

# **Syllabus**

## **SOLID STATE PHYSICS**

### **Crystal Structure:**

**Crystalline and Amorphous Solid(1.1) , Crystal Lattice and Crystal structure(1.2) , translational Symmetry, Space, Unit Cell and Primitive Cell(1.3), Symmetry Elements in Crystals(1.4-1.4.1 to 1.4.6), The Seven crystal Systems(1.5), Coordination Number(1.5.1), Some importance crystal structure(1.6) , Simple Cubic Structure(1.6.1), Body Centered Cubic Structure(1.6.2), Face Centered Cubic Structure(1.6.3), Wigner-Seitz Cells(1.7), Miller Indices(1.8), The spacing of a set crystal planes (1.11).**

### **Basic Reference:**

**Solid State Physics By Ajay Kumar Saxena (Macmillan India Limited)**

### **Atomic Cohesion and Crystal Binding**

**Cohesion of Atoms(2.1), Primary Bonds(2.2), The Covalent Bond(2.2.1), The Metallic Bond(2.2.2), The Ionic Bond(2.2.3), Mixed Bond(2.2.4), Secondary Bonds(2.3), The Van der Waals Bond(2.3.1), The Hydrogen Bond(2.3.2), The Cohesive Energy(2.4), Ionic Crystal-Metallic Energy (2.4.1), Noble Gas Crystal(2.4.2), Atomic Radius and Lattice Constant(2.5), Elastic Constants of Crystals(2.6), Elastic Stress(2.6.1), Elastic Energy Density(2.7.1), Application to Cubic Crystal(2.7.2), Bulk Modulus and Compressibility(2.7.3)**

### **Basic Reference:**

**Elements of Solid-State Physics (2003) by J P Shrivastav, PHI**

### **Other Reference:**

- 1. Introduction to solid state Physics By C.Kittel (John Willey)**
- 2. Fundamental of solid-state Physics By Saxena, Gupta, Saxena (Pragati Prakashan)**
- 3. Solid State Physics By Ajay Kumar Saxena (Macmillan India Limited)**
- 4. Introduction to by E.S.R. Gopal**



## Chapter-1

### સ્ફટિક બંધારણ ( Crystal Structure)

પરીચાલકની આસપાસ રહેલું દ્રવ્ય ઘન, પ્રવાહી અને વાયુ એમ ત્રણ અવસ્થાઓ જોવા મળે છે. જે મૂળભૂત રીતે અણુઓ અને પરમાણુઓના બનેલા છે. ઘન પદાર્થોની પરમાણ્વીય માપકમ પરની લાક્ષણિકતાઓનો અભ્યાસ ભૌતિકશાસ્ત્રમાં કરવામાં આવે છે તેને ઘન અવસ્થા ભૌતિકશાસ્ત્ર ( Solid State Physics) કહે છે. ઘન પદાર્થોની લાક્ષણિકતાઓ પરમાણુઓની ગોઠવણી અને ઇલેક્ટ્રોન તેમજ પરમાણુઓના દોલનો વચ્ચે થતી આંતરક્રિયા પર આધાર રાખે છે.

કેટલાક પદાર્થો બરડ, મૃદુ, વિદ્યુત સુવાહક અને કેટલાક વિદ્યુત અવાહક હોય છે. કેટલાક પદાર્થો ચુંબકીય ગુણધર્મો ધરાવે છે. પદાર્થોની આવી જુદી-જુદી લાક્ષણિકતાઓ તેના સ્ફટિક બંધારણ પર આધારિત હોય છે.

ઘન અવસ્થા ભૌતિકશાસ્ત્રને બે વિભાગોમાં વહેચી અને અભ્યાસ કરી શકાય

(૧) પદાર્થોના પરમાણુક ગુણધર્મો (૨) ઇલેક્ટ્રોનિક ગુણધર્મો

#### પદાર્થોના પરમાણુક ગુણધર્મો :-

સ્ફટિક બંધારણમાં પરમાણુ કે પરમાણુ સમૂહો અવકાશમાં વ્યવસ્થિત આર્વત ભાત રચાય તે રીતે ગોઠવાયેલા હોય છે. જુદા-જુદા પદાર્થોને તેમના સ્ફટિક બંધારણ અનુસાર વર્ગીકૃત કરી શકાય છે. તેમનાં ચોક્કસ બંધારણ તેમના ઘટક પરમાણુઓ વચ્ચે લાગતાં બળો પર આધાર રાખે છે. પદાર્થો ના કેટલાક ગુણધર્મો તેના સ્ફટિક બંધારણ પર આધાર રાખે છે. જ્યારે કેટલાક ગુણધર્મો આંશિકરીતે સ્ફટિક બંધારણ પર આધાર રાખે છે. સોલિડ સ્ટેટ ફિઝિક્સની જે શાખામાં સ્ફટિક બંધારણનો અભ્યાસ કરવામાં આવે છે. તેને ક્રીસ્ટલોગ્રાફી કહે છે.

#### ઇલેક્ટ્રોનિક ગુણધર્મો :-

ઘન પદાર્થોના ઘણા ગુણધર્મો દા.ત. વિદ્યુતવહન, પ્રકાશીય ગુણધર્મો વગેરે અંદર રહેલી ઇલેક્ટ્રોનની ખાસ પ્રકારની ગોઠવણીને લીધે હોય છે. ઘન પદાર્થોમાંના ઇલેક્ટ્રોન અને સતત દોલનો કરતા પરમાણુઓ વચ્ચેની આંતરક્રિયાઓથી ઉદભવે છે. દા.ત. અધિવાહકતા ( Super conductivity) આ અભ્યાસને electron-phonon interaction નો અભ્યાસ કહેવામાં આવે છે.

સોલિડ સ્ટેટ ફિઝિક્સ = પરમાણુઓની ગોઠવણી + ઇલેક્ટ્રોનની ગોઠવણી +  
પરમાણુ દોલનો અને ઇલેક્ટ્રોન વચ્ચેની આંતરક્રિયા

**ગ્લાસી ( એમોરફસ) પદાર્થો :**

ગ્લાસી એટલે સ્વરૂપ- વિહિન ગ્લાસી દ્રવ્યમાં બંધારણીય કણો અસ્તવ્યસ્ત રીતે ગોઠવાયેલાં હોય છે. જો કે આવા દ્રવ્યોમાં બહુ ટૂંકા વિસ્તાર પૂરતી કણોની ગોઠવણી નિયમિત જોવા મળે .

જ્યારે પીગળેલ દ્રવ્યને એટલે બધું ઝડપથી ઠડું પાડી દેવામાં આવે કે જેથી તેના કણોને પોતાની સ્ફટિકમાંની યોગ્ય જગ્યા પર જવાનો સમય જ ન મળે અને તેઓ જ્યાં જગ્યા મળે ત્યાં ગમે તેમ ગોઠવાઈ જાય તો ગ્લાસી દ્રવ્ય તૈયાર થાય. દા.ત. લાકડું, કાચ, પ્લાસ્ટીક. રબ્બર.

આવા દ્રવ્યોના દિશીય ગુણધર્મો હોતાં નથી તેઓ સમદિશીય છે. જો કે તેમનામાં આંતરકણ આંતરક્રિયાઓ જે પ્રમાણે સ્ફટિકોમાં હોય છે. તેવી જ રહે છે.

ગ્લાસી પદાર્થોને સુપરકુલ્ડ દ્રવ્યો પણ કહે છે. આવા દ્રવ્યોનું તાપમાન વધારતાં પ્રથમ મૃદુ બને છે. પછી રગડા જેવા થાય છે. અને તાપમાન સાથે તેમની શ્યાનતા ઘટતી જાય છે. અને ક્રમશઃ પ્રવાહી સ્થિતિ ધારણ કરે છે.

**સ્ફટિકીય અને અસ્ફટિકીય ધન પદાર્થો :**

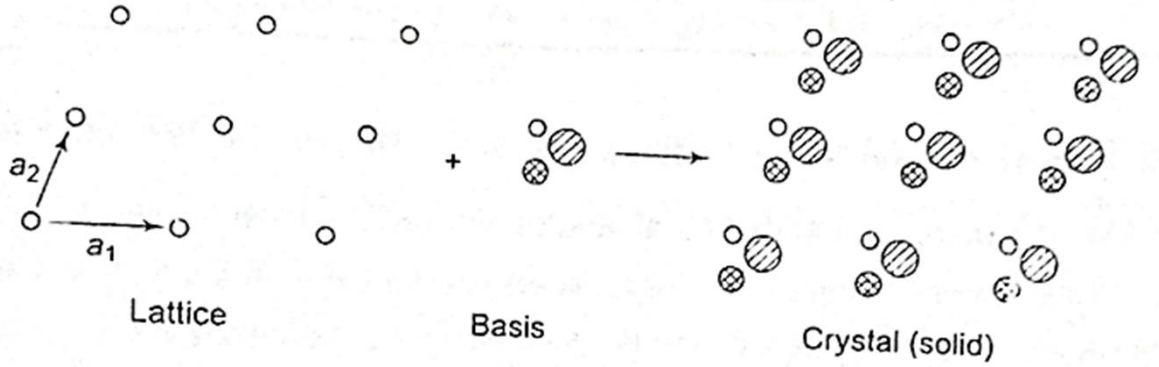
ધન પદાર્થોની રચનાના આધારે તેમની મુખ્ય બે વર્ગોમાં વહેંચણી કરવામાં આવે છે.

**(૧) સ્ફટિકીય (૨) અસ્ફટિકીય ( સ્તરવિહિન)**

સ્ફટિક પદાર્થોમાં અણુઓ એકઠાં પધ્ધતિમાં વર્ગીકૃત થયેલા હોય છે. જે એક ત્રિ-પરિમાણ કૃતિ ઉત્પન્ન કરે છે. અને જેને કોઈ ખાસ એકમ કોષના ત્રિ-પરિમાણીય પુનરાવર્તનથી મેળવી શકાય છે. જો આ પ્રકારની આવર્તીય ગોઠવણી પદાર્થમાં બધી જ જગ્યાએ વ્યાપ્ત હોય તો આ પ્રકારના સ્ફટિકને “ એકાકી સ્ફટિક” (single Crystal) તરીકે ઓળખવામાં આવે છે. જ્યારે “ બહુ સ્ફટિકીય “ રચનાઓમાં આ પ્રકારની આવર્તીય રચના પ્રદેશ સીમાઓ આગળ તૂટેલી જોવા મળે છે. આવા પ્રદેશોમાં રચના આવર્તીય હોય છે. તથા આવા પ્રદેશોનું કદ કેટલાક સ્થૂળ પરિમાણથી ચોક્કસ એંગસ્ટ્રોમ ( $A^{\circ}$ ) જેટલું હોય છે. જો આવા પ્રદેશોનું કદ એકમ કોષના કદ જેટલું થઈ જાય તો સ્ફટિકતા નાબુદ થાય છે. આવા પદાર્થોને અસ્ફટિકીય પદાર્થ કહે છે. એક ધારી રચનાને લીધે એકાકી સ્ફટિકમાં લાંબા અંતરની નિયમિતતા જોવા મળે છે. અસ્ફટિક પદાર્થમાં કોઈ આવર્તીય નિયમિતતા જોવા મળતી નથી અને લાંબા અંતરની નિયમિતતા એ જ ટૂંકા અંતરની નિયમિતતામાં રૂપાંતરિત થયેલી હોય છે.

**સ્ફટિક ( Lattice) અને સ્ફટિક રચના :**

અણુઓની પુનરાવર્તિત આવર્તીય ગોઠવણી એ સ્ફટિકનો ખૂબ જ પ્રાથમિક ગુણધર્મ છે. અણુઓની પુનરાવર્તિત ગોઠવણી તેના તાપીય અને ઇલેક્ટ્રોનિક ગુણધર્મો નક્કી કરવામાં અગત્યનો ભાગ ભજવે છે. આ પુનરાવર્તિત ગોઠવણને ધ્યાનમાં રાખી સ્ફટિકમાં અણુઓને ભૂલી જઈ તે સ્ફટિક કઈ રીતે પુનરાવર્તિત થાય તેના પર ધ્યાન લેતાં , જો દરેક એકમ કૃતિને એક બિંદુ તરીકે સ્વીકારીએ તો એક ગાણિતીય સંકલ્પનાની રચના કરે છે. જેને લેટીસ ( જાલક) કહે છે. લેટીસ એ “ અવકાશમાં આવેલી અનંત, નિયમિત બિંદુઓની હારમાળા છે.”અણુઓની સ્ફટિકમાં ગોઠવણીને સ્ફટિક રચના તરીકે ઓળખવામાં આવે છે. સ્ફટિકની સમગ્ર રચના કોઈ એક એકમ કૃતિ ના પુનરાવર્તનથી મેળવી શકાય છે. જેને “ એકમ કોષ “ કહે છે. એકમ કોષના મૂળ રચના વર્ગને આધાર તરીકે ઓળખવામાં આવે છે. **સ્ફટિક લેટીસ + આધાર ( basis) = સ્ફટિક રચના**



આકૃતિમાં ત્રિ-પરિમાણીય સ્ફટિક સંબંધ દર્શાવે છે. જે વાસ્તવિક સ્ફટિકમાં રહેલી આંતરિક નિયમિતતા તેના બહારના ભાગમાં હંમેશા પ્રદર્શિત થતી હોય છે.

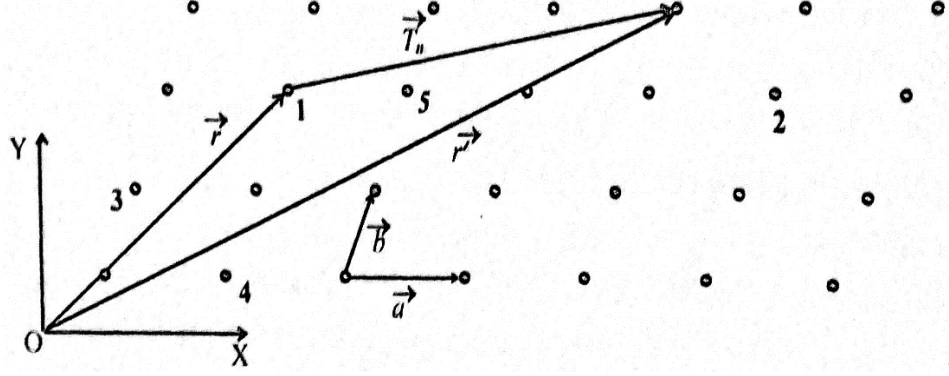
**સ્થાનાંતર સંમિતિ, અવકાશ લેટીસ, એકમ કોષ અને અભાજ્ય કોષ (Translational Symmetry, Space Lattice, Unit Cell & Primitive Cell) :**

સ્ફટિક સ્થાનાંતરીય સંમિતિ અથવા આવર્તીય ત્યારે જ કહી શકાય કે જ્યારે એવા ત્રણ રેખીય સ્વતંત્ર સદીશો અસ્તિત્વ ધરાવે કે  $(\vec{a}, \vec{b}, \vec{c})$  કે જે સ્ફટિકમાં સ્થાનાંતર  $\vec{R}_n = n_1\vec{a} + n_2\vec{b} + n_3\vec{c}$  ( જ્યાં  $n_1, n_2$  અને  $n_3$  એ પૂર્ણાંક સંખ્યા દર્શાવે છે.) મૂળ બિંદુને સમાન બિંદુએ પ્રસ્થાપિત કરે. (સ્ફટિકમાં બે બિંદુઓ ત્યારે જ સમાન રાખી શકાય કે જ્યારે તેમની આજુબાજુનું અવકાશ એક સમાન હોય) સ્ફટિકમાં બે લેટીસ બિંદુઓને  $\vec{R}_n$  સ્વરૂપના સદિશ દ્રવ્ય જોડવામાં આવે છે કે જેથી તેમના સ્થાન સદિશો  $\vec{r}$  અને  $\vec{r}'$  નીચે મુજબ દર્શાવી શકાય.  $\vec{r}' =$

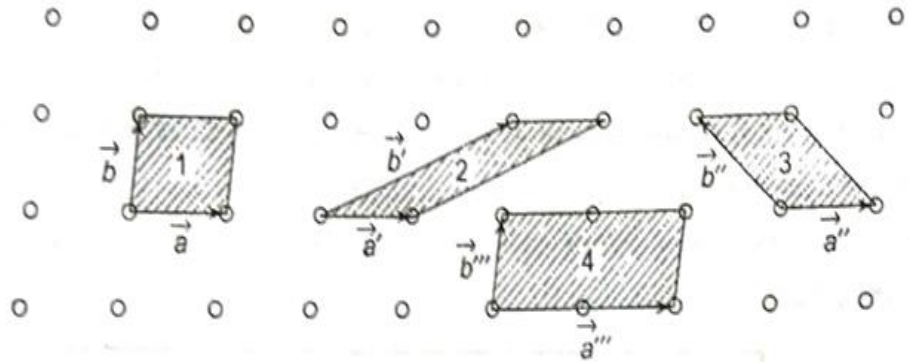
$$\vec{r} + \vec{R}_n$$

ઉગમબિંદુ એવી રીતે પસંદ કરી શકીએ કે જેથી  $0 \leq n_1, n_2, n_3 \leq 1$  જેને સંલગ્ન લેટીસ બિંદુ તરીકે ઓળખવામાં આવે છે. માટે  $\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$  ને પ્રાથમિક અથવા અભાજ્ય સદિશો તરીકે

ઓળખવામાં આવે છે. અને આ વિભાજ્ય સદિશોથી બનતા સમાંતર ષટફલકને “ અભાજ્ય કોષ” કહે છે. એ એક ખાસ પ્રકારનો એકમ કોષ ( યુનિટ શેલ) છે. જે માત્ર એક જ લેટીસ બિંદુ ધરાવે છે. અવિભાજ્ય કોષ (પ્રિમિટિવ શેલ) એ લઘુત્તમ કદ ધરાવતો એકમ છે.



જે ઉપરની આકૃતિમાં દર્શાવેલ છે. અવિભાજ્ય કોષ એ અવકાશનો એવો ભાગ છે કે જેના અવિભાજ્ય સ્થાનાતરીય સદિશોના પુનરાવર્તનથી સ્ફટીકનું સમગ્ર અવકાશ ભરાય જાય છે. સદિશ  $\vec{a}$  અને  $\vec{b}$  ની બધી જોડીઓ સ્થાનાતરીય સદિશો છે. પરંતુ  $\vec{a}''$  અને  $\vec{b}''$  અભાજ્ય સદિશો નથી. કારણકે  $\vec{a}''$  અને  $\vec{b}''$  ના સંકલિત જોડાણથી લેટીસ સ્થાનાંતર  $\vec{R}_n$  મેળવી શકાતો નથી. બીજા બધા ભાગ જેમકે  $(\vec{a}', \vec{b}')$  અને  $(\vec{a}'', \vec{b}'')$  એ અવિભાજ્ય સ્થાનાતરીય સદિશો તરીકે લઈ શકાય છે. સમાંતર બાજુ ચતુષ્કોણ 1, 2 અને 3 ક્ષેત્રફળ સમાન છે. તે દરેકને અભાજ્ય કોષ તરીકે સ્વીકારી શકાય છે. સમાંતર બાજુચતુષ્કોણ 4 એ બે લેટીસ બિંદુ ધરાવતો કોષ છે.

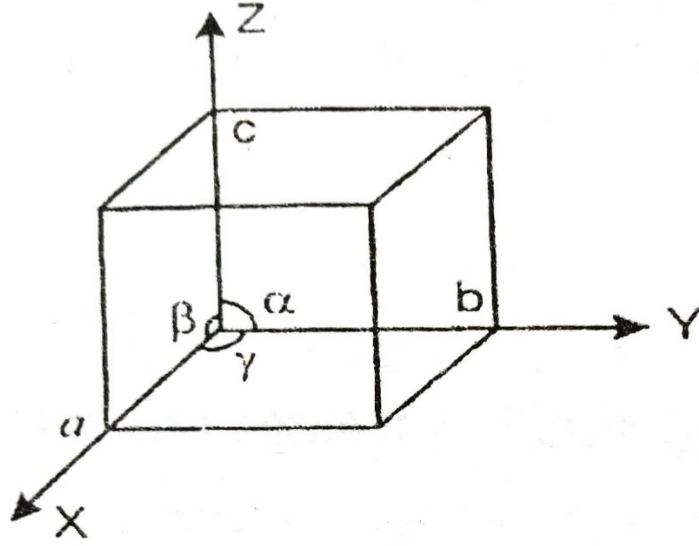


#### દ્વિપરિમાણ લેટીસના લેટીસ બિંદુઓ

ઇ.સ. 1848માં બ્રેવાઇસે અવકાશ લેટીસની વાત રજૂ કરી. એ એક ગાણિતીય સંકલ્પના છે. જે તેને નીચે પ્રમાણે વ્યાખ્યાયિત કરી.

લેટીસ અવકાશ : “ અનંત સંખ્યાના બિંદુઓ ગોઠવણનો એવો ગુણધર્મ ધરાકવે છે. કે જેમા કોઈ એક બિંદુ આગળની ગોઠવણ એ બીજા કોઈ પણ બિંદુ આગળની ગોઠવણને સમાન હોય “. આ

પ્રકારની બિંદુઓથી બનતી રચનાને “બ્રેવાઇસ લેટીસ” કહે છે. સદિશ  $\vec{R}_n$  ના અંત્ય બિંદુઓથી અવકાશ લેટીસ તૈયાર થાય છે.



અવકાશ લેટીસ એ છ પદો દ્રાવ્ય સંપૂર્ણ પણે દર્શાવી શકાય છે. ત્રણ સદિશો  $\vec{a}, \vec{b},$  અને  $\vec{c}$  અને ત્રણ ખૂણાઓ  $\alpha, \beta$  અને  $\gamma$ .

દરેક પ્રિમિટિવ શેલ હંમેશાં એક લેટીસ બિંદુ ધરાવે છે. પ્રિમિટિવ શેલ જો સમાંતર ષટફલ હોય તો તેના આઠ ખૂણે એક લેટીસ બિંદુ રહેલું હોય છે. અને પ્રત્યેક લેટીસ બિંદુ સમાન રીતે આઠ સમાંતર ષટફલકોમાં વહેંચાયેલું કલ્પી શકાય અને માટે પ્રત્યેક અભાજ્ય કોશ દીઠ બિંદુ ધનતા =  $8 \times 1/8 = 1$  પ્રતિ અવિભાજ્ય કોશ મળશે. એકમ કોશ જેટલો નાનો તેટલા તેમાં લેટીસ બિંદુઓ ઓછા અને તેટલું સરળ તેમનું વર્ણન.

ઘણીવાર સગવડતા ખાતર કે સંમિતિના કારણોસર એવીરીતે યુનિટ સેલ નક્કી કરવામાં આવે છે કે જેથી એક જ પરમાણુ- બેસીસવાળા બંધારણ માટે પણ યુનિટ સેલમાં એક કરતાં વધારે પરમાણુઓ હોય. આવા યુનિટ સેલને નોન-પ્રિમિટિવ યુનિટ સેલ કહે છે.

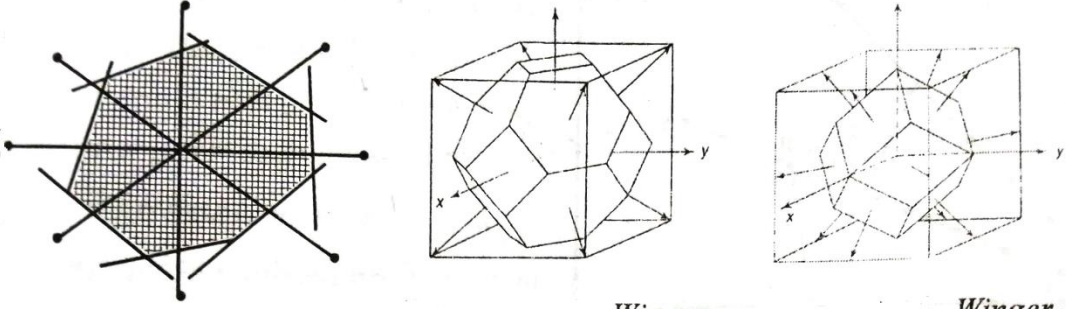
### વિઝ્નર સિટઝ કોષ ( Wigner Seitz Cells) :

યુનિટ સેલ નક્કી કરવામાં આ બીજી રીતમાં , જો નાનામાં નાનો સંભવિત એકમ કોષ એ અવિભાજ્ય ( Primitive ) કોષ છે. પરંતુ વખતોવખત કેટલાક મોટા નોન અવિભાજ્ય (Non-Primitive) એકમ કોષનો ઉપયોગ થાય છે. કે જે સંમિતિને વધારે સારી રીતે રજૂ કરે છે.

નજીકના  $\vec{R}_n$  (ત્રિજ્યાને ) દુભાગતા સમતલો વડે બંધિત કદ એ એકમ કોષને વધારે સારી રીતે રજૂ કરે છે. આવા એકમ કોષને વિઝ્નર સિટઝ કોષ કહે છે. આ એક ખાસ પ્રકારનો અવિભાજ્ય કોષ છે. જે સંમિતિને વધારે સ્પષ્ટ રીતે રજૂ કરે છે. નીચે પ્રથમ આકૃતિમાં ટ્રી-પરિમાણીક સ્ફટિક માટેનો વિઝ્નર સિટઝ કોષ દર્શાવે છે. બીજી આકૃતિ એ BCC સ્ફટિક માટેનો વિઝ્નર સિટઝ કોષ દર્શાવે છે. ત્રીજી આકૃતિ માં FCC સ્ફટિકમાં અણુઓ અને મુખના કેન્દ્ર પર ગોઠવાયેલા હોય છે.



જે સીમાઓના કેન્દ્ર બિંદુને સમતુલ્ય છે. કાળા રંગ વડે દર્શાવેલ કોષમાં અણુઓ ખૂણા ઉપર છે. જ્યારે સફેદ રંગ વડે દર્શાવેલ કોષમાં અણુઓ સીમાઓના કેન્દ્ર પર અને ઘનના કેન્દ્ર પર છે.



Wigner-

Wigner-

Seitz cell for the BCC

Seitz cell for FCC

વિઝ્નર સિટઝ સેલ રચનામાં સ્ફટિકની સંમિતિ જળવાઈ રહે છે. સ્ફટિકના ઇલેક્ટ્રોનિક બંધારણ તેમજ દોલનીય ગુણધર્મોના સૈધ્ધાંતિક અભ્યાસમાં અને વ્યુત્ક્રમ સેલની રચનામાં વિઝ્નર સિટઝ અભિગમ ઉપયોગી છે. ત્રિપરિમાણ વિઝ્નર સિટઝ સેલ બહુફલક (Polyhedron) હોય છે.

### સ્ફટિકોમાં સંમિતિ તત્વ (અવયવ) :

સ્ફટિક અલગ અલગ સંમિતિઓ અથવા સંમિતિ તત્વ ધરાવે છે. સ્ફટિકોના આંતરીક રચના ના અભ્યાસમાં સંમિતિનો ખ્યાલ ખૂબજ મહત્વનો ભાગ ભજવે છે.

સંમિતિ તત્વ એ ખૂબ જ ખાસ ક્રિયાઓ દ્વારા રજૂ કરવામાં આવે છે. સંમિતિ ક્રિયા એ જે સ્ફટિક અને તેના અવકાશને અચળ રાખે છે. ઉદાહરણ તરીકે એક પદાર્થને સ્થાનાંતરની ક્રિયા દ્વારા આવર્તીય રીતે ફેરબદલ કરી શકાય છે. તે જ પ્રમાણે કોઈ પદાર્થને તેની અક્ષની આગળ પુનરાવર્તીત કોણાવર્તન આપી શકાય છે.

સંમિતિ ક્રિયા કોઈ બિંદુ અથવા રેખાને અનુલક્ષીને કાર્યાવંત કરવામાં આવે છે. તેમને “બિંદુ સમૂહ સંમિતિ ક્રિયા” અને જે સંમિતિ ક્રિયા સ્થાનાંતર દ્વારા થાય છે તેમને “ અવકાશ સમૂહ સંમિતિ ક્રિયા” દ્વારા ઓળખવામાં આવે છે. સંમિતિ તત્વ અલગ અલગ અણુ હરોળમાં રહેલી સમાનતા કૃતિને સમજવામાં ખૂબ જ મદદરૂપ થાય છે. નીચે કેટલાક સ્ફટિકોમાં જોવા મળતી અલગ અલગ બિંદુ સમૂહ સંમિતિ તત્વો દર્શાવે છે.

