

आकाशीय जालक	space lattice
ब्रेवे जालक	Bravais lattice
अ-ब्रेवे जालक	non-Bravais lattice
जालक सदिश	lattice vectors
अभाज्य एकक कोष्ठिका	primitive unit cell
क्रिस्टल समुदाय	crystal system
अभाज्य/सरल जालक	primitive/simple lattice
आधार केंद्रित जालक	base centred lattice
अंतः केंद्रित जालक	body centred lattice
फलक केंद्रित जालक	face centred lattice
त्रिनताक्ष	triclinic
एकनताक्ष	monoclinic
विषमलंबाक्ष	orthorhombic
त्रिसमनताक्ष/समांतर षट्फलकीय	trigonal/rhombohedral
षट्कोणीय	hexagonal
द्विसमलंबाक्ष	tetragonal
घनीय	cubic
फलक केंद्रित घनीय जालक	face central cubic (fcc) lattice
अंतः केंद्रित घनीय जालक	body centred cubic (bcc) lattice
जालक स्थिरांक	lattice constant
समन्वय संख्या	co-ordination number
परमाण्वीय संकुलन गुणांक	atomic packing fraction
घूर्णन सममिति	rotational symmetry
घूर्णन वलन	fold of rotation
सममिति समूह	symmetry groups
सममिति अवयव	symmetry elements
बिंदु समूह	point group
आकाशीय समूह	space group
तत्समक संक्रिया	identity operation
मानक सदिश	unit vector
बेसिस सदिश	basis vector
मिलर सूचकांक	Miller indices
अंतरातलीय दूरी	interplanar distance
क्रिस्टलाणु	crystallite
प्रतिदर्श	sample

इकाई 3 व्युत्क्रम जालक आकाश

इकाई की रूपरेखा

- 3.1 प्रस्तावना
उद्देश्य
- 3.2 व्युत्क्रम जालक की रचना
- 3.3 व्युत्क्रम जालक का गणितीय निरूपण
- 3.4 विशेष क्रिस्टल संरचनाओं के व्युत्क्रम जालक
- 3.5 ब्रिलुवा क्षेत्र
- 3.6 सारांश
- 3.7 अंत में कुछ प्रश्न
- 3.8 हल और उत्तर
- 3.9 शब्दावली

3.1 प्रस्तावना

पिछली इकाई में आपने क्रिस्टलों में परमाणुओं की ज्यामितीय व्यवस्थाओं का अध्ययन किया। इकाई 2 में आपने गौर किया होगा कि ज्यामितीय विन्यासों और अंतरापरमाण्वीय दूरियों को त्रिविम वास्तविक समष्टि (real space) में परिभाषित किया गया था; जहां मापन की प्रचलित इकाइयां लागू होती हैं। क्या क्रिस्टल में परमाणुओं की आवर्ती व्यवस्था को निरूपित करने का कोई और भी तरीका है? ऐसा संभव है। क्रिस्टल परमाणुओं की आवर्ती विन्यास को हम व्युत्क्रम आकाश (reciprocal space) में भी निरूपित कर सकते हैं। व्युत्क्रम आकाश में मापन को लंबाई मापन की व्युत्क्रम इकाइयों (m^{-1} , m^{-2} , m^{-3}) में व्यक्त करते हैं। किसी क्रिस्टल को व्युत्क्रम आकाश में निरूपित करने वाले बिंदुओं की व्यवस्था को व्युत्क्रम जालक (reciprocal lattice) कहते हैं। क्रिस्टल संरचना ज्ञात करने के लिए प्रयुक्त एक्स-किरण विवर्तन प्रयोगों के परिणामों को समझने के लिए यह निरूपण काफी उपयोगी है। इस बारे में आप इकाई 4 में विस्तार से पढ़ेंगे। इसके अतिरिक्त, व्युत्क्रम जालक की संकल्पना, क्रिस्टल के समांतर समतलों का निरूपण भी आसान कर देती है।

अनुभाग 3.2% आप किसी दिए गए सामान्य जालक (direct lattice) के लिए व्युत्क्रम जालक की रचना करना सीखेंगे। अनुभाग 3.3 में आप इस रचना का गणितीय निरूपण करना सीखेंगे। अनुभाग 3.4 में आप sc, fcc और bcc क्रिस्टलों के व्युत्क्रम जालक आरेखित करना सीखेंगे। व्युत्क्रम जालक के अभाज्य एकक कोष्ठिका को ब्रिलुवा क्षेत्र (Brillouin zone) कहते हैं। यह संकल्पना सामान्य जालक के लिए विनैर-साइट्ज अभाज्य एकक कोष्ठिका के समान ही है। आवर्ती विभव (periodic potential) से अभिलक्षित ठोसों की इलेक्ट्रॉनिक संरचना (electronic structure) के सैद्धांतिक विश्लेषण में ब्रिलुवा क्षेत्र संकल्पना अत्यंत महत्वपूर्ण भूमिका निभाती है। अनुभाग 3.5 में आप इस संकल्पना के बारे में पढ़ेंगे।

उद्देश्य

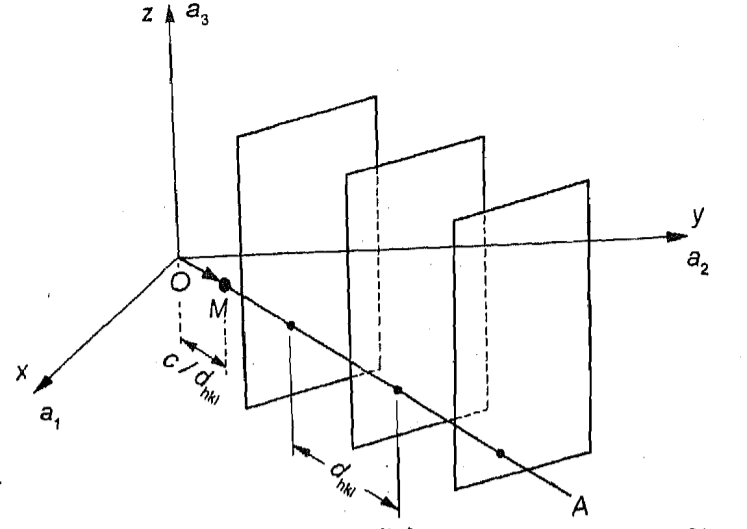
इस इकाई को पढ़ने के बाद आप

- विभिन्न क्रिस्टल समतलों को, व्युत्क्रम आकाश में, दिशों के रूप में निरूपित कर सकेंगे;
- किसी दिये गये सामान्य जालक के लिए व्युत्क्रम जालक प्राप्त कर सकेंगे;
- sc, fcc, और bcc क्रिस्टलों के लिए व्युत्क्रम जालक निर्धारित कर सकेंगे; और
- व्युत्क्रम जालक आकाश में ब्रिलुवा क्षेत्रों की रचना कर सकेंगे।

3.2 व्युत्क्रम जालक की रचना

इकाई 2 में मिलर सूचकांकों के अध्ययन के दौरान आपने जाना कि किसी क्रिस्टल के सभी समांतर समतल एक दूसरे के तुल्य (equivalent) होते हैं। अनंत स्थानांतरण सममिति के कारण क्रिस्टल का एक समतल दूसरे समांतर समतल से अविभेद्य (indistinguishable) होता है। अतः इन सभी समतलों को हम एक ही मिलर सूचकांक समुच्चय से निरूपित करते हैं। व्युत्क्रम जालक में, समांतर समतलों के प्रत्येक समुदाय को हम एक बिंदु द्वारा निरूपित करते हैं।

आइए, अब हम व्युत्क्रम जालक की रचना विधि सीखें। चित्र 3.1 देखें। इसमें अनंत, समांतर एवं समदूरस्थ समतलों का एक समुदाय दिखाया है। इन समतलों की अंतरातलीय दूरी d_{hkl} है।



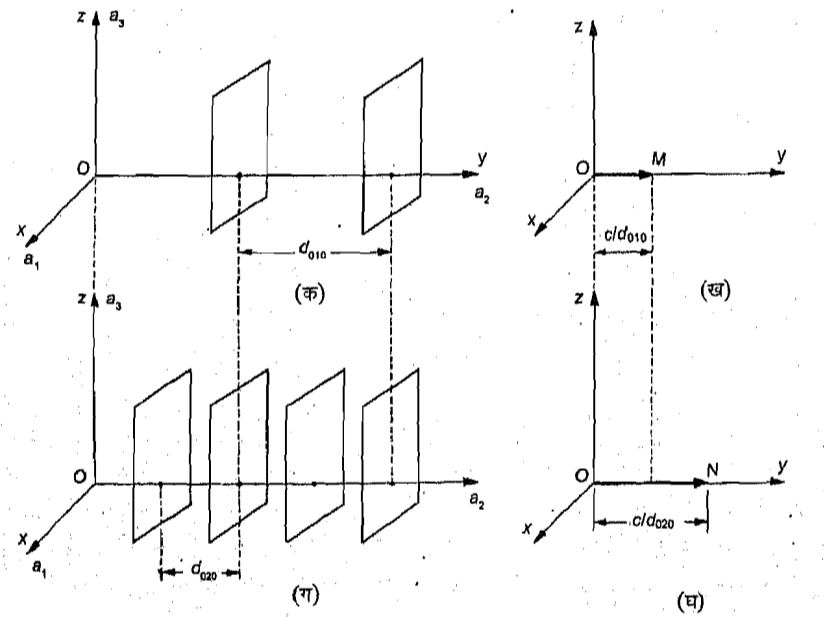
चित्र 3.1 : समांतर एवं समदूरस्थ समतलों के समुदाय का व्युत्क्रम जालक बिंदु

