SOLID STATE CHEMISTRY (UNIT 5.1)
-Arghyadeep Roy [B.Sc Chemistry | M.Sc]

Contact- 7595825568/9830507435

পদার্থের কঠিন অবস্থা (Solid State Chemistry): কাঠামোগত রসায়ন ও কেলাসবিদ্যার বৈজ্ঞানিক বিশ্লেষণ

পদার্থবিজ্ঞানের এবং রসায়নের অন্যতম গুরুত্বপূর্ণ শাখা হলো কঠিন অবস্থা বা সলিড স্টেট কেমিস্ট্রি, যা পদার্থের আণবিক, পারমাণবিক এবং আয়নিক স্তরের ত্রিমাত্রিক গঠন নিয়ে আলোচনা করে। এই প্রতিবেদনে কঠিন পদার্থের বিভিন্ন অবস্থা, তাদের প্রতিসম বৈশিষ্ট্য, একক কোষের গাণিতিক বিশ্লেষণ এবং বিভিন্ন জটিল আয়নীয় কেলাসের ত্রিমাত্রিক গঠনের পুঙ্খানুপুঙ্খ আলোচনা করা হয়েছে।

For animations & 3D experience visit-
https://haloformyl1.github.io/SOLID-STATE-CHEMISTRY

In Website- Module 1

কেলাসাকার এবং অকেলাসাকার কঠিন পদার্থ

কঠিন পদার্থকে তাদের অভ্যন্তরে থাকা গঠনকারী কণাগুলির (পরমাণু, অণু বা আয়ন) বিন্যাসের সুশৃঙ্খলতার উপর ভিত্তি করে দুটি প্রধান ভাগে বিভক্ত করা হয়, যথা—কেলাসাকার (Crystalline) এবং অকেলাসাকার (Amorphous) কঠিন পদার্থ। কেলাসাকার কঠিন পদার্থে গঠনকারী কণাগুলি একটি সুনির্দিষ্ট, সুশৃঙ্খল এবং পর্যায়ক্রমিক জ্যামিতিক বিন্যাসে ত্রিমাত্রিক স্থানে সজ্জিত থাকে। এই বিন্যাস কেলাসের অভ্যন্তরে বহুদূর পর্যন্ত বজায় থাকে, যাকে দীর্ঘ-পাল্লার শৃঙ্খল বা লং-রেঞ্জ অর্ডার (Long-range order) বলা হয়। তাপগতিবিদ্যার সূত্র অনুযায়ী, এই সুশৃঙ্খল বিন্যাসের কারণে কেলাসাকার কঠিন পদার্থের স্থিতিশক্তি সর্বনিম্ন হয় এবং এরা অত্যন্ত স্থিতিশীল হয়। এদের গলনাঙ্ক অত্যন্ত সুনির্দিষ্ট (sharp) হয়, অর্থাৎ একটি নির্দিষ্ট তাপমাত্রায় পৌঁছালে কেলাসাকার কঠিন পদার্থ সম্পূর্ণভাবে গলে তরলে পরিণত হয়।

তীক্ষ্ণ ধারালো অস্ত্র দিয়ে কাটলে এরা মসৃণ এবং সমতল পৃষ্ঠ তৈরি করে, যা এদের বিদারণ ধর্ম বা ক্লিভেজ প্রপার্টি (Cleavage property) নামে পরিচিত। সোডিয়াম ক্লোরাইড, কোয়ার্টজ এবং হীরা হলো কেলাসাকার কঠিন পদার্থের উৎকৃষ্ট উদাহরণ।

অন্যদিকে, অকেলাসাকার কঠিন পদার্থে গঠনকারী কণাগুলির কোনো সুনির্দিষ্ট এবং সুশৃঙ্খল ত্রিমাত্রিক জ্যামিতিক বিন্যাস থাকে না। যদিও এদের মধ্যে কিছু স্থানে অত্যন্ত ক্ষুদ্র পরিসরে আংশিক শৃঙ্খল দেখা যেতে পারে, যাকে স্বল্প-পাল্লার শৃঙ্খল (Short-range order) বলে, তবে সামগ্রিকভাবে এদের গঠন এলোমেলো প্রকৃতির হয়। অকেলাসাকার পদার্থের কোনো নির্দিষ্ট বা তীক্ষ্ণ গলনাঙ্ক থাকে না। উত্তপ্ত করা হলে এরা একটি নির্দিষ্ট তাপমাত্রার পরিসরে (temperature range) ধীরে ধীরে নরম হতে থাকে এবং গলতে শুরু করে। অনেক ক্ষেত্রে, কাঁচের মতো অকেলাসাকার পদার্থগুলিকে 'অতি-শীতলীকৃত তরল' (Supercooled liquid) হিসেবে আখ্যায়িত করা হয়, কারণ এদের মধ্যে দীর্ঘমেয়াদে প্রবাহিত হওয়ার একটি অত্যন্ত ধীর প্রবণতা কাজ করে। রাবার, প্লাস্টিক এবং কাঁচ হলো অকেলাসাকার কঠিন পদার্থের সাধারণ উদাহরণ।

আইসোট্রপি এবং অ্যানিসোট্রপি

কঠিন পদার্থের বাহ্যিক ভৌত ধর্মগুলি (যেমন— বৈদ্যুতিক পরিবাহিতা, তাপীয় পরিবাহিতা, প্রতিসরাঙ্ক বা যান্ত্রিক শক্তি) পরিমাপের দিকের উপর নির্ভর করে কি না, তার ভিত্তিতে আইসোট্রপি এবং অ্যানিসোট্রপি ধর্ম সংজ্ঞায়িত করা হয়। অকেলাসাকার কঠিন পদার্থে কণাগুলির বিন্যাস সব দিকে সম্পূর্ণ এলোমেলো এবং অনিয়মিত হওয়ায়, যে কোনো দিক থেকে এদের ভৌত ধর্ম পরিমাপ করলে সব দিকের গড় মান একই পাওয়া যায়। পদার্থের এই দিক-নিরপেক্ষ ধর্মকে আইসোট্রপি (Isotropy) বা সমগতিকতা বলা হয়। যেহেতু কণাগুলির কোনো সুনির্দিষ্ট দিকনির্দেশক সজ্জা নেই, তাই আলো বা বিদ্যুতের প্রবাহ কেলাসের সব দিকে একই ধরনের বাধা বা মাধ্যমের সম্মুখীন হয়, যা অকেলাসাকার পদার্থগুলিকে আইসোট্রপিক করে তোলে।

বিপরীতক্রমে, অ্যানিসোট্রপি (Anisotropy) বা অসমগতিকতা হলো কেলাসাকার কঠিন পদার্থের একটি অকাট্য বৈশিষ্ট্য। কেলাসাকার পদার্থে কণাগুলি সুনির্দিষ্টভাবে সজ্জিত থাকার ফলে, কেলাসের বিভিন্ন অক্ষ বা দিক (directions) বরাবর কণাগুলির প্রকৃতি, বিন্যাস ও আন্তঃকণা দূরত্ব ভিন্ন হয়। তাই ভিন্ন ভিন্ন দিক বরাবর কেলাসাকার পদার্থের ভৌত ধর্মগুলি পরিমাপ করলে ভিন্ন ভিন্ন মান পরিলক্ষিত হয়। উদাহরণস্বরূপ, একটি নির্দিষ্ট কেলাসের এক্স-অক্ষ বরাবর আলোর প্রতিসরাঙ্ক বা বৈদ্যুতিক পরিবাহিতা যা হবে, ওয়াই-অক্ষ বা জেড-অক্ষ বরাবর তা সম্পূর্ণ ভিন্ন হতে

পারে। কণাগুলির পর্যায়ক্রমিক এবং সুশৃঙ্খল বিন্যাসই মূলত এই অসমগতিকতার জন্ম দেয়।

কঠিন পদার্থের রাসায়নিক শ্রেণীবিভাগ

গঠনকারী কণাগুলির প্রকৃতি এবং তাদের মধ্যে ক্রিয়াশীল আন্তঃকণা আকর্ষণ বলের উপর ভিত্তি করে কেলাসাকার কঠিন পদার্থকে বৈজ্ঞানিকভাবে চারটি প্রধান ভাগে ভাগ করা হয়। এই শ্রেণীবিভাগ পদার্থের যৌত ও রাসায়নিক ধর্ম বুঝতে ব্যাপকভাবে সাহায্য করে।

আয়নীয় কঠিন পদার্থসমূহ (Ionic Solids) প্রধানত বিপরীত আধানযুক্ত ক্যাটায়ন (ধনাত্মক আয়ন) এবং অ্যানায়নের (ঋণাত্মক আয়ন) মধ্যে ক্রিয়াশীল শক্তিশালী স্থির-তাড়িতিক আকর্ষণ বল বা কুলম্বীয় বলের মাধ্যমে গঠিত হয়। এই সুদৃঢ় আকর্ষণ বলের কারণে আয়নীয় কেলাসগুলি অত্যন্ত কঠিন এবং ভঙ্গুর প্রকৃতির হয়। এদের আন্তঃআয়নিক বন্ধন ভাঙতে প্রচুর শক্তির প্রয়োজন হয়, যার ফলে এদের গলনাঙ্ক ও স্ফুটনাঙ্ক খুব বেশি হয়। কঠিন অবস্থায় আয়নগুলি কেলাস জালকে দৃঢ়ভাবে আবদ্ধ থাকায় এরা বিদ্যুৎ পরিবহন করতে পারে না। কিন্তু গলিত অবস্থায় বা উপযুক্ত দ্রাবকে (যেমন জলে) দ্রবীভূত হলে আয়নগুলি স্বাধীনভাবে বিচরণ করতে পারে, এবং তখন এরা তীব্র তড়িৎ বিশ্লেষ্য পদার্থ হিসেবে কাজ করে। সোডিয়াম ক্লোরাইড (NaCl), ক্যালসিয়াম ফ্লোরাইড (CaF_2) এবং জিংক সালফাইড (ZnS) হলো এর প্রকৃষ্ট উদাহরণ।

ধাতব কঠিন পদার্থ (Metallic Solids) ধনাত্মক ধাতব আয়ন বা কার্নেল (Kernels) এবং এদের ঘিরে থাকা মুক্ত ইলেকট্রনের সমুদ্রের সমন্বয়ে গঠিত হয়। এই মুক্ত ইলেকট্রনগুলি সমগ্র কেলাস জুড়ে স্বাধীনভাবে চলাচল করতে পারে, যা ধাতব বন্ধনের (Metallic bonding) সৃষ্টি করে। মুক্ত ইলেকট্রনের উপস্থিতির কারণেই ধাতব কঠিন পদার্থগুলি তাপ ও তড়িতের অত্যন্ত সুপরিবাহী হয়। ধাতুগুলির যান্ত্রিক বৈশিষ্ট্য যেমন নমনীয়তা (Malleability) এবং প্রসারণশীলতা (Ductility) এই বিশেষ বন্ধন প্রকৃতির জন্যই পরিলক্ষিত হয়। লোহা, তামা, সোনা এবং রূপার মতো ধাতুগুলি এই শ্রেণীর অন্তর্ভুক্ত।

সমযোজী বা নেটওয়ার্ক কঠিন পদার্থের (Covalent or Network Solids) ক্ষেত্রে সমগ্র কেলাস জুড়ে অধাতব পরমাণুগুলি সমযোজী বন্ধনের মাধ্যমে একে অপরের সাথে যুক্ত হয়ে একটি বিশাল ত্রিমাত্রিক আণবিক নেটওয়ার্ক তৈরি করে। শক্তিশালী সমযোজী বন্ধনের কারণে এরা অত্যন্ত কঠিন হয় এবং এদের গলনাঙ্ক অকল্পনীয়ভাবে বেশি থাকে। বেশিরভাগ সমযোজী কঠিন পদার্থ বৈদ্যুতিক অন্তরক (Insulator)

