Өзбекстан Республикасы Жоқары ҳәм орта арнаўлы билим министрлиги

Бердақ атындағы Қарақалпапақ мәмлекетлик университети

Улыўма физика кафедрасы

Б.Әбдикамалов

КРИСТАЛЛОФИЗИКА

пәни бойынша лекциялар текстлери

Физика қәнигелиги магистратурасы
ушын дүзилген

Нөкис - 2006

Мазмуны

Кирисиў

Техниканы4 пайда еткен маш3алалары, кристалларда2ы рентген нурларыны4 дифракциясыны4 ашылы7ы, рентгенструктуралы3 анализди4 методларыны4 исленип шы2ылы7ы, соны4 менен бир 3атарда 3атты денелерди4 атомлы3-кристаллы3 3урылысын изертле7ди4 бас3а да дифракциялы3 методларыны4 ашылы7ы XX 1сирди4 басына шекем 5згермей келген кристаллография илимини4 тез ра7ажланып кети7ине 6лкен т6ртки берди. Егер сол 7а3ытлар2а шекем кристаллография геологиялы3-минералогиялы3 илимге жа3ын болып келген болса, енди ол физика, химия, техникалы3 илимлерди4 к5п тара7лары менен тиккелей байланыса баслады 81м кейинирек сол илимлер арасында2ы байланыстыры7шы орайлы3 орынды ийеледи. Кристаллография илимини4 5зини4 орайы менен ма3сети кристаллофизика т1репке к5бирек а7ысты. Усыны4 менен бирге кристалларды4 31сийетлерин изертле7де математиканы4 тут3ан орны артты.

Кристалларды4 физикалы3 31сийетлери 5лшенген шамалар арасында2ы 3атнаслар менен т1рипленеди. Мысалы ты2ызлы3 масса менен к5лем арасында2ы 3атнастан аны3ланады. Масса менен к5лем ба2ытлар2а байланыссыз бол2анлы3тан ты2ызлы3 ба2ыттан 21резсиз 31сийет болып шы2ады. Керисинше салыстырмалы электр 5ткизгишлик сыя3лы 31сийетлер 81р 3айсысы ба2ыт3а байланыслы бол2ан физикалы3 шамалар арасында2ы 3атнастан келип шы2ады (бул жа2дайда электр майданыны4 керне7лилиги 81м то3 ты2ызлы2ы). Экспериментлер 8а3ый3атында да кристалларды4 к5пшилик физикалы3 31сийетлерини4 усы физикалы3 31сийет 5лшенген ба2ыт3а байланыслы екенлигин к5рсетеди. Бундай жа2дайларда кристалларды 3арап атырыл2ан 31сийетлерге 3арата ***анизотроп*** деп 3араймыз.

Демек кристалларды4 физикалы3 31сийетлерин 3алай т1риплеймиз деген т1бийий сора7 пайда болады. Усы2ан байланыслы лекциялар текстинде кристалларды4 физикалы3 31сийетлерини4 тензорлы3 жазылы7ларыны4 т1ртиплери берилген 81м усындай тензорларды4 не екенлиги 81м 3алай 3олланылату2ынлы2ы т6синдирилген.

Биз д1слеп улы7ма т6рде кристалларды4 жыллылы3, электрлик 81м механикалы3 31сийетлери арасында2ы байланысларды к5рсетип 5темиз. Бундай байланыслар усы кириси7 б5лиминде келтирилген А 81м В с67ретлеринде с17лелендирилген. Сырт3ы 6ш м6йешликти4 т5белеринде температура Т, электр майданыны4 керне7лилиги E_i, керне7лер σ_{ij} 3ойыл2ан. Бул шамаларды кристаллар2а т6сирилген ‘к6шлер’ деп 3ара72а болады. Ишки 6ш м6йешликти4 с1йкес т5белеринде S - к5лем бирлигиндеги энтропия, D_i - электр индукциясы 81м ε_{ij} деформациясы жайлас3ан. Бул шамалар с1йкес к6шлерди4 т1сир ети7ини4 тиккелей н1тийжеси болып табылады. Сырт3ы 81м ишки 6ш м6йешликлерди4 с1йкес т5белерин байланыстырату2ын жу7ан сызы3лар ***бас эффектлер*** деп аталату2ын 6ш бас эффектке с1йкес келеди.

q. Қайтымлы процессте температураны4 5си7и бирлик к5лемде энтропияны4 т5мендегидей 5згерисин болдырады`

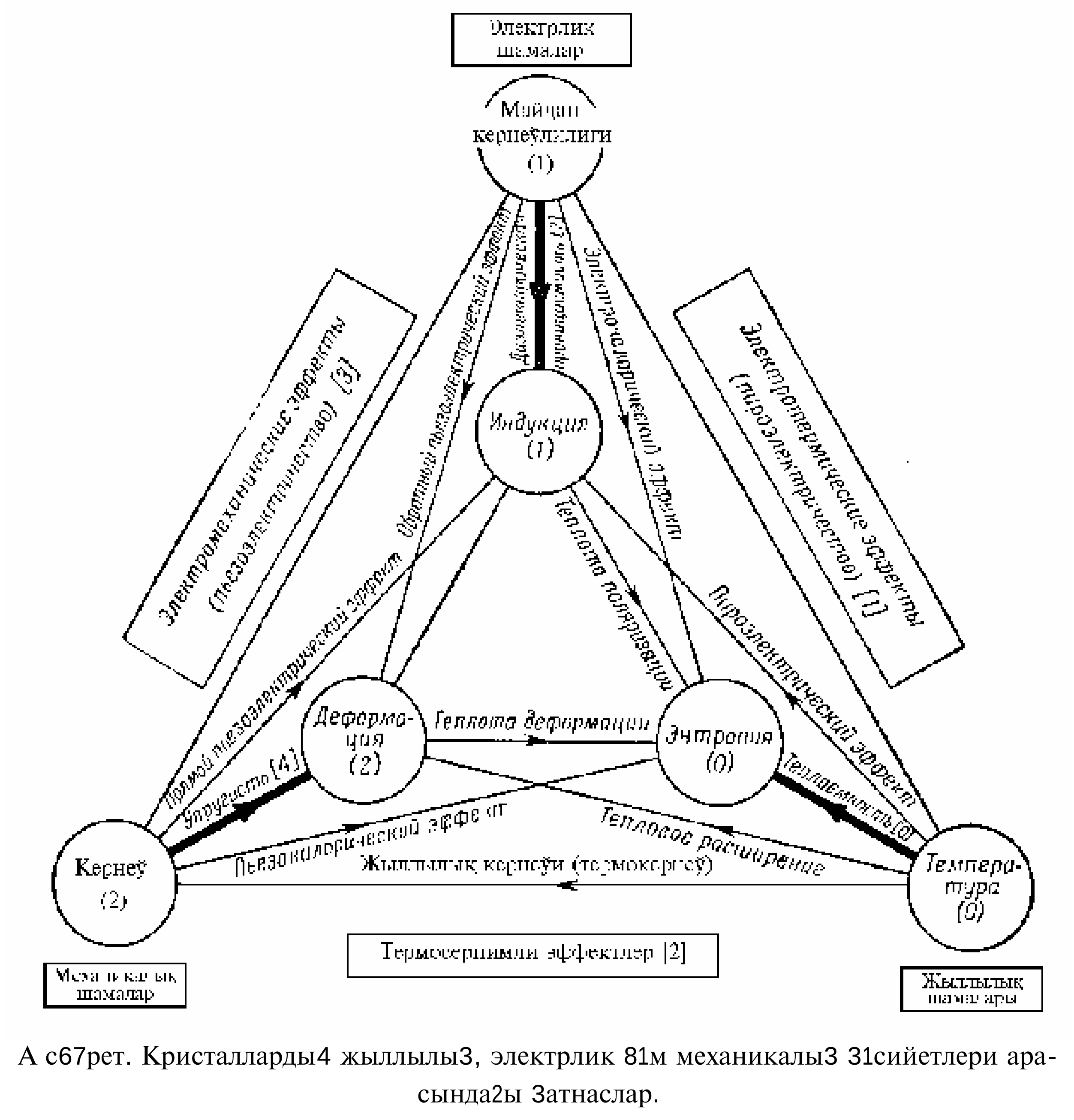
$$dS = (C/T)dT.$$

Бул а4латпада2ы скалярлар С бирлик к5лем ушын жыллылы3 сыйымлылы2ы 81м Т - абсолют температура болып табылады.

w. Электр майданыны4 киши 5згериси $dE_{\ddagger}$ электр индукциясыны4 5згериси $dD_{\ddagger}$ ди пайда етеди`

$$dD_{\ddagger} = \chi_{\ddagger j} dE_j.$$

Бул жерде $\chi_{\ddagger j}$ диэлектриклик си4иргишлик тензоры болып табылады.



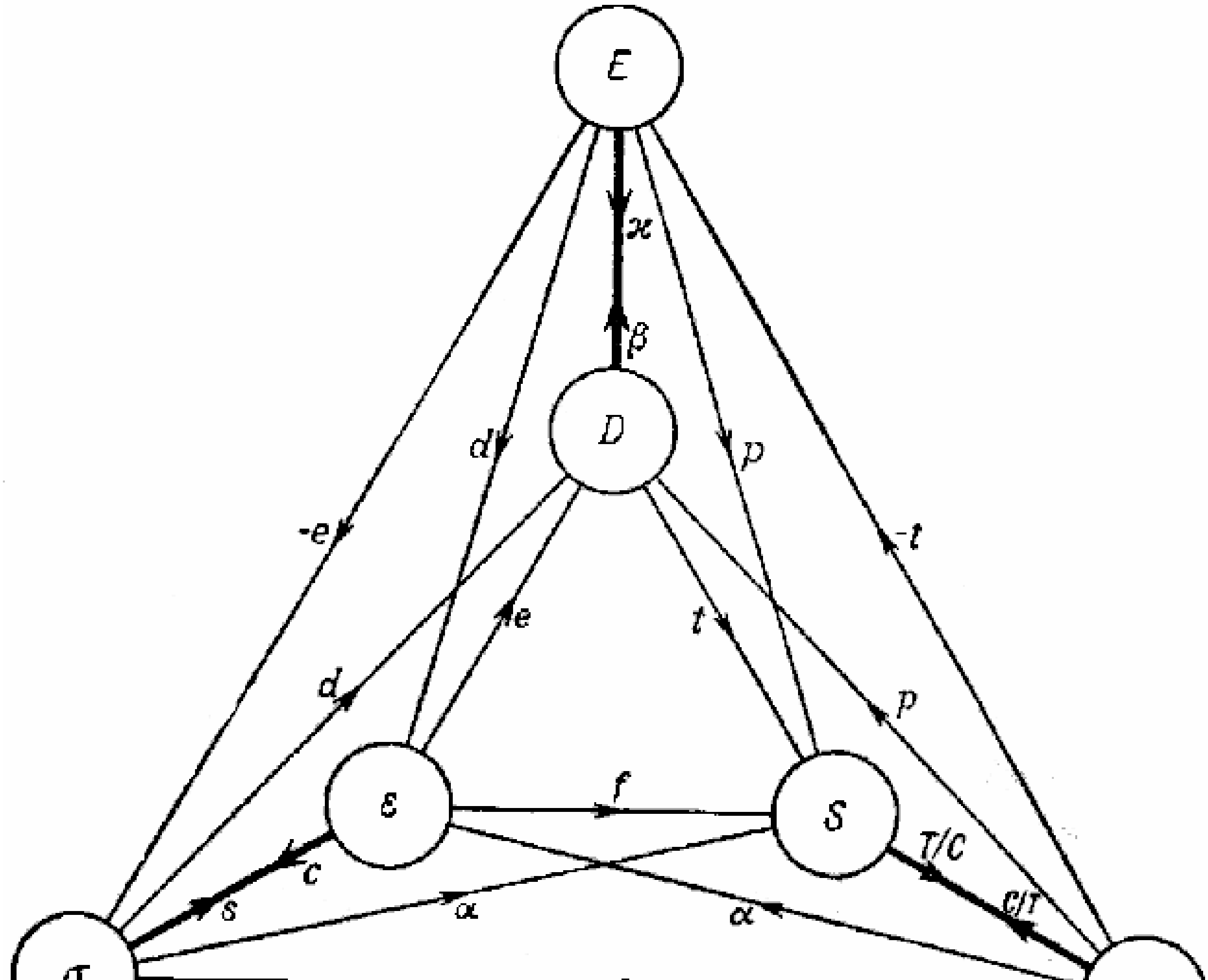
А с67рет. Кристалларды4 жыллылы3, электрлик 81м механикалы3 31сийетлери арасында2ы 3атнаслар.
@1резсиз 5згери7шилер ушын тензорды4 рангасы ушын д54гелек 3а7сырмалар, ал 31сийетлер ушын квадрат 3а7сырмалар 3олланыл2ан.

е. Керне7ди4 киши 5згериси $d\sigma_{kl}$ т5мендеги 3атнас бойынша деформацияны4 5згериси $d\varepsilon_{\ddagger j}$ ты пайда етеди.

$$d\varepsilon_{ij} = s_{ijkl} d\sigma_{kl}.$$

Бул жерде s_{ijkl} серпимли берилгишлик тензоры деп аталады.

С67ретте келтирилген диаграмма ***жуплы3 эффектлер*** (c□†pl,d ,ff,c„s) деп аталы7шы эффектлерди де с17лелендиреди. Бундай эффектлер сырт3ы 81м ишки 6ш м6йешликлерди тутастыры7шы сызы3лар ар3алы к5рсетилген. Мысал ретинде диаграмманы4 т5менги б5лиминдеги 5з-ара параллел бол2ан еки сызы3ты аламыз.



В с67рет. Кристалларды4 жыллылы3, электрлик 81м механикалы3 31сийетлерин т1рипле7ши шамалар арасында2ы 3атнаслар.

Оларды4 бири жыллылы3 ке4ейи7ине (температураны4 5згери7и менен ж6рету2ын деформация), ал екиншиси пьезокалориялы3 эффектке (механикалы3 кернe7ди4 т1сиринде жыллылы3ты4 б5линип шы2ы7ы) с1йкес келеди. Диаграмманы4 т5менги б5лиминдеги еки горизонт ба2ытында2ы сызы3лар деформация салдарынан б5линип шы2ату2ын жыллылы3ты 81м кристаллды4 температурасы 5згергенде пайда болату2ын жыллылы3 кернe7ин (термокерне7ди) береди. Бундай жуплы3 эффектлер скаляр менен екинши рангалы тензорлар арасында2ы 3атнасларды а4латады 81м сонлы3тан оларды4 5злери екинши рангалы тензорлар болып табылады. Мысалы жыллылы3 ке4ейи7и ушын

$$d\varepsilon_{ij} = \alpha_{ij} dT$$

а4латпасын жаза аламыз.

Диаграмманы4 шеп т1репи кристаллардын4 пьезоэлектрлик 31сийетлери менен байланыслы бол2ан жуплы3 эффектлерди с17лелендиреди. Ту7ры пьезоэлектрлик эффект дифференциал формада

$$dP_i = d_{ijk} d\sigma_{jk}$$

те4лемеси менен т1рипленеди.

$$D_i = \chi_0 E_i + P_i$$

бол2анлы3тан

$$dP_i = dD_i - \chi_0 dE_i.$$

Сонлы3тан, егер кристалда электр майданы тура3лы етип услап турылату2ын болса т5мендегидей формуланы жаза аламыз`

$$dD_i = d_{ijk} d\sigma_{jk}.$$

Солай етип ту7ры 81м кери пьезоэффектлер диаграмманы4 шеп т1репиндеги диагоналлар менен т1рипленеди.

Жо3арыда келтирилгендей жоллар менен диаграмманы4 бас3а т1реплеринде с17леленген байланысларды а4сат таба аламыз. В с67ретте болса физикалы3 шамалар 3абыл етилген белгиле7лерде берилген.

Солай етип кристаллардын4 жыллылы3, электрлик 81м механикалы3 31сийетлерини4 барлы2ын да биргеликте 3ара7ымыз2а болады екен. !лбетте сол 31сийетлер арасында2ы байланысларды т6сини7 ушын с1йкес процесслерди4 термодинамикасын 3арап шы2ы7 керек. Бундай м1селелер 8а33ында лекциялар текстлеринде ай3ын процесслер 3арал2анда толы3 айтылады.

I бап. Кристаллографиядан тийкарғы мағлыўматлар

§ l. Кристаллардың структурасы ҳәм кеңислик пәнжереси[1]

Кристаллофизика ишки симметриясына 81м дискрет атомлы3 3урылысына байланыслы бол2ан кристаллардын4 физикалы3 3убылысларды4 нызамларын 6йренеди. Ал кристаллардын4 тийкар2ы 5згешелиги олардын4 симметрия2а ийе болы7ы болып табылады.

Атомлар арасында2ы ке4исликтеги 5з-ара 3атнаслар 81м олар арасында2ы 5з-ара т1сир етиси7 к6шлери кристаллардын4 ишки 3урылысыны4 симметриясын, нызамлылы3ларын 81м дурыслы2ын т1риплейди. Кристалларды 3урайту2ын б5лекшелер, я2ный атомлар, ионлар, молекулалар, олардын4 комплекслери 3атарлар, тегисликлер, п1нжере бойынша дурыс 81м симметриялы т6рде жайласады. Ишки 3урылысыны4

[1] Лекциялар текстлеринде кристаллы3 3урылыс 81м кристаллы3 структура с5злери бир м1ни де 3олланылады.

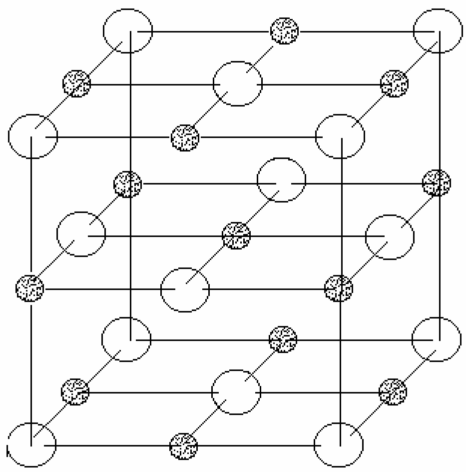
симметриялы бол2анлы2ы себепли кристаллардыӊ физикалы3 31сийетлери де, олардыӊ сырт3ы формалары да симметриялы болып келеди.

Кристалдыӊ 31липлескен структурасыныӊ симметриясы менен нызамлылы2ы к5плеген к6шлер менен процесслердиӊ динамикалы3 теӊ салма3лылы2ыныӊ н1тийжеси болып табылады. Сырт3ы т1сирлер (мысалы электр майданы, механикалы3 3ысы7 ямаса кристал2а бас3а т6рли атомларды киргизи7) динамикалы3 теӊ салма3лы3тыӊ бузылы7ына алып келеди 81м со2ан с1йкес кристалдыӊ физикалы3 31сийетлерин 5згертеди. Бул техникада кристаллардыӊ физикалы3 31сиетлерин 5згерти7де кеӊ т6рде 3олланылады.

Кристаллардыӊ бир теклилиги, дискретлилик 81м анизотропиясы олардыӊ 3урылысыныӊ нызамлылы2ы менен симметриясыныӊ салдары болып табылады.

Кристаллар ишиндеги 81р бир но3ат улы7ма жа2дайларда 81р 3ыйлы а78ал2а ийе` бир но3атта бир сортта2ы б5лекшелер (мысалы NaCl кристаллында2ы Na ионыныӊ орайы), ал бас3а но3атта бас3а сортта2ы б5лекшелер (мысалы Cl ядросы) жайласады. Ал 6шинши но3атта болса ядролардыӊ п6ткиллей болма7ы м6мкин, бира3 бул но3ат электр потенциалыныӊ белгили бир м1ниси менен, т5ртинши но3ат бас3а бир м1ниси менен т1рипленеди (I-с67рет).

Бира3 тутасы менен ал2анда кристал бир текли орталы3 болып табылады` оныӊ 31леген бир б5лими бас3а бир б5лиминен арты3 та, кем де емес. Кристалдыӊ бир теклилиги *бир теклилик радиусы* R диӊ болы7ына байланыслы. Радиусы усындай бол2ан шарды кристалдыӊ 3айсы б5лимине жай2астырса3 та, 31леген но3ат пенен 3атар усы но3ат пенен бирдей бол2ан но3ат жай2асады (бул но3ат берилген но3ат3а 3арата гомологиялы3 но3ат деп аталады). Демек бир теклилик шарында keминде еки Na 81м еки Cl ядросы жай2асады. Бир теклилик радиусы 1детте бир неше ангстремлерди 3урайды. Соныӊ менен бирге кристал дискрет - кристалда2ы 31леген но3атты 31леген санда2ы киши радиус3а ийе бир теклилилик шары менен 3орша7 м6мкин. Бундай жа2дайда бул шарлардыӊ ишинде биринши шардыӊ ишине 3арата гомологиялы3 бир де но3ат болмай шы2ады.



I-с67рет. Тас дузыныӊ (хлорлы натрийдыӊ) 3урылысы.

Бул жерде кристаллы3 затларды4 структурасын т1рипле7де еки т6рдеги к5з-Зарасты4 орын алату2ынлы2ын ке7ил б5лемиз` кристалларды тутас (6зликсиз) деп те, дискрет (6зликли) деп те Зараймыз. Ишки Зурылысты4 дискретлилиги кристал ишиндеги барлы3 ноЗатларды4 бирдей физикалы3 З1сийетке ийе болмайту2ынлы2ын к5рсетеди. Бира3 кристалларды4 к5плеген З1сийетлерин т1риплегенде айырым атомлар менен молекулаларды4 к5лемлерине салыстыр2анда 6лкен, бира3 кристалды4 5зини4 к5лемине салыстыр2анда киши бол2ан к5лемлерди Зара7 жеткиликли. Усындый жоллар менен кристалларды тутас 81м бир текли орталы3 деп Зарай аламыз.

Анизотропия деп кристалларды4 81р Зыйлы ба2ытларда З1сийетлерини4 81р Зыйлы екенлигин айтамыз. Кристалды4 Зурылысында 81р Зыйлы ба2ытларда б5лекшелер арасында2ы байланыс 81м ЗашыЗлыЗлар 81р Зыйлы бол2анлыЗтан кристалды4 дерлик барлы3 81р Зыйлы ба2ытларында2ы физикалы3 З1сийетлер 81р Зыйлы болады (бира3 бир бирине симметриялы3 ба2ытларда бирдей). Кристалларды4 5си7 тезлиги де анизотропиялы3 болады. СонлыЗтан кристаллар симметриялы3 дурыс к5пм6йешликлер формасында 5седи.

Берилген затты4 барлы3 кристалларында бирдей шараятларда с1йкес т1реплери арасында2ы м6йешлерди4 м1нислери бирдей болады. Бул ***кристаллардың мүйешлериниң турақлылығы нызамы*** деп аталады (Николай Стенон т1репинен Іууо-жылы ашыл2ан). !лбетте, кристалларды4 м6йешлерини4 тураЗлылы2ы нызамы 8аЗЗында айтыл2анда затты4 берилген модификациясын н1зерде туты7 керек.

Кристаллы3 к5п м6йешликлерди4 Заптал бетлери материаллы3 б5лекшелер т1репинен д6зилген тегисликлерге, Забыр2алары - материаллы3 б5лекшелер Затарларына с1йкес келеди. Б5лекшелерди4 массалары орайлары Затарлар, тегис торлар, кристаллы3 п1нжерелерди пайда етеди.

Идеал кристаллар Зурылысында барлы3 гомологиялы3 (бирдей болып жайласЗан) ноЗатлар шексиз узын дурыс симметриялы3 Затарлар т6ринде жай2асады (w-с67рет). Кристаллы3 ке4ислик ноЗатлары анизотроп. СонлыЗтан бул ноЗатлар 1детте симметриялы емес фигуралар ж1рдесинде с17лелендириледи. Шексиз узын Затарда2ы гомологиялы3 ноЗатлар арасында2ы е4 киши ЗашыЗлы3 ***е4 ЗысЗа*** ямаса тийкар2ы ***трансляция*** деп аталады. Бул ЗашыЗлыЗты а 81рипи менен белгилеймиз 81м ***трансляция д17ири***, ***Затарды4 бирдейлик д17ири***, ***Затар параметри*** деп те атаймыз. Айтылып атыр2ан Затарлар, торлар, кристаллы3 п1нжерелер ойымызда шексиз к5п т6рли болып алына бери7и м6мкин.

w-с67рет. Симметриялы шексиз узын Затар.

Ке4исликте ба2ытын 5згертпей Зайталанату2ын симметриялы3 т6рлендири7 (я2ный параллел к5шири7) ***трансляция ж1рдеминде т6рлендири7*** ямаса тек ***трансляция*** деп аталады. Трансляция ж1рдеминде базы бир ноЗатты Зайтала7 арЗалы бир биринен а, wа, еа, ..., nа, ... (n п6тин сан) ЗашыЗлыЗларында тур2ан гомологиялыЗ ноЗатларды4 шексиз узын д17ирли Затарын аламыз. Бул Затардыӗ т1риплемеси болып **а** трансляциясы хызмет етеди 81м оны4 ж1рдеминдеги симметриялыЗ т6рлендири7 жолы менен алын2ан бир бирине байланысЗан гомологиялыЗ ноЗатлар ***Затарды4 т6йинлери*** деп аталады. Қатар т6йинини4, тап сол сыяЗлы тегис тордыӗ ямаса ке4исликтеги п1нжерени4 т6йинини4 материаллыЗ ноЗат пенен байланыслы болы7ы (я2ный усы т6йинде материаллыЗ ноЗатты4 жайласы7ы) ш1рт емес.