अब हम किसी एक जालक बिंदु O को मूल बिंदु चुनते हैं और उस बिंदु से इन समतलों पर एक सामूहिक अभिलंब OA आरेखित करते हैं। मान लें कि इस अभिलंब के अनुदिश एक बिन्दु M है। यदि OM की लंबाई, अंतरातलीय दूरी के व्युत्क्रमानुपाती है, तो बिन्दु M एक व्युत्क्रम जालक बिन्दु को परिभाषित करता है, अर्थात्

$$OM = \frac{c}{d_{hkl}} \quad (3.1)$$

यहां c एक विमाहीन (dimensionless) अनुपातिकता स्थिरांक है। ध्यान दें कि यहां समांतर जालक समतलों के संपूर्ण समुदाय को केवल एक बिंदु M से निरूपित किया गया है और OM की विमा, व्युत्क्रम लंबाई की इकाइयों में है। बिंदु O और M को जोड़ने वाले सदिश को इन समतलों का व्युत्क्रम जालक सदिश (reciprocal lattice vector, RLV) कहते हैं।

आइए अब हम लंबकोणीय (orthogonal) जालक आकाश में मिलर सूचकांकों (010) द्वारा परिभाषित समतलों पर विचार करें। ऐसे समतल चित्र 3.2 क में दर्शाए गए हैं। समतलों के इस समुदाय के लिए व्युत्क्रम जालक बिंदु, y -अक्ष के अनुदिश, $\frac{c}{d_{010}}$ दूरी पर स्थित होगा (चित्र 3.2 ख)।

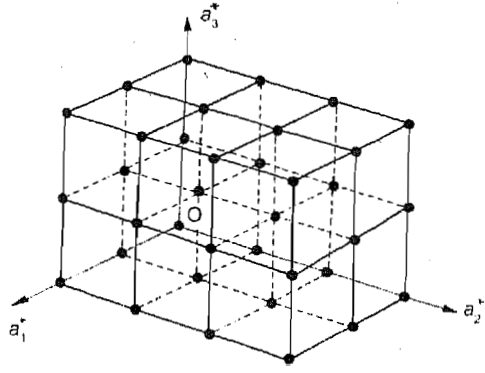


चित्र (3.2) : क) एक सामान्य जालक में (010) समतलों का समुदाय; ख) (010) समतलों के संगत व्युत्क्रम जालक बिंदु, ग) सामान्य जालक में (020) समतलों का समुदाय; और घ) (020) समतलों के संगत व्युत्क्रम जालक बिंदु

इसके बाद हम (020) समतलों के समुच्चय पर विचार करते हैं। इन समतलों के लिए अंतरातलीय दूरी d_{020} है, और इसका मान (010) समतलों के अंतरातलीय दूरी के मान का आधा है। (चित्र 3.2 ग) आगे, (020) समतलों के लिए भी व्युत्क्रम जालक बिंदु (N) y -अक्ष पर ही स्थित होगा,

परंतु उसकी लंबाई $\frac{c}{2}$ है, जो OM से दोगुनी है।

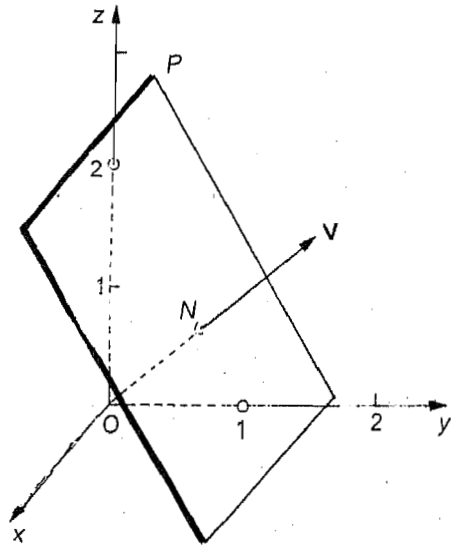
उपर्युक्त चर्चा से स्पष्ट है कि (010), (020), (030),...समतलों के समुच्चय के लिए y -अक्ष के अनुदिश व्युत्क्रम जालक बिंदुओं की एक रैखिक श्रेणी प्राप्त होती है। इसी तरह, अन्य मिलर सूचकांकों वाले समतलों के लिए त्रिविम में व्यवस्थित व्युत्क्रम जालक बिंदु प्राप्त होते हैं जो एक त्रिविम (3-D) व्युत्क्रम जालक का निर्माण करते हैं जैसाकि चित्र 3.3 में दर्शाया गया है।



चित्र 3.3 : 3-D में व्युत्क्रम जालक

अब हम एक उदाहरण की मदद से व्युत्क्रम जालक सदिश की रचना विधि को सुस्पष्ट करेंगे।

उदाहरण 1: चित्र 3.4 में दिखाए गये समतल के लिए व्युत्क्रम जालक सदिश निर्धारित करें।



चित्र 3.4: एक समतल जिसका मिलर सूचकांक (021) है

चित्र 3.4 में आप देख सकते हैं कि समतल P; x, y , और z , अक्षों को क्रमशः $\infty, 1$ और 2 पर प्रतिच्छेदित करता है। अतः इस समतल के मिलर सूचकांक (021) हैं।

व्युत्क्रम जालक सदिश V की दिशा बिन्दु O से समतल P पर आरेखित लंब के अनुदिश, अर्थात् ON की दिशा में है।

अंतरातलीय दूरी d_{hkl}

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

से दी जाती है।

और अंतरातलीय दूरी $ON = d_{021} = \frac{a}{\sqrt{(0)^2 + (2)^2 + (1)^2}} = \frac{a}{\sqrt{5}}$ है।

अतः व्युत्क्रम जालक सदिश V की लम्बाई

$$V \propto \frac{1}{d_{021}} \left[\text{अर्थात् } \frac{\sqrt{5}}{a} \right] = \frac{c\sqrt{5}}{a}$$

इस तरह V , ON की दिशा में P समतल के लंबवत है और उसका परिमाण $\frac{c\sqrt{5}}{a}$ है।

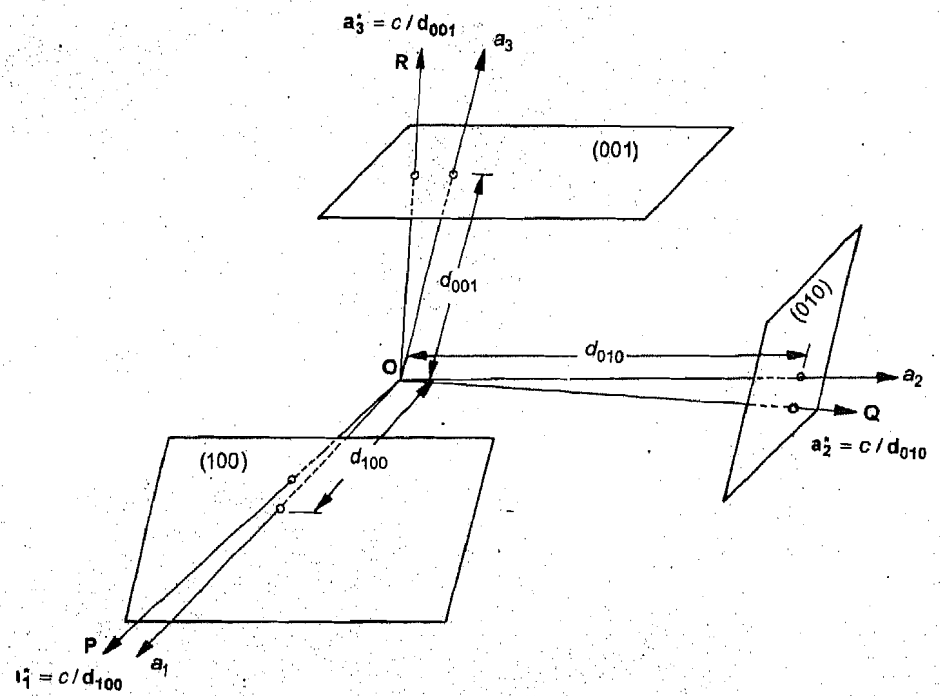
उपर्युक्त उदाहरण के आधार पर हम इस निष्कर्ष पर पहुंचते हैं कि किसी समतल का प्रतिनिधित्व करने वाले व्युत्क्रम सदिश की दिशा उसके समतल के लंबवत दिशा के अनुदिश होती है और उसका परिमाण अंतरातलीय दूरी के व्युत्क्रम के समानुपाती होता है। इससे स्पष्ट है कि V की लंबाई व्युत्क्रम लंबाई के मात्रक में है। आगे, आनुपातिकता स्थिरांक c का चुनाव अनुप्रयोग पर निर्भर करता है जिसकी चर्चा हम बाद में करेंगे।

व्यापक रूप में, किसी व्युत्क्रम जालक सदिश को निम्न रूप में परिभाषित करते हैं:

$$V = \hat{n} \frac{c}{d_{hkl}} \tag{3.2}$$

यहां \hat{n} , (hkl) समतलों के लंब के अनुदिश मात्रक सदिश (unit vector) है। V को \hat{V}_{hkl} द्वारा भी निरूपित कर सकते हैं।

आइए अब हम व्युत्क्रम जालक रचना की एक सामान्य विधि की चर्चा करें। चित्र 3.5 देखें। यहां a_1, a_2, a_3 सामान्य जालक आकाश में क्रिस्टल के मात्रक सदिश हैं जो परस्पर लंबकोणीय हो भी सकते हैं या नहीं भी।



चित्र 3.5: 3-D व्युत्क्रम जालक की रचना

आप ध्यान दें कि समतल (100) , (010) और (001) क्रमशः a_2a_3 -, a_1a_3 - तथा a_1a_2 - समतलों के समांतर हैं और a_1, a_2, a_3 अक्षों को उनकी संगत मात्रक लंबाइयों पर विच्छेदित करते हैं। आगे,

OP, OQ और OR इन तीन समतलों के लंबवत् हैं। इसलिए प्रभावी तौर पर OP, (100)

