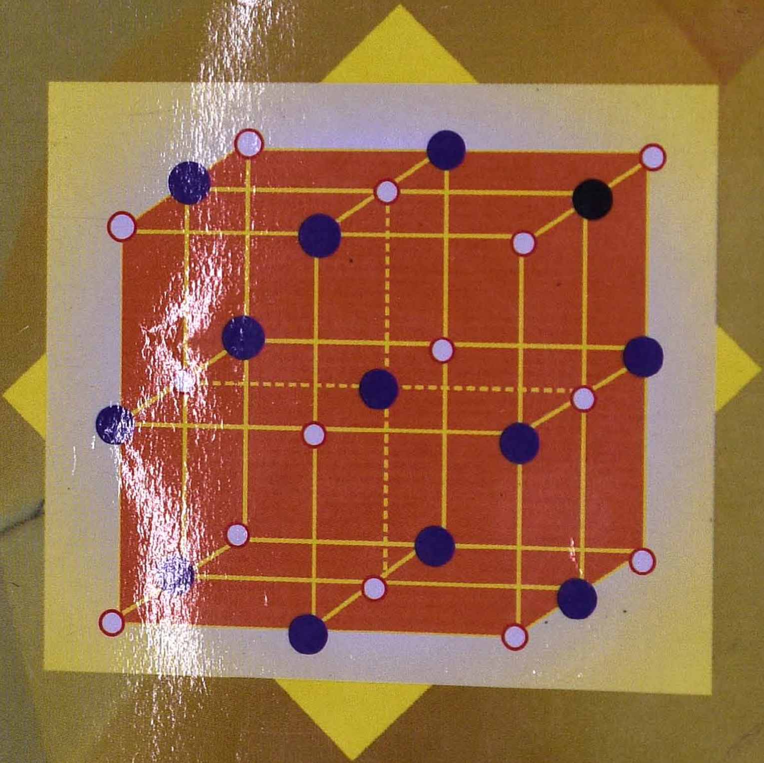
உறைம இயற்பியல்-I

(Contensed Matter Physics - I)



முனைவர் மெ. மெய்யப்பன்

தமிழ்நாடு மாநில உயர்கல்வி மன்றம்
சென்னை - 600 005.

உறைம இயற்பியல் - I

முனைவர் மெ. மெய்யப்பன்

தமிழ்நாடு மாநில உயர்கல்வி மன்றம்
சென்னை - 600 005.

முதற்பதிப்பு : 2011

பதிப்புரிமை : தமிழ்நாடு மாநில உயர்கல்வி மன்றம்
சென்னை – 600 005.

நூலின் பெயர் : உறைம இயற்பியல் – I

நூலாசிரியர் : முனைவர் மெ. மெய்யப்பன்
பேராசிரியர். துறைத்தலைவர்
இராஜராஜன் தொழில்நுட்பக்கல்லூரி
அமராவதிப் பூதூர்.
காரைக்குடி – 630 301.

மறு ஆய்வு செய்தவர் : முனைவர் ஆர். சபேசன்.
பேராசிரியர், துறைத் தலைவர் (ஓய்வு),
இயற்பியல் துறை,
அழகப்பா பல்கலைக்கழகம்,
காரைக்குடி – 630 003

தமிழ் திருத்தம் செய்தவர் : திரு.எஸ். சந்திரசேகர்,
தமிழ் விரிவுரையாளர் (ஓய்வு),
தன்ராஜ் பெய்த் ஜெயின் கல்லூரி,
துரைப்பாக்கம்,
சென்னை – 600 097

விலை : ரூ. 74.00

அச்சிட்டோர் : பவர்மேன் பிரிண்டர்ஸ்,
எண்.6/15, டாக்டர் ராதாகிருஷ்ணன் நகர்,
3வது தெரு, கொருக்குப்பேட்டை
சென்னை – 600 021.
செல் : 98846 99888

MADURAI KAMARAJ UNIVERSITY ★ DR. T.P.M. LIBRARY ★
299060

பொருளடக்கம்

1.	படிகக் கட்டமைப்பு	1
2.	படிகப் பண்புகளும் குறைபாடுகளும்	26
3.	அணித்தள அதிர்வுகள்	100
4.	திண்மப் பொருட்களின் வெப்பவியல் பண்புகள்	142
5.	உலோகங்களின் கட்டற்ற எலக்ட்ரான் கொள்கை	184
6.	தொடர் இடமாற்றப் பண்புகள்	250

I. படிகக் கட்டமைப்பு

இடஅணிக்கோவை – ஓரலகு செல் - படிக வகைகள் - பிராவிஸ் அணித்தளம் - கனச்சதுரப்படிகம் - ஓரலகு செல் ஒன்றுக்கான அணுக்கள் - அண்டை அணுக்களின் எண்ணிக்கை – மில்லர் குறியெண் அணித்தள இடைத்தொலைவு – அணுஆரம் - திணிவடர்த்தி - இறுக்கமிக்க ஆறுமுகக் கட்டமைப்பு.

1. படிகக் கட்டமைப்பு

(Crystal Structure)

1.1 அறிமுகம்

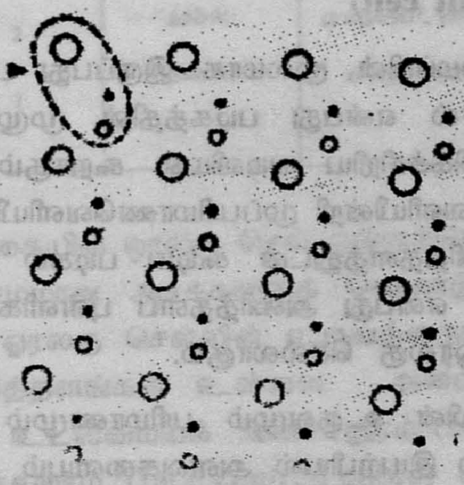
திண்மப் பொருட்களை அதிலுள்ள அணுக்களின் கட்டமைப்பைப் பொறுத்து இரு வகைப்படுத்தலாம். ஒன்று படிகம் (crystalline) மற்றொன்று படிக உருவற்றது (amorphous). அணுக்களின் கட்டமைப்பு மீண்டும் மீண்டும் வருமாறு படிகங்களில் இடைவெளிச் சீர்மையுடன் அணி வகுத்திருக்கும். படிக உருவற்ற திண்மங்களில் இத்தகைய ஒழுங்கமைவைக் காணமுடியாது. அங்கே அணுக்கள் பிணைவுற்றிருந்தாலும், தாறுமாறாக இருக்கும். படிகங்கள், வெவ்வேறு திசைகளில் வெவ்வேறு இயற்பியல் பண்புகளைக் கொண்டிருக்கும். இதைத் திசையொவ்வாப் பண்பு (anisotropic) என்பர். படிக உருவற்ற திண்மங்களின் இயற்பியல் பண்பு எல்லாத் திசைகளிலும் ஒரே அளவினதாக இருக்கும். மேலும் இதன் குளிர்வூட்டக் கோடு (cooling curve) சீரான சரிவு மாற்றத்துடன் இருக்கும். ஆனால் படிகங்களுக்கு இதன் இடையில் ஒரு முறிவு காணப்படுகிறது. இது படிகமயமாதலைக் குறிக்கிறது. படிகமயமாதல் வழிமுறையில் வெளிப்படும் உறைவெப்பம், வெப்ப இழப்பைச் சமன்செய்வதால், வெப்பநிலை மாறாதிருக்கிறது.

1.2 இட அணிக்கோவை (space lattice)

படிகம் என்பது முப்பரிமாணவெளியில் சீரான இடைவெளியுடன் அணுக்களின் அணிவகுப்பைக் கொண்டது. வடிவியல் நோக்கில் இதில் ஒவ்வொரு அணுவும் மற்றொன்றின் நகலாக, திரும்பத் திரும்பத் தோன்றியிருப்பதுபோலத் தென்படும். அணுக்களின் அமைவிடங்களை ஊடகவெளியில் புள்ளிகளாகக் கற்பனை செய்யலாம். ஊடகவெளியில் இப்புள்ளிகளையே **அணித்தளப் புள்ளிகள் (lattice points)** என்பர். இப்புள்ளிகளின் மொத்தம் படிகத்தின் அணித்தளத்தை அல்லது இட அணிக்கோவையை உண்டாக்குகின்றது. அணித்தளப்புள்ளிகளில் உள்ள அணுக்கள் எல்லாம் ஒத்தவைகளாக இருப்பின், அதனை **பிராவிஸ் அணிக்கோவை** என்பர். இடஅணிக் கோவையை மற்றொரு விதமாகவும் விவரிக்க முடியும். ஒரு புள்ளிக்குரிய அதே சுற்றுப்புறம்

ஒவ்வொரு புள்ளிக்கும் இருக்குமாறு, ஊடகவெளியில் வரிசையாக அமைந்துள்ள புள்ளிகள் என இட அணிக்கோவையை வரையறுக்கலாம்.

அணித்தளப் புள்ளி என்பது கற்பனையான கருத்துரு. படிகத்தின் கட்டமைப்பில் இருக்கும் ஒவ்வொரு அணுவையும் புள்ளிகளாகக் குறிப்பிட்டால், ஊடகவெளியில் புள்ளிகளின் அணிகளாலான வரிசைகள் கிடைக்கும். அவை படிகத்தின் அணித்தளம் எனப்படும்.



படம். 1.1 அணித்தளப் புள்ளிகளும் அடிப்படை அலகும்

வெறும் அணித்தளம் மட்டுமே படிகத்தின் கட்டமைப்பைத் தெரிவிப்பதில்லை. ஒரு சில அணுக்கள் அல்லது மூலக்கூறுகளின் அணித்தளப் புள்ளிகளைக் கொண்டு உருவான அடிப்படை அலகு (basis), படிகத்தின் கட்டமைப்பைத் தெரிவிக்கக்கூடியதாக இருக்கின்றது. இதில் ஒரு மாதிரியான சேர்மானமும், அமைவுநிலையும், திசையமைவும் இருக்கும். இந்த ஓரலகுக் கூட்டமைப்பை, முப்பரிமாணவெளியில் சரியான இடைவெளியுடன் நிறுவ, படிகக் கட்டமைப்பு தோன்றுகின்றது. அதாவது அணித்தளமும், அடிப்படை அலகும் சேர்ந்து படிகக் கட்டமைப்பைத் தருகின்றது எனலாம்.

அணுக்களின் அணி வகுப்பாலான அணித்தளத்தை, அடிப்படையான மூன்று இடமாற்று வெக்டார் (translational) **a,b,c** மூலம் வரையறுக்கலாம். r, r' என்ற இரு புள்ளிகளில் படிகக்

கட்டமைப்பிலுள்ள அணுக்களின் தோற்றம் ஒரேமாதிரியாக இருப்பின் இந்த இடமாற்றம் வெக்டார் மூலம் குறிப்பிட முடியும்.

$$r' = r + pa + qb + rc$$

இதில் p,q,r ஆகிய மூன்றும் ஏதாவதொரு முழு எண்ணாகும். இத்தன்மையுடைய அணித்தளத்தைத் தன்மூலமய (primitive) அணித்தளம் என்றும், இடமாற்று வெக்டாரை அடிப்படை அலகு வெக்டார் என்றும் அல்லது படிக அச்சு என்றும் கூறுவர்.

ஓரலகு செல் (unit cell)

படிகக் கட்டமைப்பின் மூலமாக இருப்பது படிகத்தின் ஓரலகு செல். ஓரலகு செல் என்பது படிகத்தின் முழுத்தோற்றத்தையும் விவரிக்கக்கூடிய மிகச்சிறிய வடிவியல் கூறாகும். இந்த ஓரலகு செல்களை இடைவெளியின்றி முப்பரிமாணவெளியில் ஓரேமாதிரியாக அடுக்கினால், அணித்தளத்துடன் கூடிய படிகம் தோன்றும். தன் மூலமயமான செல் என்பது அணித்தளப் புள்ளிகளை மூலைகளில் மட்டும் கொண்ட ஓரலகு செல்லாகும்.

ஓரலகு செல்லின் உருவமும் பரிமாணமும் படிகத்தில் சில பண்புகளையும் சில இயற்பியல் அளவுகளையும் தெரிவிக்கின்றன. ஓரலகு செல் பொதுவாக, மூன்று விளிம்பு நீளங்கள் (a,b,c) மூன்று விளிம்பிடைக் கோணங்கள் (α, β, γ) ஆகிய 6 மாறிலிகளால் குறிப்பிடப்படுகின்றது. சீர்மை மற்றும் கட்டமைப்பின் அடிப்படையில் முப்பரிமாணவெளியில் 14 வகையான அணித்தள வகைகள் இருப்பதாகக் கூறலாம். இவற்றை, பிராவிஸ் அணித்தளம் என்பர். படிகக் கட்டமைப்பினால் இவை 7 வகைக்குள் அடங்குகின்றன. இவை கனச்சதுரம் (cubic), செவ்வகம் அல்லது நாற்கோணம், அறுங்கோணம் (tetragonal), ஆறு செவ்வக முகப்பு (orthorhombic), சாய்சதுர முகப்பு (rhombohedral), ஒருதிசைச் சரிவு (monoclinic), முத்திசைச் சரிவு (triclinic) எனப்படும்.

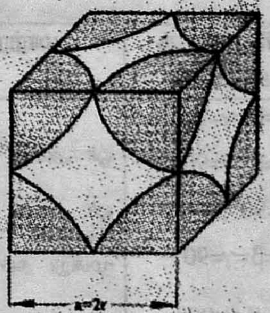
அட்டவணை 1.1

டிக வகை	உள்வகை	விளிம்பு நீளம்	விளிம்பிடைக் கோணம்	மாற்றம்
சதுரம்	3	a=b=c	$\alpha=\beta=\gamma=90^\circ$	-
காணம்	2	a=b≠c	$\alpha=\beta=\gamma=90^\circ$	ஓர் அச்சு
கோணம்	1	a≠b≠c	$\alpha=\beta=90^\circ, \gamma=120^\circ$	ஓர் அச்சு, ஒரு கோணம்
செவ்வகமுகப்பு	4	a≠b≠c	$\alpha=\beta=\gamma=90^\circ$	மூன்று அச்சுகள்
துரம்	1	a=b=c	$\alpha=\beta, \gamma\neq 90^\circ$	ஒரு கோணம்
சைச் சரிவுள்ள	2	a≠b≠c	$\alpha=\beta=90^\circ, \gamma\neq 90^\circ$	மூன்று அச்சுகள் ஒரு கோணம்
சைச் சரிவுள்ள	1	a≠b≠c	$\alpha\neq\beta\neq\gamma\neq 90^\circ$	மூன்று அச்சுகள் மூன்று கோணங்கள்

கனச்சதுர வகையில் ஓரலகு செல் ஒன்றுக்கொன்று செங்குத்தாக உள்ள மூன்று சமமான அச்சுகளைக் கொண்டுள்ளது. அதாவது இந்த வகையில் ஓரலகு செல்லின் உருவத்தைப் பொறுத்து மூன்று வகையான அணித்தளங்கள் உள்ளன. அவை எளியகனச்சதுரம் (simple cubic), உடல்மையக் கனச்சதுரம் (body centred cubic) முகமையக் கனச்சதுரம் (face centred cubic) எனப்படும். வைரம், சிங் சல்பைடு போன்றவை கனச்சதுர வகைப் படிகங்களாகும்.

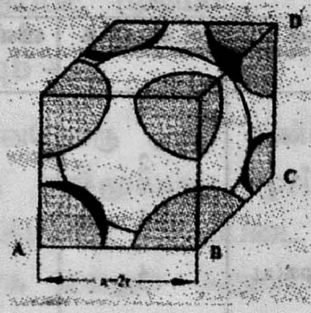
கனச்சதுரப் படிகமும் ஓரலகு செல்லிற்கான அணுவும் (Cubic crystal and number of atoms per unit cell)

ஓரலகு செல்லிலுள்ள அல்லது ஓரலகு செல்லினால் பங்கிடப்பட்டுள்ள மொத்த அணுக்களின் எண்ணிக்கை, ஓரலகு செல்லிற்குரிய அணுவாகும். இது ஓரலகு செல்லின் மூலைகளிலும், உடல்மையத்திலும், முகமையங்களிலும் உள்ள அணுக்களின் எண்ணிக்கையைப் பொறுத்திருக்கின்றது. ஓரலகு செல்லின் கட்டமைப்பைப் பொறுத்து இவை வேறுபடுவதால், வெவ்வேறு படிக வகைக்குரிய ஓரலகு செல்கள் வெவ்வேறு ஓரலகு செல்லிற்கான அணுக்களின் எண்ணிக்கையைப் பெற்றுள்ளன.



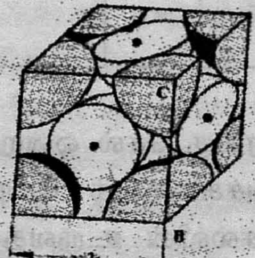
படம் 1.2 (அ)

எளிய கனச்சதுரம்



படம் 1.2 (ஆ)

உடல்மையக் கனச்சதுரம்



படம் 1.2 (இ) முகமைய கனச்சதுரம்

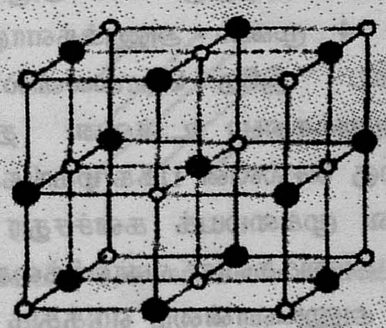
எளிய கனச்சதுரப் படிகத்தின் ஓரலகு செல்லின் மூலைகள் ஒவ்வொன்றிலும் ஓரணு உள்ளது. படிகத்தில் இந்த மூலை அணுக்கள் அந்த ஓரலகு செல்லைச் சுற்றி அண்டையிலுள்ள 8 ஓரலகு செல்களுக்கும் பொதுவானதாக இருப்பதால், ஒரு மூலை அணு ஓர் ஓரலகு செல்லிற்கு அளிக்கும் பங்களிப்பு 1/8 ஆகும். எனவே 8 மூலை அணுக்களும் ஓர் ஓரலகு செல்லிற்கு அளிக்கும் பங்களிப்பு $1/8 \times 8 = 1$ ஆகும்.

உடல்மையக் கனச்சதுரப் படிகத்தின் ஓரலகு செல்லின் உடல் மையத்தில் ஓரணுவும், அதன் மூலைகளில் 8 அணுக்களும் உள்ளன. உடல்மைய அணு முழுமையாகச் செல்லிற்குள் இருப்பதால் அது அண்டையிலுள்ள செல்களினால் பங்கிடப்படுவதில்லை. ஆனால் ஒவ்வொரு மூலை அணுவும் எளிய கனச்சதுர ஓரலகு செல் போல 8 அண்டை செல்களினால் பங்கிடப்படுகின்றன. எனவே உடல்மையக் கனச்சதுர ஓரலகு செல் ஒன்று பெற்றிருக்கும் அணுக்கள் $1 + 1/8 \times 8 = 2$ ஆகும்.

முகமையக் கனச்சதுரப் படிகத்தின் ஓரலகு செல்லின் முகமையங்களில் ஓரணுவும், அதன் மூலைகளில் 8 அணுக்களும் உள்ளன. ஒரு செல்லின் 6 முகங்களையும் ஒட்டியுள்ள அண்டை செல்களினால் சரிபாதியாக முகமைய அணுக்கள் பங்கிடப்படுகின்றன. எனவே ஓர் ஓரலகு செல்லிற்கு முகமைய அணுக்களின் பங்களிப்பு $\frac{1}{2} \times 6 = 3$ ஆகும். மூலை அணுக்களின் பங்களிப்பையும் சேர்த்தால் ஓர் ஓரலகு செல் பெற்றிருக்கும் அணுக்கள் $3+1/8 \times 8 = 4$ ஆகும்.

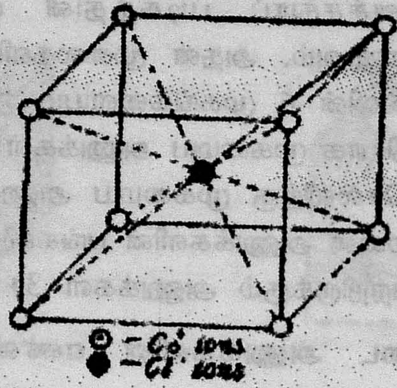
இனமொத்த அண்டை அணுக்களின் எண்ணிக்கை (Coordination number)

படிகக் கட்டமைப்பில் ஓர் அணுவிற்கு அருகில் சமதொலைவில் இருக்கின்ற அணுக்களின் எண்ணிக்கையை இனமொத்த அண்டை அணுக்களின் எண்ணிக்கை என வரையறை செய்யலாம். இந்த எண்ணிக்கையின் அளவு அதிகமாக இருப்பின், படிகக் கட்டமைப்பில் அணுக்கள் மிக நெருக்கமாக அமைந்துள்ளன எனலாம். கனச்சதுரப் படிக வகைகளுக்கான அண்டை அணுக்களின் எண்ணிக்கையைப் பின்வருமாறு மதிப்பிட்டறியலாம்.



படம் 1.3 (அ) கனச்சதுர ஓரலகு செல்

எளிய கனச்சதுர ஓரலகு செல்லின் ஒவ்வொரு மூலையிலும் ஓரணு உள்ளது. (படம் 1.3அ.) ஒரு செல்லின் ஒரு மூலையிலுள்ள அணுவை எடுத்துக் கொண்டால், அதற்கு மிக அருகிலுள்ள அணுக்கள் ஓரலகு செல்லின் பக்கநீளமான 'a' என்ற தொலைவில் அமைந்துள்ளன எனலாம். படிகத்தை ஓரலகு செல்களின் கட்டமைப்பாகக் கருதினால், ஒவ்வொரு அணுவிற்கும் 'a' என்ற தொலைவில் 6 அணுக்கள் இருக்குமெனலாம்.



படம் 1.3 (ஆ) உடல்மைய ஓரலகு செல்

உடல்மைய ஓரலகு செல்லில் உடல்மைய அணுவிற்கு 8 மூலை அணுக்களும் சமதொலைவில் இருக்கின்றன என்பதால் இனமொத்த அண்டை அணுக்களின் எண்ணிக்கை இதற்கு 8 ஆகும். மூலைவிட்டம் $\sqrt{3}a$ என்பதால் இவை ஒவ்வொன்றும் உடல் மையத்திலிருந்து $\sqrt{3}/2(a)$ தொலைவில் உள்ளன. (படம் 1.3 ஆ).

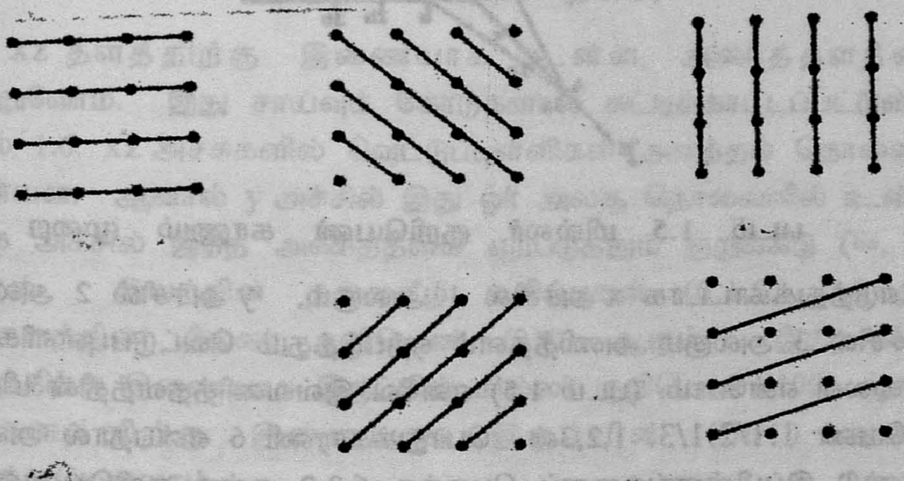
முகமையக் கனச்சதுர ஓரலகு செல்லின் முகமைய அணுவை மையமாகக் கொண்டால், அதற்கு மிக அருகிலுள்ள அணுக்கள் அதே தளத்திலுள்ள 4 மூலை அணுக்களாகும். இவை $a/\sqrt{2}$ தொலைவில் உள்ளன. இதே தொலைவில் பக்க முகங்களின் மையங்களிலுள்ள அணுக்களும் உள்ளன. தளத்திற்கு மேலுள்ள மற்றும் கீழுள்ள ஓரலகு செல்லின் பக்கமுகங்களிலுள்ள அணுக்கள் மொத்தம் 8. எனவே முகமையக் கனச்சதுர ஓரலகு செல்லிற்கு இனமொத்த அண்டை அணுக்களின் எண்ணிக்கை 12 ஆகும். ஓரலகு செல்லிலுள்ள மூலை அணுவொன்றை எடுத்துக் கொண்டாலும் இதே மதிப்பே கிடைக்கப்பெறும்.

1.3 அணித்தளங்களும் மில்லர் குறியெண்களும்

ஒரு படிகம் எண்ணிறைந்த சம இடைத்தொலைவுடன் கூடிய இணை அணித்தளங்களாலானதாகக் கருதலாம். இந்த அணித்தளங்கள் அணித்தளப் புள்ளிகளின் ஊடாகச் செல்கின்றன. அணித்தளங்களைப் பலவகையாக அமைத்துக்கொள்ள முடியும். இவை அவற்றின் திசையமைவுகளால் வேறுபடுகின்றன. (படம் 1.4). ஒரு குறிப்பிட்ட திசையமைவுடன் கூடிய அணித்தளங்களை (h,k,l) என்று 3 குறியெண்களால் குறிப்பிடுவார்கள். இதை மில்லர்

குறியெண் (Miller Index) என்பர். சமஇடைத் தொலைவுடன் கூடிய இணை அணித்தளங்களின் தொகுதியைக் குறிப்பிட மில்லர் குறியெண் பயன்படுகின்றது. ஒரு குறிப்பிட்ட அணித்தளத்தின் மில்லர் குறியெண் என்பது, அக்குறிப்பிட்ட அணித்தளம், படிகத்தின் மூன்று ஆய அச்சுகளில் ஏற்படுத்தும் வெட்டுப்புள்ளிகள், ஆயமையத்திலிருந்து இருக்கும் தொலைவை, அணுவிடைத் தொலைவின் அலகில், அதாவது இடமாற்று வெக்டாரின் அளவில் குறிப்பிட்டு அவற்றின் தலைகீழ் மதிப்புகளில் அதே தகவைப் பெற்றிருக்கும் மிகச்சிறிய முழு எண் மதிப்பாகும். ஓர் அணித்தளம் படிக அச்சில் வெட்டும் புள்ளிகள் இடமாற்று வெக்டாரின் அளவில் n_1, n_2, n_3 எனில்,

$$h:k:l = 1/n_1 : 1/n_2 : 1/n_3$$ எனலாம்.



படம் 1.4 மில்லர் தளம்

ஓர் அணித்தளத்தின் மில்லர் குறியெண்ணைக் கண்டறிய

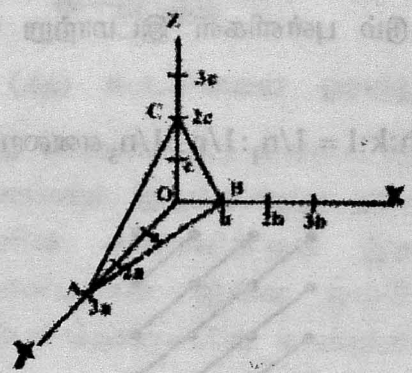
(1) அந்த அணித்தளம் படிகஅச்சில் ஏற்படுத்தும் வெட்டுப் புள்ளியை இடமாற்று வெக்டாரின் அளவில் கண்டறியவேண்டும்.

(2) இவற்றின் தலைகீழ் மதிப்புகளை அறியவேண்டும்.

(3) இப்பின்னங்களின் கீழ்க்கூறுகளின் தாழ்ந்த பொதுக்காரணியால் பெருக்க முழு எண்கள் கிடைக்கும். இதனால் தலைகீழ்ப் பின்ன மதிப்புடையனவற்றை முழு எண்களாக மாற்றிக் கொள்ளமுடிகிறது.

(4) ஓர் அணித்தளம், ஒரு படிக அச்சுக்கு இணையாக இருக்குமெனில் அதன் வெட்டுப்புள்ளி முடிவிலாத் தொலைவாகும் (அனந்தமாகும்). இதன் தலைகீழ் மதிப்பு சுழியாகும்.

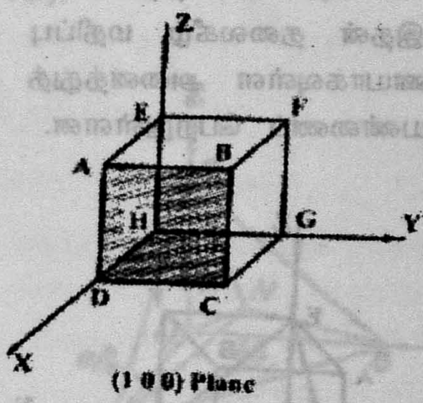
(5) வெட்டுப்புள்ளி ஏற்படுத்தும் தொலைவு எதிர்குறியுடையதாக இருப்பின் இக்குறியெண்களில் ஒன்று அல்லது இரண்டு எதிர்குறியுடையதாக இருக்கலாம். இப்படி எதிர்குறியுடன் கூடிய மில்லர் குறியெண்களை (h,k,l)என்று குறிப்பிடுவர்.



படம் 1.5 மில்லர் குறியெண் காணும் முறை

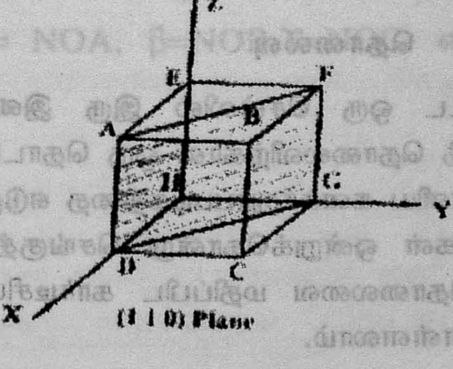
எடுத்துக்காட்டாக x அச்சில் 1 அலகும், y அச்சில் 2 அலகும், z அச்சில் 3 அலகும் அணித்தளம் ஏற்படுத்தும் வெட்டுப்புள்ளிகளின் தொலைவு என்போம். (படம் 1.5) எனவே இவ்வணித்தளத்தின் மில்லர் குறியெண் 1:1/2:1/3. 1,2,3ன் பொதுக்காரணி 6 என்பதால் அதைக் கொண்டு இப்பின்னங்களைப் பெருக்க 6,3,2 என்ற குறியெண்ணைப் பயன்படுத்தலாம். இதுவே அத்தளத்தின் மில்லர் குறியெண்ணாகும்.

எளிய கனச்சதுரப் படிகத்தில் சில குறிப்பிட்ட அணித்தளங்களின் மில்லர் குறியெண்கள்



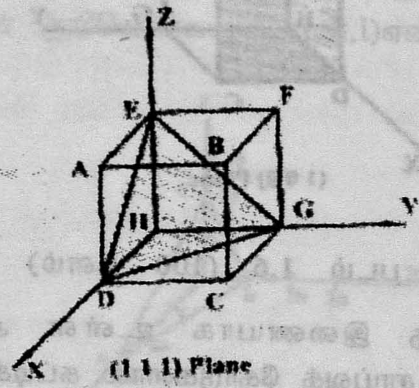
படம் 1.6 (100 தளம்)

xz தளத்திற்கு இணையாக உள்ள அணித்தளத்தைக் கருதுவோம். இது சாய்வுக் கோடுகளால் சுட்டிக்காட்டப்பட்டுள்ளது. படம் 1.6. xz அச்சுகளில் வெட்டுப்புள்ளிகள் அனந்தம் தொலைவில் உள்ளன. ஆனால் y அச்சில் இது ஓர் அலகு தொலைவில் உள்ளது. படிக அச்சில் இந்த அணித்தளம் ஏற்படுத்தும் குறுக்கீடு (∞, 1, ∞) ஆகும். இவற்றின் தலைகீழ் மதிப்புகள் (0,1,0) என்பதால், இத்தளத்தின் மில்லர் குறியெண் (010) ஆகும். இத்தளம் yz தளத்திற்கு இணையாக இருப்பின் மில்லர் குறியெண் (100) ஆகவும், xy தளத்திற்கு இணையாக இருப்பின் (001) ஆகவும் இருக்குமெனலாம்.



படம் 1.7 (110 தளம்)

படம்.1.7ல் காட்டப்பட்டுள்ள அணித்தளம் xy அச்சுகளில் ஓரலகு குறுக்கீட்டுத் தொலைவையும், z அச்சில் வெட்டுப் புள்ளி இல்லாமலும் இருக்கின்றது. எனவே படிக அணித்தளம் ஏற்படுத்தும் குறுக்கீடு 1,1,∞ ஆகும். இதன் தலைகீழ் மதிப்பு (1,1,0) என்பதால் இத்தளத்திற்கு இணையாகவுள்ள அனைத்துத் தளங்களும் (110) என்ற மில்லர் குறியெண்ணைப் பெற்றுள்ளன.



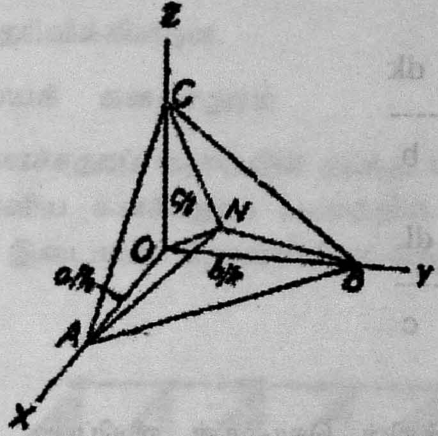
படம் 1.8 (111 தளம்)

படம் 1.8ல் காட்டப்பட்டுள்ள அணித்தளம் x,y,z அச்சுகளில் ஓரலகு குறுக்கீட்டுத் தொலைவைக்கொண்டிருப்பதால், அதன் மில்லர் குறியெண் (111) ஆகும். குறியெண்களின் தகவு ஒரே மாதிரியாக இருக்குமெனில் அவை யாவும் ஒரு குறிப்பிட்ட இணை அணித்தளங்களையே குறிப்பிடும். எடுத்துக்காட்டாக (111), (222), (333). . . போன்ற அணித்தளங்கள் யாவையும் (111) மில்லர் குறியெண்ணால் குறிப்பிடப்படும்

அணித்தளஇடைத் தொலைவு

கொடுக்கப்பட்ட ஒரு செல்லில் இரு இணைத்தளங்களுக்கு இடைப்பட்ட குத்துத் தொலைவிற்கான ஒரு தொடர்பைப் பெறுவோம். எளிமைக்காக ஓர் எளிய கனச்சதுரப்படிகத்தை எடுத்துக் கொள்வோம். அதன் ஆய அச்சுகள் ஒன்றுக்கொன்று செங்குத்தாக இருப்பதால், அணிதள இடைத்தொலைவை மதிப்பிட கார்டீசியன் ஆயங்களைப் பயன்படுத்திக் கொள்ளலாம்.

(h,k,l) என்ற மில்லர் குறியெண் உடைய அணித்தளம் x,y,z அச்சுகளில் ஏற்படுத்தும் குறுக்கீட்டுத் தொலைவு OA, OB, OC என்போம். (படம் 1.9).



படம் 1.9 அணித்தள இடைத்தொலைவு

ABC தளத்திற்கு இணையான தளம் ஆயமையம் வழியாகச் செல்வதாகக் கொள்வோம். எனவே OA, OB, OC என்ற குறுக்கீட்டுத் தொலைவுகள் முறையே a/h, b/k, c/l ஆக இருக்கும். ஆய மையத்திலிருந்து இத்தளத்திற்கு ஒரு செங்குத்துக் கோடு (ON) வரைந்தால் அத்தொலைவு அணித்தள இடைத்தொலைவு d ஆகும்.

ABC தளத்திற்கு நேர்குத்தாக இருக்கும் ON, x,y,z அச்சுகளோடு ஏற்படுத்தும் கோணம் முறையே α,β,ϒ என்போம்.

அதாவது $\alpha = \hat{NOA}$, $\beta = \hat{NOB}$, $\Upsilon = \hat{NOC}$. எனவே

$$\cos\alpha = \frac{d}{OA} = \frac{dh}{a}$$

$$\cos\beta = \frac{d}{OB} = \frac{dk}{b}$$

$$\cos\gamma = \frac{d}{OC} = \frac{dl}{c}$$

திசைக்கோணத்தின் கொசைன் விதிப்படி

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

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

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

கனச் சதுரப் படிகம் என்பதால் $a=b=c$

$$d_{hkl} = a[h^2+k^2+l^2]^{-1/2}$$

(1) எளிய கனச்சதுரம்

இதைக்கொண்டு ஒரு குறிப்பிட்ட மில்லர் குறியெண் கொண்ட அணித்தளங்களுக்கிடைப்பட்ட தொலைவை மதிப்பிட்டறியலாம்.

$$d_{100} = a;\ d_{110} = a/\sqrt{2};\ d_{111} = a/\sqrt{3};$$

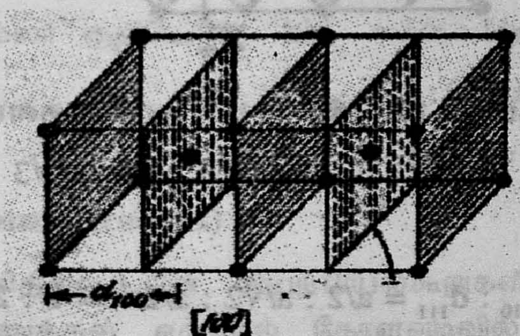
இம் மதிப்புகள்

$$d_{100} : d_{110} : d_{111} = 1:1/\sqrt{2}:1/\sqrt{3}$$

என்ற தகவைத் தெரிவிக்கின்றன.

(2) உடல்மையக் கனச்சதுரம்

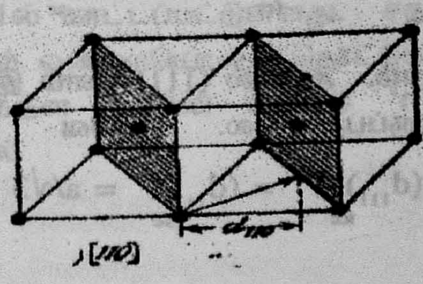
உடல்மையக் கனச்சதுரப் படிகத்தின் ஓரலகு செல்லில் கூடுதலாக 100 தளமொன்று எளிய கனச்சதுரப் படிகத்தின் ஓரலகு செல்லின் 100 தளங்களுக்கு இடையில் தோன்றியிருக்கிறது. (படம் 1.10 (அ)). எனவே



படம் 1.10 (அ) 100 அணித்தளம்

$$(d_{100})_{bcc} = (1/2d_{100})_{sc} = a/2$$

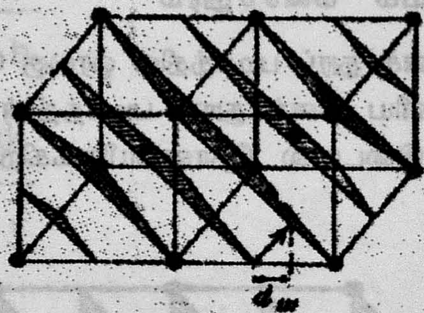
110 அணித்தளங்களெனில், அவைகளுக்கிடையே புதிய அணித்தளம் ஏதும், உடல்மைய அணுவின் தோற்றத்தால் ஏற்படவில்லை. (படம் 1.10(ஆ)). எனவே



படம் 1.10 (ஆ) 110 அணித்தளம்

$$(d_{110})_{BCC} = (d_{100})_{SC} = a/\sqrt{2}$$

111 அணித்தளங்களெனில், உடல்மைய அணுவின் தோற்றத்தால் இடையில் ஒரு புதிய அணித்தளம் ஏற்படுகின்றது. (படம் 1.10 (இ)). எனவே



படம் 1.10 (இ) 111 அணித்தளம்

$$(d_{111})_{BCC} = (1/2d_{111})_{SC} = a/2\sqrt{3}$$

$$d_{100} : d_{110} : d_{111} = a/2 : a/\sqrt{2} : a/2\sqrt{3} = 1 : 2/\sqrt{2} : 1/\sqrt{3}$$

(3) முகமையக் கனச்சதுரம்

முகமையக் கனச் சதுரப்படிகத்தின் தளங்களில் 100 தளங்களும், (110) தளங்களும், இடையில் கூடுதலாக ஓர் இணைத்தளத்தைப் பெற்றுள்ளன. எனவே

$$(d_{100})_{fcc} = 1/2(d_{100})_{sc} = a/2$$

$$(d_{110})_{fcc} = 1/2(d_{110})_{sc} = a/2\sqrt{2}$$

என்று குறிப்பிடலாம். ஆனால் (111) தளம் இடையில் இக்கூடுதல் தளத்தைக் கொண்டிருப்பதில்லை. எனவே

$$(d_{111})_{fcc} = (d_{111})_{sc} = a/\sqrt{3}$$

எனவே

$$d_{100} : d_{110} : d_{111} = 1 : 1/\sqrt{2} : 2/\sqrt{3}$$

அல்லது

$$1/d_{100} : 1/d_{110} : 1/d_{111} = 1 : \sqrt{2} : \sqrt{3}/2$$

மாதிரிக் கணக்கு-1:

ஓர் எளிய கனச்சதுரச் செல்லில் ஒரு தளம் படிக அச்சுடன் a,b/2,3c என்ற குறுக்கு வெட்டைக் கொண்டுள்ளது எனில் அதன் மில்லர் குறியெண் என்ன?

குறுக்குவெட்டின் எண்ணளவை $x=1;\ y=1/2,\ z=3$

எனவே மில்லர் குறியெண் hkl $= 1/x : 1/y : 1/z$

$= 1 : 2 : 1/3$

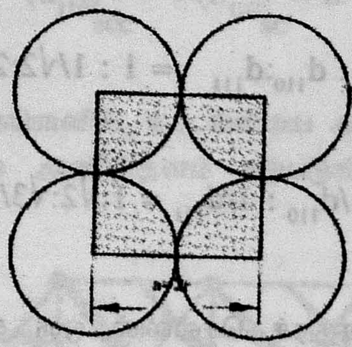
$= 3:6:1 = (361)$

அணுஆரம் (Atomic Radius)

படிக அணித்தளத்தின் இயற்பியல்கூறுகள் தெரியுமெனில், படிகத்தில் அணுக்கள் எல்லாம் கோளவடிவில் ஒன்றையொன்று தொட்டுக்கொண்டு அமைந்திருக்கின்றன என்று கருதி அணுவின் ஆரத்தைக் கணக்கிட்டறியலாம். தூய படிகத்தில் அருகே அமைந்துள்ள அண்டை அணுக்களின் இடைத்தொலைவில் பாதியென அணு ஆரத்தை வரையறுக்கலாம். கனச்சதுரப் படிகத்தை எடுத்துக்கொண்டு இதை விவரிப்போம்.

(1) எளிய கனச்சதுரம்

ஓர் எளிய கனச்சதுரப் படிகத்தின் ஓரலகு செல்லின் பக்கத் தோற்றம் படம் 1.11ல் காட்டப்பட்டுள்ளது. சதுரத்தின் மூலைகளில் இருக்கும் அணுக்கள் ஒன்றையொன்று தொட்டுக் கொண்டிருக்கின்றன. 'a' என்பது அணித்தள மாறிலி என்றும் 'r' என்பது அணுஆரம் என்றும் கொண்டால்



படம் 1.11 எளிய கனச்சதுரத்தின் அணுஆரம்

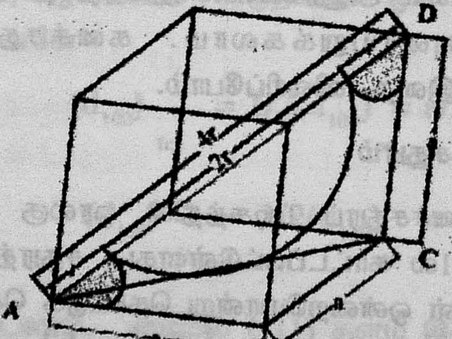
(2) உடல்மையக் கனச்சதுரம்

இதன் ஓரலகு செல்லில் 8 மூலை அணுக்களும் ஓர் உடல்மைய அணுவும் உள்ளன. மூலை அணுக்கள் ஒன்றையொன்று தொட்டுக் கொண்டிருப்பதில்லை. ஆனால் அவை ஒவ்வொன்றும் உடல்மைய அணுவோடு ஒட்டிக் கொண்டிருக்கின்றன. ஓரலகு செல்லின் வடிவியல் தோற்றத்தைக் கொண்டு

$$(4r)^2 = a^2+2a^2=3a^2$$

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

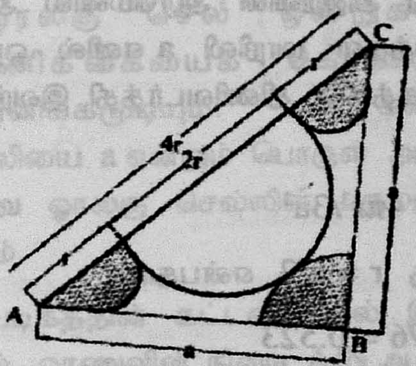
$$r = \sqrt{3}.a/4$$



படம் 1.12 ஒரு உடல்மையக் கனச்சதுரத்தின் அணுஆரம்

(3) முகமையக் கனச்சதுரம்

இதன் ஓரலகு செல்லில் 8 மூலை அணுக்களும் 6 முக மைய அணுக்களும் உள்ளன. (படம்1.13). இதில் மூலை அணுக்கள் ஒன்றையொன்று தொட்டுக் கொண்டிருப்பதில்லை. ஆனால் அவை ஒவ்வொன்றும் முகமைய அணுக்களோடு ஒட்டிக் கொண்டிருக்கின்றன. எனவே



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

அல்லது

$$r = a/2\sqrt{2}$$

படம் 1.13 ஒரு முகமையக் கனச்சதுரத்தின் அணுஆரம்

திணிவடர்த்தி (Packing density)

அணுக்களிடையேயான வேதிப்பிணைப்புகளைப் பொறுத்து அணித்தளத்தில் அணிவகுக்கும் அணுக்களின் கட்டமைப்பு அமையும். இப்பிணைப்பு திசையமைவு கொண்டதாகவோ (சகப்பிணைப்பு) அல்லது திசையமைவுஏதும் இல்லாததாகவோ (உலோகப் பிணைப்பு) இருக்கலாம். சகப்பிணைப்பால் அணுக்கள் பிணைவுற்றிருந்தால், இரு பிணைப்புகளுக்கிடையே ஒரு குறிப்பிட்ட அளவு கோணம் இருக்கும் திசையமைவுஏதும் இல்லாத பிணைப்பால் அணுக்கள்யாவும் மிக நெருக்கமாக அமைவதால், ஓர் அணுவைச் சுற்றிப் பல அணுக்கள் இருக்கும். இதை நாம் அண்டை அணு எண்ணிக்கை எனக் குறிப்பிட்டோம். இதன் மதிப்பு அதிகமானால் படிகக்கட்டமைப்பு மிக நெருக்கமாக அமைந்திருக்கின்றது என்று பொருள். இதனால் நாம் படிகத்திற்கு திணிவடர்த்தி என்ற மற்றுமோர் இயற்பியல் பண்பைக் கற்பிக்க வேண்டியிருக்கின்றது.

திணிவடர்த்தி அல்லது திணிவுக் காரணி (packing factor) என்பது ஓரலகு செல்லிலுள்ள அனைத்து அணுக்களின் பருமனுக்கும், ஓரலகு செல்லின் பருமனுக்கும் உள்ள தகவாகும். கனச்சதுரப் படிகத்தின் திணிவடர்த்தியை மதிப்பிடும் முறையை இனி அறிவோம்.

(1) எளிய கனச்சதுரம்

இவ்வகைப் படிகத்தில் ஓரலகு செல் ஒன்றுக்கு ஒரேயொரு அணு மட்டும் உள்ளது. r என்பது அணுவின் ஆரமெனில் அதன் பருமன் $4\pi r^3/3$ அதுபோல அணித்தள மாறிலி a எனில் ஓரலகு செல்லின் பருமன் a^3 ஆகும். இப்படிகத்தின் திணிவடர்த்தி இவற்றின் தகவு என்பதால்

$$(pf)_{SC} = 4\pi r^3/3a^3$$

எளிய கனச்சதுரப் படிகத்திற்கு $r = a/2$ என்பதால்

$$(pf)_{sc} = \pi/6 = 0.523$$

(2) முகமையக் கனச்சதுரம்

முகமையக் கனச்சதுரப் படிகத்தின் ஓரலகு செல் ஒன்றுக்கு 4 அணுக்கள் வீதம் உள்ளன. எனவே அணுக்களின் மொத்தப் பருமன் $4\times 4\pi r^3/3$. இதன் திணிவடர்த்தி

$$(pf)_{fcc} = 16\pi r^3/3a^3$$

இப்படிகத்தில் அணுஆரம் $r = a/2\sqrt{2}$ என்பதால்,

$$(pf)_{fcc} = \sqrt{2}\pi/6 = 0.74$$

(3) உடல்மைய கனச்சதுரம்

இதன் ஓரலகு செல் ஒன்றுக்கு 2 அணுக்கள் வீதம் உள்ளன. எனவே திணிவடர்த்தி

$$(pf)_{bcc} = 2\times (4/3)r^3/a^3 = 8\pi r^3/3a^3$$

$r = \sqrt{3}a/4$ என்ற மதிப்பைப் பதிலீடு செய்ய

$$(pf)_{bcc} = \sqrt{3}\pi/8 = 0.68$$

நம்முடைய இக்கணக்கீடு

$$(pf)_{sc} < (pf)_{bcc} < (pf)_{fcc}$$

எனத் தெரிவிக்கிறது. அதாவது எளிய கனச்சதுரப் படிகம் பிறவற்றைக் காட்டிலும் தளர்ச்சியாகத் திணிவுற்றுள்ளது எனலாம்.

அணித்தள மாறிலியும் அடர்த்தியும்

அணித்தள மாறிலிக்கும் பொருள் அடர்த்திக்கும் இடையே ஒரு தொடர்பை நிறுவலாம். இதைக் கனச்சதுரப் படிகத்தைக் கொண்டு விளக்குவோம்.

ஓரலகு செல் ஒன்றுக்கு இருக்கும் அணுக்களின் எண்ணிக்கையைக் கொண்டு, அதன் பரிமாணங்களைத் தீர்மானிக்கமுடியும். ஒரு கனச்சதுரப் படிகத்தின் அணித்தள மாறிலியை a என்றும் பொருள் அடர்த்தியை ρ என்றும் கொள்வோம். எனவே ஓரலகு செல்லின் பருமனும் நிறையும் முறையே a^3, ρa^3 ஆகும்.

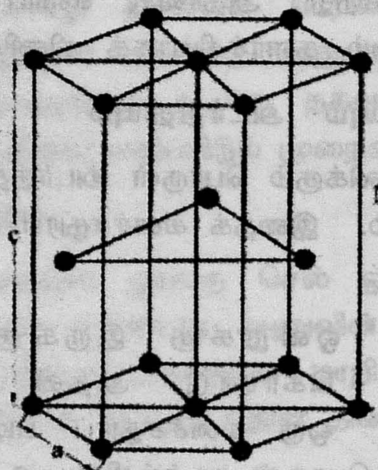
படிகத்தின் கட்டமைப்பில் இருக்கும் அணுவின் அணுஎடை A எனில், ஓரணுவின் நிறை A/N ஆகும். இதில் N என்பது அவகாட்ரோ (Avogadro) எண்ணாகும். இது ஒரு கிலோ மோல் செறிவுள்ள பொருளில் இருக்கும் அணுக்களின் எண்ணிக்கையைக் குறிக்கிறது. ஓரலகு செல் ஒன்றில் n அணுக்கள் வீதம் இருப்பின், ஓரலகு செல்லின் நிறை nA/N ஆகும். இது ρa^3க்கு சமம் என்பதால்

$a = (nA/\rho N)^{1/3}$ என்ற தொடர்பைப் பெறலாம்.

இறுக்கமிக்க ஆறுமுகக் கட்டமைப்பு

(Hexagonal close packed structure)

உலோகப் படிகங்கள் பொதுவாக இறுக்கமாகத் திணிவுற்ற ஆறுமுகக் கட்டமைப்பைப் பெற்றுள்ளன. அதனால் அவற்றின் அடர்த்தி குறிப்பிடும்படியாக அதிகமாக இருக்கின்றது. உலோகப் படிகங்கள் படிகமாக்க வழிமுறையில் முகமைய அல்லது இறுக்கமிக்க ஆறுமுகக் கட்டமைப்பைக் கொண்டு உருவாகின்றன.(HCP). படம் 1.14.



படம் 1.14 HCP கட்டமைப்பு

இதில் ஒவ்வொரு மூலை அணுவும் அருகருகேயுள்ள 6 செல்களினாலும், மைய அணு 2 ஓரலகு செல்களினாலும் பகிர்ந்து கொள்ளப்படுகின்றன. (படம் 1.14) எனவே ஓரலகு செல் ஒன்றுக்கு இருக்கும் அணுக்களின் எண்ணிக்கை

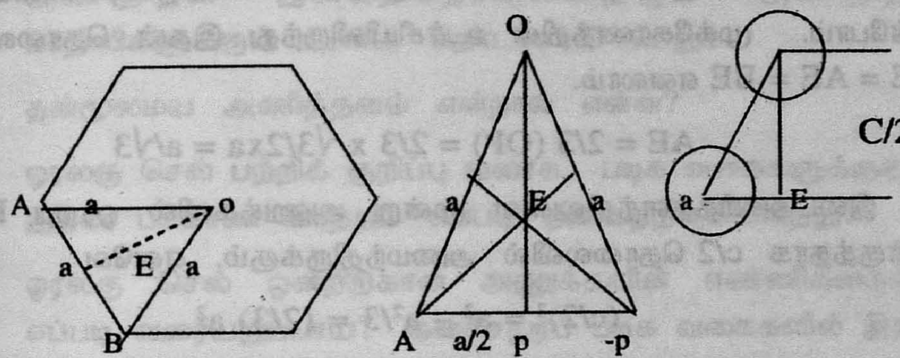
$$2(6 \times 1/6)+2 \times 1/2$$

$$2+1 = 3$$

இதன் பருமன் மிகவும் அதிகம் என்பதால் திணிவடர்த்தி மிகவும் குறைவு எனலாம். அதனால் உலோகங்களைப் படிகமாக உறையச் செய்யும்போது, அவை எளிய ஆறுமுகக் கட்டமைப்புடன் அமைவதில்லை. இறுக்கமிக்க ஆறுமுகக் கட்டமைப்பின் அலகில் மூன்று தளங்கள் உள்ளன. அடி மற்றும் மேல்தளங்கள் ஆறுமுகக் குறுக்குவெட்டுத் தோற்றத்துடன் 6 மூலைஅணுக்களுடன் ஒரு மைய அணுவையும் பெற்றுள்ளன. இவ்விரு தளங்களுக்கும் இடையில் மூன்று அணுக்களுடன் மற்றொரு தளமுமுள்ளது.

இறுக்கமிக்க ஆறுமுக ஓரலகு செல்லின் அடித்தளத்தை எடுத்துக்கொண்டால், மைய அணு 6 மூலை அணுக்களுடன் ஒட்டிக் கொண்டிருக்கின்றது. அதாவது மைய அணு தானிருக்கும் அதே தளத்தில் 6 அண்டை அணுக்களைப் பெற்றுள்ளது. இவை ஒவ்வொன்றும் ‘a’ என்ற அணித்தள மாறிலித் தொலைவில் உள்ளன. மேலும் c/2 என்ற தொலைவில் எடுத்துக்கொண்ட மைய அணு

இருக்கும் தளத்திற்கு மேலும் கீழுமுள்ள தளங்கள் ஒவ்வொன்றிலும் 3 அணுக்கள் உள்ளன. எனவே மொத்தம் 12 அண்டை அணுக்களாகின்றன. இதனால் HCP படிகத்திற்கு அண்டை அணுக்கள் 12 எனலாம்.



படம் 1.15 HCP-ல் c/a தகவு

மேலும் HCP ஓரலகு செல்லின் குறுக்குவெட்டின் தோற்றத்தைக் கொண்டு a=2r என நிறுவலாம். எனவே அணு ஆரம் r=a/2 எனலாம்.

HCP ஓரலகு செல் ஒன்றிற்குரிய அணுக்களின் எண்ணிக்கையையும் மதிப்பிடலாம். இதில் ஒவ்வொரு மூலை அணுவும், ஒட்டியுள்ள 6 ஆறுமுகச் செல்களினால் பங்கிடப்படுகின்றன. ஆனால் மைய அணித்தளத்திலுள்ள 3 அணுக்களும், முழுமையாக ஓர் ஓரலகு செல்லிற்குரியதாகின்றன. எனவே HCP ஓரலகு செல் ஒன்றிற்குரிய அணுக்கள்

$$2(1/6x6)+2(1/2x1)+3 = 2+1+3=6$$

என்று நிறுவலாம்.

HCP கட்டமைப்பில் c/a தகவு

இறுக்கமிக்க ஆறுமுக ஓரலகு செல்லின் உயரம் c என்றும் அண்டை அணுக்களுக்கிடைப்பட்ட தொலைவு a என்றும் கொள்வோம். அடித்தளத்தின் ஆறுமுகப்பரப்பில் ABO என்று சமபக்க முக்கோணத்தைக் கருதுவோம். இதில் A,B,O ஆகிய மூன்றும் அணித்தளப் புள்ளிகளாகும். இத்தளத்திற்குச் செங்குத்தாக c/2 தொலைவில் அடுத்த அணித்தளம் அமைந்துள்ளது.

O என்ற புள்ளியிலிருந்து ABக்கு வரையப்படும் நேர்குத்துக்கோட்டின் நீளம் $\sqrt{a^2-a^24}=\sqrt{3}.a/2$. இதை இடைநிலைக் கோடு (median) என்பர். இதைப்போல முக்கோணத்தின் வெவ்வேறு உச்சிகளிலிருந்து எதிர்ப்பக்கத்திற்கு இடைநிலைக்கோடுகள் வரையலாம். இடைநிலைக் கோடுகளின் வெட்டுப்புள்ளியை E என்போம். முக்கோணத்தின் உச்சியிலிருந்து இதன் தொலைவை OE = AE = BE எனலாம்.

$$AE = 2/3\ (OP) = 2/3 \times \sqrt{3}/2 xa = a/\sqrt{3}$$

இடைஅணித்தளத்திலுள்ள மூன்று அணுக்களில் ஓரணு Eக்கு நேர்குத்தாக c/2 தொலைவில் அமைந்திருக்கும். எனவே

$$(c/2)^2 = a^2 - a^2/3 = (2/3)\ a^2$$

அல்லது

$$c/a = 8/3 = 1.633$$

HCP ஓரலகு செல்லின் திணிவடர்த்தி

இறுக்கமிக்க ஆறுமுகச் செல்லின் அடிப்பக்கப் பரப்பு என்பது ABO என்ற சமபக்க முக்கோணத்தின் பரப்பைப் போல 6 மடங்காகும். இதன் மதிப்பு

$$6 \times 1/2 xAB \times OP$$

$$= 3xax\sqrt{3}a/2 = 3\sqrt{3}a^2/2$$

எனவே HCP ஓரலகு செல்லின் பருமன் $3\sqrt{3}a^2c/2$

ஓரலகு செல் ஒன்றுக்கு 6 அணுக்கள் வீதம் இருப்பதால் அணுக்களின் மொத்தப் பருமன் $6 \times 4\pi r^3/3 = 8\ \pi r^3$

திணிவடர்த்தி $16\pi r^3 / = 3\sqrt{3} \times a^2c$

2r=a என்றும், c=8/3xa என்றும் மதிப்புகளைப் பதிலீடு செய்ய

$$(Pf)_{HCP} = \pi/3\sqrt{2} = 0.74$$

வினாக்கள்

1. மில்லர் குறியெண் என்றால் என்ன? ஓர் எளிய கனச்சதுர ஓரலகு செல்லில் (100), (110), (111) போன்ற மில்லர் தளங்களைக் குறிப்பிடு. மில்லர் தளத் தொகுதி ஒன்றின் அணித்தள இடைத்தொலைவிற்கும் அணித்தள மாறிலிகளுக்கும் உள்ள தொடர்பைப் பெறுக.

2. தன்மூலமய அணித்தளம் என்றால் என்ன?

3. ஓரலகு செல் பற்றிக் குறிப்பு வரைக. படிக வகைகளுக்குஏற்ப இதன் பரிமாண மாற்றம் எப்படி அமைந்திருக்கின்றது?

4. ஓரலகு செல் ஒன்றிற்கான அணுக்களின் எண்ணிக்கையை எப்படி வரையறுப்பாய்? கனச்சதுரப் படிக வகைகளில் இதன் மதிப்பைக் கண்டறிக.

5. அண்டை அணு எண்ணிக்கை என்றால் என்ன? கனச்சதுரப் படிக வகைகளில் இதன் மதிப்பைக் கண்டறிக.

6. அணுஆரம், திணிவடர்த்தி இவற்றின் மதிப்பை எளிய, முகமைய, உடல்மைய கனச் சதுர ஓரலகு செல்களைக் கொண்டு மதிப்பிடுக.

7. இறுக்கமிக்க ஆறுமுகக் கட்டமைப்பை விவரித்து அதன் c/a தகவைக் கண்டறிக.

2.(அ) படிகப் பண்புகளும் குறைபாடுகளும்

(அ) படிகச் சீர்மை – புள்ளித் தொகுதிகள் - இடைவெளித் தொகுதி – அணித்தளத்தில் எக்ஸ்கதிர் விளிம்பு விளைவு – பிராக் விதி – வான் லவே அணுகுமுறை – எக்ஸ்கதிர் விளிம்பு விளைவு சோதனைகள் - சுழல் படிக முறை – நுண்பொடி முறை

தலைகீழ் அணிக்கோவை – பண்புகள் - பிராக் நிபந்தனை – பிரிலோயின் மண்டலம் - sc, bcc, fcc படிகங்களில் பிரிலோயின் மண்டலங்கள்.

அணுவியல் சிதறல் காரணி – வடிவியல் சிதறல் காரணி

(ஆ) படிகக் குறைபாடுகள் - கண்டுபிடிப்பு – வகைகள் - புள்ளி வழு, வரி வழு, தளவழு, அடுக்குப் பிழை

ஸ்காட்கி குறைபாடுகள் - ஸ்காட்கி வழுக்களின் செறிவு – பிரென்கெல் குறைபாடுகள் - பிரென்கெல் வழுக்களின் செறிவு – புறவியலான வெற்று இடங்கள் - நிறமையங்கள் - F மையம் - F' மையம் R_1, R_2 மற்றும் M மையங்கள் - V மையம்.

வரிவழு – சறுக்கலும் நெகிழ்ம உருக்குலைவும் - சறுக்குப் பெயர்ச்சியின் வலிமை – விளிம்பு மற்றும் திருகு உருக்குலைவு – பர்கெர் வெக்டர்.

2அ. படிகப் பண்புகள்

2.1. படிகச் சீர்மை (Crystal symmetry)

படிகங்கள் வடிவியல் சீர்மை கொண்டுள்ளன. ஒரு படிகத்தை நிலை மாற்றுச் செயலால் அதன் அமைவு நிலையில் மாற்றம் செய்ய, அது முன்பிருந்த நிலையிலிருந்து எந்த வேறுபாடான தோற்றத்தையும் புலப்படுத்திக் காட்டாதிருப்பதால், அப்படிகம் சீர்மை கொண்டிருப்பதாகக் கூறப்படும். எடுத்துக்காட்டாக ஒரு சதுரத்தை அதன் மையத்திலிருந்து தளத்திற்குச் செங்குத்தான அச்சுப் பற்றி 90° சுழற்சி பெறச் செய்ய அது தன் நிலையில் எந்த வேறுபாட்டையும் காட்டுவதில்லை. படிகச் சீர்மையைச் சீர்தளம் (plane of symmetry), சீர்மையம் (centre of symmetry) மற்றும் மடி சீரச்சு (n-fold axis of symmetry) ஆகியவற்றால் விவரிக்க முடியும்.

எதிரொளிப்பு ஆடிபோல ஓர் அமைப்பின் இடவலச் சீர்மையை அங்ஙனமே காட்டும் ஒரு படிகம் எதிரொளிப்புச் சீர்தளத்தைப் பெற்றிருக்குமெனலாம். அதாவது அமைப்பில் ஒரு புள்ளி, இத்தளத்தில் ஓர் ஆடி பிம்பத்தைப் பெற்றிருக்கும்.

ஓர் அமைப்புச் சீர்மையம் கொண்டிருக்கிறது என்றால், அந்த மையம் வழியாக வரையப்படும் எந்த நேர்கோட்டிலும், மையத்திற்கு இருமருங்கும் சம தொலைவில் கட்டமைப்பு ஒத்திருக்கும். கனச் சதுரப் படிகத்தில் கனச்சதுரத்தின் மையம் சீர்மையமாகும்.

ஓர் அமைப்பு ஒரு சில குறிப்பிட்ட அச்சுப் பற்றிச் சுழற்சி பெறச் செய்ய அது தன் பழைய நிலையையே காட்டுமானால் அது சீரச்சுக் கொண்டுள்ளது எனலாம். 180° சுழற்ற இது ஏற்படுமானால் அதை இருமடிச் சீரச்சு என்றும், 90° சுழற்ற ஏற்படுமானால் அதை நான்மடிச் சீரச்சு என்றும் கூறுவர்.

2.2 புள்ளித் தொகுதிகள் (point groups)

ஒன்று அல்லது அதற்கு மேற்பட்ட எளிய மற்றும் சிக்கலான சீர்மைக் கூறுகளால் (symmetry elements) ஓர் உருவத்தை அதற்கு இணையான மற்றோர் உருவத்துடன் ஒத்திருக்குமாறு செய்ய முடியும். சீர்மையைப் புலப்படுத்திக் காட்டும் செயல்முறைகளில் பல்வேறு

சேர்க்கையினால் 32 உருவரைப் புள்ளிகளைப் பெற முடியும். இவற்றையே 'புள்ளித் தொகுதிகள்' என்பர். ஓர் அணித்தளப்புள்ளியில் சீர்மைக் கூறுகளைச் செயல்படுத்த, அது அணித்தளத்தை மாறாதிருக்கச் செய்யுமானால், சீர்மைக் கூறுகளின் தொகுப்பு புள்ளித் தொகுதியாகும்.

C_1, C_2, C_3, C_4 மற்றும் C_6 (C_5 இல்லை) ஆகிய 5 புள்ளித்தொகுதிகள் சுழற்சி இயக்கத்தால் பெறப்படுகின்றன. D_2, D_3, D_4 மற்றும் D_6 ஆகிய 4 புள்ளித் தொகுதிகள் ஒன்றுக்கொன்று செங்குத்தான இரு சுழற்சி அச்சுகளின் சேர்க்கையாலானவை. n=1 எனில் D_1ம் C_2ம் ஒத்திருக்கின்றன என்பதால் D_1 தவிர்க்கப்பட்டுள்ளது. இவற்றை இருமுகத் தொகுதி (dihedral groups) என்பர். இவ்வச்சுகளை n மடி முதன்மை அச்சு என்றும் n-இருமடி துணை அச்சு என்றும் குறிப்பிடுவர். T என்ற நான்முகத் (tetrahedral) தொகுதி, நாற்கோண உருவின் 3 - இருமடி அச்சுடன் நான்கு மும்மடி அச்சுகள் பற்றிய நிலைமாற்றத்தை ஏற்படுத்துவதால் விளைவதாகும். O என்ற எண்முகத்தொகுதி (octahedral) ஒன்றுக்கொன்று செங்குத்தான மூன்று நான்குமடி அச்சுகள் வட்டச்சுற்று அச்சுகள் (கனச்சதுரத்தின் உயரம் போல) நான்கு மூன்று மடி வட்டச்சுற்று அச்சுகள் (கனச்சதுரத்தின் மூலைவிட்டம் போல) ஆறு இரு மடி அச்சுகள் (கனச்சதுரத்தின் பக்கப்பரப்பின் மூலை விட்டம் போல) இவற்றின் உதவியால் பெறப்படுகின்றது.

ஒருமடி மற்றும் இருமடித் திருகு அச்சுச் சீர்மையினால் $\overline{C}_1$, $\overline{C}_2$ போன்ற புள்ளித் தொகுதிகளைப் பெறலாம். $\overline{C}_1$ என்று குறிப்பிடப்படும் புள்ளித் தொகுதியின் கட்டமைப்பை வட்டச் சுழற்சி அச்சு, மற்றும் ஆடி எதிரொளிப்பு மூலம் பெறமுடியும் என்பதால் C_1 C_1^h உடன் சில சமயங்களில் C_1^v உடன் ஒத்திருக்கிறது. இதை S_1 என்று குறிப்பிடுவர். h என்பது கிடைமட்ட ஆடி எதிரொளிப்பையும் v என்பது நேர் குத்து ஆடி எதிரொளிப்பையும் குறிக்கும். அதன் நிலை கிடைமட்டம் மற்றும் நேர்குத்து அச்சுகளுக்கு இரு சமவெட்டியாக (bisect) இருக்குமானால் d என்ற எழுத்தால் குறிப்பிடுவர். T என்ற புள்ளித் தொகுதியுடன் கிடைமட்ட ஆடியைச் செயல்படுத்தி T^h என்ற புள்ளித் தொகுதியையும், மூலைவிட்ட நேர்குத்து ஆடியைச் செயல்படுத்தி T^d புள்ளித் தொகுதியையும் பெறலாம். இது போல O என்ற புள்ளித் தொகுதியில் O_h என்ற கூடுதல் தொகுதியைப் பெறலாம்.

அட்டவணை 2.1

படிகச் சீர்மையும் புள்ளித் தொகுதியும்

எண்	படிக வகை	புள்ளித் தொகுதிகளின் குறியீடு	எண்ணிக்கை
1	முத்திசைச் சரிவுள்ள படிகம்	$C_1; C_2 = S_2$	2
2	ஒருதிசைச் சரிவுள்ள படிகம்	$C_1 = C_1^h = C_5; C_2; C_2^h$	3
3	ஆறு செவ்வக முகப் படிவம்	$D_2; C_2^v; D_2^h$	3
4	நாற்கோணப் படிகம்	$C_4; S_4; D_4; C_4^h$ $C_4^v; D_2^d; D_4^h$	7
5	கனச்சதுரப் படிகம்	$T; O; T_h; T_d; O_h$	5
6	சாய்சதுரப் படிகம்	$C_3; D_3; C_3^v; C_3^i; D_3^d$	5
7	அறுங்கோணப் படிகம்	$C_3^h; D_3^h; C_6; D_6; C_6^h;$ $C_6^v; D_6^h$	7

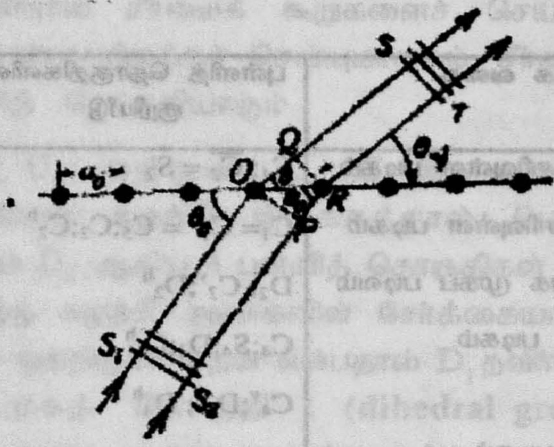
இடவெளித் தொகுதி (space groups)

புள்ளித் தொகுதிகளை, அணித்தளத்துடன் மேற்பொருத்தக் கிடைப்பது இடவெளித் தொகுதியாகும். ஒரு படிகக் கட்டமைப்பின் இடவெளித் தொகுதி என்பது கட்டமைப்பை மாற்றம் செய்யா இடமாற்றுப்பெயர்ச்சி, புள்ளி பற்றிய செயலிகள் மற்றும் இவற்றின் கலப்பால் ஆன செயலிகளின் தொகுப்பு எனலாம். 32 புள்ளித் தொகுதிகள், 14 வகையான அணித்தளங்களுடன் சேர்ந்து 230 வகை இடவெளித் தொகுதிகளைத் தந்துள்ளன.

2.3. அணித்தளத்தில் எக்ஸ் கதிர் விளிம்பு விளைவு

அணித்தள அணுவோடு பிணைந்துள்ள எலக்ட்ரான் படிகத்தை ஊடுருவிச் செல்லும் எக்ஸ்கதிர்கள் பாதையில் குறுக்கிடும்போது, எக்ஸ்கதிரின் மின்புலத்தை அடுத்தடுத்து மாற்றத்திற்கு உள்ளாக்கித் திணிப்பதிர்வால் அலைவுறத் தொடங்குகிறது. இதனால் எலக்ட்ரான் நேர்முடுக்கம் அல்லது எதிர் முடுக்கத்திற்கு ஆளாகி, எக்ஸ் கதிரின் அதே அதிர்வெண், அலைநீளத்தைக் கொண்ட மின்காந்த அலைகளை

உமிழ்கிறது. அதாவது எல்க்ட்ரான் விழும் எக்ஸ் கதிர்களைச் சிதறடிக்கிறது எனலாம்.



படம் 2.1 ஒற்றைப் பரிமாண அணித்தளத்தில் ஒருதள அலையின் விளிம்பு விளைவு

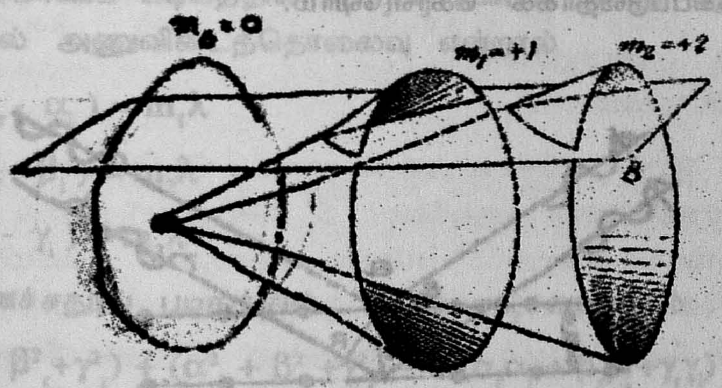
ஓர் ஒற்றைப் பரிமாண அணித்தளத்தைக் கருதுவோம். அணித்தளத்திலுள்ள அணுவிடைத் தொலைவு a_0 என இருக்கட்டும். அணுக்கள் விழும் எக்ஸ் கதிர்களைச் சிதறடிப்பதால் அவை ஒவ்வொன்றும் கோள அலைமுகப்பை உருவாக்கும் மூலங்களாக விளங்குகின்றன. விலகிச்செல்லும் அலைமுகப்புகளின் தொடுகொடு, விழும் அலைமுகப்புகளின் தொடுகோட்டிற்கு இணையாக இருந்தால், அது சுழிவகை நிலை விளிம்பு விளைவு (zero order diffraction) எனப்படும். ஓர் அணுவிற்கு மிக நெருக்கமாக உள்ள அலைமுகப்பும், அதற்கும் அடுத்துள்ள அணுவின் மூன்றாவது அலை முகப்பும் ஒரே தொடுகோட்டால் அமையுமானல் அது ‘முதல் வகை நிலை விளிம்பு விளைவு’ எனப்படும். அடுத்தடுத்த அணுக்களில் அலைமுகப்பு வேறுபாடு ஒன்றாகும். இது போல அடுத்தடுத்த அணுக்களின் அலைமுகப்பு வேறுபாடு 2 எனில் அது ‘இரண்டாம் வகை நிலை விளிம்பு விளைவு’ எனப்படும்.

அடுத்தடுத்த இரு அணித்தள அணுக்கள் மீது விழும் எக்ஸ் கதிர்களையும், விளிம்பு விளைவிற்கு ஆளாகி விலகிச் செல்லும் எக்ஸ் கதிர்களையும் கருதுவோம். (படம் 2.1.) விழும் கதிர்கள் θ_i கோணம் சாய்வாக விழுவதால், அவைகளுக்கிடையே OQ என்ற பாதை வேறுபாடும், மீளும் கதிர் θ_r கோணம் சாய்வாக விலகிச்செல்வதால், அவைகளுக்கிடையே PR என்ற பாதை

வேறுபாடும் ஏற்படுகின்றன. படம் 2.1.லிருந்து அவ்விரு கதிர்களுக்குமிடையேயான மொத்தப் பாதை வேறுபாடு OQ – PR. மீளும் திசையில் பெருமச் செறிவை ஏற்படுத்துவதற்கான நிபந்தனை, இப்பாதை வேறுபாடு, அலைநீளத்தின் ஒரு முழு எண் மடங்காக இருக்கவேண்டும். இதை

$$OQ - PR = a_o (\cos\theta_r - \cos\theta_i) = m\lambda \qquad (2.1)$$

இத்தொடர்பு சுழி வகை நிலை தவிர்த்த பிற வகைகளில், அலை நீளம் 2 a_o க்கும் அதிகமாக இருக்கும்போது, விளிம்பு விளைவுப் பெருமம் ஏற்படுவதிலலை எனத் தெரிவிக்கிறது. ஏனெனில் $(\cos\theta_r - \cos\theta_i)$ன் பெரும மதிப்பு 2க்கு மேலிருப்பதில்லை. அணித்தள அணுக்கள் விளிம்பு விளைவிற்குட்பட்ட கதிர்வீச்சை எல்லாத் திசைகளிலும் சிதறடிப்பதால் முப்பரிமாண விளம்பு விளைவுப் பாங்கினை, அவ்வணித்தள அச்சைப் பொறுத்து 2π கோணம் சுற்றுவதினால் பெறமுடியும்.



படம் 2.2. ஒரு தளத்தில் பதிவு செய்யப்படும் விளிம்பு விளைவுப் பாங்கு

வெவ்வேறு வகை நிலைகளில் அணித்தளத்திற்கு இணையான தளத்தில் பதிவு செய்யப்படும் நிறமாலையின் தோற்றம் படம் 2.2.இல் காட்டப்பட்டுள்ளது. சுழி வகை நிலையில் $\theta_i = \pi/2$, $\theta r = 0$ என்பதால், நிறமாலை இத்தளத்தில் ஒரு நேர்கோடாகத் தெரிகிறது. பிற வகை நிலைகளில் இது நீள பரவளையமாகத் தோன்றுகின்றது.

d என்ற ஒரே மாறிலியுடன் கூடிய முப்பரிமாண அணித்தளத்தைக் கருதுவோம். X,Y,Z அச்சைப்பொறுத்து, விழும்

எக்ஸ் கதிரின் கொசைன் திசைமம்(directional cosine) $\alpha_i, \beta_i, \gamma_i$, என்றும் விலகுகதிரின் கொசைன் திசைமம் $\alpha_r, \beta_r, \gamma_r$, என்றும் கொள்வோம். முப்பரிமாண அணித்தள விளிம்பு விளைவை மூன்று சமன்பாட்டினால் குறிப்பிடலாம்.

$$a_o\ (\alpha_r - \alpha_i) = m_1\lambda$$

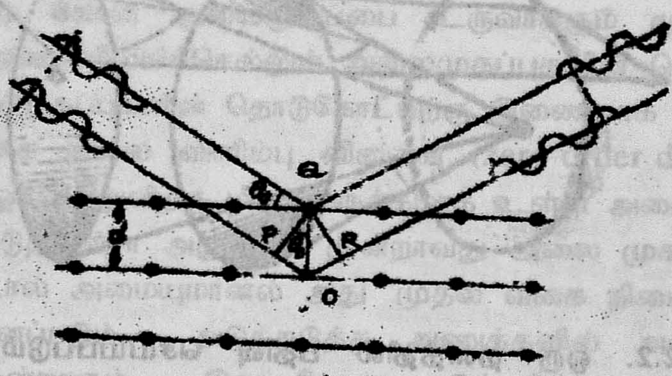
$$a_o\ (\beta_r - \beta_i) = m_2\lambda \qquad (2.2)$$

$$a_o\ (\gamma_r - \gamma_i) = m_3\lambda$$

இச்சமன்பாடுகளை லவே சமன்பாடுகள் என்பர் (Laue's equations)

பிராக் விதி (Bragg's law)

ஒரு படிகத்தில் இரு இணை அணித்தளங்களை எடுத்துக்கொள்வோம். அணித்தளவிடைத் தொலைவு d என்போம். இதில் O மற்றும் Q என்ற அமைவிட அணுக்களால் எக்ஸ்கதிர் எதிரொளிக்கப்படுவதாகக் கொள்வோம்.



படம் 2.3 பிராக் விதி

மேல் அணித்தளத்திற்குக் கீழாகவுள்ள அணித்தளத்தால் எதிரொளிக்கப்படும் எக்ஸ் கதிர் கூடுதலாகக் கடக்கும் பாதை OP+OR ஆகும். θ என்பது விழுகதிரின் சாய்வுக் கோணம் எனில் OP=OR=dsinθ எனலாம். பெருமஒளிச் செறிவிற்கான நிபந்தனையின் படி இதை

$$2d\sin\theta = n\lambda \qquad (2.3)$$

எனக் குறிப்பிடலாம். ஒற்றை அலை நீளமுள்ள கதிர்வீச்சாக இருப்பின் மாறா அலைநீளத்திற்கும், கொடுக்கப்பட்ட அணித்தளத்திற்கும் சமன்பாடு(2.3), சில குறிப்பிட்ட தீர்வுகளை மட்டுமே கொண்டுள்ளது. அதாவது.

$$\theta = \sin^{-1} (\lambda / 2d_1) = \sin^{-1} (2\lambda / 2d_2) = \sin^{-1} (3\lambda / 2d_3) \qquad (2.4)$$

இவை முறையே முதல், இரண்டாவது, மூன்றாவது விளிம்பு விளைவுப் பெருமங்களைக் குறிப்பிடுகின்றன. அதாவது ஒரு படிகம் எல்லாக் கோணத்திசைகளிலும் எதிரொளிப்பைச் செய்யாது. ஒரு சில குறிப்பிட்ட, (சமன்பாடு 2-3க்கு ஏற்ப) கோணத் திசைகளில் மட்டும் செய்கின்றது. பிராக் எதிரொளிப்பு $\lambda \leq 2a_0$ என்றிருக்கும்போது மட்டும் நிகழ முடியும் என்பதால் எக்ஸ் கதிர்களைவிட அலை நீளமிக்க கட்புலனுணர் அலைகளை, பிராக் விளிம்பு விளைவிற்குப் பயன்படுத்த முடியாது.

முப்பரிமாணப் படிகத்தில் a_1, a_2, a_3 என்பன முறை x,y,z அச்சுத் திசைகளில் அணுவிடைத்தொலைவு என்றால்

$$a_1 \ (\alpha_r - \alpha_i) = m_1 \lambda$$

$$a_2 \ (\beta_r - \beta_i) = m_2 \lambda$$

$$a_3 \ (\gamma_r - \gamma_i) = m_3 \lambda$$

எளிய கனச்சதுரப் படிகத்தில் $a_1 = a_2 = a_3$ என்பதால்

$$(\alpha^2_r + \beta^2_r + \gamma^2_r) + (\alpha^2_i + \beta^2_i + \gamma^2_i) - 2 (\alpha_r \alpha_i + \beta_r \beta_i + \gamma_r \gamma_i) = (\lambda / a_0)^2 (m_1^2 + m_2^2 + m_3^2)$$

ஆனால் கொசைன் திசைமம் சார்ந்த விதிப்படி

$$\alpha^2_r + \beta^2_r + \gamma^2_r = \alpha^2_i + \beta^2_i + \gamma^2_i = 1$$

$$\alpha_r \alpha_i + \beta_r \beta_i + \gamma_r \gamma_i = \cos\phi$$

இதில் ϕ என்பது விழும் கதிருக்கும், விலகு கதிருக்கும் இடைப்பட்ட கோணமாகும். எனவே

$$2 - 2\cos\phi = (\lambda / a_0)^2 (m_1^2 + m_2^2 + m_3^2)$$

அல்லது $2 \sin \phi/2 = (\lambda / a_0) (m_1^2 + m_2^2 + m_3^2)$ (2.5)

இத்தொடர்பைக் கொண்டு விலகு கோணம் ϕன் மதிப்பைக் கணக்கிட்டறியலாம்.

ஓர் அணித்தளத்தின் மில்லர் குறியெண் (h,k,l) என்பது ஆயவெட்டுத் தொலைவுகளின் தலைகீழ் மதிப்பை அவற்றின் தாழ்ந்த பகா எண்களால் குறிப்பிடுவதாகும். இவற்றின் உண்மையான வெட்டுத் தொலைவின் தலைகீழ் மதிப்பு nh,nk,nl ஆகும். இதில் n என்பது ஒரு முழு எண் மதிப்புக் கொண்டது. விளிம்பு விளைவை ஏற்படுத்தும் அணித்தளத்தை $m_1=nh$, $m_2=nk$, $m_3=nl$ என்றிருக்குமாறு தேர்வு செய்தால், (h,k,l) என்ற மில்லர் குறியெண் கொண்ட அணித்தளத்தின் n வகை நிலை விளிம்புவிளைவுக் கற்றையைக் குறிப்பிடலாம். எனவே

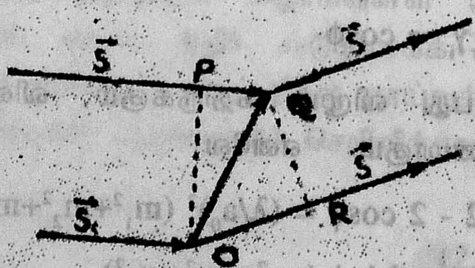
$$2 \sin \phi/2 = (\lambda/a_0)\, (h^2+k^2+l^2)^{1/2}\, n$$

அல்லது $n\lambda = 2\ (a_0 / \sqrt{(h^2+k^2+l^2)} \sin \phi/2$

$2 \sin \theta = n\lambda$ என்ற சமன்பாட்டோடு ஒப்பிட்டு, அணித்தளவிடைத் தொலைவு $d = (a_0 / \sqrt{(h^2+k^2+l^2)}$ என்றும் $\phi/2=\theta$ என்றும் நிறுவலாம்.

வான்லவே அணுகுமுறை
(Von Laue treatment)

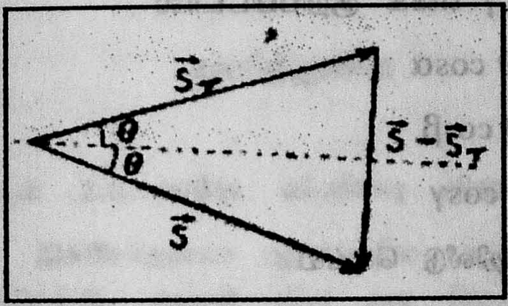
r என்ற இடைத் தொலைவுடன் கூடிய O, Q என்ற ஒத்த இரு சிதறல் மையங்களைக் கருதுவோம். S_i என்பது படுகதிரின் திசையில் ஓரலகு வெக்டார் என்றும் S_r என்பது விடுகதிரின் திசையில் ஓரலகு வெக்டார் என்றும் கொள்வோம். படுகதிர் இணைக்கற்றை என்றும், சிதறலுற்று வெளியேறும் கற்றை வெகு தொலைவிலுள்ளதொரு புள்ளியில் அளவிடப்படுகின்றது என்றும் அனுமானிப்போம். OP, QR என்பன முறையே படு கதிர் மற்றும் விடுகதிர் அலை பரவும் திசைகளில் எறிவீச்சாகும். எனவே O மற்றும் Q புள்ளிகளினால் சிதறலுற்று வெளியேறும் அலைகளின் பாதை வேறுபாடு



படம் (2.4) லவே அணுகுமுறை

$$PQ - OR = r.S_i - r.S_r = r.S$$

இதில் $S = S_i - S_r$ ஆகும். படுகதிரின் திசையை, விடுகதிரின் திசையில் எதிரொளிக்கின்ற தளத்திற்கு நேர்க்குத்தாக இருக்கும் செங்குத்துத் திசையை வெக்டார் S குறிப்பிடுகிறது.



எதிரொளிப்புத்தளம்

படம் (2.5) லவே வெக்டார்கள்

இது பிராக் விளிம்பு விளைவில் எதிரொளிப்புத் தளமாகும். S_i க்கும் S_r க்கும் இடைப்பட்ட கோணம் 2θ எனில், θ என்பது படுகோணமாகும். படம் 2.5. லிருந்து $|S| = 2\sin\theta$ என்ற மதிப்பைப் பெறலாம்.

O,Q புள்ளிகளிலிருந்து சிதறலுறும் ஒளி ஒரே அலைக் கட்டத்தில் இருப்பதில்லை. ϕ என்பது அலைக் கட்ட வேறுபாடு எனில்

$\phi = 2\pi/\lambda\ (r.s)$

S_r என்ற வெக்டார் திசையில் சிதறலுறும் ஒளியின் செறிவு பெருமமாக இருக்க வேண்டுமெனில், அத்திசையில் ஒவ்வொரு சிதறல் மையத்திலிருந்தும் வரும் சிதறல் ஒளி, $2\pi n$ என்ற அலைக் கட்ட வேறுபாட்டைப் பெற்றிருக்க வேண்டும். இது உண்மையாக இருப்பதற்கு, அடுத்தடுத்துள்ள அணித்தள அணுக்களிலிருந்து சிதறலுறும் கதிர்வீச்சு குவியும் போது அலைக் கட்டத்தால் ஒன்று கூடுவதாக இருக்க வேண்டும். அடுத்தடுத்த அணுக்கள் a,b,c என்ற இடமாற்ற வெக்டார் அலகில் விலகி இருப்பதால்

$$2\pi/\lambda\ (a.s) = 2\pi/h' = 2\pi nh$$

$$2\pi/\lambda\ (b.s) = 2\pi/k' = 2\pi nk \qquad (2.7)$$

$$2\pi/\lambda\ (c.s) = 2\pi/l' = 2\pi nl$$

h',k',l' என்பன முழு எண்களாகும். அது மிகச்சிறிய முழு எண் தொகுப்பாலானதாகவோ, அல்லது ஒரு பொதுக்காரணி உடையதாகவோ இருக்கலாம். n என்பது பொதுக்காரணி எனில் $h'=nh$, $k'=nk$, $l'=nl$ என்று குறிப்பிடலாம். எதிரொளிப்புத் தளத்திற்குச் செங்குத்து வெக்டார் Sக்கும் a,b,c என்ற படிக அச்சுக்கும் உள்ள கோணத்தை முறையே α, β, γ எனக் குறிப்பிட்டால்

$$a.s = a.s \cos\alpha = 2a \sin\theta \cos\alpha$$

$$b.s = b.s \cos\beta = 2b \sin\theta \cos\beta \qquad (2.8)$$

$$c.s = c.s \cos\gamma = 2c \sin\theta \cos\gamma$$

இம் மதிப்புகளை (2.7)ல் பதிலீடு செய்ய

$$2a \sin\theta \cos\alpha = nh\lambda$$

$$2b \sin\theta \cos\beta = nk\lambda \qquad (2.9)$$

$$2c \sin\theta \cos\gamma = nl\lambda$$

இந்த நிபந்தனைகள் 'லவே சமன்பாடுகள்' எனக் கூறப்படுகின்றன. இத் தொடர்புகள், θ ன் மதிப்பை அதாவது சிதறல் திசையை அறியப் பயன்படுகின்றன. இத் தொடர்புகளிலிருந்து சிதறல்தளச் செங்குத்தின் கொசைன் திசைமம் $(S_i - S_r)$, h/a, k/b, l/cக்கு நேர் விகிதத்திலிருப்பதைச் தெரிந்து கொள்ள முடிகின்றது. அதாவது (hkl) என்ற மில்லர் குறியெண் கொண்ட தளத்தின் செங்குத்துத் திசைமம் h/a, k/b, l/c க்கு நேர் விகிதத்திலிருக்கின்றது. (hkl) தளத்தைப் பிராக்கின் எதிரொளிப்புத் தளமாகவும், சிதறல்தளத்தின் செங்குத்து, (hkl) தளச் செங்குத்தாகவும் கொள்ளலாம். இது லவே சமன்பாடுகளுக்கும் பிராக்கின் விதிக்கும் ஒரு தொடர்பைத் தருகிறது.

(hkl) மில்லர் குறியெண்ணால் குறிப்பிடப்படுகிற தளங்களின் தளவிடைத் தொலைவு d எனில்

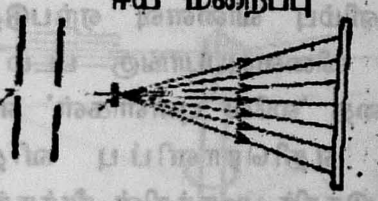
$$d = a \cos\alpha / h = b \cos\beta / k = c \cos\gamma / l$$

சமன்பாடு (2.9) ஐக்கொண்டு

$$2d \sin\theta = n\lambda$$

என்ற பிராக் தொடர்பைப் பெறலாம்.