হিসেবে কাজ করে, কারণ এদের মধ্যে কোনো মুক্ত ইলেকট্রন থাকে না। হীরা এবং কোয়ার্টজ এই শ্রেণীর আদর্শ উদাহরণ। তবে গ্রাফাইট একটি ব্যতিক্রমী সমযোজী কঠিন, যার স্তরভিত্তিক গঠন এবং ডিলোকালাইজড ইলেকট্রনের উপস্থিতির কারণে এটি ভালো বিদ্যুৎ পরিবাহী হিসেবে কাজ করে।

আণবিক কঠিন পদার্থগুলি (Molecular Solids) প্রধানত অণু দ্বারা গঠিত হয় এবং আন্তঃআণবিক আকর্ষণ বলের ভিত্তিতে এদের তিনটি উপবিভাগে ভাগ করা হয়। অধ্রুবীয় আণবিক কঠিন পদার্থের অণুগুলির মধ্যে অত্যন্ত দুর্বল লন্ডন বিক্ষেপণ বল (London dispersion forces) কাজ করে, যার ফলে এরা নরম হয় এবং এদের গলনাঙ্ক অত্যন্ত কম থাকে (যেমন কঠিন আর্গন বা শুষ্ক বরফ)। ধ্রুবীয় আণবিক কঠিন পদার্থের অণুগুলি ধ্রুবীয় প্রকৃতির হওয়ায় এদের মধ্যে তুলনামূলকভাবে শক্তিশালী ডাইপোল-ডাইপোল আকর্ষণ বল কাজ করে, তবে এরাও সাধারণত নরম এবং অপরিবাহী হয় (যেমন কঠিন সালফার ডাইঅক্সাইড)। অন্যদিকে, হাইড্রোজেন-বন্ধনী যুক্ত আণবিক কঠিন পদার্থগুলির অণুগুলির মধ্যে শক্তিশালী হাইড্রোজেন বন্ধনী থাকে, যা ফ্লোরিন, অক্সিজেন বা নাইট্রোজেনের মতো উচ্চ তড়িৎ-ঋণাত্মক মৌলের সাথে হাইড্রোজেন যুক্ত থাকলে গঠিত হয় (যেমন কঠিন বরফ)।

শুষ্ক বরফ **(Dry Ice)** এর আণবিক বৈশিষ্ট্য

শুষ্ক বরফ বা ড্রাই আইস হলো কার্বন ডাই অক্সাইডের (CO_2) কঠিন রূপ, যা অধ্রুবীয় আণবিক কঠিন পদার্থের (Non-polar molecular solid) একটি অত্যন্ত গুরুত্বপূর্ণ উদাহরণ। কার্বন ডাই অক্সাইড অণুর গঠন রৈখিক (linear) হওয়ায় এর দুটি কার্বন-অক্সিজেন বন্ড ডাইপোল একে অপরকে বাতিল করে দেয়, ফলে অণুটির সামগ্রিক ডাইপোল মোমেন্ট শূন্য হয়। কঠিন অবস্থায় এই অধ্রুবীয় CO_2 অণুগুলি একে অপরের সাথে অত্যন্ত দুর্বল লন্ডন বিক্ষেপণ বল দ্বারা আবদ্ধ থাকে। এই দুর্বল আন্তঃআণবিক আকর্ষণ বলের কারণে শুষ্ক বরফের তাপগতিবিদ্যার দশা চিত্র (phase diagram) এমন হয় যে, এটি স্বাভাবিক বায়ুমণ্ডলীয় চাপে কক্ষ তাপমাত্রায় কঠিন অবস্থা থেকে গলে তরল হওয়ার পরিবর্তে সরাসরি গ্যাসীয় অবস্থায় রূপান্তরিত হয়, যাকে উর্ধ্বপাতন বা সাবলিমেশন (Sublimation) বলা হয়। কোনো তরল অবশেষ না রাখার কারণেই একে "শুষ্ক" বরফ বলা হয়, এবং এটি পরীক্ষাগারে ও শিল্পক্ষেত্রে অত্যন্ত নিম্ন তাপমাত্রার শীতলীকরণ মাধ্যম হিসেবে ব্যাপকভাবে ব্যবহৃত হয়।

In Website- Module 2, 6 & 7

স্পেস ল্যাটিস, ল্যাটিস বিন্দু এবং একক কোষ

স্ফটিকবিজ্ঞান বা ক্রিস্টালোগ্রাফির গাণিতিক ও জ্যামিতিক বিশ্লেষণের মূল ভিত্তি হলো স্পেস ল্যাটিস, ল্যাটিস বিন্দু এবং একক কোষের ধারণা। ত্রিমাত্রিক স্থানে (3D space) কোনো কেলাসের গঠনকারী কণাগুলির (পরমাণু, অণু বা আয়ন) সুশৃঙ্খল, পর্যায়ক্রমিক এবং অসীম জ্যামিতিক বিন্যাসকে স্পেস ল্যাটিস বা কেলাস জালক (Space Lattice) বলা হয়। ঊনবিংশ শতাব্দীতে ফরাসি গণিতবিদ অগাস্ট ব্র্যাভেইস (Auguste Bravais) গাণিতিকভাবে প্রমাণ করেন যে, ত্রিমাত্রিক স্থানে জ্যামিতিক প্রতিসাম্য (Translational symmetry) বজায় রেখে মাত্র ১৪ ধরনের স্বাধীন ল্যাটিস বিন্যাস তৈরি করা সম্ভব। এই নির্দিষ্ট জ্যামিতিক বিন্যাসগুলিকেই বিজ্ঞান জগতে ব্র্যাভেইস ল্যাটিস (Bravais Lattices) বলা হয়।

একটি স্পেস ল্যাটিসের মধ্যে প্রতিটি কণার নির্দিষ্ট এবং আপেক্ষিক অবস্থানকে একটি জ্যামিতিক বিন্দু দ্বারা নির্দেশ করা হয়, যাকে ল্যাটিস বিন্দু বা জালক বিন্দু (Lattice Point) বলে। প্রতিটি ল্যাটিস বিন্দু কেলাসের একটি সম্পূর্ণ গঠনকারী কণাকে প্রতিনিধিত্ব করে।

স্পেস ল্যাটিসের ক্ষুদ্রতম, মৌলিক এবং প্রতিসম জ্যামিতিক অংশটিকে একক কোষ বা Unit Cell বলা হয়। এই ক্ষুদ্রতম অংশটি ত্রিমাত্রিক স্থানে সমস্ত দিকে বারবার পুনরাবৃত্ত হয়ে সম্পূর্ণ অসীম কেলাস জালকটি গঠন করে। একটি একক কোষকে গাণিতিকভাবে সংজ্ঞায়িত করার জন্য তার তিনটি ধার বা বাহুর দৈর্ঘ্য (a, b, c) এবং বাহুগুলির মধ্যবর্তী তিনটি অক্ষীয় কোণ (α, β, γ) ব্যবহার করা হয়। এই ছয়টি প্যারামিটারের উপর ভিত্তি করেই ১৪টি ব্র্যাভেইস ল্যাটিসকে ৭টি মৌলিক কেলাস তন্ত্রে বিভক্ত করা হয়, যার বিবরণ নিচের সারণিতে দেওয়া হলো:

কেলাস তন্ত্র **(Crystal System)**	অক্ষীয় বাহুর সম্পর্ক **(Edge Lengths)**	অক্ষীয় কোণের সম্পর্ক **(Axial Angles)**	ব্র্যাভেইস ল্যাটিসের সংখ্যা
ঘনকাকার (Cubic)	$a = b = c$	$\alpha = \beta = \gamma = 90°$	৩ (P, I, F)
টেট্রাগোনাল (Tetragonal)	$a = b \neq c$	$\alpha = \beta = \gamma = 90°$	২ (P, I)

অর্থোরম্বিক (Orthorhombic)	$a \neq b \neq c$	$\alpha = \beta = \gamma = 90°$	৪ (P, I, F, C)
মনোক্লিনিক (Monoclinic)	$a \neq b \neq c$	$\alpha = \gamma = 90°, \beta \neq 90°$	২ (P, C)
ট্রাইক্লিনিক (Triclinic)	$a \neq b \neq c$	$\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90°$	১ (P)
হেক্সাগোনাল (Hexagonal)	$a = b \neq c$	$\alpha = \beta = 90°, \gamma = 120°$	১ (P)
রম্বোহেড্রাল (Rhombohedral)	$a = b = c$	$\alpha = \beta = \gamma \neq 90°$	১ (P)

(বিঃদ্রঃ P = Primitive, I = Body-Centered, F = Face-Centered, C = Base/End-Centered)

ঘনকাকার কেলাস তন্ত্রের জ্যামিতি

৭টি মৌলিক কেলাস তন্ত্রের মধ্যে ঘনকাকার (Cubic) কেলাস তন্ত্রটি জ্যামিতিকভাবে সবচেয়ে প্রতিসম (most symmetrical)। এই তন্ত্রে তিনটি বাহুর দৈর্ঘ্য পরস্পর সমান হয় ($a = b = c$) এবং এদের মধ্যবর্তী তিনটি কোণই সমকোণ হয় ($\alpha = \beta = \gamma = 90°$)। স্ফটিকবিজ্ঞানের হিসাব-নিকাশ এবং মিলার সূচক (Miller indices) নির্ধারণের জন্য একটি ঘনকাকার একক কোষের জ্যামিতিক উপাদানগুলির নিখুঁত ধারণা থাকা আবশ্যক। একটি আদর্শ ঘনকাকার একক কোষের জ্যামিতিক বিন্যাসে ৮টি কৌণিক বিন্দু (Corners) থাকে। সম্পূর্ণ একক কোষটির ৬টি সমতল পৃষ্ঠতল (Faces) থাকে এবং প্রতিটি পৃষ্ঠের ঠিক কেন্দ্রবিন্দুতে একটি করে মোট ৬টি পৃষ্ঠকেন্দ্র (Face Centers) অবস্থান করে। সমগ্র ঘনকটির একটিমাত্র অভ্যন্তরীণ আয়তন বা দেহ (Body) থাকে এবং ঘনকের সম্পূর্ণ কেন্দ্রস্থলে একটিমাত্র দেহকেন্দ্র (Body Center) থাকে, যার আপেক্ষিক স্থানাঙ্ক (1/2, 1/2, 1/2)। এই কোষের মোট ১২টি বাহু বা ধার (Edges) থাকে। ঘনকের একটি কোণ থেকে শুরু করে তার অভ্যন্তরীণ দেহকেন্দ্র ভেদ করে বিপরীত কোণ পর্যন্ত অঙ্কিত সরলরেখাকে দেহ কর্ণ (Body Diagonal) বলা হয়, এবং একটি ঘনকে মোট ৪টি দেহ কর্ণ থাকে যার গাণিতিক দৈর্ঘ্য $\sqrt{3}a$। এছাড়া প্রতিটি পৃষ্ঠে ২টি করে মোট ১২টি পৃষ্ঠ কর্ণ (Face Diagonals) থাকে।