व्युत्क्रम जालक आकाश

समतलों का समुदाय निरूपित करता है और $OP = \frac{c}{d_{100}}$ जहां d_{100} , (100) समतलों के लिए

अंतरातलीय दूरी है। इसी तरह OQ और OR क्रमशः (010) और (001) समतलों को निरूपित करते हैं

और उनके परिमाण क्रमशः $\frac{c}{d_{010}}$ और $\frac{c}{d_{001}}$ है। अतः सदिश OP, OQ, और OR, व्युत्क्रम जालक

आकाश में मुख्य अक्षों को निरूपित करते हैं और उन्हें a_1^* , a_2^* और a_3^* (या d_{100}^* , d_{010}^* और d_{001}^*) से

निरूपित किया जा सकता है।

इसी तरह, समतल (200) के लिए व्युत्क्रम जालक सदिश d_{200}^* , OP की दिशा में ही होगा परंतु उसका परिमाण d_{100}^* के परिमाण से दोगुना होगा।

इस प्रकार हम प्रत्येक व्युत्क्रम जालक सदिश को व्युत्क्रम आकाश में एक बिंदु से निरूपित कर सकते हैं, जिसमें उस बिंदु और मूल बिंदु (व्युत्क्रम जालक आकाश में) के बीच की दूरी c/d_{hkl} के तुल्य है और उसकी दिशा सामान्य जालक आकाश में संगत समतलों के लंबवत् है। अतः व्युत्क्रम जालक सदिश को निम्न रूप में लिखा जा सकता है:

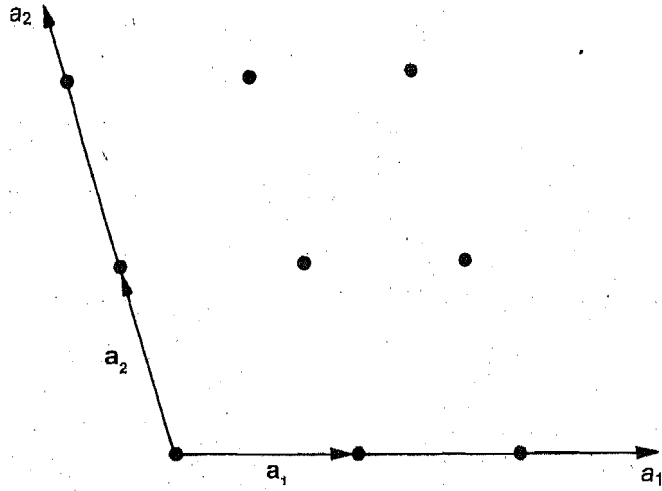
$$d_{hkl}^* = ha_1^* + ka_2^* + la_3^* \quad (\text{यहां } c = 1 \text{ है।}) \quad (3.3)$$

इसका अर्थ यह हुआ कि व्युत्क्रम जालक अक्षों a_1^* , a_2^* और a_3^* के अनुदिश क्रमशः h , k , और l मात्रकों के स्थानांतरण द्वारा किसी व्युत्क्रम जालक बिन्दु का स्थान निर्धारित किया जा सकता है। आप ध्यान दें कि यह परिणाम हमने केवल ज्यामितीय आधारों पर प्राप्त किया है। हम चाहेंगे कि अब आप एक बोध प्रश्न का उत्तर दें।

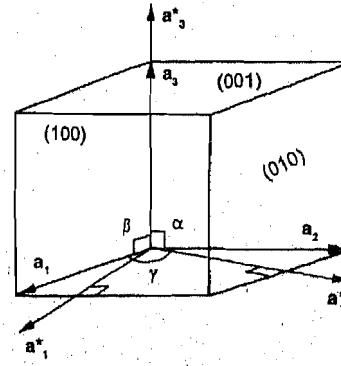
बोध प्रश्न 1

5 मिनट लगाएं

चित्र 3.6 में दिखाए गए 2-D क्रिस्टल जालक के लिए मुख्य व्युत्क्रम जालक सदिश और (100), (110), (010), (210) समतलों के लिए व्युत्क्रम जालक बिंदु निर्धारित करें।



चित्र 3.6 : 2-D क्रिस्टल जालक



चित्र 3.7 : एकनताक्ष जालक और उसका संगत व्युत्क्रम जालक सदिश

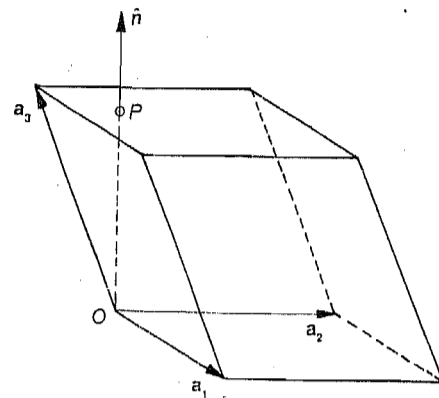
2-D में व्युत्क्रम जालक रचना विधि समझ लेने के बाद आइए अब हम 3-D की चर्चा करें। चित्र 3.7 में एक एकनताक्ष (monoclinic) क्रिस्टल की एकक कोष्ठिका दिखाई गई है। यहां, $a_1 \neq a_2 \neq a_3$ और $\alpha = \beta = 90^\circ \neq \gamma$ । ध्यान रहे कि a_1^* , a_2^* , a_3^* - समतल के लंबवत् है, a_2^* , a_1^* , a_3^* - समतल के लंबवत् है और a_3^* , a_1^* , a_2^* - समतल के लंबवत् है। इसका अर्थ हुआ कि a_1^* , a_2^* एवं a_3^* , दोनों पर लंबवत् है। इसी तरह a_2^* , a_1^* और a_3^* के लंबवत् तथा a_3^* , a_1^* और a_2^* के लंबवत् है अर्थात् यहां पर सामान्य और व्युत्क्रम सदिशों में पूरी तरह से व्युत्क्रमता है। इन प्रतिबंधों का गणितीय रूप निम्न है:

$$\left. \begin{aligned} \mathbf{a}_1^* \cdot \mathbf{a}_2 = \mathbf{a}_1^* \cdot \mathbf{a}_3 = \mathbf{a}_2^* \cdot \mathbf{a}_1 = \mathbf{a}_2^* \cdot \mathbf{a}_3 = \mathbf{a}_3^* \cdot \mathbf{a}_1 = \mathbf{a}_3^* \cdot \mathbf{a}_2 = 0 \\ \mathbf{a}_1^* \cdot \mathbf{a}_1 = \mathbf{a}_2^* \cdot \mathbf{a}_2 = \mathbf{a}_3^* \cdot \mathbf{a}_3 = 1 \end{aligned} \right\}$$

निम्न अनुभागों में आप इन संबंधों का अनुप्रयोग करना सिखेंगे।

3.3 व्युत्क्रम जालक का गणितीय निरूपण

इस अनुभाग में हम सामान्य और व्युत्क्रम जालकों के बीच कुछ और संबंधों की चर्चा करेंगे। सर्वप्रथम हम सामान्य जालक में एक कोष्ठिका के रूप में समांतर षट्फलक ((parallelepiped) पर विचार करते हैं (चित्र 3.8)।



चित्र 3.8 : एक कोष्ठिका का आयतन

हम जानते हैं कि समांतर षट्फलक का आयतन, उसके आधार के क्षेत्रफल और ऊंचाई OP के गुणन के बराबर होता है। चित्र 3.8 में आप पायेंगे कि कोष्ठिका की ऊंचाई अंतरतलीय दूरी d_{001} के बराबर है। अतः हम लिख सकते हैं:

$$d_{001} = \frac{\text{कोष्ठिका का आयतन}}{\text{कोष्ठिका के आधार का क्षेत्रफल}} = \frac{(\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2) \cdot \mathbf{a}_3}{\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2} \quad (3.5)$$

और

$$\mathbf{d}_{001}^* = \frac{\hat{\mathbf{n}}}{|d_{001}|} = \frac{\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2}{(\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2) \cdot \mathbf{a}_3} \quad (3.6)$$

जहां $\hat{\mathbf{n}}$, OP की दिशा में मात्रक सदिश है। यहां हमने $c = 1$ माना है। पारिभाषिक तौर पर व्युत्क्रम जालक सदिश \mathbf{a}_3^* समतल $a_1 a_2$ के लंबवत् है और उसकी लंबाई, d_{001} के व्युत्क्रमानुपाती है। अतः समीकरण (3.2) और (3.6) के आधार पर हम लिख सकते हैं:

$$\mathbf{a}_3^* = \mathbf{d}_{001}^* = \frac{\hat{\mathbf{n}}}{|d_{001}|} = \frac{\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2}{(\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2) \cdot \mathbf{a}_3} \quad (3.7)$$

इसी प्रकार उपरोक्त विधि का अनुप्रयोग कर आप निम्नलिखित संबंध स्वयं प्राप्त कर सकते हैं:

$$\mathbf{a}_1^* = \mathbf{d}_{100}^* = \frac{\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3}{(\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3) \cdot \mathbf{a}_1} \quad (3.8)$$

और

PHE-04 पाठ्यक्रम की इकाई 1 से आप याद करें कि सदिश \mathbf{a}_1 और \mathbf{a}_2 से परिभाषित एक समांतर चतुर्भुज का क्षेत्रफल, उनके सदिश गुणनफल अर्थात् $\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2$ से मिलता है, और सदिश \mathbf{a}_1 , \mathbf{a}_2 और \mathbf{a}_3 से बने समांतर षट्फलक का आयतन उनके अदिश त्रिकगुणनफल अर्थात् $(\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2) \cdot \mathbf{a}_3$ से मिलता है। इसे $(\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3) \cdot \mathbf{a}_1$ तथा $(\mathbf{a}_3 \times \mathbf{a}_1) \cdot \mathbf{a}_2$ भी लिखा जा सकता है।

$$a_2^* = d_{010}^* = \frac{a_3 \times a_1}{(a_3 \times a_1) \cdot a_2} \quad (3.9)$$