(i) કોણાવર્તન અક્ષ

(ii) અરીસા સમતલ

(iii) વ્યસ્ત કેન્દ્ર (સમમિતિનું કેન્દ્ર)

(iv) કોણીય વ્યસ્ત અક્ષ



## યોગ્ય કોણાવર્તન અક્ષ :

જો સ્ફટિકને  $(360/n)^\circ$  કોણાવર્તન આપતાં તે પાછો મૂળ સ્થિતિમાં પ્રસ્થાપિત થાય તો તે “ n -ફોલ્ડ કોણાવર્તન અક્ષ” ધરાવે છે. તેમ કહી શકાય અને કોણાવર્તન કોણને  $(360/n)=\theta$  ને “ અક્ષનો પ્રો ( આઘાત / ઘક્કો)” કહે છે. અને મૂળ સ્થિતિમાં પ્રસ્થાપિત થવા માટે જરૂરી ક્રમિક કોણાવર્તનનોની સંખ્યા ‘n’ને અક્ષની ફોલ્ડ ( ગડી) કહે છે.

કોણાવર્તન અક્ષ દ્વારા ધરાવતી સ્વીકાર્ય આઘાતો શોધવા માટે આકૃતિમાં દર્શાવેલ હાર લેટીસથી શરૂઆત કરતાં કોઈ n - ફોલ્ડ અક્ષને લેટીસના પ્રત્યેક બિંદુએ  $\phi$  જેટલા મૂલ્યના “ n “ કોણાવર્તનો અધ્યારોપણ કરવા માટે જરૂરી છે.

આ કોણાવર્તનો સમઘડી દિશામાં કે વિષમ ઘડી દિશામાં થાય છે તે મહત્વ ધરાવતું નથી. આકૃતિમાં બે અક્ષને વિરુદ્ધ દિશાઓમાં  $\phi$  જેટલા કોણાવર્તનો દર્શાવેલ છે.

$$\bullet \leftarrow t \rightarrow \bullet \leftarrow t \rightarrow \bullet \leftarrow t \rightarrow \bullet \leftarrow t \rightarrow \bullet \leftarrow t \rightarrow \bullet \leftarrow t \rightarrow \bullet \leftarrow t \rightarrow$$

હવે બે નવા લેટીસ A અને B મળે એ વાસ્તવિક રેખાથી સમાન અંતરે હોવા જ જોઈએ. હવે A અને Bને જોડતી રેખા સ્થાનાંતર t થી સમાંતર હોવી જોઈએ તથા તે t ના કોઈ પૂર્ણાંક ગુણાંક જેટલી હોવી જોઈએ અને જો તેમ ન હોય તો A અને B ને જોડતી રેખા લેટીસની સ્થાનાંતર રેખા ન હોઈ શકે અને તે હાર આવર્તીય બનશે. આકૃતિ પરથી  $\phi$  ના સ્વીકાર્ય મૂલ્યો શોધી શકાય.

$$Mt = t + 2t \cos \theta$$

$$M = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3 \dots \dots \dots$$

અહીં  $\pm m$  નો ઉપયોગ કરેલ છે. તે સ્થાનાંતર જમણી કે ડાબી બાજુથી થયેલ છે. બંને બાજુને

$$t \text{ વડે ભાગી સાદુરૂપ આપતાં } \cos \theta = \frac{M-1}{2}$$

છેવટે m એ પૂર્ણાંક છે. માટે m-1 પણ પૂર્ણાંક થશે. ધારોકે તે N છે. ઉપરનું સમી.

$$\cos \theta = \frac{N}{2} \text{ થશે. ઉપરના સમી આધારિત ઉકેલોનો કોઠો દર્શાવેલ છે.}$$

N	$\cos \theta$	$\theta$	n	સંજ્ઞા
-2	-1	$180^\circ$	2	●
-1	-1/2	$120^\circ$	3	▲
0	0	$90^\circ$	4	■

+1	+1/2	60°	6	●
+2	+1	360° or 0°	1	-

જેમાં  $-2 \leq N \leq 2$  ને અનુરૂપ અવધિ  $-1 \leq \cos\theta \leq 1$ .  $N$  નું 2 કરતાં વધારે મૂલ્ય અશક્ય છે. કારણકે  $\cos\theta$  થી 1 વધારે કિંમત અશક્ય છે. અને માટે માત્ર પાંચ પ્રકારના ઉકેલો શક્ય છે. જે લેટીસ સાથે સુસંબધ છે.

જો  $n=1$  હોય તો સ્ફટિકને અધ્યારોપણ માટે  $360^\circ$  ફેરવવો જ પડે આવી અક્ષને “ ઓળખ અક્ષ” તેરીકે ઓળખવામાં આવે છે. અને પ્રત્યેક સ્ફટિક આવી અનંત સંખ્યામાં અક્ષો ધરાવે છે. જો  $n=2$  હોય ● સ્ફટિકને અધ્યારોપણ માટે  $180^\circ$  કોણાવર્તન આપવું પડશે. આ અક્ષ દ્વિવિધ અક્ષ તેરીકે ઓળખાય છે. જેને “●” સંજ્ઞા વડે દર્શાવાય છે. જો  $n=3$  હોય તો સ્ફટિકને  $120^\circ$  કોણાવર્તન આપવાથી અધ્યારોપણ મેળવાય. આ પ્રકારની અક્ષને ત્રિવિધ અક્ષ કહે છે. જેને “▲” સંજ્ઞા વડે દર્શાવામાં આવે છે. જો  $n=4$  હોય તો તેને આનુષંગિક કોણાવર્તન  $90^\circ$  થશે. અને આ અક્ષને ચતુર્વિધ તેરીકે ઓળખવામાં આવે છે. જેને “■” સંજ્ઞા વડે દર્શાવાય છે. જો  $n=6$  હોય તો આનુષંગિક કોણાવર્તન કોણ  $60^\circ$  નો બને છે. અને આ અક્ષને ષટ્વિધ (Hexa)તેરીકે ઓળખવામાં આવે છે. જેને સંજ્ઞા વડે દર્શાવાય છે.

### સંમિતિ સમતલ :

જો સ્ફટિકમાં સમતલને દોરવામાં આવે કે જે સ્ફટિકના કેન્દ્રમાંથી પસાર થતું હોય તથા સ્ફટિકનો અડધો ભાગ બીજા ભાગનું પ્રતિબિંબ ( પરાવર્તન) બને તો સ્ફટિક “ સમતલ સંમિતિ” ધરાવે છે. તેમ કહી શકાય તથા સંજ્ઞાત્મક રીતે તેને “m” વડે દર્શાવવામાં આવે છે.

### વ્યસ્ત કે કેન્દ્ર ( સંમિતિ કેન્દ્ર) :

જેની સંજ્ઞા  $\bar{1}$  છે. જે વન બાર વંચાય છે. કેન્દ્રથી યાદસ્થિક અંતર ‘r’ એ આવેલા પ્રત્યેક બિંદુ માટે ‘-r’ જેટલા અંતરે એકસમાન બિંદુ અસ્તિત્વ ધરાવે તો તેવા બિંદુને સંમિતિકેન્દ્ર કહે છે. તે વ્યસ્તનો ઉપયોગ કરી મેળવાતી હોવાથી આવા કેન્દ્રને વ્યસ્તકેન્દ્ર પણ કહે છે. તે સમતલને બદલે બિંદુથી મળતું પ્રતિબિંબ રજૂ કરે છે.

### કોણીય વ્યસ્ત અક્ષ :




જો સ્ફટિકને મૂળ સ્થિતિમાં પ્રસ્થાપિત કરવા માટે કોણાવર્તન ક્રિયા અને વ્યસ્તીકરણ ક્રિયા બંનેની સંયુક્ત રીતે જરૂર પડે તો જ સ્ફટિક કોણીય વ્યસ્ત અક્ષ ધરાવે છે. તેમ કહી શકાય.

કોણીય -વ્યસ્ત અક્ષને દર્શાવવા માટે સંબંધિત કોણાવર્તન અક્ષ સંજ્ઞા ઉપર બાર ( - )નું ચિહ્ન મૂકવામાં આવે છે. જેમ કે 3- ફોલ્ડ કોણીય વ્યસ્ત અક્ષને વડે દર્શાવવામાં આવે છે.

અવકાશ લેટીસમાં માત્ર પાંચ કોણીય અક્ષો શક્ય છે. 1,2,3,4 અને 6 માટે કોણીય વ્યસ્ત અક્ષોનો પૂર્ણ ગણ આ પ્રમાણે લખી શકાય.

$$1 + \bar{1} \rightarrow \bar{1}, 2 + \bar{1} \rightarrow \bar{2}, 3 + \bar{1} \rightarrow \bar{3}, 4 + \bar{1} \rightarrow \bar{4}, 6 + \bar{1} \rightarrow \bar{6}$$

આ પાંચ કોણીય વ્યસ્ત અક્ષોના સંદર્ભમાં નીચેના મુદ્દાઓ જરૂરી છે.

1.  $\bar{1}$  એ સંમિતિ કેન્દ્રને સમાન છે. તેથી તેને અલગ સંમિતિ તત્વ તરીકે ન ગણી શકાય.
2.  $\bar{2}$  એ અલગ સંમિતિ તત્વ નથી. તે અક્ષને કાટખૂણે કેન્દ્રમાંથી પસાર થતા અરીસા પ્રતિબિંબ (પરાવર્તન) ને સમતુલ્ય છે.
3.  $\bar{3}$  એ ત્રણ ફોલ્ડ કોણાવર્તન અક્ષ અને કેન્દ્રના જોડકાંને સમતુલ્ય છે. પણ સરળતા ખાતર તેને અલગ તત્વ ગણી  વડે દર્શાવવામાં આવે છે.
4.  $\bar{4}$  એ અસંકુચિત તત્વ છે. તેને  સંજ્ઞા વડે દર્શાવવામાં આવે છે.
5.  $\bar{6}$  એ ત્રણ ફોલ્ડ કોણાવર્તન અક્ષ અને અક્ષને કાટખૂણે કેન્દ્રમાંથી પસાર થતા અરીસા પ્રતિબિંબ (પરાવર્તન)ના જોડકાંને સમતુલ્ય છે. પણ સરળતા ખાતર તેને અલગ તત્વ તરીકે સ્વીકારવામાં આવે છે.  સંજ્ઞા વડે દર્શાવવામાં આવે છે. તેથી  $\bar{3}$ ,  $\bar{4}$  અને  $\bar{6}$  એ માત્ર સ્વીકાર્ય તત્વો છે. તેથી લેટીસ અવકાશમાં શક્ય સંમિતિ તત્વોનો સંપૂર્ણ ગણ નીચે મુજબ લખી શકાય.

કોણાવર્તન અક્ષ : 1, 2, 3, 4 અને 6. કેન્દ્રિય સમમિતિ :  $\bar{1}$

કોણીય વ્યસ્ત અક્ષો :  $\bar{3}$ ,  $\bar{4}$  અને  $\bar{6}$  અરીસા સમતલ : m

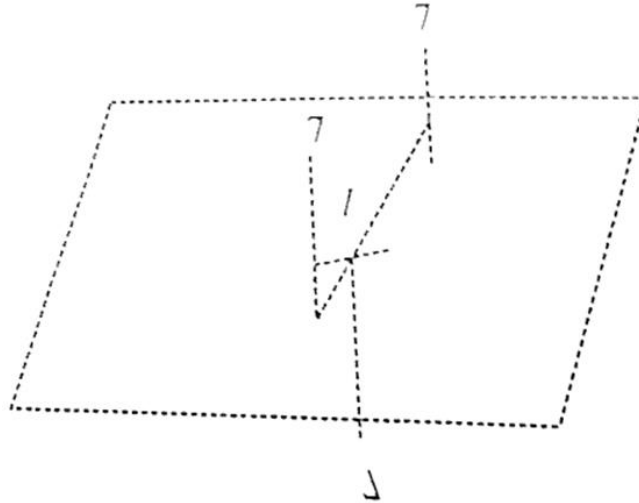
“ સ્થૂળસંમિતિ તત્વો “ એ એવા સંમિતિ તત્વો છે કે સ્ફટિકના બહારના આકારને અસર કરે છે. અને તે સહજ રીતે દેખીતું થાય છે. અને તેને ઉપરોક્ત યાદીમાં જોઈ શકાય છે. કેટલાંક સંમિતિ તત્વો સ્ફટિકના બાહ્ય આકારને અસર કરતા નથી. પરંતુ તે માત્ર આણ્વિક સ્તરની રચના સાથે જ સંબંધ ધરાવે છે. તેમને “ સૂક્ષ્મ સંમિતિ તત્વો ” ( microscopic symmetry elements) કહે છે. તે બે પ્રકારના છે. (1) વિસર્પણ તલ (Glide plane) (2) સ્ક્રૂ (પેચ) અક્ષ (Screw axis)

**વિસર્પણ તલ (Glide plane) :**

પ્રતિબિંબ (પરાવર્તન) અને પ્રતિબિંબ સમતલને સમાંતર સ્થાનાંતરને જોડી શકવાનું શક્ય છે. આ પ્રકારના જોડાણને વિસર્પણ પ્રતિબિંબ કહે છે. આ પરિણામી કૃતિને સંબંધિત સમમિતિ તત્વને વિસર્પણ સમતલ કહે છે.

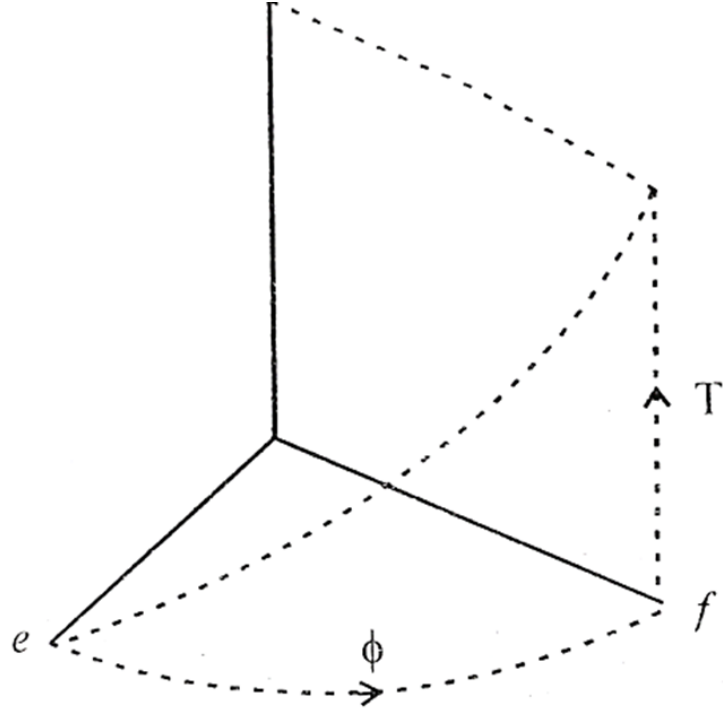
સ્થાનાંતર અવયવ “ T ” એ વિસર્પણ દિશામાં લંબ સ્થાનાંતરના અડધા મૂલ્ય જેટલો હોય છે. અને માટે a- અક્ષ દિશામાં વિસર્પણ અવયવ  $T = \frac{1}{2} a$  અને તેને a- વિસર્પણ કહે છે. આજ રીતે વિકર્ણીય વિસર્પણ  $T = \frac{1}{2}a + \frac{1}{2}b$  અથવા  $\frac{1}{2}b + \frac{1}{2}c$  વગેરે કિંમતો ધરાવી શકે છે. ટેબલમાં અલગ અલગ વિસર્પણ અવયવના સંભવિત મૂલ્યો દર્શાવ્યા છે.

વિસર્પણનો પ્રકાર	સંજ્ઞા	સ્થાનાંતર અવયવ
અક્ષીય વિસર્પણ	a	a/2
અક્ષીય વિસર્પણ	b	b/2
અક્ષીય વિસર્પણ	c	c/2
વિકર્ણીય વિસર્પણ	n	a/2+b/2, b/2+c/2, c/2+a/2
વિકર્ણીય વિસર્પણ	d	a/4 + b/4, b/4+c/4, c/4+a/4



### સ્ક્રૂ (પેચ) અક્ષી (Screw axis):

જેવી રીતે કોણાવર્તન અને વ્યસ્તીકરણને જોડી કોણીય વ્યસ્ત અક્ષ બનાવવી શક્ય છે. તેવી જ રીતે કોણાવર્તન અને કોણીય અક્ષને સમાંતર સ્થાનાંતરને જોડી શકાય છે. ( આકૃતિમાં જુઓ)



$e$  થી  $f$  સુધીનું  $\phi$  જેટલું કોણાવર્તન અને  $f$  થી  $g$  નું  $T$  જેટલું સ્થાનાંતર એ  $e$  થી  $g$  સુધીની “ સ્ક્રૂ ગતિ” ને સમતુલ્ય છે. આવી ગતિને સંબંધિત સંમિતિ તત્વને સ્ક્રૂ અક્ષ તરીકે ઓળખવામાં આવે છે. સ્ક્રૂટીકમાં અક્ષ એ સ્થાનાંતર દિશા ( $R_n$ ) ને સમાંતર હોવી જોઈએ અને માટે  $\bar{\theta}$  જેટલા  $n$  કોણાવર્તનો અને  $n$  સ્થાનાંતરો એ  $T$  જેટલું અંતર કાપશે. એટલે કે સ્ક્રૂ અક્ષને સાપેક્ષ  $n$  કોણાવર્તનો ( $nT$ ) એ કોઈ લેટીસ સ્થાનાંતર  $t$  ના પૂર્ણ ગુણાંકને સમતુલ્ય હશે.

$$\therefore n \bar{I} = mt$$

જ્યાં  $m$  અને  $n$  પૂર્ણાંક છે.

$$\therefore \bar{I} = mt/n$$

ઉપરિક્ત સમી. અનુસાર સ્થાનાંતર અવયવ અથવા સ્ક્રૂ અક્ષના પેચ જે અલગ અલગ કિંમત ધરાવી શકે છે. તે અક્ષના ફોલ્ડ “  $n$  ” પર આધારિત છે. હવે  $m=0,1,2,3,\dots$  કિંમતો ધરાવી શકે છે. તેને અનુરૂપ  $\bar{I}$  ની કિંમતો કોઠા માં દર્શાવેલ છે.

અક્ષોના ફોલ્ડ

$T$  ના સંભવિત મૂલ્યો

(  $n$  )

1       $0t, 1t, 2t$  વગેરે

2       $0t, (1/2)t, (2/2)t, (3/2)t$  વગેરે

3       $0t, (1/3)t, (2/3)t, (3/3)t, (4/3)t$  વગેરે

4  $ot, (1/4)t, (2/4)t, (3/4)t, (4/4)t, (5/4)t$  વગેરે

6  $ot, (1/6)t, (2/6)t, (3/6)t, (4/6)t, (5/6)t, (6/6)t, (7/6)t$   
વગેરે

હવે  $\frac{3}{2}t = t + \left(\frac{1}{2}\right)t$  અને  $\frac{5}{4}t = t + \left(\frac{1}{4}\right)t$  વગેરે. તેથી કોઠા પ્રમાણે માત્ર અનન્ય અક્ષો આ પ્રમાણે છે.  $2_1, 3_1, 3_2, 4_1, 4_2, 4_3, 6_1, 6_2, 6_3, 6_4, 6_5$  જ્યાં “ સબ સ્ક્રીપ્ટ” એ  $m$  ની કિંમતો દર્શાવે છે. હવે  $m=0$  અને  $m=n$  એ પૂર્ણ કોણાવર્તન ( i.e.  $2\pi/n$  પ્રકારનું) દર્શાવે છે. તેમને સ્ક્રૂ અક્ષોના ખાસ કિસ્સાઓ તરીકે લઈ શકાય.

**ત્રિપરિમાણક બ્રેવાઇસ લેટીસો( સાત સ્ફટિકીય તંત્રો)(બ્રેવાઇસ લેટીસના પ્રકારો)(**

**Seven Crystals Systems, divided into 14 Bravais Lattices):**

નિયમિતતા અને સંમિતિ એ સ્ફટિકનો ખૂબ જ સાહજિક ગુણધર્મ છે. મુખ્ય અક્ષોની લંબાઈ અને તેમની વચ્ચેના ખૂણાના આધારે સ્ફટિકને ત્રિ-પરિમાણમાં સાત સ્ફટિકીય તંત્રો અને 14 બ્રેવાઇસ લેટીસોમાં વર્ગીકૃત કરવામાં આવે છે. સાત સ્ફટિકીય તંત્રો તેમની અનિવાર્ય “ સંમિતિ તત્વ “ સાથે કોઠામાં અને 14 બ્રેવાઇસ લેટીસો આકૃતિમાં દર્શાવેલ છે. સાત સ્ફટિકીય તંત્રોને અનુરૂપ યુનિટ સેલ(એકમકોષ) અલગ અલગ શક્ય આકાર ધરાવી શકે છે. જેમને બ્રેવાઇસ લેટીસમાં પ્રત્યેક બિંદુ સાથે સંકળાયેલા “ સંમિતિ તત્વ” વડે દર્શાવી શકાય છે.

કોણાવર્તન અને પરાવર્તનની સાપેક્ષે સંમિતિ વ્યાખ્યાયિત કરવા માટે આપણે એવા લેટીસોને ધ્યાનમાં લઈશું કે જેમાં કોણાવર્તન અક્ષો અને પરાવર્તન સમતલોમાં કોઈ એક બિંદુ સામાન્ય હોય ( એટલેકે એક બિંદુ કે જે કોણાવર્તનો અને પરાવર્તનો દરમિયાન સ્થિર(અચળ) રહે ) અક્ષોના કોણાવર્તન અને સમતલોના પરાવર્તન સાથે સંકલિત “સંમિતિ તત્વ “ ને ધ્યાનમાં લઈ બ્રેવાઇસ લેટીસોની રચના કરવામાં આવે છે. તે આધારિત બ્રેવાઇસ લેટીસોને સાત ભાગમાં વર્ગીકૃત કરવામાં આવે છે. બ્રેવાઇસ લેટીસમાં દરેક બિંદુને સંમિતિ તત્વના સેટ ( ગણ) સાથે સંકલિત કેન્દ્રિય સંમિતિ તરીકે વિચારી શકાય.

P : મુખ્ય કોષ (primitive Cell) , C : બે સમાંતર મુખ પર લેટીસ બિંદુઓ ધરાવતો એકમ કોષ, F : પ્રત્યેક મુખના કેન્દ્ર પર લેટીસ બિંદુ ધરાવતો એકમ કોષ, I : તેના આંતરિક કેન્દ્ર પર લેટીસ બિંદુ ધરાવતો એકમ કોષ , R : સમાંતર ષટફલકીય એકમ કોષ કે જેના દરેક બિંદુઓ લેટીસ બિંદુઓ છે.

હેકઝાગોનલ બ્રેવાઇસ લેટીસ માટે કોઈ સામાન્ય નિયમ બનેલ નથી. કેટલાકે તેને કોષ ‘P’ અને કેટલાક તેને ‘C’ કોષ તરીકે દર્શાવે છે.

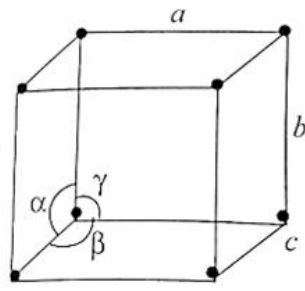
1. Triclinic : કોણાવર્તન કે પરાવર્તન સમમિતિ હાજર નથી.

- 2.Monoclinic: એક 2-ફોલ્ડ અક્ષ અને અક્ષને લંબ પરાવર્તન સમતલ વડે વર્ણવવામાં આવે છે.
- 3.Orthorhombic: 2 પરસ્પર લંબવત 2-ફોલ્ડ કોણાવર્તન અક્ષો અને પરાવર્તન સમતલ કે જે બે માંથી એક અક્ષને લંબ હોય છે.
- 4.Tetragonal: જે સમચતુર્ભુજ સમમિતિથી બનાવી શકાય છે.
- 5.Trigonal : જે 3- ફોલ્ડ કોણાવર્તન અક્ષ વડે દર્શાવી શકાય છે.
- 6.Hexagonal : જે 6-ફોલ્ડ, 3-ફોલ્ડ અને 2-ફોલ્ડ અને વ્યસ્ત કેન્દ્ર ધરાવે છે.
7. Cubic : જેને 4,3-ફોલ્ડ અક્ષ વડે દર્શાવાય છે.

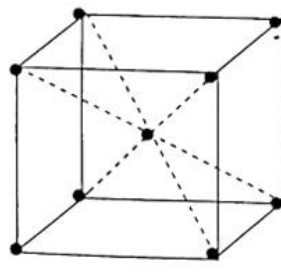
તંત્ર	બ્રેવાઇસ લેટિસ અને તેના સંજ્ઞા	રૈવાજિક સેલ	સંમિતિ ઘટકો	ઉદાહરણ
ઘન (Cubic)	સાદી(P) બોડી કેન્દ્રિત(I) તલ કેન્દ્રિત(F)	$a = b = c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	ચાર 3-ફોલ્ડ પરિભ્રમણ અક્ષો	Au, Ag, Cu, Fe, NaCl, CaF <sub>2</sub> , NaClO <sub>3</sub> .
ટેટ્રાગોનલ (Tetragonal)	સાદી(P) બોડી કેન્દ્રિત(I)	$a = b \neq c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	એક 4-ફોલ્ડ પરિભ્રમણ અક્ષ અથવા એક 4-ફોલ્ડ અક્ષ	$\beta$ -Sn(સફેદ), TiO <sub>2</sub> , NiSO <sub>4</sub> , SnO <sub>2</sub>
ઓર્થોરોમ્બીક (Orthorhombic) (ગેલીયમ) (સીમેન્ટાઇટ)	સાદી(P) બેઇઝકેન્દ્રિત(C) બોડી કેન્દ્રિત(I) તલ કેન્દ્રિત(F)	$a \neq b \neq c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	ત્રણ પરસ્પર લંબ એવી 2-ફોલ્ડ પરિભ્રમણ અક્ષો	$\alpha$ -સલ્ફર, જીપ્સમ, Fe <sub>3</sub> C, KNO <sub>3</sub> , BaSO <sub>4</sub> , MgSO <sub>4</sub>
મોનોક્લીનીક (Monoclinic)	સાદી(P) બેઇઝકેન્દ્રિત(C)	$a \neq b \neq c$ $\alpha = \beta = 90^\circ \neq \gamma$	એક 2-ફોલ્ડ પરિભ્રમણ અક્ષ	Na <sub>2</sub> SO <sub>2</sub> , જીપ્સમ, FeSO <sub>4</sub> , CaSO <sub>4</sub> , 2H <sub>2</sub> O



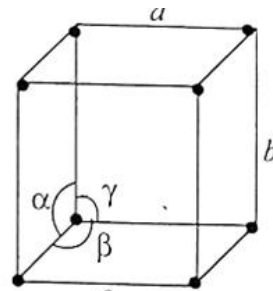
ટ્રાયક્લીનીક (Triclinic )	સાદી(P)	$a \neq b \neq c$ $\alpha \neq \beta \neq \gamma$ $\neq 90^\circ$	એકપણ નહિ	$K_2Cr_2O_7,$ $CuSO_4$
ટ્રાયગોનલ(Trigonal) અથવા રહેમ્બોહેદ્રલ (Rhombohedral )	સાદી(P)	$a = b = c$ $\alpha = \beta = \gamma$ $\neq 90^\circ$	એક 3-ફોલ્ડ પરિભ્રમણ અક્ષ	As, Sb, Bi, $CaSO_4,$ Calcite (કેલ્સાઇટ)
ષટકોણીય (Hexagonal)	સાદી(P)	$a = b \neq c$ $\alpha = \beta$ $= 90^\circ$ $\gamma = 120^\circ$	એક 6-ફોલ્ડ પરિભ્રમણ અક્ષ	Zn, Cd, Ni, As, $SiO_2,$ Agl, quartz(ક્વાર્ટ્ઝ)



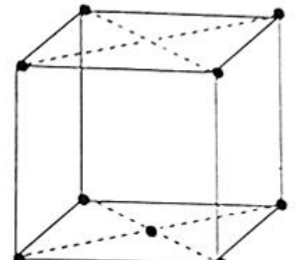
સીમ્પલ ટેટ્રાગોનલ  
(P)



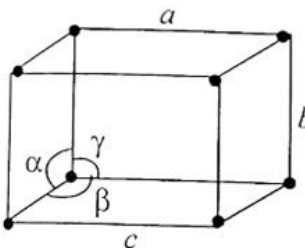
બોડી સેન્ટર્ડ ટેટ્રાગોનલ (I)



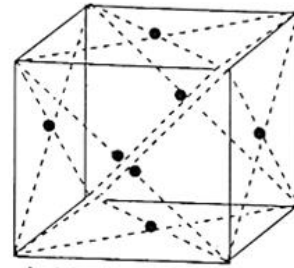
સીમ્પલ મોનોક્લિનીક  
(P)



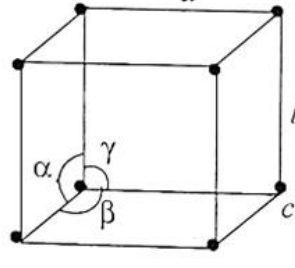
બેઇઝ-સેન્ટર્ડ  
મોનોક્લિનીક (C)



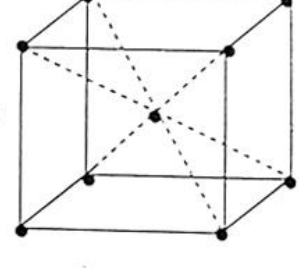
ટ્રાયક્લિનીક સીમ્પલ  
(P)



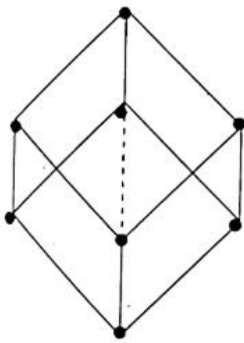
ફેઇસ-સેન્ટર્ડ ક્યુબીક  
(F)



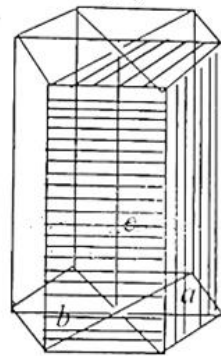
સીમ્પલ ક્યુબીક  
(P)



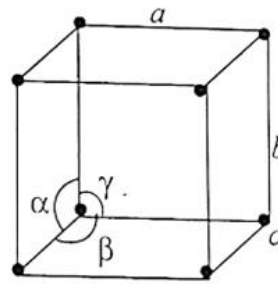
બોડી સેન્ટર્ડ  
ક્યુબીક (I)



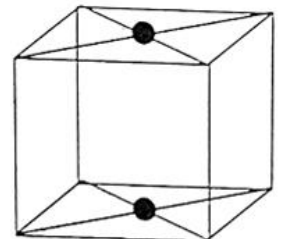
ટ્રાયગોનલ  
(R)



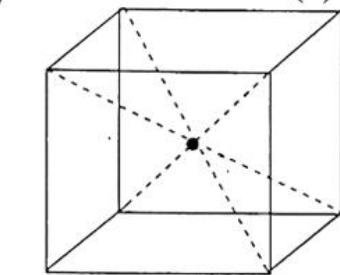
હેક્ઝાગોનલ (શેડેડ)  
(P)



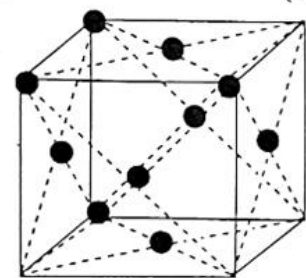
સીમ્પલ ઓરથોરોમ્બીક  
(P)



બેઇઝ સેન્ટર્ડ ઓરથોરોમ્બીક  
(C)



બોડી-સેન્ટર્ડ ઓરથોરોમ્બીક  
(I)



ફેઇસ-સેન્ટર્ડ ઓરથોરોમ્બીક  
(F)

**સમન્વય સંખ્યા (Coordination Number) :**

બ્રેવાઇસ લેટીસમાં આપેલ બિંદુની નજીકના બિંદુઓને 'નિકટમ પાડોશી બિંદુઓ' ( The number of neighboring atoms ) કહે છે. બ્રેવાઇસ લેટીસના આવર્તીય ગુણધર્મના કારણે દરેક બિંદુને એક સરખા 'નિકટમ પાડોશી બિંદુઓ' હોય છે. આ પાડોશી બિંદુઓની સંખ્યા એ લેટીસનો આગવો ગુણધર્મ છે, જેને લેટીસની ' સમન્વય સંખ્યા' ( coordination number) તરીકે ઓળખવામાં આવે છે. જે સાદા ઘન ( SC)લેટીસ માટે 6, BCC( Body Centered Cubic Structure) માટે 8 અને FCC( Face Centered Cubic Structure) માટે 12 હોય છે.