2.4. எக்ஸ்கதிர் விளிம்பு விளைவு – சோதனை முறைகள்



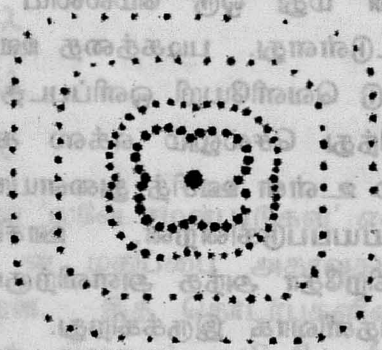
படம் 2.6 லவே விளிம்பு விளைவு (நிலையான படிகம்)

இச்சோதனை முறையில் படிகம் நிலையாக இருக்குமாறு வைக்கப்பட்டு, அதன் மீது ஒரு மெல்லிய எக்ஸ் கதிர் கற்றை விழுமாறு செய்யப்பட்டுள்ளது. படிகத்தை ஊடுருவும் கதிர் விளிம்பு விளைவிற்கு உட்பட்டு வெளியேறி ஒளிப்படத் தட்டில் பதிவாகிறது. மூலத்திலிருந்து விரிந்து செல்லும் எக்ஸ் கதிரிலிருந்து இரு ஈய மறைப்புத் தட்டிகளில் உள்ள ஊசித் துளையால் இணைக்கற்றைகள் மட்டும் தேர்வு செய்யப்படுகின்றன. ஊசித் துளை எவ்வளவு நுண்மையாக இருக்கிறதோ அந்த அளவிற்குப் பதிவாகும் விளிம்பு விளைவுப் பாங்கு தெளிவாக இருக்கிறது.

படிகத்தை ஒரு பிடிகோலில் பொருத்தி, அதன் அமைவு நிலையைத் தேவைக்கேற்ப மாற்றிக் கொள்ளலாம். லவே வழி முறையில் நீண்ட அலை நீள நெடுக்கைக்கு உட்பட்ட எக்ஸ் கதிர்கள் பயன்படுத்தப்படுகின்றன.

ஒரு குறிப்பிட்ட (λ) ஒற்றை அலைநீளமுள்ள எக்ஸ் கதிர் கற்றையைக் கொடுக்கப்பட்ட படிகத்தில் ஒரு குறிப்பிட்ட திசை வழியாகச் செலுத்த, விளிம்பு விளைவு பொதுவாக ஏற்படுவதில்லை. ஏனெனில் ஒரு சில தளங்கள் மட்டுமே, பிராக் சமன்பாட்டிற்கு ஏற்ப அனுகூலமான நிலையில் அமைந்திருக்கின்றன. ஆனால் நீண்ட நெடுக்கைக்குட்பட்ட அலைநீளங்கொண்ட எக்ஸ் கதிர்களைப் பயன்படுத்தும்போது, ஒரு சில குறிப்பிட்ட λ மதிப்புகள், பிராக்கின் நிபந்தனைக்கு உட்பட்டிருப்பதால், படிகத்தின் அணித்தளத்தின் திசையமைவு எப்படியிருப்பினும், அந்த λ மதிப்பிற்கு விளிம்பு விளைவு ஏற்படுகின்றது. அதாவது d மற்றும் θ_iன் எம்மதிப்பிற்கும், விளிம்பு விளைவை ஏற்படுத்தும் ஒரு நீண்ட அலைநீள நெடுக்கையிலுள்ள

எக்ஸ் கதிரில் இருக்கும் படிகத்தில் அணித்தளம் முப்பரிமாணமுள்ளதால், பல வகையான அணித்தளத் தொகுதிகளினால் விளிம்பு விளைவு ஏற்படுத்தப்படும். பதிவு செய்யப்படும் விளிம்பு விளைவுப்பாங்கு படம் 2.7இல் காட்டியது போல இருக்கும். இதை 'லவே புள்ளிகள்' என்பர். இந்த லவே புள்ளிகள் யாவும் எதிரொளிப்பு விதிக்கு உட்பட்ட அமைவிடங்களாகும். படுகதிர் படிகத்தின் சீரச்சுத் திசையில் கடக்கும் போது, லவே விளிம்பு விளைவுப் பாங்கு பல அடுக்கடுக்கான புள்ளிகளைக் கொண்டிருக்கும். இவற்றின் இயங்குவரை நீள்வட்டமாக இருப்பதுடன், படுகதிரினால் உண்டாக்கப்பட்ட மையப்பதிவு வழியாகக் கடந்தும் செல்லும்.

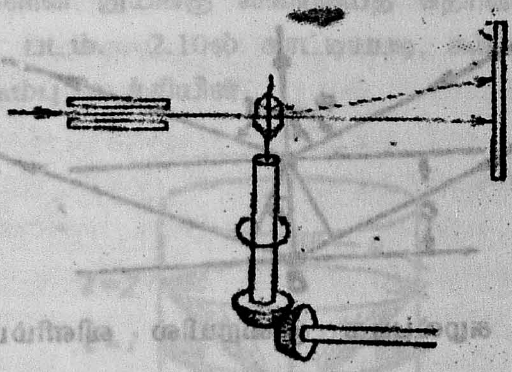


படம் 2.7 லவே விளிம்பு விளைவுப் பாங்கு

நடைமுறையில் படிகத்தின் கட்டமைப்பை ஆராய்வதற்கு லவே வழிமுறை பெரிதும் பின்பற்றப்படுவதில்லை. ஏனெனில் இதில் பல அலைநீளங்கள் ஒரே அணித்தளத்திலிருந்து வெவ்வேறு வகை நிலைகளில் எதிரொளிக்கப்படுவதால் அவை யாவும் மேற்பொருந்தி ஒரே புள்ளியாகக் காட்சியளிக்கின்றன. இதன் காரணமாக எதிரொளிப்பு கதிரின் செறிவை மதிப்பிட்டறிவது கடினமாக இருக்கும்.

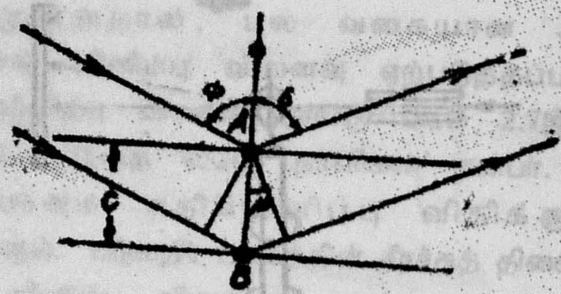
சுழல் படிக முறை (Rotating Crystal Method)

இவ்விதிமுறைக்குத் தேவையான எக்ஸ்கதிர் தகுந்த வடிப்பான் மூலம் வடிகட்டப்பட்டு ஒற்றை அலை நீளமுள்ளதாக ஆக்கப்படுகின்றது. இணையாக்கி அமைப்பு மூலம் நேர்த்தியான மெல்லிய கற்றையாக்கி, படுகதிருக்குச் செங்குத்தாக அமைக்கப்பட்ட ஒரு சுழல் தண்டின் நுனியில் பொருத்தப்பட்ட படிகத்தின் வழியாக ஊடுருவிச் செல்லுமாறு செய்யப்பட்டுள்ளது.



படம் 2.8 சுழல்படிக முறை

ஒரு சிறிய மின் மோட்டார் மூலம் சுழல் தண்டைச் சீரான கோணத்திசை வேகத்தில் சுற்றுமாறு செய்யலாம். இங்கு, படிகத்தின் பரிமாணம் 1 மிமீ அளவிற்கு மேல் இல்லாதவாறு பார்த்துக் கொள்ள வேண்டும். ஏனெனில் அப்பொழுதுதான் படிகம் முழுதும் படுகதிரின் தாக்கத்திற்கு உட்படும். படிகம் ஒரு குறிப்பிட்ட அச்சுபற்றிச் சுழலும்போது, குறிப்பிட்ட அணித்தளத் தொகுதிகள் அடுத்தடுத்து எதிரொளிக்கும் நிலையில் அமைகின்றன. அதாவது θன் மதிப்பு பிராக் விதிக்கு உட்பட்டிருக்கிறது. விளிம்பு விளைவைப் படுகதிரின் நேர்க் கற்றைக்குச் செங்குத்தாக உள்ள பதிவுத் தகட்டில் பதிவு செய்யலாம். இப்படிச் செய்யப்படும் பதிவை இரு வகைகளில் பெறலாம். முதலாவதான முழு நிறைவுச் சுழற்சி முறையில், படிகம் சுழல் தண்டின் அச்சுபற்றி ஒரு முறை முழுமையாகத் தற்சுழலுமாறு செய்யப்படுகிறது. இதனால் எல்லா அணித்தளத் தொகுதிகளும் ஒன்று விட்டு ஒன்றென விளிம்பு விளைவிற்கு உட்படுகின்றன. ஒரு முறை படிகம் சுழலும் போது ஓர் அணித்தளத் தொகுதி நான்குமுறை எதிரொளிப்புச் செய்வதால், பதிவுத் தட்டில் நேர்க்கற்றை ஏற்படுத்தும் மையப் புள்ளியைப் பொறுத்து இவை ஒரு செவ்வக வடிவப் பாங்கை ஏற்படுத்துகின்றன. இரண்டாவது வழிமுறையில் படிகம் ஒரு சீரான அலைவியக்கத்திற்கு உட்படுத்தப்படுகிறது. ஒரு குறிப்பிட்ட கோண நெடுக்கைக்கு உட்பட்டு அலைவியக்கத்தின் அலைவீச்சு இருக்குமாறு இதில் செய்யப்பட்டுள்ளது. இதனால் எதிரொளிப்புக் கதிர்கள் ஒன்றோடொன்று மேற்பொருந்தி அமையும் வாய்ப்பு பெரிதும் தணிக்கப்படுகிறது.



படம் 2.9 சுழல்படிக முறையில் விளிம்பு விளைவு

இனி, இதற்கான கொள்கையை நிறுவுவோம். இதில் பயன்படுத்தப்படும் படிகத்தின் ஒரு படிக அச்சு z அச்சுடன் ஒன்றிணைந்திருப்பதாகக் கொள்வோம். z அச்சில் அடுத்தடுத்துள்ள A,B என்ற இரு அண்டை அணுக்களைக் கருதுவோம். அணித்தள இடைவெளியை d என்போம். விளிம்பு விளைவுப் பெருமத்திற்கான தொடர்பு

$$d(\cos\delta + \cos\phi) = n\lambda$$

சுழல் அச்சு, படுகற்றைக்குச் செங்குத்தாக இருக்கும்போது $\phi=90°$ என்பதால்

$$d\cos\delta = d\sin\mu = n\lambda$$

விளிம்பு விளைவின் வெவ்வேறு வகை நிலைகளுக்கு n இன் மதிப்பு 0,1,2,3,4, . . . என்ற முழு எண் மதிப்புகளை மட்டுமே கொண்டிருக்கும் இது

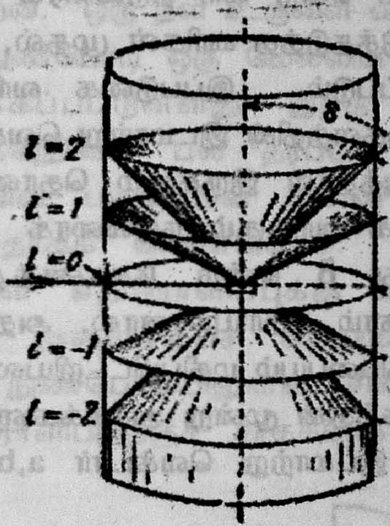
$$\cos\delta_0 = \sin\mu_0 = 0$$

$$\cos\delta_1 = \sin\mu_1 = \lambda/d$$

$$\cos\delta_2 = \sin\mu_2 = 2\lambda/d$$

$$\cos\delta_3 = \sin\mu_3 = 3\lambda/d$$

இச்சமன்பாடுகள், படிகம் சுழல வாய்ப்புள்ள எல்லா விளிம்பு விளைவுக் கதிர்களின் இயங்கு வரையைத் தெரிவிக்கிறது. இந்த இயங்கு வரைகள் படம். 2.10ல் காட்டியபடி, கூம்புத் தொகுதியின் கூறுகளாகும். கூம்பு உச்சியின்



படம். 2.10. உருளைவடிவப் பதிவுத் தாளில் பதிவாகும் கூம்பின் தொடுகை வரிகள்

பாதிக் கோணத்திலிருந்து $\delta_0, \delta_1, \delta_2$ . . . போன்ற மதிப்புகளைப் பெறலாம். கூம்பின் சாய்வுப் பரப்பு, கிடை மட்டத்தளத்தோடு ஏற்படுத்தும் கோணம் μ_1, μ_2, μ_3 ... என வகை நிலையைப் பொறுத்து அமைகிறது.

மையக் கிடைத்தளம், சுழி நிலையின் எல்லா வகையான விளிம்பு விளைவுக் கற்றைகளைக் கொண்டிருக்கும். மையக் கிடைத்தளத்தில் பதிவு செய்ய விளைவுக்கற்றையைத் தரக்கூடிய அணித்தளங்களின் மில்லர் குறியெண் (h k o) ஆகும். இதுபோல (h k l) என்ற மில்லர் குறியெண் கொண்ட அணித்தளத்தால் ஏற்படும் விளிம்பு விளைவுக்கற்றை முதல் வகை நிலைக் கூம்பில் அமைய

$$\mu_1 = \sin^{-1}\lambda/d$$

என்றிருக்கும் எனலாம். n வகை நிலைக் கூம்பில் அமைய

$$\mu_n = \sin^{-1} n\lambda/d$$

என்றிருக்கும் என்று இதைப் பொதுமைப்படுத்திக் கொள்ளலாம்.

படம் 2.10 லிருந்து நீள உருளைப் பதிவுத்தாளில் குறுக்கிடும் கூம்புகள், அதன் அச்சுக்குச் செங்குத்தான தளத்தில் பல வட்டங்களை ஏற்படுத்துவதைப் பார்க்க முடிகிறது. சுருண்டிருக்கும் பதிவுத்தாளை விரிக்கும் போது இவை யாவும் நீண்ட கோடாகக் காட்சியளிக்கும். n=0 என்ற வரி நடுவரைக் கோடு அல்லது சுழி படுகைவரி என்றும் அடுத்தடுத்த வரிகள் முதல், இரண்டாவது படுகை வரிகள் என்றும் கூறப்படும். இப்படுகை வரிகளின் இடைவெளி, கொடுக்கப்பட்ட அணித்தளத்தின் இடமாற்று வெக்டாரைப் பொறுத்தது. படிகத்திலிருந்து பதிவுத்தாள் இருக்கும் தொலைவு தெரியுமானால், ஒரு குறிப்பிட்ட படுகை வரிக்கும் நடுவரைக் கோட்டிற்கும் உள்ள இடைவெளியிலிருந்து δ என்ற கோணத்தின் மதிப்பையும், எக்ஸ்கதிரின் அலைநீளம் தெரியுமானால், அதிலிருந்து அணித்தள இடைவெளி d-இன் மதிப்பையும் மதிப்பிட்டறியலாம். சுழல் படிகத்தின் ஒளிப்படப்பதிவை, படிகத்தின் மூன்று அச்சுக்களுக்கும் தனித்தனியாக எடுத்து, அதிலிருந்து இடமாற்று வெக்டார் a,b,c-இன் மதிப்புகளை அறியலாம்.

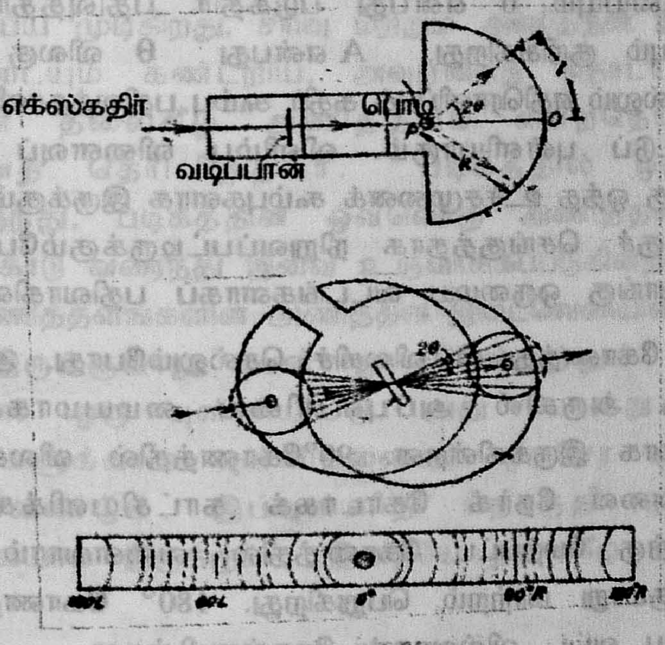
படிகப் பண்புகளை அறியும் இந்த வழிமுறை வெயிசன்பெர்க் (Weissenberg) என்பாரால் முதன்முதலில் அறிவிக்கப்பட்டது. இதில் படிகம் 180°க்கு முன்னும் பின்னுமாகத் தொடர்ந்து சுழலுமாறு செய்யப்பட்டும், ஒளிப்படப் பதிவுக்கருவி சுழல் அச்சுக்கு இணையாக ஒரு மாறாத வேகத்தில் முன்னும் பின்னுமாக இயங்குமாறு செய்யப்பட்டுள்ளது. இதன் இயக்கம், சுழலும் படிகத்தின் ஒரு குறிப்பிட்ட கோண அமைவு நிலைக்கு ஒத்தியங்குமாறு உள்ளது. பதிவுத்தாளில் பதிவாகியுள்ள புள்ளியின் ஆயங்களிலிருந்து எதிரொளிப்புக்கோணம், மற்றும் எதிரொளிப்புத் தளத்தின் அமைவு நிலையையும் அறியலாம். ஒரு படுகைக்குரிய வரிகளின் புள்ளிகளை மட்டும் அனுமதிக்குமாறு இவ்வமைப்பில் ஒரு பிளவு படிகத்திற்கும் பதிவுத்தாளுக்குமிடையில் அமைக்கப் பட்டுள்ளது.

நுண்பொடி முறை (Powder Photograph method):

இந்த வழிமுறை படிகங்களுக்கு மட்டுமன்றி, உலோகங்கள், கலப்பு உலோகங்கள் சேர்மங்களுக்கும் பயன் தருகிறது. ஒரு படிகத்தை ஒரு குறிப்பிட்ட அளவு முழுமையான படிகமாக உருவாக்க முடியாத நிலையிலும் இது பயன்படுகிறது. இவ்வழிமுறையை டிபை

மற்றும் ஸ்ரெரர் (Debye, Scherrer) ஆகியோர் முதன்முதலாகக் கண்டறிந்தனர்.

இவ்வழிமுறையில் ஒற்றைநிற எக்ஸ்கதிர்களும், ஒற்றைப் படிகத்திற்குப் பதிலாக, சிறுசிறு படிகங்களாலான நுண்பொடியும் பயன்படுத்தப்படுகின்றன. ஒரு நீள் உருளை வடிவப்பதிவுப் பெட்டியின் மையத்தில் இந்த நுண்பொடி ஒரு மெல்லிய கண்ணாடிக் குழாயில் நிரப்பப்பட்டு வைக்கப்பட்டுள்ளது. இந்த நுண் பொடியிலுள்ள படிகங்களின் அமைவுநிலை பல தரப்பட்டவைகளாக இருக்கும் என்பதால் அமைப்பில் படிகத்தின் எல்லா வகையான அமைவு நிலைகளும் இருப்பதாகக் கொள்ளலாம். அதனால் வெவ்வேறு அமைவு நிலைகளை எதிரொளிப்புக்கு உள்ளாக்க வேண்டிப் படுகதிருக்கு ஏற்ப அமைப்பைச் சுழலுமாறு செய்யவேண்டிய அவசியமில்லை. நுண்பொடியிலுள்ள சில நுண் படிகங்களின் அமைவுநிலை எதிரொளிப்பிற்குச் சாதகமாக அமைகின்றன.



படம் 2.11 எக்ஸ்கதிர் நுண்பொடி முறை

நுண் படிகங்களிலிருந்து வெளிப்படும் விளிம்பு விளைவுக் கதிர்கள் பிராக்கின் சமன்பாட்டிற்கு உட்பட்டவாறு θ கோண விலக்கத்தில் உள்ள தளத்தில் அமைந்திருக்கின்றன. இத்தளத்திற்கு வரையப்படும் செங்குத்துக்கோடு, படுகதிருடன் (90-) என்ற

கோணத்தை ஏற்படுத்தும். பொடியில் எல்லா வகையான அமைவு நிலைகளிலும் நுண்படிகங்கள் சராசரியாகச் சமஅளவில் இருப்பதால் எதிரொளிப்புக்கதிர்கள் ஒரு கூம்பின் வடிவில் விலகிச் செல்லும். இதன் பாதி உச்சிக்கோணம் 2θ ஆக இருக்கும். ஒவ்வொரு அணித்தளச் தொகுதிக்கும் ஏற்ப இவ்வாறு எதிரொளிப்புக் கதிர் கூம்புகள் ஏற்படுவதால், பதிவுத்தாளில் இவற்றின் குறுக்கீடு வரிகளை ஏற்படுத்தும். இவை படுகதிர் விழும் மையப்புள்ளியை மையமாகக் கொண்ட விட்டமுனை வட்டப்பகுதிகளாக இருக்கும். நீள் உருளைப் பதிவுப்பெட்டியின் ஆரத்திலிருந்து, விலகுகோணம் θன் மதிப்பைக் கண்டறியமுடியும். அதைக்கொண்டு அணித்தள இடைவெளியைக் மதிப்பிட்டறியலாம்.

தகுந்த வடிப்பான்களைப் பயன்படுத்தி எக்ஸ்கதிரை ஒற்றை நிறங்கொண்டதாகச் செய்யலாம். படம். 2.11இல் P என்பது நீள உருளைப் பதிவுப் பெட்டியின் மையத்தில் வைக்கப்பட்டுள்ள நுண்பொடியையும் 0 என்பது படுகதிர் பதிவுத்தாளில் விழும் புள்ளியையும் குறிக்கிறது. A என்பது θ விலகு கோணத்தில் விலகிச்செல்லும் எதிரொளிப்புக் கதிர் கூம்பு பதிவுத்தாளில் குறுக்கிடும் ஒரு வெட்டுப் புள்ளியாகும். விளிம்பு விளைவுப் பெருமங்கள் படுகதிருக்கு ஒத்த உச்சமுனைக் கூம்புகளாக இருக்கும். பதிவுத்தாள் படுகதிருக்குச் செங்குத்தாக நிறுவப்பட்டிருக்கும்போது விளிம்பு விளைவுப்பாங்கு ஒருமைய வட்டங்களாகப் பதிவாகின்றன.

சிறிய கோணத்துடன் விலகிச் செல்லும்போது, அவை மையப் புள்ளிக்கு அருகில் அப்புள்ளியை மையமாகக் கொண்ட வட்டவில்லாக இருக்கின்றன. 90°கோணத்தில் விலகிச் செல்லும் போது, அவை நேர்க் கோடாகக் காட்சியளிக்கின்றன. 90° கோணத்திற்கு மேற்பட்ட கோணத்தில், வளைவாரம் எதிர்மையம் பெற்றிருக்குமாறு மாற்றம் பெறுகிறது. 180° கோணத்தில் அவை ஏறக்குறைய வட்ட வில்லாகத் தோன்றுகின்றன.

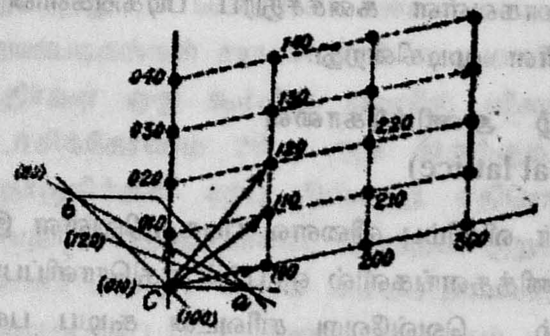
பதிவுத்தாளில் 0 விற்கும் A க்கும் இடைப்பட்ட தொலைவு l எனில், விலகு கோணம் $\theta = l/2R$ ஆகும். R என்பது நீள் உருளை வடிவப் பதிவுப் பெட்டியின் ஆரமாகும். வெவ்வேறு பதிவு வரிகளின் l மதிப்பை அறிந்து அதற்குரிய θன் மதிப்பைக் கணக்கிட்டறியலாம். இந்த வழிமுறைமூலம் a, b, c என்ற இடமாற்று

வெக்டார் சமமாகவுள்ள கனச்சதுரப் படிகங்களின் கட்டமைப்பை அறிந்து கொள்ள முடிகின்றது.

2.5. தலைகீழ் அணிக்கோவை (reciprocal lattice)

எக்ஸ் கதிர் விளிம்பு விளைவு படிகத்திலுள்ள இணையான ஒரு தொகுப்பு அணித்தளங்களில் ஏற்படும் எதிரொளிப்பால் ஏற்படுகிறது என அறிவோம். வெவ்வேறு சரிவுடன் கூடிய பல அணித்தளத் தொகுப்புகளை ஒரே நேரத்தில் கருதும்போது அவற்றின் விளைவுகளைத் தனித்து இனமறிவது சிக்கலாக இருக்கலாம். தளங்களின் சரிவு, அவற்றின் வடிவியலால் தீர்மானிக்கப்படுகிறது. இது தளத்தின் செங்குத்துக் கோட்டாலும் தீர்மானிக்கப்படுகிறது என்பதால், அதன் மூலம் நமக்கோர் அனுகூலம் கிடைக்கிறது. செங்குத்துக் கோட்டின் பரிமாணம், தளத்தை விட ஒன்று குறைவாக உள்ளது. இதனால் ஓர் அணித்தளத்தின் சரிவை ஓரளவு எளிதாகக் கற்பனை செய்ய முடிகிறது. சரிவு மற்றும் அணித்தள இடைவெளி இவையிரண்டையும் கண்டறிய, அவற்றைத் தொடர்புபடுத்திப் படிகவியலார் தலைகீழ் அணித்தளம் என்றதொரு புதிய கருத்துருவைத் தெரிவித்தனர். படிகத்தில் ஒரு பொது மையத்திலிருந்து, படிகத்தின் ஒவ்வொரு அணித்தளத்திற்கும் செங்குத்துக்கோடு வரைந்து இவை உருவாக்கப்படுகின்றன. இதன் நீளம், அவ்வணித்தளங்களின் அணித்தள இடைவெளியின் தலைகீழ் மதிப்பாக இருக்குமாறு உள்ளது. செங்குத்துக் கோட்டின் மறுமுனையில் ஒரு புள்ளியிட்டு, அது போன்று பல்வேறு அணித்தளங்களுக்கான புள்ளிகளையும் ஒருசேர அமைத்துக் கொள்ள வேண்டும். இப்புள்ளித் தொகுதி ஒரு புதிய அணிக்கோவையாக இருக்கும். இதையே தலைகீழ் அணித்தளம் என்பர்.

வரைபடக்காட்சி மூலம் படிகத்திற்கான தலைகீழ் அணித்தளத்தை எங்ஙனம் கட்டமைப்பது எனப் பார்ப்போம்.

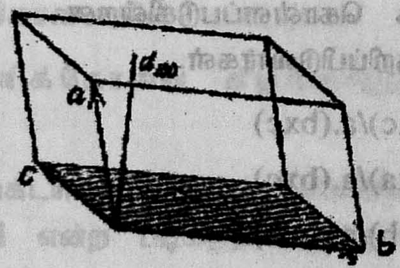


படம் 2.12 தலைகீழ் அணித்தளங்களின் உருவாக்கம்.

எளிமைக்காக நாம் ஒரு குறிப்பிட்ட பகுதிக்குட்பட்ட எல்லாத் தளங்களை மட்டும் எடுத்துக் கொள்வோம். நாம் கருதும் எந்தத் தொகுப்புத் தளமும் ஒரு பொதுவான கோட்டிற்கு இணையாக இருக்கின்றன. இதைத் தொகுதிக்கொடு என்றும் இத்தளங்களுக்கான செங்குத்து இதே தளங்களில் அமைகிறது என்றும், அது தொகுதி ஆய அச்சுக்குச் செங்குத்தாக இருக்கிறது என்றும் கூறலாம். இவ்வாறு படிக அணித்தளங்களை இரு பரிமாண வெளியில் தலைகீழ் அணிக்கோவையாகக் காட்டலாம். இது படம் 2.12இல் ஒரு திசைச் சரிவுள்ள படிகத்தைக் கொண்டு காட்டப்பட்டுள்ளது. ஓரலகு படிகத்தின் பரிமாணம் (a,b,c)யாகும். (100), (110), (120), (010), போன்ற சில படிக அணித் தளங்கள் எடுத்துக் காட்டுகளாகக் காட்டப்பட்டுள்ளன.

தலைகீழ் அணிக்கோவைக்கான வெக்டார் கணக்கீடு

ஒரு பொது மையத்திலிருந்து ஒவ்வொரு தளத்திற்கும் செங்குத்து வரைய முடியுமாறும், அதில் மையத்திலிருந்து $1/d_{hkl}$ என்ற தொலைவில் ஒரு புள்ளி அமையுமாறும் இருக்கும் ஒரு புள்ளித் தொகுதி உண்மையில் ஒரு அணிக் கோவையாகும். இதை நாம் நிறுவுவதுடன் அதன் மூலம் தலைகீழ் அணிக்கோவையை அல்ஜீப்ராபடி அறியும் முறைக்கான ஒரு சூத்திரமும் பெற முடியும். இதற்கு நாம் முதலில் ஒரு தளத்தின் செங்குத்துக் கோட்டிற்கும், படிக அச்சுக்களான a,b,cக்கும் இடையிலான ஒரு தொடர்பை உருவாக்கிக் கொள்ள வேண்டும். இதை நாம் ஓரலகு செல்லைக் கொண்டு செய்யமுடியும். இதன் பக்க நீளங்கள் முறையே a,b,c என்றும் பருமன் v என்றும் கொள்வோம். பருமன் v என்பது (100)என்ற மில்லர் எண் கொண்ட அடித்தளப்பரப்பு மற்றும் குத்துயரம் d_{100}இவற்றின் பெருக்கல் பலனாகும்.



படம் 2.13 படிகத்தில் a,b,cக்கும், தளக்குத்துக் கோட்டிற்கும் உள்ள தொடர்பு.

எனவே $v =$ பரப்பு $x\ d_{100}$

அல்லது $1/d_{100}$ = பரப்பு/v

ஒரு தளத்தின் பரப்பு என்பது அதன் பக்க நீளங்களின் வெக்டார் பெருக்கல் என்பதாலும் பருமன் என்பது இப்பரப்பிற்கும் உயரத்தின் வெக்டாருக்குமான ஸ்கேலார் பெருக்கல் என்பதாலும் அணித்தள இடைவெளியின் தலைகீழ் மதிப்பை

$$n/d_{100} = (bxc)/a.(bxc) \qquad (2.10)$$

இதில் n என்பது தளத்திற்குச் செங்குத்துத் திசையில் ஓரலகு வெக்டாராகும். மேலும்,

$$\sigma_{hkl} = n/d_{hkl}$$

என்றும் கொள்வோம். இதனால்

$$\sigma_{100} = n/d_{100}$$

என்றும் குறிப்பிடலாம். இதை (2.10)ல் பதிலீடு செய்ய

$$\sigma_{100} = (bxc)/a.(bxc)$$

இதைப்போல σ_{010} மற்றும் σ_{001} க்குரிய தொடர்புகளையும் வருவிக்க முடியும்.

$$\sigma_{010} = (cxa)/a.(bxc)$$
$$\sigma_{001} = (axb)/a.(bxc) \qquad (2.11)$$

இந்த மூன்று வெக்டார்களும், முப்பரிமாண தலைகீழ் அணிக்கோவையை வரையறுக்கக்கூடிய தலைகீழ் இடமாற்று

வெக்டார்கள் எனக் கொள்ளப்படுகின்றன. இவற்றை முறையே a*, b*, c* என்று குறிப்பிடுவார்கள்.

$$a^* = \sigma_{100} = (bxc)/a.(bxc)$$

$$b^* = \sigma_{010} = (cxa)/a.(bxc)$$

$$c^* = \sigma_{001} = (axb)/a.(bxc)$$

தலைகீழ் இடமாற்று வெக்டார்கள், படிகத்தின் இடமாற்று வெக்டாரோடு ஓர் எளிய தொடர்பைக் கொண்டுள்ளன. இதன்படி a*, b*, c* என்ற வெக்டார்கள் முறையே bக்கும் cக்கும், cக்கும் aக்கும், aக்கும் bக்கும் செங்குத்தாக உள்ளன. இதை வெக்டார் பண்புடன் இணைக்க, நாம் கீழ்க்காணும் நிபந்தனைகளைப் பெறலாம்.

$$a^* .b = a^*.c = 0$$

$$b^* .c = b^*.a = 0$$

$$c^* .a = c^*.b = 0 \qquad (2.11)$$

மேலும்

$$a^*.a = a.\ bxc/a.bxc=1$$

$$b^*.b = b.\ cxa/a.bxc=a.bxc/a.bxc=1$$

$$c^*.c = c.\ axb/a.bxc=a.bxc/a.bxc=1 \qquad (2.12)$$

தலைகீழ் இடமாற்று வெக்டார்களைப் பயன்படுத்தி, அணிக்கோவையை ஏற்படுத்திக் கொள்ளமுடியும். a* அமைந்துள்ள திசையில் அடுத்தடுத்த புள்ளிகள் d_{100} தொலைவின் k மடங்கிலும், b*அமைந்துள்ள திசையில் d_{010} தொலைவின் h மடங்கிலும், c* அமைந்துள்ள திசையில் d_{001}தொலைவின் l மடங்கிலும் இருக்கும்.

$$a^* = \sigma_{100} = (1/d_{100})\ n$$

$$2a^* = 2\sigma_{100} = (2/d_{100})n = \sigma_{200} = 1/d_{200}\ n$$

$$3a^* = 3\sigma_{100} = (3/d_{100})n = \sigma_{300} = 1/d_{300}\ n$$

தலைகீழ் அணித்தொலையில் hkl என்ற புள்ளி h அலகு a* திசையிலும் k அலகு b* திசையிலும், l அலகு c* திசையிலும் பெற்றிருக்கும் என்பதால்

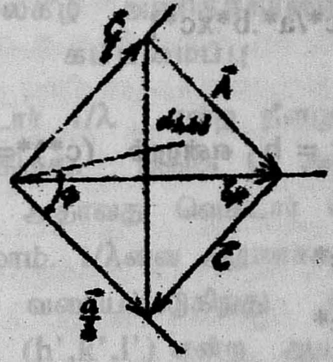
$$\sigma_{hkl} = ha^* + kb^* + lc^* \qquad (2.13)$$

தலைகீழ் அணிக்கோவையின் பண்புகள்

தலைகீழ் அணிக்கோவை கீழ்க்காணும் பண்புகளைப் பெற்றிருக்கும்.

1.σ_{hkl} என்ற வெக்டரின் முனைப்புள்ளிகளின் தொகுப்பு, σ_{hkl} என்ற வெக்டார் hkl என்ற படிகத்தளத்திற்குச் செங்குத்தாகவும், அதன் நீளம் $1/d_{hkl}$ க்குச் சமமாகவும் இருக்குமாறு நிபந்தனைக்குட்பட்டுள்ளன.

இதை நாம் வெக்டார் அல்ஜீப்ரா மூலம் நிறுவலாம்.



படம் 2.14

2. தலைகீழ் அணிக்கோவையின் ஓரலகு செல்லின் பருமன், படிக அணித்தளத்தின் ஓரலகு செல்லின் பருமனுக்கு எதிர் விகிதத்தில் இருக்கிறது.

படிக அணித்தளத்தின் ஓரலகு செல்லின் பருமன் a.(bxc) தலைகீழ் அணிக்கோவையின் ஓரலகு செல்லின் பருமன் = a*.(b*xc*)

a*.(b*xc*)ல்; a*, b*,c* ன் மதிப்புகளைப் பதிலீடு செய்ய

$$a^*.b^*xc^* = [(bxc)/a.(bxc)].\ [(cxa)/a.(bxc)]\ x\ [(axb)/a.(bxc)]$$

$$= 1/(a.bxc)^3\ [(bxc).(cxa)x(axb)]$$

$$= 1/(a.bxc)^3\ [(bxc).\ [\{c.(axb)\}a-\{a.(axb)\}c]$$

$$= [a.(bxc)][c.(axb)]/(a.bxc)^3$$

$$= 1/(a.bxc)$$

3. தலைகீழ் அணிக்கோவையின் தலைகீழ் மதிப்புகள் படிக அணித்தளத்தைக் குறிப்பிடுகின்றன.

$$a^* = b \times c / a.b \times c$$

என அறிவோம். a*ன் தலைகீழ் மதிப்பு

$$(a^*)^* = b^* \times b^* / a^*.b^* \times c^*$$

$a.a^* = 1$ என்பதால் இதை $a.a^*$ உடன் பெருக்க மதிப்பு மாறுவதில்லை.

$$(a^*)^* = a.a^* [b^* \times c^*/a^*.b^* \times c^*]$$

$$= a [a^*.b^* \times c^*/a^*.b^* \times c^*]$$

$$= a$$

இதைப்போல $(b^*)^* = b$ என்றும் $(c^*)^* = c$ என்றும் நிறுவலாம். எனவே

$$a = b^* \times c^*/a^*.b^* \times c^*$$

$$b = c^* \times a^*/a^*.b^* \times c^*$$

$$c = a^* \times b^*/a^*.b^* \times c^*$$

தலைகீழ் அணிக்கோவையின் அடிப்படையில் பிராக் நிபந்தனை

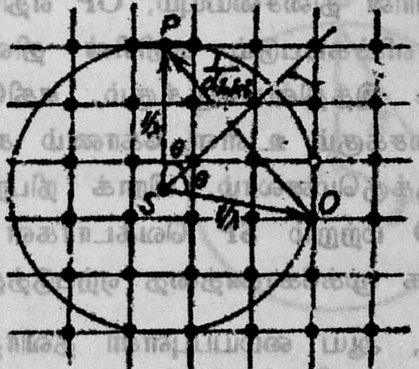
பிராக் நிபந்தனையை நாம் தலைகீழ் அணிக்கோவையின் கண்ணோட்டத்துடன் அணுகலாம். படிக அணித்தளத்தின் அடிப்படையில்

$$\sin \theta_{hkl} = n\lambda/2d_{hkl}$$

இதை நாம்

$$\sin\theta_{hkl} = n(1/d_{hkl}) / 2/\lambda$$

எனக் குறிப்பிடலாம். வடிவியல் அடிப்படையில் இதற்கான விளக்கம் பின்வருமாறு:-



படம் 2.15 தலைகீழ் அணிக்கோவையில் எவால்டு கட்டமைப்பு

SO என்ற வெக்டார் $1/\lambda$ என்ற நீளமுள்ளவாறு படுகதிரின் திசையில் வரையப்படுகிறது. இங்கு O அணித்தள மையமாகக் கொள்ளப்பட்டுள்ளது. அதாவது வெக்டார் O என்ற புள்ளியோடு முடிவடைகின்றது எனலாம். $1/\lambda$வை ஆரமாகவும் Sஐ மையமாகவும் கொண்டு ஒரு கோளம் வரையப்படுகிறது. இக்கோளம் தலைகீழ் அணிக் கோவையில் (h',k',l') என்ற ஆயங்கொண்ட P என்ற புள்ளியில் குறுக்கீடுவதாகக் கொள்வோம். OP என்ற வெக்டார் தலைகீழ் அணிக்கோவையின் ஆய மையத்தையும் (h',k',l') என்ற புள்ளியையும் இணைக்கிறது. இந்த வெக்டார் படிக அணித்தளத்திலுள்ள (h,k,l) தளத்திற்குச் செங்குத்தாக உள்ளது எனலாம். எனவே இதன் நீளம் $1/d_{hkl}$ என்று தீர்மானிக்கலாம். SE என்பது இத்தளமெனில் $\angle ESO = \theta$ என்ற பிராக் கோணமாகும். மேலும் OPன் நீளம் n/dக்குச் சமமாக இருக்கும். இதில் n என்பது பெருமக்காரணியாக உள்ளது.

படம் 2.15 லிருந்து $OP = 2\sin\theta/\lambda = n/d_{hkl}$

$$\text{இது } 2d \sin\theta = n\lambda$$

என்ற பிராக்கின் நிபந்தனையை நிறுவுகிறது. இதிலிருந்து $1/\lambda$ என்ற ஆரத்துடன் ஒரு கோளம் வரைய, அதன் பரப்பு தலைகீழ் அணிக்கோவையை வெட்டும் புள்ளிகள் பிராக் நிபந்தனைக்கு உட்பட்டு எதிரொளிக்கின்றன எனலாம். படத்தில் SP என்பது எதிரொளிப்புக் கதிரின் திசையைக் குறிக்கும்.

படம் 2.15ல் SO படுகதிரின் திசையையும், OP எதிரொளிப்புத் தளத்தையும், AB எதிரொளிக்கப்படும் கதிரின் திசையையும் குறிப்பிடுகின்றன என்பதால் இத்திசைகளுக்கும், எதிரொளிப்புத் தளத்தின் செங்குத்துத் திசைக்கும் உள்ள கோணம் சமமாகவும், பிராக் கோணமாகவும் இருக்குமெனலாம். பிராக் நிபந்தனைக்கு உட்பட்டிருக்கும்போது SO மற்றும் SP வெக்டார்கள் வெக்டார் OP யுடன் ஓர் இரு சமபக்க முக்கோணத்தை ஏற்படுத்துகிறது.

வரையப்படும் கோளம், ஆய மையப்புள்ளி தவிர்த்து வேறு எந்தப்புள்ளியுடனும் குறுக்கிடவில்லையெனில், கொடுக்கப்பட்ட அலைநீளமுள்ள எக்ஸ்கதிர் படிகத்தின் அணித்தளத்தின் அத்திசையமைவில் விளிம்பு விளைவிற்கு உள்ளாவதில்லை எனலாம். திசையமைவைத் திருத்தியமைக்க விளிம்பு விளைவு உண்டாகிறது. எவால்டு கட்டமைப்பு மூலம் பிராக் நிபந்தனைக்கு இணக்கமாகப் படிகத்தைப் பயன்படுத்தும் பல்வேறு வழிமுறைகளைப் பற்றித் தெரிந்து கொள்ள முடிகிறது. இக்கட்டமைப்பு, எக்ஸ்கதிரின் அலைநீளம் 2a ஐ விடக் கூடுதலாக இருக்கும்போது விளிம்பு விளைவு ஏற்படாது என்பதையும் தெரிவிக்கின்றது. $\lambda > 2a$ எனில் $SO < 1/2a$ அதாவது சிறிய அளவிலான கோளம் எந்த அணிக்கோவைப் புள்ளி வழியாகச் செல்வதில்லை. λன் மதிப்பு குறைய SO ன் மதிப்பு அதிகரிக்கும், அப்போது வரையப்படும் பெரிய கோளம், ஏதாவதொரு அணிக்கோவைப்புள்ளியைக் குறுக்கிடுவதற்கான வாய்ப்பு அதிகம் என்பதால் விளிம்பு விளைவு ஏற்படும் வாய்ப்பு அதிகம் எனலாம்.

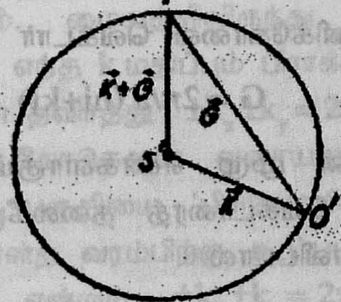
தலைகீழ் அணிக்கோவையில் பிராக் சமன்பாட்டை மிக நேர்த்தியாக நிறுவலாம். SO, SP மற்றும் PO வெக்டார்களை 2πஆல் பெருக்கி, அதற்கு வேறு குறியீடு வழங்கலாம். விளிம்பு விளைவிற்கு |SP|ன் மதிப்பும் |SO|ன் மதிப்பும் சமமாக இருக்க வேண்டும். எனவே பிராக் நிபந்தனைப்படி

$$(k+G)^2 = k^2$$

$$(k+G) . (k+G) = k^2$$

$$k^2 + 2k.G + G^2 = k^2$$

அல்லது $2k.G + G^2 = 0$ (2.14)



படம் 2.16 பிராக் - சிதறல்

இதை, பிராக் சமன்பாட்டின் வெக்டார் வடிவம் என்பர். இதில் G என்பது தலைகீழ் அணிக்கோவை வெக்டாரின் 2π மடங்காகும். K என்பது படுகதிரின் திசையில் அலை வெக்டாராகும்.

சிதரொளியின் அலை வெக்டாரை k' என்றால்

$$k' = k+G$$

எனவே $k'^2 = k^2$

$$k' - k = G \qquad (2.15)$$

இது, சிதறலினால் kன் திசை மட்டும் மாற்றம் பெறுவதைக் காட்டுகிறது. அதாவது சிதரொளியின் அலை வெக்டார், படுகதிரின் அலை வெக்டாரிலிருந்து, தலைகீழ் அணிக்கோவை வெக்டாரினால் வேறுபட்டிருக்கிறது. எனவே இதை மீட்சிச்சிதறல் எனலாம்.

2.6. பிரிலோயின் மண்டலம்

எவால்டு கட்டமைப்பு மூலம் பிராக் எதிரொளிப்பிற்கான நிபந்தனையின் இயற்பியல் முக்கியத்துவத்தை உணர்ந்து கொண்டோம். பிராக் எதிரொளிப்பிற்கு உள்ளாகும் எல்லா மதிப்புகளின் வரைதளம் தலைகீழ் அணிக்கோவையில் கட்டமைப்போம். எளிமைக்காக நாம் இங்கு எளிய கனச்சதுரப் படிகத்தைக் கருதுவோம். அதன் இடமாற்று வெக்டார்களை a = ai என்றும் b = aj என்றும் கொள்வோம். இதில் a என்பது ஓரலகுச் செல்லின் பக்க நீளமாகும். தலைகீழ் அணிக்கோவையில் இதற்கு ஈடான இடமாற்று வெக்டார்கள் முறையே

$$a^* = (1/a)i; \; b^* = (1/a)j$$

எனவே தலைகீழ் அணிக்கோவை வெக்டார் G

$$G = 2\pi/a\,(hi+kj)$$

இதில் h,k என்பன முழு எண்களாகும். பயன்படுத்தப்படும் எக்ஸ்கதிரின் அலை வெக்டாரைத் தலைகீழ் அணிக்கோவையின் மையத்திலிருந்து அளவிட்டால்

$$k = ik_x + jk_y$$

எனக் குறிப்பிடலாம்.

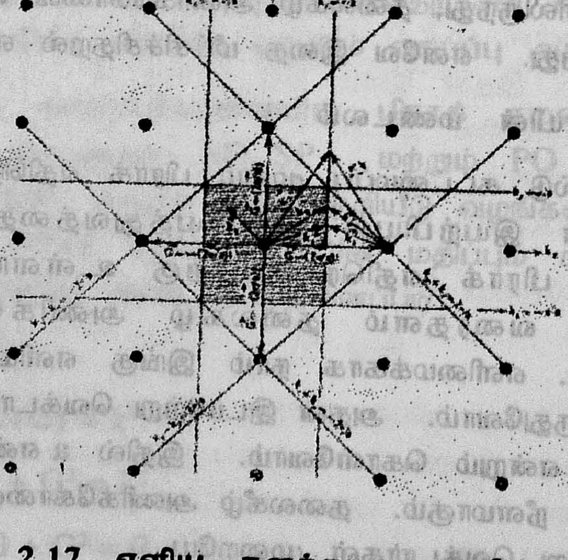
பிராக் நிபந்தனைப்படி

$$2k.G + G^2 = 0$$

$$2(k_xG_x + k_yG_y) + G_x^2 + G_y^2 = 0$$

$$hk_x + kk_y = -\pi/a\,(h^2+k^2)$$

h, kக்கு அனுமதிக்கப்படும் எல்லா மதிப்புகளையும் எடுத்துக்கொண்டு, பிராக் எதிரொளிப்பைத் தரக்கூடிய k மதிப்புகளைப் பெறலாம். $h = \pm1, k=0$ எனில் $k_x = \pm\pi/a$; k_y = ஏதாவதொரு மதிப்பு $h=0, k=\pm1$ எனில் $k_y = \pm\pi/a$; k_x = ஏதாவதொரு மதிப்பு என வரையறுக்கலாம்.



படம். 2.17 எளிய கனச்சதுர அணித்தளத்தில் பிரிலோயின் மண்டலம்

$k_x = \pm \pi/a$ மற்றும் $k_y = \pm \pi/a$ இவற்றுக்கான நான்கு கோடுகளை k வெளியில் வரைவோம். மையத்திலிருந்து தொடங்கி இக்கோடு ஒன்றுடன் முடிவடையும் எந்த k மதிப்பும் பிராக்கின் எதிரொளிப்பைத் தருகிறது. இக்கோடுகள் தவிர்த்து $\pm k_x \pm k_y = 2\pi/a$ என்ற தொடர்புக்கு ஏற்ப மேலும் நான்கு கோடுகளை வரையலாம். இந்த எட்டுக் கோடுகளுக்கு உட்பட்ட பகுதியை, 'பிரிலோயின் மண்டலம்' என்பர். $k_x = \pm \pi/a$; $k_y = \pm \pi/a$ என்ற வரம்பிற்கு உட்பட்ட பகுதியை 'முதல் பிரிலோயின் மண்டலம்' என்றும் $\pm k_x \pm k_y = 2\pi/a$ என்ற தொடர்பால் ஏற்படும் கூடுதல் பரப்பு 'இரண்டாவது பிரிலோயின் மண்டலம்' என்றும் கூறுவர். பிரிலோயின் மண்டலத்தின் எல்லை, பிராக் எதிரொளிப்பைத் தரும் k மதிப்புகளின் வரைதளமாக விளங்குகிறது. அதாவது அவற்றை எதிரொளிப்புத் தளமாகக் கருதலாம். அதாவது முதல் மண்டலத்தின் எல்லைகள், முதல் வகை நிலை எதிரொளிப்பிற்கான எதிரொளிப்புத் தளமாகவும், இரண்டாவது மண்டலத்தின் எல்லைகள், இரண்டாம் வகைநிலை எதிரொளிப்பிற்கான எதிரொளிப்புத் தளமாகவும் உள்ளன எனலாம். பிரிலோயின் மண்டலப் பகுதிக்குள் உள்ள எந்த k வெக்டாரும் பிராக் எதிரொளிப்பைத் தருவதில்லை என்ற உண்மையை இது தெரிவிக்கிறது. எண் மதிப்பு π/a ஐ விட அதிகமாக இருக்கும். (அலை நீளம் 2a ஐ விடக் குறைவாக இருக்கும்) k வெக்டார் எதிரொளிக்கப்படுவதில்லை என்று இதற்குப் பொருள் கொள்ள முடியாது. இந்த வெக்டார்கள் மண்டலத்தின் எல்லையோடு முடிவடைந்திருந்தால் எதிரொளிக்கப்படும். இல்லையென்றால் இல்லை என்று கூறலாம்.

முகமையக் கனச்சதுர அணித்தளத்தில் பிரிலோயின் மண்டலம்

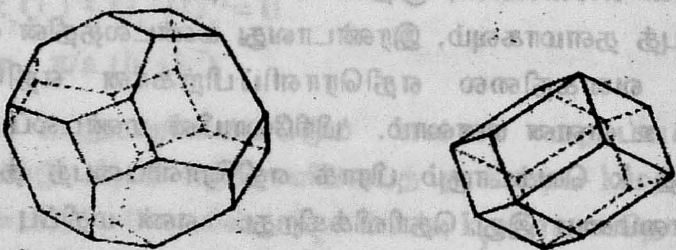
முகமையக் கனச்சதுர அணித்தளத்திற்கான இடமாற்று வெக்டார்கள் $a = (a/2)(i+j)$; $b = (a/2)(j+k)$ $c=(a/2)(k+i)$ என அறிவோம். தலைகீழ் அணிக்கோவையில் இவைகளுக்கு ஈடான இடமாற்று வெக்டார்கள் முறையே $a^* = (1/a)(i+j-k)$; $b^*=(1/a)(-i+j+k)$; $c^*=(1/a)(i-j+k)$ இவற்றை நோக்கும் போது இவை உடல் மையக் கனச்சதுர அணித்தளத்தின் இடமாற்று வெக்டாராக இருப்பது தெரியவரும். இதனால் உடல்மையக் கனச்சதுர அணித்தளத்தை முகமைய அணித்தளத்தின் தலைகீழ் அணிக்கோவை எனலாம்.

(h,k,l)என்பன முழு எண்களெனில் G வெக்டாரை

$$G = 2\pi(a^*h+b^*k+c^*l)$$

$$= (2\pi/a)\,[(h-k+l)i+(h+k-l)j+(-h+k+l)k] \quad (2.16)$$

மிகச்சிறிய சுழியற்ற மதிப்புக் கொண்ட G கீழ்கண்ட எட்டு வெக்டார்களாகும். அவற்றை $(2\pi/a)\,(\pm i \pm j \pm k)$ என்று குறிப்பிடலாம். இந்த வெக்டாரின் மையப்புள்ளிக்குச் செங்குத்தாக உள்ள எட்டுத் தளங்களினால் முதல் பிரிலோயின் மண்டலத்தின் எல்லை தீர்மானிக்கப்படுகிறது. ஆனால் இந்த எண்முகியின் மூலைகள் $(2\pi/a\pm 2i)$; $(2\pi/a\pm 2j)(2\pi/a\pm 2k)$ என்ற தலைகீழ் அணிக்கோவை வெக்டார்களை இருசமக் கூறாக்கும் செங்குத்துத் தளத்தால் மூலைகள் முறிக்கப்பட்டுள்ளன.



படம் 2.18 முக மையக் கனச் சதுர அணித்தளத்தில் பிரிலோயின் மண்டலம்

உடல் மையக் கனச்சதுர அணித்தளத்தில் பிரிலோயின் மண்டலம்

இதன் இடமாற்று வெக்டார் முறையே $a=(a/2)(i+j-k)$; $b=(a/2)(-i+j+k)$; $c=(a/2)(i-j+k)$ என அறிவோம். எனவே தலைகீழ் அணிக்கோவையில் இதற்கீடான இடமாற்று வெக்டார்கள் $a^*=(1/a)(i+j)$; $b^*=(1/a)(j+k)$ $c^*=(1/a)(k+i)$ எனலாம். ஆயினும் இவையாவும் முகமையக் கனச்சதுர அணித்தளத்தின் இடமாற்று வெக்டாராகும். அதனால் fcc அணித்தளத்தை bcc அணித்தளத்தின் தலைகீழ் அணிக்கோவை என்பர்.

இதற்குரிய G வெக்டார்

$$G = 2\pi\,(ha^*+kb^*+lc^*)$$

$$= 2\pi/a\,[(h+l)i+(h+k)j+(k+l)k]$$

Gன் மிகச்சிறிய சுழியற்ற மதிப்புகள் கீழ்கண்ட 12 வெக்டார்களாகும்.

$$2\pi/a\ (\pm i \pm j);\ 2\pi/a\ (\pm j \pm k);\ 2\pi/a\ (\pm k \pm i) \qquad (2.17)$$

இந்த வெக்டார்களின் மையப்புள்ளியின் செங்குத்துத் தளங்களினால் முதல் மண்டலத்தின் எல்லை தீர்மானிக்கப்படுகிறது. இது பனிரெண்டு முகங்கொண்ட உருவமாக இருக்கிறது.

2.7. அணுவியல் சிதறல் காரணி(Atomic Scattering factor)

பிராக் மற்றும் லவே சமன்பாடுகள், சிதறல் மையத்திலிருந்து ஏற்படும் விளிம்பு விளைவிற்கான நிபந்தனைகளைச் சுட்டிக்காட்டுகின்றன. ஆனால் விளிம்பு விளைவினால் விளைவிக்கப்படும் ஒளியின் செறிவைப் பற்றி அறியவேண்டுமானால், இச்சிதறல் அணுக்கருவைச் சுற்றி மேகம் போலப் படர்ந்துள்ள எலக்ட்ரான்களால் உண்டாக்கப்படுவதாகக் கொள்ள வேண்டும். அணுக்கரு, எக்ஸ்கதிருடன் மிகவும் வலுவற்ற முறையில் இடைவினை புரிவதால், எலக்ட்ரான்களோடு ஒப்பிட, அணுக்கருவின் தாக்கத்தைப் புறக்கணிக்கலாம். எனவே ஓரணுவால் ஏற்படும் சிதறல் என்பது, அதிலுள்ள எலக்ட்ரான்களின் எண்ணிக்கைக்கும், ஓர் எலக்டரானால் ஏற்படும் சிதறலுக்கும் உள்ள பெருக்கல் பலனாகும் என்று எதிர்பார்க்கலாம். ஆனால் உண்மை நிலை அப்படியில்லை. அணுவின் பரிமாணம் எக்ஸ்கதிரின் அலைநீள நெடுக்கையில் இருப்பதால், அணுவின் எல்லாப்பகுதிகளும் சிதறலை ஒரே அலைக்கட்டத்தில் விளைவிப்பதில்லை. சிதரொளியின் அலைவீச்சு, தனி எலக்ட்ரானின் சிதரொளியைப் போல Z மடங்காக இல்லாது அதைவிடக்குறைவாக F மடங்கே இருக்கும் எனலாம். F என்பது அணுவின் சிதரொளியின் அலைவீச்சுக்கும், தனி எலக்ட்ரானின் சிதரொளியின் அலைவீச்சுக்கும் உள்ள தகவாகும். இதையே அணுவியல் சிதறல் காரணி என்று கூறுகின்றனர். இதன் மதிப்பு ஓரணு, விழும் கதிர்களை எவ்வளவு பயனுறு திறனுடன் சிதறடிக்கிறது என்பதை மதிப்படுவதாக இருக்கின்றது.

அணுவின் மையத்திலிருந்து r என்ற தொலைவில் dv என்ற நுண்ணளவுப் பருமனில் பரவியுள்ள $\rho(r)dv$ என்ற ஒரு கூறு மின்னூட்டத்தினால் ஏற்படும் சிதரொளியின் அலைவீச்சுக்கும், அதே அமைவிடத்தில் மின்னூட்டம் புள்ளி வடிவ எலக்ட்ரானாக இருந்தால்

ஏற்படும் சிதறொளியின் அலைவீச்சுக்கும் உள்ள தகவைக் கணக்கிட்டறிவோம். $\rho(r)$ என்பது r என்ற புள்ளியில் மின்னூட்டச் செறிவாக இருக்கட்டும். சிதறல் S_r என்ற திசையில் ஏற்படுவதாகக் கருதுவோம். மையத்திலிருந்தும், r என்ற புள்ளியில் உள்ள மின்னூட்டக் கூறாலும் சிதறலுறும் ஒளியின் அலைக்கட்ட வேறுபாடு

$$\phi_r = (2\pi/\lambda)[S_r - S_i).r]$$

S_i, S_r என்பன முறையே படுகதிர் மற்றும் விடுகதிர் திசைகளில் ஓரலகு வெக்டாரின் மதிப்பாகும். மையத்திலுள்ள எலக்ட்ரானால் S_r திசையில் ஏற்படும் சிதறொளி அலைவீச்சை $A\exp(kx-\omega t)$ எனக் குறிப்பிடலாம். இதில் x என்பது S_r திசையில் தொலைவையும் k என்பது அலை வெக்டாரையும் குறிப்பிடுகிறது. மின்னூட்டக் கூறு $\rho(r)dv$ லிருந்து அதே திசையில் சிதறலுறும் ஒளியின் அலைவீச்சு ϕ_r என்ற அலைக்கட்ட வேறுபாடுடன் இருப்பதால் அதை

$$A\, e^{\,i(kr-\omega t)+i\phi r} \quad \rho(r)dv$$

எனக் குறிப்பிடலாம். இவற்றின் தகவு df எனில்

$$df = \frac{Ae^{\,i(kx-\omega t)+i\phi r}.\ \rho(r)\ dv}{Ae^{\,i(kx-\omega t)}}$$

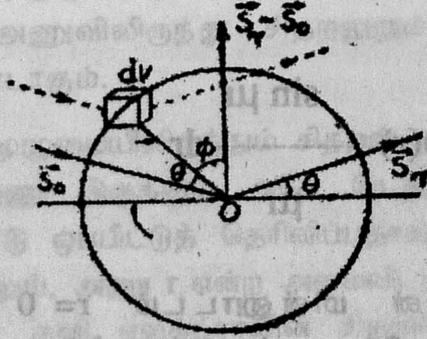
$$= e^{i\phi}{}_r\, \rho\ (r)dv$$

எனவே மொத்த மின்னூட்டம் $\rho\ (r)d\rho$ யைக் கருத,

$$f = \int \rho(r)\ e^{\,i\phi r}\ dv \qquad (2.18)$$

இத் தொகுப்பாக்கம் அணுவின் முழுப் பருமனுக்கும் மேற்கொள்ளப்படுகின்றது.

அணுவில் எலக்ட்ரானின் பங்கீட்டுத்தனம் பொதுவாகக் கோளச் சீர்மையுடன் இருக்கும். இந்த அனுமானத்தின் அடிப்படையில் $\rho(r)$என்பது r ஐ மட்டும் பொறுத்த ஒரு சார்பு எனலாம். மேலும் மேற்கண்ட தொகுப்பாக்கத்தைக் கோளக ஆயத்தைக் கொண்டு தீர்வு செய்யலாம். இவ்வாய அமைப்பில்



படம் 2.19 அணுவியல் சிதறல் காரணி

$$dv = 2\pi r^2 \sin\phi \, d\phi dr$$

ϕ_r ன் மதிப்பைக் கொண்டு

$$\phi_r = (2\pi/\lambda)\ [(s_r - s_i).r]$$

$$= (2\pi/\lambda)\ (s_r - s_i) r \cos\phi$$

$$= (2\pi/\lambda).\ 2\sin\theta\ r \cos\phi;$$ ஏனெனில் $s_r - s_i = 2\sin\theta$

$$= (4\pi/\lambda)\ r \sin\theta \cos\phi$$

$\mu = (4\pi/\lambda)\ \sin\theta$ எனில் $\phi_r = \mu r \cos\phi$

இம்மதிப்பைப் பதிலீடு செய்து

$$f = \int_{r=0}^{\infty} \int_{\phi=0}^{\pi} \rho(r)\, e^{i\mu r \cos\phi}\, 2\pi r^2 \sin\phi \, d\phi dr$$

$$\int_0^{\pi} e^{i\mu r \cos\phi} \sin\phi \, d\phi \quad \left[1/i\mu r\ e^{i\mu r \cos\phi}\right]_0^{\pi}$$

$$= \frac{2}{\mu r} \cdot \frac{e^{i\mu r} - e^{-i\mu r}}{2i}$$

$$= \frac{2\sin \mu r}{\mu r}$$

MADURAI KAMARAJ UNIVERSITY ★ DR. T.P.M. LIBRARY ★
299060

எனவே

$$f = \int_0^\infty 4\pi r^2 \rho(r) \frac{\sin \mu r}{\mu r} dr \qquad (2.19)$$

எலக்ட்ரானின் மின்னூட்டம் r= 0 என்ற மையத்தில் செறிவுற்றிருக்கும் போது, $\sin \mu r / \mu r \rightarrow 1$; எனவே

$f = \int 4\pi r^2 \rho(r)dr$. $4\pi r^2 \rho(r)dr$ என்பது r ஆரமும் dr தடிப்புமுள்ள கோளவிடைப் பகுதியிலுள்ள மின்னூட்டமாகும். இதன் தொகுப்பாக்கம் அணுவிலுள்ள மொத்த எலக்ட்ரான் மின்னூட்டத்தைக் குறிக்கும். z என்பது அணுவின் அணுவெண் எனில் இதன் மதிப்பு ze ஆகும்.

வடிவியல் சிதறல் காரணி (Geometrical structure factor)

நடைமுறையில் ஒரு படிகத்தால் சிதறலுறும் ஒளியின் செறிவு அணுவின் கட்டமைப்போடு தொடர்புடைய காரணிகளால் மட்டுமன்றி, ஓரலகு செல்லின் அடக்கம், அதாவது அதிலுள்ள அணுக்களின் எண்ணிக்கை, அவற்றின் பங்கீட்டுத்தனம் இவற்றையும் பொருத்தது. ஒரு குறிப்பிட்ட வகை நிலை எதிரொளிப்பின் செறிவு மற்றும் பிராக்கின் விதியால் அனுமதிக்கப்படுகின்ற வெவ்வேறு எதிரொளிப்பின் ஒப்புச் செறிவு இவற்றைப் பற்றி அறிய, ஒரு குறிப்பிட்ட திசையில் சிதறல் அலைவீச்சுக்கு ஓரலகு செல்லிலுள்ள எல்லா அணுக்களினாலும் அளிக்கப்படும் பங்களிப்பைக் கணக்கிடவேண்டும். இதை (h'k'l') என்ற தளத்தின் எதிரொளிப்பிற்கான F(h'k'l') என்ற சார்பின் மதிப்பைக் கணக்கிடுவதால் செய்யமுடியும். F(h'k'l') என்பது படிகத்தின் ஓரலகு செல் முழுவதாலும் சிதறலுறும் கதிர்வீச்சின் அலைவீச்சிற்கும், அதே விடுகதிருக்கு, அதன் மையத்தில் ஒரு புள்ளி எலக்ட்ரானால் ஏற்படும் சிதரொளியின் அலைவீச்சிற்கும் உள்ள தகவாகும். இதை நாம் கீழ்க்காணுமாறு குறிப்பிடமுடியும்.

$$F(h^1k^1l^1) = \Sigma f_i e^{i\phi i}$$

$$= \Sigma f_i e^{2\pi i(ri.s)/\lambda}$$

இதில் கூட்டுத்தொகையாக்கம் ஓரலகு செல்லிலுள்ள எல்லா அணுக்களுக்கும் மேற்கொள்ளப்படுவதால் விளைவதாகும். ϕ_i என்பது

மையத்திலிருந்து சிதறலுறும் ஒளிக்கும், ஓரலகு செல்லிலுள்ள i என்று குறிப்பிட்ட அணுவிலிருந்து சிதறலுறும் ஒளிக்குமுள்ள அலைக்கட்ட வேறுபாடாகும்.

f_i என்பது, அணு முழுமையிலிருந்தும் சிதறல் அலைவீச்சை, ஒரு தனி எலக்ட்ரான், அணு இருக்கும் அதே இடத்தில் ஏற்படுத்தும் சிதறல் அலைவீச்சோடு ஒப்பிட்டுத் தெரிவிப்பதால், $f_i e^{i\phi_i}$ என்பது எலக்ட்ரான் மையத்திலும், அணு r_i என்ற அமைவிடத்திலும் அணுவின் சிதறல் அலைவீச்சை தனி எலக்ட்ரானின் சிதறல் அலைவீச்சோடு ஒப்பிட்டுக் கூறுவதாகும்.

i என்று குறிப்பிடப்படும் அணுவின் ஆயம் $(u_i.v_i,w_i)$எனில்

$r_i = u_i a+v_i b+w_i c$

(h',k',l') எதிரொளிப்பிற்கு,

a. $(s_r - s_i) = k'\lambda$

எனவே $r_i(S_r - s_i) = (u_i h'+v_i k'+w_i l')\lambda$

இதிலிருந்து

$F(h'k'l') = f_i \exp 2\pi i\,(u_i h'+v_i k'+w_i l')$

ஓரலகு செல்லிலுள்ள அணுக்கள் யாவும் ஒத்தவையெனில் அவற்றின் f_i மதிப்புகள் சமமானவைகளாக இருக்கும்

$F(h'k'l') = fG$

இதில் $G = \Sigma \exp 2\pi i\,(u_i h'+v_i k'+w_i l')$

எனவே மொத்த சிதறல் அலைவீச்சு என்பது f என்ற அணுவியல் சிதறல் காரணி மற்றும் G என்ற வடிவியல் சார்புக்காரணி இவற்றின் பெருக்கல் பலனாகும். Gன் மதிப்பு ஓரலகு செல்லில் அமைந்துள்ள அணுக்களின் கட்டமைப்பைப் பொறுத்திருக்கிறது.

வினாக்கள்

1. ஓர் எளிய சதுரப்படிக அணித்தளத்தின் தலைகீழ் அணிக்கோவை மற்றோர் எளிய கனச்சதுரம் எனக் காட்டுக.

2. ஒரு கனச்சதுரப் படிக அணித்தளத்தின் தலைகீழ் அணிக்கோவை முகமையக் கனச்சதுரப் படிகக் கட்டமைப்புக் கொண்டது எனக் காட்டுக.

3. கனச் சதுரப் படிகத்தில் (hkl) என்ற மில்லர் குறியெண் கொண்ட அடுத்தடுத்த இணைத் தளங்களுக்கு இடைப்பட்ட தொலைவு $d_{hkl} = a/(h^2+k^2+l^2)^{1/2}$ என்று நிறுவுக.

4. முதல் பிரிலோயின் மண்டலத்தின் பருமன் $(2\pi)^3/v_c$ என்று காட்டுக. இதில் v_c என்பது படிகத்தின் மூலமுதலான செல்லின் பருமன்.

5. இரு பரிமாணமுள்ள சதுரவடிவ அணித்தளத்திற்கு முதல் மூன்று பிரிலோயின் மண்டலங்களைக் கணக்கிடு. அவை ஒவ்வொன்றும் சம பரப்புடையன என்று நிருபிக்க.

6. படிகத்தில் எக்ஸ்கதிர் விளிம்பு விளைவிற்கான லவே சமன்பாடுகள் யாவை? இச்சமன்பாடுகள் பிராக் விதியை நிறுவுகின்றன எனக்காட்டுக.

7. அணுவியல் சிதறல் காரணிக்கான ஒரு தொடர்பைப் பெறுக.

   எக்ஸ் கதிர் விளிம்பு விளைவில் இதன் பங்கு என்ன?

8. தலைகீழ் அணிக்கோவை என்றால் என்ன? அதன் பண்புகளை விவரிக்க?

2.(ஆ) படிகக் குறைபாடுகள்

(Imperfections in crystals)

2.8 படிகக் குறைபாடு – கண்டுபிடிப்பு

படிகத்தின் முக்கியமானதொரு சிறப்பியல்பு அதன் அலைச்சீர்மையுடன் கூடிய சீரான கட்டமைப்பாகும். ஆனால் உண்மை நிலையில் எந்தப் படிகமும் முழுமையாகச் சீரான கட்டமைப்புடன், குறைபாடு ஏதுமின்றி இருப்பதில்லை. கட்டமைப்பில் அணுக்களின் அலைச்சீர்மையில் காணப்படும் எந்த விலக்கமும் படிகக்குறைபாடு எனப்படும். இதை 'அணித்தளவழு' (lattice defect) என்றும் கூறுவர்.

படிகங்களில் லவே விளிம்பு விளைவு மூலம் அவற்றின் அகக்கட்டமைப்பைப்பற்றி அறிந்து கொள்ளமுடியும். இதனால் திண்மப் பொருட்களின் பல இயற்பியல் பண்புகளை விளக்கித் தெரிந்து கொள்வது இயலுவதாயிற்று. எனினும் நெகிழ்மத்தன்மை (Plasticity) மின்னாற்பகுபடு பொருட்களின் மின்கடத்து திறன், படிகத்தின் வலிமை போன்ற ஒரு சில இயற்பியல் பண்புகளைப் படிகங்களின் கட்டமைப்பில் காணப்படும் வேறுபாடுகளைக் கொண்டு விளக்க முடியவில்லை. இதனால் முழுமையான இலட்சியப் படிகம் (Ideal crystal) என்றும், அதிலிருந்து விலகி இருக்கும் உண்மைப்படிகம் என்றும் வரையறுத்துக் கூறுவது அவசியமானது. படிகங்களில் எக்ஸ் கதிர் விளிம்பு விளைவின் சில முடிவுகளை விளக்குவதற்கும், சில இயற்பியல் பண்புகளில் காணப்படும் முரண்பாடுகளைக் களைவதற்கும் 1914இல் டார்வின் (C.G. Darwin) என்பார், அணித்தளங்களில் அமைந்திருக்கும் அணுக்கள், ஒரே மாதிரியாகவும், சீராகவும் படிகம் முழுவதிலும் விரவி இருப்பதில்லை என்றும், பாளம் பாளமாகப் பிரிந்து, பாள இடைவெளியில் படிகத்தின் சீர்மையைச் சீர்குலைத்து விடுகின்றது என்றும் கூறினார். இதை 'மொசைக் படிகம்' என்றும் விவரித்தார். டார்வினின் இக்கருத்துகள் முதலில் வெறும் அனுமானங்களாகவே வெளிப்பட்டன. என்றாலும் பின்வந்த ஆராய்ச்சியாளர்கள் அக்கருத்தை வெற்றிகரமாகப் பயன்படுத்திக் கொண்டார்கள். இயற்கையில் கிடைக்கும் பல படிகங்களையும், குறைபாடுள்ள படிகம் என வர்ணித்ததால், டார்வினின் கருத்துக்கு ஒரு திருத்தம் தேவைப்பட்டது. 1928-29ல் பிராண்டில் (Prandtl) மற்றும் டெலிங்கர் (Dehlinger) தனித்தனியாக, ஆராய்ந்து,

படிகங்களின் பட்டறைப் பண்புகள் (mechanical properties), அவற்றில் இருக்கும் நேரிய அல்லது ஒரு கோட்டிலான குறைபாடுகளுடன் தொடர்புடையதாக இருக்கின்றன எனக் கண்டறிந்தனர். 1934ல் டெய்லர் (Taylor), ஓரோவான் (Orowan), போலானை (Polanyi) முதலிய அறிவியலாளர்கள் தனித்தனியாக ஆராய்ந்து, படிக அலைச்சீர்மையிலிருந்து விலகி உண்மையான படிகங்களில் காணப்படும் ஒரு கோட்டுக் குறைபாடுகளை நழுவல் (dislocation) என்று பெயரிட்டனர். இப்படிகம் செயல்படும் இறுக்க விசையால் மிக எளிதாக உருக்குலைவிற்கு ஆளாவதாகக் கண்டறிந்தனர்.

ஸ்மெகால் (Smekal) என்பார் மின்னாற்பகுபடு பொருட்களின் மின்கடத்துதிறன், ஊடுபரவல் (diffusion) போன்ற பண்புகளை விளக்க நழுவல் தவிர்த்த வேறு வகையான படிகக்குறைபாடுகள் தேவை என்பதைத் தெரிவித்தார். மின்கடத்தல் என்பது மின்னாற்பகுபடுபொருளில் அயனிகளின் இயக்கமாகும். அதன் இடப்பெயர்வு அவ்விடத்தில் படிகச்சீர்மையைச் சீர்குலைக்கிறது.

பெரும்பாலும் எல்லாப் படிகங்களும் நுண்ணளவிலாவது படிகக் குறைபாடுடையதாக இருக்கும். மீள்திறன், வெப்பஏற்புத் திறன், அடர்த்தி, மின்கடத்தாப் பொருளாலான மின் தேக்கு திறன் முதலிய பல பண்புகள் படிகங்களின் குறைபாடுகளை உணர்வதில்லை. குறைபாடு இருந்தாலும் இல்லாவிட்டாலும் ஒரே மதிப்புடையதாக இருக்கிறது. ஆனால் வேறு சில நிலைகளில் இப்படிகக் குறைபாடுகளை நாம் புறக்கணிக்க முடியாது. ஏனெனில் சில இயற்பியல் பண்புகள் முழுமையான, குறைபாடில்லாத படிகத் தன்மையைப் பொறுத்திருக்கிறது. படிகத்தின் குறைபாடுகளால் இயற்பியல் பண்புகளில் ஏற்படும் தாக்கம் பின்வருமாறு:

1. உலோகங்களில் படிகக் குறைபாடு கடத்து எலக்ட்ரான்களைச் சிதறலுக்கு உள்ளாக்குவதால், ஊடகத்தின் மின்தடை அதிகரிக்கிறது. இது உலோகங்களைவிட, கலப்பு உலோகங்களில் (alloys) கூடுதலாக இருக்கிறது.

2. நுண்ணிய அளவில் சில குறைபாடுகள் தோன்றியிருந்தாலும் அவை படிகத்தின் வலிமையைப் பேரளவில் குறைத்து விடுகின்றன.

3. தூய படிகங்களில் வேற்றுப் பொருளும், படிகக் குறைபாடுகளும் இருக்கும்போது அவை சிறப்பு நிறம் பெறுகின்றன.

4. பெரோகாந்தப் பொருட்களின் தயக்கக்கண்ணி இழப்பு அதன் கட்டமைப்பிற்கு உணர்வு நுட்பமிக்கதாக இருக்கிறது.

2.9 படிகக் குறைபாடுகளின் வகைகள்

படிகங்களின் கட்டமைப்பில் ஏற்படும் குறைபாடுகளினால் எழும் படிகவியல் வழுக்கள் தவிர்த்து வேறுபல குறைபாடுகளும் காணப்படுகின்றன. அவற்றைப் படிகவியல் குறைபாடுகள் (crystal), மின்னணுவியல் குறைபாடுகள் (electronic), இடைவரவுக் குறைபாடுகள் (transient) என்ற மூன்று பெருவகைக்குள் அடக்கலாம்.

(அ) படிகவியல் குறைபாடுகள்

இதில் பல வகைகள் உள்ளன. படிகத்தின் கட்டமைப்பில் உள்ள குறைபாடுகளினால் இவை விளைகின்றன. அவை

1. வெப்பக் கிளர்ச்சி.
2. புள்ளி வழு (point defect)

   இது வெற்று இடநிலை (Vacancies), சிற்றிடைவெளி அல்லது சிறுபிளவு (interstitials), வேற்றுப்பொருள் (Foreign atoms)இவற்றால் தூண்டப்படலாம்.
3. வரிவழு (line defect), இதை நழுவல் என்று குறிப்பிடுவர்.
4. தளவழு (Surface defect) இது திண்மப் பொருளின் முகப்பரப்பிலோ, அல்லது அகப்பரப்பிலோ அமையலாம். இதனால் வரம்பு அகவரி போலத் தோன்றிப் பொருளின் ஒருபடித்தன்மையின் தொடர்ச்சியை முறிக்கிறது.

(ஆ) மின்னணுவியல் குறைபாடுகள்

படிகத்தின் மின்னணுவியல் சார்ந்த கட்டமைப்பில் ஏற்படும் மாற்றத்தினால் இக்குறைபாடு ஏற்படுகிறது. எடுத்துக்காட்டாக, கடத்து எலக்ட்ரான் அல்லது மின்துளை போன்றவை வேற்றுப்பொருள் ஆற்றல் நிலையிலிருந்தோ, அல்லது நிறைவுற்ற ஆற்றல் நிலையிலிருந்தோ வெப்பக்கிளர்ச்சியால் இடம் பெயர்வதால் இக்குறைபாடு ஏற்படுகிறது. திண்மப் பொருளின் மின் மற்றும் காந்தப் பண்புகளுக்கு இக்குறைபாடுகளின் தாக்கம் முக்கியமானதாகும்.

(இ) இடைவரவுக் குறைபாடுகள்

புறமூலங்களின் தூண்டுதலினால் படிகத்தில் தோற்றுவிக்கப்படுவது இக்குறைபாடாகும். இது ஒளித்துகளான போட்டான், மின்னூட்டத் துகள்களான எலக்ட்ரான், புரோட்டான், மெசான்கள், மின்நடுநிலைத் துகளான நியூட்ரான் போன்றவற்றால் தூண்டப்படலாம்.

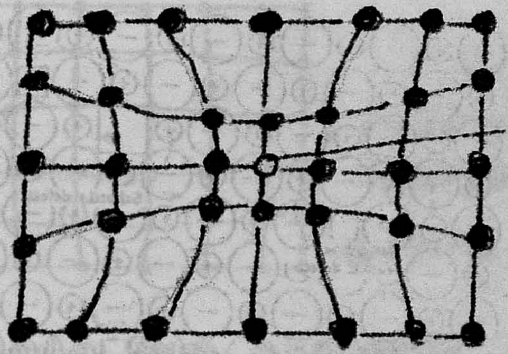
இனி நாம் இக்குறைபாடுகளைப் பற்றி விரிவாகக் காண்போம்.

புள்ளி வழு

புள்ளி வழு என்ற கலைச்சொல்லே, அணித்தளத்தின் ஓரிடத்தில் ஏற்படும் குறைபாடு என்பதைத் தெரிவிக்கிறது. இது பொதுவாக ஒரு சில அணுவிடைத்தொலைவின் நெடுக்கைக்குள் அமையும். படிகத்தின் சீர்மையில் வழக்கமான அமைவிடத்திலிருந்து இருக்கவேண்டிய அணுக்கள் நீக்கப்பட்டதாலோ, வழக்கத்திற்கு புறம்பான அமைவிடத்தில் வேற்றணுக்கள் புகுத்தப்பட்டதாலோ ஏற்படும் சீர்குலைவினால் இது விளையலாம். புள்ளி வழுவில் சில துணை வகைகள் உள்ளன. இவை படிகச் சீர்குலைவை ஏற்படுத்தும் முறையால் வேறுபடுகின்றன.

வெற்று இடநிலை

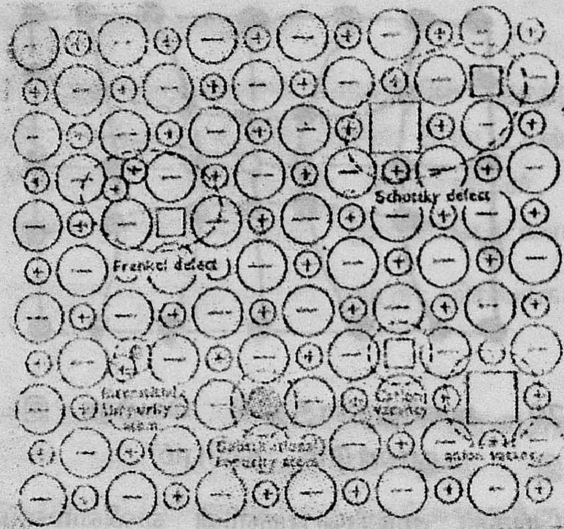
படிகத்தின் இயல்பான அணித்தளத்தில் அணிஅணியாய் அமைந்துள்ள அணுக்களுள் ஒன்றோ அல்லது பலவோ நீக்கப்பட்டு, அவ்விடத்தில் அக்குறிப்பிட்ட அணு இல்லாதிருந்தால் அது வெற்று இடம் எனப்படும். இந்த வெற்று இடம் படிகக் குறைபாட்டைத் தூண்டுகிறது. படிகத்தின் சீர்மையை உருக்குலைக்கும் இந்த வெற்று இடம் பிற ஒழுங்கான அணித்தளங்களைச் சீர்குலைக்கின்றது. குறைக்கடத்திகளில் மின் துளைகள் போல இந்த வெற்று இடம் இடம்விட்டு இடம் பெயர்ந்து செல்லக்கூடியதாய் இருக்கிறது. அதனால் இரண்டு, மூன்று என வெற்று இடங்கள் ஒன்று சேரும் வாய்ப்பைப் பெறுகின்றன.



படம் 2.20. அணித்தளத்தில் வெற்று இடமும் அது தூண்டும் திரிபும்

வெற்று இடங்கள் மூலப்பொருளின் வலிமையைப் பேரளவில் பாதிக்கின்றன. வெற்று இடங்கள் ஊடகத்தில் அதிக எண்ணிக்கையில் இருப்பின் அது மூலப்பொருளை வலுவிழக்கச் செய்கின்றது. இந்த வெற்று இடங்கள் அணித்தளத்தில் ஒரே வரிசையில் அமைந்திருந்தால் அவ்விடத்தில் வெடிப்பு ஏற்படுவது சாத்தியமாகின்றது. ஒருபகுதியில் வெற்று இடங்கள் திரண்டிருந்தால் அதை உட்குழிவு (cavity) என்பர். இது அவ்விடத்தில் ஒரு கிளர்ச்சியைத் தூண்டுகின்றது. பட்டறைப் பண்புகளில் தூண்டப்படும் இது போன்ற விளைவுகள் தவிர்த்து, புள்ளி வழுக்கள் மூலப்பொருளின் ஒளியியல் பண்புகளையும் பெரிதும் கட்டுப்படுத்துவதாய் இருக்கின்றன.

வெற்று இடநிலை, அவ்விடத்தில் இருக்க வேண்டிய அணு அல்லது அயனி இல்லாமலிருப்பதாலும் ஏற்படும். அயனிகளான வெற்று இடத்தை ஸ்காட்கி வழு (Schottky defect) என்று கூறுவர். அயனிகளில் நேர்மின் அயனி (anion), எதிர்மின் அயனி (cation) என இரு வகையுண்டு. எலக்ட்ரான் நீக்கப்பட்டது நேர்மின் அயனி, இணைக்கப்பட்டது எதிர்மின் அயனியாகும். மின்நடுநிலை நிலைபட்டிருப்பதால், சமஅளவில் நேர்மின் அயனியும், எதிர்மின் அயனியும் விடுபட்டிருக்கும். இதனால் ஏற்படும் படிகக் குறைபாடு ஸ்காட்கி வழு எனப்படும். படம் 2.21.

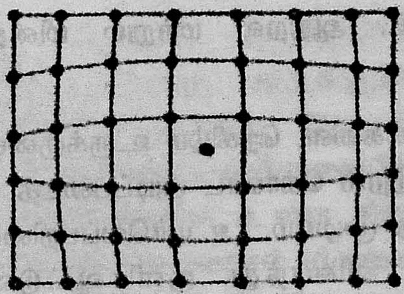


படம் 2.21. இருபரிமாண அயனிப்படிகத்தில் புள்ளி வழுக்கள் (வகை)

அணு அல்லது அயனி, இயல்பாக இருக்க வேண்டிய இடத்திலிருந்து நீக்கப்பெற்று, படிகத்தின் வேறொரு இடத்தில், குறிப்பாகச் சிற்றிடைவெளிகளில் இடம் பெற்றிருந்தால் அது பிரென்கெல் வழு (Frenkel defect) எனப்படும். இயற்பியல் கொள்கை இந்த பிரென்கெல் வழு, சில படிகங்களில் மிக எளிதாக உருவாகிறது எனத் தெரிவிக்கிறது. இது படிகத்தில் இரு குறைபாடுகளை - சிற்றிடைவெளி, வெற்று இடநிலை. ஒரே சமயத்தில் உருவாக்குகிறது.

சிற்றிடைவெளி கூடுதலணு

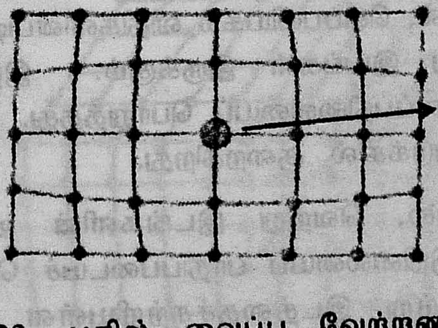
சிற்றிடைவெளியில் கூடுதலாக ஓரணு இடம்பெற்றிருக்கலாம். இந்த அணு வேற்றுப் பொருளணுவாகவோ, அல்லது படிகத்தில் இடம் பெற்றிருக்கும் ஓரணுவாகவோ இருக்கலாம். இக்கூடுதலணு படிகத்தின் அணித்தளத்தில் இடம் பெறாமல், அணித்தளங்களுக் கிடையேயான இடைவெளியில் இடம்பெறலாம். வெற்று இடைநிலை போல, சிற்றிடைவெளியில் புகுந்த அணுவும், அணித்தள அமைப்பைச் சீர்குலைக்கிறது. படம் 2.22.



படம் 2.22. சிற்றிடைவெளி கூடுதலணுவும் புள்ளிவழுவும்

பதில்வைப்பு வேற்றணு

படிகத்தின் அணித்தளத்தில் இடம்பெற்றிருக்கும் அணுக்களிலிருந்து வேறுபட்ட எலக்ட்ரான் கட்டமைப்புக் கொண்ட அணு ஒன்று ஏதாவதொரு அமைவிடத்தில் வழக்கமான அணுவிற்குப் பதிலாக மாற்று அணுவாக அமையப் பெறலாம். சில சமயங்களில் ஓரணுவோ அல்லது ஒன்றுக்கும் மேற்பட்ட அணுக்களோ, ஒழுங்கான அமைவிடத்திலோ அல்லது சிற்றிடைவெளியிலோ அமையலாம். பலவகையான வேற்றுப்பொருள் கலப்பு முறை (doping techniques) மூலம் வேற்றணுக்களைப் படிகத்தின் அணித்தளத்தில் இடம்பெறுமாறு செய்யலாம். இதனால் அப்படிகத்திற்கு வெவ்வேறு இயற்பியல் பண்புகளை ஊட்டமுடியும். வேற்றணுக்களின் பாதிப்புப் பற்றி பொருட்களின் குறைகடத்தும் மற்றும் ஒளியியல் பண்புகளில் ஏற்படும் மாற்றங்கள் மூலம் நாம் அறிய முடியும். கலப்பு உலோகங்களில் இந்த வேற்றணு அவற்றின் வலிமையைக் குறிப்பிடும்படியாக வேறுபடுத்துகிறது. படம் 2.23.



படம் 2.23. பதில் வைப்பு வேற்றணுவாலான புள்ளி வழு

புள்ளி வழு – தூண்டுதல், ஆற்றல் மற்றும் மின்னூட்ட நடுவுநிலைத் தன்மை

படிகங்களில் புள்ளி வழுக்களை, நெகிழ்ம உருக்குலைவு (plastic deformation) மற்றும் உயராற்றல் கொண்ட அடிப்படைத் துகள்களின் தாக்கம் இவற்றால் ஏற்படுத்த முடியும். உயர்வெப்பநிலையிலிருந்து தாழ்ந்த வெப்பநிலைக்கு விரைந்து குளிர்வூட்டுவதன் மூலம் செறிவுமிக்க வெற்றுஇடங்கள் படிகத்தில் தங்கியிருக்குமாறு செய்யலாம்.

அயனிப்படிகத்தில் அணித்தளத்திலிருந்து ஓரணு அல்லது அயனியை அகற்றி, அதனைப் படிகத்தின் புறப்பரப்பில் படியுமாறு செய்யும்போது படிகத்தின் உட்பகுதியில் ஒரு வெற்று இடம் தோற்றுவிக்கப்படுகிறது. இதனை உருவாக்குவதற்குத் தேவையான ஆற்றல் வெற்று இடவாக்க ஆற்றல் எனப்படும். இது வெவ்வேறு படிகங்களுக்கு வெவ்வேறு மதிப்புடையதாக இருக்கின்றது. எனவே வெற்று இடங்களின் உருவாக்கம் என்பது படிகத்தின் உள்கட்டமைப்பைச் சீர்குலைப்பதுடன், அணித்தளத்தின் ஆற்றலையும் அதிகரிக்கிறது. இந்த ஆற்றல் அதிகரிப்பு வெப்பநிலை மற்றும் உருவாக்கப்படும் வெற்று இடங்களின் எண்ணிக்கையைப் பொறுத்திருக்கிறது. N என்ற எண்ணிக்கையுடன் வெற்றுஇடம் உருவாக்கப்படும்போது, ஹெம்ஹோல்ட்ஸ் இயல்பாற்றலில் (free energy) ஏற்படும் மாற்றம் ΔG எனில்,

$$\Delta G = \Delta U - T\Delta S$$

இதில் ΔS என்பது வெற்று இடங்களின் உருவாக்கத்தால் படிகத்தின் என்ட்ரோபி(entropy)யில் ஏற்படும் மாற்றமாகும். ஒரு குறிப்பிட்ட வெப்பநிலையில், வெப்பயியக்க விதிகளின்படி நிலையான எண்ணிக்கையில் வெற்று இடங்கள் இருக்கும். இந்த வெற்று இடங்களின் நகர்திறன் வெப்பநிலையைப் பொறுத்தது. வெப்பநிலை அதிகரிக்க இது e-ன் அடுக்கில் குறைகிறது.

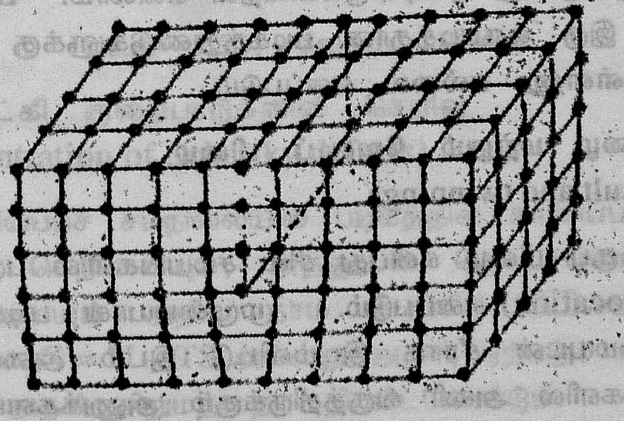
அயனிப் படிகங்களில், வெற்று இடங்களின் உருவாக்கம் படிகத்தில் மின்னூட்ட நடுநிலையைப் பாதிப்படையச் செய்கின்றது. எனவே படிகத்தின் வெற்று இடத்தைச்சுற்றியுள்ள படிகத்தின் பகுதியிலுள்ள மின்னூட்டம், படிகத்தின் மின்னூட்ட நடுநிலை பாதிக்கப்படாதவாறு புதிய சூழ்நிலைக்குத் தக்கவாறு திருத்தியமையப் பெறுகிறது. இது படிகத்தில் இருவிதமாக

நிகழக்கூடும். நேர்மின் அயனியொன்று நீக்கப்பட்டு வெற்றுஇடம் உருவானால், அதற்கு அருகிலுள்ள வெளியில் எதிர்மின் அயனியொன்றும் நீக்கப்படும். இது ஸ்காட்சி விளைவு என்று முன்பு குறிப்பிட்டோம். மற்றொரு வழிமுறையில் நேர்மின் அயனியின் வெற்று இடத்திற்கு வெகுஅருகில் உள்ள சிற்றிடைவெளியில் ஒரு நேர்மின் அயனி இடம்பெறச் செய்வதால் மின்னூட்ட நடுநிலையைப் பாதுகாக்க முடியும். இது பிரென்கெல் விளைவு என்று சொல்லப்படும்.