यह सुनिश्चित करने के लिए कि आपने उपर्युक्त संकल्पनाएं समझ ली हैं, हम चाहेंगे कि आप निम्न बोध प्रश्न हल करें।

बोध प्रश्न 2

5 मिनट लगाएं

चित्र 3.9 एक यादृच्छिक समतल, जिसके मिलर सूचकांक (hkl) हैं, दिखाया गया है। व्युत्क्रम आकाश में इसे $d_{hkl}^* = ha_1^* + ka_2^* + la_3^*$ से निदर्शित किया गया है। सिद्ध करें कि d_{hkl}^* सामान्य जालक आकाश में (hkl) समतलों के लंबवत् है।

संकेत : यह सिद्ध करना पर्याप्त होगा कि (hkl) समतल का व्युत्क्रम जालक सदिश, इस समतल में किराी भी दो अरैखिक (non-linear) सदिशों के लंबवत् है।

यह सिद्ध कर लेने के बाद कि सदिश d_{hkl}^* , समतल (hkl) के लंबवत् है, आइए अब इसके परिमाण के लिए एक व्यंजक की व्युत्पत्ति करें। इसके लिए सर्वप्रथम, सदिश d_{hkl}^* के अनुदिश मात्रक सदिश को निम्न रूप से लिखते हैं:

$$\hat{n} = \frac{ha_1^* + ka_2^* + la_3^*}{|d_{hkl}^*|} \quad (3.10)$$

आगे, चित्र 3.9 में अंतराल OA , वास्तविक समष्टि में अंतरातलीय दूरी d_{hkl} है। चूंकि d_{hkl}^* , (hkl) समतल के लंबवत् है, यह इस समतल में स्थित सभी सदिशों के लंबवत् है। इसलिये यह HA के भी लंबवत् है। यदि OA और OH के बीच का कोण ϕ है तो हम लिख सकते हैं:

$$d_{hkl} = OA = OH \cos \phi \quad (3.11)$$

परंतु OH , a_1 -अक्ष पर समतल (hkl) का विच्छेद (intercept) है। अतः मिलर सूचकांकों की परिभाषा के आधार पर इसका परिमाण निम्न रूप से व्यक्त करते हैं:

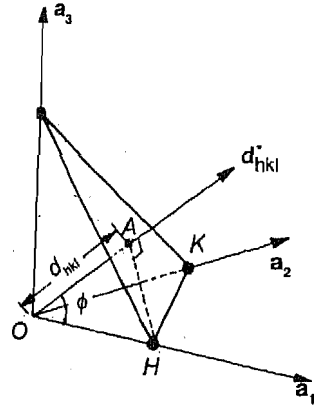
$$d_{hkl} = \frac{|a_1|}{h} \cos \phi \quad (3.12)$$

चूंकि व्युत्क्रम जालक सदिश d_{hkl}^* , OA के अनुदिश है और \hat{n} इस दिशा में मात्रक सदिश है, d_{hkl} को निम्न रूप में लिखते हैं:

$$d_{hkl} = \frac{|a_1|}{h} \cdot \hat{n} \quad (3.13)$$

समीकरण (3.13) में समीकरण (3.10) से \hat{n} का मान रखने पर हम पाते हैं:

$$d_{hkl} = \frac{a_1}{h} \cdot \frac{ha_1^* + ka_2^* + la_3^*}{|d_{hkl}^*|} \quad (3.14)$$



चित्र 3.9: (hkl) समतल का व्युत्क्रम जालक सदिश

समीकरण (3.4) से आप जानते हैं कि $\mathbf{a}_1 \cdot \mathbf{a}_2 = \mathbf{a}_1 \cdot \mathbf{a}_3 = 0$ । अतः, समीकरण (3.14) को निम्न सरलीकृत रूप में लिख सकते हैं:

$$d_{hkl} = \frac{h(1)}{h|\mathbf{d}_{hkl}^*|} = \frac{1}{|\mathbf{d}_{hkl}^*|} \quad (3.1)$$

या

$$|\mathbf{d}_{hkl}^*| = \frac{1}{d_{hkl}} \quad (3.1)$$

समीकरण (3.16) को शब्दों में व्यक्त करें तो हम कह सकते हैं कि वास्तविक समष्टि में समतलों के समुदाय को निरूपित करने वाला व्युत्क्रम जालक सदिश, इन समतलों के लंबवत् होता है और इसकी लंब वास्तविक समष्टि में अंतरातलीय दूरी के व्युत्क्रम होती है। अतः गणितीय प्रविधि से भी हमें वही निष्कर्ष प्राप्त होते हैं जो कि ज्यामितीय रचना से।

आपने ध्यान दिया होगा कि सामान्य और व्युत्क्रम जालक सदिशों में काफी समतुल्यता है: सामान्य जालक में, $p\mathbf{a}_1 + q\mathbf{a}_2 + r\mathbf{a}_3$ स्थानांतरण से किसी भी जालक बिंदु तक पहुंचा जा सकता है। व्युत्क्रम सदिश की परिभाषा $h\mathbf{a}_1^* + k\mathbf{a}_2^* + l\mathbf{a}_3^*$ से स्पष्ट है कि व्युत्क्रम आकाश में बिंदुओं का समूह एक त्रिविम जालक का निर्माण करता है जो वास्तविक समष्टि के जालक के समान ही होता है। फलस्वरूप, व्युत्क्रम जालक परिभाषित बिंदुएं भी सामान्य जालक जैसी ही सममिति प्रक्रियाएं (घूर्णन, परावर्तन, स्थानांतरण और विलोमन) दर्शाती हैं। अतः हमें व्युत्क्रम आकाश में भी त्रिनताक्ष, एकनताक्ष, विषमलंबाक्ष, षट्कोणीय, त्रिफलकीय, द्विसमलंबाक्ष और घनीय जालक प्राप्त होते हैं।

क्या आप बता सकते हैं कि व्युत्क्रम जालक का व्युत्क्रम क्या होगा? यदि आप सोच रहे हैं कि यह एक सामान्य जालक होगा, तो आप तर्कसंगत और सही हैं।

ध्यान दें कि उपर्युक्त चर्चा में हमने आनुपातिकता स्थिरांक c का मान 1 माना है। लेकिन कुछ भौतिक परिस्थितियों/निकायों के लिए इसका मान भिन्न हो सकता है। ठोस अवस्था पदार्थों के सैद्धांतिक विश्लेषण में, c का मान 2π लिया जाता है। (यह मान ठोसों में उपस्थित आवर्ती विभव के लिए श्रोडिन्गर समीकरण के हल के समविन्यास (conformity) के लिए चुना जाता है)।

3.4 विशेष क्रिस्टल संरचनाओं के व्युत्क्रम जालक

आइए अब हम उपर्युक्त चर्चा के आधार पर कुछ विशेष क्रिस्टल संरचनाओं के संगत व्युत्क्रम जालकों का निर्माण करना सिखें। सरलता के लिए, हम एक सरल घनीय (simple cubic) संरचना से शुरुआत करें हैं।

सरल घनीय संरचना

पिछली इकाई के अनुभाग 2.4 में आपने पढ़ा कि वास्तविक समष्टि में घनीय संरचना के अभाज्य जालक सदिश निम्न संबंधों से अभिलक्षित होते हैं:

$$a_1 = a_2 = a_3 = a \text{ और } \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$$

चूंकि बेसिस सदिश (basis vectors) एक दूसरे के लंबवत् हैं, समीकरण (2.4) के आधार पर हम लिख सकते हैं:

$$\begin{aligned} \mathbf{a}_1 &= a \hat{i} \\ \mathbf{a}_2 &= a \hat{j} \\ \mathbf{a}_3 &= a \hat{k} \end{aligned}$$

समीकरण (3.8) में उपरोक्त संबंधों का उपयोग करने पर हमें निम्नलिखित व्युत्क्रम जालक सदिश प्राप्त होते हैं:

$$\mathbf{a}_1^* = c \frac{\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3}{(\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3) \cdot \mathbf{a}_1} = c \frac{a\hat{j} \times a\hat{k}}{(a\hat{j} \times a\hat{k}) \cdot a\hat{i}} = c \frac{a^2 \hat{i}}{a^3 (\hat{i} \cdot \hat{i})} = c \frac{\hat{i}}{a} \quad (3.17)$$

इसी तरह समीकरण (3.9) और (3.7) के आधार पर हम लिख सकते हैं:

$$\mathbf{a}_2^* = c \frac{\hat{j}}{a} \quad (3.18)$$

और

$$\mathbf{a}_3^* = c \frac{\hat{k}}{a} \quad (3.19)$$

अब प्रश्न है कि इन परिणामों से हम क्या निष्कर्ष निकाल सकते हैं? आप गौर करें कि तीनों व्युत्क्रम जालक सदिश, समान लंबाई (c/a) के तथा परस्पर लंबवत् हैं। यह चित्र 3.10 में दिखाया गया है। सरल घनीय (sc) संरचना के व्युत्क्रम जालक सदिश प्राप्त करने के बाद, आइए अब हम फलक केंद्रित (fcc) घनीय संरचना पर विचार करें।

फलक-केंद्रित घनीय संरचना

चित्र 3.11 में दिखाये गये fcc क्रिस्टल के लिये अभाज्य जालक सदिश, समीकरण (2.11) के आधार पर निम्न रूप में परिभाषित किए जा सकते हैं:

$$\mathbf{a}_1 = \frac{a}{2} (\hat{j} + \hat{k}),$$

$$\mathbf{a}_2 = \frac{a}{2} (\hat{k} + \hat{i}),$$

एवं

$$\mathbf{a}_3 = \frac{a}{2} (\hat{i} + \hat{j}),$$

किसी fcc संरचना के व्युत्क्रम जालक सदिशों का निर्धारण करने के लिए सर्वप्रथम हम वास्तविक सर्गण में उपर्युक्त सदिशों द्वारा परिभाषित अभाज्य एकक कोष्ठिका का आयतन परिकलित करते हैं:

$$\text{कोष्ठिका का आयतन } V_f = (\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2) \cdot \mathbf{a}_3 \quad (3.20)$$