СимметриялыЗ Затарды4 ноЗатларын д1слепки трансляция2а параллел болма2ан басЗа $\mathbf{a}_w$ трансляциясыны4 ж1рдеминде Зайтала7 арЗалы ***тегис тор*** т6риндеги гомологиялыЗ ноЗатлар системасын аламыз (е-с67рет). Еки 5лшемли тегис тор $\mathbf{a}_l$ 81м $\mathbf{a}_w$ трансляциялары ж1рдеминде толы2ы менен аныЗланады. Т5белери т6йинлер бол2ан параллелограмлар тегис торды4 ***Зутышалары*** деп аталады. Қапталлары элементар трансляциялар бол2ан Зутышалар тегис торды4 ***элементар Зутышасы*** деп аталады, ал ишинде т6йин болма2ан элементар Зутыша ***1пи7айы*** элементар Зутыша деп аталады. !пи7айы элементар Зутышаны4 майданы бир т6йин ийелейту2ын майдан2а те4 болады.

Т6йинди бир бирине салыстыр2анда компланар емес 6ш трансляция ж1рдеминде шексиз к5п Зайтала7 арЗалы гомологиялыЗ ноЗатларды4 6ш 5лшемли системасы бол2ан ***ке4исликтеги п1нжере*** пайда етиледи. Бул жа2дайда да тийкар2ы 6ш $\mathbf{a}_l$, $\mathbf{a}_w$, $\mathbf{a}_e$ трансляцияларын к5п санлы усыллар менен сайлап алы7 м6мкин. БираЗ тегис торда2ы сыяЗлы бул жа2дайда да п1нжерени4 симметриясын аныЗ с17лелендире алату2ындай е4 киши трансляциялар сайлап алынады.

Қабыр2алары 6ш элементар трансляция болату2ын параллелопипед ***элементар Зутыша*** ямаса ***элементар параллелопипед***, ал ишинде т6йин болмайту2ын элементар параллелопипед 1пи7айы элементар Зутыша ямаса 1пи7айы параллелопипед деп аталады.

Элементар трансляцияларды (элементар Зутыша Забыр2аларын) а, b 81м с ямаса a_l, a_w, a_e 81риплери менен, ал олар арасында2ы м6йешлерди α, β, γ грек 81риплери менен белгиле7 Забыл етилген (r-с67рет).

Элементар Зутышаны4 трансляциялыЗ топары (топарлар 8аЗЗында кейинирек ке4 т6рде айтылады) п1нжерени толы2ы менен т1риплейту2ын 81м Зутышаны4 6ш Забыр2асына с1йкес келету2ын $\mathbf{a}_l$, $\mathbf{a}_w$, $\mathbf{a}_e$ 6ш элементар трансляцияларын 5з ишине алады.

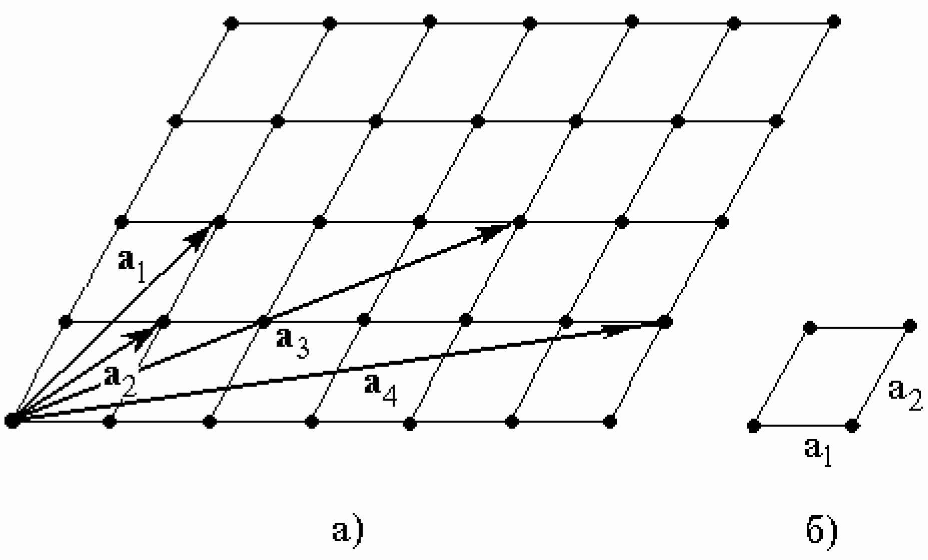
Егер $\mathbf{a}_l$, $\mathbf{a}_w$, $\mathbf{a}_e$ тийкар2ы 6ш трансляциялары белгили болса п1нжередеги З1леген т6йинни4 жайласЗан орны

$$R = m\mathbf{a}_l + n\mathbf{a}_w + p\mathbf{a}_e$$

векторы менен аныЗланады. m, n, p лар п6тин санлар, $\mathbf{a}_l$, $\mathbf{a}_w$, $\mathbf{a}_e$ лер п1нжерени4 ***векторлыЗ базисин*** Зурайды.

Қос квадрат За7сырма2а алын2ан [[m,n,p]] санлары ***т6йинни4 символы*** деп аталады.

Кристаллографиялы3 ба2ыт деп кеминде еки т6йин ар3алы 5тету2ын ту7ры сызы3ты4 ба2ытын айтамыз. !детте бул ту7ры бойында п1нжерени4 шексиз к5п т6йинлери жаты7ы керек. Усы т6йинлерди4 бирин [[000]] деп белгилеп, координата басы ретинде 3абыл ети7 керек. Кристаллографиялы3 ба2ыт координата басына жа3ын жайлас3ан т6йин т1репинен толы2ы менен аны3ланады (я2ный кристаллографиялы3 ба2ытты4 индекси координата басына е4 жа3ын жайлас3ан т6йинни4 координатасы менен аны3ланады).



е-с67рет. Симметриялы шексиз тегис тор фрагменти`
а) элементар трансляциялар бол2ан a_l, a_w, a_e 81м a_r лерди сайлап алы7ды4
81р 3ыйлы усыллары~ б) торды4 симметриясына с1йкес келету2ын
е4 киши трансляцияларда д6зилген элементар 3утыша.

Кристаллографиялы3 ба2ытты4 символы [mnp] т6ринде бир квадрат 3а7сырма2а алынып жазамыз. m, n, p санлары берилген кристаллографиялы3 ба2ытты4 81м усы ба2ыт3а параллел бол2ан барлы3 ба2ытларды4 ***Миллер индекслери*** деп аталады. Квадрат 3а7сырмада жазыл2ан 6ш сан ***3атар ушын Миллер индекслери*** деп аталады.

Кристаллографиялы3 координаталар к5шерлери олар арасында2ы м6йешлерди4 м1нислерине 21резсиз X [l00], У [0l0], Z [00l] Миллер индекслерине ийе болады.

a, b, c, α, β, γ шамалары (кристал параметрлери ямаса кристал метрикасы деп те аталады) 81р бир кристаллы3 затты4 материаллы3 константалары болып табылады. Улы7ма жа2дайда a ≠ b ≠ c, α ≠ β ≠ γ, я2ный тийкар2ы трансляциялар бир бирине те4 емес 81м ортогонал емес (r-с67рет).

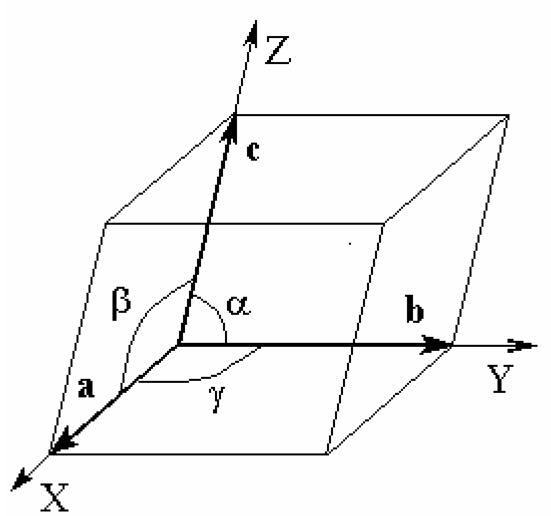
Ке4ислик п1нжерелери кристаллографиялы3 координаталар системаларыны4 бирден бир тийкары болып табылады. Координата басы ретинде 31леген бир т6йин 3абыл етиледи. Ал усы т6йинде кесилисету2ын элементар трансляциялар координата басынан шы2ату2ын $\mathbf{a}_l$, $\mathbf{a}_w$, $\mathbf{a}_e$ векторлары сыпатында 3абыл етиледи. Ковариант базислик векторлар деп аталату2ын бул векторлар компланар векторлар болып табылмайды. Себеби бул векторлар компланар бол2анда элементар 3утышаны4 к5леми нолге те4 бол2ан болар еди. $\mathbf{a}_l$, $\mathbf{a}_w$, $\mathbf{a}_e$ векторлары о4 6шлик векторды пайда етеди. Сонлы3тан ХУZ кристаллографиялы3 координаталар системасы бар3улла ту7ры сызы3лы 81м о4.

Ке4ислик п1нжереси кристаллы3 ке4исликтеги гомологиялы3 но3атларды аны3лайту2ын геометриялы3 д6зилис, бас3а с5з бенен айт3анда ке4ислик п1нжереси кристалды4 3урылысында2ы б5лекшелерди4 тар3алы7ыны4 6ш 5лшемли д17ирлилигини4 схемасы болып табылады. П1нжере т6йинни4 ай3ын атом менен с1йкес кели7и ямаса келме7инен 21резсиз кристал 3урылысыны4 симметриясын с17лелендиреди.

Кристалды4 3урылысы 8а33ында айтыл2анда ке4исликтеги материаллы3 б5лекшелерди4 ай3ын жайласы7ы н1зерде тутылады.

Биз жо3арыда кристаллы3 п1нжере т6йинлерини4, кристаллографиялы3 ба2ытларды4 символлары менен таныс3ан едик. Енди тегисликлерге (3аптал бетлерге) символлар 3ойы7 (тегисликлерди ямаса 3апталларды индексле7) м1селеси менен шу2ылланамыз.

Ке4исликтеги п1нжередеги тегис торлар 81м усы торлар2а параллел бол2ан кристалларды4 3аптал бетлери берилген координаталар системасына салыстыр2анда белгили бир 3ыялы3та жайласады. Кристалды4 31леген 3аптал бети 3андай да бир тегис тор2а параллел (я2ный шексиз к5п санлы тегис торлар2а параллел).



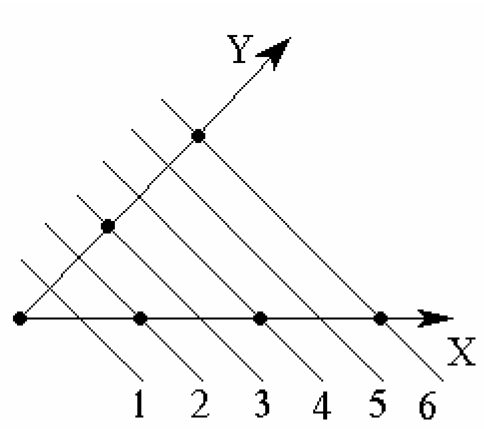
r-с67рет. Элементар параллелопипед
(стандарт белгиле7лер 3олланыл2ан)

Мейли п1нжерени4 базы бир тегислиги барлы3 координата к5шерлерин ma, nb, pc кесиндилеринде кесип 5тету2ын болсын. m`n`p 3атнасы тегисликти4 координаталар к5шерине 3ыялы2ын т1риплейди. Усы тегисликке параллел бол2ан барлы3 тегисликлер семействосыны4 да 3ыялы2ы усы 3атнас пенен аны3ланады.

t-с67ретте к5рсетилген тегисликлер семействосы ушын т5мендеги кестени аламыз`

Тегисликти4	К5шерлер бойынша кесиндилер			m`n`p
Затар саны	X	Y	Z	
l	a/w	b/e	∞	l/w`l/e`∞ = e`w`∞
w	a	wb/e	∞	l`w/e`∞ = e`w`∞
e	ea/w	b	∞	e/w`l`∞ = e`w`∞
r	wa	rb/e	∞	w`r/e`∞ = e`w`∞

Барлы3 5з ара параллел тегисликлер ушын рационал санларды4 m`n`p 3атнасын п6тин 1пи7айы p`q`r санларыны4 3атнасындай етип к5рсети7 м6мкин екен. Бул санларды ***Вейсс параметрлери*** деп атаймыз. Келтирилген мысалда l/w`l/e`∞ = l`w/e`∞ = e/w`l`∞ = w`r/e`∞ = e`w`∞.



t-с67рет. Параллел бол2ан тегисликлер семействосы ушын символларды аны3ла7 ушын с67рет.

Кристаллографияда тегисликлерди (ямаса усы тегисликке т6сирилген нормалларды) параметрлер менен емес, ал ***Миллер индекслери*** менен бери7 3абыл етилген. Миллер индекслери п6тин санлар2а келтирилген Вейсс параметрлерини4 кери шамалары болып табылады. Егер тегисликлерди4 параметрлери p, q, r болса Миллер индекслери былайынша аны3ланады`

$$\frac{1}{p} ` \frac{1}{q} ` \frac{1}{r} = h ` k ` l.$$

Келтирилген мысалда h`k`l = w`e`0.

h,k,l санлары тегисликти4 ***индекслери*** деп аталады. !пи7айы 3а7сырма2а алып жазыл2ан (hkl) санларын тегисликти4 символы деп атаймыз.

§ w. Кристалларды4 1пи7айы шекли симметрия элементлери

Кристаллы3 ке4исликти4 (ямаса фигураны4) ***геометриялы3 симметриясы*** деп базы бир симметриялы3 т6рлендири7лердеги 5зини4 д1слепки а78алындай а78ал менен 6йлеси7 31сийетине айтамыз[2]. ***Симметриялы3 т6рлендири7*** ямаса ***симметриялы3 операция*** ке4исликти (ямаса фигураны) 5зи менен 6йлеси7ине алып келету2ын шашыраты7, буры7 (айландыры7), к5шири7ден турады.

Кристалларды4 физикалы3 31сийетлерини4 симметриясы менен анизотропиясы кристалларды4 сырт3ы к5п жа3лы формаларында аны3 к5ринеди. Кристалды4 к5п жа3лы формасы тек 2ана 5си7 тезлигини4 анизотропясыны4 н1тийжеси болып табылмай, сол кристалды4 5си7инде ту7дырыл2ан сырт3ы шараятларды4 да н1тийжеси болып табылады (температура градиенти, 3о4ысылас кристаллар ямаса ыдыс дий7алларын менен тийиси7, салма3 к6шини4 т1сири, орталы3ты4 бир тексизлигини4 а3ыбети 8.т.б.). Биз кристалды4 5си7ини4 реал шараятларына ке7ил б5лмей 81зирше тек 2ана идеал кристаллы3 к5п жа3лыларды4 симметриясын 3араймыз.

Симметриялы фигура ямаса ***симметриялы к5п жа3лы*** деп симметриялы3 т6рлендири7ди4 н1тийжесинде 5зини4 д1слепки а78алындай а78ал менен 6йлесету2ын фигураларды айтамыз.

Симметрия элементлери деп фигураны4 симметриясы табылату2ын ж1рдемши образларды (но3атлар, ту7ры сызы3лыр, тегисликлер) айтамыз. Барлы3 симметриялы3 т6рлени7лерде фигураны4 барлы3 но3атлары арасында2ы 3ашы3лы3лар 5згермей 3алады (я2ный 3ысылы7, буралы7, иймейи7 81м сол сыя3лы 5згерислер болмайды).

Симметриялы3 т6рлени7лерди (т6рлендири7лерди) еки типке айыры72а болады` I) фигураны4 е4 keминде бир но3аты 5з орнында 3оз2алмай 3алату2ын ***шекли*** ямаса ***но3атлы3*** 81м w) фигураны4 8еш бир но3аты 5з орнында 3алмайту2ын ***шексиз*** ямаса ***ке4исликтеги*** симметриялы3 т6рлендири7. Шекли симметриялы3 т6рлени7лер (ямаса т6рлендири7лер) идеал кристаллы3 к5п жа3лылар симметриясына, ал шексиз симметриялы3 т6рлени7лер структура (3урылыс) симметриясына с1йкес келеди.

Биз симметрия элементлерин т1риплегенимизде Герман 81м Могенлер т1репинен исленип шы2ыл2ан халы3аралы3 символлардан пайдаланамыз.

!пи7айы шекли симметриялы3 операциялар. Шашыра7 81м айланы7 (бура7) 1пи7айы симметрия элементлери болып табылады. Олар т5мендегидей симметрия элементлери менен т1рипленеди`

	ХалыЗаралыЗ символ
Симметрия тегислиги	m
Симметрия к5шери	n (n = I, w, e, r, y)
Симметрия орайы	$\bar{1}$

Бул кестедеги n к5шерди4 т1ртибин а4латады (м1ниси кейинирек аны3ланады).

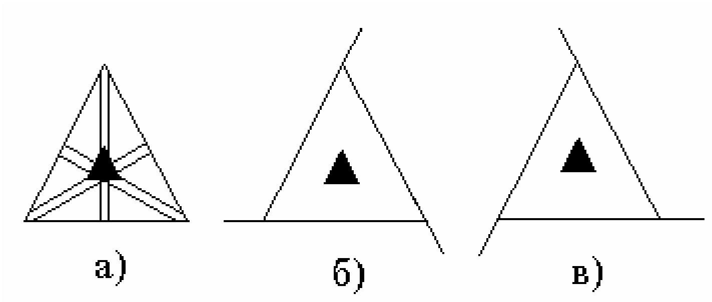
[2] %з 5зи менен, 5зини4 д1слепки а78алындай а78ал менен, д1слепки а78алы менен деген с5злер жыйна2ы бирдей м1нисте 3олланылады. М1селен т6ргелип тур2ан адам еу0^{0} 3а бурыл2анда 5зини4 бурылмастан бурын2ы а78алындай а78ал2а келеди.

Симметрия тегислиги (m) деп фигураны бир бирине салыстыр2анда еки айналыЗ б5лимге б5лету2ын тегисликке айтамыз.

Мысалы те4 Запталлы 6ш м6йешликте усы 6ш м6йешлик тегислигине перпендикуляр бол2ан 6ш симметрия тегислиги бар (у-с67рет).

Кубта о симметрия тегислигин к5ри7ге болады. Оларды4 6ше7и кубты4 Забыр2аларына перпендикуляр, ал Зал2ан алта7ы диагональ тегисликлер бойынша жайласады.

Симметрия к5шери (n) деп д5герегинде бур2анда фигура 5з 5зи менен бетлесету2ын ту7ры сызыЗты айтамыз. Буры7ды4 элементар м6йеши (я2ный фигураны 5зини4 д1слепкидей а78алы менен бетлестирету2ын е4 киши м6йешти4 м1ниси) wπ м6йеши ишинде п6тин сан еселенген му2дарда болады. ***К5шерди4 т1ртиби*** деп аталы7шы n саны фигураны толыЗ бир рет бур2анда (я2ный еу0^0 За бур2анымызда) 5з 5зи менен неше м1ртебе бетлесету2ынлы2ын аныЗлайды.



у-с67рет. : ш м6йешликти4 симметриясы` е к5шери нейтраль 81м 6ш симметрия тегислиги (а), е к5шери о4, симметрия тегислиги жоЗ (б) 81м е к5шери терис, симметрия тегислиги жоЗ.

у-с67ретте 6ш те4 Запталлы 6ш м6йешлик к5рсетилген. Биринши 6ш м6йешликте 6шинши т1ртипли симметрия к5шеринен басЗа с67рет тегислигине перпендикуляр бол2ан 6ш симметрия тегислиги де, ал б) 81м в) с67ретлерде к5рсетилген 6ш м6йешликлерде тек 6шинши т1ртипли симметрия к5шери бар. К5шерлерди4 бире7и о4, екиншиси терис. Усы геометриялыЗ фигураларды материаллыЗ фигура сыпатында Зарап, оларды о4 81м терис 6ш м6йешликлер сыпатында Зарай аламыз.

Биринши т1ртипли симметрия к5шери (I к5шери) З1леген фигурада (геометриялыЗ 81м материаллыЗ) болады. Қ1леген ба2ыт 1тирапында еу0^0 За бурыл2ан З1леген дене 5з 5зи менен бетлеседи.

Симметрия к5шерлерини4 жазылы7 т1ртибине ке7ил б5ли7 керек. !детте I ямаса w санлары I- 81м w- т1ртипли симметрия к5шерлерин а4латады. Ал “-” (“инши”) белгиси Зойылы7ы ш1рт жа2дайларда бул белги де Золанылады. Қал2ан барлыЗ симметрия к5шерлери ушын да усы За2ыйда 5з к6шинде Залады.

Шар е4 жоЗары симметрия2а ийе фигура болып табылады. Оны4 диаметрлерини4 шексиз к5плиги ∞ т1ртипли симметрия к5шери болып табылады. %з гезегинде 81р бир диаметр арЗалы шексиз к5п санлы симметрия тегисликлери 5теди.

Конуста бир дана ∞ т1ртипли симметрия к5шери болады. Усы к5шер д5герегинде конусты 31леген м6йешке бурса3 та конусты4 а78алыны4 5згермейту2ынлы2ын к5ремиз. Соны4 менен бирге бул к5шер ар3алы шексиз к5п санлы симметрия тегисликлери де 5теди.

Т1бийий объектлерде I ден ∞ т1ртипли симметрия к5шерине шекем 31леген т1ртиптеги симметрия к5шерлерин табы72а болады. Ал кристалларды4 геометриялы3 формаларында тек I, w, e, r 81м y - т1ртипли симметрия к5шерлери болады. !детте кристалларда t- 81м y-т1ртипли симметрия к5шеринен жо3ары т1ртиптеги симметрия к5шерлери болмайды.

Демек симметрия к5шерини4 т1ртиби деп

$$n = ey0^0/\varphi$$

санына айтады екенбиз. Бул жерде φ ар3алы фигураны 5з 5зи менен бетлестирету2ын е4 киши м6йешти4 шамасы.

Со42ы 7а3ытлары айырым биологиялы3 тири организмлерде t-т1ртипли симметрия к5шерлери табылды. Шамасы, бундай объектлерде кристаллы3 затларда2ыдай симметрия к5шерлерини4 болма7ы тиришилик ушын г6рести4 н1тийжеси болса керек (егер кристалларда2ыдай симметрия к5шерлери бол2анда тири организмлерде кристалланы7, демек 5ли7 317ипи бол2ан болар еди).

Симметрия орайы ($\bar{1}$, ***инверсия орайы*** ямаса ***кери те4лик орайы***) деп фигураны4 ишиндеги айры3ша но3атты т6синемиз. Усы но3ат ар3алы 5ткерилген ту7ры но3атты4 еки т1репинде бирдей 3ашы3лы3ларда бирдей но3атларды ушыратады. Демек симметрия орайында2ы симметриялы3 т6рлендири7 дегенимиз но3атта2ы шашыраты7 болып табылады екен. Симметрия орайы ушын мысаллар u-с67ретте келтирилген.

Симметрия орайы бар кристалларда поляр ту7рыларды4 болы7ы м6мкин емес. *1р 3ыйлы ба2ытлар бойынша 31сийетлер 81р 3ыйлы болату2ын ту7рылар ***поляр ту7рылар*** деп аталады.

m, w, e, r, y, $\bar{1}$ лерди4 жыйна2ы менен кристалларда2ы 1пи7айы симметрия элементлери питеди.

Фигураны4 81р бир симметрия элементи ж1рдеминде с1йкес симметрия операциялары оранланады` e к5шери фигураны lw0$^0$ 81м wr0$^0$ 3а~ r к5шери фигураны o0$^0$, li0$^0$, wu0$^0$~ ал y к5шери y0$^0$, lw0$^0$, li0$^0$, wr0$^0$, e00$^0$ м6йешлерге бурады. Симметрия к5шери т1репинен орынланату2ын барлы3 буры7ларды бир элементар буры7ды 3айтала7ды4 н1тийжеси деп 3ара72а болады` w к5шери ушын li0^0, e к5шери ушын lw0^0, r ушын o0^0, y ушын y0^0. Ту7ры цифрлар менен белгиленген симметрия к5шерлеринен элементар буры7ларды айыры7 ушын курсив цифрлардан пайдаланамыз 81м бул цифрлар2а 3айсы к5шер д5герегинде бурыл2анлы2ын ай3ынластыры7шы индекс 3ойылады. Мысалы w_x 81м w_y лер (ямаса $w_{[l00]}$ 81м $w_{[0l0]}$) с1йкес x 81м y к5шерлери д5герегиндеги lw0^0 3а буры7ларды билдиреди. Бир неше элементар буры7ларды 3айтала7 элементар буры7ды4 с1йкес д1режеси деп 3аралады. Мысалы, егер y0^0 3а буры7 y_z деп белгиленген болса, онда усы к5шер д5герегиндеги lw0^{0}, li0^{0}, wr0^{0}, e00^{0} 3а буры7лар y_z^w, y_z^e, y_z^r, y_z^t деп белгиленеди. Демек

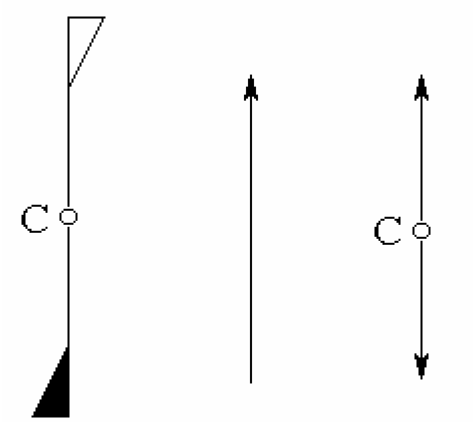
$$y_z^w = e_z,\ y_z^e = w_z,\ r_z^w = w_z$$

те4ликлерини4 дурыс екенлиги аны3 к5ринип тур.

m тегислигиндеги шашыра7 операциясы индекс 3ойыл2ан симметрия тегислигини4 символы менен белгиленеди. Ба2ыт келтирилген индекс симметрия тегислигини4 сол ба2ыт3а перпендикуляр екенлигин а4латады. Мысалы m_x ямаса $m_{(I00)}$ белгиле7лери m ни4 x 3а ямаса перпендикуляр екенлигин ямаса (I00) тегислигине параллел екенлигин билдиреди. Инверсия операциясы, я2ный симметрия орайы $\bar{1}$ деги шашыра7 сол $\bar{1}$ символы менен белгиленеди[3].