வரிவழு

இது, பொதுவாக 'நழுவல்' என்றழைக்கப்படும் ஒருவகையான படிகக் குறைபாடாகும். இது, படிகத்தில் ஒரு குறிப்பிட்ட சிறிய பகுதிக்குள் உள்ளடங்கி அமைகிறது. இதில் அணித்தளத்தின் ஒரு பகுதி சறுக்குத் திரிபுக்கு உள்ளாகி இடம்பெயருகிறது. இப்படிச் சறுக்கும்போது, நழுவல் தொலைவு எல்லாமதிப்புகளையும் உடையதாக இருப்பதில்லை. படிக மாறிலியின் அதாவது அணித்தள வெக்டாரின் ஏதாவொரு மடங்காக இருக்கும். இதனை பர்கெர் (Burger) வெக்டர் என்று கண்டுபிடிப்பாளரின் பெயருடன் அழைப்பார்கள்.

படிகத்தில் ஒரு சிறுபகுதி சறுக்கி அமையும்போது அதனைச் சுற்றி ஒரு எல்லை கோடு போல ஏற்படுகின்றது. படம் 2.24. இதனை நழுவல் கோடு (dislocation line) என்பர். பொதுவாக விளிம்பு நழுவல், (edge dislocation), திருகு நழுவல் (screw dislocation) என இரு வகை நழுவல்கள் உள்ளன. படிகங்களில் நழுவல் என்பது இவ்விரு நழுவல்களின் கலப்பாக இருக்கிறது.



படம் 2.24. முழுமையற்ற இடைஅணித்தளமும் நழுவலாலான குறைபாடும்

தளவழு

படிகத்தில் இக்குறைபாடு ஒரு பரப்பில் விரிந்திருக்கிறது என்றாலும் ஒரு சிறு பகுதிக்குள் உள்ளடங்கியிருக்கிறது. இது பரப்பில் வரிவழுக்களின் திரட்சியால் ஏற்படுகிறது.

வகைப்படுத்தப்பட்ட சில தளவழுக்கள் பின்வருமாறு:-

1. மரபுவழி எல்லை (lineage boundary)

ஒரு படிகத்தில் ஒழுங்காய் அமைந்திருக்கும் அணித்தளங்களுடன் கூடிய இரு பகுதிகள் ஒன்றுக்கொன்று சற்று சாய்ந்திருக்கும்போது, அவைகளுக்கிடையே தோன்றும் எல்லைக்கோடு.

2. உள்ளணு எல்லை (grain boundary)

இதனை உருவ அளவு வழு (size defect) என்றும் கூறுவர். இரு பரிமாணம் சார்ந்த படிகக் குறைபாடுகளில் இது முக்கியமானதாகும்.

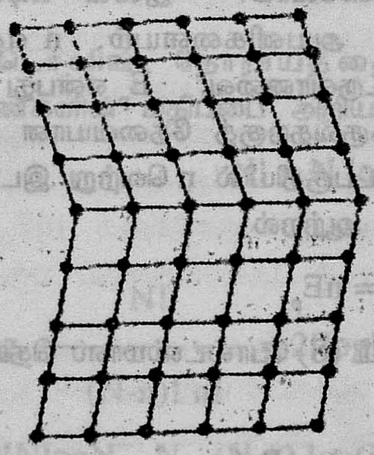
ஒரு படிகம் ஒருபடித்தானதாக, அதாவது அதன் முழுப்பரிமாணமும் ஒரே மாதிரியான, சீராக அமைந்த அணித்தளங்களுடன் இருந்தால் அதனை 'ஒருபடித்தான படிகம்' என்பர். ஒருபடித்தான படிகத்தை உருவாக்குதல் என்பது ஓரளவு கடினமான வழிமுறையாகும். பொதுவாக எல்லாப் படிகமும் பல படிகங்களின் சேர்மானமாக இருப்பதால், அவை பலப்படித் தன்மையுடையனவாக இருக்கின்றன. அதாவது பல ஒரு படித்தான படிகங்கள் தாறுமாறாக, ஒரு குறிப்பிட்ட அச்சு வெவ்வேறு திசை நோக்கி இருக்குமாறு ஒட்டியிருக்கின்றன எனலாம். பல படித்தான படிகத்தில் இரு ஒருபடித்தான படிகத்துண்டுகளுக்கு இடைப்பட்ட எல்லை **உள்ளணு எல்லை** எனப்படும்.

அடுக்குப்பிழை மற்றும் ஜோடிப் பிழை
(Stacking fault and twinning)

அடுக்குப் பிழை என்பது சில சமயங்களில் பகுதி நழுவல் (partial dislocation) எனப்படும். முழுமையான படிகம் என்பது, அலைச்சீர்மையுடன் சீராக இடம்விட்டு இடம் அமைந்திருக்கும் அணித்தளங்களில் அணி வகுத்திருக்கும் அணுக்களாலானதாகும். இந்த அமைப்பில் ஏதாவது சீர்குலைவு அல்லது அதன் வரிசைத்

தொடரில் ஏற்படும் குறுக்கீடுகளினால் அடுக்குப் பிழை ஏற்படுகின்றது. வெவ்வேறு அணித்தளங்களில் அணுக்களின் வரிசைத் தொடர் வெவ்வேறானதாக இருப்பதால், அடுக்குப்பிழை வெவ்வெறு அணித்தளங்களுக்கு வெவ்வேறானதாக இருக்கும்.

ஜோடிப்பிழை என்பதும் அணித்தள அமைப்பில் ஏற்படும் குறைபாடுகளினால் ஏற்படுவதாகும். படிக அணித்தளத்தின் சீர்மை சிறிதளவே பாதிக்கப்பட்டிருந்தாலும், அது இயல்பான அணித்தளத்திலிருந்து வேறுபட்டிருக்கும். ஒரு பகுதியிலுள்ள அணித்தளங்கள் இயல்பானதாகவும், அதற்கு அண்டைப் பகுதியிலுள்ள அணித்தளங்கள் உருக்குலைவிற்கு உள்ளாகியும் இருந்தால், அவ்விரு பகுதிகளும் சந்திக்குமிடம், இணைஜோடி சந்திப்பு (twin junction) எனப்படும். உருக்குலைவுற்ற அணித்தளப் பகுதியில் சறுக்கலுற்றது போல ஒரு தளம் அதற்கு முன் உள்ள தளத்தைவிட ஒரு குறிப்பிட்ட அளவு இடப்பெயர்விற்கு உள்ளாகியிருக்கிறது.



இணைச் ஜோடி சந்திப்பு

படம் 2.25. ஜோடிப் பிழை

2.10 ஸ்காட்கி குறைபாடுகளின் செறிவு (concentration of Schottky defects)

ஒரு வெப்பச் சமநிலையில் படிகத்தில் காணப்படும் வெற்று இடங்களின் செறிவையும், அதனுடன் தொடர்புடைய படிகக் குறைபாடுகளையும் அறிய நாம் முதலில் ☐ெல்ம்☐ோல்ட்ஸ் இயலாற்றலை $G = U - TS$ அல்லது அதில் ஏற்படும் மாற்றத்தைக் கண்டறிந்து அதன் சிறுமத்தை மதிப்பிடவேண்டும்.

சமஅளவில் நேர்மின் மற்றும் எதிர்மின் அயனிகளைக் கொண்ட முழு நிறைவான ஒரு படிகத்தைக் கருதுவோம். ஓர் எதிர்மின் அயனிக்கான வெற்று இடம் ஏற்பட, படிகத்தின் உட்புறத்தில் அணித்தளத்தின் கட்டமைப்பிலிருந்து ஒரு நேர்மின் அயனி இடம் பெயர்ந்து நகர வேண்டும். நேர்மின் அயனி மட்டும் படிகத்தில் இடம்பெயர்ந்து நகருமெனில், படிகத்தின் புறப்பரப்பு இந்த நேர்மின் அயனிகளைச் சேகரித்து, நேர் மின்னூட்டத்தைப் பெறும். இது படிகத்தின் உட்புறத்திலிருந்து மேலும் இடம்பெயர்ந்து நகரக்கூடிய நேர்மின் அயனிகளை எதிர்க்கிறது. அதேசமயத்தில் படிகத்தின் உட்புறத்தில் கூடுதல் எதிர் மின்னூட்டம் ஏற்படுத்தப்படுகிறது. இது எதிர்மின் அயனி வெற்று இடம் ஏற்பட துணைபுரிகிறது. எனவே புறவிசை ஏதும் இல்லாத நிலையில், படிகத்தினுள் நேர் மற்றும் எதிரயணிகளின் வெற்று இடங்கள் சமமாக இருக்கின்றன என்று கூறலாம்.

ஒரு படிகத்தில் மொத்தம் N அணுக்களும், n ஸ்காட்கி வழுக்களும் இருப்பதாகக் கொள்வோம். இவை படிகத்தின் உட்பகுதியிலிருந்து n நேர்மின் அயனிகளையும், n எதிர்மின் அயனிகளையும் அகற்றுவதால் உருவானவை. E_p என்பது இப்படி ஒரு ஜோடி அயனிகளை உருவாக்குவதற்குத் தேவையான ஆற்றல் என்போம். எனவே படிகத்தின் உட்பகுதியில் n வெற்று இடங்களை உருவாக்குவதற்குத் தேவையான ஆற்றல்

$$U = nE_p$$

ஆகும். அமைப்பின் என்ட்ரோபி (S) போல்ட்ஸ்மாஸ் தொடர்பால் நிறுவப்பட்டுள்ளது. இதன்படி

$$S = k_B \log P$$

இதில் P என்பது, அக்குறிப்பிட்ட அமைப்பைப் பெறுவதற்கான வாய்ப்பாகும். அமைப்பிலுள்ள வெவ்வேறு அயனிகளைப் பல விதங்களில் நீக்கி, அக்குறிப்பிட்ட அமைப்பைப் பெறமுடியும் என்பதால், இது அனுகூலமான அமைப்புகளின் எண்ணிக்கைக்கும், மொத்த இருக்கக்கூடிய அமைப்புகளின் எண்ணிக்கைக்கும் உள்ள தகவாகும். இது வெவ்வேறு வழிமுறைகளினால் ஸ்காட்கி வழுவைப் பெறும் வழிமுறைகளின் எண்ணிக்கையைப் பொறுத்தது. N அணுக்களில் n நேர்மின் அயனிகளை நீக்கி, உண்டாக்க இருக்கும்

வழிமுறைகளின் எண்ணிக்கை N (N-1) (N-2) . . . (N-n+1) ஆகும். இதை N! / (N-n)! எனக் குறிப்பிடலாம். அயனிகள் நீக்கமுற்ற வரிசை மாற்றத்தால் வேறு அமைப்புப் போலத் தோன்றினாலும், ஒரே மாதிரியான அமைப்பையே குறிப்பிடுவதால் இதை n! வகுக்கவேண்டும். எனவே n நேர்மின் அயனிகளை நீக்குவதற்கு உள்ள வழிகளின் எண்ணிக்கை N! / (N-n)! n! ஆகும். இதுபோல எதிர்மின் அயனிகளுக்கும் செய்து வெற்று இடங்களை உருவாக்க முடியும் என்பதால் n ஸ்காட்கி வழுக்களை உருவாக்க உள்ள மொத்த வழிகளின் எண்ணிக்கை $[N! / (N-n)!\, n!]^2$ ஆகும். இதை ஹெல்ம்ஹோல்ட்ஸ் இயலாற்றலுக்கான தொடர்பில் பதிலீடு செய்ய

$$G = U - TS$$

$$= nE_p - k_BT \log \left(\frac{N!}{(N-n)!\, n!} \right)^2$$

ஸ்டெர்லிங் தோராயத்தைப் பயன்படுத்தி N! போன்ற உயரெண்களின் மதிப்பை அறியலாம். இதன்படி

$$N! = N \log N - N, \quad N >> 1$$

எனவே

$$2\log \frac{N!}{(N-n)!\, n!} = 2[\log N! - \log(N-n)! - \log n!]$$

$$= 2[N\log N - N - (N-n) \log(N-n) + (N-n) - n\log n + n]$$

$$= 2[N\log N - (N-n) \log(N-n) - n\log n]$$

எனவே

$$G = nE_p - 2k_BT\, [N\log N - (N-n) \log(N-n) - n\log n]$$

T என்ற கொடுக்கப்பட்ட வெப்பநிலையில் சமநிலை எய்தப்பெற்றால் ஹெல்ம்ஹோல்ட்ஸ் இயலாற்றல் மாறிலியாக இருக்கும். அப்போது அதன் பகுப்பாக்கம் சுழியாக இருக்கும் என்பதால்

$$\left(\frac{dG}{dn}\right)_T = 0 = E_p - 2k_B T \log\left(\frac{N-n}{n}\right)$$

$$N - n / n = e^{Ep/2k_B T}$$

பொதுவாகப் படிகத்திலுள்ள வெற்று இடங்களின் எண்ணிக்கை n அயனிகளின் எண்ணிக்கை Nயை விடக் குறைவு என்பதால் $n<<N$ அல்லது $N-n=N$ எனலாம். இத்தோராயத்தின் அடிப்படையில்,

$$n = Ne^{-Ep} / 2k_B T \qquad (2.20)$$

இத்தொடர்பு வெப்பநிலை அதிகரிக்க, வெப்பச் சமநிலையில் வெற்று இடங்களின் செறிவு குறைகின்றது எனத் தெரிவிக்கிறது.

எடுத்துக்காட்டாக NaCl என்று குறிப்பிடப்படுகிற சோடியம் குளோரைடு என்ற அயனிப்படிகத்தைக் கருதுவோம். இதிலிருந்து Na^+ என்ற நேர்மின் அயனியையும், Cl^- என்ற எதிர்மின் அயனியையும் உருவாக்குவதற்குத் தேவைப்படும் ஆற்றல் E_p. சற்றேறக்குறைய 2 எ.வோ. ஆகும். சமன்பாடு(2.20)யைப் பயன்படுத்தி அறை வெப்பநிலையில் NaCl படிகத்தில் ஓரலகுப்பருமனில் இருக்கும் ஸ்காட்கி வழுவின் எண்ணிக்கையை 10^6 அதே ஓரலகுப் பருமனில் இருக்கும் Na^+ மற்றும் Cl^- அயனிகளின் எண்ணிக்கை 10^{22} ஆகும். எனவே $n<<N$ என்று எடுத்துக்கொண்டு தோராயத்தைப் புகுத்தியது சரியானதே, என்று கூறலாம்.

காரஉப்புகளில்(alkali halides) ஸ்காட்கி வழு குறிப்பிடும் படியாக இருக்கிறது. ஒரு ஜோடி வெற்று இடங்கள், தனித்த வெற்று இடத்தைவிட, அணித்தளத்தில் மிக எளிதாக நகர்ந்து செல்கிறது. ஏனெனில் ஜோடி வெற்று இடங்களுக்குக் குறைந்தளவு விலகு விசையே அங்கு உள்ளது. ஸ்காட்கி வழுக்களின் உருவாக்கத்தினால் படிகத்தின் அடர்த்தி குறைகிறது. ஏனெனில் நிறையில் அதிகரிப்பு ஏதுமின்றி, பருமனில் அதிகரிப்பு ஏற்படுகிறது.

2.11 பிரென்கெல் வழு

இது மற்றொரு வகையான அணித்தள வெற்று இடமாகும். இதில் படிகத்தில் ஒழுங்காய் அணித்தளத்தில் ஓரணு நீக்கப்பட்டு, ஒரு சிற்றிடைவெளியில் இடம்பெறுகிறது. எனவே பிரென்கெல் வழுவில் இருகூறுகள் உள்ளன. அவை ஒரு வெற்று இடம், மற்றும் சிற்றிடைவெளியில் அமைந்த அணு. சிற்றிடைவெளியில் அமைந்த அணு அதனுடைய வெற்று இடத்தைத் திரும்ப அடையாவிட்டால், அதுவும், வெற்று இடமும், தான் தோன்றிய இடத்திலிருந்து ஊடுபரவத் தொடங்குகின்றன. அதனால் அவைகளுக்கிடைப்பட்ட இடைவினை தாழ்ந்து இறுதியில் அவையிரண்டும் தனித்தியங்கும் தன்மையைப் பெறுகின்றன.

ஸ்காட்கி வழுவின் செறிவைப்போல, ஒரு குறிப்பிட்ட வெப்பநிலையில் வெப்பச் சமநிலையில் இருக்கும் பிரென்கெல் வழுக்களின் செறிவையும் கணக்கிட்டறியலாம். இயல்பான அமைவிடத்திலிருந்து ஓர் அணுவை அகற்றி, ஒரு சிற்றிடைவெளியில் இணைக்கத் தேவைப்படும் ஆற்றலை E_i என்போம். படிகத்தில் N அணுக்களும், அதன் கட்டமைப்பில் N_i சிற்றிடைவெளிகளும் இருப்பதாகக் கொள்வோம். இவற்றைக் கொண்டு அமைப்பில் T என்ற வெப்பநிலையில் n பிரென்கெல் வழுக்கள் இருப்பதாகக் கருதுவோம். இவற்றை உருவாக்கத் தேவையான ஆற்றல் nE_i ஆகும்.

N அணுக்களில் n வெற்று இடங்களை உருவாக்க இருக்கு வழிகளின் எண்ணிக்கை $N!/(N-n)!n!$. அதுபோல N_i சிற்றிடைவெளிகளில் n பிரென்கெல் வழுக்களை உருவாக்க இருக்கும் வழிகளின் எண்ணிக்கை $N_i!/(N_i-n)!n!$. எனவே பிரென்கெல் வழுக்களை உருவாக்க இருக்கும் வழிகளின் மொத்த எண்ணிக்கை இவற்றின் பெருக்கல் பலனாகும்.

$$\frac{N!}{(N-n)!\,n!} \times \frac{N_i!}{(N_i-n)!\,n!}$$

பிரென்கெல் வழுக்களை உருவாக்குவதால் ெ□ல்ம்□ோல்ட்ஸ் இயலாற்றலில் ஏற்படும் மாற்றத்தை

$$G = U - TS$$

எனக் குறிப்பிடலாம். இதில் $U = nE_i$, $S = k_B \log p$. எனவே

$$G = nE_i - k_BT \log \frac{N!}{(N-n)!\,n!} \times \frac{N_i!}{(N_i-n)!\,n!}$$

ஸ்டெர்லிங் தோரயத்தைப் பயன்படுத்தி,

$$\log \frac{N!}{(N-n)!\,n!} \times \frac{N_i!}{(N_i-n)!\,n!} = N\log N + N_i \log Ni - (N-n)\log(N-n) - (N_i-n)\log(N_i-n) - 2n\log n$$

வெப்பச்சமநிலையில் $(\partial G/\partial n)_T = 0$, எனவே

$$(\partial G/\partial n)_T = 0 = E_i - k_BT \log \frac{(N-n)(N_i-n)}{n^2}$$

பொதுவாகப் பிரென்கெல் வழுக்களின் எண்ணிக்கையைவிட, அமைப்பிலுள்ள அணுக்களின் ¡எண்ணிக்கையும், சிற்றிடைவெளியும் அதிகமாக இருக்கும். $N >> n$, $N_i >> n$. எனவே

$$E_i - k_BT \log \frac{NN_i}{n^2} = 0$$

$$\frac{E_i}{k_BT} = \log \frac{NN_i}{n^2} = \log(NN_i) - 2\log n$$

அல்லது $$\log n \;\frac{1}{2}\; \log(NN_i) - \frac{E_i}{2k_BT}$$

$$n = (NN_i)^{1/2}\, e^{-Ei/2k_BT} \qquad (2.21)$$

இத்தொடர்பு, பிரென்கெல் வழு (NN_i)ன் வர்க்க மூலத்திற்கு நேர்விகிதத்தில் இருக்கிறது என்றும், சார்பிலாசுழி வெப்பநிலைக்கு மேற்பட்ட எந்தவொரு வெப்பநிலையிலும் பிரென்கெல் வழுக்கள் படிகத்தில் இருக்குமென்றும், வெப்பநிலை அதிகரிக்க, e-ன் அடுக்கில் அதிகரிக்கிறது என்றும் தெரிவிக்கிறது.

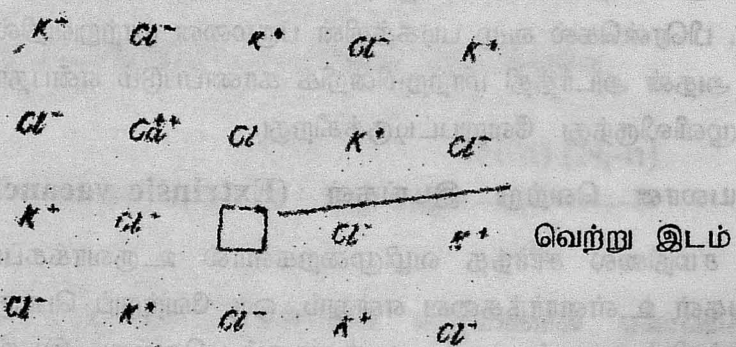
பொதுவாக ஒரு படிகத்தில் இருவகையான வழுக்களும் சேர்ந்திருக்கும் என்றாலும், அவற்றின் உருவாக்கத்திற்குத் தேவையான ஆற்றல் வெவ்வேறாக இருப்பதால், இவற்றில் ஒன்று மற்றொன்றைவிட மேலோங்கியிருக்கும். தூய கார உப்புக்களில் ஸ்காட்கி வழுவும், 700 K வெப்பநிலைக்குக்கீழ், சில்வர் ஹாலைடுகளில் பிரென்கெல் வழுவும் மேலோங்கி இருப்பதைக் குறிப்பிடலாம். பிரென்கெல் வழு படிகத்தின் பருமனை மாற்றுவதில்லை என்பதாலும், அதன் அடர்த்தி மாற்றமின்றிக் காணப்படும் என்பதாலும் ஸ்காட்கி வழுவிலிருந்து வேறுபட்டிருக்கிறது.

2.12 புறவியலான வெற்று இடங்கள் (Extrinsic vacancies)

வெப்பச் சமநிலை சார்ந்த வழிமுறைகளால் உருவாக்கப்படும் வெற்று இடங்கள் உள்ளார்ந்தவை என்றும், ஒரு வேற்றுப் பொருளை அயனிப்படிகத்தில் கலப்பதால் உருவாகும் வெற்று இடங்கள் புறவியலானவை என்றும் கூறப்படும். பொதுவாக ஓரயணி இல்லாத மூலக்கூறுகளாலான வேற்றுப்பொருளைப் படிகத்துடன் கலப்பார்கள். இது படிகத்தில் அயனி இல்லாத நிலையிலேயே படிகிறது. எடுத்துக்காட்டாக அயனிப்படிகம் பொட்டாசியம் குளோரைடு (KCl) போன்ற ஈரணு மூலக்கூறுகளாலான காரஉப்பாக இருந்தால், அதில் கால்சியம் குளோரைடு ($CaCl_2$) போன்ற மூவணு மூலக்கூறுகளாலான பொருளைச் சேர்ப்பார்கள். இதில் இரு cl^- அயனிகளும் (Cl^{2+}) ஒரேயொரு கால்சிய அயனியும் இருப்பதால், ஒரு நேர்மின் அணி காணப்படாததாக இருக்கிறது. (படம் 2.26)

இனி வேற்றுப்பொருள் படிகத்தோடு சேரும்போது எங்ஙனம் வெற்று இடங்கள் தோற்றுவிக்கப்படுகின்றன எனப் பார்ப்போம். CaCl மூலக்கூறு KCl படிகத்தின் புறப்பரப்பில் வைக்கப்பட்டிருப்பதாகக் கொள்வோம். (Ca^{2+}) அயனி படிகத்தினுள் ஊடுபரவி, ஓர் நேர்மின் அயனிக்கான வெற்று இடத்தில் படிகிறது. அதாவது K^+ இருக்கவேண்டிய இடத்தில் அமைகிறது. எண்ணிக்கையால் மிகவும்

அதிகமாக இருக்கும் குளோரின் அயனிகளைப் படிகத்தின் உட்பகுதிக்குள் உட்புகுத்தத் தேவைப்படும் ஆற்றல் அதிகமாக இருப்பதால் அந்த இரு குளோரின் அயனிகளும், படிகத்தின் புறப்பரப்பிலேயே KCl–ன் கட்டமைப்பில் இணைந்து தங்கியிருக்கின்றன. அதனால் இது படிகத்தின் உட்பகுதியை நேர்மின்னூட்டம் கொண்டதாகவும் படிகப் பரப்பை எதிர்மின்னூட்டம் கொண்டதாகவும் செய்கிறது. பொட்டாசியம் ஓரலகு நேர் மின்னூட்டம் கொண்டது. ஆனால் கால்சியம் ஈரலகு நேர் மின்னூட்டம் கொண்டது. ஆதனால் K^+க்கு பதிலாக Ca^{2+} அமையும்போது, ஒரு நிலையற்ற தன்மை தூண்டப்படுகிறது.



படம் 2.26 KCl படிகத்தில் $CaCl_2$ஆல் அணித்தளத்தில் வெற்றுஇடம் உருவாதல்

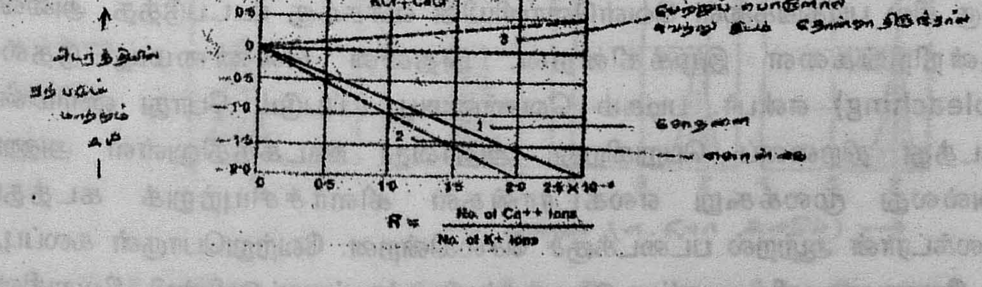
KCl படிகம் பொதுவாக பிரென்கெல் வழுக்களைக் கொண்டிருக்கிறது. அதாவது சிற்றிடைவெளி சார்ந்த K^+ அயனிகளையும், நேர்மின் அயனிகளான வெற்று இடங்களையும் கொண்டுள்ளது. சிற்றிடைவெளியிலுள்ள இரு K^+ அயனிகள் புறப்பரப்பை நோக்கி ஊடுபரவி அங்குள்ள இரு குளோரின் அயனிகளுடன் இணைந்து பரப்பின் எதிர் மின்னூட்டத்தைச் சமன் செய்கின்றன. அதனால் ஏற்படும் நேர்மின் அயனிக்கான வெற்றுஇடம், உட்பகுதியில் Ca^{2+}ன் நேர் மின்னூட்டத்தை விட்டு வைக்கிறது.

கொடுக்கப்பட்ட ஒரு வெப்பநிலையில் படிகத்தில் இருக்கும் பிரென்கெல் வழுக்களின் எண்ணிக்கை மாறாதது. எனவே வெப்பச் சமநிலையில் புறப்பரப்பை நோக்கி நகர்ந்து குளோரிகனோடு இணைந்த அந்த ஊடுபரவிய K^+ அய்னிகளுக்குப் பதிலீடு செய்ய இரு புதிய பிரென்கெல் வழுக்கல் உருவாகவேண்டியது அவசியமாயிருக்கிறது.

அதாவது படிகத்தின் உட்பகுதியில் இரு புதிய நேர்மின் அயனிக்கான வெற்று இடங்கள் தோன்றுகின்றன. ஒரு வெற்று இடத்தில் Ca^{2+} அயனி இடம்பெறுவதால், மொத்தத்தில் ஒவ்வொரு மூலக்கூறு சேர்க்கைக்கும் ஒரு நேர்மின் அயனிக்கான வெற்று இடம் உருவாகிறது எனலாம்.

இப்பொழுது ஓர் ஐயம் எழுகிறது. கால்சிய அயனி KCl படிகத்தில் ஊடுபரவி, K^+ அயனிபோல உண்மையிலேயே செயல்படுகிறதா? இதனைத்தவிர கால்சியம்(20), பொட்டாசியம்(19)ஐ விடச் சற்று பெரியது, கனமானது, கூடுதலாய் ஒரு புரோட்டானை அணுக்கருவில் கொண்டுள்ளது, என்பதால் கூலும் கவர்ச்சி விசை அதிகமாகிப் படிக மாறிலியில் சிறிது குறைவு ஏற்படுகிறது என்பதும் தெரிந்ததே.

சோதனை முறையில் வெற்று இடங்கள் தோன்றியிருப்பதைப் படிகத்தின் அடர்த்தியை அளவிட்டு மதிப்பிடுகிறார்கள். படம் 2.27இன் KClஉடன் $CaCl_2$வைச் சேர்ப்பதால் ஏற்படும் அடர்த்தி மாற்றத்தை ஓர் வரைபடமாகக் காட்டுகின்றது. இதில் உள்ள திடக்கோடு சோதனை மதிப்புகளையும், மேற்புறமுள்ள புள்ளிக்கோடு வேற்றுப் பொருள் சேர்க்கையினால் வெற்று இடம் ஏதும் தோன்றாதிருந்தால் ஏற்படும் மாற்றத்தையும் (அப்போது ஊடகத்தின் அடர்த்தி கனமான கால்சிய அயனியால் அதிகரிக்கும்), கீழ்ப்புறமுள்ள புள்ளிக்கோடு கொள்கைவாயிலான மதிப்புகளையும் குறிப்பிடுகின்றன. சோதனை மற்றும் கொள்கை மதிப்பும் ஏறக்குறைய ஒன்றியிருக்கின்றன. ஒவ்வொரு ஈரிணைதிறன் கொண்ட நேர்மின் அயனியும் அதனுடன் கூடுதலாக ஒரு வெற்று இடத்தையும் கொண்டு வருகிறது என்பதை உறுதிசெய்வதாய் இருக்கிறது.



படம் 2.27 KCl + $CaCl_2$ன் அடர்த்தியில் ஏற்படும் மாற்றம்

கார மற்றும் சில்வர் ஹாலைடு படிகங்களில் அவற்றின் மின்கடத்து திறனை அதிகரிக்க, அதில் புறவியலான வெற்று இடங்கள் தோன்றுமாறு தகுந்த வேற்றுப்பொருளைச் சேர்ப்பார்கள். இவற்றில் மின்கடத்தல் என்பது எலக்ட்ரான்களின் இயக்கத்தால் ஏற்படுவதில்லை, மாறாக அயனிகளின் இயக்கங்களால் ஏற்படுகிறது. எனவே வெற்று இடங்கள் என்பன, குறைக்கடத்திகளில் மின்துளைபோன்று செயல்படுகின்றன என்று கூறலாம்.

2.13 நிற மையங்கள் (Colour Centres)

குறைபாடுகளின்றித் தூய நிலையிலுள்ள NaCl, KCl போன்ற அயனிப் படிகங்கள், நிறமாலையின் கட்புலனுணர் ஒளி அலைகளுக்கு ஒளி உட்புகு ஊடகமாக விளங்குகின்றன. எனினும் தூய்மையற்ற நிலையில் அப்படிகங்கள் பெரும்பாலும் ஏதாவது சிறப்பு நிறங்கொண்டு திகழ்கின்றன. இது வேற்றுப்பொருள் கலப்பால் படிகங்களை நிறமூட்டமுடியும் என்பதைத் தெரிவிக்கக் கூடியதாக இருக்கிறது. ஹென்றிபெக்குரல் என்பார் ஒரு மின்னிறக்கக் குழாய்க்கு அருகில் வைக்கப்பட்ட ஒளி உட்புகு NaCl படிகம் மஞ்சள் நிறத்துடன் ஒளிர்வதைக் கண்டார். சோடியம் குளோரைடு படிகத்தைச் சோடிய ஆவியில் வைத்துச் சூடுபடுத்த மஞ்சள் நிறம் பெறுகிறது. KCl, பொட்டாசிய ஆவியில் நீலநிறம் பெறுகிறது. படிகங்களில் இருக்கும் வேற்றுப் பொருள் மற்றும் பல்வேறு புள்ளி வழுக்களினால் நிறமாலையின் கட்புலனுணர் பகுதியில் உட்கவர் பட்டை (absorbtion band) என்றழைக்கப்படும் ஒரு சில குறிப்பிட்ட அலைநீள நெடுக்கையில் ஆற்றல் உட்கவரப்படுவதே இதற்குக் காரணம் என்பதைப் பிற்பாடு அறிந்து கொண்டனர். இது படிகங்கள் நிறமூட்டப்படுதல் என்பது படிகங்களிலுள்ள குறைபாடுகளினால் விளைகிறது என்பதைத் தெளிவுபடுத்தியது. மேலும் நிறமுடைய ஒரு சில படிகங்களை வெள்ளொளியின் வீச்சுக்கு உட்படுத்த, அவை தன் நிறங்களை இழக்கின்றன. இதனை வெண்மையூட்டுதல் (bleaching) என்பர். படிகம் வெண்மையூட்டப்படும் போது ஒளிமின் கடத்து திறனைப் பெறுகிறது. அதாவது ஊடகத்திலுள்ள அணு அல்லது மூலக்கூறு எலக்ட்ரான்கள் கிளர்ச்சியுற்றுக் கடத்து எலக்ட்ரான் ஆற்றல் பட்டைக்குச் செல்கின்றன. வேற்றுபொருள் கலப்பு, உலோக அயனிகளைக் கூடுதலாகச் சேர்த்தல் மட்டுமின்றி, வேறுசில வழிகளினாலும் படிகங்களை நிறமூட்ட முடியும். படிகங்களை எக்ஸ்

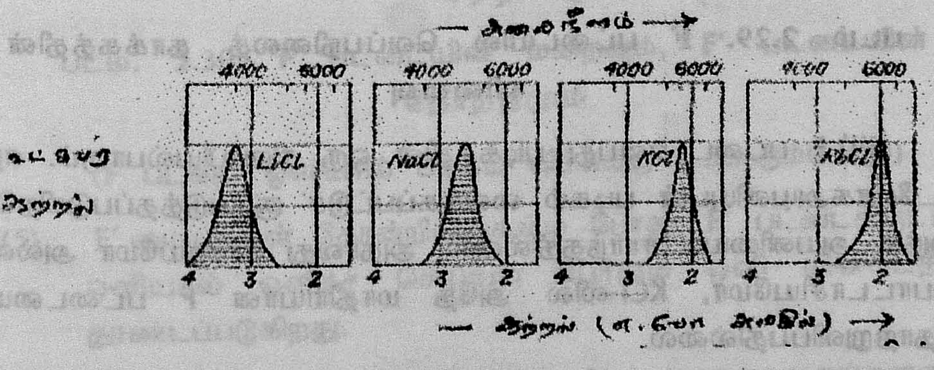
கதிர், காமாக் கதிர், புறஊதாக் கதிர் போன்ற ஆற்றல் மிக்க கதிர்வீச்சுகளுக்கு உட்படுத்த அவை நிறமூட்டப்படுகின்றன. மின்னாற்பகுப்பு மூலமாகவும் நிறமூட்ட முடியும்.

நிறமூட்டப்படும் வழி எவ்வழியாக இருப்பினும், படிகம் நிறம் பெறுகிறது என்றால், அது நிறமையங்களைக் கொண்டிருக்கிறது என்று அர்த்தம். நிறமையம் என்பது ஒளியை உட்கவரக்கூடிய அணித்தளக் குறைப்பாடுகளாகும். வெவ்வேறு நிறமூட்டும் வழிமுறைகளினால் வெவ்வேறு நிற மையங்களைத் தோற்றுவிக்க முடியும். ஒரு படிகத்தைக் கூடுதலான கார உலோகங்களின் ஆவியில் சூடுபடுத்துவதினால் ஒரு எளிய நிறமையத்தை உண்டாக்க முடியும். இதனை F மையம் என்பர். நிறத்திற்கான ஜெர்மன் மொழிச் சொல்லின் முதலெழுத்தே 'F' என்ற அடைமொழியை இதற்குத் தந்தது.

F-மையங்கள்

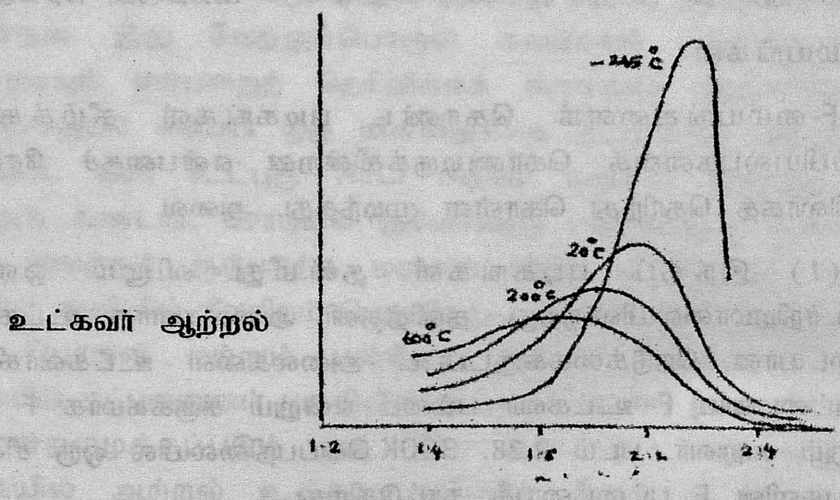
F-மையங்களைக் கொண்ட படிகங்கள் கீழ்க்காணும் சிறப்பியல்புகளைக் கொண்டிருக்கின்றன என்பதைச் சோதனை வாயிலாகத் தெரிந்து கொள்ள முடிந்தது. அவை

(1) இந்தப் படிகங்கள் தன்மீது விழும் ஒளியின் தொடர்நிறமாலையிலிருந்து, தனித்தனி அலைகளாக உட்கவராது, பட்டையான நெடுக்கைக்குட்பட்ட அலைகளை உட்கவர்கின்றன. இப்பட்டையை F உட்கவர் பட்டை என்றும் சுருக்கமாக F பட்டை என்றும் கூறுவர். படம் 2.28. 300K வெப்பநிலையில் ஒரு சில கார உப்புகளின் F பட்டையைக் காட்டுகிறது.



படம் 2.28. சில கார உப்புகளில் F பட்டையின் தோற்றம்

கார உப்புகளின் F பட்டையின் தோற்றத்திலிருந்து நாம் சில உண்மைகளைத் தெரிந்து கொள்ள முடிகிறது. (i) F பட்டை, மைய அலைநீளத்தைப் பற்றிச் சீர்மை கொண்டதாக இல்லை. மைய அலைநீளம் என்பது, எந்த அலைநீளத்தில் ஆற்றல் பெருமமாக உட்கவரப்படுகின்றதோ அந்த அலைநீளமாகும். குறைந்த அலைநீளப்பக்கத்தில் வால் போன்று ஒரு பகுதி நீட்டிக் கொண்டிருக்கிறது. இதற்கு K பட்டை என்று பெயரிட்டுள்ளனர். (ii) வெப்பநிலை அதிகரிக்கும் போது, உட்கவர் பட்டையின் முகடு தாழ்ந்த ஆற்றல் பக்கம் இடம் பெயர்கிறது. மேலும், பட்டையின் அகலமும் அதிகரிக்கிறது. இது படம் 2.29இல் KBrஇன் F பட்டைமூலம் காட்டப்பட்டுள்ளது.



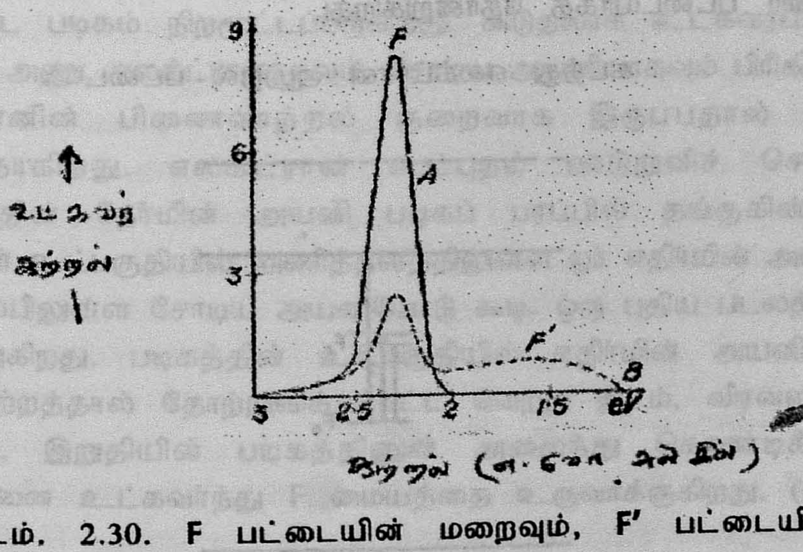
படம் 2.29. F பட்டையில் வெப்பநிலைத் தாக்கத்தின் விளைவு

(iii) F பட்டை என்பது படிகத்தின் ஒரு சிறப்பியல்பாகும். எந்த உலோகஅயனியுடன் படிகம் வைக்கப்பட்டுச் சூடுபடுத்தப்படுகிறதோ அந்த அயனியைச் சார்ந்ததில்லை. அதாவது சோடியமோ அல்லது பொட்டாசியமோ, KCl-லில் அதே மாதிரியான F பட்டையைத் தோற்றுவிப்பதில்லை.

(2). வேதிச்சமானப்படி அமைந்த சரியான படிகத்தை எக்ஸ்கதிர் வீச்சுக்கு உட்படுத்தி, F பட்டையினால் நிறமூட்ட முடியும். ஆனால் வெப்பப்படுத்தி இந்த நிறத்தை நீக்கி வெண்மைப்படுத்தி விடலாம். மிகையாக ஊட்டப்பட்ட உலோக அயனிகளினால் ஏற்படும் நிறத்தை இதுபோல நீக்கி விட முடிவதில்லை.

(3) கதிர்வீச்சினால் நிறமூட்டப்பட்ட ஒரு சில குறிப்பிட்ட படிகங்களை, F பட்டையில் அமைந்திருக்கும் ஒளியின் வீச்சுக்கு உட்படுத்தி நிறமிழக்கச் செய்யமுடியும்.

(4) நிறங்கொண்ட படிகங்களை F பட்டைக்குட்பட்ட ஒளியால் ஒளிரச் செய்யும்போது அவை ஒளி மின்கடத்தலை வெளிப்படுத்துகின்றன. F பட்டைக்குட்பட்ட ஒளியால் தீவிரமாக ஒளிரச் செய்யும்போது F பட்டை குறைந்து பதிலாக F' என்ற புதிய பட்டை தோன்றுகிறது. F' பட்டை, F பட்டையை விட அகலமாயிருக்கிறது. (படம் 2.30)



படம். 2.30. F பட்டையின் மறைவும், F' பட்டையின் தோற்றமும்

(F பட்டை ஒளியால் படிகம் வீச்சுக்கு உட்படும்போது)

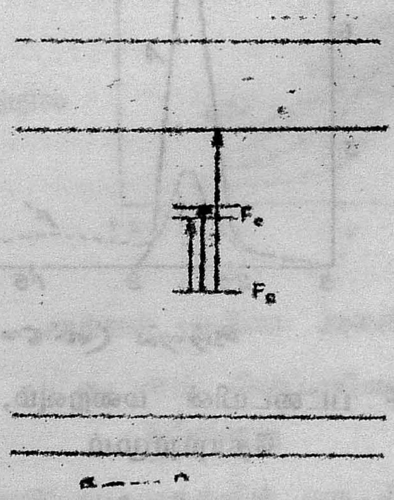
(5) F' மையங்கள் தோன்றியிருக்கும் போது, F' பட்டைக்குட்பட்ட ஒளியால் ஒளிரச் செய்யும் போதும் ஒளி மின்கடத்தல் தூண்டப்படுகிறது.

(6) நிறமூட்டப்பட்ட படிகங்கள், நிறமூட்டப்படாத படிகங்களைவிட அடர்த்தி குறைவாக இருக்கின்றன.

F-நிற மையத்தை உருவாக்குதல்

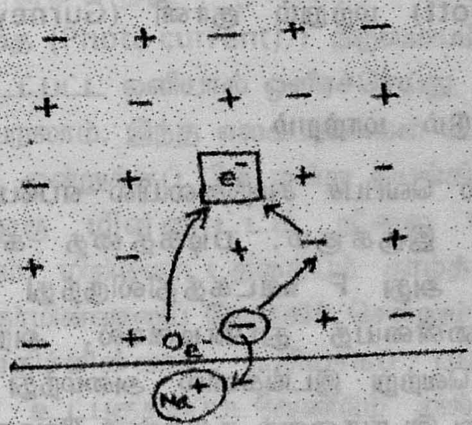
F-நிறமையம் என்பது எதிர்மின் அயனிக்கான வெற்று இடத்தில் ஓர் எலக்ட்ரான் சிறைப்படுத்தப்பட்டிருப்பதாகும். இதன் குவாண்டம் ஆற்றல் நிலைகள் தவிர்க்கப்பட்ட ஆற்றல் பட்டையில் அமைந்திருக்கும். இந்த ஆற்றல் நிலைகள், வெற்று இடத்தின் சுற்றுச் சூழலைப் பொறுத்தது என்பதால் அவை படிகத்தின் கட்டமைப்போடு தொடர்புடையன என்றும், அந்த எலக்ட்ரானை வழங்கிய உலோக அயனியோடு தொடர்பில்லை என்றும் கூறலாம். படிகத்தை வெள்ளொளியால் ஒளிரச் செய்யும்போது, சில ஒளி அலைகள், சிறைப்பட்டிருக்கும் எலக்ட்ரானைக் கிளர்ச்சியூட்டித் தவிர்க்கப்பட்ட ஆற்றல்பட்டைப் பகுதிக்குள் இருக்கும் உயர் குவாண்டம் ஆற்றல் நிலைக்கு எடுத்துச் செல்லலாம். படம் 2.31. உண்மையில் பல உயர் குவாண்டம் ஆற்றல் நிலைகளும், சுற்றுச் சூழலைப்பொறுத்துச் சற்று மாறுபட்ட குவாண்டம் ஆற்றல் நிலைகளும் இருப்பதால், F-உட்கவர் பட்டையாகத் தோன்றுகிறது.

கடத்து எலக்ட்ரான் ஆற்றல் பட்டை



இணைதிற எலக்ட்ரான் ஆற்றல் பட்டை

படம்: 2.31. படிகக் குறைபாடு இருக்கும்போது ஏற்படும் ஆற்றல் பரிமாற்றங்கள்



படம்: 2.32. F மையம் உருவாதல்

படிகம், அதன் சேர்மானப் பொருளின் ஏதாதொரு சேர்ம அயனியைப் பெற்றிருக்கும் போது, அது நிறமையத்தைப் பெறுகிறது. NaCl படிகத்தைச் சோடிய ஆவியில் சூடுபடுத்தி அதனை விரைந்து குளிர்வூட்ட படிகம் நிறமூட்டப்படுகிறது. கூடுதலாக உட்கவரப்பட்ட சோடியம் அணு, எலக்ட்ரானாகவும், சோடிய அயனியாகவும் பிரிகிறது. எலக்ட்ரானின் பிணைவாற்றல் குறைவாக இருப்பதால் இது இயலுவதாகிறது. எலக்ட்ரான் உட்புறம் ஊடுருவிச் செல்ல சோடியத்தின் நேர்மின் அயனி படிகப் பரப்பில் தங்குகின்றது. படிகத்தின் உட்பகுதியில் அணித்தளத்திலுள்ள ஓர் எதிர்மின் அயனி, படிகப்பரப்பிலுள்ள சோடிய அயனியோடு கூடி, ஒரு புதிய படலத்தை ஏற்படுத்துகிறது. படிகத்தின் உட்பகுதியில் எதிர்மின் அயனியின் வெளியேற்றத்தால் தோற்றுவிக்கப்பட்ட வெற்று இடம், விரவலுக்கு உட்பட்டு, இறுதியில் படிகத்தினுள் அலைந்து கொண்டிக்கும் எலக்ட்ரானை உட்கவர்ந்து F மையத்தை உருவாக்குகிறது. (படம் 2.32).

தொடக்கத்தில் படிகத்தில் சம அளவில் நேர்மின் அயனியும், எதிர்மின் அயனியும் இருக்கும். இந்த வேதிச்சமானம் படிகத்தில் கூடுதலாய்ச் சேரும் சோடியத்தின் நேர்மின் அயனிகளால் பாதிக்கப்படுகிறது. இதன் விளைவாக, குளோரின் எதிர்மின் அயனிக்கான வெற்று இடங்கள் தோன்றுகின்றன. சோடியத்தின் இணைதிற எலக்ட்ரான் இவ்வெற்று இடங்களில் நிலைப்பட முயலுவதால் Fமையம் தோன்றுகின்றது எனலாம். F மையத்திற்கான

இந்த மாதிரியமைப்பு டிபோயர் (DeBoer) என்பாரால் தெரிவிக்கப்பட்டு, பின்னர் மோட் (Mott) மற்றும் குர்னி (Gurney) என்பாரால் திருத்தப்பட்டது.

அடர்த்தியில் ஏற்படும் மாற்றம்

NaCl படிகத்தில் வெப்பச் சமநிலையில் எப்போதும் சில Cl^- வெற்று இடங்கள் இருக்கும். படிகத்தை கதிர்வீச்சுக்கு உட்படுத்தும்போது, அது F ஊடகத்திலிருந்து எலக்ட்ரானை வெளியேற்றும் வினையைத் தூண்டினால், அந்த விடுபட்ட எலக்ட்ரான்கள் Cl^- வெற்று இடங்களில் அமைந்து F மையத்தை ஏற்படுத்தலாம். வெற்று இடங்களைக் கூடுதல் உலோக அயனிகளால் உருவாக்கும்போது, படிகத்தின் அடர்த்தி குறைகிறது. எக்ஸ்கதிர் விளிம்பு விளைவினால் படிகத்தின் அடர்த்தியில் ஏற்படும் மாற்றத்தை அளவிட்டறியலாம்.

F- மையமும் படிகத்தின் காந்தப் பண்பும்

கார உப்புப் படிகம் இயல்பாக ஒரு டயா காந்தமாக இருக்கும். ஏனெனில் அதிலுள்ள அயனிகள் யாவும் முழுமைபெற்ற எலக்ட்ரான் கூடுகளைக் கொண்டிருக்கும். ஆனால் நிறமையம் கொண்டுள்ள படிகத்தில், நிறமையத்திலுள்ள சிறைப்பிடிக்கப்பட்ட ஜோடியில்லா எலக்ட்ரானால் சிறிது பாரா காந்தத்தன்மையைப் பெறுகிறது. அதனால் Fமையங்களின் கட்டமைப்பை, சிறைப்பட்டுள்ள எலக்ட்ரானின் அலைச்சார்பு பற்றித் தெரிவிக்கும் எலக்ட்ரான் பாரா காந்த ஒத்ததிர்வு நிறமாலை மூலம் அறிந்து கொள்ள முடியும்.

பிற வகையான நிற மையங்கள்

F மையம் தவிர்த்து, சிறைபிடிக்கப்பட்ட எலக்ட்ரான்களைக் கொண்டுள்ள வேறு சில நிறமையங்களும் உள்ளன. F′ நிறமையம், V நிற மையம் போன்றவற்றைக் குறிப்பிட்டுச் சொல்லலாம்.

F′ நிறமையம்

F மையத்தில் முதல் கிளர்ச்சியுற்ற ஆற்றல் நிலையிலுள்ள எலக்ட்ரான், வெப்பக்கிளர்ச்சியால் கடத்து எலக்ட்ரான் ஆற்றல் பட்டைக்குச் செல்லும்போது ஒளிமின் கடத்தல் விளைகிறது என்று பார்த்தோம். முதல் கிளர்ச்சியுற்ற ஆற்றல் நிலை கடத்து எலக்ட்ரான் ஆற்றல் பட்டைக்கு மிக அருகில் இருப்பதால் இது

இயலுவதாயிருக்கிறது. ஒளிமின் விளைவாலான ஒளி மின்னோட்டத்தை (Photo current), F நிறமையம் கொண்ட படிகத்தை F பட்டைக்கு உட்பட்ட ஒளியால் ஒளிரச்செய்து, ஒரு புற மின்புலத்தை ஏற்படுத்திப் பெறலாம். இந்த எலக்ட்ரான்கள் படிகத்தினுள் இயங்கிச் செல்லும்போது, ஒன்றுக்குப் பின் ஒன்று தயங்கிச் செல்வதால் ஊடக வெளியில் ஒரு மின்னூட்டம் நிலை கொள்கிறது. இது மின்புலத்தையும், மின்னோட்டத்தையும் தாழ்த்திவிடுகிறது. இதைத் தடுப்பதற்கு, நேர்மின்வாயை நோக்கிச் செல்லும் எலக்ட்ரான்களுக்குப் பதிலீடாக, எதிர்மின்வாய் வழியாகப் படிகத்தினுள் வேற்று எலக்ட்ரான்கள் உட்புகுத்தப்படவேண்டும் அல்லது மின்னாற்பகுபடு பொருளாலான கடத்தலாலும் சமன் செய்யலாம். படிகத்தின் விழும் ஒளியின் செறிவைத் தாழ்த்தியும், விட்டுவிட்டு விழுமாறு செய்தும், இவ்விடர்ப்பாட்டைக் களையலாம்.

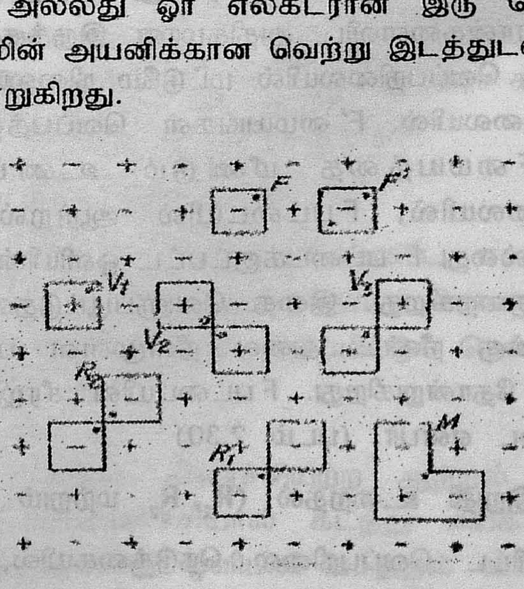
புறமின் புலம் இல்லாத நிலையில், இந்தக் கடத்து எலக்ட்ரான் F′ மையத்தால் சிறைப் பிடிக்கப்படுகிறது. எதிர்மின் அயனிக்கான வெற்று இடத்தில் இரு எலக்ட்ரான்கள் சிறைப்பட்டிருந்தால் அது F′ மையமாகும். எனவே F′ மையம் என்பது இருபிணை எலக்ட்ரான்களுடன் ஒரு நேர்மின் அயனிக்கான வெற்று இடத்தைப் பெற்றிருக்கிறது. ஒரு வெற்று இடத்தில், இரு எலக்ட்ரான்கள் வலுவாகப் பிணைக்கப்பட்டிருக்க முடியாது என்பதால் இதன் ஆற்றல் F மைய எலக்ட்ரான்களைவிட அதிகமான இருக்கும். அதனால் F′ மையம் தாழ்நத வெப்பநிலையில் மட்டுமே நிலையாக இருக்கிறது. உயர் வெப்பநிலையில் F′ மையங்கள் வெப்பத்தால் சேர்மானச் சிதைவுற்று F மையத்தை மீண்டும் உண்டாக்குகின்றன. அறைவெப்பநிலையில், F பட்டையில் ஆற்றல் உட்கிரகிப்பு, வெள்ளொளி அல்லது F பட்டைக்குட்பட்ட ஒளியின் வீச்சுக்குப்பிறகு படிப்படியாகக் குறைகிறது. இதை வெளுப்பூட்டுதல் என்பர். இதன் பிறகு F பட்டைக்கு நீண்ட அலை நீளமுள்ள பக்கத்தில் புதிய பட்டையொன்று தோன்றுகிறது. F பட்டையின் சீரழிவால் தோன்றும் இதனை F′ பட்டை என்பர். (படம் 2.30)

F மையங்கள் இறுதி உறைதல் (R_1, R_2 மற்றும் M மையங்கள்)

ஒரு குறிப்பிட்ட வெப்பநிலை நெடுக்கையில், F மையத்துடன் கூடிய படிகத்தை, F பட்டைக்குட்பட்ட ஒளியால் ஒளிரச் செய்யும் போது, இறுகி உறையும் நிலை ஏற்படுகிறது. இதன் விளைபொருள்

கார உலோகத்தின் மிதவலான அல்லது சூழ்ம நிலையிலான துகள்களாக இருக்கும். சோடியம் குளோரைடு, மற்றும் பொட்டாசியம் குளோரைடு போன்ற கார உப்புகளுக்கு அக்குறிப்பிட்ட வெப்பநிலை, அறைவெப்பநிலை அல்லது அதனைவிடச் சிறிது அதிகமாக இருக்கிறது. இவ்வழிமுறையில், F பட்டைக்கு உயர் அலைநீளமுள்ள பகுதியில் பல புதியபட்டைகள் தோன்றுகின்றன

F மையத்தின் அயனியாக்கத்தால் உண்டாகும் எதிர்மின் அயனிக்கான வெற்று இடம், நேர்மின் அயனிக்கான வெற்று இடத்துடன் இணைந்து, ஜோடியாகின்றன. இது ஊடகத்தில் மிகவும் எளிதாக நகர்ந்து செல்லும் திறன் கொண்டுள்ளது என்பதால் எதிர்மின் அயனிக்கான வெற்று இடத்தைக் கடத்திச் செல்லக் கூடியதாக இருக்கிறது. புதிய உட்கவர் பட்டைகள், F மையமும் வெற்று இடங்களும் சேர்வதால் ஏற்படுகின்றன. இறுதி உறைதலினால் முதல் விளைபொருளாக R_1,R_2 பட்டைகள் நிறமாலையின் சிவப்பு ஒளிப்பகுதியிலும், M பட்டை அகச்சிவப்புப் பகுதியிலும் தோன்றுகின்றன. F மையம் ஒரு நேர்மின் அயனிக்கான வெற்று இடத்தோடு சேர்வதாலோ அல்லது இரு நேர்மின் அயனிக்கான வெற்று இடத்தோடு ஓர் எலக்ட்ரான் கூடுவதாலோ R_1 பட்டை தோன்றலாம். F மையங்கள் ஒன்றிணைவதால் தோன்றுவது R_2 பட்டை. F மையம், நேர் மற்றும் எதிர்மின் அயனிக்கான ஜோடி வெற்று இடத்துடன் இணைவதாலோ, அல்லது ஓர் எலக்ட்ரான் இரு நேர்மின் அயனி மற்றும் ஒரு எதிர்மின் அயனிக்கான வெற்று இடத்துடன் கூடுவதாலோ M பட்டை தோன்றுகிறது.



படம். 2.33. **F, F1, R1, R2, M – மையங்கள்**
(கரும் புள்ளி எலக்ட்ரானாகும்)

V-மையம்

இதுவரை கூடுதலாகக் காரஉலோக அயனியைப் பெற்றிருக்கும்போது படிகத்தில் விளையும் மின்னணுவியல் பண்புகளைப் பற்றிப் பார்த்தோம். கார உப்புப் படிகங்களை ஹாலஜன் ஆவியில் சூடுபடுத்த, ஹாலஜன் அயனிகள் படிகத்தில் கூடுதலாய்ச் சேருகின்றன. நேர்மின் அயனிக்கான வெற்று இடம் எப்படி எலக்ட்ரானைச் சிறைபிடிக்கிறதோ அது போல இந்த எதிர்மின் அயனிக்கான வெற்று இடம் மின்துளையைச் சிறைப்படுத்துகிறது. இவ்விடம் பொதுவாக நேர்மின் அயனிக்கான வெற்று இடத்திற்கு அருகில் அமைந்திருக்கும். நேர்மின் அயனிக்கான வெற்று இடத்தில் சிறைப்படும் மின்துளை V மையம் எனப்படும். இவற்றின் தோன்றலை நாம் F மையத்திற்கான அதே விளக்கத்தைக் கொண்டே விவரிக்கலாம். F மையத்தில் வரும் எலக்ட்ரானுக்குப் இதில் மின்துளைகள் உள்ளன என்பது மட்டும் வேறுபாடாகும்.

2.14 வரி வழு – நழுவலுக்கான வரையறை

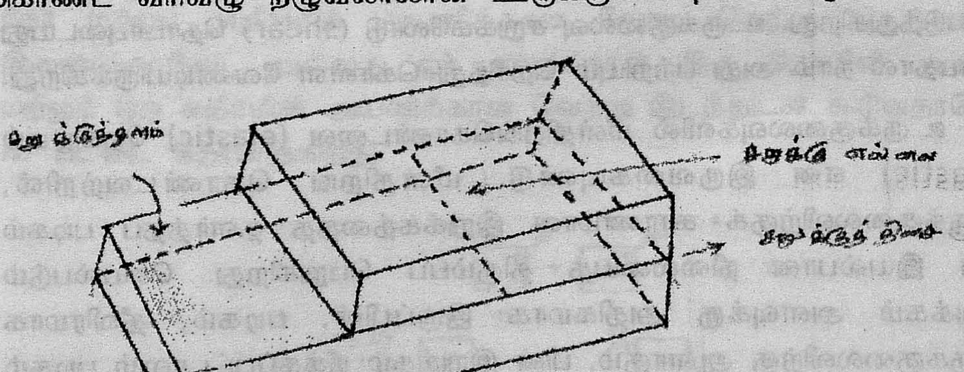
நழுவல் என்பது அணித்தள வரிசைகளின் அலைச்சீர்மை படிகத்தின் ஏதாவதொரு திசையில் அல்லது திசைகளில் சிதைந்து தடைப்பட்டிருப்பதாகும். நழுவல் படிகத்தில் உருக்குலைவை ஏற்படுத்துகிறது. உருக்குலைவு சறுக்கலோடு (shear) தொடர்புடையது என்பதால் நாம் அது பற்றியும் தெரிந்து கொள்ள வேண்டியிருக்கிறது.

உருக்குலைவுகளில் மீள்திறங்கொண்டவை (elastic) நெகிழ்மம் (plastic) என இருவகையுண்டு. மீள்திறங் கொண்டவற்றில், உருக்குலைவிற்குக் காரணமான இறுக்கத்தைத் தளர்த்தப் படிகம் தன் இயல்பான நிலையைத் திரும்பப் பெறுகிறது. செயல்படும் இறுக்கம் அளவுக்கு அதிகமாக இருப்பின், படிகம், தீவிரமாக உருக்குலைவிற்கு ஆளாகும். பின் இறுக்கம் நீக்கப்பட்டாலும் படிகம் முழுமையாகத் தன் இயல்புநிலைக்குத் திரும்பவதில்லை. அந்நிலையில் படிகம் நெகிழ்ம உருக்குலைவு கொண்டதாகக் கூறப்படும். இந்நிகழ்வு முன்னதைப் போல இருபோக்குத் தன்மையானதில்லை (reversible).

சறுக்கலும் நெகிழ்ம உருக்குலைவும்

படிகத்தின் ஒரு பகுதி பிற பகுதியைப் பொறுத்து நழுவி நகரும் போது நெகிழ்ம உருக்குலைவு ஏற்படுகிறது. நழுவி நகரும் வழிமுறையைச் சறுக்கல் (Slip) என்பர். எத்திசையில், எத்தளத்தின் மீது படிகத்தின் ஒரு பகுதி சறுக்கலுறுகின்றதோ அதனைச் சறுக்குத்திசை (Slip direction) என்றும், சறுக்குத்தளம் (Slip plan) என்றும் கூறுவர். படிகத்தின் ஒரு பகுதி நழுவி நகர்ந்ததால் தெரியும் படிகத்தின் உட்பகுதி சறுக்குப்பட்டை (Slip band) எனப்படும். ஓர் ஒற்றைப்படிகத்தின் மேற்பரப்பு உருக்குலைவுற்றுத் தோன்றும் சறுக்குப்பட்டை படம் 2.34இல் காட்டப்பட்டுள்ளது. இது பொதுவாகச் சில ஆயிரம் ஆங்ஸ்ட்ராம் அலகுகள் அகலமாயிருக்கும். இதை நாம் ஒளியியல் நுண்ணோக்கியால் பார்க்க முடியும். எலக்ட்ரான் நுண்ணோக்கி இதனைப் பல செதிலடுக்குளாலானதாகக் காட்டுகிறது.

பொதுவாகச் சறுக்கல் சறுக்குத் தளத்தில் படிகம் முழுதும் நிகழ்வதில்லை, படிகத்தில் ஒரு பகுதியோடு முற்றுப் பெறுகிறது. இதனைச் சறுக்கு எல்லை (Slip line) என்பர். சறுக்குத் தளத்தில் நழுவலுற்ற மற்றும் நழுவாத பகுதிகளுக்கிடைப்பட்ட வரப்பைக் கொண்ட வரிவழு நழுவலாலான உருக்குலைவு எனப்படும்.



படம். 2.34. சறுக்கலும் உருக்குலைவும்

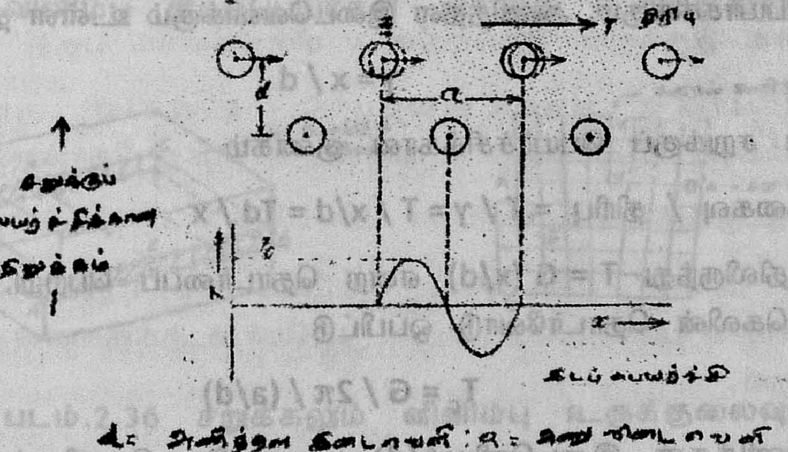
நெகிழ்ம உருக்குலைவு ஒரே சீரானதாக அல்லது ஒரு படித்தானதாக இல்லை. சறுக்குத் தளத்தின் இரு பக்கப் பரப்புகளிலும் படிந்துள்ள அணுக்கள் மட்டுமே இதில் பங்கேற்கின்றன. மீள்திற உருக்குலைவுகளில் படிகத்திலுள்ள எல்லா அணுக்களும்

பாதிக்கப்படுவதால், அதன் பண்புகளை, அணித்தளங்களில் உள்ள அணுக்களுக்கிடைப்பட்ட இடைவிசையினால் மதிப்பிடமுடியும். மீள்திற உருக்குலைவை, உயரளவு இறுக்கம் மற்றும் திரிபுகளுக்கு விரிவுபடுத்தி நெகிழ்ம உருக்குலைவை அறிந்து கொள்ளமுடியாது.

ஒற்றைப் படிகத்தில் சறுக்குப் பெயர்ச்சியின் வலிமை (Shear strength of single crystals)

ஒரு முழுநிறைவான படிகத்தின் ஏற்படும் சறுக்குப் பெயர்ச்சியின் வலிமையைக் கொள்கை வாயிலாக மதிப்பிடும் ஓர் எளிய வழிமுறையை, பிரென்கெல் என்பார் தெரிவித்துள்ளார். சறுக்கப் பெயர்ச்சிக்கு மாறுநிலை இறுக்கம் (Critical stress), அதாவது மீள்திற உருக்குலைவை, நெகிழ்ம உருக்குலைவாக மாற்றும் இறுக்கத்தின் தாழ்ந்த மதிப்பையும் கணக்கிட்டு அறிவித்துள்ளார்.

ஒன்றின்மீது ஒன்று நழுவும் இரு பரப்புகளைக்கொண்டு சறுக்குப் பெயர்ச்சிக்குத் தேவையான விசையைக் கருதுவோம். அணித்தளங்களுக்கு இடைப்பட்ட தொலைவை a என்றும், சறுக்குப் பெயர்ச்சி நிகழும் திசையில் அணித்தளத்திலுள்ள அணுவிடை வெளி 'a' என்றும் கொள்வோம்.



படம். 2.35. A: சீரான இழுவலில் இரு தளங்களிலுள்ள அணுக்களில் ஏற்படும் சறுக்குப்பெயர்ச்சி

B: சமநிலை அமைவிடத்திலிருந்து தளங்களில் ஏற்படும் சார்பு இடப்பெயர்ச்சிக்கு இறுக்கத்திற்குமான தொடர்பு

சறுக்குப் பெயர்ச்சிக்காகச் செயல்படுத்தப்படும் இறுக்கம் T என்போம். இதன் காரணமாக மேல் தளத்திலுள்ள அணுக்கள் சமநிலை அமைவிடத்திலிருந்து x தொலைவு இடப்பெயர்விற்கு உள்ளாகின்றன என்று எடுத்துக்கொள்வோம். இடப்பெயர்விற்கு உள்ளான நிலை புள்ளிக் கோடுகளால் காட்டப்பட்டுள்ளது.

படம். 2.35-இல் சறுக்குப் பெயர்ச்சிக்கான இறுக்கம் T-க்கும் சமநிலை அமைவிடத்திலிருந்து அணித்தளங்களின் சார்பு இடப்பெயர்ச்சிக்கும் உள்ள தொடர்பைக் குறிப்பிடுகிறது. இது x-இன் மதிப்பைப் பொறுத்து T அலைசார்பில் மாற்றம் பெறுவதைத் தெரிவிக்கிறது. அதனால் x = o, a/2, a என்ற அமைவிடங்களில் T = o என்றிருக்கிறது.

அலைச்சார்பில் மாற்றம் பெறுவதால், சறுக்குப் பெயர்ச்சிக்கான இறுக்கத்தை,

$$T = T_c \sin 2\pi x / a$$

எனக்குறிப்பிடலாம் என்று பிரென்கெல் அனுமானித்தார். இதில் T_c என்பது அலைச்சார்பின் வீச்சு, இது சறுக்குப் பெயர்ச்சிக்கு மாறுநிலை இறுக்கத்தைக் குறிப்பிடுகிறது. சறுக்குத் திரிபு (γ) என்பது இடப்பெயர்ச்சிக்கும், அணித்தள இடைவெளிக்கும் உள்ள தகவாகும்.

$$\gamma = x / d$$

எனவே சறுக்குப் பெயர்ச்சிக்கான குணகம்

$$G = \text{தகைவு} / \text{திரிபு} = T / \gamma = T / x/d = Td / x$$

இதிலிருந்து $T = G\,(x/d)$ என்ற தொடர்பைப் பெற்று, அதனை பிரென்கெலின் தொடர்வோடு ஒப்பிட்டு

$$T_c = G / 2\pi / (a/d)$$

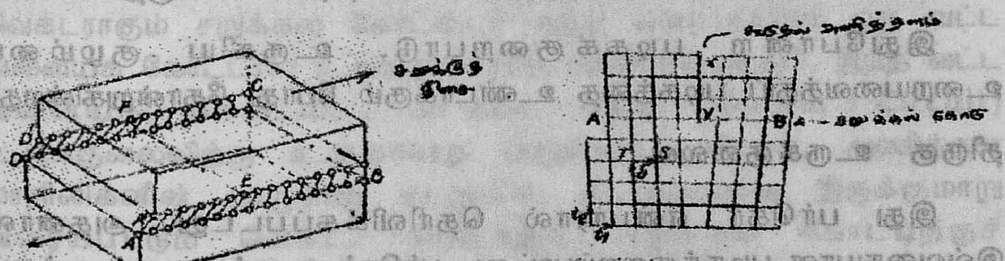
அணித்தள இடைவெளியும்(d), அணுவிடைவெளியும் சமமாக இருக்குமெனில் a= d,

$$T_c = G / 2\pi \cong G/6 \qquad (2.22)$$

இதுவே மாறுநிலைச் சறுக்குப்பெயர்ச்சி இறுக்கத்தின் பெருமமாகும் இதற்கு அப்பாற்பட்ட இறுக்கத்தில் படிகம் நிலையற்ற நிலையை அடைகிறது. ஒரு கனச்சதுரப் படிகத்திற்கு (C_{44}) சறுக்குப்

பெயர்ச்சிக் குணகம் <100> திசையில் 10^{10} நியூட்டன்/$மீ^2$ என அறிந்துள்ளனர். எனவே பிரென்கெல் மாதிரியமைப்பில், மாறுநிலை சறுக்குப் பெயர்ச்சிக்கான இறுக்கம் T_c~10^9 நியூட்டன் / $மீ^2$ இது பல தூய படிகங்களுக்கு அளவிட்டறிந்த மதிப்பைவிட மிகவும் அதிகமாகும். சறுக்குப் பெயர்ச்சிக் குணகத்தின் சோதனை மதிப்பு 10^{-4}Gஐவிடக் குறைவாக இருக்கின்றது. இது மீள்திறனுக்கான அதே கொள்கையை, அதிகமான அல்லது தீவிரமான திரிபுகளுக்கு எவ்வித மாற்றமுமின்றி அப்படியே விரிவுபடுத்துவது, படிகத்தின் சறுக்குப் பெயர்ச்சியின் வலிமையை மதிப்பிடாது எனலாம். கொள்கைக்கும் சோதனை முடிவுகளுக்கும் உள்ள முரண்பாடு, படிகத்தில் குறைபாடுகள் இருக்கவேண்டும் என்றும், அவை வலிமைமைக் குறைக்கும் மூலங்களாக விளங்குகின்றன என்றும், தாழ்ந்த இறுக்கத்தைச் செயல்படுத்தும்போது, நழுவலை அனுமதிக்கிறது என்றும் தெரிவிக்கிறது. இந்த முரண்பாட்டை, டெய்லர் மற்றும் போலானி போன்றவர்கள் விளிம்பு இடப்பெயர்வு அல்லது உருக்குலைவு (edge dislocation) மூலமாகவும், பர்கெர் என்பார் திருகு இடப்பெயர்வு (Screw dislocation) அல்லது உருக்குலைவு மூலமாகவும் விளக்கம் கொடுத்தனர்.

2.25. விளிம்பு இடப்பெயர்ச்சி அல்லது உருக்குலைவு



படம்.2.36 சறுக்கலும் விளிம்பு உருக்குலைவும்

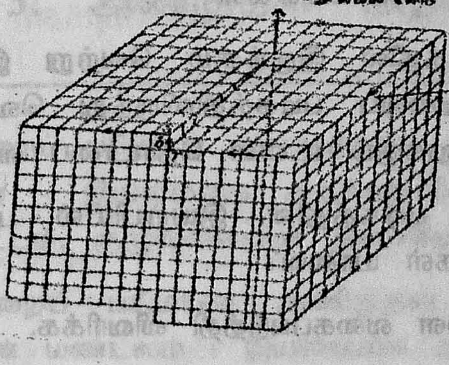
படிகத்தின் மேற்பகுதியில் ஒரு பாதி மட்டும் ஓரலகு அணுவிடைத் தொலைவு சறுக்கலுக்கு உள்ளாகும் போது ஏற்படும் விளிம்பு இடப்பெயர்வும் அதனாலேற்படும் உருக்குலைவும் படம். 2.36-இல் காட்டப்பட்டுள்ளது. சறுக்கலுற்ற மற்றும் சறுக்கலுறாத பகுதிகளுக்கிடையேயான வரப்பு விளிம்பு உருக்குலைவு எனப்படும். இதன் அமைவிடம், மேற்பகுதியை எட்டாமல், கூடுதல் அணித்தளமான

AB முடிவுறும்போது குறிப்பிடும் படியாகத் தெரிகிறது. கூடுதல் அணித்தளமான BA-க்கு மேலே உள்ள அணுக்கள் (A-க்கு அருகில் மேலே) இறுக்கத்திற்கு ஆளான நிலையிலும், கீழே உள்ள அணுக்கள் (A-க்கு அருகில் கீழே) நீட்சிக்கு ஆளான நிலையிலும் உள்ளன. இந்த உருக்குலைவு, கூடுதல் அணித்தளம் படிகத்தினுள் எவ்விடத்தில் முடிவடைகிறதோ அவ்விடத்திலுள்ள விளிம்பில் அமைந்திருப்பதால், இதனை 'விளிம்பு உருக்குலைவு' என்பர். இதன் குறுக்குத் தோற்றம் படம் 2.36-இல் காட்டப்பட்டுள்ளது. AB என்பது சறுக்குத் தளத்தையும், இதற்கு மேலுள்ள படிகப் பகுதியான xy கூடுதல் அணித்தளத்தையும் குறிப்பிடுகின்றன. y என்ற புள்ளியில் தளத்திற்குச் செங்குத்தாக வரையப்பட்ட கோடு சறுக்கல் கோடு அல்லது உருக்குலைவுக் கோடு எனப்படும். இந்த உருக்குலைவு கூடுதல் அணித்தளமுள்ள படிகப்பகுதியின் கீழ் விளிம்பில் காணப்படுகிறது. சறுக்கல் கோட்டுப் பகுதியில் உருக்குலைவு அழுத்தமாகத் தோன்றும். ஏனெனில் அக்கோட்டுப் பகுதியில் அடுத்தடுத்துள்ள அணித்தளங்களில் ஒன்றுக்கொன்று எனச் சரியான எண்ணிக்கையில் அணுக்கள் இல்லாதிருப்பதேயாகும். இதனை உருக்குலைவின் உள்ளகம் என்பர். இதிலிருந்து ஒரு சில அணுவிடைத் தொலைவிற்கு அப்பால், உருக்குலைவு மிகவும் சொற்பமாக இருக்கும். இப்பகுதியை 'மீள்திறமிக்க பகுதி' என்பர்.

இதுபோன்ற படிகக்குறைபாடு, உருகிய குழம்பை உறையவைத்துப் படிகத்தை உண்டாக்கும் போது தோன்றுகின்றது.

திருகு உருக்குலைவு

இது பர்கெர் என்பாரால் தெரிவிக்கப்பட்டது, அதனால் இவ்வகையான படிகக்குறைப்பாட்டை பர்கெர் உருக்குலைவு என்றும் குறிப்பிடுவர்.



படம் 2.37 திருகு உருக்குலைவு

படிகத்தின் மேற்பகுதியில் ஓர் ஆப்பு வடிவில் ஒரு சிறு பகுதியை வெட்டி நீக்கிவிட்டதாகக் கருதுவோம். அகற்றப்பட்ட ஆப்பின் அடிப்பக்கத்தடிப்பு – பக்கப்பரப்பில் ஓரலகு அணுவிடைத் தொலைவாக இருக்கட்டும். அதாவது ஆப்பு நீக்கப்பட்ட பக்கத்திலுள்ள படிகப்பகுதி ஓரலகு அணுவிடைத் தொலைவு கீழ்நோக்கிச் சறுக்கியதாகக் கூறலாம். சறுக்கல் கோட்டுப்பகுதியில் உருக்குலைவு அதிகமாக இருக்கும். இது திருகு உருக்குலைவு எனப்படும். (படம் 2.37)

பர்கெர் வெக்டர்

பர்கெர் வெக்டர் என்பது உருக்குலைவின் இடப்பெயர்ச்சி வெக்டராகும் சறுக்கல் கோட்டைச் சுற்றி வரையப்படும் ஒரு வட்ட வளையக் கோட்டால் உருக்குலைவை விவரிக்கமுடியும். இந்த வட்ட வளையக் கோட்டை, பர்கெர் சுற்று (Burger's Circuit) உருக்குலைவிற்கு உள்ளாகாத பகுதிகள் வழியாக, அணித்தள மாறிலிகளின் முழுஎண் மடங்கில் இடப்பெயர்வு இருக்குமாறு வரையப்படும் வெக்டர் கோடாகும். சறுக்கல் கோட்டிற்குச் செங்குத்தாக உள்ளதளத்தில் சமஅளவு இடப்பெயர்ச்சி நேர் மற்றும் எதிர் திசைகளில் இருக்குமாறு செய்யப்பட்டு அந்தவட்ட வளையம் முழுமைபெற்றிருக்கும். இந்த வட்ட வளையத்தின் உட்பகுதியில் இந்த உருக்குலைவு இல்லையெனில் அது இயல்பாகவே முழுமை பெற்றிருக்கும். அப்படி இல்லாவிட்டால் உட்பகுதியில் ஏதோ உருக்குலைவு இருப்பதாகக் கூறலாம் அப்போது வட்ட வளையப் பகுதியை முழுமைப்படுத்த பர்கெர் வெக்டர் S அளவு இடப்பெயர்வு செய்ய வேண்டும். இதை

$$S = n_1a + n_2b + n_3c$$

என்று குறிப்பிடலாம். n_1, n_2, n_3 என்பன முழு எண்கள், a, b, c என்பன படிக அடிப்படை மாறிலிகளாகும்.

வினாக்கள்

1. ஓர் ஒற்றைப் படிகத்தில் இருக்கும் வெற்று இடங்களின் செறிவிற்கும், ஓரணுவைப் படிகத்திலிருந்து வெளியேற்றத் தேவைப்படும் ஆற்றலுக்கும் உள்ள தொடர்பை வருவிக்க.

2. படிகக் குறைபாடு, படிகத்தின் இயற்பியல் பண்புகளில் ஏற்படுத்தும் பாதிப்புகள் யாவை?

3. படிகக் குறைபாடுகளை வகைப்படுத்தி விவரிக்க.

4. புள்ளிவழு என்றால் என்ன? அதன் வகைகள் யாவை?

5. வரிவழு என்றால் என்ன? அதன் வகைகள் யாவை?

6. ஸ்காட்கி குறைபாடுகள் என்றால் என்ன? அதன் செறிவிற்கான ஒரு தொடர்பை வருவித்து விளக்குக.

7. பிரென்கெல்வழு என்றால் என்ன? அதன் செறிவிற்கான ஒரு தொடர்பை வருவித்து விளக்குக?

8. புறவியலாக வெற்று இடங்களை எங்ஙனம் தோற்றுவிப்பீர்கள்?

9. நிறமையங்கள் என்றால் என்ன? F மற்றும் V நிறமையங்களுக்கான காரணத்தையும், படிகத்தின் இயற்பியல் பண்புகளில் காணப்படும் மாற்றங்களையும் விவரி.

10. ஒற்றைப் படிகத்தில் சறுக்குப் பெயர்ச்சியின் வலிமைக்கான தொடர்பைப் பெறுக.

11. விளிம்பு உருக்குலைவு, திருகு உருக்குலைவு தக்க உதாரணத்துடன் விளக்குக.

12. பர்கெர் வெக்டர் என்றால் என்ன?

3. அணித்தள அதிர்வுகள்

ஒற்றைப் பரிமாண ஒருபடித்தான ஊடகத்தின் மீள்திற அதிர்வுகள் - இயல்வகை அதிர்வுகளின் எண்ணிக்கை – அலைக்கட்டம், குழுவலைவின் திசைவேகங்கள்.

ஒற்றைப் பரிமாண அணித்தள அதிர்வியக்கம் - பிரிலோயின் மண்டலம் - இயல்வகை அதிர்வினங்கள்.

நேரிய ஈரணு அணித்தளம் - ஒளியியல் மற்றும் ஒலியியல் கிளைகள் அகச்சிவப்பு நெடுக்கையில் ஒளியியல் பண்புகள்.

வட்டார அதிர்வியக்கம் - அணித்தள அதிர்வுகளின் குவாண்டமாக்கம் - போனான் உந்தம் - போட்டான் - போனான் மீட்சியிலாச் சிதறல் - நியூட்ரான் - போனான் மீட்சியிலாச் சிதறல்.

3. அணித்தள அதிர்வுகள்
(Lattice vibrations)

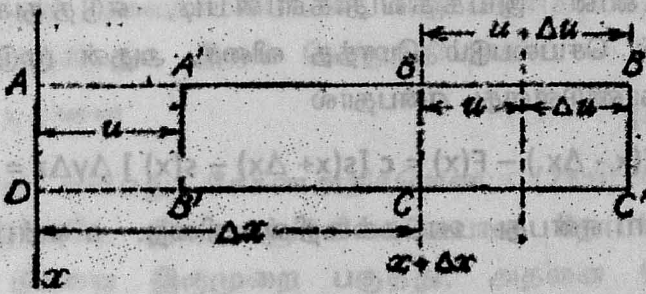
3.1 தொடக்கம்

மீள்திறமிக்க சுருள் வில்லால் இணைக்கப்பட்ட அணுக்களின் அணிவகுப்பால் ஆனதாகப் படிகத்திலுள்ள அணித்தளங்களைக் கருதலாம். அணித்தளத்தின் இந்த மாதிரியைக்கொண்டு, அணித்தளத்தில் அடுத்தடுத்துள்ள அணுக்கள் ஒருங்கிணைந்து செயல்பட்டு, அவற்றின் இயக்கங்கள் எங்ஙனம் ஒன்றோடொன்று பின்னியவாறு உள்ளன என்பதைப் புரிந்துகொள்ள முடியும். அதாவது ஒவ்வொரு அணுவின் இயக்கமும் படிகத்திலுள்ள பிற அணுக்களால் பங்கிடப்பட்டு, படிகம் முழுவதும் அதிர்வுறுவதற்குக் காரணமாகின்றன. படிக அணித்தளத்தின் மீள்திறமிக்க அதிர்வியக்கத்தின் தன்மைகளை அறிந்து, அதன் முடிவுகளை அந்த மீள்திறமிக்க ஊடகம் ஒருபடித்தன்மை கொண்டதாகவும், தொடர்ச்சியாகவும் இருந்தால் எப்படி இருக்கும் என்பதின் முடிவுகளோடு ஒப்பிட்டு அணித்தள அதிர்வுகளின் இயற்பியல் தன்மைகளை அறியலாம். எளிமைக்காக நாம் ஒற்றைப் பரிமாண அணித்தளத்தைக் கருதுவோம். அதன் முடிவுகளை மட்டும் இரு மற்றும் முப்பரிமாண அணித்தளங்களுக்கு விரிவுபடுத்துவோம்.

3.2 ஒற்றைப் பரிமாண ஒருபடித்தான ஊடகத்தின் மீள்திற அதிர்வுகள்

(Elastic vibrations of one dimensional homomogeneous line)

x அச்சில் விரிந்துள்ள ஒருபடித்தான மீள்திறமிக்க ஊடகத்தில் Δx என்ற நீளமுள்ள ΔA என்ற குறுக்குப்பரப்புள்ள ABCD என்ற ஒரு சிறு கூறைக் கருதுவோம். படம் 3.1.



படம் 3.1 ஒற்றைப் பரிமாண ஊடகத்தின் நீட்சி

மீட்சித் திரிபு ஏதும் இல்லாத நிலையில், ABCD என்ற பகுதி xலிருந்து $x+\Delta x$ வரை இருக்கின்றது. இழுவிசையால் விரிவடையும்போது அதன் புதிய அமைவிடம் A'B'C'D' ஆகும். இதில் AD என்ற இடதுபக்க முனை u என்ற தொலைவு விரிந்து A'D' என்ற புதிய முனையையும், BC என்ற வலப்பக்க முனை $u+\Delta u$ என்ற தொலைவு விரிந்து B'C' என்ற புதிய முனையையும் அடைகின்றன. மீள்திற ஊடகம் ஒருபடித்தானதாகவும் நேரியலாகவும் இருப்பின், செயல்படும் இழுவிசையும், திரிபும், □▾க் விதியால் தொடர்புபடுத்தப்படும். திரிபு என்பது ஓரலகு நீளமுள்ள ஊடகத்தில் ஏற்படும் நீட்சி என்பதால்

$$\text{திரிபு} \quad s(x) = \lim_{\Delta x \to 0} \frac{\Delta u}{\Delta x} = \frac{du}{dx}$$

நாம் ஒற்றைப் பரிமாண ஊடகத்தைக் கருதுவதால், இறுக்கத்தை விசை/ பரப்பு என்ற வரையறையால் குறிப்பிடமுடியாது. எனவே இங்கு நாம் இறுக்கத்திற்குப் பதிலாக விசையைக் கருதவேண்டியது அவசியமாகிறது. c என்பது ஊடகத்தின் மீள்திற மாறிலி என்போம்.

$$c = \frac{\text{தகைவு}}{\text{திரிபு}} = \frac{F(x)}{\Delta y.\Delta z.s(x)}$$

அல்லது $F(x) = c.s(x)\,\Delta y\,\Delta z.$

இதுபோல $F(x + \Delta x) = c\,s(x+ \Delta x)\,\Delta y.\Delta z$

நியூட்டனின் இயக்கவிதிகளின்படி, எடுத்துக்கொண்ட ஊடகக்கூறில் செயல்படும் மொத்த விசை, அதன் முடுக்கத்தோடு தொடர்பு கொண்டுள்ளது என்பதால்

$$F(x - \Delta x) - F(x) = c\,[s(x+\Delta x) - s(x)]\,\Delta y \Delta z = ma$$

இதில் m என்பது ஊடகக்கூறின் நிறை, a என்பது அதன் முடுக்கம்.

s(x+Δx) என்ற சார்பை xஐப் பற்றி டெய்லர் விரிதொடராகக் குறிப்பிடமுடியும். Δxஐப்பொறுத்த உயர்கூறுகளைப் புறக்கணிக்கலாம். எனவே

$$s(x+\Delta x) = s(x) + \frac{\partial s(x)}{\partial x}\,\Delta x + \ldots\ldots$$

$$c\,\frac{\partial s(x)}{\partial x}\,\Delta x\,\Delta y \Delta z = m\,a$$

இதில் s(x) ன் மதிப்பைப் பதிலீடு செய்ய

$$c\,\frac{\partial s(x)}{\partial x}\,\Delta x\,\Delta y \Delta z = ma = m\,\frac{\partial^2 u}{\partial t^2}$$

அல்லது

$$c\,\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = \frac{1}{c}\;\frac{m}{\Delta x\,\Delta y \Delta z}\;\frac{\partial^2 u}{\partial t^2}$$

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = \frac{\rho}{c}\;\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} \qquad (3.1)$$

இதில் ρ என்பது ஊடகத்தின் அடர்த்தியாகும். இத்தொடர்பு ஒருபடித்தான, நேரியலான ஊடகத்தில் மீட்சி அலைகளின்

அலைவீச்சுக்கான அலைச்சமன்பாட்டை x(இடம்), t(காலம்) இவற்றின் சார்பாகக் காட்டுகிறது. இதன் பொதுத்தீர்வாக

$$u(x,t) = A\, e^{i(\omega t-kx)} \quad (3.2)$$

இதில் ω என்பது கோணஅதிர்வெண், (2πυ). k என்பது பரவல்மாறிலி(2π/λ). இவைகளுக்கிடையேயான தொடர்பைப்பெற, மேற்கண்ட தீர்வை இருமுறை பகுத்து, அதனை மேற்கண்ட அலைச்சமன்பாட்டில் பதிலீடு செய்யவேண்டும்.

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = -Ak^2 e^{i(\omega t-kx)}$$

$$= -k^2 u \quad (3.2)$$

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = -A\omega^2 e^{i(\omega t-kx)}$$

சமன்பாடு (3.1) உடன் சமன்பாடு (3.2) ஒப்பிட்டால்,

$$\omega = k\sqrt{(c/\rho)} \quad (3.3)$$

இது அதிர்வெண்ணையும், அலைநீளத்தையும் தொடர்புபடுத்தியுள்ளது.

அலையின் அலைக்கட்டத் திசைவேகம் (Phase velocity of the wave)

அலையின் அலைக்கட்டத் திசைவேகம் என்பது, அலையின் குறிப்பிட்ட அலைக்கட்டம், அல்லது நிலையான ஒரு அலைக்கட்டப்புள்ளி, அலைபரவிச் செல்லும் திசையில் முன்னேறிச் செல்லும் விதமாகும். நிலையான அலைக்கட்டம் என்பதற்கு எடுத்துக்காட்டாகச் சுழிஅலைக்கட்டத்தை எடுத்துக்கொள்ளலாம். அலைக்கட்டக் கோணத்தை (ωt-kx) என்ற சார்பு தருவதால் சுழி அலைக்கட்டத்தின் இயக்கத்தை, (ωt-kx) = 0

என்றும் குறிப்பிடலாம். எனவே

$$x = \omega t/k = v_p t$$

இதில் v_p என்பது அலைக்கட்டப் புள்ளியின் மாறாத அலைக்கட்டத் திசைவேகமாகும்.

