บทที่ 2

โครงสร้างของแข็งมีผลึก

วัสดุที่มีสถานะเป็นของแข็งสามารถแบ่งออกได้ตามการจัดเรียงตัวของอะตอม สำหรับวัสดุที่อะตอมมีการจัดเรียงตัวอย่างเป็นระเบียบ มีแบบแผนซ้ำ ๆ กัน จะเรียกว่า มี **โครงสร้างผลึก (crystal structure)** การจัดเรียงตัวของอะตอมอย่างมีแบบแผนใน 3 มิติจะเกิดขึ้นในระหว่างการแข็งตัว อะตอมที่อยู่ติดกันจะมีพันธะยึดเหนี่ยวกัน ในการแข็งตัวแบบปกติ วัสดุ คือ โลหะ เซรามิกและพอลิเมอร์จะมีโครงสร้างผลึก หรืออะตอมมีการจัดเรียงตัวอย่างเป็นระเบียบ แต่ในบางกรณีวัสดุก็อาจไม่มีโครงสร้างผลึกเนื่องจากการเย็นตัวไม่เหมาะสมทำให้โครงสร้างที่ได้ไม่เป็นผลึก (noncrystalline) หรืออสัณฐาน (amorphous) ซึ่งจะกล่าวถึงต่อไปในบทนี้

สำหรับวัสดุที่อะตอมจัดเรียงตัวอย่างเป็นระเบียบ สมบัติของวัสดุเหล่านี้ขึ้นอยู่กับโครงสร้างผลึกและการจัดเรียงตัวของอะตอมหรือโมเลกุล โครงสร้างผลึกมีหลายแบบ ตั้งแต่แบบง่าย ๆ ไม่ซับซ้อนจนถึงโครงสร้างที่ซับซ้อนมากของเซรามิกหรือพอลิเมอร์บางประเภทซึ่งจะอธิบายต่อไปในบทที่ 12 และ 14

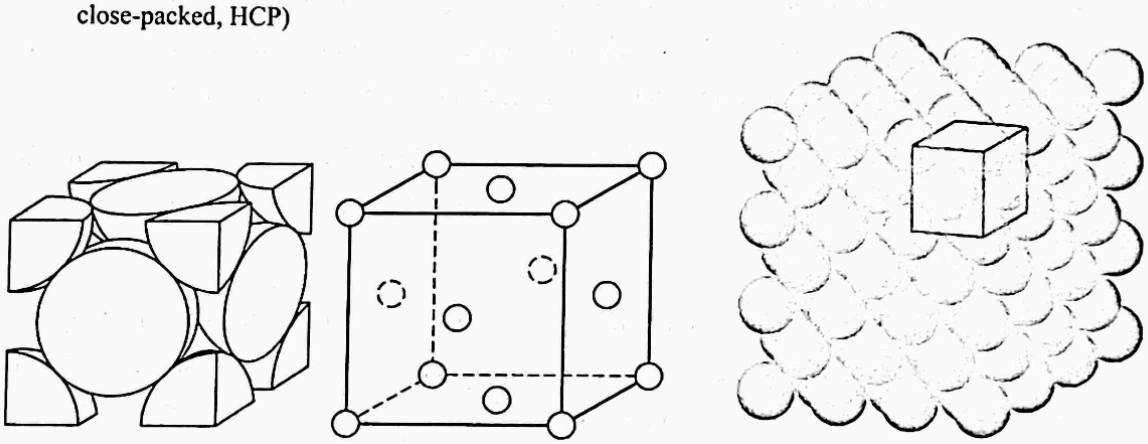
สำหรับการอธิบายเกี่ยวกับโครงสร้างผลึกต่อไปในบทนี้ จะใช้ทรงกลมที่มีความยาวเส้นผ่านศูนย์กลางแน่นอนค่าหนึ่งเป็นตัวแทนไอออนหรืออะตอม จึงเรียกแบบจำลองที่สร้างโดยใช้ทรงกลมแทนอะตอมว่า *"แบบจำลองทรงกลมแข็งของอะตอม (atomic hard sphere model)"* โดยให้ทรงกลมที่แทนอะตอมนี้เรียงชิดติดกัน ตัวอย่างการเรียงตัวของอะตอมในโครงสร้างอย่างง่าย โดยอาศัยแบบจำลองทรงกลมแข็งของอะตอมแสดงไว้ในรูปที่ 3.1*c* ซึ่งพบอยู่ในโลหะทั่วไป บางกรณีมีการใช้คำว่า **โครงผลึก (lattice)** แทนคำว่าโครงสร้างผลึก แต่การใช้คำว่าโครงผลึกนี้จะหมายความถึงการเรียงตัวของอะตอมโดยที่ใช้จุดแสดงตำแหน่งของอะตอมในโครงสร้างผลึก

