B.Sc. Sem.-III CC-Phy-301

Unit-III Crystal Structure — Dr. S.R. Suthar

→ condensed matter physics ની એક શાખા કે જેમાં પદાર્થના અલગ અલગ ગુણધર્મોનો પરમાણુ લેવલ સુધીનો અભ્યાસ કરવામાં આવે છે તેને solid state physics કહેવાય છે.

→ ઘન પદાર્થના ગુણધર્મો તેના પરમાણુઓની ગોઠવણ, ઇલેક્ટ્રોન સંસ્પન અને ઇલેક્ટ્રોન-ઇલે. વચ્ચેની આંતરક્રિયા તથા પરમાણુના દોલનો પર આધારિત છે.

→ કેટલાક solid એ બરડતા (britle), કેટલાક ટીપી શકાય તેવા કેટલાક ઉષ્મા અને વિદ્યુતના સુવાહક તો કેટલાક અવાહક હોય છે.

→ Crystalline Solid :

એવા ઘન પદાર્થો કે જેના અણુ-પરમાણુઓ ત્રણેય દિશામાં કોઈ ચોક્કસ પ્રકારની આવર્તીય પેટર્નમાં ગોઠવાયેલા હોય તેને સ્ફટિક કહેવાય છે.

→ આવા સ્ફટિકો દિશીય ગુણધર્મ ધરાવે છે.
→ તે વધારે સ્થિર હોય છે.
→ ચોક્કસ ગલનબિંદુ ધરાવે છે.

→ Single crystal

→ જે crystal માં પરમાણુની ગોઠવણી બધી જ દિશામાં અને સમગ્ર crystal માં એક સમાન હોય તેને single crystal કહે છે.

Poly crystal

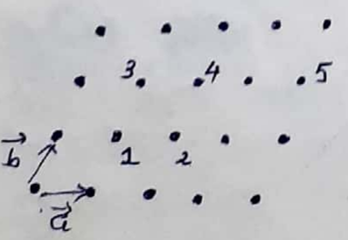
→ જે crystal માં પરમાણુઓની ગોઠવણ અલગ-અલગ નાના વિસ્તાર (Grain boundary) માં અલગ અલગ હોય તેને poly-crystal કહે છે.

→ Amorphous solid (અસ્ફટિકમય પદાર્થ)

જે ઘન પદાર્થમાં પરમાણુઓની ગોઠવણ અસ્તવ્યસ્ત હોય તેને અસ્ફટિકમય પદાર્થ કહે છે.

→ Lattice :

→ લેટિસ એ ગાણિતીય સંકલ્પના છે.
→ અવકાશમાં બિંદુઓની આવર્તીય ગોઠવણને લેટિસ કહે છે.



→ આકૃતિમાં દ્વિપરિમાણીય લેટિસ દર્શાવેલ છે.
→ તે બિંદુઓ પૈકી પ્રત્યેકનું સ્થાન સમાન છે.
→ ધારો કે બિંદુ 1 નો સ્થાન સદિશ $\vec{r}$ છે.
→ બિંદુ 2 નો સ્થાન સદિશ $= \vec{r} + \vec{a}$
→ બિંદુ 3 " $= \vec{r} + \vec{b}$
→ બિંદુ 4 " $= \vec{r} + \vec{a} + \vec{b}$

વ્યાપક સ્વરૂપે વિચારતાં કોઈ એક બિંદુનો સ્થાન સદિશ $\vec{r}$ હોય તો બીજા બિંદુનો સ્થાન સદિશ $\vec{r}\,' = \vec{r} + n_1\vec{a} + n_2\vec{b}$ લખી શકાય.

Scanned with CamS

ત્રિપરિમાણમાં વિચારીએ તો $\boxed{\vec{r}' = \vec{r} + n_1\vec{a} + n_2\vec{b} + n_3\vec{c}}$ — (1)
જ્યાં $\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$ ને મૂળભૂત પ્રિમીટીવ સદિશ કહેવાય છે.
n_1, n_2 અને n_3 એ યાદચ્છિક પૂર્ણાંકો છે.
સમી. (1) ને લેટિસ સમીકરણ કહે છે.

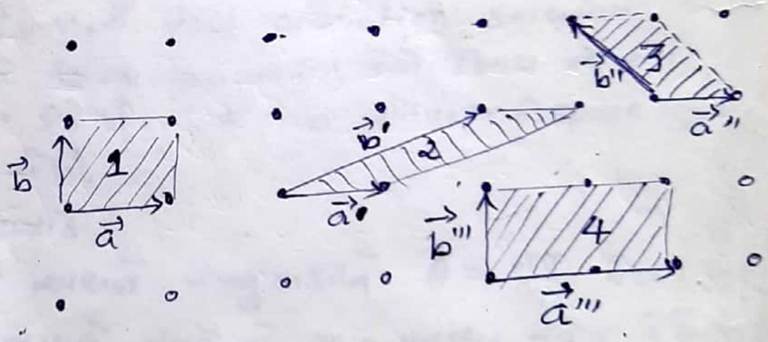
→ **Space lattice:** (અવકાશીય સદિશ)

સ્પેસ લેટિસ એટલે અવકાશમાં અનંત બિંદુઓની એવી ચોક્કસ ગોઠવણ કે જેથી કોઈપણ બિંદુ $\vec{r}$ પાસેથી જોતાં જેવી ગોઠવણ દેખાય તેજ પ્રકારની ગોઠવણ બીજા કોઈપણ બિંદુ પાસેથી જોતાં દેખાય જ્યાં

$\vec{r}' = \vec{r} + n_1\vec{a} + n_2\vec{b} + n_3\vec{c}$

સ્પેસ લેટિસનો વિચાર સૌપ્રથમ બ્રેવેઈસ (Bravais) નામના વૈજ્ઞાનિકે 1848 માં રજૂ કર્યો હતો. તેથી સ્પેસ લેટિસને બ્રેવેઈસ લેટિસ કહેવામાં આવે છે.