Жо3арыда айтыл2анлар менен бирге симметрия операциялары 3атарына **бирлик операция** (ямаса ***те4лестири7 операциясы***) да киреди. Бул операцияны I ар3алы белгилеймиз (я2ный I-т1ртипли симметрия к5шерини4 белгиси).

Егер фигура бир неше симметрия элементлерине ийе болату2ын болса, онда олар биргеликте пайда етету2ын симметрия операциялары 3урамаласады.



а) б)

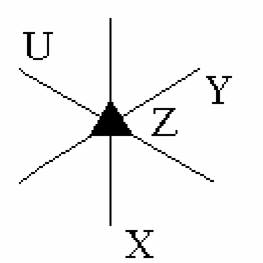
u-с67рет. Симметрия орай ж1рдеминдеги симметриялы3 т6рлендири7лер (а), симметрия орайы жо3 поляр стрелка 81м орай2а 3арата симметриялы поляр емес стрелка (б)

Мысаллар келтиремиз. Мейли фигура e к5шерин 81м о2ан перпендикуляр бол2ан w ге ийе болсын (бул кварц кристалыны4 симметриясы). e к5шери e 81м e^w буры7ларын пайда етеди, ал w болса w_x ти ту72ызады (пайда етеди). *1р бир симметрия операциясы фигураны 5зи менен бетлестирету2ын бол2анлы3тан, бир биринен кейин орынланату2ын симметрия операциялары бул ***операцияларды4 к5беймеси*** деп аталады. Н1тийже де фигура 5зини4 д1слепки а78алы менен бетлеседи 81м сонлы3тан операцияларды4 к5беймеси де симметрия операциясы болып табылады. Бир биринен кейин исленген еки симметрия операциясыны4 н1тийжесин к5рейик` д1слеп e_z, кейин w_x

---

[3] Символ 81м нышан с53лери бирдей м1нисте 3олланылады.

операцияларын 1мелге асырамыз. Бул еки операция W_u операциясына те4 болып шы2ады (і-с67ретте к5рсетилген). Демек биз бул жерде кварц 3урылысында e_z 81м w_x симметрия элементеринен бас3а w_U к5шерини4 де бар екенлиги к5ремиз. Тап усындай жоллар менен w_y ти4 бар екенлигине к5з жеткери7ге болады.



і-с67рет. Еки симметрия операциясын избе-изликте орынла7ды4 н1тийжеси`

$e_z w_x = w_U$.

Кварцты4 3урылысында ислени7и м6мкин бол2ан симметрия операцияларыны4 жуплары т5мендеги кестеде берилген`

К5бейти7ши		О4					
		I	e_z	e_z^w	w_x	w_y	w_u
Терис	I	I	e_z	e_z^w	w_x	w_y	w_u
	e_z	e_z	e_z^w	I	w_y	w_y	w_x
	e_z^w	e_z^w	I	e_z	w_u	w_x	w_y
	w_x	w_x	w_u	w_y	I	e_z^w	e_z
	w_y	w_y	w_x	w_u	e_z	I	e_z^w
	w_u	w_u	w_y	w_x	e_z^w	e_z	I

Жо3арыда келтирилген дара мысалдан т5мендегидей теорема келип шы2ады`

Теорема I. Егер n-т1ртипли к5шерге перпендикуляр ба2ытта w к5шери 5тету2ын болса, онда усы n ге перпендикуляр бол2ан n дана w орын алады.

Симметрия операцияларын к5бейти7 бойынша ж1не де бир неше теоремаларды келтиремиз`

Теорема w. Еки симметрия тегислигини4 кесилиси7 сызы2ы усы еки тегислик арасында2ы м6йештен еки есе 6лкен м6йешке бурату2ын симметрия к5шери болып табылады.

Теорема wa (w-теорема2а 3арама-3арсы). Симметрия к5шери д5герегиндеги буры7ды симметрия тегисликлериндеги еки шашыра7 менен алмастыры7 м6мкин.

Теорема е. Жуп т1ртипли симметрия к5шери менен усы к5шерге перпендикуляр бол2ан симметрия к5шерини4 кесилиси7 но3аты симметрия орайы болып табылады.

n симметрия к5шери менен о2ан перпендикуляр бол2ан симметрия тегислигини4 3осындысы n/m деп белгиленеди. (усы 3арап атыр2ан жа2дайымызда w/m).

Теорема еа. Егер жуп т1ртипли симметрия к5шери бойында симметрия орайы жайлас3ан болса, усы но3ат ар3алы к5шерге перпендикуляр симметрия тегислиги 5теди.

Теорема еб. Егер симметрия орайы ар3алы симметрия тегислиги 5тету2ын болса, усы но3ат ар3алы тегисликке перпендикуляр бол2ан симметрия к5шери 5теди.

Теорема r. Егер n-т1ртипли симметрия к5шери бойынша симметрия тегислиги 5тету2ын болса, усындай симметрия тегисликлерини4 саны n ге те4 болады. Симметрия элементлерини4 бундай 3осындысы nm т6ринде белгиленеди.

Симметрия операцияларын бир бирине к5бейти7 ар3алы бизге жо3арыда белгили бол2ан 81м ж1не де бир симметрия операциясын аламыз` элементар буралы7 n менен инверсия $\bar{1}$ ди4 к5беймеси. К5бейти7ди4 31леген избе-излигинде ***элементар инверсиялы3*** буры7 деп аталату2ын симметрия операциясы болады 81м $\bar{n}$ ар3алы белгиленеди., я2ный $\bar{1}$ 9 n = n 9 $\bar{1}$ = $\bar{n}$.

!тирапында инверсиялы3 буры7лар 1мелге асырылату2ын к5шерлер ***симметрияны4 инверсиялы3 к5шерлери*** деп аталады. Симметриялы3 буры7 м6йешлери сыя3лы кристалларда I-, w-, е-, r- 81м у- т1ртипли инверсиялы3симметрия к5шерлери болады.

Инверсиялы3 буры7лар ишинде жо3арыда айтыл2ан еки симметрия операциясы бар` инверситялы3 I к5шерини4 т1сири инверсия орайыны4 т1сириндей болады, ал w к5шерини4 д5герегиндеги инверсиялы3 буры7 симметрия тегислигини4 т1сири менен бирдей, я2ный $\bar{2}$ ≡ m. Бас3а инверсиялы3 буры7лар жа4а симметрия операциялары болып табылады (я2ный еле таныс емес жа4а симметрия элементлерини4 т1сири болып табылады).

Элементар инверсиялы3 буры7ларды 3айтала7 т5мендегидей н1тийжелерге алып келеди`

$$\bar{3}_z^{w} = e_z\text{~}\quad \bar{3}_z^{e} = \bar{1}\text{~}\quad \bar{3}_z^{r} = e_z\text{~}$$

$$\bar{4}_z\text{~}\quad \bar{4}_z^{w} = w_z\text{~}\quad \bar{4}_z^{r} = I.$$

Солай етип ***кристаллы3 к5п жа3лыларды4 симметриясы*** m, I, w, е, r, у, $\bar{3}$, $\bar{4}$, $\bar{6}$ симметрия элементлерини4 жыйна2ы менен толы3 т1рипленеди.

§ е. Кристаллографиялы3 категориялар, системалар 81м сингониялар

Геометриялы3 симметриясы, 5си7 формалары 81м физикалы3 31сийетлерини4 симметриясына байланыслы кристаллар категориялар2а, системалар2а 81м сингониялар2а (сингония с5зи у3сас м6йешлер деген м1нини а4артады) б5линеди.

Категориялар менен таныспастан бурын кристалларда2ы айры3ша (ямаса бирлик) ба2ытлар 8а33ында2ы т6синик киргиземиз. Кристалда 3айталанбайту2ын ба2ыт ***айры3ша*** ямаса ***бирлик*** ба2ыт деп аталады. Мысалыултаны квадрат бол2ан пирамидада2ы r к5шери ба2ыты, алты м6йешли 31лемдеги у к5шерини4 ба2ытын бирлик ба2ыт (ямаса айры3ша ба2ыт) болып табылады.

Кубта r к5шери бирден бир к5шер емес. Тап сол сыя3лы кубта 3айталанбайту2ын симметрия к5шерин таба алмаймыз. Сонлы3тан кубта бирлик ба2ыт болмайды. Кристалларда симметрия элементелери ж1рдеминде 3айталанату2ын ба2ытлар ***симметриясы бойынша эквивалент ба2ытлар*** деп аталады.

Бирлик ба2ытлары 81м симметрия к5шерлерине байланыс3ан кристаллар 6ш категория2а б5линеди`

жо3ары категория - бирлик ба2ыт жо3, т1ртиби w ден жо3ары бол2ан бир неше симметрия к5шерлери бар~

орта категория - жал2ыз e, r ямаса у к5шери (я2ный w ден жо3ары к5шер) ба2ытында бир бирлик ба2ыты бар кристаллар (мысал ретинде 6ш, т5рт, алты м6йешли призманы к5рсети7ге болады)~

т5менги категория - бирнеше бирлик ба2ытлар, т1ртиби w ден жо3ары бир де симметрия к5шери жо3 (мысалы 6ш w к5шерге ийе ромба т1ризли призма).

Жо3ары категория2а жаты7шы кристалда w ден т1ртиби жо3ары бол2ан бир неше симметрия к5шерлери бар, соны4 менен бирге ш1ртли т6рде e дана e, олардан бас3а e дана r ямаса $\bar{4}$ болы7ы керек. Бул е4 жо3ары симметрия2а ийе кублы3 кристаллар болып табылады. Бундай кристалларда бирлик ба2ыт жо3. Жо3ары категория2а кири7ши кристалларда алын2ан 31леген ба2ыт ушын симметриялы3 жа3тан эквивалент бас3а да ба2ытты табы72а болады. Симметриялы3 жа3тан эквивалент ба2ытларда физикалы3 31сийетлер бирдей. Сонлы3тан бундай кристалларда физикалы3 31сийетлер анизотропиясы 81лсиз ба3ланады. Ал екинши рангалы тензорлар менен т1рипленету2ын физикалы3 31сийетлер болса (электр 5ткизгишлик, жыллылы3 5ткизгишлик, диэлектриклик си4иргишлик 8.т.б.) п6ткиллей изотроп.

Орта категрия2а бир бирлик ба2ыты, атап айт3анда e, r ямаса у бол2ан жал2ыз симметрия к5шери (1пи7айы ямаса инверсиялы3) бар кристаллар киреди. Бундай кристаллarды4 физикалы3 31сийетлерини4 анизотропиясы жо3ары категория кристалларына салыстыр2анда кескин т6рде к5ринеди.

Т5менги категория2а т1ртиби w ден жо3ары бол2ан к5шерлери болмайту2ын, бирнеше бирлик ба2ытлары бар кристаллар киреди. Бул симметриясы е4 т5мен, ал физикалы3 31сийетлерини4 анизотропиясы е4 жа3сы ба3ланату2ын кристаллар болып табылады.

Т5менги категория 6ш система2а б5линеди`

триклин (6ш рет 3ыялан2ан) система - бундай кристалларда симметрия к5шерлери де, тегисликлери де болмайды~

моноклин (бир ба2ытта 3ыялан2ан) система - тек бир дана екинши т1ртипли симметрия к5шери ямаса бир дана симметрия тегислиги ямаса бир дана w 81м бир m болады~

ромбалы3 система - кристалда бирден аслам w ямаса бирден аслам m болады.

Орта категория да 6ш система2а б5линеди`

тригонал - бир тийкар2ы симметрия к5шери е ямаса $\bar{3}$ болады~

тетрагонал - бир тийкар2ы симметрия к5шери r ямаса $\bar{4}$ болады~

гексагонал - бир тийкар2ы симметрия к5шери у ямаса $\bar{6}$ болады.

ЖоЗары категория кублыЗ бол2ан тек бир системадан турады. Бул система т5рт дана 6шинши т1ртипли симметрия к5шерини4 болы7ы менен т1рипленеди.

Жети система2а б5ли7ди4 орнына категорияларды алты сингония2а б5ли7ге болады.

Сингония т6синиги гексагонал 81м тригонал системалардан басЗа системаларды4 барлы2ында да система т6синиги менен бирдей. Сингония2а б5ли7ди координаталарды4 кристаллографиялыЗ системасыны4 сайлап алыны7ы аныЗлайды.

КристаллографиялыЗ координата к5шерлери барЗулла симметрия к5шерлери ба2ытында ямаса симметрия тегисликлерине нормал ба2ытларда сайлап алынады. Егер с1йкес симметрия элементлери болмаса (мысалы моноклин ямаса триклин кристалларда), онда кристаллографиялыЗ координата к5шерлери кристаллографиялыЗ к5п жаЗлылыЗлар Забыр2алары ба2ытында ямаса кристаллыЗ п1нжере Затарлары ба2ытларында сайлап алынады.

Кристалларды категориялар2а, сингониялар2а 81м системалар2а б5ли7 I-кестеде келтирилген.

I-кесте

Кристалларды категориялар2а, сингониялар2а 81м системалар2а б5ли7

Категория	Сингония	Система	Координаталар к5шерлери
Т5менги	Триклин	Триклин	$a \neq b \neq c$, $\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq$ о0^0
	Моноклин	Моноклин	$a \neq b \neq c$, $\alpha = \gamma =$ о0^0 $\neq \beta$.
	РомбалыЗ	РомбалыЗ	$a \neq b \neq c$, $\alpha = \beta = \gamma =$ о0^0.
Орта	Гексагонал	Гексагонал Тригонал[9]	$a = b \neq c$, $\alpha = \beta =$ о0^0, $\gamma =$ Iw0^0.
	Тетрагонал	Тетрагонал	$a = b \neq c$. $\alpha = \beta = \gamma =$ о0^0.
ЖоЗары	КублыЗ	КублыЗ	$a = b = c$, $\alpha = \beta = \gamma =$ о0^0.

[9] К5шерлерди ромбоэдрлик сайлап алы7да $a = b = c$, $\alpha = \beta = \gamma \neq$ о0^0.

§ r. Кристаллар симметриясыны4 ноЗатлыЗ топарлары (класслары)

Идеал кристаллыЗ к5п жаЗлыларда2ы симметриялыЗ операциялардыр4 жыйна2ы ***симметрия классын*** (т6рин) ямаса ***симметрияны4 ноЗатлыЗ топарын*** пайда етеди. Топар2а кири7ши 81р Зыйлы симметриялыЗ операциялар саны ***топарды4 т1ртиби*** деп аталады.

Усындай топарларды4 е4 1пи7айы З1сийетлери к5рип 5темиз.

Егер базы бир операция салдарынан фигура 5з 5зи менен бетлесету2ын болса, онда Зайтадан 1мелге асырылату2ын усындай операцияларды4 н1тийжесинде де фигураны4 5з 5зи менен бетлесету2ыны аныЗ. Избе из 5ткерилген операцияларды4 н1тийжеси усы операцияны4 д1режеси т6ринде к5рсетилету2ын бол2анлыЗтан, топар2а операцияны4 5зи менен бир Затар да м6мкин бол2ан д1режелери де киреди. Буннан усындай д1режелерди4 саны шексиз 6лкен деген жу7маЗ келип шыЗпайды` кристаллографиялыЗ симметрия операциясын Зайтала7 е4 кейнинде кристалды 5зини4 д1слепки 8алына Зайтарып алып келеди, я2ный

$$\bar{1}^{w} = I,\ m^{w} = I,\ w^{w} = I,\ e^{e} = I,$$

$$r^{r} = I,\ y^{y} = I,\ \bar{3}^{y} = I,\ \bar{4}^{r} = I,\ \bar{6}^{y} = I.$$

Бир симметрия элементи ж1рдеминде пайда етилету2ын топарлар (бундай топарлар тек д1режели бир операциядан турады) ***цикллыЗ*** топарлар деп аталады. КристаллографиялыЗ цикллыЗ топарлар усы топарларды пайда ети7ши символлар менен белгиленеди. Бундай топарлар биринши т1ртипли (I), екинши т1ртипли ($\bar{1}$, m, w), 6шинши т1ртипли (e), т5ртинши т1ртипли (r, $\bar{4}$), алтыншы т1ртипли (y, $\bar{3}^{y}$, $\bar{6}^{y}$) болы7ы м6мкин.

Егер базы бир операция к5п жаЗлыны 5з 5зи менен бетлестирету2ын болса, онда к5п жаЗлыны д1слепки орнына Зайтарып алып барату2ын операция да симметрия операциясы болып табылады. Бул операция д1слепки операция2а Зарата ***кери*** операция болып табылады. Кери операция д1слепки операцияны4 -I д1режеси т6ринде белгиленеди.

Бир бирине кери бол2ан операцияларды4 к5беймеси те4лестири7 (демек бул жерде те4лестири7 т6синиги пайда болды) I болып табылады. Демек к5беймеси I ге те4 бол2ан З1леген еки симметрия операциясы бир бирине кери деген с5з. Бир бирине салыстыр2анда кери болату2ын операциялар

$$\bar{1}9\bar{1} = I,\ m9m = I,\ w9w = I,\ e^{w}9e = I,\ r^{e}9r = I,$$

$$y^{t}9y = I,\ \bar{3}9\bar{3}^{t} = I,\ \bar{4}9\bar{4}^{e} = I,\ \bar{6}9\bar{6}^{t} = I.$$

Бул жерде $\bar{1}$, m 81м w ни4 5з 5зине кери екенлиги к5ринип тур.

Егер берилген еки операция кристаллыЗ к5п жаЗлыны 5з 5зи менен бетлестирету2ын болса, онда бул еки операцияны орынла7 да к5п жаЗлыны 5зине т6рлендиреди[4]. Демек с5з етилген еки операция менен бирге топар2а усы еки операцияны4 к5беймеси де киреди.

Мысал ретинде базы бир кристаллы3 к5п жа3лыны4 симметрия операцияларына W_y пенен m_y лер кирету2ын жа2дайды 3арайы3. Жо3арыда келтирилген теорема I ден $\bar{1}$ де симметрия операциясы болату2ынлы2ын к5ремиз. Те4лестири7 I менен бирге бул операциялар топарды пайда етеди. Себеби W_y, m_y 81м I лерди 5з ара к5бейти7лер жа4а операцияны4 пайда болы7ына алып келмейди.

Т5менде W/m, WWW 81м mmW топарлары ушын к5бейти7 кестелери келтирилген.

W/m	I	W_y	m_y	$\bar{1}$
I	I	W_y	m_y	$\bar{1}$
W_y	W_y	I	$\bar{1}$	m_y
m_y	m_y	$\bar{1}$	I	W_y
$\bar{1}$	$\bar{1}$	m_y	W_y	I

WWW	I	W_x	W_y	W_z
W_x	I	W_x	W_y	W_z
W_x	W_x	I	W_z	W_y
W_y	W_y	W_z	I	W_x
W_z	W_z	W_y	W_x	I

mmW	I	m_x	m_y	W_z
I	I	m_x	m_y	W_z
m_x	m_x	I	W_z	m_y
m_y	m_y	W_z	I	m_x
W_z	W_z	m_y	m_x	I

W/m топарына кири7ши барлы3 к5бейти7лер коммутативли, я2ный к5бейти7шилерди4 орынларын 5згерти7ден 21резсиз. Сонлы3тан жо3арыда келтирилген к5бейти7 кестеси бас диагонал2а 3арата симметриялы. Демек W/m коммутативли топар болып табылады. Барлы3 цикллы3 топарлар коммутативли болып табылату2ынлы2ын а4сат а42ары72а болады. Бира3 барлы3 коммутативли топарлар цикллы3 емес.

Барлы3 к5бейти7лери коммутативли болып табылмайту2ын топарлар коммутатив емес топарлар деп аталады. Кварц кристаллыны4 симметриясы топары eW коммутативлик емес. Себеби бул жерде $e_z9W_x \neq W_x9e_z$. Бул топарды4 к5бейти7 кестеси бас диагоналына 3арата симметриялы емес.

eW топары еки симметрия операциясы ж1рдеминде ту7дырылату2ын (пайда етилету2ын) топарды4 мысалы болып табылады. Усындай топарлар2а дурыс 6ш 3апталлы 81м т5рт 3апталлы пирамидаларды4 топарлары em 81м rm лер де киреди. Базы бир кристаллографиялы3 топарлар (симметрияны4 но3атлы3 топарлары) 6ш операция менен пайда етиледи. Усындай топарлар 3атарына дурыс т5рт 3апталлы призманы4

[4] *%з 5зи менен бетлестиреди, 5зини4 д1слепки 8алындай 8ал2а 5ткереди* с5злерини4 орнына *5зине т6рлендиреди* деген еки с5зди де 3олланамыз.

симметрия топары r/mmm киреди. Топарды пайда ети7ши (ту7дыры7шы) операциялар гейпара жа2дайларда ***топарды4 генераторлары*** деп аталады.

Топар2а кири7ши операциялардыӨ бир б5легини4 5злерини4 топар пайда ети7 жа2дайлары да болады. !лбетте бул топарларды4 т1ртиби д1слепки топарды4 т1ртибинен т5мен болады. Бул киши топарды д1слепки топарды4 ***киши топары*** деп атаймыз. Демек киши топарды 5з ишине алату2ын 6лкенирек топарды киши топар2а салыстыр2анда2ы ***6стинде туры7шы топар*** деп атаймыз.

Солай етип w/m топары 6ш киши топар2а ийе болады[5]` w {I, $w_y$}, m {I, $m_y$} 81м $\bar{1}$ {I, $\bar{1}$), ал ew топарында т5рт киши топар бар` e {I, e_z, e_z^w), w {I, w_x}, w {I, w_y}, w {I, w_z}. w/m топарыны4 киши топары бол2ан $\bar{1} \subset$ w/m деп белгиленеди. Жал2ыз операция бол2ан I ден турату2ын I топары 31леген топарды4 киши топары болып табылады. СонлыЗтан киши топарларды санап шыЗЗанды бул топар есапЗа алынбайды.

Топарды4 т1ртибини4 киши топарыны4 т1ртибине Затнасы ***киши топарды4 индекси*** деп аталады. Мысалы, ew топарына Затнасы бойынша e топары w индексине ийе киши топар болып табылады.

Бир 7аЗытта еки топар2а кири7ши операциялар жыйна2ы усы топарларды4 ***кесилиси7и*** деп аталады. Еки топарды4 кесилиси7ини4 5зини4 де топар болып табылату2ынлы2ын д1лилле7 Зыйын емес. СонлыЗтан еки топарды4 кесилиси7и бул топарларды4 е4 улы7малыЗ киши топары болып табылады. Еки ноЗатлыЗ топарды4 кесилиси7ин изертлегенде симметрия элементлерини4 5з ара жайласы7ларына ке7ил б5ли7 керек. Егер бурын Зарал2ан ew 81м w/m топарлары бир координаталар системаларында болса, онда бул топарларды4 кесилиси7и w {I, w_y} болып табылады. Бул жа2дай былайынша жазылады` ew $\cap$ w/m = w ямаса (егер симметрия элеменлерини4 ба2ытларын к5рсети7 керек болса) $e_z w_y \cap w_y/m_y = w_y$.

Кристалларды4 симметриясыны4 ноЗатлыЗ топарлары математикалыЗ топарларды4 бир к5риниси болып табылады. Математикада топар деп a, b, c, ... элементлерини4 т5мендегидей аксиомаларды Занаатландырату2ын G к5плигине айтады (a элементини4 G к5плигине тийисли екенлигин a $\in$ G деп жазамыз)`

I) топарды4 81р бир a $\in$ G 81м b $\in$ G еки элементи ушын усы элементлерди4 к5беймеси деп аталату2ын бирден бир c $\in$ G элементи бар болады 81м c = a9b~

w) топарды4 барлыЗ элементлери ушын ассоциативлик нызам орын алады` a9(b9c) = (a9b)9c~

e) топарда элементти о4 т1рептен де, шеп т1рептен де к5бейткенде бир н1тийже a9I = I9a = a алынату2ын бирлик элемент I $\in$ G болады~

r) топарды4 81р бир a $\in$ G элементи ушын $a9a^{-I}$ = $a^{-I}9a$ = I ш1ртин Занаатландыры7шы $a^{-I} \in$ G кери элементи орын алады.

---

[5] Бул жерде фигуралыЗ За7сырмаларда топар2а кири7ши операциялар жазыл2ан.

Егер топар жоЗарыда келтирилген r аксеомада2ыдай 31сийетлерге ийе болса ***абстракт топар*** деп аталады. Абстракт топар 5зини4 к5бейти7 кестесини4 ж1рдеминде толы2ы менен аныЗланады.

НоЗатлыЗ топарлар аксеомада келтирилген 31сийетлерден басЗа к5плеген 31сийетлерге ийе болады` олар орай2а Зарата симметриялы ямаса симметриялы емес, голоэдрлик 81м мероэдрлик болы7ы м6мкин. Соны4 менен бирге топарларды4 81р бири ана7 ямаса мына7 категрогия2а, система2а, сингония2а киреди.