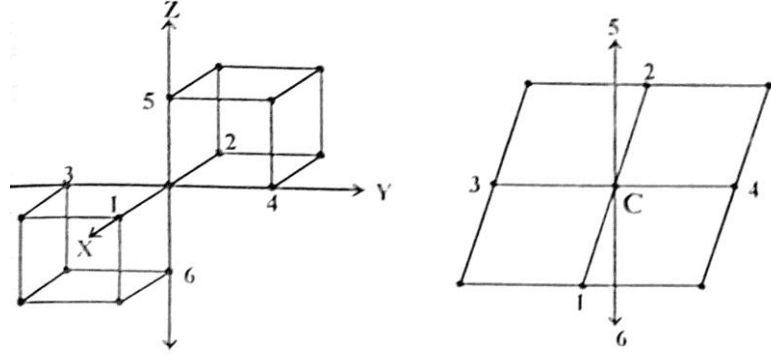


Figure - (a) Simple cubic structure

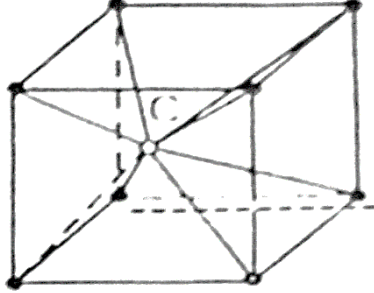


Figure - (b) Body centered cubic structure

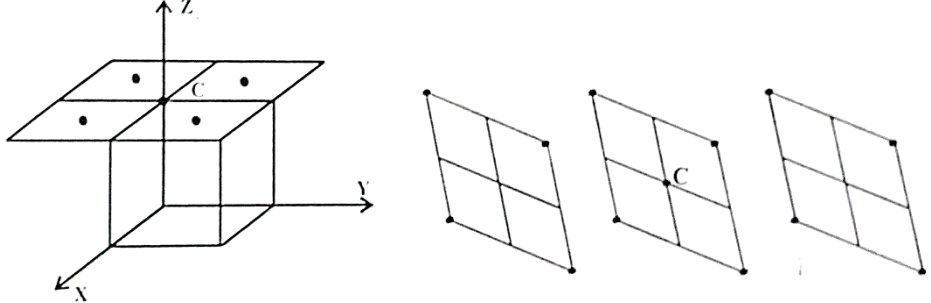


Figure - (c) Face centered cubic structure

## કેટલીક અગત્યની સ્ફટિકીય રચનાઓ (Some importance crystal structure- Simple Cubic Structure, Body Centered Cubic Structure, Face Centered Cubic Structure ) :

હવે કેટલીક સરળ સ્ફટિકીય રચનાઓનો અભ્યાસ કરીશું. સ્ફટિકમાં આવેલ દરેક અણુને ચોક્કસ ત્રિજ્યા ધરાવતા ગોળા તરીકે કલ્પી શકાય. તથા સ્ફટિકમાં આ ગોળાઓ ખૂબજ સ્થાયી રીતે સંકલિત કરેલા કલ્પવામાં આવે છે. ત્રિઘન રચના માટે પેકીંગ ફેક્શન (PF) અથવા પેકીંગ ઘનતા અથવા સંકલન ગુણાંક નીચેના સૂત્રથી ગણી શકાય.

$$\text{પેકીંગ ફેક્શન ( PF )} = \frac{\text{એકમ કોષમાં પરમાણુની સંખ્યા} \times \text{એકમ પરમાણુનું કદ}}{\text{એકમ કોષનું કદ}}$$

“ એકમ કોષમાં અણુઓના કદ અને એકમ કોષના કદના ગુણોતરને પેકીંગ ફેક્શન કહે છે.”

### (1) સાદી ઘનાકાર રચના (Simple Cubic Structure) :

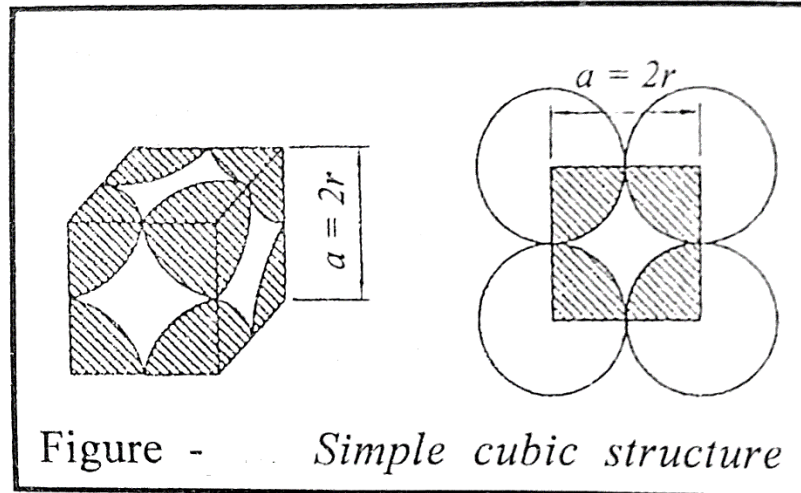


Figure - Simple cubic structure

આકૃતિમાં સાદા ઘનમાં અણુઓની ગોઠવણ દર્શાવેલ છે. તેની રચનામાં એકમ કોષમાં માત્ર 8 પરમાણુ હોય છે. જે દરેક પરમાણુ તે રચનાના એકમ કોષમાં ઘનના માત્ર ખૂણાઓમાં જ અણુઓ રહેલા છે. અને માટે અણુઓ એકબીજાને સીમાવર્તીય રીતે સ્પર્શે છે. વળી ખૂણામાં રહેલ દરેક અણુ 8 કોષમાં વહેંચાયેલ હોય છે. તેથી એક કોષમાં દરેક અણુ  $1/8$  જેટલો ફાળો આપે છે. તેમ કહેવાય. ( આ લેટીસને ત્રણ પરસ્પર લંબ એવા સરખી લંબાઈના મુખ્ય સદિશો વડે વિસ્તૃત કરી શકાય છે. આ રચના નરમ બંધિત છે. પ્રત્યેક અણુને માત્ર છ પાડોશી અણુઓ છે. માત્ર એક જ તત્વ  $a-P_0$  (ચોક્કસ તાપમાને) આ પ્રકારની સ્ફટિકીય રચના ધરાવે છે.)

તેથી એકમ કોષ દીઠ બધા ખૂણાઓમાં પરમાણુઓનો કુલ ફાળો =  $8 \times 1/8=1$ .

તેથી એકમ કોષ દીઠ પરમાણુઓની સંખ્યા = 1.

સાદી ઘન રચનામાં અણુઓ કે ઓઅરમાણુઓ એકબીજાને ઘનની ધાર પર સ્પર્શે છે. ધારો કે આવી રચનામાં બે નજીકના અણુઓનું વચ્ચેનું અંતર  $2r = a$  છે. જે આકૃતિમાં દર્શાવેલ છે.  $\therefore r = a/2$

હવે તમામ અણુઓને ગોલીય આકારમાં કલ્પતાં,

$$\text{દરેક અણુનું કદ} = \frac{4}{3} \pi r^3 = \frac{4}{3} \pi \left(\frac{a}{2}\right)^3$$

$$\text{દરેક કોષનું કદ} = a^3 \text{ થાય.}$$

$$\therefore \text{પેકીંગ ફેકશન (PF)} = \frac{\frac{4}{3} \pi \frac{a^3}{8}}{a^3} = \frac{\pi}{6} = 0.52$$

અર્થાત સાદી ઘન રચનામાં અણુઓ દ્વારા 52% કદ આવરી લેવાય છે. જ્યારે બાકીના 48% કદ રિક્ત (ખાલી) રહે છે.

## (2) અંત:કેન્દ્રિય ઘનાકાર રચના (Body Centered Cubic Structure) :

એકમ કોષ ઘનાકાર હોય છે. તેના પ્રત્યેક ખૂણામાં અણુઓ ધરાવે છે. તથા એક અણુ ઘનના કેન્દ્રમાં રહેલો હોય છે. અને માટે આઠ ખૂણાઓમાં આઠ અણુઓ અને કેન્દ્રમાં એક અણુ ગોળો રહેલો હોય છે. પ્રત્યેક અણુ આઠ પાડોશી અણુઓ ધરાવે છે. અને અણુઓ અંત:કર્ણો દ્વારા એકબીજાને સ્પર્શે છે. એક એકમ કોષમાં રહેલા અણુઓની સંખ્યા  $8 \times 1/8 + 1=2$  (આકૃતિ પરથી) માટે લેટીસને  $ax, ay$  અને  $az$  વડે વિસ્તૃત કરી શકાય છે.

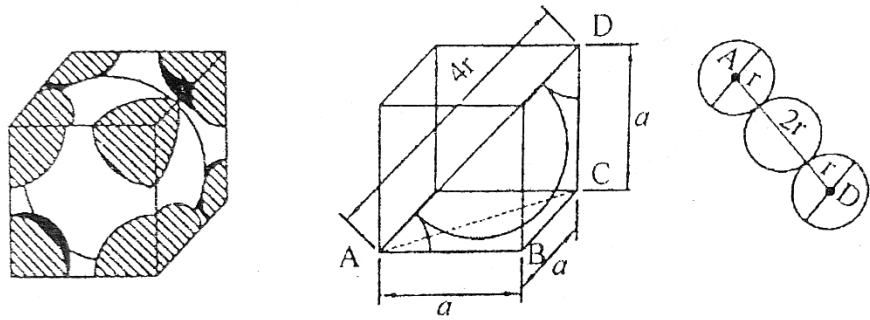


Figure - BCC Structure

$$\Delta ABC \text{ ઉપરથી } (AC)^2 = (AB)^2 + (BC)^2$$

$$AC^2 = a^2 + a^2$$

$$AC = \sqrt{2} a$$

જો R = ગોળાઓની ત્રિજ્યા હોય તો,  $AD = r + 2r + r = 4r$

સ્પર્શીય ગોઠવણ માટે  $AD^2 = AC^2 + CD^2 \Rightarrow (4r)^2 = (\sqrt{2} a^2) + a^2$

$$\therefore 16r^2 = 3a^2$$

$$\therefore r = \frac{\sqrt{3}}{4} a$$

$$\text{અણુનું કદ ( ધનફળ) } = \frac{4}{3} \pi r^3 = \frac{4}{3} \pi \left(\frac{\sqrt{3}}{4} a\right)^3$$

તથા એકમ કોષનું કદ =  $a^3$

$$\text{સંકલન ગુણાંક (PF) } = \frac{\text{ગોળાઓનું કદ}}{\text{ઘનનું કદ}}$$

$$\therefore \text{PF} = \frac{2 \times \frac{4}{3} \pi \left(\frac{\sqrt{3}}{4} a\right)^3}{a^3} = \frac{2 \times \frac{4}{3} \pi \frac{\sqrt{3}}{4} \frac{\sqrt{3}}{4} \frac{\sqrt{3}}{4} a^3}{a^3} = 0.68$$

આમ આ રચનામાં અણુઓ દ્વારા 68% ભાગ રોકાય છે. જ્યારે બાકીનો 32% જટલો ભાગ ખાલી રહે છે. તેથી સંકુલન ઘનતા (Packing density) 68% થશે.

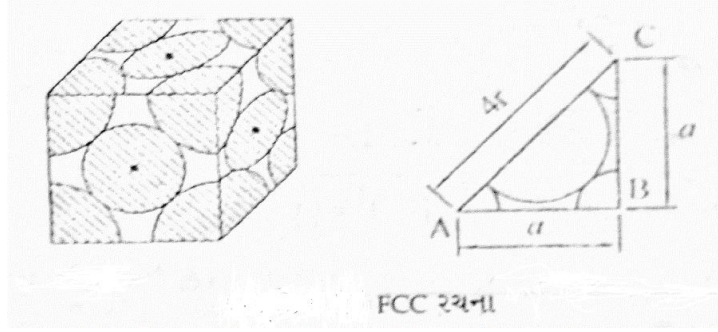
Ba, Li, Na, K, Cs, Nb તમામ BCC રચનાઓ ધરાવે છે.

એક આણ્વિક BCC સ્ફટિક રચના ધરાવતા તત્ત્વો.

તત્ત્વ	a (A <sup>0</sup> )	તત્ત્વ	a (A <sup>0</sup> )
Ba	5.02	Fe	2.87
Li	3.49(78K)	Mo	3.15
Na	4.23(5K)	W	3.16
K	5.23(5K)	Ti	3.88
Cs	6.05(78K)	V	3.02
Nb	3.30	Ta	3.31

### (3) મુખ કેન્દ્રિય ઘનાકાર રચના (Face Centered Cubic Structure) :

એકમ કોષ ઘન હોય છે. અણુઓ આઠ ખૂણાઓ અને પ્રત્યેક છ બાજુઓના ( મુખના) કેન્દ્ર પર રહેલા હોય છે. એક એકમ કોષમાં રહેલા અણુ ગોળાઓની સંખ્યા =  $8 \times \frac{1}{8} + 6 \times \frac{1}{2} = 4$  લેટીસને  $ax, ay, az$  અને ચાર બિંદુ પદ્ધતિથી  $0, a/2(x+y), a/2(y+z), a/2(z+x)$  વડે વિસ્તારી શકાય છે. જે આકૃતિમાં અને કોઠામાં દર્શાવેલ છે. અણુઓ મુખને વિકર્ણીય દિશામાં એકબીજાને સ્પર્શે છે.



$$(AC)^2 = (AB)^2 + (BC)^2 = a^2 + a^2 = 2a^2$$

$$AC = 4r$$

$$\therefore (4r)^2 = 2a^2$$

$$\therefore 4r = \sqrt{2}a$$

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

$$\text{ઘનનું કદ} = \left(\frac{4R}{\sqrt{3}}\right)^3 \quad (\text{ત્રણે બાજુઓને ઘન}) \quad (a^3)$$

$$\text{સંકલન ગુણાંક (PF)} = \frac{\text{અણુઓના ગોળાઓનું કુલ કદ}}{\text{ઘનનું કદ}}$$

$$= \frac{4 \times \frac{4}{3} \pi R^3}{\left(\frac{4R}{\sqrt{3}}\right)^3} = \frac{\pi\sqrt{2}}{6} = 0.74$$

આમ આ રચનામાં અણુઓ દ્વારા 74% ભાગ રોકાય છે. જ્યારે બાકીનો 26% જેટલો ભાગ ખાલી રહે છે. ત્રણેય નોબલ ધાતુઓ Cu, Ag, Au અને અમુક સંક્રાંતિ ધાતુઓ જેવી કે Co ( $\beta$ ), Fe ( $\gamma$ ) તથા Al, FCC બંધારણ ધરાવે છે.

એક આણ્વિક FCC સ્ફટિક રચના ધરાવતા તત્ત્વો.



તત્વ	a (A <sup>0</sup> )	તત્વ	a (A <sup>0</sup> )	તત્વ	a (A <sup>0</sup> )
Al	4.05	Ca	5.58	Pd	3.89
Cu	3.61	Ce	5.16	Pr	5.16
Ag	4.09	B-Co	3.55	Pt	3.92
Au	4.08	Ni	3.52	Sr	6.08
Pb	4.95	Ar	5.26(4.2k)	Kr	5.72
Xe	6.20(58k)	Ne	4.43(4.2k)		

### મીલર અંકો (Miller Indices Numbers) :

લેટીસ સમતલોના ઢાળને રજૂ કરવા માટે મીલરે એક ખાસ પદ્ધતિ રજૂ કરી જે મુજબ પ્રત્યેક સમતલ એ ત્રણ ખાસ અંકો  $h, k$  અને  $l$  વડે રજૂ કરવામાં આવે છે. જેમને મીલર અંકો કહે છે. મીલર અંકો એ ત્રણ નાની પૂર્ણાંક સંખ્યા દર્શાવે છે. જેમનું મૂલ્ય સમતલ વડે X-અક્ષ, Y-અક્ષ અને Z-અક્ષ સાથે બનાવેલ અંતઃખંડ (છેદ)ના વ્યસ્ત જેટલું હોય છે. માટે જો X-અક્ષ, Y-અક્ષ અને Z-અક્ષ સાથે બનાવેલા અંતઃખંડની કિંમત  $l_1, l_2$  અને  $l_3$  હોય તો,

$$h : k : l = \frac{1}{l_1} : \frac{1}{l_2} : \frac{1}{l_3}$$

મીલર અંકો સ્ફટિક સમતલ માટે નીચે મુજબ શોધી શકાય.

- (1) પ્રથમ અંતઃખંડોની લંબાઈઓ શોધો. ( સ્ફટિક અચળાંકો  $a, b, c$  ના સ્વરૂપમાં) ધારો કે તે  $l_1 = pa, l_2 = qb, l_3 = rc$  છે. જ્યાં  $p, q$  અને  $r$  પૂર્ણાંક સંખ્યા દર્શાવે છે.
- (2) હવે તેમનો વ્યસ્ત મેળવો,  $\frac{1}{p}, \frac{1}{q}, \frac{1}{r}$
- (3) ત્યાર પછી છેદનો લ.સા.અ. મેળવો. ત્યાર પછી દરેક વ્યસ્તને લ.સા.અ. વડે ગુણો. તેમને પૂર્ણાંકમાં રૂપાંતરિત કરો. ધારો કે તે  $h, k$  અને  $l$  છે. તેમનો નીચે મુજબ કૌંસમાં રજૂ કરો.

(  $h, k, l$  ) એ આપેલ સમતલના મીલર અંકો કહે છે.

ઉદા. જો સ્ફટિક સમતલ  $X, Y$  અને  $Z$  અક્ષ સાથે અનુક્રમે  $3a, 2b$  અને  $5c$  અંતઃખંડો ધરાવે છે. તો મીલર અંકો મેળવો.

ઉકેલ : (1)  $p=3, q=2, r=5$

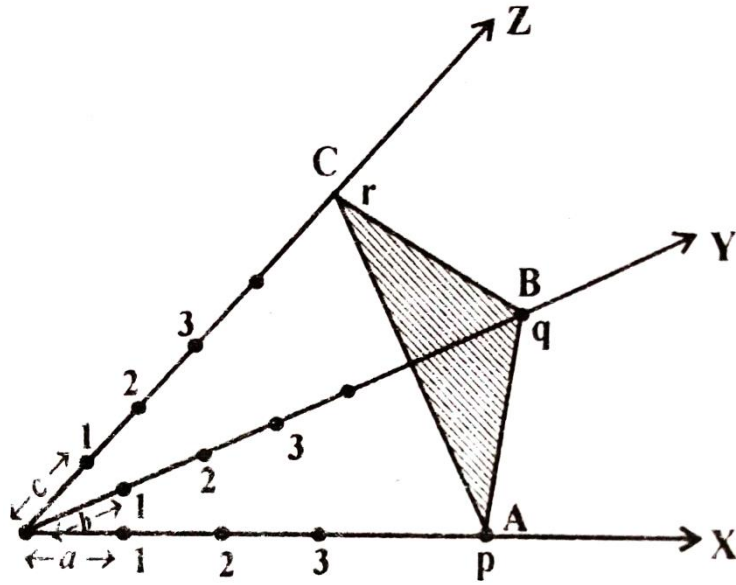
(2)  $\frac{1}{p} = \frac{1}{3}, \frac{1}{q} = \frac{1}{2}, \frac{1}{r} = \frac{1}{5}$

(4) છેદનો લ.સા.અ. =  $3 \times 2 \times 5 = 30$

$$\therefore h = \frac{30}{3} = 10, k = \frac{30}{2} = 15, l = \frac{30}{5} = 6$$

$$\therefore h : k : l = 10 : 15 : 6$$

સ્ફટિક સમતલના મીલર અંકો =  $(10, 15, 6)$



આકૃતિ એ ઘન સ્ફટિકમાં રહેલા કેટલાક અગત્યના સમતલો માટે મીલર અંકો દર્શાવે છે. આ આકૃતિની મદદથી સમતલમાં મીલર અંકો દર્શાવવા માટેના પદો નક્કી કરી શકાય છે. મીલર અંકોને સંબંધિત બીજી કેટલીક સંજ્ઞાઓ નીચે મુજબ છે. જો સમતલ યામાક્ષો પૈકી કોઈ એકને સમાંતર હોય તો તે અનંત અંતરે છેદશે. તેથી તે અક્ષના મીલર અંકો શૂન્ય થશે.

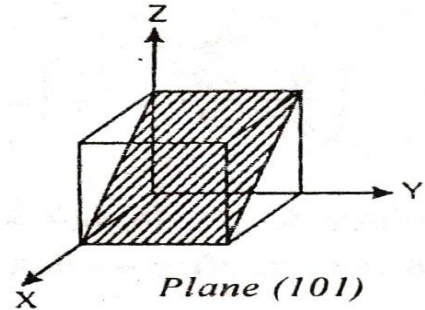
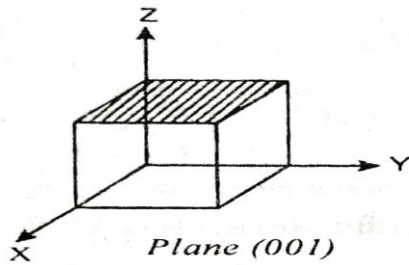
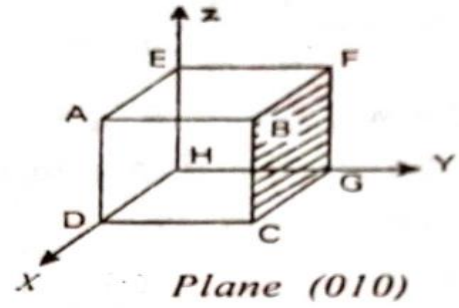
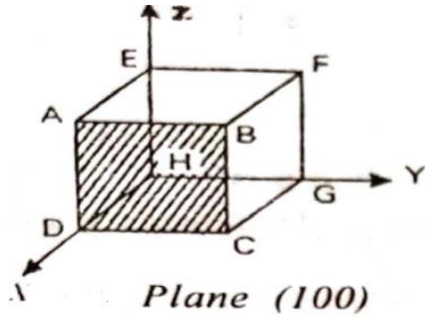
(1)  $(\bar{h}kl)$  એ એવું સમતલ દર્શાવે છે કે જે  $\bar{h}$  અક્ષને છેદે છે.

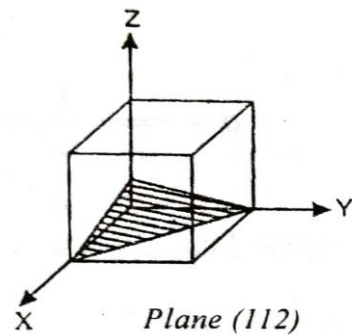
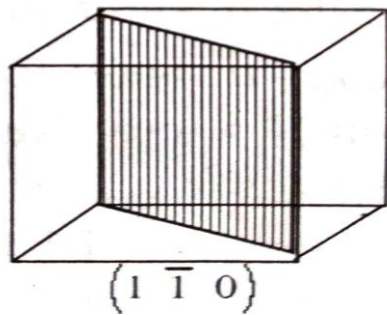
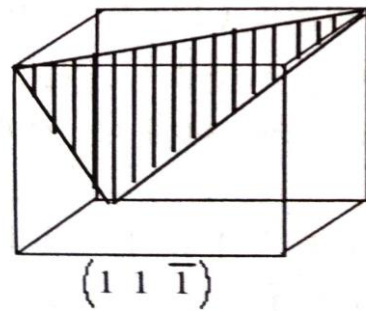
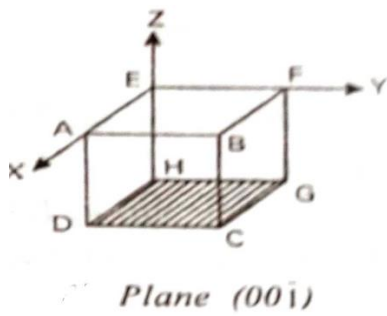
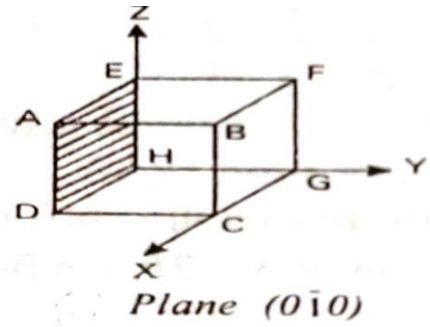
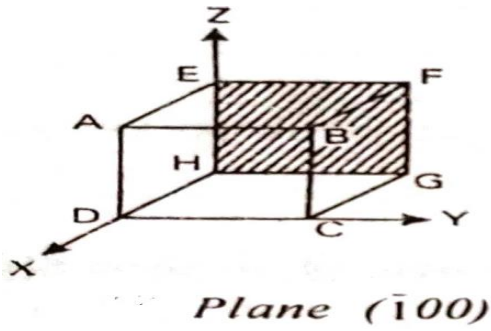
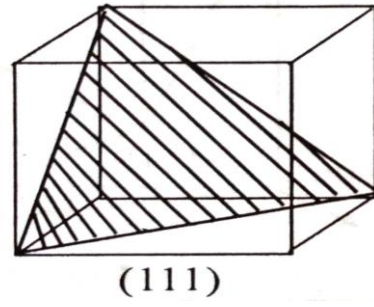
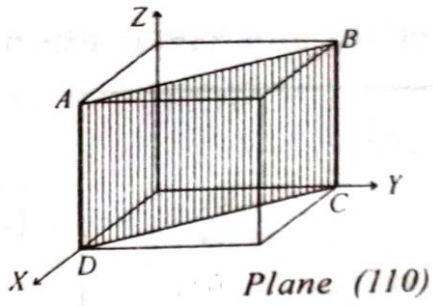
(2)  $(h, k, l)$  સમતુલ્ય સંમિતિ ધરાવતા સમતલો માટે જેમ કે  $\{100\}$  એ  $(100)$ ,  $(010)$ ,  $(001)$ ,  $(\bar{1}00)$ ,  $(0\bar{1}0)$  અને  $(00\bar{1})$  માટે ઘન(Cubic) સંમિતિ માટે વપરાય છે.