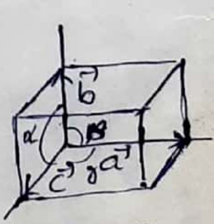
ટ્રાન્સલેશનલ સંમિતિ (symmetry) → જો crystal માં ત્રણ રેખીય રીતે સ્વતંત્ર સદિશો ($\vec{a}$, $\vec{b}$ અને $\vec{c}$) નીચે દર્શાવ્યા મુજબ ટ્રાન્સલેશનલ હોય તો તેને Translationaly symmetric કહેવાય છે. $\vec{T} = n_1\vec{a} + n_2\vec{b} + n_3\vec{c}$ માં જો n_1, n_2 અને n_3 પૂર્ણાંક સંખ્યા હોય તો તેને પ્રિમીટીવ ટ્રાન્સલેશન સદિશ કહે છે. → જો n_1, n_2 અને n_3 પૈકી કોઈપણ એક જો અપૂર્ણાંક હોય તો તેવા ટ્રાન્સલેશનલ સદિશને નોન પ્રિમીટીવ ટ્રાન્સલેશનલ સદિશ કહે છે.



→ સામેની 2-D લેટિસની આકૃતિમાં ($\vec{a}$ અને $\vec{b}$) ($\vec{a}'$, $\vec{b}'$) તથા ($\vec{a}''$ $\vec{b}''$) એ ત્રણેય પ્રિમિટીવ ટ્રાન્સલેશન સદિશ છે. તેમના દ્વારા બનતા સમાંતર બાજુ ચતુષ્કોણ (1), (2) અને (3) એ દ્વિપરિમાણીય પ્રિમીટીવ યુનિટ સેલ છે.
→ ($\vec{a}'''$, $\vec{b}'''$) એ નોન પ્રિમીટીવ સદિશ છે. તથા સ.બા.ચ.કો. (4) એ નોન પ્રિમીટીવ યુનિટ સેલ કહેવાય છે.

→ **યુનિટ સેલ:** નાનામાં નાની ભૌમિતિક આકૃતિ કે જેના પુનરાવર્તન વડે મૂળ સ્ફટિક લેટિસ તૈયાર કરી શકાય.

→ ત્રિપરિમાણીય યુનિટ સેલ.
ત્રિપરિમાણમાં ત્રણ મૂળભૂત ટ્રા. સદિશો $\vec{a}$, $\vec{b}$, $\vec{c}$ વડે ઘેરાતા કદને યુનિટ સેલ કહે છે.



→ યુનિટ સેલના શિરોબિંદુ પર એક જ પરમાણુ હોય તો યુનિટ સેલ દીઠ પરમાણુ or લેટીસ point ની સંખ્યા 1 મળે તેને પ્રિમીટીવ યુનીટ સેલ કહે છે.

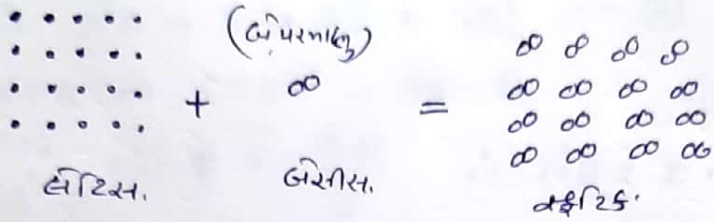
Scanned with CamScanner

Que: લેટિસ, બેસીસ અને સ્ફટિકની વ્યાખ્યા આપી ટૂંકમાં સમજાવો.

Ans: લેટિસ: અવકાશમાં બિંદુઓની આવર્તી ગોઠવણને લેટિસ કહે છે.

બેસીસ: લેટિસ બિંદુઓના સ્થાને ગોઠવવામાં આવતા અણુ, પરમાણુ અથવા આયનને બેસીસ કહે છે.

સ્ફટિક: લેટિસ બિંદુના સ્થાને આયન અથવા પરમાણુ કે તેનો સમૂહ ગોઠવવામાં આવેતો બનતી રચનાને સ્ફટિક (crystal) કહે છે.



⇒ Symmetry Elements in Crystal

→ જુદા જુદા crystals અલગ-અલગ પ્રકારની symmetry દર્શાવે છે.

→ crystalની આંતરિક રચના સમજવા માટેનું અગત્યનું સાધન symmetry છે.

→ symmetry operations: એટલે crystal પર કરવામાં આવતી એવી પ્રક્રિયા કે જેના અંતે સ્ફટિક મૂળ આકાર જેવોજ દેખાય તો તે સ્ફટિક પર કરવામાં આવેલ ઓપરેશન symmetry operation છે તેમ કહેવાય.

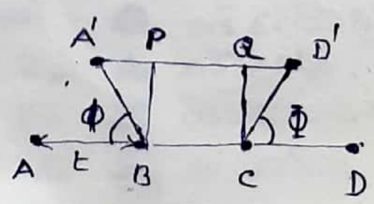
→ Translational symmetry operation: જો કોઈ સ્ફટિકને કોઈપણ દિશામાં $\vec{T} = n_1\vec{a}+n_2\vec{b}+n_3\vec{c}$ જેટલું operation કરાવવામાં આવે અને operationના અંતે સ્ફટિક મૂળ આકાર જેવો દેખાય તો તેને Translational sy. op. કહે છે. આ ઓપરેશનનો space ગ્રુપમાં સમાવેશ કરવામાં આવે છે.

Proper Rotation axis

→ જો સ્ફટિકને કોઈ અક્ષને અનુલક્ષીને $\theta = \frac{2\pi}{n}$ જેટલા ખૂણે પરિભ્રમણ કરાવવામાં આવે અને તે મૂળ આકાર જેવોજ દેખાયતો આ સ્ફટિક Rotation Symmetry operation (પરિભ્રમણ સંમિતિ ક્રિયા) દર્શાવે છે તેમ કહેવાય. અને અક્ષને અનુલક્ષીને જે પરિભ્રમણ આપવામાં આવે છે તેને "ફોલ્ડ" તરીકે ઓળખાય છે. તેને (n) વડે દર્શાવાય છે.