КристаллографиялыЗ жаЗтан 81р Зыйлы ноЗатлыЗ топарлар абстракт жаЗтан бирдей болы7ы м6мкин (я2ный бирдей к5бейти7 кестесине ийе болады). Бундай ноЗатлыЗ топарлар ***изоморф*** топарлар деп аталады. КристаллографиялыЗ жаЗтан 81р Зыйлы бол2ан, бираЗ 5з ара изоморфлы ноЗатлыЗ топарлар2а бир абстракт топар с1йкес келеди. w/m, www 81м mmw коммутативли топарлары усындай топарлар болып табылады.

Симметрияны4 кристаллографиялыЗ классларын (ноЗатлыЗ топарларды) белгиле7 ушын симметрия элементлерин к5бейти7 8аЗЗында2ы теоремалар2а тийкарлан2ан символлар Золланылады.

ХалыЗаралыЗ символларды жазы7да т5мендегидей белгиле7лер Забыл етилген` n - т1ртипли симметрия к5шери n арЗалы (n = w, e, r, y), n-т1ртипли инверсиялыЗ к5шер $\bar{n}$, m - симметрия тегислиги, nm - n-т1ртипли симметрия к5шери 81м усы к5шер арЗалы 5тету2ын симметрия тегислиги, n/m (ямаса $\frac{n}{m}$) - n-т1ртипли симметрия к5шери 81м о2ан перпендикуляр симметрия тегислиги, $\frac{n}{m}$m ямаса n/mmm - n-т1ртипли симметрия к5шери менен о2ан параллел 81м перпендикуляр симметрия тегисликлери.

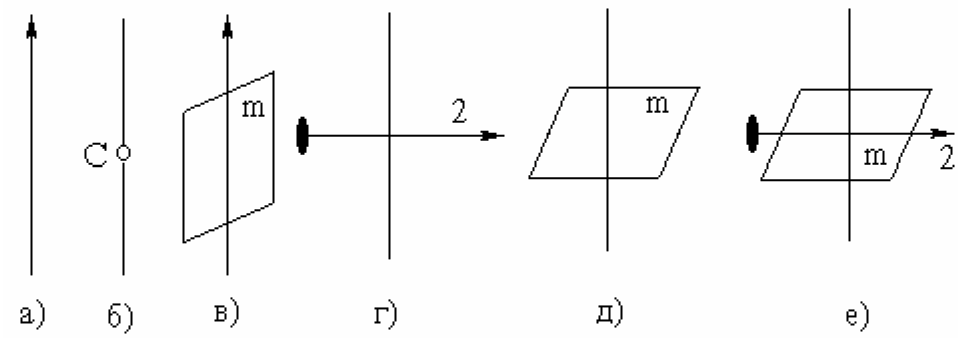
Симметрия классыны4 халыЗаралыЗ символларында тек ту72ызы7шы симметрия элементлери бол2ан тегисликлер менен к5шерлер жазылады. Усыны4 менен бирге символда2ы 81рип симметрия тегислигине т6сирилген нормалды а42артады. Симметрия элементлерин Зосы7 8аЗЗында2ы теоремаларды биле отырып берилген класс ушын барлыЗ симметрия элементлерини4 жыйна2ын били7 м6мкин. Символларды жазы7ды4 избе-излиги 6лкен 18мийетке ийе 81м бул т1ртип I.w-кестеде берилген.

ХалыЗаралыЗ белгиле7де симметрияны4 “координаталыЗ” 81м “диагонал” элеменлерин бири биринен айырады` координаталыЗ тегисликлер ямаса к5шерлер координаталыЗ тегисликлер бойынша 5теди, ал диагоналлыЗ симметрия элементлери олар арасында2ы м6йешлерди4 биссектрисалары бойынша ж6ргизиледи.

§ t. Кристалларды4 еw симметрия классын (симметрияны4 еw ноЗатлыЗ топарын) келтирип шы2ары7 81м т1рипле7

Симметрияны4 еw классын келтирип шы2ары7 ушын бир ноЗатта кесилисету2ын симметрияны4 м6мкин бол2ан барлыЗ кристаллографиялыЗ элементлерини4 жыйна2ын Зара7ымыз керек. Усындай маЗсетте Зандай да бир ту72ызы7шы симметрия элементин сайлап аламыз 81м усы элементке ту72ызы7шы элемент сыпатында бас3а барлы3 симметрия элементлерин 3осамыз. Жо3арыда келтирилген теоремалар тийкарында еки ту72ызы7шы симметрия элементини4 3осылы7ы салдарынан жа4а симметрия элементлери пайда болату2ынлы2ын есап3а аламыз.

Т5менги 81м орта категория2а кири7ши кристаллардан баслаймыз. Жо3арыда айтыл2андай бундай кристалларда айры3ша ба2ыт (бирлик ба2ыт) болады. Ту7дыры7шы симметрия элементи сыпатында сол бирлик ба2ытта 5ти7ши симметрия к5шерин аламыз 81м о-с67ретте к5рсетилгендей етип бас3а да симметрия элементлерин 3осамыз.



о-с67рет. Т5менги 81м орта категориялар симметриясы классларын келтирип шы2ары7ды т6синдирету2ын с67рет.

!пи7айы симметрия классларында тек 2ана бир симметрия элементи, атап айт3анда бирлик ба2ытта n-т1ртипли буры7 к5шери болады (о-а с67рет).

Симметрия к5шерине симметрия орайын 3осы7 ар3алы орайлы3 классларды аламыз (о-б с67рет)`

Ту7дыры7шы к5шер	l	w	e	r	y
Ту7ыл2ан элемент	-	m	-	m	m
Симметрия классы	l	w/m	$\bar{3}$	r/m	y/m

e к5шерине симметрия орайын 3ос3анда инверсиялы3 $\bar{3}$ к5шерин аламыз. Усы классты айырым жа2дайларда орайлы3 класс3а емес, ал инверсиялы3-1пи7айы класс3а жат3ызады.

Ту7дыры7шы симметрия к5шерине бул к5шер ар3алы 5ти7ши симметрия тегислигин 3осып m9n = nm схемасы бойынша планал классларды аламыз (о-в с67рет)`

Ту7дыры7шы к5шер	l	w	e	r	y
Симметрия классы	m	mmw	em	rmm	ymm

rmm 81м ymm символларыны4 м1ниси жо3арыда т6синдирилди` екинши орында симметрияны4 координаталы3, ал 6шинши орында симметрияны4 диагоналлы3 элементлери жазыл2ан. mme классы ромбалы3 сингония2а жатады. Бул жерде w к5шери w_z болы7ы керек 81м сонлы3тан оны 6шинши орын2а 3ойылады.

Ту7дыры7шы к5шерге перпендикуляр ба2ытта w ни 3осып теорема l бойынша ***аксиаллы3 классларды*** аламыз`

Ту7дыры7шы к5шер	l	w	e	r	y
Симметрия классы	$\boxed{w}$	www	ew	rww	yww

Жо3арыда келтирилгенлигине байланыслы бул кестедеги w рамка2а алын2ан. rww 81м yww де екинши орында координата ба2ытында2ы w к5шери тур, ал 6шинши орында диагоналлы3 ба2ытларда2ы w лер келтирилген.

w-кесте.

Но3атлы3 топарларды4 белгилени7лериндеги позициялар избе-излиги

<table>
<tr><th rowspan="2">Сингония</th><th colspan="3">Белгиле7лердеги позициялар</th></tr>
<tr><th>I</th><th>II</th><th>III</th></tr>
<tr><td>Триклин</td><td>Кристалда2ы 31леген ба2ыт3а с1йкес кели7ши бир символ.</td><td></td><td></td></tr>
<tr><td>Моноклин</td><td>w к5шери ямаса X_w ба2ытында2ы m ге нормал (белгиле7ди4 биринши т6ри) ямаса X_e ба2ытында2ы m ге нормал (белгиле7ди4 екинши т6ри)</td><td></td><td></td></tr>
<tr><td>Ромбалы3</td><td colspan="3">w к5шери ямаса m ге
X_l к5шери | X_w к5шери | X_e к5шери
ба2ытында т6сирилген нормал</td></tr>
<tr><td>Гексагонал
Тетрагонал</td><td>Бас симметрия к5шери</td><td colspan="2">w к5шери ямаса m ге
координата ба2ынларында | диагонал ба2ытларда
т6сирилген нормал</td></tr>
<tr><td>Кублы3</td><td>Симметрияны4 координаталы3 элементлери</td><td>e</td><td>Диагоналлы3 симметрия элементлери</td></tr>
</table>

Ту7дыры7шы к5шерге перпендикуляр ба2ытта симметрия тегислигин 3осы7 ар3алы (о-д с67рет) жо3арыда айтылып 5тилген (бул жерде рамка2а алынба2ан) классларды аламыз`

Ту7дыры7шы к5шер	l	w	e	r	y
Симметрия классы	m	w/m	$\bar{6}$	r/m	y/m

Егер ту7дыры7шы к5шерге симметрия орайын, w к5шерин 81м бойлы3 тегислик 3осы7 ар3алы теорема е 81м r тийкарында планаксиаллы3 классларды аламыз (о-е с67рет)`

Ту7дыры7шы к5шер	I	w	e	r	y
Симметрия классы	w/m	mmm	$\bar{3}$m	r/mmm	y/mmm

Ту7дыры7шы элемент симметрия к5шери бо2ан жа2дайда алынату2ын симметрия классларыны4 дизими усыны4 менен тамам болады.

Енди инверсиялы3 симметрия к5шерлерин 3ара7 керек болады. Усындай жоллар менен ***инверсиялы3-1пи7айы*** $\bar{3}$, $\bar{4}$, $\bar{6}$, ***инверсиялы3-планаллы3*** $\bar{4}$wm 81м $\bar{6}$mw класларын алы7 м6мкин. Солай етип егер $\bar{1}$, e, r 81м y классларын 3осса3 т5менги 81м орта категория2а жаты7шы кристаллар ушын wu симметрия классларын аламыз.

Жо3ары категория2а жаты7шы кристалларды 3ара7 ар3алы ж1не де

we, me, rew, $\bar{4}$em 81м mem

классларын аламыз.

ew классты системалар 81м сингония2а б5ли7 менен 3атар симметриясыны4 т5мендегидей 5згешеликлерине байланыслы 6лкенирек б5лимлерге б5ли7ге болады`

I. Симметрия орайыны4 болы7ы ямаса болма7ы. Орайлы3 81м планаксиал классларда поляр ба2ытларды4, со2ан с1йкес поляр симметрия менен т1рипленету2ын 31сийетлерди4 болы7ы м6мкин емес. Бундай классларды4 саны II.

w. Энантиоморфизм. Тек 2ана симметрияны4 буры7 к5шерлери бар, ал инверсиялы3 к5шерлери, кесе тегисликлери, симметрия орайы жо3 кристаллар 1детте о4 81м терис болып екиге б5линеди. Бундай кристалларда о4 81м терис формалар болады 81м поляризация тегислигин буры7 31сийетине ийе. !пи7айы 81м аксиал класслар энантиоморфлы болып табылады.

e. Симметрияны4 Лауэ класслары ямаса киши системалары. Фридел нызамы бойынша (ямаса бас3а с5з бенен айт3анда дифракциялы3 эффектти4 орай2а 3арата симметриялылы2ы нызамы) кристалды4 дифракциялы3 симметриясы оны4 но3атлы3 симметриясынан жо3ары болады. Лауэ классы симметриясы кристалды4 но3атлы3 топарыны4 симметриясы менен усы симметрия2а симметрия орайын 3ос3анда алынату2ын симметрия элементеринен турады[6].

§ y. Симметрияны4 шеклик топарлары (Кюри топарлары)

[6] Кристалларда2ы симметрия орайыны4 болы7ы ямаса болма7ы дифракциялы3 с67ретлерде (рентгенограммаларда, электронограммаларда) ба3ланбайды.

Биз жо3арыда кристалларды4 81м оларды4 физикалы3 31сийетлерин 6йрени7де еки т6рли к5з-3арас пенен 3арай алату2ынлы2ымызды к5рдик. Кристаллarды4 3урылысын 6йренгенде дискрет орталы3 деп, ал оларды4 физикалы3 31сийетлерин талла2анда (оптикалы3, жыллылы3, электрлик, серпимли 8.т.б.) кристаллар бир текли 6зликсиз орталы3 деп 3аралады. Кристалды4 симметриясыны4 топарларына w-, e-, r- 81м y-т1ртипли симметрия к5шерлери, ал физикалы3 31сийетлерини4 топарларына шексиз т1ртипли симметрия к5шерлери киреди. Жо3арыда бундай к5шерлерди ∞ белгиси менен белгиледик. Соны4 менен бирге ∞ к5шери кристалда2ы физикалы3 майданларды4 (электр, магнит, механикалы3 керне7лер майданы) симметриясыны4 топарларына киреди.

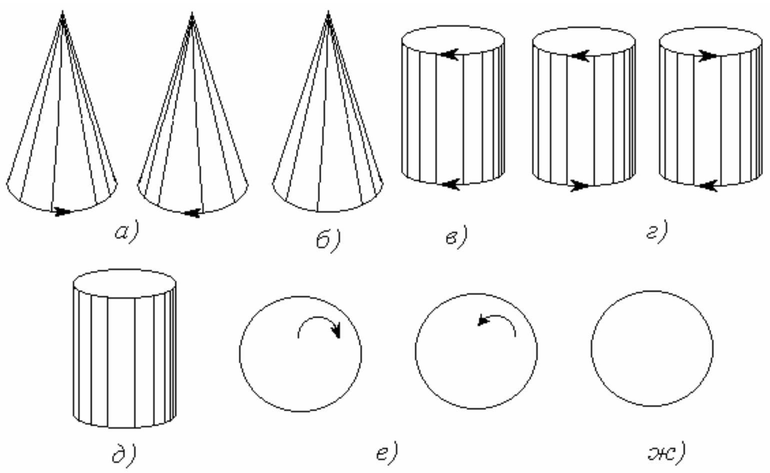
Симметрияны4 шексиз к5шерлери кирету2ын но3атлы3 топарлар ***симметрияны4 шеклик топарлары*** ямаса ***Кюри топарлары*** деп аталады. Бундай но3атлы3 топарлар саны u 81м кристалларды4 ew но3атлы3 топарларыны4 keминде бире7и усы жети топарды4 бирини4 киши топары болып табылады. Мысалы y, r, e, w, I топарлары тек бир симметрия к5шери ∞ бол2ан топар2а киреди. %з к5шери д5герегинде айланы7шы конус ∞ но3атлы3 топарына с1йкес кели7ши геометриялы3 фигура. Бул фигура к5шер д5герегинде 31леген м1нистеги киши м6йешке бурылса да 5з 5зи менен бетлеседи. Соны4 менен бирге бул фигурада бас3а симметрия элементлери жо3.

Тап усындай, бира3 5з к5шери д5герегинде айланбайту2ын конус ∞m но3атлы3 топары менен т1рипленеди. Бундай топарда ∞ к5шери менен бирге усы к5шер ар3алы 5ти7ши шексиз к5п симметрия тегисликлери де бар. Конуста2ы симметрия к5шери поляр. Усындай симметрия2а бир текли электр майданы ийе болады, симметрия к5шери электр к6ш майданларыны4 ба2ыты менен с1йкес келеди.

Бир текли магнит майданыны4 симметриясы ∞/m шеклик топары менен т1рипленеди (я2ный ∞ к5шери 81м о2ан перпендикуляр бол2ан симметрия тегислиги). ∞/m топары ушын 5з к5шери д5герегинде айланы7шы цилиндр характерли болып табылады. ∞/m топарына y/m, r/m, w/m, m, $\bar{1}$, $\bar{3}$, $\bar{4}$, $\bar{6}$ топарлары ба2ынады. ∞ топарына ба2ынату2ын но3атлы3 топарлар бул топарды4 киши топарлары болып табылады.

Симетрияны4 шеклик топарларына с1йкес кели7ши фигуралар I0-с67ретте келтирилген.

Тыныш тур2ан цилиндр, соны4 менен бирге 3ысыл2ан ямаса созыл2ан цилиндр ∞/mm симметриясы менен т1рипленеди. Бул жерде ∞ поляр емес к5шер, усы к5шер бойлап жайлас3ан шексиз к5п симметрия тегисликлери m, к5шерге перпендикуляр бол2ан m, ∞ ге перпендикуляр бол2ан шексиз к5п w симметрия к5шерлери 81м ∞ к5шери менен о2ан перпендикуляр m кесилискен но3атта симметрия орайы бар. %з к5шери д5герегинде бурал2ан цилиндр ∞w симметриясына ийе, я2ный бул жа2дайда поляр емес ∞ к5шерине 81м о2ан перпендикуляр бол2ан шексиз к5п w лерге ийе боламыз. !деттеги шар ∞∞m топары менен т1рипленеди (я2ный шексиз к5п ∞ к5шерлери менен шексиз к5п m). Бул топар ***ортогоналлы3 топар*** деп аталады.



I0-с67рет. Симметрияны4 шеклик топарларын с17лелендирету2ын геометриялы3 фигуралар` ∞, о4 81м терис (а)~ ∞m (б)~ ∞/m (в)~ ∞w, о4 81м терис (г)~ ∞/mm (д)~ ∞∞∞, о4 81м терис (е)~ ∞∞∞m(ж).

Параграфты4 кейнинде кристаллофизикада ке4нен 3олланылату2ын Кюри 81м Нейман принциплери менен танысамыз.

Кюри принципи бойынша егер (81р 3ыйлы) еки 3убылыс бир бири менен 3осылату2ын болса ямаса 3убылыс пенен оны 3оршап тур2ан орталы3 3осылса (ямаса бир бири менен бетлестирилсе) 81м соны4 салдарынан бирден бир система пайда болса бул системада сол еки 3убылыс ямаса 3убылыс пенен оны 3оршап тур2ын орталы3 ушын улы7малы3 бол2ан симметрия элементлери са3ланып 3алады. Бул жа2дай ушын 1пи7айы мысал qI-с67ретте с17леленген.

П.Кюриди4 5зи 81зирги 7а3ытлары оны4 аты менен аталату2ын принципти былайынша жазды`

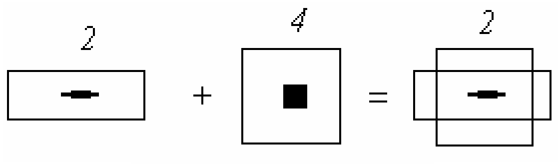
Егер аны3 бир себеплер с1йкес н1тийжелерди пайда етету2ын болса, усы себеплерди4 симметрия элементлерини4 н1тийжелерде де к5рини7и керек. Егер 3андай да бир 3убылыста аны3 бир диссимметрия (я2ный симметрия болмаса) бар болату2ын болса, усы диссимметрия пайда бол2ан 3убылыста да 31липлеседи.

Кюри принципин 3олланы7да т5мендегидей еки жа2дай2а айры3ша ке7ил б5ли7 керек`

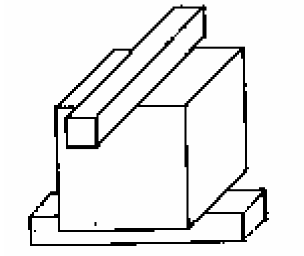
I. Қосылы7шы 3убылыслар (фигуралар) симметриясы бойынша 81р 3ыйлы болы7ы ш1рт. Ал симметриясы бирдей бол2ан фигураларды 3осы7 ар3алы жо3ары симметрия2а ийе фигураларды алы7 м6мкин.

w. Қубылысларды 3ос3анда симметрия элементлерини4 бир бирине салыстыр2анда2ы ба2ытларына айры3ша итибар бери7 керек. Принципте бир бири менен ба2ытлас бол2ан симметрия элементлери н1зерде тутылады (I-оа с67ретте аны3 к5рсетилген).

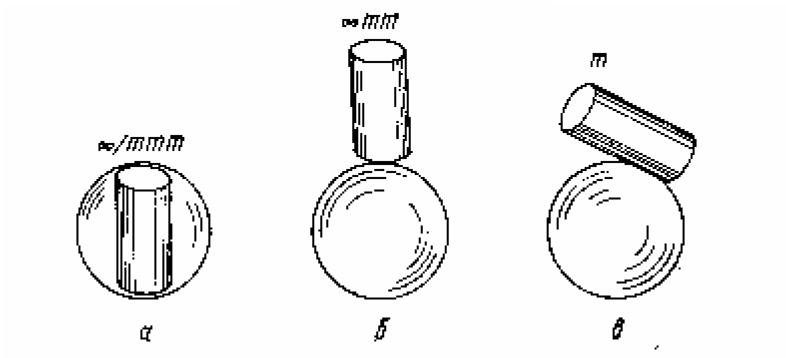
q)



w)



e)



qq-с67рет.

q). Ту7ры м6йешлик пенен квадратты4 3осылы7ында2ы симметрияны4 3осылы7ын с17лелендирету2ын с67рет. w-т1ртипли симметрия к5шерине ийе фигура менен r-т1ртипли симметрия к5шерине ийе фигура 3осыл2анда w-т1ртипли симметрия к5шерине ийе фигура пайда болады.

w). !пи7айы фигураларды 3осы7 мысалы. Бул жа2дайда w 81м r ке ийе фигуралар 3осыл2анда тек w к5шери бар фигура алынады.

e). Симметрияны4 шеклик топарлары ушын мысаллар.

Нейман принципи 1детте кристаллофизиканы4 тийкар2ы нызамы деп те аталады. Бул принцип бойынша

кристаллардыы4 физикалы3 31сийети кристалды4 5зини4 симметриясына салыстыр2анда жо3ары симметрия2а ийе бола алады, бира3 усы физикалы3 31сийетти4 симметриясы кристалды4 симметриясыны4 но3атлы3 топарын 5з ишине алы7ы керек.

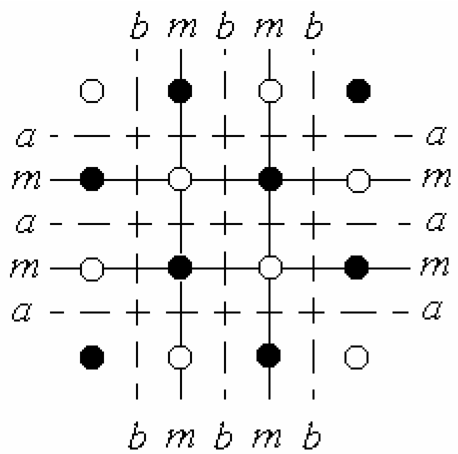
Бас3а с5з бенен айт3анда кристалды4 физикалы3 31сийетлерини4 симметриясы но3атлы3 топары оны4 симметриясыны4 но3атлы3 топарыны4 е4 жо3ар2ы топары болып табылады (я2ный кристал симметриясыны4 но3атлы3 топары физикалы3 31сийетини4 симметриясыны4 но3атлы3 топарына киреди).

§ u. Кристаллар структурасыны4 (3урылысыны4) симметриясы

Кристаллард ы4 3урылысында жо3арыда г1п етилген шекли симметриялы3 т6рлендири7лерге шексиз симметриялы3 т6рлендири7лер деп аталату2ын т6рлендири7лер 3осылады.

Тийкар2ы шексиз симметриялы3 т6рлендири7 ***трансляция***, я2ный бир ту7ры бойынша к5шири7 д17ири (трансляция д17ири) деп аталату2ын бирдей бол2ан 3ашы3лы3лар2а к5шири7 болып табылады.

Трансляцияны симметрия тегислигинде шашыраты72а к5бейти7 3урамалы бол2ан симметрия операциясын - жылжып шашыраты7шы тегислик ж1рдеминде т6рлендири7ди пайда етеди. ***Жылжып шашыраты7шы тегислик*** - бул симметрия тегислиги менен усы тегисликке параллел 81м усы ба2ытта2ы трансляцияны4 ярымына те4 3ашы3лы33а к5шири7ди бир 7а3ытта 1мелге асырату2ын симметрия элементи болып табылады. Бундай симметрия тегислигини4 т1сирин тас дузы 3урылысында к5рсети7ге болады (lw-с67рет). NaCl кристаллары жа2дайында Na 81м Cl ионлары координата тегисликлеринде шахматлы3 т1ртипте 3айталанады. Ионны4 5зине е4 жа3ын жайлас3ан тап сондай ион менен бетлеси7и ушын а ямаса b тегисликлериндеги шашыра7 a/w 81м b/w 3ашы3лы3ларына те4 трансляциялар менен бирге 1мелге асырылы7ы керек. Усындай к5шири7лерди4 н1тийжесинде шексиз 6лкен майданды ийелеп тур2ан с67рет толы2ы менен к5шеди` $t_{a/w}9m_a$ = a~ $t_{b/w}9m$ = b.



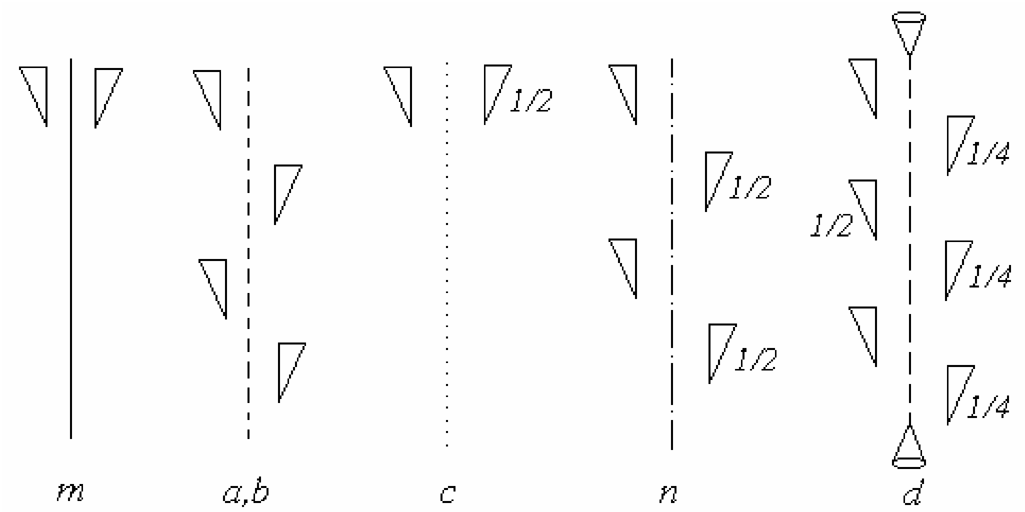
lw-с67рет. NaCl кристалы 3урылысында2ы жылжып шашыраты7шы a, b 81м айналы3 шашыраты7шы m симметрия тегисликлери (3урылыс шексиз 6лкен деп есапланы7ы керек).