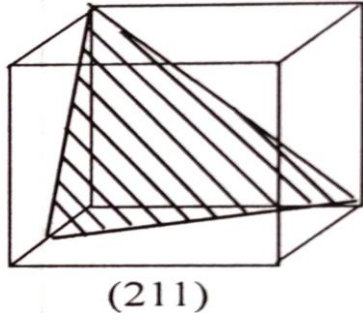
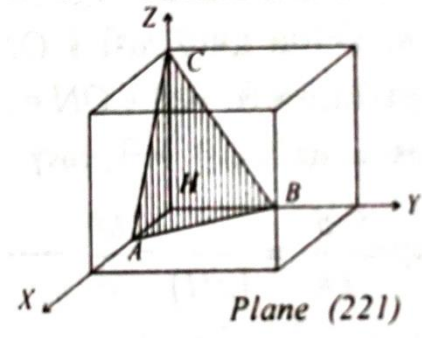
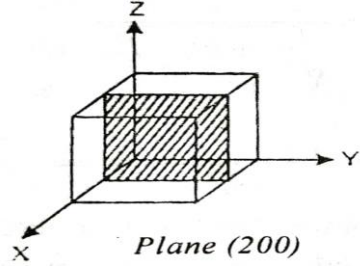
(3)  $[h, k, l]$  સ્ફટિકની દિશા દર્શાવવા માટે વપરાય છે. જેમ કે  $[100]$  એ x-અક્ષ માટે વપરાય છે.

(4)  $\langle h, k, l \rangle$  સમતુલ્ય દિશાઓના પૂર્ણ ગણ તરીકે

$$\langle 111 \rangle = [\bar{1}11], [1\bar{1}1], [11\bar{1}], [\bar{1}\bar{1}1], [1\bar{1}\bar{1}], [\bar{1}1\bar{1}] \text{ વગેરે}$$



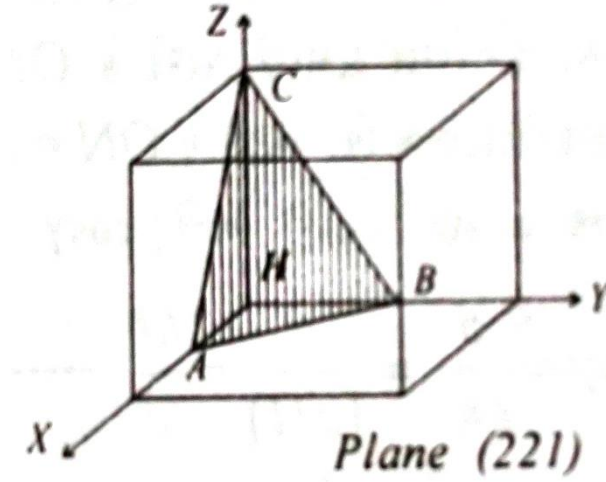




ઉપરની આકૃતિ ઘન સ્ફટિકમાં કેટલાક અગત્યના સમતલના મીલર અંકો દર્શાવે છે.

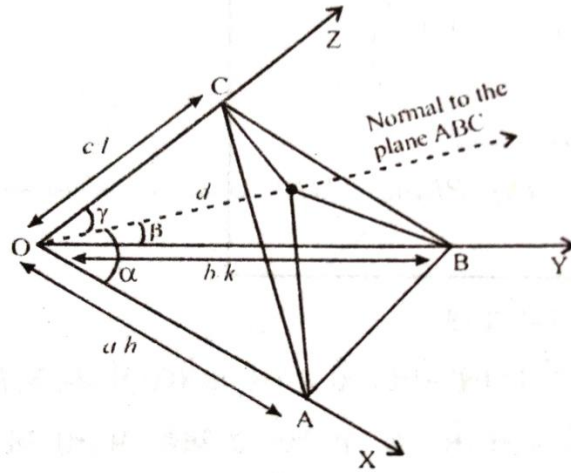
**મીલર અંકો પરથી સમતલ દોરવાની રીત:**

સૌ પ્રથમ આપેલા મીલર અંકોના વ્યસ્ત લો. આ વ્યસ્ત પદો અનુક્રમે X, Y અને Z અક્ષો પરના અક્ષીય એકમના રૂપમાં છેદ બતાવે છે. દા.ત.(221) મીલર અંકો માટે, વ્યસ્ત પદો લેતાં X, Y અને Z અક્ષો માટે  $1/2$ ,  $1/2$  અને  $1/1$  અથવા 0.5, 0.5 અને 1.0 થશે. જે આકૃતિમાં બતાવેલ છે.



સ્ફટિક સમતલો વચ્ચેનો અંતરાલ (The Spacing of a set of Crystal planes) :  
 ઉગમબિંદુ પાસેના પરંતુ ઉગમબિંદુમાંથી પસાર ન થતા હોય તેવા સમતલનું સમીકરણ  
 નીચે મુજબ દર્શાવી શકાય.

$$\frac{x}{(a/h)} + \frac{y}{(b/k)} + \frac{z}{(c/l)} = 1$$



આકૃતિમાં દર્શાવ્યા મુજબ ABC સમતલ વિચારો. આ ABC સમતલ એ મિલર અંકો  $(h, k, l)$  સમૂહ ધરાવે છે. ધારો કે ઉગમબિંદુથી સમતલનું લંબઅંતર "d" જેટલું છે. જે લંબ ON થી દર્શાવેલ છે. "d" એ બે ક્રમિક સમાંતર સમતલો વચ્ચેનું અંતર પણ થશે. આકૃતિમાં દર્શાવ્યા પ્રમાણે ધારો કે ON એ ઉગમબિંદુમાંથી સમતલ ઉપર દોરેલો લંબ છે. એટલેકે  $ON = d$  છે. અને તેમની દિશા કોસાઇન  $\cos \alpha$ ,  $\cos \beta$  અને  $\cos \gamma$  હોય તો

$$\cos \alpha = \frac{d}{OA} = \frac{d}{(a/h)} = \frac{hd}{a},$$

$$\cos\beta = \frac{d}{OB} = \frac{d}{(b/k)} = \frac{kd}{b},$$

$$\cos\gamma = \frac{d}{OC} = \frac{d}{(c/l)} = \frac{ld}{c} \quad \text{----(1)}$$

અહીં  $\alpha$ ,  $\beta$  અને  $\gamma$  એ  $x$ ,  $y$  અને  $z$  અક્ષો સાથેના અનુક્રમે આંતર સમતલીય કોણ છે. દિશા કોસાઇન નીચે પ્રમાણેના સમીકરણને સંતોષે છે.

$$\cos^2\alpha + \cos^2\beta + \cos^2\gamma = 1$$

અહીં સમીકરણ (1) માંથી કિંમતો મૂકતાં

$$\left( \frac{h^2}{a^2} + \frac{k^2}{b^2} + \frac{l^2}{c^2} \right) d^2 = 1$$

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

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

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

ઉપરોક્ત સમીકરણ પરસ્પર લંબ અને અલગ અલગ લંબાઇ ધરાવતી ત્રણ અક્ષો ધરાવતા વિષમ લંબાક્ષ સમચતુર્ભુજ (inter planer spacing-આંતર સમતલીય અંતરાલ) માટેનું સમીકરણ છે.

ટેટ્રાગોનલ સ્ફટિક માટે  $a=b$  અને  $d = \frac{1}{\sqrt{\frac{h^2+k^2}{a^2} + \frac{l^2}{c^2}}}$

જ્યારે ઘન સ્ફટિક માટે  $a=b=c$  હોવાથી  $d = \frac{a}{\sqrt{h^2+k^2+l^2}}$

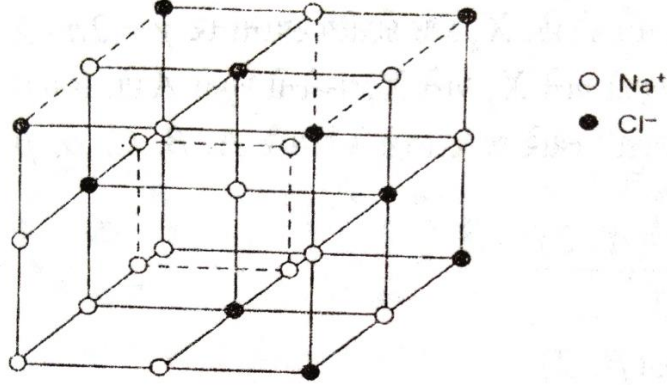
અહીં નોંધનીય છે કે જો  $a/h$ ,  $b/k$ ,  $c/l$  એ અક્ષો પરના અંતઃખંડ દર્શાવે છે તો “0” મીલર અંકો એ અનંત અંતઃખંડ દર્શાવે છે. માટે જો  $l = 0$  હોય તો Z-અક્ષ ઉપરનો અંતઃખંડ અનંત છે. અથવા સમતલ Z- અક્ષને “સમાંતર” છે. જો  $k$  અને  $l$  બંને “0” હોય તો સમતલ તે બંને અક્ષોને સમાંતર છે.

## કેટલાક ઉપયોગી સ્ફટિક બંધારણ (Some Importance Crystal Structure):

### NaCl બંધારણ (NaCl Structure):



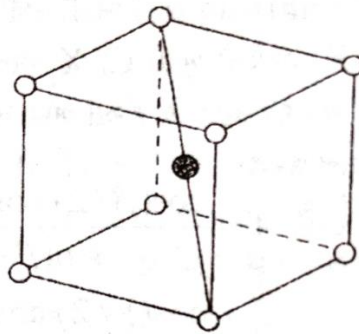
સોડીયમ ક્લોરાઇડ સ્ફટિકમાં Na અને Cl વચ્ચે આયનીક પ્રકારનું બંધન હોય છે. અહીં બ્રેવાઇસ લેટીસ એ FCC પ્રકારનું છે. જેમાં એકમ કોષમાં  $\text{Na}^+$  અને  $\text{Cl}^-$  આયનને  $1/2$  જેટલા અંતરથી અલગ કરેલ હોય છે. નીચે મુજબ સ્થિતિ પ્રમાણે એકમ કોષમાં NaCl ના ચાર અણુઓ હોય છે. નીચે આકૃતિમાં દર્શાવ્યા મુજબ દરેક આયન નજીકના પાડોશી આયનોથી વિરૂદ્ધ દિશામાં ઘેરાયેલો હોય છે. તેથી તેની સમન્વય સંખ્યા 6 થાય છે. KCl, KBr, MgO, AgBr વગેરે NaCl બંધારણના પ્રતિનિધિરૂપ સ્ફટિકો છે.



*Sodium chloride structure*

#### **CsCl બંધારણ ( Cesium Chloride Structure):**

આ બંધારણ આકૃતિમાં દર્શાવ્યા મુજબ મળે છે. અવકાશ લેટીસ એ સાદો ઘન છે. અહીં  $\text{Cs}^+$  આયન 0 0 0 સ્થિતિએ અને  $\text{Cl}^-$  આયન  $1/2 \ 1/2 \ 1/2 \ 1/2$  સ્થિતિએ હોય છે. આ બંધારણમાં દરેક આયન ઘનની મધ્યમાં ઘેરાયેલ હોય છે. સમન્વય સંખ્યા 8 છે. CsCl બંધારણ બે Cs લેટીસ ધરાવે છે. તેનો એક ગૌણ લેટીસ (sub lattice) એ બીજાનો BCC પ્રકારનો હોય છે. CsCl નો એક ગૌણ લેટીસ  $\text{Cs}^+$  દ્વારા અને બીજો લેટીસ  $\text{Cl}^-$  દ્વારા મળે છે.



*cesium chloride crystal structure*

#### **બિંદુ સમૂહો (Point Group):**

સ્ફટિક રચના એ સ્ફટિકનું બહારનું સ્વરૂપ અથવા સ્ફટિકનો આકાર વિજ્ઞાન નિર્ધારીત કરે છે. જે દર્શાવે છે કે કેટલાક સ્ફટિકો એવું આકાર વિજ્ઞાન ( આકારીકી) ધરાવે છે કે જેમાં

એક કે વધારે “ સંમિતિ તત્વ” હાજર હોય. જો સંમિતિ અક્ષને રેખા તરીકે અને અરીસાઓને સમતલ તરીકે વિચારવામાં આવે તો આ સંમિતિ તત્વો સ્ફટિક કેન્દ્રના સામાન્ય બિંદુ આગળ એકબીજાને છેદતાં જોઈ શકાય છે. સંમિતિ તત્વના જુદાજુદા સંભવિત જોડકાંઓ( સામાન્ય બિંદુ આગળના) ને “બિંદુ સમૂહો” કહે છે. બિંદુ સમૂહો એ ચોક્કસ ગણ દર્શાવે છે. કે જે ગણ કોણાવર્તન અને પરાવર્તન રૂપાંતરણોનો બનેલો છે. અને જે લેટીસને પોતાનામાં ચિત્રિત કરે છે. અને જેમાં બધા કોણાવર્તન અક્ષો અને પરાવર્તન સમતલોમાં કોઈ એક બિંદુ તો સામાન્ય હોય જ.

સંમિતિ તત્વોનો વિસ્તૃત અભ્યાસ દર્શાવે છે કે તેમને સાત સ્ફટિકીય તંત્રોમાં વર્ગીકૃત કરી શકાય છે. આ સાત સ્ફટિકીય તંત્રો તેમનામાં એકબીજાથી તદ્દન અલગ હોય તેવા સંમિતિ તત્વોના માત્ર 32 ગણો ધરાવે છે.

આ 32 બિંદુ સમૂહોમાં 2-ત્રિનતાક્ષ (Triclic) ,3-એક્લનતિક(Monoclinic),3-વિષમ લંબાક્ષ સમચતુર્ભુજ(Orthorombic), 7-દ્વિસમલંબ(Tetragonal), 5-ત્રિફલકીય(Trigonal), 7-ષટફલકીય(Hexagonal) અને 5-સમઘન(Cubic) રચના ધરાવે છે. આમ કુલ 32 સ્ફટિકીય વર્ગો હોય છે. સ્ફટિક ક્યો વર્ગ ધરાવશે તેનો આધાર તેના કદ કે આકાર ઉપર હોતો નથી. પરંતુ તેના મુખોના(Face) કોણીય સંબંધ ઉપર આધારિત હોય છે. હવે આ 32 બિંદુ સમૂહો હાઇબ્રીડ ગાણિતીક ભૂમિતિનો ઉપયોગ કરી તારવી શકીએ છીએ કે “એઝરોફ” (Azarrof) નામના વૈજ્ઞાનિક દ્વારા વર્ણિત કરાયેલી છે.

આ પદ્ધતિમાં “ગ્રુપ થીયરી” નો ઉપયોગ કરેલ છે. કે જેમાં એક સંમિતિ કાર્ય પછી બીજું સંમિતિ કાર્ય થાય છે. ત્યારે ત્રીજી સંમિતિ ક્રિયા આપમેળે ઉત્પન્ન થાય છે.જ્યારે બે કોણાવર્તન અક્ષો ભેગી થાય છે. ત્યારે જે ત્રીજી સંમિતિ તત્વ ઉત્પન્ન થાય છે. તે પણ કોણાવર્તન અક્ષ જ હોય છે. અને તેમના સાપેક્ષ દિશાઓ યુલર (Euler) વડે દર્શાવેલ થીયરી વડે નક્કી કરી શકાય છે.

તેમની સાપેક્ષ જટીલતાના કારણે યુલર(Euler) ની થીયરીના વિસ્તૃત અભ્યાસમાં જઈશું નહીં.તેમાંથી ઉત્પન્ન થતા પરિણામોનો માત્ર ઉપયોગ કરીશું ધારો કે બે કોણાવર્તન અક્ષો  $X_1$  અને  $X_2$  ( કે જે ક્રમિક  $\alpha = 2\pi/X_1$  અને  $\beta = 2\pi/X_2$  નો કોણીય સ્થાનાંતર(throw) ) ધરાવે છે.ભેગી મળી ત્રીજા અક્ષનો ઉદ્ભવ કરે છે.  $X_3$  કે જે કોણીય સ્થાનાંતર  $\gamma = 2\pi/X_3$  ધરાવે છે. ધારો કે  $X_1$  અને  $X_2$  વચ્ચેનો ખૂણો C,  $X_1$  અને  $X_3$  વચ્ચેનો ખૂણો B,  $X_2$  અને  $X_3$  અને વચ્ચેનો ખૂણો A છે. ( આ ક્રિયા ગ્રુપ થીયરી  $A \bullet B = C$  વડે દર્શાવેલ છે.)આ ત્રણ અક્ષો

“સ્વ સતત ગણ” ત્યારે જ ધરાવશે કે જ્યારે  $A, B, C, \alpha, \beta$  અને  $\gamma$  નીચેના સંબંધોનું પાલન કરશે.

$$\cos A = \frac{\cos\left(\frac{\beta}{2}\right) \cos\left(\frac{\gamma}{2}\right) + \cos\left(\frac{\alpha}{2}\right)}{\sin\left(\frac{\beta}{2}\right) \sin\left(\frac{\gamma}{2}\right)}$$

$$\cos B = \frac{\cos\left(\frac{\gamma}{2}\right) \cos\left(\frac{\alpha}{2}\right) + \cos\left(\frac{\beta}{2}\right)}{\sin\left(\frac{\gamma}{2}\right) \sin\left(\frac{\alpha}{2}\right)}$$

$$\cos C = \frac{\cos\left(\frac{\alpha}{2}\right) \cos\left(\frac{\beta}{2}\right) + \cos\left(\frac{\gamma}{2}\right)}{\sin\left(\frac{\alpha}{2}\right) \sin\left(\frac{\beta}{2}\right)}$$

આ સમીકરણોને યુલર ( Euler) ના સમીકરણ વડે ઓળખાય છે. આ સમીકરણોની મદદથી કોણાવર્તનના સંભવિત જોડકાંઓ અને તેમના પરસ્પર દિશાઓ શોધી શકાય છે. એક દાખલો લઈએ. જેમાં 2-ફોલ્ડ અક્ષ બીજી 2-ફોલ્ડ અક્ષ સાથે મળી ત્રીજી 2-ફોલ્ડ અક્ષ ઉત્પન્ન કરે છે. (i.e.  $2 \bullet 2=2$ )

$X_1 = 2$	$\alpha = 180^\circ$	$X_1 X_2 = C$
$X_2 = 2$	$\beta = 180^\circ$	$X_1 X_3 = B$
$X_3 = 2$	$\gamma = 180^\circ$	$X_2 X_3 = A$

$$\cos A = \frac{\cos\left(\frac{180}{2}\right) \cos\left(\frac{180}{2}\right) + \cos\left(\frac{180}{2}\right)}{\sin\left(\frac{180}{2}\right) \sin\left(\frac{180}{2}\right)} = \frac{0+0}{1} = 0 \Rightarrow A = 90^\circ$$

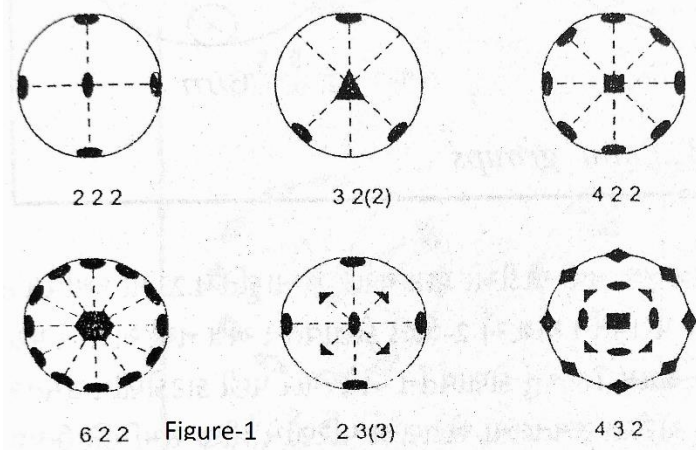
એ જે પ્રમાણે  $B = 90^\circ$  અને  $C = 90^\circ$

તેથી પરસ્પર લંબ ત્રણ 2-ફોલ્ડ અક્ષો હોય તો “સતત ગણ” મેળવી શકાય છે. અને માટે 2 2 2 એ 32 વર્ગોમાંનો એક વર્ગ દર્શાવે છે. ત્યાર પછી હવે  $2 \bullet 2=3$  ને ધ્યાનમાં લઈએ અહીં બે આંતર અક્ષીય ખૂણો નક્કી કરવો પડે તથા 2-ફોલ્ડ અક્ષ અને 3-ફોલ્ડ અક્ષ વચ્ચેનો ખૂણો અને 2-2-ફોલ્ડ અક્ષ વચ્ચેના ખૂણો નક્કી કરવો પડે, જે નીચે મુજબ કરી શકાય.

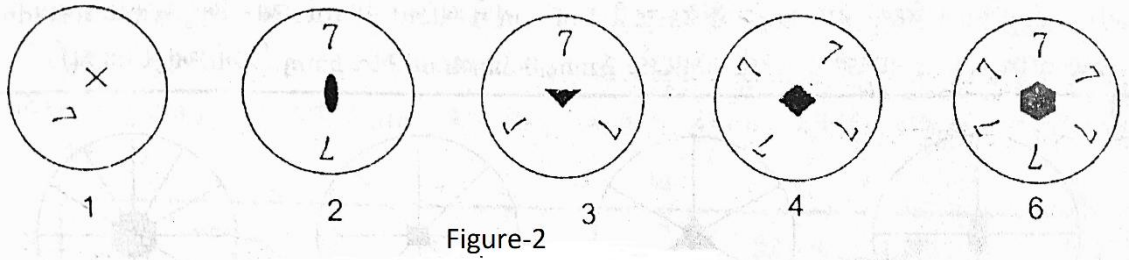
$$\cos B = \frac{\cos\left(\frac{180}{2}\right) \cos\left(\frac{120}{2}\right) + \cos\left(\frac{180}{2}\right)}{\sin\left(\frac{180}{2}\right) \sin\left(\frac{120}{2}\right)} = \frac{0+0}{3/2} = 0 \Rightarrow B = 90^\circ$$

$$\cos C = \frac{\cos\left(\frac{180}{2}\right)\cos\left(\frac{180}{2}\right) + \cos\left(\frac{120}{2}\right)}{\sin\left(\frac{180}{2}\right)\sin\left(\frac{180}{2}\right)} = \cos 60^\circ \Rightarrow C = 60^\circ$$

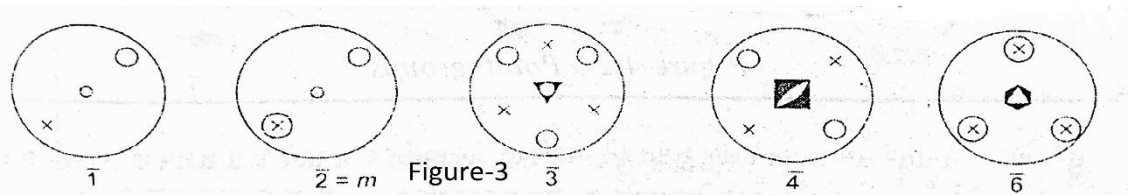
આ પદ્ધતિનો ઉપયોગ કરી, એવું સાબિત શકાય છે કે સામાન્ય બિંદુ આગળ છેદતી માત્ર છ કોણાવર્તન અક્ષોની જોડીઓ શક્ય છે. કે જે 222, 32(2), 422, 23(3), અને 432 વડે દર્શાવી શકાય છે. કે જે આકૃતિ-1માં દર્શાવેલ છે.



આ સિવાય બીજી 5 (અરૂપાંતરણીય) કોણીય અક્ષો પાંચ સમૂહો બનાવે છે. 1, 2, 3, 4, અને 6. જે નીચે આકૃતિ-2માં દર્શાવેલ છે.



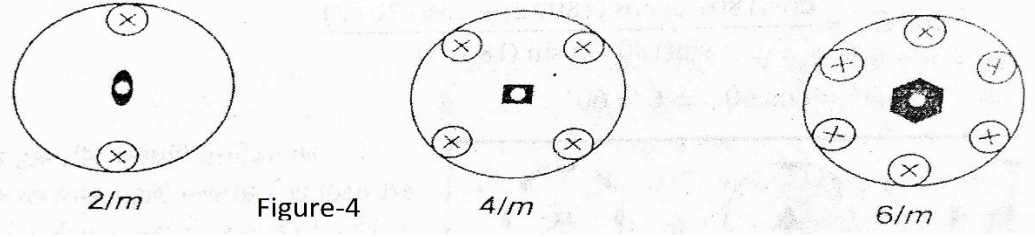
પ્રત્યેક પાંચ અવ્યવસ્થિત કોણીય અક્ષ એક બિંદુ સમૂહ ધરાવે છે. કે જે  $\bar{1}, \bar{2} = m, \bar{3}, \bar{4}$  અને  $\bar{6}$  વડે દર્શાવી શકાય છે. જે નીચે આકૃતિ-3માં દર્શાવેલ છે.



હવે આપણે વ્યવસ્થિત કોણાવર્તન અને અવ્યવસ્થિત કોણાવર્તનની જોડીઓનો વિચાર કરીશું. પ્રથમ ક્ષણે અરીસા સમતલને અક્ષથી લંબ રાખી અરીસા સમતલને વ્યવસ્થિત કોણાવર્તન અક્ષ સાથે જોડી શકાય કે જે 5 બિંદુ સમૂહ ઉત્પન્ન કરે છે. જે નીચે મુજબ છે.

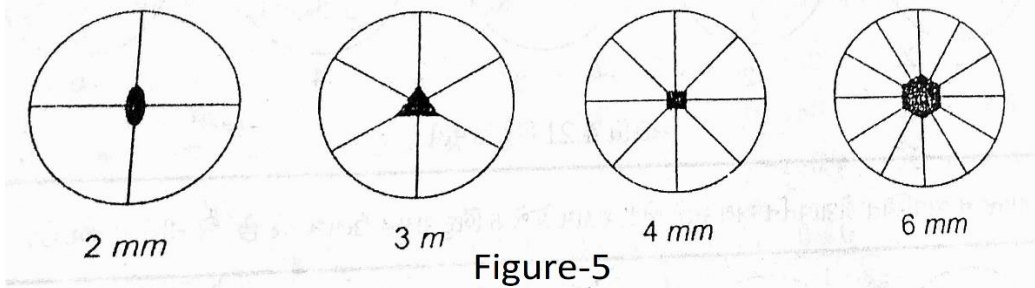
$$\frac{1}{m} = m = \bar{2}, \frac{2}{m}; \frac{3}{m} = \bar{6}, \frac{4}{m} \text{ અને } \frac{6}{m} \text{ છે.}$$

જ્યારે આ  $\bar{2}$  અને  $\bar{6}$  પહેલેથી ધ્યાનમાં લીધેલ હોય તો માત્ર ત્રણ નવી જોડીઓ પ્રાપ્ત થશે. જે આકૃતિ-4માં દર્શાવેલ છે.



અહીં એ નોંધનીય છે કે  $\bar{2}$  i.e. 2-ફોલ્ડ કોણાવર્તન-પરાવર્તન અક્ષ એ 2-ફોલ્ડ કોણાવર્તન અક્ષ નથી અને એ પરાવર્તન સમતલ પણ નથી. તે બંને ક્રિયાઓનું સંકર મિશ્રણ દર્શાવે છે. પ્રથમ  $180^\circ$  નું કોણાવર્તન અને ત્યાર પછી કાટકોણીય સમતલ દ્વારા પરાવર્તન. આકૃતિ-4 માં વ્યવસ્થિત કોણાવર્તન અને લંબ અરીસા સમતલના જોડાણના પરિણામે ત્રીજી સમમિતિ ઉત્પન્ન થાય છે. જે વ્યસ્ત કેન્દ્ર વડે દર્શાવેલ છે.