หน่วยเซลล์ (unit cells)

การเรียงตัวของอะตอมในโครงสร้างผลึกนั้น สามารถแบ่งออกเป็นหน่วยย่อยหรือกลุ่มอะตอมที่มีการเรียงตัวเป็นแบบแผนซ้ำกัน ดังนั้น การอธิบายโครงสร้างผลึกจะใช้กลุ่มอะตอมที่มีการเรียงตัวซ้ำกันที่มีขนาดเล็กที่สุดเรียกว่า **หน่วยเซลล์** หน่วยเซลล์ส่วนมากมีรูปร่างเป็นลูกบาศก์หรือปริซึมฐานสี่เหลี่ยมที่มีด้านขนานกัน 3 คู่ รูปที่ 3.1(*c*) แสดงหน่วยเซลล์รูปลูกบาศก์ หน่วยเซลล์ที่เลือกมาเป็นสิ่งแสดงความสมมาตรในโครงสร้างผลึก ระยะความกว้างแต่ละด้านของหน่วยเซลล์สามารถบอกตำแหน่งของอะตอมได้ เมื่อพิจารณาให้หน่วยเซลล์คือ หน่วยของโครงสร้างพื้นฐานที่ประกอบขึ้นเป็นผลึก เราจะสามารถบอกลักษณะทางเรขาคณิตและตำแหน่งของอะตอมโดยให้อะตอมอยู่ที่ตำแหน่งเดียวกับมุมของหน่วยเซลล์ นอกจากนี้ในบางครั้งอาจเลือกมาพิจารณามากกว่าหนึ่งหน่วยเซลล์ แต่โดยทั่วไปจะพิจารณาจากหน่วยเซลล์ที่มีขนาดเล็กที่สุด

โครงสร้างผลึกของโลหะ

อะตอมของโลหะจะยึดเหนี่ยวกันด้วยพันธะโลหะซึ่งโดยธรรมชาติเป็นพันธะแบบไม่มีทิศทาง และไม่มีข้อจำกัดของจำนวนและตำแหน่งของอะตอมข้างเคียง จึงสามารถมีอะตอมข้างเคียงได้มากทำให้การเรียงของอะตอมที่ยึดกันด้วยพันธะโลหะค่อนข้างแน่น การจัดเรียงตัวของอะตอมในโลหะก็สามารถใช้แบบจำลองโดยให้ทรงกลมแทนอะตอม และอาจลดขนาดทรงกลมให้เล็กลง เพื่อง่ายต่อการแสดงตำแหน่งโดยทรงกลมที่ลดขนาดลงนี้ ใช้เป็นตัวแทนศูนย์กลางของอะตอม ในตารางที่ 3.1 แสดงรัศมีของอะตอมโลหะชนิดต่าง ๆ และพบว่าโครงสร้างอย่างง่ายนั้น สามารถแบ่งออกเป็น 3 แบบสำหรับโลหะ คือ เฟสเซ็นเตอร์คิวบิก (face-centered cubic, FCC) บอดีเซ็นเตอร์คิวบิก (body-centered cubic, BCC) และเฮกซะโกนอลโคลสแพก (hexagonal close-packed, HCP)



(*a*) (*b*) (*c*)

รูปที่ 3.1 โครงสร้างผลึกเฟสเซ็นเตอร์คิวบิก (face-centered cubic, FCC) (*a*) แบบจำลองทรงกลมแข็งของอะตอม (*b*) แบบจำลองที่ลดขนาดทรงกลมลง (*c*) กลุ่มอะตอมที่เรียงตัวแบบ FCC

โครงสร้างผลึกแบบเฟสเซ็นเตอร์คิวบิก (face-centered cubic, FCC)