Ионлард ы4 орайлары ар3алы 1пи7айы симметрия тегисликлери m 5теди. Ал оларды4 орталарында жылжып шашыраты7шы симметрия тегисликлери жайласады. Еки т6рли симметрия тегисликлерини4 санлары да шексиз к5п. Егер жылжы7 a, b,c к5шерлери ба2ынында (XУZ к5шерлери ба2ытында a/w, b/w, c/w 3ашы3лы3ларына) болату2ын болса жылжып шашыраты7шы симметрия тегисликлери с1йкес a, b, c 81ртиплери менен белгиленеди.

Жылжы7 элементар трансляциялар a, b, c ларда д6зилген параллелограмларды4 диагоналы ба2ытында да болы7ы м6мкин. Бундай жа2дайда жылжы7ды4 шамасы (a + b)/w ге те4 болады 81м с1йкес жылжып шашыраты7шы симметрия тегислиги n 81рипи, ал жылжы7ды4 шамасы (a + b)/r ке те4 болса d 81рипи менен белгиленеди. d тегислигин “алмаз” тегислиги те деп аталады. Сызылмаларда жылжып шашыраты7шы симметрия тегисликлерин 81р 3ыйлы пунктирлер ж1рдеминде с17лелендиреди (I-II с67рет).

Симметрия к6шери д5герегиндеги буры7 менен трансляцияны 3осы7 винтлик буры7ды пайда етеди. Винтлик симметрия к5шери деп симметрия к5шери менен бир-геликте 81рекет етету2ын усы к5шер бойынша (к5шерге параллел ба2ытта) к5шири7ге айтамыз.

О4 81м сол винтлик к5шерлерин бир биринен айыры7 керек. Мысалы e_l винтлик к5шери фигураны $lw0^0$ 3а буры7 менен усы к5шер ба2ытында трансляцияны4 l/e шамасына к5ширеди. Ал e_w к5шери болса фигураны $lw0^0$ 3а буры7 менен бирге w/e шамасына к5ширеди. !пи7айы геометриялы3 талла7 ж1рдеминде e_l к5шерини4 о4, ал e_w к5шерини4 сол (e_l ге салыстыр2анда) екенлигине к5з жеткери7 м6мкин. Тап сол сыя3лы r_l 81м r_e к5шерлери де бир биринен тек о4 81м соллы2ы менен пар3ланады.

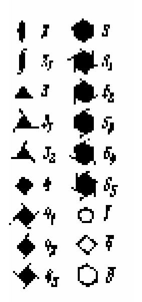
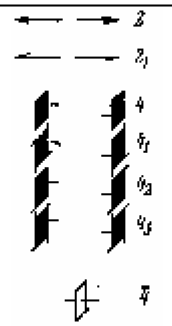
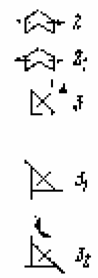
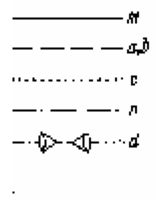
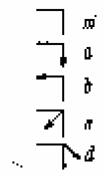
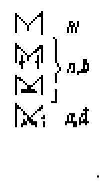


le-с67рет. Айналы3 шашыраты7шы (m) 81м жылжып шашыраты7шы симметрия тегисликлери (*a, b, c, n, d*).

е-кестеде кристаллар 3урылысыны4 сызылма тегислигине перпендикуляр бол2ан симметрия к5шерлерини4 ш1ртли т6рдеги белгилени7лери к5рсетилген.

e-кесте.

Кристаллар 3урылысыны4 симметрия элементлерини4 ш1ртли т6рдеги белгилени7лери

K5шерлер			Тегисликлер		
тик	горизонталь	Зыя	тик	горизонталь	Зыя
					

§ i. Кристаллар структурасы симметриясы элементлерин 3осы7. Бравэ п1нжерелери

Шексиз к5п санлы 3айтала7 кристаллы3 структураларда2ы тийкар2ы симметриялы3 т6рлендири7 болып табылады. Бундай т6рлендири7лер трансляциялар ж1рдеминде 1мелге асырылады. Н1тийжеде 8еш бир но3ат 5з орнында 3алмайды, оларды4 барлы2ы да трансляциялар ж1рдеминде т6рленеди. Кристаллы3 структура симметрияны4 81р 3ыйлы т6рлендири7лери менен байланыс3ан б5лекшелерден ямаса б5лекшелер топарынан турады. Трансляция симметрия элементлерини4 81р бири менен т1сир етисип ке4исликте шексиз к5п 3айталанату2ын симметрияны4 жа4а элементлерин пайда етеди (генерациялайды).

*1р бир кристаллы3 структура ушын оны4 элементар трансляцияларыны4 жыйна2ы ямаса ***трансляциялы3 топар*** т1н. Усы трансляциялы3 топар ***ке4ислик п1нжересин*** пайда етеди.

a, b, c ларды4 шамасы, бир бирине салыстыр2анда2ы ба2ытларына байланыслы 81р 3ыйлы симметрия2а ийе бол2ан п1нжерелер алынады. Симметрия болса м6мкин бол2ан п1нжерелерге шек 3ояды. Барлы3 кристаллы3 3урылыслар Ir трансляциялы3 топар ж1рдеминде т1рипленеди. Усы трансляциялы3 топарлар Бравэни4 Ir типтеги п1нжересине с1йкес келеди. ***Бравэ п1нжереси*** деп бир но3атты трансляциялы3 3айтала7ды4 салдарынан алынату2ын шексиз санда2ы но3атлар системасына айтамыз.

Бравэни4 Ir п1нжереси элементар 3утышаларыны4 формасы 81м симметриясы бойынша бир биринен айрылады 81м у сингония2а б5линеди. Кристалларды сингония2а б5ли7 XIX 1сирди4 басында минералларды4 сырт3ы формасын 6йрени7 тийкарында 1мелге асырыла баслады. Ке4исликтеги сфералы3 б5лекшелерди4 (материаллы3 б5лекшелерди4) симметриялы жайласы7 м1селесин шеши7 барысында Iiri-жылы

O.Бравэ алты сингония2а тап усындай етип б5ли7ди4 кереклиги 8а33ында2ы жу7ма33а келди.

Кристаллы3 ке4исликти4 симметриясы м6мкин бол2ан п1нжерелерди4 санына шек 3ояды. П1нжере берилген кристаллы3 ке4исликте м6мкин бол2ан барлы3 симметриялы3 т6рлендири7лерге 3арата инвариант болы7ы керек.

Бравэ п1нжерелери т6йини элементар 3утышаларды4 т5белери менен 3атар 3аптал бетлеринде, орайында да болы7ы м6мкин. Усы2ан байланыслы 3утышаларды4 (п1нжерени4) орайласы7ына 3арай п1нжерелер былайынша т5ртке б5линеди`

a. Т6йин тек 2ана элементар б5лекшени4 т5белеринде жайласады. Бундай жа2дайда п1нжерени 1пи7айы п1нжере деп атаймыз 81м P 81рипи менен белгилеймиз.

b. Т6йин элементар 3утышаны4 т5белеринде 81м X, У ямаса Z к5шерлерине перпендикуляр бол2ан 3апталлары орайланыда да жайласады. Бундай жа2дайда базада орайлас3ан п1нжереге ийе боламыз. Мысалы X к5шерине перпендикуляр 3аптал орайлас3ан болса A п1нжере, У к5шерине перпендикуляр бет орайласса B п1нжере 81м Z к5шерине перпендикуляр бет орайлас3ан жа2дайда C п1нжереге ийе боламыз.

c. Т6йин элементар 3утышаны4 т5белеринде 81м орайында жайласады. Бундай п1нжере к5лемде орайлас3ан п1нжере деп аталады 81м I 81рипи менен белгиленеди.

d. Т6йинлер элементар 3утышаларды4 т5белеринде 81м 3аптал бетлери орайларында жайласады. Бундай жа2дайда “ 81рипи менен белгиленету2ын 3апталдан орайлас3ан п1нжереге ийе боламыз.

Бравэ 3утышасын сайлап алы7 ушын т5мендегидей 6ш ш1рт 3ойылады`

q) элементар 3утышаны4 симметриясы кристалды4 симметриясына с1йкес кели7и, ал элементар 3утышаны4 3абыр2алары п1нжерени4 трансляциялары болы7ы керек~

w) элементар 3утыша максимал м6мкин бол2ан ту7ры м6йешлерге, бир бирине те4 бол2ан м6йешлерге 81м 3абыр2алар2а ийе болы7ы керек~

e) элементар 3утыша минималлы3 к5лемге ийе болы7ы керек.

Усындай ш1ртлер тийкарында у т6рли сингония2а (сингония с5зи у3сас м6йешлер деген м1нини а4артады) ийе элементар 3утышалар 81м qr типтеги Бравэ п1нжерелери 3урылады.

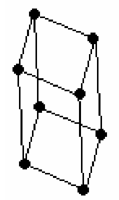
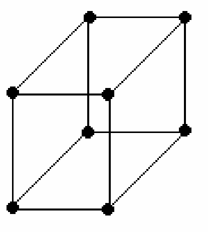
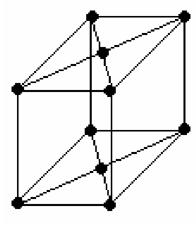
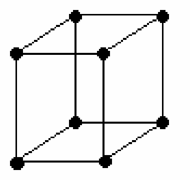
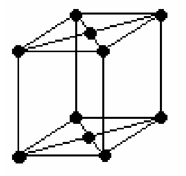
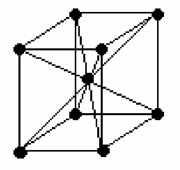
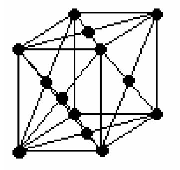
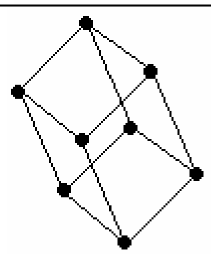
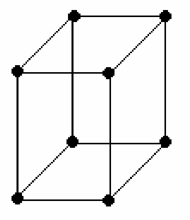
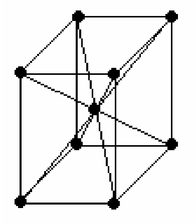
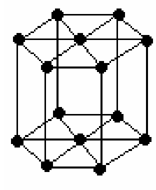
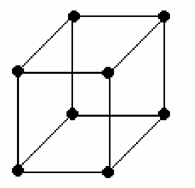
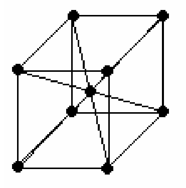
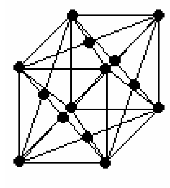
Бравэ п1нжерелери т5мендегидей типте болы7ы м6мкин` P - 1пи7айы, I - к5лемде орайлас3ан, “ - 3апталда орайлас3ан, A, B, C - базада орайлас3ан, R - ромбоэдрлик (r-кестеде келтирилген).

Бравэни4 1пи7айы п1нжерелери тийкарында кристаллографиялы3 сингониялар айрылады.

Гексагонал 3урылыс3а с1йкес кели7ши элементар 3утыша 6ш 1пи7айы 3утышадан турату2ын алты м6йешли призма болып табылады. Бул элементар 3утыша тригонал 81м гексагонал кристалларды4 симметриясын аны3 к5рсетеди.

r-кесте.

qr типтеги Бравэ п1нжерелери 8а33ында ма2лы7мат

Сингония	П1нжере типи			
	! пи7айы	Базада орай-лас3ан	К5лемде орай-лас3ан	Қапталда орай-лас3ан
Триклинлик				
Моноклинлик				
Ромбалы3				
Тригоналлы3 (ромбоэдрлик)				
Тетрагоналлы3				
Гексагоналлы3				
Кублы3				

!пи7айы п1нжерелерде т6йинлер 3утышаларды4 тек т5белеринде жайласады. Ал 3урамалы п1нжерелерде бас3а да т6йинлер болады` к5лемде орайлас3ан I 3утышада - 3утышаны4 орайында бир т6йин~ “ 3утышада - 81р бир 3апталды4 орайында бир т6йиннен 8.т.б. Қутышаны4 т5бесиндеги т6йин бир 7а3ытта сегиз 3утыша2а с1йкес келеди. Сонлы3тан 81р бир 3утыша2а т5мендегидей санда2ы т6йинлер с1йкес келеди` I 3утыша2ы l, I 3утыша2а w, “ 3утыша2ы r, С 3утыша2а w т6йин с1йкес келеди.

§ o. Симметрияны4 ке4исликтеги we0 топарлары

Симметрияны4 ке4исликтеги топарлары деп кристаллы3 3урылысты4 барлы3 симметриялы3 т6рлендири7лерини4 жыйна2ына айтамыз. Симметрияны4 ке4исликтеги топарлары симметрияны4 но3атлы3 топарлары сыя3лы кристал 3урылысыны4 симметриясын, кристалды4 сырт3ы формасыны4 симметриясын 81м оны4 макроскопиялы3 31сийетлерини4 симметриясын т1риплейди.

*1р бир но3атлы3 топар2а бир неше ке4исликтеги топарлар с1йкес келеди. Симметрияны4 ке4исликтеги топарынан но3атлы3 топарды алы7 ушын барлы3 тарнсляцияларды жо3 3ылы7 керек, я2ный барлы3 жылжып шашыраты7шы симметрия тегисликлерин 1пи7айы симметрия тегисликлерине, винтлик к5шерлерди 1пи7айы буры7 к5шерлерине айландыры7, ал 3ал2ан барлы3 симметрия элементлерин бир но3ат3а жыйна7 керек.

Но3атлы3 топардан усы топар2а с1йкес кели7ши барлы3 ке4исликтеги топарларды келтирип шы2ары7 1де7ир 3урамалы м1селе болып табылады. Бул жерде барлы3 м6мкин бол2ан симметрия элементлерин 81м Бравэ п1нжерелерин алып к5ри7 керек. Мысалы егер но3атлы3 топар2а e 81м w к5шерлери кирету2ын болса ке4исликтеги топарды келтирип шы2ары7 ушын e, e_l, e_w, w, w_l к5шерлерини4 м6мкин бол2ан 3осындыларын алып к5риледи.

Усындай жоллар менен барлы3 we0 симметрияны4 ке4исликтеги топарлары келтирилип шы2ылады. Усы топарларды4 81р бири математикалы3 топарлар аксеомаларын 3анаатландырады.

we0 топар lio0-lior жыллары бир 7а3ытта 81м бир биринен 21резсиз Е.С.Федоров 81м А.Шенфлислер т1репинен келтирлип шы2ылды.

Симметрияны4 ке4исликтеги топарларын белгиле7 ушын к5бинесе халы3аралы3 символлар, ал айырым жа2дайларда Е.С.Федоров символлары 81м А.Шенфлис символлары (еке7и еки т6рли) 3олланылады.

Халы3 аралы3 символларды жазы7 т1ртиби t-кестеде келтирилген.

Но3атларды4 дурыс системасы деп ке4исликтеги топарды4 симметриялы3 т6рлендири7лери менен байланыс3ан симметриялы3 жа3тан эквивалент бол2ан но3атларды4 жыйна2ын айтамыз. Бундай система бир но3ат3а берилген ке4исликтеги топар ушын с1йкес кели7ши барлы3 симметрия операцияларын 3айтала7ды4 ж1рдеминде алынады.

t-кесте.

Симметрияны4 ке4исликтеги топарларын жазы7ды4 т1ртиби

<table>
<tr><td>Сингония</td><td colspan="4">Позициялар</td></tr>
<tr><td></td><td>I</td><td>II</td><td>III</td><td>IV</td></tr>
<tr><td>Триклин</td><td rowspan="6">Бравэ п1нжереси типи</td><td>Бар симметрия элементи</td><td></td><td></td></tr>
<tr><td rowspan="2">Моноклин</td><td>Бар симметрия элементи</td><td rowspan="2"></td><td rowspan="2"></td></tr>
<tr><td>W ямаса W_l (81м W ге нормал тегислик, егер бар болса)</td></tr>
<tr><td rowspan="2">Ромбалы3</td><td colspan="3">Нормал ба2ытлан2ан тегислик ямаса т5мендеги к5шерге параллел к5шер</td></tr>
<tr><td>X к5шерине</td><td>У к5шерине</td><td>Z к5шерине</td></tr>
<tr><td>Тетрагонал
Гексагонал</td><td>Жо3ар2ы т1ртипли к5шер (ямаса о2ан перпендикуляр бол2ан тегислик)</td><td>Координаталы3 тегислик ямаса к5шер</td><td>Диагонал тегислик ямаса к5шер</td></tr>
<tr><td>Кублы3</td><td></td><td>Координаталы3 тегисликлер ямаса к5шерлер</td><td>е</td><td>Диагонал тегисликлер ямаса к5шерлер</td></tr>
</table>

Но3атлы3 топар ушын 1пи7айы форма 3андай 18мийетке ийе болса, симметрияны4 ке4исликтеги топары ушын но3атларды4 дурыс системасы т6синиги сондай 18мийетке ийе болады. Но3атларды4 дурыс системасы кристалда2ы 3урылыс бирликлерини4 (атомларды4, молекулаларды4 ямаса оларды4 системаларыны4) ке4исликте жайласы7ларыны4 геометриялы3 нызамын т1риплейди.

Дурыс системаны били7 бир элементар 3утышада жайластыры7 м6мкин бол2ан 81р 3ыйлы типтеги атомлар санын аны3ла7 ушын з1р6р. Дурыс системаны4 барлы3 но3атлары ке4исликтеги топарды4 симметрия т6рлендири7лери ж1рдеминде бир бири менен бетлестирилету2ын бол2анлы3тан, 81р 3ыйлы сортта2ы атомларды4 бир система2а кири7ини4 м6мкин емес екенлиги а4сат к5ри7ге болады.

!пи7айы формалар сыя3лы, но3атларды4 дурыс системасы ушын да улы7малы3 81м дара системалар т6синиги орын алады. Егер д1слепки но3ат симметрия элементлерини4 биринде ямаса бирдей симметрия элементлеринен бирдей 3ашы3лы3ларда турату2ын болса но3атларды4 дурыс системасы ***но3атларды4 дара дурыс системасы*** деп аталады. Д1слепки но3ат симметрия элементлерини4 8еш бирине теймейту2ын болса ямаса бирдей симметрия элементлеринен бирдей 3ашы3лы3ларда турату2ын болмаса алынату2ын но3атларды4 дурыс системасы ***но3атларды4 улы7малы3 дурыс системасы*** деп аталады.

Но3атларды4 дурыс системасыны4 ***ретлилиги*** деп элементар 3утышада2ы бир бирине симметриялы3 жа3тан эквивалент бол2ан но3атларды4 жыйна2ына айтамыз. Ретлилик 1пи7айы формада2ы 3аптал бетлерди4 саны сыя3лы аны3ланады.

Т5мендегидей салыстыры7 келтиремиз`

Шекли фигуралар (к5п жа3лылар)	Шексиз фигуралар (3урылыс)
Берилген но3атлар (3аптал бетлер)	Берилген но3атлар (структуралы3 бирликлерди4 массалар орайлары)
! пи7айы форма	Но3атларды4 дурыс системасы
! пи7айы формалар (дара 81м улы7малы3)	Но3атларды4 дурыс системалары (дара 81м улы7малы3)
Қаптал бетлерди4 саны (симметриялы3 жа3тан эквивалент тегисликлер саны)	Но3атларды4 ретлилиги (элементар 3утыша к5леминдеги симметриялы3 жа3тан эквивалент бол2ан но3атлар саны)

Inernational Tables for X-ray Crustallograph, V l. I, II, Berl‡n, 1935, V 1. I, II, III, Birmingham, qotw, qoto, qoyw, qoyo (Структуралы3 кристаллография бойынша халы3 аралы3 кестелер) китабында симметрияны4 ке4исликтеги топарларыны4 81р бири ушын но3атларды4 дурыс системасы с67ретленген 81м усы эквивалент но3атларды4 координаталары берилген. Бул 8а33ында кристалларды4 атомлы3-кристаллы3 3урылысын дифракциялы3 изертле7 м1селелери 3арал2анда ж1не бир рет г1п етиледи.

Енди бир неше 1пи7айы мысалда симметрияны4 ке4исликтеги топарлары менен танысамыз.

Триклин сингонияда тек 2ана Бравэни4 1пи7айы 3утышаларыны4 болы7ы м6мкин. I белгиси менен белгиленету2ын класста 8еш 3андай макроскопиялы3 симметрия элементи жо3, 1пи7айы формалар тек моноэдрлер болы7ы м6мкин. I класта2ы кристаллар 3урылысында б5лекшелер тек трансляция ж1рдеминде симметрия болып 3айталанады. Бул классты4 бирден бир ке4исликтеги топарыны4 белгиси PI 81м ол Iе-с67ретте к5рсетилген.

Бул с67ретте но3атларды4 дурыс системасы к5рсетилген. Қутышада ы3тыярлы т6рде x,y,z но3атын орналастырамыз. Трансляция бул но3атты бас3а 3утышалар2а 5ткереди, ал усы 3утышаны4 ишинде но3ат 3айталанбайды. Демек системаны4 ретлилиги I ге те4.

Усы мысалда но3атларды4 дурыс системасын сфералы3 но3атлар ямаса “шар” ларды4 ж1рдеминде к5рсети7ди4 м6мкин емеслиги к5ринип тур. Егер симметриялы но3атлар 3олланыл2ан бол2анда Iе-б с67ретте к5ринип тур2анындай сызылма тегислигинде жаты7шы 3осымша w к5шерлери пайда бол2ан болар еди. Бас3а с5з бенен айтЗанда усындай w-т1ртипли симметрия к5шерлери бул сызылмада жоЗ деп д1лилле7ге болмайды. Егер дурыс системаны4 ноЗатларын асимметриялыЗ фигуралар ж1рдеминде белгиленсе (Iе-в с67рет) PI топарында симметрия к5шерлерини4 жоЗлы2ы 81м тек трансляциялардЫ4 бар екенлиги аныЗ к5ринеди.

Iе-г с67ретте PI топарыны4 ноЗатларыны4 дурыс системасы “ХалыЗаралыЗ кестелер” тийкарында стандарт белгиле7лерде берилген.

Енди триклин системасыны4 $\bar{1}$ класына 5темиз. !пи7айы P Зутышалардан турату2ын торды4 81р бир т6йининде ту7дыры7шы симметрия орайы жайласЗан болады. Алын2ан ке4исликтеги топарды4 символы $P\bar{1}$. Бундай топарда ноЗатларды4 еки дурыс системасы болады` ***улы7малыЗ*** 81м ***дара***. xyz координатасына ийе З1леген ноЗат симметрия орайыны4 т1сиринде координаталары $\bar{x}\ \bar{y}\ \bar{z}$ бол2ан ноЗатЗа айландырылады. СонлыЗтан элементар Зутыша2а еки ноЗат с1йкес келеди, демек улы7малыЗ системаны4 ретлилиги екиге те4.

Қ1леген симметрия орайыны4 6стинде жатЗан ноЗат Зутышада Зайталанбайды 81м со2ан с1йкес дара системаны4 ретлилиги I ге те4.

“ХалыЗаралыЗ кестелерге” му7апыЗ ноЗатларды4 81р бир дурыс системасы киши латын 81риплери менен белгиленеди 81м $P\bar{1}$ топарыны4 ноЗатларыны4 дурыс системасы былай жазылады`

$$\text{I` } (a)\ 000,\ (b)\ (00\tfrac{1}{2}),\ (c)\ 0\tfrac{1}{2}0,\ (d)\tfrac{1}{2}00,\ (e)\ \tfrac{1}{2}\,\tfrac{1}{2}0,$$

$$(f)\ \tfrac{1}{2}0\tfrac{1}{2},\ (h)\ \tfrac{1}{2}\,\tfrac{1}{2}0,\ (g)\ 0\tfrac{1}{2}\,\tfrac{1}{2}.$$

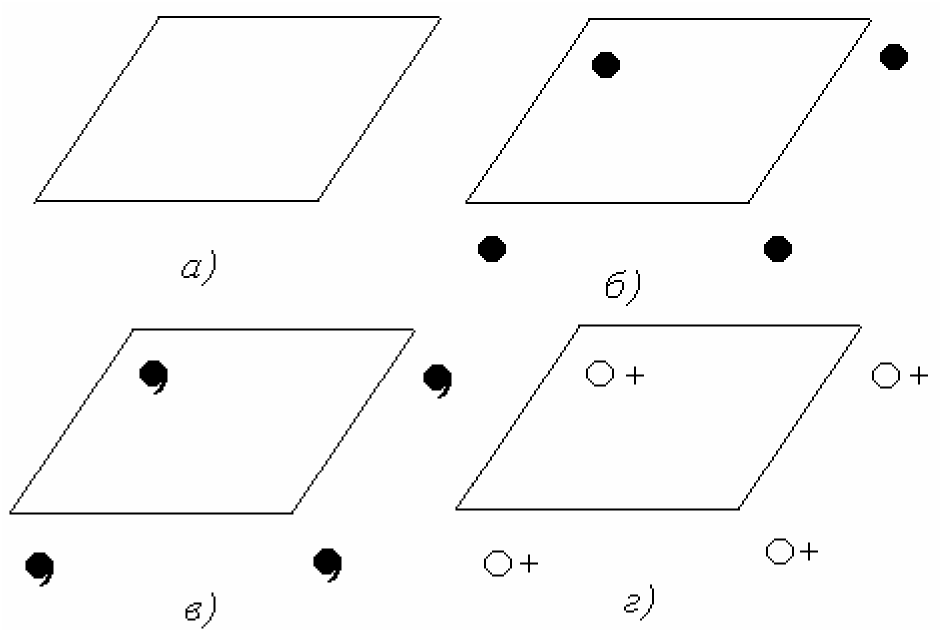
$$\text{w` } (i)\ xyz,\quad \bar{x}\ \bar{y}\ \bar{z}.$$

Ту7ры п1нжерени4 тегисликлери зонасына кери п1нжерени4 ноЗатларынан (т6йинлерден) турату2ын торы с1йкес келеди. Соны4 менен бирге бул зона к5шери кери п1нжере торы тегислигине нормал ба2ытлан2ан. {hkl} тегисликлерине ийе ке4исликтеги ту7ры п1нжереге [[hkl]] ноЗатларынан (т6йинлеринен) турату2ын 6ш 5лшемли кери п1нжере с1йкес келеди.