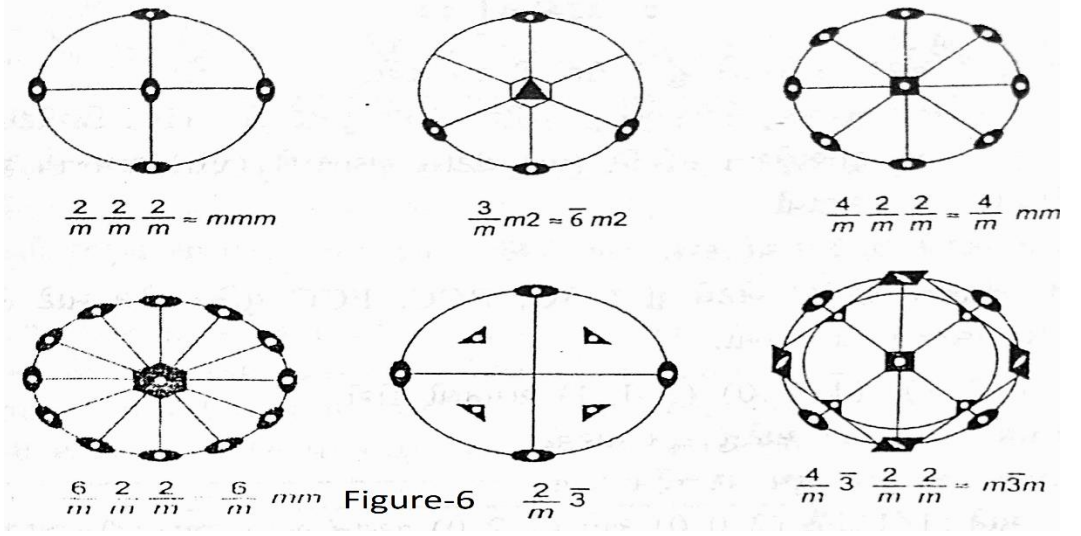
હવે અરીસા સમતલને વ્યવસ્થિત કોણાવર્તન અક્ષને સમાંતર મૂકી શકાય છે. આ કિસ્સામાં જે ત્રીજી સમમિતિ ઉત્પન્ન થાય છે તે બીજો અરીસા સમતલ છે કે જે કોણાવર્તન અક્ષને સમાંતર છે. અને અરીસા સમતલો વચ્ચેનો ખૂણો કોણાવર્તન ખૂણાના ઘક્કાના (throw) અડધા ભાગ જેટલો હોય છે. સાહજિક જોડી  $1m=m$  ને બાકાત રાખતાં ચાર બિંદુ સમૂહો કોણાવર્તન અક્ષને પરાવર્તન સમતલને સમાંતર રાખવાથી મેળવી શકાય છે.  $2mm$ ,  $3mm$ ,  $4mm$  અને  $6mm$ . ( જુઓ આકૃતિ-5)



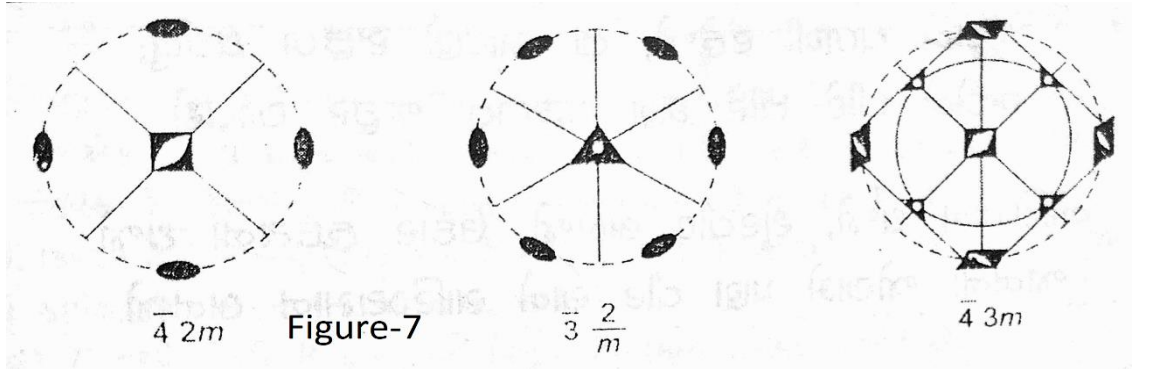
હવે આગળ સમાંતર સમતલ અને લંબ સમતલને વ્યવસ્થિત કોણાવર્તન અક્ષ જોડી શકાય છે. અહીં બંને સમતલો એકબીજાને કાટખૂણે છેદે છે. માટે 2-ફોલ્ડ અક્ષ તેમના છેદ પર ઉત્પન્ન થાય છે. આ પ્રકારના બે સમતલો અને કોણાવર્તન અક્ષના જોડકાંને બિંદુ સમૂહો સાથે જોડી આકૃતિ-6માં દર્શાવ્યા પ્રમાણે બતાવી શકાય છે.

$$\frac{2}{m} \frac{2}{m} \frac{2}{m} = mm; \frac{3}{m} m^2 \quad \frac{4}{m} \frac{2}{m} \frac{2}{m} = \frac{4}{m} mm;$$

$$\frac{6}{m} \frac{2}{m} \frac{2}{m} = \frac{6}{m} mm; \quad \frac{2}{m} \bar{3} \text{ અને } \frac{4}{m} \bar{3} \frac{2}{m}$$



આ બધા બિંદુ સમૂહો ( અપવાદ  $\frac{3}{m} m2$  ) અરીસા સમતલને બેકી -ફોલ્ડ અક્ષ લંબ ધરાવે છે. અને માટે વ્યસ્ત કેન્દ્ર ધરાવે છે. હવે છેવટે આપણે અવ્યવસ્થિત અક્ષો અને વ્યવસ્થિત અક્ષો વચ્ચેની જોડીઓ વિચારીએ. જે ત્રણ બિંદુ સમૂહો ઉત્પન્ન કરે છે. જે  $\bar{4} 2m$ ,  $\bar{3} \frac{2}{m}$  અને  $\bar{4} 3m$  (જુઓ આકૃતિ-7) વડે દર્શાવી શકાય છે. આમ, કુલ મળી 32 બિંદુ સમૂહો વર્ગીકૃત કરી શકાય છે.



દાખલા(Example) :

1. KCl સફટીકની આણ્વિક વજન 74.45 અને ઓરડાના તાપમાને ઘનતા  $1.98 \text{ g/cm}^3$  છે. તો નીચેની વિગતો મેળવો.

(i) બે ક્રમિક અણુઓ વચ્ચેનું અંતર(લેટીસ અચળાંક)

(ii) નીચેના સમતલો વચ્ચેનો અંતરાલ



(a) { 1 0 0 }, (b) { 1 1 0 }, (c) { 1 1 1 }

(iii) બે સમાન પ્રકારના અણુઓ વચ્ચેનું અંતર

(iv) પ્રથમ નિકટતમ પાડોશી અણુ અને દ્વિતીય નિકટતમ પાડોશી અણુ અંતર

$$\begin{aligned} \text{ઉકેલ : (i) KCl અણુનું દળ} &= 74.45 \frac{\text{ગ્રામ}}{\text{અણુ}} \times \frac{1 \text{ મોલ}}{n a} \\ &= 74.45 \frac{1}{6.023 \times 10^{23}} g = 12.37 \times 10^{23} g \end{aligned}$$

$$\text{હવે ઘનતા} = \frac{\text{KCl અણુઓની સંખ્યા}}{\text{એકમ કદ}}$$

$$= \frac{1.98}{\text{સે.મી}^3} \text{ ગ્રામ.} \times \frac{1}{12.37 \times 10^{-27} \text{ ગ્રામ}} = 1.6 \times 10^{22} \text{ અણુઓ / સે.મી}^3$$

KCl અણુ દ્વિ-આણ્વિક છે માટે

$$\frac{\text{અણુઓની સંખ્યા}}{\text{એકમ કદ}} = 2 \times 1.6 \times 10^{22} / \text{સે.મી}^3 = 3.2 \times 10^{22} \frac{\text{અણુઓ}}{\text{સે.મી}^3}$$

જો  $a =$  બે અણુઓ વચ્ચેનું અંતર હોય તો અને જો સીમાવર્તીય અણુઓની સંખ્યા (પ્રતિ સે.મી<sup>3</sup>)  $n$  હોય તો,

$$\text{એકમ ઘનનું કદ} = (n a)^3 = n^3 a^3$$

જ્યાં  $n^3$  એ એકમ કદમાં રહેલા અણુઓ દર્શાવે છે.

$$\therefore n^3 = 3.2 \times 10^{22} = 3.2 \times 10^{22} \times a^3 = 1$$

$$\therefore a^3 = \frac{1 \times \text{cm}^3}{3.2 \times 10^{22}} \Rightarrow a = 3.15 \times 10^{-8} \text{ cm}$$

$$\therefore \text{લેટીસ અચળાંક} = 3.15 \text{ \AA}$$

$$(ii) d_{hkl} = \frac{1}{\sqrt{\left(\frac{h}{a}\right)^2 + \left(\frac{k}{b}\right)^2 + \left(\frac{l}{c}\right)^2}}$$

જ્યાં  $hkl$  મીલર અંકો દર્શાવે છે. જ્યારે  $a, b, c$  એ અભાજ્ય રૂપાંતરણ સદિશોની લંબાઈ દર્શાવે છે.

KCl માટે  $a = b = c \approx a$  (લેટીસ અચળાંક)

$$d_{100} = \frac{1}{\sqrt{(1/a)^2 + 0 + 0}} = 3.15 \text{ \AA}$$

$$d_{110} = \frac{1}{\sqrt{(1/a)^2 + (1/a)^2 + 0}} = \frac{a}{\sqrt{2}} = 2.23 \text{ \AA}$$

$$d_{111} = \frac{1}{\sqrt{(1/a)^2 + (1/a)^2 + (1/a)^2}} = \frac{a}{\sqrt{3}} = 1.82 \text{ \AA}$$

(iii) બે સમાન અણુઓ વચ્ચેનું અંતર  $= 2a = 2 \times 3.15 \text{ \AA} = 6.3 \text{ \AA}$



(iv) KCl સ્ફટિક FCC પ્રકારનો બ્રેવાઇલેટીસ ધરાવે છે.

$$\therefore \text{પ્રથમ નિકટતમ અંતર} = \sqrt{\left(\frac{a}{2}\right)^2 + \left(\frac{a}{2}\right)^2} = \frac{a}{2}$$

$$= 3.15/2 = 1.575 \text{ \AA}$$

અને દ્વિતીય નિકટતમ પાડોશી અંતર  $a = 3.15 \text{ \AA}$

2. મિલર અંકો (1 1 0) વચ્ચેનું અંતર  $2.86 \text{ \AA}$  તો સાદા ઘન માટે લેટીસ અચળાંક શોધો.

ઉકેલ : મિલર અંકો  $(hkl) = (110)$

મિલર અંકો વચ્ચેનું અંતર  $d = 2.86 \text{ \AA}$

$$d = \frac{a}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}}$$

$$a = d \times \sqrt{h^2 + k^2 + l^2}$$

$$= 2.86 \times 10^{-10} \times \sqrt{1^2 + 1^2 + 0^2}$$

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

3. સાદા ઘન માટે  $d_{101} : d_{100} : d_{001} :: \frac{a}{\sqrt{2}} : \frac{a}{\sqrt{1}} : \frac{a}{\sqrt{1}}$  સાબિત કરો.

ઉકેલ અગાઉ ના સૂત્ર પરથી  $d = \frac{a}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}}$

$$d_{101} = \frac{a}{\sqrt{1^2 + 0^2 + 1^2}} = \frac{a}{\sqrt{2}}$$

$$d_{100} = \frac{a}{\sqrt{1^2 + 0^2 + 0^2}} = \frac{a}{\sqrt{1}}$$

$$d_{001} = \frac{a}{\sqrt{0^2 + 0^2 + 1^2}} = \frac{a}{\sqrt{1}}$$

$$\text{માટે } d_{101} : d_{100} : d_{001} :: \frac{a}{\sqrt{2}} : \frac{a}{\sqrt{1}} : \frac{a}{\sqrt{1}}$$

4. કોઈ ઉદગમબિંદુમાંથી ઘરીને અનુલક્ષીને બિંદુના યામ (1) ( 4 0 0 ) ( 0 1 0 ) અને ( 0 0 2 ) તથા (2) ( 3 0 0 ) ( 0 2 0 ) અને ( 0 0 2 ) છે તો તેમના મિલર અંકો શોધો.

ઉકેલ: (1) ઉદગમબિંદુથી કોઈ બિંદુના યામ (4 0 0 ) ( 0 1 0 ) અને ( 0 0 2 ) છે. એટલે તેના સમતલનું અંતરછેદ (4 1 2 ) છે.

તેનો વ્યસ્ત  $\left(\frac{1}{4}, \frac{1}{1}, \frac{1}{2}\right)$  થશે.

વ્યસ્તના અંકોનો લ.સા.અ. 4 થશે. તેથી ( 4 1 2 ) સમતલને દર્શાવતા મિલર અંકો  $\frac{1}{4} \times 4 = 1$ ,  $\frac{1}{1} \times 4 = 4$ ,  $\frac{1}{2} \times 4 = 2$  એટલે કે (142) થશે.

(2) ( 3 0 0 ), ( 0 2 0 ), ( 0 0 2 ) યામ માટે સમતલ અંતરછેદ (3 2 2 ) તેનો વ્યુક્ત  $\left(\frac{1}{3}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right)$  આથી લ.સા.અ. 6. તેથી મિલર અંકો  $\frac{1}{3} \times 6 = 2$ ,  $\frac{1}{2} \times 6 = 3$ , (233) થશે.

5. જે સમતલના  $x, y, z$  અક્ષો પરના અંતરછેદો  $(\infty, 1, 1)$  અને  $(2, 3, 4)$  હોય તો તેમના મિલર અંકો શોધો.

(1)  $(\infty, 1, 1)$  માટે

તેમના વ્યસ્ત  $\left(\frac{1}{\infty}, \frac{1}{1}, \frac{1}{1}\right) = \left(0, \frac{1}{1}, \frac{1}{1}\right)$  થશે તો તેમનો લ.સા.અ. પણ 1 થશે તેથી તેમના મિલર અંકો  $= 0 \times 1 = 0, 1 \times 1 = 1, 1 \times 1 = 1 = (011)$

(2)  $(2, 3, 4)$  માટે

તેમના વ્યસ્ત  $\left(\frac{1}{2}, \frac{1}{3}, \frac{1}{4}\right)$  થશે.

વ્યસ્ત અંકોનો લ.સા.અ. 12 છે.

$\therefore$  આપેલ અંતરછેદના મિલર અંકો  $= \frac{1}{2} \times 12 = 6, \frac{1}{3} \times 12 = 4, \frac{1}{4} \times 12 = 3$

માટે મિલર અંકો ( 6 4 3 ) થશે.

### સ્વાધ્યાય(Exercise):

૧. સ્ફટિક એટલે શું ? સમજાવો.

૨. વ્યાખ્યા આપો. અવકાશ લેટીસ, બેસીસ, યુનિટ સેલ, પ્રિમીટીવ સેલ, ટ્રાન્સલેશન સંમિતિ, લેટીસ અચળાંકો, સમન્વય સંખ્યા, વિઝનર સીટઝ યુનિટ સેલ અથવા

વિઝનર સીટઝ યુનિટ સેલ સમજાવો.

૩. સ્ફટિકોમાં સંમિતિ તત્વ સમજાવો. અથવા  
સ્ફટિકની સ્થાનાતર સંમિતિ સમજાવો. અથવા  
કોણીય વ્યસ્ત અક્ષ સમજાવો.
૪. બ્રેવાઇસ લેટીસ એટલે શું ? સમજાવો. અથવા  
બ્રેવાઇસ લેટીસના પ્રકારો સવિસ્તર આકૃતિસહ સમજાવો.
૫. પેકિંગ ફેક્શન એટલે શું ? SC, BCC, FCC યુનિટ સેલ માટે તેની ગણતરી કરો.
૬. મિલર અંકો વિશે નોંધ લખો. અથવા  
મિલર અંકોની સમજ આપી તે નક્કી કરવાની રીત વર્ણવો.
૭. આંતર સમતલીય અંતર (d) માટેનું સૂત્ર તારવો. અથવા  
સ્ફટિક સમતલો વચ્ચેના અંતર માટેનું સૂત્ર  

$$d = \frac{1}{\sqrt{\frac{h^2}{a^2} + \frac{k^2}{b^2} + \frac{l^2}{c^2}}}$$
 સાબિત કરો.
૮. NaCl અને CsCl ના બંધારણની આકૃતિ દોરી સમજાવો.
૯. બિંદુ સમૂહો ( પોઇન્ટ ગ્રુપ) વિશે નોંધ લખો.

**MCQ પ્રશ્ન****જવાબ**

૧. સાદા ઘન સ્ફટિકમાં યુનિટ સેલની લાક્ષણિકતાઓ ----- (d)  
(a)  $a = b \neq c$  (b)  $a \neq b = c$  (c)  $a \neq b \neq c$  (d)  $a = b = c$
૨. હેક્ઝાગોનલ સ્ફટિકનું ઉદાહરણ કયું છે? (c)  
(a) NaCl (b) SnO<sub>2</sub> (c) SiO<sub>2</sub> (d) એક પણ નહીં
૩. સાદા ઘન સ્ફટિકમાં અણુઓ સામાન્ય રીતે -----કદ રોકે છે. (c)  
(a) 48% (b) 58% (c) 52% (d) 42%

૪. BCC સ્ફટિકમાં અણુઓ સામાન્ય રીતે -----કદ રોકે છે. (c)  
(a)48% (b) 58% (c) 68% (d) 32%
૫. FCC સ્ફટિકમાં અણુઓ સામાન્ય રીતે -----કદ રોકે છે. (d)  
(a)48% (b) 58% (c) 52% (d) 74%
૬. SC સ્ફટિકમાં સમન્વય સંખ્યા ---- હોય છે. (a)2 (b) 6 (c) 8 (d) (b)  
12
૭. BCC સ્ફટિકમાં સમન્વય સંખ્યા ---- હોય છે.(a)2 (b) 6 (c) 8 (d) (c)  
12
૮. FCC સ્ફટિકમાં સમન્વય સંખ્યા ---- હોય છે.(a)2 (b) 6 (c) 8 (d) (d)  
12
૯. KCl સ્ફટિક કેવા પ્રકારનો બ્રેવિયસ લેટીસ ધરાવે છે? FCC/BCC BCC
૧૦. લેટીસ + બેસીસ = ----- સ્ફટિક
૧૧. કેલ્સાઇટ કેવા પ્રકારનો સ્ફટિક છે ? (c)  
(a)ટેટ્રાગોનલ સ્ફટિક (b)હેકઝાગોનલ સ્ફટિક (c) ટ્રાયગોનલ સ્ફટિક
૧૨. ક્વાર્ટઝ કેવા પ્રકારનો સ્ફટિક છે ? (b)  
(a)ટેટ્રાગોનલ સ્ફટિક (b) હેકઝાગોનલ સ્ફટિક (c) ટ્રાયગોનલ સ્ફટિક
૧૩. હેકઝાગોનલ સ્ફટિકના લેટીસ ખૂણા  $\gamma =$  ---- છે. (c)  
(a)90° (b) 180° (c) 120° (d) 360°
૧૪. ટેટ્રાગોનલ સ્ફટિકનું ઉદાહરણ કયું છે ? (b)  
(a)NaCl (b) SnO<sub>2</sub> (c) SiO<sub>2</sub> (d) એક પણ નહીં
૧૫. બિંદુ સમૂહો માં સંમિતિ તત્વોના -----ગણો હોય છે. (c)  
(a)6 (b) 8 (c) 32 (d) 12

## Chapter-2

### અણુઓની સંશક્તિ અને સ્ફટિક બંધન

#### (Atomic Cohesion and Crystal Binding)

##### 2.1 પ્રસ્તાવના (Introduction):

પ્રકરણ-1 માં થયેલ ચર્ચા મુજબ સ્ફટિકની સંમિતિ અને સ્ફટિકના બંધારણની રચના ઘટક અણુઓ અથવા કણો વચ્ચે લાગતા બંધનબળો પર આધારિત છે. સ્ફટિકના બંધારણના વિશ્લેષણથી એ સાબિત થયું કે રાસાયણિક રીતે પરમાણુઓને બાંધે છે અને જેઓ એક સાથે સ્ફટિકના અણુ તરીકે ભેગા થાય છે. તે દળો વચ્ચે કોઈ ફરક નથી. આ રાસાયણશાસ્ત્રીઓના વિચારોને યોગ્ય રીતે વિસ્તૃત કરીને ભૌતિકશાસ્ત્રીઓએ સ્ફટિકોના બંધનબળોનો અભ્યાસ કર્યો. આ પ્રકરણમાં વિવિધ પ્રકારના સ્ફટિકો બંધનબળોના વર્ણન માટે ની અને અન્ય સંબંધિત ગુણધર્મોની પણ ચર્ચા છે.

##### 2.2 અણુઓની સંશક્તિ (Cohesion of Atoms):

ચોક્કસ અંતરે રહેલા બે અણુઓને ધ્યાનમાં લો. પદાર્થના બંધારણની પ્રબળતા અણુની સંશક્તિ ઉર્જા નામની ભૌતિક રાશિ તરીકે ઓળખાય છે. આ બે અણુઓ વચ્ચે પ્રવર્તતું બળ અથવા બંધનશક્તિ એ તે અણુઓની અંદરના ભાગે વિતરીત ધન વિજભાર અને બહારના ભાગે વિતરીત ઋણ વિજભાર પર આધારિત હોય છે. જ્યારે બંને અણુઓ અનંત અંતરે રહેલા હોય ત્યારે સ્થિતિશક્તિનું મૂલ્ય શૂન્ય થાય છે. પરંતુ જ્યારે બંને અણુઓ ખૂબ જ નજીક કોઈ ચોક્કસ અંતરે લાવવામાં આવે છે, ત્યારે તંત્રની ચોક્કસ સ્થિતિઉર્જાનું મૂલ્ય પ્રાપ્ત થાય છે. જે બંને વચ્ચેના આકર્ષણ અને અપાકર્ષણ બળોને આધારે મળે છે. અણુઓ પોતે આકર્ષણ માટે કાર્ય કરતા હોવાથી સ્થિતિશક્તિ માટે આકર્ષતાનું મૂલ્ય ઋણ મળે છે, જ્યારે અપાકર્ષણના કિસ્સામાં કોઈ બાહ્ય બળ અથવા મદદથી અપાકર્ષિત સ્થિતિશક્તિ માટેનું તેનું મૂલ્ય ધન મળે છે. આ બાબત ત્યારે જ શક્ય બને છે જ્યારે બંને અણુઓ ખૂબ- ખૂબ નજીક આવવાનો સંશક્તિ નો ગુણ ધરાવે છે.

કુલ સ્થિતિઉર્જાનું મૂલ્ય નીચેના સૂત્રથી અપાય છે.

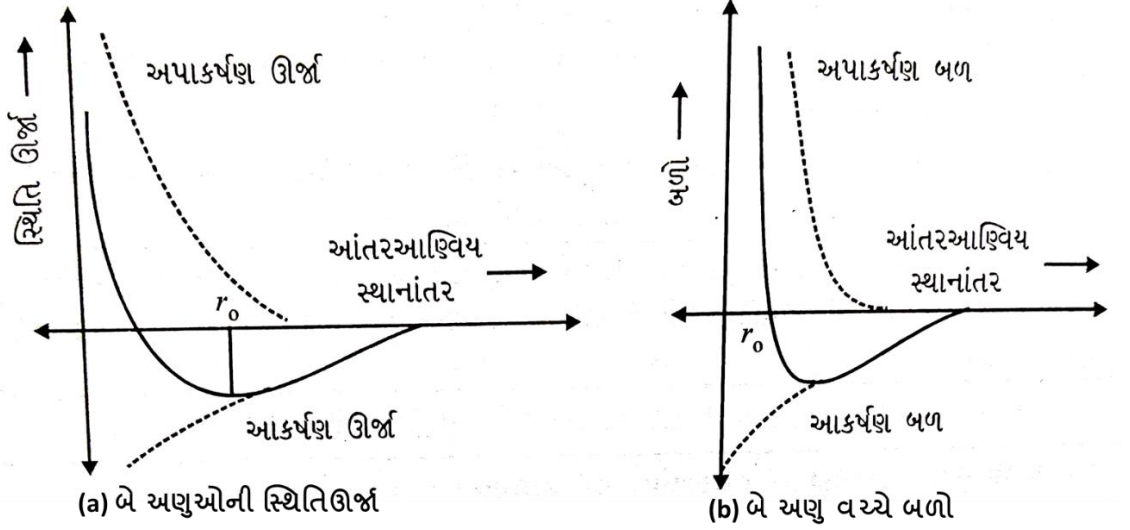
$$U(r) = -\frac{A}{r^n} + \frac{B}{r^m} \text{ -----(1)}$$

જ્યાં  $r$  એ આંતર આણ્વિક અંતર અને  $A$  અને  $B$  અચળાંક છે.

ચોખ્ખું બળ  $F(r)$  વડે દર્શાવતાં,

$$F(r) = -\frac{dU(r)}{dr} = -\frac{nA}{r^{n+1}} + \frac{mB}{r^{m+1}} \text{ -----(2)}$$

પ્રથમ પદ આકર્ષક બળ અને બીજું પદ અપાકર્ષક બળ રજૂ કરે છે. સ્થિતિઊર્જા અને બળ વચ્ચેનો ફેરફાર એ આંતર આણ્વિક અંતરનું વિધેય રજૂ કરે છે. જે આકૃતિ 1(a) માં દર્શાવેલ છે. અંતરે ચોખ્ખું બળ શૂન્ય મળે છે જે આકૃતિ 1(b) માં દર્શાવેલ છે. આ સ્થિતિમાં સ્પષ્ટ છે કે સ્થિતિઊર્જા લઘુત્તમ થાય છે અને ઋણ હોય છે.



અહીં એક બાબત સ્પષ્ટ થાય છે કે જ્યારે બંને અણુઓ ખૂબ જ નજીક આવે છે ત્યારે ટૂંકા અંતરે અપાકર્ષક બળોનું મૂલ્ય આકર્ષક બળોના મૂલ્યની સાપેક્ષ વધુ ઝડપથી વધે છે. ઉપરાંત સ્થાયી સંતુલન અવસ્થામાં તે રાસાયણિક બંધથી બંધાય છે. આ બંધ બનાવવાની પ્રક્રિયામાં અણુઓની શક્તિ ખર્ચાય છે. બીજા શબ્દોમાં કહીએ તો અણુઓની અમુક શક્તિ બંધ સ્વરૂપે સંગ્રહિત થાય છે. તેથી અણુઓ મોટી સંખ્યામાં ગોઠવાઈને ઘન સ્વરૂપે આકાર પામે છે. ત્યારે અણુઓની ઇલેક્ટ્રોન ઊર્જા ઘટતી જોવા મળે છે. જે દર્શાવે છે કે જ્યારે ઘનને ઊર્જા આપતાં તે તૂટીને અંતે અલગ અલગ અણુઓમાં વહેંચાઈ જાય છે, અને બંધ બનવા માટે સંગ્રહિત ઊર્જા અલગ થયેલ અણુમાં વહેંચાય છે. ઘન સ્વરૂપમાં એકત્રિત અણુઓ કેટલી મજબૂતાઈથી પરસ્પર જોડાયેલા રહે છે. તે સંશક્તિ ઊર્જા કે બંધન ઊર્જા તરીકે ઓળખાય છે. જ્યારે ઘન સ્વરૂપમાં નિમ્ન ઇલેક્ટ્રોન ઊર્જા ઉદભવે છે ત્યારે સર્જાયેલા બંધ ખૂબ જ સખત બંધનથી જોડાય છે. જે પ્રાથમિક બંધ તરીકે ઓળખાય છે. નિમ્ન ઇલેક્ટ્રોન ઊર્જા નાના મૂલ્યની હોય ત્યારે આ બંધ નબળા બને છે જે ગૌણ બંધ તરીકે ઓળખાય છે.

સંભાવનાનું ક્વોન્ટમ યંત્રશાસ્ત્રીય અર્થઘટન એ સમજવામાં ઉપયોગી છે કે કેટલાક બંધ મજબૂત અને દિશાસૂચક હોય છે જ્યારે અન્ય નબળા અને નિર્દેશીય હોય છે. સકારાત્મક વિજભાર આયન કોરના સંદર્ભમાં ઊર્જા અને બંધ ઇલેક્ટ્રોનના સ્થાન વિશેની માહિતી પ્રાપ્ત કરી શકાય છે. આ ઇલેક્ટ્રોન માટે સંભાવનાનું ક્વોન્ટમ યંત્રશાસ્ત્રીય અર્થઘટનને રજૂ કરતાં,

$|\psi^2|dV$  (મોટા મૂલ્ય માટે)  $\rightarrow$  ચોક્કસ દિશા  $\rightarrow$  સખત અને મજબૂત બંધની રચના

$|\psi^2|dV$  (નાના મૂલ્ય માટે)  $\rightarrow$  દિશાવિહિન  $\rightarrow$  નબળા બંધની રચના

ગોલીય સંમિતિ અર્થાત બંધિત ઇલેક્ટ્રોનની બધી દિશામાં હોવાની સમાન શક્યતા અને એક અણુ કોઈ પણ દિશાએથી  $4\pi$  ખૂણે બંધ બનાવવા માટે બીજા અણુ નજીક જાય છે. આ પ્રકારનું સખત બંધન ઘાતુઓમાં વધુ જોવા મળે છે. વિવિધ પ્રકારે બનતા આ બંધને બે ભાગમાં વર્ગીકૃત કરી શકાય છે. (1) પ્રાથમિક બંધ(Primary Bond) (2) ગૌણ બંધ(Secondary Bond)

## 2.3 પ્રાથમિક બંધ (Primary Bond):

પ્રાથમિક બંધને ત્રણ પ્રકારમાં વહેંચવામાં આવે છે.