โลหะหลายชนิดมีโครงสร้างที่แต่ละหน่วยเซลล์เป็นลูกบาศก์ที่มีอะตอมที่มุมและกึ่งกลางหน้าลูกบาศก์ เรียกโครงสร้างแบบนี้ว่า เฟสเซ็นเตอร์คิวบิกหรือ FCC โลหะที่มีโครงสร้างผลึกแบบ FCC หลายชนิด เช่น ทองแดง อะลูมิเนียม เงิน ทอง (ดูตามตารางที่ 3.1) รูปที่ 3.1(*a*) แสดงแบบจำลองทรงกลมแข็งของหน่วยเซลล์แบบ FCC สำหรับรูปที่ 3.1(*b*) ได้ลดขนาดของทรงกลมลงเพื่อแสดงตำแหน่งอะตอมให้ชัดเจนขึ้น และในรูปที่ 3.1(*c*) ซึ่งประกอบด้วยหน่วยเซลล์ FCC หลายหน่วย จะมีอะตอมบนหน้าตัดเรียงชิดกัน ดังนั้น ถ้าความยาวของหน่วยเซลล์เท่ากับ a และรัศมีอะตอมเท่ากับ R จะได้ความสัมพันธ์ดังนี้

$$a = 2R\sqrt{2} \tag{3.1}$$

คุณลักษณะที่สำคัญของโครงสร้างผลึกอีก 2 อย่าง คือ **เลขโคออร์ดิเนชัน (coordination number)** และ **อะตอมมิกแพกกิงแฟกเตอร์ (atomic packing factor, *APF*)** สำหรับโลหะ อะตอมแต่ละอะตอมจะมีจำนวนอะตอมข้างเคียงที่เรียงชิดติดกันอยู่เท่า ๆ กัน เรียกว่า เลขโคออร์ดิเนชัน เช่น สำหรับ FCC มีค่า 12 ซึ่งพิสูจน์ได้จากการพิจารณารูปที่ 3.1(a) เห็นว่าอะตอมที่อยู่กลางหน้าในด้านหน้าของหน่วยเซลล์จะอยู่ติดกับอะตอมที่มุม 4 อะตอมและอะตอมที่กลางหน้าด้านข้างหน้าด้านบน และหน้าด้านล่างของหน่วยเซลล์อีก 4 อะตอม (ก็คือ ยกเว้นอะตอมกลางหน้าด้านหลัง) และเมื่อพิจารณาหน่วยเซลล์ที่อยู่ด้านหน้าซึ่งติดกับหน่วยเซลล์ที่สนใจก็จะมีอะตอมที่กลางหน้าด้านข้าง ด้านบนและล่างอีก 4 อะตอมที่ติดกับอะตอมที่กำลังพิจารณา ดังนั้น รวมทั้งหมด จึงมี 12 อะตอม

สำหรับ *APF* คือ สัดส่วนของปริมาตรของทรงกลมแข็งที่ใช้เป็นตัวแทนอะตอมต่อปริมาตรหน่วยเซลล์ เมื่อพิจารณาจากแบบจำลองทรงกลมแข็งจะได้ว่า

$$APF = \frac{V_S}{V_C} \tag{3.2}$$

โดย V_S คือ ปริมาตรอะตอมในหน่วยเซลล์ และ V_C คือ ปริมาตรของหน่วยเซลล์ สำหรับโครงสร้างผลึกแบบ FCC จะมีค่า *APF* เท่ากับ 0.74 ซึ่งเป็นค่าที่มากที่สุดสำหรับอะตอมที่มีเส้นผ่านศูนย์กลางเท่า ๆ กัน การคำนวณ *APF* แสดงดังตัวอย่าง โลหะส่วนมากจะมีค่า *APF* สูง

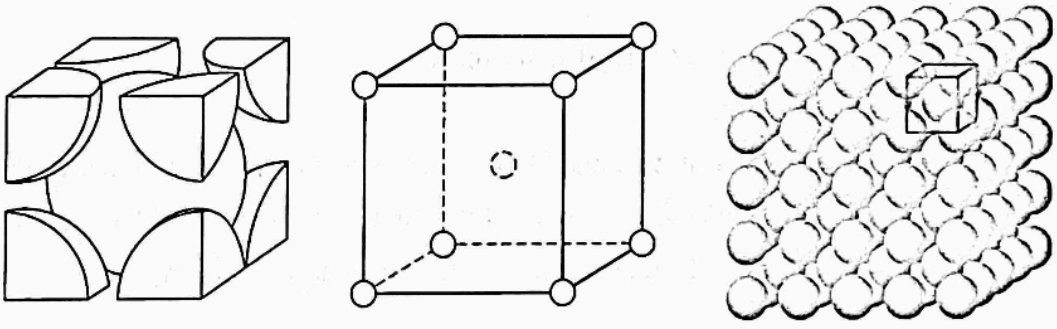
โครงสร้างผลึกแบบบอดีเซ็นเตอร์คิวบิก (body-centered cubic, BCC)