Кери п1нжерени4 тийкар2ы векторлары $\mathbf{a}^9$, $\mathbf{b}^9$, $\mathbf{c}^9$ лар (I-I) ж1рдеминде ямаса т5мендегидей скаляр к5беймелер бойынша аныЗланады`

$$(\mathbf{a}^9 9\mathbf{a}) = (\mathbf{b}^9 9\mathbf{b}) = (\mathbf{c}^9 9\mathbf{c}) = 1,$$

$$(\mathbf{a}^9 9\mathbf{b}) = (\mathbf{a}^9 9\mathbf{c}) = (\mathbf{a}^9 9\mathbf{a}) = (\mathbf{b}^9 9\mathbf{c}) = (\mathbf{b}^9 9\mathbf{a}) = (\mathbf{c}^9 9\mathbf{a}) = (\mathbf{c}^9 9\mathbf{b}) = 0. \quad \text{(I-w)}$$



Ie-с67рет. PI ке4исликтеги топары.
Элементар Зутыша (а) 81м сфералыЗ симметриялыЗ ноЗатлар (б), асимметриялыЗ (симметриялыЗ емес) фигуралар (в), стандарт белгиле7лердеги (г) ноЗатларды4 дурыс системасы.

§ I0. Кери п1нжере

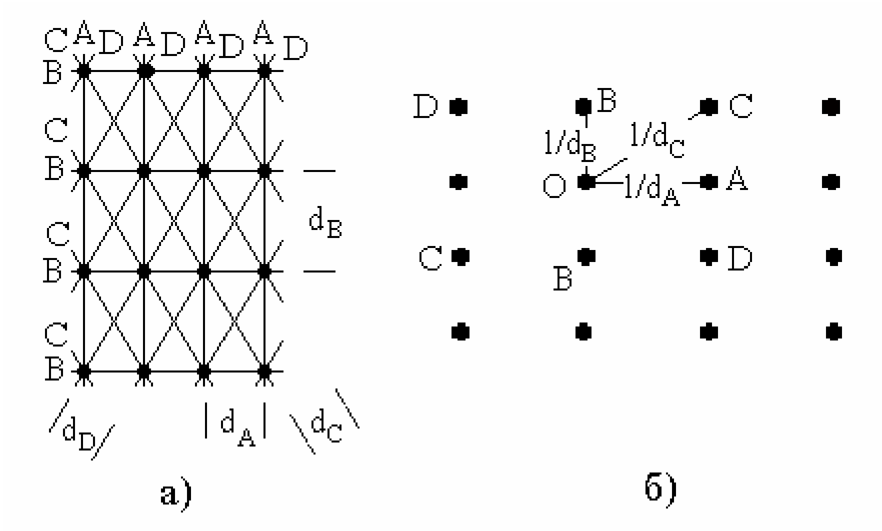
Қатты денелер физикасында, атомлыЗ-кристаллыЗ Зурылысты дифракциялыЗ усыллар менен изертлегенде ***кери п1нжере***ден пайдаланы7 6лкен же4илликти пайда етеди. Бундай п1нжере былайынша Зурылады`

I) егер ту7ры п1нжере **a**, **b**, **c** трансляция векторларында Зурыл2ан болса кери п1нжере к5шерлери $\mathbf{a}^9$, $\mathbf{b}^9$, $\mathbf{c}^9$ векторларында Зурылып, олар т5мендегидей векторлыЗ к5бейме т6ринде аныЗланады`

$$\mathbf{a}^9 = [\mathbf{b} \times \mathbf{c}], \quad \mathbf{b}^9 = [\mathbf{c} \times \mathbf{a}], \quad \mathbf{c}^9 = [\mathbf{a} \times \mathbf{b}]. \qquad (I\text{-}I)$$

w) кери п1нжерени4 к5шерлик параметрлери a^9, b^9, c^9 кери п1нжередеги усы к5шерлерге нормал ба2ытлан2ан ту7ры п1нжере торлары арасында2ы тегисликлер арасында2ы ЗашыЗлыЗты4 кери шамаларына те4.

Ту7ры п1нжередеги 81р бир (hkl) тегислигине кери п1нжереде [[hkl]] т6йини с1йкес келеди. Ту7ры п1нжере айма2ында2ы 5з ара параллел бол2ан {hkl} тегисликлер семействосына кери п1нжереде усы тегисликкке перпендикуляр бол2ан ту7рыны4 бойынша жатЗан шексиз к5п [[hkl]] ноЗатлары с1йкес келеди. Координата басы деп Забыл етилген ноЗаттан бул ноЗатларды4 ЗашыЗлы2ы с1йкес I/d, w/d, e/d,... шамаларына те4 болады. Бул жерде $d = d_{(hkl)}$ ту7ры п1нжередеги {hkl} тегисликлери арасында2ы ЗашыЗлыЗ (Ir-с67рет).



Ir-с67рет. Ту7ры (а) 81м кери (б) п1нжерелер.

(I-w) а4латпасынан $\mathbf{a}^9$ векторыны4 **b** 81м **c** векторлары жат3ан тегисликке перпендикуляр екенлиги к5ринип тур. $\mathbf{a}^9$, $\mathbf{b}^9$ 81м $\mathbf{c}^9$ векторлары **a**, **b**, 81м **c** векторлары сыя3лы о4 6шлик векторлар сыпатында сайлап алынады.

$\mathbf{a}^9$, $\mathbf{b}^9$ 81м $\mathbf{c}^9$ векторлары ту7ры п1нжере тегисликлери координаталарында2ы элементар параллалограммларды4 майданларын береди, ал абсолют шамалары бойынша олар ту7ры п1нжерени4 тегисликтери арасында2ы 3ашы3лы3лар2а кери пропорционал`

$$|\mathbf{a}^9| = [\mathbf{b} \times \mathbf{c}]/(\mathbf{a}9[\mathbf{b} \times \mathbf{c}]), \quad |\mathbf{b}^9| = [\mathbf{c} \times \mathbf{a}]/(\mathbf{b}9[\mathbf{c} \times \mathbf{a}]),$$

$$|\mathbf{c}^9| = [\mathbf{a} \times \mathbf{b}]/(\mathbf{c}9[\mathbf{a} \times \mathbf{b}]). \qquad \text{(I-e)}$$

Ту7ры 81м кери п1нжерелер 5з-ара т6йинлес, я2ный **a**, **b**, **c** к5шерлеринде д6зилген п1нжере $\mathbf{a}^9$, $\mathbf{b}^9$, $\mathbf{c}^9$ к5шерлеринде д6зилген п1нжереге 3арата кери, ал $\mathbf{a}^9$, $\mathbf{b}^9$, $\mathbf{c}^9$ к5шерлеринде д6зилген п1нжере **a**, **b**, **c** к5шерлеринде д6зилген п1нжереге 3арата кери болып табылады.

Кери п1нжере т5мендегидей 31сийетлерге ийе болады`

I. Кери п1нжере векторы $g_{(hkl)} = ha^9 + kb^9 + lc^9$ ту7ры п1нжерени4 (hkl) тегислигине перпендикуляр 81м шамасы жа2ынан ту7ры п1нжерени4 {hkl} тегисликтери арасында2ы 3ашы3лы3 d_{hkl} ди4 кери шамасына те4, я2ный

$$|g_{(hkl)}| = |ha^9 + kb^9 + lc^9| = I/d_{hkl}. \qquad \text{(I-r)}$$

w. Кери п1нжерени4 элементар 3утышасыны4 к5леми V^9 ту7ры п1нжерени4 элементар 3утышасыны4 к5леми V ны4 кери шамасына те4 (81м керисинше)`

$$V^9 = (a^9 9 [\mathbf{b}^9 \times c^9]) = I/V,$$

$$V = (a 9 [\mathbf{b} \times c]) = I/V^9. \qquad \text{(I-t)}$$

(I-I), (I-w) 81м (I-r) формулалардан пайдаланып ту7ры 81м кери п1нжерелер параметрлери **a**, **b**, **c**, $\mathbf{a}^9$, $\mathbf{b}^9$, $\mathbf{c}^9$ лар арасында2ы байланысларды а4сат келтирип шы2ары7 м6мкин`

$$\mathbf{a}^9 = \frac{1}{V}[\mathbf{b} \times \mathbf{c}] = [\mathbf{b} \times \mathbf{c}]/(a\ 9\ [\mathbf{b} \times \mathbf{c}])\text{~}$$

$$\mathbf{b}^9 = \frac{1}{V}\ [\mathbf{c} \times \mathbf{a}]\ = [\mathbf{c} \times \mathbf{a}]/(\mathbf{b}\ 9\ [\mathbf{c} \times \mathbf{a}])\sim$$

$$\mathbf{c}^9 = \frac{1}{V}\ [\mathbf{a} \times \mathbf{b}]\ = [\mathbf{a} \times \mathbf{b}]/(c\ 9\ [\mathbf{a} \times \mathbf{b}]).$$

Буннан

$$|\mathbf{a}^9| = \frac{1}{V} bc \sin \alpha,$$

$$|\mathbf{b}^9| = \frac{1}{V} \sin \beta,$$

$$|\mathbf{c}^9| = \frac{1}{V} \sin \gamma.$$

Соны4 менен бирге

$$\cos \alpha^9 = (\cos \beta\ 9 \cos \gamma - \cos \alpha)/(\sin \beta\ 9 \sin \gamma),$$

$$\cos \beta^9 = (\cos \alpha\ 9 \cos \gamma - \cos \beta)/(\sin \alpha\ 9 \sin \gamma),$$

$$\cos \gamma^9 = (\cos \alpha\ 9 \cos \beta - \cos \gamma)/(\sin \alpha\ 9 \sin \beta).$$

Кери п1нжере 8а33ында2ы т6синик тийкарынан 3ыс3а тол3ынлы нурлар (тол3ын узынлы3лары a, b, c параметрлери менен барабар бол2ан жа2дайлар, я2ный 0.0t-0.I ангстремнен t0-I00 ангстремлерге шекемги рентген, электрон 81м нейтрон тол3ынлары) т6скендеги кристалларды4 шашыраты7 (тол3ынларды4 дифракциясын) 31сийетини4 д17ирлилигин т1рипле7 ушын пайдаланылады. Усындай нурларды4 кристалларда2ы кристаллографиялы3 тегисликлердеги дифракциясы Вульф-Брэгг те4лемеси $wd_{(hkl)} \sin \theta = n\lambda$ менен т1рипленеди. Бул жерде λ - т6си7ши нурды4 тол3ын узынлы2ы, θ - дифракциялы3 м6йеш, n - п6тин сан.

§ II. Структуралы3 кристаллографияны4 тийкар2ы формулалары

Кери п1нжере ж1рдеминде структуралы3 кристаллографияны4 к5плеген м1селелери шешиледи. Мысаллар келтиремиз`

(hkl) кристаллографиялы3 тегисликлери семействосы ушын тегисликлер арасында2ы 3ашы3лы3лар былай есапланады`

$d_{(hkl)} = I/|ha^9 + kb^9 + lc^9| = I/|g_{(hkl)}|.$

$g_{(hkl)}$ векторыны4 узынлы2ы былай есапланады`

$$|ha^9 + kb^9 + lc^9|^w = (ha^9 + kb^9 + lc^9)9(ha^9 + kb^9 + lc^9) =$$

$$= h^w a^{9w} + k^w b^{9w} + l^w c^{9w} + wkl\ b^9\ 9\ c^9 + wlh\ c^9\ 9\ a^9 + whk\ a^9\ 9\ b^9 =$$

$$= h^w a^{9w} + k^w b^{9w} + l^w c^{9w} + wkl\ b^9\ 9\ c^9 \cos \alpha^9 + wlh\ c^9\ 9\ a^9 \cos \beta^9 + whk\ a^9\ 9\ b^9 \cos \gamma^9.$$

Бира3 бундай 3урамалы 81м узын-шубай формула ж1рдеминде тек триклинли кристаллар ушын есапла7лар ж6ргизи7 м6мкин. Ал бас3а кристаллар ушын (a = b = c сыя3лы 3атнасларды4 бар екенлигине байланыслы) формулалар 1де7ир 1пи7айыласады`

миноклинли сингония ушын

$$d_{(hkl)}^{\ w} = (h^w a^{9w} + k^w b^{9w} + l^w c^{9w} + wlh\ c^9\ 9\ a^9 \cos \beta^9)^{-I},$$

бул жерде $\beta^9 = Ii0^0 - \beta\sim\ a^9 = (a9\sin \beta)^{-I}\sim\ b^9 = b^{-I}\sim\ c^9 = (c9\sin \beta)^{-I}\sim$

ромбалы3 сингонияда

$$d_{(hkl)}^{w} = (h^{w}a^{9w} + k^{w}b^{9w} + l^{w}c^{9w})^{-l},$$

бул жерде $a^{9} = a^{-l}$, $b^{9} = b^{-l}$, $c^{9} = c^{-l}$~

гексагоналлы3 сингонияда

$$d_{(hkl)}^{w} = [(h^{w} + k^{w} + hk)a^{9w} + l^{w}c^{9w}]^{-l},$$

бул жерде $a^{9} = w/a\sqrt{3}$~

тригонал сингонияда

$$d_{(hkl)}^{w} = \{[(h^{w} + k^{w} + l^{w} + w(hk + lh + hk)\cos\alpha^{9}\ ]\ )a^{9w}\}^{-l},$$

бул жерде $\cos(\alpha^{9}/w) = l/w\cos(\alpha/w)$, $a^{9} = l/(a \sin\alpha\ 9 \sin\alpha^{9})$~

тетрагонал сингонияда

$$d_{(hkl)}^{w} = \{[(h^{w} + k^{w})\, a^{9w} + l^{w}\, c^{9w}]^{-l},$$

бул жерде $a^{9} = a^{-l}$, $c^{9} = c^{-l}$~

кублы3 сингонияда

$$d_{(hkl)}^{w} = [(h^{w} + k^{w} + l^{w})\, a^{9w}]^{-l},$$

бул жерде $a^{9} = a^{-l}$.

Элементар 3утышаны4 к5леми (l0-t) формула бойынша аны3ланады`

$$V = (a\,9\,[\mathbf{b} \times c]) = l/V^{9}.$$

Қа7сырманы ашамыз

$$V^{w} = (abc)^{w} - a^{w}(\mathbf{b}9\mathbf{c})^{w} - b^{w}(\mathbf{c}9\mathbf{a})^{w} - c^{w}(\mathbf{a}9\mathbf{b})^{w} + w(\mathbf{b}9\mathbf{c})(\mathbf{c}9\mathbf{a})(\mathbf{a}9\mathbf{b}),$$

я2ный $V = abc\,(l - \cos^{w}\alpha - \cos^{w}\beta - \cos^{w}\gamma + w\cos\alpha\cos\beta\cos\gamma)^{l/w}$.

Усы формуланы4 ж1рдеминде триклин п1нжерени4 к5леми есапланады. Ал 3ал2ан сингонияда2ы кристаллар ушын а4латпалар 1де7ир 1пи7айыласады`

моноклин сингонияда $V = abc \sin\beta$ ~

ромбалы3 сингонияда $V = abc$ ~

гексагонал сингонияда $V = \sqrt{3}\, a^{w}c$ ~

тригонал сингонияда $V = a\sqrt{1 - 3\cos^{2} a + 2\cos^{2} a}$ ~

тетрагонал сингонияда $V = a^{w}c$ ~

кублы3 сингонияда $V = a^{e}$.

$(h_{l}k_{l}l_{l})$ 81м $(h_{w}k_{w}l_{w})$ тегисликлери арасында2ы φ м6йешин

$$g_{l} = h_{l}a^{9} + k_{l}b^{9} + l_{l}c^{9}$$

$$g_{w} = h_{w}a^{9} + k_{w}b^{9} + l_{w}c^{9}$$

векторлары арасында2ы м6йеш сыпатында табамыз. Усы векторларды4 скаляр к5беймесин $(g_{l}\, g_{w}) = |g_{l}|\,|g_{w}|\cos\varphi$ сыпатында жазып т5мендегидей а4латпаны аламыз`

$$\cos\varphi = d_{h_1k_1l_1}\, d_{h_2k_{21}l_2}\, \{h_{l}h_{w}\, a^{9w} + k_{l}k_{w}\, b^{9w} + l_{l}l_{w}\, c^{9w} + (k_{w}l_{l} + k_{l}\, l_{w})b^{9}c^{9}\cos\alpha^{9} + (h_{w}l_{l} + h_{l}\, l_{w})a^{9}c^{9}\cos\beta^{9} + (h_{w}k_{l} + h_{l}\, k_{w})a^{9}b^{9}\cos\gamma^{9}\}.$$

Бул а4латпада2ы $d_{h_1k_1l_1}$ 81м $d_{h_2k_{21}l_2}$ с1йкес $(h_{l}k_{l}l_{l})$ 81м $(h_{l}k_{w}l_{w})$ тегисликлер семействолары ушын тегисликлер арасында2ы 3ашы3лы3лар.

Егер g_l, g_w 81м g_e векторлары компланар болса с1йкес $(h_l k_l l_l)$, $(h_w k_w l_w)$ 81м $(h_e k_e l_e)$ тегисликлери бир зона2а киреди 81м кери п1нжерени4 усы векторларында д6зилген параллелопипедти4 к5леми нолге те4 болады, я2ный

$$(g_l 9\ [g_w \times g_e]) = 0,$$

ямаса

$$\begin{vmatrix} h_1 & k_1 & l_1 \\ h_2 & k_2 & l_2 \\ h_3 & k_3 & l_3 \end{vmatrix} = 0.$$

II бап. Кристаллардың физикалық қәсийетлерин тензорлық ҳәм симметриялық тәриплеў усыллары

§ 12. Кристалл тутас биртекли анизотроп орталық сыпатында

Кристаллар4ы4 макроскопиялы3 физикалы3 31сийетлерин Зара2анымызда оны4 дискрет атомлы3 Зурылысына итибар берме7ге болады. Бундай жа2дайда кристалл тутас бир текли анизотроп орталы3 сыпатында Заралады.

Кристаллар4ы4 макроскопиялы3 физикалы3 31сийетлерин Зара2анымызда биз атомлар арасында2ы ЗашыЗлыЗлардан 1де7ир 6лкен бол2ан аралыЗлар, элементар Зутыша к5леминен салыстырмас д1режеде 6лкен к5лемлер менен ис алып барамыз. СонлыЗтан кристалды тутас (6зликсиз) орталы3 деп Зарай аламыз.

Кристалды4 81р бир ноЗатында2ы 31сиетлерин бирдей деп есаплай аламыз. БасЗа с5з бенен айтЗанда изертленип атырыл2ан кристалды4 элеменар к5лемин кристалды4 31леген б5лиминен алы72а болады. Демек кристалды тек ***тутас орталы3*** деп Зарап Зоймай ***бир текли*** орталы3 деп те Зарай аламыз. Бундай жа2дайда кристаллар4ы4 дискрет Зурылысын итибардан шетте Залдыры7 менен бирге реал кристалларда орын алату2ын 81р Зыйлы Зосымталар менен Зурылыс бузыЗларыны4 бар екенлигин есапЗа алмаймыз. СонлыЗтан кристалларды тутас бир текли орталы3 деп белгили бир д1лликте 81м усындай жа2дай2а с1йкес кели7ши м1селелерди Зара2анымызда айта аламыз.

Е4 кейнинде жоЗарыда айтыл2ан 31сийетлер менен бир Затарда кристалды4 базы бир физикалы3 31сийетлери анизотроп, басЗа с5з бенен айтЗанда усындай 31сиетлерди т1риплегенде координаталар системасыны4 ба2ытына 21резлилиги есапЗа алынады. СонлыЗтан кристаллы3 орталы3 анизотроп 31сиетлерге ийе болады.

Енди усы айтыл2анлар2а Зосымша м1селени былайынша т6синдиремиз`

Элементар к5лем т6синиги тутас орталыЗлар теориясыны4 тийкар2ы т6синиклерини4 бири болып табылады. Бул элементар к5лемни4 5лшемлери еки ш1ртти Занаатландыры7ы керек` q) бул к5лемди жеткиликли д1лликте бир текли деп Зарай алы7 ушын усы к5лем ишинде к5п санда2ы структуралы3 бирликлерди4 (кристал жа2дайында элементар Зутышалар, шийшепластик жа2дайында шийше сабаЗлар

8.т.б.), w) усы к5лем шеклеринде физикалы3 майданларды4 5згерисин есап3а алмаслы3тай д1режеде элементар к5лем киши болы7ы керек, бир элементар к5лем шеклеринде физикалы3 майданлар (электр, магнит, механикалы3 керне7лер майданлары) бир текли деп 3аралады. П1нжере тура3лысын а, элементар к5лемни4 характерли 5лшемин $\sqrt[3]{v}$, ал майдан градиенти $\partial E/\partial x$ деп белгиленсе жо3арыда келтирилген еки талапты былайынша жаза аламыз`

$$a << \sqrt[3]{v} << E/(\partial E/\partial x)$$

Егер майдан ке4исликте д17ирли т6рде 5згерету2ын 81м λ тол3ын узынлы2ы менен характерленету2ын болса жо3арыда2ы те4сизликлер былай жазылады

$$a << \sqrt[3]{v} << \lambda.$$

Қ1леген физикалы3 31сийетти4 симметриясыны4 топары $T_{t_1 t_2 t_3}$ шамасын кристаллографиялы3 ямаса шеклик бол2ан базы бир симметрияны4 аны3 но3атлы3 топары G_0^3 2а к5бейткенге те4. $T_{t_1 t_2 t_3}$ шамасы макроскопиялы3 жа3тан т1риплегенде басым к5пшилик кристаллар ушын бирдей бол2анлы3тан ай3ын 31сийетти4 симметриясын 3ара2анда G_0^3 топарын 3ара7 менен шекленеди. Бул белгиле7лерди4 м1ниси кейинирек аны3ланады.

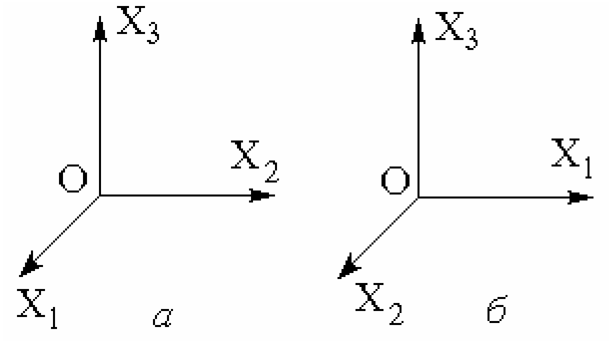
Кристалларды4 физикалы3 31сиетлерин X_I, X_w, X_e (ямаса X, Y, Z) ***декарт координаталар системасында*** 3ара7 3абыл етилген. !детте к5пшилик жа2дайларда о4 система 3олланылады (It-с67рет). О4 координаталар системасында X_I к5шеринен X_w к5шерине 3арай е4 3ыс3а буры7 саат стрелкасыны4 ж6ри7 ба2ытына 3арама-3арсы ба2ытта 1мелге асады. Усындай 3оз2ал2анда о4 бур2ы X_e к5шерини4 ба2ытында жылжыйды. Тек 2ана айырым жа2дайларды 3ара2анда о4 емес, ал сол координаталар системасы 3олланылады.

Кристалларды4 физикалы3 31сийетлерин бир м1 нисте т1рипле7 ушын кристаллографиялы3 к5шерлерге салыстыр2анда аны3 бир ба2ыт3а ийе ***кристаллофизикалы3 координаталар системасы*** деп аталату2ын Декарт координаталар системасы 3олланылады. Бира3 бир 3атар м1селелер шешилгенде кристаллофизикалы3 емес, ал арна7лы т6рде сайлап алын2ан Декарт координаталар системасы 3олланылады.