একক কোষের প্রকারভেদ এবং পরমাণু সংখ্যার **(Z)** গণনা

ল্যাটিস বিন্দু বা গঠনকারী কণাগুলির অবস্থানের উপর ভিত্তি করে ব্র্যাভেইস ল্যাটিসের একক কোষকে প্রধানত দুটি ভাগে ভাগ করা যায়: আদিম (Primitive) এবং অ-আদিম বা কেন্দ্রিক (Non-primitive / Centered)। যে একক কোষে গঠনকারী কণাগুলি শুধুমাত্র কোষের আটটি কৌণিক বিন্দুতে (corners) অবস্থান করে, তাকে আদিম বা সরল ঘনকাকার একক কোষ (Simple Cubic Unit Cell - SC) বলা হয়। অন্যদিকে, অ-আদিম একক কোষে কণাগুলি কৌণিক বিন্দুগুলি ছাড়াও কোষের অন্যান্য নির্দিষ্ট অবস্থানে (যেমন পৃষ্ঠে বা কেন্দ্রে) উপস্থিত থাকে। ঘনকাকার কেলাসের ক্ষেত্রে অ-আদিম কোষগুলি প্রধানত পৃষ্ঠকেন্দ্রিক ঘনকাকার (Face-Centered Cubic - FCC) এবং দেহকেন্দ্রিক ঘনকাকার (Body-Centered Cubic - BCC) হয়। পৃষ্ঠকেন্দ্রিক কোষে কণাগুলি ৮টি কোণ এবং ৬টি পৃষ্ঠতলের কেন্দ্রে অবস্থান করে। দেহকেন্দ্রিক কোষে কণাগুলি ৮টি কোণ এবং কোষের একেবারে কেন্দ্রে অবস্থান করে। প্রান্তকেন্দ্রিক বা এন্ড-সেন্টারড (End-Centered Cubic - ECC) একক কোষে কণাগুলি ৮টি কোণে এবং যে কোনো দুটি বিপরীত পৃষ্ঠের কেন্দ্রে অবস্থান করে। যদিও তাত্ত্বিকভাবে ঘনকাকার তন্ত্রে ECC ব্র্যাভেইস ল্যাটিস অস্তিত্বহীন (এটি মূলত অর্থোরম্বিক বা মনোক্লিনিক ল্যাটিসে দেখা যায়), তবে সিলেবাসের গাণিতিক বিশ্লেষণের জন্য এর কাঠামো অধ্যয়ন করা হয়।

একটি স্ফটিক ল্যাটিসে একক কোষগুলি বিচ্ছিন্ন থাকে না; তারা একে অপরের সাথে সন্নিহিতভাবে যুক্ত থেকে কণাগুলি ভাগ করে নেয়। তাই একটি নির্দিষ্ট ল্যাটিস বিন্দুতে থাকা কণার সম্পূর্ণ অংশ একটি একক কোষের নিজস্ব হয় না। কৌণিক বিন্দুতে থাকা একটি কণা ৮টি সন্নিহিত কোষ দ্বারা সমভাবে ভাগ করা হয়, তাই একটি কোষের প্রতি এর অবদান হলো ১/৮ অংশ। পৃষ্ঠকেন্দ্রে থাকা কণাটি ২টি কোষ দ্বারা ভাগ করা হয়, ফলে এর অবদান ১/২ অংশ। দেহকেন্দ্রে থাকা কণাটি সম্পূর্ণভাবে একটি কোষের অভ্যন্তরে থাকে বলে এর অবদান ১। আর ধারে বা প্রান্তে থাকা কণা ৪টি কোষ দ্বারা ভাগ হওয়ায় এর অবদান ১/৪ অংশ। এই গাণিতিক নীতি প্রয়োগ করে একক কোষে মোট পরমাণুর সংখ্যা (Z) নির্ণয় করা হয়।

একক কোষের প্রকার **(Type of Unit Cell)**	কণার অবস্থান ও জ্যামিতিক হিসাব	মোট পরমাণুর সংখ্যা **(Z)**
সরল ঘনকাকার (Simple Cubic - SC)	৮টি কোণে কণা থাকে: (8 × 1/8)	Z = 1

দেহকেন্দ্রিক (Body Centered - BCC)	৮টি কোণ + ১টি দেহকেন্দ্র: (8 × 1/8) + (1 × 1)	Z = 2
পৃষ্ঠকেন্দ্রিক (Face Centered - FCC)	৮টি কোণ + ৬টি পৃষ্ঠকেন্দ্র: (8 × 1/8) + (6 × 1/2)	Z = 4
প্রান্তকেন্দ্রিক (End Centered - ECC)	৮টি কোণ + ২টি বিপরীত পৃষ্ঠ: (8 × 1/8) + (2 × 1/2)	Z = 2

[cite: 10, 15]

[cite: 10]

[cite: 10, 16]

[cite: 10]

In Website- Module 5

প্যাকিং দক্ষতা এবং শূন্যস্থানের শতকরা হার

কেলাসের অভ্যন্তরে গঠনকারী কণাগুলি (পরমাণু বা আয়ন) একে অপরের যতটা সম্ভব কাছাকাছি অবস্থান করে পদার্থের স্থিতিশক্তি হ্রাস করার চেষ্টা করে। এই কণাগুলিকে নিরেট গোলক হিসেবে কল্পনা করলে, তারা একক কোষের মোট আয়তনের যে ভগ্নাংশ বা শতকরা অংশ দখল করে থাকে, তাকে প্যাকিং দক্ষতা (Packing Efficiency) বলা হয়। গোলকগুলি যতই কাছাকাছি থাকুক না কেন, তাদের মধ্যে কিছু ফাঁকা স্থান থেকেই যায়। একক কোষের এই ফাঁকা বা অধিকৃত না হওয়া অংশটিকে শূন্যস্থান বা ভয়েড (Void) বলা হয়। গাণিতিকভাবে, গোলকাকার কণার ব্যাসার্ধ (r) এবং একক কোষের বাহুর দৈর্ঘ্যের (a) মধ্যে একটি সুনির্দিষ্ট সম্পর্ক থাকে, যা ব্যবহার করে বিভিন্ন কেলাসের প্যাকিং দক্ষতা নির্ণয় করা যায়।

একক কোষের কাঠামো **(Lattice Structure)**	কণার ব্যাসার্ধ ও বাহুর সম্পর্ক	প্যাকিং দক্ষতা **(Percentage)**	প্যাকিং দক্ষতা **(Fractional)**	শূন্যস্থান **(Void %)**	শূন্যস্থান **(Void Fractional)**

সরল ঘনকাকার (Simple Cubic)	r = a/2	৫২.৪% (52.4%)	০.৫২৪	৪৭.৬% (47.6%)	০.৪৭৬
দেহকেন্দ্রিক ঘনকাকার (BCC)	r = √3a/4	৬৮.০% (68.0%)	০.৬৮০	৩২.০% (32.0%)	০.৩২০
পৃষ্ঠকেন্দ্রিক (FCC) / হেক্সাগোনাল (HCP)	r = a/(2√2)	৭৪.০% (74.0%)	০.৭৪০	২৬.০% (26.0%)	০.২৬০

এই গাণিতিক উপাত্ত থেকে সুস্পষ্টভাবে প্রমাণিত হয় যে, FCC বা HCP বিন্যাসে কণাগুলি সবচেয়ে নিবিড়ভাবে অবস্থান করে, কারণ এর প্যাকিং দক্ষতা সর্বোচ্চ (৭৪%)। এই কারণেই এই বিন্যাসগুলিকে নিবিড়তম প্যাকিং (Close Packing) বলা হয়। এই নিবিড় সজ্জায় কণাগুলির মধ্যে যে শূন্যস্থান বা ভয়েড সৃষ্টি হয়, তা মূলত দুই প্রকারের হয়— চতুস্তলকীয় ফাঁক (Tetrahedral void) এবং অষ্টতলকীয় ফাঁক (Octahedral void)। একটি টেট্রাহেড্রাল ভয়েড ৪টি গোলকের স্পর্শবিন্দুতে সৃষ্টি হয়। একটি কিউবিক ক্লোজ প্যাকড (ccp বা FCC) কেলাসে প্রতিটি গঠনকারী কণার জন্য ২টি করে টেট্রাহেড্রাল ভয়েড থাকে, যা ঘনকের দেহ কর্ণের উপর ১/৪ দূরত্বে অবস্থান করে। অন্যদিকে, একটি অক্টাহেড্রাল ভয়েড ৬টি গোলক দ্বারা বেষ্টিত থাকে। একটি FCC কেলাসে প্রতিটি কণার জন্য ১টি করে অক্টাহেড্রাল ভয়েড থাকে, যা ঘনকের দেহকেন্দ্রে এবং ১২টি বাহুর মধ্যবিন্দুতে অবস্থান করে।

In Website- Module 3

ঘনত্বের বৈজ্ঞানিক সূত্র

এক্স-রে ক্রিস্টালোগ্রাফির সাহায্যে একটি একক কোষের মাত্রা (Dimensions) পরিমাপ করে সমগ্র কেলাসিত পদার্থের ঘনত্ব অত্যন্ত নিখুঁতভাবে নির্ণয় করা সম্ভব। যেহেতু একটি স্ফটিক অসংখ্য অভিন্ন একক কোষের পুনরাবৃত্তির মাধ্যমে গঠিত হয়, তাই একটি একক কোষের ঘনত্ব (Density, ρ) সমগ্র কেলাসিত পদার্থের ঘনত্বের সমান হয়। একক কোষের ঘনত্ব নির্ণয়ের জন্য কোষের মোট ভরকে তার মোট আয়তন দিয়ে ভাগ করা হয়। এই গাণিতিক সূত্রটি নিচে প্রদান করা হলো:

$\rho = (Z \times M)/(N_a \times a^3)$

এই সমীকরণে ব্যবহৃত প্রতিটি পদের গাণিতিক ও ভৌত তাৎপর্য রয়েছে:

- ρ (Rho) = পদার্থের ম্যাক্রোস্কোপিক ঘনত্ব (Density of the solid), যা সাধারণত g/cm^3 বা kg/m^3 এককে প্রকাশ করা হয়।
- Z = একক কোষে উপস্থিত মোট কার্যকর পরমাণু বা অণুর সংখ্যা (Effective number of atoms)।
- M = পদার্থের মোলার ভর বা আণবিক ভর (Molar mass), যা g/mol এককে পরিমাপ করা হয়।
- N_a = অ্যাভোগাড্রো সংখ্যা (Avogadro's Number), যার ধ্রুবক মান $6.022 \times 10^{23}\ mol^{-1}$।
- a = একক কোষের বাহুর দৈর্ঘ্য (Edge length)। গাণিতিক সমস্যায় এটি সাধারণত পিকোমিটার (pm) বা অ্যাংস্ট্রম (Å) এককে দেওয়া থাকে, যা ঘনত্বের এককের সাথে সামঞ্জস্য রাখার জন্য সেন্টিমিটারে রূপান্তর করতে হয় ($1\ pm = 10^{-10}\ cm$ এবং $1\ Å = 10^{-8}\ cm$)।
- a^3 = একক কোষের জ্যামিতিক আয়তন (Volume of the unit cell)।

কেলাসের অভ্যন্তরীণ ত্রুটি বা ডিফেক্টের (Defects) কারণে এই তাত্ত্বিক ঘনত্বের পরিমাপে পরিবর্তন পরিলক্ষিত হতে পারে। উদাহরণস্বরূপ, স্কটকি ত্রুটির (Schottky defect) ক্ষেত্রে কেলাস জালক থেকে সমসংখ্যক ক্যাটায়ন ও অ্যানায়ন নিরুদ্দিষ্ট হয়, যার ফলে একক কোষের ভর হ্রাস পায় এবং পরিণামে পদার্থের সামগ্রিক ঘনত্ব কমে যায়। এর বিপরীতে, ফ্রেংকেল ত্রুটির (Frenkel defect) ক্ষেত্রে কোনো আয়ন কেলাস থেকে হারিয়ে যায় না, বরং ক্যাটায়ন তার নিজস্ব স্থান ছেড়ে কেলাসের অন্তর্বর্তী স্থানে (interstitial site) অবস্থান করে। এই কারণে ফ্রেংকেল ত্রুটিতে একক কোষের ভর ও আয়তন অপরিবর্তিত থাকে এবং ঘনত্বে কোনো পরিবর্তন হয় না।

In Website- NOT INCLUDED.