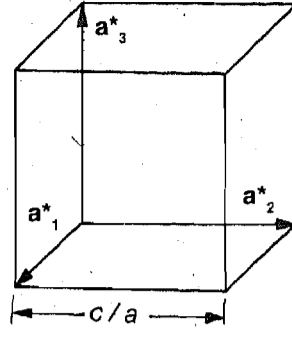
$$= \left\{ \left[\frac{a}{2} (\hat{j} + \hat{k}) \right] \times \left[\frac{a}{2} (\hat{k} + \hat{i}) \right] \right\} \cdot \left[\frac{a}{2} (\hat{i} + \hat{j}) \right] \quad (3.21)$$

$$= \frac{a^3}{8} [\hat{j} \times \hat{k} + \hat{j} \times \hat{i} + \hat{k} \times \hat{k} + \hat{k} \times \hat{i}] \cdot [\hat{i} + \hat{j}]$$

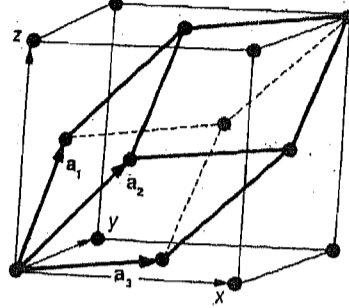
$$= \frac{a^3}{8} [\hat{i} - \hat{k} + \mathbf{0} + \hat{j}] \cdot [\hat{i} + \hat{j}]$$

$$= \frac{a^3}{8} (1+1)$$

$$= \frac{a^3}{4} \quad (3.22)$$



चित्र 3.10: सरल घनीय संरचना का व्युत्क्रम जालक



चित्र 3.11: fcc जालक की अभाज्य कोष्ठिका

$$\begin{aligned}
 \mathbf{a}_1^* &= c \frac{\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3}{V_f} = c \frac{\left[\frac{a}{2}(\hat{\mathbf{k}} + \hat{\mathbf{i}}) \right] \times \left[\frac{a}{2}(\hat{\mathbf{i}} + \hat{\mathbf{j}}) \right]}{\frac{a^3}{4}} \\
 &= \frac{c}{a} (\hat{\mathbf{k}} \times \hat{\mathbf{i}} + \hat{\mathbf{k}} \times \hat{\mathbf{j}} + \hat{\mathbf{i}} \times \hat{\mathbf{i}} + \hat{\mathbf{i}} \times \hat{\mathbf{j}}) \\
 &= \frac{c}{a} (\hat{\mathbf{j}} - \hat{\mathbf{i}} + 0 + \hat{\mathbf{k}}) \\
 &= \frac{c}{a} (-\hat{\mathbf{i}} + \hat{\mathbf{j}} + \hat{\mathbf{k}})
 \end{aligned} \tag{3.2}$$

इसी तरह हम अन्य व्युत्क्रम जालक सदिशों के लिए निम्न व्यंजक प्राप्त कर सकते हैं:

$$\mathbf{a}_2^* = \frac{c}{a} (\hat{\mathbf{i}} - \hat{\mathbf{j}} + \hat{\mathbf{k}}) \tag{3.2}$$

$$\mathbf{a}_3^* = \frac{c}{a} (\hat{\mathbf{i}} + \hat{\mathbf{j}} - \hat{\mathbf{k}}) \tag{3.2}$$

यदि c का मान 2 लिया जाए तो समीकरण (3.24), (3.25) और (3.26) समीकरण (2.10) द्वारा परिभाषित अंतः केंद्रित घनीय (bcc) जालक के अभाज्य जालक सदिशों के समान हो जाएंगे। अतः फलक केंद्रित घनीय जालक का व्युत्क्रम जालक, अंतः केंद्रित घनीय जालक है।

उपर्युक्त तर्क को हम बाकी के क्रिस्टल समूहों पर भी लागू कर सकते हैं। चूंकि सामान्य और व्युत्क्रम जालक में समान सममिति प्रक्रियाएं प्रेक्षित होती हैं, एक सामान्य जालक और उसका व्युत्क्रम जालक एक ही क्रिस्टल समूह में अंतर्निहित होते हैं। दूसरे शब्दों में एकनताक्ष, त्रिनताक्ष..... और घनीय जालकों के व्युत्क्रम जालक भी क्रमशः एकनताक्ष, त्रिनताक्ष.... और घनीय होते हैं। परन्तु एक ही क्रिस्टल समूह के दो जालकों की ब्रैवे संरचनाएं भिन्न हो सकती हैं।

अब आप निम्न बोध प्रश्न हल करें।

5 मिनट लगाएं

बोध प्रश्न 3

सिद्ध कीजिये कि अंतः केंद्रित घनीय (bcc) संरचना की व्युत्क्रम जालक संरचना, फलक केंद्रित घनीय (fcc) होती है।

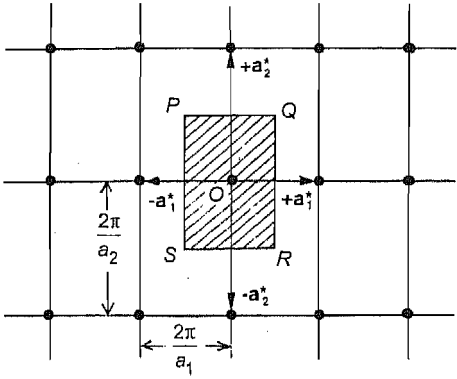
3.5 ब्रिलुवा क्षेत्र (Brillouin zone)

इकाई 2 में आपने पढ़ा कि सामान्य क्रिस्टल जालक की अभाज्य एकक कोष्ठिका एक ऐसी एकक कोष्ठिका है जिसका आयतन लघुतम होता है। अब आप पूछ सकते हैं कि एक व्युत्क्रम जालक के लिए अभाज्य एकक कोष्ठिका को किस प्रकार परिभाषित करते हैं? इस प्रश्न का उत्तर है: व्युत्क्रम जालक की अभाज्य एकक कोष्ठिका एक विंगनर-साइडज कोष्ठिका है जिसे प्रथम ब्रिलुवा क्षेत्र (first Brillouin zone-FBZ) कहते हैं। यह संकल्पना ठोसों के बैंड सिद्धांत (band theory of solids) के आधार पर ठोसों की इलेक्ट्रॉनिक संरचना को समझने के लिए काफी उपयोगी है। इस पाठ्यक्रम की इकाई 10 में आप इसके

जालक सदिशों के लंबवत एवं द्विभाजक समतलों द्वारा होती है।

अब हम एक द्विविम (2-D) आयताकार (rectangular) व्युत्क्रम जालक के लिए प्रथम ब्रिलुवा क्षेत्र की रचना विधि की चर्चा करते हैं जिससे उपर्युक्त बातें स्पष्ट हो जाएं। चित्र 3.12 को देखें जिसमें O को मूल बिंदु माना गया है। प्रथम ब्रिलुवा क्षेत्र की रचना करने के लिए:

- मूल बिन्दु O को उसके नजदीकी पड़ोसी व्युत्क्रम जालक बिंदुओं से जोड़ते हैं, जिससे हमें $\mathbf{a}_1^*, \mathbf{a}_2^*, -\mathbf{a}_1^*$ और $-\mathbf{a}_2^*$ प्राप्त होते हैं।
- सदिश $\mathbf{a}_2^*, \mathbf{a}_1^*, -\mathbf{a}_2^*$ और $-\mathbf{a}_1^*$ के लंबवत् द्विभाजक क्रमशः PQ, QR, RS और SP आरेखित करते हैं।
- इन द्विभाजकों द्वारा आच्छादित क्षेत्रफल ($PQRS$), दिए गए द्विविम आयताकार व्युत्क्रम जालक का प्रथम ब्रिलुवा क्षेत्र है।



चित्र 3.12: एक आयताकार व्युत्क्रम जालक का प्रथम ब्रिलुवा क्षेत्र (FBZ)

आगे बढ़ने से पहले आप कुछ अन्य ज्यामितिय संरचनाओं के लिए प्रथम ब्रिलुवा क्षेत्र आरेखित करना चाहेंगे।

बोध प्रश्न 4

10 मिनट लगाएं

(क) एक 2-D तिर्यक (oblique) व्युत्क्रम जालक तथा (ख) एक 3-D सरल घनीय (sc) व्युत्क्रम जालक के लिए प्रथम ब्रिलुवा क्षेत्र आरेखित करें।

उपर्युक्त बोध प्रश्न को हल करते हुए आपने पाया होगा कि एक 2-D तिर्यक जालक का प्रथम ब्रिलुवा क्षेत्र षट्कोणीय आकार वाला होता है तथा 3-D सरल घनीय जालक का प्रथम ब्रिलुवा क्षेत्र भी एक घन ही होता है जिसकी भुजाओं की लम्बाई $\frac{2\pi}{a}$ होती है।

त्रिविम सरल घनीय व्युत्क्रम जालक के व्युत्क्रम जालक सदिश समीकरण (3.17), (3.18) और (3.19)

द्वारा व्यक्त होते हैं। अगर c का मान 2π लें तो ये समीकरण निम्न रूप लेते हैं: $\mathbf{a}_1^* = \frac{2\pi}{a} \hat{i}$,

$\mathbf{a}_2^* = \frac{2\pi}{a} \hat{j}$ और $\mathbf{a}_3^* = \frac{2\pi}{a} \hat{k}$ । 6 व्युत्क्रम जालक सदिशों, $\pm \mathbf{a}_1^*, \pm \mathbf{a}_2^*$ और $\pm \mathbf{a}_3^*$ के मध्य बिंदुओं