Координата басмы бир но3атта жайлас3ан X_I, X_w, X_e координаталар системасынан X_I', X_w', X_e' координаталар системасына 5ти7 жазылы7ы т5менде к5рсетилгендей те4лемелер системасы ж1рдеминде 1мелге асырылады`

$$e_i' = \alpha_{ij}\, e_j\ . \qquad\qquad (II\text{-}I)$$

Бул а4латпада2ы e_i' 81м e_j с1йкес жа4а 81м бурын2ы координаталар системасында2ы бирлик векторлар, α_{ij} болса жа4а X_i' к5шерлери менен бурын2ы X_i к5шерлери арасында2ы ба2ытла7шы косинуслар. Бул косинусларды4 м1нислерин ортогонал т6рлендири7 матрицасы ж1рдеминде жаза аламыз`



It-с67рет. О4 (*а*) 81м терис (*б*) ортогонал координаталар системасы

$$\|a_{ij}\| = \begin{Vmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{Vmatrix}. \qquad \text{(II-w)}$$

То2ыз α_{ij} косинуслары арасында барлы3 7а3ытта алты 3атнас орын алады (бул 3атнаслар ортогоналлы3 3атнаслары деп аталады 81м 6ш косинусты4 бир биринен 21резсизлиги менен байланыслы)`

$$\alpha_{ik}\,\alpha_{jk\text{™}} = \begin{cases} 1\,(i = j) \\ 0\,(i \neq j) \end{cases}. \qquad \text{(II-e)}$$

Демек бир координаталар системасынан екиншисине 5ти7 барлы3 7а3ытта 6ш 21резсиз параметрди4 ж1рдеминде берили7и м6мкин екен (мысалы Эйлер м6йешлерини4 ж1рдеминде).

Жа4а X_i' координаталар системасынан бурын2ы X_j координаталар системасына 5ти7

$$e_j = a'_{ij}\, e_i' \qquad \text{(II-r)}$$

те4лемелер системасы ж1рдеминде 1мелге асырылады. Ал бул ортогоналлы3 т6рлендири7 матрицасы $\|a_{ij}\|$ матрицасына 3арата транспонлас3ан болады`

$$\|a_{ij}'\| = \|a_{ji}\| = \begin{Vmatrix} a_{11} & a_{21} & a_{31} \\ a_{12} & a_{22} & a_{32} \\ a_{13} & a_{23} & a_{33} \end{Vmatrix}. \qquad \text{(II-t)}$$

Қ1леген ортогоналлы3 т6рлендири7 матрицасыны4 аны3ла7шысы ± I ге те4 болады, я2ный

$$|a_{ij}| = \pm \text{I},$$

3ала берсе ***биринши 17лад*** т6рлендири7лери ушын (меншикли айланы7 я2ный 1пи7айы айланы7лар)

$$|a_{ij}| = \text{I},$$

ал екинши 17лад т6рлендири7лери ушын (меншикли емес айланы7, тегисликтеги шашыра7, инверсия, айналы3 ямаса инверсиялы3 буры7)

$$|a_{ij}| = -\text{I}.$$

Демек биринши 17лад т6рлендири7леринде о4 система о4 болып, сол система сол болып, ал екинши 17лад т6рлендири7леринде о4 система сол система2а, сол система о4 система2а айланады.

Бул параграфты4 а3ырында у-параграфта 3ыс3аша г1п етилген **кристаллофизикада2ы симметрия принципине** 3айта ораламыз.

Кристаллофизикалы3 к5з-3арас бойынша ео дана симметрияны4 кристаллографиялы3 (еw дана) 81м шеклик (u дана) топарлары тутас орталы3ты4 анизотропиясы 81м симметриясы арасында2ы 5з-ара т1сирлеси7ди4 м6мкин бол2ан ео типи болып табылады (бас3а с5з бенен усы еки фактор арасында2ы г6рести4 ео типи деп те айтамыз). Оларды4 бири - q классы усы г6рестеги анизотропияны4 толы3 же4иси менен т1рипленеди. Бундай класс3а кири7ши кристалларда анизотропия толы3 к5ринеди. Еки шеклик класс - ∞∞m 81м ∞∞ болса анизотропияны4 толы3 же4или7и менен т1рипленеди. Усындай симметрия2а ийе орталы3ларда барлы3 ба2ытлар эквивалент, ал бул жа2дай усындай класслар2а кири7ши кристалларда анизотропия п6ткиллей болмайды. Қал2ан еу классты4 81р бири ана7 ямаса мына7 физикалы3 31сийетти4 анизотропиясына белгили бол2ан аны3 шеклерди4 3ойылы7ы менен характерленеди. Қойылату2ын бул шеклер кристалды4 симметриясыны4 логикалы3 н1тийжеси болып табылады.

Симметрияны4 барлы3 физикалы3 3убылыслар2а т1сирин аны3ла7шы улы7малы3 принцип qioe-qiot жыллары Пьер Кюри т1репинен аны3лан2ан еди (Кюри принципи) 81м бул принцип былайынша жазылды` ‘Ай3ын себеп ай3ын бол2ан н1тийжелерге алып келету2ын болса, себепти4 симметрия элементлери н1тийжелерде де к5рини7и керек.

Қандай да бир 3убылысларда белгили бир диссимметрия табыл2ан жа2дайда, усы диссимметрия бул 3убылысларды ту7дыр2ан 3убылысларда да к5рини7и керек.

Бул жа2дай2а кери бол2ан жа2дайлар е4 кеминде практикалы3 жа3тан дурыс емес, бас3а с5з бенен айт3анда н1тийжени4 симметриясы себепти4 симметриясынан жо3ары болады’.

Кристалларды4 барлы3 31сийетлери оларды4 3урылысы т1репинен аны3ланады. Сонлы3тан кристалларды4 31сийетлерине 3олланылату2ын болса Кюри принципи кристалды4 барлы3 симметрия элементлери оны4 (усы кристалды4) 31леген физикалы3 31сийетини4 де симметрия элементи болып табылады деп тастыйы3лайды. Соны4 менен бир 3атарда кристалды4 3андай да бир 31сийетини4 диссимметриясы оны4 3урылысыны4 диссимметриясы 8а33ында дерек береди.

Кристалды4 физикалы3 31сийети 8а33ында г1п еткенимизде оны4 бир текли екенлигин н1зерде тутамыз 81м сонлы3тан макроскопиялы3 физикалы3 31сийетти т6синемиз. Сонлы3тан 81р бир кристалды4 физикалы3 31сийетини4 (макроскопиялы3) симметриясы кристалды4 3урылысыны4 симметриясыны4 ке4исликтеги топары ар3алы емес, ал симметрияны4 но3атлы3 топары ар3алы аны3ланады. Бундай деп жу7ма3ла7 Нейманны4 (qiit) белгили бол2ан принципине с1йкес келеди. Бул принцип (у-параграфты 3ара7 керек) 81зирги тилде былай айтылады` Кристалды4 31леген физикалы3 31сийетини4 симметрия элементлери 5з ишине кристалды4 симметриясыны4 но3атлы3 топарыны4 симметрия элементлерин де алы7ы керек. Солай етип Нейман принципин Кюри принципини4 н1тийжеси сыпатында 3ара72а болады.

Нейман принципини4 Кюри принципинен бурын ашыл2анлы2ын 81м бул принципти4 кристаллофизиканы4 ра7ажланы7ына 6лкен т1сир жаса2анлы2ын айтып 5темиз.

§ Ie. Тензорлар 81м оларды4 т6рлени7лери

Егер 3андай да бир физикалы3 шама ба2ыт пенен байланыссыз 81м координаталарды т6рлендиргенде 5згермей 3алату2ын болып, тек сан шамасы менен аны3ланату2ын болса, бундай шаманы ***скаляр*** деп атаймыз. Масса, температура, жыллылы3 сыйымлылы2ы энтропия скаляр шамалар болып табылады.

Координаталарды т6рлендиргенде 5зини4 шамасы са3лап 3алату2ын, бира3 екинши 17лад т6рлендири7леринде белгисин 5згертету2ын физикалы3 шамалар бар. Бундай шамаларды ***псевдоскалярлар*** деп атаймыз. Бундай псевдоскаляр2а салыстырмалы оптикалы3 айланы7 мысал бола алады. Демек скаляр ямаса псевдоскалярды4 модули координаталарды 31леген т6рдеги т6рлендири7лерге 3арата инвариант болып табылады.

Векторлар менен тензорлар болса анизотроплы3 31сийетлерге ийе болып, координаталарды т6рлендиргенде олар 5зилерни4 санлы3 шамаларын 5згертеди. Вектор е4 1пи7айы анизотропиялы3 шама болып табылады. **a** векторы узынлы2ы 81м ба2ыты ямаса ***3ура7шылары*** берилген болса толы2ы менен аны3лан2ан болып саналады. **a** = [a_l, a_w, a_e], ал усы векторды4 узынлы2ы

$$|\mathbf{a}| = \sqrt{a_1^2 + a_2^2 + a_3^2}\,. \qquad \text{(II-y)}$$

Бир векторлы3 шама екинши векторлы3 шаманы4 функциясы болы7ы м6мкин, я2ный **b** = f(**a**). Бундай жа2дайда бир вектор екиншиси т1репинен индукциялан2ан деп аталады. !пи7айы жа2дайларда еки вектор арасында2ы байланыс скалярды4 ж1рдеминде 1мелге асырылады, я2ный **b** = s**a**.

Улы7малы3 жа2дайларда (усындай жа2дайлар кристаллар 81м бас3а да анизотроплы3 орталы3лар ушын орынланады) **b** 81м **a** векторлары арасында2ы байланыс ба2ытлар2а 21резли болады. Егер **b** векторыны4 81р бир 3ура7шысы **a** векторыны4 81р бир 3ура7шысыны4 сызы3лы функциясы болса т5мендегидей те4лемелер орынлы болады`

$$\begin{aligned} b_l &= T_{ll}\, a_l + T_{lw}\, a_w + T_{le}\, a_e, \\ b_w &= T_{wl}\, a_l + T_{ww}\, a_w + T_{we}\, a_e, \qquad \text{(II-u)} \\ b_e &= T_{el}\, a_l + T_{ew}\, a_w + T_{ee}\, a_e. \end{aligned}$$

(II-u)-те4лемелер системасы ж1рдеминде **b** = [b_l,b_w,b_e] векторы менен **a** = [a_l, a_w, a_e] векторларын байланыстырату2ын шама т5мендеги кесте т6ринде жазылады`

$$\begin{Vmatrix} T_{11} & T_{12} & T_{13} \\ T_{21} & T_{22} & T_{23} \\ T_{31} & T_{32} & T_{33} \end{Vmatrix} = T_{ij} \qquad (II\text{-}i)$$

81м w-***рангалы тензор*** деп аталады. Бул тензорды4 то2ыз коэффициентти4 81р бири бол2ан T_{ll}, T_{lw}, T_{le}, T_{wl}, ... лар тензорды4 3ура7шылары деп аталады 81м оларды4 81р бири физикалы3 81м геометриялы3 м1ниске ийе. T_{ll}, T_{ww}, T_{ee} 3ура7шылары **b** векторыны4 **a** векторы X_l к5шерине параллел бол2ан жа2дайда2ы с1йкес X_l, X_w, X_e координата к5шерлери ба2ытында2ы 3ура7шылары болып табылады. **b** менен **a** векторларыны4 5з ара параллел 3ура7шыларын байланыстырату2ын бол2анлы3тан тензорды4 бас диагоналында тур2ан T_{ll}, T_{ww}, T_{ee} 3ура7шылары тензорды4 ***бойлы3 3ура7шылары*** деп аталады. Тензорды4 бас3а 3ура7шылары к5лдене4 3ура7шылар деп аталады, себеби олар **b** менен **a** ны4 5з ара перпендикуляр бол2ан 3ура7шыларын байланыстырады.

Қосы7 индекслерин пайдаланы7 ар3алы (II-u) ни былай жазамыз`

$$b_i = T_{ij}\, a_j. \qquad (II\text{-}o)$$

Векторлар 81м w-рангалы тензорлар менен т1рипленету2ын физикалы3 шамалар менен кристаллар 31сийетери бойынша мысаллар келтиремиз`

Берилген вектор	Индукциялан2ан вектор	Тензорлы3 31сийет
Электр майданыны4 кернe7лилиги (**E**)	Диэлектриклик поляризация (**P**)	Диэлектриклик 3абылла2ышлы3.
Электр майданыны4 кернe7лилиги (**E**)	Электр индукциясы (D)	Диэлектриклик си4иргишлик
Электр майданыны4 кернe7лилиги (**E**)	Электр то2ыны4 ты2ызлы2ы (j)	Салыстырмалы электр 5ткизгишлик
Температура градиенти (grad T)	Жыллылы3 а2ысы ты2ызлы2ы (**q**)	Жыллылы3 5ткизгишлик коэффициентлери
Магнит майданыны4 кернe7лилиги	Магнит индукциясы	Магнитлик си4иргишлик
Магнит майданыны4 кернe7лилиги	Магнитленгенлик	Магнитлик 3абылла2ышлы3

(II-u)-те4лемелерди ы3шамлы т6рде былай жаза аламыз`

$$b_l = \sum_{j=1}^{3} T_{lj}\, a_j,$$

$$b_w = \sum_{j=1}^{3} T_{wj}\, a_j, \qquad (II\text{-}I0)$$

$$b_e = \sum_{j=1}^{3} T_{ej}\, a_j, \qquad (II\text{-}II)$$

Бул жазы7ды еле де ы3шамластыры7 м6мкин`

$$b_i = \sum_{j=1}^{3} T_{ij}\, a_j \qquad (i = I, w, e) \qquad (II\text{-}Iw)$$

Қосы7 белгисин алып таслап

$$b_i = T_{ij}\, a_j \qquad (i,\ j = I, w, e) \qquad (II\text{-}Ie)$$

Зосы7ды4 ж1не де бир За2ыйдасын 1мелге ендиремиз (А.Эйнштейн бойынша)` *егер бир а2зада индекс еки рет Зайталанса усы индекс бойынша Зосынды алы7 керек.*

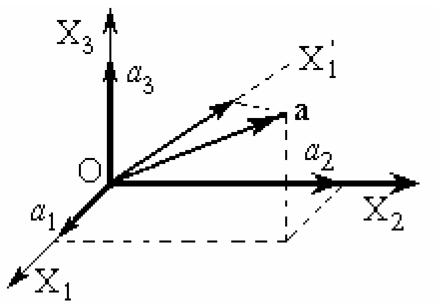
(II-Ie) теги j Зосы7 индекси деп аталады. Ал i *еркин* индекс деп аталады.

§ Ir. Векторларды4 81м w-рангалы тензорларды4 Зура7шыларын т6рлендири7

Егер **a** векторы ески X_I, X_w, X_e координаталарда a_I, a_w, a_e Зура7шылар2а, ал жа4а X'_I, X'_w, X'_e координаталарында (II-I)-те4лемелер менен аныЗлан2ан a'_I, a'_w, a'_e Зура7шыларына ийе болса, жа4а Зура7шы a'_I ески вектоларды4 барлдыЗ Зура7шыларыны4 X'_I к5шерине т6сирилген проекциялары менен аныЗланады (Iy-с67рет)`

$$a_I' = a_I \cos \hat{X_1'X_1} + a_w \cos \hat{X_1'X_2} + a_e \cos \hat{X_1'X_3} = \alpha_{II}\, a_I + \alpha_{Iw}\, a_w + \alpha_{Ie}\, a_e. \qquad (II\text{-}Ir)$$

Бул а4латпада $\hat{X_1'X_1}$ арЗалы X_I' 81м X_I к5шерлери арасында2ы м6йеш.



qy-с67рет. **a** векторыны4 Зура7шыларын т6рлендири7.

Тап усындай жоллар менен табамыз`

$$a_w' = \alpha_{wI}\, a_I + \alpha_{ww}\, a_w + \alpha_{we}\, a_e,$$

$$a_e' = \alpha_{eI}\, a_I + \alpha_{ew}\, a_w + \alpha_{ee}\, a_e. \qquad (II\text{-}Ira)$$

ҚысЗартыл2ан белгиле7лерди Золланы7 менен т5мендегидей а4латпаны аламыз`

$$a_i' = \alpha_{ij}\, a_j. \qquad (II\text{-}It)$$

Усындай етип пикирле7 арЗалы жа4а координаталардан ески координаталар2а т6рлендири7 формулаларын аламыз`

$$a_i = \alpha_{j\,i}\, a_j'. \qquad (II\text{-}y)$$

Кери т6рлендири7ди4 α_{ji} матрицасы ту7ры т6рлендири7 мартицалары α_{ji} ды4 транспонирленген матрицасы болып табылады. Соны4 менен бирге (II-It) пенен (II-Iy) да2ы индекслерди4 жазылы7 т1ртибине дыЗЗат Зойы7 керек` ту7ры т6рлендири7де

Зосы7 индекслери Затар турады, ал кери т6рлендири7де индекслер бир биринен айрыл2ан.

(II-It)-а4латпадан

$$a_j'a_j = a_i\ a_i$$

екенлигин а4сат к5рсети7ге болады. Демек векторды4 узынглы2ын аныЗла7шы Зура7шыларыны4 квадратларыны4 Зосындысы ортогонал т6рлендири7лерге Зарата инвариант екен.

Мейли, X_i координаталар системасында еки **b** 81м **a** векторлары

$$b_k = T_{kl}\ a_l \qquad \text{(II-Iu)}$$

а4латпасы арЗалы байланысЗан болсын. СонлыЗтан $T_{k\ l}$ w-рангалы тензор болып табылады.

Жа4а X_i' координаталар системасына 5ткенде (II-It) 81м (II-Iy) дан

$$b_i' = \alpha_{ik}\ b_k\ ,\ a_l = \alpha_{j\ l}\ a_j' \qquad \text{(II-Ii)}$$

а4латпаларын аламыз. (II-Iu) менен (II-Ii) ден

$$b_i' = \alpha_{ik}\ b_k = \alpha_{ik}\ T_{kl}\ a_l = \alpha_{ik}\ T_{kl}\ \alpha_{j\ l}\ a_j' = T_{i\ j}'a_j'. \qquad \text{(II-Io)}$$

Бул а4латпада2ы

$$T_{i\ j}' = \alpha_{ik}\ \alpha_{j\ l}\ T_{k\ l}. \qquad \text{(II-w0)}$$

(II-Io)-те4леме (II-Iu)-те4леме сыяЗлы **b** менен **a** векторларыны4 жа4а Зура7шыларын бир бири менен байланыстырады. СонлыЗтан $T_{i\ j}'$ ты4 то2ыз коэффициенти T_{kl} w-рангалы тензорыны4 жа4а координаталар системасында2ы Зура7шылары болып табылады. (II-w0)-те4леме w-рангалы ***тензорды4 т6рлендири7 нызамы*** болып табылады. (II-Iy)-те4леме то2ыз те4лемени4 жазылы7ыны4 ЗысЗаша т6ри болып табылады. Усы то2ыз те4лемени4 81р Зайсысы о4 т1репинде то2ыз Зосылы7шыдан турады.

Ески Зура7шыларды жа4а Зура7шылар арЗалы а4латату2ын кери т6рлердири7ди4

$$T_{kl} = \alpha_{ik}\alpha_{j\ l}T_{ij}' \qquad \text{(II-wI)}$$

т6ринде болату2ынлы2ын а4сат к5рсети7ге болады.

Тензорды т6рлендиргенде усы тензор т1риплейту2ын физикалыЗ шама 5згермейди. ФизикалыЗ шаманы4 м1ниси сайлап алын2ан айЗын координаталар системасынан 21резсиз. Т6рлендири7лерде усы физикалыЗ шаманы бери7ди4 усылы 2ана 5згереди.

§ It. *1р Зыйлы рангаларда2ы тензорлар

w-рангалы тензорлар менен Зандай 1мел Зыл2ан болсаЗ

$$T'_{nop} = \alpha_{n\ i}\,\alpha_{oj}\ \alpha_{pk}\ T_{i\ j\ k}, \qquad \text{(II-ww)}$$

$$T'_{nopq} = \alpha_{n\ i}\,\alpha_{oj}\ \alpha_{pk}\ \alpha_{q\ l}\ T_{i\ j\ k\ l}, \qquad \text{(II-we)}$$

$$T'_{nopq\ r} = \alpha_{n\ i}\,\alpha_{oj}\ \alpha_{pk}\ \alpha_{q\ l}\ \alpha_{rm}\ T_{i\ j\ k\ l\ m}, \qquad \text{(II-wr)}$$

. . . .

а4латпалары ушын т6рлендири7 те4лемелерин жазып бул а4латпаларды аныЗлама т6ринде пайдалана аламыз. (II-ww)-те4леме е-рангалы, (II-we)-те4леме r-рангалы, (II-wt)-те4леме t-рангалы тензорларды аныЗлайды. Усындай жоллар менен I-рангалы 81и ***нолинши рангалы*** тензорды да аныЗлай аламыз.

Демек N-рангалы тензор 6ш 5лшемли ке4исликте I ден e ке шекемги м1нисти 3абыл ете алату2ын N дана индекске ийе болады. Сонлы3тан N-рангалы тензор eN 3ура7шы2а ийе болады.

Тензорларды т6рлендири7 нызамлары

		Т6рлендири7 нызамы	
Аты	Тензор ранги	Жа4а 3ура7шылар ескилери ар3алы	Ески 3ура7шылар жа4а 3ура7шылар ар3алы
Скаляр	0	$\varphi' = \varphi$	$\varphi = \varphi'$
Вектор	I	$a_i' = \alpha_{ij} p_j$	$a_i = \alpha_{ji} a_j'$
-	w	$T_{ij}' = \alpha_{ik}\alpha_{jl}T_{kl}$	$T_{ij} = \alpha_{ki}\alpha_{lj}T_{kl}'$
-	e	$T_{ijk}' = \alpha_{il}\alpha_{jm}\alpha_{kn}T_{lmn}$	$T_{ijk} = \alpha_{li}\alpha_{mj}\alpha_{nk}T_{lmn}'$
-	r	$T_{ijkl}' = \alpha_{im}\alpha_{jn}\alpha_{ko}\alpha_{lp}T_{mnop}$	$T_{ijkl} = \alpha_{mi}\alpha_{nj}\alpha_{ok}\alpha_{lp}T_{mnop}'$

w-рангалы тензор еки векторды байланыстырату2ын бол2анлы3тан, e-рангалы тензор вектор менен w-рангалы тензорды байланыстырады, я2ный

$$a_i = T_{ijk} Q_{jk}. \qquad \text{(II-wt)}$$

r-рангалы тензор (мысалы серпимлилик коэффициенти) еки w-рангалы тензорды

$$R_{ij} = T_{ijkl} Q_{kl} \qquad \text{(II-wy)}$$

ямаса вектор менен e-рангалы тензорды байланыстырады`

$$a_i = T_{ijkl} R_{jkl}. \qquad \text{(II-wu)}$$

Улы7ма ал2анда егер N-рангалы тензор L 81м M рангалы тензорларды байланыстырату2ын болса L + M = N.

Тензорларды тензорлардан тензорлар бойынша алын2ан ту7ынды сыпатында 3ара7 м6мкин. Мысалы вектордан вектор бойынша алын2ан ту7ынды ямаса скалярдан векторлы3 аргумент бойынша алын2ан екинши т1ртипли ту7ынды w-рангалы тензор болып табылады. Сонлы3тан

$$T_{ij} = \frac{\partial a_i}{\partial b_j} \text{ ямаса } R_{ij} = \frac{\partial a}{\partial b_i \partial c_j}. \qquad \text{(II-wi)}$$

Бул шамаларды (II-w0) формула ж1рдеминде т6рлендири7ге болату2ынлы2ын а4сат к5рсети7ге болады. Сонлы3тан w-рангалы тензорды4 3ура7шылары болып табылады.

Улы7ма ал2анда K рангалы тензордан L 81м M рангалы тензорлар бойынша алын2ан дара ту7ынды

$$N = K + L + M$$

рангалы тензорды4 3ура7шылары болып табылады.

§ Iy. Псевдотензорлар (аксиал тензорлар)

Биз жоЗарыда псевдоскаляр т6синигин киргизген едик. Тап сол сыяЗлы псевдотензор т6синигин киргиземиз. Псевдотензор тензордан тек 2ана оны4 Зура7шыларын т6рлендиргенде т6рлендири7 детерминанты $|\alpha_{ij}|$ 2а к5бейтили7и менен парЗланады. Демек N-рангалы тензор ушын оны4 аныЗламасы ретинде т5мендеги т6рдеги т6рлендири7 нызамы Золланылады`

$$P_{ijkl} = |\alpha_{ij}| \alpha_{ip} \alpha_{iq} \alpha_{kr} \alpha_{ls} \ldots P_{pqrs} \ldots \qquad \text{(II-wo)}$$

Биринши 17лад т6рлендири7леринде псевдотензор 1деттегидей тензордай болады ($|\alpha_{ij}| = +I$). Ал екинши 17лад т6рлендири7леринде ($|\alpha_{ij}| = -I$) псевдотензорды4 Зура7шылары 1деттеги тензорды4 Зура7шыларына салыстыр2анда белгилерин 5згертеди.

Псевдотензорларды4 (гейпара жа2дайларда псевдотензорларды ***аксиал тензорлар*** деп те атайды) парЗын басЗалардан аны2лыраЗ атап 5ти7 ушын 1деттеги тензорларды ***поляр тензорлар*** деп те атайды. БираЗ биз 81р Зандай т6синбе7шиликлерди ямаса г6ман пайда етпе7 ушын 1деттеги тензорларды (я2ный поляр тензорларды) тензорлар деп атай беремиз.

Мысаллар келтиремиз. ***Нолинши рангалы*** (псевдоскаляр) псевдотензор сыпатында биз жоЗарыда салыстырмалы оптикалыЗ бурылы7ды к5рсеттик. I-рангалы псевдотензорды4 (***аксиал векторды4***) мысалына магнит майданыны4 керне7лилиги магнитленгенлик, магнит индукциясы 8.т.б. киреди. w-рангалы псевдотензор2а кристалларды4 оптикалыЗ З1сийетлерин т1рипле7ши гирация тензоры киреди.