โครงสร้างผลึกแบบลูกบาศก์อีกชนิดหนึ่งซึ่งมีอะตอมอยู่ที่มุมทั้ง 8 และมี 1 อะตอมอยู่ตรงกลางของลูกบาศก์ เรียกว่า บอดีเซ็นเตอร์คิวบิกหรือ BCC รูปที่ 3.2 แสดงโครงสร้างผลึกแบบ BCC ถ้าอะตอมที่มุมและกลางหน่วยเซลล์สัมผัสกัน ให้ลูกบาศก์แต่ละด้านมีความยาว a และรัศมีอะตอมมีค่า R จะได้ว่า

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

ตัวอย่างของโลหะที่มีโครงสร้าง BCC เช่น โครเมียม เหล็ก ทังสเตน และอื่น ๆ ดังแสดงในตารางที่ 3.1

ใน BCC หนึ่งหน่วยเซลล์ประกอบด้วย 2 อะตอม คือ 1/8 อะตอมที่มุมทั้ง 8 มุมและ 1 อะตอมที่กลางหน่วยเซลล์ เมื่อนับรวมแล้วจะได้ 2 อะตอมต่อหน่วยเซลล์ นอกจากนี้จะเห็นว่าตำแหน่งอะตอมที่มุมและกลางหน่วยเซลล์นั้นเป็นตำแหน่งเสมือน ดังนั้น เมื่อย้ายมุมของหน่วยเซลล์จากศูนย์กลางของอะตอมที่มุมมาที่ศูนย์กลางของอะตอมส่วนกลางจะได้หน่วยเซลล์ใหม่ที่มีโครงสร้าง BCC เหมือนเดิม เลขโคออร์ดิเนชันของ BCC เท่ากับ 8 เห็นได้จากอะตอมที่กลางหน่วยเซลล์จะอยู่ติดกับอะตอมที่มุมทั้ง 8 มุม เลขโคออร์ดิเนชันของโครงสร้างแบบ BCC นี้มีค่าน้อยกว่าแบบ FCC ค่า *APF* ของโครงสร้าง BCC จึงมีค่า 0.68 น้อยกว่าโครงสร้างแบบ FCC

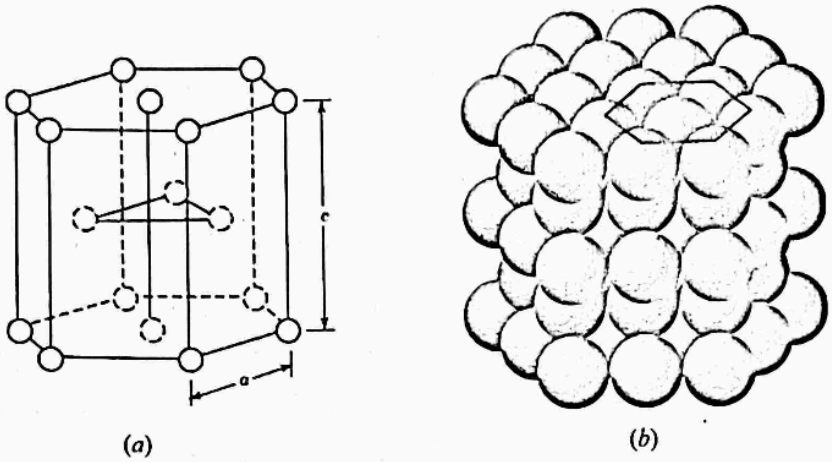


(*a*) (*b*) (*c*)

รูปที่ 3.2 โครงสร้างผลึกบอดีเซ็นเตอร์คิวบิก (body-centered cubic, BCC) (*a*) แบบจำลองทรงกลมแข็งของอะตอม (*b*) แบบจำลองที่ลดขนาดทรงกลมลง (*c*) กลุ่มอะตอมที่เรียงตัวแบบ BCC