Que: → પરિભ્રમણ સંમિતિમાં કુલ કેટલા ફોલ્ડ સંમિતિ શક્ય છે?

Ans: આકૃતિમાં A, B, C, D બિંદુઓ એ (t) જેટલા અંતરે ગોઠવાયેલા છે.



→ AB રેખાને B બિંદુને અનુલક્ષીને Φ જેટલા ખૂણે પરિભ્રમણ આપતાં A બિંદુ A' સ્થાને આવે છે.

→ આજ રીતે D બિંદુ પરિભ્રમણના અંતે D' સ્થાને આવે છે.

Scanned with CamS

→ પરિભ્રમણના અંતે મળતા બિંદુઓ A' અને D' ને જોડતા રેખાખંડની લંબાઈ symmetry operationના નિયમ મુજબ mt જેટલી હોય

$\therefore A'D' = mt$ જ્યાં m એ (+)(−) અને શૂન્ય સહિતની પૂર્ણાંક સંખ્યા છે.

→ B અને C બિંદુમાંથી લંબ દોરતાં તે A'D' ને P અને Q બિંદુએ છેદે છે. $\therefore A'D' = A'P + PQ + QD'$

$\therefore A'P + PQ + QD' = mt$ માં $PQ = t$ મૂકતાં

$\therefore A'P + t + QD' = mt$ — (1)

$\Delta A'PB$ માં $\angle PBA' = 90 - \phi$ $\therefore \sin(90-\phi) = \frac{A'P}{A'B}$ પરંતુ $A'B = t$

$\therefore \cos\phi = \frac{A'P}{t}$ $\therefore A'P = t\cos\phi$ — (2)

આજ રીતે $\Delta D'QC$ માં $\angle D'CQ = 90 - \phi$ લેતાં

$QD' = t\cos\phi$ — (3) મળે.

સમી (1)માં (2) અને (3)ની કિંમત મૂકતાં

$mt = t\cos\phi + t + t\cos\phi$ ∴

$\therefore m = 2\cos\phi + 1$ $\therefore \boxed{\frac{m-1}{2} = \cos\phi}$ — (4)

સમી. 4માં
m ના અલગ અલગ મૂલ્ય માટે $\frac{m-1}{2}$ નું મૂલ્ય $\cos\phi$ ના વિસ્તાર [−1, 1] વચ્ચે મળે તેને અનુરૂપ ϕ માટે પરિભ્રમણ સંમિતિ ઓપરેશન છે તેમ કહેવાય.

$m = 0$ $\therefore \cos\phi = -1/2$ $\therefore \phi = 120^\circ$ $\therefore n = \frac{360^\circ}{\phi} = 3$ $\therefore n = 3$

$m = 1$ $\therefore \cos\phi = 0$ $\therefore \phi = 90^\circ$ " $= 4$ $\therefore n = 4$

$m = -1$ $\therefore \cos\phi = -1$ $\therefore \phi = 180^\circ$ ⟶ $\therefore n = 2$

$m = 2$ $\therefore \cos\phi = +1/2$ $\therefore \phi = 60^\circ$ ⟶ $\therefore n = 6$

$m = -2$ $\therefore \cos\phi = -3/2$ જે cosineના વિસ્તારમાં નથી તેથી −2 થી આગળના મૂલ્ય લેવાતા નથી.

$m = 3$ $\therefore \cos\phi = 1$ $\therefore \phi = 360^\circ$ $\therefore n = 1$

$m = 4$ $\therefore \cos\phi = 3/2$ આ પણ cosineના વિસ્તારમાં નથી તેથી +4 અને તેના કરતાં આગળના મૂલ્ય લેવામાં આવતા નથી.

આમ. m ના શક્ય મૂલ્યોને અનુરૂપ n ના શક્યમૂલ્ય 1, 2, 3, 4 અને 6 મળે છે.

→ n = 1 ફોલ્ડ અંગે સ્ફટિકને 360° ફેરવતાં મૂળ આકાર જેવોજ દેખાય આ અક્ષને n = 1 માટેની identity અક્ષ કહે છે.

→ n = 2-ફોલ્ડ તો આ અક્ષને diad કહે છે તેને ● વડે દર્શાવાય છે.

→ n = 3-ફોલ્ડ " " Triad કહે છે તેને ▲ વડે દર્શાવાય છે.

→ n = 4-ફોલ્ડ " " Tetrad કહે છે તેને ■ વડે દર્શાવાય છે.

→ n = 6-ફોલ્ડ " " Hexad કહે છે તેને ⬢ વડે દર્શાવાય છે.

Scanned with CamS

⇒ Reflection (પરાવર્તન) symmetry operation

→ સ્ફટિકમાં એવું સમતલ દોરવાનું વિચારીએ કે જેને મીરર પ્લેન ગણીએ તો સમગ્ર સ્ફટિક એ આ સમતલમાં દેખાતા અડધા ભાગનું પ્રતિબિંબ હોય તેવું લાગે તો તે સ્ફટિક પરાવર્તન સંમિતિ ધરાવે છે તેમ કહેવાય અને તેનો symmetry element એ અરીસા સમતલ (mirror plane) તેને (m) વડે દર્શાવાય છે.

⇒ Inversion symmetry operation:

જો સ્ફટિકમાં એવીરીતે operation કરવામાં આવે જેથી કોઈ લેટિસ બિંદુનો સ્થાન સદિશ $\vec{r}$ એ $-\vec{r}$ થાય છતાં સ્ફટિક મૂળ આકાર જાળવી રાખે તો તે operationને inversion (વ્યુત્ક્રમ or વ્યસ્ત) સંમિતિ ઓપરેશન કહેછે. અને જે બિંદુને અનુલક્ષીને ઓપરેશન કરવામાં આવે છે તેને centre of inversion કહેછે. તેને ($\bar{1}$) (બાર વન) વડે દર્શાવાય છે.