पर लंबवत् स्थित समतलों द्वारा प्रथम ब्रिलुवा क्षेत्र की सीमाएं निर्धारित होती हैं:

$$\pm \frac{2\pi}{2a} \mathbf{a}_1^* = \pm \frac{\pi}{a} \hat{i}$$

$$\pm \frac{2\pi}{2a} \mathbf{a}_2^* = \pm \frac{\pi}{a} \hat{j}$$

और

$$\pm \frac{2\pi}{2a} \mathbf{a}_3^* = \pm \frac{\pi}{a} \hat{k} \quad (3.27)$$

ये छह समतल एक घन बनाते हैं, जिसकी भुजाओं की लंबाई का मान $\frac{2\pi}{a}$ है।

उपर्युक्त विधि का अनुसरण कर हम एक bcc जालक का भी प्रथम ब्रिलुवा क्षेत्र आरेख प्राप्त कर सकते हैं। इस स्थिति में व्युत्क्रम जालक सदिशों के व्यंजक निम्नलिखित होंगे:

$$\mathbf{a}_1^* = \frac{2\pi}{a}(\hat{j} + \hat{k}),$$

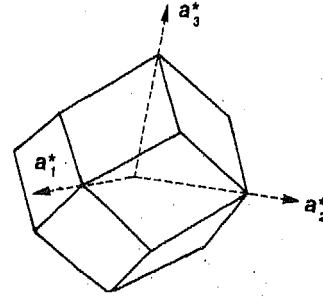
$$\mathbf{a}_2^* = \frac{2\pi}{a}(\hat{k} + \hat{i}),$$

और

$$\mathbf{a}_3^* = \frac{2\pi}{a}(\hat{i} + \hat{j}) \quad (3.28)$$

आगे, व्युत्क्रम सदिश $\mathbf{V} = h\mathbf{a}_1^* + k\mathbf{a}_2^* + l\mathbf{a}_3^*$

$$= \frac{2\pi}{a}[(k+l)\hat{i} + (h+l)\hat{j} + (h+k)\hat{k}] \quad (3.29)$$



चित्र 3.13: एक अंतःकेंद्रित घनीय व्युत्क्रम जालक का प्रथम ब्रिलुवा क्षेत्र

12 सबसे छोटे और अशून्य परिमाण वाले व्युत्क्रम सदिश निम्न हैं:

$\frac{2\pi}{a}(\pm\hat{i} \pm \hat{j})$; $\frac{2\pi}{a}(\pm\hat{j} \pm \hat{k})$; $\frac{2\pi}{a}(\pm\hat{i} \pm \hat{k})$ । इन 12 सदिशों के लंबवत् द्विभाजक समतलों द्वारा परिबद्ध क्षेत्र, प्रथम ब्रिलुवा क्षेत्र है जिसका आकार 12-फलकित ठोस के समान है। इस प्रथम ब्रिलुवा क्षेत्र को चित्र 3.13 में दिखाया गया है, और इस आकार को विषमलंबाक्ष द्वादशफलक (rhombic dodecahedron) कहते हैं।

ब्रिलुवा क्षेत्र की रचना विधि जान लेने के बाद आप एक बोध प्रश्न हल करना चाहेंगे।

5 मिनट लगाएं

बोध प्रश्न 5

फलक केंद्रित घनीय जालक के लिए प्रथम ब्रिलुवा क्षेत्र निर्धारित करें।

इस इकाई में आपने जो कुछ सीखा आइए अब उसे सारांशित करें।

3.6 सारांश

- प्रत्येक क्रिस्टल संरचना के संगत दो प्रकार के जालक परिभाषित किए जा सकते हैं: वास्तविक समष्टि में सामान्य क्रिस्टल जालक तथा व्युत्क्रम आकाश में व्युत्क्रम जालक।
- व्युत्क्रम जालक सदिश और सामान्य जालक सदिश निम्नलिखित व्यंजकों द्वारा एक दूसरे से संबंधित हैं:

$$\mathbf{a}_1^* = \frac{\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3}{(\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3) \cdot \mathbf{a}_1}, \quad \mathbf{a}_2^* = \frac{\mathbf{a}_3 \times \mathbf{a}_1}{(\mathbf{a}_3 \times \mathbf{a}_1) \cdot \mathbf{a}_2} \quad \text{और} \quad \mathbf{a}_3^* = \frac{\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2}{(\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2) \cdot \mathbf{a}_3}$$

जहां $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$ सामान्य जालक के अभाज्य सदिश हैं और $\mathbf{a}_1^*, \mathbf{a}_2^*, \mathbf{a}_3^*$ व्युत्क्रम जालक सदिश हैं।

- सरल घनीय सामान्य जालक की व्युत्क्रम जालक संरचना भी सरल घनीय होती है।
- फलक केंद्रित घनीय जालक का व्युत्क्रम जालक, अंतः केंद्रित घनीय होता है और अंतः केंद्रित घनीय जालक का व्युत्क्रम जालक, फलक केंद्रित घनीय होता है।
- प्रथम ब्रिलुवा क्षेत्र (FBZ), व्युत्क्रम जालक की अभाज्य एकक कोष्ठिका है। सामान्य जालक में विग्नैर-साइट्ज कोष्ठिका की तरह ही इसकी रचना की जा सकती है।

1. एक सामान्य जालक के अभाज्य स्थानांतरण सदिश निम्नलिखित हैं:

$$\mathbf{a}_1 = 2\hat{i} + \hat{j}, \quad \mathbf{a}_2 = 2\hat{j} \quad \text{और} \quad \mathbf{a}_3 = \hat{k}$$

इस जालक के संगत व्युत्क्रम जालक के अभाज्य स्थानांतरण सदिश निर्धारित करें।

2. एक षट्कोणीय सामान्य जालक के अभाज्य स्थानांतरण सदिश निम्नलिखित हैं:

$$\mathbf{a}_1 = \frac{a}{2}\hat{i} + \frac{1}{16}a\hat{j}, \quad \mathbf{a}_2 = -\frac{a}{2}\hat{i} + \frac{1}{16}a\hat{j} \quad \text{और} \quad \mathbf{a}_3 = c\hat{k}$$

इस जालक के (i) अभाज्य एकक कोष्ठिका का आयतन तथा (ii) व्युत्क्रम जालक के अभाज्य स्थानांतरण सदिश निर्धारित करें।

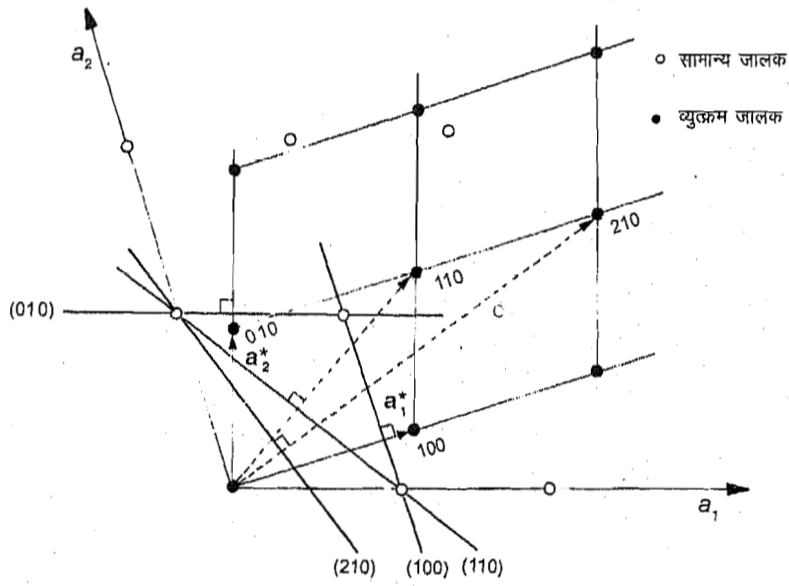
3. अंतः केंद्रित घनीय संरचना का जालक स्थिरांक 3.5 \AA है। इस जालक के प्रथम ब्रिलुवां क्षेत्र की परिसीमाएं ज्ञात करें।

4. सरल घनीय जालक के उदाहरण के आधार पर सिद्ध करें कि किसी व्युत्क्रम जालक की एकक कोष्ठिका का आयतन उसके संगत सामान्य जालक की एकक कोष्ठिका के आयतन का व्युत्क्रमानुपाती होता है।

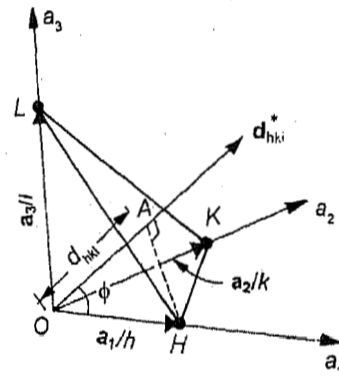
3.8 हल और उत्तर

बोध प्रश्न

1. मुख्य व्युत्क्रम जालक सदिश $\mathbf{a}_1^*, \mathbf{a}_2^*$ और (100), (110), (010) और (210) समतलों के लिए व्युत्क्रम जालक बिंदु चित्र 3.14 में दिखाये गये हैं।



चित्र 3.14 : व्युत्क्रम आकाश में क्रिस्टल समतलों का निरूपण



चित्र 3.15 : (hkl) समतलों के व्युत्क्रम जालक सदिश

2. (hkl) मिलर सूचकांकों वाला समतल a_1, a_2 तथा a_3 क्रिस्टल अक्षों को क्रमशः $\frac{a_1}{h}, \frac{a_2}{k}$ और $\frac{a_3}{l}$ पर दिखेदित करता है। यह चित्र 3.15 में दिखाया है। यदि इस समतल में स्थित किन्हीं

दो आरेखीय (non-linear) सदिशों का \mathbf{d}_{hkl}^* के साथ अदिश गुणनफल का मान शून्य हो तो हम