$v_p = \omega/k = \sqrt{(c/\rho)}$ (3.4)

எனவே அலைச்சமன்பாட்டை

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = \frac{1}{v_p^2} \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} \qquad (3.5)$$

என எழுதலாம். இங்கு அலைக்கட்டத் திசைவேகம் அதிர்வெண் மற்றும் அலைநீளத்துடன் சார்பாக இருக்கவில்லை, மாறாக நீட்சி மாறிலியான c மற்றும் மீள்திற ஊடகத்தின் அடர்த்தி இவற்றுடன் தொடர்புள்ளதாக இருக்கிறது எனலாம்.

தொடர் ஊடகத்தின் ஒரு குறிப்பிட்ட நெடுக்கையில் இயல்வகை அதிர்வுகள் (Normal modes of vibrations in a finite lengths of the continuous medium)

இயல்வகை அதிர்வுகள் என்பது, கொடுக்கப்பட்ட வரம்பு நிபந்தனைகளைப் பூர்த்தி செய்கிற அலைச்சமன்பாட்டின் தனித் தீர்வுகளின் எண்ணிக்கையாகும். இருமுனைகளும் நிலையானவைகளாக இருக்க L என்ற நீளங் கொண்ட ஒரு தொடர்ஊடகத்தில் இருக்கக்கூடிய இயல்வகை அதிர்வுகளின் எண்ணிக்கையை இப்பொழுது கணக்கிட்டறிவோம். இந்த நிபந்தனையின்கீழ், இருபுள்ளிகளுக்கிடையே அடைபட்ட நீளத்தில் அசையா நிலை அலை (standing wave) தோன்றியிருக்கும் எனலாம். அதனை

$u = u_o \sin kx \sin \omega t$ (3.6)

எனக் குறிப்பிட்டு எழுதலாம். வரம்பு நிபந்தனையின்படி இரு முனைகளிலும் x=0, x=L இடப்பெயர்ச்சி u சுழியாகும்.

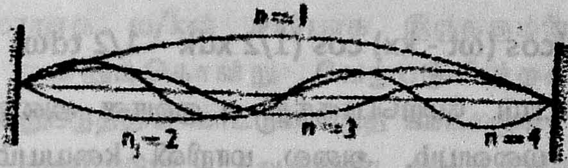
$x=L,\ 0 = u_o \sin kL \sin \omega t$

இதில் $u_o \sin \omega t$ சுழியில்லாதவை என்பதால்

$$\sin kL = 0$$

அல்லது $kL = n\pi$; $n = 1,2,3,\ldots\ldots$

$$k = n\pi / L \qquad (3.7)$$



படம் 3.2 வரம்பிற்குட்பட்ட நீளத்தில் குறுக்கலைகள்

எனவே $u=u_0 \sin kx \sin \omega t$ என்ற சமன்பாடு அதிர்வின் இயல்வகையைக் குறிப்பிடும்படி இருக்கவேண்டுமெனில், அலைமாறிலி k-ன் மதிப்பு சில குறிப்பிட்ட மதிப்புகளை மட்டுமே பெற்றிருக்க வேண்டும். எனவே அதிர்வெண்ணின் நிறமாலையும் தொடர்ச்சியின்றி விட்டுவிட்டு இருக்கும் எனலாம். படம் 3.2.

சீரிசை அலைகளில் குழுவலையின் திசைவேகம் (Group velocity of Harmonic wave Trains)

சமமான அலைவீச்சும் ஆனால் ω, $\omega+d\omega$ என்று வெவ்வேறு அதிர்வெண்ணும் k, k+dk என்று வெவ்வேறு அலைமாறிலியும் கொண்ட இரு அலைகள் ஒன்றோடொன்று இணைந்து மேற்பொருந்துவதாகக் கருதுவோம். இவ்விரு அலைகளையும் பின்வரும் சமன்பாட்டால் குறிப்பிடலாம்.

$$u_1 = A \cos (\omega t - kx)$$

$$u_2 = A \cos [(\omega + d\omega)t - (k+dk)x]$$

இவ்விரு அலைகளும் மேற்பொருந்துவதால் விளையும் அலையின் அலைவீச்சு

$$u = u_1 + u_2 = A [\cos (\omega+d\omega)t - (k+dk)x] + A \cos(\omega t - kx)$$

$\cos\alpha + \cos\beta = 2 \cos (\alpha+ \beta)/2 \ \cos (\alpha- \beta)/2$ என அறிவோம்.

எனவே

$$\alpha + \beta = 2 \omega t - 2kx + t\, d\omega - x\, dk \cong 2 (\omega t - kx)$$

$$\alpha - \beta = x dk - t\, d\omega$$

$d\omega, dk$ போன்றவை ω, k யோடு ஒப்பிட மிகவும் சிறியவை என்பதால் அவை எடுத்துக்கொள்ளப்படவில்லை.

$$u = 2A [\cos (\omega t - kx) \cos (1/2\, x dk - 1/2\, t d\omega) \quad (3.8)$$

இச்சமன்பாடு, மேற்பொருந்தி உருவான அலை, மூலஅலையின் அதிர்வெண் ωவையும், அலை மாறிலி kயையும் கொண்டுள்ளது. என்பதையும், கூடுதலாக $(2\pi/dk)$ என்று அதிக அலைநீளங்கொண்ட சைன் அலையை மேலுறையாகக் கொண்டுள்ளது என்பதையும் தெரிவிக்கிறது.

படம் 3.3 இரு அலைகள் மேற்பொருந்தி விளையும் அலை

குழுவலையைக் குறிக்கும் மேலுறையின் சுழி அலைக்கட்டம் இயங்குவதை

$$x dk - t d\omega = 0$$

என்ற தொடர்பால் குறிப்பிட்டால்,

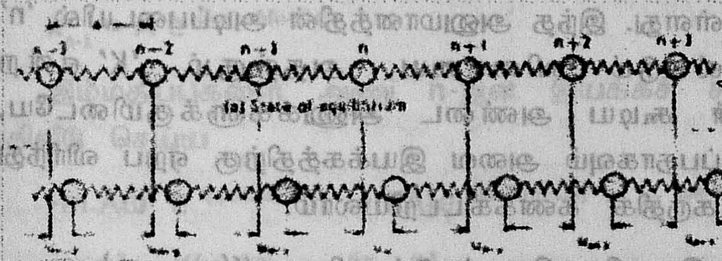
$$x = t\, d\omega/dk = t v_g \quad (3.9)$$

இதில் v_g என்பது குழுவகையின் திசைவேகமாகும். இதனை அலைபரவும் திசையில் அலை ஆற்றலைக் கடத்திச் செல்லும் வேகம் என வரையறுக்கலாம். அலைக்கணுக்கள் இயக்கமில்லா அமைவிடங்களாகும். எனவே அலையின் ஆற்றல் அதிர்விலா அலைக்கணுவிற்கு அப்பால் பரவிச் செல்வதில்லை. மாறாக அலைக்கணுவே அலைபரவும் திசையில் இயங்கிச் சென்றால், ஆற்றலானது குழுவலை வேகத்தில் கடத்தப்படும் எனலாம். அசைவின்றி ஊடகத்தில் நிலையாக நிற்கும் அலைகளின் குழுவலைவேகம் சுழி என்பதால், மொத்த ஆற்றல் பாய்வு சுழியாகும்.

அலைக்கட்டத் திசைவேகமும், குழுவலையின் திசைவேகமும், ஒருபடித்தான ஊடகத்தில் மீட்சி அலைகளுக்குச் சமமாக இருக்கிறது. இவ்விரு வேகங்களும் சமமாக இருக்கவேண்டுமெனில் ω, kக்கு

நேர்கோட்டுத் தொடர்பில் மாறுமாறு ஒரு சார்பாக இருக்கவேண்டும். இந்நிலையில் ω/k, யன் மதிப்பும் dω/dk ன் மதிப்பும் சமமாக இருக்கும். மாறாக ω/kன் சார்பாக இருக்கும்போது இவ்விரு வேகங்களும் ஒன்றுக்கொன்று வேறுபடுகின்றன. இவ்விரு வேகங்களை வேறுபடுத்திக் காட்டும் எந்த ஊடகமும் 'பிரிகைத்திறன் மிக்க ஊடகம்' எனப்படும். (அதாவது ஊடகத்தின் ஒளிவிலகல் எண் அதிர்வெண்ணோடு சார்புள்ளதாக இருக்கும்). இதனை நிறப்பிரிகை என்பர். ஹுக் விதிக்கு உட்பட்டு, அணுக்கள் இடம்விட்டு விட்டு அணிவகுத்து அமைந்திருக்கும் ஊடகத்தில் பரவும் மீட்சி அலைகளும் இத்தகையதே. இதுபோன்ற நிகழ்வுகளில் அலைநீளம், அணுவிடைத் தொலைவைவிட மிகவும் அதிகமாக இருக்கிறது.

3.3 ஓரணு ஒற்றைப் பரிமாண அணித்தளத்தில் அலையியக்கம் (Wave motion in a one dimensional monoatomic lattice)



படம் 3.4 அணித்தள அணுக்கள் - ஓய்வு நிலையிலும் அதிர்வுறும் நிலையிலும்

x-அச்சில் நீண்டு விரிந்துள்ள ஓரணுவாலான ஒற்றைப் பரிமாண அணித்தளத்தைக் கருதுவோம். m என்ற நிறையுடைய அந்த அணுக்கள் ஒவ்வொன்றும் 'a' என்ற இடைவெளியுடன் அமைந்திருப்பதாகவும் கொள்வோம். இங்கு நாம் ஒவ்வொரு அணுவும் அதற்கு இருமருங்கும் அருகிலுள்ள அண்டை அணுக்களுடன் மட்டும் ஹீக் விதிக்கு உட்பட்டு இடையீட்டுச் செயல்புரிகின்றன என்று அனுமானித்துக் கொண்டுள்ளோம்.

கனச்சதுரப் படிகங்களில் மூலஅடிப்படையான திசைகளாக (100), (110), (111) ஆகிய தளவடுக்குத் தளங்களைக் கொள்வர். இதில் ஏதாவதொரு திசையில் அலை பரவிச் செல்லும்போது படிகத்திலுள்ள அணித்தள அணுக்கள் எல்லாம் ஒரே அலைக்கட்டத்தில்

ஒத்தியங்குகின்றன. அது நெட்டலையெனில் இயக்கம் அலைபரவும் திசைக்குச் செங்குத்தாகவும் இருக்கும். எளிமைக்காக நாம் அலையானது படிகத்தின் (100) தளத்திற்கு இணையான திசையில் செல்வதாகக் கொள்வோம். அதனால் நெட்டலை வகையினங்களை மட்டும் நாம் கவனத்தில் கொண்டுள்ளோம்.

ஓய்வுச் சமநிலையில் அனைத்து அணித்தள அணுக்களும் 'a' என்ற சமமான இடைவெளியுடன் உள்ளன. அதில் அதிர்வியக்கம் தூண்டப்படும்போது, ஓய்வுச் சமநிலையைப் பொறுத்து அணுக்கள் யாவும் ஒரு சீரிசை அலைவியக்கத்தை ஏற்படுத்துகின்றன. அணிவரிசையில் 'n'வது அணுவின் இடப்பெயர்வை x_n என்ற அலைவீச்சு குறிப்பிடுவதாகக் கொள்வோம். இதனுடன் வினையாற்றும் அண்டை அணுக்கள் (n-1) மற்றும் (n+1) மட்டுமே. விலகி இருப்பதால் n+2, n+3,...(n-2), (n-3) போன்ற அணுக்கள் 'n' அணுவோடு ஏற்படுத்தும் வினை புறக்கணிக்கப்பட்டுள்ளது. இந்த அனுமானத்தின் அடிப்படையில் 'n' அணுமீது செயல்படும் விசையை, அதற்கும் 'K' என்ற விசைமாறிலியுடன் கூடிய அண்டை அணுக்களுக்குமிடையே, சுருள்வில்கள் இருப்பதாகவும் அவை இயக்கத்திற்கு ஏற்ப விரிந்து சுருங்குவதாகவும் கருதிக் கணக்கிட்டறியலாம்.

n+1, n க்கும் இடையே செயல்படும் விசை $K(x_{n+1} - x_n)$

n, (n-1) க்கும் இடையே செயல்படும் விசை $K(x_n - x_{n-1})$

எனவே அணு nமீது செயல்படும் மொத்தவிசை, இவ்விரு விசைகளின் வேறுபாடாகும்.

$$F_n = K(x_{n+1} + x_{n-1} - 2x_n)$$

நியூட்டனின் இயக்கவிதிப்படி விசையை, நிறை மற்றும் முடுக்கத்தின் பெருக்கல் பலன் எனலாம்.

$$m\frac{\partial^2 x_n}{\partial t^2} = K(x_{n+1} + x_{n-1} - 2x_n) \qquad (3.10)$$

இது அணு nன் இயக்கச் சமன்பாடாகும். ஒரு பொதுத் தீர்வைக் கருத்திற்கொண்டு இச்சமன்பாட்டைத் தீர்வு செய்யலாம்.

$$x_n = - A e^{i(\omega t - kna)} \qquad (3.11)$$

ஏனெனில் அணு nன், xஆயம் na ஆகும். இதனை அடுத்தடுத்து இருமுறை பகுக்க.

$$\frac{\partial x_n}{\partial t} = Ai\omega\, e^{i(\omega t - kna)}$$

$$\frac{\partial^2 x_n}{\partial t^2} = - A\omega^2\, e^{i(\omega t - kna)}$$

அணு (n+1), (n-1)-இன் இயக்கச் சமன்பாடுகளின் பொதுத்தீர்வுகளைக் கொண்டு

$$x_{n+1} = A\, e^{i[\omega t - k(n+1)a]}$$

$$x_{n-1} = A\, e^{i[\omega t - k(n-1)a]}$$

இம்மதிப்புகளை அணு n-இன் இயக்கச் சமன்பாடு (3.10)ல் பதிலீடு செய்ய

$$-m.A\omega^2\, e^{i(\omega t-kna)} = KA[e^{i(\omega t-k\,(n+1)a]} + e^{i(\omega t-k\,(n-1)a]} - 2e^{i(\omega t-\,ka)}]$$

$$-m\omega^2 = K[e^{-ika} + e^{ika} - 2]$$

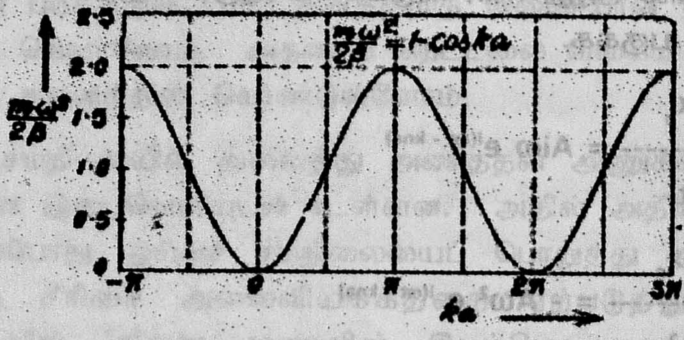
$$= 2K\,(\cos ka-1)$$

$$= -4K \sin^2 ka/2$$

அல்லது $\omega = 2\sqrt{(K/m)}\sin ka/2$ (3.12)

அதிர்வெண்ணிற்கு ஏற்றுக்கொள்ளத்தக்க நேர்குறியுடைய தீர்வு மட்டும் எடுத்துக் கொள்ளப்பட்டுள்ளது.

இதனை 'நிறப்பிரிகைத் தொடர்பு' என்பர். $\omega/[4K/m]^{1/2}$ க்கும் kக்கும் ஒரு வரைபடம் வரைந்தால், அது $2\pi/a$ அலைவு நேரத்துடன் kன் அலைசீர்மை கொண்ட சார்பாக இருப்பதைக் காணலாம். (படம் 3.5)



படம் 3.5 ωக்கும் kக்கும் இடையேயான வரைபடம்

sin ka/2 பெருமமதிப்பு 1 என்பதால் (3.12), அணித்தளத்தில் பரவும் அலையின் பெரும அதிர்வெண்

$$v_{பெருமம்} = 1/(K/m)^{1/2} \qquad (3.13)$$

இந்த அதிர்வெண்ணிற்கு மேற்பட்ட அதிர்வெண் கொண்ட அலைகள் ஊடுருவிச் செல்ல முடிவதில்லை. அதாவது அணித்தளத்திலுள்ள அணுத்தொடரானது சுழி முதல் $v_{பெருமம்}$ வரையுள்ள அதிர்வெண் கொண்ட அலைகளை மட்டும் பரவிச்செல்ல அனுமதிக்கிற தாழ்வதிர்வெண் கடத்தும் வடிப்பானாக (filter)ச் செயல்படுகிறது எனலாம். ஆனால் இது போன்ற அதிர்வெண் வரம்பு ஏதும் தொடர் ஊடகமான கம்பியில் இருப்பதில்லை, அலைபரவும் திசைவேகமும் அலைநீளத்தைப் பொறுத்து மாறுவதில்லை, அணித்தளத்தில் இதுவும் வேறுபடுகிறது. அலைபரவும் திசைவேகம், அலை நீளம் குறையக் குறையக் குறைகிறது.

அலைமாறிலி k, π/a-இன் மதிப்பைவிட மிகவும் குறைவாக அதாவது அலைநீளம் λ, 2a-இன் மதிப்பை விடக் கூடுதலாக இருப்பின் அதிர்வெண் ω, kச் சார்ந்து ஏறக்குறைய நேர்கோட்டு மாற்றத்திற்கு உட்பட்டிருக்கிறது.

$$\sin ½\, ka \approx 1/2\, ka$$

அல்லது $\omega = \sqrt{(K/m)}\, ka$

இதிலிருந்து அலைக்கட்டத் திசைவேகம் மற்றும் குழுவலைத் திசைவேகம் இவற்றைக் கண்டறியலாம்.

அலைக்கட்டத்திசை வேகம் $v_p = \omega/k = \sqrt{(K/m)}\, a$ = மாறிலி

குழுவலைத் திசைவேகம் $v_g = d\omega/dk = \sqrt{(K/m)}\, a$ = மாறிலி

எனவே உயர் அலைநீளங்களுக்கு, ஊடகம் ஒரு தொடர்ச்சியான, ஒருபடித்தான மீள்திறமிக்க ஊடகமாக விளங்குகிறது. அதனால் அலைக்கட்டத் திசைவேகமும், குழுவலைத் திசைவேகமும் சமமாக இருக்கின்றன.

k-இன் மதிப்பு அதிகரிக்கும்போது, ω, k-இன் மதிப்பைச் சார்ந்து ஒரு நேர்கோட்டு மாற்றத்திற்கு உட்படுவதில்லை. அதனால் நிறப்பிரிகை விளைவு மேலோங்கி வெளிப்படுகிறது. இந்நிலையில் அலைக்கட்டத் திசைவேகமும், குழுவலைத்திசை வேகமும் பின்வருமாறு:-

$$\text{அலைக்கட்டத் திசைவேகம் } v_p = \frac{\omega}{k} = \frac{K}{m} \frac{\sin ka/2}{ka/2}$$

$$\text{குழுவலைத் திசைவேகம் } v_p = \frac{d\omega}{dg} = \sqrt{\frac{K}{m}}\, .\, a\, \frac{\cos ka}{2}$$

பிரிலோயின் மண்டலம்

அணித்தளத்தில் அடுத்தடுத்துள்ள இரு அதிர்வுறும் அணுக்களின் இடப்பெயர்ச்சிகளின் தகவு கொடுக்கப்பட்ட அமைப்பிற்கு ஒரு மாறிலி

$$\frac{x_n}{x_{n+1}} = \frac{A e^{i(\omega t - kna)}}{A e^{i[\omega t - k(n+1)a]}} = e^{ika} \qquad (3.14)$$

e^{ika} இன் தனி மதிப்புகள் யாவும், kaயின் மதிப்பு 2π என்ற நெடுக்கைக்குள் இருக்கும்போது உள்ளடங்குகின்றன. அலையானது xஅச்சில் வலப்பக்கமாகவோ அல்லது இடப்பக்கமாகவோ பரவலாம் என்பதால் kஇன் நேர் மற்றும் எதிர் குறியுடைய மதிப்புகளையும் எடுத்துக்கொள்ளவேண்டும். k-இன் தனி மதிப்புகளில் நெடுக்கையை $-\pi \leq ka \leq \pi$ என்றோ, $-\pi/a \leq k \leq \pi/a$ என்றோ குறிப்பிடலாம். k

மதிப்புகளின் இந்த நெடுக்கையை நேரியலான அணித்தளத்தின் முதல் பிரிலோயின் மண்டலம் என்பர்.

முதல் பிரிலோயின் மண்டலத்திற்கு வெளியில் k மதிப்புள்ளதாக இருக்கும் நிலையை இப்பொழுது கருதுவோம். இது -π/a லிருந்து -2π/a வரையில் ஒரு பகுதியையும், +π/aலிருந்து +2π/a வரையில் ஒரு பகுதியையும் ஆக 2 பகுதிகளைக் கொண்டுள்ளது. (படம் 3.5). இவ்விரு தீர்வுகளின் தன்மை முதல் மண்டலத்திற்குப் பெற்ற தீர்வின் தன்மைபோலவே இருக்கிறது. k-இன் மதிப்பு மட்டும் ±π/a லிருந்து ±2π/a வரை மாறுபடுகிறது. இது இரண்டாவது பிரிலோயின் மண்டலம் எனப்படும். k-இன் மதிப்பு முதல் பிரிலோயின் மண்டலத்திற்கு வெளியே இருப்பதாகக் கொள்வோம்

$$k_m = k + 2\pi m/a \text{ இதில் } m = \pm1, \pm2, \pm3.....$$

இதனை nஆவது துகளின் இடப்பெயர்ச்சி x_n மற்றும் அதிர்வெண்ணுக்கான தீர்வுகளில் பதிலீடு செய்ய

$$x_n = A\, e^{i(\omega t + k_m na)}$$

$$x_n = A\, e^{i[\omega t + (k+2\pi m/a)na)]}$$

$$x_n = A\, e^{i[\omega t + kna]}$$

ஏனெனில் m,n இரண்டும் முழு எண்களாகும். $e^{i2\pi mn} = 1$

$$\omega = \sqrt{\left[\frac{K}{m}\right]} \sin k_m a/2$$

$$= \sqrt{\left[\frac{K}{m}\right]} \sin a/2\, [k+2\pi m/a)]$$

$$= \sqrt{\left[\frac{K}{m}\right]} \sin ka/2$$

இது தீர்வும், அதிர்வெண்ணும் அதிர்வின வகைகளுக்கு ஒரேமாதிரியாக இருக்கின்றன என்பதைத் தெரிவிக்கிறது. அதாவது

அணித்தளத்தின் அதிர்வியக்கம் அலைமாறிலி kக்கு உள்ளதுபோலவே பிற அலைமாறிலிகளான $k + 2\pi m/a$ க்கும் உள்ளது. அணித்தளத்தில் அதிர்வியக்க நிலைக்கும், அலைவெக்டார் k க்கும் இடையே ஒரு தனித்தன்மை வாய்ந்த தொடர்பை நிறுவ, k, 2/a என்ற நெடுகைக்குள் உட்பட்டிருக்குமாறு அமைத்துக்கொள்ள வேண்டும். $-\pi/a \leq k \leq \pi/a$ என்ற நிபந்தனை முதல் பிரிலோயின் மண்டலத்தைக் குறிக்கும். இரண்டாவது பிரிலோயின் மண்டலம் இரு பகுதிகளாக, முதல் பிரிலோயின் மண்டலத்திற்கு இரு பக்கங்களிலும் அமைந்துள்ளது. முதல் பிரிலோயின் மண்டலத்தின் எல்லை $(k_{பெருமம்} = \pm\pi/a)$ யில் nஆவது அணுவின் இடப்பெயர்வு

$$x_n = A\, e^{i(\omega t - k_{பெருமம்}\, na)}$$

இது கடந்து செல்லும் அலையைக் குறிப்பிடுவதில்லை. $nk_{பெருமம்}a = \pm n\pi$ என்பதால், இது நிலையாக நிற்கும் அலையைக் குறிப்பிடும்.

$$x_n = A\, e^{i\omega t}\; e^{\pm in\pi} = A\, e^{i\omega t} \cos n\pi$$

$\cos n\pi = \pm 1$ என்பதால், இந்த நிலைஅலைக்கு அடுத்தடுத்துள்ள அணுக்கள் ஒன்றுக்கொன்று எதிர்கட்டத்தில் இயக்கம் கொண்டிருக்கும். இந்த நிபந்தனையானது படிக அணித்தளத்தின் வழியாகக் கடந்து செல்ல முடியாத எக்ஸ்கதிர் அலைகளுக்கான பிராக் எதிரொளிப்பிற்கு இணையானது. இந்த அலை திரும்பத் திரும்ப எதிரொளிக்கப்பட்டு முன்னும் பின்னுமாகச் செல்வதால் நிலை அலை தோன்றுகிறது. $k_{பெருமம்} = \pm\pi/a$ என்பது பிராக் விளிம்பு விளைவின் நிபந்தனைக்கு ஏற்ப இருக்கிறது. பிராக் விதி $2d\sin\theta = n\lambda$ -ன்படி $\theta = \pi/2$, $d = a$, $k = 2\pi/\lambda$, $n = 1$ எனவே $\lambda = 2a$.

ஒரு குறிப்பிட்ட நீளமுள்ள ஒற்றைப் பரிமாண அணித்தளத்தில் இயல்வகை அதிர்வினங்கள்

L என்ற ஒரு குறிப்பிட்ட நீளமுள்ள ஒற்றைப் பரிமாண அணித்தளத்தில் காணப்படும் இயல்வகை அதிர்வினங்களைக் கணக்கிடுவோம். 'a' என்ற அணுவிடைத் தொலைவுடன் L நீளமுள்ள அணித்தளத்தில் (N+1) அணுக்கள் அமைந்திருப்பதாகவும், அவற்றை n=0, n=N வரை எண்ணால் குறிப்பிட்டிருப்பதாகவும் கொள்வோம்.

அணித்தளத்தில் அலை பரவிச்செல்லும்போது, நிலையான எல்லையிலிருந்து எதிரொளிக்கப்படுவதால் ஊடகத்தில் நிலையலை உருவாகிறது. இதனை

$$x_n = A \sin kna \sin \omega t$$

வரம்பு நிபந்தனைக்கு உட்படுத்த

$$n=0,\ x_n = x_o = 0$$

$$n=N,\ x_N = A \sin kNa \sin\omega t = 0$$

$$\sin kNa = 0 \text{ என்பதால்}$$

$$k = \pi/Na,\ 2\pi/Na,\ \ldots\ N\pi/Na$$

$Na=L$ என்பதால் $k = \pi/L,\ 2\pi/L,\ \ldots\ N\pi/L$

இங்கு $k=0$, $k=N\pi/L$ ஆகிய மதிப்புகளை நாம் தவிர்க்கவேண்டும். ஏனெனில் இது எல்லா அணுக்களும் அதிர்வியக்கமின்றி அமைதிநிலையில் இருப்பதைக் குறிப்பிடுகிறது. எனவே

$$k = \pi/L,\ 2\pi/L,\ \ldots\ (N-1)\pi/L$$

எனவே இங்குத் தனித்த, அனுமதிக்கப்பட்ட k மதிப்புகள் இருப்பதாகக் கூறலாம். இவ்வெண்ணிக்கை, அதிர்வியக்கத்திற்கு அனுமதிக்கப்படுகிற அணுக்களின் எண்ணிக்கையேயாகும். எனவே இங்கு (N-1) இயல்வகை அதிர்வினங்கள் உள்ளன எனலாம்.

3.4 நேரிய ஈரணு அணித்தளம் (The linear diatomic lattice)

ஈரணு அணித்தளத்தில் ஒவ்வொரு மூலக்கூறிலும் (NaCl) போல ஈரணுக்கள் இணைந்திருக்கும். ஒற்றைப் பரிமாண வெளியில் இவ்விரு அணுக்களும் மாறி மாறி அமைந்திருந்தாலும் அணுவிடைவெளி 'a' எனச் சீராக இருக்கட்டும். அதாவது ஒரேமாதிரியான அடுத்தடுத்த இரு அணுக்களுக்கு இடைப்பட்டவெளி 2a ஆகும். ஈரணுவிலுள்ள அணுக்கள் வெவ்வேறானதாக இருந்தால் அவற்றின் நிறையும் வெவ்வேறாக இருக்கும். கனமான அணுவின் நிறையை M என்றும், இலேசான அணுவின் நிறையை m என்றும் கொள்வோம். படிகத்தின் சமச்சீர்மை அச்சுத் திசையில் அலை பரவிச் செல்வதாகக் கருதுவோம். இது NaClக்கு (111)ஆக உள்ளது. கனமான அல்லது இலேசான அயனிகளுக்கான இயக்கச் சமன்பாடுகளைப்

பிரித்துக்கொள்ள வரிசையில் இரட்டையெண் கொண்டவை இலேசானவை என்றும் ஒற்றையெண் கொண்டவை கனமானவை என்றும் கொள்ளலாம்.

$$\left.\begin{aligned} m\frac{\partial^2 x_{2n}}{\partial t^2} &= K(x_{2n+1} + x_{2n-1} - 2x_{2n}) \\ M\frac{\partial^2 x_{2n+1}}{\partial t^2} &= K(x_{2n+2} + x_{2n} - 2x_{2n-1}) \end{aligned}\right\} \quad (3.15)$$

ஒவ்வொரு அணுவும் அருகில் அடுத்துள்ள அணுக்களோடு மட்டும் இடைவினை புரிகின்றன என்று அனுமானிப்பதால், அருகருகே உள்ள ஒரு ஜோடி அணுக்களுக்கிடைப்பட்ட விசைமாறிலி சமமாக இருக்கும் என்று கொள்ளப்பட்டுள்ளது. ஆயினும் அணுக்களின் நிறை வெவ்வேறாக இருப்பதால், அவற்றின் அதிர்வியக்க அலைவீச்சு வெவ்வேறு மதிப்புடையதாக இருக்கும் எனலாம். இவற்றை முறையே A (இலேசான அணு), B (கனமான அணு) என்போம். எனவே இயக்கச் சமன்பாட்டின் தீர்வை

$$\begin{aligned} x_{2n} &= A\, e^{i(\omega t - 2kna)} \\ x_{2n+1} &= B\, e^{i[\omega t - (2n+1)ka]} \end{aligned} \quad (3.16)$$

இவ்விரு தொடர்புகளையும் 't'யைப் பொறுத்து இருமுறை பகுக்க

$$\frac{d^2 x_{2n}}{dt^2} = -\omega^2 A\, e^{i(\omega t - 2kna)}$$

$$\frac{d^2 x_{2n+1}}{dt^2} = -\omega^2 B\, e^{i[\omega t - (2n+1)ka]}$$

இதில் k என்பது ஒரு குறிப்பிட்ட வகை அதிர்வின் அலைவெக்டாராகும். வெவ்வேறு வகையான அணுக்கள் ஒரே

அலைவியக்கத்தில் ஈடுபட்டிருப்பதால் அவற்றின் அதிர்வெண் சமமாகக் கொள்ளப்பட்டுள்ளது.

$x_{2n,}$ x_{2n+1}க்குப் பெற்றதுபோல $x_{2n+2,}$ x_{2n-1}க்கும் இயக்கச் சமன்பாடுகள் மூலம் தீர்வுகளைப் பெறலாம்.

$$x_{2n+2} = A\, e^{\,i\,[\omega t - (2n+2)ka]} = x_{2n}\, e^{-2i\,ka}$$

$$x_{2n-1} = B\, e^{\,i\,[\omega t - (2n-1)ka]} = x_{2n+1}\, e^{2i\,ka}$$

இம்மதிப்புகளை $x_{2n,}$ x_{2n+1}க்கான இயக்கச் சமன்பாடுகளில் பதிலீடு செய்ய

$$-m\omega^2 A = KB\,(e^{-ika} + e^{ika}) - 2KA$$

$$-M\omega^2 B = KA\,(e^{-ika} + e^{ika}) - 2KB$$

$e^{-ika} + e^{ika} = 2\cos ka$ என்பதால், மேற்கண்ட சமன்பாடுகளை மாற்றியமைத்து

$$(2K - \omega^2 m)A - (2K\cos ka)\,B = 0$$

$$-(2K\cos ka)A - (2K - \omega^2 M)\,B = 0 \qquad (3.17)$$

எனக் குறிப்பிடலாம். ஒருபடித்தான, நேரிய இந்த இணைச்சமன்பாடுகள், A,Bக்கு சுழியில்லாத தீர்வுகளைப் பெற்றிருக்க A,Bயின் குணகங்களான அணிக்கோவை சுழியாக இருக்க வேண்டும். எனவே

$$\begin{vmatrix} 2K - \omega^2 m & 2K\cos ka \\ 2K\cos ka & 2K - \omega^2 M \end{vmatrix} = 0$$

அல்லது $(2K - \omega^2 m)\,(2K - \omega^2 M) - 4K^2\cos^2 ka = 0$

$$\omega^4 - \frac{2K(m+n)}{mM}\omega^2 + \frac{2K^2 \sin^2 ha}{mM} = 0$$

$$\omega^2 = k\left(\frac{1}{m} + \frac{1}{M}\right) \pm K\sqrt{\left(\frac{1}{m} + \frac{1}{M}\right)^2 - \frac{4\sin^2 ka}{mM}} \qquad (3.18)$$

இதுவே நேரிய ஈரணு அணித்தளத்திற்கான நிறப்பிரிகைத் தொடர்பாகும். இதனை நாம் நேரிய ஒற்றையணு அணித்தளத்திற்கான இணைத்தொடர்பைக் (3.12) கொண்டு ஒப்பிடலாம்.

$$\omega^2 = \frac{4K}{m}\sin^2\frac{ka}{2}$$

ஈரணுக்களாலான அணித்தளத்தில் அதிர்வியக்கத்தின் அதிர்வெண் ω ஒவ்வொரு k மதிப்பிற்கும் இரு நேர்மின் மதிப்புகளைக் கொண்டிருக்கும். அவை (3.18) ஆல் குறிப்பிடப்படும் இரு தீர்வுகளைாகும். அவற்றை நாம் ω_+ (நேர்மத்தீர்வு) என்றும் (எதிர்மத்தீர்வு) என்றும் குறிப்பிடுவோம். $k \to 0$ என்ற நிலையில் சைன் கூறு தரும் மதிப்பைப் புறக்கணிக்கலாம். அந்நிலையில் நேர்மத்தீர்வு

$$\omega_+ = \sqrt{2K\left(\frac{1}{m} + \frac{1}{M}\right)} \qquad (3.19)$$

அதுபோல $k \to \pi/2a$ எனில், சைன் கூறின் மதிப்பு -4/mM ஆகும்.

$$\omega_+ = \left(\frac{2K}{m}\right)^{1/2} \qquad (3.20)$$

அதாவது $-\pi/2a \le k \le \pi/2a$ முதல் பிரிலோயின் மண்டல நெடுக்கைக்குட்பட்ட பகுதியில், kஇன் பெருமமதிப்பான $\pm\pi/2a$ல், ω_+ ன் மதிப்பை இது தருகிறது.

இனி எதிர்மத் தீர்வைக் கருத்திற் கொள்வோம். $k \rightarrow 0$ என்றால், சைன்கூறின் மதிப்பை இங்கு நாம் புறக்கணித்து விட முடியாது. ஏனெனில் இது மட்டுமே தீர்வுக்குச் சுழியற்ற மதிப்பைத் தரக்கூடியதாக இருக்கிறது. θன் தாழ்ந்த மதிப்பிற்கு $\sin\theta \approx \theta$ என்பதால்

$$\omega_-^2 = \frac{K(m+M)}{mM} - K\left(\left(\frac{m+M}{mM}\right)^2 - \frac{4k^2a^2}{mM}\right)^{1/2}$$

$$= \frac{K(m+M)}{mM} - K\,\frac{(m+M)}{mM}\left(1 - \frac{mM}{(m+M)^2}\,4k^2a^2\right)^{1/2}$$

$$= \frac{K(m+M)}{mM}\left(1 - 1 + \frac{mM}{(m+M)^2}\,2k^2a^2\right)$$

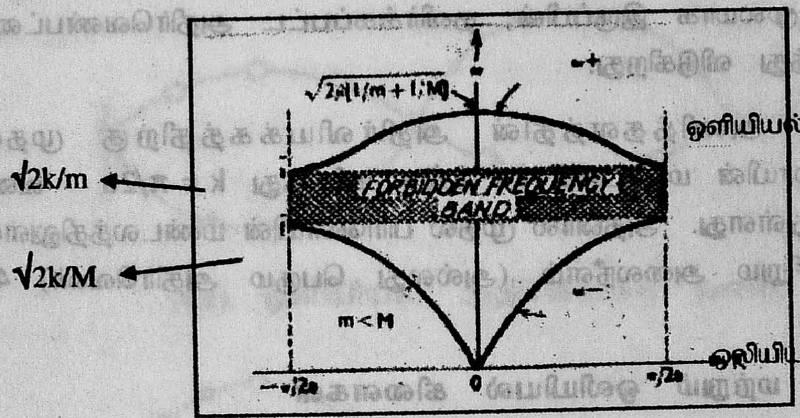
$$= \frac{2K\,k^2a^2}{(m+M)}$$

அல்லது $$\omega_- = ka\left(\frac{2K}{(m+M)}\right)^{1/2} \qquad (3.21)$$

$k \rightarrow \pi/2a$ எனில், நேர்மத்தீர்வுக்கு உள்ளது போலவே இருக்கிறது.

$$\omega = \left(\frac{2K}{M}\right)^{1/2} \qquad (3.22)$$

சமன்பாடு (3.18)ஐக் கொண்டு, kக்கும் ωவிற்குமான ஒரு வரைபடம் வரையலாம். இதில் சிறப்புத் தீர்வுகளான (3.19), (3.20) (3.21) மற்றும் (3.22)ம் குறிப்பிடப்பட்டுள்ளன.



படம் 3.6 ஈரணு அணித்தளத்திற்குரிய ஒளியியல் மற்றும் ஒலியியல் கிளைகள்

இந்த வரைபடம் கீழ்கண்ட உண்மைகளைத் தெரிவிக்கிறது.

1. அதிர்விற்கு அனுமதிக்கப்படுகிற அதிர்வெண்கள் இரு கிளைகளாகப் பிரிந்துள்ளன. மேற்பகுதிக்கிளையை 'ஒளியியல் கிளை' என்றும், கீழ்பகுதிக்கிளையை 'ஒலியியல் கிளை' என்றும் கூறுவர். இதில் ஒலியியல் கிளை ஒற்றை அணுக்களாலான அணித்தளத்திற்குரிய பிரிகைத் தொடர்பிற்கு ஏற்ப ஒன்றுபோல இருக்கிறது. ஆனால் ஒளியியல் கிளை பிரிதொரு வகையான அலை இயக்கத்தைச் சுட்டிக்காட்டுகிறது.

2. மீட்சி அலைகள் ஈரணு அணித்தளத்தில் பரவும்போது ஏற்படும் அனுமதிக்கப்பட்ட இரு அதிர்வெண்கிளைகளுக்கு இடையே ஒரு தவிர்க்கப்பட்ட அதிர்வெண்பட்டையொன்று காணப்படுகிறது. இப்பகுதியில் அலையியக்கத்திற்கான தீர்வுகளுக்கு வாய்ப்பில்லை. இந்தப் பட்டையின் அகலம், ஈரணுக்களிலுள்ள

அணுக்களின் நிறைதகவைச் சார்ந்திருக்கிறது. $k \to \pi/2a$ என்ற நிலையில்,

$$\omega_+ - \omega_- = \left(\frac{2K}{m}\right)^{1/2}\left(1 - \sqrt{\frac{m}{M}}\right)$$

m/M=1 எனில், அதாவது ஈரணுவிலுள்ள இரு அணுக்களும் ஒரே மூலமாக இருப்பின், தவிர்க்கப்பட்ட அதிர்வெண்பட்டை மறைந்து விடுகிறது.

3. ஈரணு அணித்தளத்தின் அதிர்வியக்கத்திற்கு முதல் பிரிலோயின் மண்டலம் $k = -\pi/2a$ லிருந்து $k = \pi/2a$ வரை விரிந்துள்ளது. அதனால் முதல் பிரிலோயின் மண்டலத்திலுள்ள மிகச்சிறும அலைநீளம் (அல்லது பெரும அதிர்வெண்) 4a ஆகும்.

ஒளியியல் மற்றும் ஒலியியல் கிளைகள்

ஒளியியல் மற்றும் ஒலியியல் கிளைகளுக்கு உட்பட்ட அதிர்வினங்களுக்கு இடையேயான இயற்பியல் வேறுபாடு பற்றியும், அவற்றை அவ்வாறு அழைப்பதற்கான காரணம் பற்றியும் இனித் தெரிந்து கொள்வோம்.

இவ்விரு கிளைகளுக்கும், $k \to 0$ என்ற நிலையில், A/Bயின் மதிப்பைக் கணக்கிடுவோம். Aயும் Bயும் முறையே இலேசான மற்றும் கனமான அணித்தள அணுக்களின் அதிர்வியக்கத்தின்போது ஏற்படும் அலைவீச்சாகும். ஒளியியல் கிளைக்கு

$k \to 0$, $\cos ka \to 1$

எனவே (13.17)லிருந்து,

$-\omega^2 mA = 2KB - 2KA$ அல்லது $\omega^2/2K = -\ B-A\ /\ mA$

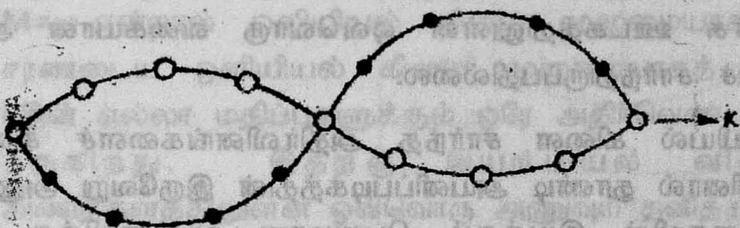
$-\omega^2 MB = 2KA - 2KB$ அல்லது $\omega^2/2K = -\ A-B\ /\ MB$

$A-B\ /\ MB = B-A\ /\ mA$ என்பதால்

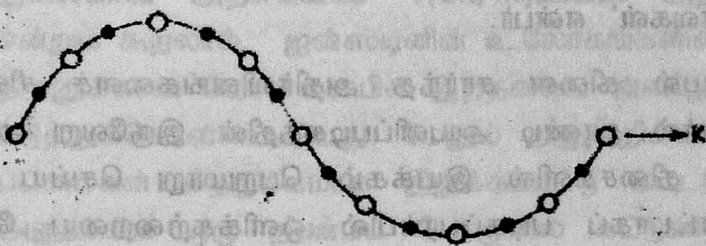
$$A/B = -\ M/m \qquad (3.23)$$

இத்தொடர்பு, ஈரணுவிலுள்ள இரு அணுக்களும் ஒன்றுக்கொன்று எதிர்திசையில் இயங்குவதாகத் தெரிவிக்கிறது. அவற்றின் அலைவீச்சு நிறைக்கு எதிர்விகிதத் தொடர்பில் இருப்பதால் ஈரணு அலகு மூலக்கூறின் நிறை மையம் அவற்றின் இயக்கத்தின்போது நில்லயாக இருக்கிறது. படம் 3.7 (அ).

இனி நாம் ஒலியியல் கிளைக்குரிய A/B-ன் மதிப்பைக் கணக்கிடுவோம். $k \to 0$ எனில் $\cos ka \to 1 - k^2a^2/2$



(அ) ஒளியியல் அதிர்வியக்க வகை



(ஆ) ஒலியியல் அதிர்வியக்க வகை

படம்.3.7 நேரிய ஈரணு அணித்தளத்தில் ஒளியியல் அதிர்வியக்கக் குறுக்க அலையும், ஒலியியல் அதிர்வியக்க குறுக்கலையும்.

(13.17)ஐக் கொண்டு

$$-\omega^2 mA = 2KB\,(1 - k^2a^2/2) - 2KA$$

$$-\omega^2 MB = 2KA\,(1 - k^2a^2/2) - 2KB$$

இவற்றைக் கூட்ட

$$-\omega^2(mA+MB) = -k^2a^2\,K(A+B)$$

இதில் $-\omega^2$ன் மதிப்பைப் பதிலீடு செய்ய

$$2k/(m+M) . (mA+MB) k^2a^2 = k^2a^2 \ K(A+B)$$

$$2 (mA+MB) = (m+M) (A+B)$$

$$A (m-M) = B(m-M)$$

அல்லது $A/B = 1$ (3.24)

அதாவது அடுத்தடுத்த அணுக்கள் ஒரே திசையில் இடப்பெயர்ச்சியைக் கொண்டுள்ளன. அதன் நிறைமையம் ஒரே பக்கமாக நகர்ந்து செல்கிறது. (படம் 13.7.ஆ) மேலும் இதில் அலைவீச்சு ஊடகத்திலுள்ள ஒவ்வொரு வகையான அணுவின் நிறையைச் சார்ந்திருப்பதில்லை.

ஒலியியல் கிளை சார்ந்த அதிர்வினங்களைச் சில வகை விசைகளினால் தூண்டி அயனிப்படிகத்தின் இருவேறு அணுக்களும் ஒரே திசையில் இயக்கம் பெறுமாறு விளைவிக்க முடியும். எடுத்துக்காட்டாக, படிகப்பரப்பில் ஒலிக்கற்றையை நேரடியாக விழுமாறு செய்யலாம். இதன் காரணமாக இத்தகைய அதிர்வினங்களை 'ஒலி அதிர்வுகள்' என்பர்.

ஒளியியல் கிளை சார்ந்த அதிர்வினங்களைச் சில வகை விசைகளினால் தூண்டி அயனிப்படிகத்தின் இருவேறு அணுக்கள் எதிர்-எதிர் திசைகளில் இயக்கம் பெறுமாறு செய்ய முடியும். எடுத்துக்காட்டாகப் படிகப்பரப்பில் ஒளிக்கற்றையை நேரடியாக விழுமாறு செய்ய இதனைப் பெறலாம். இதில் ஒன்றை நாம் கருத்திற் கொள்ளவேண்டும். ஒளியியல் கிளை சார்ந்த அதிர்வினங்களைத் தோற்றுவிக்க, ஈரணுவிலுள்ள அணுக்களின் நிறை வெவ்வேறாக இருக்க வேண்டும் என்ற கட்டாயமில்லை, அவை நேர்-எதிர் மின் அயனிகளாக இருக்க வேண்டும் என்பதுமில்லை. ஓரலகு செல்லில் ஈரணுக்கள் இருக்கவேண்டும் என்பது மட்டுமே கட்டாயமாகும்.

ஈரணு அணித்தளம் சார்ந்த பிற இயற்பியல் உண்மைகள் பின்வருமாறு:-

1. அணித்தளத்தில் இருக்கும் அணுக்கள் எல்லாம் சமநிறைகொண்டனவாக இருந்தால், அதிர்வெண் நெடுக்கை என்ற வரம்பிற்கு உட்பட்டிருக்கும். மேலும் ஒற்றை அணுக்களாயினும், ஈரணுக்களாயினும் இந்நெடுக்கை சமமாக இருக்கும். ஒற்றை அணுவிற்கு முழுநெடுக்கையும் ஒலியியல்

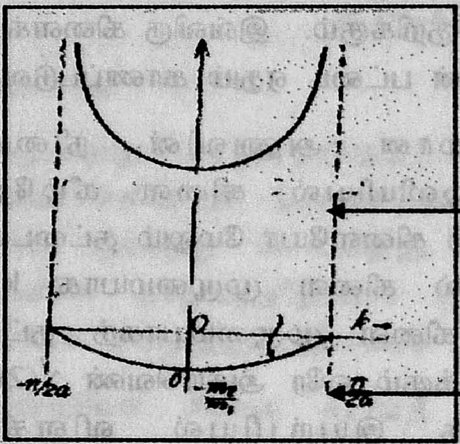
கிளைக்கு உட்பட்டதாக இருக்கும். ஆனால் ஈரணுவிற்கு இது இருகூறாகப்பிரிந்து, $0 < \omega^2 < 2K/m$ என்ற நெடுக்கை ஒலியியல் கிளையையும், $2K/m < \omega^2 < 4K/m$ என்ற நெடுக்கை ஒளியியல் கிளையையும் குறிக்கும். இவ்விரு கிளைக்கிடையே தவிர்க்கப்பட்ட அதிர்வெண் பட்டை ஏதும் காணப்படுவதில்லை.

2. ஈரணுவிலுள்ள கனமான அணுவின் நிறை (M) அதிகரிக்கும்போது, ஒலியியல் கிளை கீழ்நோக்கிச் சரணடைகிறது. ஒளியியல் கிளையோ மேலும் தட்டையாகிறது. $M=\infty$ என்றால் ஒலியியல் கிளை முழுமையாக k அச்சில் சரணடைய ஒளியியல் கிளை முழுமையாகத் தட்டையாகி kஇன் எல்லா மதிப்புகளுக்கும் ஒரே அதிர்வெண் $\sqrt{(2K/m)}$ஐத் தருகிறது. இதற்கு இயற்பியல் விளக்கமாக, அணித்தளத்திலுள்ள ஒவ்வொரு அணுவும் தனித்தியங்கவல்ல, சுதந்திரமான அணுவாக இயங்குகின்றன என்றும், அண்டையிலுள்ள அணுவின் தாக்கம் ஏதுமின்றி, தனக்குரிய இயல்பான அதிர்வெண் $\sqrt{(2K/m)}$உடன் அதிர்வுறுகின்றன என்றும் கூறலாம். ஐன்ஸ்டினின் உலோகங்களின் வெப்பஏற்புத் திறனுக்கான கொள்கையில் இத்தகைய அணித்தள மாதிரியே எடுத்துக்கொள்ளப்பட்டது. மேலும் அனுமதிக்கப்பட்ட ஆற்றல் பட்டைகள் நெருக்கமாக இறுக்கப்பட்டு மட்டங்களாகின்றன. அணுக்கள் ஒரு திண்மப் பொருளில் கட்டுண்டிருக்கும்போது ஆற்றல் பட்டைகளும், அவை தனித்து இயங்கும்போது ஆற்றல் மட்டங்களும் ஏற்படும் எனலாம்.

3. ஈரணுவிலுள்ள இலேசான அணுவின் நிறை (m) குறையும்போது, ஒளியியல் கிளை மேல்நோக்கி இடம்பெயருகிறது. வரம்பு நிலையான $m \rightarrow 0$ என்ற நிலையில், அது முழுமையாக மறைந்து விடுகிறது. எனினும் அதிர்வியல் கிளை இதனால் சிறிதும் பாதிக்கப்படுவதில்லை. ஏனெனில் $m \rightarrow 0$ நாம் அணித்தள இடைவெளி 2aயுடன் கூடிய ஒற்றையணு அணித்தளத்தைப் பெறுகிறோம்.

4. அணித்தளத்திலுள்ள கனமான அணுக்களின் இயக்கம் மற்றும் இலேசான அணுக்களின் இயக்கம் இவற்றின் அலைவீச்சு முறையே B,A என்றால் இவற்றின் தகவான B/Aக்கும்,

அலைவெக்டர் kக்கும் ஒரு வரைபடம் ஒளியியல் மற்றும் ஒலியியல் கிளைக்காக வரையலாம்.



படம். 3.8 அலைவீச்சுத் தகவிற்கும் kக்கும் இடைப்பட்ட வரைபடம்

$k = \pm\pi/2a$ என்ற நிலையில் B/Aன் மதிப்பு ஒளியியல் கிளைக்குச் சுழியாகவும், ஒலியியல் கிளைக்கு அனந்தமாகவும் இருக்கிறது. இதிலிருந்து, ஒலியியல் கிளையில் இலேசான அணுக்கள் (நிறைm) எல்லாம் ஓய்வில் இருக்கின்றன (A=0) என்றும், ஒளியியல் கிளையில் கனமான அணுக்கள் (நிறைM) எல்லாம் ஓய்வில் இருக்கின்றன (B=0) என்று முடிவு செய்யலாம். அதாவது பிரிலோயின் மண்டலத்தின் விளிம்பில், துணை அணித்தளங்களுள் ஏதாவது ஒன்று மட்டுமே அதிர்வுறும் என்று கூறலாம். ஒலியியல் கிளையில் இந்த அணித்தளம், கனமான அணுக்களைக் கொண்டதாகவும், ஒளியியல் கிளையில் இலேசான அணுக்களைக் கொண்டதாகவும் இருக்கிறது. நிறைகள் சமமாக இல்லாதிருந்தால், இந்த இருவேறு வகையினங்களும் வெவ்வேறு அதிர்வெண்களைப் பெற்றிருக்கும். kஇன் மதிப்பு $\pi/2a$ யிலிருந்து குறையும் போது இருதுணை அணித்தளங்களும் அதிர்வுறத் தொடங்குகின்றன.

ஈரணு அணித்தளத்தில் அனுமதிக்கப்பட்ட அதிர்வெண்கள் இரு பகுதிகளாகப் பிரிந்து ஒளியியல், ஒலியியல்

கிளைகளாயின. ஓரலகு செல்லில் N அணுக்கள் இருப்பின், அனுமதிக்கப்பட்ட ஆற்றல் பட்டை N பட்டைகளாகப் பிரியும்.

ஓர் அதிர்வெண் பட்டையில் இருக்கக்கூடிய இயல்வகை அதிர்வினங்களின் எண்ணிக்கை

L நீளமுள்ள ஒரு படிகத்தைக் கருதுவோம். வரம்பு நிபந்தனையின்படி

$$x_{2n}(x) = x_{2n}(x+L)$$

(13.16)இன்படி

$$A\, e^{i(\omega t - 2kna)} = A\, e^{[\, i\, (\omega t - 2k(na+L))]}$$

$$e^{-2i\, kL} = 1$$

$$\text{அல்லது } k = \pm\pi/L, \pm 2\pi/L, \ldots\, N\pi/2L$$

இதில் N என்பது படிகத்திலுள்ள ஓரலகு அடிப்படைக் கூறுகளின் எண்ணிக்கை. எனவே Na=L. kன் பெரும மதிப்பு $N\pi/2L$ என எடுத்துக் கொள்ளப்பட்டது. ஏனெனில் இது $\pm\pi/2a$க்குச் சமமாக இருக்கவேண்டும். ஒவ்வொரு kஇன் மதிப்பும் ஒரு இயல்வகை அதிர்வினத்தைக் குறிப்பிடுவதால் ஒரு பட்டையில் இயலக்கூடிய இயல்வகை அதிர்வினத்தின் எண்ணிக்கை N எனலாம். இது அதில் இருக்கக்கூடிய ஓரலகு செல்களின் எண்ணிக்கையே ஆகும்.

3.5 அகச்சிவப்பு நெடுக்கையில் ஒளியியல் பண்புகள் (Optical properties in the infrared)

NaCl போன்று ஈரணுக்களாலான ஓர் அணித்தளத்தை எடுத்துக்கொள்வோம். இது x-அச்சில் நீண்டு விரிந்துள்ளதாகவும் இருக்கட்டும். அணுக்களாலான சங்கிலித் தொடருக்கு நேர்குத்துத் திசையில் ஓர் ஒளிக்கற்றை விழுவதாகக் கொள்வோம். ஒளி என்பது மின்காந்த அலை. அதில் மின்புலமும் காந்தப்புலமும் ஒன்றுக்கொன்று செங்குத்தாகவும், ஒளி செல்லும் திசைக்குச் செங்குத்தாகவும் இருக்கும். X-அச்சுத்திசையில் அலைவுறும் மின்புல வெக்டார், அணித்தளத்தை ஒளியியல் வகை இனத்தில் அதிர்வுறத் தூண்டுகிறது. அணித்தளத்தில் அடுத்தடுத்துள்ள நேர் மற்றும் எதிர்மின் அயனிகள்மீது இந்த மின்புலம் எதிர்-எதிர் திசைகளில் விசையை ஏற்படுத்துகிறது. இத்தூண்டலினால் திணிப்பு நெட்டலை

அதிர்வுகள் தோற்றுவிக்கப்படுகின்றன. இதன் அதிர்வெண் தூண்டும் மூலத்தின் அதிர்வெண்ணாக இருக்கிறது.

இதுபோன்ற புலம் செயல்படும்போது, நேர்மின் அயனிமீது $eE_o e^{i\omega ot}$ என்ற விசையும், எதிர்மின் அயனிமீது $-eE_o e^{i\omega ot}$ என்ற விசையும் செயல்படும். இதில் ω_o என்பது ஒளியின் அதிர்வெண், E_o என்பது அதன் மின்புல வெக்டாரின் எண்ணளவு மதிப்பாகும். இவற்றின் இயக்கச் சமன்பாடுகளை

$$m \frac{d^2x_{2n}}{dt^2} = K [x_{2n+1} + x_{2n-1} - 2x_{2n}] + eE_o e^{i\omega ot}$$

$$M \frac{d^2x_{2n+1}}{dt^2} = K [x_{2n+2} + x_{2n} - 2x_{2n+1}] - eE_o e^{i\omega ot} \qquad (3.25)$$

இதன் தீர்வாக (3.16)ஐக் கொள்ளலாம். இதனை மேற்கண்ட சமன்பாட்டில் பதிலீடு செய்ய

$$-m\omega_o^2 x_{2n} = K [(1+e^{2ika}) \ x_{2n+1} - 2x_{2n}] + eE_o e^{i\omega ot}$$

$$-m\omega_o^2 x_{2n+1} = K [(1+e^{-2ika}) \ x_{2n} - 2x_{2n+1}] - eE_o e^{i\omega ot} \qquad (3.26)$$

ஒளியால் ஒளியியல் அதிர்வுகள் தூண்டப்பட்டால் $k=0$ எனவே

$$eE_o e^{i\omega ot} = (2K-m_o^2)x_{2n} - 2Kx_{2n+1}$$

$$-eE_o e^{i\omega ot} = -2Kx_{2n} + (2K-M\omega_o^2)x_{2n+1} \qquad (3.27)$$

இவை சமமானதாகவும், எதிரானதாகவும் இருப்பதால்,

$$(2K-m\omega_o^2)x_{2n} - 2Kx_{2n+1} = 2Kx_{2n} - (2K-M\omega_o^2)x_{2n+1}$$

$$-m\omega_o^2 x_{2n} = M\omega_o^2 \ x_{2n+1} \qquad (3.28)$$

அல்லது $x_{2n} = -M/m \ x_{2n+1}$

x_{2n} ன் இம்மதிப்பை (3.27)இல் பதிலீடு செய்ய

$$eE_o e^{i\omega ot} = (2K-m_o^2) \ (-M/m \ x_{2n+1}) - 2Kx_{2n+1}$$

$$x_{2n+1} = \frac{-eE_o e^{i\omega ot}}{(2K-m\omega_o^2)\,M/m + 2K}$$

$$= \frac{-eE_o e^{i\omega ot}}{2K(1+ M/m] - m\omega_o^2}$$

$$= \frac{e/M\ E_o e^{i\omega ot}}{\omega_o^2 - 2K\,(m+M/mM)}$$

ஒளியியல் கிளைக்கு $\omega_+^2\,(o) = 2K\,(m+M/mM)$ என்பதால்

$$x_{2n+1} = \frac{e/M\ E_o e^{i\omega ot}}{\omega_o^2 - \omega_+^2\,(o)}$$

(3.28)இல் பதிலீடு செய்ய

$$x_{2n} = \frac{- e/m\ E_o e^{i\omega ot}}{\omega_o^2 - \omega_+^2\,(o)} \qquad (3.29)$$

அணித்தளத்தின்மீது விழும் ஒளியின் அதிர்வெண், $\omega_+(o)$ ஆக இருக்கும்போது, அதாவது ஒளியியல் கிளை சார்ந்த வகையினத்தில் அணித்தளத்தின் இயல்பு அதிர்வெண்ணுக்குச் சமமாக இருக்கும்போது ஒத்ததிர்வு ஏற்பட்டு, அயனிகளின் அதிர்வியக்க அலைவீச்சு மிகவும் அதிகமாக இருக்கும். ஒத்ததிரும்போது, ஒத்ததிர்வெண்ணில் அயனிகள் தீவிரமாக மின்காந்த ஆற்றலைக் கதிர்வீச்சாக வெளிப்படுத்துகின்றன. இந்த நிகழ்வு அயனிப் படிகத்தில் காணப்படுகிறது.

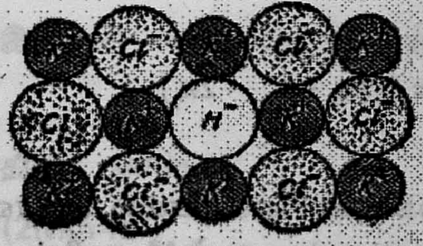
ஓர் அகச்சிவப்பு மூலத்திலிருந்து தொடர்ச்சியான நீண்ட அலைநீள நெடுக்கைக்குட்பட்ட கதிர்வீச்சை அயனிப் படிகத்தின்மீது பலமுறை விழச் செய்து எதிரொளிக்கப்படுகிறது. எஞ்சி நிற்கும் கதிர்வீச்சு,

அப்படிகத்தின் அணித்தளத்தின் ஒத்ததிர்வெண்ணுக்குச் சமமான அதிர்வெண் கொண்ட ஒற்றைநிற அகச்சிவப்பு ஒளியாக இருக்கும். இதற்குக் காரணம், பிற அதிர்வெண் கொண்ட ஒளிக்கு எதிரொளிப்புத்திறன் மிகவும் குறைவு என்பதால் பலமுறை எதிரொளிக்கப்படும்போது வலிமையாக மெலிவடைகிறது. $\omega_+(o)$ க்கு ஈடான அலைநீளத்தை ரெஸ்ட்ராஹல் (Restrstrahl) அலைநீளம் என்பர்.

ரெஸ்ட்ராஹல் விளைவைக் கொண்டு, ஒரு படிகம் அயனிப்படிகமா, அல்லது சகப்பிணைப்புப் படிகமா என அறிந்து அதிலிருக்கும் பிணைப்புகள் பற்றிய விவரங்களைப் பெறமுடியும். ஏனெனில் ரெஸ்ட்ராஹல் விளைவு சகப்பிணைப்புப் படிகத்தில் அதிலுள்ள அணுக்கள் அயனிகளாக இல்லாததால் ஒளியியல் கிளை சார்ந்த அதிர்வியக்கத்தைத் தூண்டுவதில்லை. கலப்புப் படிகத்தில் அயனிப்பிணைப்பும், சகப்பிணைப்பும் இருக்கும். அயனிக்கூறுகளின் ஒப்புவலிமையை ரெஸ்ட்ராஹல் விளைவில் எதிரொளிப்புச் செறிவின் முகடைக் கொண்டு கண்டறியலாம்.

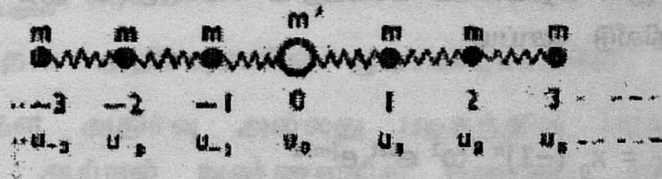
3.6 வட்டார அதிர்வியக்கம் (localised vibrations)

இதுவரை அணித்தளம் தொடர்புடைய அதிர்வியக்கத்தின் தன்மைகளை விரிவாகப் பார்த்தோம். இப்போது படிகக்குறைபாடுடைய, குறிப்பாகப் புள்ளி வழு கொண்ட அணித்தளத்தின் அதிர்வியக்கம் பற்றி அறிந்து கொள்வோம். எடுத்துக்காட்டாக KCl படிகத்தில், ஒரு Cl^- அயனி H^- அயனியால் மாற்றீடு செய்யப்பட்டுள்ளது. இந்த வேற்றுப்பொருள் U மையம் எனப்படும். இந்த நிறைதாழ்ந்த H^- அயனி, நாற்புறமும் கனமான K^+ அயனிகளால் சூழப்பட்டுள்ளது. H^- அயனி, உயர்அதிர்வெண்ணில் அதிர்வினவகையுடன் K^+ அயனிகளாலான பொந்தில் மேலும் கீழுமாக இயங்குகிறது. இதன் விளைவாக, H^- அயனிக்கு அருகிலுள்ள படிகம், அணித்தள அதிர்வியக்கத்தின்போது சிறிது உருக்குலைவிற்கு உள்ளாகிறது. இந்த உருக்குலைவின் அளவு H^- அயனியிலிருந்து விலகிச் செல்லச் செல்ல விரைந்து குறைகிறது. இந்த வகையான அதிர்வியக்கத்தை வட்டார அதிர்வு என்று குறிப்பிடுகின்றனர்.



படம் 3.9 படிகக் குறைபாடுடன் கூடிய அணித்தளம் (U-மையம்)

இதனை நாம் ஓர் எளிய அமைப்புடனான அணித்தளத்தை எடுத்துக்கொண்டு விளக்குவோம். ஒரு நேரியலான ஒருபடித்தான M என்ற நிறையுடைய அணுக்களாலான அணித்தளத்தில் ஒரேயொரு அணுமட்டும் m என்ற தாழ்ந்த நிறையுடைய அணுவாக இருப்பதாகக் கொள்வோம். இதில் m<M என்றிருக்கட்டும்.



படம் 3.10 U - மையத்துடன் கூடிய அணித்தளம்.

அணித்தளத்தில் இலேசான அணு x-அச்சின் மையத்தில் இருப்பதாகக் கொள்வோம். அருகில் உள்ள அண்டை அணுக்களோடு மட்டும் இடைவினை புரிவதாகவும், m,M நிறையுடைய அணுக்களுக்கிடையேயான விசை மாறிலி K என்றும் கொள்வோம். x_0 என்னுமிடத்திலுள்ள m நிறையுடைய அணுவின் இயக்கச்சமன்பாடு

$$m \frac{d^2x_0}{dt^2} = K\,[x_1 + x_{-1} - 2x_0] \qquad (3.30)$$

x_1 எனுமிடத்திலுள்ள M நிறையுடைய அணுவின் இயக்கச் சமன்பாடு

$$M \frac{d^2x_1}{dt^2} = K\,[x_2 + x_0 - 2x_1] \qquad (3.31)$$

x_0லிருந்து விலகிச் செல்லச் செல்ல அதிர்வியக்கம் தடைப்பட்டு நலிவடைகிறது என்றும், $m \rightarrow M$ எனில், நிறைவான படிக அணித்தளத்தின் இயல்வகை அதிர்வினங்களை மேற்கொள்கிறது என்றும் கொண்டு இச்சமன்பாடுகளுக்குத் தீர்வுகாண முயல்வோம். நிறைவான படிக அணித்தளத்திற்கான தீர்வு

$$x_n = x_0\,(-1)^n\, e^{i\omega t}$$

என்பதால், உருக்குலைவுற்ற படிக அணித்தளத்திற்கான சோதனை தீர்வாக

$$x_n = x_0\,(-1)^n\, e^{i\omega t}\, e^{-|n|\alpha}$$

இதில் α-இன் மதிப்பைக் கண்டறிய வேண்டும். இதனை (3.30), (3.31)இல் பதிலீடு செய்ய

$$\frac{d^2x_n}{dt^2} = x_0\,(-1)^n\,\omega^2\, e^{i\omega t}\, e^{(-n)\alpha}$$

எனவே

$$\frac{d^2x_o}{dt^2} = -x_0\,\omega^2\, e^{i\omega t}$$

$$\omega^2 = 2K/m\,(1+e^{-\alpha})$$

$$\omega^2 = K/M\,(2+e^{-\alpha}+e^{\alpha}) \qquad (3.32)$$

இவ்விரு தொடர்புகளும் ஒரே ω^2ன் மதிப்பைத் தருவதால், அவையிரண்டும் சமமாக இருக்கவேண்டும்.

$$2/m\,(1+e^{-\alpha}) = 1/M\,(2+e^{-\alpha}+e^{\alpha})$$

$$2M\,(1+e^{-\alpha}) = m\,(2+e^{-\alpha}+e)$$

$$me^{2\alpha} = 2(m-M)\,e^{\alpha}+(m-2M) = 0$$

e^{α} ஐப் பொருத்த இருபடிச் சமன்பாட்டின் தீர்வு

$$e^{\alpha} = (2M-m)/m \qquad (3.33)$$

இம்மதிப்பை 3.32ல் பதிலீடு செய்ய

$$\omega^2 = \omega^2_{\text{பெருமம்}} \quad M^2/(2Mm-m^2) \qquad (3.34)$$

இங்கு $\omega_{\text{பெருமம்}} = \sqrt{(4K/m)}$ எனக் கொள்ளப்பட்டுள்ளது. சீர்குலைவிற்கு உள்ளாகாத அணித்தளத்திற்கு m=M என்றிருக்கும்போது அதன் அதிர்வின் பெரும அதிர்வெண்ணாகும். இதிலிருந்து உருக்குலைவிற்கு ஆளாகாத அணித்தள அதிர்வெண் பெரும அதிர்வெண்ணைவிடக் கூடுதலான அதிர்வெண்ணுடன் வட்டார அதிர்வியக்கங் கொண்டுள்ள அணுவின் இயல்வகை அதிர்வியக்கமுள்ளது என்பதைத் தெரிந்துகொள்ள முடிகிறது.

$m << M$ எனில் (3.34)

$$\omega^2 = \omega^2_{\text{பெருமம்}} \quad M/2m \qquad (3.35)$$

3.7 அணித்தள அதிர்வுகளின் குவாண்டமாக்கம்

அணித்தள அதிர்வு அல்லது படிகத்தில் பரவும் மீட்சி அலைகளின் ஆற்றல் நுண்ணலகில் குவாண்ட மதிப்புகளை உடையதாக இருக்கிறது. இந்த குவாண்டம் ஆற்றலை, போனான் (Phonon) என்பர். இது மின்காந்த அலையின் குவாண்டம் ஆற்றலை, போட்டான் என்று குறிப்பிடுவதற்கு இணையானது. இந்த ஒப்புமையின்படி அதிர்வியக்கத்தின் கோணஅதிர்வெண் ω எனில், அதற்கான போனானின் ஆற்றல் $\hbar\omega$ ஆகும். இதில் $\hbar=h/2\pi$ சுருக்கப்பட்ட பிளாங் மாறிலியாகும்.

T என்ற சார்பிலா வெப்பநிலையில் அதிர்வியக்க வகையினம் பிளாங் விதிப்படி

$$n = 1/ \exp(\hbar\omega/k_B T -1)$$

என்ற எண்ணிக்கையிலான போனான்களைப் பெற்றிருக்கும் எனலாம். எந்தவொரு வெப்பநிலையிலும் படிகம் போனான் வளிமத்தால் நிரப்பப்பட்டிருப்பதாகக் கொள்ளலாம். இது உலோகத்தில் இருக்கும் எலக்ட்ரான் வளிமத்திற்கு ஒப்புமை கொண்டது. வெப்பநிலை அதிகரிக்க கூடுதலாகப் போனான்கள்

உருவாகின்றன. இந்த போனான்கள் படிகத்தில் மீட்சி அலைகளுடன் தொடர்புடையதாக இருப்பதால், இவை திண்ம ஊடகங்களில் ஒலியின் திசைவேகத்தில் பரவிச் செல்கின்றன. எனவே போனானின் ஆற்றலை

$$\hbar\omega = v_s k$$

என்று குறிப்பிடலாம்.

மீட்சி அலைகளின் நிறமாலை (மின்காந்த அலைகளின் நிறமாலைக்கு இணையானது) 10^4 முதல் 10^{13} Hz வரையிலான நீண்ட அதிர்வெண் நெடுக்கையில் விரிந்துள்ளது. நிறமாலையின் தாழ்ந்த அதிர்வெண் பகுதி ஒலி அதிர்வெண் நெடுக்கையிலும், உயர் அதிர்வெண் பகுதி அகச்சிகப்புப் பகுதியிலும் அமைந்துள்ளது.

அணித்தள அதிர்வாற்றலின் குவாண்டமாக்கம், அணித்தள அதிர்வுகள் ஓர் இடைவினையில் ஈடுபடும்போது முக்கியமாகிறது. அணித்தளம் ஓர் அதிர்வியக்க நிலையிலிருந்து அடுத்துள்ள மற்றோர் அதிர்வியக்க நிலைக்குச் செல்லத் தேவைப்படும் குறைந்த அளவு ஆற்றல் $\Delta\varepsilon = \hbar\omega$ ஆகும். கொடுக்கப்படும் ஆற்றல் இதற்குக் குறைவாக இருந்தால், எவ்வளவு செறிவு மிக்கதாக இருப்பினும் நிலைமாற்றம் ஏற்படுவதில்லை. படிகத்தில் அணித்தள அதிர்வுகள் ஆற்றலை உட்கவர்ந்தாலும், அல்லது உமிழ்ந்தாலும் குவாண்டம் அளவிலேயே செய்கின்றன. உண்மையில் மீட்சி அலைகளின் ஆற்றல் குவாண்டம் அலகில் அமைந்துள்ளது என்பதற்கு நேரடியான சோதனைச் சான்று ஏதுமில்லை. ஏனெனில் இந்த மீட்சி அலைகள் படிகத்திற்குள் மட்டுமே இருக்கின்றன. படிகத்தை விட்டு வெளியேறி வருவதில்லை. மீட்சி அலைகளின் ஆற்றல் குவாண்டம் அலகில் உள்ளது என்பதற்கான மறைமுகமான சோதனைச் சான்றுகள் பல உள.

1. திண்மப்பொருளின் வெப்ப ஏற்புத்திறனுக்கு அணித்தள அதிர்வுகளின் பங்களிப்பு, சார்பிலா வெப்பநிலை சுழியாகும்போது சுழியாகிறது. இதனை அணித்தள அதிர்வுகள் குவாண்டமாக்கத்திற்கு உட்பட்டிருக்கின்றன எனக் கொள்வதால் மட்டுமே விளக்க முடியும்.
2. எக்ஸ் கதிர், நியூட்ரான் போன்றவற்றின் மீட்சியிலாச் சிதறல் ஒரு படிகத்தில் நிகழும்போது, அவற்றின் ஆற்றலும் உந்தமும்

தோன்றும் அல்லது உட்கிரகிக்கப்படும் ஒன்று அல்லது பல போனான்களுக்கு ஏற்ப மாற்றம் பெறுகின்றன. தனித்த போனானின் பண்புகளைச் சிதறல் எக்ஸ்கதிர் அல்லது நியூட்ரானை அளவிட்டுத் தீர்மானிக்கலாம். இச் சோதனைகளின் உதவியால், நாம் அதிர்வெண் மற்றும் போனானின் அலைவெக்டாருக்கு இடைப்பட்ட பிரிகைத் தொடர்பைப் பெறலாம். இது போனான்கள் இருப்பதற்கான சான்றாகக் கருதப்படுகிறது.

போனானின் உந்தம்

போனானுக்கு உந்தமில்லை என்றாலும், k என்ற அலைவெக்டாரைக் கொண்ட போனான், பிற துகள்களுடனும், புலத்துடனும் இடைவினை புரியும்போது, அது hk என்ற உந்தமுடைய துகள்போலச் செயல்படுகிறது. போனான் படிகத்திற்குள் மட்டும் தோன்றியிருப்பதால், இதனைப் 'படிக உந்தம்' என்றும் குறிப்பிடுவர். குவாண்டம் நிலைகளுக்கிடையே அனுமதிக்கப்பட்ட நிலைமாற்றங்களுக்குத் தேர்வுவிதி (selection rule) இருப்பது போல, அலைவெக்டார் அல்லது உந்தத்திற்கு (hk)க்கு மாறாக் கோட்பாடுகள் உள்ளன. படிகத்தில் எக்ஸ்கதிர் போட்டானுக்கான (மீட்சிச் சிதறல்) பிராக்விளிம்பு விளைவில், அலைவெக்டாருக்குரிய மாறாக்கோட்பாடு, அலைவெக்டாரின் தேர்வு விதியால் கட்டுப்படுத்தப்படுகிறது என்று 2ஆம் அத்தியாயத்தில் பார்த்தோம். அதன்படி

$$k' = k+G \tag{3.36}$$

இதில் k', k என்பன முறையே சிதறல் மற்றும் விழுகதிரிலுள்ள போட்டானின் அலைவெக்டராகும், G என்பது எதிரீடான அணித்தளத்தில் வெக்டராகும். எனவே உந்தம் மற்றும் ஆற்றல் மாறாக் கோட்பாடு

$$hk' = hk+hG$$

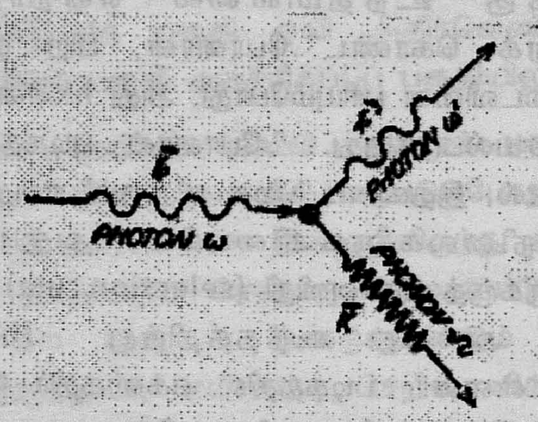
$$h\omega' = h\omega$$

இதில் ω, ω' ஆகியவை விழுகதிர் மற்றும் சிதறலொளியிலுள்ள போட்டானின் கோணஅதிர்வெண்ணாகும். இந்த வழிமுறையில் முழுப்படிகமும் - hG என்ற உந்தத்துடன் எகிறியெழ, விழுகதிரின் அதிர்வெண், சிதறலொளியின் அதிர்வெண்ணிற்குச் சமமாக

இருக்கிறது. அதிர்வெண்ணில் மாற்றமின்றி நிகழும் இதுபோன்ற நிகழ்வுகள் இயல்வகைமுறை (Normal process) எனப்படும்.

படிகத்தில் போட்டானின் மீட்சியிலாச் சிதறல் ஏற்படுமானால், அதில் ஒரு போனான் உருவாகலாம் அல்லது உட்கவரப்படலாம். அதனால் விழுகதிரிலுள்ள போட்டானின் அதிர்வெண் மாற்றத்திற்கு உட்படுகிறது. தோன்றும் போனானின் அலைவெக்டார் k_f எனில், அலைவெக்டாருக்கான தேர்வுவிதி

$$k' + k_f = k + G \quad (3.37)$$



படம் 3.11. போனானின் உருவாக்கத்துடன் போட்டானின் மீட்சியிலாச் சிதறல்

உந்தம் மற்றும் ஆற்றல் மாறாக் கோட்பாட்டின்படி

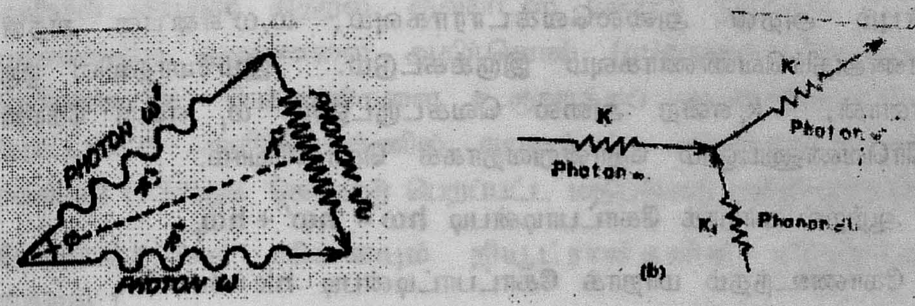
$$\hbar k' + \hbar k_f = \hbar k + h'G$$

$$\hbar\omega' + \hbar\omega_f = \hbar\omega$$

இதில் k_f ω_f என்பன உருவாகும் போனானின் அலைவெக்டார் மற்றும் கோணஅதிர்வெண்ணாகும்.

இந்த நிலையில் போனான் உட்கிரகிக்கப்பட்டால்

$$k' = k + k_f + G \quad (3.38)$$



(அ) (ஆ)

படம். 3.12. போனானின் உட்கிரகிப்புடன் போட்டானின் மீட்சியிலாச் சிதறல்

உந்தம் மற்றும் ஆற்றல்மாறாக் கோட்பாட்டின்படி

$$hk' = hk + hk_f + h'G$$

$$h\omega' = h\omega + h\omega_f$$

இந்தவகையான வழிமுறையில் அதிர்வெண்ணில் மாற்றம் ஏற்படும். இதனை உம்கிளாப் (Umklapp) அல்லது சுருக்கமாக U வழிமுறை என்பர்.

அலைநீளமிக்க போனான்களால் விளையும் போட்டான்களின் மீட்சியிலாச் சிதறல் (Inelastic scattering of photons by long wave length phonons)

போட்டான் - போனான்களுக்கிடையேயான இடைவினை, ஒலி அலையின் மீட்சித்திரிபு, ஊடகத்தின் அணுக்களிடையே வட்டாரச் செறிவில் மாற்றத்தை ஏற்படுத்தி, அதன் விளைவாக ஊடகத்தின் ஒளிவிலகல் எண்ணில் ஒரு மாற்றத்தை விளைவிப்பதால் தூண்டப்படுகிறது எனலாம். எனவே ஒலிஅலையானது ஊடகத்தின் ஒளியியல் பண்புகளை அலைப்பண்பேற்றம் செய்கிறது என்று கூறலாம். இதற்கு நேர்மாறாக ஒளியின் மின்புலம், ஊடகத்தின் மீள்திறப்பண்புகளை அலைப்பண்பேற்றம் செய்கிறது எனலாம். இதனால் படிகத்திலுள்ள ஒலி அலைகளினால் ஒரு போனான் உருவாக்கி அல்லது உட்கவர்ந்து போட்டானைச் சிதறலடையச் செய்யலாம்.

k, k' என்பன ஒரு போனானால் போட்டான் சிதறுவதற்கு முன்பும், பின்பும் அதன் அலைவெக்டாராகவும், ω, ω' என்பன அதன் கோணஅதிர்வெண்ணாகவும் இருக்கட்டும். இம்மோதலில் ஒரு போனான், k_f என்ற அலை வெக்டருடனும் ω_f என்ற கோண அதிர்வெண்ணுடனும் தோன்றுவதாகக் கொள்வோம்.

ஆற்றல் மாறாக் கோட்பாடின்படி $h\omega = h\omega' + h\omega_f$

கோணஉந்தம் மாறாக் கோட்பாட்டின்படி $hk = hk' + hk_f$

இங்கு நாம் சிதறலுடன் சேர்ந்து நிகழும் எதிரீடான அணித்தள வெக்டார் தொடர்புடைய பிராக் விளிம்பு விளைவின் வாய்ப்பை எடுத்துக்கொள்ளவில்லை. படிகத்தில் ஒலியின் திசைவேகம் v_s மாறிலியெனில் $\omega_f = v_s k_f$. போனானின் அலைவெக்டார் k_f போட்டானின் அலைவெக்டாரை ஒப்பிடச் சமமாக இருப்பினும் $v_s k_f << Ck$, ஏனெனில் $C >> v_s$ எனவே $\omega >> \omega_f$ அதாவது மோதலில் உருவாகும் போனான் விழும் போட்டானின் மிகச் சொற்ப அளவு ஆற்றலை மட்டுமே எடுத்துச்செல்கிறது. எனவே

$$\omega = \omega'$$

$$\text{அல்லது } |k| = |k'|$$

படம் 3.12(அ)வைக் கொண்டு

$$k_f = 2k \sin /2$$

மீட்சியிலாத சிதறலாக, போட்டான்கள், விழும் கதிரின் திசையிலிருந்து ϕ கோணம் விலகிச் சிதறும்போது, போனான்கள் உருவாகின்றன. இதன் அதிர்வெண்

$$\omega_f = v_s k_f \quad = 2 v_s k \sin \phi/2$$

$$= 2 v_s (\omega/c)\, \mu \sin \phi/2 \qquad (3.39)$$

இதில் μ என்பது ஊடகத்தின் ஒளிவிலகல் எண்ணாகும். படிகத்தில் ஒளியின் திசைவேகம் c' எனில்

$$\omega = 2\pi\upsilon = c'k = (c/\mu)\ k$$

$$\text{எனவே } \omega\mu/c = k$$

செறிவுமிக்க இலேசர் ஒளிமூலத்திலிருந்து வரும் கட்புலனுணர் ஒளியில் ஏற்படும் சிதறல், குவார்ட்ஸ் மற்றும் நீலக்கல் போன்ற படிகங்களில் நுண்ணலை அதிர்வெண் (microwave frequency) நெடுக்கையில், போனான்களை உருவாக்கப் பயன்படுத்தப்பட்டது. போட்டானின் அதிர்வெண்ணில் காணப்பட்ட மாற்றத்தின் அளவு சமன்பாடு (3.39)ஐக் கொண்டு பெறப்பட்ட மதிப்போடு ஒன்றியிருக்கிறது.

போனான்களால் விளையும் நியூட்ரான்களின் மீட்சியிலாச் சிதறல்

ஒரு திண்மப் பொருளின் போனான் நிறமாலையை உம்கிளாப் வழிமுறையில் மீட்சியிலாத், விரவலுக்கு உள்ளாகும் எக்ஸ்கதிர் சிதறல்மூலம் அறியமுடியும். ஆனால் எக்ஸ்கதிரின் ஆற்றல் (10^5 eV), அணித்தள அதிர்வின் ஆற்றலைவிட (~0.01eV) அதிகமாக இருப்பதால், மிக நுண்ணிய அளவில் ஏற்படும் அதிர்வெண் பெயர்ச்சியை அளவிட்டறிவதில் நடைமுறைச் சிக்கல் உள்ளது. 10^{-2} eV ஆற்றலும், 2×10^{-10} மீ பொருள் அலைநீளமும் உடைய நியூட்ரான்களாலான சிதறலில், அதிர்வெண் பெயர்ச்சியை நேரடியாக மதிப்பிட்டறிய முடிகிறது.

நியூட்ரான் கற்றை ஒரு படிகத்தில் விழுந்து மீட்சியிலாச் சிதறலுக்கு உள்ளாவதாகக் கொள்வோம். இவ்வழிமுறையில் நியூட்ரான் ஆற்றலையும், உந்தத்தையும் இழக்கின்றது, அல்லது கூடுதலாகப் பெறுகிறது. இழப்பு என்பது போனான்களின் உற்பத்தியாலும், ஆதாயம் என்பது போனான்களின் முழுஅழிவாக்கம் என்பதாலும் ஏற்படுவதாகக் கொள்வோம். அலைவெக்டாரின் மாறாக் கோட்பாட்டின்படி

$$k = k' + G \pm k_f$$

இதில் k, k' என்பன விழும் நியூட்ரான் மற்றும் சிதறலுறும் நியூட்ரானின் அலைவெக்டாரைக் குறிப்பிடுகின்றன. k_f என்பது போனானின் அலைவெக்டராகும். G என்பது எதிரீடான அணித்தளத்தின் அலைவெக்டராகும். நேர்குறி போனான் உருவாக்கத்தையும், எதிர்குறி உட்கிரகிப்பையும் குறிப்பிடுகின்றன.

நியூட்ரானின் நிறை m_n எனக் கொண்டால் விழும் நியூட்ரானின் இயக்க ஆற்றல் ε_n

$$\varepsilon_n = \frac{1}{2} m_n v^2 = \frac{1}{2} \frac{p^2}{m_n} = \frac{h^2k^2}{2m_n}$$

சிதறலுறும் நியூட்ரானின் அலைவெக்டர் k′ எனில், அதன் இயக்கஆற்றல்

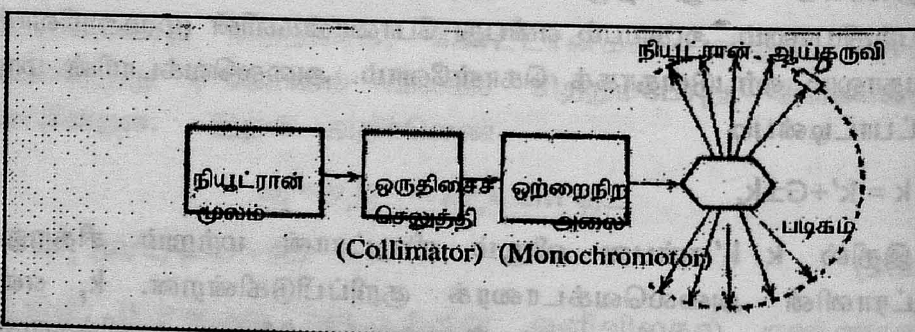
$$\varepsilon_n^{1} = \frac{h^2(k')^2}{2m_n}$$

ஆற்றல் மாறாக் கோட்பாட்டின்படி

$$\frac{h^2k^2}{2m_n} = \frac{h^2k'^2}{2m_n} \pm \hbar k_f$$

இதில் $\hbar k_f$ என்பது உருவாகும் (+) அல்லது உட்கவரப்படும் (-) போனானின் ஆற்றலாகும்.

பிரிகைத் தொடர்பைக் கண்டறிய, சிதறலுறும் திசையில் நியூட்ரான் இழக்கும், அல்லது ஆதாயமடையும் ஆற்றலைக் கண்டறிய ஒரு சோதனை மேற்கொள்ளவேண்டும். இதனை நியூட்ரான் சிதறலுக்கான புலப்பெயர்வுக் காலமுறை மூலம் செய்யலாம்.



படம் 3.13 புலப்பெயர்வு காலமுறையும் நியூட்ரான் சிதறலும்

நியூட்ரான் உமிழ்வு அணுக்கரு வினை மூலம் நியூட்ரான்களை உற்பத்தி செய்யும்போது, அவை பல்வேறு திசைகளில்

பலஆற்றல்களுடன் வெளியேறும். இதனை ஒரு திசையில் செலுத்தக்கூடிய வகையிலும் ஒரு குறிப்பிட்ட ஆற்றல் இருக்குமாறும் செய்து, இறுதியாக ஒரு படிகத்தில் விழுமாறு செய்யப்படுகிறது. படிகத்தைச் சுற்றி ஒரு வட்டப்பரிதியில் ஆய்வுக்கருவிகள் நிறுவப்பட்டு, சிதறலுறும் நியூட்ரான்கள் மதிப்பிடப்படுகின்றன. அதேசமயத்தில் புலப்பெயர்வுக் காலமும் அளவிடப்படுகிறது. இது துடிப்பலை தோற்றுவிக்கப்பட்டதிலிருந்து அளவிடப்படும் காலமாகும்.

எதிரீடான அணித்தள வெக்டார் Gயை, நியூட்ரானின் மீட்சித் சிதறலால் (பிராக் எதிரொளிப்பு) மதிப்பிடலாம். இதை அதன் மாறா ஆற்றல் மற்றும் கூடுதலான செறிவு இவற்றால் இனமறியலாம். இதனால் பிராக் கோணத்தில் செறிவின் முகடு தோன்றுகிறது. புலப்பெயர்வு காலத்திலிருந்து சிதறலுறும் நியூட்ரானின் ஆற்றலையும், வட்டபரிதியில் நியூட்ரான் ஆய்வுக்கருவியின் அமைவிடத்திலிருந்து அதன் அலை வெக்டாரையும் அறியலாம். இவற்றைக் கொண்டு போனானின் ஆற்றலைக் கணக்கிடலாம்.

வினாக்கள்

1. N அணுக்களுடன் அமைந்த சங்கிலித்தொடரில் நெட்டலை அதிர்வுகள், வரம்பு நிபந்தனைகளுக்கு உட்பட்டிருக்க, அவ்வமைப்பிலுள்ள முதல் மற்றும் இறுதி அணுக்களின் இயக்கம் ஒரே மாதிரியாக இருக்கிறது. இயல்வகை அதிர்வினங்களின் எண்ணிக்கையைக் கண்டறிக.

2. ஈரணுக்களுடன் கூடிய ஒற்றைப் பரிமாணப் படிகத்திற்கான நிறப் பிரிகைத் தொடர்பைப் பெறுக. ஒளியியல் மற்றும் ஒலியியல் சார்ந்த அதிர்வினங்களை விவரிக்கவும்.

3. அலைச்சீர்மையுடன் நேரிய அணித்தளத்தில் அமைந்திருக்கும் ஈரணுக்களின் அதிர்வியக்கத்தை விளக்கிக் கூறுக. அதிர்வெண்ணிற்கும், அலைவெக்டாருக்குமான தொடர்பைப் பெற்று, $d\omega/dk$, மண்டல எல்லையில் சுழியாகிறது எனக் காட்டுக.

4. போனான்களினால் ஏற்படும் நியூட்ரானின் மீட்சியிலா சிதறல், ஆற்றல் மற்றும் உந்தம் மாறாக் கோட்பாடுகளுக்குஏற்ப இருக்கிறது என்று நிறுவுக.

5. போனான்கள் யாவை? போட்டானாலும், நியூட்ரானாலும் விளையும் போனானின் மீட்சியிலாச் சிதறலில், எங்ஙனம் ஆற்றல் மற்றும் உந்தம் மாறாக்கோட்பாடு விவரிக்கப்படுகிறது?