⇒ Roto-Inversion (કોણાવર્તન-વ્યસ્ત) સંમિતિ.

જો સ્ફટિકને મૂળસ્થિતિમાં લાવવા માટે રોટેશન અને ઇનવર્ઝન સંમિતિ લાગુ પાડવી પડે તો તે સ્ફટિક inversion અક્ષ ધરાવે છે તેમ કહેવાય. તેને દર્શાવવા રોટેશન અક્ષની સંખ્યા (n) પર (–) બારનું ચિહ્ન મૂકવામાં આવેછે. જેમકે 3-ફોલ્ડ રોટો ઇનવર્ઝન દર્શાવવા ($\bar{3}$) વડે દર્શાવાય છે.

→ $\bar{3}$ ને ▲ વડે, $\bar{4}$ ને ■, $\bar{6}$ ને ⬢ વડે દર્શાવાય છે.

➡ Macroscopic Symmetry elements (સ્થૂળ સંમિતિ તત્ત્વો)

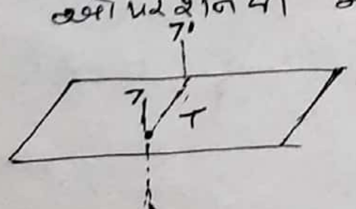
જે symmetry elements સ્ફટિકના બહારના આકારને અસર કરે છે અને સહજતાથી દેખી શકાય છે તેને સ્થૂળ સંમિતિ તત્ત્વો કહે છે. રોટેશન, રીફ્લેક્શન, ઇનવર્ઝન અને રોટો ઇનવર્ઝન એ આ પ્રકારના છે.

→ Microscopic symmetry elements: (સૂક્ષ્મ સંમિતિ તત્ત્વો)

જે સંમિતિ તત્ત્વો સ્ફટિકના બાહ્ય આકારને અસર કરતા નથી પરંતુ તે માત્ર આણ્વિકસ્તરની રચના (atomic level) સાથે જ સંબંધ ધરાવે તેને સૂક્ષ્મ સંમિતિ તત્ત્વો કહેછે. તેના બે પ્રકાર છે.

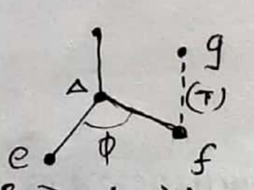
① glide plane (વિસર્પણ તલ) ② screw axis (સ્ક્રૂ અક્ષ)

① Glide plane: Reflection અને Translation (સ્થાનાંતરણ)ના સંયુક્ત ઓપરેશનથી બનતા સમતલને glide plane કહેછે.



આકૃતિમાં (7) નું પ્રતિબિંબ (7) છે. આ (7) ને સમતલને સમાંતર (T) જેટલું સ્થાનાંતર કરાવતા તેનું સ્થાન (7') આગળ મળે છે.

② Screw axis: Rotation અને Translation ઓપરેશનના સંયુક્ત જોડાણથી screw axis મેળવી શકાય છે. આકૃતિમાં દર્શાવ્યા મુજબ (e) ને φ જેટલું કોણાવર્તન આપી T જેટલું સ્થાનાંતર કરાવતાં તે (g) સ્થાને આવેછે.



Que ત્રિપરિમાણમાં બ્રેવેઈસ લેટિસના પ્રકાર જણાવો.

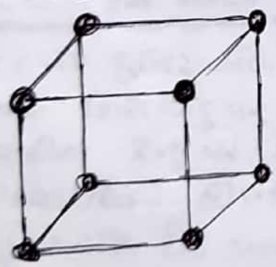
Ans સ્ફટિકના યુનિટ સેલની મુખ્ય અક્ષોની (a, b અને c) તથા તેમની વચ્ચેના ખૂણા (α, β અને γ) ના આધારે Bravais નામના વૈજ્ઞાનિકે સાત ~~પ્રકારના~~ બ્રેવેઈસ systems (તંત્ર) અને તે દરેક પર અલગ અલગ સંમિતિ ને અનુરૂપ અલગ અલગ (14) પ્રકાર નીચે મુજબ દર્શાવ્યા છે.

system	Unit cell parameter		Latice tye		Example
cubic	$a = b = c$,	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	P, I, F	(3)	NaCl, CaF_2
Tetragonal	$a = b \neq c$	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	P, C	(2)	SnO_2
Orthorhombic	$a \neq b \neq c$	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	P, C, I, F	(4)	KNO_3, $BaSO_4$
Trigonal	$a = b = c$	$\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$	P	(1)	calcite
Hexagonal	$a = b \neq c$	$\alpha = \beta = 90^\circ$, $\gamma = 120^\circ$	P	(1)	SiO_2, Quartz
Monoclinic	$a \neq b \neq c$	$\alpha = \beta = 90 \neq \gamma$	P, C	(2)	$FeSO_4$
Triclinic	$a \neq b \neq c$	$\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$	P	(1)	$CuSO_4$
			Total	(14)	types

P = પ્રિમીટીવ, C = base centred, I = body centred
F = Face centred.

Que: Simple Cubic Structure (સાદો ઘન) માટે પેકીંગ ફ્રેક્શન શોધો.

Ans.



સાદા ઘનમાં પરમાણુઓની ગોઠવણ આકૃતિમાં દર્શાવ્યા મુજબ માત્ર યુનિટ સેલના શિરોબિંદુ પર જ અણુ/પરમાણુ ગોઠવાયેલ હોય છે.

