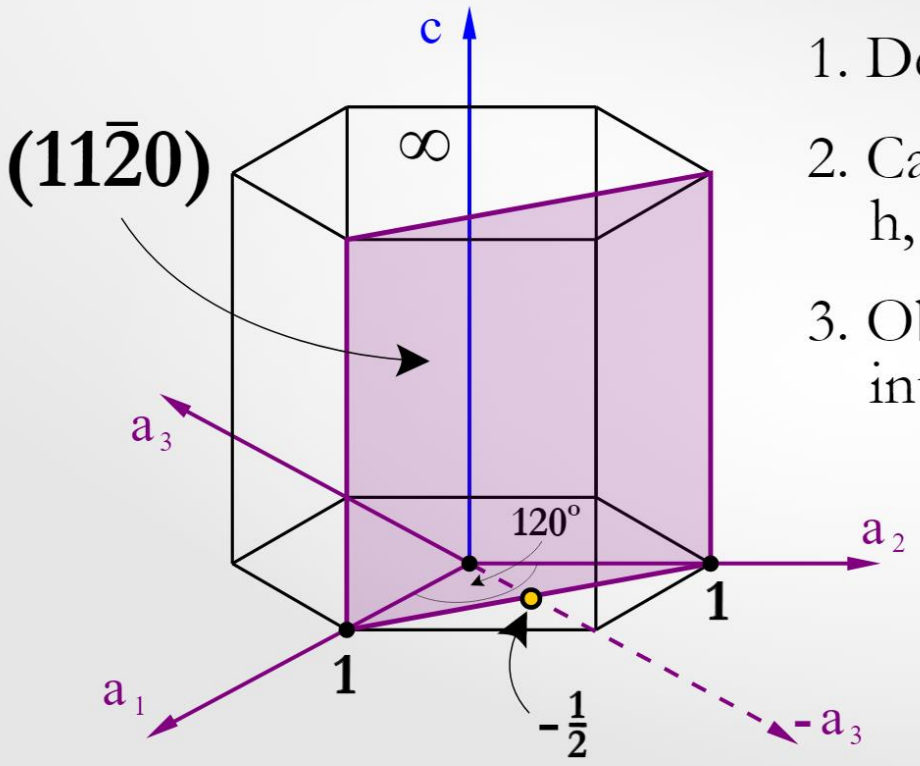
$$U = \frac{2u-v}{3}$$

$$V = \frac{2v-u}{3}$$

$$T = -(U+V)$$

$$W = w$$

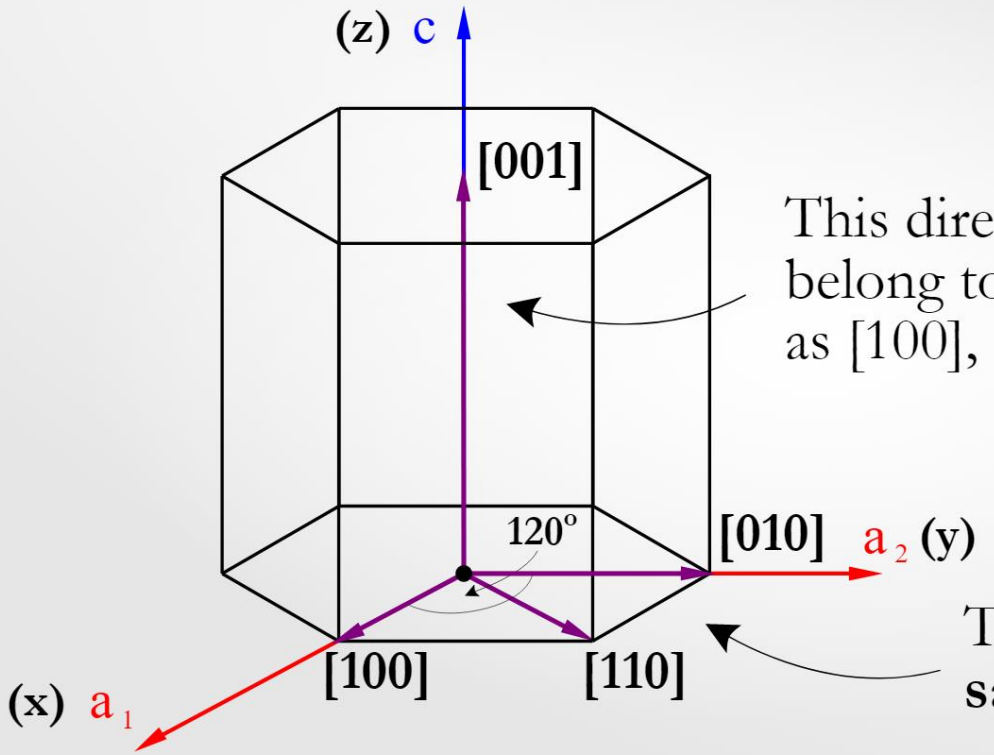
Hexagonal Miller-Bravais Indices for Planes