นอกจากโครงผลึกแบบลูกบาศก์แล้ว โลหะยังสามารถมีโครงผลึกแบบอื่นดังที่จะกล่าวถึงในแบบสุดท้าย โครงผลึกที่มีฐานหกเหลี่ยม ดังรูปที่ 3.3 ในรูปที่ 3.3(*a*) แสดงหน่วยเซลล์ของโครงสร้าง **แบบเฮกซะโกนอลโคลสแพก (hexagonal close-packed, HCP)** โดยลดขนาดทรงกลมแทนอะตอมให้เล็กลง ตัวอย่างกลุ่มอะตอมที่เรียงตัวแบบ HCP แสดงดังในรูปที่ 3.3(*b*) โดยที่ด้านหน้าบนและล่างจะมีอะตอมกลางล้อมรอบด้วยอะตอมอีก 6 อะตอม สำหรับระนาบที่อยู่ถัดลงมาจะมีอะตอมอยู่ 3 อะตอมและอยู่ระหว่างระนาบบนและล่างของหน่วยเซลล์ ดังนั้นจะมีอะตอมใน 1 หน่วยเซลล์ทั้งหมด 6 อะตอม คือ 1/6 อะตอมที่มุมทั้ง 12 มุม และ 1/2 อะตอมที่กลางระนาบบนและล่าง รวมทั้งอีก 3 อะตอมที่อยู่ระนาบกลางหน่วยเซลล์ ถ้า a คือความยาวด้านที่ระนาบฐาน และ c คือความสูงของหน่วยเซลล์ ดังรูปที่ 3.3(*a*) ระยะ c/a จะมีค่า 1.633 อย่างไรก็ตามโลหะบางชนิดก็มีค่าต่างไปจากนี้

เลขโคออร์ดิเนชันและ *APF* ของผลึก HCP จะมีค่าเท่ากับ FCC คือ 12 และ 0.74 ตามลำดับ โลหะที่มีโครงสร้าง HCP เช่น แคดเมียม แมกนีเซียม ไทเทเนียม สังกะสี และอื่น ๆ ตามตารางที่ 3.1

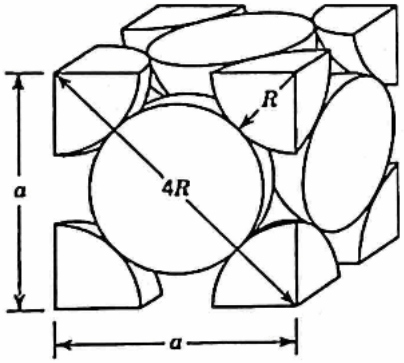


(*a*) (*b*)

รูปที่ 3.3 โครงสร้างผลึกเฮกซะโกนอลโคลสแพก (hexagonal close-packed, HCP) (*a*) แบบจำลองทรงกลมแข็งของอะตอม (*b*) แบบจำลองที่ลดขนาดทรงกลมลง (*c*) กลุ่มอะตอมที่เรียงตัวแบบ HCP

โจทย์ตัวอย่าง 3.1

จงคำนวณปริมาตรของหน่วยเซลล์ FCC ในรูปรัศมีอะตอม *R*



โจทย์ตัวอย่าง 3.2

จงแสดงว่า *APF* ของโครงสร้างผลึกแบบ FCC เท่ากับ 0.74

การคำนวณค่าความหนาแน่น

จากพื้นฐานความรู้เกี่ยวกับโครงสร้างผลึกของโลหะของแข็ง เราสามารถคำนวณค่าความหนาแน่นทางทฤษฎีได้โดยใช้ความสัมพันธ์

$$\rho = \frac{nA}{V_C N_A} \tag{3.5}$$

โดย n คือ จำนวนอะตอมในหน่วยเซลล์ A คือ น้ำหนักอะตอม V_C คือ ปริมาตรของหน่วยเซลล์ และ N_A คือ เลขอาโวกาโด (6.023×10^{23} atom/mol)

โจทย์ตัวอย่าง 3.3

ทองแดงมีรัศมีอะตอม 0.128 nm (1.28 Å) และมีโครงสร้าง FCC มีน้ำหนักอะตอม 63.5 g/mol จงคำนวณหาความหนาแน่นทางทฤษฎีและเปรียบเทียบกับค่าที่วัดได้จริง