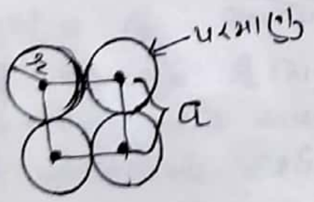
યુનિટ સેલ દીઠ પરમાણુની સંખ્યા $N = \frac{N_c}{8} + \frac{N_F}{2} + N_i$

જ્યાં N_c = શિરોબિંદુ પર રહેલ પરમાણુની સંખ્યા = 8

N_F = સપાટી પર રહેલા પરમાણુની સંખ્યા = 0

N_i = યુનિટ સેલની અંદરના કદમાં રહેલ પરમાણુની સંખ્યા = 0

$\therefore$ સાદા ઘન માટે $N = \frac{8}{8} + 0 + 0 = 1$ મળે.



$2r = a$

→ યુનિટ સેલની કોઈ એક સપાટી પર પરમાણુને ગોળા તરીકે વિચારીએ તો આકૃતિ (2) માં દર્શાવ્યા મુજબ ~~આવશે~~. ગોઠવાયેલા હોય છે.

→ બે ક્રમિક પરમાણુ વચ્ચેનું અંતર $a = 2r$ જેટલું હોય જ્યાં r એ ગોળાની ત્રિજ્યા છે.

→ અણુ/પરમાણુનું કદ $= \frac{4}{3}\pi r^3$

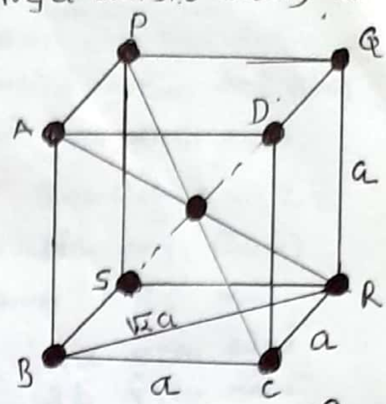
→ યુનિટ સેલનું કદ $= a^3$ થાય

પેકીંગ ફ્રેક્શન $= \frac{N \times \text{પરમાણુ/અણુનું કદ}}{\text{યુનિટ સેલનું કદ}} = \frac{\frac{4}{3}\pi r^3}{a^3}$ માં $r = \frac{a}{2}$ મૂકતાં પેકીંગ ફ્રેક્શન $= \frac{\pi}{6}$ મળે $= 0.52$

[illegible]

Scanned with CamS

→ **Body centered cubic structure** (અંતઃ કેન્દ્રિય ઘનાકાર રચના) માટે પેકીંગ ફ્રેક્શન શોધો.



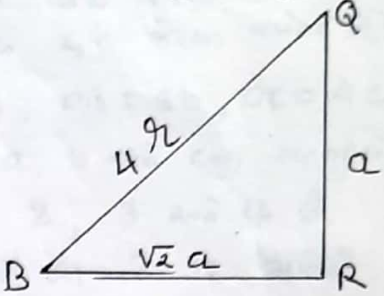
→ BCC નો યુનિટ સેલ આકૃતિમાં દર્શાવેલ છે.

→ પ્રત્યેક શિરોબિંદુ પર એક પરમાણુ અને યુનિટ સેલની મધ્યમાં એક પરમાણુ રહેલ છે.

→ યુનિટ સેલ દીઠ પરમાણુની સંખ્યા $N = \frac{N_c}{8} + \frac{N_F}{2} + N_i$

$N_c = 8,\ N_F = 0,\ N_i = 1$

$\therefore N = \frac{8}{8} + 0 + 1 = 2$ થાય.



→ યુનિટ સેલની ધારની લંબાઈ (a) હોય તો તેની કોઈ એક સપાટી માટે તેના વિકર્ણનું મૂલ્ય $\sqrt{2}a$ થાય.

→ આ વિકર્ણ ($\sqrt{2}a$) તથા યુનિટ સેલના મધ્યમાંથી પસાર થતો વિકર્ણ જેની લંબાઈ (4r) અને ત્રીજી બાજુ યુનિટ સેલની એક ધાર (a) હોય તેવો એક ત્રિકોણ ઉપરની આકૃતિમાં દર્શાવેલ છે. આથી આકૃતિ પરથી કહી શકાય કે $(4r)^2 = (\sqrt{2}a)^2 + a^2$

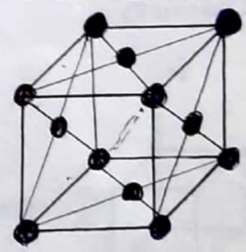
$\therefore r = \frac{\sqrt{3}}{4}a$ થાય. (1)

→ BCC માટે પેકીંગ ફ્રેક્શન $= \frac{2 \times \frac{4}{3}\pi r^3}{a^3}$ માં $r = \frac{\sqrt{3}}{4}a$ મૂકતાં

પેકીંગ ફ્રેક્શન $= \frac{2 \times 4 \times \pi \times \sqrt{3} \times \sqrt{3} \times \sqrt{3} \times a^3}{3a^3 \times 4 \times 4 \times 4} = \boxed{\frac{\sqrt{3}\pi}{8} = 0.68}$

આમ BCC માટે યુનિટસેલનો 68% ભાગ અણુ દ્વારા રોકાયેલો અને 32% ભાગ ખાલી હોય છે.

Que: FCC ફેસ સેન્ટર્ડ ક્યુબીક (મુખ કેન્દ્રિત ઘન રચના) માટે પેકીંગ ફ્રેક્શન શોધો



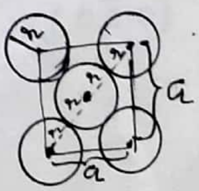
Ans: → FCC નો યુનિટ સેલ આકૃતિમાં દર્શાવેલ છે.

→ પ્રત્યેક શિરોબિંદુ પર એક અને તેની દરેક સપાટીના કેન્દ્ર પર એક એવી રીતે પરમાણુ ગોઠવાયેલા હોય છે.