(1) સહસંયોજક બંધ (Covalent Bond)

(2) ધાત્વીય બંધ (Metallic Bond)

(3) આયોનિક બંધ (Ionic Bond)

### 2.3.1 સહસંયોજક બંધ (Covalent Bond)

આ પ્રકારના બંધમાં બે પરમાણુઓના જોડકામાં બે બે ઇલેક્ટ્રોનની પરસ્પર ભાગીદારી જોવા મળે છે. બંને ઇલેક્ટ્રોનની સ્પિનની દિશા વિરુદ્ધમાં હોય છે. ઘન અવસ્થામાં સહસંયોજક બંધ ખૂબ જ સ્થાયી અવસ્થા ધરાવે છે. જે મુખ્યત્વે અઘાત્વિય પરમાણુઓમાં જોવા મળે છે. આવર્તકોષ્ટકના ચોથા અને પાંચમા સમૂહના તત્ત્વોમાં સહસંયોજક પ્રકારનો બંધ બનવાનું વલણ છે. સહસંયોજક બંધ મજબૂત હોય છે. જેમ કે નાઇટ્રોજન, ઓક્સિજન, કાર્બન, ફ્લોરિન અને ક્લોરિન વગેરે. કેટલાક અન્ય તત્ત્વો પણ આ પ્રકારના સહસંયોજક બંધ ની મદદથી સ્ફટિકનું નિર્માણ કરે છે. જેમાં મુખ્યત્વે  $Si, Ge, As$  અને  $Se$  હોય છે. પરંતુ આ પ્રકારના સહસંયોજક બંધમાં અંશતઃ સહસંયોજન જોવા મળે છે. તેથી તે આંશિક સહસંયોજક બંધ કહેવાય છે. જ્યારે દરેક પરમાણુમાં ઓછામાં ઓછી અડધી કક્ષક ભરાયેલી હોય તો સખત-મજબૂત(Strong) સહસંયોજક બંધની રચના થાય છે. આ સ્થિતિમાં નિમ્ન ઇલેક્ટ્રોન ઊર્જા મળે છે. બંધિત દરેક ઇલેક્ટ્રોન એક જ સમયે બે ઇલેક્ટ્રોનની કક્ષકો આપે છે. નિમ્ન ઇલેક્ટ્રોન ઊર્જા એ બંધિત કક્ષકોના ખૂણાને સમપ્રમાણ હોય છે. આ પરથી મજબૂત બંધ હોવાની સાબિતી મળે

છે. પરતુ કક્ષકમાં ઉપરાઉપરી(Overlap) થવાની ઘટનાને પાઉલીનો અપવર્જન સિધ્ધાંત રોકે છે. ઘરા અવસ્થામાં હાઇડ્રોજનની કક્ષકોમાં એક જ ઇલેક્ટ્રોન મળે છે. કક્ષક અડધી ભરાયેલી હોય છે. પાઉલીનો સિધ્ધાંત આ કક્ષકમાં વિરૂધ્ધ સ્પિનવાળો ઇલેક્ટ્રોન રહી શકે તેની સાબિતી આપે છે. તેથી જ્યારે બે હાઇડ્રોજન પરમાણુ ખૂબ જ નજીક લાવવામાં આવે છે ત્યારે તેમાં ઇલેક્ટ્રોન વિજભાર વિતરણ એક બીજાને ઢાંકે છે. અને પરસ્પર વિરૂધ્ધ સ્પિનવાળા બે ઇલેક્ટ્રોન સહસંયોજક બંધથી બંધિત જોવા મળે છે. આ પ્રકારની ઇલેક્ટ્રોન રચનામાં બીજો ઇલેક્ટ્રોન 2s કક્ષામાં વિરૂધ્ધ સ્પિન સાથે જવાની સંભાવનાથી નિમ્ન ઇલેક્ટ્રોન ઊર્જા મળે છે. આ સ્થિતિમાં હાઇડ્રોજન પરમાણુ ધરાસ્થિતિ(Ground State) ધરાવે છે.

અપાકર્ષણબળની અસર એ પાઉલીના બળ તરીકે મળે છે. જે વાયુરૂપ ધનમાં સારી રીતે જોવા મળે છે. જેમાં પરમાણુઓની કક્ષકો પૂર્ણ ભરાયેલી જોવા મળે છે. આ પરિણામ  $Cl_2(2A^0)$  જેવા સહસંયોજક બંધનવાળા પરમાણુમાં બંધ લંબાઇની તુલનામાં મોટા આંતરઆણ્વિક અંતર ( $3.76A^0$  હવામાં)માં પરિણમે છે. તેને પૂર્ણ કરવા માટે ક્લોરિન ( $3p^5$ )ના બહારના શેલમાં એક ઇલેક્ટ્રોનની ઉણપ છે. આને કારણે ક્લોરિન અણુની બાહ્ય ભ્રમણકક્ષામાં ખામીના ઇલેક્ટ્રોનની શોધમાં પડોશી ક્લોરિન અણુની સાથે ઉપરાઉપરી(overlap) થવાનું વલણ રહે છે. આ સ્થિતિ સહસંયોજક બંધને આભારી છે. આ સહસંયોજક બંધ પૂર્ણ ભરાયેલ બંધ (saturable bond) તરીકે પણ ઓળખાય છે.

આવર્તકોષ્ટકના IV સમૂહના કેટલાક ચોક્કસ તત્ત્વો (C, Si, Ge and grey Sn) વિના ઉપરોક્ત સહસંયોજક બંધની ચર્ચા અધૂરી છે. જે હીરો ની રચના માટે ખૂબજ સહાયક તત્ત્વો છે. હીરાની સ્ફટિકીય રચના માટે તેમનું મહત્વનું પ્રદાન છે. જે આકૃતિમાં દર્શાવેલ છે. જેમાં દરેક પરમાણુ તેના ચાર પાડોશી પરમાણુઓ સાથે ચાર સહસંયોજક બંધ બનાવે છે. આ બંધ ખૂબ જ સૂચિત છે અને તે તાકાત અને સખ્તાઇ પૂરી પાડે છે. કટીંગ ટૂલ્સ બનાવવા માટે હીરાનો ઉપયોગ ખૂબ જ થાય છે. ઉપરાંત સહસંયોજક બંધની દિશાકીય પ્રકૃતિ, બંધ પેકિંગને નકારી કાઢે છે અને સહસંયોજક બંધાયેલા સ્ફટિકોમાં ખાલીપણું વધારે છે. ઉદાહરણ તરીકે અણુઓ દ્વારા રોકાયેલ ડાયમંડ સ્ફટિકનું કદ અપૂર્ણાંક માત્ર 0.34 છે જે નજીકના ભરેલા FCC અને HCP બંધારણના મૂલ્યનો 46 ટકા છે. આ હકીકતને ધ્યાનમાં રાખીને ડાયમંડ લેટિસને ખાલી લેટિસ(empty lattice) કહેવાય છે.

[ખાસ કરીને આવર્તકોષ્ટકના ચોથા અને પાંચમા સમૂહના તત્ત્વોમાં સહસંયોજક પ્રકારનું બંધ બનાવવાનું વલણ છે. સહસંયોજક બંધ મજબૂત હોય છે જેનું ઉદાહરણ હીરો છે. સહસંયોજક બંધ બે – વિદ્યુત તટસ્થ પરમાણુઓ વચ્ચે રચાય છે. સહસંયોજક બંધને દિશીય ગુણધર્મો છે. બે પરમાણુઓ વચ્ચેના ભાગમાં ઇલેક્ટ્રોનનું જોડકું સ્થિત થતાં સહસંયોજક બંધ રચાય છે. કાર્બનમાં રચાતા સહસંયોજક બંધનો વિચાર કરીએ. કાર્બન પરમાણુની ઇલેક્ટ્રોનની સંરચના



$1s^2 2s^2 2p^2$  છે હવે જ્યારે બે કાર્બન પરમાણુઓ નજીક આવે છે ત્યારે તે દરેક પરમાણુમાં  $1s^2 2s^2 2p^3$  બને છે. આમ દરેક પરમાણુ પર એક કક્ષક અને ત્રણ  $p$  કક્ષકો હોય છે. અહીં  $sp^3$  સંકરણ આકાર લે છે. અને તેથી ચાર સંકર કક્ષકો તૈયાર થાય છે. ]

### 2.3.2 ધાતુ બંધ (The Metallic Bond):

ધાતુઓના આધુનિક સિદ્ધાંતમાં વેલેન્સ ઇલેક્ટ્રોન, સંબંધિત પિતૃ પરમાણુઓ સાથે સહેલાઈથી બંધાયેલા હોય છે. તે ધાતુના બનેલા અણુઓના આખા ગુપને અનુરૂપ તરીકે ગણવામાં આવે છે. વેલેન્સ ઇલેક્ટ્રોન સામાન્ય રીતે ધાતુઓમાં એક કે વધુ જોડીના પરમાણુમાં મુક્ત ઇલેક્ટ્રોન, તે પરમાણુના સમગ્ર કદમાં જવા મુક્ત હોય છે. ધાતુ એ ધન ધાતુ આયનોનું સંયોજિત ચિત્ર છે. જે મુક્ત ઇલેક્ટ્રોન વાયુરૂપ હોય છે. ધાતુ આયનો અને ઇલેક્ટ્રોન ગેસ (વાયુ) વચ્ચેના મજબૂત આકર્ષણથી પ્રભાવી બંધન ઉર્જાને વેગ મળે છે. મુક્ત ઇલેક્ટ્રોન ગેસ મજબૂતાઈ કરવા માટે જવાબદાર છે. મુક્ત ઇલેક્ટ્રોન ગેસનો અભિગમ આ પ્રકારની રચનાની સફળતા માટે અસરકારક ભૂમિકા ભજવે છે અને ધાતુના મોટા ભાગના ગુણધર્મો જેવા કે ઉચ્ચ વિદ્યુતીય અને ઉષ્મીય વાહકતા, ઉચ્ચ પરાવર્તકતા અને ક્ષમતા (કેપેસિટી)ની વ્યવસ્થિત સમજ આપે છે. ધાતુના સંદર્ભમાં મુક્ત ઇલેક્ટ્રોનની ગતિને ઇલેક્ટ્રોન વાહક કહે છે. જે સાથી ઇલેક્ટ્રોન સહિતના અન્ય કણોની હાજરીને કારણે આ સંપૂર્ણ ચિયરી આ અસરની હાજરી લે છે જે સામાન્ય રીતે ધન પદાર્થોના કેટલાક નાટકીય ગુણધર્મો (દા.ત. સુપર કંડક્ટીવીટી) ને સમજાવવામાં નિર્ણાયક સાબિત થાય છે.

ધાતુ પદાર્થનું બંધારણ જોતાં તેમાં તત્વના પરમાણુના વેલેન્સ ઇલેક્ટ્રોન પિતૃ પરમાણુઓથી છૂટા થઈ જાય છે. અને તેઓ ધન આયનો તથા બાકીના ઇલેક્ટ્રોનની અસર નીચે ગતિ કરે છે.

**ધાત્વીય સ્ફટિકની ઉર્જા = મુક્ત ઇલેક્ટ્રોનની ઉર્જા + આયનો વચ્ચેની કુલ ઉર્જા + ઇલેક્ટ્રોન અને આયનની આંતરિક ઉર્જા.**

ધાત્વીય બંધમાં ઓછી મજબૂતાઈથી બંધિત ઇલેક્ટ્રોન પણ હોય છે. વળી, આ બંધ માટે મોટી સંખ્યામાં સંભવિત અભિગમ મળે છે. બીજા શબ્દોમાં આ પ્રકારના બંધ નબળા બંધિત અને અદિશાકીય હોય છે. આવા બંધની મૂળભૂત લાક્ષણિકતા એ છે કે તે મોટી સંખ્યામાં પડોશી ઇલેક્ટ્રોનથી બંધાઈને સ્ફટિકીય રચના બનાવે છે. જે HCP, FCC અને BCC જેવી રચનાઓ સાથે સહમત હોવાની સાબિતી છે. બધી જ રચનાઓ પૈકી ધાત્વીય બંધ પૂર્ણ નથી. દા.ત. લીથીયમની BCC રચના જેમાં દરેક બંધમાં માત્ર  $\frac{1}{4}$  મા ભાગના ઇલેક્ટ્રોન છે. જેથી સૌથી બહારની  $3s^1$  કક્ષક 8 બંધ ધરાવે છે. વળી આ રચનામાં ધનમાં ખૂણા પર પરમાણુ હોય છે. ધાતુનું બંધન આયનીય પ્રકારનાં બંધન કરતાં ઇલેક્ટ્રોન- જોડ અથવા સહસંયોજક બંધ સાથે વધુ નજીકનો સંબંધ ધરાવે છે.

### 2.3.3 આયોનીક બંધ (The Ionic Bond):

આયોનીક બંધની રચના ઘન અને ઋણ વચ્ચેના ઇલેક્ટ્રોસ્ટેટિક્સ આકર્ષણ પર આધારિત છે કે જે મુક્ત અણુઓમાંથી ઇલેક્ટ્રોનના નુકશાન અથવા લાભ દ્વારા મેળવવામાં આવે છે. આયોનીક બંધ ક્ષારના બંધન માટે જવાબદાર છે જે પર સ્થિત તત્ત્વોના સંયોજનોનો સમાવેશ કરે છે. આર્વત કોષ્ટકની જમણી અને ડાબી બાજુઓ, આલ્કલીહેલાઇડ ( $LiF, NaCl, RbI, CsBr$ ) આવી લાક્ષણિકતાઓ ધરાવે છે  $Cu, Ag, Au$  ના હેલાઇડ તથા  $CdS, InSb, ZnTe$  જેવા કેટલાક દ્રવ્યોમાં આયોનીક બંધ સારા પ્રમાણમાં હોય છે. ક્ષાર આલ્કલી અને હેલાઇડ અણુઓની ઇલેક્ટ્રોનિક્સ રૂપરેખાઓ લગભગ બંધ શેલ છે. આ રૂપરેખાની બંધની રચના એ સરળતા દ્વારા કરવામાં આવે છે કે જેની સાથે આલ્કલી એક અણુ ગુમાવે છે. ઇલેક્ટ્રોન અને હેલોજન અણુ બંધ શેલ રૂપરેખા મેળવવા માટે તેને સ્વીકારે છે. બીજી રીતે એમ કહેવાય કે બંધનનું મૂળ આલ્કલી અણુઓની આયનીકરણ ઉર્જા અને ઉચ્ચ ઇલેક્ટ્રોનમાં રહેલું છે. આયોનીક બંધમાં લગભગ 90% બંધન સ્થિત વિદ્યુત આકર્ષણ પ્રકારનું હોય છે. એટલે કે આયોનીક બંધમાં મોટાભાગનું બંધન ઘન આયન અને ઋણ આયનો વચ્ચે ઉદભવતા કુલંબ પ્રકારના આકર્ષણને લીધે હોય છે.

ઉદાહરણ તરીકે  $NaCl$  લઇએ તો  $Na$  ની  $e^-$  સંરચના  $1S^2 2S^2 2P^6 3S^1$  છે જ્યારે  $Cl$  ની સંરચના  $1S^2 2S^2 2P^6 3S^2 3P^5$  છે.  $Cl$  માં કવચ પૂર્ણ કરવા માટે એક  $e^-$  ખૂટે છે જ્યારે  $Na$  માં એક વધારે છે જ્યારે  $Na$  અને  $Cl$  ની અણુની નજીક લાવવામાં આવે છે ત્યારે આયોનીક બંધથી જોડાય છે. નજીક લાવતાં ઘન અને ઋણ આયન બને છે. દરેક આયનની લાક્ષણિકતા એવી હોય છે કે તેથી આજુબાજુ તેની વિરુદ્ધની નિશાનીવાળો આયન શક્ય રીતે આવે.

આયોનીક બંધ સંતૃપ્ત કે ચોક્કસ દિશામાં હોતા નથી. આયોનીક સ્ફટિકો પ્રમાણમાં મજબૂત ઊંચા ગલનબિંદુ તથા નીચા પ્રસરણાંકવાળા હોય છે.

### 2.2.4 મિશ્ર બંધ (Mixed Bonding):

મોટાભાગની ધાતુઓમાં સહસંયોજક બંધની સાથે ઓછા પ્રમાણમાં આયોનીક બંધ હોય છે. દા.ત.  $GaAs, Ge$  અને  $Si$  સંપૂર્ણપણે સહસંયોજક બંધ ધરાવે છે પરંતુ ઘણા તત્ત્વો મિશ્ર લાક્ષણિકતા ધરાવે છે.  $X - Ray$  પ્રકીર્ણન ડેટાનું વિશ્લેષણ કરીને ઘન પદાર્થોની આયોનીકતાનો અભ્યાસ કરી શકાય છે.

### 2.3 ગૌણ બંધ (Secondary Bonds):

ગૌણ બંધ સરળતાથી જુદા પાડી શકાતા નથી. વાન્ડરવાલ અને હાઇડ્રોજન બંધને આ સૂચિમાં મૂકવામાં આવે છે. ઇલેક્ટ્રીક દ્વિધ્રુવ- દ્વિધ્રુવ ક્રિયાપ્રતિક્રિયા આનો આધાર બનાવે છે.

### 2.3.1 વાન્ડરવાલ બંધ (The Van der Waals Bond)

નિષ્ક્રિય વાયુના પરમાણુઓમાં વિદ્યુતભાર વિતરણ સમગ્ર પરમાણુ પર ગોળીય રીતે સંમિત છે એટલે કે ઋણ વિદ્યુતભાર ધરાવતા ઇલેક્ટ્રોનના વિતરણનું કેન્દ્ર ધન વિદ્યુતભારના વિતરણ કેન્દ્રની ઉપર સંપાત થાય છે. પરિણામે પરમાણુ વિદ્યુતભારની દૃષ્ટિએ થોડા સમય માટે તટસ્થ થાય છે. આવી સ્થિતિમાં આવા બે પરમાણુઓ એકબીજા સાથે આંતરક્રિયા કરી શકે નહીં પરંતુ વિદ્યુતભારનું વિતરણ ગોળીય રીતે સંમિતિ ન પણ હોય એટલે કે આ વખતે ધન વિદ્યુતભારનું વિતરણ કેન્દ્ર ઋણ વિદ્યુતભારના વિતરણ કેન્દ્ર પર સંપાત થતું નથી તેના પરિણામે પરમાણુમાં દ્વિધ્રુવી ચાકમાત્રા ઉત્પન્ન થાય છે. આની દિશા ઋણ વિદ્યુતભારથી ધન વિદ્યુતભાર તરફ હોય છે. આ બંને દ્વિધ્રુવો એકબીજાને આકર્ષે છે અને નબળા બંધનું નિર્માણ થાય છે. આ બંધને વાન્ડરવાલ બંધ કહે છે. નબળા હોવા છતાં વાન્ડરવાલ બંધનકર્તા થાય છે. ઇલેક્ટ્રોન ચાર્જ તરીકે વિતરણ સતત વધઘટ કરતું રહે છે. આવા વિદ્યુત દ્વિધ્રુવોને અસ્થિર દ્વિધ્રુવ કહે છે.

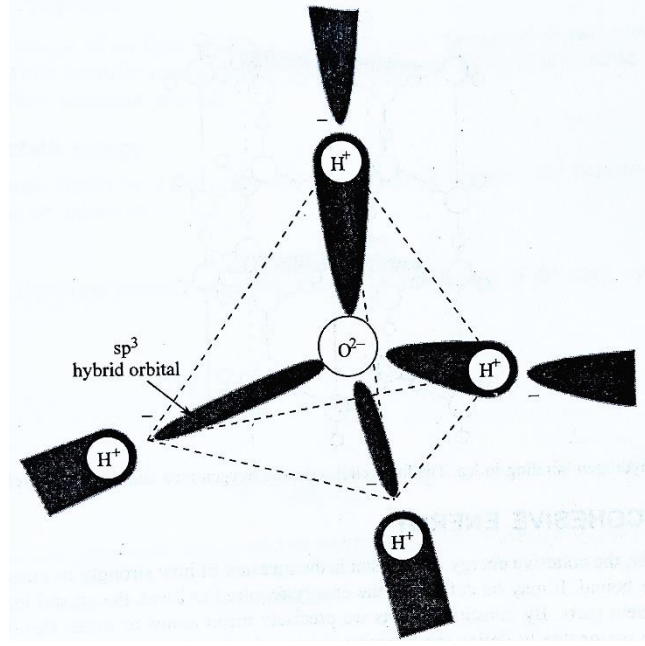
ધારો કે પરમાણુ 1 અને પરમાણુ 2 છે. જેમની ત્રિજ્યા  $r$  છે અને એકબીજાથી  $R$  અંતરે આવેલા છે. અહીં  $R > r$  છે. જો પરમાણુ એકની દ્વિધ્રુવી ચાકમાત્રા  $P_1$  અને પરમાણુ બેની દ્વિધ્રુવી ચાકમાત્રા  $P_2$  હોય અને પરમાણુ એકને કારણે પરમાણુ બે આગળ વિદ્યુતક્ષેત્રની તીવ્રતા  $E$  છે. તેથી પરમાણુ એક અને બે વચ્ચે આંતરક્રિયા ઉર્જા  $\frac{1}{r^6}$  ના પ્રમાણમાં ફેરફાર અનુભવે છે બે અણુ વચ્ચેની વાન્ડરવાલ બંધન ઉર્જા માટે આંતરક્રિયા ઉર્જા જરૂરી છે.

સ્ફટિકોમાં આકર્ષણબળો તેમજ અપાકર્ષણબળો લાગે છે. આ બંને પ્રકારના બળો સંયુક્ત અસર હેઠળ સ્ફટિક સ્થિરતા પ્રાપ્ત કરે છે.

વાન્ડરવાલ બંધ સંતૃપ્ત કે દિશામાં હોતા નથી. FCC બંધારણ ધરાવતા વાયુ સ્ફટિકમય હોય છે. આ પ્રકારના નબળા બંધના સ્ફટિક પારદર્શક, અવાહક અને નીચું ગલનબિંદુ ધરાવતા હોય છે.

### 2.3.2 હાઇડ્રોજન બંધ ( The Hydrogen Bond):

હાઇડ્રોજન બંધને ગૌણ બંધ તરીકે ઓળખવામાં આવે છે. હાઇડ્રોજનમાં એક ઇલેક્ટ્રોન હોવાથી બે હાઇડ્રોજન પરમાણુ સહસંયોજક બંધ રચે છે. મોટા ભાગના સહસંયોજક બંધના અણુઓ કાયમી દ્વિધ્રુવી ચાકમાત્રા ધરાવે છે. અણુ સ્ફટિકમય અવસ્થા પામતો હોય ત્યારે તેના દ્વિધ્રુવીના ધન છેડા સાથે બીજા અણુના દ્વિધ્રુવીને ઋણ છેડો આકર્ષાય છે. પરિણામે આ હાઇડ્રોજન બંધ રચાય છે. આ બંધ વાન્ડરવાલ બંધ કરતાં મજબૂત હોય છે.



દા.ત. પાણીના અણુમાં ઓક્સિજન પોતાની અડધી ભરાયેલી બે  $p$  કક્ષકો સાથે  $H_2$  ના પરમાણુઓના ઇલેક્ટ્રોનની ભાગીદારી કરે છે. આ પરિસ્થિતિ આકૃતિમાં દર્શાવેલ છે. આ રીતે  $O_2$  અને  $H_2$  ની ભાગીદારીમાં રહેલ ઇલે. તેમના મોટાભાગનો સમય બે પરમાણુઓની વચ્ચેના ભાગમાં ગાળે છે. આથી  $O_2$  બાજુનો છેડો વિદ્યુત દ્રિધુવીના ઋણ છેડા તરીકે અને  $H_2$  બાજુનો છેડો વિદ્યુતદ્રિધુવીના ધન છેડા તરીકે વર્તે છે. હવે  $H_2O$  ના અણુઓ જ્યારે એકબીજાની નજીક આવે છે ત્યારે આકૃતિમાં દર્શાવ્યા પ્રમાણે એક અણુનો ધન છેડો બીજા અણુના ઋણ છેડા વડે આકર્ષાય છે અને અણુઓ આકૃતિમાં દર્શાવ્યા પ્રમાણે ગોઠવાઈને દ્રિધુવ બંધ બનાવે છે. જેને હાઇડ્રોજન બંધ કહે છે. આ પ્રકારના બંધ પાણી ઉપરાંત  $HCl$ , ફાર્મિક એસિડ,  $H_2F_2$ ,  $DNA$ , પ્રોટીન વગેરેમાં જોવા મળે છે.

## 2.4 સંશક્તિ ઉર્જા (The Cohesive Energy):

પદાર્થના બંધારણની પ્રબળતાની માત્રા સંશક્તિ ઉર્જા નામની ભૌતિક રાશી વડે જાણી શકાય છે. ધારો કે કોઈ પદાર્થ પરમાણુઓનો બનેલો છે. સામાન્ય રીતે ગણતરી કરવા માટે 1 મોલ પદાર્થ લેવામાં આવે છે. તેથી  $N$  નું મૂલ્ય એવોગ્રેડો અંક  $N_0 = 6.02 \times 10^{23}$  જેટલું લેવાય છે. જ્યારે આ  $N$  પરમાણુઓ તેમની વિદ્યુત તટસ્થતા સ્થિતિમાં તેમજ ઘરાસ્થિતિમાં એકબીજાથી અનંત અંતરે છુટાછુટાં હોય તે વખતની તેમની ઉર્જાઓનો સરવાળો ધારો કે  $E_{free}$  છે. હવે જ્યારે તેઓ સ્થિર ધન પદાર્થની રચના કરે છે ત્યારે તેમની કુલ ઉર્જા  $E_S < E_{free}$  હોય છે. તેથી  $E_S - E_{free}$  ને આપેલા પદાર્થની સંશક્તિ ઉર્જા કહે છે.

આવર્તકોષ્ટકનાં જુદાંજુદાં તત્વોની સંશક્તિ ઉર્જાનો અભ્યાસ દર્શાવે છે કે નિષ્ક્રિય પરમાણુઓ  $[H_e, N_e, A_r, K_r, \text{વગેરે}]$  વડે બનતા ઘન પદાર્થની સંશક્તિ ઉર્જાનાં મૂલ્યો પ્રમાણમાં નાના છે. આલ્કલી ધાતુઓ  $L_i, N_a, K, R_b, C_s$  ની સંશક્તિ ઉર્જાનાં મૂલ્યો વચગાળામાં પડે છે. જ્યારે સંક્રાંતિ ધાતુઓ માટેનાં મૂલ્યો સારા એવા મોટા છે. આ હકીકત તેમનામાં ઉદભવતા બળો વચ્ચે કંઈક તફાવત હોવાનો નિર્દેશ કરે છે. વળી આયોનિક સંયોજનોની સંશક્તિ ઉર્જા પણ પ્રમાણમાં મોટી હોય છે. બીજા સંયોજનમાં (દ.ત. સહસંયોજક સંયોજનો) ની સંશક્તિ ઉર્જાના મૂલ્યો બહુ મોટા નથી. આમ, જુદાજુદા પ્રકારના પદાર્થોમાં ઉદભવતા જુદાજુદા પ્રકારના રાસાયણિક બંધોની સમજૂતી મેળવવી આવશ્યક છે. સ્ફટિકની ઉર્જા જાણવાની માત્રા સંશક્તિ ઉર્જા જ મળે તેવું નથી. ઉર્જાની ગણતરીથી સ્થાયી સ્ફટિક બંધારણ, દબાણ-કદ સંબંધ, સ્થિતિસ્થાપકતાના ગુણધર્મો, તાપમાન સાથેના ફેરફારો વગેરે જાણવા મળે છે.