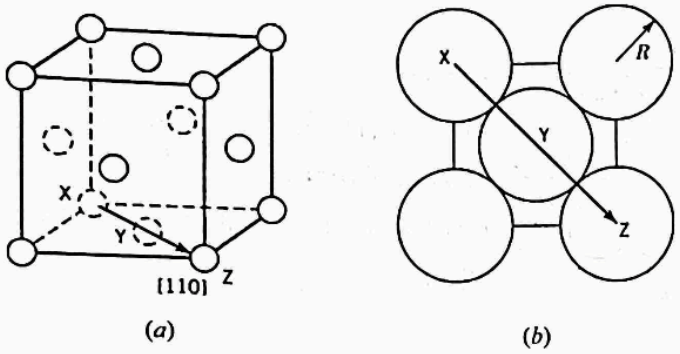
ความหนาแน่นเชิงเส้นและเชิงระนาบ (linear and planar density)

ในหัวข้อก่อนได้กล่าวถึงระนาบและทิศทางในผลึก สำหรับทิศทางที่สมมาตรกันนั้นจะมีค่าความหนาแน่นเชิงเส้นเท่า ๆ กัน เช่นเดียวกัน ความหนาแน่นเชิงระนาบนั้นจะมีค่าเท่ากันสำหรับระนาบที่สมมาตรกัน

ค่าความหนาแน่นเชิงเส้น (linear density, LD) คือ จำนวนอะตอมต่อหน่วยความยาว โดยที่อะตอมเหล่านั้นมีศูนย์กลางอยู่บนเวกเตอร์แสดงทิศทางนั้นในผลึก หรือก็คือ

$$\text{LD} = \frac{n_v}{L_v} \tag{3.8}$$

โดยค่า n_v จำนวนอะตอมที่มีศูนย์กลางอยู่บนเวกเตอร์ และค่า L_v คือความยาวของเวกเตอร์แสดงทิศทาง ดังนั้น LD จะมีหน่วยเป็นส่วนกลับของความยาว เช่น nm^{-1} หรือ m^{-1}



รูปที่ 3.12 ทิศทาง [110] ในหน่วยเซลล์ FCC แสดงโดยแบบจำลองที่ลดขนาดอะตอม (*b*) ระนาบด้านล่างของหน่วยเซลล์ในรูป (*a*) แสดงอะตอม x y z ในทิศทาง [110]

ตัวอย่างเช่น การคำนวณ LD ของทิศทาง [110] ในระบบ FCC รูปโครงสร้างแบบ FCC ในหน่วยเซลล์และทิศทาง [110] แสดงในรูปที่ 3.12(*a*) รูปที่ 3.12(*b*) แสดงให้เห็นว่ามีอะตอม 5 อะตอมบนระนาบพื้น และมี 3 อะตอมคือ อะตอม x y และ z ที่มีศูนย์กลางอยู่บนทิศทาง [110] จากรูปจะเห็นว่าเวกเตอร์แสดงทิศทาง [110] ลากผ่านศูนย์กลางอะตอม x ไปผ่านอะตอม y และสิ้นสุดที่ศูนย์กลางอะตอม z ดังนั้น อะตอม x และ z จะถูกแบ่งออกอยู่ในหลายหน่วยเซลล์ กล่าวคือ ครึ่งหนึ่งของอะตอม x และ z เท่านั้นที่อยู่บนเวกเตอร์ที่กำลังพิจารณา ส่วนอะตอม y นั้นอยู่บนเวกเตอร์ที่พิจารณาทั้งอะตอม เมื่อนับรวมแล้ว จะได้ว่าอะตอมที่อยู่บนเวกเตอร์แสดงทิศทาง [110] มีทั้งหมด 2 อะตอม เวกเตอร์ที่สนใจนี้มีความยาว $4R$ จากสมการ 3.8 จะได้ว่า LD ของโครงสร้าง FCC ในทิศทาง [110] คือ

$$\mathrm{LD}_{110} = \frac{2\ \text{atoms}}{4R} = \frac{1}{2R} \tag{3.9}$$

โดยทั่วไป ค่า LD มีค่าเท่ากับส่วนกลับของระยะระหว่างอะตอมที่ติดกัน (r)