→ યુનિટ સેલ દીઠ પરમાણુની સંખ્યા $N = \frac{N_c}{8} + \frac{N_F}{2} + N_i$

$N_c = 8,\ N_i = 0,\ N_F = 6$

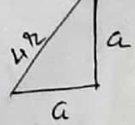
$\therefore N = 4$ મળે છે.



→ પ્રત્યેક પરમાણુને r ત્રિજ્યાનો ગોળો માનીએ તો યુનિટસેલની એક સપાટી પર પરમાણુઓ આમ આકૃતિમાં દર્શાવ્યા મુજબ ગોઠવાયેલ હોય.

આથી આકૃતિ પરથી કહી શકાય કે $(4r)^2 = a^2 + a^2$

$\therefore r = \frac{\sqrt{2}}{4}a$ મળે છે.



→ પેકીંગ ફ્રેક્શન $= \frac{4 \times \frac{4}{3}\pi r^3}{a^3}$ માં $r = \frac{\sqrt{2}}{4}a$ મૂકતાં

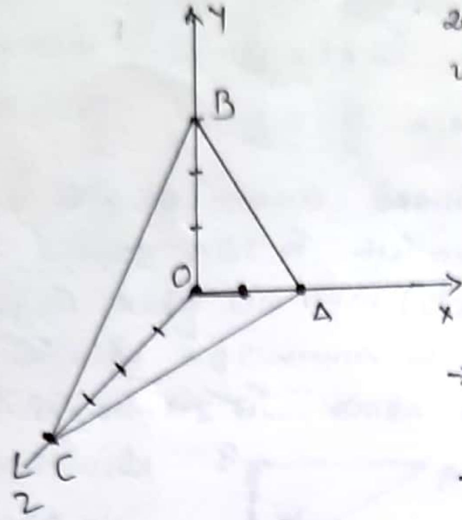
પેકીંગ ફ્રેક્શન $= \frac{4 \times 4 \times \pi \times 2\sqrt{2} \times a^3}{3 \times 4 \times 4 \times 4 \times a^3} = \boxed{\frac{\sqrt{2}\pi}{6} = 0.74}$

એટલે કે FCC ના યુનિટ સેલમાં અણુ કે પરમાણુ દ્વારા 74% જગ્યા રોકાયેલ છે અને 26% જગ્યા ખાલી હોય છે.

Scanned with CamS

Que: મિલર અંક એટલે શું? ઉદાહરણ આપી તે શોધવાની રીત સમજાવો.

Ans: સ્ફટિકમાં પરમાણુઓની ગોઠવણ અલગ અલગ સમતલમાં હોય તેવી રીતે વિચારીએ તો સ્ફટિકમાં વિચારેલા આ કાલ્પનિક સમતલોનું સ્થાન અને નમન દર્શાવતા અંકોને મિલર અંકો કહેવાય છે. તે નીચે મુજબ શોધી શકાય.



આકૃતિમાં દર્શાવ્યા મુજબ ઉગમબિંદુ O માંથી પસાર થતા ત્રણ પરસ્પર લંબ અક્ષો વિચારો ધારો કે કોઈ એક સમતલ ABC એ X-અક્ષને A બિંદુએ $2a$ જેટલા અંતરે Y-અક્ષને B બિંદુએ $3b$ જેટલા અંતરે Z-અક્ષને C બિંદુએ $4c$ જેટલા અંતરે છેદે છે.

આથી $OA = 2a$, $OB = 3b$, $OC = 4c$

→ આ અંતઃખંડમાં a, b અને c ના સહગુણકો અલગ લખો તો 2, 3 અને 4 છે.

→ આ અંકોનો લ.સા.અ. લો તો તે 12 મળે છે.

→ દરેક અંકનો વ્યસ્ત લો. ABC સમતલ માટે તે $\frac{1}{2}$, $\frac{1}{3}$ અને $\frac{1}{4}$ મળે છે.

→ આ વ્યસ્તને લસાઅ વડે ગુણો.

$\frac{1}{2} \times 12 = 6$, $\frac{1}{3} \times 12 = 4$ અને $\frac{1}{4} \times 12 = 3$

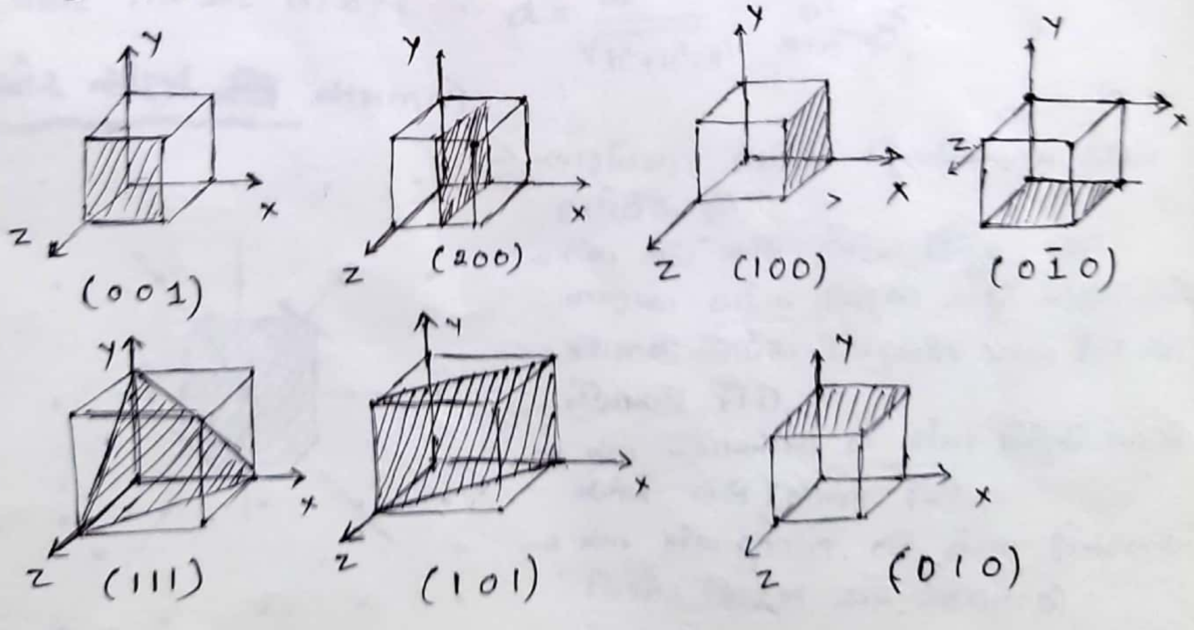
આ અંકોને કૌંસમાં મૂકવાથી તેને મિલર અંકો તરીકે ઓળખવામાં આવે છે. સમતલ ABC ના મિલર અંકો (6 4 3) મળે છે. તેને (hkl) વડે દર્શાવાય છે.