### 2.4.1 આયોનિક સ્ફટિકો (Ionic Crystals):

આયોનિક સ્ફટિકોમાં સ્થિતિ ઉર્જા બે કારણે મળે છે. 1. સ્થિત વિદ્યુતઉર્જા 2. અપાકર્ષણ ઉર્જા (પાઉલી અપવર્જન સિધ્ધાંત)

#### સ્થિત વિદ્યુતઉર્જા (The Electrostatic Energy):

આયોનિક સ્ફટિકમાં  $N$  પરમાણુઓ છે. આ આયોનિક સ્ફટિકમાં મોટા ભાગનું બંધન ઘન આયન અને ઋણ આયનો વચ્ચે ઉદભવતા કુલંબ પ્રકારના આકર્ષણને લીધે હોય છે. આવા આકર્ષણથી મળતી આંતરીક ઉર્જાને વૈજ્ઞાનિક નામ પરથી મેડેલીંગ ઉર્જા કહે છે. અહીં કુલ ઉર્જા

$$U_e^{(a)} = NU_i \text{ ----- (3)}$$

જ્યાં  $U_i$  = બીજા આયનોની વચ્ચે રહેલા એક આયનની સરેરાશ સ્થિતિ ઉર્જા છે. (potential energy)

$$U_i^{(a)} = \sum_{i=1}^{2N-1} U_{ij} \text{ ----- (4)}$$

$$\text{જ્યાં } U_{ij}^{(a)} = \pm \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{q^2}{|r_{ij}|^2}$$

$$\text{જ્યાં } r_{ij} = r_i - r_j$$

અહીં  $U_{ij}$  સ્થિત વિદ્યુત આંતરક્રિયા ઉર્જા છે. જે બે સરખા વિજભાર  $q$  વચ્ચે મળે છે. આ બંને વિદ્યુતભારોને  $r_i$  અને  $r_j$  સદિશથી દર્શાવે છે. તંત્રમાં એક અણુનું સ્થાન

$$r_{ij} = (in_1 + jn_2 + kn_3)r$$

$$|r_{ij}| = (n_1^2 + n_2^2 + n_3^2)^{\frac{1}{2}}r \text{ ----- (5)}$$

જ્યાં  $n_1, n_2, n_3$  એ  $x, y, z$  દિશામાં  $r$  અંતરે રહેલા અણુઓમાં ગુણાંક અંતરે છે. જો ઘન આયન ઉદગમ બિંદુઓ હોય તો  $(n_1, n_2, n_3)r$  તેમના સ્થાન દર્શાવે છે.

જો  $n_1 + n_2 + n_3$  એકી હોય તો ઋણ આયન

જો  $n_1 + n_2 + n_3$  બેકી હોય તો ઘન આયન

તેથી ઉદગમબિંદુએ રહેલા આયન અને  $r_i$  અંતરે રહેલા બીજા આયન વચ્ચેની કુલબ ઉર્જા

$$U_{ij} = \frac{(-1)^{n_1+n_2+n_3} q^2}{4\pi\epsilon_0 (n_1^2+n_2^2+n_3^2)^{1/2} r} \quad \text{----- (6)}$$

$$\text{અથવા } U_{ij} = \frac{\alpha q^2}{4\pi\epsilon_0 r} \quad \text{----- (7)}$$

જ્યાં  $\alpha$  મેડેલંગ અચળાંક છે.

$$\alpha = \sum_{n_1=0}^{2N-1} \sum_{n_2=0}^{2N-1} \sum_{n_3=0}^{2N-1} (-1)^{n_1+n_2+n_3} (n_1^2 + n_2^2 + n_3^2)^{-\frac{1}{2}}$$

$$(n_1, n_2, n_3) \neq (0, 0, 0)$$

**અપાકર્ષણ ઉર્જા (The repulsive overlap energy):**

આયનોની જે કક્ષક પૂર્ણ ભરાયેલી હોય તેમની વચ્ચે અપાકર્ષણ બળ લાગે છે. તેના કારણે મળતી આંતરક્રિયા ઉર્જા

$$U_{ij}^{(r)} = \lambda_{ij} \exp\left(\frac{-|r_{ij}|}{\rho}\right) \quad \text{----- (8)}$$

જ્યાં  $\lambda_{ij}$  અને  $\rho$  બોર્ન મેયરના પ્રાયલો છે કે જે  $i$  અને  $j$  પરમાણુ પર આધાર રાખે છે. અંતર પર આધારીત નથી આવા અપાકર્ષણને બોર્ન મેયર અપાકર્ષણ કહે છે. ઉપરનું સમીકરણ આયન જોડકા માટેની આંતરક્રિયા ઉર્જા આપે છે. આ અપાકર્ષણ ઉર્જા જો આયનના ઇલેક્ટ્રોન વિજભાર વિતરણમાં નો વિરોધ કર છે. અચળાંક  $\lambda$  અને  $\rho$  તીવ્રતા અને આકર્ષણ વિસ્તારની મર્યાદા આપે છે.  $\lambda$  અને  $\rho$  લેટીસ અચળાંક અને દાબનીયતાના પ્રાયોગીક મૂલ્યો પરથી મેળવી શકાય છે. આકર્ષણથી  $\frac{1}{e}$  મા ભાગનું મૂલ્ય  $r_{ij}$  અંતર થાય ત્યારે કુલ અંતર મળે છે.

તેથી કુલ સ્થિતિ ઉર્જા = આકર્ષણ સ્થિતિ ઉર્જા + અપાકર્ષણ સ્થિતિ ઉર્જા.

$$U_{ij}^{(t)} = U_{ij}^{(a)} + U_{ij}^{(r)}$$

સમી. (6) અને સમી. (8) પરથી,

$$= -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{q^2}{|r_{ij}|} + \lambda_{ij} \exp\left(\frac{-|r_{ij}|}{\rho}\right)$$

$$= -\frac{\alpha q^2}{4\pi\epsilon_0 r} + \lambda_{ij} \exp\left(\frac{-|r_{ij}|}{\rho}\right) \quad \text{----- (9)}$$

$NaCl$  સ્ફટિક માટે સ્થિતિઊર્જા મેળવવામાં પ્રથમ પદ  $\frac{6}{\sqrt{2}}$  વાયુ મળે છે. અહીં પડોશમાં(નજીકમાં) 6 વિરૂધ્ધ વિદ્યુતભાર ધરાવતા આયનો હોય છે. જ્યારે બીજું પદ  $\frac{12}{\sqrt{2}}$  વાળું છે જેમાં તે જ પ્રકારના નજીકમાં અંતરે અણુઓ હોય છે. તેથી  $NaCl$  ની સ્થિતિઊર્જા (potential energy)

$$U = N \left( -\frac{\alpha q^2}{4\pi\epsilon_0 r} + 6\lambda_{+-} \exp\left(\frac{-\sqrt{1}r}{\rho}\right) + 12\lambda_{++} \exp\left(\frac{-\sqrt{2}r}{\rho}\right) + \dots \right) \text{ --- (10)}$$

$\lambda$  ની બાજુમાં નિશાની આયનોની પ્રકારની છે. જો અપાકર્ષણ નજીકના અણુઓ વચ્ચે જ થતું વિચારીએ તો

$$U = N \left( -\frac{\alpha q^2}{4\pi\epsilon_0 r} + z\lambda e^{-r/\rho} \right) \text{ --- (11)}$$

$Z =$  નજીકના અણુઓની સંખ્યા છે. (6 –  $NaCl$  માટે) (સંશક્તિ ઊર્જાના લઘુત્તમ મૂલ્ય માટે)

ઉપરનું સમી. (11) સ્થિતિ ઊર્જાનું લઘુત્તમ મૂલ્ય આપે તે માટે

$$\therefore \frac{dU}{dr} = 0$$

સમી. (11) નું વિકલન કરતાં,

$$\therefore \frac{dU}{dr} = N \left( \frac{\alpha q^2}{4\pi\epsilon_0 r^2} - \frac{z\lambda}{\rho} e^{-r/\rho} \right)_{r=r_0} = 0$$

જ્યાં  $r_0$  સંતુલન સમયે નજીકના અણુનું વચ્ચેનું અંતર

$$\therefore z\lambda e^{-r/\rho} = \frac{\alpha q^2 \rho}{4\pi\epsilon_0 r_0^2} \text{ --- (12)}$$

સમી. (11) અને સમી. (12) પરથી

$$\therefore U_0 = N \left[ \frac{-\alpha q^2}{4\pi\epsilon_0 r_0} + \frac{\alpha q^2 \rho}{4\pi\epsilon_0 r_0^2} \right]$$

$$\therefore U_0 = \frac{-N\alpha q^2}{4\pi\epsilon_0 r_0} \left( 1 - \frac{\rho}{r_0} \right) \text{ --- (13)}$$

સ્ફટિકના એક આયન અણુની સ્થિતિ ઊર્જા

$$\therefore U_{ion} = \frac{-\alpha q^2}{4\pi\epsilon_0 r_0} \left( 1 - \frac{\rho}{r_0} \right) \text{ --- (14)}$$

$NaCl$  માટે જ્યાં  $\alpha = 1.748$ ,  $r_0 = 2.81A^0$ ,  $\rho = \frac{r_0}{g}$  મેડેલંગ અચળાંક છે.  $U_{ion} = -7.97eV$  મળે છે. અહીં એક અણુ બે વખત ગણતરીમાં લેવામાં આવેલ છે. તેથી  $U_{ion} = \frac{-7.97}{2} = -3.99eV$  જે એક આયનનો સ્થિતિ ઊર્જામાં ફાળો છે. જ્યારે આયોનિક સ્ફટિકમાં મૂલ્ય  $7.97eV$  તે લેટિસ ઊર્જા કે જે સંશક્તિ ઊર્જા આયન જોડકાં આપે છે. જે પ્રાયોગિક મૂલ્ય જેટલું છે.

એક અણુની સંશક્તિ ઊર્જા સરળતાથી ગણી શકાય છે.



$Na$  ની આયોનાઇઝેશન સ્થિતિઊર્જા =  $5.14eV$  છે.

$Cl$  ની આયોનાઇઝેશન સ્થિતિઊર્જા =  $-3.61eV$  છે.

$Na^+Cl^-$  આયન જોડકા બને છે ત્યારે ચોખ્ખી ઊર્જા  $5.14 + (-3.91) = 1.53eV$  આનો અર્થ એમ થાય કે એક અણુ  $0.77eV$  ઊર્જામાં ફાળો આપે છે.

એક અણુની સંશક્તિ ઊર્જા =  $-3.99 + 0.77 = -3.22eV$

જે માપન મૂલ્ય  $3.28eV/atom$  જેટલી છે.

## 2.4.2 ઉમદા (નિષ્ક્રિય) વાયુ સ્ફટિકો (Noble Gas Crystals):

નિષ્ક્રિય વાયુના પરમાણુઓ વચ્ચે લાગતું અપાકર્ષણ બળ બે પરમાણુઓ વચ્ચેના અંતર પર આધાર રાખે છે.

ધારોકે નિષ્ક્રિય વાયુના બે પરમાણુઓ વચ્ચેનું અંતર  $r$  હોય તો તેમની વચ્ચેની આંતરક્રિયાથી મળતી સ્થિતિઊર્જા નાચે મુજબ મળે છે.

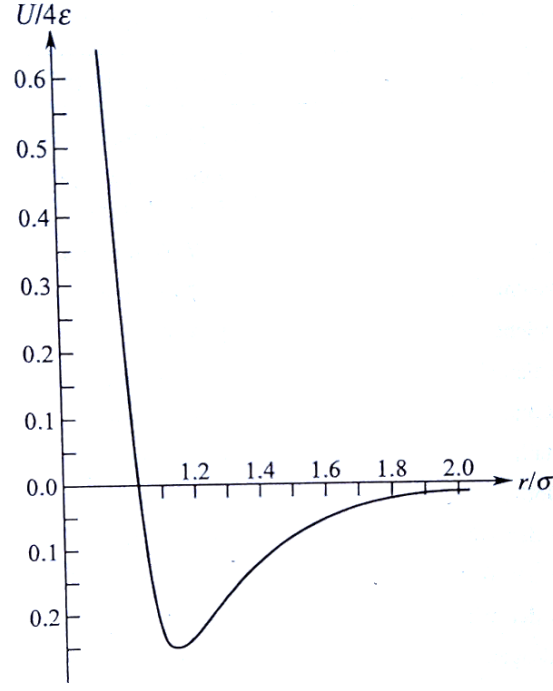
$$\therefore U(r) = -\frac{A}{r^6} + \frac{B}{r^{12}} \quad \text{--- (15)}$$

આને લેનાર્ડ જોન્સ સ્થિતિમાન (Lennard Jones potential) કહે છે. જ્યાં  $A$  અને  $B$  આંતરક્રિયા અચળાંક છે. દૂકા અંતરમાં અપાકર્ષણ બળ આકર્ષન બળ કરતાં વધુ હોય છે. અપાકર્ષણ પદમાં 6 ના ઘાત કરતાં વધારે હોય છે. તેથી સરળતા ખાતર 12નો ઘાત લેતાં  $H_6^3$  અને  $H_6^4$  ના અંદાજ માટે તે ઉત્તમ ઉદાહરણ છે. વાન્ડરવાલ્સ આંતરક્રિયાઓ પદાર્થની ત્રણે અવસ્થામાં જોવા મળે છે. ઘણા સ્ફટિકમાં નબળું આકર્ષણ સંશક્તિ ઊર્જા માટે જવાબદાર નથી જ્યાં તીવ્ર આકર્ષણ ધરાવતા બંધ હોય છે. ઉપરનું સમીકરણ છેલ્લે નીચે મુજબ દર્શાવી શકાય.

$$\therefore U(r) = 4\varepsilon \left[ \left( \frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma}{r} \right)^6 \right]$$

$U(r)$ ની ગણતરી નિરપેક્ષ તાપમાને લીધેલ છે.  $T = 0$  જ્યાં  $\sigma = \left( \frac{B}{A} \right)^{\frac{1}{6}}$  અને  $\varepsilon = \frac{A}{AB}$  અને  $\varepsilon$  અને  $\sigma$  લેનાર્ડ જોન્સ સ્થિતિમાનના પ્રાયલો કહે છે. જેનો સંબંધ દર્શાવતો ગ્રાફ નીચે દર્શાવેલ છે.





પ્રાયલોનું સૈધ્ધાંતિક મૂલ્ય કોઈ ભૌતિક લાક્ષણિકતા માટે મેળવેલ હોત તે વાયુ સ્વરૂપમાં પ્રાયોગિક રીતે મેળવી શકાય છે. તે મૂલ્યોનો ઉપયોગ ઘન અવસ્થામાં કરી શકાતો નથી. જ્યાં ઊંચી ઘનતામાં જોડીના સ્થિતિમાનોના સરવાળા જેટલું અપાકર્ષણ કોરની ત્રિજ્યા આપે છે.

લેટીસ અચળાંકો સ્થિતિઊર્જામાં અગત્યનો ભાગ ભજવે છે. ઘણી લાક્ષણિકતાઓમાં તેનું સારું એવું યોગદાન હોય છે. ચોક્કસ કદ જાળવી રાખવા દબાણની ગણતરી સમયે સંશક્તિ ઊર્જાના લેટીસ અચળાંક સાપેક્ષે ફેરફારનો દર જાણવો જરૂરી છે. કદનો દબાણની સાપેક્ષે અભ્યાસ કરવા માટે દાબનીયતા ગણવી પડે. લેટીસ અચળાંક અને દાબનીયતાના અંદાજથી  $\lambda$  અને  $\rho$  પ્રાયલ મળી શકે. અટોમીક ત્રિજ્યા અને લંબ લંબાઈ સાથે લેટીસ અચળાંક જોડાયેલા હોય છે.

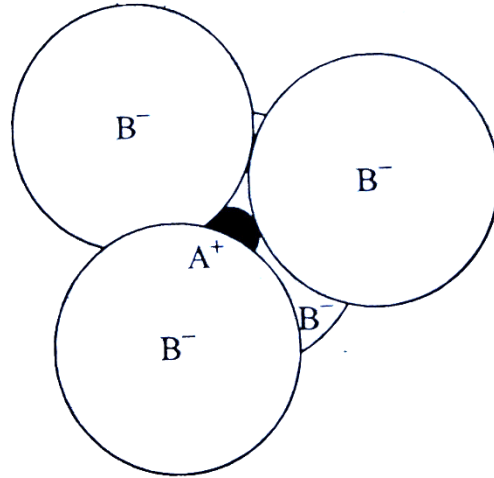
## 2.5 અટોમીક ત્રિજ્યા વિરૂધ્ધ લેટીસ અચળાંક (Atomic Radii VS Lattice Constants):

W. B. Pearson કહ્યું કે આયોનિક ત્રિજ્યા અને એટોમીક ત્રિજ્યા ગુંચવણ ભરેલી છે. તટસ્થ આયનની સરખામણીમાં ઘન આયનની સાઇઝ નાની અને ઋણ આયનની સાઇઝ મોટી હોય છે. દા.ત.  $Na$  અણુની ત્રિજ્યા  $1.86A^{\circ}$  છે. જ્યારે  $Na^{+}$  આયનની ત્રિજ્યા  $0.96A^{\circ}$  છે. છેલ્લી કક્ષામાંથી ( $3S^1$ ) ઇલેક્ટ્રોન ગુમાવ્યા બાદ  $Na^{+}$  આયન મજબૂત બંધનથી જોડાય છે અને સાઇઝ ઘટે છે. જ્યારે  $Cl$  અણુનું વિદ્યુતભાર વિતરણ નિષ્ક્રિય વાયુ  $Ar$  ની જેવું જ હોય છે.  $Cl$  અણુ ઇલેક્ટ્રોન  $Cl^{-}$  મેળવીને આયન બને છે. તેથી તેનું કદ વધે છે.

કોઈ સ્ફટિકના આયનના વિદ્યુતભાર વિતરણ સુધીની ત્રિજ્યાને સ્ફટિકની આયોનિક ત્રિજ્યા કહે છે. મુક્ત આયન ત્રિજ્યાથી જુદી પાડવી જરૂરી છે. ક્વોન્ટમ મીકેનિક્સ અનુસાર મુક્ત આયન

ત્રિજ્યા સંભાવના કંપવિસ્તાર  $|\psi|^2$  થી અપાય છે. જ્યાં મુક્ત હલે. છેલ્લી કક્ષામાં મળવાની સંભાવના મહત્તમ તરંગ વિઘેય  $\psi$  થી દર્શાવાય છે. તરંગ વિઘેય  $\psi$  શ્રોડીન્ઝર સમીકરણનો ઉકેલ છે. અનંત અંતર સીમા શરતો અનુસાર  $|\psi|^2$  અને  $\psi$  તરંગ વિઘેયનું વિકલન ધીમે ધીમે શૂન્ય થાય છે. સ્ફટિક આયનમાં માનાંક અને તરંગ વિઘેયના વિકલનનું સીમા આગળ મૂલ્ય શૂન્ય મળે છે. તે વખતે સ્થિતિમાન કુંલંબ પ્રકારનું નથી.

આ ચર્ચાથી કહી શકાય કે આયોનિક ત્રિજ્યા એક હલે.ના શ્રોડીન્ઝ સમી.ના ઉકેલથી મેળવી શકાય.બીજી પદ્ધતિ અનુસાર બે અણુઓ વચ્ચેનું અંતર બે આયોનિક ત્રિજ્યાનો સરવાળો આપે છે. તે પરથી મેળવી શકાય. આ લાક્ષણિકતાને એડીટીવ નિયમ(Additive rule) કહે છે. વિવર્તન પદ્ધતિથી( પ્રમાણભૂત પદ્ધતિ) પણ લેટીસ અચળાંક મેળવી શકાય છે. જે વિવર્તન ભાતથી મેળવવામાં આવે છે. આના પરિણામો ચોક્કસ મળે છે.જે પદાર્થની ભૌતિક લાક્ષણિકતાઓ આપે છે. જે સ્ફટિકમાં એડીટીવ નિયમથી મેળવેલ ત્રિજ્યા, (આયોનિક) બંધ લંબાઈ અને બે અણુ વચ્ચેની કેન્દ્રની લંબાઈ આપે છે. સ્ફટિક બને તે પહેલાં સફળતાથી મેળવવું પડે છે. પરંતુ આપણે જાણીએ છીએ કે વિદ્યુતભાર વિતરણ દઢ નથી અને દરેક અણુ માટે ગોળીય સંમિતિ નથી જે આપણા અંદાજમાં ત્રુટી આપી શકે છે. તેથી કોઈપણ અંદાજ પહેલાં સ્ફટિકમાં અણુનું સરેરાશ વિદ્યુતભાર વિતરણ લેવું પડે.



આયોનિક ત્રિજ્યાનું જ્ઞાન અણુઓની એક સૂત્રતા અને સ્ફટિકમાં અણુઓની શક્ય ગોઠવણી હોય છે. 4 ફોલ્ડ સ્ફટિકમાં ઘનના ચાર ખૂણા પર  $B^-$  આયન અને કેન્દ્રમાં  $A^+$  આયન છે. બધાજ  $B^-$  આયન  $A^+$  આયનને સ્પર્શ કરે છે. અહીં સંતુલન સમયે ધાર છે. અહીં બે  $B^-$  આયનોની સપાટીએ બીજા સાથે જોડાયેલી છે અને તેમનું કેન્દ્રથી અંતર  $\sqrt{2}a$  છે. જો  $A^+$  અને  $B^-$  વચ્ચે જોડતી રેખા અને બે  $B^-$  આયનને જોડતી રેખા વચ્ચેનો ખૂણો  $\theta$  હોય તો

$$\therefore \cos\theta = \frac{\frac{\sqrt{2}a}{2}}{\frac{\sqrt{3}a}{2}} = \sqrt{\frac{2}{3}}$$

$$\therefore \cos\theta = \frac{r_B}{r_A+r_B} = \sqrt{\frac{2}{3}} = 0.816$$

ઉપરોક્ત મૂલ્ય  $\frac{r_A}{r_B} = 0.225$  મળે.

જે સંતુલને 4 ફોલ્ડ સ્ફટિક બંધારણ માટે ન્યુનતમ મૂલ્ય આપે છે. આ ગણતરી પરથી કહી શકાય કે ફોલ્ડ બંધારણ માટે આયનોની ત્રિજ્યાનો ગુણોતર 0.115 થી 0.225 વચ્ચે હોય છે.

કેટલાક તત્વોના સૈધ્ધાંતિક અને પ્રાયોગિક પરિણામો નીચે મુજબ આપેલ છે. તે પરથી કેટલી સફળતા મળેલ છે. જે જાણી શકાય.

સ્ફટિક	આયન /અણુની ત્રિજ્યા $A^0$	નજીકના અણુ વચ્ચેનું અંતર $d A^0$	$d$ અને $a$ વચ્ચેનો સંબંધ (લેટીસ અચળાંક)	લેટીસ અચળાંક $a A^0$	
				સૈધ્ધાંતિક	પ્રાયોગિક
<i>NaF</i>	$Na^+(0.97)$ $F^-(1.63)$	2.33	$a = 2d$	4.66	4.62
<i>NaCl</i>	$Na^+(0.97)$ $Cl^-(1.81)$	2.78	$a = 2d$	5.56	5.63
<i>Diamond</i>	$C(0.72)$	1.54	$a = \frac{4d}{\sqrt{3}}$	3.56	3.56
<i>Ne</i>	$Ne(1.58)$	3.16	$a = \sqrt{2d}$	4.47	4.46

## 2.6 સ્ફટિકોના સ્થિતિસ્થાપકતા અચળાંકો (Elastic Constants of Crystals):

ધન પદાર્થ સંપૂર્ણ રીતે દઢ હોતા નથી. આવા પદાર્થોને કોઈ બળ આપવાથી તેના કદ અને આકારમાં ફેરફાર થઈ શકે છે. હવે જો આ ફેરફાર મોટો ન હોય તો જ્યારે પદાર્થ પર લગાડેલ બાહ્ય બળ દૂર કરીએ ત્યારે તે પદાર્થ મુળ સ્થિતિમાં આવી જાય છે. પદાર્થના આ ગુણધર્મને સ્થિતિસ્થાપકતા કહે છે. આ ગુણધર્મ લગભગ બધા જ ધન પદાર્થો ધરાવે છે. સ્ફટિક માટે સ્થિતિસ્થાપક અચળાંક શોધવા માટે સ્ફટિક પરમાણુની આવર્ત ગોઠવણી ન ગણતાં એક સતત માધ્યમ તરીકે લઈશું. હવે સ્ફટિક પર લાગતા બળોથી ઉદભવતી વિકૃતિઓ જે કદ કે આકાર અથવા બંને હોય તેવો વિચાર કરીએ. આ બળને Stress કહે છે. જ્યારે વિકૃતિને Strain કહે છે. Stress અને Strain વચ્ચેનો સંબંધ હુકના નિયમથી દર્શાવાય છે.

સ્ફટિક બંધન ધન પદાર્થોની સ્થિતિસ્થાપકતા વર્તણૂકનું મજબૂતીથી નિયમન કરે છે. ધન પદાર્થમાં બંધન બળો ઘણીવાર સ્થિતિસ્થાપકતાથી પ્રતિભાવ આપે છે. સ્થિતિસ્થાપકતાની લાક્ષણિકતાઓનો અભ્યાસ ધન પદાર્થની લાક્ષણિકતાઓનું અર્થઘટન આપે છે. દા.ત. ઉષ્મીય ગુણધર્મો સ્થિતિસ્થાપક અચળાંક સાથે જોડાયેલા છે. તે માટે સ્ફટિકને સ્થિતિસ્થાપક માધ્યમ તરીકે સ્વીકારીએ જે સતત છે.

### 2.6.1. સ્થિતિસ્થાપક પ્રતિબળ(Elastic Stress):

ધારોકે પ્રાથમિક ઘન સ્ફટિકમાં એક સરખું વિરૂપણ થાય છે. વિરૂપણ બળના કારણે સ્ફટિકમાં આપેલ બળના પ્રતિભાવ રૂપે આંતરિક બળ ઉદભવે છે. સ્ફટિકમાં એકમ ક્ષેત્રફળ પર લાગતા બળો પ્રતિબળ કહે છે. જો આપેલ બળ મોટું ન હોય તો હુકનો નિયમ પળાય છે. (પ્રતિબળ  $\propto$  વિકૃતિ) પ્રતિબળ ઘનની છ સપાટી પર અસર કરે છે. જેને નવ ઘટકોથી દર્શાવાય છે.  $\sigma_{xx}, \sigma_{xy}, \sigma_{xz}, \sigma_{yx}, \sigma_{yy}, \sigma_{yz}, \sigma_{zx}, \sigma_{zy}, \sigma_{zz}$  અહીં  $\sigma_{xy}$  માં x-પ્રથમ પદ આપેલ બળની દિશામાં દર્શાવે છે. Y- બળની લંબ દિશામાં દર્શાવે છે.

અહીં પ્રતિબળ દ્વિતિય રેન્કની ટેન્સર રાશિ છે. જે  $3 \times 3$  મેટ્રિક્સથી દર્શાવાય છે.

$$[\sigma_{\alpha\beta}] = \begin{bmatrix} \sigma_{xx} & \sigma_{xy} & \sigma_{xz} \\ \sigma_{yx} & \sigma_{yy} & \sigma_{yz} \\ \sigma_{zx} & \sigma_{zy} & \sigma_{zz} \end{bmatrix} \quad \alpha, \beta = x, y, z$$

ઘટકો  $\sigma_{xx}, \sigma_{yy}, \sigma_{zz}$  સામાન્ય પ્રતિબળ ઘટકો છે. પ્રતિબળના લંબ ઘટકો કે જે yz, zx અને xy સપાટી પર અસર કરે છે. જે સમતલને લંબ છે. બાકીના છ ઘટકો જે તે સમતલમાં જ લાગે છે.(સમાંતર) જેને shear stress ઘટકો કહે છે. જો ઘન પદાર્થ સમતોલન સ્થિતિમાં હોય અને સમાંતર ઘટકોને કારણે પરિભ્રમણ ન કરતો હોય તો  $\sigma_{\alpha\beta} = \sigma_{\beta\alpha}$  થાય છે.

પરિણામે પ્રતિબળ(Stress)ઘટકો નવ માંથી છ થઈ જાય છે. (Stress) પ્રતિબળ ઘટક એકમ ક્ષેત્રફળ દીઠ બળ(ની દિશા) છે. અથવા એકમ કદે ઉર્જા દર્શાવે છે.

### 2.6.2. સ્થિતિસ્થાપક વિકૃતિ(વિરૂપણ)(Elastic Strain):

Stress લાગવાથી વિકૃતિ ઉદભવે છે. તેના પણ છ ઘટકો હશે. ધારો કે વિરૂપણ પહેલાં કોઈ ઘનની એક બાજુને લંબ એકમ અક્ષો  $\hat{i}, \hat{j}$  અને  $\hat{k}$  છે. વિરૂપણ બળ લગાડતાં ઘન સ્ફટિકમાં વિકૃતિ ઉદભવે છે. જે ઘણું નાનું છે. પરિણામે અક્ષોની લંબાઈ અને પરિમાણમાં ફેરફાર થાય છે. નવી અક્ષો  $l, m$  અને  $n$  (કે જે લંબઘનથી) મળે છે. જેને નીચેના સમીકરણોથી દર્શાવી શકાય.

$$l = (1 + \varepsilon_{xx})\hat{i} + \varepsilon_{xy}\hat{j} + \varepsilon_{xz}\hat{k}$$

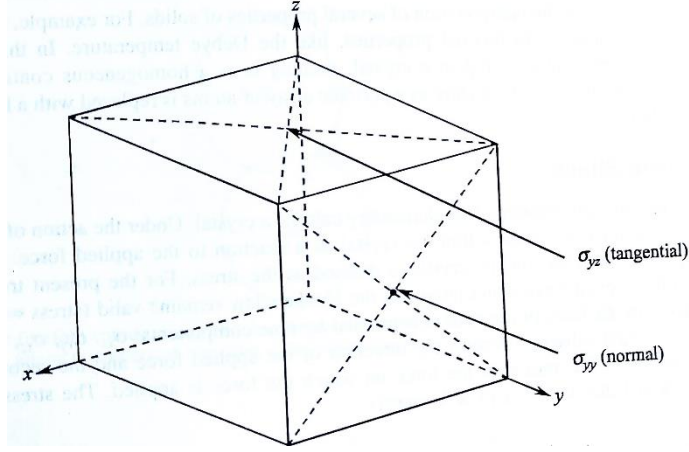
$$m = \varepsilon_{yx}\hat{i} + (1 + \varepsilon_{yy})\hat{j} + \varepsilon_{yz}\hat{k}$$

$$n = \varepsilon_{zx}\hat{i} + \varepsilon_{zy}\hat{j} + (1 + \varepsilon_{zz})\hat{k}$$

$\varepsilon_{\alpha\beta}$  = વિરૂપણ દર્શાવે છે. જે પરિમાણ રહિત છે. અને નાના વિરૂપણ માટે તેનું મૂલ્ય  $\ll 1$  છે. આ નવી અક્ષો એકમ લંબાઈની હોતી નથી.