6. வட்டார அதிர்வியக்கம் பற்றி விவரிக்க. உருக்குலைவிற்கு ஆளாகாத அணித்தள அதிர்வெண், பெரும அதிர்வெண்ணை விடக் கூடுதலான அதிர்வெண்ணுடன் வட்டார அதிர்வியக்கமுள்ளது என்று காட்டுக.

7. அணித்தள அதிர்வுகள் குவாண்டமாக்கத்திற்கு உட்பட்டுள்ளன என்பதற்கான சான்றுகள் யாவை?

8. ரெஸ்ட்ராஹல் விளைவு என்றால் என்ன? இதனைக்கொண்டு ஒருபடிகம் அயனிப் படிகமா அல்லது சகப்பிணைப்புப் படிகமா என்பதை எங்ஙனம் அறிய முடியும்?

4. திண்மப் பொருட்களின் வெப்பவியல் பண்புகள்

1. வெப்ப ஏற்புத்திறன் - டூலாங் - பெட்டிட் விதி
2. ஐன்ஸ்டீன் கொள்கை
3. டிபை கொள்கை-
4. இசைவிலா அதிர்வியக்கம் - குருனேசன் மாறிலி –
5. வெப்பஞ்சார்ந்த பெருக்கம்.
6. வெப்பங்கடத்துதிறன் - $K_{எலக்ட்ரான}$, $K_{போனான்}$ - போனான் சிதறல்கள் - இயல்பு மற்றும் உம்கிளாப் வழிமுறைகள்.

4. திண்மப் பொருட்களின் வெப்பவியல் பண்புகள்

(Thermal Properties of Solids)

4.1 வெப்ப ஏற்புத் திறன்

திண்மப் பொருட்களின் வெப்பவியல் பண்புகளை அறிந்து கொள்வதற்கு நாம் அவற்றின் வெப்ப ஏற்புத்திறன் (Heat Capacity) மற்றும் வெப்பம் கடத்துதிறன் இவற்றைப் பற்றி விரிவாகத் தெரிந்து கொள்ள வேண்டியது அவசியமாகிறது. முதலில் பொருட்களின் வெப்ப ஏற்புத்திறனை வரையறுத்துக் கொண்டு அது தொடர்பான கொள்கைகளைப் பற்றிப் பார்ப்போம்.

திண்மங்கள், அணு அல்லது மூலக்கூறுகளின் பிணைப்பால் உருவானவை. ஒரு திண்மப் பொருளுக்கு dQ என்ற வெப்ப ஆற்றலை ஊட்டினால், அவ்வெப்பத்தின் ஒரு பகுதியை (dU) வெப்பநிலையை உயர்த்திக் கொள்வதின் மூலம் தன் அக ஆற்றலை அதிகரித்துக் கொளவதற்கும், மற்றொரு பகுதியை (dW) வெப்பம் சார்ந்த பெருக்கத்தின் போது, மூலக்கூறு / அணுக்களின் கவர்ச்சிக்கு எதிராகச் செய்யப்படும் வேலைக்கும் உட்கிரகித்துக் கொள்கிறது. ஆற்றல் சமனை

$$dQ = dU + dW$$

என்று எழுதலாம். வளிமங்களில் நிகழ்வதைப் போல, திண்மங்களில் வெப்பம் சார்ந்த பெருக்கம் குறிப்பிடும்படியாக இல்லை. எனவே அதற்காக எடுத்துக் கொள்ளப்படும் வெப்ப ஆற்றலின் அளவு மிகவும் குறைவு என்பதால் dW-ன் மதிப்பைப் புறக்கணித்துவிடலாம். அதாவது திண்மங்களுக்கு ஊட்டப்படும் வெப்பம் முழுதும், அதன் வெப்பநிலை ஏற்றத்திற்கே எடுத்துக் கொள்ளப்படுகிறது என்று கருதலாம்.

பருமன் மாறாததால் திண்மத்தின் வெப்ப ஏற்புத்திறனை C_v எனக் குறிப்பிட்டால், இதனைக் கொண்டு உட்கிரகிக்கப்படும் வெப்ப ஆற்றலுக்கும் உயரும் வெப்பநிலைக்கும் ஒரு தொடர்பை ஏற்படுத்தலாம்.

$$dQ = dU = m\,C_v\,dT \quad (4.1)$$

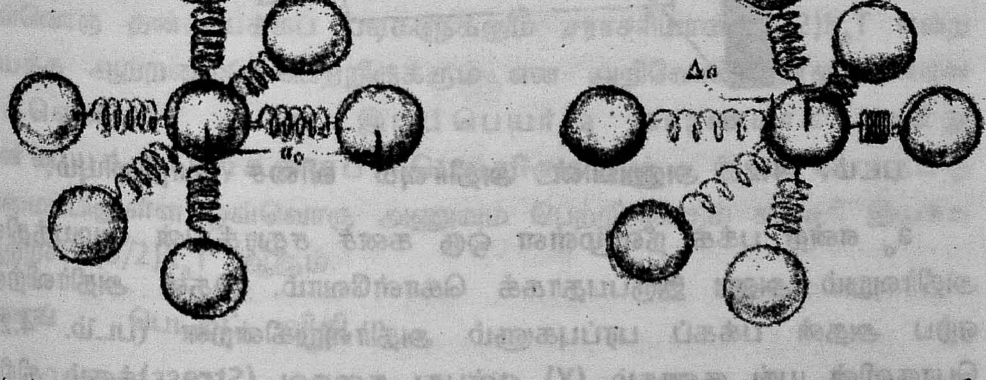
இதில் m என்பது திண்மப் பொருளின் நிறையாகும். m = 1 மோல் எனில் C_v ஐ மோலார் வெப்ப ஏற்புத்திறன் என்பர். சமன்பாடு (4.1) லிருந்து

$$C_v = 1/m\,(dU / dT) \quad (4.2)$$

இதிலிருந்து வெப்ப ஏற்பத் திறனுக்கான வரையறையைப் பெறமுடியும். ஓரலகு நிறையுடைய திண்மப் பொருளின் வெப்பநிலையை 1K உயர்த்துவதற்குத் தேவையான வெப்ப ஆற்றல் அதன் வெப்ப ஏற்புத் திறனாகும்.

திண்மங்களில் வெப்ப ஏற்புத்திறன் பொருளுக்குப் பொருள் மாறுபடுகிறது. அப்படியென்றால் பொருளின் எந்த இயற்பியல் கூறு அதன் வெப்ப ஏற்புத் திறனைத் தீர்மானிக்கிறது?

திண்மங்களில் எல்லா அணுக்களும் ஒரு குறிப்பிட்ட அமைவிடத்தில் இருக்கின்றன. அருகில் உள்ள அணுக்களால் ஏற்படுத்தப்படும் ஒரு பொதுவான புலத்தில் ஒவ்வொரு அணுக்களும் சமநிலையில் இருக்கின்றன. இந்நிலையில் ஒவ்வொரு அணுக்களும் முழு அமைதிநிலையில் இருப்பதில்லை. மாறாகத் தத்தம் ஓய்வுநிலையை மையமாகக் கொண்டு சீரிசை அலைவியக்கத்தில் ஈடுபடுகின்றன.



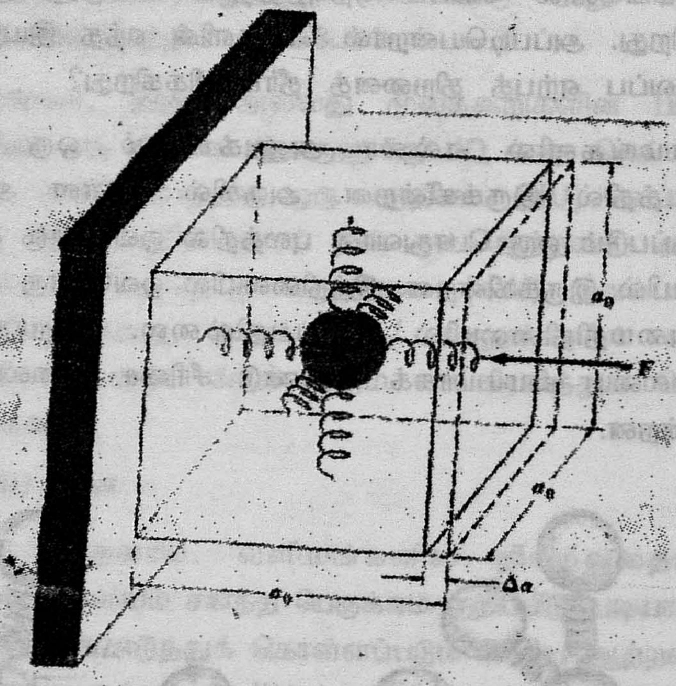
(அ) சமநிலையில் (ஆ) மைய அணு அதிர்விற்கு ஆளாகும் நிலையில்

படம். 4.1. திண்மப்பொருள் மாதிரியமைப்பு

திண்மப் பொருளில் ஓரணு அதிக ஆற்றலைப் பெறுமானால் அது கூடுதலான அலைவீச்சுடன் அதிர்வுறுகிறது. □ூக்விதி (Hook அடிப்படையில் இவ்வதிர்வின் அதிர்வெண்ணை

$$\upsilon = 1/2\pi \sqrt{k/m} \qquad (4.3)$$

என்று குறிப்பிடலாம். இதில் m என்பது அதிர்வுறும் அணுவின் நிறை, k என்பது விசை மாறிலி (force constant). விசை மாறிலி என்பது அதிர்வுறும் அணுவின் ஓரலகு இடப்பெயர்விற்குத் தர வேண்டிய விசையின் அளவாகும். இதன் மதிப்பைத் திண்மப் பொருளின் சில இயற்பியல் பண்பளவுகளைக் கொண்டே அறியமுடியும்.



படம். 4.2. அணுவின் அதிர்வும் விசை மாறிலியும்.

a_0 என்ற பக்க நீளமுள்ள ஒரு கனச் சதுரத்தின் மையத்தில் அதிர்வுறும் அணு இருப்பதாகக் கொள்வோம். இதன் அதிர்விற்கு ஏற்ப அதன் பக்கப் பரப்புகளும் அதிர்வுறுகின்றன (படம். 4.2). பொருளின் யங் குணகம் (Y) என்பது தகைவு (Stress)க்கும் திரிபு (Strain) க்கும் உள்ள தகவாகும். எனவே

திரிபு $= \Delta a / a_0 = (1/Y) . (F/A) = 1/Y . F/a_0^2$

ஆனால் $F = k \Delta a$, எனவே $k = a_o Y$ (4.4)

இத் தொடர்பு, விசை மாறிலிக்கும், அணுவிடைத் தொலைவிற்கும், யங்குணகத்திற்கும் உள்ள தொடர்பைத் தெரிவிக்கிறது. இதனைக் கொண்டு திண்மப் பொருளில் அதிர்வுறும் அணுவின் அதிர்வெண்ணை ஒருவாறு மதிப்பிடமுடியும்.

எடுத்துக்காட்டாக அலுமினியத்தைக் கருதுவோம். $a_o = 2.86 \times 10^{-10}$மீ, $Y = 7 \times 10^{10}$ நியூட்டன் / $மீ^2$. எனவே அலுமினியத்திற்கு k-இன் மதிப்பு 20 நி/மீ ஆகும். அதாவது அலுமினிய அணுக்கள் ஒன்றோடொன்று தனித்தனியாக இரப்பர் நூலால் கட்டப்பட்டவைகளைப் போல இருக்கின்றன. அதன் அதிர்வெண்

$\upsilon = 1/2\pi \sqrt{20 / 4.5 \times 10^{-26}}$

$= 3.4 \times 10^{12}$ ஹெர்ட்ஸ்

ஆனால் சோதனை மூலம் பெற்ற மதிப்பு 6.4×10^{12} HZ. திண்மத்தில் அதிர்வுறும் ஒவ்வொரு அணுவும் பிறவற்றைச் சார்ந்திருப்பதில்லை என்று நாம் அனுமானித்துக்கொண்ட கருதுகோள் முழுதும் ஏற்புடையதில்லை என்பதால் அதிர்வெண் மதிப்பில் இந்த முரண்பாடு காணப்படுகிறது. அதாவது நம் வழிமுறையில் விசை மாறிலியின் மதிப்புக்கான கணக்கீடு துல்லியமானதில்லை. என்றாலும் கணக்கிடப்பட்ட அதிர்வெண், கண்டறியப்பட்ட மதிப்பின் நெடுக்கையில் அமைந்திருக்கிறது.

வெப்ப இயக்கக் கொள்கைப்படி ஒரு துகள் பெற்றிருக்கும் ஒவ்வொரு தன்னியக்கப் படிகளுக்கும் சராசரியாக $(1/2)k_B T$ என்ற இயக்க ஆற்றலைப் பெற்றிருக்கும் என அறிவோம். ஓரணுவாலான துகளெனில், அஃது இடப்பெயர்வு காரணமாக மூன்று தன்னியக்கப்படிகளைப் பெற்றிருக்கும். இதன்பொருட்டு அமைப்பிலுள்ள ஒவ்வொரு அணுவும் பெற்றிருக்கும் சராசரி இயக்க ஆற்றல் $(3/2)k_B T$ ஆகும்.

டூலாங் - பெட்டிட் விதி

திண்மப் பொருளில் அணுக்கள் ஓய்வுச் சமநிலையை இருப்பிடமாகச் கொண்டு சீரிசை அலைவியக்கத்தில் ஈடுபடுவதால் அவை இயக்க ஆற்றலோடு, நிலையாற்றலையும் கொண்டிருக்கும் ஒரு சீரிசை அலையியற்றியின் மொத்த ஆற்றல் என்பது அதன்

இயக்க மற்றும் நிலை ஆற்றல்களின் கூடுதலாகும்: ஒரு குறிப்பிட்ட வெப்பநிலையில் மாறிலியாக இருக்கிறது. அதாவது அணுவிற்கு அணு, இயக்க ஆற்றலும், நிலையாற்றலும் வேறுபாட்டாலும், அவற்றின் சராசரி இயக்க மற்றும் நிலையாற்றல்கள் மாறாதிருக்கின்றன. சீரிசை அலையியற்றிக்கு, சராசரி இயக்க ஆற்றலும், சராசரி நிலையாற்றலும் சமம் என்பதால், இடப்பெயர்வு காரணமாக மூன்று தன்னியக்கப் படிகளைக் கொண்டுள்ள அணு பெற்றிருக்கும் மொத்த ஆற்றல் $3k_BT$ ஆகும். ஒரு மோல் செறிவுள்ள திண்மத்தில் N (அவகாட்ரோ எண்) அணுக்கள் இருப்பின், அதன் உள்ளடக்க ஆற்றல்

$$U = 3\,Nk_BT$$

$$= 3\,RT \qquad (4.5)$$

எனவே திண்மத்தின் மோலார் வெப்ப ஏற்புத்திறன்

$$C_v = dU / dT = 3R \qquad (4.6)$$

$$= 3.\,(8.31)$$

$= 24.93$ ஜூல் / மோல் - கெல்வின்

ஒரு கிலோ கலோரி என்பது 4182 ஜூல் ஆற்றலுக்குச் சமம் என்பதால்

$C_v = 24.93 / 4.182 = 5.97$ கி. கலோரி / கி.மோல் - கெல்வின்

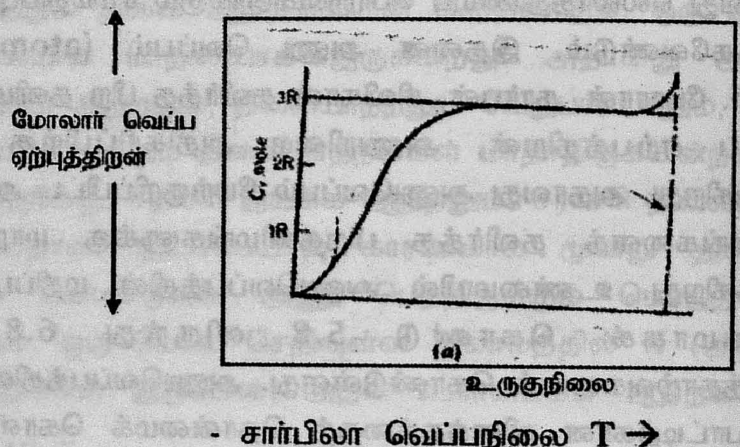
இதுவே டுலாங்-பெட்டிட் விதி (Dulong – Patit law) எனப்படுகிறது. இத்தொன்மை விதி, எல்லாத் திண்மங்களும், அவற்றின் மூலப்பொருள் எதுவாக இருப்பினும், எல்லா வெப்பநிலைகளிலும் ஓரேயளவு வெப்ப ஏற்புத்திறனைக் கொண்டவையாக இருக்கும் எனத் தெரிவிக்கிறது. இவ்விதி அறைவெப்பநிலைக்கு மேற்பட்ட வெப்பநிலையில் அணு நிறையெண் 40-க்கு அதிகமாக இருக்கும் போது மிகவும் தோராயமான மதிப்பைத் தருகிறது. தாழ்ந்த வெப்பநிலைகளில் இவ்விதி சிறிதும் பொருத்தமாக இருப்பதில்லை. இவ்விதி வேறு சில குறைபாடுகளையும் கொண்டுள்ளது. அவையாவன:

(1) சாதாரண வெப்பநிலைகளில் ஒரு திண்மப்பொருளின் வெப்ப ஏற்புத்திறன், அதிலுள்ள அணுநிறைக்கு எதிர் வீதத்திலிருக்கிறது. எனவே வெப்ப ஏற்புத்திறன் மற்றும் அணுநிறை இவற்றின் பெருக்கல் பலன் ஒரு மாறிலியாக,

அதாவது எல்லாத்திண்மப் பொருள்களுக்கும் சமமதிப்புள்ளதாக இருக்கவேண்டும். இதனை அணு வெப்பம் (atomic heat) என்பர். போரான், கார்பன், சிலிகான் தவிர்த்த பிற தனிமங்களின் வெப்ப ஏற்புத்திறன், அணுநிறை அதிகரிப்பிற்கு ஏற்பக் குறைகிறது. அதாவது அணுவெப்பம் மேற்குறிப்பிட்ட அம்மூன்று தனிமங்களைத் தவிர்த்த பிறதனிமங்களுக்கு மாறிலியாக இருக்கிறது. உண்மையில் அணுவெப்பத்தின் மதிப்பு 6.4-ஐ மையமாகக் கொண்டு 5.8 லிருந்து 6.8 வரை ஏற்றத்தாழ்வுகளைக் கொண்டுள்ளது. அணுவெப்பத்தின் இந்த மாறுபாட்டிற்கான விளக்கத்தைத் தொன்மைக் கொள்கையின் அடிப்படையில் பெறமுடியவில்லை.

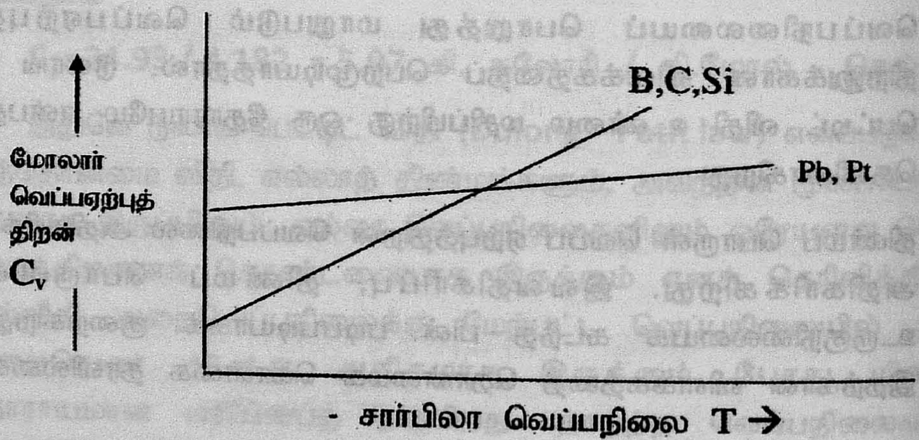
(2) மோலார் வெப்ப ஏற்புத்திறன் ஒரு மாறிலி என்ற கருத்து உண்மையில் எல்லாத் திண்மங்களுக்கும் உயர்வெப்பநிலையில் பொருந்தி இருக்கிறது. தாழ்ந்த வெப்பநிலைகளில் குறிப்பிடும்படியான விலக்கம் காணப்படுகிறது. அதாவது டூலாங் - பெட்டிட்விதி தாழ்ந்த வெப்பநிலையில் முழுநிறைவுடையதாக இல்லை. வெப்பநிலை குறையும்போது C_v -இன் மதிப்பும் குறைந்து சுழியை அடைகிறது. அதாவது C_v வெப்பநிலையைச் சார்ந்த ஒரு சார்பாக இருக்கின்றது எனத் தெரிவிக்கிறது. வெப்பநிலையைப் பொறுத்து மாறுபடும் வெப்பஏற்புத் திறனுக்கான விளக்கத்தைப் பெறமுடியாததால், டூலாங் - பெட்டிட் விதி உண்மை மதிப்பிற்கு ஒரு தோராயமே என்பது தெளிவாகிறது.

(3) திண்மப் பொருள் வெப்ப ஏற்புத்திறன் வெப்பநிலை அதிகரிக்க அதிகரிக்கிறது. இவ்வதிகரிப்பு, திண்மப் பொருளின் உருகுநிலையைக் கடந்த பின் படிப்படியாகக் குறைகிறது. இதற்கான விளக்கத்தை தொன்மைக் கொள்கை தரவில்லை.



படம். 4.3. C_v - T வரைபடம் - உருகுநிலையில் ஏற்படும் மாற்றம்

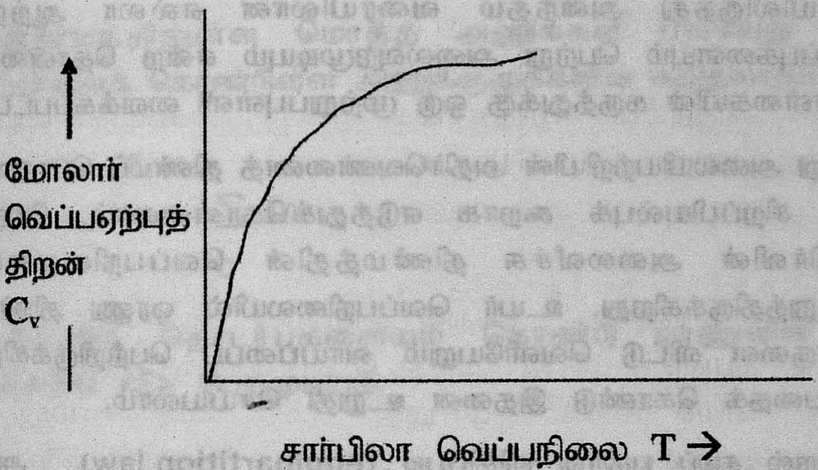
(4) காரீயம், பிளாட்டினம் போன்ற சில உலோகங்களின் வெப்பஏற்புத்திறன் சிறிய அளவில் வெப்பநிலையைப் பொறுத்து மாறுபடுகிறது. ஆனால் போரான், கார்பன், சிலிகான் போன்ற உயர் உருகுநிலை கொண்ட பொருட்களின் வெப்பஏற்புத்திறன் அதிக அளவில் வெப்ப நிலையைப் பொறுத்து மாறுபடுகிறது.



படம். 4.4 C_v- T வரைபபடம் - திண்மப் பொருட்களுக்கு ஏற்ப வேறுபடும் வெப்பநிலை சார்ந்த C_v

(5) தாழ்ந்த வெப்பநிலைகளில் திண்மத்தின் வெப்ப ஏற்புத்திறன் சீராகக் குறைகிறது. இதனைத் தன்னியக்கப்படிகளின்

படிப்படியான மறைவினால் விளக்கமுடியாது. ஏனெனில் தன்னியக்கப்படியொன்றின் மறைவு, வெப்ப ஏற்புத்திறனில் ½ R / மோல் என்ற மடங்கில் அதன் மதிப்பைத் தாழ்த்தும். இதற்கான விளக்கத்தையும் வெப்ப ஏற்புத்திறனுக்கான தொன்மைக் கொள்கை விவரிக்கவில்லை.



படம். 4.5 தாழ்ந்த வெப்பநிலையில் C_v ன் சீரான குறைவு

(6) நேர்மின் அயனிபோல இயங்கும் திறன் கொண்ட சோடியம், மக்னீசியம், கால்சியம் போன்ற தனிமங்களின் மோலார் வெப்ப ஏற்புத்திறன் Cv, வெப்பநிலை அதிகரிக்க அதிகரிக்கிறது. ஒரு குறிப்பிட்ட வெப்பநிலைக்கு அப்பால் இதன் மதிப்பு தொன்மைக் கொள்கையின் வரம்பு மதிப்பு 3Rஐ விடக் கூடுதலாக இருக்கிறது. இதனால் திண்மங்களில் அணிக்கோவை மற்றும் அணுக்களின் அதிர்வுகள் பற்றிய தொன்மைக் கொள்கை திருத்தியமைக்கப்பட வேண்டியது அவசியமாகிறது.

4.2. வெப்ப ஏற்புத்திறன் பற்றிய ஐன்ஸ்டீன் கொள்கை

இயற்பியலின் தொன்மைக் கொள்கைக்கும், இயல் தன்மைக்கும் உள்ள முரண்பாடுகளைக் களைய 1907-ஆம் ஆண்டு ஐன்ஸ்டீன், பிளாங் குவாண்டம் கொள்கையின் அடிப்படையில், புதியதொரு விளக்கத்தை வெளியிட்டார். இக்கொள்கை கீழ்வரும் கருதுகோள்களின் அடிப்படையில் எழுந்துள்ளது.

1. திண்மத்திலுள்ள அணுக்களெல்லாம் ஒற்றைப் பரிமாண சீரிசை அலையியற்றி போலச் செயல்படுகின்றன. அதாவது அணுக்கள் யாவும் ஒரு பொது அதிர்வெண்ணோடு, ஒன்றுக்கொன்று தொடர்பின்றி அல்லது பாதிப்பின்றி அலைவுறுகின்றன. இக்கருதுகோளின் மூலம் அணு அலையியற்றிகள் சுழியிலிருந்து அனந்தம் வரையிலான எல்லா ஆற்றல் மதிப்புகளையும் பெற்று அலைவுறமுடியும் என்ற தொன்மைக் கொள்கையின் கருத்துக்கு ஒரு முற்றுப்புள்ளி வைக்கப்பட்டது.

2. அணு அலையியற்றியின் அதிர்வெண்ணைத் திண்மப் பொருளின் ஒரு சிறப்பியல்புக் கூறாக எடுத்துக்கொள்ளலாம். மேலும் அதிர்வின் அலைவீச்சு திண்மத்தின் வெப்பநிலையைப் பொறுத்திருக்கிறது. உயர் வெப்பநிலையில் ஓரணு திண்மப் பொருளை விட்டு வெளியேறும் வாய்ப்பைப் பெற்றிருக்கிறது என்பதைக் கொண்டு இதனை உறுதி செய்யலாம்.

3. ஆற்றல் சமப் பகிர்வு விதிப்படி (equipartition law), அணு அலையியற்றியின் ஒரு தன்னியக்கப்படிக்கான மொத்த ஆற்றல் $k_B T$. பிளாங்கின் விதிப்படி இம்மதிப்பு $h\upsilon / (e^{h\upsilon/k_B T} - 1)$ ஆகும். இதில் h என்பது பிளாங் மாறிலி, υ அதிர்வெண், k_B போல்ட்ஸ்மான் மாறிலி.

பிளாங் கொள்கைப்படி அணு அலையியற்றியின் ஆற்றல் குவாண்டம் மதிப்புடையதாக அதாவது ஒரு குறிப்பிட்ட அடிப்படை அளவின் மடங்காக இருக்கும். எனவே அணு அலையியற்றியின் ஆற்றலை

$$\varepsilon = m h \upsilon$$

எனக் குறிப்பிடலாம். இதில் $m = 0, 1, 2, 3 \ldots\ldots$ என்று முழுவெண் மதிப்புகளை உடையதாக இருக்கும்.

திண்மத்திலுள்ள அணுக்களை, ஆற்றல் அடிப்படையில் பல குழுக்களாக வகுத்துக் கொள்ளலாம். ஒவ்வொரு குழுவும் வரையறுக்கப்பட்ட குவாண்டம் ஆற்றலில் ஒரு மதிப்பைப் பெற்றிருக்கும் எனலாம். இதன்படி திண்மத்தின் மொத்த ஆற்றல், E, என்பது அதிலுள்ள பல குழுக்களின் ஆற்றல்களின் கூடுதலாகும்.

$$E = E_0 + E_1 + E_2 + \ldots\ldots E_N + \ldots\ldots\ldots\ldots E_\infty$$

dn என்ற அணுக்களைக் கொண்ட 'N' என்ற குழுவின் ஆற்றல்

E_N எனில்,

$E_N = \varepsilon_n dn$

இதில் $\varepsilon_n = mh\upsilon$

திண்மத்திலுள்ள மொத்த அணுக்கள் பல்வேறு ஆற்றல் மதிப்புகளைக் கொண்டுள்ள அணுக்குழுக்களின் கூடுதலாகும். எனவே

$$n = \sum_{0}^{\infty} dn$$

இவ்விரு தொடர்புகளையும் கொண்டு ஓரணுவின் சராசரி ஆற்றலைப் <E> பெறமுடியும்.

$$\langle E\rangle = \frac{\sum_{0}^{\infty} \varepsilon_n dn}{\sum_{0}^{\infty} dn}$$

$$\langle E\rangle = \frac{\sum_{0}^{\infty} mh\upsilon \; e^{-mh\upsilon / k_B T}}{\sum_{0}^{\infty} e^{-mh\upsilon / k_B T}}$$

இங்குப் புள்ளியியல் கொள்கையின் (statistical mechanics) ஒரு கருத்து கையாளப்பட்டிருக்கிறது. சுழியிலிருந்து அனந்தம் வரையிலான ஆற்றலைக் கொண்டுள்ள மொத்தமுள்ள n அணுக்களில் ε மற்றும் ε+dε என்ற குறுகிய நெடுக்கைக்குட்பட்ட ஆற்றலுடைய

அணுக்களின் எண்ணிக்கை dn எனில், அது போல்ட்ஸ்மான் காரணியான e^{-/k_BT}க்கு நேர் விகிதத்திலிருக்கிறது. எனவே

$$dn \propto e^{-\varepsilon/k_BT} = C e^{-\varepsilon/k_BT}$$

$$n = \sum_{0}^{\infty} dn = C[e^{0} + e^{-2h\upsilon/k_BT} + e^{-h\upsilon/k_BT} + \ldots\ldots \infty$$

$$E = \sum_{0}^{\infty} \varepsilon_n\, dn = h\upsilon\,[\,e^{-h\upsilon/k_BT} + 2\,e^{-2h\upsilon/k_BT} + 3\,e^{-3h\upsilon/k_BT} + \ldots\ldots \infty]$$

எனவே

$$\langle E\rangle = E/n = h\upsilon\,[\,e^{x} + 2e^{2x} + 3\,e^{3x} + \ldots]\,/[1 + e^{x} + 2e^{2x} + 3e^{3x} + \ldots]$$

$$= h\upsilon\ d/dX \log\,[1 + e^{x} + 2e^{2x} + 3\,e^{3x} + \ldots]$$

இதில் $x = -h\upsilon / k_BT$

பகர அடைப்பிற்குள் இருப்பது ஒரு பெருக்கத் தொடர் என்பதால்

$$\langle E\rangle = h\upsilon\ d/dx \log\,(1/1-e^{x})$$

$$= h\upsilon\ e^{x}/1-e^{x}$$

$$= h\upsilon / e^{-x} - 1$$

x-இன் மதிப்பைப் பதிலீடு செய்ய

$$\langle E\rangle = h\upsilon / e^{h\upsilon k_BT} - 1 \qquad (4.7)$$

ஒரு மோல் செறிவுள்ள திண்மத்தில் N அணுக்கள் இருப்பதாலும், ஒவ்வொன்றிற்கும் மூன்று உரிமைப் படிகள் உள்ளதாலும், திண்மத்தின் மொத்த ஆற்றலை,

$$U = 3N \times h\upsilon / e^{h\upsilon/k_BT} - 1 \qquad (4.8)$$

எனக் குறிப்பிடலாம். திண்மத்தின் ஆற்றலுக்கு அதிலுள்ள எல்லா அணுக்களும் சம அளவு ஆற்றல் பங்களிப்புச் செய்யவில்லை என்றும், அதிர்வெண் மற்றும் வெப்பநிலையைப் பொறுத்து வெவ்வேறு அளவில் ஆற்றல் பங்களிப்புச் செய்கின்றன என்றும் இது தெரிவிக்கிறது.

திண்மத்தின் அக ஆற்றலின் வெப்பநிலை மாறுபாட்டு வீதமே அதன் வெப்ப ஏற்புத் திறன் என்பதால்,

$$C_v = (dU / dT)_v = 3N h\upsilon\ d/dT\ (1/e^{h\upsilon/k_B T}-1)$$

$$= 3R\ (h\upsilon/k_B T)^2\ .\ \exp (h\upsilon / k_B T)\ /\ (e^{h\upsilon/k_B T} -1)^2 \quad (4.9)$$

இதுவே வெப்ப ஏற்புத் திறனுக்கான ஐன்ஸ்டீன் சமன்பாடாகும். இது அணுவெப்பம் என்பது வெப்பநிலையைச் சார்ந்திருக்கிறது என்பதைச் சுட்டிக்காட்டுகிறது.

துகள்களின் வெப்ப இயக்கக் கொள்கைப்படி துகளின் ஆற்றலை வெப்பநிலையோடு தொடர்புபடுத்த முடியும். திண்மத்தில் எல்லா அணுக்களும் υ என்ற ஒரு பொதுவான அதிர்வெண்ணோடு அதிர்வுறுவதால்,

$$h\upsilon = k_B\theta_E$$

எனக் குறிப்பிடலாம். இதில் θ_E என்பது ஐன்ஸ்டீன் வெப்பநிலை எனப்படுகிறது. அதாவது

$$\theta_E = (h\upsilon / k_B) \quad (4.10)$$

ஒரு குறிப்பிட்ட திண்மத்திற்கு υ ஒரு குறிப்பிட்ட மதிப்புடையதாக இருப்பதால் θ_E என்பது கொடுக்கப்பட்ட திண்மத்தின் ஒரு சிறப்பியல்பாகும். இதனை ஐன்ஸ்டீன் தொடர்பில் இணைக்க

$$Cv = 3R\ (\theta_E / T).\ \exp(\theta_E / T)\ /\ (e^{\theta E / T} -1)^2$$

இதனை

$$Cv = 3R\ F_E\ (\theta_E / T) \quad (4.11)$$

என்று குறிப்பிடலாம். இதில் F_E என்பது ஐன்ஸ்டீன் சார்பு (Einstein Function) எனப்படுகிறது.

கொள்கை முடிவுகளும் விளக்கமும்

(i) உயர் வெப்ப நிலைகளில்

உயர் வெப்ப நிலை நெடுக்கைகளில் அணு அலையியற்றியின் ஆற்றல் அணுவின் வெப்ப இயக்க ஆற்றலை ஒப்பிட மிகவும் குறைவு

$$h\upsilon << k_B T$$

என்பதால் $h\upsilon / k_BT$ சொற்ப மதிப்புடையதாக விளங்கும். எனவே

$$e^{h\upsilon / k_BT} = 1 + h\upsilon / k_BT + ½! (h\upsilon / k_BT)^2 + ...$$

நுண் மதிப்பால் $(h\upsilon / k_BT)$ ன் உயரடுக்குளைப் புறக்கணிக்கலாம்.

அப்போது,

$$e^{h\upsilon / k_BT} \cong 1 + h\upsilon / k_BT \cong 1$$

அல்லது

$$C_v = 3R$$

உயர் வெப்பநிலையில் ஐன்ஸ்டீன் சார்பின் மதிப்பு 1 ஆகிவிடுவதால், அவ்வெப்பநிலை நெடுக்கையில் திண்மங்களின் வெப்ப ஏற்புத்திறன் தொன்மைக் கொள்கை நிறுவியதைப் போல டுலாங்-பெட்டிட் விதிக்கு உட்பட்டிருக்கின்றது.

(ii) தாழ்ந்த வெப்பநிலைகளில்

இவ்வெப்பநிலை நெடுக்கையில் $h\upsilon / k_BT$ என்பதால் $h\upsilon > k_BT$ன் மதிப்பு அதிகமாக இருக்கும்.

$$e^{h\upsilon / k_BT} = 1 + (h\upsilon / k_BT) + ½! (h\upsilon / k_BT)^2 + ...$$

என்பதால்

$$e^{h\upsilon / k_BT} >> 1$$

எனவே

$$e^{h\upsilon / k_BT} / (e^{h\upsilon / k_BT} - 1)^2 \cong e^{-h\upsilon / k_BT}$$

இம் மதிப்பை ஐன்ஸ்டீன் தொடர்பில் பதிலீடு செய்ய

$$C_v = 3R (h\upsilon / k_BT)^2 \exp(-h\upsilon / k_BT) \qquad (4.12)$$

இத்தொடர்பு C_v எங்ஙனம் மாறுகிறது என்று தீர்மானிப்பதில் $(h\upsilon / k_BT)^2$ எனும் உறுப்பைவிட $\exp(-h\upsilon / k_BT)$ எனும் உறுப்பு வலிமையாக உள்ளது என்பதைத் தெரிவிக்கிறது. $T \rightarrow 0$; $h\upsilon / k_BT \rightarrow \infty$ என்றாலும் $e^{-h\upsilon > k_BT} \rightarrow 0$ எனவே $C_v \rightarrow 0$ என்ற சோதனை முடிவை உறுதிப்படுத்த முடிகிறது. இது டுலாங் - பெட்டிட் விதியின் இயலாமையாகும்.

ஐன்ஸ்டீன் வெப்பநிலை

எவ்வெப்பநிலை மதிப்பு, நீண்ட வெப்பநிலை நெடுக்கையில் திண்மப் பொருளுக்குச் சோதனை மூலம் கண்டறியப்பட்ட வெப்ப ஏற்புத்திறன் மதிப்பும், கொள்கை மூலம் பெறப்பட்ட மதிப்பும் பெரிதும் ஒத்திருக்குமாறு இருக்கச் செய்கிறதோ, அவ்வெப்பநிலையை ஐன்ஸ்டீன் வெப்பநிலை (θ_E) எனலாம். இதனை ஒரு பெயர்ச்சி வெப்பநிலையாகக் கற்பிக்கலாம். ஒரு பொருளின் இரு வேறுபட்ட இயற்பியல் நிலைகளில், ஒரு நிலையிலிருந்து மற்றொரு நிலைக்கு நிலைமாற்றத்தைத் தூண்டுவது இந்தப் பெயர்ச்சி வெப்பநிலை $T>\theta_E$ என்ற வெப்பநிலைகளில் வெப்ப ஏற்புத்திறன் தொன்மைக் கொள்கைக்கு இணக்கமாகவும், $T<\theta_E$ என்ற வெப்பநிலைகளில் குவாண்டம் கொள்கைக்கு ஏற்பவும் இருக்கின்றன.

பல திண்மங்களுக்கு θ_E – ன் மதிப்பு 100 – 300 கெல்வின் வெப்பநிலை நெடுக்கைக்குள் இருக்கிறது. $\theta_E = 300$ கெல்வின் எனில், அணு அலையியற்றியின் அதிர்வெண்

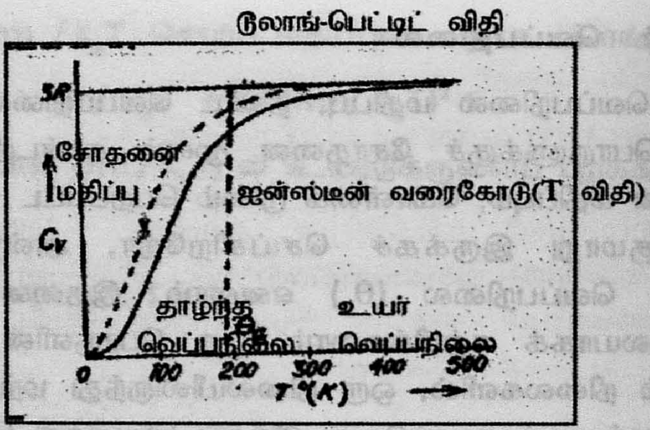
$= k_B\theta_E / h = 1.38 \times 10^{-23} \times 300 / 6.626 \times 10^{-34}$

$= 6.25 \times 10^{12}$ ஹெர்ட்ஸ்

இம்மதிப்பு அணு அலையியற்றிகளின் அதிர்வெண் நெடுக்கையில் உள்ளது.

ஐன்ஸ்டீன் வரைபடம்

ஐன்ஸ்டீன் சமன்பாட்டைக் கொண்டு (4.9) Cv-க்கும் Tக்கும் ஒரு வரைபடம் வரைந்தால் அது ஐன்ஸ்டீன் வரைபடமாகும்.



படம்.4.6 ஐன்ஸ்டீன் வரைபடம்

சோதனை மதிப்புகள் ஐன்ஸ்டீன் கொள்கையால் நிறுவப்படும் மதிப்போடு ஏறக்குறைய ஒன்றியிருக்கின்றன. ஆனால் தாழ்ந்த வெப்பநிலைகளில் ஐன்ஸ்டீன் கொள்கை தரும் மதிப்பு, சோதனை மதிப்பிலிருந்து குறிப்பிடும்படியான அளவில் தாழ்ந்திருக்கிறது. இதற்கான விளக்கத்தை நாம் கீழ்வருமாறு அளிக்கமுடியும்.

திண்மப் பொருளுக்கு ஊட்டப்படும் ஆற்றல் இருவேறு காரணங்களினால் உட்கிரகித்துக் கொள்ளப்படுகிறது. அணிக்கோவையில் அமைந்திருக்கும் அணுக்கள் தங்களது தனித்த அதிர்வியக்கத்தை மேலும் அதிகரித்துக் கொள்வதால் ஒரு பகுதி ஆற்றல் எடுத்துக் கொள்ளப்படுகின்றது. இதனை $U_{\text{அணிக்கோவை}}$ என்பர். கடத்து எலக்ட்ரான்கள் வெப்பக் கிளர்ச்சியுற்று உயர் ஆற்றல் நிலைகளை அடைவதால் மற்றொரு பகுதி ஆற்றல் ஏற்றுக் கொள்ளப்படுகிறது. இதனை $U_{\text{எலக்ட்ரான்}}$ என்பர்.

$$U = U_{\text{அணிக்கோவை}} + U_{\text{எலக்ட்ரான்}}$$

எனவே

$$Cv = (dU / dT) = (dU / dT)_{\text{அணிக்கோவை}} + (dU / dT)_{\text{எலக்ட்ரான்}}$$

$$= (Cv)_{\text{அணிக்கோவை}} + (Cv)_{\text{எலக்ட்ரான்}}$$

உயர் வெப்பநிலைகளில் வெப்ப இயக்க ஆற்றல் மிகவும் அதிகம். அதனால் அணுக்கள் மிக எளிதாகச் கிளர்ச்சியுற்று உயர் ஆற்றல் நிலையை அடைகின்றன. இதனால் திண்மங்களின் அக ஆற்றலுக்கு எலக்ட்ரான்களின் பங்களிப்பும் அதனால்

திண்மப்பொருளின் வெப்ப ஏற்புத்திறனும் மிகவும் குறைந்து போய்விடுகிறது, அதாவது உயர் வெப்பநிலைகளில் திண்மங்களின் வெப்ப ஏற்புத்திறன் என்பது அதன் அணிக்கோவையின் அதிர்வால் மட்டுமே ஏற்படுகிறது எனலாம்.

சார்பிலாச் சுழிவெப்பநிலையில் கட்டற்ற எலக்ட்ரான்கள் அடிமட்ட ஆற்றல் நிலையிலிருந்து பெர்மி ஆற்றல் வரை பங்கிடப்பட்டுள்ளன. பெர்மி ஆற்றல் 5 – 6 எலக்ட்ரான் வோல்ட் நெடுக்கையிலும், அதற்கிணையான பெர்மிவெப்பநிலை 50,000 K நெடுக்கையிலும் உள்ளது. T என்ற வெப்பநிலையில் வெப்ப ஆற்றல் k_BT என்பதால் 300K என்ற அறை வெப்பநிலையில் அதனளவு 0.025 eV நெடுக்கையில் இருக்கும். அடிமட்ட ஆற்றல் நிலையில் உள்ள எலக்ட்ரான்கள் வெப்ப ஆற்றலை உட்கிரகித்து k_BT ஆற்றல் விலகியுள்ள உயர் ஆற்றல் நிலையை அடைவதில்லை. ($k_BT < k_BT_F$). ஏனெனில் அவ்வாற்றல் நிலைகளில் ஏற்கனவே எலக்ட்ரான்கள் உள்ளன. எனவே பெர்மி ஆற்றல் நிலையிலிருந்து அல்லது E_F ஆற்றலிலிருந்து k_BT அளவு விலகியுள்ள ஆற்றல் நிலைகளுக்கு உட்பட்ட எலக்ட்ரான்கள் மட்டும் வெப்ப ஆற்றலை உட்கிரகித்து வெற்று ஆற்றல் நிலைக்குத் தாவுகின்றன. $E_F = k_BT_F$ என்பதால், வெப்ப ஆற்றலை எல்லா எலக்ட்ரான்களும் உட்கிரகிப்பதில்லை. மாறாக (T / T_F) என்ற பின்னத்தால் மதிப்பிடப்படும் எலக்ட்ரான்களே உட்கிரகிக்கின்றன.

அதாவது ஒரு மோல் செறிவுள்ள திண்மத்தில் வெப்ப ஆற்றலை உட்கிரகிக்கும் எலக்ட்ரான்களின் எண்ணிக்கை $N (T / T_F)$. இது எலக்ட்ரான் வழியிலான வெப்ப ஏற்புத்திறன் $Cv = 3R\, T/T_F$ என்று தெரிவிக்கிறது. சாதாரணமாக $T / T_F = 1/100$ என்பதால் $Cv \cong 0.01\, 3R$ இத்தாழ்ந்த மதிப்பு சாதாரண வெப்பநிலைகளில் எலக்ட்ரான்கள் வெப்ப ஏற்புத்திறனில் பங்கு கொள்வதில்லை என்பதை விளக்கிக் கூறுகிறது.

இதே கருத்தை நாம் குவாண்டம் கொள்கையின் அடிப்படையைக் கொண்டும் நிறுவலாம். தாழ்ந்த வெப்பநிலைகளில் பெரும்பாலான அணு அலையியற்றிகள் சுழிநிலை ஆற்றலைப் (Zero point energy) பெற்றிருக்கும். சுழிநிலை ஆற்றலின் மதிப்பு 1/2 hυ ஆகும். ஏனெனில் குவாண்ட இயக்கக் கொள்கை, ஒரு சீரிசை அலையியற்றியின்

ஆற்றல் $(m + \frac{1}{2})h\nu$ என்ற திருத்தப்பட்ட தொடர்பை நிறுவியுள்ளது. எனவே அணு அலையியற்றியின் சராசரி ஆற்றல்,

$$\langle E \rangle = \frac{1}{2} h\nu \; [illegible] \; / \left(e^{h\nu/k_B T} - 1\right)$$

ஆகும் [illegible] என்ற போது கூட, அணு அலையியற்றி சிறிதளவு ஆற்ற[illegible] பெற்றிருந்தாலும், அது வெப்பநிலை சாராத மதிப்பாக [illegible]றது. எனவே அவ்வெப்பநிலைகளில் Cv சுழியாகிவிடுகிறது. [illegible]றிதளவு வெப்பநிலை அதிகரிக்கும்போது மிகச் சில அலையியற்றிகளே வெப்ப ஆற்றலால் கிளர்ச்சி பெறுகின்றன. தாழ்ந்த வெப்ப நிலைகளில் சராசரி வெப்ப இயக்க ஆற்றல் $k_B T$, குவாண்ட ஆற்றல் $h\nu$ ஐ விட மிகவும் குறைவாக இருக்கும். எனவே அணுக்களுக்குக் கிடைக்கும் வெப்ப ஆற்றல் அதனைக் கிளர்ச்சியூட்டி ஆற்றல் நிலையை உயர்த்தப் போதுமானதாக இருப்பதில்லை.

இதனால் தாழ்ந்த வெப்பநிலைகளில் ஐன்ஸ்டீன் கொள்கை தொன்மைக் கொள்கையால் நிறுவப்பட்ட வெப்ப ஏற்புத் திறனைவிடக் குறைவான மதிப்பைத் தருகிறது எனலாம்.

வெப்ப ஏற்புத்திறனுக்கான ஐன்ஸ்டீன் கொள்கையின் குறைபாடுகள்

தொன்மைக் கொள்கையை விட ஐன்ஸ்டீன் கொள்கை திண்மப் பொருட்களின் வெப்ப ஏற்புத் திறனை நீண்ட வெப்பநிலை நெடுக்கையில் விளக்கக் கூடியதாக இருக்கிறது என்றாலும் அதில் சில குறைபாடுகள் இருக்கவே செய்கின்றன.

1. ஐன்ஸ்டீன் சமன்பாடு வெப்பநிலையைப் பொறுத்து மாறுபடும் வெப்ப ஏற்புத் திறனை ஒரு குறிப்பிட்ட வெப்பநிலை வரை விளக்குகிறது. இது $0.2\,\theta_E$ வரை அமைந்திருக்கிறது. இதற்கும் கீழான வெப்பநிலைகளில் ஐன்ஸ்டீன் கொள்கை தவறிவிடுகிறது. இவ்வெப்பநிலைகளில் மின்கடத்தா திண்மப் பொருளின் வெப்ப ஏற்புத்திறன் T^3-க்கும், உலோகங்களில் T-க்கும் நேர்விகிதத்தில் இருக்கிறது. திண்மப் பொருள் மீக்கடத்தும் நிலையை அடையப் பெறுமானால், வெப்ப ஏற்புத்திறனில் ஏற்படும் சரிவு, T-ன் நேர்விகிதத் தொடர்பால் நிறுவப்படுவதைவிடக் கூடுதலாக இருக்கிறது. இதற்கான விளக்கத்தை ஐன்ஸ்டீன் கொள்கை தரவில்லை.

2. அணு அலையியற்றியின் அதிர்வெண் υ, மற்றும் ஐன்ஸ்டீன் வெப்பநிலை θ_E இவற்றின் மதிப்புகள் அனுமான முறையில் பெறப்பட்டுள்ளன. இம்மதிப்புகளை உறுதி செய்ய உறுதுணையான தனித்த இயற்பியல் வழிமுறைகள் இல்லை.

3. திண்மத்திலுள்ள எல்லா அணுக்களும் ஒன்றையொன்று சார்ந்து அதிர்வுறுவதில்லை என்றும் அதனால் எல்லா அணுக்களும் ஒரே அதிர்வெண்ணுடன் அதிர்வுறுகின்றன என்றும் ஐன்ஸ்டீன் கொள்கையில் கூறப்பட்டுள்ளது. ஆனால் உண்மையில் இந்த அணு அலையியற்றிகள் ஒன்றையொன்று சார்ந்தவாறே இயங்குகின்றன. ஒவ்வோர் அணுவும், பிற அணுக்களால் தோற்றுவிக்கப்படும் புலத்தில் இயங்குவதால் அதன் அதிர்வியக்கம் ஐன்ஸ்டீன் கொள்கையால் வரையறுக்கப்படுவதைப் போல அவ்வளவு எளிமையானதாக இருப்பதில்லை. ஓரணுவின் அதிர்வியக்கம் அதற்கு அமைந்திருக்கும் புறச்சூழலைப் பொறுத்திருக்கிறது என்பதால் திண்மத்தின் உட்பகுதியில் அதிர்வுறும் அணுவின் அதிர்வெண்ணும், புறத்தளத்தில் அதிர்வுறும் அணுவின் அதிர்வெண்ணும் சமமாக இருப்பதில்லை. இவ்வேறுபாடு ஐன்ஸ்டீன் கொள்கையில் எடுத்துக் கொள்ளப்படவில்லை.

4.3. வெப்ப ஏற்புத்திறனுக்கான டிபை (Debye) கொள்கை

டிபை கொள்கை பின்வரும் கருதுகோள்களின் அடிப்படையில் விவரிக்கப்பட்டுள்ளது.

1. தொடர்ச்சியான மீள்திறம் மிக்க பொருளாகத் திண்மத்தைக் கருதலாம். அதன் மீட்சி மாறிலிகள் (elastic constant) அதிர்வெண்ணைச் சார்ந்து இருப்பதில்லை.

2. ஐன்ஸ்டீன் கொள்கை ஒளியியல் செயல் வகையான வெப்ப ஆற்றலைக் கருதுகிறது. ஆனால் டிபை கொள்கை ஒலியியல் செயல்வகைப்பட்ட வெப்ப ஆற்றலை ஏற்றுக்கொண்டுள்ளது.

3. திண்மத்திலுள்ள அணுக்கள் சுழிமுதல் ஒரு பெரும மதிப்பு வரையுள்ள நீண்ட நெடுக்கைக்குட்பட்ட அதிர்வெண்களுடன் அதிர்வுறுகின்றன. இதனால் எல்லா அணுக்களும் ஒரே அதிர்வெண்ணுடன் அதிர்வுறும் என்ற ஐன்ஸ்டீன் கருத்துக்கு

முற்றுப்புள்ளி இடப்பட்டது. அணிக்கோவையில் அணுவிடைத் தொலைவைவிடக் குறைவாக இருக்கும் அரை அலைநீளமுள்ள அலைகள் ($\lambda \leq 2 < a$) படிகத்தளத்தின் ஊடாகப் பரவிச் செல்ல முடிவதில்லை என்ற உண்மை அணு அலையியற்றியின் அதிர்வெண்ணிற்கு ஓர் உயர் வரம்பை ஏற்படுத்தியது.

4. ஒவ்வோர் அதிர்வெண்ணுக்கும் (ε) பங்கீட்டுச் சார்பு $n(\omega)$ உள்ளது. இது ε, $\varepsilon + d\varepsilon$ என்ற அதிர்வெண் இடைவெளியில் இருக்கும் அதிர்வெண் வகைகளின் எண்ணிக்கையை $n(\omega)\, d\varepsilon$ தருகிறது.

5. மாக்ஸ்வெல் - போல்ட்ஸ்மான் பங்கீட்டுத்தன விதிப்படி, அதிர்வெண் வகைகள் ஆற்றல் வெளியில் பகிர்வு செய்யப்பட்டுள்ளன.

திண்மத்தின் மீட்சித் தன்மை, அதிலுள்ள அணுக்கள் எல்லா மதிப்புள்ள அதிர்வெண்களுடன் அதிர்வுறும் என்பதைவிட, தொடர்ச்சியான ஊடகத்தின் அமைப்பை, பொதுவாகச் சுழியிலிருந்து ஒரு பெரும மதிப்பு வரையுள்ள நீண்ட நெடுக்கைக்குட்பட்ட எல்லா அதிர்வெண்களிலும் அதிர்வுறும் அணு அலையியற்றிகளின் தொகுப்பாகக் கருதலாம் எனத் தெரிவிக்கிறது. எனவே அதிர்வுறும் அணு என்றும், அதன் தன்னியக்கப்படிகளுக்கு ஏற்பப் பெறும் ஆற்றல் என்றும் கூறுவதை விட, அமைப்பு என்றும், அதில் இருக்கக்கூடிய அதிர்வினங்கள் என்றும், அவை பெற்றிருக்கக் கூடிய ஆற்றல் என்றும் நெறிப்படுத்திக் கொள்ள வேண்டியது அவசியமாகிறது. எனவே வெப்ப ஏற்புத்திறனுக்கான டிபை கொள்கையை அறிந்து கொள்வதற்கு முன்னால், அமைப்பில் இருக்கக்கூடிய அதிர்வினங்கள், மற்றும் அவற்றில் உறையும் ஆற்றலைப் பற்றித் தெரிந்து கொள்வோம்.

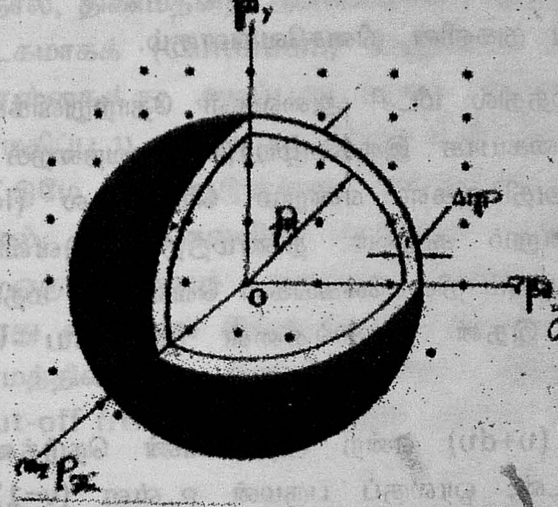
அதிர்வெண் நெடுக்கையில், அனுமதிக்கப்பட்ட அதிர்வுகளின் எண்ணிக்கையைக் காணல்

ஒரு முப்பரிமாண உந்த-இடவெளியின் (Phase-space) ஓரலகு உந்தம் $\Delta p_x.\Delta p_y.\Delta p_z$ ஆகும். ஓரலகு இடவெளி $\Delta x.\Delta y.\Delta z$ (v) ஆகும். ஓரலகு உந்த இடவெளியில், ஒரே ஒரு துகள் மட்டும்தான் இருக்க முடியும். எனவே இந்த ஓரலகு உந்த-இடவெளி, ஒரு ஐகன் நிலை (Eigen state) என்போம். ஹைசன்பெர்க் (Heisenberg) கொள்கைப்படி, ஓரலகு உந்தஇடவெளியின் பருமன்

$\Delta p_x.\Delta p_y.\Delta p_z = h^3 / \Delta x.\Delta y.\Delta z$

$= h^3/v$ ஆகும்.

குறிப்பிட்ட தருணத்தில், உந்தம் pக்கும், (p+dp)க்கும் இடையேயான உந்தங்களைக் கொண்ட துகள்கள் அடங்கும். உந்தவெளியின் பருமன், படம் 4.7



படம் 4.7 உந்தவெளியில் அனுமதிக்கப்பட்ட நிலைகளைக் காணுதல்

$4\pi/3\ [(p+dp)^3 - p^3]$ ஆகும்.

$4\pi\ p^2\ dp$ ஆகும்.

இந்தப் பருமனில் உள்ள உந்தநிலைகள் n(p) dp என்றால்,

$$n(p)\ dp = 4\pi p^2\ dp/h^3/v$$

இவையே, அனுமதிக்கப்பட்ட உந்தநிலைகளின் எண்ணிக்கையாகும்.

$$p = \frac{h\upsilon}{c}\ ;\ dp = \frac{h d\upsilon}{c}$$

எனவே, இச்சமன்பாட்டை, அதிர்வெண் நிலைக்கு மாற்றினால்,

$$n(\upsilon)d\upsilon = \frac{4\pi}{h^3}\,\frac{h^2\upsilon^2}{c^2}\,\frac{h}{c}\,d\upsilon.V$$

$$= v\frac{4\pi\upsilon^2}{c^3}\,d\upsilon$$

இதில் c என்பது துகளின் திசைவேகமாகும்.

ஒரு திண்மத்தில் மீட்சி அலைகள் தோற்றுவிக்கப்படும்போது அவை இரு வகையாக இருக்கமுடியும். அவற்றைக் குறுக்கலை (transverse) அதிர்வுகள் என்றும் நெட்டலை (longitudinal) அதிர்வுகள் என்றும் கூறுவர். திண்மத்தில் இவ்விருவகையான அலைகள் ஊடுபரவும் திசைவேகங்கள் வெவ்வேறு மதிப்புடையதாக இருக்கின்றன. இதன் வேகங்களை முறையே v_t, v_l என்று குறிப்பிடுவோம்.

υ மற்றும் $(\upsilon+d\upsilon)$ என்ற அதிர்வெண் நெடுக்கைக்குட்பட்ட அதிர்வெண்களுடன், ஓரலகுப் பருமன் உள்ள (v=1) அமைப்பில் அனுமதிக்கின்ற நெட்டலைகளின் எண்ணிக்கை

$$[n(\upsilon)d\upsilon]_{\text{நெட்டலை}} = 4\pi\upsilon^2\,d\upsilon/\,v_l^3$$

அதே அதிர்வெண் நெடுக்கையில் குறுக்கலை அதிர்வெண்களின் எண்ணிக்கை

$$[n(\upsilon)d\upsilon]_{\text{குறுக்கலை}} = 2\pi\upsilon^2\,d\upsilon/\,v_t^3$$

ஏனெனில், குறுக்கலைகள் இரு தளவாக்கங்களில் அதிர முடியும்.

எனவே ஓரலகுப் பருமனில் υ, $\upsilon + d\upsilon$ என்ற அதிர்வெண் நெடுக்கையில் இருக்கக்கூடிய மீட்சிநிலை அலைகளின் (Stationay waves) எண்ணிக்கை

$$n(\upsilon)\,d\upsilon = n_l(\upsilon)\,d\upsilon + n_t(\upsilon)\,d\upsilon$$

$$= 4\pi\,\upsilon^2 d\upsilon\,/\,(1/v_l^3 + 2/v_t^3)$$

V என்ற பருமனுள்ள திண்மப் பொருளில்,

$$n(\upsilon)d\upsilon = 4\pi V\,(1/v_l^3 + 2/v_t^3)\,\upsilon^2 d\upsilon \qquad (4.13)$$

திண்மம் என்பது அணிக்கோவையில் அமைந்துள்ள அணுக்களின் தொகுப்பு. மீட்சி அலை திண்மத்தை ஊடுருவிச் செல்லும்போது (அவை திண்மத்திற்குள் மட்டுமே தோன்றியிருக்கின்றன. திண்மத்தைவிட்டு வெளியேறிச் செல்வதில்லை), அதன் அலைநீளம், அணுவிடைத் தொலைவை ஒப்பிட அதிகமாக இருக்கிறது என்பதால், திண்மத்தை அவ்வலையைப் பொறுத்தமட்டில் ஒரு தொடர் ஊடகமாகக் (Continuum) கருதலாம். இக்கருத்தை டிபை தன் கொள்கைக்கு அடிப்படையாகக் கொண்டுள்ளார். அதிர்வெண்ணின் மதிப்பு υ_m என்ற ஒரு பெரும மதிப்பிற்கு உட்பட்ட மதிப்புகளை மட்டுமே கொண்டுள்ளது. ஏனெனில் அதிர்வெண் அனந்தம் என்றால், அவ்வலையின் ஆற்றலும் அனந்தமாகும். நடைமுறையில் ஒரு திண்மம் அனந்தம் அளவு ஆற்றலைப் பெற்றிருக்கமுடியாது என்பதால் இக்கட்டுப்பாடு அவசியமானது. υ_m-ன் மதிப்பு திண்மத்தின் ஒரு சிறப்பியல்பாகும். இதனை வரம்பு அதிர்வெண் (Cut-off frequency) என்றும் டிபை அதிர்வெண் என்றும் கூறுவர்.

அதிர்வெண் நிறமாலையில் அமைந்திருக்கும் அனைத்து நிலை அலைகள் அல்லது ஒன்றையொன்று சார்ந்திராத தனித்த அதிர்வினங்களின் எண்ணிக்கையை $n(\upsilon)d\upsilon$ யைச் சுழிமுதல் டிபை அதிர்வெண் வரைக்கு உட்பட்டுத் தொகையாக்கம் செய்வதினால் பெறலாம். N அணுக்களை உடைய ஒரு திண்மத்தில், அதிர்வினங்களின் எண்ணிக்கை 3Nக்கும் அதிகமாக ஒருபோதும் இருக்கமுடியாது எனவே பெரும அதிர்வெண் υ_m, கீழ்க்காணும் தொடர்பிற்கு ஏற்ப அமையவேண்டும் எனலாம்.

$$3N = 4\pi V\,(1/v_l^3 + 2/v_t^3)\int_0^{\upsilon_m}\upsilon^2\,d\upsilon$$

$$= 4\pi V\,(1/v_l^3 + 2/v_t^3)\,(\upsilon_m^3/3)$$

இத்தொடர்பு டிபை அதிர்வெண்ணின் மதிப்பைத் தருக்கிறது.

$$\upsilon_m^3 = 9N / 4\pi V\,(1/v_l^3 + 2/v_t^3) \tag{4.14}$$

திண்மத்தில் ஒலியின் திசைவேகம் (υ_e, v_t) 10^3 மீ/வி என்ற நெடுக்கையில் இருக்கிறது. N/V என்பது ஓரலகுப் பருமனில் உள்ள துகள்களின் எண்ணிக்கை. இது 10^{28}/மீ³ என்ற மதிப்புடையதாக இருக்கிறது என்று கொண்டால்

$\upsilon_m = 10^{13}$ ஹெர்ட்ஸ்

என்ற மதிப்பைப் பெறலாம். இதற்குச் சமமான சிறும அலைநீளம் 10^{-10}மீ அல்லது ஒரு ஆங்ஸ்ட்ராம் ஆக இருக்கிறது. தொடர் ஊடக மாதிரி அலைநீளம், அணுவிடைத் தொலைவைவிடக் குறைவாக இருக்கும் வரைதான் ஏற்புடையதாக இருக்கிறது என்பதால் உயர் υ_m மதிப்புகளில் இக்கொள்கை பிசகிவிடுகிறது.

திண்மத்தில் ஒரு வெப்பச் சமநிலையில், ஓர் அணு அலையியற்றியின் சராசரி ஆற்றலை, கரும்பொருள் கதிர்வீச்சின் ஒப்புமைப்படி

$$\langle E\rangle = h\upsilon / e^{h\upsilon/k_B T} - 1$$

என்று கொள்ளப்பட்டுள்ளது. எனவே 1 மோல் செறிவுள்ள திண்மத்தின் ஆற்றலைப் பின்வருமாறு கண்டறியலாம். υ மற்றும் $\upsilon + d\upsilon$ என்ற அதிர்வெண் நெடுக்கைக்குள் உள்ள நிலை அலைகளின் ஆற்றல்

$$U(\upsilon)d\upsilon = \langle E\rangle\ N(\upsilon)\ d\upsilon$$

திண்மத்தின் அக ஆற்றலைத் தொகையாக்கத்தின் மூலம் மதிப்பிடலாம்.

$$U = \int_0^{\upsilon_m} \langle E\rangle\ N(\upsilon)\ d\upsilon$$

$$= 4\pi V\ (1/\upsilon_l^3 + 2/\upsilon_t^3) \int_0^{\upsilon_m} h\upsilon^3\ d\upsilon \,/\, (e^{h\upsilon/k_B T} - 1)$$

தொடர்பு (4.14) ஐக் கொண்டு

$$V = 9N / \upsilon_m^3 \int_0^{\upsilon} h\upsilon^3\, d\upsilon \;/\; (e^{h\upsilon/k_B T} - 1)$$

$h\upsilon / k_B T = x$ என்போம். $d\upsilon = k_B T / h\, dx$: $\upsilon \to 0$ எனில் $x \to 0$,

$\upsilon \to \upsilon_m$ எனில் $h\upsilon_m / k_B T = x_m = \theta_D / T$. இதில் θ_D என்பது டிபை வெப்பநிலை எனப்படும். எனவே புதிய மாறிலியின் அடிப்படையில்,

$$U = (9R / \upsilon_m^3)\;(k_B^3\; T^4 / h^3) \int_0^{x_m} x^3 / e^x - 1 \;\; dx$$

$$= 9R.\; T^4/\theta_D^3 \int_0^{\theta_D/T} x^3 / e^x - 1 \;\; dx \qquad (4.15)$$

இதிலிருந்து திண்மத்தின் வெப்ப ஏற்புத்திறனைக் கண்டறியலாம்.

$$Cv = \left(\frac{dU}{CT}\right)_v$$

$$= 9R\,[\,4T^3 / \theta_D^3 \int_0^{\theta_D/T} x^3 dx / e^{x-1} + T^4 / \theta_D^3 \;\; d/dT \int_0^{\theta_D/T} x^3 / (e^x - 1)\, dx]$$

பகர அடைப்பிற்குள் உள்ள தொகையாக்கக் கூறினை A என்போம்.

$$A = \int_0^{\theta_D/T} x^3 / e^{x-1} \;\; dx$$

$$dA / dx = [\,x^3 / e^{x-1}\,]_0^{\theta_D/T}$$

எனவே

$$dA/dT = dA/dx \; . \; dx/dT$$

$$= -x^3/e^{x-1} \; . \; h\upsilon/k_BT^2$$

$$= \left[-x^4/e^{x-1} \; 1/T\right]_0^{\theta_D/T}$$

$$= -\theta_D^{\,4}/T^5/e^{\theta D/T}-1$$

$$Cv \quad = 9R \left[4T^3/\theta_D^{\,3}\int_0^{\theta_D/T} x^3/e^{x-1} - \theta_D/T \;/ e^{\theta D/T}-1\right]$$

இது ஒற்றை அணுக்களாலான திண்மத்திற்கான டிபையின் வெப்ப ஏற்புத்திறனின் தொடர்பாகும்.

$$Cv = 3R\left[12\,T^3/\theta_D^{\,3}\int_0^{\theta_D/T} x^3/e^{x-1} - 3\;\theta_D/T \;/ e^{\theta D/T}-1\right] \qquad (4.16)$$

பகர அடைப்பிற்குள் உள்ள பகுதி θ_D/T யின் சார்பாக உள்ளது. இதனை **டிபை கோவை (Debye function)** என்பர். இதனை D (θ_D/T) என்று குறிப்பிட்டால்

$$Cv = 3R \;\; D(\theta_D/T)$$

என்று சுருக்கமாகக் குறிப்பிடலாம்.

இனி உயர் மற்றும் தாழ்ந்த வெப்பநிலை நெடுக்கையில் வெப்பநிலையைச் சார்ந்த Cv-இன் மதிப்பையும் அதில் ஏற்படும் மாற்றங்களையும் அறிந்து கொள்வோம்.

(i) உயர் வெப்பநிலையில்

உயர் வெப்பநிலையில் θ_D/T -ன் மதிப்பு மிகவும் குறைவாகும்.

$\theta_D/T << 1$

$e^{\theta_D/T} \cong 1 + \theta_D/T$ எனலாம்.

$$\int_0^{\theta_D/T} x^3 / e^{x-1} \quad \int_0^{\theta_D/T} x^2 dx = 1/3 \ (\theta_D / T)^3$$

எனவே

$$Cv = 9R \, [4 \, (T/\theta_D)^3 \times 1/3 \ (\theta_D / T)^3 - 1]$$

$$= 3R$$

ஐன்ஸ்டீன் கொள்கையைப் போல, டிபையின் கொள்கையும் உயர் வெப்பநிலையில், திண்மத்தின் வெப்ப ஏற்புத்திறன் டூலாங் - பெட்டிட் விதிக்கு உட்பட்டிருக்கிறது.

(ii) தாழ்ந்த வெப்பநிலையில்

தாழ்ந்த வெப்பநிலையில் $T \rightarrow o; \ x \rightarrow \alpha$ அல்லது $\theta_D/T \rightarrow \alpha$. எனவே $\theta_D/T \ / \ e^{\theta D/T}-1$ -ன் மதிப்பு சுழியை நெருங்குகிறது. எனவே டிபை கோவையில் உள்ள இரண்டாவது உறுப்பு சுழியாவதுடன், முதல் உறுப்பான தொகையாக்கியின் மேல் வரம்பு அனந்தமாகிவிடுகின்றது. படித்தர தொகையாக்கத்தின்படி

$$\int_0^{\alpha} x^3 \, dx / e^{x-1} = \pi^4 / 15$$

எனவே தாழ்ந்த வெப்பநிலையில்

$$Cv = 12/5 \, . \, \pi^4 \, RT^3 / \theta_D^3$$

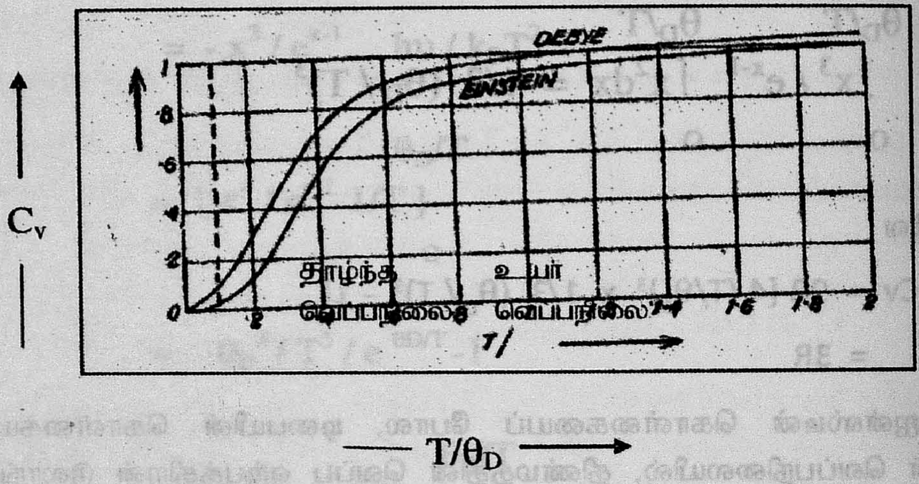
$$= 77.94 \times 3R \, (T / \theta_D)^3 \qquad (4.17)$$

இத்தொடர்பு டிபையின் T^3 விதி எனப்படும்.

டிபை வெப்பநிலை

டிபையின் தொடர்பைக் கொண்டு வெவ்வேறு வெப்ப நிலைகளில் ஒரு திண்மத்தின் வெப்ப ஏற்புத்திறனை மதிப்பிடலாம்.

அம்மதிப்புகளைக் கொண்டு Cv-க்கும் T-க்கும் டிபை வரைபடம் ஒன்றைப் பெறமுடியும். (படம் 4.8)



படம். 4.8 டிபை வரைகோடு

θ_D என்பது டிபை வெப்பநிலையெனில் $\theta_D = h\nu_m / k_B$ ஆகும். $T/\theta_D = 1$ என்ற நிலையில் Cv-ன் மதிப்பு ஏறக்குறைய 3R ஐ நெருங்குகிறது. எனவே $T > \theta_D$ எனில் திண்மம் தொன்மைக் கொள்கைக்கும் $T<\theta_D$ எனில் குவாண்டம் கொள்கைக்கும் உட்பட்டிருக்கிறது எனலாம். குவாண்ட இயற்பியலுக்கும், தொன்மைக் கொள்கைக்கும் ஒரு திண்மத்தின் வெப்பப் பண்பு வேறுபடக் காரணம், முன்பு தெரிவித்ததைப் போல, உயர் வெப்பநிலைகளில் அனுமதிக்கப்படும் குவாண்ட ஆற்றல் வேறுபாடுகள் ($h\nu$), வெப்ப இயக்க ஆற்றலைவிடக் (k_BT) குறைவாக இருப்பதும், அதனால் அதிர்வெண் நிறமாலை ஒரு நீண்ட தொடர்ச்சியுடன் அமைந்திருப்பதும், தாழ்ந்த வெப்பநிலைகளில் ஆற்றல் இடைவெளி k_BT-ஐ விட அதிகமாக இருப்பதால், சுழிநிலை ஆற்றலைவிடக் கூடுதலான ஆற்றலைப் பெற்றிருப்பது இயல்பாகவே தவிர்க்கப்படுவதும்தான்.

சில தனிமங்கள் மற்றும் சேர்மங்களின் டிபை வெப்பநிலை அட்டவணை 4.1இல் தரப்பட்டுள்ளன.

அட்டவணை 4.1

திண்மங்களின் டிபை வெப்பநிலை

தனிமம்	θ_D	தனிமம்	θ_D	சேர்மம்	θ_D
Nn சோடியம்	150	Al அலுமினியம்	375	NaCl	280
K பொட்டாசியம்	100	Sn டின்	260	Kcl	230
Ag வெள்ளி	215	Pt பிளாட்டினம்	225	AgBr	150
Au தங்கம்	170	Pb ஈயம்	95	KBr	177
Zn துத்தநாகம்	250	Cu செம்பு	340	Agcl	183
Fe இரும்பு	360	Be பெர்லியம்	1200	CaF2	474
Co கோபால்ட்	385	Ca கால்சியம்	230		
Mg மக்னீசியம்	290	Cd காட்மியம்	172		
Sr ஸ்டிரான்டியம்	170				

டிபை கொள்கையின் குறைபாடுகள்

தாழ்ந்த வெப்பநிலையில் திண்மத்தின் ஆற்றல் (4.15)-இன்படி அகஆற்றல் சார்பிலா வெப்பநிலையின் நான்காவது மடிக்கு நேர் விகிதத்திலிருக்கிறது.

$E \alpha T^4$

இது வெப்பவியல் ஸ்டீபன் விதிக்கு ஒப்புமை கொண்டுள்ளது. இதனால் போட்டானும், போனானும் ஒரே மாதிரியான புள்ளியியல் கொள்கைக்கு உட்பட்டிருக்கின்றன என்று கூறலாம். எனினும் போனான், போட்டான் போல எல்லா வெப்பநிலைகளிலும் இல்லாது தாழ்ந்த வெப்பநிலைகளில் மட்டும் உட்படுவது முக்கியமான வேறுபாடாகும்.

டிபை கொள்கை தரும் மதிப்புகள் திண்மத்தின் வெப்ப ஏற்புத் திறனுக்கான சோதனை மதிப்புகளோடு ஒத்திருக்கின்றன என்றாலும் தாழ்ந்த வெப்பநிலைகளில் குறிப்பிடும்படியான நல்லிணக்கமின்மை காணப்படவே செய்கிறது. டிபையின் T^3 விதி $T << 0.1\ \theta_D$ என்ற குறுகிய நெடுக்கை வரையே இணக்கமாக இருக்கிறது. இதற்குப் பல காரணங்களைக் குறிப்பிட்டுச் சொல்லலாம்.

1. தொடர் ஊடாக மாதிரியமைப்பு உண்மையில் உயர் அலைநீளங்கொண்ட அதிர்வுகளுக்கே ஏற்புடையதாக இருக்கிறது. இதன்படி திண்மத்தில் தாழ்ந்த அதிர்வெண்கள் மட்டுமே பாதிப்பை ஏற்படுத்துவதில் வலிமையாக இருக்கின்றன என்று தீர்மானிக்கப்பட்டுள்ளது. இது முழுவதும் சரியானதன்று.

2. திண்மத்தில் அனுமதிக்கப்படும் அதிர்வினங்களின் எண்ணிக்கை 3N என்று கொள்ளப்பட்டுள்ளது. மீள்திறமிக்க தொடர் ஊடகமாகக் கற்பிக்கப்பட்டுள்ள திண்மத்திற்கு இது முரணானதாகும். ஏனெனில் இக்கற்பிதம் அனந்தம் மதிப்புடைய அதிர்வெண்களையும் அனுமதிக்கிறது. υ_m என்று உயர் வரம்பிட்டுக் கொண்டது முழுமையான அளவில் முரண்பாட்டைக் களையக் கூடியதாக இல்லை.

3. டிபை அதிர்வெண், குறுக்கலைகளுக்கும், நெட்டலைகளுக்கும் சம மதிப்புடையவைகளாகக் கொள்ளப்படுள்ளன. வெவ்வேறு இயல்தன்மை கொண்ட அலைகள் ஒத்த டிபை அதிர்வெண்ணைப் பெற்றிருக்க முடியாது. இதனால் பான் (Born) என்பர். இவ்விரு அலைகளும் தாழ்ந்த வரம்பு அலைநீளங்களைப் பெற்றிருக்கின்றன என்றும், எனவே அவற்றின் டிபை அதிர்வெண்களை,

(υ_m) குறுக்கலை $= \upsilon_{\text{குறுக்கலை}} / \lambda_{\text{சிறுமம}}$

(υ_m) நெட்டலை $= \upsilon_{\text{நெட்டலை}} / \lambda_{\text{சிறுமம்}}$

என வேறுபடுத்த வேண்டும் என்றும் தெரிவித்துள்ளார்.

4. டிபை கொள்கை சரியாக இருப்பின் θ_D-இன் மதிப்பு வெப்பநிலை சார்ந்து மாறாதிருக்க வேண்டும். ஆனால் சோதனை முடிவுகள் θ_D வெப்பநிலையைச் சார்ந்து மாறுபடுவதைப் புலப்படுத்திக் காட்டியிருக்கின்றன.

4.4 சீரிசைவிலாப் படிக அதிர்வியக்கமும் பாதிப்பும் (Anharmonic Crystal interactions)

அணிக்கோவையின் அதிர்வு பற்றிய கொள்கையில், அணு அலையியற்றியின் நிலை ஆற்றலை அணுவிடை இடப்பெயர்ச்சியுடன் தொடர்புடைய பல உறுப்புகளில் இருபடித்தான உறுப்புடன் மட்டுப்படுத்திக் கொண்டோம். இதற்குக் காரணம் உயர்படி

உறுப்புகளின் பங்களிப்பு புறக்கணிக்கக்கூடிய அளவில் சிறிய அளவினதாக இருப்பதே. இதனால் அதிர்வுகளைச் சீரிசை அதிர்வியக்கமாகக் கற்பித்துக் கொள்ள முடிந்தது. இதன்படி

(1) வெப்பம்சார்ந்த பெருக்கம் காண முடியாது

(2) வெப்பமாற்றீடற்ற மற்றும் சமவெப்பநிலை மாறிலிகள் சமமாக இருக்கும்.

(3) மீட்சி மாறிலிகள், அழுத்தம் மற்றும் வெப்பநிலையைச் சார்ந்திருப்பதில்லை.

(4) $T > \theta_D$ என்ற வெப்பநிலையில், வெப்ப ஏற்புத்திறன் மாறிலியாக அமைகிறது.

(5) இரு அணித்தள அதிர்வலைகள் இடைவினை புரிவதில்லை. ஆனால் நிகழ்வு நிலையில் இவை யாவும் முழுமையான உண்மையாக இருப்பதில்லை. இதற்குக் காரணம் அணுவிடை இடப்பெயர்ச்சியில் சீரிசையிலா உறுப்புகளை (இருபடித்தான உறுப்பிற்கு மேற்பட்டவை) புறக்கணித்ததாகும்.

குருனேசன் மாறிலி (Gruneisen Constant)

திண்மத்தின் வெப்ப ஏற்புத்திறனுக்கான கொள்கையில் Cv மட்டும் மதிப்பிடப்பட்டுள்ளது. இதில், வெப்பநிலை அதிகரித்தாலும் அணுவிடைத் தொலைவு மாறாதிருக்கிறது என்ற ஊகம் ஏற்றுக் கொள்ளப்பட்டுள்ளது. இதற்கான திருத்தம் அக்கொள்கைகளில் மேற்கொள்ளப்படவேண்டும். இது தொன்மைக் கொள்கையான டூலாங்-பெட்டிட் விதிக்கும்கூடப் பொருந்தும்.

வெப்ப இயக்கவியல் கொள்கை மூலம்

$$C_p - C_v = -T\ (V/\partial T)^2{}_p / (\partial V/\partial P)_T$$

என அறிவோம். இதில் V என்பது மோலார் பருமனாகும். மேலும் வெப்பஞ்சார்ந்த பருமப் பெருக்க எண்ணை (Coefficient of Volume expansion)

$$\alpha_v = 1 \leq V\ (\partial V/\partial T)_p$$

என்றும், அதன் இறுகு திறனை (Compessibility)

$\beta = - 1/V (\partial v \leq \partial P)_T$

என்றும் அறிவோம். பருமப்பெருக்க எண், நீட்சிப் பெருக்க எண்ணைப்போல 3 மடங்கு $[\alpha_v = 3\alpha_e]$ என்பதால்

$C_p - C_v = 9TV\ \alpha^2_l/\beta$

$\gamma = 3\alpha_l V / C_v\beta$ என்போம். இது குருனேசன் மாறிலி எனப்படுகிறது. இம் மாறிலியின் அடிப்படையில்

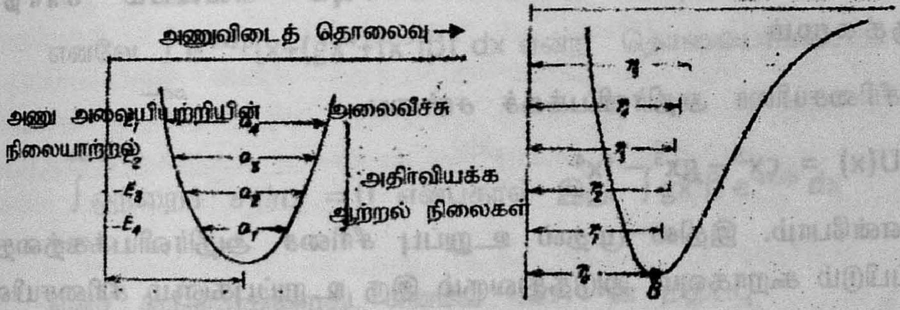
$$Cp / Cv = 1 + 3\gamma\alpha_l T \qquad (4.18)$$

அணு அலையியற்றி மாதிரியமைப்பின் அடிப்படையில் குருனேசன், நீட்சிப்பெருக்க எண், வெப்பஏற்புத்திறன் மற்றும் இறுகுதிறன் இவற்றைப் பின்னியவாறு ஒரு தொடர்பை நிறுவினார். அதுவே குருனேசன் மாறிலி எனப்பட்டது. இதன் மதிப்பு வெப்பநிலையைச் சாராதிருக்கிறது. இது நீட்சிப் பெருக்கமும், மாறாப்பருமனில் வெப்ப ஏற்புத் திறனும் நேர்விகிதத் தொடர்பில் இருக்கின்றன என்றும், அவையிரண்டும் ஒத்த வெப்பநிலைச் சார்புடையனவாக இருக்கின்றன என்றும் தெரிவிக்கின்றது. பெரும்பாலான பொருட்கள் குருனேசன் மாறிலியின் மதிப்பு 1-க்கும் 2-க்கும் இடைப்பட்ட மதிப்புகளைக் கொண்டிருக்கின்றது.

4.5 வெப்பம்சார்ந்த பெருக்கம் (Thermal Expansion)

ஏறக்குறைய எல்லாத் திண்மப் பொருட்களும், வெப்பத்தினால் பெருக்கமடைகின்றன. வெப்பத்தினால் பெருக்கமடையும்போது திண்மத்திலுள்ள சராசரி அணுவிடைத் தொலைவு அதிகரிக்கிறது. வெப்பநிலை அதிகரிக்க அதிர்வியக்கத்தில் அலை வீச்சு அதிகரிக்கிறது. அணித்தளத்தில் அதிர்வுகள் துல்லியமாக சீரிசையாக இருப்பின், வெப்பஞ்சார்ந்த பெருக்கத்தை நாம் விளக்க முடியாது.

அணித்தள அதிர்வியக்கம் சீரிசையாக இருப்பின், அணு அலையியற்றியின் நிலையாற்றல், அதன் சமநிலையிலிருந்து பெறும் இடப்பெயர்ச்சிக்கு ஏற்பப் பரவளைய வடிவில் மாற்றம் பெறும்.



படம். 4.9. சீரிசை மற்றும் சீரிசையிலா அதிர்வியக்கம்

வெப்பநிலை அதிகரிக்க அதிர்வியக்கத்தின் ஆற்றல் நிலையும் அதிகரிக்கிறது. ஆனால் அதன் சமநிலை அமைவிடம் மாற்றம் பெறாது நிலையாக மாறாதிருக்கிறது. இது அணுவிடைத் தொலைவு மாற்றமின்றி மாறிலிபோல இருப்பதால், வெப்பம்சார்ந்த விரிவாக்கத்தை விவரிக்க முடியாது.

உண்மையில் அணு அலையியற்றியின் இந்த நிலையாற்றல் - இடப்பெயர்வு வரைபடம் படம்.4.9(ஆ)ல் காட்டப்பட்டது போல இருக்கும். வளைகோடு சமநிலை அமைவிடத்தைப் பொறுத்து சற்றேறக்குறைய ஒரு பரவளைய வடிவத்தைக் கொண்டிருந்தாலும், அணுவிடைத் தொலைவு அதிகரிக்க, பரவளையக் கோட்டிலிருந்து பெரிதும் விலகிச் செல்கிறது. அதனால் நிலையாற்றலின் வரைகோடு, சீர்மையற்ற புயங்களினால், சீர்மையற்று விளங்குகிறது. வெப்பநிலை அதிகரிக்க, அணுஅலையியற்றியின் சமநிலை அமைவிடம் மாறாதிருப்பதில்லை: அதனால் வெப்பநிலை அதிகரிக்க அணுவிடைத் தொலைவும் அதிகரிக்கிறது எனலாம். அதாவது வெவ்வேறு அணு அலையியற்றிகளின் சராசரி ஒய்வுநிலை வெப்பநிலை சார்ந்ததாக இருக்கின்றது. உயர் வெப்ப நிலைகளில் சராசரி அணுவிடைத் தொலைவு, சார்பிலா சுழி வெப்பநிலையில் உள்ள மதிப்பைவிடக் கூடுதலாக இருக்கிறது. இதன்படி திண்மங்களின் வெப்பம்சார்ந்த பெருக்கம் என்பது படிக அதிர்வுகளின் சீரிசையிலாத் தன்மையால் உண்டாகிறது என்று முடிவு செய்யலாம்.

சீரிசைவிலா அதிர்வியக்கச் சார்பும் வெப்பம் சார்ந்த பெருக்கமும்

சீரிசையிலா அதிர்வியக்கச் சார்பை

$$U(x) = cx^2 - gx^3 - fx^4$$

என்போம். இதில் முதல் உறுப்பு சீரிசை அதிர்வியக்கத்தைக் குறிப்பிடும் கூறாகவும், அடுத்துவரும் இரு உறுப்புகளும் சீரிசையிலா அதிர்வியக்கத்தைக் குறிப்பிடும் கூறாகவும் உள்ளன. c, g, f போன்ற குணகங்கள் எல்லாம் நேரெண் மதிப்புடையன. அலையியற்றி அணுக்களுக்கிடையேயான விலக்குவிசையின் சீர்மையற்ற தன்மை x^3 கூறிலும், உயர் அலைவீச்சுடன் கூடிய அதிர்வுகளின் தடையூட்டம் x^4 கூறிலும், அடங்கியுள்ளது. அலையியற்றி அணுவின் சராசரி x-இன் மதிப்பை, போல்ட்ஸ்மான் பங்கீட்டுத்தனச் சார்பைக் கொண்டு கணக்கிட்டறியலாம்.

$$\langle X \rangle = \frac{\int_{-\infty}^{\infty} x\, e^{-\beta U(x)}\, dx}{\int_{-\infty}^{\infty} x\, e^{-\beta U(x)}\, dx}$$

இதில் $\beta = 1/k_B T$. $k_B T$ உடன் ஒப்பிட சீரிசையிலா அதிர்வியக்கக்கூறு நுண்ணளவினதாக இருப்பதால், தோராயமாக,

$$e^{-(cx2 - gx3 - fx4)\beta} = e^{-Cx2\beta} \cdot e^{(gx3 + fx4)\beta}$$

$$= e^{-Cx2\beta}\, [1 + (gx^3 + fx^4)\beta]$$

எனவே $\int_{-\infty}^{\infty} e^{-ex2\beta}[x+(gx^4+fx^5)\beta]\, dx$ என்ற தொகையாக்கியில்

$\int_{-\infty}^{\infty}$ ஒற்றைச் சார்பு $= 0$ என்பதால் இது $\int_{-\infty}^{\infty} gx^4\beta\, e^{-ex2\beta}\, dx$

எனச் சுருங்குகின்றது. எனவே <x> - ன் மதிப்பு

$$<x> = \int_{-\infty}^{\infty} gx^4\beta\, e^{-cx2\beta}\, dx \Big/ \int_{-\infty}^{\infty} e^{-cx2\beta}\, dx$$

படித்தரத் தொகையாக்கத்தின் முலம்

$$<x> = g\beta\ \frac{3\pi^{1/2}}{4}\ \frac{1}{a^{5/2}}\ / (\pi /a)^{1/2}$$

U(x) -இன் இந்த மதிப்புடன் <x> இன் மதிப்பை, தொகையாக்கி, கணக்கிட்டால்,

$$x = [3g / k_B T] / [4.c^2/(k_B T)^2] = 3g\, k_B T / 4c^2$$

வெப்பம்சார்ந்த பெருக்க எண்

$$\alpha = d<x> /dT = 3gk_B / 4c^2$$

α, வெப்பநிலையைச் சாராதிருக்கிறது என்று இது தெரிவிக்கிறது. இதில் ஆற்றலின் குவாண்டமாக்கம் (quantization) கருத்திற்கொள்ளப்படாமல் முடிவு பெறப்பட்டுள்ளது. உயர் வெப்பநிலையில் திண்மம், தொன்மைக் கொள்கைக்கு உட்பட்டிருப்பதைப் போலவே காணப்படுகிறது.

தாழ்ந்த வெப்பநிலையில்,

$$<x> = 3g/4c^2 <E>$$

ஏனெனில் $k_B T$ என்பது, அணு அலையியற்றியின் சீரிசைத் தோராயத்தில், தொன்மைக் கொள்கையின்படி சராசரி ஆற்றலை <E> க் குறிக்கிறது. பிளாங் தொடர்பை உட்புகுத்த

$$<x> = [3/g/4c^2] / [h\upsilon/ (e^{h\upsilon/k_B T} -1)]$$

வெப்பநிலை $T \to 0$ எனில்,

$\alpha = d<x> / dT = 0$ எனவாகும்.