→ જો કોઈ સમતલ કોઈ અક્ષને સમાંતર હોય તો અક્ષ સાથેનો અંતઃખંડ અનંત (∞) મળે છે. તેથી તેનો વ્યસ્ત $\frac{1}{\infty} = 0$ થાય આથી તે મિલર અંક 0 (શૂન્ય) હોય છે.

→ જો કોઈ સમતલ ઋણ અક્ષને છેદે છે તો તે અક્ષના મિલર અંક પર આડી લીટી (બાર) દર્શાવવામાં આવે છે. દા.ત. $(\bar{h}, k, l)$

→ <hkl> એ સમતુલ્ય સમતલ દર્શાવવા વપરાય છે.

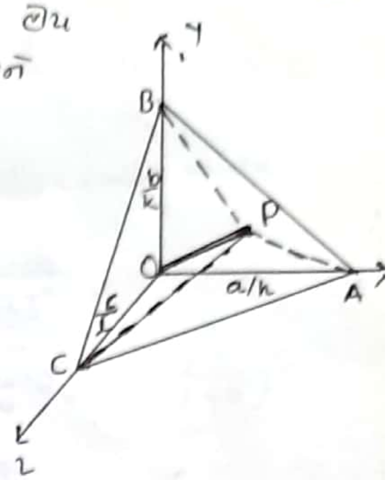
→ [hkl] સ્ફટિક દિશા દર્શાવવા વપરાય છે.



સ્ફટિક સમતલો વચ્ચેનો અંતરાલ (Inter planer spacing) શોધવાનું સૂત્ર મેળવો

ઓર્થોરોમ્બિક તંત્ર માટે $a \neq b \neq c$ તથા $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$ હોય

ધારોકે કોઈ સમતલ ABC આ યુનિટસેલની ત્રણેય બાજુને આકૃતિમાં દર્શાવ્યા મુજબ છેદે છે. આ સમતલના મિલર અંકો ધારોકે (hkl) છે તો.

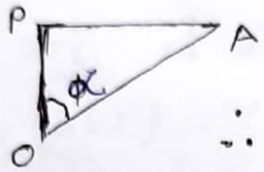


$OA = \frac{a}{h}$, $OB = \frac{b}{k}$ અને $OC = \frac{c}{l}$ થાય.

ધારોકે બીજુ એક સમતલ ઉગમબિંદુ (O)માંથી પસાર થાય અને સમતલ ABC ને સમાંતર હોય તો આ બંને સમતલો વચ્ચેનું લંબ અંતર (d) નીચે મુજબ મળે.

→ O બિંદુમાંથી ABC સમતલ પર લંબ દોરતા તે સમતલને P બિંદુએ છેદે છે. આથી $OP = d$ થાય.

→ આકૃતિ પરથી



ΔOPA માં

$\cos\alpha = \frac{OP}{OA}$ $\therefore \cos\alpha = \frac{d}{a/h}$ $\therefore \cos\alpha = d \cdot \frac{h}{a}$ —(1)

∴ આજ રીતે ΔOPB માટે $\cos\beta = d \cdot \frac{k}{b}$ અને ΔOPC માટે $\cos\gamma = d \cdot \frac{l}{c}$

→ દિક્કોસાઈનના નિયમ પ્રમાણે $\cos^2\alpha + \cos^2\beta + \cos^2\gamma = 1$ માં આ કિંમત મુકતા

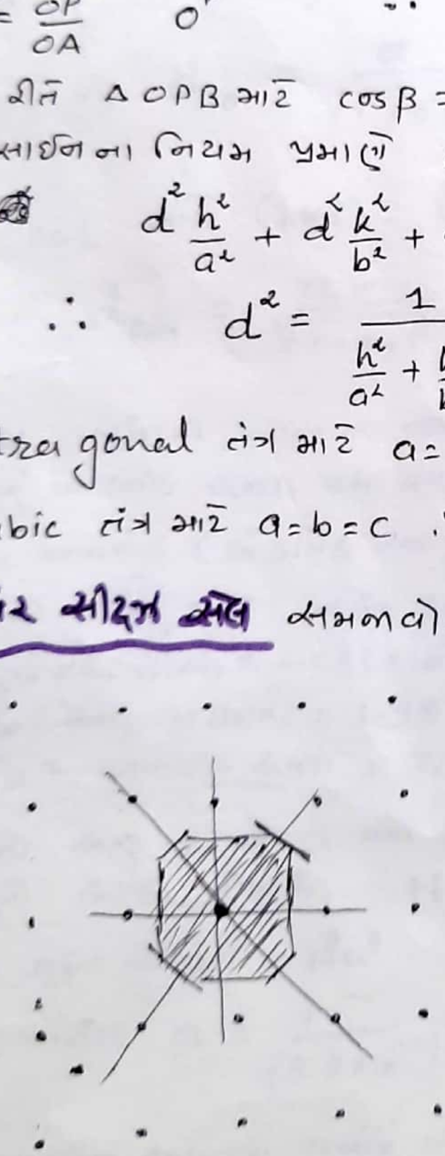
$$\therefore d^2\frac{h^2}{a^2} + d^2\frac{k^2}{b^2} + d^2\frac{l^2}{c^2} = 1$$

$$\therefore d^2 = \frac{1}{\frac{h^2}{a^2} + \frac{k^2}{b^2} + \frac{l^2}{c^2}} \qquad \therefore d = \frac{1}{\sqrt{\frac{h^2}{a^2} + \frac{k^2}{b^2} + \frac{l^2}{c^2}}} \quad \text{—(2)}$$

⇒ Tetragonal તંત્ર માટે $a = b \neq c$ $\therefore d = \frac{1}{\sqrt{\frac{h^2+k^2}{a^2} + \frac{l^2}{c^2}}}$

⇒ Cubic તંત્ર માટે $a = b = c$ $\therefore d = \frac{a}{\sqrt{h^2+k^2+l^2}}$ મળે છે.