ব্যাসার্ধ অনুপাত নিয়ম **(Radius Ratio Rule)**

আয়নীয় কেলাসের কাঠামোগত স্থিতিশীলতা এবং জ্যামিতিক বিন্যাস মূলত ক্যাটায়ন এবং অ্যানায়নের আপেক্ষিক আকারের উপর নির্ভর করে। একটি ক্যাটায়নের ব্যাসার্ধ (r^+) এবং একটি অ্যানায়নের ব্যাসার্ধের (r^-) অনুপাতকে ব্যাসার্ধ অনুপাত (Radius Ratio) বলা হয়।

ব্যাসার্ধ অনুপাত = r^+/r^-

সাধারণত ক্যাটায়নগুলি ইলেকট্রন বর্জনের কারণে অ্যানায়নের চেয়ে আকারে ছোট হয়, তাই কেলাসের গঠনে ক্যাটায়নগুলি অ্যানায়ন দ্বারা সৃষ্ট ফাঁকা স্থান বা ভয়েডে (Voids) অবস্থান করে। ব্যাসার্ধ অনুপাতের মানের উপর ভিত্তি করে একটি নির্দিষ্ট ক্যাটায়নকে ঘিরে থাকা অ্যানায়নের সংখ্যা, অর্থাৎ সবর্গাঙ্ক সংখ্যা বা কোঅর্ডিনেশন নম্বর (Coordination Number - CN), এবং কেলাসের জ্যামিতিক গঠন গাণিতিকভাবে অনুমান করা যায়। ক্যাটায়নের আকার ক্রমান্বয়ে বৃদ্ধি পেলে ব্যাসার্ধ অনুপাতের মান বাড়ে, এবং তখন ওই ক্যাটায়নকে ঘিরে রাখতে আরও বেশি সংখ্যক অ্যানায়নের প্রয়োজন হয়, যা উচ্চতর কোঅর্ডিনেশন নম্বরের দিকে পরিচালিত করে।

ব্যাসার্ধ অনুপাতের সীমা **(r^+/r^-)**	সম্ভাব্য সবর্গাঙ্ক সংখ্যা **(CN)**	কাঠামোগত জ্যামিতিক বিন্যাস	শূন্যস্থানের প্রকৃতি **(Type of Void)**	আয়নীয় কেলাসের উদাহরণ
০.১৫৫ – ০.২২৫	৩	সমতলীয় ত্রিভুজাকার (Trigonal Planar)	ত্রিভুজাকার ভয়েড	B_2O_3
০.২২৫ – ০.৪১৪	৪	চতুস্তলকীয় (Tetrahedral)	টেট্রাহেড্রাল ভয়েড	ZnS, CuCl
০.৪১৪ – ০.৭৩২	৬	অষ্টতলকীয় (Octahedral)	অক্টাহেড্রাল ভয়েড	NaCl, MgO
০.৭৩২ – ১.০০০	৮	ঘনকাকার (Cubic)	কিউবিক ভয়েড	CsCl, NH_4Br

[cite: 17, 18]

[cite: 17, 18]

In Website- NOT INCLUDED.

আয়নীয় কঠিন পদার্থের কাঠামোগত বিন্যাস

এক্স-রে ক্রিস্টালোগ্রাফি গবেষণার মাধ্যমে বিভিন্ন গুরুত্বপূর্ণ আয়নীয় কেলাসের গঠন প্রকৃতি, ল্যাটিসের ধরন এবং কোঅর্ডিনেশন নম্বর সম্পর্কে নিখুঁত তথ্য উদঘাটন করা হয়েছে।

সোডিয়াম ক্লোরাইড (NaCl) বা রক সল্ট (Rock Salt) কাঠামো একটি ক্লাসিক উদাহরণ, যেখানে ক্লোরাইড আয়ন (Cl^-) গুলি আকারে অপেক্ষাকৃত বড় হওয়ায় তারা একটি ফেস-সেন্টারড কিউবিক (FCC) বা কিউবিক ক্লোজ প্যাকড (ccp) ল্যাটিস তৈরি করে। অর্থাৎ, ক্লোরাইড আয়নগুলি কোষের ৮টি কোণে এবং ৬টি পৃষ্ঠকেন্দ্রে অবস্থান করে। সোডিয়াম আয়ন (Na^+) গুলি আকারে ছোট হওয়ায় তারা এই ল্যাটিসের সমস্ত অক্টাহেড্রাল ভয়েডগুলিতে (দেহকেন্দ্রে এবং ১২টি ধারের মধ্যবিন্দুতে) প্রবেশ করে। এই জ্যামিতিক বিন্যাসের ফলে প্রতিটি Na^+ আয়ন ৬টি Cl^- আয়ন দ্বারা এবং প্রতিটি Cl^- আয়ন ৬টি Na^+ আয়ন দ্বারা বেষ্টিত থাকে, যা 6:6 কোঅর্ডিনেশন বিন্যাস নামে পরিচিত।

জিংক সালফাইড (ZnS) প্রকৃতিতে মূলত দুটি বহুরূপী (Polymorphic) কাঠামোতে বিরাজ করে: জিংক ব্লেন্ড (Zinc Blende) এবং উরটজাইট (Wurtzite)। জিংক ব্লেন্ড কাঠামোতে সালফাইড আয়ন (S^{2-}) FCC ল্যাটিস তৈরি করে এবং জিংক আয়ন (Zn^{2+}) অর্ধেক সংখ্যক টেট্রাহেড্রাল ভয়েডে একান্তরভাবে (alternately) অবস্থান করে। এর ফলে জিংক ব্লেন্ডের কোঅর্ডিনেশন নম্বর হয় 4:4। অন্যদিকে, উরটজাইট কাঠামোটি হেক্সাগোনাল ক্লোজ প্যাকড (HCP) ল্যাটিসের উপর ভিত্তি করে গঠিত হয়। এখানেও S^{2-} আয়নগুলি প্রধান ল্যাটিস তৈরি করে এবং Zn^{2+} আয়নগুলি অর্ধেক টেট্রাহেড্রাল ভয়েডে অবস্থান করে, যার ফলে এরও কোঅর্ডিনেশন নম্বর 4:4 হয়, তবে এদের সামগ্রিক জ্যামিতিক প্রতিসাম্য আলাদা হয়।

ক্যালসিয়াম ফ্লোরাইড (CaF_2) বা ফ্লোরাইট (Fluorite) কাঠামো একটি ব্যতিক্রমী গঠন উপস্থাপন করে কারণ এখানে ক্যাটায়নটি অ্যানায়নের চেয়ে আকারে বড়। ক্যালসিয়াম আয়ন (Ca^{2+}) একটি FCC ল্যাটিস গঠন করে এবং ক্ষুদ্র ফ্লোরাইড আয়ন (F^-) সমস্ত (১০০%) টেট্রাহেড্রাল ভয়েডে অবস্থান করে। এর ফলে প্রতিটি Ca^{2+} আয়ন ৮টি F^- দ্বারা এবং প্রতিটি F^- আয়ন ৪টি Ca^{2+} দ্বারা বেষ্টিত থাকে, যা 8:4 কোঅর্ডিনেশন বিন্যাস তৈরি করে। সোডিয়াম অক্সাইড (Na_2O) বা অ্যান্টি-ফ্লোরাইট (Anti-fluorite) কাঠামোটি ফ্লোরাইট কাঠামোর ঠিক বিপরীত। এখানে অক্সাইড আয়ন (O^{2-}) FCC ল্যাটিস তৈরি করে এবং সোডিয়াম আয়ন (Na^+) সমস্ত টেট্রাহেড্রাল ভয়েডে অবস্থান করায় এর কোঅর্ডিনেশন নম্বর হয় 4:8।

ক্যালসিয়াম টাইটানেট ($CaTiO_3$) বা পেরোভস্কাইট (Perovskite) কাঠামোটি আধুনিক পদার্থবিদ্যা এবং উপাদান বিজ্ঞানে অত্যন্ত তাৎপর্যপূর্ণ, কারণ এই কাঠামোর

উপর ভিত্তি করেই অনেক উচ্চ-তাপমাত্রার সুপারকন্ডাক্টর এবং সোলার সেল তৈরি করা হয়। ১৮৩৯ সালে রাশিয়ার ইউরাল পর্বতে গুস্তাভ রোজ এই খনিজটি আবিষ্কার করেন এবং রুশ খনিজবিদ লেভ পেরোভস্কির নামে এর নামকরণ করেন। পেরোভস্কাইট যৌগগুলির সাধারণ রাসায়নিক সংকেত হলো ABO_3, যেখানে A এবং B হলো দুটি ভিন্ন আকারের ক্যাটায়ন এবং O হলো অ্যানায়ন। $CaTiO_3$ এর আদর্শ ল্যাটিস কাঠামোটি একটি সরল ঘনকাকার বা সিম্পল কিউবিক (Ideal Cubic) বিন্যাস প্রদর্শন করে। স্ফটিকবিজ্ঞানে এই একক কোষটিকে দুটি সমতুল্য জ্যামিতিক উপায়ে বর্ণনা করা যায়। প্রথম বিন্যাসে, অপেক্ষাকৃত ছোট টাইটানিয়াম আয়ন (Ti^{4+}) কিউবের ঠিক কেন্দ্রে (Body center) অবস্থান করে, ক্যালসিয়াম আয়ন (Ca^{2+}) কিউবের ৮টি কোণে (Corners) থাকে এবং অক্সিজেন আয়ন (O^{2-}) কিউবের ৬টি পৃষ্ঠকেন্দ্রে (Face centers) অবস্থান করে। বিকল্প দ্বিতীয় বিন্যাসে, ক্যালসিয়াম আয়ন (Ca^{2+}) কিউবের ঠিক কেন্দ্রে অবস্থান করে, টাইটানিয়াম আয়ন (Ti^{4+}) ৮টি কোণে থাকে এবং অক্সিজেন আয়ন (O^{2-}) ১২টি ধারের বা কিনারাগুলির মধ্যবিন্দুতে (Edge centers) অবস্থান করে। উভয় ক্ষেত্রেই গাণিতিক হিসাব দেখা যায় যে একক কোষে 1টি Ca, 1টি Ti এবং 3টি O পরমাণু থাকে, এবং টাইটানিয়ামের কোঅর্ডিনেশন নম্বর 6 (অক্টাহেড্রাল) এবং ক্যালসিয়ামের 12 (কিউবোক্টাহেড্রাল) হয়।