1. Defined plane (hkil). **(11$\bar{2}$0)**
2. Calculating inverse values for h, k, i, l Miller-Bravais indices. $\frac{1}{1}\ \frac{1}{1}\ \frac{1}{-2}\ \frac{1}{0}$
3. Obtained values are the intersections with axes. $11\text{-}\frac{1}{2}\infty$

"∞" means that the plane **never** intersects the "c" axis ➡ it is parallel to "c"

Directions in a Hexagonal Cell



This direction does **NOT** belong to the same family as [100], [110], and [010].

These directions belong to the **same** family by 6-fold rotation.

บทนำ

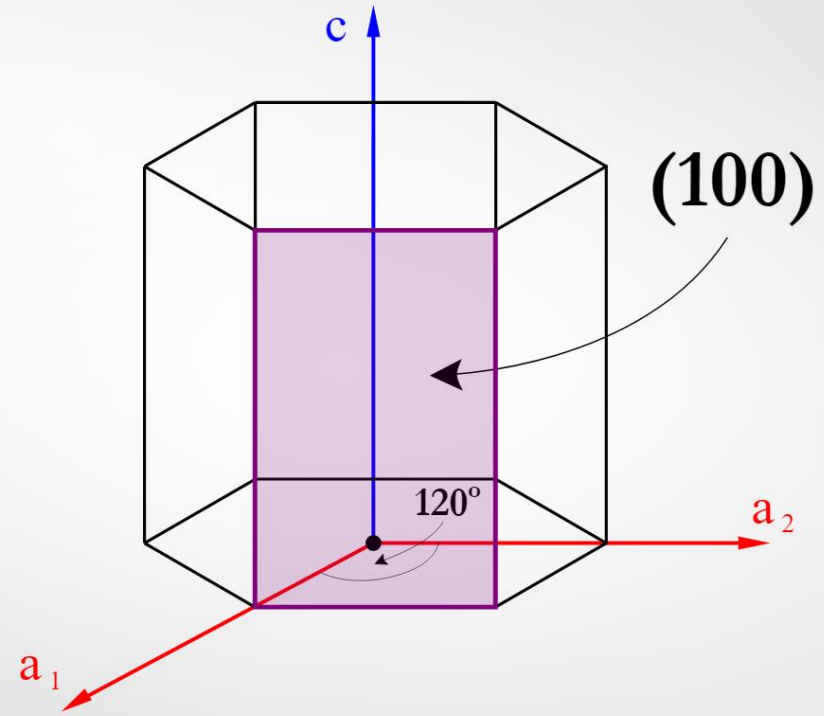
ตำแหน่งอะตอม

ทิศทางของผลึก

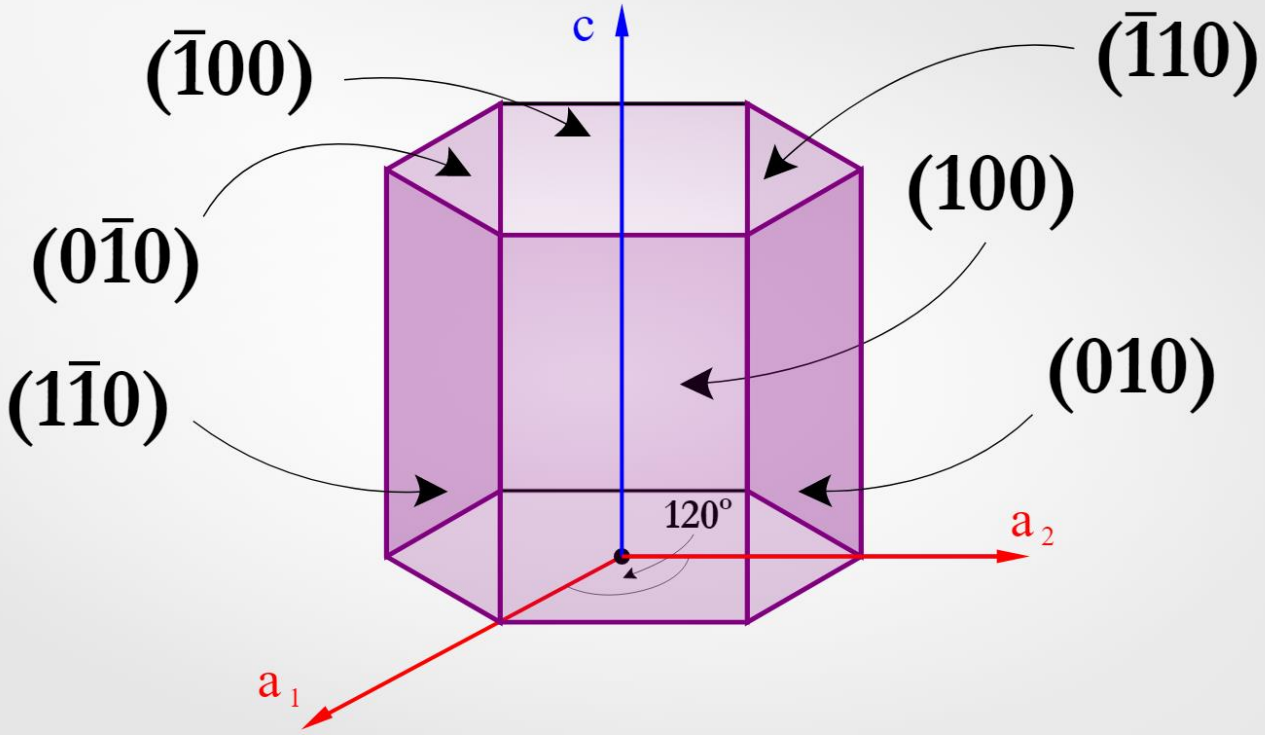
การระบุระนาบในผลึก

การระบุตำแหน่งบนพื้นผิวของแข็ง

(100) One of the Side Face Planes in a Hexagonal Cell



{100} Family of Planes in a Hexagonal Cell

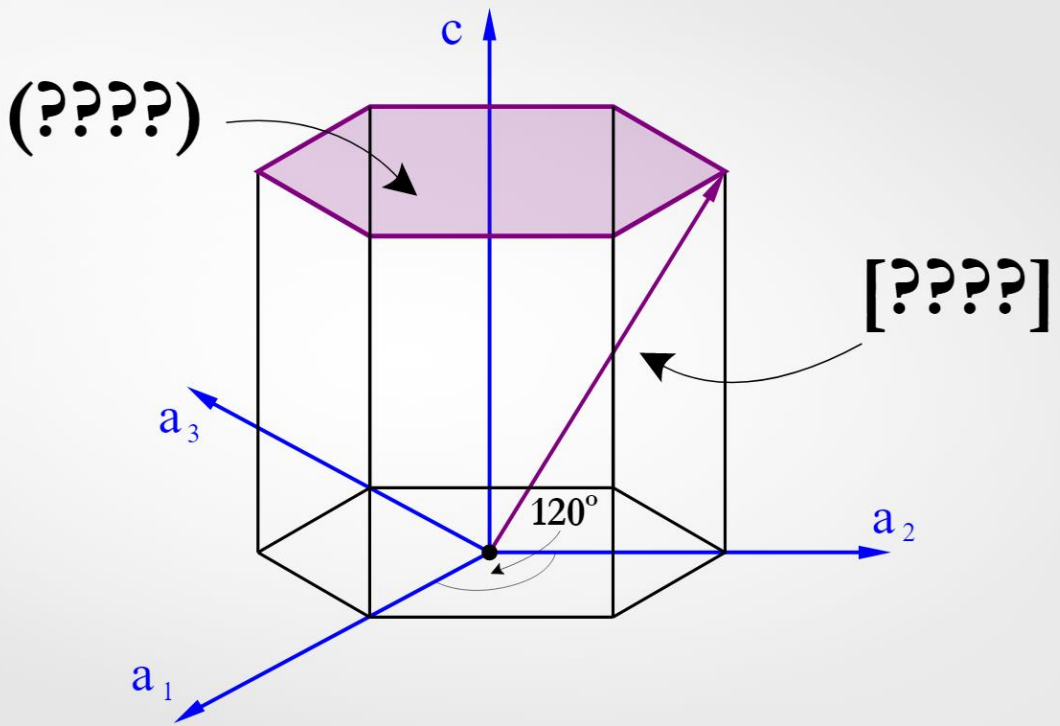


บทนำ

ตำแหน่งอะตอม

ทิศทางของผลึก

การระบุระนาบในผลึก

การระบุตำแหน่งบนพื้นผิวของแข็ง

Hexagonal Miller-Bravais Indices: Practice