Que: વિગ્નેર સીટ્ઝ સેલ સમજાવો.



→ આકૃતિમાં કોઈ એક દ્વિ-પરિમાણીય લેટિસ દર્શાવેલ છે.

→ તેમાં કોઈ એક લેટિસ બિંદુને તેની નજીકના બધાજ બિંદુઓ સાથે જોડતી અને ધ્યાનમાં લીધેલા બિંદુમાંથી પસાર થાય તેવી રેખાઓ દોરો.

→ આ રેખાઓના બે ક્રમિક બિંદુઓ વચ્ચેના અંતરે લંબ દ્વિભાજક દોરો.

→ આ લંબ દ્વિભાજક વડે ઘેરાતુ ક્ષેત્રફળ એ વિગ્નેર સિટ્ઝ સેલ કહેવાય છે.

→ ત્રિ પરિમાણીય લેટિસમાં રેખાના બદલે લંબદ્વિભાજક સમતલો લેવામાં આવે છે અને આ સમતલો વડે ઘેરાતા કદને ત્રિપરિમાણીય વિગ્નેર સિટ્ઝ સેલ કહે છે.

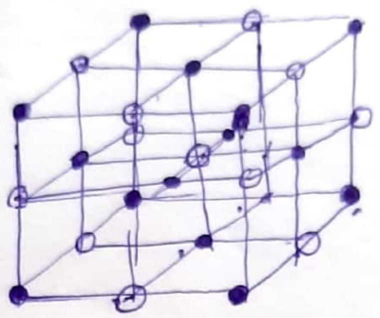
Scanned with CamS

V Γ+Γ+Γ

NaCl બંધારણ અને CsCl બંધારણ સમજાવો

⇒ NaCl બંધારણ: સોડિયમ ક્લોરાઈડ સ્ફટિકમાં Na અને Cl વચ્ચે આયનીક બંધ હોય છે. → તેનો યુનિટ સેલ FCC પ્રકારના બે યુનિટ સેલને ઇન્ટરલોક કરવામાં આવ્યા હોય તેવો છે. તેમાં Na^+ અને Cl^- આયન $\frac{1}{2}$ જેટલા અંતરે હોય છે. યુનિટ સેલ દીઠ NaCl ના પરમાણુની સંખ્યા 4 હોય

NaCl નો યુનિટ સેલ



⇒ CsCl બંધારણ: (cesium chloride)

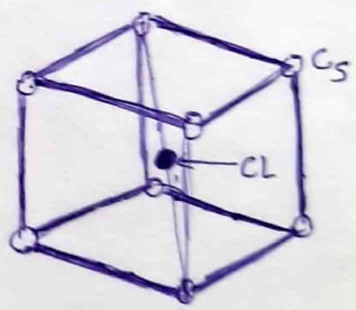
→ યુનિટ સેલ નીચે આકૃતિમાં દર્શાવ્યા મુજબ મળે છે.

→ યુનિટ સેલ બોડી સેન્ટર્ડ ઘન પ્રકારનો છે.

→ Cs^+ આયન 0 0 0 સ્થિતિમાં હોય તો Cl આયન ½, ½, ½ સ્થિતિમાં હોય છે.

→ Cl આયન યુનિટસેલના કેન્દ્ર મધ્યમાં હોય છે.

→ સમન્વય સંખ્યા (કોઓર્ડિનેશન નંબર) 8 છે.



⊙ Coordination number

SC - 6

f.c.c. - 12

body - 8

Scanned with CamS

Example: મિલર આંકો (110) વાળા સમતલો વચ્ચેનું અંતર 2.86 Å હોય તો સાદા ઘન માટે લેટિસ અચળાંક શોધો.

$(h\,k\,l) = (1\,1\,0)$ આ સમાંતર સમતલો વચ્ચેનું અંતર

$d = 2.86\ \text{Å}$ જ્યારે $d = \dfrac{a}{\sqrt{h^2+k^2+l^2}}$

$\therefore\ a = d\left(\sqrt{h^2+k^2+l^2}\right)$

$\therefore$ લેટીસ અચળાંક $a = 2.86 \times 10^{-10} \times (1^2+1^2+0^2)^{1/2}$

$\therefore\ a = 4.044 \times 10^{-10}\ m$

Example: d_{101} માટે d શોધવાનું સમી. મેળવો.

$\rightarrow d_{101}\ \therefore (hkl) = (101)\quad \therefore\ d = \dfrac{a}{\sqrt{h^2+k^2+l^2}}$

$\therefore\ d_{101} = \dfrac{a}{\sqrt{1^2+0^2+1^2}}\quad \therefore\ d_{101} = \dfrac{a}{\sqrt{2}}$

$\rightarrow d_{001}$ માટે $(hkl) = (001)\quad \therefore\ d = \dfrac{a}{\sqrt{h^2+k^2+l^2}}$

$\therefore\ d_{001} = \dfrac{a}{\sqrt{0+0+1^2}}\quad \therefore\ d_{001} = \dfrac{a}{\sqrt{1}}$ OR $d_{001} = a$

Scanned with CamS