$$\mathrm{LD} = \frac{1}{r} \tag{3.10}$$

ค่าความหนาแน่นเชิงระนาบ (planar density, PD) สามารถหาได้ด้วยหลักการเดียวกับ LD โดยคำนวณจากจำนวนอะตอมที่มีศูนย์กลางบนระนาบที่สนใจ ก็คือ

$$\mathrm{PD} = \frac{n_p}{A_p} \tag{3.11}$$

โดยค่า n_p จำนวนอะตอมที่มีศูนย์กลางอยู่บนระนาบ และค่า A_p คือพื้นที่ของระนาบ ดังนั้น PD จะมีหน่วยเป็นส่วนกลับของพื้นที่ เช่น nm^{-2} หรือ m^{-2}

ตัวอย่างเช่น เมื่อพิจารณาระนาบ (110) ในหน่วยเซลล์ FCC ดังรูปที่ 3.10(*a*) และ 3.10(*b*) จะเห็นว่ามีอะตอมทั้งหมด 6 อะตอมดังรูปที่ 3.10(*b*) แต่อะตอม A C D และ F อยู่บนระนาบในหน่วยเซลล์นี้เพียง ¼ อะตอม ส่วนอะตอม B และ E อยู่บนระนาบในหน่วยเซลล์นี้ ½ อะตอม ดังนั้น จำนวนอะตอมโดยรวมบนระนาบนี้เทียบเท่ากัน 2 อะตอม ขนาดของระนาบนี้คือ ผลคูณของความกว้างและความยาว จากรูปความ

กว้างเท่ากับ $2R\sqrt{2}$ และความยาวเท่ากับ $4R$ ดังนั้น พื้นที่ของระนาบเท่ากับ $(4R)(2R\sqrt{2}) = 8R^2\sqrt{2}$ ดังนั้น ค่า PD หาได้จาก

$$PD_{110} = \frac{2\text{ atoms}}{8R^2\sqrt{2}} = \frac{1}{4R^2\sqrt{2}} \qquad (3.12)$$

LD และ PD มีความสำคัญต่อการพิจารณาการเลื่อนของอะตอมซึ่งทำให้เกิดการแปรรูปพลาสติก การเลื่อนจะเกิดขึ้นในระนาบที่มีความหนาแน่นสูงสุดในทิศทางที่มีความหนาแน่นสูงสุด

วัสดุเป็นผลึกและไม่เป็นผลึก (crystalline and noncrystalline materials)

ผลึกเดี่ยว (single crystals)

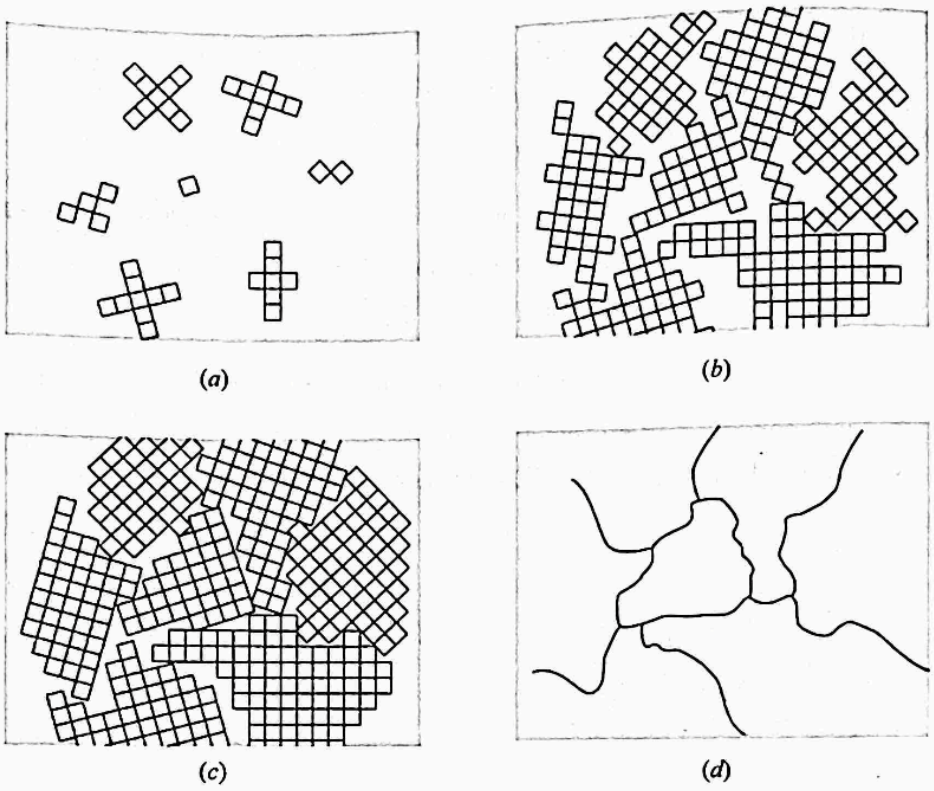
ผลึกของแข็งที่มีการจัดเรียงตัวของอะตอมในผลึกอย่างเป็นระเบียบสมบูรณ์ทั่วทั้งชิ้นงานจัดเป็น **ผลึกเดี่ยว** ในผลึกเดี่ยวหน่วยเซลล์ทุกหน่วยจะเรียงตัวไปในทางเดียวกัน ผลึกเดี่ยวนั้นมีอยู่ตามธรรมชาติและสามารถสร้างขึ้นได้เช่นกันแต่จะต้องมีการควบคุมบรรยากาศอย่างละเอียด