গ্রাফাইট (Graphite) একটি আয়নীয় কঠিন না হওয়া সত্ত্বেও এর গঠনগত বৈচিত্র্যের জন্য এটি বিশেষভাবে পঠিত হয়। গ্রাফাইট হলো কার্বনের একটি সমযোজী নেটওয়ার্ক কঠিন রূপ, যার গঠন হেক্সাগোনাল (Hexagonal) এবং স্তরভিত্তিক। গ্রাফাইটের প্রতিটি স্তরে কার্বন পরমাণুগুলি sp^2 সংকরায়িত (hybridized) অবস্থায় থাকে এবং প্রতিটি কার্বন অন্য তিনটি কার্বন পরমাণুর সাথে শক্তিশালী সমযোজী বন্ধনে আবদ্ধ হয়ে সমতলীয় ষড়ভুজাকার (hexagonal) আংটির মতো স্তর তৈরি করে। কার্বনের চতুর্থ যোজক ইলেকট্রনটি (delocalized electron) কোনো নির্দিষ্ট পরমাণুর সাথে আবদ্ধ না থেকে সমগ্র স্তর জুড়ে স্বাধীনভাবে ঘুরে বেড়াতে পারে। এই মুক্ত ইলেকট্রনের উপস্থিতির কারণেই সমযোজী কঠিন হওয়া সত্ত্বেও গ্রাফাইট তাপ ও বিদ্যুতের অত্যন্ত ভালো পরিবাহী। গ্রাফাইটের দুটি সমতলীয় ষড়ভুজাকার স্তরের মধ্যে অত্যন্ত দুর্বল ভ্যান ডার ওয়ালস (Van der Waals) আকর্ষণ বল কাজ করে। এই দুর্বল আন্তঃস্তরীয় বলের কারণে সামান্য যান্ত্রিক চাপ প্রয়োগ করলেই স্তরগুলি একে অপরের উপর দিয়ে সহজেই পিছলে যেতে পারে, যা গ্রাফাইটকে পিচ্ছিল বৈশিষ্ট্য প্রদান করে এবং একে পেন্সিলের সীস বা যন্ত্রপাতির শুষ্ক লুব্রিকেন্ট হিসেবে ব্যবহারের উপযোগী করে তোলে।

In Website- Module 4 & 8

কঠিন পদার্থের ত্রুটি এবং কেলাসিত গঠনে ফাঁকা স্থান বা ভয়েড

তাত্ত্বিকভাবে, একটি কঠিন পদার্থের কেলাস (Crystalline solid) একটি সুশৃঙ্খল এবং সুনির্দিষ্ট জ্যামিতিক কাঠামোর উপর ভিত্তি করে গঠিত হয়। আদর্শ অবস্থায়, পরম শূন্য তাপমাত্রায় (0 K) একটি কেলাসের অভ্যন্তরীণ গঠন সম্পূর্ণ নিখুঁত থাকে, অর্থাৎ কেলাসের প্রতিটি কণা (পরমাণু, অণু বা আয়ন) তার নির্ধারিত ল্যাটিস বিন্দুতে (Lattice point) অবস্থান করে। কিন্তু বাস্তবে, পরম শূন্য তাপমাত্রার উপরে তাপীয় কম্পন (Thermal vibration), যান্ত্রিক চাপ, এবং অন্যান্য পরিবেশগত কারণে কেলাসের কণাগুলির বিন্যাসে অনিয়ম বা বিচ্যুতির সৃষ্টি হয়। এই ধরনের বিচ্যুতি বা অপূর্ণতাগুলিকেই কেলাসের ত্রুটি (Defects in crystals) বলা হয়।

একটি স্ফটিক বা কেলাসের ভৌত বৈশিষ্ট্য, যেমন বৈদ্যুতিক পরিবাহিতা, তাপীয় পরিবাহিতা, যান্ত্রিক শক্তি, এবং আলোকীয় বৈশিষ্ট্য মূলত এই ত্রুটিগুলির প্রকৃতির উপর নির্ভর করে। তাপগতিবিদ্যার দৃষ্টিকোণ থেকে, নিখুঁত কেলাসের এনট্রপি (Entropy) শূন্য হলেও, তাপমাত্রা বৃদ্ধির সাথে সাথে কেলাসে ত্রুটির সৃষ্টি এনট্রপি বৃদ্ধি করে, যা সিস্টেমের গিবস মুক্ত শক্তি (Gibbs Free Energy) হ্রাস করে এবং সিস্টেমটিকে তাপগতীয়ভাবে স্থিতিশীল করে তোলে। কেলাসের ত্রুটিগুলিকে মূলত তাদের কাঠামোগত ব্যাপ্তির উপর ভিত্তি করে বিন্দু ঘটিত ত্রুটি (Point defects), রেখা ত্রুটি (Line defects), তলীয় ত্রুটি (Plane/Surface defects), এবং আয়তন ত্রুটি (Volume defects) হিসেবে শ্রেণীবদ্ধ করা হয়। বিন্দু ঘটিত ত্রুটিগুলি স্ফটিক জালকের মধ্যে কেবল একটি একক পরমাণু বা অণুকে প্রভাবিত করে, অন্যদিকে রেখা ত্রুটিগুলি এক মাত্রায় বিস্তৃত থাকে। এই প্রতিবেদনে বিন্দু ঘটিত ত্রুটির পুঙ্খানুপুঙ্খ বিবরণ এবং রেখা ত্রুটির সংক্ষিপ্ত পর্যালোচনার পাশাপাশি কেলাসের অভ্যন্তরীণ ফাঁকা স্থান বা ভয়েড (Voids)-এর জ্যামিতিক অবস্থান ও স্থানাঙ্ক নিয়ে একটি বিস্তারিত আলোচনা উপস্থাপন করা হলো।

কেলাসে বিন্দু ঘটিত ত্রুটি **(Point Defects)**

বিন্দু ঘটিত ত্রুটি হলো কেলাস জালকের মধ্যে একটি নির্দিষ্ট বিন্দুর চারপাশে বা একটি নির্দিষ্ট ল্যাটিস বিন্দুতে পরমাণু বা আয়নের নিখুঁত বিন্যাসের স্থানীয় বিচ্যুতি। এটি সাধারণত একক পরমাণু বা আয়নের অনুপস্থিতি, ভুল অবস্থানে উপস্থিতি, বা বহিরাগত কোনো কণার প্রবেশের কারণে ঘটে থাকে। এই ত্রুটিগুলি কেলাসের নিয়মিত, পুনরাবৃত্তিমূলক প্যাটার্নকে ব্যাহত করে এবং পদার্থের বৈশিষ্ট্যগুলিকে আমূল পরিবর্তিত করতে পারে। রাসায়নিক গঠন এবং স্টয়সিওমেট্রি বজায় থাকার উপর ভিত্তি করে বিন্দু ত্রুটিগুলিকে প্রধানত তিনটি শ্রেণিতে বিভক্ত করা যায়:

স্টয়সিওমেট্রিক ত্রুটি (Stoichiometric defects), নন-স্টয়সিওমেট্রিক ত্রুটি (Non-stoichiometric defects), এবং অশুদ্ধিজনিত ত্রুটি (Impurity defects)।

স্টয়সিওমেট্রিক ত্রুটি **(Stoichiometric Defects)**

স্টয়সিওমেট্রিক ত্রুটিগুলি হলো সেই ধরনের বিন্দু ঘটিত ত্রুটি যেখানে কেলাসের ত্রুটি সৃষ্টি হওয়ার পরেও যৌগটির রাসায়নিক সংকেত বা স্টয়সিওমেট্রি (ক্যাটায়ন এবং অ্যানায়নের সংখ্যার অনুপাত) সম্পূর্ণ অপরিবর্তিত থাকে। এই ত্রুটিগুলি পদার্থের মৌলিক রাসায়নিক গঠনকে প্রভাবিত করে না, তাই এদের অনেক সময় সহজাত ত্রুটি (Intrinsic defects) বা তাপগতীয় ত্রুটি (Thermodynamic defects) বলা হয়, কারণ তাপমাত্রার পরিবর্তনের সাথে সাথে এই ত্রুটিগুলির মাত্রা পরিবর্তিত হয়। নন-আয়নিক কঠিন পদার্থে এই ত্রুটি সাধারণত দুটি রূপ ধারণ করে: শূন্যতা ত্রুটি (Vacancy defect) এবং অন্তঃস্থানিক ত্রুটি (Interstitial defect)।

শূন্যতা ত্রুটির ক্ষেত্রে, কেলাসের মধ্যে কিছু ল্যাটিস বিন্দু কেলাস গঠনকারী কণা দ্বারা অপূর্ণ থাকে। এর ফলে পদার্থের সামগ্রিক আয়তন অপরিবর্তিত থাকলেও ভর হ্রাস পায় এবং পরিণামে ঘনত্ব কমে যায়। কেলাসকে উত্তপ্ত করলে সাধারণত এইরূপ ত্রুটির সৃষ্টি হয়। অন্যদিকে, অন্তঃস্থানিক ত্রুটিতে কিছু কণা কেলাসের ল্যাটিস বিন্দুগুলির মধ্যবর্তী স্থান বা ইন্টারস্টিশিয়াল স্থানে অবস্থান গ্রহণ করে, যা পদার্থের ঘনত্ব বৃদ্ধি করে। তবে আয়নিক যৌগের ক্ষেত্রে পরিস্থিতি কিছুটা ভিন্ন হয়। সামগ্রিক বৈদ্যুতিক প্রশমতা (Electrical neutrality) বজায় রাখার বাধ্যবাধকতা থাকায়, আয়নিক যৌগে এই ত্রুটিগুলি স্কটকি ত্রুটি (Schottky defect) এবং ফ্রেনকেল ত্রুটি (Frenkel defect) হিসেবে আত্মপ্রকাশ করে।

স্কটকি ত্রুটি **(Schottky Defect)**

জার্মান পদার্থবিদ ওয়াল্টার এইচ স্কটকি (Walter H. Schottky)-এর নামানুসারে স্কটকি ত্রুটি হলো আয়নিক কেলাসের একটি বিশেষ ধরনের শূন্যতা ত্রুটি। যখন কোনো আয়নিক যৌগের কেলাস জালক থেকে সমান সংখ্যক ক্যাটায়ন এবং অ্যানায়ন সম্পূর্ণভাবে নিরুদ্দিষ্ট হয়ে জোড়া শূন্যতার সৃষ্টি করে, তখন তাকে স্কটকি ত্রুটি বলা হয়। বৈদ্যুতিক প্রশমতা বজায় রাখার জন্য যতো সংখ্যক ধনাত্মক আয়ন নিখোঁজ হয়, ঠিক ততো সংখ্যক ঋণাত্মক আয়নও কেলাস থেকে অপসারিত হয়।

এই ত্রুটি সৃষ্টির প্রধান শর্তাবলি পদার্থের পারমাণবিক কাঠামোর উপর গভীরভাবে নির্ভরশীল। প্রথমত, যৌগের ক্যাটায়ন এবং অ্যানায়নের আকারের পার্থক্য অত্যন্ত সামান্য হতে হবে, অর্থাৎ তাদের ব্যাসার্ধ প্রায় সমান হতে হবে। দ্বিতীয়ত, যৌগটির আয়নের সর্বগাঙ্ক সংখ্যা বা কো-অর্ডিনেশন সংখ্যা (Coordination Number) উচ্চ

হতে হবে (যেমন ৬ বা ৮)। স্কটকি ত্রুটির ফলে কেলাসের ভরের একটি উল্লেখযোগ্য হ্রাস ঘটে। যেহেতু সামগ্রিক আয়তন অপরিবর্তিত থাকে এবং ভর কমে যায়, তাই যৌগের ঘনত্ব বহুলাংশে হ্রাস পায়।