4.6. வெப்பம்கடத்து திறன் (Thermal Conductivity)

வெவ்வேறு திண்மங்கள் வெவ்வேறு அளவில் வெப்பம்கடத்தும் தன்மையைப் பெற்றிருக்கின்றன. இதை வெப்பம்கடத்தும் திறனால் அளவிடுகிறார்கள். K என்பது ஒரு திண்மத்தின் வெப்பம்கடத்துதிறன் எனில், K-இன் மதிப்பு, அதன் வழியாகச் சீராக வெப்பப்பாய்வு நிகழும்போது, ஓரலகு குறுக்குப் பரப்பின் வழியாக ஒரு வினாடி நேரத்தில், ஓரலகு வெப்பநிலைச் சரிவுடன் கடக்கும் வெப்பத்தின் அளவாகும். இதனை

$$\theta = -K\, dT/dx$$

என்று குறிப்பிடுவர். x அதிகரிக்க வெப்பநிலை குறைவதால், இத்தொடர்பில் எதிர் குறி வந்துள்ளது. வெப்பத்தடை அல்லது வெப்பக்காப்பான்களாகச் (insulator) செயல்படும் திண்மங்களுக்கு வெப்பங்கடத்தும் திறன் குறைவாகவும், உலோகங்களின் உயர்ந்தும் காணப்படுகிறது.

திண்மப் பொருளில் வெப்பமானது பல்வேறு தனிச்சிறப்பான வழிமுறைகளினால் கடத்திச் செல்லப்படும் வாய்ப்பைப் பெற்றுள்ளது. எடுத்துக்காட்டாக உலோகங்களில், அதன் வெப்பக்கடத்தலுக்குக் கடத்து எலக்ட்ரான்களின் இயக்கமும், அணித்தள அதிர்வுகளும் (அல்லது போனான்களும்) பங்களிப்புச் செய்கின்றன. உலோகத்தன்மை குறைந்த பிஸ்மத் போன்ற அலோகங்களிலும், பெருமளவு வேற்றுப்பொருள் சேர்ந்துள்ள கலப்பு உலோகங்களிலும் (Alloys) அணித்தள அதிர்வு பெரும் பங்கு வகிக்கிறது. வெப்பம்கடத்தாப் பொருட்களில் அணித்தள அதிர்வுகளால் மட்டுமே வெப்பம் கடத்தப்படுகிறது. பொதுவாக அணித்தள அதிர்வுகளின் பங்கு மிகவும் சொற்பமாக இருப்பதால், இதனால் கடத்தும் திறனைப் பெற்ற திண்மங்களின் வெப்பம் கடத்தும் திறனைப் பெற்ற திண்மங்களின் வெப்பம்கடத்தும் திறன் குறைவாக இருக்கின்றன.

வெப்ப ஆற்றல் முக்கியமாக அணித்தளத்தில் அமைந்துள்ள அணுக்களின் அதிர்வியக்கத்தில் உறைந்துள்ளது. ஒன்று மற்றொன்றுடன் மோதும்போது, சிறிதளவு ஆற்றல் அவைகளுக்கிடையே பரிமாற்றம் செய்யப்படுகிறது. அணித்தளத்தின் அதிர்வை நாம் போனான் என்று கற்பித்துள்ளோம். போனான் ஒலியின் திசை வேகத்தில் இயங்கிச் செல்கிறது. அதனால் வெப்பக்கடத்தல், இதே வேகத்தில் நிகழும் என ஊகிக்கலாம். $K_{\text{போனான்}}$ என்பது போனான் காரணமாக விளையும் வெப்பம்கடத்துதிறன் என்றும், $K_{\text{எலக்ட்ரான்}}$ என்பது கடத்து எலக்ட்ரான் காரணமாக விளையும் வெப்பம்கடத்து திறன் என்றும் கொண்டால், பொருளின் மொத்த வெப்பம்கடத்துதிறன் இவற்றின் தொகுபயனாகும்.

$$K = K_{\text{போனான்}} + K_{\text{எலக்ட்ரான்}} \quad (4.19)$$

ஒன்றோடொன்று மோதிக் கொள்வதினாலும், பொருளில் இருக்கும் வேற்றுப் பொருள், மற்றும் குறைபாடுகளினால் ஏற்படும் மோதல்களினாலும் விளையும் சிதறலால் அவற்றால் கடத்தப்படும் வெப்பம் தடைப்படுகிறது.

உலோகங்களில் கட்டற்ற எலக்ட்ரான்கள் திரண்டு ஒரு வளிமம் போல இருக்கிறது. வெப்ப இயக்கக் கொள்கையின் அடிப்படையில் எலக்ட்ரான்களின் வெப்பங்கடத்து திறனுக்கான ஒரு தொடர்பைப் பெறமுடியும். இது அடுத்துவரும் உலோகங்களின் கட்டற்ற எலக்ட்ரான் கொள்கை என்ற அத்தியாயத்தில் விவரிக்கப்பட்டுள்ளது.

அணித்தள அதிர்வுகளால் வெப்பம்கடத்துதிறன்

வெப்ப ஏற்புத்திறனுக்கான கொள்கையின் அதே கருதுகோள்களின் அடிப்படையில் 1914-இல் டிபை வெப்பக்காப்பான்களின் வெப்பம்கடத்து திறனுக்கான ஒரு கொள்கையை நிறுவினார்.

படிகத்தில் அணுக்களின் அதிர்வியக்கம் மிகவும் சிக்கலானது என்றாலும் எளிமைக்காக அவை பொது அதிர்வினங்களை மட்டுமே தோற்றுவிப்பதாகக் கொள்ளலாம். இதன்படி அணு அலையியற்றிகள் ஒவ்வொன்றும் தனித்து இயங்குகின்றன, அனுமதிக்கப்படுகின்றன ஆற்றல் மதிப்புகள் குவாண்டம் அளவில் $h\upsilon$-ன் மடங்காக இருக்கின்றன. குவாண்டம் ஆற்றலுடைய மீட்சி அலையை, போனான் என்ற துகளாகக் கருதுவார்கள். ஈதர் ஊடகத்தில் மின்காந்த அலையைக் குறிக்கும் போட்டான் இயங்குவதுபோல, மீட்சியியல் ஊடகத்தில் போனான்கள் இயங்குகின்றன எனலாம். இந்த மீட்சி அலைகளின் அதிர்வெண் நெடுக்கம் ஏறத்தாழ 10^4 முதல் 10^{13} ஹெர்ட்ஸ் வரை இருக்கிறது.

போனான் வரையறைப்படி, படிக அணித்தளத்தின் ஒரு குறிப்பிட்ட வகை அதிர்வுகளின் ஆற்றலை $E_m = mh\upsilon$ என்று கூறலாம். இதில் m என்பது அந்த வகை அதிர்வுகளைக் குறிப்பிடும் போனான்களின் எண்ணிக்கையாகும். வெவ்வேறு அதிர்வினங்கள் வெவ்வேறு எண்ணிக்கையுடைய போனான்களால் குறிப்பிடப்படும். இதனால் அணித்தள அதிர்வுகளை, போனான் வளிமமாகக் (phonon gas) கற்பனை செய்து கொள்ளலாம். வெவ்வேறு அதிர்வினைச் சேர்ந்த போனான்கள் ஒன்றோடொன்று மோதி இடைவினை புரிந்து கொள்வதால், வெப்பம்சார்ந்த தொடர் இடப்பெயர்வுப் பண்புகளை (transport properties) அதன் அடிப்படையில் விளக்க முடிகிறது.

திண்மங்கள் வெப்பம்சார்ந்த பெருக்கத்தைப் பெறுவதால் அணுவிடைத் தொலைவு மாற்றம் பெறுவதுடன், அணு அலையியற்றியின் அதிர்வியக்கங்களில் ஒரு சீரிசையிலாத் தன்மையும் தூண்டப்படுகிறது. இதனால் போனான்களின் மோதலின்போது போனானின் உந்தமும் அதன் இயக்கத் திசையும், வளிம மூலக்கூறுகளைப் போலத் தொடர்ந்து மாறிக் கொண்டேயிருக்கிறது. இதன் மூலம் ஆற்றல் பரவலாக்கம் நடைபெறுகிறது. எனவே சீரிசையிலாத் தன்மை, திண்மத்தின் வெப்பம்கடத்தும் திறனைத் தீர்மானிக்கக் கூடியதாக இருக்கின்றது எனலாம்.

அணித்தள அதிர்வுகளினால் ஏற்படும் வெப்பங்கடத்தும் திறனை அறிய நாம் முதலில் ஒற்றை அணு வளிமத்தில் வெப்பக்கடத்தலை ஆராய்வோம்.

தொன்மைக் கொள்கைப்படி ஓர் திண்மைப் பொருளின் வெப்பஏற்புத்திறன் C_v பின்வருமாறு அதன் வெப்பம் கடத்துதிறனுடன் K சார்புடையது.

$$K = 1/3\ C_v \langle v \rangle . \lambda \qquad (4.20)$$

இதில் λ என்பது துகள்களின் சராசரி 'மோதலிடைத் தொலைவு'.

<v> என்பது வெப்பம்கடத்து துகள்களின் சராசரி வேகமாகும்.

சமன்பாடு (4.20)இ போனான் வளிமத்திற்கும் பொருந்தும் என டிபை கருதினார். அதில் <v> என்பது போனான்களின் சராசரிவேகம் என்றும் அது படிகத்தில் ஒலி கடந்து செல்லும் சராசரிவேகம் என்றும் மாற்றம் செய்யப்பட்டுள்ளது. ஒலியின்வேகம், வெப்பஏற்புத்திறன் முதலியவை சோதனை மூலம் அறியக்கூடியதால் அணித்தள அதிர்வாலான வெப்பக்கடத்துதிறனை அறிவது திண்மத்தில் போனான்களின் சராசரி மோதலிடைத் தொலைவை மதிப்பிடுவதோடு இணைந்திருக்கிறது எனலாம்.

போட்டான் - போட்டான் சிதறல்

$K_{போனான்}$-இன் மதிப்பு திண்மத்தில் போனானின் சராசரி மோதலிடைத் தொலைவு λ -ஆல் தீர்மானிக்கப்படுகிறது. λ-ன் மதிப்போ, ஊடகத்தில் நிகழும் சிதறல் முறைகளினால் முடிவு செய்யப்படுகிறது. சிதறல் முறைகளில் முக்கியமாக மூன்று வகைகள் உள்ளன. அவை

1. போனான் - போனான் இடைவினை
2. படிகக் குறைபாடுகளினாலான சிதறல்
3. ஊடகத்தின் வரப்பினாலான சிதறல்

போனான் - போனான் இடைவினை

இது உயர் வெப்பநிலையில் முக்கியமானதாக விளங்குகிறது. ஏனெனில் உயர்வெப்பநிலைகளில் இடப்பெயர்ச்சி அதிகமாக இருப்பதால் மோதல் நிகழ்வதற்கான வாய்ப்பும் அதிகமாக இருக்கும் எனலாம். இந்த வெப்பநிலை நெடுக்கையில், போனானின் சராசரி மோதலிடைத் தொலைவு சார்பிலா வெப்பநிலைக்கு எதிர்விகிதத்தில் மாற்றம் பெறுகின்றது. ஏனெனில் வெப்பநிலை அதிகரிக்க, அதிக எண்ணிக்கையிலான போனான்கள் மோதலில் ஈடுபடுகின்றன.

சீரிசை அதிர்வலைகள் வெப்பத்தடைக்கு ஆதரவாக இருப்பதில்லை. தாழ்ந்த வெப்பநிலையில் படிகத்தில் இருக்கும் போனானின் நிலை இது போன்றதே. உயர் வெப்பநிலையில் சீரிசையிலா அதிர்வலைகள் குறிப்பிடும்படியாக வெளிப்பட்டு, அதனால் போனான் - போனான் இடைவினை வெப்பத்தடைக்குப் பங்களிப்புச் செய்கிறது. இதுபோன்ற வழிமுறையில்

1. ஆற்றல் மாறாக் கோட்பாடு பின்பற்றப்படுகிறது. அதாவது இரு போனான்கள் மோதி, மூன்றாவதாக ஒரு போனானை விளைவிக்கும்போது அவற்றின் ஆற்றல் வினைக்கு முன்பும், பின்பும் சமமாக இருக்கின்றன.

$$h\upsilon_1 + h\upsilon_2 = h\upsilon_3 \qquad (4.21)$$

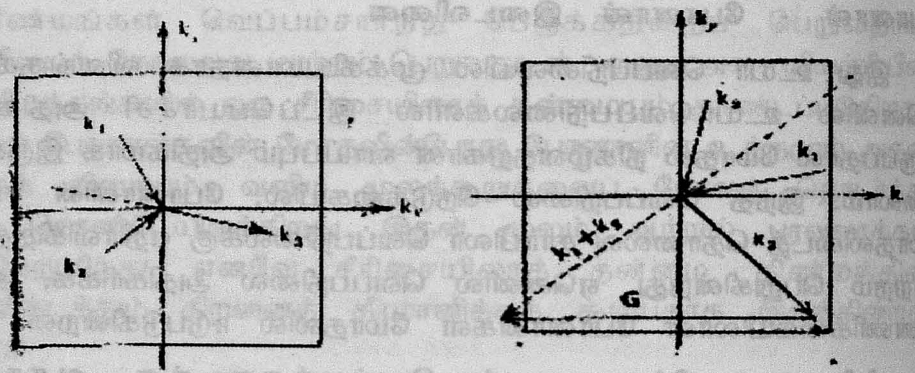
2. உந்தம் மாறாக் கோட்பாடு பின்பற்றப்படுகிறது.

$$P_1 + P_2 = P_3$$
$$k/\lambda_1 + k/\lambda_2 = k/\lambda_3 \qquad (4.22)$$
$$k_1 + k_2 = k_3$$

இந்த வழிமுறையை இயல்பு முறை (Normal Process) என்பர். (படம் 4.10 அ).

இது வெப்பம்கடத்தலுக்கு எவ்விதமான பங்களிப்பும் செய்வதில்லை. எனினும். வெப்பச் சமநிலையை நிறுவுவதில், இது துணை புரிகிறது.

k_1, k_2 இரண்டும் பிரிலோயின் மண்டலத்தில் அடங்கியிருந்தாலும், k_3 அப்படி இருக்கவேண்டும் என்ற கட்டாயமில்லை. அப்படியிருந்தால் மோதலுக்கு முன்பும் பின்பும் அமைப்பின் உந்தம் சமமாக இருக்கும். k_3 பிரிலோயின் மண்டலத்திற்கு வெளியே அமைந்திருந்தால், இரு போனான்களின் மோதலின் இயற்பியல் தேர்வு விதியினால் (selection rule) தீர்மானிக்கப்படுகிறது.



(அ) இயல்பு முறை (N-Process) (ஆ) உம்கிளாப் வழிமுறை
படம் 4.10 இரு பரிமாண பிரிலோயின் மண்டலம் (U-Process)

$$\upsilon_1 + \upsilon_2 = \upsilon_3$$

$$k_1 + k_2 = k_3 + G \qquad (4.23)$$

இதில் G என்பது அதே வகையில் எதிரீடான அணித்தள வெக்டாராகும். (reciprocal lattice). அதாவது படிகத்தில் நிகழும் போனான் இடைவினைகளில், அலை வெக்டாரில் ஏற்படும் மொத்த மாற்றம் சுழியாக இருக்கவேண்டும் என்ற அவசியமில்லை. மாறாக அது அதே வகையில் எதிரீடான அணித்தள வெக்டாராக இருக்கலாம். அலைவு முறைப்படி (periodic lattice) அமைந்திருக்கும் அணித்தளங்களில் இது எப்போதும் நிகழக்கூடியதே, முழுமையான தொடர் ஊடகத்தில் G எப்போதும் சுழியாகும்.

$G \neq 0$ என்ற நிலையில் நிகழும் மோதல்கள் உம்கிளாப் வழிமுறை எனப்படுகிறது. மோதல் விளைவினால் ஏற்படும் போனானின் அலை வெக்டார் k_3, $2\pi/a > k_3 > \pi/a$ என்றிருந்தால், அதன் அலைநீளம், அணுவிடைத் தொலைவின் இருமடங்கிற்கும் குறைவாக இருக்கும். அப்போது போனானின் திசைவேகம் நேரெதிராகத் திருப்பப்படுகிறது. அதனால் விளையும் போனான் (i) நேரெதிர்திசையில் இயங்கிச் செல்கிறது (ii) அலை வெக்டார் $k'_3 = k_3 - 2\pi/a$ எனப் பெற்றிருக்கிறது. (iii) அதே மொத்த ஆற்றலைப் பெற்றிருக்கிறது.

உம்கிளாப் வழிமுறையில் நேரெண் மதிப்பில் அலை வெக்டாருடைய இரு போனான்கள், மோதலுக்குப்பின் எதிரெண் மதிப்பில் அலை வெக்டாருடைய ஒரு போனான் விளைவிக்கப்படுகிறது.

(படம் 4.10ஆ) உயர் வெப்பநிலையில் $T>\theta_D$, எல்லா போனான்களும் கிளர்ச்சியுறுகின்றன. ஏனெனில் அவ்வெப்பநிலையில் வெப்பஆற்றல் k_BT, பெரும குவாண்ட ஆற்றலை விட $h\upsilon_{பெருமம்}$ அதிகமாயிருக்கிறது. அப்போது பெரும்பாலான போனான்கள் உம்கிளாப் வழிமுறையில் ஈடுபடுகின்றன. உம்கிளாப் மற்றும் இயல்பு வழிமுறை என்ற வேறுபாடின்றி, நாம் வெப்பத்தடையை மதிப்பிடலாம் (வெப்பத்தடையின் தலைகீழ் மதிப்பு வெப்பம்கடத்து திறனாகும்).

ஒரு குறிப்பிட்ட ஆற்றலுடைய போனானின் எண்ணிக்கைk_BT / h ஆகும். அதாவது அதன் செறிவு சார்பிலா வெப்பநிலைக்கு நேர் விகிதத்திலிருக்கின்றது. ஒருவகைப் போனானின் சராசரி மோதலிடைத் தொலைவு λ என்பது, அது இடைவினை புரியும் பிற எல்லா வகையான போனான்களின் செறிவிற்கு எதிர்விகிதத்திலிருக்கிறது. எனவே,

$$\left.\begin{array}{l}\lambda \propto T^{-1}\\ k \propto T^{-1}\end{array}\right\} T >> \theta_D$$

இது ஏற்கனவே அறியப்பட்ட உண்மைகளுக்கு ஏற்ப இருக்கிறது.

தாழ்ந்த வெப்பநிலைகளில் U-வழிமுறை ஒரு குறிப்பிட்ட சிறும மதிப்பைவிடக் கூடுதலான ஆற்றலைப் போனான் பெற்றிருக்கும் போது மட்டுமே நிகழும் என்பதைச் சமன்பாடுகள் (4.23) தெரிவிக்கின்றன. உம்கிளாப் வழிமுறை நிகழ்வதற்கு மோதும் k_1, k_2 போட்டான்களின் ஆற்றல், ½ $k_B\theta_D$ என்ற நெடுக்கையில் இருக்கவேண்டும். ஏனெனில் மோதல் வாய்ப்புக்கு அவ்விரு போனான்களின் அலைவெக்டார் ½ G என்ற நெடுக்கையில் இருக்கவேண்டும். தாழ்ந்த வெப்பநிலையில் U-வழிமுறைக்கு உகந்த போனான்கள் (1/2 $k_B\theta_D$ ஆற்றலுடன் கூடிய) $e^{-\theta D/2T}$ என்ற போல்ட்ஸ்மான் சார்புக்கு ஏற்ப மாறுபடும். தாழ்ந்த வெப்பநிலையில் வெப்பநிலைக்கு ஏற்ப மாறுபடும். இதிலிருந்து, λ மற்றும் K-இன் மதிப்பை வருவிக்கலாம்.

$$\left.\begin{array}{l}\lambda \,\alpha\, e^{\theta D/2T}\\ K \,\alpha\, e^{\theta D/2T}\end{array}\right\} T << \theta_D$$

அதாவது வெப்பம்கடத்துதிறன், தாழ்ந்த வெப்பநிலையில், வெப்ப நிலைக்கு ஏற்ப e-இன் சார்பில் குறைகிறது.

வினாக்கள்

1. திண்மப் பொருளில் அதிர்வுறும் அணுவின் அதிர்வெண்ணை அறிவதற்கான தொடர்பைத் தருக.

2. டூலாங்-பெட்டிட் விதியைக் கூறி, அதன் இயலாமையைத் தெரிவிக்கவும்.

3. திண்மங்களின் வெப்ப ஏற்புத் திறனுக்கான ஐன்ஸ்டீன் கொள்கையை விவரித்து, அது எங்ஙனம் வெப்பநிலையைச் சார்ந்து மாறுபடுகிறது என்பதை விளக்கிக்கூறுக.

4. ஐன்ஸ்டீன் கொள்கையின் குறைபாடுகள் யாவை? இவை எங்ஙனம் டிபை கொள்கையில் கையாளப்படுகின்றன?

5. ஐன்ஸ்டீன் வெப்பநிலை என்றால் என்ன? சிறுகுறிப்பு வரைக.

6. தாழ்ந்த வெப்பநிலையில் கட்டற்ற எலக்ட்ரான்கள் வெப்ப ஏற்புத்திறனில் பங்கேற்பதில்லை. ஏன்?

7. வெப்ப ஏற்புத்திறனுக்கான டிபை கொள்கையை விவரிக்க.

8. உயர்வெப்பநிலையில் ஐன்ஸ்டீன் கொள்கையும், டிபை கொள்கையும் டூலாங் - பெட்டிட் விதியோடு ஒத்துப் போகின்றன என்பதை நிறுவுக.

9. தாழ்ந்த வெப்பநிலையில் பொருளின் வெப்ப ஏற்புத்திறன், வெப்பநிலையின் மும்மடிக்கு நேர்விகிதத்தில் இருக்கிறது என்பதைக் காட்டுக.

10. டிபை வெப்பநிலை என்னறால் என்ன? அதன் முக்கியத்துவம் யாது?

11. டிபை கொள்கையின் குறைபாடுகள் யாவை?

12. குருனேசன் மாறிலிக்கான தொடர்பை வெப்பவியக்கவியல் சமன்பாட்டைக் கொண்டு வருவிக்க. அதிலிருந்து அறியப்படும் உண்மை யாது?

13. திண்மங்களில் வெப்பஞ்சார்ந்த பெருக்கம், படிக அதிர்வுகளின் சீரிசையிலாத் தன்மையால் விளைகிறது என்று எப்படி விளக்குவீர்?

14. ஒரு திண்மத்தில் அணு இடப்பெயர்ச்சி xஐ சார்ந்த சீரிசையிலா நிலை அழுத்தச் சார்பை

$U(x) = ax^2 - gx^3 - fx^4$

என்று குறிப்பிடலாம். இதில் a, g, f யாவும் மாறிலிகளாகும். வெப்பநிலை சாரா வெப்பம்சார்ந்த பெருக்கத்தின் கூறு $\alpha = 3kg_B / 4a^2$ என்று நிறுவுக.

15. அணித்தள அதிர்வுகளாலான வெப்பங்கடத்துதிறன் பற்றி விளக்கிக் கூறுக.

16. இயல்பு, மற்றும் உம்கிளாப் வழிமுறைகள் என்றால் என்ன? வெக்டார் வரைபடம் மூலம் விளக்குக.

17. ஐன்ஸ்டீன் மாதிரிக்கும், டிபை மாதிரிக்கும் உள்ள வேறுபாடுகள் யாவை? இவை எங்ஙனம் கொள்கை விளக்கத்தில் மாற்றத்தை ஏற்படுத்துகின்றன?

18. டிபை மாதிரியில் ஒரு திண்மத்தின் சுழிநிலை ஆற்றல் (Zero Point energy) 9/8 $R\theta_D$ எனக் காட்டுக.

19. டிபை மாதிரியைப் பயன்படுத்தி, ஒற்றை அணுக்களால் நேரியலான அணிக்கோவையின் வெப்ப ஏற்புத்திறன் $T << \theta_D$ என்ற வெப்பநிலை நிபந்தனையில் T/θ_Dக்கு நேர்விகிதத்திலிருக்கும் எனக் காட்டுக.

20. போனான்கள் யாவை? போனான் - போனான் சிதறலில் ஆற்றல் மற்றும் உந்தம் மாறாக் கோட்பாடுகளை விளக்கு.

21. பிளாங் கொள்கை மூலம் அதிர்வெண்ணோடு தொடர்புபடுத்தப்பட்ட போனானின் ஆற்றலுக்கான சமன்பாட்டையும், டி-பிராக்ளி கொள்கைமூலம் அலை எண்ணோடு தொடர்புபடுத்தப்பட்ட போனானின் உந்தத்திற்கான சமன்பாட்டையும் கொண்டு 300K வெப்பநிலையில் சராசரி வெப்ப ஆற்றலுடன் கூடிய போனானின் நிறைச் சமனை (equivalent mass)-க் கண்டறிக. அதன் நிறைச் சமனை எலக்ட்ரானின் ஓய்வு நிலை நிறையோடு ஒப்பிடுக.

22. வெப்பநிலை சார்ந்த வெப்பங்கடத்துதிறன் குறித்து ஒரு குறிப்பு வரைக.

5. உலோகங்களின் கட்டற்ற எலக்ட்ரான் கொள்கை

1. உலோகங்களின் தனிச்சிறப்பியல்புகள் - எலக்ட்ரான் வளிமம் - ட்ருடு – லாரன்ஸ் கொள்கை – மின்கடத்துதிறன் - ஓம்விதி – வெப்பம்கடத்துதிறன் - வீட்மான் - பிரான்ஸ் தகவு.

2. தொல்லியக்க கட்டற்ற எலக்ட்ரான் கொள்கையின் முறிவு நிலை.

3. சோமர் பெல்டு குவாண்டம் கொள்கை – ஒற்றைப் பரிமாண மின்னழுத்தப் பெட்டி – நிலையடர்த்தி – முப்பரிமாண மின்னழுத்தப் பெட்டி.

4. பெர்மி – டிராக் புள்ளியியல் கொள்கை – பெர்மி ஆற்றல் - வெப்பநிலைக்கும் பெர்மி ஆற்றலுக்கும் உள்ள தொடர்பு – 5. கடத்து எலக்ட்ரான்களின் வெப்ப ஏற்புத்திறன் - 6. வெப்ப உமிழ்வு – 7. பௌலி பாராகாந்தம் - 8. ஷாட்கிவிளைவு – 9. ஒளிமின் விளைவு.

5. உலோகங்களின் கட்டற்ற எலக்ட்ரான் கொள்கை

(Free electron theory of metals)

5.1 உலோகங்களின் தனிச்சிறப்பியல்புகள்

உலோகங்கள் பிறவற்றிலிருந்து பல சிறப்பியல்புகளால் வேறுபட்டிருக்கின்றன. பொதுவாக எல்லா உலோகங்களும் உயரளவு மின்கடத்து திறனை (Electrical conductivity) 10^7 mho/m என்ற நெடுக்கையில் பெற்றிருக்கின்றன. உலோகங்களின் மின் கடத்து திறன் பற்றிய சோதனைகள் கீழ்க்காணும் உண்மைகளைத் தெரிவித்துள்ளன.

1. உலோகங்கள் உயரளவு மின்மற்றும் வெப்பங்கடத்து திறனைப் பெற்றிருக்கின்றன.

2. உலோக மின் கடத்திகள் ஓம் விதிக்கு உட்படுகின்றன. இதன்படி ஒரு சீரான நிலையில் உலோக மின்னோட்டச் செறிவு (current density) J, மின்புல வலிமைக்கு (E) நேர்விகிதத்திலிருக்கிறது.

   $J = \sigma.E$

   இதில் σ என்பது ஒரு மாறிலி. இதையே மின்கடத்துதிறன் என்பர். இது J ஐப் பொறுத்தோ அல்லது E ஐப் பொறுத்தோ மாறுபடுவதில்லை.

3. அறை வெப்பநிலையில் உலோகங்களின் மின்தடைத்திறன் (resistivity) 10^5 ஓம்/செமீ என்ற நெடுக்கையிலிருக்கிறது. படிக அணித்தள அதிர்வுகளோடு தொடர்புடைய ஒரு சிறப்பு வெப்பநிலையான டிபை வெப்பநிலைக்கு மேல் உலோகங்களின் மின்தடைத்திறன் ρ சார்பிலா வெப்பநிலைக்கு நேர்விகிதத்திலிருக்கிறது.

   $\rho \propto T$ (அறை வெப்பநிலையில்) இது. உலோகங்களின் மின் தடை, வெப்பநிலை உயரும்போது அதிகரிக்கிறது என்பதைத் தெரிவிக்கிறது.

மிகத்தாழ்ந்த வெப்பநிலையில் இந்த நேர்விகிதத்தொடர்பு பொருத்தமானதாக இல்லை. 20K வெப்பநிலைக்குத் தாழ்ந்த வெப்பநிலைகளில் உலோகங்களின் மின்தடைத்திறன் வெப்பநிலையின் 5வது மடிக்கு நேர்விகிதத்திலிருக்கிறது.

$\rho \propto T^5$ (தாழ்ந்த வெப்பநிலைகளில் சார்பிலாச் சுழி வெப்பநிலைக்கு அருகில் சில உலோகங்களில் மின்தடை திடீரென்று சரிந்து சுழியாகி விடுகிறது. அதாவது அதன் மின்கடத்துதிறன் அனந்தத்தை எட்டுகிறது. இவற்றை மீக்கடத்தி (superconductor) என்பர்.

4. பெரும்பாலான உலோகங்களின் மின்தடைத்திறன், அதன் மீது செயல்படும் அழுத்தத்திற்கு எதிர் விகிதத்திலிருக்கிறது.

$\rho \propto 1/P$

5. சிறிதளவு வேற்றுப்பொருள் கலந்துள்ள உலோகத்தின் மின்தடைத்திறன், $\rho=\rho_o+\rho(T)$

இதில் ρ_o என்பது வேற்றுப்பொருள் கலந்துள்ள உலோகத்திற்கு ஒரு மாறிலியாகும். இதன் மதிப்பு வேற்றுப்பொருளின் செறிவைப் பொறுத்துள்ளது. $\rho(T)$ என்பது தூய்மையான உலோகத்தின் வெப்பநிலை சார்ந்துள்ள மின்தடைத்திறன் கூறாகும். இவ்விதியை மாத்தீசன் விதி (Matthiessen's rule) என்பர்.

1. காந்தப்புலத்தில் உலோகங்களின் மின்தடை அதிகரிக்கிறது. இதனைக் காந்த – மின்தடை விளைவு (magneto resistance) என்பர்.

2. உலோகங்களின் வெப்பங்கடத்து திறனுக்கும், மின் கடத்து திறனுக்கும் அதிலுள்ள கட்டற்ற எலக்ட்ரான்களே காரணமாக இருப்பதால், இவ்விரு திறனுக்குமிடையே ஒரு நெருக்கமாக தொடர்பு இருத்தல் வேண்டும். டிபை வெப்பநிலைக்குமேல், வெப்பக்கடத்து திறனுக்கும், (K) மின்கடத்து திறனுக்குமுள்ள தகவு, வெப்பநிலைக்கு நேர் விகிதத்திலிருக்கிறது.

$$K/\sigma \propto T$$

அதாவது ஒரு குறிப்பிட்ட வெப்பநிலையில் K/σ இன் மதிப்பு எல்லா உலோகங்களுக்கும் சமமாக இருக்கிறது. அதாவது K/σT ஒரு மாறிலியாக அமைகிறது. இவ்விதியை வீட்மான்-பிரான்ஸ் (Weidemann-Franz) விதி என்பர்.

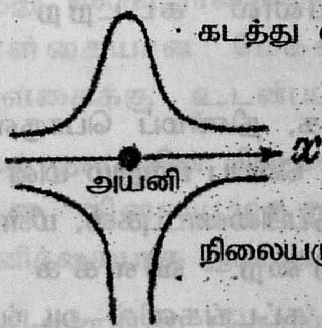
எலக்ட்ரான் வளிமம்

பெரும்பாலான உலோகங்கள் மிகையான வெப்பக்கடத்துதிறனும், மின்கடத்து திறனும் பெற்றிருப்பதற்குக் காரணம், அவைகளில் கட்டற்ற எலக்ட்ரான்கள் அதிகமாக இருப்பதுதான் என்பது தெளிவாக நிறுவப்பட்டுள்ளது. இதனை முதன்முதலாக 1900-இல் ட்ரூடு என்பவர் தெரிவித்தார். இது பிற்பாடு லாரன்ஸ் என்பவரால் உறுதி செய்யப்பட்டது. எனவே, கட்டற்ற எலக்ட்ரான்களைக் கடத்து எலக்ட்ரான்கள் என்பர். உலோகத்தின் புறப்பரப்பு நீங்கலாகப் பிற பகுதிகளில் இந்த எலக்ட்ரான்கள் வளிமத்திலுள்ள மூலக்கூறுகள் போலத் தன்னிச்சையாக இயங்கக்கூடியவைகளாக இருக்கிறது. இதற்குக் காரணம் பரப்பின் மீதுள்ள அக மின்னழுத்தமே (potential). இதனால் கட்டற்ற எலக்ட்ரான்கள் உலோகத்தைவிட்டுப் பொதுவாக வெளியேறமுடியாது. உலோகத்தின் உட்புறம் முழு நிறைவான (ideal) வளிம மூலக்கூறு போல இயங்கினாலும், புறப்பரப்போடு மோதி, எதிரொளிக்கப்படுவதைத் தவிர மற்றபடி தங்களுக்குள் மோதிக் கொள்வதில்லை. அதாவது கடத்து எலக்ட்ரான்கள் அயனிகளினாலும், பிற கடத்து எலக்ட்ரான்களினாலும் விலக்கமுறாமல் ஓரளவு நெடுந்தொலைவு (அணுவிடைத் தொலைவைப் போல் பல மடங்கு நேராக) இயங்கிச் செல்கின்றன. ஒரு தூய உலோகத்தில் தாழ்ந்த வெப்பநிலையில், எலக்ட்ரானின் சராசரி மோதலிடைத்தொலைவு 10^8-10^9செ.மீ. (அணுவிடைத் தொலைவு ஏறக்குறைய 1 செமீ) என்ற நெடுக்கையில் உள்ளது. எதிர்பார்ப்பிற்கு மாறாக இப்படி இருப்பது வியப்பளித்தது. அதாவது கடத்து எலக்ட்ரான்களுக்கு, உறை உலோகப்பொருள், எளிதில் ஊடுருவிச் செல்ல அனுமதிக்கும் பொருள் போல விளங்குகிறது. ஒன்றுக்கொன்று இடைவினை புரியாத துகள்களாலான வளிமம்போல கடத்து எலக்ட்ரான்கள் செயல்படுகின்றன. இதற்கு இரு வேறு காரணங்கள் சொல்லப்படுகின்றன. ஒரு குறிப்பிட்ட இடைவெளியுடன் ஒரே மாதிரியாகக் கட்டமைக்கப்பட்ட அணித்தளத்தில் உள்ள அயனிகள் கடத்து எலக்ட்ரானை விலக்குவதில்லை. ஏனெனில்

அவ்வூடகத்தில் எலக்ட்ரானின் பொருள் அலை (matter wave) எளிதாகப் பரவிச் செல்வதாக இருக்கிறது. கடத்து எலக்ட்ரான், பிற கடத்து எலக்ட்ரான்களினால் மிக மிக அரிதாகவே சிதறலுக்கு ஆளாகிறது. இப்பண்பு, பௌலியின் தவிர்க்கை விதியின் விளைவாகும்.

கடத்து எலக்ட்ரான்கள் அணித்தளத்தில் நிலை பெற்றுள்ள அயனிகளோடும். தங்களுக்குள் ஒன்றோடொன்றும் இடைவினை புரியலாம். இருப்பினும் கட்டுற்ற எலக்ட்ரான்களைவிடக் கட்டற்ற எலக்ட்ரான்கள் மீது செலுத்தப்படும் விசை அளவு மிகவும் குறைவே. எடுத்துக்காட்டாகச் செம்பு அணுவில் புறச் சுற்றுப் பாதையில் உள்ள 4s எலக்ட்ரான்கள் இணைவு எலக்ட்ரான்களாகும். தனித்த அணுவில் ஆற்றல் நிலைகள் ஓரளவு இடைவெளியுடன் இருப்பதால், போதிய ஆற்றல் இல்லாமையால் கிளர்ச்சி பெறுவதில்லை. திண்மத்தில் பல அணுக்கள் நெருக்கமாக அமைந்திருப்பதால், ஆற்றல் நிலைகள் மிக நெருக்கமாக அமைந்து வரிகளாக இருந்த ஆற்றல் நிலை, ஒரு தடிப்புள்ள பட்டையாகி (Energy Band) விடுகிறது. அதாவது அடுத்தடுத்துள்ள செம்பு அணுக்களின் எலக்ட்ரான்களின் அலைச்சார்பு (wave function) ஒன்றையொன்று குறுக்கிடுகின்றன என்பதால், இந்த எலக்ட்ரான்கள் உலோகத்தினுள் அணுவிட்டு அணு எளிதாகத் தாவிச் செல்லும் தன்மையுடையனவாக இருக்கின்றன.

மேலும் ஓர் எலக்ட்ரான் ஓர் அயனியின் அருகாமையில் செல்லும்போது, அதன் இயக்கவேகம் பெரிதும் அதிகரிக்கிறது. இதற்குக் காரணம் இடைத்தொலைவு குறையக் குறைய நிலையழுத்தமும் (Potential) குறைவதுதான். இதனால் எலக்ட்ரான், தன் இயக்கத்தின்போது, மிகவும் சிறிதளவு நேரமே அயனிகளுக்கருகாமையில் இருந்து இடைவினை புரிகிறது என்றும் பெரும்பாலான நேரங்களில் அயனிகளைவிட்டு அப்பால் கட்டற்ற எலக்ட்ரான்களாக விளங்குகிறது என்றும் கூறலாம்.



படம் 5.1 உலோகத்தினுள் நிலைஅழுத்தமும் கடத்து எலக்ட்ரானின் வேகமும்

எலக்ட்ரான்களுக்குள்ளான இடைவினையும் வலுவற்றதே. இதற்கு இரு காரணங்கள் சொல்லப்பட்டுள்ளன. இணையான தற்சுழற்சி (spin) கொண்ட கட்டற்ற எலக்ட்ரான்களின் காந்தத் திருப்புதிறன் ஒரே திசைப்படுத்தப்பட்டு இருப்பதால், அவை ஒன்றையொன்று விலக்கிக் கொள்கின்றன. எதிரிணையான இரு எலக்ட்ரான்கள் இணையலாம் என்றாலும், அமைப்பின் ஆற்றலைச் சிறுமமாக இருத்திவைக்க ஒன்றைவிட்டு ஒன்று விலகியே இருக்கின்றன. இரு எலக்ட்ரான்கள் நெருங்கும்போது, அமைப்பின் கூலும் ஆற்றல் (coulomb energy) பெரிதும் அதிகரிக்கிறது. இது தாழ்ந்த ஆற்றல் நிலையில் இருக்க வேண்டும் என்ற எலக்ட்ரானின் இயற்கை விருப்பத்திற்கு முரணானதாக இருக்கிறது.

இத்தகைய காரணங்களினால் உலோகத்திலுள்ள கட்டற்ற எலக்ட்ரான்கள் ஒரு வளிமம் போலச் செயல்படுகின்றன என்று கருதலாம். மூலக்கூறு வளிமத்திற்கும் எலக்ட்ரான் வளிமத்திற்கும் குறிப்பிடும்படியான இரு வேறுபாடுகள் உள்ளன.

1. எலக்ட்ரான்கள் மின்னூட்டம் பெற்றவை. மூலக்கூறுகள் மின்னூட்டம் அற்றவை.
2. ஓரலகு பருமனில் உள்ள எலக்ட்ரான்களின் எண்ணிக்கை. அதே பருமனிலுள்ள அணுக்களின் எண்ணிக்கையாகும் என்பதால் எலக்ட்ரானின் செறிவு (10^{29} /எலக்ட்ரான்/ மீ^{3}), மூலக்கூறின் செறிவைவிட (10^{25} /மூலக்கூறு/ மீ^{3}), 10^3 – 10^4 மடங்கு கூடுதலாய் இருக்கிறது.

5.2. தொல்லியக்க இயற்பியலில் கட்டற்ற எலக்ட்ரான் கொள்கை

கட்டற்ற எலக்ட்ரான் கொள்கை, திண்மப் பொருளின் பல்வேறு இயற்பியல் பண்புகளைக் குறிப்பாக, வெப்ப மற்றும் மின் கடத்துதிறன், திண்ம அணுக்களிடையேயான வேதிப்பிணைப்புகள், மீள்திறன், பெரோ காந்தத்தன்மை போன்றவற்றை விளக்க முடிகிறது. இக்கொள்கையின் வளர்ச்சி மூன்று கட்டங்களில் அடங்கியிருக்கிறது அவை

(1) தொல்லியக்கக் கட்டற்ற எலக்ட்ரான் கொள்கை
(2) குவாண்ட இயக்கக் கட்டற்ற எலக்ட்ரான் கொள்கை
(3) ஆற்றல் பட்டைக் கொள்கை

இக்கொள்கைகளைப் பற்றி இனி விரிவாகக் காண்போம்.

தொல்லியக்க கட்டற்ற எலக்ட்ரான் கொள்கை கீழ்க்காணும் கருதுகோள்களை அடிப்படையாகக் கொண்டுள்ளது.

1. திண்மப்பொருட்கள் அணுக்களாலானவை. அணுக்களில் அணுக்கருவும், அதனைச் சுற்றி வட்டப்பாதைகளில் இயங்கும் எலக்ட்ரான்களும் உள்ளன.

2. அணுக்கருவோடு தளர்வாகப் புறச்சுற்றுப்பாதையில் பிணைவுற்றிருக்கும் இணைவு எலக்ட்ரான்கள் மிக எளிதாக விடுபட்டு உலோகத்தில் தன்னிச்சையாக இயங்குகின்றன. இதனால் எல்லா அணுக்களையும் புறக்கணித்துவிட்டு, தன்னிச்சையாக இயங்கவல்ல எலக்ட்ரான்களை மட்டும் இக்கொள்கை கருத்திற்கொண்டுள்ளது.

3. புறமின்புலம் ஏதுமில்லாத நிலையில், கடத்து எலக்ட்ரான்கள் இலக்கின்றி இங்குமங்குமாக இயங்குகின்றன. அப்போது நேர்மின் அயனிகளோடும், எலக்ட்ரான் வளிமத்திலுள்ள எலக்ட்ரான்களோடும் மோதுகின்றன. இம் மோதல் மீட்சித் தன்மை (elastic) உடையதாகும். எனவே, மோதலின் போது ஆற்றல் இழப்பு இல்லை.

4. புறமின்புலம் ஒன்றை உலோகத்தின் மீது செயல்படுத்தும்போது, கடத்து எலக்ட்ரான்கள் முடுக்கப்படுகின்றன. இவை செயல்படும் மின்புலத்திற்கு எதிர்திசையில் எடுத்துச் செல்லப்படுகின்றன.

5. கடத்து எலக்ட்ரான்களின் வேகம், தொல்லியக்கப் புள்ளியியல் கொள்கையான மேக்ஸ்வெல் - போல்ட்ஸ்மான் பங்கீடு கொள்கைக்கு உடன்பட்டிருக்கும்

6. படிகத் தளத்தின் நிலைவிடங்களில் அமைந்துள்ள அயனிகளின் சீரான நிலையழுத்தத்தால், கடத்து எலக்ட்ரான்கள் தன்னிச்சையாக இயங்கக்கூடிய தன்மையைப் பெற்றிருக்கின்றன.

ட்ரூடு – லாரன்ஸ் கொள்கை

(Drude-Lorentrz theory of Electrical conductivity)

திண்மப்பொருளிலுள்ள அணுவில் தளர்வாக இணைந்துள்ள இணைவு எலக்ட்ரான்கள் அணுக்கருவிலிருந்து தங்களை விடுவித்துக் கொள்ள தேவைப்படும் ஆற்றல் ஏறத்தாழச் சுழி என்று கூறலாம். இதனால் அவ்வெலக்ட்ரான்கள் இணைவதும் விடுபடுவதுமாக இருக்கின்றன. எனினும் சராசரியாக அதிக எண்ணிக்கையில் எலக்ட்ரான்கள் தன்னிச்சையாக இயங்குகின்றன.

இக்கொள்கையில் கடத்து எலக்ட்ரான்களுக்கும், அயனிகளுக்குமிடையேயான விசைகள் புறக்கணிக்கப்பட்டுள்ளன நிலையழுத்தப் புலம், திண்மத்திலுள்ள அயனிகளால் பருமவெளி முழுவதிலும் சீராக இருக்குமாறு தோற்றுவிக்கப்படுகின்றது. அதனால் கட்டற்ற எலக்ட்ரான்கள் திண்மத்திலுள்ள தன் ஆற்றலில் எவ்வித மாற்றமுமின்றித் தொடர்ந்து தன்னிச்சையாக இயங்குகின்றன. அதாவது அதன் நிலையாற்றல் புறக்கணிக்கப்பட்டு, அதன்இயக்க ஆற்றலே மொத்த ஆற்றலாகக் கொள்ளப்பட்டுள்ளது.

அறை வெப்பநிலையில் கடத்து எலக்ட்ரான்கள் யாவும் திண்ம வெளியைவிட்டு வெளியேறிச் செல்வதில்லை. ஏனெனில் திண்மவெளியில் இருக்கும் எலக்ட்ரானின் நிலையாற்றல், அது திண்மவெளியைவிட்டு வெளியில் இருக்கும்போது பெற்றிருக்கும் நிலையாற்றலைவிடக் குறைவாக இருக்கின்றது.

ஒரு புறமின் புலத்தைச் செயல்படுத்தும் போது, கடத்து எலக்ட்ரான்கள் புலத்திற்கு எதிராக முடுக்கப்படுகின்றன. ஆனால் இந்த முடுக்கம் தொடர்ந்து இருப்பதில்லை. (நிலைவிடங்கள் அமைந்துள்ள) கனமான அயனிகளுடனான மோதலினால், முடுக்கம் முடிவின்றித் தொடராது மட்டுப்படுத்தப்படுகிறது. கடத்து எலக்ட்ரானின்

கூலும் விலக்கமும் புறக்கணிக்கப்பட்டுள்ளது. ஏனெனில், புலத்திசையில் ஓர் எலக்ட்ரான் மற்றோர் எலக்ட்ரானுக்கு உந்தப்பரிமாற்றம் செய்வதில்லை. புறமின் புலத்தைச் செயல்படுத்துவதினால், கடத்து எலக்ட்ரான்கள் பெறும் சராசரித் திசைவேகம், நகர்வுத் திசைவேகம் (drift velocity) எனப்படும். இது அமைப்பில் எலக்ட்ரான்கள் எல்லாத் திசைகளிலும் முன்பே சம அளவில் பெற்றிருக்கும் இலக்கிலா இயக்கத்தோடு மேற்பொருந்துகிறது.

ஒரு கடத்தியின் வழிச்செல்லும் மின்னோட்டத்தின் அளவு, செயல்படுத்தப்படும், மின்னழுத்த வேறுபாட்டின் மதிப்பிற்கு, அது எவ்வளவு சிறியதாக இருப்பினும் நேர் விகிதத்திலிருக்கிறது. இவ்வுண்மை, உலோகங்களின் வெப்ப மற்றும் மின் கடத்தும் திறன்கள், அதிலுள்ள கட்டற்ற எலக்ட்ரான்களோடு தொடர்புடையன என்று தெரிவிக்கிறது.

நகர்வுத் திசைவேம் $\langle v_d \rangle$

ஒரு புறமின் புலத்தைச் செயல்படுத்தும்போது, திண்மத்திலுள்ள கடத்து எலக்ட்ரான்கள் புலத்திசைக்கு எதிராகப் பெறும் சராசரி திசைவேகம் நகர்வுத் திசைவேகம் எனப்படும்.

ஓரலகுப் பருமனில் n எலக்ட்ரான்கள் இருப்பதாகக் கொள்வோம். இவ்வெலக்ட்ரான்கள் யாவும் தன்னிச்சையாக இலக்கு நோக்கின்றி இங்குமங்குமாகப் பல்வேறு திசைவேகங்களுடன் இயங்கிக் கொண்டிருக்கும். இத்திசைவேகப் பங்கீடானது பொருளின் வெப்பநிலையைப் பொறுத்திருக்கும். ஒரு கடத்து எலக்ட்ரானின் சராசரித்திசைவேகம் அதன் நகர்வுத் திசைவேகம் $\langle v_d \rangle$ எனவே

$$\langle v_d \rangle = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} v_{di}$$

இதில் v_{di} என்பது i என்ற எலக்ட்ரானுடைய இயக்கத் திசைவேகமாகும். புறமின்புலம் செயல்படாதபோது $\langle v_d \rangle$ இன் மதிப்பு எந்தவொரு குறிப்பிட்ட திசையிலும் சுழியாகத்தான் இருக்க வேண்டும். அதாவது $\langle v_d \rangle = 0$. கடத்து எலக்ட்ரான்களின் இயக்கம் இல்லை என்று இதன் பொருளில்லை. ஒரு குறிப்பிட்ட திசையில் எவ்வளவு

எலக்ட்ரான்கள் நகர்கின்றனவோ, அதேயளவு எலக்ட்ரான்கள் எதிர்திசையிலும் நகர்வதால் இப்படித் தோன்றுகிறது.

புறமின்புலச் செயல்பாடு

E என்ற புலச்செறிவுடைய ஒரு புறமின்புலத்தைச் செயல்படுத்தும்போது, கட்டற்ற எலக்ட்ரான்கள் புலத்திசைக்கு எதிராக ஒரு முடுக்கத்தைப் பெறுகின்றன. இதன் மதிப்பு -eE/m என்போம். இதில் e,m என்பன முறையே எலக்ட்ரானின் மின்னூட்டம் மற்றும் நிறையாகும். இதனால் அவ்வெலக்ட்ரானின் இயக்கத் திசைவேகம் காலத்தைப் பொறுத்து அதிகரிக்கிறது.

முடுக்கம் என்பது நகர்வுத் திசைவேகத்தின் மாறுபாட்டு வீதம் என்பதால்

$$(dv_d/dt)_{\text{புலம்}} = - eE/m$$

இதனைத் தொகைப்படுத்த

$$v_d = - (eE/m)\ t + \text{மாறிலி.} \qquad (5.1)$$

தொடக்க நேரத்தில் $t=0$; $v_d \rightarrow 0$. எனவே தொகையாக்கத்தில் வரும் மாறிலியின் மதிப்பு சுழியாகும். இத்தொடர்பு எலக்ட்ரானின் நகர்வுத் திசைவேகம், நேரமாக ஆக அதிகரிக்கும் எனத் தெரிவிக்கிறது. ஆனால் நடைமுறையில் இப்படி நிகழ்வதில்லை. இதற்குக் காரணம் எலக்ட்ரான்கள் படிக அணித்தளத்திலுள்ள உலோக அயனிகளுடன் மீட்சி மோதலில் ஈடுபடும்போது, ஓரளவு நேரத்தை எடுத்துக்கொண்டு விடுவதால், முழுநேரத்திலும் முடுக்கப்படுவதில்லை. மோதலினால் முடுக்கம் கட்டுப்படுத்தப் படுகிறது என்பதால் எலக்ட்ரான் பெறும் முடுக்கம் வரம்பின்றி இருப்பதில்லை.

தளர்வு நேரம் (Relaxation Time)

மோதல் நிகழ்வுகளைத் தளர்வு நேரம் என்ற இயற்பியல் கூறால் வரையறுப்பதுண்டு. இதனை τ என்று குறிப்பிடுவர். இது அடுத்தடுத்த இரு மோதல்களுக்கிடைப்பட்ட சராசரித் தொலைவைக் கடக்க எலக்ட்ரான் எடுத்துக்கொள்ளும் நேரத்தோடும், சராசரி மோதலிடைத் தூரத்தோடும் தொடர்புடையதாக இருக்கிறது. இதன்படி dt என்ற மிகச்சிறிய காலத்தில் ஓர் எலக்ட்ரான் உலோக அயனியோடு

மோதுவதற்கான வாய்ப்பு dt/τ ஆகும். எளிமையாக்கத்திற்காக τஇன் மதிப்பு எலக்ட்ரானின் ஆற்றல் மற்றும் இயக்கத்திசை இவற்றைச் சாராதிருக்கிறது என்று கொள்ளலாம்.

மோதலின்போது எலக்ட்ரான், புறமின் புலத்திலிருந்து பெற்ற தனது முழு இயக்க ஆற்றலையும் இழந்து விடுகிறது. மீட்சி மோதலுக்குப்பிறகு அதன் திசைவேகம், மோதலுக்கு முன்புள்ள இயக்கத் திசையைப் பொறுத்ததாக இல்லை. எனவே மோதல்காரணமாக ஏற்படும் உந்தமாறுபாடு வீதம் ஓர் எதிர்முடுக்கத்திற்குக் காரணமாகிறது.

$$(dv_d/dt)_{\text{மோதல்}} = -v_d/\tau$$

இதில் வரும் எதிர்குறியானது எதிர்முடுக்கத்தைச் சுட்டிக் காட்டுகிறது. எனவே புறமின் புலத்திலும் கூட மோதல் நிகழ்வுகள் எலக்ட்ரான் வளிமத்தின் ஒரு சமநிலையில் ஏற்படுகிறது என்பதையே இது தெரிவிக்கிறது.

$$\left(\frac{dv_d}{dt}\right)_{\text{மொத்தம்}} = \left(\frac{dv_d}{dt}\right)_{\text{புலம்}} + \left(\frac{dv_d}{dt}\right)_{\text{மோதல்}} = 0$$

$$= -eE/m - v_d/\tau = 0$$

அல்லது $v_d = -(eE/m)\,\tau$ (5.2)

கொடுக்கப்பட்ட புறமின் புலச் செறிவிற்கு நகர்வுத் திசைவேகம் ஒரு மாறிலி. சராசரி நகர்வுத் திசைவேகம் $\langle v_d \rangle$ என்பது v_d இன் மதிப்பில் பாதியாகும். ஏனெனில் $\langle v_d \rangle$இன் மதிப்பு சுழியிலிருந்து $(eE/m)\tau$ என்ற பெருமத்திற்கு உட்பட்ட மதிப்புகளை உடையதாக இருக்கிறது.

தளர்வு நேரத்தை, புறமின் புலம் உள்ள போது, அடுத்தடுத்த இரு மோதல்களுக்கு இடையே எலக்ட்ரான் எடுத்துக்கொள்ளும் காலம் எனவும் வரையறை செய்யலாம். சமன்பாடு (5.1)இன்படி நகர்வுத் திசைவேகம்

$$v_d = -(eE/m)\,t$$

இரு மோதல்களுக்கு இடைப்பட்ட தொலைவில் சராசரி நகர்வுத்திசை வேகம்

$$\langle v_d \rangle = \frac{1}{\tau}\int_0^{\tau} (-eE/m)t\,dt$$

$$= (-eE/m)\,\tau/2 \qquad (5.3)$$

மின்கடத்து திறன் σ

J என்பது மின்னோட்டச் செறிவு எனில்

$J = \sigma E$

இதில் σ என்பது மின்கடத்து திறனாகும். இதன் மதிப்பு ஒரு திண்மப் பொருள், புறமின் புலத்தில் எங்ஙனம் மின்சாரத்தைக் கடத்தும் திறனைக் கொண்டிருக்கிறது என்பதைக் குறிக்கிறது. இதன் தலைகீழ் மதிப்பு மின்தடைத் திறனாகும். (ρ)

மின்னோட்டச் செறிவு என்பது கடத்தியின் குறுக்குப்பரப்பு வழியாக ஒரு வினாடியில் செல்லும் மின்னோட்டத்தின் அளவு என்பதால்

$$J = n\langle v_d \rangle e$$

இதில் n என்பது ஓரலகுப் பருமனில் உள்ள எலக்ட்ரான்களின் எண்ணிக்கையாகும். v_d ன் மதிப்பை இங்குப் பதிலீடு செய்ய

$$J = \sigma E = \frac{ne^2E}{m}\,\frac{\tau}{2}$$

அல்லது

$$\sigma = \frac{ne^2\tau}{2m} \qquad (5.4)$$

ஓர் எலக்ட்ரானின் நகர்வுத் திசைவேகம் v_d எனில், அது புறமின் புலத்தில் சராசரி மோதலிடைத் தொலைவு λவைக் கடக்க எடுத்துக் கொள்ளும் காலம் தளர்வு நேரமாகும்.

$$\tau = \lambda/v_d$$

எனவே $$\sigma = \frac{ne^2\lambda}{2mv_d}$$

எலக்ட்ரானின் இயக்க ஆற்றல், சார்பிலா வெப்பநிலைக்கு நேர்விகிதத்திலிருக்கிறது.

$$(1/2)m\,v_d^{\,2} \propto T$$

போல்ட்ஸ் மான் விதிப்படி

$$(1/2)m\,v_d^{\,2} = 3/2\,k_BT$$

எனவே $$\sigma = \frac{ne^2\lambda v_d}{6k_BT} \qquad (5.5)$$

இத்தொடர்பில் σஇன் மதிப்பு v_d மற்றும் T ஆகியவற்றைச் சார்ந்துள்ளது. σ, Tஐ மட்டும் சார்ந்திருக்குமாறான ஒரு தொடர்பையும் பெற முடியும்.

$$\sigma = \frac{ne^2\lambda}{2m(v_d^{\,2})^{1/2}}$$

$$m\,v_d^{\,2} = 3k_BT$$

அல்லது $$m^{1/2}\,(v_d^{\,2})^{1/2} = (3\,k_BT)^{1/2}$$

$$m\,(v_d^{\,2})^{1/2} = (3\,k_BT)^{1/2}$$

$$ne^2\lambda$$

எனவே $$\sigma = \frac{ne^2\lambda}{2(3mk_BT)^{1/2}} = 10^6\,T^{-1/2} = 1/\rho \qquad (5.6)$$

எனவே, மின்தடைத்திறன் ρ சார்பிலா வெப்பநிலையின் வர்க்கமூலத்திற்கு நேர்விகிதத்திலிருக்கிறது என்று தெரிவிக்கிறது. ஆயினும் சோதனை முடிவுகள் ∝T என்று தெரிவித்துள்ளன. இதற்குக் காரணம் சராசரி மோதலிடைத் தூரம் λ வெப்பநிலையைப் பொறுத்ததில்லை என்ற ஊகம் தவறானதாகும். மேலும் இத்தொடர்பு, வெவ்வேறு உலோகங்கள், வெவ்வேறு அளவு கட்டற்ற எலக்ட்ரான்களின் செறிவைப் பெற்றிருப்பதால், வெவ்வேறு அளவு மின்கடத்து திறனைப் பெற்றுள்ளன என்றும் தெரிவிக்கிறது.

ஓம் விதி

சராசரி நகர்வுத் தொலைவு $\langle v_d \rangle = (eE/m)\, \tau/2 = (eE/2m)\, \lambda/v_d$

$\frac{1}{2} m v_d^2 = 3/2 k_B T$ என்ற தொடர்பைப் பயன்படுத்தி

$$\langle v_d \rangle = \frac{eE\lambda v_d}{6k_B T}$$

என்ற தொடர்பைப் பெறலாம்.

$$J = ne\langle v_d \rangle$$

$$= \frac{ne^2 \lambda v_d E}{6k_B T}$$

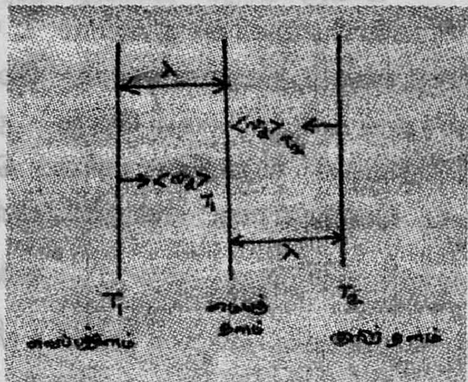
அதாவது $J \alpha E$

இது ஓமின் விதியை நிறுவுகிறது.

வெப்பம்கடத்து திறன்

எலக்ட்ரானின் சராசரி இயக்க ஆற்றல், வளிமங்களுக்கான இயக்க ஆற்றல், கொள்கைப்படி $3/2k_B T$ ஆகும். அதாவது எலக்ட்ரானின் சராசரி இயக்க ஆற்றல் சார்பிலா வெப்பநிலைக்கு நேர்விகிதத்திலிருக்கிறது. எனவே வெப்ப முனையில் எலக்ட்ரான்கள் கூடுதலான இயக்க ஆற்றலையும், குளிர்ச்சியான முனையில் குறைவான இயக்க ஆற்றலையும் கொண்டிருக்கும் எனலாம். அப்போது எலக்ட்ரான்களின் இலக்கு நோக்கற்ற இயக்கத்தில்,

கூடுதலான ஆற்றலை வெப்ப முனையிலிருந்து குளிர் முனைக்குக் கடத்தி எடுத்துச் செல்கிறது.



படம் 5.2 எலக்ட்ரான்களின் பரிமாற்றமும் வெப்பக்கடத்தலும்

X-அச்சு வழியாக வெப்பநிலைச் சரிவுள்ள ஓர் உலோகத் துண்டைக் கருதுவோம். சராசரியாக ஒவ்வொரு திசையிலும் v_d என்ற சராசரி நகர்வுத் திசைவேகத்துடன் n/6 எலக்ட்ரான்கள் இயங்கிச் செல்லும். இதில் n என்பது ஓரலகுப் பருமனில் உள்ள எலக்ட்ரான்களின் எண்ணிக்கையாகும். X–அச்சுக்குச் செங்குத்தாக T_1, T_2 என்ற வெப்பநிலையில் உள்ள, மையத் தளத்திலிருந்து மிகச்சரியாக λ என்ற சராசரி மோதலிடைத் தொலைவில் இருக்கின்ற இரு ஓரலகுப் பரப்புள்ள இணைதளங்களைக் கருதுவோம். மையத்தளத்திற்குக் குறுக்காக ஒரு வினாடியில் இருமருங்கும் கடக்கும் எலக்ட்ரான்கள் சமம். இதன் மதிப்பு $n<v_d>/6$ ஆகும். மையத்தளத்தின் வழியாகக் கடக்கும் மொத்த எலக்ட்ரான்களின் எண்ணிக்கை சுழியென்றாலும், வெப்ப முனையிலிருந்து, குளிர்முனை நோக்கிச் செல்லும் எலக்ட்ரான்கள் கூடுதலான ஆற்றலையும், குளிர் முனையிலிருந்து வெப்பமுனை நோக்கிச் செல்லும் எலக்ட்ரான்கள் குறைவான ஆற்றலையும் கடத்துகின்றன. ஓர் எலக்ட்ரான், வெப்பமுனையிலிருந்து குளிர்முனைக்குச் செல்லும்போது கடத்தும் ஆற்றல் $3/2k_BT_1$, குளிர்முனையிலிருந்து வெப்பமுனைக்குச் செல்லும்போது கடத்தும் ஆற்றல் $3/2k_BT_2$. எனவே மையத்தளத்தில் ஓரலகு குறுக்குப்பரப்பின் வழியாக ஓரலகு நேரத்தில் இப்படி ஏற்படும் மொத்த ஆற்றல் பரிமாற்றம், கடத்தி எடுத்துச் செல்லப்படும் வெப்ப ஆற்றலாகும்.

$$Q = \frac{n<v_d>}{6} \frac{3k_B}{2} (T_1-T_2)$$

வெப்பம்கடத்து திறனுக்கான வரையறையிலிருந்து

$$Q = \frac{K(T_1-T_2)}{2\lambda}$$

இவ்விரு தொடர்புகளையும் ஒப்பிட்டால்

$$K = \frac{n<v_d>}{2} k_B \lambda \qquad (5.7)$$

இத்தொடர்பு சோதனை முடிவுகளோடு ஓரளவு இணக்கமாக இருக்கிறது. இது இக்கொள்கையின் சிறப்பாகும்.

விட்மான்-பிரான்ஸ் தகவு

விட்மான்-பிரான்ஸ் விதியைச் சரிபார்த்து இக்கொள்கையின் உண்மைத் தன்மையை அறிந்து கொள்ளலாம். உலோகங்களின் வெப்ப மற்றும் மின் கடத்து திறனுக்கு அதிலுள்ள கட்டற்ற எலக்ட்ரான்களே காரணமாக இருப்பதால், ஒரு குறிப்பிட்ட வெப்பநிலையில் இவ்விரு இயற்பியல் பண்புகளின் தகவு ஒரு மாறிலியாக இருக்க வேண்டும் என எதிர்பார்க்கலாம். விட்மான்-பிரான்ஸ் விதிப்படி, எல்லா உலோகங்களுக்கும் அவற்றின் வெப்பம்கடத்து திறனுக்கும், மின்கடத்து திறனுக்கும் உள்ள தகவு கொடுக்கப்பட்ட ஏதாவதொரு வெப்பநிலையில் மாறிலியாகும். இதனை விட்மான்-பிரான்ஸ் தகவு என்பர்.

$$\frac{K}{\sigma} = \frac{n<v_d>}{2} k_B \lambda \times \frac{2m<v_d>}{ne^2\lambda}$$

$$= \frac{k_B\, m <v_d>^2}{e^2} = 3\left(\frac{k_B}{e}\right)^2 T \qquad (5.8)$$

அதாவது $K/\sigma \propto T$. இது விட்மான்-பிரான்ஸ் கொள்கையாகும்.

$K/\sigma T$ ன் மதிப்பு வெப்பநிலை சாரா ஒரு மாறிலி. இதனை லாரன்ஸ் எண் என்பர். இதன் மதிப்பு 2.45×10^{-8} வாட்-ஓம்/கெல்வின்^{2} என்ற நெடுக்கையில் உள்ளது. கட்டற்ற எலக்ட்ரான் கொள்கை விட்மான்-பிரான்ஸ் விதியை விளக்கினாலும், அது தற்செயலாக விளைந்த ஒன்றாகும். ஏனெனில் K, σ இவற்றின் கொள்கை மதிப்புகள், சோதனை மதிப்புகளிலிருந்து பெரிதும் வேறுபட்டிருக்கின்றன. விட்மான்-பிரான்ஸ் தகவில் முரண்பாடுகள் சரிக்கட்டப்படுவதால், கணக்கிடப்படுவதும் கண்டறியப்படுவதும் ஒன்றாய்த் தோன்றுகின்றன.

கடத்தும் திறனைப் பாதிக்கும் கூறுகள்

ஓர் உலோகத்தின் மின்கடத்துதிறன் அதன் வெப்பநிலைக்குஏற்ப மாறுகிறது. இந்த மாற்றத்தைப் பொதுவாக வெப்பநிலைக்கு ஏற்ப மாறுபடும் மின்தடைத்திறனால் குறிப்பிடுவார்கள். சார்பிலாச் சுழி வெப்பநிலையில் ρ-இன் மதிப்பு அளவாக இருக்கிறது. அதன்பிறகு Tக்கு ஏற்ப அதிகரிக்கிறது. அதிகரிப்பு வீதம் முதலில் குறைவாகவும், அதன்பிறகு சீராக நேரியலாகவும் காணப்படுகிறது. இந்த நேரியல் தன்மை உலோகத்தின் உருகுநிலை எட்டும்வரை தொடர்கிறது. பெரும்பாலான உலோகங்களுக்கு அறைவெப்பநிலை, இந்த நேரியல் நெடுக்கையில் அமைந்திருக்கிறது. சமன்பாடு (5.5) லிருந்து

$$\rho = \frac{6k_B T}{ne^2 v_d} = \frac{6k_B T}{ne^2 v_d^{\,2}} \; 1/\tau$$

இதில் τ என்பது தளர்வு நேரமாகும்.

மின்கடத்து திறன் அல்லது மின்தடைத்திறனில் வெப்பநிலை சார்ந்த மாற்றத்தில் காணப்படும் முரண்பாடு, எலக்ட்ரான்களின் மோதல்கள் படிக அணித்தளத்தின் சீர்மையில் காணப்படும் குறைபாடுகளினால் ஏற்படலாம். இது, அயனிகளின் வெப்பக்கிளர்ச்சியால் அணித்தளத்தில் அவற்றின் ஓய்வு நிலையிலிருந்து ஏற்படும் அணித்தள அதிர்வுகளினாலும் (போனான்), வேற்றுப்பொருள் சேர்க்கை, படிகக் குறைபாடுகளினாலும்

தூண்டப்படுகிறது. இவற்றின் காரணமாக எழும் தளர்வு நேரம் முறையே $\tau_{போனான்}$, $\tau_{குறைபாடு}$ எனில் ஓரலகு நேரத்தில் மோதலுக்கான வாய்ப்பு இவற்றின் தலைகீழ் மதிப்பாகும். வாய்ப்புகள் கூட்டல் பாங்கினைப் பெற்றுள்ளன என்பதால், தளர்வுநேரத்தில் விளைபயன்

$$\frac{1}{\tau} = \frac{1}{\tau_{போனான்}} + \frac{1}{\tau_{குறைபாடு}}$$

படிகக்குறைபாடுகளின் செறிவு, வெப்பநிலை சாராதிருப்பதால் τ குறைபாடு, வெப்பநிலையைப் பொறுத்து மாறாதது எனலாம். ஆனால் போனான் வெப்பநிலையைப் பொறுத்து மாறுபடுகின்றன.

எனவே மின்தடைத் திறனை

$$\rho = \rho_{போனான்} + \rho_{குறைபாடு} = \frac{6k_B T}{ne^2 \langle v_d \rangle^2} = \frac{1}{\tau_{போனான்}} + \frac{1}{\tau_{குறைபாடு}}$$

இத்தொடர்பினால், வெப்பநிலை பொறுத்து மாறுபடும் உலோகத்தின் மின்தடைத்திறனை விளக்க முடிகிறது. மின்தடைத்திறனை, வெப்பநிலை சார்ந்த பகுதி என்றும், வெப்பநிலை சாராத பகுதி என்றும் வேறுபடுத்துதல் மாத்தீசன் விதியாகும்.

மிகத்தாழ்ந்த வெப்பநிலையில், அணித்தள அதிர்வுகளின் அலைவீச்சு குறைவாக இருப்பதால், போனான்களின் சிதறல் புறக்கணிக்கக்கூடிய அளவிலேயே நிகழும். எனவே $\tau_{போனான்} \rightarrow \infty$, $\rho_{போனான்} \rightarrow 0$ அப்போது

$$\rho = \rho_{குறைபாடு}$$

வெப்பநிலை அதிகரிக்க, போனான்கள் சிதறல் வலுப்பெற்று $\rho_{போ}(T)$ அதிகரிக்க உலோகத்தின் மின்தடைத்திறனும் அதற்கேற்ப அதிகரிக்கிறது. உயர்வெப்பநிலையில் போனான் சிதறல் விஞ்சுவதால்,

$$\rho = \rho_{போ}(T)$$

இந்நிலையில் ρ, Tக்கு நேர்விகிதத்தில் மாற்றம் பெறுவது போன்ற தோற்றத்தைத் தருகிறது.

தொல்லியக்கக் கட்டற்ற எலக்ட்ரான் கொள்கையின் முறிவுநிலை

1. உலோகங்களின் வெப்ப ஏற்புத்திறனுக்கான விளக்கத்தில் முரண்பாடு அதிகமாயுள்ளது. இக்கொள்கை உலோகங்களின் வெப்பஏற்புத்திறனை 4.5R எனத் தெரிவிக்கிறது. இதில் R என்பது வளிம மாறிலியாகும். எனினும், சோதனையில், இதன் மதிப்பு 3R என்று தெரிகிறது. எலக்ட்ரான்களின் வெப்ப ஏற்புத்திறனை 3/2R என இக்கொள்கை தெரிவிக்க, சோதனை மதிப்போ 0.01R என உள்ளது.

2. இக்கொள்கை மூலம் குறைக்கடத்திகள் மற்றும் மின்கடத்தாப் பொருட்களின் மின்கடத்து திறனை விளக்க முடியவில்லை.

3. தாழ்ந்த வெப்பநிலைகளில் K, σ இவற்றின் மதிப்புகளில் கொள்கைக்கும் சோதனைக்குமுள்ள வேறுபாடு அதிகமாக இருக்கிறது. அவை வெவ்வேறு விதமாக வெப்பநிலை சார்ந்து மாறுபடுவதால் **K/σT**-ன் மாறிலித் தன்மை சீர்குலைந்து போகிறது.

4. எலக்ட்ரான்களின் தற்சுழற்சி எலக்ட்ரான் வளிமத்திற்கு ஒரு பாராகாந்தத் தன்மை தருகிறது. பாரா காந்த ஏற்புத்திறனின் மதிப்பில் கொள்கைக்கும் சோதனைக்கும் உள்ள முரண்பாடு குறிப்பிடும்படியாக இருக்கிறது. கொள்கை மதிப்பு, சோதனை மதிப்பைவிட மிகவும் அதிகமாக இருக்கிறது.

5. பொருட்களின் பெரோகாந்தத் தன்மையை விளக்க முடியவில்லை.

6. ஒளி-மின் விளைவு (Photo-electric effect), காம்டன் விளைவு(Compton effect), கரும்பொருள் கதிர்வீச்சு (Black Body radiation) போன்ற இயற்பியல் நிகழ்வுகளை விளக்கமுடியவில்லை.

7. ஏறக்குறைய 1 செ.மீ தொலைவிற்குச் சமமான உயரளவு சராசரி மோதலிடைத் தொலைவை இது அனுமதிப்பதில்லை என்பதால் இயற்கையில் அப்படி இருப்பதை விளக்கிக் கொள்ள முடியவில்லை. கட்டற்ற எலக்ட்ரான்களின் சராசரி மோதலிடைத் தொலைவு, வெப்பநிலையைச் சார்ந்திருப்பதில்லை என்று அனுமானம் தவறு என்பதை இது சுட்டிக்காட்டுகிறது.

5.3 சொமர்பெல்டு குவாண்டம் கொள்கை

1928இல் சொமர்பெல்டு உலோகங்களிலுள்ள எலக்ட்ரான் வளிமத்திற்கு ஒரு மாதிரியை வெளிப்படுத்தினார். இதில் உலோகத்தின் உட்பகுதியில் நிலையழுத்தம் மாறிலியாகக் கொள்ளப்பட்டுள்ளதால், அங்கு இயங்கும் எலக்ட்ரான்மீது செயல்படும் விசை சுழியாக உள்ளது.

உலோகங்களில் ஒரு கடத்து எலக்ட்ரான், அங்குள்ள அனைத்து அயனிகள் மற்றும் பிற கடத்து எலக்ட்ரான்களின் புலத்தில் இருக்கிறது. எலக்ட்ரான்களுக்கிடையிலான விலகு விசை இக்கொள்கையில் புறக்கணிக்கப்பட்டுள்ளது. மேலும் எலக்ட்ரான் அயனிக்கிடைப்பட்ட இடையீட்டுச்செயல் நிறையாற்றலூட்டும் புலமாகச் செயல்படுகிறது. இப்புலம் உலோகத்தினுள் எங்கும் சீராக இருப்பதாக் கொள்ளப்பட்டுள்ளது. இதனால் கடத்து எலக்ட்ரான்கள் உலோகத்தினுள் எவ்விதப் பாதிப்புமின்றித் தன்னிச்சையாக இயங்கக்கூடியதாக இருக்கின்றன. கணக்கீடுகளில் இந்த நிலையாற்றலூட்டும் புலத்தைப் புறக்கணித்துக் கொண்டாலும் மதிப்பீட்டில் பிழை ஏற்படுவதில்லை. (இது அமைப்பிலுள்ள நேர்மின் அயனிகளைப் புறக்கணிப்பதற்கு ஒத்தது). எனவே உலோகத்திலுள்ள கடத்து எலக்ட்ரான்களின் மொத்தஆற்றல் வெறும் இயக்க ஆற்றல் மட்டுமே என்று இக்கொள்கையால் ஏற்றுக் கொள்ளப்பட்டுள்ளது.

கடத்து எலக்ட்ரான்கள் உலோகத்தை விட்டுச் சாதாரண சூழ்நிலையில் வெளியேறுவதில்லை. உலோகத்தின் பருமவெளியில் கட்டுண்டிருக்கின்றன. இது ஓய்வு நிலையில் உலோகத்திற்கு வெளியே இருக்கும் எலக்ட்ரான் நிலையாற்றலைவிட உலோகத்திற்குள்ளே ஓய்விலிருக்கும் எலக்ட்ரானின் நிலையாற்றல் குறைவாக உள்ளது என்பதை உணர்த்துகிறது. இந்நிலையைக் கருத்திற்கொண்டு, உலோகப் பரப்பிற்கு வெளியே நிலையழுத்தம் அதிக அளவில் அல்லது அனந்தமாக இருக்கிறது என்று முடிவு செய்யப்பட்டது. இந்த புறவெளி உயர் நிலையழுத்தமே, அறைவெப்பநிலை நெடுக்கையில், கடத்து எலக்ட்ரான்களை வெறியேறிவிடாமல் உலோகத்திற்குள்ளே இருக்குமாறு செய்கிறது.

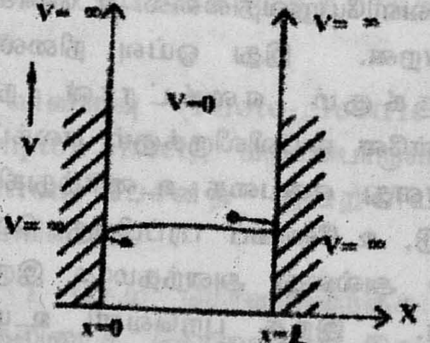
இம்முடிவுகளுக்கு இணக்கமாக, உலோகப்பரப்பை ஒரு மின்னழுத்தத் தடுப்புச் சுவராகக் (potential barrier) கருதலாம்.

இத்தடுப்புச்சுவர் உயரமாக இருப்பதாலும் எலக்ட்ரான்கள் உட்புறமாகக் குறைந்த ஆற்றலுடன் இருப்பதாலும், போதிய ஆற்றலூட்டப்படாத நிலையில், அவ்வெலக்ட்ரான்கள் தடுப்புச் சுவரைத் தாண்டி வெளியே வருவதில்லை. இதனால் தடுப்புச் சுவரின் உயரம், உயர்மட்ட நிலையாற்றலைக் குறிப்பிடுவதாகக் கொள்ளலாம். மின்னழுத்தத் தடுப்புச் சுவருக்கு உட்பட்ட வெளியை மின்னழுத்தப் பெட்டி (potential box) என்பர்.

சொமர்பெல்டு, குவாண்டம் கொள்கையைப் பயன்படுத்தி மின்னழுத்தப் பெட்டியில் கட்டுண்டிருக்கும் எலக்ட்ரான்கள் எல்லா ஆற்றல் மதிப்புகளையும் பெற்றிருக்கமுடியாது என்றும், குவாண்டம் ஆற்றல் நிலைகளில் மட்டும் இருக்க முடியும் என்றும் தெரிவித்தார். சொமர்பெல்டு கொள்கையைப் புரிந்து கொள்ள முதலில் நாம் ஒற்றைப் பரிமாணப் பெட்டியில் கட்டுண்டிருக்கும் எலக்ட்ரான்களைப் பற்றி அறிந்து கொள்வோம். பின்னர் முப்பரிமாணப் பெட்டிக்கு விரிவுபடுத்துவோம்.

ஒற்றைப் பரிமாணப் பெட்டியில் ஆற்றல் நிலைகளும், நிலைகடத்திகளும்

L நீளமுள்ள ஓர் ஒற்றைப் பரிமாணப் பெட்டியில் இருக்கும் எலக்ட்ரானைக் கருதுவோம். எளிமையாக்கத்திற்காகப் பெட்டியினுள் எலக்ட்ரானின் நிலையாற்றல் சுழியெனக் கொள்ளப்பட்டுள்ளது.



படம் 5.3 ஒற்றைப் பரிமாண மின்னழுத்தப் பெட்டியில் எலக்ட்ரான்

எனவே எலக்ட்ரானின் நிலையாற்றலை V(x)

$V(x) = 0; \ 0 < x < L$

$= \infty; \quad x \leq 0; \ x \geq L$

எனக் குறிப்பிட்டுக் கொள்ளலாம்.

எலக்ட்ரான் போன்ற நுண்துகளைப் பொருள் அலையாகக் (matter waves) கருதலாம். அலைச்சார்பு, நுண்துகளை விளக்கக் கூடியதாக இருப்பதால், துகளின் ஆற்றலை அதனைக்கொண்டு பெறமுடியும். எலக்ட்ரானின் அலைச்சார்புகளை, துகளின் இயக்கத்தை ஓர் அலையியக்கச் சமன்பாடாகக் குறிப்பிடும் ஷ்ரோடிங்கர் (Schrodinger) சமன்பாட்டைத் தீர்வு செய்து பெறலாம்.

மின்னழுத்தப் பெட்டியினுள் V=0 என்பதால் ஷ்ரோடிங்கர் சமன்பாடு

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} E\psi = 0 \qquad (\text{இதில் } \hbar = h/2\pi)$$

இதில் ψ,E என்பன முறையே அனுமதிக்கப்படுகிற நிலைகளின் அலைச்சார்பும் ஆற்றலுமாகும். இச் சமன்பாட்டின் பொதுத்தீர்வு

$\psi = A e^{ikx} + Be^{-ikx}$

இதில் $k^2 = 2mE/\hbar^2$, A,B என்பன தன் விருப்பப்படியான மாறிலிகளாகும். இதன் மதிப்புகள் அமைவிடத்தைப் (x) பொறுத்தோ, காலத்தைப் (t) பொறுத்தோ மாறுவதில்லை. இம்மாறிலிகளின் மதிப்புகளை வரம்பு நிலை நிபந்தனைகளைக் (boundary condition) கொண்டு கண்டறிய முடியும். எலக்ட்ரானை, மின்னழுத்தப் பெட்டியை விட்டு வெளியில் காணமுடியாது என்பதால் x=0 என்ற போதும், x=L என்ற போதும் ψ=0 என்றிருக்கும். பொதுத்தீர்வில் இந்நிபந்தனைகளை உட்புகுத்தினால்

$$A + B = 0 \qquad (1)$$

$$A e^{ikL} + B^{-ikL} = 0 \qquad (2)$$

முதல் தொடர்பிலிருந்து A=-B என்று பெறப்படுவதால்

சமன்பாடு (2), $A(e^{ikL} - e^{-ikL}) = 0$

இதில் $A \neq 0$ என்பதால்

$e^{ikL} - e^{-ikL} = 0$ இதன் தீர்வு,

$\sin kL = 0$ என்றாகும்.

அல்லது $kL = n\pi$

அதாவது, $k = n\pi/L$. இதில் $n = 1, 2, 3, \ldots$ என்ற மதிப்புகளை பெற்றிருக்கும் இதனை குவாண்டம் எண் என்பர். இது எலக்ட்ரானுக்கு அனுமதிக்கப்படும் ஆற்றல் நிலைகளைத் தெரிவிக்கிறது.

$k^2 = n^2\pi^2/L^2 = 2mE_n/\hbar^2$

$$E_n = (\hbar^2/2m)(n\pi/L)^2 \qquad (5.9)$$

இவ்வாற்றல் நிலைகளுக்குரிய அலைச்சார்வை ψ_n என்று குறிப்பிட்டால்

$\psi_n = A \sin(n\pi x/L)$

L-இன் மதிப்பு அதிகமாக இருந்தால் அனுமதிக்கப்படும் ஆற்றல்கள் மிகவும் நெருக்கமாக அமைந்திருக்கும். மேலும் அடுத்தடுத்த இரு ஆற்றல் நிலைகளின் ஆற்றல் வேறுபாடு $(2n+1)\hbar^2\pi^2/2m$ என்பதால் உயர் ஆற்றல் நிலைகள், குறைந்த ஆற்றல் நிலைகளைவிடக் கூடுதலான இடைவெளியுடன் பிரிந்திருக்கும்.

பொருள் அலையின் அலைவீச்சு, பொருள் அவ்வெளியில் இருப்பதற்கான வாய்ப்பைக் குறிப்பிடுகிறது. அலைவீச்சு சுழியெனில் துகள் அவ்விடத்தில் இல்லை என்று கூறலாம். உலோகத்தினுள் எலக்ட்ரான் கட்டுண்டிருப்பதால், அதன் அலைச்சார்பு, உலோகத்திற்கு வெளியே சுழியாகக் கொள்ளப்பட்டிருப்பது, இதன் பொருட்டுதான் ψ_n என்ற அலைச்சார்பில் குறிப்பிடப்படுகின்ற ஒரு துகள், அது இயங்கும் வெளியில் $d\tau$ என்ற நுண்ணளவுவெளியில் இருப்பதற்கான வாய்ப்பு $|\psi_n|^2 d\tau$ ஆகும். இதனைத் தொகைப்படுத்த, துகள் அது இயங்கும் மொத்த வெளியில் இருப்பதற்கான வாய்ப்பு கிடைக்கும். இது 1 என்பதால், இந்த நிபந்தனையை உட்புகுத்தி, A-ன் மதிப்பை அறியலாம். இவ்வழிமுறைக்கு அலைச்சார்பைப் பண்படுத்துதல் அல்லது இயல்பூட்டுதல் எனப்படும். ஒற்றைப் பரிமாணப் பெட்டியில் உள்ள எலக்ட்ரானின் அலைச்சார்பை இயல்பூட்டினால்

$$\int_0^L |\psi_n|^2 \, dT = 1$$

ψ_n-ன் மதிப்பைப் பதிலீடு செய்ய

$$A^2 \int_0^L \sin^2 \frac{n\pi x}{L} \, dx = A^2 \int_0^L \frac{1 - \cos 2n\pi x/L}{2} \, dx = 1$$

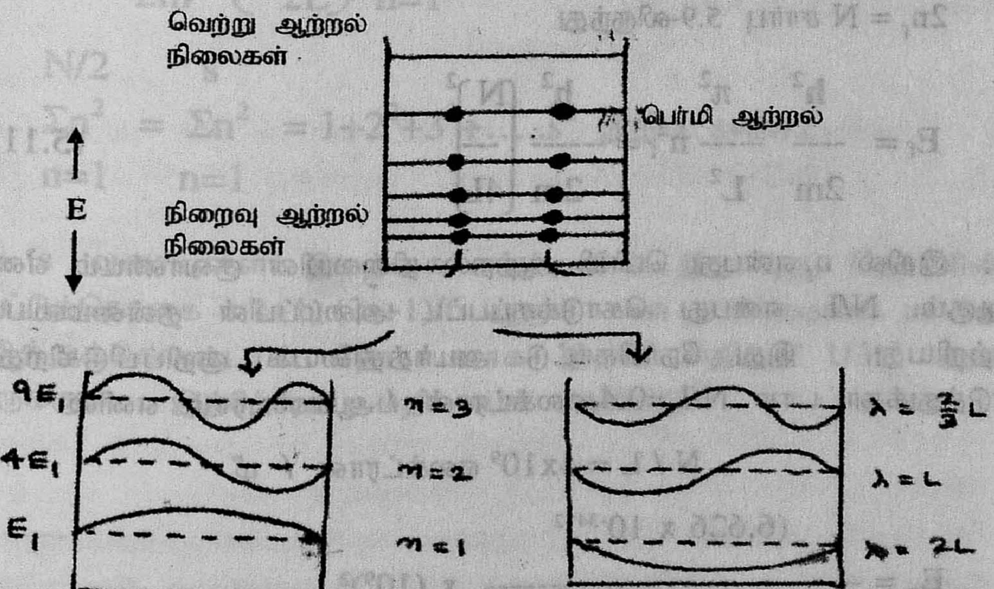
அல்லது $A = (2/L)^{1/2}$

எனவே இயல்பூட்டப்பட்ட அலைச்சார்பை

$$\psi_n = (2/L)^{1/2} \sin n\pi x/L \qquad (5.10)$$

எனக் குறிப்பிடலாம்.

மின்னழுத்தப் பெட்டியில் இயங்கும் எலக்ட்ரானின் ஒரு சில தாழ்ந்த ஆற்றல் நிலைகளின் ஆற்றலும் அலைச்சார்பும் படம் 5.4இல் காட்டப்பட்டுள்ளன.



படம். 5.4 ஆற்றல் நிலைகளில் எலக்ட்ரான்களின் பங்கீட்டுத்தளமும் அவற்றின் சில பொருள் அலைகளும்

பல ஆற்றல் நிலைகளைக் கொண்டுள்ள ஒரு தொகுதியில் N எலக்ட்ரான்கள் இருப்பதாகக் கொள்வோம். முதல் எலக்ட்ரான், E_1 என்ற குறைந்த ஆற்றலுடன் அடிமட்ட ஆற்றல் நிலையில் இடம்பிடிக்கும். இரண்டாவது எலக்ட்ரான், அதன் தற்சுழற்சி மாறுபட்டதாக இருந்தால் அதே ஆற்றல் நிலையில் இடம்பிடிக்கும். ஆனால் மூன்றாவது எலக்ட்ரான், பௌலியின் தவிர்க்கை விதிக்கு உட்படுவதால் அதே ஆற்றல் நிலையில் இடம் பிடிக்க முடியாது. அதை அடுத்துள்ள $4E_1$ என்ற ஆற்றலுள்ள ஆற்றல் நிலையில் இடம்பிடிக்கின்றது. ஒவ்வொரு ஆற்றல் நிலையிலும், நேர், எதிர் தற்சுழற்சியுடைய இரு எலக்ட்ரான்களைத் திணிக்கலாம் என்பதால் N எலக்ட்ரான்களை, N இரட்டையெனில் N/2 ஆற்றல் நிலைகளிலும், ஒற்றையெனில் (N+1)/2 ஆற்றல் நிலைகளிலும் நிரப்பலாம். இவ்வாற்றல் நிலைகளுக்கு மேற்பட்ட ஆற்றல் நிலைகள் நிரப்பப்படாமல் வெற்றிடமாக இருக்கும். நிறைவு மற்றும் வெற்றிட ஆற்றல் நிலைகளைப் பிரிக்கும் ஆற்றல் நிலையை, பெர்மி ஆற்றல் நிலை (Fermi level) என்பர்.

பெர்மி ஆற்றல் நிலையில் ஆற்றலை பெர்மி ஆற்றல் (fermi energy) என்பர். இதை E_F என்று குறிப்பிடுவர். அமைப்பில் இரட்டை எண்ணிக்கையில் N எலக்ட்ரான்கள் இருப்பதாகக் கொண்டால்

$2n_f = N$ சார்பு 5.9-லிருந்து

$$E_f = \frac{h^2}{2m}\frac{\pi^2}{L^2}n_f^2 = \frac{h^2}{2m}\left[\frac{N}{4L}\right]^2 \qquad (5.11)$$

இதில் n_f என்பது பெர்மி ஆற்றல் நிலையின் குவாண்டம் எண் ஆகும். N/L என்பது கொடுக்கப்பட்ட அமைப்பின் தன்மையைப் பற்றியது. இது நேர்கோட்டு அடர்த்தியைக் குறிப்பிடுகிறது. எடுத்துக்காட்டாக N/L=0.4 எலக்ட்ரான் / ஆங்ஸ்ட்ராம் எனில்

$$N / L = 4\times10^9 \text{ எலக்ட்ரான் / மீ}$$

$$E_F = \frac{(6.626 \times 10^{-34})^2}{2 \times 9.109\times10^{-31}} \times (10^9)^2$$

$= 2.4 \times 10^{-19}$ ஜூல்

$= 1.5$ எலக்ட்ரான் வோல்ட்

எனவே ஒரு மீட்டர் நீளமுள்ள நேர்கோட்டில் 4×10^9 எலக்ட்ரான்களைத் திணிக்க, அவ்வமைப்பிலுள்ள எலக்ட்ரான் பெறும் பெரும ஆற்றல் 1.5 ev ஆகும்.

அமைப்பின் தாழ்ந்த ஆற்றலுடன் N எலக்ட்ரான்களும் இருந்தால், அவ்வாற்றலை E_0 என்போம். இது அமைப்பில் பல்வேறு குவாண்டம் ஆற்றல் நிலைகளில் இருக்கும் N எலக்ட்ரான்களின் ஆற்றல்களின் கூடுதலுக்குச் சமம்.

$$E_o = 2 \sum_{n=1}^{N/2} E_n$$

$$= 2 \frac{h^2}{2m} \left(\frac{1}{2L} \right)^2 \sum_{n=1}^{N/2} n^2$$

$$\sum_{n=1}^{N/2} n^2 = \sum_{n=1}^{s} n^2 = 1+2^2+3^2+\ldots s^2$$ இதில் $s = N/2$

s வரையுள்ள இயற்கை எண்களின் இருமடித் தொடரின் கூட்டுத்தொகை $s(s+1)(2s+1)/6$ ஆகும். sன் உயர்மடியை மட்டும் எடுத்துக்கொண்டால் தோராயமாக இதன் மதிப்பு $1/3 s^3$ ஆக இருக்கும். இத்தோராய மதிப்பைக் கொண்டு

$$E_o = 2\,\frac{h^2}{2m}\left(\frac{1}{2L}\right)^2 \frac{1}{3}\left(\frac{N}{2}\right)^3$$

$$= \frac{1}{3}\,\frac{h^2}{2m}\left(\frac{N}{4L}\right)^2 N \quad \text{சமன் (5.11)படி,}$$

$$E_o = 1/3\ N\ E_F$$

அதாவது ஒற்றைப் பரிமாண மின்அழுத்தப் பெட்டியில் தாழ்ந்த ஆற்றல் நிலையில் அமைப்பின் சராசரி இயக்க ஆற்றல், பெர்மி ஆற்றலில் மூன்றில் ஒரு பங்காகும்.