कह सकते हैं कि d_{hkl}^* इस समतल के लंबवत है। सदिश HK और KL , समतल (hkl) में स्थित हैं।

चूंकि हम लिख सकते हैं: $HK = \frac{a_1}{h} - \frac{a_2}{k}$

$$d_{hkl}^* \cdot HK = (ha_1^* + ka_2^* + la_3^*) \cdot \left(\frac{a_1}{h} - \frac{a_2}{k} \right)$$

$$= a_1^* \cdot a_1 - a_2^* \cdot a_2$$

समीकरण (3.4) से यह स्पष्ट है कि उपर्युक्त दोनों अदिश गुणनफलों का मान 1 है। अतः $d_{hkl}^* \cdot HK = 1$

इसी प्रकार, $KL = \frac{a_2}{k} - \frac{a_3}{l}$

और $d_{hkl}^* \cdot KL = (ha_1^* + ka_2^* + la_3^*) \cdot \left(\frac{a_2}{k} - \frac{a_3}{l} \right) = 0$

चूंकि, d_{hkl}^* , समतल में स्थित दो अदिश सदिशों के लंबवत है, d_{hkl}^* इस समतल में स्थित सभी सदिशों के लंबवत है, तथा (hkl) सूचकांकों द्वारा निर्देशित सभी समतलों के समुदाय के लंबवत है।

3. अंतः केंद्रित घनीय (bcc) जालक के अभाज्य आधार सदिश समीकरण (2.10) द्वारा परिभाषित है:

$$a_1 = \frac{a}{2}(-\hat{i} + \hat{j} + \hat{k})$$

$$a_2 = \frac{a}{2}(\hat{i} - \hat{j} + \hat{k})$$

और

$$a_3 = \frac{a}{2}(\hat{i} + \hat{j} - \hat{k})$$

अतः अभाज्य कोष्ठिका का आयतन

$$V_b = (a_1 \times a_2) \cdot a_3$$

$$= \left\{ \left[\frac{a}{2}(-\hat{i} + \hat{j} + \hat{k}) \right] \times \left[\frac{a}{2}(\hat{i} - \hat{j} + \hat{k}) \right] \right\} \cdot \left[\frac{a}{2}(\hat{i} + \hat{j} - \hat{k}) \right]$$

$$= \frac{a^3}{8} [-\hat{i} \times \hat{i} + \hat{i} \times \hat{j} - \hat{i} \times \hat{k} + \hat{j} \times \hat{i} - \hat{j} \times \hat{j} + \hat{j} \times \hat{k} + \hat{k} \times \hat{i} - \hat{k} \times \hat{j} + \hat{k} \times \hat{k}] \cdot (\hat{i} + \hat{j} - \hat{k})$$

$$= \frac{a^3}{8} [0 + \hat{k} + \hat{j} - \hat{k} + 0 + \hat{i} + \hat{j} + \hat{i} + 0] \cdot (\hat{i} + \hat{j} - \hat{k})$$

$$= \frac{a^3}{8} [2\hat{i} + 2\hat{j}] \cdot (\hat{i} + \hat{j} - \hat{k})$$

$$= \frac{a^3}{2}$$

आगे, व्युत्क्रम सदिश का व्यंजक है:

$$a_1^* = c \frac{a_2 \times a_3}{V_b} = c \frac{\left[\frac{a}{2}(\hat{i} - \hat{j} + \hat{k}) \right] \times \left[\frac{a}{2}(\hat{i} + \hat{j} - \hat{k}) \right]}{\frac{a^3}{2}}$$

$$\begin{aligned}
 &= \frac{c}{2a} [\hat{i} \times \hat{i} + \hat{i} \times \hat{j} - \hat{i} \times \hat{k} - \hat{j} \times \hat{i} - \hat{j} \times \hat{j} + \hat{j} \times \hat{k} + \hat{k} \times \hat{i} + \hat{k} \times \hat{j} - \hat{k} \times \hat{k}] \\
 &= \frac{c}{2a} [0 + \hat{k} + \hat{j} + \hat{k} + 0 + \hat{i} + \hat{j} - \hat{i} + 0] \\
 &= \frac{c}{2a} [2\hat{j} + 2\hat{k}] \\
 &= \frac{c}{a} (\hat{j} + \hat{k})
 \end{aligned}$$

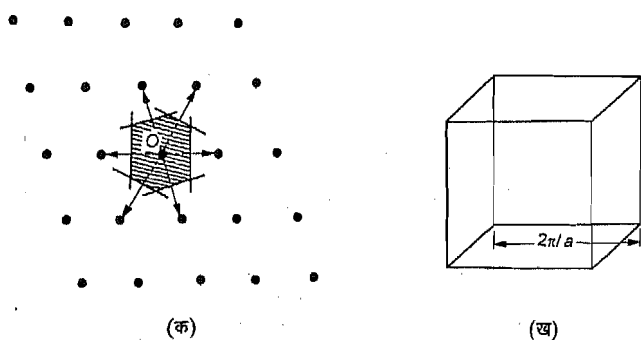
इसी तरह

$$\mathbf{a}_2^* = \frac{c}{a} (\hat{i} + \hat{k})$$

$$\mathbf{a}_3^* = \frac{c}{a} (\hat{i} + \hat{j})$$

$c = 2$ रखने पर ये व्युत्क्रम सदिश एक फलक केंद्रित घनीय (fcc) जालक के अभाज्य बेसिस सदिशों को व्यक्त करते हैं।

4. (क) द्विविम तिर्यक जालक के प्रथम ब्रिलुवा क्षेत्र को चित्र 3.16 क में दिखाया गया है; (ख) त्रिविम सरल घनीय व्युत्क्रम जालक के प्रथम ब्रिलुवा क्षेत्र को चित्र 3.16 ख में दिखाया गया है।



चित्र 3.16 : क) 2-D तिर्यक व्युत्क्रम जालक; और ख) 3-D सरल घनीय व्युत्क्रम जालक के प्रथम ब्रिलुवा क्षेत्र

5. एक फलक केंद्रित घनीय जालक का प्रथम ब्रिलुवा क्षेत्र, समीकरण (3.24), (3.25) और (3.26) द्वारा परिभाषित इसके व्युत्क्रम जालक सदिशों के आधार पर प्राप्त किया जा सकता है। मान लें कि व्युत्क्रम जालक सदिश

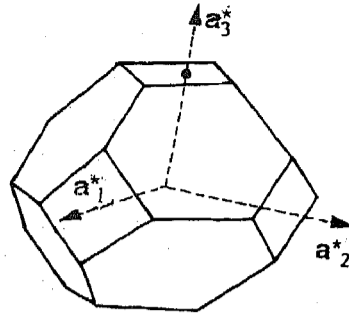
$$\mathbf{G} = h\mathbf{a}_1^* + k\mathbf{a}_2^* + l\mathbf{a}_3^* \text{ है।}$$

आनुपातिकता स्थिरांक $c = 2\pi$ रखने पर हम लिख सकते हैं:

$$\mathbf{G} = \frac{2\pi}{a} [(-h+k+l)\hat{i} + (h-k+l)\hat{j} + (h+k-l)\hat{l}]$$

शून्येतर लघुतम लंबाई वाले 8 व्युत्क्रम सदिश \mathbf{G} निम्न है: $\frac{2\pi}{a}(\pm\hat{i} \pm \hat{j} \pm \hat{k})$ । प्रथम ब्रिलुवा क्षेत्र की परिसीमाएं उपरोक्त 8 सदिशों के लंबवत् एवं समद्विभाजक समतलों से बनती हैं। परंतु इस अष्टभुज के कोने उन समतलों द्वारा विच्छेदित होते हैं जो कि अगले पड़ोसी 6 व्युत्क्रम जालक सदिशों के लंबवत् द्विभाजक हैं।

अंत में कुछ प्रश्न



चित्र 3.17 : एक फलक केंद्रित घनीय व्युत्क्रम जालक का प्रथम त्रिलुंबा क्षेत्र

1. व्युत्क्रम जालक एकक कोष्ठिका के आयतन का व्यंजक है:

$$\begin{aligned} V_{uc} &= (\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2) \cdot \mathbf{a}_3 \\ &= [(2\hat{i} + \hat{j}) \times (2\hat{j})] \cdot \hat{k} \\ &= [4\hat{k} - 0] \cdot \hat{k} \\ &= 4 \end{aligned}$$

और व्युत्क्रम जालक सदिश के व्यंजक निम्नलिखित है :

$$\mathbf{a}_1^* = \frac{\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3}{4} = \frac{2\hat{j} \times \hat{k}}{4} = \frac{2\hat{i}}{4} = \frac{\hat{i}}{2},$$

$$\mathbf{a}_2^* = \frac{\mathbf{a}_3 \times \mathbf{a}_1}{4} = \frac{\hat{k} \times (2\hat{i} + \hat{j})}{4} = \frac{2\hat{j} - \hat{i}}{4}$$

एवं

$$\mathbf{a}_3^* = \frac{\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2}{4} = \frac{(2\hat{i} + \hat{j}) \times 2\hat{j}}{4} = \frac{4\hat{k}}{4} = \hat{k}$$

2. (i) अभाज्य एकक कोष्ठिका के आयतन का व्यंजक है :

$$\begin{aligned} V_h &= (\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2) \cdot \mathbf{a}_3 \\ &= \left[\left(\frac{a}{2}\hat{i} + \frac{a}{16}\hat{j} \right) \times \left(-\frac{a}{2}\hat{i} + \frac{a}{16}\hat{j} \right) \right] \cdot (c\hat{k}) \end{aligned}$$

$$= \begin{vmatrix} \frac{a}{2} & \frac{a}{16} & 0 \\ -\frac{a}{2} & \frac{a}{16} & 0 \\ 0 & 0 & c \end{vmatrix}$$

$$= \frac{a}{2} \left(\frac{ac}{16} \right) + \frac{a}{16} \left(\frac{ac}{2} \right) = \frac{a^2c}{16}$$