তাপগতিবিদ্যার সূত্র এবং পরিসংখ্যানগত বলবিদ্যা (Statistical mechanics) প্রয়োগ করে একটি কেলাসে স্কটকি ত্রুটির সংখ্যা ($n_{\square}$) নিম্নলিখিত সমীকরণের মাধ্যমে নির্ণয় করা যায়:

$$n_{\square} \approx N \exp(-\Delta H_{\square}/2RT)$$

এই সমীকরণে $n_{\square}$ হলো একক আয়তনে স্কটকি ত্রুটির সংখ্যা, N হলো কেলাসের মোট পরমাণুর সংখ্যা, $\Delta H_{\square}$ হলো স্কটকি ত্রুটি গঠনের এনথালপি, R হলো সার্বজনীন গ্যাস ধ্রুবক, এবং T হলো পরম তাপমাত্রা (কেলভিন স্কেলে)। সমীকরণটি স্পষ্ট করে যে তাপমাত্রা বৃদ্ধির সাথে সাথে ত্রুটির সংখ্যা সূচকীয়ভাবে (exponentially) বৃদ্ধি পায়। ঘরের তাপমাত্রায় সোডিয়াম ক্লোরাইড (NaCl) কেলাসে প্রতি ঘন সেন্টিমিটারে প্রায় 10^6 টি স্কটকি ত্রুটি পরিলক্ষিত হয়, যা কেলাসের মোট আয়নের তুলনায় একটি নগণ্য অংশ হলেও ভৌত বৈশিষ্ট্যের উপর বিশাল প্রভাব ফেলে। সাধারণ উদাহরণগুলির মধ্যে রয়েছে সোডিয়াম ক্লোরাইড (NaCl), পটাশিয়াম ক্লোরাইড (KCl), সিজিয়াম ক্লোরাইড (CsCl) এবং সিলভার ব্রোমাইড (AgBr)।

ফ্রেনকেল ত্রুটি **(Frenkel Defect)**

রাশিয়ান পদার্থবিদ ইয়াকভ ফ্রেনকেল (Yakov Frenkel)-এর আবিষ্কৃত ফ্রেনকেল ত্রুটি হলো আয়নিক কঠিন পদার্থের এমন এক ধরনের ত্রুটি, যেখানে একটি আয়ন (সাধারণত আকারে ছোট ক্যাটায়ন) তার নিজস্ব ল্যাটিস বিন্দু পরিত্যাগ করে কেলাসের অভ্যন্তরে একটি আন্তঃস্থানিক (Interstitial) স্থানে অবস্থান গ্রহণ করে। এই প্রক্রিয়ায় আয়নটির আদি স্থানে একটি শূন্যতা তৈরি হয় এবং নতুন স্থানে একটি অন্তঃস্থানিক ত্রুটি তৈরি হয়। একজোড়া কাছাকাছি অবস্থিত শূন্যস্থান ও একটি অন্তর্বর্তী ত্রুটি মিলে ফ্রেনকেল জোড় (Frenkel pair) গঠন করে। এই কারণে ফ্রেনকেল ত্রুটিকে অনেক সময় স্থানচ্যুতি ত্রুটিও (Dislocation defect) বলা হয়ে থাকে।

ফ্রেনকেল ত্রুটি সাধারণত সেইসব আয়নিক যৌগে দেখা যায় যেখানে ক্যাটায়ন এবং অ্যানায়নের আকারের মধ্যে একটি বিশাল পার্থক্য বর্তমান থাকে (অর্থাৎ অ্যানায়ন ক্যাটায়নের তুলনায় অনেক বড় হয়)। এছাড়া, যৌগটির সর্বগাঙ্ক সংখ্যা সাধারণত নিম্নমানের (যেমন ৪ বা ৬) হতে হয়। যেহেতু কোনো কণা কেলাসের বাইরে বেরিয়ে যায় না এবং শুধুমাত্র কেলাসের ভেতরেই স্থান পরিবর্তন করে, তাই ফ্রেনকেল ত্রুটিতে

কঠিন পদার্থের সামগ্রিক ভর বা ঘনত্বের কোনো পরিবর্তন ঘটে না। সাধারণ উদাহরণ হিসেবে সিলভার ক্লোরাইড (AgCl), সিলভার ব্রোমাইড (AgBr), সিলভার আয়োডাইড (AgI) এবং জিংক সালফাইড (ZnS)-এর নাম উল্লেখ করা যায়। সিলভার ব্রোমাইড (AgBr) হলো এমন একটি ব্যতিক্রমী যৌগ যা একই সাথে স্কটকি এবং ফ্রেনকেল উভয় প্রকার ত্রুটিই প্রদর্শন করতে সক্ষম, কারণ এর ক্যাটায়ন ও অ্যানায়নের আকারের অনুপাত এবং কেলাস জালক শক্তি এমন একটি ভারসাম্য তৈরি করে যেখানে উভয় ত্রুটি গঠনের সম্ভাবনা প্রায় সমান থাকে।

স্কটকি এবং ফ্রেনকেল ত্রুটির কাঠামোগত ও ভৌত বৈশিষ্ট্যের তুলনামূলক বিশ্লেষণ

ভৌত ও রাসায়নিক পরামিতি	স্কটকি ত্রুটি **(Schottky Defect)**	ফ্রেনকেল ত্রুটি **(Frenkel Defect)**
ত্রুটির মৌলিক প্রকৃতি	সমসংখ্যক ক্যাটায়ন এবং অ্যানায়ন কেলাস জালক থেকে সম্পূর্ণভাবে অপসারিত হয়ে শূন্যতা সৃষ্টি করে।	একটি আয়ন (সাধারণত ক্যাটায়ন) তার ল্যাটিস বিন্দু থেকে স্থানচ্যুত হয়ে কেলাসের ইন্টারস্টিশিয়াল স্থানে চলে যায়।
আয়নের আকারের প্রভাব	ক্যাটায়ন এবং অ্যানায়নের আকারের পার্থক্য অত্যন্ত সামান্য থাকে ($r^+ \approx r^-$)।	ক্যাটায়ন এবং অ্যানায়নের আকারের পার্থক্য অনেক বেশি থাকে (অ্যানায়ন অনেক বড় হয়)।
সর্বগাঙ্ক সংখ্যা (Coordination Number)	এটি উচ্চ সর্বগাঙ্ক সংখ্যা (যেমন ৬ বা ৮) বিশিষ্ট যৌগে বেশি পরিলক্ষিত হয়।	এটি নিম্ন সর্বগাঙ্ক সংখ্যা (যেমন ৪ বা ৬) বিশিষ্ট যৌগে বেশি পরিলক্ষিত হয়।

ঘনত্বের উপর প্রভাব	পদার্থের ভর কমে যাওয়ায় ঘনত্ব উল্লেখযোগ্যভাবে হ্রাস পায়।	পদার্থের ভর অপরিবর্তিত থাকায় ঘনত্ব সম্পূর্ণরূপে অপরিবর্তিত থাকে।
বৈদ্যুতিক পরিবাহিতা	শূন্যতার মধ্য দিয়ে আয়নের চলনের ফলে বৈদ্যুতিক পরিবাহিতা কিছুটা বৃদ্ধি পায়।	ইন্টারস্টিশিয়াল স্থানে আয়নের উপস্থিতির কারণে বৈদ্যুতিক পরিবাহিতা বৃদ্ধি পায়।
যৌগের সাধারণ উদাহরণ	NaCl, KCl, CsCl, AgBr	ZnS, AgCl, AgI, AgBr

নন-স্টয়সিওমেট্রিক ত্রুটি **(Non-stoichiometric Defects)**

যে বিন্দু ঘটিত ত্রুটির কারণে কেলাসের ক্যাটায়ন এবং অ্যানায়নের অনুপাত যৌগটির আদর্শ রাসায়নিক সংকেত থেকে বিচ্যুত হয়, তাকে নন-স্টয়সিওমেট্রিক ত্রুটি বলা হয়। অর্থাৎ, এই ত্রুটির ফলে কেলাস গঠনকারী ক্যাটায়ন ও অ্যানায়ন সংখ্যার অনুপাত যৌগটির রাসায়নিক সংকেত দ্বারা নির্দেশিত অনুপাত অপেক্ষা ভিন্ন হয়। যে সকল আয়নীয় যৌগে এই প্রকার ত্রুটি দেখা যায় তাদের বার্থোলাইড যৌগ (Berthollide compounds) বলে আখ্যায়িত করা হয়। এই ত্রুটিগুলিকে প্রধানত দুটি ভাগে ভাগ করা যায়: ধাতব আধিক্যজনিত ত্রুটি (Metal excess defect) এবং ধাতব ঘাটতিজনিত ত্রুটি (Metal deficiency defect)।

ধাতব আধিক্যজনিত ত্রুটি মূলত অ্যানায়নিক শূন্যতা অথবা অতিরিক্ত ক্যাটায়নের উপস্থিতির কারণে ঘটে থাকে। অ্যানায়নিক শূন্যতাজনিত ত্রুটির ক্ষেত্রে, একটি ঋণাত্মক আয়ন তার ল্যাটিস বিন্দু পরিত্যাগ করে কেলাস থেকে বেরিয়ে যায়। কিন্তু সমগ্র কেলাসের বৈদ্যুতিক প্রশমতা বজায় রাখার জন্য উক্ত অ্যানায়নিক শূন্যস্থানে একটি ইলেকট্রন এসে অবস্থান গ্রহণ করে। এই ইলেকট্রন দ্বারা অধিকৃত অ্যানায়নিক শূন্যস্থানটিকে "F-কেন্দ্র" (F-center বা Farbzentrum) বলা হয়, যা জার্মান শব্দ 'Farbe' থেকে এসেছে যার অর্থ রঙ বা বর্ণ। F-কেন্দ্রগুলি কেলাসের রঙের জন্য প্রত্যক্ষভাবে দায়ী। যখন কেলাসের উপর দৃশ্যমান আলো আপতিত হয়, তখন F-কেন্দ্রের অযোগ্য ইলেকট্রনটি সেই আলো থেকে নির্দিষ্ট শক্তির ফোটন শোষণ করে উচ্চ শক্তিস্তরে উন্নীত হয় এবং এর পরিপূরক রঙের বিকিরণ ঘটায়। উদাহরণস্বরূপ, সোডিয়াম ক্লোরাইড (NaCl) কেলাসকে সোডিয়াম বাষ্পে উত্তপ্ত করলে তা হলুদ বর্ণ

ধারণ করে, লিথিয়াম ক্লোরাইড (LiCl) গোলাপি বর্ণ ধারণ করে, এবং পটাশিয়াম ক্লোরাইড (KCl) বেগুনি বা লাইল্যাক বর্ণ ধারণ করে। অন্যদিকে, অতিরিক্ত ক্যাটায়নের কারণে সৃষ্ট ত্রুটিতে একটি অতিরিক্ত ধনাত্মক আয়ন ইন্টারস্টিশিয়াল স্থানে প্রবেশ করে এবং প্রশমতার জন্য একটি ইলেকট্রন পার্শ্ববর্তী অন্য একটি ইন্টারস্টিশিয়াল স্থানে অবস্থান নেয়। জিংক অক্সাইড (ZnO) কে উত্তপ্ত করলে তা সাদা থেকে হলুদ বর্ণ ধারণ করে, যা এই ধরনের ত্রুটির একটি উৎকৃষ্ট উদাহরণ।

ধাতব ঘাটতিজনিত ত্রুটি সাধারণত পরিবর্তনশীল যোজ্যতা (Variable valency) বিশিষ্ট অবস্থান্তর ধাতুগুলির (Transition metals) যৌগে দেখা যায়। এই ত্রুটিতে একটি ক্যাটায়ন তার নির্ধারিত ল্যাটিস বিন্দু থেকে নিরুদ্দিষ্ট হয় এবং বৈদ্যুতিক প্রশমতা বজায় রাখতে পার্শ্ববর্তী কোনো ধাতব আয়ন উচ্চতর জারণ স্তরে উন্নীত হয়। উদাহরণস্বরূপ, আয়রন (II) অক্সাইড (FeO) প্রায়শই নন-স্টয়সিওমেট্রিক ফর্মে $Fe_{0.88}O$ থেকে $Fe_{0.95}O$ রূপে অবস্থান করে। এক্ষেত্রে কেলাস থেকে কিছু Fe^{2+} আয়ন অনুপস্থিত থাকে এবং সেই ধনাত্মক আধানের ঘাটতি পূরণের জন্য আনুপাতিক হারে কিছু Fe^{2+} আয়ন জারিত হয়ে Fe^{3+} আয়নে পরিণত হয়। নিকেল অক্সাইড (NiO) এবং কপার সালফাইড ($Cu_{1.89}S$) যৌগেও এই ধরনের ধাতব ঘাটতিজনিত ত্রুটি পরিলক্ষিত হয়।