ถ้าผลึกเดี่ยวเกิดขึ้นอย่างอิสระ ผลึกเดี่ยวนั้นจะมีรูปร่างทางเรขาคณิตซึ่งแตกต่างกันตามโครงสร้างผลึกและมีผิวเรียบเหมือนอัญมณี รูปที่ 3.16 แสดงผลึกเดี่ยวหลายผลึก ในระยะหลังนี้ ผลึกเดี่ยวมีความสำคัญมากขึ้นในเทคโนโลยีสมัยใหม่ โดยเฉพาะเทคโนโลยีเกี่ยวกับวงจรขนาดเล็ก ที่ต้องใช้ซิลิกอนผลึกเดี่ยวรวมทั้งวัสดุกึ่งตัวนำอื่น ๆ

รูปที่ 3.16 รูปผลึกเดี่ยวหลายผลึกของ CaF_2

วัสดุหลายผลึก (polycrystalline materials)

วัสดุที่มีสถานะของแข็งส่วนมากประกอบขึ้นจากผลึกขนาดเล็กซึ่งเรียกว่า **เกรน (grain)** วัสดุแบบนี้เรียกว่า **วัสดุหลายผลึก** ผลึกในวัสดุหลายผลึกนี้เกิดขึ้นระหว่างการแข็งตัวดังแสดงในรูปที่ 3.17 ช่วงแรกเริ่มเกิดนิวเคลียสขนาดเล็กที่จุดต่าง ๆ นิวเคลียสเหล่านี้มีทิศทางการเรียงตัวไม่แน่นอนดังรูปจะแสดงด้วยสี่เหลี่ยมขนาดเล็ก นิวเคลียสเหล่านี้โตขึ้นเป็นเกรนจากอะตอมในของเหลวที่มาเรียงตัวต่อกันจากนิวเคลียส การแข็งตัวจะเกิดขึ้นจนสมบูรณ์เมื่อเกรนโตขึ้นจนกระทั่งชนกันและไม่มีของเหลวเหลืออยู่ ดังนั้น การเรียงตัวของผลึกจึงแตกต่างกันในแต่ละเกรน ดังรูปที่ 3.17 ที่รอยต่อของแต่ละเกรนอะตอมจะไม่เรียงตัวต่อเนื่องกัน บริเวณนี้เรียกว่า **ขอบเกรน (grain boundary)**



รูปที่ 3.17 รูปวาดแสดงขั้นตอนระหว่างการแข็งตัวของวัสดุหลายผลึกโดยสี่เหลี่ยมขนาดเล็กแทนหน่วยเซลล์ (*a*) นิวเคลีย
ขนาดเล็กของผลึก (*b*) ผลึกเริ่มโตขึ้น ขอบของบางเกรนเริ่มชนกัน (*c*) เกรนที่เกิดระหว่างการแข็งตัวมีรูปร่างไม่แน่นอน
(*d*) โครงสร้างที่ได้เมื่อตรวจสอบด้วยกล้องจุลทรรศน์ เส้นสีดำคือขอบเกรน