நிலை அடர்த்தி (density of states)

நிலை அடர்த்தி என்பது ஓரலகு ஆற்றல் நெடுக்கையில் எலக்ட்ரான்களுக்கு அனுமதிக்கப்பட்ட ஆற்றல் நிலைகளின் எண்ணிக்கையாகும்.

$$E_n = \frac{h^2}{2m}\,\frac{n^2}{4L^2}$$

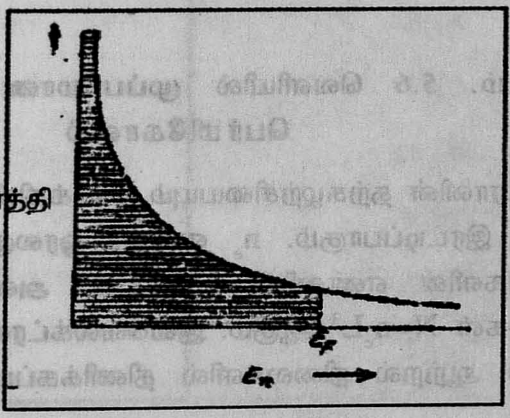
என அறியலாம். இத்தொடர்பைப் பகுத்தால்

$$dE_n = \frac{h^2}{2m}\,2\,\frac{n}{2L}\,\frac{dn}{2L}$$

dn/dE_n என்பது ஓரலகு ஆற்றல் நெடுக்கையிலுள்ள ஆற்றல் நிலைகளின் எண்ணிக்கையாகும். ஒவ்வொரு ஆற்றல் நிலையிலும் இரு எலக்ட்ரான்கள் இருக்கும் என்பதால், அவ்வாற்றல் நிலைகளிலுள்ள மொத்த எலக்ட்ரான்கள்

$$\therefore \quad 2\frac{dn}{dE_n} = \frac{8L^2m}{h^2}\frac{1}{n} \qquad (5.13)$$

இத்தொடர்பு உயர் ஆற்றல் நிலைகளில் n மற்றும் E_n அதிகமாக இருப்பினும் எலக்ட்ரான்களின் நிலைஅடர்த்தி dn/dE குறைவாக இருக்கும் என்பதைத் தெரிவிக்கிறது. ஆற்றலுக்கும், அவ்வாற்றல் நெடுக்கையில் நிலைஅடர்த்திக்கும் ஒரு வரைபடம் வரையலாம்.

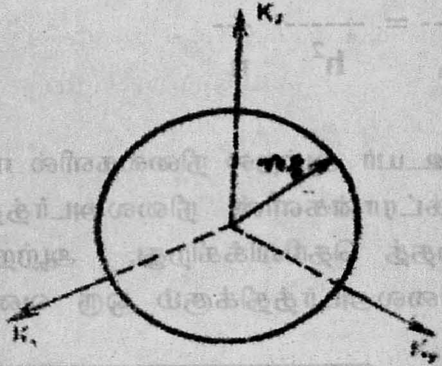


படம். 5.5 E, dn/dEக்கும் இடைப்பட்ட வரைபடம் (ஒற்றைப் பரிமாணப்பெட்டி)

ஒற்றைப் பரிமாணப் பெட்டிக்கான விளக்கத்தில் பின்பற்றியது போல, ஒரு முப்பரிமாணப் பெட்டிக்கான பெர்மி ஆற்றல், நிலை அடர்த்தி போன்றவற்றைக் கணக்கிடலாம்.

சார்பிலாச் சுழி வெப்பநிலையில் ஒரு குறிப்பிட்ட ஆற்றல் நிலைக்குக் கீழ் எல்லா ஆற்றல் நிலைகளும் நிரப்பப்பட்டும், அதற்கு மேற்பட்ட ஆற்றல் நிலைகள் நிரப்பப்படாமல் வெற்றாகவும் இருக்குமெனில், அக்குறிப்பிட்ட ஆற்றல் நிலையின் ஆற்றல் பெர்மி ஆற்றலாகும். இதனை E_{F0} என்று குறிப்பிடுவோம்.

n_f என்ற வரம்பிற்குட்பட்ட குவாண்டம் எண்களின் எண்ணிக்கை $4\pi/3\ n_F^3$



படம். 5.6 வெளியில் முப்பரிமாணப் பெட்டி – பெர்மிகோளம்

எலக்ட்ரானின் தற்சுழற்சியையும் கணக்கில் எடுத்துக்கொண்டால் இம்மதிப்பு இரட்டிப்பாகும். n_e என்பது ஓரலகுப் பருமனில் உள்ள எலக்ட்ரான்களின் எண்ணிக்கை எனில், அமைப்பிலுள்ள மொத்த எலக்ட்ரான்கள் $N=n_eL^3$ ஆகும். இவ்வெலக்ட்ரான்கள் மேற்குறிப்பிட்ட குவாண்டம் ஆற்றல் நிலைகளில் திணிக்கப்பட்டுள்ளன என்பதால்

$$N=n_eL^3 = 2\,(4\pi/3)\, n_f^3$$

$$n_f = (3n_e/8\pi)^{1/3}\, L$$

n_f குவாண்டம் எண்ணோடு தொடர்புடைய ஆற்றல் பெர்மி ஆற்றல் என்பதால்

$$E_{Fo} = h^2/2m\, (2\pi/L)^2\; n^2_f$$

n_f -இன் மதிப்பைப் பதிலீடு செய்ய

$$E_{Fo} = (h^2/2m)\, [3\pi^2]^{2/3}\; n_e^{\;2/3} \qquad (5.16)$$

இத்தொடர்பைக் கொண்டு பல உலோகங்களின் பெர்மி ஆற்றலை அவற்றின் எலக்ட்ரான் செறிவைக் கொண்டு மதிப்பிடலாம். சில உலோகங்களின் பெர்மி ஆற்றல் அட்டவணை 5.1இல் தரப்பட்டுள்ளது.

அட்டவணை 5.1

சில உலோகங்களின் பெர்மி ஆற்றல்

உலோகம்	பெர்மி ஆற்றல் eV $E_{Fo} = h^2/2m\,[3\pi^2 n_e]^{2/3}$
லித்தியம் - Li	4.72
சோடியம் - Na	3.12
பொட்டாசியம் - K	2.14
ருபிடியம் - Rb	1.82
அலுமினியம் - Ae	11.70
செம்பு - Cu	7.04
பேரியம் - Ba	3.80
வெள்ளி – Ag	5.51

E_{Fo}-இன் மதிப்பு ஏறக்குறைய 5 எ.வோ என்ற நெடுக்கையில் இருக்கிறது. இம்முடிவுகள் அமைப்பு சுழிவெப்பநிலையில் இருந்தாலும், அதிலுள்ள எலக்ட்ரான்களுள் சில ஏறக்குறைய 5 எ.வோ. ஆற்றலைப் பெற்றிருக்க முடியும் என்று தெரிவிக்கின்றன. இது தொல்லியக்க இயல்பியலுக்கு முற்றிலும் முரண்பாடானது.

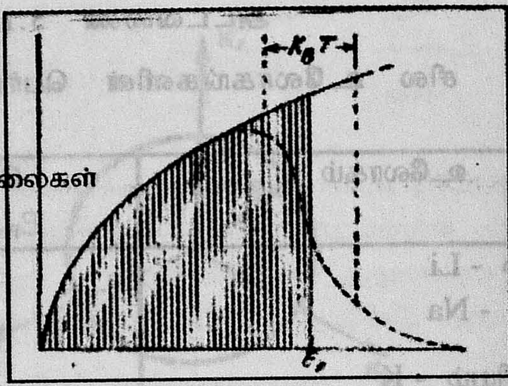
முப்பரிமாணப் பெட்டிக்கான dn/dE நிலை அடர்த்தியையும் முன்னர் செய்ததைப் போலக் கண்டறிய முடியும். சமன்பாடு (5.16)ஐக் கொண்டு

$$\int (dn/dE)\, dE = n_e = 1/3\pi^2\ (2mE/h^2)^{3/2}$$

$$\text{அல்லது}\quad dn/dE = 1/3\pi^2\ (2m/h^2)^{3/2}\ (3/2)\ E^{1/2}$$

$$= (1/2\pi^2)\ (2m/h^2)^{3/2}\ E^{1/2}$$

இத்தொடர்பு **dn/dE** ஆற்றலைச் சார்ந்து ஒரு பரவளையச் சார்புடையதாக இருக்கிறது என்பதைத் தெரிவிக்கிறது. Eக்கும் **dn/dE** க்கும் உள்ள தொடர்பை ஒரு வரைபடமாகக் காட்டலாம்.



படம் 5.7 முப்பரிமாணப் பெட்டியில் E, d(E)க்கும் உள்ள தொடர்பு

குவாண்டம் நிலைகளும் நிலைகுலைவுகளும் (Quantum states and degeneracy)

முப்பரிமாணப் பெட்டியில் இயங்கும் எலக்ட்ரானின் குவாண்டம் ஆற்றலை,

$$E_n = h^2/2mL^2 = (n_x^2+n_y^2+n_z^2)$$

இதில் $n^2 = (n_x^2+n_y^2+n_z^2)$

எனக் குறிப்பிடலாம். வெவ்வேறு மதிப்புகளுக்கு, அதாவது வெவ்வேறு குவாண்டம் நிலைகளுக்கு ஒரே ஆற்றல் இருக்குமாறு அமையலாம். ஓர் ஆற்றலுக்கு ஒரே ஒரு குவாண்டம் நிலை மட்டும் இருக்குமெனில் அந்நிலை **'நிலைகுலைவற்ற நிலை'** எனப்படும். அப்படியின்றி ஒரே ஆற்றலில் பல குவாண்டம் நிலைகள் இருக்குமெனில், அந்நிலைகள் நிலைகுலைவுற்ற நிலைகள் எனப்படும் நிலைகுலைவின் தரம் அதிலுள்ள குவாண்டம் நிலைகளின் எண்ணிக்கையாகும்.

அட்டவணை – 2

முப்பரிமாணப்பெட்டியில் எலக்ட்ரானின் சீர்குலைவுற்ற நிலைகள்

(n_x,n_y,n_z)	நிலை	தரம்
(1.1.1)	சீர்குலைவுற்றது	-
(1.1.2); (1.2.1); (2.1.1)	சீர்குலைவுற்றது	3
(2,2,1); (2,1,2); (1,2,2)	சீர்குலைவுற்றது	3
(1,1,3); (1,3,1); (3,1,1)	சீர்குலைவுற்றது	3
(3,3,1); (3,1,3); (1,3,3)	சீர்குலைவுற்றது	3

உலோகங்களின் படிகக் கட்டமைப்பு உலோகங்களுக்கு ஏற்பவும், சூழ்நிலைக்கேற்பவும் வெவ்வேறுவிதமாக இருக்கும். நம்முடைய கணக்கீட்டில் உலோகத்தை ஒரு கனச்சதுரமாக கொண்டுள்ளோம். உண்மையில் ஒரு சில படிகங்கள் மட்டுமே கனச்சதுர சமச்சீர்மை (symmetry) உடையதாக இருக்கின்றன. வெவ்வேறு படிகங்கள் வெவ்வேறு சமச்சீர்மை கொண்டுள்ளன. குவாண்டம் நிலைகளின் நிலைகுலைவு, படிகங்களின் சமச்சீர்மையோடு தொடர்புடையதாக இருக்கிறது.

மூவேறு செவ்வக முகப்படிகங்களில் (Orthorhombic). $L_x \neq L_y \neq L_z$. எனவே

$$k^2 = \pi^2 \left[\left(\frac{n_x}{L_x}\right)^2 + \left(\frac{n_y}{L_y}\right)^2 + \left(\frac{n_z}{L_z}\right)^2\right]$$

ஆற்றல் மதிப்பு

$$E_k = \frac{h^2k^2}{2m} = \frac{h^2\pi^2}{2m}\left[\left(\frac{n_x}{L_x}\right)^2 + \left(\frac{n_y}{L_y}\right)^2 + \left(\frac{n_z}{L_z}\right)^2\right]$$

ஆற்றல் தொடர்புகளை ஒப்பிட்டு நோக்கும்போது மூவேறு செவ்வகமுகப் படிகங்களைவிட, கனச்சதுரப் படிகங்களில் ஒரே

ஆற்றலுக்குப் பல குவாண்டம் நிலைகள் இருப்பது தெரியவருகிறது. மூவேறு செவ்வக முகப்படிகங்களில்

$$E(2,1,1) \neq E(1,2,1) \neq E(1,1,2)$$

பெட்டியின் சமச்சீர்மை அதிகரிக்கும்போது சீர்குலைவு தோன்றுகிறது. எடுத்துக்காட்டாக இருவேறு செவ்வகமுகம், ஒரு சதுர முகம் கொண்ட (tetragonal) படிகங்களில் ($L_x = L_y \neq L_z$)சில சீர்குலைவுகள் மட்டுமே தோன்றுகின்றன. இவ்வகைப் படிகத்திற்கு

$$E(2,1,1) = E(1,2,1) = E(1,1,2)$$

இவ்விளக்கம், ஓர் அமைப்பின் நிலைக்குலைவு நிலைகள் என்பது அவ்வமைப்பின் சமச்சீர்மையின் தரத்தோடு தொடர்புடையதாக இருக்கிறது எனலாம்.

5.4 பெர்மி-டிராக் புள்ளியியல் கொள்கை

எலக்ட்ரான் வளிமத்திலுள்ள எலக்ட்ரான்களின் பங்கீட்டுத்தனத்தை, பெர்மி-டிராக் புள்ளியியல் கொள்கை வரையறுக்கிறது. பொதுவாக, பெர்மி-டிராக் புள்ளியியல் கொள்கை எலக்ட்ரானுக்கு மட்டுமின்றி, ஒன்றுக்கொன்று வேற்றுமை காண முடியாத, அரையெண் எண்ணிக்கையில் தற்சுழற்சியுடைய துகள் யாவற்றிற்கும் இணக்கமானது. பெர்மி-டிராக் புள்ளியியல் கொள்கைக்கு உட்பட்டுச் செயல்படும் துகள்களை, 'பெர்மியான்' எனப் பொதுப் பெயரிட்டு அழைக்கிறார்கள்.

ஆற்றல் நிலைகளை (E) உந்த இடவெளியில் (phase space) நுண்ணறைகளாகக் கருதலாம். இந்த நுண்ணறை மூன்று இருப்பிட ஆயங்களையும், மூன்று உந்த ஆயங்களையும் கொண்டது. அதனால் ஒவ்வொரு நுண்ணறையிலும் பௌலியின் விதிக்குட்பட்டு ஒரேயொரு எலக்ட்ரான் மட்டும் இடம்பெறும்.

பெர்மியான்களின் பங்கீட்டுத்தன வாய்ப்பை, பெர்மி (Fermi) கீழ்க்காணும் சமன்பாட்டின் மூலம் நிறுவினார்.

$$F(E) = \frac{1}{\mathrm{Exp}\,[(E-E_F/k_B T)+1]}$$

இதில் F(E) என்பது, ஒரு கொடுக்கப்பட்ட ஆற்றல் நிலையில் ஓர் எலக்ட்ரான் இடம்பெறுவதற்கான வாய்ப்புப் பற்றிய சார்பு என்பதை அறிந்து கொள்ள முடியும். E_F என்பது T-வெப்பநிலையில் பெர்மி ஆற்றல் (Fermi Energy) எனப்படும்.

சார்பில சுழிவெப்பநிலையில், எலக்ட்ரான்கள் யாவும் பெர்மி ஆற்றல் E_{F0} எனப்படும் ஆற்றல் நிலை வரையிலுள்ள நிலைகளை மட்டும் நிறைவு செய்திருக்கும், அதற்கு அப்பால் உயராற்றலுடன் கூடிய நிலைகள் யாவும் வெற்று நிலைகளாக இருக்கும். $E<E_F$ எனில்

$$F(E) = \frac{1}{1+e^{-\infty}} = 1/1 = 1$$

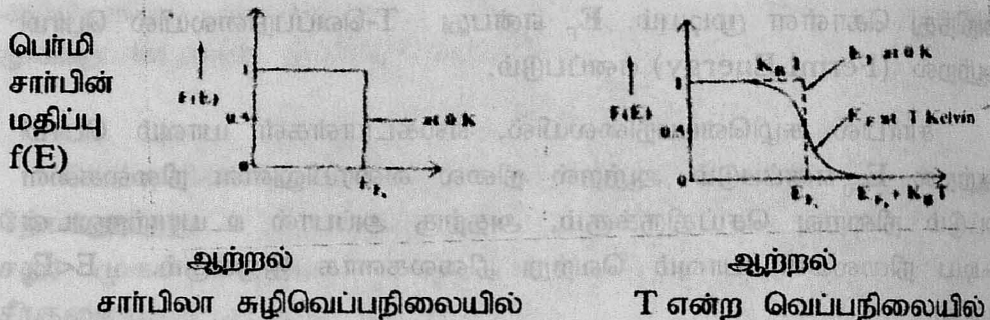
அதாவது பெர்மி ஆற்றல் நிலைக்குள் எலக்ட்ரான் நிறைவு பெற்றிருப்பதற்கான வாய்ப்பு 1 ஆகும். $E>E_F$ எனில்

$$F(E) = \frac{1}{1+e^{\infty}} = 1/\infty = 0$$

பெர்மி ஆற்றல் நிலைக்கு மேற்பட்ட உயராற்றல் நிலைகளில் எலக்ட்ரான் இருப்பதற்கான வாய்ப்பு சுழியாகும். $E=E_F$ எனில்

$$F(E) = \frac{1}{1+1} = 1/2 = 0.5$$

பெர்மி ஆற்றல் நிலைக்கு உட்பட்ட நிலைகளுக்குள் எலக்ட்ரான் இடம் பெற்றிருப்பதற்கும், அல்லது இடம்பெறாதிருப்பதற்குமான வாய்ப்பு 0.5 ஆகும்.



படம் 5.8 OK, TK வெப்பநிலைகளில் f(E) சார்பு (E_F பெர்மி ஆற்றல்)

இவ்விளக்கத்திலிருந்து F(E) நிறைவுபெற்ற ஆற்றல் நிலைகளைப் பற்றி தெரிவிக்கிறது என்பதை அறிந்து கொள்ளலாம். அதாவது ஒரு குறிப்பிட்ட E என்ற ஆற்றல் நிலை நிறைவுற்ற ஆற்றல் நிலையாக இருப்பதற்கான வாய்ப்பை பெர்மி சார்பு தெரிவிக்கிறது.

பெர்மி ஆற்றல்

T=0 என்ற வெப்பநிலையில், தாழ்ந்த ஆற்றல் நிலையிலிருந்து படிப்படியாக ஆற்றல் நிலைகள் நிரப்பப்படுகின்றன. தாழ்ந்த ஆற்றல் நிலைகள் நிரப்பப்படாமல், உயராற்றல் நிலைகள் நிரப்பப்படுவதில்லை. அதாவது சார்பிலாச் சுழி வெப்பநிலையில் E_{F0} நிறைவு மற்றும் வெற்று ஆற்றல் நிலைகளைப் பிரித்துக் காட்டுகிறது. சுழியற்ற பிற வெப்பநிலைகளில் பெர்மி ஆற்றல் E_F என்பது எந்த ஆற்றலில் பெர்மி சார்பு F(E)–ன் மதிப்பு ½ ஆக இருக்கிறதோ அந்த ஆற்றலாகும். அதாவது எந்த ஆற்றல் நிலை, அது பெர்மியானால் நிரப்பப்படுவதற்கான வாய்ப்பு 1/2 ஆகப் பெற்றிருக்கிறதோ அந்த நிலையின் ஆற்றலாகும்.

சுழிவெப்பநிலையில் பெர்மி ஆற்றலின் E_{F0} மதிப்பைக் கணக்கிடுவோம்.

$$N = \int_0^{E_{Fo}} n(E)\, dE = \int_0^{E_{Fo}} F(E)\, g(E)\, dE$$

$(E < E_{Fo})$ எனில், $F(E) = 1$

$$N = \int_0^{E_{Fo}} g(E)\, dE$$

இதில் g(E) என்பது உந்த இடவெளியில், **E** மற்றும் (E+dE)க்கு இடையேயான ஆற்றல் நிலை எண்ணிக்கையாகும். உந்த-இடவெளியில் g(p) dpன் மதிப்பை அறிந்து அதிலிருந்து g(E) dE–ன் மதிப்பை வருவிக்கலாம். g(p)dp என்பது p, p+dp என்ற உந்த ஆரமுடைய ஒரு மைய கோளங்களுக்கிடைப்பட்ட உந்த ஆற்றல் நிலைகளின் எண்ணிக்கையாகும்.

$$g(p)dp = 2.V\,(4\pi p^2 dp)/h^3$$

ஓர் நுண்ணறையில், +1/2, -1/2 என்ற இரண்டு தற்சுழற்சி கொண்ட எலக்ட்ரான்கள் இருக்க முடியுமாதலால் g(p)dp 2ஆல் பெருக்கப்பட்டுள்ளது. v என்பது பருமன். $E=p^2/2m$ என்ற தொடர்பின்மூலம் இதை g(E) dE ஆக மாற்றிக்கொள்ள முடியும்.

$$g(E)dE = V/2\pi^2\,(2m/h^2)^{3/2}\,E^{1/2}\,dE$$

இம்மதிப்பைப் பதிலீடு செய்து N–இன் மதிப்பைப் பெறலாம்.

$$N = \int_0^{E_{Fo}} V/2\pi^2\,(2m/h^2)^{3/2}\,E^{1/2}\,dE$$

$$N = (1/3\pi^2)\,(2m/h^2)^{3/2}\,E_{Fo}^{3/2}$$

அல்லது

$$E_{Fo} = h^2/2m\,(3\pi^2/V)^{2/3} = h^2/2m\,(3\pi^2 n_e)^{2/3}$$

இதில் n_e என்பது ஓரலகுப் பருமனில் உள்ள எலக்ட்ரான்களின் எண்ணிக்கையாகும். இதுவே O K வெப்பநிலையில் எலக்ட்ரான் வளிமத்தில் உயர்ஆற்றல் நிலையிலுள்ள எலக்ட்ரானின் ஆற்றலாகும்.

பெர்மி ஆற்றலைக் கொண்டு பெர்மி அலை வெக்டார், k_f பெர்மி வேகம் v_f மற்றும் பெர்மி வெப்பநிலை T_F போன்றவற்றை வரையறுக்க முடியும்.

$$E = \frac{p^2}{2m} = \frac{h^2}{2m} \text{ என்பதால்}$$

$$E_{F0} = \frac{h^2 k_F^2}{2m} = \frac{1}{2} m v_f^2 = k_B T_F$$

$$T_F = \frac{E_{Fo}}{k_B} = \frac{h^2}{2mk_B} (3\pi^2 n_e)^{2/3}$$

பெர்மி வெப்பநிலை சீர்குலைவின் தரத்தைப் பொறுத்த வரையில் ஒரு நிலைமாற்றுப் பெயர்ச்சி வெப்பநிலையாகும். $T << T_F$ எனில் அதாவது $k_B T << E_{FO}$ என்றால், அது வன்னிலைச் சீர்குலைவுற்ற பங்கீட்டுத்தனம் (strongly degenerate) என்றும் $T >> T_F$ எனில் அதாவது $k_B T >> E_{FO}$ என்றால், அது மென்னிலைச்சீர் குலைவுற்ற பங்கீட்டுத்தனம் (weakly degenerate) என்றும் கூறப்படும்.

சார்பிலாச் சுழிவெப்பநிலையில் ஓரலகு ஆற்றல் நெடுக்கையில் உள்ள எலக்ட்ரான்களின் எண்ணிக்கை

ஓரலகு ஆற்றல் நெடுக்கையில் உள்ள எலக்ட்ரான்களின் எண்ணிக்கை என்பது நிலைஅடர்த்தியாகும். இது எலக்ட்ரான் செறிவிற்கும் ஆற்றலுக்கும் உள்ள தகவிற்குச் சமம்.

$$D(E) = dn(E) / dE = f(E)\, g(E)$$

$$= \frac{1}{2\pi^2}\left(\frac{2m}{h^2}\right)^{2/3} E^{1/2} \qquad E < E_{Fo}$$

$$= 0 \qquad E > E_{Fo}$$

(v) சார்பிலாச் சுழிவெப்பநிலையில் எலக்ட்ரான் வளிமத்தின் சராசரி இயக்க ஆற்றல்

சார்பிலாச்சுழி வெப்பநிலையில் பல ஆற்றல் நிலைகளிலுள்ள எலக்ட்ரான்களின் மொத்த ஆற்றலை ஒவ்வொரு ஆற்றல் நிலையின் ஆற்றலையும், அவ்வாற்றல் நிலையிலுள்ள எலக்ட்ரான்களின் எண்ணிக்கையையும் பெருக்கி, ஒன்று கூட்டுவதால் பெறலாம்.

$$E_o = \Sigma\, n_i\, \varepsilon_i$$

$$E_o = \int_0^{E_{Fo}} \varepsilon\, n(\varepsilon)\, d\varepsilon$$

$$= \frac{8\pi mV}{h^3}(2m)^{1/2} \int^{E_{Fo}} E^{3/2}\, dE$$

$$= \frac{4}{5}\left(\frac{4\pi mV}{h^3}\right)(2m)^{1/2} (E_{Fo})^{5/2}$$

E_{F0}-இன் மதிப்பைப் பதிலீடு செய்ய

$$E_o = \frac{3}{5} N (E_{Fo})$$

எனவே ஓர் எலக்ட்ரான் பெற்றிருக்கும் சராசரி இயக்க ஆற்றல்

$$<E_o> = \frac{E_o}{N} = \frac{3}{5}(E_{Fo})$$

இது எலக்ட்ரானின் சுழிநிலை ஆற்றல் (zero point energy) எனப்படும்.

சராசரித் திசை வேகமும் பெர்மி திசைவேகமும்

இதிலிருந்து எலக்ட்ரானின் சராசரித் திசைவேகமும் சார்பிலாச் சுழிவெப்பநிலையில் சுழியில்லை என்று கூறலாம். OK வெப்பநிலையில் எலக்ட்ரானின் சராசரித் திசை வேகம் v_0 எனில்

$$<E_o> = \frac{3}{5}(E_{Fo}) = ½\, m <v_o>^2$$

அல்லது

$$<v_o> = \left(\frac{6}{5}\,\frac{E_{Fo}}{m}\right)^{1/2}$$

v_{F0} என்பது OK வெப்பநிலையில் பெர்மி ஆற்றல்நிலையில் எலக்ட்ரானின் திசைவேகமெனில்

$$N_{F0} = \left(\frac{2E_{Fo}}{m}\right)^{1/2}$$

எனவே

$$<v_o> = \frac{3}{5}\, v_{Fo}$$

ஒற்றை இணைதிற எலக்ட்ரான்களைக் கொண்ட உலோகங்களில் பெர்மி திசைவேகம் 10^5 கி.மீ/வி என்ற நெடுக்கையில் இருக்கிறது.

பெர்மி – டிராக் சார்பின் வெப்பநிலை பாதிப்பு

(Effect of Temperature on Fermi-Dirac distribution function)

T>OK என்ற வெப்பநிலையில் பெர்மி ஆற்றல் நிலைக்கு அருகிலுள்ள எலக்ட்ரான்கள் மட்டும் உயர்ஆற்றல் நிலைக்கு எடுத்துச் செல்லப்படுவதால் f(E)-E வரைபடத்தில் மாற்றம் ஏற்படுகிறது. E_{FO} க்கு குறைவான ஆற்றல்களில் மிகக்குறுகிய ஆற்றல் நெடுக்கைக்குள்ளே $E_{Fo}-E >> k_BT$, f(E)–இன் மதிப்பு 1ஐ எட்டி விடுகிறது. சுழிவெப்பநிலையிலிருந்து வெப்பநிலையில் அதிக மாற்றமில்லையெனில் எலக்ட்ரான்களின் பங்கீட்டுத்தனத்திலும் பெரிய மாற்றம் ஏற்படுவதில்லை என்பதை இது சுட்டிக் காட்டுகிறது. E_{FO}க்கு அருகாமையிலுள்ள ஆற்றல் நிலைகளிலுள்ள எலக்ட்ரான்களே வெப்பநிலை உயர்வால் பாதிக்கப்படுகின்றன. எனவே எலக்ட்ரான் வளிமத்தை வெப்பமூட்டி, வெப்பநிலையைச் சுழியிலிருந்து TKக்கு உயர்த்தும்போது, எல்லா எலக்ட்ரான்களும் ஆற்றலை k_BTஅளவு உயர்த்திக் கொள்வதில்லை. ஆனால் E_{FO} லிருந்து k_BT ஆற்றல் நெடுக்கைக்குள் உள்ள ஆற்றல் நிலைகளிலுள்ள எலக்ட்ரான்கள் ஆற்றலை உட்கிரகித்துக் கொண்டு உயர் ஆற்றல் நிலைக்குச் செல்கின்றன. E_{FO} லிருந்து பெருமளவு விலகி இருக்கும் ஆற்றல் நிலையிலுள்ள எலக்ட்ரான்கள் இப்படி ஆற்றலை உட்கிரகித்துக் கொண்டு கிளர்ச்சியுற்று k_BTஅளவு விலகி அங்குள்ள ஆற்றல் நிலையில் இடம்பிடிக்க முடியாது. ஏனெனில் அந்த ஆற்றல் நிலைகள் ஏற்கனவே பெர்மியான்களால் நிரப்பப்பட்டிருக்கின்றன. இதனால் $k_BT<<E_{FO}$ என்றிருக்கும்போது பங்கீட்டுத்தனத்தைச் சீர்குலைவுற்றது என்றும், $k_BT>>E_{FO}$ என்றிருக்கும்போது சீர்குலைவற்றது (தொல்லியக்க வரம்பு நிலை) என்றும் கூறுவர். அதாவது E_{FO} ஆற்றலுக்குக்கீழ் $E_F-E >> K_BT$,என்ற நிலையில் E_{Fo}ஐ விட்டு மிகவும் விலகியுள்ள நிலைகளுக்கு (மென்சீர்குலைவுற்ற நிலைகள்) f(E)–இன் மதிப்பு 1 ஆகவே இருக்கிறது. இவ்வாற்றல் நெடுக்கையில் எலக்ட்ரான்களின் பங்கீட்டுத்தனம் T=OK வெப்பநிலையில் இருந்ததுபோலவே இருக்கிறது. E_{FO}க்கு அருகாமையில் $E \sim k_BT$ என்ற நெடுக்கையில் உள்ள ஆற்றல் நிலைகளில் உள்ள எலக்ட்ரான்கள் மட்டுமே பாதிப்படைகின்றன. அதனால் f(E)-இன் மதிப்பு T=OK வெப்பநிலைக்கான மதிப்பிலிருந்து தாழ்வுறுகிறது. $E-E_{Fo} >> k_BT$, என்ற போது பெர்மி-டிராக் சார்பிலுள்ள பின்னத்தின் கீழ்பகுதியிலுள்ள 1ஐப் புறக்கணித்துவிடலாம். எனவே,

$$f(E) = e^{-(E-E_F)/k_BT}$$

என்றாகும். இது தொல்லியற்பியல் பங்கீட்டுத்தனமான போல்ட்ஸ்மான் சார்பை ஒத்திருக்கிறது.

பெர்மி ஆற்றல், வெப்பநிலைக்குஏற்ப மாற்றம் பெறுகிறது. பெர்மி ஆற்றலுக்கும், வெப்பநிலைக்குமுள்ள தொடர்பை கீழ்க்காணுமாறு எளிதாகத் தருவிக்க முடியும்.

$$E_F = E_{fo}\left(1- \frac{\pi^2 k_B^2 T^2}{12 E_F^2}\right)$$

இத்தொடர்பு பெர்மி ஆற்றல் ஒரு மாறிலியில்லை என்பதைத் தெரிவிக்கிறது. அறைவெப்பநிலையில் பாதிப்பு மிகவும் சொற்பம். ஆனால் உயர் வெப்பநிலையில் பெர்மி ஆற்றல் தாழ்வுறுகிறது. அமைப்பின் மொத்த ஆற்றலுக்கான தொடர்பிலிருந்தும் T≠OK வெப்பநிலையில் பெர்மி ஆற்றலை மதிப்பிட முடியும்.

5.5 கடத்து எலக்ட்ரான்களின் வெப்பஏற்புத்திறன்

வளிமங்களின் வெப்பஇயக்கக் கொள்கைப்படி வெப்பச் சமநிலையில் தன்னியக்கத்துடன் இயங்கும் ஒரு துகளின் ஆற்றல் அது பெற்றிருக்கின்ற ஓர் உரிமைப்படிக்கு ½ k_BT, வீதம் பெற்றிருக்கிறது. கடத்து எலக்ட்ரான்கள் இடப்பெயர்வு காரணமாக மூன்று உரிமைப் படிகளைப் பெற்றிருப்பதால், அதன் சராசரி ஆற்றல் $(3/2)k_BT$ ஆகும். 1 மோல் செறிவுள்ள ஒற்றை இணைதிற எலக்ட்ரான்களைக்கொண்ட உலோகத்தில் எலக்ட்ரான் வளிமத்தின் ஆற்றல்

$$U = 3/2\ RT$$

எனவே கடத்து எலக்ட்ரான்கள், உலோகத்தின் வெப்பஏற்புத்திறனுக்கு அளிக்கும் பங்களிப்பு

$$C_v = \left(\frac{dU}{dT}\right)_v = \frac{3}{2}R$$

வெப்ப ஏற்புத் திறனுக்கு எலக்ட்ரான்களின் பங்களிப்பு இந்த அளவில் இல்லை என்பது உறுதியாக நிறுவப்பட்டிருக்கிறது. இந்த முரண்பாடு தொல்லியக்க இயற்பியலின் இயலாமையைத் தெரிவிக்கிறது. குவாண்டம் கொள்கையில் வெப்ப ஆற்றலை உட்கிரகிக்கும் எலக்ட்ரான்களின் எண்ணிக்கையில் மேற்கொள்ளப்படும் தவறான முடிவு, அந்த முரண்பாட்டிற்குக் காரணம் என அறியப்பட்டுள்ளது.

பெர்மி-டிராக் புள்ளியியல் கொள்கை மூலம் எலக்ட்ரான் வளிமத்தின் வெப்ப ஏற்புத்திறனை மதிப்பீடு செய்ய முடியும். எலக்ட்ரான் வளிமத்தை வெப்பமூட்டி, அதன் வெப்பநிலையை TK வரை உயர்த்தும்போது, பெர்மி ஆற்றலுக்குக் கீழ் k_BT என்ற ஆற்றல் நெடுக்கைக்குட்பட்ட ஆற்றல் நிலைகளிலுள்ள எலக்ட்ரான்கள் மட்டும், ஆற்றலை உட்கிரகித்து, தன் ஆற்றலை k_BT அளவு உயர்த்திக் கொண்டு வெற்று ஆற்றல் நிலைகளுக்குச் செல்கின்றன. ஒரு மோல் செறிவுள்ள எலக்ட்ரான்களில் இப்படி இடம் பெயரும் எலக்ட்ரான்களின் எண்ணிக்கை

$$N\frac{k_BT}{E_{Fo}} = N\frac{T}{T_F}$$

$C_v=3/2N\,k_B$ என்ற தொடர்பில் இம்மதிப்பைப் பதிலீடு செய்ய

$$C_v\frac{3}{2}R\frac{T}{T_F}$$

T=300K, T_F=30,000K என்று கொண்டு C_vஇன் மதிப்பைக் கணக்கிட்டால், குவாண்டம் கொள்கை தரும் மதிப்பு தொல்லியக்க் இயற்பியல் நிறுவும் மதிப்பில் 0.01 பங்குதான். இது 3/2R–இன் மதிப்பைவிட மிகவும் குறைவானது. சோதனை முடிவுகளுக்கு இக்கருத்து இணக்கமாக இருக்கிறது.

பெர்மி-டிராக் புள்ளியியல் கொள்கையின் அடிப்படையில் எலக்ட்ரான் வளிமத்தின் வெப்ப ஏற்புத்திறனுக்கான ஒரு தொடர்பைப் பெறுவோம். வெப்பச் சமநிலையில் E, E+dE என்ற ஆற்றல் நெடுக்கைக்குட்பட்ட ஆற்றல் நிலைகளில் உள்ள எலக்ட்ரான்களின் எண்ணிக்கை dn(E).

$$dn(E) = f(E)\, g(E)\, dE$$

$$N = \int dn(E) = \frac{1}{2\pi^2}\left(\frac{2m}{h^2}\right)^{3/2} \int_0^\infty E^{1/2} F(E)\, dE$$

எலக்ட்ரான் வளிமத்தின் மொத்த ஆற்றல்

$$\Sigma n_i E_i = \frac{1}{2\pi^2}\left(\frac{2m}{h^2}\right)^{3/2} \int_0^\infty E^{3/2} F(E)\, dE$$

எனவே ஓர் எலக்ட்ரானின் சராசரி ஆற்றலை

$$\langle E\rangle = \frac{\Sigma n_i E_i}{N} = \frac{1}{2\pi^2 N}\left(\frac{2m}{h^2}\right)^{3/2} \int_0^\infty E^{3/2} F(E)\, dE$$

மோலார் வெப்பஏற்புத்திறன் $C_v = N[d(E)/dT]$. பகுதி வழித்தொகையாக்கத்தின் மூலம்

$$\langle E\rangle = \frac{1}{2\pi^2 N}\left(\frac{2m}{h^2}\right)^{3/2}\left(F(E)\, 2/3\, E^{5/2}\Big|_0^\infty - \int_0^\infty \frac{dF(E)}{dE}\, 2/5\, E^{5/2}\, dE\right)$$

பகர அடைப்பிற்குள் உள்ள சார்பு வரம்பு மதிப்புகளில் சுழியாகிறது. எனவே

$$\langle E \rangle = -\frac{1}{2\pi^2 N}\left(\frac{2m}{h^2}\right)^{3/2}\int_0^{\infty}\frac{2}{5}\frac{dF(E)}{dE}E^{5/2}\,dE$$

$E^{5/2}$ என்ற உறுப்பை, டெய்லர் தொடர்மூலம் $E=E_F$ என்ற புள்ளியில் விரிவுபடுத்திக் கொள்ளலாம்.

$$\int\frac{dF(E)}{dE}\phi(E)\,dE = a_0\,\phi(E)\Big|_{E=E_F} + a_1\,\phi(E)\Big|_{E=E_F} + a_2\,\phi(E)\Big|_{E=E_F} + \ldots$$

இதன் மதிப்பு a_0, a_1, a_2 ன் மதிப்புகளைக் கண்டறிந்து <E> இன் மதிப்பை அறியலாம்.

$$\langle E \rangle = \frac{1}{2\pi^2 N}\left(\frac{2m}{h^2}\right)^{3/2}\frac{2}{5}E_F^{5/2}\left(1+\frac{5}{8}\left(\frac{\pi k_B T}{E_F}\right)^2\right)$$

இதில் E_{F_0} ஐ உட்புகுத்த

$$\langle E \rangle = -\left(\frac{3}{5}\right)E_{F_0}\left(\frac{E_F}{E_{F_0}}\right)^{5/2}\left(1+\frac{5}{8}\frac{\pi k_B T}{E_{F_0}}\right)^2$$

E_F / E_{F_0} -இன் மதிப்பைப் பதிலீடு செய்ய

$$\langle E \rangle = \frac{3}{5} E_{Fo} \left(1 - \frac{1}{12}\left(\frac{\pi k_B T}{E_{Fo}}\right)^2\right)^{5/2} \left(1 + \frac{5}{8}\left(\frac{\pi k_B T}{E_{Fo}}\right)^2\right)$$

$$= \frac{3}{5} E_{Fo} \left(1 - \frac{5}{24}\left(\frac{\pi k_B T}{E_{Fo}}\right)^2\right) \left(1 + \frac{5}{8}\left(\frac{\pi k_B T}{E_{Fo}}\right)^2\right)$$

$$= \frac{3}{5} E_{Fo} \left(1 + \frac{5}{12}\left(\frac{\pi k_B T}{E_{Fo}}\right)^2\right)$$

$C_v = N\, d(E)/dT$ என்பதால்

$$C_v = N \frac{d}{dT} \left(\frac{3}{5} E_{Fo} + \frac{(\pi k_B T)^2}{4E_{Fo}}\right)$$

$$C_v = \frac{1}{2} R\pi^2 \frac{k_B T}{E_{Fo}}$$

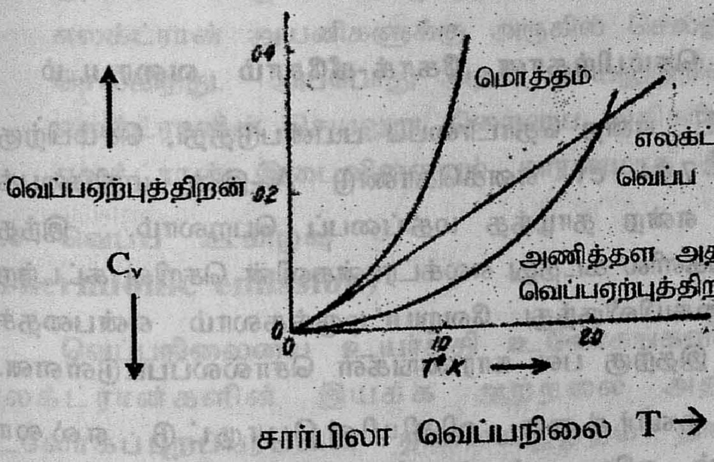
E_{Fo} -இன் மதிப்பைப் பதிலீடு செய்ய

$$C_v = \frac{mk^2_B}{3h^2} (3\pi^2 n)^{1/3}\, T$$

இத்தொடர்பு எலக்ட்ரானின் வெப்பஏற்புத்திறன் சார்பிலா வெப்பநிலைக்கு நேர்விகிதத்திலிருக்கிறது என்று தெரிவிக்கிறது. தாழ்வான வெப்பநிலைகளில் படிக அணித்தள அதிர்வுகளோடு தொடர்புடைய வெப்பஏற்புத்திறன் சார்பிலா வெப்பநிலையின் மும்மடிக்கு நேர் விகிதத்திலிருக்கிறது. எனவே தாழ்ந்த வெப்பநிலைகளில் உலோகத்தின் மொத்த வெப்பஏற்புத்திறன்

$$C_v \text{(மொத்தம்)} = AT + BT^3$$

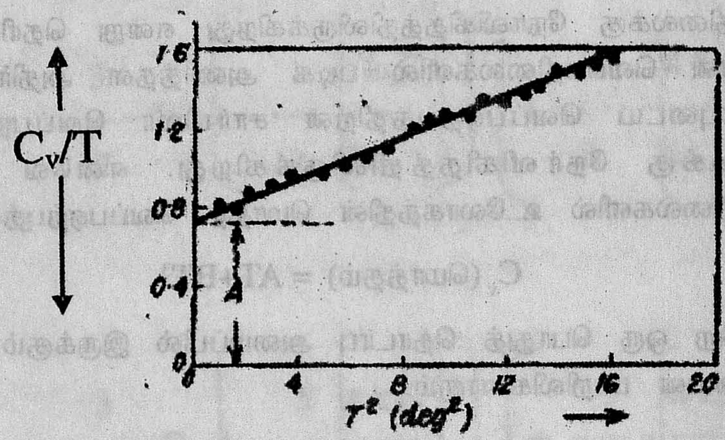
என்ற ஒரு பொதுத் தொடர்பு அமைப்பில் இருக்கும். இதில் A,B என்பன மாறிலிகளாகும்.



படம் 5.9 கோபால்டின் வெப்பஏற்புத் திறனுக்கு எலக்ட்ரான் மற்றும் படிக அணித்தள அதிர்வுகளின் பங்களிப்பு

படம் 5.9ல் கோபால்டின் வெப்ப ஏற்புத்திறனுக்கு எலக்ட்ரான் மற்றும் படிக அணித்தள அதிர்வுகளின் பங்களிப்பு வரைபடமாகக் காட்டப்பட்டுள்ளது. எலக்ட்ரான்களின் பங்களிப்பு தாழ்ந்த வெப்பநிலைகளில் குறிப்பிடும்படியான பங்கு வகிக்கிறது என்பதை இதிலிருந்து தெரிந்துகொள்ள முடிகிறது.

கோக் மற்றும் கீசோம் (Koh and Keesom) என்ற விஞ்ஞானிகள் செம்பிற்கு A–இன் மதிப்பு 1.78 என்று சோதனை வாயிலாகக் கண்டறிந்தார்கள். C_v/Tக்கும் T^2க்கும் ஒரு வரைபடம் வரைந்தால் அது ஓர் நேர்கோடாக அமையும். அதன் வெட்டுப்புள்ளியிலிருந்து A–இன் மதிப்பை அறிய முடியும்.



படம் 5.10 செம்பிற்கான கோக்-கீசோம் வரைபடம்

$C_v=1/2\ \pi^2 R\ k_B\ /E_{FO}$ என்ற தொடர்பைப் பயன்படுத்தி, செம்பிற்கு E_{FO}–இன் மதிப்பை 7.04 ev எனக்கொண்டு A–இன் மதிப்பைக் கணக்கிட்டால் 1.24 என்ற தாழ்ந்த மதிப்பைப் பெறலாம். இந்த முரண்பாடு உலோகங்களில் கடத்து எலக்ட்ரான்களின் செறிவு கட்டற்ற எலக்ட்ரான் கொள்கையிலிருந்து வேறுபட்டிருக்கலாம் என்பதைச் சுட்டிக்காட்டுகிறது. இதற்கு பல காரணங்கள் சொல்லப்பட்டுள்ளன.

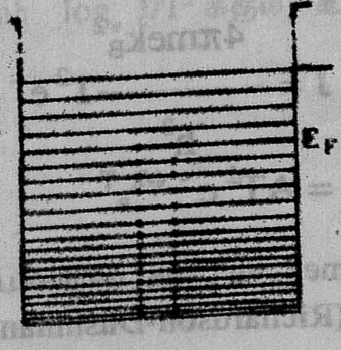
1. பௌலியின் தவிர்க்கை விதியின்பொருட்டு எல்லா எலக்ட்ரான்களும் ஒரே ஆற்றல் நிலையில் இருப்பதில்லை. இதனால் தாழ்ந்த வெப்பநிலையிலும் கூட எலக்ட்ரான்கள் குறிப்பிடும்படியான இயக்க ஆற்றலை உடையதாக இருக்கின்றன. வெப்பக்கிளர்ச்சியூட்டுதல் என்பது பெர்மி ஆற்றலுக்கு அருகில் உள்ள எலக்ட்ரான்களுக்கு மட்டுமே இயலுவதாக இருக்கிறது. பெர்மி ஆற்றலுக்கு $k_B T$ ஆற்றலுக்கும் விலகி இருக்கும் எலக்ட்ரான்களுக்கு வெற்றாற்றல் நிலைக்குச் செல்லத் தேவையான ஆற்றல் இல்லாமையால் பாதிப்படைவதில்லை. அதனால் தாழ்ந்த வெப்பநிலையில் குறைந்த எண்ணிக்கையிலான எலக்ட்ரான்கள் மட்டுமே வெப்பஏற்புத்திறனில் பங்கேற்கின்றன. ஆற்றல் நிலை அடர்த்தி, ஆற்றல் நெடுக்கையில் சீராக இல்லாததும் இதற்குக் காரணமாகிறது.

2. கடத்து எலக்ட்ரான், கட்டுறுதியான படிகக் கட்டமைப்பின் அலைச்சீர்மை கொண்ட (periodic) நிலையழுத்தத்துடன் மேற்கொள்ளும் இடையீட்டுச் செயலினால், இயங்கும் எலக்ட்ரானின் உண்மையான நிறையில் (m) அதிகரிப்பு ஏற்படுகிறது. இதனை அதன் செயலுறுநிறை (effective mass) m^* என்பர். செம்பு அணுவில் கடத்து எலக்ட்ரானின் செயலுறுநிறை $m^* = 1.5m$ ஆகும்.

3. கடத்து எலக்ட்ரான் போனானுடன் இடையீட்டுச் செயல் புரியலாம். இயங்கும் எலக்ட்ரான் அணித்தளக் கட்டமைப்பை நுண்ணிய அளவில் உருச்சிதைவிற்கு உள்ளாக்குகிறது. அதனால் அந்த எலக்ட்ரான் அயனிகளுக்கு அருகில் செல்லும்போது இழுத்துச் செல்கிறது. அப்போது அதன் செயலுறுநிறை அதிகரிக்கிறது. எலக்ட்ரானின் செயலுறு நிறையை அதிகரிப்பதில் எலக்ட்ரான்-எலக்ட்ரான் இடைவினையும் காரணமாக இருக்கமுடியும்.

5.6 வெப்ப உமிழ்வு (Thermionic emission)

வெப்பநிலையை உயர்த்தி உலோகங்களில் உள்ள கடத்தி எலக்ட்ரான்களின் இயக்க ஆற்றலை அதிகரிக்க முடியும். உலோகப்புறப்பரப்பின் நிலையழுத்தம் தாழ்வாக இருக்கும் உலோகங்களில் இந்த எலக்ட்ரான்களுக்குப் போதிய வெப்ப ஆற்றலூட்டி இயல்பாக வெளியேறுமாறு செய்ய முடியும். சீசியம் போன்ற உலோகங்களில் இதனை எளிதாகச் செய்ய முடிகிறது. இதை வெப்ப உமிழ்வு என்றும், இதன்மூலம் வெளிப்படும் எலக்ட்ரான்களை வெப்ப எலக்ட்ரான்கள் (thermions) என்றும் கூறுவர்.



படம் 5.11 கட்டற்ற எலக்ட்ரான் மாதிரியமைப்பு

பெர்மி-டிராக் புள்ளியியல் கொள்கைப்படி சார்பிலாச் சுழி வெப்பநிலையில் ஓர் எலக்ட்ரான் பெரும ஆற்றலாகப் பெர்மி ஆற்றலைக் கொண்டதாக இருக்கமுடியும். மேலும் பெர்மி ஆற்றல் வெப்பநிலை உயர்விற்குக் குறிப்பிடும்படியான மாற்றம் பெறுவதில்லை. சாதாரண வெப்பநிலைகளில் கடத்து எலக்ட்ரான்கள் உலோகப்பரப்பை விட்டு வெளியேற இந்த பெர்மி ஆற்றல் போதுமானதாக இல்லை. உலோகத்திற்குள் தன்னிச்சையாக இயங்கும் கடத்து எலக்ட்ரான்கள், சாதாரணமாக உலோகப்பரப்பை விட்டு வெளியேறாதிருப்பதற்குக் காரணம், இவ்வெலக்ட்ரான்கள் எல்லாம் ஓர் நிலையமுத்தக் கிணற்றில் (potential well) இருப்பதுதான். கட்டற்ற எலக்ட்ரான் கொள்கைப்படி, உலோகத்தினுள் வெற்றிட வெளியோடு ஒப்பிட, ஒரு மாறா நேர்மின்னழுத்தம் செயல்படுவதாகக் கற்பனை செய்து கொள்ளலாம். இம்மின்னழுத்தத்தினால் எலக்ட்ரான்கள் உலோகத்தினுள் கட்டுண்டிருக்கின்றன. கடத்து எலக்ட்ரான்களை உலோகத்திலிருந்து வெளியேற்ற வேண்டுமானால் குறைந்தது இம்மின்னழுத்தத்திற்குச் சமமான ஆற்றலை ஊட்டவேண்டும். இது சிறும வெளியேற்று ஆற்றல் (work function) எனப்படும். இதனை ϕ என்றும் குறிப்பிடுவர்.

$$\phi = W - E_{Fo}$$

உலோகத்தைச் சூடுபடுத்தும்போது, அதிலுள்ள கட்டற்ற எலக்ட்ரான்களும் வெப்பஆற்றலைப் பெறுகின்றன. இந்த வெப்பஆற்றல் $W-E_{Fo}$ஐ விட அதிகமாக இருந்தால், வெப்ப உமிழ்வு நிகழ்கிறது. அப்போது $(W-E_{Fo})$ஐ க்கும் அதிகமான வெப்ப ஆற்றல், வெப்ப எலக்ட்ரானின் இயக்க ஆற்றலாக மாறுகிறது. பெர்மி-டிராக் புள்ளியியல் கொண்டு, வெப்பத்தால் உமிழப்படும் எலக்ட்ரான் செறிவை (J)ஐ கீழ்க்காணுமாறு தருவிக்க இயலும்.

$$J = \frac{4\pi m e k_B^2}{h^3} T^2 e^{-\phi/k_B T}$$

$$= AT^2 e^{-\phi/k_B T}$$

இதில் $A = 4\pi m e k_B^2/h^3$, ஒரு மாறிலியாகும். இச்சமன்பாட்டை ரிச்சட்சன்-டுஸ்மான் (Richardson-Dushman) தொடர்பு என்பர். இது உமிழ்வு மின்னோட்டத்தின் செறிவு, உலோகத்தின் வெளியேற்று

ஆற்றல் ϕ மற்றும் சார்பிலா வெப்பநிலையின் இருமடி இவற்றிற்கு நேர்விகிதத்தில் இருக்கிறது என்று தெரிவிக்கிறது.

சோதனை மூலம் உறுதிப்படுத்துதல்

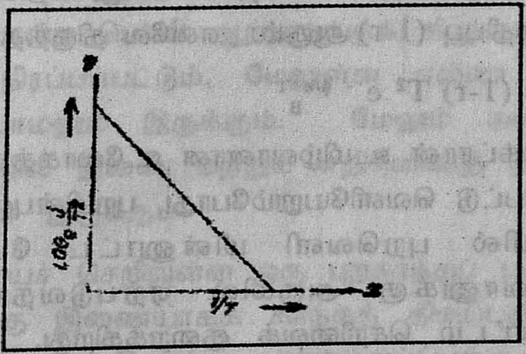
ரிச்சட்சன்-டுஸ்மான் சமன்பாட்டிலிருந்து

$$J/T^2 = A\,e^{-\phi/k_B T}$$

$$\log_e \frac{J}{T^2} = \log_e A - \frac{\phi}{k_B T} = \log_e A - \frac{b}{T}$$

1/Tக்கும் $\log_e J/T^2$ க்கும் ஒரு வரைபடம் வரைந்தால், அது ஒரு நேர்கோட்டைத் தருகிறது. Y–அச்சு வெட்டு $\log_e A$-இன் மதிப்பையும், நேர்கோட்டின் சரிவு b–இன் மதிப்பையும் கொடுக்கின்றன. இதனைக்கொண்டு ஓர் உலோகத்தின் வெளியேற்று ஆற்றலை மதிப்பிட்டறிய முடியும். சில உலோகங்களின் சோதனை மதிப்புகள் அட்டவணையில் கொடுக்கப்பட்டுள்ளன.

loge J/T^2



படம் 5.12 1/T க்கும் $\log_e J/T^2$ க்கும் உள்ள வரைபடம்

அட்டவணை – 3

உலோகங்களின் வெளியேற்று ஆற்றல்

உலோகம்	$Ax10^{-4}$ ஆம்/மீ/கெ^{2}	$Bx10^{-4}$ ஆம்/மீ/கெ^{3}	உருகுநிலை கெ	வெளியேற்று ஆற்றல்(எ.வோ)
கால்சியம்	60.2	26,000	1083	2.24
கார்பன்	60.2	46,000	3773	4.34
சீசியம்	60.2	21,000	299	1.81
பிளாட்டினம்	60.2	59,000	2028	5.32

கொள்கை முடிவுகள், சோதனை முடிவுகளோடு முழுமையாகப் பொருந்தவில்லை. இந்த முரண்பாட்டிற்கான விளக்கத்தை டுஸ்மான் குவாண்டம் கொள்கையின் அடிப்படையில் வெளியிட்டார். மேற்கண்ட விளக்கத்தில் வெப்ப எலக்ட்ரான் உமிழ்வின் செலுத்துகைக் குணகம் 1 (transmission coefficient) எனக் கொள்ளப்பட்டுள்ளது. ஆனால் குவாண்டம் கொள்கைப்படி, r என்பது எதிரொளிப்புக் குணகமானால் இதன் மதிப்பு (1-r) ஆகும். எனவே திருத்தம் செய்யப்பட்ட தொடர்பு

$$J = (1-r)\,T^2\,e^{-\phi/k_B T}$$

எலக்ட்ரான் உமிழ்வானான உலோகத்திலிருந்து எலக்ட்ரான்கள் உமிழப்பட்டு வெளியேறும்போது, புறமின்புலம் ஏதும் பயன்படுத்தாத நிலையில் புறவெளி மின்னூட்ட மேகம் (space charge), உமிழ்வானுக்கு அருகில் ஏற்படுவதால், வெப்ப உமிழ்வு மின்னோட்டம் செறிவைக் குறைக்கிறது. இதைத் தவிர்ப்பதற்குப் புறமின்புலம் ஒன்றைப் பயன்படுத்துவது அவசியமாகும். உமிழ்வானிலிருந்து எலக்ட்ரான் வெளியேற்றப்பட்டவுடன், உடனடியாக அங்கிருந்து எலக்ட்ரான்களை அகற்றிச்செல்ல இந்தப் புறமின்புலத்தின் வலிமை போதிய வலுவுள்ளதாக இருக்க வேண்டும். ஆனால் புறமின்புலம் செயல்படுத்தும்போது, சிறும வெளியேற்று ஆற்றலின் மதிப்பும் மாறுகிறது. புலச்செறிவு அதிகரிக்க, இது குறைகிறது. எனவே வெவ்வேறு புலச்செறிவுகளில் J(T)யின் மதிப்பை அறியவேண்டியதாக இருக்கிறது.

வெப்பம்சார்ந்த விரிவாக்கத்தினால் ϕஇன் மதிப்பு வெப்பநிலை சார்ந்த மாறியாக இருக்கிறது. உலோகங்களில் $d\phi/dT \sim 10^{-4}$ எ.வோ/கெ என்ற அளவில் உள்ளது. இது ϕஐ வெப்பநிலை சாராத ஒரு மாறிலியாகக் கொள்வது தவறெனச் சுட்டிக் காட்டுகிறது.

உண்மையில் உமிழ்வானிலிருந்து வெளியேறும் வெப்பஉமிழ்வு மின்னோட்டத்தின் செறிவு, அதன் புறப்பரப்பின் தன்மையைப் பொறுத்திருக்கிறது. பரப்பின் தூய்மையற்ற தன்மை, பரப்பின் சொரசொரப்பான தன்மை, வளைவுகளினால் வடிவியல் பரப்பைவிடக் கூடுதல் பரப்பைக் கொண்டிருத்தல், திசையொவ்வா (non-isotropic) பண்பினைக் கொண்ட படிகக் கட்டமைப்பு போன்ற பல்வேறு காரணங்கள் J-இன் மதிப்பைப் பாதிக்கின்றன.

5.7 பாராகாந்தம் பற்றிய பௌலியின் கொள்கை

உலோகங்கள், கட்டற்ற எலக்ட்ரான்கள் காரணமாக வெப்பநிலை சாரா ஒரு பாரா காந்தத் தன்மையைப் பெற்றிருக்கின்றன. வலிமையால் மிகக் குறைந்த இதனை, பௌலி பாரா காந்தம் என்பர்.

T=OK என்ற வெப்பநிலையில், புறகாந்தப்புலம் செயல்படாதபோது, E_{F_0} என்ற பெர்மி ஆற்றலுக்குக் கீழுள்ள எல்லா ஆற்றல் நிலைகளும் நிரப்பப்பட்டும், மேலுள்ள எல்லா ஆற்றல் நிலைகளும் நிரப்பப்படாமலும் இருக்கும். மேலும் அமைப்பில் சமஅளவு எண்ணிக்கையில் இணை மற்றும் எதிரிணைத் தற்சுழற்சி கொண்ட எலக்ட்ரான்கள் இருக்கும்.

B என்ற காந்தப் பாயச் செறிவுள்ள ஒரு புறகாந்தப் புலத்தைச் செயல்படுத்த, புலத்திற்கு இணையாகக் காந்தத் திருப்புதிறன் μ_B கொண்ட எலக்ட்ரான்கள் - $\mu_B B$ என்ற ஆற்றலைப்பெற்று ஆற்றல் நிலைகளைத் தாழ்த்திக் கொள்கின்றன. ஆனால் எதிரிணையாகக் காந்தத் திருப்புதிறன் கொண்ட எலக்ட்ரான் $\mu_B B$ என்ற ஆற்றலைப் பெற்று ஆற்றல் நிலைகளை உயர்த்திக் கொள்கின்றன. (μ_B என்பது போர் மாக்னெட்டானாகும்). இதனால் இருவேறு தற்சுழற்சி கொண்ட எலக்ட்ரான்களின் பெரும ஆற்றல் நிலைகளின் ஆற்றல் வேறுபடுகின்றது. ஆனால் ஒரு குறிப்பிட்ட வெப்பநிலையில் இவ்விரு தற்சுழற்சி கொண்ட எலக்ட்ரான்களும், ஒத்த, சமமான பெரும ஆற்றல் நிலையை, அதற்குக் கீழுள்ள எல்லா ஆற்றல் நிலைகளும் நிரம்பியவாறு பெற்றிருக்கவேண்டும். பெர்மி ஆற்றல் நிலைக்கு

அருகிலுள்ள சில எதிரிணை எலக்ட்ரான்கள் இணை எலக்ட்ரான்களாக மாறினால் மட்டுமே இது நிகழக்கூடும். இதனால் புறகாந்தப்புலத்தில் எலக்ட்ரான் வளிமத்தில் கூடுதலான எண்ணிக்கையில் உள்ள இணை எலக்ட்ரான்கள் ஒரு பாரா காந்தத்தன்மையை விளைவிக்கின்றன.

n_p என்பது ஓரலகுப் பருமனில் உள்ள இணை எலக்ட்ரான்களின் எண்ணிக்கை எனில்

$$n_p = 1/2 \int_{-\mu_B B}^{E_F} f(E)\, D(E+\mu_B B)\, dE$$

இதில் $1/2\, D(E+\mu_B B)$ என்பது இணைத் தற்சுழற்சி கொண்ட எலக்ட்ரான்களின் நிலை அடர்த்தியாகும். தொகையாக்க நெடுக்கையில் $f(E) = 1$ என்பதால்,

$$D(E+\mu_B B) = \frac{1}{2\pi^2}\left(\frac{2m}{h^2}\right)^{3/2} (E+\mu_B B)^{1/2}$$

எனவே

$$n_p = 1/2\, \frac{1}{2\pi^2}\left(\frac{2m}{h^2}\right)^{3/2} \int_{-\mu_B B}^{E_F} (E+\mu_B B)^{1/2}\, dE$$

இதனைப்போல எதிரிணை எலக்ட்ரான்களுக்கு, வருவிக்கமுடியும்.

$$n_a = 1/2\, \frac{1}{2\pi^2}\left(\frac{2m}{h^2}\right)^{3/2} \int_{+\mu_B B}^{E_F} (E-\mu_B B)^{1/2}\, dE$$

எனவே காந்தமாக்கத்திறன்

$$M = \mu_B (n_p - n_a)$$

இங்குள்ள தொகையாக்கத்தின் கீழ்வரம்பைசட சுழியாக்கிக் கொள்ளலாம். ஏனெனில் E=0 அருகில் வெகு சில ஆற்றல் நிலைகளே உள்ளன. மேலும், $\mu_B B << E_F$ எனவே

$$M = \frac{\mu_B}{2}\frac{1}{2\pi^2}\left(\frac{2m}{h^2}\right)^{3/2}\left(\int_0^{E_F}(E+\mu_B B)^{1/2}\,dE - \int_0^{E_F}(E-\mu_B B)\,dE\right)$$

தொகையாக்க வரம்புகள் சமமாக இருப்பதால்

$$(E+\mu_B B)^{1/2} - (E-\mu_B B)^{1/2} = \mu_B B / \sqrt{E}$$

$$M = \frac{\mu_B}{2}\frac{1}{2\pi^2}\left(\frac{2m}{h^2}\right)^{3/2}\mu_B B\int_0^{E_F} dE / E^{1/2}$$

$$= \frac{\mu_B^2}{2\pi^2}\left(\frac{2m}{h^2}\right)^{3/2} E_F^{1/2}\,B$$

பாராகாந்த ஏற்புத்திறன்

$$\chi = \frac{M}{H}\mu_0\frac{1}{2\pi^2}\left(\frac{2m}{h^2}\right)^{3/2}\mu_B^2 E_F^{1/2}$$

இதில் E_Fஇன் மதிப்பைப் பதிலீடு செய்தால்

$$\chi = \mu_0\frac{3\pi^2 m}{2\pi^2}\frac{\mu_B^2}{E_F}$$

$$\chi = \frac{3}{2}\mu_0\frac{n\mu_B^2}{2k_B T_F}$$

நம்முடைய வழிமுறையில் வெப்பநிலை OK எனக் கொள்ளப்பட்டுள்ளது. உயர்வெப்பநிலையிலும் இம்முடிவு சரியானதாக இருக்கின்றது. பெர்மி-டிராக் புள்ளியியல் கொள்கை, எலக்ட்ரான் வளிமத்தின் பாராகாந்தத் தன்மையைச் சோதனை முடிவுகளுக்கு ஏற்ப இணக்கமான முறையில் விளக்குகிறது.

5.8 ஷாட்கி விளைவு

வலிமையான மின்புலத்தைச் செயல்படுத்தி அதன்மூலம் ஓர் உலோகப் பரப்பிலிருந்து எலக்ட்ரான் வெளியேறுமாறு செய்யலாம். இதனைப் புலஉமிழ்வு (field emission) என்பர். ஒரு மின்புலத்தைச் செயல்படுத்தும்போது, உலோகப்பரப்பின் நிலையழுத்தத் தடுப்புச் சுவரின் உயரத்தைக் குறைத்து, எலக்ட்ரான் உமிழ்வைத் தூண்டுகிறது. மின்புலச் செறிவைச் சார்ந்த எலக்ட்ரான் உமிழ்வு ஷ்காட்கி விளைவு எனப்படும்.

ஷ்காட்கி விளைவைப் புரிந்து கொள்ள, உலோகப்பரப்பில் அமைந்துள்ள நிலையழுத்தத் தடுப்பை முழுமையாக விவரிக்க வேண்டியிருக்கின்றது. இதில் உலோகப் பரப்பிற்கு அருகில் வெளியே இருக்கும் ஓர் எலக்ட்ரான்மீது செயல்படும் விசையையும் கணக்கில் எடுத்துக்கொண்டு நிலையழுத்தத் தடுப்பை கருதலாம். கடத்தியின் பரப்பிற்கு அருகில் இருக்கும் ஒரு மின்னூட்டம், கடத்தியின் ஊடகத்தில் மின்முனைவாக்கத்தைத் தூண்டுவதினால், மின்கவர்ச்சி விசைக்கு ஆளாகின்றது. உலோகப் பரப்பிலிருந்து வெளியில் எலக்ட்ரான் இருக்கும் அதே தொலைவில், உலோகப் பரப்பிற்கு பதிலாக, பரப்பிலிருந்து உள்ளே அதற்கு ஈடான ஒரு நேர்மின்னூட்டம் இருந்தால், அவைகளுக்கிடையே என்ன கவர்ச்சி விசை தோன்றுமோ அந்த விசைக்கு இது சமமானது. இதை மின்பிம்பம் (electrical image) என்றும், விசையை கற்பனை விசை அல்லது மின்பிம்ப விசை என்றும் கூறுவர். இதன் காரணமாக உலோகப் பரப்பின் மீதுள்ள எலக்ட்ரான் மீது செயல்படும் மின்னழுத்தத்தைக் கணக்கிடும்போது மின்பிம்ப விசையையும் கருத்திற் கொள்ளவேண்டியிருக்கின்றது.

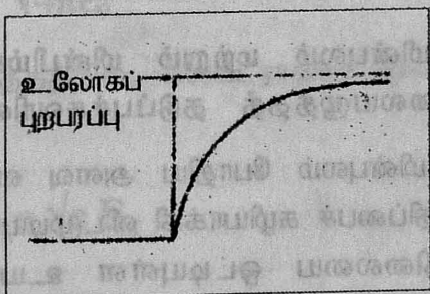
எலக்ட்ரான்மீது செயல்படும் இவ்விசை

$$F_{\text{மின்பிம்ப விசை}} = 1/\,4\pi\varepsilon_0\; e^2/(2x)^2$$

x என்பது உலோகப்பரப்பிற்கும் எலக்ட்ரான்களுக்குமுள்ள தொலைவாகும். எனவே இதன் நிலையாற்றல்

$$V_{\text{மின்பிம்பம}} = -\int_{x}^{\infty} \frac{1}{4\pi\varepsilon_0} \frac{e^2}{4x^2} dx = -\frac{1}{4\pi\varepsilon_0} \frac{e^2}{4x}$$

உண்மையில் இத்தொடர்பு, நிலையழுத்தத் தடையைப் பற்றிக் குறுகிய தொலைவில் குறிப்பிடக்கூடியதாக இல்லை. ஏனெனில் x=0 என்றபோது, இத்தொடர்பு ஒவ்வாத அளவற்ற ஆற்றலைக் கற்பிக்கிறது. எலக்ட்ரான் உலோகப்பரப்பின்மீது இருக்கும்போதும், அல்லது உள்ளே இருக்கும்போதும், அதன் நிலையாற்றல் வரம்பிற்கு உட்பட்ட மதிப்புகளையே பெற்றிருக்கிறது. எனவே உலோகப்பரப்பிலிருந்து குறுகிய தொலைவில் சில ஆங்ஸ்ட்ராங் நெடுக்கையில் இந்த வழிமுறை முறிவு பெறுகிறது. இதற்குக் காரணம், இக்குறுகிய தொலைவில் உலோகப்பரப்பை ஒரு தளக் கடத்தியாகக் கருதமுடியாததாக இருப்பதுதான். இதனால் எலக்ட்ரான்மீது செயல்படும் விசையைக் கணக்கிட வேறொரு வழிமுறை பின்பற்றப்படுகிறது. இதன்படி எலக்ட்ரான்மீது செயல்படும் விசை ஒரு மாறிலியாகவும், அதன் நிலையாற்றல் x-இன் மதிப்பைச் சார்ந்த ஒரு படிச்சார்பாகவும் இருக்கிறது எனலாம். குறுந்தொலைவிற்கு இத்தொடர்பைக் கொண்டும், நெடுந்தொலைவிற்கு $V_{\text{மின்பிம்பம்}}$–க்குப் பெறப்பட்ட தொடர்பைக் கொண்டும், உலோகப் பரப்பிற்கு அருகாமையில் மின்னழுத்தத் தடுப்பின் கட்டமைப்பை ஒரு வரைபடமாகக் காட்டலாம்.



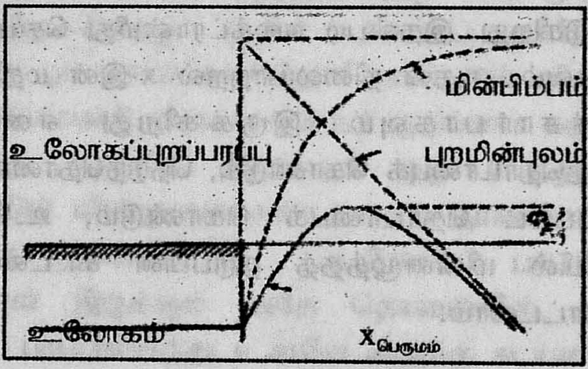
படம் 5.13 மின்பிம்ப விசையினால் மின்னழுத்தத் தடுப்பில் ஏற்படும் மாறுதல்

இப்போது E_x என்ற புறமின் புலத்தை எலக்ட்ரானை உமிழும் உமிழ்வானுக்கும், உமிழ்வு எலக்ட்ரான்களைச் சேகரிக்கும் நேர்மின்

முனைக்கும் இடையில் தோன்றியிருப்பதாகக் கொள்வோம். இப்புலம் உமிழப்படும் எலக்ட்ரான்மீது $-eE_x$ என்ற மாறாத ஒரு விசையை ஏற்படுத்தி அதன் நிலையாற்றலை $-eE_x X$ என்ற அளவில் அதிகரிக்கச் செய்கிறது. எனவே உமிழப்படும் எலக்ட்ரானின் மொத்த நிலையாற்றல்

$$V = - \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 4x} - eE_x x$$

இதனால் எலக்ட்ரானை உலோகத்திலிருந்து வெளியேற்றத் தேவையான சிறும ஆற்றல் (Work function) தாழ்வுறுகிறது. படம் 5.14லிருந்து புறமின்புலம் செயல்படாத போது உலோகத்தின் வெளியேற்று சிறும ஆற்றலைவிட, புலம் செயல்படும்போது அதன் மதிப்புக் குறைவதைத் தெளிவாக அறிந்து கொள்ளலாம்.



படம் 5.14 புறமின்புலம் மற்றும் மின்பிம்ப விசையால் விளையும் நிலையழுத்தத் தடுப்புச்சுவரின் அமைப்பு

செயல்படும் புறமின்புலம் போதிய அளவு வலிமையுடையதாக இருந்தால் ϕ-இன் மதிப்பைச் சுழியாக்கி விடமுடியும். இந்நிலையில் பெர்மி ஆற்றல் நிலையை ஒட்டியுள்ள உயராற்றல் கடத்து எலக்ட்ரான்கள் வெளியேறிச் செல்லும் வாய்ப்பை இயல்பாகப் பெறுகின்றன. இந்த விளைவை ஷாட்கி விளைவு என்பர்.

உலோகப் பரப்பிலிருந்து புலஉமிழ்வைத் தோற்றுவிக்கத் தேவையான புறமின்புலத்தின் செறிவை, பெரும நிலையாற்றல் நிபந்தனையிலிருந்து பெறலாம். V=பெருமம் எனில்

$$(dv/dx)_{x=x_{பெருமம்}} = 0$$

எனவே

$$\frac{dV}{dx} = 0 = \frac{e^2}{16\pi\varepsilon_o x^2_{பெருமம்}} - eE_x$$

அல்லது

$$E_x = \frac{e}{16\pi\varepsilon_o x^2_{பெருமம்}}$$

இதிலிருந்து $x_{பெருமம்}$ –இன் மதிப்பை அறியலாம்.

$$x_{பெருமம்} = \frac{R}{\sqrt{16\pi\varepsilon_o E_x}}$$

இத்தொலைவில் உண்மையான நிலையழுத்தம்

$$V_{பெருமம்} = -\frac{1}{\sqrt{4\pi\varepsilon_o}} \sqrt{e}\, E_0$$

இந்நிலையழுத்தத்தில், எலக்ட்ரானின் நிலையாற்றல்

$$= -\frac{1}{\sqrt{4\pi\varepsilon_o}}\, e\sqrt{e}\, E_x$$

இது எலக்ட்ரான் சிறும வெளியேற்று ஆற்றலில் ஏற்படும் குறைவைக் குறிப்பிடுகிறது.

$$\Delta\phi = \frac{e}{\sqrt{4\pi\varepsilon_o}} \sqrt{e E_x}$$

ரிச்சட்சன்-டுஸ்மான் சமன்பாட்டின்படி

$$J = A\, T^2\, e^{-\phi/k_B T}$$

ஷாட்கி விளைவையும் கருத்திற்கொண்டால்

$$J_s = A\, T^2\, e^{-(\phi-\Delta\phi)/k_B T}$$

$$= J\, e^{\Delta\phi/k_B T}$$

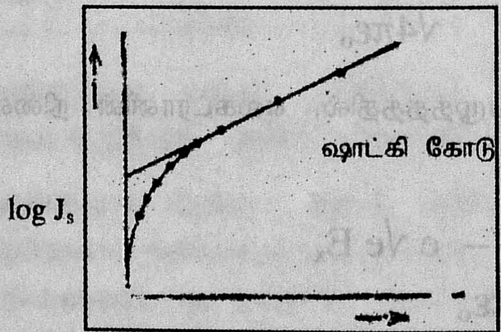
இத்தொடர்பு, ஒரு குறிப்பிட்ட வெப்பநிலையில் காணப்படும் வெப்ப உமிழ்வு, செயல்படுத்தப்படும் புறமின்புலத்தால் அதிகரிக்கிறது என்பதைத் தெரிவிக்கிறது.

மடக்கை எடுத்தால்

$$\log J_s = A + B \log \Delta\phi$$

$$= C + D \log E^{1/2}$$

$\log J_s$ க்கும் $E^{1/2}$ க்கும் ஒரு வரைபடம் வரைந்தால் அது படம் 5.15இல் காட்டியபடி ஒரு நேர்க்கோடாக இருக்கும். இதனை ஷாட்கி கோடு என்பர்.



படம் 5.15 ஷாட்கி கோடு

E-இன் உயர் மதிப்புகளுக்குச் சோதனை முடிவும், கொள்கை முடிவும் பெரிதும் ஒன்றிப் போகின்றன. தாழ்ந்த E–இன் மதிப்புகளுக்குச் சோதனை மதிப்பு, கொள்கை மதிப்பைவிடக்

குறைவாக இருக்கிறது. இதற்குப் புலவெளி மின்னூட்ட மேகம் (space charge) காரணமாக இருக்கலாம் என்று கருதப்படுகிறது.

5.9 ஒளி மின் விளைவு (Photo-electric effect)

ஓர் உலோகப் பரப்பின்மீது ஒளிக்கற்றையை விழுமாறு செய்து எலக்ட்ரான்களை உமிழுமாறு செய்யலாம். இது ஒளிமின் விளைவு எனப்படுகிறது. சோதனைகள் கீழ்க்காணும் உண்மைகளைத் தெரிவித்துள்ளன.

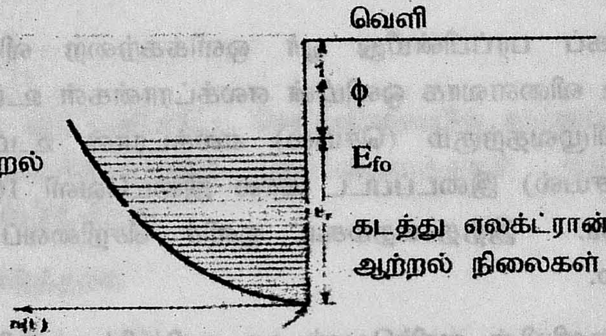
1. உலோகப் பரப்பின்மீது ஓர் ஒளிக்கற்றை விழுந்த உடனே, உடனடி விளைவாக ஒளிமின் எலக்ட்ரான்கள் உமிழப்படுகின்றன. ஒளி விழுவதற்கும் (செயல்) எலக்ட்ரான் உமிழப்படுவதற்கும் (எதிர்செயல்) இடைப்பட்ட கால இடைவெளி 10^{-8} வினாடிக்கும் குறைவே. இத்தாமதம்கூட ஒளிச் செறிவைப் பொறுத்ததாக இல்லை.

2. விழும் ஒளியின் அதிர்வெண் ஒரு குறிப்பிட்ட அதிர்வெண்ணுக்கும் குறைவாக இருக்கும்போது, உயரளவு ஒளிச் செறிவிற்கும்கூட எலக்ட்ரான் உமிழ்வு ஏற்படுவதில்லை இவ்வதிர்வெண் பயன்தரு சிறும அதிர்வெண் (threshold frequency) எனப்படுகிறது. இதன் மதிப்பு வெவ்வேறு உலோகங்களுக்கு வெவ்வேறானதாக இருக்கிறது.

3. பயன்தரு சிறும அதிர்வெண்ணிற்கு மேல், செறிவு தாழ்ந்த ஒளிகூட ஒளிமின் எலக்ட்ரான்களை உலோகத்திலிருந்து வெளியேற்றுகிறது. பயன்தரு சிறும அதிர்வெண்ணிற்கு மேல் கூடுதலாய்ப் பெற்றிருக்கும் அதிர்வெண் ஆற்றல் ஒளிமின் எலக்ட்ரானின் இயக்க ஆற்றலாக வெளிப்படுகிறது. இது கூடுதல் அதிர்வெண்ணிற்கு ஏற்ப அதிகரித்தாலும், ஒளிச்செறிவைச் சிறிதும் சார்ந்ததில்லை.

4. பயன்தரு சிறும அதிர்வெண்ணிற்கு மேல், கூடுதல் ஒளிச்செறிவு, கூடுதலான ஒளிமின் எலக்ட்ரான்களை வெளியேற்றுகிறது. எனவே ஒளிமின் எலக்ட்ரான்களாலான மின்னோட்டம், ஒளிச்செறிவு மற்றும் அதிர்வெண் இவற்றைப் பொறுத்து அமைகிறது.

இவ்வுண்மைகள் அனைத்தையும் கட்டற்ற எலக்ட்ரான் கொள்கை வாயிலாக விளக்க முடியும். உலோகப் பரப்பிற்கு அருகிலுள்ள எலக்ட்ரான்கள், பரப்பில் விழும் ஒளித்துகளின் ஆற்றலை உட்கிரகித்துக் கொள்கின்றன. ஆற்றலின் மதிப்பு எலக்ட்ரான் வெளியேற்று சிறும ஆற்றலைவிடக் கூடுதலாக இருப்பின் ஒளிமின் எலக்ட்ரான் உமிழ்வு நிகழ்கிறது. இல்லாவிட்டால் நிகழக்கூடிய வாய்ப்பை இழக்கிறது. இது பயனுறு சிறும அதிர்வெண்ணுடன் கூடிய ஒளியின் தேவையைப் புலப்படுத்திக் காட்டுகிறது.



படம். 5.16 ஒளிமின் விளைவு நிகழ, ஒளித்துகளின் ஆற்றல் ϕயை விடக் கூடுதலாக இருக்கவேண்டும்.

பயனுறு சிறும அதிர்வெண்ணிற்குக் கீழ் அதிர்வெண் கொண்ட ஒளியின் ஆற்றல், ஒளிமின் எலக்ட்ரான்களைத் தருவதில்லை. அது உலோகத்தினுள் உள்ள எலக்ட்ரான் வளிமத்தின் இயக்க ஆற்றலை அதிகரிக்கிறது. பரப்பிற்கு அருகிலுள்ள எலக்ட்ரான் இந்த ஆற்றலை உட்கிரகித்து, பின் பிற எலக்ட்ரான்களோடு மேற்கொள்ளும் மோதலினால் பகிர்ந்து கொள்ளப்பட்டு, வெப்பஆற்றலாக இழுக்கப்படுகிறது.

$h\upsilon$ என்பது விழும் ஒளிக்கற்றையிலுள்ள ஒளித்துகளின் ஆற்றல் என்றும், ϕ என்பது எலக்ட்ரான் வெளியேற்றுச் சிறுமஆற்றல் என்றும் கொண்டால், ஒளிமின் எலக்ட்ரானின் இயக்க ஆற்றல்

$$\frac{1}{2} mv^2 = h\upsilon - \phi$$

இதில் m என்பது எலக்ட்ரானின் நிறை, vஎன்பது வெளியேறும் ஒளிமின் எலக்ட்ரானின் வேகம். v அதிகரிக்க, வெளியேறும் ஒளிமின்

எலக்ட்ரானின் வேகம் இயக்க ஆற்றல் போன்றவையும் அதிகரிக்கின்றன.

கட்டற்ற எலக்ட்ரான்கள் உலோகத்தினுள் பல்வேறு ஆற்றல் நிலைகளில் இருக்கின்றன. பெர்மி ஆற்றல் நிலைக்கு அருகாமையில் உள்ள எலக்ட்ரான்களுக்குக் குறைந்த வெளியேற்று ஆற்றலும், விலகிய ஆற்றல் நிலைகளில் உள்ள எலக்ட்ரான்களுக்கு அதிகமான வெளியேற்று ஆற்றலும் தேவைப்படுவதால், ஒளிமின் எலக்ட்ரான்களின் இயக்க ஆற்றல் சுழிமுதல் ஒரு பெருமம் வரை இருக்கும். ஒளிச்செறிவை அதிகரிப்பதால் உலோகப்பரப்பில் விழும் ஒளித்துகள்களின் எண்ணிக்கையை அதிகரிக்க முடியும். ஆனால் அதன் ஆற்றலை அதிகரிக்க முடியாது. எனவே ஒளிச்செறிவை அதிகரிப்பதினால், ஒளிமின் எலக்ட்ரான்களின் இயக்க ஆற்றலை அதிகரிக்க முடியாது. எனினும் பயனுறு சிறும அதிர்வெண்ணிற்கு மேற்பட்ட அதிர்வெண்ணில் விழும் ஒளி இருப்பின், ஒளிமின் எலக்ட்ரான்களின் ஆற்றலையும், செறிவு அதிகமாக இருப்பின் அதன் எண்ணிக்கையையும் அதிகரிக்க முடியும்.

E_o, P_o என்பன முறையே ஒளி-எலக்ட்ரான் மோதலுக்கு முன்பு எலக்ட்ரான் பெற்றுள்ள ஆற்றல் மற்றும் உந்தம் என்போம். மோதலுக்குப் பின்பு இதன் மதிப்புகள் முறையே E, P என இருக்கட்டும். ஆற்றல் மாறாக் கோட்பாட்டின்படி

$$E = E_o + h\upsilon$$

உந்தம் மாறாக் கோட்பாட்டின்படி

$$P = P_o + h\upsilon/c$$

சாதாரணமாக உந்தத்திற்கும், ஆற்றலுக்குமுள்ள தொடர்பு $P=\sqrt{2mE}$ என்பதால்

$$(2mE)^{1/2} = (2mE_o)^{1/2} + h/c$$

$$2m(E-E_o) = h^2\upsilon^2/c^2 + 2\,(2mE_o)^{1/2}\, h\upsilon/c$$

$E - E_o = h\upsilon$ என்பதால்

$$h\upsilon/2mc^2 + (2E_o / mc^2)^{1/2} = 1$$

எலக்ட்ரானின் ஆற்றலோடு ஒப்பிட $h\upsilon << mc^2$. மேலும் மோதலுக்கு முன்பு எலக்ட்ரானின் ஆற்றல், மோதலுக்குப் பின்பு

எலக்ட்ரானின் ஆற்றலை விடக் குறைவு. அதாவது $E_o << mc^2$. எனவே இத்தொடர்பு நிலைபேறுள்ள, முரண்பாடற்ற ஒரு தொடர்பாக இருக்கிறது. உட்புற எலக்ட்ரான்கள் ஒளித்துகளை உட்கிரகிப்பதில்லை. $E \sim E_o \sim mc^2$ என்பதால், உட்புற எலக்ட்ரான்கள் ஆற்றல் மற்றும் உந்தம் மாறாக் கோட்பாட்டிற்கு ஏற்ப இருக்கின்றன என்று சொல்லமுடியாது. ஆனால் மாறாக் கோட்பாட்டுக் கொள்கைக்கு உலோகத்தின் புறப்பரப்பில் உள்ள எலக்ட்ரான்கள் உட்படுகின்றன. ஏனெனில் பரப்பிலுள்ள மின்னழுத்தத் தடுப்புச்சுவர், எலக்ட்ரான் உந்தத்தை ஏற்கும் ஏற்பியாகவும், மீட்டுக் கொடுக்கும் மூலமாகவும் இருப்பதால் இது இயலுவதாகிறது. எனவே இந்த அமைப்பை வெறும் எலக்ட்ரான்-ஒளித்துகள் என்று மட்டும் கருதாமல், அவற்றோடு உலோகத்தின் புறப்பரப்பையும் கருத்திற்கொள்ள வேண்டும். ஒளிமின் விளைவின்போது உமிழப்படும் எலக்ட்ரான்கள், உலோகத்தின் புறபரப்பிலிருந்து வருகின்றன. அதனால்தான் காலதாமதம் மிகவும் குறைந்து இருக்கிறது. மேலும் ஒளிமின் விளைவு பரப்பின் தன்மைக்கு ஏற்ப அமைந்திருக்கிறது.

இனி ஒளிமின் விளைவால் விளையும் மின்னோட்டச் செறிவிற்கான ஒரு தொடர்பைக் கீழ்க்காணுமாறு பெறமுடியும்.

$$J = AT^2 F\left(\frac{h\upsilon-\phi}{k_B T}\right)$$

இதிலிருந்து

$$\log_e \frac{J}{T^2} - \log_e A = \log F\left(\frac{h\upsilon-\phi}{k_B T}\right)$$

$\log F \frac{(h\upsilon-\phi)}{k_B T}$ க்கும் $\frac{h\upsilon-\phi}{k_B T}$ க்கும்

ஒரு வரைபடம் வரையலாம். இது பௌலர் திட்டக்கோடு (Fowlder plot) எனப்படும். இது சோதனை மதிப்புகளைக் கொண்டு

வரையப்பட்ட வரைகோட்டை ஒத்திருக்கிறது. எனினும் y அச்சில் (J/T^2 அச்சு) logA ன் மதிப்பளவு விலகியும், x அச்சில் ϕ/kT–இன் அளவு விலகியும் இருக்கின்றன.

கட்டற்ற எலக்ட்ரான் கொள்கையின் குறைபாடுகள்

கட்டற்ற எலக்ட்ரான் கொள்கை உலோகங்களின் பல்வேறு இயற்பியல் பண்புகள் பற்றித் தெளிவாக வரையறுத்துக் கூறினாலும், இதுவும் ஒரு வரம்பிற்கு உட்பட்டுச் சில குறைபாடுகளைக் கொண்டுள்ளது.

1. கட்டற்ற எலக்ட்ரான் கொள்கைப்படி, மின்கடத்துதிறன் எலக்ட்ரான் செறிவைப் பொறுத்திருக்கிறது எனலாம். இரு (பெர்லியம், காட்மியம், துத்தநாகம்) மற்றும் மூன்று (அலுமினியம், இண்டியம்) இணைதிற எலக்ட்ரான்களைக் கொண்ட உலோகங்களில், ஒற்றை இணைதிற (செம்பு, வெள்ளி, தங்கம்) எலக்ட்ரான்களைக் கொண்ட உலோகங்களைவிட எலக்ட்ரானின் செறிவு அதிகமாக இருப்பினும், அவற்றின் மின்கடத்து திறன் குறைவாகவே இருக்கிறது.

2. ஹால் விளைவை (Hall effect) விளக்கினாலும், கட்டற்ற எலக்ட்ரான் கொள்கை எதிர்குறியுடைய ஹால் மாறிலியைத் தெரிவிக்க, பெர்லியம், காட்மியம், துத்தநாகம் போன்ற சில உலோகங்கள் நேர்குறியுடைய ஹால் மாறிலியைப் புலப்படுத்திக் காட்டியுள்ளன.

3. பெர்மி பரப்பு கோளவடிவில் இருக்கும் எனக் கட்டற்ற எலக்ட்ரான் கொள்கை வெளிப்படுத்தினாலும், இது பெரும்பாலும் கோளவடிவமற்றதாக இருக்கிறது.

இத்தகைய குறைபாடுகளை, எலக்ட்ரான் மற்றும் அணித்தளங்களுக்கிடைப்பட்ட இடையீட்டுச் செயல்மூலம் களைய முடியும். இது அடுத்த அத்தியாயமான ஆற்றல்பட்டைக் (Band theory) கொள்கையில் விவரிக்கப்பட்டுள்ளது.

வினாக்களும் பயிற்சிக் கணக்குகளும்

1. ஒரு கடத்தியின்மீது புறமின்புலத்தைச் செயல்படுத்தினாலும், அதிலுள்ள கடத்து எலக்ட்ரான்கள் முடுக்கப்படாமல், ஒரு சராசரித் திசைவேகத்தைப் பெறுவதேன்?

2. நுகர்வுத் திசைவேகம் என்றால் என்ன? வரையறுத்து அதற்கான ஒரு தொடர்பைப் பெறுக.

3. லாரன்ஸ்-ட்ருடு கொள்கையின் அடிப்படையில் ஓர் உலோகத்தில் மின்கடத்துதிறனுக்கான தொடர்பை வருவிக்க.

4. லாரன்ஸ்- ட்ருடு கொள்கையின் மூலம் ஓம் விதியை நிறுவுக.

5. லாரன்ஸ்-ட்ருடு கொள்கையின் அடிப்படையில் ஓர் உலோகத்தின் வெப்பங்கடத்துதிறனுக்கான தொடர்பைப் பெறுக.

6. வீட்மான்-பிரான்ஸ் தகவிற்கான தொடர்பை நிறுவுக.

7. லாரன்ஸ்-ட்ருடு கொள்கையின் குறைபாடுகள் யாவை? மின்கடத்தும் திறனைப் பாதிக்கும் கூறுகள் மூலம் இது எங்ஙனம் நீக்கப்படுகிறது?