অশুদ্ধিজনিত ত্রুটি এবং ডোপিং **(Impurity Defects and Doping)**

অশুদ্ধিজনিত ত্রুটি বা বহিরাগত বিন্দু ত্রুটি হলো এমন একটি অবস্থা যেখানে মূল কেলাসের পরমাণু বা আয়নের স্থানে অন্য কোনো বহিরাগত বা অণু-পরমাণু উপস্থিত থাকে। বস্তু বিশুদ্ধিকরণ প্রণালীগুলিতে ফাঁক থেকে যাওয়ার কারণেই মূলত কোনো পদার্থই কখনো ১০০% বিশুদ্ধ হতে পারে না, ফলে স্বভাবতই কেলাসের গঠনে এই ত্রুটিগুলি প্ররোচিত হয়। এটি প্রধানত দুটি উপায়ে ঘটতে পারে: প্রতিস্থাপনমূলক অশুদ্ধি (Substitutional impurity), যেখানে হোস্ট পরমাণুকে সরিয়ে অন্য পরমাণু বা আয়ন সেই জায়গা দখল করে; এবং অন্তঃস্থলীয় অশুদ্ধি (Interstitial impurity), যেখানে অশুদ্ধি কণা ল্যাটিসের ফাঁকা জায়গায় বা ইন্টারস্টিশিয়াল স্থানে অবস্থান করে।

আয়নিক যৌগের ক্ষেত্রে এর একটি চমৎকার উদাহরণ হলো বিগলিত সোডিয়াম ক্লোরাইডের (NaCl) সাথে সামান্য পরিমাণ স্ট্রনশিয়াম ক্লোরাইড ($SrCl_2$) যোগ করে কেলাসিত করার প্রক্রিয়া। এই মিশ্রণটি কেলাসিত হলে কিছু Na^+ আয়নের স্থান Sr^{2+} আয়ন দ্বারা প্রতিস্থাপিত হয়। যেহেতু Sr^{2+} এর চার্জ +2 এবং Na^+ এর চার্জ +1, তাই সমগ্র কেলাসের বৈদ্যুতিক প্রশমতা বজায় রাখতে প্রতিটি Sr^{2+} আয়নের প্রবেশের জন্য

দুটি Na^+ আয়ন অপসারিত হয়। এর মধ্যে একটি স্থান Sr^{2+} দখল করে এবং অপর স্থানটি ক্যাটায়নিক শূন্যতা হিসেবে থেকে যায়।

অর্ধপরিবাহী (Semiconductor) পদার্থবিজ্ঞানে অশুদ্ধিজনিত ত্রুটির একটি অত্যন্ত গুরুত্বপূর্ণ এবং ব্যবহারিক প্রয়োগ হলো ডোপিং (Doping) প্রক্রিয়া। সিলিকন (Si) বা জার্মেনিয়ামের (Ge) মতো খাঁটি চতুর্যোজী (১৪ নং গ্রুপ) অর্ধপরিবাহীতে সামান্য পরিমাণ পঞ্চযোজী (১৫ নং গ্রুপ, যেমন আর্সেনিক বা ফসফরাস) মৌল যোগ করলে একটি অতিরিক্ত ইলেকট্রন মুক্ত অবস্থায় থাকে, যা n-টাইপ অর্ধপরিবাহী (n-type semiconductor) তৈরি করে। অন্যদিকে, ত্রিযোজী (১৩ নং গ্রুপ, যেমন বোরন বা গ্যালিয়াম) মৌল যোগ করলে ইলেকট্রনের ঘাটতি বা 'হোল' (Hole) তৈরি হয়, যা p-টাইপ অর্ধপরিবাহী সৃষ্টি করে। এই প্রক্রিয়াটি কঠিন পদার্থের বৈদ্যুতিক পরিবাহিতাকে বহুগুণ বৃদ্ধি করে এবং আধুনিক ইলেকট্রনিক্স, ট্রানজিস্টর, এবং মাইক্রোচিপ শিল্পের ভিত্তি স্থাপন করে।

রেখা ত্রুটি: একটি সংক্ষিপ্ত আলোচনা (Line Defects in Short)

বিন্দু ত্রুটির মতো শুধুমাত্র একটি নির্দিষ্ট ল্যাটিস বিন্দুর স্থানীয় বিচ্যুতির বাইরে গিয়ে যখন কেলাস জালকের পরমাণু বা অণুর একটি সম্পূর্ণ রেখা বা শারি তার স্বাভাবিক অবস্থান থেকে বিচ্যুত হয়, তখন তাকে রেখা ত্রুটি (Line Defect) বা স্থানচ্যুতি (Dislocation) বলা হয়। স্ফটিকের যান্ত্রিক শক্তি, নমনীয়তা (Ductility), প্রসারণশীলতা (Malleability), এবং প্লাস্টিক বিকৃতি (Plastic deformation) বোঝার জন্য রেখা ত্রুটিগুলি অত্যন্ত প্রাসঙ্গিক। এগুলিকে প্রধানত দুটি ভাগে ভাগ করা যায়: প্রান্ত স্থানচ্যুতি (Edge Dislocation) এবং স্ক্রু স্থানচ্যুতি (Screw Dislocation)।

প্রান্ত স্থানচ্যুতি তখন ঘটে যখন কেলাসের অভ্যন্তরে পরমাণুর একটি অতিরিক্ত অর্ধ-তল (Extra half-plane) প্রবেশ করানো হয়। এই অতিরিক্ত তলের প্রান্ত বরাবর যে ত্রুটির সৃষ্টি হয়, তা কেলাসের নিয়মিত কাঠামোর মধ্যে প্রবল যান্ত্রিক বিকৃতি বা পীড়ন (Stress) তৈরি করে। অন্যদিকে, একটি নিখুঁত কেলাসের উপর শিয়ার স্ট্রেস (Shear stress) বা কৃন্তন পীড়ন প্রয়োগ করা হলে কেলাসের এক অংশ অন্য অংশের সাপেক্ষে পিছলিয়ে যায়, যার ফলে পরমাণুর স্তরগুলি একটি সর্পিল বা স্ক্রু-এর মতো আকার ধারণ করে, একেই স্ক্রু স্থানচ্যুতি বলা হয়। টপোলজিক্যাল হোমোটপি (Topological homotopy) নামক গাণিতিক পদ্ধতি ব্যবহার করে এই রেখা ত্রুটিগুলির বৈশিষ্ট্য এবং ভেক্টর (যাকে বার্গার্স ভেক্টর বা Burgers vector বলা হয়) নির্ণয় করা যায়। কঠিন পদার্থের ফাটল নিরাময় বা ক্রিস্টাল গ্রোথ (Crystal

growth)-এর ক্ষেত্রে এই স্থানচ্যুতিগুলি, বিশেষ করে স্ক্রু স্থানচ্যুতিগুলি অত্যন্ত গুরুত্বপূর্ণ ভূমিকা পালন করে।

কঠিন পদার্থের কেলাসে ফাঁকা স্থান বা ভয়েড

কঠিন পদার্থের কণাগুলি (পরমাণু, অণু বা আয়ন) যখন নিবিড়তম ঘন সন্নিবেশ (Close packing) গঠন করে, তখন কণাগুলি গোলাকার হওয়ার কারণে কেলাসের সম্পূর্ণ আয়তন কখনোই কণা দ্বারা পূর্ণ হতে পারে না। ত্রিমাত্রিক বিন্যাসে, কণাগুলির মধ্যে যে পরিমাণ অবিকৃত বা ফাঁকা স্থান থেকে যায় তাকে ভয়েড (Void) বা ইন্টারস্টিস (Interstice) বলা হয়।

পৃষ্ঠকেন্দ্রিক ঘনকাকার (Face Centered Cubic বা FCC), যা কিউবিক ক্লোজ প্যাকিং (CCP) নামেও পরিচিত, এবং হেক্সাগোনাল নিবিড় সন্নিবেশ (Hexagonal Close Packing বা HCP) কাঠামোর প্যাকিং দক্ষতা বা প্যাকিং ভগ্নাংশ (Packing efficiency) হলো সর্বাধিক, যার মান প্রায় ৭৪%। এর অর্থ হলো, নিবিড়তম সন্নিবেশেও একটি কেলাসের ২৬% স্থান (Void fraction) সম্পূর্ণ ফাঁকা থাকে। বডি-সেন্টারড কিউবিক (BCC) কাঠামোতে এই ফাঁকা স্থানের পরিমাণ আরও বেশি (প্রায় ৩২%) এবং সরল ঘনকাকার (Simple Cubic) কাঠামোতে এটি প্রায় ৪৭.৬%। কেলাস গঠনকারী কণাগুলির বিন্যাস এবং জ্যামিতিক কাঠামোর ওপর ভিত্তি করে এই ফাঁকা স্থানগুলিকে মূলত চারটি শ্রেণিতে ভাগ করা যায়: ত্রিভুজাকার, চতুস্তলকীয়, অষ্টতলকীয় এবং ঘনকাকার ফাঁকা স্থান।

ত্রিভুজাকার ফাঁকা স্থান **(Triangular Voids)**

যখন একই সমতলে তিনটি গোলাকার কণা পরস্পরকে স্পর্শ করে অবস্থান করে, তখন তাদের কেন্দ্রগুলি একটি সমবাহু ত্রিভুজ গঠন করে। এই কণা তিনটির ঠিক মাঝখানে যে একটি ক্ষুদ্র শূন্যস্থান তৈরি হয়, তাকে ত্রিভুজাকার ফাঁকা স্থান বলা হয়। এটি একটি দ্বিমাত্রিক ত্রুটি বা স্তরীয় ফাঁকা স্থান। যেহেতু এই শূন্যস্থানটি সরাসরি তিনটি কণা দ্বারা বেষ্টিত থাকে, তাই এর সর্বগাঙ্ক সংখ্যা (Coordination Number) হলো ৩। এই ফাঁকা স্থানে বসতে পারে এমন একটি গোলকের ব্যাসার্ধ (r) এবং কেলাস গঠনকারী মূল গোলকের ব্যাসার্ধের (R) অনুপাত নির্ণয় করলে দেখা যায় এটি 0.155 থেকে 0.225 এর মধ্যে সীমাবদ্ধ থাকে। ত্রিমাত্রিক কেলাস গঠনে এই ভয়েডগুলি সাধারণত অন্যান্য বৃহত্তর ভয়েডের অংশ হিসেবে অবস্থান করে।

চতুস্তলকীয় ফাঁকা স্থান **(Tetrahedral Voids)**

ত্রিমাত্রিক সন্নিবেশে, যখন একটি স্তরের তিনটি কণা দ্বারা গঠিত ত্রিভুজাকার ফাঁকা স্থানের ঠিক উপরে বা নিচে দ্বিতীয় স্তরের একটি কণা স্থাপন করা হয়, তখন মোট চারটি কণা দ্বারা বেষ্টিত যে শূন্যস্থানটি তৈরি হয়, তাকে চতুস্তলকীয় ফাঁকা স্থান বলা হয়। এই চারটি কণার (তিনটি একই তলে এবং একটি তার উপরে বা নিচে) কেন্দ্রগুলিকে সরলরেখা দ্বারা যুক্ত করলে একটি সুষম চতুস্তলক (Tetrahedron) গঠিত হয়। এই ফাঁকা স্থানটি সরাসরি চারটি কণার সংস্পর্শে থাকে, যার ফলে এর সর্বগাঙ্ক সংখ্যা হলো ৪।