(ii) अभाज्य व्युत्क्रम जालक सदिश निम्नलिखित है:

$$\mathbf{a}_1^* = \frac{\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3}{V_h} = \frac{\left(-\frac{a}{2}\hat{i} + \frac{a}{16}\hat{j} \right) \times (c\hat{k})}{V_h}$$

$$= \frac{\frac{ac}{2}\hat{j} + \frac{ac}{16}\hat{i}}{V_h} = \frac{16}{a^2c} \left[\frac{ac}{16}\hat{i} + \frac{ac}{2}\hat{j} \right]$$

$$= \frac{\hat{i}}{a} + \frac{8\hat{j}}{a}$$

$$\mathbf{a}_2^* = \frac{\mathbf{a}_3 \times \mathbf{a}_1}{V_h} = \frac{(c\hat{k}) \times \left(\frac{a}{2}\hat{i} + \frac{a}{16}\hat{j} \right)}{V_h}$$

$$= \frac{\frac{ac}{2}\hat{j} - \frac{ac}{16}\hat{i}}{V_h} = \frac{16}{a^2c} \left[-\frac{ac}{16}\hat{i} + \frac{ac}{2}\hat{j} \right]$$

$$= -\frac{\hat{i}}{a} + \frac{8\hat{j}}{a}$$

$$\mathbf{a}_3^* = \frac{\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2}{V_h} = \frac{\left(\frac{a}{2}\hat{i} + \frac{a}{16}\hat{j} \right) \times \left(-\frac{a}{2}\hat{i} + \frac{a}{16}\hat{j} \right)}{V_h}$$

$$= \frac{\frac{a^2}{32}\hat{k} + \frac{a^2}{32}\hat{k}}{V_h} = \frac{16}{a^2c} \left[\frac{a^2}{16}\hat{k} \right] = \frac{\hat{k}}{c}$$

- 3) व्युत्क्रम जालक सदिशों $\frac{2\pi}{a}(\pm\hat{i} \pm \hat{j})$, $\frac{2\pi}{a}(\pm\hat{j} \pm \hat{k})$ और $\frac{2\pi}{a}(\pm\hat{i} \pm \hat{k})$ को लंबवत द्विभाजित करने वाले समतलों द्वारा bcc जालक के प्रथम ब्रिलुवा क्षेत्र का निर्माण होता है। अतः FBZ की परिसीमाएं होंगी $\frac{1}{2} \frac{2\pi}{a}(\hat{i} + \hat{j}) = \frac{\pi}{3.5}(\hat{i} + \hat{j}) \text{ \AA}^{-1}$ और इसी तरह हम अन्य परिसीमाएं $\frac{\pi}{3.5}(\hat{i} - \hat{j}) \text{ \AA}^{-1}$; $\frac{\pi}{3.5}(-\hat{i} + \hat{j}) \text{ \AA}^{-1}$, ..., $\frac{\pi}{3.5}(-\hat{i} - \hat{k}) \text{ \AA}^{-1}$ निर्धारित कर सकते हैं। ये 12 बिंदु क्रिस्टल जालक के FBZ की परिसीमाएं परिभाषित करते हैं।

4. सामान्य जालक में सरल घनीय समूह की एकक कोष्ठिका की भुजाओं की लम्बाई a है तथा इस कोष्ठिका का आयतन a^3 है। व्युत्क्रम जालक में, एकक कोष्ठिका के भुजा की लम्बाई $\frac{2\pi}{a}$ है

(समीकरण (3.27))। इस लिए, इस कोष्ठिका का आयतन $\left(\frac{2\pi}{a}\right)^3 = \frac{8\pi^3}{a^3}$ होगा जो सामान्य जालक में एकक कोष्ठिका के आयतन, a^3 , के व्युत्क्रमानुपाती है।

वास्तविक समष्टि	real space
व्युत्क्रम आकाश	reciprocal space
व्युत्क्रम जालक	reciprocal lattice
सामान्य जालक	direct lattice
ब्रिलुवां क्षेत्र	Brillouin zone
आवर्ती विभव	periodic potential
इलेक्ट्रॉनिक संरचना	electronic structure
आनुपातिकता स्थिरांक	constant of proportionality
व्युत्क्रम जालक सदिश	reciprocal lattice vector (RLV)
लंबकोणीय	orthogonal
समांतर षट्फलक	parallelepiped
तिर्यक	oblique

इकाई 4 संरचना निर्धारित करने की तकनीकें

इकाई की रूपरेखा

- 4.1 प्रस्तावना
उद्देश्य
- 4.2 क्रिस्टल द्वारा ऐक्स-किरण विवर्तन
ब्रैग संरूपण
लाउए संरूपण : संरचना गुणक
- 4.3 ऐक्स-किरण विवर्तन और व्युत्क्रम जालक
- 4.4 क्रिस्टल संरचनाओं का निर्धारण
ऐक्स-किरण विवर्तन
न्यूट्रॉन और इलेक्ट्रॉन विवर्तन
- 4.5 सारांश
- 4.6 अंत में कुछ प्रश्न
- 4.7 हल और उत्तर
- 4.8 शब्दावली

4.1 प्रस्तावना

इस खंड की पिछली इकाईयों में आपने पढ़ा कि बिंदु और आकांश समूह सममितियों के आधार पर क्रिस्टलों का वर्गीकरण किस प्रकार करते हैं। आपने यह भी सीखा कि बाह्य फलकों, घनत्वों और आयतनों के आधार पर क्रिस्टलों के संरचना और स्वरूप से संबंधित जानकारी किस प्रकार प्राप्त की जाती है। परंतु परमाण्विक स्तर पर क्रिस्टल को परिभाषित करने के लिए यह जानकारी पर्याप्त नहीं है। ऐक्स-किरणों के आविष्कार के कारण क्रिस्टल में परमाणुओं की आंतरिक व्यवस्था को यथार्थ रूप से प्रकट करने के लिए परिशुद्ध विधि विकसित हुई। जब अंतरापरमाणुक दूरियों के समतुल्य तरंगदैर्घ्य वाली ऐक्स-किरणें क्रिस्टल के परमाणुओं से परस्पर क्रिया करती हैं तब वे विवर्तन प्रतिरूप (diffraction pattern) उत्पन्न करती हैं। यह प्रतिरूप समुचित उपकरणों द्वारा अंकित (record) किए जाते हैं।

सन् 1912 में लाउए (Laue) ने सुझाव दिया कि जब ऐक्स-किरणों का पुंज क्रिस्टल पर आपतित होता है, तब प्रत्येक परमाणु प्रकीर्णित तरंगों (scattered waves) के स्रोत की तरह व्यवहार करता है। इन तरंगों का संपोषी व्यतिकरण (constructive interference) विशिष्ट दिशा में उच्च तीव्रता उत्पन्न करता है। इसके फलस्वरूप, क्वार्ट्ज और रॉक सॉल्ट जैसे क्रिस्टलीय पदार्थों के लिए, फोटोग्राफिक प्लेट पर विविक्त (discrete) तीक्ष्ण विवर्तन बिंदु प्राप्त होते हैं। लेकिन कांच जैसे अक्रिस्टलीय पदार्थों के लिए हमें विसरित (diffused) धब्बे मिलते हैं। इन प्रतिरूपों का विश्लेषण करने पर हमें क्रिस्टल में उपस्थित परमाणुओं के प्रकार, प्रति एकांक आयतन में उनकी संख्या, उनके सापेक्ष आकार, स्थान एवं विन्यास के बारे में जानकारी मिलती है। अनुभाग 4.2 में हम किसी परमाणु में उपस्थित इलेक्ट्रॉनों द्वारा ऐक्स-किरण प्रकीर्णन के सैद्धांतिक पहलू पर विचार करेंगे। आगे, क्रिस्टल के सभी परमाणुओं द्वारा प्रकीर्णन निर्धारित करने के लिए हमें इन तरंगों पर क्रिस्टल में उपस्थित सभी इलेक्ट्रॉनों के प्रभाव का संकलन करने की आवश्यकता होती है। ऐक्स-किरणों का क्रिस्टल द्वारा विवर्तित होने की शर्तें, ब्रैग (Bragg) और लाउए (Laue) सूत्रों से निर्धारित होती हैं।

व्युत्क्रम जालक की संकल्पना, क्रिस्टलीय समतलों द्वारा ऐक्स-किरणों के विवर्तन को समझने का एक सुविधाजनक तरीका है। अनुभाग 4.3 में हम व्युत्क्रम जालक के संकल्पना के परिपेक्ष में विवर्तन शर्तों की पुनः जांच करेंगे। आप पायेंगे कि विवर्तन प्रतिरूप का फोटोग्राफ वस्तुतः व्युत्क्रम जालक सदिशों का अभिलेख ही होता है। अनुभाग 4.4 में आप ठोसों की संरचना निर्धारित करने के लिए प्रयुक्त विविध ऐक्स-किरण तकनीकों के बारे में पढ़ेंगे। यहां यह बता देना उपयुक्त होगा कि इन विवर्तन तकनीकों के

जब विकिरण, बिंदु स्वरूप परमाणु द्वारा सभी दिशाओं में परावर्तित होता है तब प्रकीर्णन (scattering) शब्द का उपयोग करते हैं। क्रिस्टलीय समतलों जैसे पृष्ठों द्वारा तरंगों के विचलित होने पर मुख्यतया परावर्तन (reflection) शब्द का उपयोग करते हैं। क्रिस्टल समतल परमाणुओं की आवर्ती व्यवस्था से बने होते हैं। दोनों प्रक्रियाओं में रचनात्मक व्यतिकरण की शर्तें संतुष्ट होने पर विवर्तन उच्चिष्ठ प्राप्त होता है।