8. சொமர்பெல்டு குவாண்டம் கொள்கையின் அடிப்படையில், ஒற்றைப் பரிமாணப் பெட்டியில் ஆற்றல் நிலைகளுக்கான தொடர்பைப் பெற்று, நினைஅடர்த்தி குவாண்ட எண்ணிற்கு எதிர்விகிதத்தில் இருக்கின்றது எனக்காட்டுக.

9. ஒற்றைப் பரிமாண மின்னழுத்தப் பெட்டியில் தாழ்ந்த ஆற்றல் நிலையில், அமைப்பின் சராசரி இயக்க ஆற்றல் பெர்மி ஆற்றலில் மூன்றில் ஒரு பங்கு என்று நிறுவுக.

10. மாக்ஸ்வெல் - போல்ட்ஸ்மான் மற்றும் பெர்மி – டிராக் பங்கீட்டுத்தனம் மூலம் ஓர் எலக்ட்ரான் வளிமத்தின் வெப்பஏற்புத்திறனை மதிப்பீடு. ஏன் சோதனை முடிவுகள் பெர்மி-டிராக் கொள்கைக்குப் பெரிதும் ஒத்திருக்கின்றன?

11. பெர்மி ஆற்றலின் முக்கியத்துவம் யாது? சார்பிலாச் சுழிவெப்பநிலையில் எலக்ட்ரான் வளிமத்தின் பெர்மி ஆற்றலுக்கான தொடர்பைப் பெறுக.

12. உலோகத்தில் எலக்ட்ரான் வளிமத்தின் நிலைஅடர்த்தி ஆற்றலின் வர்க்கமூலத்திற்கு நேர்விகிதத்திலிருக்கிறது எனக் காட்டுக.

13. பெர்மி-டிராக் பங்கீட்டுத்தனத்திற்கான சார்பைப் பெறுக.

14. சார்பிலா சுழிவெப்பநிலையில் எலக்ட்ரான் வளிமத்தின் சராசரி இயக்க ஆற்றல் 3/5 E_{F_0} என நிறுவுக. (E_{F_0} என்பது பெர்மி ஆற்றல்).

15. எலக்ட்ரான் வளிமத்தில் எலக்ட்ரானின் சராசரித்திசை வேகத்திற்கும் பெர்மி திசைவேகத்திற்குமான தொடர்பை வரையறுக்க.

16. வெப்பநிலையைப் பொறுத்து மாறும் பெர்மி ஆற்றலுக்கான தொடர்பை நிறுவுக.

17. கடத்து எலக்ட்ரான்களின் வெப்பம்கடத்துதிறன் சார்பிலா வெப்பநிலைக்கு நேர்விகிதத்திலிருக்கின்றது எனக் காட்டுக.

18. பெர்மி-டிராக் கொள்கையின் அடிப்படையில் வெப்பஉமிழ்வை விவரித்து ரிச்சட்சன்-டுஸ்மான் தொடர்பைப் பெறுக. சோதனை முடிவுகள், கொள்கை மதிப்புகளிலிருந்து விலகியிருப்பதற்கு என்ன விளக்கம் கொடுக்கப்பட்டுள்ளது?

19. பாராகாந்தம் பற்றிய பௌலியின் கொள்கையைத் தருக.

20. புல உமிழ்விற்கும், வெப்பஉமிழ்விற்கும் உள்ள வேறுபாடு யாது? ஷாட்கி விளைவை, கட்டற்ற எலக்ட்ரான் கொள்கைமூலம் விவரிக்க.

21. ஒரு குறிப்பிட்ட வெப்பநிலையில் காணப்படும் வெப்பஉமிழ்வு, செயல்படும் புறமின் புலத்தால் அதிகரிக்கிறது என நிறுவுக.

22. பெர்மி-டிராக் புள்ளியியல் கொள்கையைக் கொண்டு ஒளிமின் விளைவில் ஏற்படும் மின்னோட்டச் செறிவிற்கான தொடர்பைப் பெறுக. பௌலர் திட்டக்கோடு மூலம் விளக்குக.

6. தொடர் இடமாற்றப் பண்புகள்

1. அறிமுகம் - 2. போல்ட்ஸ்மான் இடமாற்றச் சமன்பாடு – நகர்வுத் தன்மையான மாற்றம் - மோதலாலான மாற்றம் - 3. லாரன்ஸ்தீர்வு – 4. மின்கடத்து திறனுக்கான சொமர்பெல்டு கொள்கை – 5. தளர்வு நேரத்தைக் கணக்கிட்டறிதல் - 6. தாழ்ந்த வெப்பநிலையில் மின்கடத்துதிறன் - 7. மாத்தீசன் விதி – காந்தமின் தடை எண்.

வெப்பங்கடத்துதிறன் - லாரன்ஸ் எண். 10. வெப்பமின் விளைவுகள் - பெல்டியர் விளைவு – ஹால்விளைவு.

6. தொடர் இடமாற்றப் பண்புகள் (Transport properties)

6.1 அறிமுகம்

கட்டற்ற எலக்ட்ரான் கொள்கையில் ஓர் உலோகத்திலுள்ள கடத்து எலக்ட்ரான்கள், வெப்பச்சமநிலையில் இருக்கும் ஓர் எலக்ட்ரான் வளிமமாகக் கொள்ளப்பட்டது. அப்போது அதனை மேக்ஸ்வெல் - போல்ட்ஸ்மான் புள்ளியியல் கொள்கைக்கு உட்படும் நிறைவு வளிம மூலக்கூறுகள் போலக் கருதினோம். உலோகங்களில் மின்னோட்டம் அல்லது வெப்பக்கடத்தலை அனுமதித்து, அதன் மூலம் சமநிலையில் ஏற்படும் பாதிப்பினால் தூண்டப்படும் சமநிலையில்லா நிலையால் உலோகத்தின் பண்புகளில் ஏற்படும் மாற்றங்களை அறிய முயலலாம். அதாவது சமநிலையின் பங்கீட்டுத்தனம், செயல்படும் மின்னோட்டம், வெப்பக்கடத்தலால் திருத்தம் பெற்று மாறுகிறது. தொடர்இடமாற்ற நிகழ்வு பற்றிய கொள்கையில், கொடுக்கப்பட்ட ஒரு புறப்புலத்தால் விளையும் பங்கீட்டுத்தனச் சார்பு அறியப்பட்டு, பொருளின் பண்புகள் விளக்கப்படுகின்றன.

6.2 போல்ட்ஸ்மான் இடமாற்றச் சமன்பாடு (Boltzmands transport equation)

புறவிசையொன்றினால், துகள்களாலான ஓர் அமைப்பு இயக்கச் சமநிலையில் (dynamical equilibrium) இருப்பதாகக் கொள்வோம். நிலையான புறமின்புலம், அல்லது புற காந்தப்புலம் செயல்பட்டு இயங்கும் உலோகத்தில் இருக்கும் எலக்ட்ரான் வளிமம் இதற்குத் தகுந்த எடுத்துக்காட்டாகும். அதன் வழியாக ஒரு மாறாத, நிலையான மின்னோட்டம் நிகழும்போது, அவ்வமைப்பு இயக்கச் சமநிலையில் இருப்பதாகக் கருதப்படும்.

ஒரு குறிப்பிட்ட நேரத்தில், ஓர் எலக்ட்ரானின் இருக்கைநிலை ஆயம் (x,y,z) என்றும், திசைவேக ஆயம் (v_x,v_y,v_z) என்றும் அல்லது உந்த ஆயம் (p_x,p_y,p_z) (இது திசை வேக ஆயத்தை எலக்ட்ரானின் நிறையால் பெருக்கக் கிடைக்கின்றது.) என்றும் கொள்வோம். எலக்ட்ரான்களின் பங்கீட்டுத்தனச் சார்பு அவற்றின் ஆயங்களைப் பொறுத்து அமைகிறது. இதனை $f(x,y,z,p_x,p_y,p_z,t)$ என்று குறிப்பிடலாம். போல்ட்ஸ்மான் சமன்பாட்டைப் பெறுவதற்கு, (x,y,z,p_x,p_y,p_z,t) என்ற அமைவு நிலைப்புள்ளியைச் சுற்றி அருகில் அமைந்திருக்கும் சிறிய வெளியை எடுத்துக் கொள்வோம். x,x+dx, y, y+dy, z, z+dz என்ற இருக்கை நிலை ஆய நெடுக்கையிலும், p_x, p_x+dp_x, p_y, p_y+dp_y, p_z, p_z+dp_z என்ற உந்த நெடுக்கையிலும் உள்ள எலக்ட்ரான்களின் எண்ணிக்கை

$f(x,y,z, p_x, p_y, p_z)\, dp_x\, dp_y\, dp_z\, dx, dy, dz$ (6.1)

ஆகும். அமைப்பு ஒரு நிலையான நிலையில் இருப்பின் dx, dy,dz $dp_x\, dp_y\, dp_z$ என்று நுண்ணளவு வெளியில் இருக்கும் எலக்ட்ரான்களின் எண்ணிக்கையில் மாற்றம் ஏற்படுவதில்லை. இதனை df/dt=0 என்ற நிபந்தனையால் குறிப்பிடலாம். அதாவது f என்ற சார்பு காலஞ் சார்ந்ததாக இருக்கக்கூடாது. எனவே f என்ற சார்பு பற்றிய விவரங்களை அறிய, fஐப் பாதித்துக் காலத்தினால் ஒரு மாற்றத்தைத் தூண்டக்கூடிய காரணிகளைப் பற்றித் தெரிந்து கொள்ள வேண்டியது அவசியமாகிறது. f-ன் மதிப்பைக் காலத்தால் மாற்றும் இரு முக்கியக் காரணிகள்.

(1) நகர்வுத் தன்மையாலான மாற்றம் (drift variation)

(2) மோதல் அல்லது சிதறலினால் மாற்றம் (collisions or scattering interactions)

நகர்வுத் தன்மையான மாற்றம்

வெப்ப இயக்கக் காரணமாகவும், புறத்திலிருந்து செயல்படும் புலத்தினால் முடுக்கப்படுவதினாலும் எலக்ட்ரான்கள் உலோகத்தினுள் ஓரிடத்திலிருந்து மற்றோரிடத்திற்குத் தொடர்ந்து மாறிக் கொண்டேயிருக்கின்றன. இதனால் பங்கீட்டுத் தனத்தில் தொடர்ந்து மாற்றம் விளைகிறது.

t என்ற நேரத்தில் (x,y,z, p_x, p_y, p_z) என்ற ஆயங்களுடன் உந்தக் கட்ட வெளியில் இருக்கும் ஓர் எலக்ட்ரான் தொகுதியைக் கருதுவோம். இந்த எலக்ட்ரான்கள் t-dt என்ற நேரத்தில் உந்தக் கட்ட வெளியில் $(x-v_x dt, y-v_y dt, z-v_z dt, p_x-F_x dt, p_y-F_y dt, p_z-F_z dt)$ என்ற அமைவிடத்திலிருந்த எலக்ட்ரான்களின் எண்ணிக்கையாகும். புறத்திலிருந்து செயல்படும் புலத்தினால் ஓர் எலக்ட்ரான் மீது செயல்படும் விசையின் கூறுகள் (F_x,F_y,F_z) எனக் கொள்ளப்பட்டுள்ளன. பங்கீட்டுத்தனத்தை நாம் வரையறை செய்து கொண்ட முறைப்படி இதன்மதிப்பு,

$$f(x- p_x/m\, dt, y-p_y/m\, dt, z- p_z/m\, dt, p_x-F_x dt, p_y-F_y dt, p_z-F_z dt, t-dt)\, dx\, dy\, dz\, dp_x\, dp_y\, dp_z \quad (6.2)$$

எனவே செயல்படும் புலத்தினால் dt என்ற காலத்தில் (x,y,z, p_x, p_y,p_z) என்ற ஆயங்களை உடைய எலக்கட்ரான்களின் எண்ணிக்கையில் ஏற்படும் மாற்றம்

$$\delta f = f(x- p_x/m\, dt, y-p_y/m\, dt, z- p_z/m\, dt, p_x-F_x dt, p_y-F_y dt, p_z-F_z dt, t-dt)$$

$-f(x, y, z, p_x, p_y, p_z, t)$

ஒரு சார்பின் டெய்லர் விரிவாக்கத்தின்படி, முதல் மடி உறுப்புகளை மட்டும் கவனத்திற்கொண்டால்

$$f_t = f_{t-dt} + \left(\frac{\partial f}{\partial q}\right)_{dt \to 0} + \left(\frac{\partial f}{\partial p}\right)_{dt \to 0}$$

இதில் q என்பது இருக்கை நிலை ஆயங்களையும், p என்பது உந்த ஆயங்களையும் குறிப்பிடும். எனவே

$$\left(\frac{\delta f}{\delta t}\right)_{\text{புலம்}} = -\left(\frac{\partial f}{\partial q}\right)_{dt \to 0} - \left(\frac{\partial f}{\partial p}\right)_{dt \to 0}$$

$$= -\frac{\partial f}{\partial x} v_x - \frac{\partial f}{\partial y} v_y - \frac{\partial f}{\partial z} v_z - \frac{\partial f}{\partial p_x} F_x - \frac{\partial f}{\partial p_y} F_y - \frac{\partial f}{\partial p_z} F_z$$

$$= -v \, grad_r f - F \, grad_v f \qquad (6.3)$$

என்று சுருக்கமாகக் குறிப்பிடலாம். இதில் $grad_v f$ உந்தவெளியில் சார்பின் சரிவும் $grad_r f$ இயல்வெளியில் சார்பின் சரிவும் ஆகும். இதில் முதல் கூறு r என்ற பகுதியிலிருந்து உட்புகும் மற்றும் வெளியேறும் எலக்ட்ரான்களைக் குறிப்பிடுகிறது. அதாவது எலக்ட்ரான்களின் விரவலினால் ஏற்படுகிறது. இரண்டாவது கூறு புறப்புலத்தினால் ஏற்படுகிறது.

2. மோதல் அல்லது சிதறலிலான மாற்றம்

எலக்ட்ரான் வளிமத்தில் எலக்ட்ரான்கள் தொடர்ந்து மோதலுக்கு உள்ளாவதால், உந்தக்கட்ட வெளியில் ஒரு பகுதியில் உட்புகும் மற்றும் வெளியேறும் எலக்ட்ரான்களால் f-இன் மதிப்பு மாறும். இது, மோதலினால் எலக்ட்ரான்கள் தொடர்ச்சியற்ற அல்லது விட்டுவிட்டுத் திசைவேக மதிப்புகளைப் பெறுவதினால் ஏற்படுகிறது.

(p_x, p_y, p_z) என்ற உந்தத்துடன் இயங்கும் எலக்ட்ரான் $(p_x', p_x'+dp_x', p_y', p_y'+dp_y', p_z', p_z'+dp_z')$ என்ற வேக நெடுக்கைக் குட்பட்ட வேகத்தைப் பெறுவதற்கான வாய்ப்பு, ஓரலகு நேரத்தில் $\theta(p_x, p_y, p_z, p_x', p_y', p_z') \, dp_x', dp_y', dp_z'$ என்போம். இச்சார்பைக் கொண்டு ஓர்

உந்தத்திலிருந்து மற்றோர் உந்த நெடுக்கைக்குட்பட்ட உந்தத்திற்கு மாறும் எலக்ட்ரான்களின் எண்ணிக்கையைக் கண்டறியலாம். அப்படி மாறும் எலக்ட்ரான்களின் எண்ணிக்கை a எனில்

$$a = f(x,y,z,p_x, p_y, p_z) \int \theta(p_x\, p_y\, p_z\, p_x'\, p_y'\, p_z')\, dp_x', dp_y', dp_z'$$

இதனைப்போல மற்றொரு வேக நெடுக்கையிலிருந்து p_x, p_y, p_z, என்ற உந்தத்தைப் பெறும் எலக்ட்ரான்களின் எண்ணிக்கையை

$$b = \int f(p_x'', p_y'', p_z'')\ \theta(p_x''\, p_y''\, p_z''\, p_x\, p_y\, p_z)\, dp_x'', dp_y'', dp_z''$$

மோதலினால் f-இன் மதிப்பில் ஏற்படும் மாறுபட்டுவீதம்

$$\frac{\partial f}{\partial t_{\text{மோதல்}}} = (b-a) \tag{6.4}$$

மொத்த மாறுபட்டு வீதம் என்பது நகர்வுத் தன்மையாலான மாற்றம் மற்றும் மோதலினாலான மாற்றம் இவற்றின் கூடுதலாகும். நிலையான (steady state) மொத்த மாறுபாட்டு வீதம் சுழியாகும். எனவே

$$\frac{\partial f}{\partial t} = \frac{\partial f}{\partial t}_{\text{புலம்}} + \frac{\partial f}{\partial t}_{\text{மோதல்}} = 0 \tag{6.5}$$

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{\text{மோதல்}} = -\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{\text{புலம்}} \tag{6.5}$$

இரு வேறு காரணங்களினால் ஏற்படும் $\partial f/\partial t$ –இன் மதிப்புகளைக் கொண்டு

$$b-a = F_x\frac{\partial f}{\partial p_x} + F_y\frac{\partial f}{\partial p_y} + F_z\frac{\partial f}{\partial p_z} + v_x\frac{\partial f}{\partial x} + v_y\frac{\partial f}{\partial y} + v_z\frac{\partial f}{\partial z}$$

அதாவது நிலையான நிலையில் மோதல் காரணமாக f-இல் ஏற்படும் மாற்றம், புறப்புலத்தாலும், வெப்பநிலைச் சரிவுகளினாலும் ஏற்படும் மாற்றத்தால் நேர்செய்யப்படுகிறது. இது போல்ட்ஸ்மான் சமன்பாடு சமநிலையில் இருக்கும் அமைப்பைக் குறிக்கவில்லை

என்றும், அது நிலையான நிலையில், அல்லது இயக்கச் சமநிலையில் உள்ள அமைப்பைக் குறிக்கிறது எனலாம். சமநிலை என்பது புறப்பலமும், வெப்பநிலைச்சரிவும் இல்லாதபோது fஇன் மதிப்பால் குறிப்பிடப்படும்.

இரு தனிச்சிறப்பு நிலைகளைக் கொண்டு போல்ட்ஸ்மான் சமன்பாட்டை அணுகுவோம். உலோகம் ஒருபடித்தன்மையுடையதாக (homogeneous) அதாவது புறப்புலத் தாக்கம் ஏதுமின்றி, மாறா வெப்பநிலையில் இருப்பதாக இருந்தால்

$$F_x = F_y = F_z = 0$$

$$\frac{\partial f}{\partial x} = \frac{\partial f}{\partial y} = \frac{\partial f}{\partial z} = 0$$

எனவே $(\partial f/\partial t)_{மோதல்} = 0$

இது a=b எனத் தெரிவிக்கிறது. அதாவது உந்தக்கட்ட வெளியில், மோதல் காரணமாக ஒரு குறிப்பிட்ட பருமனுள் உட்புகும் எலக்ட்ரான்களின் எண்ணிக்கையும், வெளியேறும் எலக்ட்ரான்களின் எண்ணிக்கையும் சமமாக இருக்கின்றன.

ஊடகம் ஒருபடித் தன்மையற்றதாக (heterogeneous) இருந்தால், எடுத்துக்காட்டாக ஒரு வெப்பநிலைச் சரிவு தோன்றியிருந்தால்

$$\frac{\partial f}{\partial x} \neq, \frac{\partial f}{\partial y} \neq, \frac{\partial f}{\partial z} \neq 0$$

எனவே $(\partial f/\partial t)_{மோதல்} \neq 0$

மின்புலம், அல்லது வெப்ப நிலைச்சரிவு போன்ற மெல்லிய பாதிப்புகளினால் சமநிலை பாதிக்கப்பட்டிருக்கும் அமைப்புகளின் இயற்பியல் தன்மையை அறிய, அவற்றின் சமநிலை பங்கீட்டுத்தனச் சார்பு தெரியுமானால் போல்ட்ஸ்மான் சமன்பாட்டைப் பயன்படுத்தலாம். மின்புலம் செயல்படும் அமைப்புகளில்

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{மோதல்} = -\frac{f(p,q,t) - f_o(p,q)}{\tau(p)} \qquad (6.6)$$

என்றிருக்கும் எனலாம். இதில் $f_o(p,q)$ என்பது சமநிலை பங்கீட்டுத்தனச் சார்பைக் குறிக்கிறது. வெப்பநிலைச் சரிவு இல்லாதபோது இச்சார்பு qவைப் பொறுத்து (அமைவிட ஆயம்) மாறுபடுவதில்லை. ஆனால் வெப்பநிலைச்சரிவு உள்ளபோது f_o,qவைப் பொறுத்து மாறுபடும். இதில் $\tau(p)$ என்பது தளர்வு நேரம் என்று சொல்லப்படும். மேற்குறிப்பிட்ட சமன்பாடு, பங்கீட்டுத்தனச் சார்பு, சமநிலைச் சார்பை நெருங்கும் வீதத்தைக் குறிக்கிறது. மோதலினால் f-இன் மதிப்பில் ஏற்படும் தளர்ச்சிவீதம், சமநிலையிலிருந்து வேறுபட்ட பங்கீட்டுத்தனத்தின் சார்புக்கும், சமநிலைச் சார்புக்கும் உள்ள வேறுபாட்டிற்கு நேர் வீதத்திலிருக்கிறது.

சமநிலையில் மெல்லிய பாதிப்பை ஏற்படுத்திய மின்புலத்தையும், வெப்பநிலைச் சரிவையும் திடீரென்று அகற்றிவிட்டால், மின்புலமும் வெப்பநிலைச் சரிவும் இல்லாத நிலையில்

$$-\frac{f-f_o}{\tau} = \frac{df}{dt}$$

$$-\frac{\partial t}{\tau(p)} = \frac{df}{f(p,t)-f_o(p)} \qquad (6.6)$$

தொகையாக்கத்திற்கு உட்படுத்த,

$$\frac{t}{\tau(p)} + c = \log\left[f(p,t)-f_o(p)\right]$$

t=0 எனில் $f(p,t) = f_i(p,t)$ எனில் c என்ற மாறிலியின் மதிப்பு

$$c = \log\left[f_i(p,t)-f_o(p)\right]$$

$$f(p,t) = f_o(p) + \left[f_i(p,t)-f_o(p)\right] e^{-t/\tau} \qquad (6.7)$$

இதில் $f_o(p)$ என்பது சமநிலைப் பங்கீட்டுத்தனச் சார்பையும், $f_i(p,t)$ தொடக்க நிலையில் பங்கீட்டுத்தனச் சார்பையும் குறிக்கும்.

6.3 லாரன்ஸ் தீர்வு

x,y அச்சுத் திசைகளில் ஒரு சீரான மின்புலமும், z அச்சுத் திசையில் ஒரு சீரான காந்தப்புலமும் செயல்படுவதாகக் கொள்வோம். இச்சுழலில் எலக்ட்ரான் மீது செயல்படும் விசையை லாரன்ஸ் விசை (Lorentz force) என்பர். α என்பது எலக்ட்ரான் பெறும் முடுக்கமெனில்

$$F = m\alpha = -e[E + v \times B]$$

இதில் E, B என்பன முறையே மின்புல மற்றும் காந்தப்புலச் செறிவாகும். e என்பது எலக்ட்ரானின் மின்னூட்டமாகும். ஆய அச்சுக்கூறுகளுடன் இச்சமன்பாட்டைப் பிரிக்க

$$F_x = m\alpha_x = -e[E_x + v_y B_z]$$

$$F_y = m\alpha_y = -e[E_y - v_x B_z]$$

போல்ட்ஸ்மென் தொடர் இடமாற்றத்திற்கான சமன்பாட்டில் இதனைப் பதிலீடு செய்ய

$$v_x \frac{\partial f}{\partial x} + v_y \frac{\partial f}{\partial y} + v_z \frac{\partial f}{\partial z} - e[E_x + v_y B_z]\frac{\partial f}{\partial p_x} - e[E_y - v_x B_z]\frac{\partial f}{\partial p_y} + 0$$

$$= b - a = \frac{\partial f}{\partial t_{\text{மோதல்}}}$$

அமைப்பின் புறச் சூழல்களுக்கு ஏற்ப இச்சமன்பாட்டைத் தக்கவாறு சுருக்கிக் கொள்ளலாம். எடுத்துக்காட்டாகக் காந்தப்புலம் செயல்படவில்லையென்றும், மின்புலம் x அச்சுத் திசையில் செயல்படுகிறது என்றும் கொண்டால் f என்ற சார்பு y,B இவற்றைச் சார்ந்திருக்கிறது. எனவே,

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{\text{மோதல்}} = v_x \frac{\partial f}{\partial x} - eE_x \frac{\partial f}{\partial p_x}$$

இதனைக்கொண்டு

$$v_x \frac{\partial f}{\partial x} - eE_x \frac{\partial f}{\partial p_x} = -\frac{f - f_o}{\tau}$$

என்ற தொடர்பைப் பெறலாம்.

$$f = f_o - \tau\left[v_x \frac{\partial f}{\partial x} - eE_x \frac{\partial f}{\partial p_x}\right]$$

செயல்படும் மின்புலம் அல்லது வெப்பநிலைச் சரிவு மிகவும் சொற்ப அளவில் இருந்தால் $f \sim f_o$ என்று கொள்ளலாம். எனவே

$$f = f_o - \tau \left[v_x \frac{\partial f_o}{\partial x} - e E_x \frac{\partial f_o}{\partial p_x} \right]$$

ஊடகம் ஒருபடித்தன்மையுடையதாக இருப்பின்

$$f = f_o + \tau e E_x \frac{\partial f_o}{\partial p_x} \qquad (6.8)$$

கீழ்க்காணும் ஊகக் கோட்பாடுகளின் அடிப்படையில் இத்தொடர்பு பெறப்பட்டுள்ளது.

(1) எலக்ட்ரான்கள் மீட்சி மோதலில் மட்டும் ஈடுபடுகின்றன.

(2) மோதலுக்குப்பின் எலக்ட்ரான் சிதறல் திசையொவ்வியதாக இருக்கிறது.

(3) பங்கீட்டுத்தனச் சார்பு, சமநிலையைக் குறிப்பதாக இருந்தால் மோதலினால் f-இன் மதிப்பில் மாற்றமில்லை

6.4 மின்கடத்து திறனுக்கான சொமர்பெல்டு கொள்கை

லாரன்ஸ் வழிமுறையில், பெர்மி-டிராக் புள்ளியியல் கொள்கையைப் புகுத்தி உலோகங்களின் மின்கடத்து திறனுக்கான ஒரு தொடர்பை சொமர்பெல்டு பெற்றார். இது ட்ரூடே - லாரன்ஸ் சமன்பாட்டைவிட மிகச்சரியாக இருக்கிறது. இக்கொள்கையில் சொமர்பெல்டு, தளர்வு நேரம் எலக்ட்ரானின் ஆற்றலைப் பொறுத்த ஒரு சார்பாக இருக்கிறது என்றும், ஆனால் அதன் இயக்கத்திசையைப் பொறுத்தில்லை என்றும் அனுமானித்துள்ளார்.

ஓர் உலோகத்தின் மீது E என்ற மின்புலம் X-அச்சுத் திசையில் செயல்படுவதாகக் கொள்வோம். ஓர் எலக்ட்ரான் மீது X-அச்சுத் திசையில் செயல்படும் விசை தளர்வு நேரத்தில் போல்ட்ஸ்மான் சமன்பாட்டை

$$e E_x \frac{\partial f_o}{\partial p_x} = \frac{f - f_o}{\tau} \qquad (6.9)$$

என எழுதலாம். மின்னோட்டம் X-அச்சுத்திசையில் விளைவதால் p_x என்ற உந்தக் கூறைக் கருத்தில் கொண்டால் போதுமானது.

$E = (p_x^2+p_y^2+p_z^2) / 2m$

என்பதால்

$$\frac{\partial E}{\partial p_x} = \frac{p_x}{m} = v_x$$

எனவே

$$\frac{\partial f_o}{\partial p_x} = \frac{1}{m}\frac{\partial f_o}{\partial v_x} = \frac{1}{m}\frac{\partial f_o}{\partial E}\frac{\partial E}{\partial v_x} = \frac{\partial f_o}{\partial E} v_x$$

இதனைக்கொண்டு,

$$F= f_o + \tau e E_x v_x \frac{\partial f_o}{\partial E} \quad (6.10)$$

மின்கடத்து திறனைக் (σ) கணக்கிட, மின்னோட்டச் செறிவை (J) மதிப்பிடவேண்டும். $J = \sigma E$ என்ற தொடர்பின் மூலம் வைக் கணக்கிடலாம்.

உந்தவெளியில் $dp_x\ dp_y\ dp_z$ என்ற அலகுப் பருமனில் இருக்கக்கூடிய எலக்ட்ரான்களின் எண்ணிக்கை $(1/h^3)\ dp_x\ dp_y\ dp_z$ எலக்ட்ரானின் தற்சுழற்சியையும் கருத்திற் கொண்டால் இது $2/h^3\ dp_x\ dp_y\ dp_z$ ஒன்றாகும். f_o என்பது புறப்புலம் செயல்படாதபோது, ஓர் அமைப்பு நிலைத்த நிலையில் இருக்கும்போது எலக்ட்ரான் பங்கீட்டுத்தனத்தின் சார்பு ஆகும். எனவே மின்புலம் இல்லாதபோது, நிலைத்த நிலையில், நிறைவுற்ற எலக்ட்ரான் ஆற்றல் நிலைகளின் சராசரி எண்ணிக்கை.

$n_1 = 2/h^3\ \ f_o(p)\ dp_x\ dp_y\ dp_z$

$f_o(p)$ பெர்மி-டிராக் பங்கீட்டுத்தனத்தின் சார்பாகக் கருதலாம். இது $dp_x\ dp_y\ dp_z$ என்ற உந்த நெடுக்கையில் உள்ள உந்தத்துடன் சமநிலையில் இருக்கின்ற எலக்ட்ரான்களின் எண்ணிக்கையுமாகும்.

E_x என்ற மின்புலம் x-அச்சுத்திசையில் செயல்படும்போது இயக்கச் சமநிலையில் இம்மதிப்பு

$n_2 = 2/h^3\ \ f(p)\ dp_x\ dp_y\ dp_z$

இது அதே $dp_x\, dp_y\, dp_z$ என்ற உந்த நெடுக்கையிலுள்ள உந்தத்துடன் மின்புலம் செயல்படும்போது இருக்கிற எலக்ட்ரான்களின் எண்ணிக்கையாகும். இதில் f(p) என்பது புறப்புலத்தில் பெர்மி-டிராக் பங்கீட்டுத்தனச் சார்பாகும்.

எலக்ட்ரான்களின் பங்கீட்டுத்தனத்தில் ஒவ்வொரு ஆற்றல் நிலையிலுள்ள எலக்ட்ரான்கள், மின்னோட்டத்திற்கு அளிக்கும் பங்களிப்பைக் கணக்கிட்டுக் கூட்டிக் கொண்டால் கடத்தப்படும் மின்னோட்டத்தின் அளவை மதிப்பிடலாம். $dp_x\, dp_y\, dp_z$ என்ற உந்த நெடுக்கையிலுள்ள உந்தமுடைய எலக்ட்ரான்கள் மின்னோட்டச் செறிவிற்குத் தரும் பங்களிப்பு

$$dJ_x\,(p_x\; p_y\; p_z) = -(n_2-n_1)\, ev_x$$

$$J_x = -\frac{2e}{h^3} \iiint v_x\, (f - f_o)\; dp_x\, dp_y\, dp_z$$

இதில் $(f - f_o)$ இன் மதிப்பை சமன்பாடு (6.10)வைக் கொண்டு பதிலீடு செய்ய

$$J_x = -\frac{2e^2}{h^3} E_x \iiint v_x^2\, \tau \frac{\partial f_o}{\partial E}\, dp_x\, dp_y\, dp_z$$

தளர்வு நேரம் எலக்ட்ரானின் ஆற்றலோடு தொடர்புடைய ஒரு சார்பு என்றும். எலக்ட்ரானின் இயக்கத் திசையைச் சார்ந்ததில்லை என்றும் சொமர்பெல்டு கருதினார்.

$$v_x^2+v_y^2+v_z^2 = v^2$$

என அறிவோம். வெப்பச்சமநிலையில் $v_x = v_y = v_z$ என்பதால்

$$v_x^2 = v^2/3$$

மேலும் $dp_x\, dp_y\, dp_z = 4\pi p^2\, dp$

எனவே

$$J_x = -\frac{2e^2 E_x}{h^3} \int_0^\infty v^2 . \tau/3 \frac{\partial f_o}{\partial E} 4\pi p^2\, dp$$

$p=\sqrt{2Em}$ என்பதால் $pdp = mdE$, $E = \frac{1}{2} mv^2$ என்பதால் $v^2 = 2E/m$, எனவே

$$J_x = -\frac{2e^2 E_x}{h^3} \int_0^\infty \frac{1}{3} \frac{2E}{m} \tau \frac{\partial f_o}{\partial E} 4\pi \sqrt{2mE}\, mdE$$

$$= -\frac{16\pi e^2}{3h^3} (2m)^{1/2} E_x \int_0^\infty \tau E^{3/2} \frac{\partial f_o}{\partial E} dE$$

$\partial f_o/\partial E$-ன் மதிப்பு பெர்மிஆற்றலுக்கு அருகாமையில் ஒரு சில ஆற்றல் நெடுக்கையில் குறிப்பிடும்படியாக இருக்கிறது. எனவே இத்தொகையாக்கத்தின் பங்களிப்பு பெர்மி ஆற்றல் E_fக்கு அருகில் ஒரு சில $k_B T$ ஆற்றல் நெடுக்கைக்கு வெளியே ஏதுமில்லை. $E^{3/2}$ $\tau(E)$இன் மதிப்பு, இவ்வாற்றல் நெடுக்கையில் அதிகம் மாறுவதில்லை எனில் இதனைத் தோராயமாக $E_{fo}^{3/2} \tau(E_{fo})$ எனக் கொள்ளலாம். மேலும்

$$\int_0^\infty \frac{\partial f_o}{\partial E} dE = -1$$

எனவே

$$J_x = \frac{16\pi e^2}{3h^3} (2m)^{1/2} E_x \tau_{fo} E_{fo}^{3/2}$$

சார்பிலாச் சுழி வெப்பநிலையில் பெர்மி ஆற்றல்

$$E_{fo} = \frac{h^2}{2m} (3\pi^2 m)^{2/3} \qquad (h = h/2\pi)$$

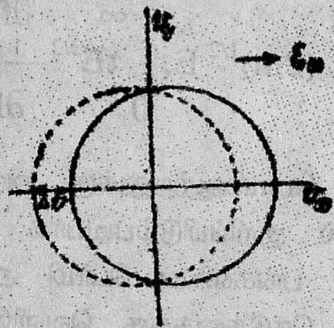
இம்மதிப்பைப் பதிலீடு செய்ய

$$J_x = n_e^2 E_x \tau_f E_x/m \qquad (6.11)$$

இதிலிருந்து மின் கடத்து திறனை மதிப்பிடலாம்.

$$\sigma = \frac{J_x}{E_x} = \frac{ne^2\tau_f}{m}$$

உலோகத்திலுள்ள எல்லாக் கடத்து எலக்ட்ரான்களும், மின் கடத்தலில் பங்கேற்க வல்லன என்றாலும், தளர்வு நேரத்தினால், பெர்மி ஆற்றல் நிலைக்கு அருகிலுள்ள எலக்ட்ரான்கள் மட்டும் கடத்தலில் ஈடுபடுகின்றன என்பதை (6.11) லிருந்து அறியமுடிகிறது.



திடக்கோடு – புலமில்லா நிலையில்

புள்ளிக்கோடு – புலமுள்ள நிலையில்

படம். 6.1. இருபரிமாண வெளியில் பெர்மி வேகப் பங்கீட்டுத்தனத்தில் புறமின்புலத்தின் தாக்கம்.

E_x என்ற புறமின்புலம் செயல்படும்போது எலக்ட்ரானின் வேகம் $\Delta v_x = - eE_x\tau / m$ என்ற அளவிற்கு மாற்றத்திற்கு ஆளாகிறது. படம் 6.1.லிருந்து பங்கீட்டுத்தன மாறுதல்கள் பெர்மி ஆற்றலுக்கு அருகில் மட்டும் ஏற்படுவதை அறியலாம். எனவே E_{fo} க்கு அருகில் எலக்ட்ரானின் தளர்வு நேரமே முக்கியப் பங்கேற்கிறது எனக் கூறலாம். ட்ரூடு – லாரன்ஸ் தொடர்பிற்கும், சொமர்பெல்டு தொடர்பிற்குமுள்ள வேறுபாடு எலக்ட்ரான் தளர்வு நேரத்தை, பெர்மி ஆற்றலில் அதன் தளர்வு நேரமாக மாற்றப்பட்டிருப்பதுதான். அதனால் மின்கடத்துதிறன் மதிப்பின் நெடுக்கையில் குறிப்பிடும்படியான மாற்றம் எதையும் சொமர்பெல்டு கொள்கைப் புலப்படுத்திக் காட்டி, ட்ரூடு-லாரன்ஸ் கொள்கையிலிருந்து விலகியிருக்கவில்லை.

ஆற்றல் பட்டைக் கொள்கை பற்றிவரும் அத்தியாயத்தில் பார்ப்போம். இக்கொள்கை இத்தொடர்பில் ஒரு சிறிய மாற்றத்தை உட்பகுத்துகிறது. இதன்படி

$$\sigma = \frac{n_{eff}\, e^2\tau_f}{m}$$

ஆகும். இதில் n_{eff} என்பது ஓரலகு பருமனில் உள்ள செயலுறு எலக்ட்ரான்களின் எண்ணிக்கையாகும். எலக்ட்ரானின் செயலுறு நிறை அடிப்படையில் இத்தொடர்பை

$$\sigma = \frac{ne^2\tau_f}{m_{eff}}$$

என்றும் குறிப்பிடலாம்.

6.5. தளர்வு நேரத்தைக் கணக்கிட்டறிதல் (calculation of Relaxation time)

உலோகங்களின் மின்கடத்து திறன் மற்றும் அதன் வெப்பநிலை சார்ந்த மாற்றம், இவை τ_f உடன் தொடர்புடையதாக இருப்பதால், பெர்மி ஆற்றல்நிலையில் எலக்ட்ரானின் தளர்வு நேரத்தைக் கணக்கிட்டறியும் வழிமுறையை அறிந்து கொள்ளவேண்டியது அவசியமாகிறது.

தளர்வு நேரத்தைத் தாழ்ந்த வெப்பநிலைகளில் $T << \theta_D$ (டிபை வெப்பநிலை) திட்டவட்டமாக வரையறுக்க முடிவதில்லை. இதனால் தளர்வு நேரம் என்ற கருத்து $T >> \theta_D$ என்ற வெப்பநிலை நெடுக்கையில் மட்டுமே ஏற்புடையதாக இருக்கிறது.

$$\lambda_f = v_f \tau_f$$

என்று ஒரு தொடர்பை நாம் ஏற்படுத்தமுடியும். இதில் λ_f, v_f, τ_f என்பதை முறையே பெர்மி ஆற்றல் நிலையில் சராசரி மோதலிடைத் தொலைவு, வேகம், மற்றும் தளர்வு நேரமாகும். λ_f ன் மதிப்பைக் கண்டறிய உலோகங்களில் எலக்ட்ரானின் இயக்கத்திற்கு உள்ள தடைகளின் மூலத்தைப் பற்றி அறிந்து கொள்ள வேண்டியது அவசியமாயிருக்கிறது. நிறைவான அலைச்சீர்மை கொண்ட படிக அணித்தளத்தில் அகப்புல அழுத்தம் தொடர்இடச்சீர்மை உடையதாக இருக்கிறது. அதில் இயங்கும் எலக்ட்ரானின் அலை வெக்டர் (wave vector) (அலை வெக்டர் $2\pi/\lambda$ ஆகும். இதை k என்று குறிப்பிடுவர்.) புறப்புலம் ஏதும் இல்லாத நிலையில் மாறாததாக இருக்கிறது. அலைப்பண்பின் காரணமாக, ஒரு நிறைவான படிகத்தில் எலக்ட்ரான்கள் எந்த ஊடகத் தடைகளுக்கும் உள்ளாவதில்லை என்பதை இது சுட்டிக்காட்டுகிறது. இதன் விளைவு, படிக அணித்தளத்தில் அயனிகள் ஓய்விலிருக்குமானால், எலக்ட்ரான்களின் சராசரி மோதலிடைத் தொலைவு வரையறுக்க முடியாததாகிறது. இதனைக்கொண்டு உலோகங்களின் மின் கடத்துதிறனை விளக்கவே முடியாது. எனவே எலக்ட்ரான்களின் உள்ளியக்கங்களுக்குத் தடை உண்டாக்கும் உண்மையான மூலங்கள், எலக்ட்ரான்கள் இயங்கும் அகப்புல அழுத்தத்தின் தொடர்சீர்மையில் காணப்படும்

சீர்குலைவுகளாக இருக்கின்றன. இவை, படிக அணித்தள அதிர்வுகள், குறைபாடுகள், வேற்றுப்பொருள் கலப்பு, போன்றவற்றின் காரணமாக ஏற்படலாம் என்று முன்பே குறிப்பிட்டுள்ளோம்.

படிகத்தில் அணித்தள அதிர்வு தவிர்த்துப் பிற குறைபாடுகள் ஏதும் இல்லை என்று கருதினால், மோதலினால் ஏற்படும் சிதறலில் இவைகளுக்குப் பங்கில்லை என்று முடிவு கட்டமுடியும். அந்நிலையில் λ_f மற்றும் τ_f மதிப்பீடு அணித்தள அதிர்வோடு மட்டும் தொடர்புடையதாக இருக்கிறது. அணித்தள அதிர்வு அலைவீச்சின் மதிப்பு, எலக்ட்ரான் அலை வெக்டரின் சிதறலை வரையறுக்கக்கூடியதாக இருக்கின்றது. அதாவது அதிர்வு அலைவீச்சு சிதறல் நிகழ்வதற்கான வாய்ப்பைத் தோற்றுவிக்கிறது என்று கூறலாம். இயக்க ஆற்றல் கொள்கை வழிச் சமன்பாடுகளைக் கொண்டு, சராசரி மோதலிடைத் தூரத்தை அதே வழிமுறையைப் பின்பற்றிக் கண்டறியலாம்.

உயர் வெப்பநிலை நெடுக்கையில் படிக அணித்தள அதிர்வு தொல்லியக்க இயற்பியல் விதிகளுக்கு உட்பட்டுத் திகழ்கின்றன என்பதால் அதிர்வுறும் அணுவின் ஒரு தன்னிச்சை உரிமைப்படிகளுக்கான ஆற்றலை

$$1/2\, k_B T = 1/2\, m\, \omega^2 d^2$$

என்று குறிப்பிடலாம். இதில் m என்பது அதிர்வுறும் அணுவின் நிறை, d என்பது அதிர்வின் அலைவீச்சு, ω என்பது கோண அதிர்வெண் ஆகும். உயர் வெப்பநிலைகளில் உயர் அதிர்வெண்ணுடன் கூடிய அதிர்வுகளே அதிகமாக ஏற்படுகின்றன (ஐன்ஸ்டீன் மற்றும் டிபை அதிர்வெண்கள் சமமாக இருக்கின்றன என்று கூறலாம். தாழ்ந்த வெப்பநிலையில் உலோகங்களின் சுய வெப்ப ஏற்புத்திறனுக்கான, ஐன்ஸ்டீன் மற்றும் டிபை கொள்கைகளைப் பார்க்க)

$$\omega^2 = \omega_E^{\,2} = \omega_D^{\,2} = \frac{k_B \theta_D^{\,2}}{h}$$

இதனைப் பதிலீடு செய்ய

$$d^2 = \frac{h^2 T}{m k_B \theta_D^{\,2}}$$

சிதறல் நிகழ்வாய்ப்பு, அலைவீச்சின் இருமடிக்கு நேர்வீதத்தில் இருப்பதால் (இவ்விரண்டின் பரிமாணமும் பரப்பலகில் இருக்கின்றன)

சிதறல் முகப்பரப்பு $= \text{மாறிலி} \dfrac{h^2 T}{n k_B \theta_D^2}$

வெப்ப இயக்கவியல் அடிப்படையில், சராசரி மோதலிடைத் தூரத்தை மதிப்பிட்டால்

$$\lambda = \frac{1}{\text{(ஓரலகு பருமனில் உள்ள அணுக்களின் எண்ணிக்கை)}}$$

$$\lambda = 1/ n_d^2$$

(ஓரலகுப் பருமனில் உள்ள அணுக்களின் எண்ணிக்கை ஓரிணை திறனுடைய அணுக்களைக் கொண்டுள்ள உலோகத்தில், ஓரலகுப் பருமனில் உள்ள கட்டற்ற எலக்ட்ராான்களின் எண்ணிக்கையாகும்)

$$\tau = \lambda/v$$

என்பதால்

$$\tau \; \alpha = \frac{1}{nvd^2} = \text{மாறிலி} \frac{mk_B\theta_D^2}{nvh^2 T}$$

அல்லது

$$\tau_f = \text{மாறிலி} \frac{mk_B\theta_D^2}{nv_f h^2 T} \quad (T >> \theta_D)$$

மின்கடத்து திறனுக்கு நாம் வருவித்த தொடர்பில் τ_f இன் மதிப்பைப் பதிலீடு செய்ய

$$\sigma = \text{மாறிலி} \frac{e^2}{m_{eff} v_f} \frac{mk_B\theta_D^2}{h^2 T}$$

என்ற தொடர்பைப் பெறலாம்.

6.6. தாழ்ந்த வெப்ப நிலையில் மின்கடத்து திறன்

$(T << \theta_D)$ என்ற தாழ்ந்த வெப்பநிலைகளில், தளர்வு நேரத்தைத் துல்லியமாக வரையறுக்க முடிவதில்லை.

$$\tau_f = \frac{m\sigma}{ne^2}$$

என்பதை அறிவோம். τ_f –ன் மதிப்பை வெப்பங்கடத்து திறனைக் கொண்டும் மதிப்பிடலாம். ($T < \theta_D$) என்ற நிலையில் இவ்விரு மதிப்புகளும் ஒத்ததாக இல்லை. இது நம்முடைய வழிமுறையின் உறுதியை ஐயப்பட வைக்கிறது. இதனால் நாம் மேற்கொண்ட வழிமுறை தாழ்ந்த வெப்பநிலைகளில் செயலற்றுப் போகிறது என்று ஏற்றக் கொள்ள வேண்டியது அவசியமாகிறது. தாழ்ந்த வெப்பநிலைகளில் படிக அணித்தள அதிர்வுகள் நலிவடைகின்றன. இதனால் சிதறல் முகப்பரப்பும் குறைந்து, மின்கடத்துதிறன், வெப்பநிலை தாழ்வுற்றுச் சார்பிலாச் சுழி வெப்பநிலையை அணுகும்போது திடீரென அதிகரிக்கிறது. திருத்தமான முழுக்கொள்கையை ப்ளாக் (Bloch) என்பார் வெளியிட்டுள்ளார். இதன்படி மின்தடை எண் சார்பிலா வெப்பநிலையின் 5-ம் மடிக்கு நேர்வீதத்தில் இருக்கிறது. சில தோராயங்களை அனுமதித்து, முழு வெப்பநிலை நெடுக்கைக்கும் ஒத்துவருமாறு மின்தடை எண்ணிற்கான ஒரு தொடர்பை, ப்ளோர் கொள்கையின் அடிப்படையில் குருனேசன் (Gruneisen) என்பார் நிறுவினார்.

$$\rho(T) = A\left(\frac{T}{\theta_D}\right)^5 \int_0^{\theta_{D/T}} \frac{x^5 dx}{(e^x-1)(1-e^{-x})} \times \text{சிதறல் முகப்பரப்பு}$$

இதில் A என்பது ஒரு மாறிலி. $T << \theta_D$ என்ற நிலையில் $\rho \alpha T$ என்றும் $T >> \theta_D$ $\rho \alpha T^5$ என்றும் நிறுவி இத்தொடர்பு சோதனை முடிவுகளுக்கு இணக்கமாக இருக்கிறது.

6.7. மாத்தீசன் விதி

ஓர் உலோகத்தில் வேற்றுப் பொருள் கலந்திருப்பின், கடத்து எலக்ட்ரான்கள், படிக அணித்தள அதிர்வுகளால் மட்டுமன்றி, வேற்று அணுக்களாலும் சிதறலுக்கு ஆளாகும். இதற்குக் காரணம் வேற்று அணுக்களுக்கருகில் புலத்தின் தன்மை மாறுபடுவதால் அகப்புல அழுத்தத்தின் தொடர் சீர்மையில் பாதிப்பு ஏற்படுவதுதான். இவ்விரு காரணங்களில் ஏற்படும் சிதறலின் முகப்பரப்புகளின் கூடுதல் மொத்த முகப்பரப்பு என்று கொள்ளலாம். (ஏனெனில் சிதறல் முகப்பரப்பு என்பது வாய்ப்பின் அடிப்படையில் வரையறுக்கப்படுகிறது)

தளர்வு நேரம், சிதறல் முகப்பரப்பிற்கு எதிர்வீதத்தில் இருப்பதால்,

$$\frac{1}{\tau} = \frac{1}{\tau_i} + \frac{1}{\tau_e}$$

என்று நிறுவமுடியும். இதில் $\tau_i \, \tau_e$ என்பன முறையே வேற்றுப் பொருள் கலப்பு, படிக அணித்தள அதிர்வுகளினால் ஏற்படும் மோதல்களுக்கான தளர்வு நேரங்களாகும். பெர்மி ஆற்றல் நிலையில் எலக்ட்ரான்களின் தளர்வு நேரத்திற்கு, மின்தடைஎண் நேர்வீதத்தில் இருப்பதால், $1/\tau_e$ வெப்பநிலை சார்ந்த மின் தடை எண் பகுதிக்கூறுக்கும், $1/\tau_i$ வெப்பநிலை சாரா மின் தடை எண் பகுதிக் கூறுக்கும் காரணமாக இருக்கின்றன என்று கூறலாம். வேற்றணுக்களின் செறிவு மிக அதிக அளவில் இல்லாதபோது $1/\tau_i$ என்பது வேற்றணுக்களின் செறிவிற்கு நேர் வீதத்தில் இருக்கின்றது என்பதால் இது வெப்பநிலை சாராப் பகுதிக் கூறுக்குக் காரணமாக இருக்கிறது. சில சமயங்களில் τ_i கூட மிகச்சிறிய அளவில் வெப்பநிலை சார்ந்த மின்தடை பகுதிக்குக் காரணமாக இருப்பதும் உண்டு.

வேற்றுப்பொருள் கலப்பினால் அதிகரிக்கும் மின் தடை எண். சார்பிலாச்ட சுழி வெப்பநிலையில் கூட மறைவதில்லை. T=O°K வெப்ப நிலையில் மறையாமல் விஞ்சி நிற்கும் மின்தடையை **மீந்த மின்தடை** (residual resistivity) என்று கூறுவர்.

லாரன்ஸ் எண்

வீடமான்-பிரான்ஸ் விதி K/σT = L என்று லாரன்ஸ் எண்ணை வரையறுக்கிறது என்று முன்பு பார்த்தோம். தாழ்ந்த வெப்பநிலைகளில் L-இன் மதிப்பு குறைந்து விடுகிறது என்பது சோதனைகள் தெரியப்படுத்தி இருக்கின்றன. அதனால் லாரன்ஸ் எண் உலோகங்களில் வெப்பங்கடத்து திறன் எங்ஙனம் மின் கடத்து திறனோடு தொடர்புள்ளதாக இருக்கிறது என்பதைச் சுட்டிக் காட்டக் கூடியதாக இருக்கிறது என்று கூறலாம்.

உலோகங்களின் கட்டற்ற எலக்ட்ரான் கொள்கையைக் கொண்டு ட்ருடு என்பார்,

$$K = \frac{3}{2} \frac{n k_B^2 T \tau}{m}; \quad \sigma = \frac{n e^2 \tau}{m}$$

$$L = \frac{3}{2} \left(\frac{k_B}{e} \right)^2$$

என்ற தொடர்புகளை வருவித்தார். இது Lஇன் மதிப்பைச் சோதனை முடிவுகளுக்கு ஏற்பத் தெரிவித்தாலும் K, σ இவற்றின் மதிப்புகளில் முரண்பாடுகளையும் அவற்றின் வெப்பநிலை சார்ந்த மாற்றங்களுக்கு விளக்கமின்மையையும் தருகிறது.

சொமர் பெல்டு குவாண்டம் கொள்கை

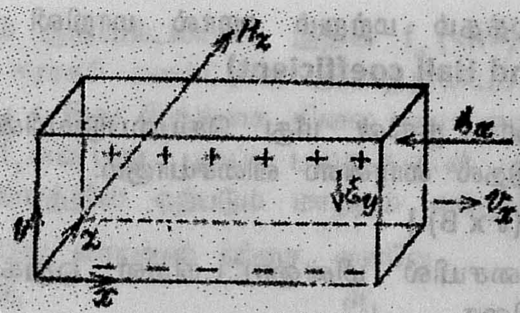
$$K = \frac{\pi^2}{3} \frac{k_B^2 T n \tau_f}{m}; \quad \sigma = \frac{ne^2\tau}{m}$$

$$L = \frac{\pi^2}{3} \left(\frac{k_B}{e}\right)^2 = 2.45 \times 10^{-8} \text{ வாட் - ஓம் டிவி}^2$$

என்று தெரிவிக்கிறது. அறை வெப்பநிலையில் பெரும்பாலான உலோகங்கள் இச்சமன்பாட்டிற்கு ஓரளவு ஒத்துப்போகின்றன. முழு இணக்கம் இல்லாமை இங்கு எதிர்பார்க்கக்கூடியதே. ஏனெனில் இக்கொள்கையில் மின் மற்றும் வெப்பங் கடத்தல்களுக்குச் சமமான தளர்வு நேரத்தைக் கற்பித்துக் கொண்டுள்ளோம். வெப்பத்தையும், மின்சாரத்தையும் கடத்தும் முக்கிய மூலமாக எலக்ட்ரான் மட்டுமே செயல்படுகிறது என்று கொண்டதால் ஏற்பட்ட தோராயத்தின் ஒரு விளைவே இது. உண்மையில், குறிப்பாகத் தாழ்ந்த வெப்பநிலைகளில் குறிப்பிடும்படியான வெப்பம் போனான்களாலும் எடுத்துச் செல்லப்படுகிறது. இதனால் $\tau_{\text{வெப்பம்}}$, $\tau_{\text{மின்}}$ இரண்டையும் சமமதிப்புள்ளவைகளாக (அறைவெப்பநிலையில் அவற்றின் தகவு ஏறக்குறைய 1 ஆக இருப்பினும்) ஏற்றுக்கொள்ளமுடியாது. $\tau_{\text{வெப்பம்}}/\tau_{\text{மின்}}$-ன் மதிப்பு வெப்பநிலைக் குறையக்குறையக் குறைவுறுகிறது.

6.11 ஹால் விளைவு (Hall effect)

மின்னோட்டம் பாய்ந்து செல்லும் ஒரு கடத்தியின் மின்னோட்டத்திசைக்கு நேர் குறுக்காக ஒரு காந்தப்புலத்தைச் செயல்படுத்தும்போது மின்னோட்டத் திசைக்கும், காந்தப்புலத் திசைக்கும் நேர்குத்து திசையில் ஒரு மின்னழுத்தம் தோற்றுவிக்கப்படுகிறது. இவ்வியற்பியல் நிகழ்வு □ால் விளைவு எனப்படுகிறது. இதனைத் தொடர் இடப்பெயர்வுக் கொள்கை மூலம் விளக்க முடியும்.



படம் 6.3 உலோகத்தண்டில் ஹால் விளைவு

ஓர் உலோகக் கடத்தியின் நீளம் x-அச்சுக்கு இணையாக இருப்பதாகக் கொள்வோம். E_x புலச் செறிவுள்ள ஒரு மின்புலம் x அச்சுத்திசையில் செயல்படுத்த எலக்ட்ரான்கள் E_xக்கு எதிர்திசையில் நகர்வுறும். அதாவது J_x என்ற மின்னோட்டச் செறிவு E_x திசையில் தோன்றும். இப்போது xஅச்சுக்கு நேர் குத்துத் திசையில், அதாவது zஅச்சுத் திசையில் B_z என்ற காந்தப் பாயச் செறிவுள்ள ஒரு நிலையான காந்தப்புலத்தை ஏற்படுத்துவோம். எலக்ட்ரானின் இயக்கத் திசைக்குக் குறுக்காகச் செயல்படும் இக்காந்தப்புலம் அதன்மீது ஒரு லாரன்ஸ் விசையைச் செயல்படுத்தி y-அச்சின் எதிர்முனைப்பக்கமாக ஒதுக்குகிறது. இதனால் y-அச்சின் எதிர்முனைப்பக்கம் எதிர் மின்னூட்டத் தன்மையையும் நேர் முனைப்பக்கம் நேர் மின்னூட்டத்தன்மையையும் பெறுகின்றன. இது y-அச்சுத் திசையில் (கடத்தியின் உட்பகுதியில்) ஒரு நிலை மின்புலத்தைத் தோற்றுவிக்கக் காரணமாக அமைகிறது. இந்த விளைவு மின்புலம் பரப்பில் மின்னூட்டக் குவிப்பைத் தூண்டுகிறது. கடத்தியின் புறப்பரப்பில் இப்படிக்குவியும் மின்னூட்டம் காந்தப்புலத்தால் செயல்படும் விசையால், விளைவு மின்புல விசை நேர் செய்யப்படும் வரை தொடர்கிறது. தூண்டப்பட்ட மின்னழுத்தத்தை ஹால் மின்னழுத்தம் என்று குறிப்பிடுகிறார்கள். அதாவது y-அச்சுத்திசையில் தூண்டுதல் மின்னோட்டம் இல்லாத நிலையை எட்டி இறுதியில் ஒரு நிலையான நிலையை அடைகிறது. அப்போது E_y என்ற நிலைமின்புலம் y-அச்சுத்திசையில் தோன்றிருக்கும்.

கடத்தியில் மின்னோட்டமானது நேர்மின் துளைகளால் (holes) ஏற்படுவதாக இருந்தால், குறுப்பரப்புகளில் ஒதுக்கப்படும் மின்னூட்டங்கள் ஒன்றுக்கொன்று இடம்மாறி, y-அச்சுக்கு எதிர்திசையில் நிலைமின் புலத்தைத் தோற்றுவிக்கிறது.

எனவே ஹால் மின்னழுத்தத்தை மதிப்பிட்டு, மின்னோட்டத்திற்கும் காரணமான மின் மூலங்களைப் பற்றிய விவரங்களைத் திரட்ட முடியும்.

ஹால் மின்னழுத்தம் மற்றும் ஹால் மாறிலி (Hall voltage and Hall coefficient)

ஒரு மின்னூட்டத்தின் மீது செயல்படும்மின் மற்றும்காந்த விசைகளின் கூடுதல் லாரன்ஸ் விசையாகும்.

$F = -e\,[E + (v \times B)]$

y-அச்சுத்திசையில் மின்னூட்டங்கள் ஒதுக்கப்படுவதற்குக் காரணமாகும் விசை

$F_y = -e\,[E_y + (v_x \times B_z)]$

ஒரு நிலையான நிலையை எட்டிய பின்பு இவ்விசை சுழியாகிவிடுகிறது அந்நிலையில்

$E_y = v_x B_z$

இதில் E_y என்பது ஹால்புலம் (Hall field) எனப்படுகின்றது. எலக்ட்ரான் கொள்கை முடிவுகளின்படி மின்னோட்டச்செறிவு

$J_x = -n e v_x$

அல்லது $v_x = -J_x / ne$

இம்மதிப்பைப் பதிலீடு செய்ய

$$E_y = \frac{J_x \cdot B_z}{ne} = R_H J_x B_z$$

இதில்

$$R_H = -\frac{1}{ne} = \frac{-v_x}{J_x} \text{ மீ}^3 \text{ கூலும்}$$

R_H-யை ஹால் குணகம் என்று குறிப்படுவர். இதன் குறியானது, கடத்தியில் மின்னோட்டம் நிகழக் காரணமாக இருக்கும் மின்துகளின் மின் குறியே ஆகும்.

ஹால்விளைவைப் போல்ட்ஸ்மான் சமன்பாட்டைக் கொண்டும் விளக்க முடியும். ஒருபடித்தன்மையுடன் ஒரு நிலையான நிலையை எட்டியுள்ள ஒரு அமைப்பிற்கு, போல்ட்ஸ்மான் சமன்பாட்டை

$$-\frac{f - f_o}{\tau} = F \cdot \frac{\partial f}{\partial p}$$

என்று எழுதலாம். மேலும்

$f = f_o(<n>) + f_1$

என்றும் குறிப்பிடலாம். இதில் f_0 (<n>) என்பது சமநிலையில் <n> என்ற சராசரி எலக்ட்ரான் அடர்த்தியைப் பொறுத்த பங்கீட்டுத் தனச் சார்பு (இது இருக்கை நிலை ஆயத்தைப் பொறுத்ததில்லை) என்றும் f_1 என்பது புறப் புலங்களின் செயல்பாடுகளினால் பங்கீட்டுத்தனத்தில் ஏற்படும் மாற்றம் என்றும் கொள்ளலாம்.

F என்பது லாரன்ஸ் விசை, எனவே

$$e \frac{\partial f_0}{\partial E} v [-E-(v \times B)] + e \frac{\partial f_1}{\partial p} [-E-(v \times B)]$$

v. (v x B) சுழியாவதால் முதல் பகுதியில் காந்தப்புலக்கூறும் மறைகிறது. இரண்டாவது பகுதியில் மின்புலக் கூறு, இருபடித் தன்மையால் மறைகிறது. எனவே

$$- e \frac{\partial f_0}{\partial E} v . E - e \frac{\partial f_1}{\partial p} (v \times B) - f_1/\tau$$

பொதுவாகக், காந்தப் புலத்தினால் ஏற்படும் மின்விளைவு, பங்கீட்டுத் தன அமைப்பைச் சுழற்சிக்கு உள்ளாக்கும் என்று கூறலாம். மின் கடத்து திறனைக்காண ஒரு தொடர்பைப் பெறும்போது பின்பற்றிய வழிமுறையைக் கொண்டு நாம் ஒரு தீர்வை மனத்திற்கொண்டு முயலலாம். ஆனால் அப்போது மின்புலத்திற்குப் பதிலாக G என்ற ஒரு புலஞ்சார்ந்த வெக்டார் கருதப்படவேண்டும். இதன்படி

$$f_1 = e\tau \frac{\partial f_0}{\partial E} v.G$$

இம்மதிப்பினைப் பதிலீடு செய்ய

$$- e \frac{\partial f_0}{\partial E} v. E - e^2\tau \left[\frac{\partial}{\partial E} \frac{\partial E}{\partial p} \frac{\partial f_0}{\partial E} (v.G)\right] (v x B)$$

$$= - e \frac{\partial f_0}{\partial E} (v.G)$$

$$- e \frac{\partial f_0}{\partial E} v. E - e^2\tau \left[\frac{G}{m} \frac{\partial f_0}{\partial E} + \frac{\partial^2 f_0}{\partial E^2} (v.G)v\right] (v x B)$$

$$= - e \frac{\partial f_0}{\partial E} (v.G)$$

v. (vxB) என்பது சுழியாவதாலும், $-e\,\partial f_o/\partial E$ என்பது பொதுவான காரணியாக இருப்பதாலும்,

$$v.E + \frac{e\tau}{m} G.(vxB) - (v.G) = 0$$

அல்லது

$$v\left[E + \frac{e\tau}{m}(BxG) - G\right] = 0$$

A.(BxC) = B.(CxA) என்ற வெக்டர் ஒப்புமைச் சமன்பாடு இங்கு பயனில் கொள்ளப்பட்டுள்ளது. இத்தொடர்பிலிருந்து

$$E = G - \frac{e\tau}{m}(BxG)$$

என்ற மதிப்பைப் பெறலாம். புற காந்தப்புலம் தோன்றி இருக்கவில்லை எனில், மின்னோட்டச் செறிவு

$$J = \sigma E$$

எனவே

$$E = \frac{J}{\sigma} = G$$

இதனை நமது சமன்பாட்டில் உட்புகுத்திக் கொண்டால்

$$E = \frac{J}{\sigma} - \frac{e\tau}{m\sigma}(BxJ)$$

இதில் இருக்கும் இரண்டாவது பகுதி, செயல்படும் புறகாந்தப்புலத்திற்கும், மின்னோட்டத்திற்கும் நேர்குத்தாகச் செயல்படும் மின்புலத்தை அதாவது ஹால் புலத்தை (E_H)க் குறிக்கிறது.

$$E_H = \frac{e\tau}{m\sigma}(BxJ)$$

இதில் வரும் தொடர்பு மாறிலி (Proportionality constant) ஹால் மாறிலியாகும்.

$$R_H = -\frac{e\tau}{m\sigma}$$

$$\sigma = \frac{ne^2\tau}{m}$$

என்ற மதிப்பைப் பதிலீடு செய்ய

$$R_H = -\frac{1}{ne}$$

அறை வெப்பநிலையில் சில உலோகங்களுக்கான ஹால் மாறிலியும், நகர்திறனும் (mobility) அட்டவணை 6.1இல் தரப்பட்டுள்ளன.

அட்டவணை 6.1.

உலோகங்களின் ஹால் மாறிலி மற்றும் நகர்திறன்

உலோகம்	ஹால் மாறிலி $R_H \times 10^{10}$ மீ3/கூலும்	நகர்திறன் μ மீ /வோல்ட்-வினாடி
வெள்ளி – Ag	-0.84	0.0056
அலுமினியம் - Al	-0.30	0.0012
தங்கம் - Au	-0.72	0.0030
செம்பு	-0.55	0.0032
லிதியம்	-1.70	0.0018
சோடியம்	-2.50	0.0053
துத்தநாகம்	+ 0.3	0.0060
காட்மியம்	+ 0.7	0.0080

ஹால் மாறிலி, கடத்தியில் உள்ள மின் கடத்து துகள்களின் மின்னூட்டத் தன்மையைப் போலக் குறியைக் கொண்டிருக்கிறது. அதாவது எலக்ட்ரான்களால் மட்டும் மின்சாரம் கடத்தப்படுமானால் ஹால் மாறிலி எப்போதும் எதிர்குறிஉடையதாக மட்டுமே இருக்கமுடியும். ஆனால் சில உலோகங்களுக்கும், குறைக்கடத்திகளுக்கும் R_H-இன் மதிப்பு நேர்குறி உடையதாக அறியப்பட்டிருக்கிறது. இது மின்சாரம் நேர்மின்னூட்டத் துகள்களாலும் கடத்தப்படும் வாய்ப்பைச் சுட்டிக்காட்டுகிறது. உலோகங்களின் கட்டற்ற எலக்ட்ரான் கொள்கை நேர்மின்னூட்டத் துகள்களின் தோன்றலையும், அதனால் மின்சாரம் கடத்தப்படுதலையும் விளக்கக்கூடியதாக இல்லை. இச்சிக்கலை ஆற்றல் பட்டைக் கொள்கையைக் கொண்டு பின்னர் தெளிவுபடுத்தினார்கள். இக்கொள்கையின்படி நிறைவுபெற்ற உயர் ஆற்றல் நிலைகளில் உள்ள எலக்ட்ரான்கள் கிளர்ச்சி பெற்று ஒரு காலி இடத்தைத் தோற்றுவிக்குமானால் அது நேர்மின் அயனிகளைப் போல ஒரு நேர் மின்துகளாகக் கருதப்படும். இதனையே துளை (hole) என்று கூறுவார்கள். ஒரு நேர் மின்துகள் எதிர் மின்னூட்டங்கொண்ட

எலக்ட்ரானைக் கவர்வது போல, இத்துளையும் எலக்ட்ரானைக் கவர நாட்டம் கொள்வதால், இதனை நேர் மின் துகளாகக் கருதுவார்கள்.

நகர்திறனும் ஹால் கோணமும்
(Mobility and Hall angle)

ஓரலகு மின்புலம் செயல்படுத்தப்படும்போது ஊடகத்திலுள்ள மின்துகள்கள் பெறும் வேகத்தை அதன் நகர்திறன் என்பர். இதனை μ என்ற கிரேக்க எழுத்தால் குறிப்பிடுவார்கள்.

$$\mu = \frac{v_x}{E_x}$$

ஹால்புலம் தொடர்பான சமன்பாட்டில் இதனைப் பதிலீடு செய்ய

$$E_y = v_x B_z = \mu E_x B_z$$

ஆனால் $E_y = R_H J_x B_z$

இவ்விரு சமன்பாடுகளையும் ஒப்பிட்டால்

$$\mu = \frac{R_x J_x}{E_x} = R_H \sigma$$

எனவே நகர் திறன் என்பது ஹால் மாறிலிக்கும் கடத்து திறனுக்கும் உள்ள பெருக்கல் பலனாகும்.

$$\mu = R_H \sigma$$

$$= \frac{E_y}{J_x B_z} = \sigma = \frac{E_y}{E_x B_z} = \frac{\phi}{B_z}$$

இதில் $\phi = E_y / E_z$ ஹால் கோணம் எனப்படுகின்றது. எனவே

$$\phi = \mu B_z$$

என்று ஹால் கோணத்தையும் நகர் திறனையும் தொடர்புபடுத்தி ஒரு சமன்பாட்டை நிறுவலாம்.

ஹால் விளைவின் முக்கியத்துவம்

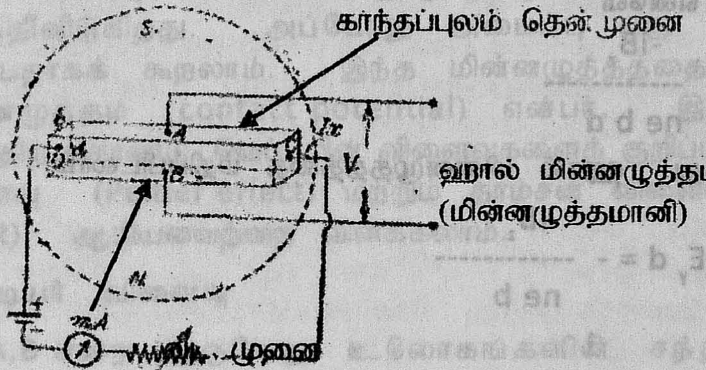
ஹால் விளைவு பற்றிய ஆய்வுகள் நமக்குப் பின்வரும் விவரங்களைத் தரக்கூடியதாக இருக்கிறது.

1. மின்சாரத்தைக் கடத்தும் ஊடகத் துகளின் மின் தன்மையை அறியமுடிகிறது.
2. ஹால் மாறிலியின் அளவிலிருந்து ஓரலகுப் பருமனில் உள்ள மின் கடத்தும் துகள்களின் எண்ணிக்கையை மதிப்பிட முடிகிறது.

3. நகர்திறனை நேரடியாகக் கண்டறிந்து கொள்ள முடிகிறது.

4. ஒரு திண்மப் பொருள் எளிதில் கடத்து உலோகமா, அரிதில் கடத்து உலோகமா, இல்லை குறைக்கடத்தியா என்பதைத் திட்டவட்டமாகத் தீர்மானிக்க முடிகிறது.

ஹால் மாறிலியைக் கண்டறியும் சோதனை முறை



படம். 6.4 ஹால் விளைவு – சோதனை அமைப்பு

சில மில்லிமீட்டர், அகலமும் சில சென்டிமீட்டர் நீளமும் உள்ள உலோகத்தண்டு, காந்தப்புலம் குறுக்காகச் செயல்படுமாறு வெளியில் வைக்கப்படுகிறது. அதன் நீளவாக்கில் மின்னோட்டம் நிகழுமாறு, ஒரு மின்கலம், மின்தடை மாற்றி (Rheostat) தொடரிணைப்பில் அமைக்கப்பட்டுள்ளன. சுற்றில் உண்டாகும் மின்னோட்டத்தை அளவிட ஒரு மில்லி அம்மீட்டரும், தேவையில்லாதபோது, அளவீடுகளை நிறுத்தி வைக்க ஏதுவாக மின்சாவியும் சுற்றில் இணைக்கப்பட்டுள்ளன. மின்னோட்டத் திசைக்கும், புறகாந்தப்புலத்திசைக்கும் நேர்குத்துத் திசையில் தூண்டுதல் மின்னழுத்தத்தை அளவிட, தகுந்த மின்முனைகள் உலோகத்துண்டின் புறப்பரப்பில் செய்யப்பட்டு, முன்கூட்டியே அளவுத் திருத்தம் (Calibration) செய்யப்பட்ட ஒரு மின்னழுத்த மானியோடு இணைக்கப்பட்டுள்ளது. இதற்கு 0.1 முதல் 10 மைக்ரோ (10^{-6}) வோல்ட் / மீட்டர் என்றவாறு மின்னழுத்த மானியை அளவுத்திருத்தம் செய்து கொள்வது நல்லது. வெப்ப விளைவுகளினால் ஏற்படும் தவிர்க்க முடியாத, எதிர்பாரா இயல் நிகழ்வுகளினால் தோன்றும் வெப்ப மின்னழுத்தத்தை முடிந்தஅளவு தவிர்க்க ஏற்புடைய அளவீட்டுத்திருத்தம் அளவீட்டில் பிழைகளைப் பெரிதும் குறைக்கும்.

ஹால் மின்புலம், $$E_y = v_x B_z = -\frac{J_x}{ne} B_z$$

மின்னோட்டச் செறிவு

$$J_x = \frac{i}{b \times d}$$

i என்பது சுற்றில் உள்ள மின்னோட்டம், b, d என்பன முறையே எடுத்துக் கொள்ளப்பட்ட உலோகத்துண்டின் அகலமும், தடிப்பும் ஆகும். எனவே

$$E_y = \frac{-iB_z}{ne\,b\,d}$$

இதிலிருந்து ஹால் மின்னழுத்தத்தை மதிப்பிடலாம்.

$$v_H = E_Y\,d = -\frac{iB_z}{ne\,b}$$

$$R_H = -\frac{1}{ne}$$

$$v_H = R_H\,\frac{iB_z}{b}$$

எனவே ஹால் மாறிலி

$$R_H = \frac{bv_H}{iB_z}$$

உலோகத் துண்டில் பாயும் மின்னோட்டத்தின் காரணமாக ஏற்படும் ஒரு வெப்பநிலைச் சரிவினால் அளவீட்டில் பிழை ஏற்பட வழியுண்டு. சுற்றில் மின்னோட்டத்தின் திசையை மாற்றியும், காந்தப்புலத்தின் திசையை மாற்றியும், அளவீடுகள் எடுத்து அவற்றின் சராசரி மதிப்பைக் கருதுவதால் இப்பிழையின் வெளிப்பாட்டை ஓரளவு தணித்துக் கொள்ளலாம்.

6.10 வெப்பமின் விளைவுகள் (Thermo electric effects)

கட்டற்ற எலக்ட்ரான் கொள்கையின் உதவியோடு வெப்ப மின் விளைவுகளை விளக்க முடிகிறது. வெவ்வேறு எலக்ட்ரான் செறிவுள்ள A, Bஎன்ற இரு உலோகங்களை எடுத்துக்கொள்வோம். Aயில் எலக்ட்ரான் செறிவு Bயில் உள்ளதைவிட அதிகமாக இருக்கட்டும். இதனால் Aஇல் எலக்ட்ரான் அழுத்தம் (Electronic pressure) Bயைக் காட்டிலும் கூடுதலாக இருக்கும். இது

எலக்ட்ரான்களை Aயிலிருந்து Bக்குள் ஊடுருவி விரவலடையத் தூண்டுகிறது. அப்போது கட்டற்ற எலக்ட்ரான்களை இழந்த A நேர்மின் முனை போலவும், அவற்றைப் பெற்ற B எதிர் மின் முனை போலவும் செயல்படுகின்றன. அதாவது இரு உலோகங்களின் சந்திப்பில் மிகச்சிறிய அளவில் ஒரு மின்னழுத்த வேறுபாடு தோற்றுவிக்கப்படுகிறது. இப்படித் தோற்றுவிக்கப்படும் அகமின்புலம், மேலும் எலக்ட்ரான்கள் Aயிலிருந்து Bக்குள் ஊடுருவலைத் தடுத்து நிறுத்திவிடுகிறது. அப்போது அமைப்பு ஒரு சமநிலையில் இருப்பதாகக் கூறலாம். இந்த மின்னழுத்தத்தைத் **தொடுகை மின்னழுத்தம் (contact potential)** என்பர். இக்கருத்தினை மனத்திற் கொண்டு, வெப்பமின் விளைவுகளைக் குறிப்பாக **பெல்டியர் விளைவு (Peltier effect)** மற்றும் **தாம்சன் விளைவு (Thomson effect)** ஆகியனவற்றை விளக்கலாம்.

பெல்டியர் விளைவு

A,B என்ற இருவேறு உலோகங்களின் சந்திப்பில் ஒரு மின்னழுத்தத்தை செயல்படுத்த ஒரு மின்னோட்டம் Aயிலிருந்து Bக்குச் செல்கிறது என்று கொள்வோம். எலக்ட்ரான்கள் Bயிலிருந்து Aக்குள் பாய்வதினால் இந்த மின்னோட்டம் நிகழ்கிறது. Aயில் எலக்ட்ரான் செறிவு Bயைக் காட்டிலும் கூடுதல் என்பதால், எலக்ட்ரான்கள் எதிர்நீச்சலிட்டுக் கடக்கின்றன என்று சொல்லவேண்டும். அதாவது எலக்ட்ரான் அழுத்த வேறுபாட்டிற்கு எதிராக வேலை செய்யவேண்டி இருக்கிறது. இவ்வேலைக்கான ஆற்றலைத் தன் வெப்ப ஆற்றலைக் கொண்டு எலக்ட்ரான்கள் பெறுவதால் அச்சந்தி குளிர்ச்சியடைகிறது.

மின்னோட்டத்தின் திசையை இப்போது மாற்றி அமைப்போம். அப்போது எலக்ட்ரான்கள் செறிவு மிக்க Aயிலிருந்து செறிவு குறைந்த Bக்குள் புகுகின்றன. எலக்ட்ரான் அழுத்த வேறுபாட்டினால் எலக்ட்ரான்கள் முடுக்கப்பெறுவதால் அதன் மீது வேலை அகற்றப்பட்டு வெப்பம் உண்டாக்கப்படுகிறது. அதாவது சந்தி சூடடைகிறது. **பெல்டியர் மாறிலி (Peltier coefficient)** என்பது, ஒரு சந்தியின் வழியாக ஓரலகு மின்னூட்டம் கடந்து செல்லும்போது உமிழப்படும் அல்லது உட்கவரப்படும் ஆற்றல் ஆகும். இதனை π என்ற கிரேக்க எழுத்தால் குறிப்பிடுவார்கள். πயின் மதிப்பு வெப்பநிலை T கெல்வினுக்கு நேர்விகிதத்தில் இருக்கும் எனத் தருவிக்கலாம்.

தாம்சன் விளைவு

சமவெப்பநிலையில் இல்லாத ஒரு கடத்தியின் வழியாக அதாவது ஒரு வெப்பநிலைச் சரிவுள்ள ஒரு கடத்தியின் வழியாக ஒரு

மின்னோட்டத்தைச் செலுத்தும்போது, மின்னோட்டத்திசைக்கு ஏற்ப வெப்பம் உட்கவரப்படுகிறது அல்லது உமிழப்படுகிறது.

செம்பு, வெள்ளி, துத்தநாகம், ஆண்டிமணி, காட்மியம் போன்ற உலோகங்கள், மின்னோட்டம் வெப்பமிக்க முனையிலிருந்து வெப்பம் தாழ்ந்த முனை நோக்கிச் செல்லும்போது வெப்பம் உமிழப்படுகிறது. வெப்பம் தாழ்ந்த முனையிலிருந்து வெப்பமிக்க முனை நோக்கிச் செல்லும்போது வெப்பம் உட்கவரப்படுகிறது. இதனால் இந்த உலோகங்கள் நேர் தாம்சன் விளைவு (Positive Thomson effect) கொண்டவை என்று வகைப்படுத்தப்பட்டுள்ளன. மாறாக இரும்பு, நிக்கல் கோபால்ட், பிஸ்மத், பிளாட்டினம் போன்றவை எதிர் தாம்சன் விளைவு (Negative Thomson effect) கொண்டவை.

எலக்ட்ரான் கொள்கை இவ்விளைவிற்கு முழுமையாக இல்லாவிட்டாலும் ஓரளவிற்கு விளக்கம் தருகிறது. மின்னோட்டம் வெப்பமிக்க முனையிலிருந்து, வெப்பம் தாழ்ந்த முனைநோக்கிச் செல்வதாகக் கொள்வோம்.

வெப்ப முனைப்பகுதியில் உள்ள எலக்ட்ரான்கள், குளிர்முனைப்பகுதியில் உள்ள எலக்ட்ரான்களை விடக் கூடுதலான இயக்க ஆற்றல் கொண்டவை. இதனால் இவை அப்பகுதியைவிட்டுக் குளிர்முனைப்பகுதிக்குள் விரவ முயலுகின்றன. அதாவது வெப்பமிக்க பகுதியில் எலக்ட்ரான் அழுத்தம் வெப்பம் தாழ்ந்த பகுதியைவிடக் கூடுதலாக இருக்கிறது. எலக்ட்ரான்களை இழந்த வெப்பமிக்க பகுதி நேர்மின் முனை போலவும், எலக்ட்ரான்களை ஏற்ற வெப்பம் தாழ்ந்த பகுதி எதிர்மின முனை போலவும் செயல்படுவதால், இதனை நாம் ஓர் அக மின்னழுத்தத்திற்கு ஒப்பிடலாம். இதைத் தாம்சன் மின்னழுத்தம் என்பர். எனவே எலக்ட்ரான்கள் இம்மின்னழுத்தத்திற்கு இணையாகவோ அல்லது எதிராகவோ எடுத்துச் செல்லப்படும்போது, வேலை செய்யப்படுவதால், வெப்பம் உமிழப்படுகிறது அல்லது உட்கவரப்படுகிறது. நேர் தாம்சன் விளைவைக் காட்டும் உலோகங்களுக்குப் பொருந்தும் இவ்விளக்கம் எதிர் தாம்சன் விளைவைக்காட்டும் உலோகங்களுக்குப் பொருந்தவில்லை. குவாண்டம் கொள்கையின் மூலம் இதனை விளக்க முடியும்.

6.5. காந்த மின் தடை எண் (Magneto resistance)

புற காந்தப்புலத்தில் ஒரு கடத்தியின் மின் தடையில் ஏற்படும் மாற்றத்திற்கும், காந்தப்புலம் இல்லா நிலையில் அதன் மின்தடைக்கும் உள்ள தகவு காந்தமின் தடை எண் என்று வரையறுக்கப்பட்டுள்ளது. புற காந்தப்புலம் செயல்படும்போது, கடத்தியின் வழியாகப் பாய்ந்து செல்லும் எலக்ட்ரான்கள் மின்புலத் திசையின் போக்கிலே செல்லாமல், காந்தப்புலச் செறிவுக்கு ஏற்ப வளைவுப்பாதையில் செல்ல

முயலுகின்றன. மின்னோட்டத்திற்கு நேர் குத்தாகப் புறகாந்தப்புலம் செயல்படுமானால், அதனால் ஏற்படும் விளைவைக் குறுக்குக் காந்தத்தூண்டல் மின்தடை விளைவு (transverse magneto resistance) என்பர். காந்தப்புலம் மின்னோட்டத்திசையிலேயே இருந்தால், அதை நெடுக்கும் காந்தத் தூண்டல் மின்தடை விளைவு (Longitudinal magneto resistance) என்பர்.

ஒரு குறிப்பிட்ட வெப்பநிலையில் ஓர் உலோகத்தூண்டின் மின்தடை, புறகாந்தப்புலம் (B_z) ஏதும் இல்லா நிலையில் R என்றும், காந்தப்புலம் தோற்றுவிக்கப்படும் போது அதன் மின்தடையில் ஏற்படும் மாற்றம் ΔR என்றும் கொண்டால், காந்த மின் தடை எண். $\Delta R/R$ ஆகும். இது காந்தப்புலச் செறிவு குறைவாக இருக்கும்போது B^2க்கு நேர் வீதத்தில் அதிகரிக்கிறது. உயர்புலச் செறிவில் $\Delta R/R \sim AB_z^2$க்கு நேர் வீதத்தில் அதிகரிக்கிறது. இதில் A ஒரு மாறிலி.

குறுக்குக் காந்தத் தூண்டல் மின் தடை விளைவு பற்றிய விரிவான ஆய்வுகள் கீழ்க்காணும் உண்மைகளைத் தெரியப்படுத்தி இருக்கின்றன.

1. காந்தப்புலச் செறிவிற்கு ஏற்ப அதிகரித்து, ஒரு நிலையில் மின்தடை தெவிட்டு நிலையை எட்டலாம். அதாவது அந்நிலையில் மின்தடை காந்தப்புலச் செறிவைச் சார்ந்திருப்பதில்லை. அளவீட்டுத் திசைக்குப் படிக அச்சுக்கள் எப்படி அமைந்திருந்தாலும் இந்தத் தெவிட்டு நிலை தோன்றுகிறது.

2. படிக அச்சுக்களின் எல்லா அமைவு நிலைகளிலும், உயர்காந்தப்புலம் வரையிலும் கூட மின்தடை தொடர்ந்து அதிகரிக்கிறது.

3. சில படிக அச்சுத் திசைகளில் காந்தத்தூண்டல் மின்தடை தெவிட்டு நிலையை அடைகிறது. வேறு சில அச்சுத்திசைகளில் தெவிட்டு நிலை தோன்றாதிருக்கலாம். இது இயல்பு மீறிய திசையொவ்வாப் பண்பெனப்படுகின்றது.

வினாக்களும் பயிற்சிக் கணக்குகளும்

1. சராசரி மோதலிடைத் தொலைவு λ திசைவேகத்தைப் பொறுத்ததில்லை எனில், மாக்ஸ்வெல் - போல்ட்ஸ் மான் கொள்கையின் அடிப்படையில், எலக்ட்ரான் வளிமத்தில் மின்கடத்து திறனை

$$\sigma = \frac{4}{3} \frac{ne^2\lambda}{\sqrt{2\lambda m k_B T}}$$

எனக் காட்டுக.

2. போல்ட்ஸ்மானின் தொடர் இடமாற்றுச் சமன்பாட்டை வருவித்து, வெவ்வேறு சிறப்பு நிலைகளில் அதன் பயன்பாட்டை விவரிக்கவும்.
3. எலக்ட்ரான் வளிமத்திலுள்ள எலக்ட்ரான் மீது லாரன்ஸ் விசை செயல்படுவதாகக் கொள்வோம். போல்ட்ஸ்மான் தொடர் இடமாற்றுச் சமன்பாட்டைப் பயன்படுத்தி லாரன்ஸ் தீர்வை விளக்குக.
4. தொடர் இடமாற்றுச் சமன்பாட்டைக் கொண்டு, மின்கடத்து திறனுக்கான சொமர்பெல்டு கொள்கையை விவரிக்கவும். இது எங்ஙனம் லாரன்ஸ் - ட்ரூடு கொள்கையிலிருந்து விலகியிருக்கிறது?
5. தளர்வு நேரம் என்றால் என்ன? எலக்ட்ரானின் தளர்வு நேரத்தை எவ்வாறு மதிப்பிட்டறியலாம்?
6. மாத்தீசன் விதி பற்றிக் கூறுக.
7. தொடர் இடமாற்றுச் சமன்பாட்டைக் கொண்டு ஓர் உலோகத்தின் வெப்பங்கடத்து திறனுக்கான தொடர்பைப் பெறவும்.
8. லாரன்ஸ் எண் என்றால் என்ன? நீண்ட வெப்பநிலை நெடுக்கையில் கொள்கை மற்றும் சோதனை மதிப்புகளுக்கிடையே காணப்படும் முரண்பாட்டிற்கு என்ன விளக்கம் தரலாம்?
9. ஹால் விளைவு என்றால் என்ன? ஹால் மின்னழுத்தம் மற்றும் ஹால் மாறிலிக்கான தொடர்புகளை வருவிக்கவும்.
10. ஹால் கோணத்தையும், நகர்திறனையும் தொடர்புபடுத்தி ஒரு சமன்பாட்டை நிறுவுக.
11. ஹால்மாறிலியின் முக்கியத்துவம் யாது? அதன் மதிப்பைக் கண்டறியும் சோதனை முறையை விவரிக்க.
12. பெல்டியர் விளைவு என்றால் என்ன? பெல்டியர் மாறிலி சார்பிலா வெப்பநிலைக்கு நேர்விகிதத்திலிருக்கிறது எனக்காட்டுக.

பார்வை நூல்கள்

1. **C. Kittel**, *Introduction to Solid State Physics*, 3rd edition, Wiley Eastern, New Delhi, 1977.

2. **N.W. Ashroff** and **N.D. Mermin**, *Solid State Physics,* Holt, rinehart and Winsten, Philadelphia.

3. **J.S. Blackmore**, *Solid State Physics*, Cambridge University Press, Cambridge, 1974.

4. **S.O. Pillai**, *Solid State Physics*, New Age International, New Delhi, 1995.

5. **Wahab**, *Solid State Physics*, Narosa Publications, New Delhi.

6. **B.S. Saxena, R.C. Gupta** and **P.N. Saxena**, *Solid State Physics*, Pragati Prakashan, Meerut, 2004.

7. **A.J. Dekker**, *Solid State Physics*, MC. Millan, 1971.

கலைச்சொற்கள்

Amorphous - படிகவுருவற்ற

anharmonic - சீரிசைவிலா

anharmonicity - சீரிசைவிலாத்தன்மை

anisotropy - திசையொவ்வாமை

band - பட்டை

body centred - உடல் மைய

bond - பிணைப்பு

Bragg's law - பிராக் விதி

Brillouin zone - பிரிலோயின் மண்டலம்

Burger vector - பர்கெர் வெக்டர்

centre of symmetry - சீர்மையம்

colour centre - நிறமையம்

compressibility - இறுகுதிறன்

coordination number - ஒத்த அண்டை அணு எண்

covalent bond - சகப்பிணைப்பு

crystal - படிகம்

crystallography - படிகவியல்

crystallographic axes - படிக அச்சுகள்

cubic - கனச் சதுர

defect - குறைபாடு

- transient - இடைவரவு

degrees of freedom - தன்னியக்கப் படிகள்

density - அடர்த்தி, செறிவு

diffraction - விளிம்பு விளைவு

diffusion - ஊடுபரவல்

dislocation - நழுவல்

- edge - விளிம்பு

- screw - திருகு

elastic vibration - மீட்சி அதிர்வுகள்

face centered - முகமைய

forbidden band - தவிர்க்கப்பட்ட பட்டை

Frenkel defect - பிரென்கெல் வழு

grain boundary - உள்ளணு எல்லை

heat capacity - வெப்ப ஏற்புத்திறன்

hexagonal - அறுங்கோண

ideal crystal - இலட்சியப் படிகம்

imperfection - குறைபாடு

interface - இடைத்தளப் பரப்பு

intermediate state - இடைநிலை

interplanner distance - அணித்தளயிடைத் தொலைவு

interstitial - சிற்றிடைவெளி, சிறுபிளவு

ionic bond - அயனிப் பிணைப்பு

- lattice - அணித்தளம், அணிக்கோவை

- constant - அணித்தள மாறிலி, படிக மாறிலி

- defect - அணித்தள வழு, மரு

- point - அணிப்புள்ளி

layer - அடுக்கு

line defect - வரிவழு

medium - ஊடகம்

Miller indices - மில்லர் குறியெண்

mono clinic - ஒரு திசைச் சரிவுள்ள

non linear - நேரியலற்ற

normal mode - இயல்முறை

optic axes	-	ஒளியியல் அச்சுகள்
orthorhombic	-	ஆறு செவ்வக முக
paching factor	-	அணுத் திணிமை
partial dislocation	-	பகுதி நழுவல்
phase	-	அலைக்கட்டம்
phonon	-	போனான், ஒலித்துகள்
plastic deformation	-	நெகிழ்ம உருக்குலைவு
point group	-	புள்ளித் தொகுதி
reciprocal lattice	-	எதிரிணை அணித்தளம், அணிமை
refractive index	-	ஒளிவிலகலெண்
Schottky defect	-	ஸ்காட்கி வழு, குறைபாடு
shear	-	சறுக்கல்
single crystal	-	ஒற்றைப் படிகம்
size defect	-	உருவ (அளவு) வழு
slip band	-	சறுக்குப்பட்டை
- line	-	சறுக்கு எல்லை
- plane	-	சறுக்குத்தளம்
space group	-	அணிமைத் தொகுதி, வகை
stacking fault	-	அடுக்குப் பிழை
Thermal expansion	-	வெப்பஞ்சார்ந்த பெருக்கம்
tetragonal	-	நாற்கோண
thin film	-	மென்படலம்
triclinic	-	முத்திசைச் சரிவுள்ள
trigonal	-	சாய்சதுர
tunneling	-	ஊடுபாய்வு
twining	-	ஜோடிப் பிழை
vacancy	-	வெற்று இடநிலை

KAMARAJ UNIVERSITY * DR. T.P.M. LIBRARY *
277060