পৃষ্ঠকেন্দ্রিক ঘনকাকার (FCC) একক কোশে চতুস্তলকীয় ফাঁকা স্থানগুলির অবস্থান অত্যন্ত সুনির্দিষ্ট। এই ভয়েডগুলি ঘনকের বডি ডায়াগোনাল বা দেহ-কর্ণ বরাবর অবস্থান করে। একটি ঘনকের মোট ৪টি দেহ-কর্ণ থাকে। প্রতিটি কর্ণ বরাবর, কোণের পরমাণু থেকে ঠিক $\sqrt{3}a/4$ দূরত্বে (যেখানে a হলো একক কোশের বাহুর দৈর্ঘ্য) একটি করে চতুস্তলকীয় ফাঁকা স্থান থাকে। যেহেতু প্রতিটি কর্ণে ২টি করে ভয়েড থাকে, তাই একটি FCC একক কোশে মোট $4 \times 2 = 8$ টি চতুস্তলকীয় ফাঁকা স্থান উপস্থিত থাকে। এই ৮টি চতুস্তলকীয় ফাঁকা স্থান একক কোশের সম্পূর্ণ অভ্যন্তরে অবস্থিত থাকে এবং অন্য কোনো কোশের সাথে এরা অংশীদারি করে না। মজার বিষয় হলো, এই ৮টি ভয়েডকে সরলরেখা দ্বারা যুক্ত করলে মূল একক কোশের অভ্যন্তরে একটি ছোট ঘনক বা 'মিনিকিউব' তৈরি হয়। একটি কেলাসে প্যাকিং গঠনকারী পরমাণুর সংখ্যা যদি n হয়, তবে চতুস্তলকীয় ফাঁকা স্থানের সংখ্যা হবে ঠিক তার দ্বিগুণ, অর্থাৎ 2n। এর ব্যাসার্ধ অনুপাত $0.225 \leq r/R < 0.414$ এর মধ্যে সীমাবদ্ধ থাকে।

অষ্টতলকীয় ফাঁকা স্থান **(Octahedral Voids)**

যখন প্রথম স্তরের তিনটি কণা দ্বারা গঠিত একটি ত্রিভুজাকার ফাঁকা স্থানের ঠিক উপরে দ্বিতীয় স্তরের আরও তিনটি কণা এমনভাবে স্থাপন করা হয় যাতে উভয় স্তরের ত্রিভুজাকার ফাঁকা স্থানগুলি পরস্পর বিপরীতমুখী (একটি ঊর্ধ্বমুখী এবং অন্যটি নিম্নমুখী) হয়, তখন মোট ছয়টি কণা দ্বারা বেষ্টিত যে শূন্যস্থানটি তৈরি হয়, তাকে অষ্টতলকীয় ফাঁকা স্থান বলা হয়। এই ছয়টি কণার কেন্দ্র যুক্ত করলে একটি সুষম অষ্টতলক (Octahedron) পাওয়া যায়। ছয়টি কণা দ্বারা ঘেরা থাকায় এর সর্বগাঙ্ক সংখ্যা হলো ৬।

FCC একক কোশে মোট ১৩টি স্থানে অষ্টতলকীয় ফাঁকা স্থান পরিলক্ষিত হয়, তবে এর সবগুলি একক কোশের সম্পূর্ণ ভেতরে থাকে না। একটি অষ্টতলকীয় ফাঁকা স্থান ঠিক ঘনকের দেহ-কেন্দ্রে (Body center position) অবস্থিত থাকে, যা ৬টি পৃষ্ঠকেন্দ্রিক কণা দ্বারা গঠিত হয় এবং এটি সম্পূর্ণভাবে ওই একক কোশের নিজস্ব অংশ। বাকি ১২টি অষ্টতলকীয় ফাঁকা স্থান একক কোশের ১২টি ধারের ঠিক মাঝখানে

(Edge centers) অবস্থান করে। স্ফটিক বিজ্ঞানের নীতি অনুযায়ী, প্রতিটি ধার ৪টি একক কোশের সাথে যুক্ত থাকে বা ভাগাভাগি হয়, তাই প্রতিটি ধারের ফাঁকা স্থানের অবদান হলো 1/4। সুতরাং, একটি FCC একক কোশে কার্যকরী অষ্টতলকীয় ফাঁকা স্থানের মোট সংখ্যা হলো 1 (body center) + 12 × 1/4 (edge centers) = 4। একটি নিবিড় সন্নিবদ্ধ কেলাসে কার্যকরী পরমাণুর সংখ্যা n হলে, কার্যকরী অষ্টতলকীয় ফাঁকা স্থানের সংখ্যাও হবে ঠিক n। এর ব্যাসার্ধ অনুপাত $0.414 \leq r/R < 0.732$ এর মধ্যে অবস্থান করে।

ঘনকাকার ফাঁকা স্থান **(Cubic Voids)**

যখন একটি সাধারণ ঘনকাকার (Simple Cubic) বিন্যাসের আটটি কোণে আটটি কণা অবস্থান করে, তখন তাদের একেবারে মাঝখানে যে বৃহৎ শূন্যস্থানটি তৈরি হয় তাকে ঘনকাকার ফাঁকা স্থান বলা হয়। এটি আকারের দিক থেকে চতুস্তলকীয় এবং অষ্টতলকীয় ভয়েডের চেয়ে বড়। আটটি কণার কেন্দ্রস্থলে অবস্থিত হওয়ায় এই ভয়েডের সর্বগাঙ্ক সংখ্যা হলো ৮।

ঘনকাকার ফাঁকা স্থানটি একটি সাধারণ ঘনকাকার (Simple Cubic unit cell) একক কোশের ঠিক দেহ-কেন্দ্রে (Body centre position) অবস্থান করে। এর ব্যাসার্ধ অনুপাত $r/R \geq 0.732$ হয়ে থাকে, যা সর্বোচ্চ ১.০০০ পর্যন্ত পৌঁছাতে পারে। সিজিয়াম ক্লোরাইড (CsCl) যৌগের কাঠামো এই ধরনের বিন্যাসের একটি উৎকৃষ্ট উদাহরণ, যেখানে Cl^- আয়নগুলি সরল ঘনকের আটটি কোণে অবস্থান করে এবং তুলনামূলকভাবে বৃহৎ Cs^+ আয়নটি দেহ-কেন্দ্রে অবস্থিত ঘনকাকার ফাঁকা স্থানে অবস্থান গ্রহণ করে।

কেলাসের বিভিন্ন ফাঁকা স্থান বা ভয়েডের কাঠামোগত তুলনামূলক বিশ্লেষণ

ফাঁকা স্থানের ধরন	গঠনকারী কণার সংখ্যা	সর্বগাঙ্ক সংখ্যা **(CN)**	কার্যকরী সংখ্যা **(n** পরমাণুর সাপেক্ষে**)**	ব্যাসার্ধ অনুপাত **(r/R)**	কেলাসে জ্যামিতিক অবস্থান **(**মূলত **FCC/SC)**
ত্রিভুজাকার ভয়েড	৩	৩	প্রযোজ্য নয়	০.১৫৫ - ০.২২৫	একই সমতলে তিনটি কণার

					কেন্দ্রে (২ডি স্তর)
চতুস্তলকীয় ভয়েড	৪	৪	2n	০.২২৫ - ০.৪১৪	FCC এর দেহ-কর্ণে (কোণ থেকে √3a/4 দূরত্বে)
অষ্টতলকীয় ভয়েড	৬	৬	n	০.৪১৪ - ০.৭৩২	FCC এর দেহ-কেন্দ্রে এবং ১২টি ধারের কেন্দ্রে
ঘনকাকার ভয়েড	৮	৮	প্রযোজ্য নয়	০.৭৩২ - ১.০০০	সরল ঘনকের (Simple Cubic) দেহ-কেন্দ্রে

ভয়েডের গাণিতিক সম্পর্ক এবং ব্যাসার্ধ অনুপাত নিয়ম

আয়নিক যৌগের কেলাসে ক্যাটায়নগুলি সাধারণত আকারে ছোট হওয়ায় তারা ফাঁকা স্থান বা ভয়েডগুলিতে অবস্থান করে এবং বৃহত্তর অ্যানায়নগুলি মূল নিবিড় কেলাস জালক গঠন করে। একটি নির্দিষ্ট ক্যাটায়ন কোন ধরনের ভয়েডে প্রবেশ করবে বা যৌগের সর্বগাঙ্ক সংখ্যা কতো হবে, তা ব্যাসার্ধ অনুপাত নিয়মের (Radius Ratio Rule) উপর নির্ভর করে। ক্যাটায়ন এবং অ্যানায়নের ব্যাসার্ধের অনুপাতকে গাণিতিকভাবে r^+/r^- দ্বারা প্রকাশ করা হয়।

গাণিতিক মডেলিংয়ের মাধ্যমে অষ্টতলকীয় ফাঁকা স্থানের ন্যূনতম ব্যাসার্ধ অনুপাত অত্যন্ত নিখুঁতভাবে নির্ণয় করা যায়। ধরা যাক, একটি অষ্টতলকীয় ভয়েডের বিষুবীয় তলে (Equatorial plane) একটি বর্গক্ষেত্রের চার কোণে চারটি অ্যানায়ন (ব্যাসার্ধ R) পরস্পরকে স্পর্শ করে আছে এবং কেন্দ্রে একটি ক্যাটায়ন (ব্যাসার্ধ r) তাদের সংস্পর্শে অবস্থান করছে। বর্গক্ষেত্রের ধারের দৈর্ঘ্য হবে 2R এবং বর্গক্ষেত্রের কর্ণের

দৈর্ঘ্য হবে $(2R + 2r)$। সমকোণী ত্রিভুজের ক্ষেত্রে পিথাগোরাসের উপপাদ্য প্রয়োগ করে পাই:

$$(2R + 2r)^2 = (2R)^2 + (2R)^2$$

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

$$4(R + r)^2 = 8R^2$$

$$(R + r)^2 = 2R^2$$

বর্গমূল করে পাই:

$$R + r = \sqrt{2}R$$

$$r = (\sqrt{2} - 1)R$$

যেহেতু $\sqrt{2} \approx 1.414$, তাই:

$$r = (1.414 - 1)R = 0.414R$$

সুতরাং, অষ্টতলকীয় ভয়েডের জন্য ন্যূনতম ব্যাসার্ধ অনুপাত $r/R = 0.414$।

একইভাবে জ্যামিতিক বিশ্লেষণের মাধ্যমে চতুস্তলকীয় ফাঁকা স্থানের জন্য 0.225 এবং ঘনকাকার ফাঁকা স্থানের জন্য 0.732 মানটি গাণিতিকভাবে প্রতিপাদন করা সম্ভব। এই গাণিতিক মডেলিং স্ফটিকের গঠন, জ্যামিতি, এবং আয়নিক যৌগের স্থায়িত্ব সম্পর্কে নিখুঁত পূর্বাভাস দিতে সাহায্য করে। যখন কোনো ক্যাটায়নের ব্যাসার্ধ অনুপাত দুটি সীমার মধ্যবর্তী হয়, তখন কেলাসটি সেই নির্দিষ্ট ভয়েড জ্যামিতি গ্রহণ করে স্থায়িত্ব লাভ করে।