$\varepsilon_{xx}, \varepsilon_{yy}, \varepsilon_{zz}$  એ  $\hat{i}, \hat{j}, \hat{k}$  ની લંબાઈમાં થયેલ આંશિક ફેરફાર છે અને તે પ્રથમ ક્રમનો જ લેવાય છે તેથી તે રેખીય Strain ઘટક રજૂ કરે છે. અહીં  $\vec{l} \cdot \vec{l}, \vec{m} \cdot \vec{m}$  અને  $\vec{n} \cdot \vec{n}$  લેતાં નવા ત્રણ ઘટક મળે છે.

$$\varepsilon_{xx} = e_{xx}, \varepsilon_{yy} = e_{yy} \text{ અને } \varepsilon_{zz} = e_{zz} \text{ -----(16)}$$



હવે અહીં  $\hat{i}, \hat{j}, \hat{k}$  શરૂઆતમાં એકબીજાને લંબ હતા પરંતુ Strain કારણે વિકૃતિ સ્વરૂપ દર્શાવેલ સદિશો  $\hat{i}, \hat{j}, \hat{k}$  પરસ્પર લંબ હોય તે જરૂરી નથી.  $\vec{l} \cdot \vec{m}, \vec{m} \cdot \vec{n}$  અને  $\vec{n} \cdot \vec{l}$  ના અદિશ ગુણાકાર કરવાથી નવા ત્રણ Strain ઘટકો મળે . અહીં  $l, m$  અને  $n$  પરસ્પર લંબ નથી.

$$e_{xy} = \vec{l} \cdot \vec{m} = [(1 + \varepsilon_{xx})\hat{i} + \varepsilon_{xy}\hat{j} + \varepsilon_{xz}\hat{k}] \cdot [\varepsilon_{yx}\hat{i} + (1 + \varepsilon_{yy})\hat{j} + \varepsilon_{yz}\hat{k}]$$

$$e_{xy} = (1 + \varepsilon_{xx})\varepsilon_{yx} + (1 + \varepsilon_{yy})\varepsilon_{xy} + \varepsilon_{xz}\varepsilon_{yz}$$

પરંતુ  $\varepsilon_{xx}\varepsilon_{yx}$  નું મૂલ્ય અવગણી શકાય તેટલું નાનું હોય છે. તેથી આવા પદો અવગણતાં

$$e_{xy} = \varepsilon_{yx} + \varepsilon_{xy}, \quad \varepsilon_{\alpha\beta} \ll 1$$

$$\text{તે જ રીતે } e_{yz} = \vec{m} \cdot \vec{n} = \varepsilon_{yz} + \varepsilon_{zy}, \quad e_{zx} = \vec{n} \cdot \vec{l} = \varepsilon_{zx} + \varepsilon_{xz} \text{ -----(17)}$$

આમ, Strain ના છ ઘટકો  $e_{xx}, e_{yy}, e_{zz}, e_{xy}, e_{yz}, e_{zx}$  મળે છે. વળી, સમી.(17) ના ઘટકો બે અક્ષો વચ્ચે બદલાતા ખૂણાનું માપ આપે છે. અક્ષોનું એકસરખું પરિભ્રમણ કરીએ તો ખૂણા બદલાતા નથી.

$$e_{xy} = e_{yx} = e_{zx} = 0$$

$$\text{તેથી } \varepsilon_{xy} = -\varepsilon_{yx}, \quad \varepsilon_{xz} = -\varepsilon_{zx}, \quad \varepsilon_{yz} = -\varepsilon_{zy} \text{ -----(18)}$$

જે બીન ઉપયોગી છે.

જો આપણે એકસરખું પરિભ્રમણ ન વિચારીએ તો તે વિરૂપણ પામતા નથી.

$$\varepsilon_{xy} = \varepsilon_{yx}, \varepsilon_{yz} = \varepsilon_{zy}, \varepsilon_{zx} = \varepsilon_{xz} \text{ -----(19)}$$

સમીકરણ (19) ની કિંમત સમીકરણ (17) માં મૂકતાં,

$$\left. \begin{aligned} \varepsilon_{xy} = \varepsilon_{yx} &= \frac{1}{2} e_{xy} \\ \varepsilon_{yz} = \varepsilon_{zy} &= \frac{1}{2} e_{yz} \\ \varepsilon_{zx} = \varepsilon_{xz} &= \frac{1}{2} e_{zx} \end{aligned} \right\} \text{ -----(20)}$$

$l \cdot m$  નું મૂલ્ય એ વિકૃતિના પરિણામે અક્ષોના પરિભ્રમણમાં થતો ફેરફાર છે. હવે અક્ષો વચ્ચે બદલાતા ખૂણાને સમીકરણ (17)થી દર્શાવી શકાય છે.

ધારો કે કોઈ અણુનો સ્થાન સદિશ  $\vec{r}$  છે.

$$\vec{r} = x\hat{i} + y\hat{j} + z\hat{k}$$

હવે Stress આપતાં ઘન સ્ફટિકમાં વિકૃતિ ઉદભવે છે. તેથી તે અણુનો સ્થાન સદિશ  $\vec{r}$  મળશે.

$$r' = xl + ym + zn$$

તેથી વિરૂપણ બળને કારણે અણુએ કરલું સ્થાનાંતર

$$\Delta r = r' - r \text{ -----(21)}$$

$$\Delta r = [x\varepsilon_{xx} + y\varepsilon_{xy} + z\varepsilon_{xz}]\hat{i} + [x\varepsilon_{yx} + y\varepsilon_{yy} + z\varepsilon_{yz}]\hat{j} + [x\varepsilon_{zx} + y\varepsilon_{zy} + z\varepsilon_{zz}]\hat{k} \text{ ---(22)}$$

સમી.(20) માંથી કિંમત મૂકતાં,

$$\Delta r = \left[ x\varepsilon_{xx} + \frac{1}{2}y\varepsilon_{xy} + \frac{1}{2}z\varepsilon_{xz} \right]\hat{i} + \left[ \frac{1}{2}x\varepsilon_{yx} + y\varepsilon_{yy} + \frac{1}{2}z\varepsilon_{yz} \right]\hat{j} + \left[ \frac{1}{2}x\varepsilon_{zx} + \frac{1}{2}y\varepsilon_{zy} + z\varepsilon_{zz} \right]\hat{k} - \text{-----(23)}$$

$$\Delta r = u_1\hat{i} + u_2\hat{j} + u_3\hat{k} \text{ -----(24)}$$

$$\text{જ્યાં, } \left. \begin{aligned} u_1 &= x\varepsilon_{xx} + \frac{1}{2}y\varepsilon_{xy} + \frac{1}{2}z\varepsilon_{xz} \\ u_2 &= \frac{1}{2}x\varepsilon_{yx} + y\varepsilon_{yy} + \frac{1}{2}z\varepsilon_{yz} \\ u_3 &= \frac{1}{2}x\varepsilon_{zx} + \frac{1}{2}y\varepsilon_{zy} + z\varepsilon_{zz} \end{aligned} \right\} \text{ ----- (25)}$$

જ્યાં  $u_1, u_2, u_3$  સ્થાનાંતરના ઘટકો છે. જે  $x, y, z$  દિશાઓ સાથે સંકળાયેલ છે. સમી.(25)નું વિકલન કરતાં,

$$\left. \begin{aligned} e_{xx} &= \frac{\partial u_1}{\partial x}; e_{xy} = \frac{\partial u_2}{\partial x} + \frac{\partial u_1}{\partial y} \\ e_{yy} &= \frac{\partial u_2}{\partial y}; e_{yz} = \frac{\partial u_3}{\partial y} + \frac{\partial u_2}{\partial z} \\ e_{zz} &= \frac{\partial u_3}{\partial z}; e_{zx} = \frac{\partial u_1}{\partial z} + \frac{\partial u_3}{\partial x} \end{aligned} \right\} \text{ ----- (26)}$$

ઉપરના સમી. Strain ના ઘટકો આપે છે.  $e_{xx}, e_{yy}$  અને  $e_{zz}$  ના રેખીય ઘટકો છે. જે ત્રણ ઘટકો છે જે ત્રણ અક્ષોની એક લંબાઈમાં થતો ફેરફાર દર્શાવે છે. જ્યારે  $e_{xy}, e_{yz}$  અને  $e_{zx}$  એ સાદા વિરૂપણ ઘટકો છે. દા.ત.  $e_{yz} = \frac{\partial u_3}{\partial y} + \frac{\partial u_2}{\partial z}$

પ્રથમ પદમાં Z દિશામાં Y અક્ષને લંબ સમતલમાં વિરૂપણ દર્શાવે છે. જ્યારે બીજું પદ Y દિશામાં Z અક્ષને લંબ સમતલમાં વિરૂપણ દર્શાવે છે. Strain દ્વિતીય રેન્કની ટેન્સર રાશિ છે. જેમના નવ ઘટકો નીચે મુજબ છે.

$$[e_{\alpha\beta}] = \begin{bmatrix} e_{xx} & e_{xy} & e_{xz} \\ e_{yx} & e_{yy} & e_{yz} \\ e_{zx} & e_{zy} & e_{zz} \end{bmatrix} \text{-----(27)}$$

જ્યાં,  $\alpha, \beta = x, y, z$

### 2.6.3 આંશિક ફેરફાર (Dilation):

વિકૃતિને કારણે કદમાં થતા આંશિક ફેરફારને Dilation તરીકે ઓળખવામાં આવે છે. આ ગણતરી માટે એકમ કદનો ઘન લઈએ તેથી કદ  $V = 1$  થાય.

હવે વિકૃતિ પછીનું કદ

$$V' = l \cdot (m \times n)$$

$$= \begin{vmatrix} 1 + \varepsilon_{xx} & \varepsilon_{xy} & \varepsilon_{xz} \\ \varepsilon_{yx} & 1 + \varepsilon_{yy} & \varepsilon_{yz} \\ \varepsilon_{zx} & \varepsilon_{zy} & 1 + \varepsilon_{zz} \end{vmatrix}$$

$$= 1 + \varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} + \varepsilon_{zz}$$

$$= 1 + e_{xx} + e_{yy} + e_{zz}$$

બે Strain ના ગુણાકાર તેમજ Strain પદોના વર્ગ અતિ નાના હોવાથી અવગણેલ છે.

$$\text{Dilation } \delta = \frac{V' - V}{V}$$

$$\delta = \frac{1 + e_{xx} + e_{yy} + e_{zz} - 1}{1}$$

$$\delta = e_{xx} + e_{yy} + e_{zz} \quad \text{હાઇડ્રોસ્ટેટ્રીક દબાણ માટે } \delta \text{ ઋણ અને તણાવ માટે ઘન હોય છે.}$$

### 2.7 સ્થિતિસ્થાપકતા અને દઢતાઅંક (Elastic Compliance and Stiffness Constants):

હુકના નિયમ પ્રમાણે સ્થિતિસ્થાપકતાની મર્યાદામાં વિકૃતિ નાની હોય ત્યારે વિકૃતિ પ્રતિબળના સમપ્રમાણમાં હોય છે.

પ્રતિબળ (Stress) અને વિકૃતિ (strain) રેખીય સંબંધથી દર્શાવી શકાય.

$$\begin{bmatrix} \sigma_{xx} \\ \sigma_{yy} \\ \sigma_{zz} \\ \sigma_{yz} \\ \sigma_{zx} \\ \sigma_{xy} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{13} & C_{14} & C_{15} & C_{16} \\ C_{21} & C_{22} & C_{23} & C_{24} & C_{25} & C_{26} \\ C_{31} & C_{32} & C_{33} & C_{34} & C_{35} & C_{36} \\ C_{41} & C_{42} & C_{43} & C_{44} & C_{45} & C_{46} \\ C_{51} & C_{52} & C_{53} & C_{54} & C_{55} & C_{56} \\ C_{61} & C_{62} & C_{63} & C_{64} & C_{65} & C_{66} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} e_{xx} \\ e_{yy} \\ e_{zz} \\ e_{yz} \\ e_{zx} \\ e_{xy} \end{bmatrix}$$

જ્યાં  $C_{11}, C_{12}, C_{13}, C_{14}, \dots, \dots, C_{66}$  સ્થિતિસ્થાપકતા દઢતા અંક (Elastic stiffness constant) અથવા modulus of Elasticity કહે છે.  $C$  નો એકમ = ન્યૂટન/મીટર<sup>2</sup> = જુલ/મીટર<sup>3</sup>

$Stress = \text{અચળાંક} \times Strain$

$$\text{અચળાંક (Const.)} = \frac{Stress}{Strain} = \frac{\text{બળ(Force)}}{\text{વિસ્તાર(area)}} = \frac{\text{ઊર્જા(energy)}}{\text{કદ(volume)}}$$

તે જે રીતે Strain ઘટકોને Stress ઘટકોના રેખીય સંબંધ દર્શાવી શકાય.

$$\begin{bmatrix} e_{xx} \\ e_{yy} \\ e_{zz} \\ e_{yz} \\ e_{zx} \\ e_{xy} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} S_{11} & S_{12} & S_{13} & S_{14} & S_{15} & S_{16} \\ S_{21} & S_{22} & S_{23} & S_{24} & S_{25} & S_{26} \\ S_{31} & S_{32} & S_{33} & S_{34} & S_{35} & S_{36} \\ S_{41} & S_{42} & S_{43} & S_{44} & S_{45} & S_{46} \\ S_{51} & S_{52} & S_{53} & S_{54} & S_{55} & S_{56} \\ S_{61} & S_{62} & S_{63} & S_{64} & S_{65} & S_{66} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \sigma_{xx} \\ \sigma_{yy} \\ \sigma_{zz} \\ \sigma_{yz} \\ \sigma_{zx} \\ \sigma_{xy} \end{bmatrix}$$

જ્યાં  $S_{11}, S_{12}, S_{13}, S_{14}, \dots, \dots, S_{66}$  ને સ્થિતિસ્થાપકતા અચળાંક કહે છે.

$$\text{જેનો એકમ } S = \frac{\text{મી.}^2}{\text{ન્યૂટન}} = \frac{\text{મી.}^3}{\text{જુલ}} = \frac{\text{વિસ્તાર(area)}}{\text{બળ(Force)}} = \frac{\text{કદ(volume)}}{\text{ઊર્જા(energy)}}$$

### 2.7.1 સ્થિતિસ્થાપકતા ઊર્જા ઘનતા (Elastic Energy Density):

ઘન પદાર્થને સ્થિતિસ્થાપકતાની રીતે વિકૃતિ બનાવવા કાર્ય કરવું પડે. જ્યાં સુધી પદાર્થ વિકૃતિ સ્થિતિમાં હશે ત્યાં સુધી આ કાર્ય ઘનમાં સંગ્રહાયેલું રહે છે. શક્તિ ઘનતા એટલે કે સંગ્રાહેલી શક્તિ અને પ્રાથમિક ઘનતા કદનો ગુણોત્તર.

હુકનો નિયમ પ્રમાણે સ્થિતિસ્થાપકતા શક્તિ ઘનતા નીચેના સમીકરણથી દર્શાવી શકાય.

$$\phi = \frac{1}{2} \sum_{\mu=1}^6 \sum_{\nu=1}^6 \bar{C}_{\mu\nu} e_{\mu} e_{\nu} \text{ -----(28)}$$

જ્યાં  $1 \equiv xx; 2 \equiv yy; 3 \equiv zz; 4 \equiv yz; 5 \equiv zx; 6 \equiv xy$

સહ અચળાંક  $C_s = \text{Elastic Stiffness const.}$

સમી.(28) માં 36 અચળાંકો છે. જે ઘટાડી શકાય છે. ઘટકો સ્થિતિ ઊર્જા  $\phi$  ને Strain સાપેક્ષે વિકલન કરવાથી Stress ઘટકો મળે છે.



$$\sigma_{xx} = \frac{\partial \phi}{\partial e_{xx}} = \frac{\partial \phi}{\partial e_1} = \bar{C}_{11}e_1 + \frac{1}{2} \sum_{\beta=0}^6 (\bar{C}_{1\beta} + \bar{C}_{\beta 1})e_{\beta} \text{ -----(29)}$$

Elastic Stiffness અચળાંકો સંમિત છે.

$$\text{તેથી } C_{\alpha\beta} = \frac{1}{2}(\bar{C}_{\alpha\beta} + \bar{C}_{\beta\alpha}) = C_{\beta\alpha} \text{ -----(30)}$$

$$\text{કારણ કે } \bar{C}_{\alpha\beta} = \bar{C}_{\beta\alpha}$$

આ લાક્ષણિકતાને કારણે 36 ઘટકોમાંથી ઘટીને 21 બને છે,

### 2.7.2 ઘન સ્ફટિકમાં ઉપયોગ (Application to Cubic Crystals):

બધા સ્ફટિકો વધ ઘટ ઓછા પ્રમાણમાં સંમિતિ ધરાવે છે. અહીં એવો સ્ફટિક આપેલ છે. કે જેમાં સ્થિતિસ્થાપકતા ગુણધર્મ બધી જ દિશામાં સરખા હોય છે. આ સ્ફટિકને સમદિગધર્મી હકે છે. આવા પદાર્થ માટે નીચે દર્શાવેલ સમી.ને ગમે તે યામ પરિવર્તનમાં પણ ફેરફાર જોવા મળતો નથી.

$$\sigma_{xx} = C_{11}e_{xx} + C_{12}e_{yy} + C_{13}e_{zz} + C_{14}e_{yz} + C_{15}e_{zx} + C_{16}e_{xy}$$

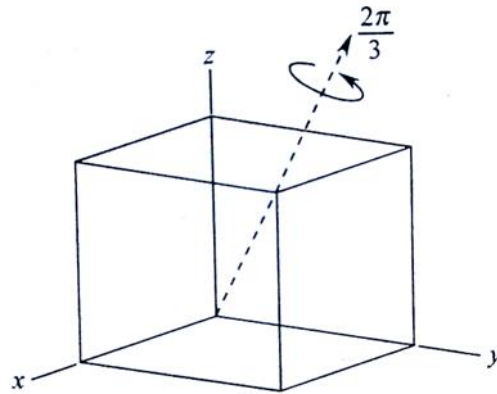
$$\sigma_{yy} = C_{21}e_{xx} + C_{22}e_{yy} + C_{23}e_{zz} + C_{24}e_{yz} + C_{25}e_{zx} + C_{26}e_{xy}$$

$$\sigma_{zz} = C_{31}e_{xx} + C_{32}e_{yy} + C_{33}e_{zz} + C_{34}e_{yz} + C_{35}e_{zx} + C_{36}e_{xy}$$

$$\sigma_{yz} = C_{41}e_{xx} + C_{42}e_{yy} + C_{43}e_{zz} + C_{44}e_{yz} + C_{45}e_{zx} + C_{46}e_{xy}$$

$$\sigma_{zx} = C_{51}e_{xx} + C_{52}e_{yy} + C_{53}e_{zz} + C_{54}e_{yz} + C_{55}e_{zx} + C_{56}e_{xy}$$

$$\sigma_{xy} = C_{61}e_{xx} + C_{62}e_{yy} + C_{63}e_{zz} + C_{64}e_{yz} + C_{65}e_{zx} + C_{66}e_{xy} \text{ -----(31)}$$



ઘન સ્ફટિકમાં Shearing strain માટે એવો નિયમ છે કે જો દિશા બદલીએ તો strainની દિશા બદલાય છે પણ તેની કિંમત બદલાતી નથી. સમતલમાં કોઈ એક અક્ષની દિશા બદલીએ

એટલે કે જો Y અક્ષની દિશા બદલીએ તો X અક્ષ બદલાશે નહીં. (180°ની પરિભ્રમણ આપીએ તો) હવે સમી. (29)ના પહેલા સમી.ના જ.બા.ના પદોમાં  $e_{xx}, e_{yy}, e_{zz}$ ની કિંમતો તેની તે જ રહે છે. તેમજ  $e_{zz}$  કિંમત પણ યથાવત રહે છે પણ દિશા બદલાય છે. તેથી જ.બા. અને ડા.બા.ની સમાનતા જળવાતી નથી. આ સમાનતા ત્યારે જ જળવાય કે જ્યારે  $C_{14} = 0$  અને  $C_{16} = 0$  થાય તે જ રીતે દિશા બદલીએ તો  $C_{14} = C_{15} = 0$  માટે  $C_{14} = C_{15} = C_{16} = 0$  થાય.

આ જ રીતે  $yy, zz$  ઘટકો માટે,

$$C_{14} = C_{15} = C_{16} = 0$$

$$C_{24} = C_{25} = C_{26} = 0$$

$$C_{34} = C_{35} = C_{36} = 0$$

$$\sigma_{xx} = C_{11}e_{xx} + C_{12}e_{yy} + C_{13}e_{zz}$$

$$\sigma_{yy} = C_{21}e_{xx} + C_{22}e_{yy} + C_{23}e_{zz}$$

$$\sigma_{zz} = C_{31}e_{xx} + C_{32}e_{yy} + C_{33}e_{zz}$$

આનો અર્થ એમ થાય કે Normal stress shearing stress સાથે સંકળાયેલું નથી.  $e_{xy} = e_{yx}$  તેથી  $C_{ij} = C_{ji}$  થશે.

$$C_{41} = C_{42} = C_{43} = 0$$

$$C_{51} = C_{52} = C_{53} = 0$$

$$C_{61} = C_{62} = C_{63} = 0$$

$$\sigma_{yz} = C_{41}e_{xx} + C_{42}e_{yy} + C_{43}e_{zz}$$

$$\sigma_{zx} = C_{51}e_{xx} + C_{52}e_{yy} + C_{53}e_{zz}$$

$$\sigma_{xy} = C_{61}e_{xx} + C_{62}e_{yy} + C_{63}e_{zz} \quad \text{-----}(32)$$

જો x અક્ષનું 180° પરિભ્રમણ આપીએ તો  $e_{zz}$  અને  $e_{xy}$ ની દિશા બદલાશે પરંતુ મૂલ્ય બદલાશે નહીં આથી ડા.બા. અને જ.બા.ની સમાનતા ત્યારે જ દર્શાવી શકાય કે જ્યારે  $C_{45} = C_{46} = 0$  થાય. આ જ રીતે OY અને OZ અક્ષ માટે

$$C_{54} = C_{56} = 0$$

$$C_{64} = C_{65} = 0$$

આથી સમીકરણો નીચે પ્રમાણે મળશે.

$$\sigma_{xx} = C_{11}e_{xx} + C_{12}e_{yy} + C_{13}e_{zz}$$

$$\sigma_{yy} = C_{21}e_{xx} + C_{22}e_{yy} + C_{23}e_{zz}$$

$$\sigma_{zz} = C_{31}e_{xx} + C_{32}e_{yy} + C_{33}e_{zz}$$

$$\sigma_{yz} = C_{44}e_{yz}$$

$$\sigma_{zx} = C_{55}e_{zx}$$

$$\sigma_{xy} = C_{66}e_{xy}$$

ઉપરોક્ત સમીકરણમાં 12 ઘટકો છે. પરંતુ ઘન સ્ફટિક સંમિતિ છે તેથી ઘટકો  $C_{12} = C_{21}, C_{31} = C_{13}, C_{23} = C_{32}$  થશે. આમ, ઘન પદાર્થ જ્યારે સ્થિતિસ્થાપક અચળાંક સંખ્યા 9 છે.

ઘન સ્ફટિક સંમિતિ ધરાવે છે. ઘનમાં દરેક સપાટીને લંબ એવી 4-ફોલ્ડ અક્ષ હોય છે. અને ત્રણે અક્ષો અમતુલ્ય છે. તેમને  $90^\circ$ ના પરિભ્રમણથી એકબીજાના સ્થાને લાવી શકાય છે.

$$X \rightarrow y \rightarrow z \rightarrow x$$

તેથી  $C_{11} = C_{22} = C_{33}$  તથા  $C_{44} = C_{55} = C_{66}$  થશે.

OY ના સ્થાને OZ આવે છે તેથી  $e_{yy}$  અને  $e_{zz}$  ના સ્થાન જ બદલાય છે. ડા.બા. યથાવત રહે તે માટે  $C_{12} = C_{13}$  તે જે રીતે  $C_{21} = C_{23}$

$$C_{13} = C_{31} = C_{12} = C_{32} = C_{23} = C_{21}$$

હવે દરેક અક્ષને લંબ એવા સમતલ જેને આરસા સમતલ તરીકે લઈએ તો તે આરસા સંમિતિ પ્રમાણે જે અક્ષોની દિશા  $180^\circ$  બદલીએ તો shearing stress ના મૂલ્યો બદલાતા નથી. તે લંબાઈની વિકૃતિઓ સાથે સંકળાયેલા રહેતા નથી. આમ, સમગ્ર રીતે અચળાંકો નીચે પ્રમાણે રજૂ કરી શકાય.

$$[C_{\alpha\beta}] = \begin{bmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{11} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{12} & C_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} \end{bmatrix} \text{-----(33)}$$

આમ,  $C_{11}, C_{12}, C_{44}$  એમ કુલ ત્રણ સ્થિતિસ્થાપક અચળાંકો મળે આનો Inverse metric compliance constants આપે છે. જેના સંબંધો નીચે મુજબ દર્શાવી શકાય.

$$C_{44} = \frac{1}{S_{44}}, C_{11} - C_{12} = (S_{11} - S_{12})^{-1}, C_{11} + 2C_{12} = (S_{11} - 2S_{12})^{-1}$$

### 2.7.3 કદનો સ્થિતિસ્થાપકતા અંક અને દબનીયતા (Bulk Modulus and Compressibility):

અહીં કદની વિકૃતિ ધ્યાનમાં લેવામાં આવે છે. જો આંશિક ફેરફાર એકસરખું હોય તો

$$e_{xx} = e_{yy} = e_{zz}$$

$$\text{આંશિક ફેરફાર } \delta = e_{xx} + e_{yy} + e_{zz}$$

$$e_{xx} = \frac{1}{3} \delta$$

આપણે જાણીએ છીએ તે મુજબ,  $\partial U = \sigma_{xx} \partial e_{xx}$

$$\frac{\partial U}{\partial e_{xx}} = \sigma_{xx}$$

$$\text{સંકલન લેતાં } \theta = \frac{C_{11} e_{xx}^2}{2}$$

બધા જ ઘટકો ધ્યાનમાં લેતાં, કુલ ઉર્જા

$$\theta = \frac{1}{2} C_{11} [e_{xx}^2 + e_{yy}^2 + e_{zz}^2] + C_{12} [e_{yy} e_{zz} + e_{zz} e_{xx} + e_{xx} e_{yy}]$$

$$\theta = \frac{1}{2} C_{11} [3e_{xx}^2] + C_{12} [3e_{xx}^2]$$

$$= \frac{1}{2} C_{11} 3x \frac{\delta^2}{9} + C_{12} 3x \frac{\delta^2}{9}$$

$$= \frac{1}{6} C_{11} \delta^2 + \frac{1}{3} C_{12} \delta^2$$

$$\theta = \frac{1}{6} \delta^2 [C_{11} + 2C_{12}] \quad \text{-----(34)}$$

માત્ર લંબાઈની વિકૃતિ થાય છે. તેથી ઉર્જા  $\theta = \frac{1}{2} \beta \delta^2$  જ્યાં  $\beta$  સ્થિતિસ્થાપક દ્રઢતા અંક છે. ઘન સ્ફટિક માટે દ્રઢતા અંક નીચે મુજબ મળે.

$$\therefore \beta = \frac{2\theta}{\delta^2}$$

$$\therefore \beta = \frac{2}{\delta^2} \times \frac{1}{6} \delta^2 [C_{11} + 2C_{12}]$$

$$\therefore \beta = \frac{1}{3} \delta^2 [C_{11} + 2C_{12}] \quad \text{-----(35)}$$

$\beta$  નું મૂલ્ય દાબનીયતાનું મૂલ્ય  $K$  આપે છે.

$$\therefore K = \frac{1}{\beta} = \frac{3}{C_{11} + 2C_{12}} \quad \text{-----(36)}$$