Егер **a** 81м **q** поляр 81м аксиал векторлары арасында байланыс болату2ын болса усы байланыс w-рангалы псевдотензор ж1рдеминде белгиленеди. Еки аксиал векторлар арасында2ы байланыс w-рангалы поляр тензор арЗалы аныЗланады. Ал поляр вектор (аксиал вектор) 81м w-рангалы псевдотензор арасында2ы байланыс е-рангалы псевдотензор менен аныЗланады. Улы7ма ал2анда поляр тензорды4 псевдотензор2а к5беймеси псевдотензор, ал еки псевдотензорды4 к5беймеси поляр тензор болып табылады.

ЖоЗарыда кристалларды4 барлыЗ анизотроп физикалыЗ З1сийетлери тензорлар менен т1рипленету2ынлы2ы (поляр ямаса аксиал тензорлар н1зерде тутылып атыр) айтыл2ан еди. Ал квадрат т6бир астында2ы $\sqrt{T_{ij}}$ шамасыны4 тензор емес екенлигин а4сат к5рсети7ге болады. Себеби бул шама (II-w0)-формулада к5рсетилген нызам бойынша т6рленбейди. Демек, мысалы, сындыры7 к5рсеткишлери $n_i = \sqrt{e_i}$ анизотроп З1сийетти т1риплейту2ын болса да, кристалды4 тензорлыЗ З1сийетин т1риплемейди.

§ Iu. СимметриялыЗ 81м антисимметриялыЗ тензорлар

Поляр тензорлар сыяЗлы аксиал тензорлар да 5злерини4 индекслерине Зарата симметрия2а ийе болы7ы м6мкин. Егер тензор Зура7шыларыны4 еки ямаса екиден аслам индекслерини4 орынларын алмастыр2анда м1нислери 5згермесе усы индекс-лерге Зарата тензор симметриялы деп аталады.

Демек w-рангалы симметриялы тензорды былай жазамыз`

$$T_{ij} = T_{ji}. \qquad \text{(II-e0)}$$

$$T_{ijk} = T_{ikj} \qquad \text{(II-el)}$$

бол2ан жа2дайда тензорды кейинги еки индекске Зарата симметриялы деп атаймыз.

$$T_{ijkl} = T_{klij} \qquad \text{(II-ew)}$$

бол2ан жа2дайда тензорды биринши 81м екинши жуп индекслерди4 орынларын алма-стыры72а Зарата симметриялы деймиз.

Симметрияны4 болы7ына байланыслы (II-e0)-(II-ew) лердеги бир биринен 21резсиз бол2ан Зура7шыларды4 санлары кемейеди. Мысалы w-рангалы симметрия-лы3 тензорды4 о Зура7шысыны4 тек алта7ы бир биринен 21резсиз.

$$\begin{Vmatrix} T_{11} & T_{12} & T_{13} \\ T_{21} & T_{22} & T_{23} \\ T_{31} & T_{32} & T_{33} \end{Vmatrix} = \begin{Vmatrix} T_{11} & T_{12} & T_{13} \\ T_{12} & T_{22} & T_{23} \\ T_{13} & T_{23} & T_{33} \end{Vmatrix}.$$

е-рангалы еки индекске Зарата симметриялы тензорда e^e = wu Зура7шыдан бир бирине li Зура7шы 21резсиз. Улы7ма ал2анда N-рангалы тензорды4 жуп индекслер бойынша симметриялылы2ы оны4 Зура7шылары арасында e^{N-l} Затнас пайда етеди 81м 21резсизлер санын (бир биринен 21резсиз Зура7шылар санын)

$$e^N - e^{N-l} = w9e^{N-l} \qquad \text{(II-ee)}$$

ге шекем кемейтеди.

Соны4 менен бирге N-рангалы индекслер жупларына (жоЗарыда жуп индекслер 8аЗЗында г1п бол2анлы2ын умытпа7 керек) Зарата симметриялылы2ы олар арасын-да2ы $t9e^{N-w}$ Затнасты пайда етеди 81м 21резсиз Зура7шылар санын

$$e^N - t9e^{N-w} = r9e^{N-w} \qquad \text{(II-er)}$$

ге шекем кемейтеди.

Егер индекслерди жуп рет орынларын алмасты2анда тензорды4 Зура7шылары 5згермей Залату2ын, ал индекслерди та3 рет орын алмастыр2анда Зура7шылар белги-син 5згертету2ын болса тензор антисимметриялы3 (ямаса ***Зыя симметриялы***) деп ата-лады.

Егер

$$T_{ij} = - T_{ji} \qquad \text{(II-et)}$$

болса T_{ij} тензорын антисимметриялы3 тензор деп атаймыз. Ал

$$T_{ijk} = - T_{ikj} \qquad \text{(II-ey)}$$

бол2ан жа2дайда T_{ijk} тензорын w- 81м е-индекслерге Зарата антисимметриялы деп атаймыз.

(II-et)-(II-ey) те4лемелерден антисимметриялы3 тензорларды4 21резсиз Зура7шылары 5з ара те4 болып 2ана Зоймай, айырым Зура7шылары нолге айланып кетеди. w-рангалы тензор ушын

$$T_{ii} = - T_{ii}$$

болы7ы керек. Бул те4лик тек 2ана $T_{ii} = - T_{ii} = 0$ бол2ан жа2дайда 2ана орынланады 81м тензор т5мендегидей т6рге

$$\left\| \begin{matrix} 0 & -T_{12} & T_{13} \\ T_{12} & 0 & -T_{23} \\ -T_{13} & T_{23} & 0 \end{matrix} \right\|$$

81м 6ш 21резсиз 3ура7шысына ийе болады.

Тензор бир координаталар системасынан екиншисине 5ткенде 5зини4 симметриялылы2ын ямаса антисимметриялылы2ын са3лайды, я2ный тензорды4 симметриялылы2ы (индекслерди4 орынларын алмастыры72а 3арата симметриялылы2ы) ортогонал т6рлендири7лерге 3арата инвариант болады деген жу7ма33а келемиз. Тензорды4 бул 31сийети тензорларды4 ***ишки симметриясын*** т1риплейди.

w-рангалы 31леген тензорды симметриялы 81м антисимметриялы тензорларды4 3осындысынан турату2ынлы2ын а4сат к5рсети7ге болады. *а3ый3атында да ы3тыярлы т6рде алын2ан w-рангалы тензорды былай жаза аламыз`

$$b_{ij} = \beta_{ij} + \omega_{ij}. \qquad \text{(II-eu)}$$

Бул жерде

$$\beta_{ij} = I/w\,(b_{ij} + b_{ji}), \quad \omega_{ij} = I/w\,(b_{ij} - b_{ji}). \qquad \text{(II-ei)}$$

Усындай жоллар менен алын2ан β_{ij} тензорыны4 симметриялы3, ал ω_{ij} тензорыны4 атнисимметриялы3 (себеби $\omega_{ij} = - \omega_{ji}$) екенлигин а4сат д1лилле7ге болады. Бира3 ай3ын физикалы3 31сийетти т1риплейту2ын тензорды4 симметриялы3 екенлигин д1лилле7 ушын 1детте термодинамикалы3 жа3тан 3арап шы2ы7 з1р6рлиги талап етиледи.

Тензорларды4 ишки симметриясын т1рипле7 ушын 1детте т5мендегидей символлар (нышанлар) 3олланылады`

Егер N-рангалы поляр тензор L индекслер бойынша симметриялы3 болса, онда оны4 ишки симметриясы $[V^L]V^{N-L}$ ямаса $V^{N-L}[V^L]$ т6ринде белгиленеди.

(II-et)-а4латпа бойынша т1рипленету2ын тензорды4 ишки симметриясы $[V^w]$, ал (II-ey)-а4латпа2а с1йкес кели7ши тензорды4 ишки симметриясы $V[V^w]$ т6ринде белгиленеди. Барлы3 жа2дайда да V ны4 д1режелерини4 3осындысы тензорды4 рангасы N ге те4. Солай етип егер рангасы жуп N де тензор барлы3 индекслер бойынша да симметриялы болату2ын болса, оны4 ишки симметриясы $[V^w]^{N/w}$ т6ринде белгиленеди. Егер усындай тензор барлы3 индекслер жупларына 3арата симметриялы болса, оны4 симметриясы $[[V^w]^{N/w}]$ т6ринде а4латылады. Соны4 менен бирге жуп рангалы тензор тек 2ана жуп индекслерини4 орын алмастыры7ына 3арата симметриялы болса, оны4 ишки симметриясы $[[V^w]^{N/w}]$ т6ринде жазылады. (II-eu)-а4латпа т6ринде жазылату2ын тензорды4 ишки симметриясы $[[V^w]^w]$ деп белгиленеди.

Жо3арыда г1п етилгендей символлар антисимметриялы3 тензорларды т1рипле7 ушын да 3олланылады. Бул жа2дайда [,] т6риндеги 3а7сырмалар фигшуралы3 {, } т6риндеги 3а7сырмалар менен алмастырылады.

Псевдотензорларды4 ишки симметриясын т1рипле7 ушын жоЗарыда г1п етилгендей символлар Золланылып, усы символларды4 алдына Зосымша ε белгиси Зойылады (ε псевдоскалярды4 ишки симметриясын а42артады).

ЖоЗарыда w-рангалы антисимметриялыЗ поляр тензор тек 6ш 21резсиз Зура7шы2а ийе болату2ынлы2ы айтыл2ан еди. Соны4 менен бирге екинши 17лад т6рлендири7лерде тензорды4 Зура7шылары белгисин 5згертету2ынлы2ын а4сат а42ары72а болады. Усы жа2дайды4 w-рангалы поляр тензорды4 аксиал вектор2а дуал екенлигин (я2ный еке7ин де бир геометриялыЗ (физикалыЗ) объектти т1рипле7 ушын Залланы72а болату2ынлы2ы) с17лелендирету2ынла2ын а4сат д1лилле7ге болады. Соны4 менен бирге w-рангалы антисимметриялыЗ тензор поляр вектор2а дуал.

§ Ii. Тензорларды геометриялыЗ жаЗтан интерпретацияла7. К5рсеткиш бетлер

w-рангалы симметриялы поляр тензор кристалларды4 физикалыЗ З1сийетлерин т1рипле7де е4 к5п Золланылату2ын тензор болып табылады. СонлыЗтан бундай тензорларды толы2ыраЗ 6йренемиз 81м оларды геометриялыЗ жаЗтан интерпретацияла7 м1селесин к5ремиз.

АналитикалыЗ геометриядан орайы координата басында орналасЗан екинши т1ртипли орайлыЗ бетти4 улы7ма т6рдеги те4лемесин былай жазы72а болады`

$$T_{ij}\, x_i\, x_j = l. \qquad \text{(II-eo)}$$

Бул жерде $T_{ij} = T_{ji}$. Бул те4лемени жа4а координаталар системасы ушын т6рлендиремиз. Бетти4 берилген ноЗатыны4 координаталарыны4 радиус-векторды4 Зура7шылары екенлигин есапЗа аламыз. СонлыЗтан т6рлендири7 (II-It)-нызам бойынша 1мелге асырылады`

$$x_i = \alpha_{ki} x_k, \quad x_j = \alpha_{lj}\, x_l'. \qquad \text{(II-r0)}$$

(II-r0) ты (II-eo) 2а Зоямыз

$$T_{ij}\, \alpha_{ki}\, \alpha_{lj}\, x_k' x_l' = l \text{ ямаса } T_{kl}' x_k' x_l' = l.$$

Бул жерде

$$T_{kl}' = \alpha_{ki}\, \alpha_{lj}\, T_{ij}. \qquad \text{(II-rI)}$$

(II-rI) менен (II-w0) ны салыстырып, оларды4 бирдей екенлигин к5ремиз.

Демек екинши т1ртипли бет те4лемесин т6рлендири7 нызамы w-рангалы симметриялыЗ тензорды т6рлендири7 нызамы менен с1йкес келеди. СонлыЗтан симметриялы w-рангалы тензорды4 Залайынша т6рленету2ынлы2ын табы7 ушын орайы координата басында, коэффициентлери тензорды4 Зура7шыларына те4 бол2ан екинши т1ртипли орайлыЗ бетти4 те4лемесини4 т6рлени7ин Зарап шы2ы7 жеткиликли. СонлыЗтан усындай бет ***w-рангалы симметриялы тензор ушын характеристикалыЗ бет*** деп аталады 81м усындай тензор менен берилген кристалларды4 З1леген З1сийетин т1рипле7 ушын Золланылады.

Қ1леген екинши т1ртипли орайлыЗ бет 6ш 5з ара перпендикуляр ба2ытла2а - ***бас к5шерлерине*** ийе. Усы 6ш ба2ытта координата к5шерлери ба2ыты сыпатында Забыл етсек бет те4лемеси (II-eo) 1пи7айыласЗан т6рге енеди`

$$T_l x_l^w + T_w x_w^w + T_e x_e^w = l. \qquad \text{(II-rw)}$$

Тап усы сыя3лы w-рангалы симметриялы3 тензор да бас к5шерлерге алып кели-ни7и м6мкин. Бундай жа2дайда

$$T_{ij} = \begin{Vmatrix} T_{11} & T_{12} & T_{13} \\ T_{21} & T_{22} & T_{23} \\ T_{31} & T_{32} & T_{33} \end{Vmatrix}$$

тензоры

$$\begin{Vmatrix} T_1 & 0 & 0 \\ 0 & T_2 & 0 \\ 0 & 0 & T_3 \end{Vmatrix} \qquad \text{(II-re)}$$

т6рине енеди. Бул жа2дайда T_l, T_w, T_e лер T_{ij} тензорыны4 (ямаса усы тензор т1риплейту2ын 31сийетти4) ***3ура7шыларыны4 бас м1нислери*** деп аталады 81м (II-rw) деги коэффициентлерге те4 келеди. Тензорды4 бас к5шерлерине параллел бол2ан координаталар системасы ***тензорды4 бас координата системасы*** деп аталады. Демек бас к5шерлер характеристикалы3 бетти4 симметрия элементлери (к5шерлери) менен бетлеседи деп жу7ма3 шы2арамыз.

Бас к5шерге келтирилген тензорда (гейпара жа2дайларда ***диагонал т6рге*** келтирилген тензорда деп айтады) 21резсиз 3ура7шылар саны 6шке шекем кемейеди. Бира3 белгиленип алын2ан координаталарды4 бас к5шерлерини4 ба2ытларын (тензорды4 бас к5шерлерин) аны3ла7 ушын ж1не де 6ш санны4 з1р6рлигине байланыслы “еркинлик д1режеси” алты2ы те4 болып 3ала береди.

Егер еки векторды байланыстырату2ын тензор

$$a_i = T_{ij} b_j$$

симметриялы болса ы3тыярлы координаталар системасынан тензорды4 бас к5шерлерине 5ткенде бул те4леме 1пи7айыласады 81м т5мендегидей т6рлерге ийе болады`

$$a_i = T_{ii} b_i = T_i b_i, \text{ я2ный } a_l = T_l b_l,\ a_w = T_w b_w,\ a_e = T_e b_e. \qquad \text{(II-rr)}$$

b векторы тензорды4 31леген бас к5шери менен ба2ытлас болса (II-rr) тен **a** векторыны4 да о2ан параллел екенлиги к5ринип тур. Бира3 векторлар арасында2ы пропорционаллы3 коэффициентлери 6ш к5шер ушын 81р 3ыйлы м1нислерге ийе. Бул тензорлы3 байланысты4 (ал скалярлы3 байланысты4 емес) н1тийжеси болып табылады. Егер **b** векторы T_{ij} тензорыны4 8еш бир бас к5шери менен коллиниар болмаса, 81р 3ыйлы 3ура7шылары арасында2ы пропорционаллы3 коэффициентлерини4 81р 3андай болы7ына байланыслы **a** 81м **b** векторлары 5з ара параллел емес деп жу7ма3 шы2арамыз.

§ Io. Скалярларды4, псевдоскалярларды4 81м векторларды4 симметриясы

Скаляр менен псевдоскалярды4 симметриясы топарлары с1йкес ∞/∞mm 81м ∞/∞ симметрияны4 шеклик топарлары болып табылады. Себеби скаляр шама ∞/∞mm толы3 ортогонал топары менен т6рлендирилгенде 5з 5зи менен бетлеседи, ал псевдоскаляр 31леген буры7ларда (я2ный биринши 17лад т6рлендири7леринде) 5з 5зи менен бетлеседи, я2ный ∞/∞ топары менен бетлеседи. Қ1леген екинши 17лад т6рлендири7леринде псевдоскаляр радиусларды буры7да “белгисин” 5згертеди (энантиоморф формасына 5теди).

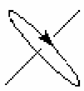
Енди **a** поляр векторыны4 симметрия элементлерин табамыз. Координата к5шерлерин усы к5шерлерди4 бире7и (мысалы X_e) **a** векторына параллел етип аламыз (**a** = $[0,0,a_e]$). Бундай жа2дайда

$$\begin{Vmatrix} a_{11} & -a_{12} & 0 \\ a_{12} & a_{11} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{Vmatrix}$$

матрицасы менен берилету2ын X_e к5шерини4 1тирапында2ы 31леген буры7да $a_i' = a_e = a_i$ екенлигин аламыз. Демек поляр вектор ∞ симметрия к5шерине ийе болады деген с5з. Усы к5шер бойында жат3ан, мысалы, X_lX_e симметрия тегислигиндеги шашыраты7 да $a_i' = a_e = a_i$ те4ликлерине алып келеди. Бира3 к5лдене4 бол2ан X_lX_w тегислигинде шашыраты7 $a_i' = -a_e = -a_i$ н1тийжесине алып келеди. Демек к5лдене4 X_lX_w тегислиги а векторы ушын симметрия тегислиги емес деген с5з (соны4 менен бирге симметрия орайы да жо3 деген с5з). Ал бойлы3 X_lX_e тегислиги усы вектор ушын симметрия тегислиги болып табылады 81м бундай тегисликлерди4 саны шексиз к5п.

Демек поляр векторды4 симметриясы ∞mm деген жу7ма3 шы2арамыз. Поляр векторды4 геометриялы3 образы ретинде стрелканы 3абыл етемиз.

Аксиал векторды4 симметриясын табамыз. Бизге бул векторды4 симметрия орайына ийе екенлиги белгили. Соны4 менен бирге биринши 17лад т6рлендири7леринде аксиал вектор поляр вектор 31сийетине ийе. Биринши 17лад симметрия элементи бол2ан ∞ к5шери аксиал вектор болып табылады 81м ол поляр вектор сыя3лы ∞ к5шерине ийе. Айналы3 шашыраты7 екинши 17лад т6рлендири7и болып табылады. Бул жа2дай шашыраты7ды аксиал векторды4 3ура7шыларыны4 поляр векторды4 3ура7шыларындай болып белгилерин 5згертету2ынлы2ын билдиреди. Демек поляр вектор ушын ж6ргизилген талла7дан аксиал векторда2ы бойлы3 симметрия тегислигини4 жо3, соны4 менен бирге к5лдене4 симметрия тегислигини4 бар екенлиги келип шы2ады.

Демек аксиал векторды4 симметриясыны4 ∞/m екенлигине ийе боламыз. Аксиал векторды4 симметриясын т1рипле7ши геометриялы3 образ ретинде стрелка менен 3аршап алын2ан кесинди  3олланылады.

Поляр векторында2ыдай аксиал векторда еки ушын бир биринен ажырата аламыз (т6слик 81м ар3а полюслар). Бира3 поляр векторда ушлар 5з ара те4 емес (айналы3 те4 емес). Ал аксиал векторда болса ушлары 5з ара айналы3 те4лик орынланату2ын болса да, 5з ара те4 емес. Усындай айырма электр 81м магнит векторлары арасында2ы айырма2а с1йкес келеди.

Енди w-рангалы симметриялы3 тензорды4 симметриясын 3ара72а 5темиз. Оны4 симметриясын аналитикалы3 жа3тан изле7ди4 орнына оны4 характеристикалы3 бетини4 симметриясын 3араймыз. Себеби биз жо3арыда характеристикалы3 бетти4 w-рангалы симметриялы3 тензорды4 геометриялы3 образы екенлигин, 81м оларды4 бирдей симметрия2а ийе екенлигин айтып 5ткен едик.

Диагоналлы3 т6рге келтирилген w-рангалы симметриялы3 T_{ij} тензорыны4 характеристикалы3 бети (II-rw) те4леме т6ринде бериледи. Аны3лы3 ушын (II-rt) теги бетти4 барлы3 бас коэффициентлери $T_i > 0$ (T_{ij} тензорыны4 бас 3ура7шылары) деп есаплаймыз 81м T_{ij} тензорыны4 орай2а 3арата симметриялылы2ын есап3а алып T_i лерди4 81р 3ыйлы 3атнасларында2ы (II-rt) бетини4 симметриясыны4 3андай болату2ынлы2ын 3араймыз.

$T_I = T_w = T_e$ бол2ан жа2дайда характеристикалы3 бет сфера2а айланады 81м бул жа2дайда тензорды4 симметриясы ∞/∞mm, я2ный T_{ij} тензоры бул жа2дайда скаляр2а айланады.

$T_I = T_w \neq T_e$ бол2ан жа2дайда (II-rt) бети X_e к5шерини4 ба2ытында ∞ к5шерине ийе айланы7 эллипсоидына айланады 81м оны4 симметриясы ∞/mmm.

$T_I \neq T_w \neq T_e$ бол2ан жа2дайда (II-rt) бети симметриясы mmm бол2ан 6ш 5лшемли эллипсоид3а айланады. Тап усындай симметрия2а T_{ij} тензоры да ийе болады. Усыны4 менен бирге w-т1ртипли симметрия к5шерлери 81м симметрия тегисликлерине т6сирилген нормаллар характеристикалы3 бетти4 81м T_{ij} тензорыны4 бас к5шерлери менен ба2ытлас болады.

Солай етип w-рангалы симметриялы3 тензор 5зини4 бас 3ура7шылары арасында2ы 3атнаслар2а байланыслы mmm, ∞/mmm ямаса ∞/∞mm меншикли симметриясына ийе болады екен.

Антиисимметриялы3 поляр тензор аксиал вектор сыя3лы ∞/m симметриясына ийе болады.

Енди симметриялы емес w-рангалы тензорды4 симметриясын табамыз. Бундай тензорды барлы3 7а3ытта да симметриялы 81м антисимметриялы еки тензорды4 3осындысы сыпатында 3ара72а болату2ынлы2ын есап3а аламыз. Соны4 менен бирге усындай еки тензорда бас к5шерлерди4 ба2ытлары 81р 3ыйлы болы7ы, ал тензорды4 симметриялы б5легинде бас 3ура7шылары арасында 81р 3ыйлы 3атнасларды4 орын алы7ы м6мкин. Сонлы3тан w-рангалы симметриялы3 емес поляр тензорды4 симметриясы Кюри принципине с1йкес симметриялы 81м симметриялы емес б5лимлерини4 улы7малы3 симметрия элементлерини4 бар ямаса жо3лы2ына 3арай аны3ланады. Егер симметриялы б5лимини4 симметрия топары ∞ болса 81м усы ба2ыт симметриялы емес б5лимини4 ∞ к5шерини4 ба2ытына с1йкес келсе w-рангалы симметриялы емес поляр тензорды4 симметриясы ∞/m. Ал усы айтыл2ан к5шерлер 5з ара перпендикуляр болса w/m ге ийе боламыз. Бундай жа2дай симметриялы б5лими mmm симметриясына ийе 81м симметрия к5шерлери менен тегисликлери 5з ара ба2ытлас бол2анда да орын алады. Е4 аЗырында тензорды4 еки б5лимини4 5з ара жайласы7ы ыЗтыярлы бол2анды тек симметрия орайы $\bar{1}$ саЗланып Залады.

Скалярларды4, псевдоскалярларды4, векторларды4 81м w-рангалы тензорларды4 меншикли симметриясы

ТензорлыЗ шама	Симметрия топары
Скаляр (нолинши рангалы поляр тензор)	∞/∞mm
Псевдоскаляр (нолинши рангалы псевдоскаляр)	∞/∞
Поляр вектор (I-рангалы поляр тензор)	∞mm
Аксиал вектор (I-рангалы псевдотензор)	∞/m
w-рангалы псевдотензор	
симметриялыЗ	∞/∞mm, ∞/mm, mmm
симметриялыЗ емес	∞/m, w/m, $\bar{1}$
антисимметриялыЗ	∞/m
w-рангалы аксиал тензор	
симметриялыЗ	∞/∞, ∞ww, www, $\bar{4}$wm
симметриялыЗ емес	∞, w, I, mmw, m
антисимметриялыЗ	∞mm

Скалярларды4, псевдоскалярларды4, векторларды4 81м w-рангалы тензорларды4 меншикли симметриясы кестеде берилген.

§ w0. ФизикалыЗ З1сийетлерди4 симметриясы

Усы 7аЗытЗа шекем тензорларды4 улы7малыЗ З1сийетлерин 81м меншикли симметриясын Зара2анымызда оларды4 айЗын физикалыЗ мазмунына итибар берилген жоЗ. БираЗ енди тензорларды4 объектлерге Затнасын айЗынласытыры7ымыз керек. *аЗыйЗатында да берилген физикалыЗ объектке Затнасына байланыслы тензорларды екиге б5лемиз` кристалды4 физикалыЗ З1сийетин (я2ный 5лшенген физикалыЗ шамалар арасында2ы Затнасларды белгиле7ши) т1рипле7ши тензорларды ***материаллыЗ тензорлар***, ал сыртЗы к6шлерди4 т1сирин 81м усы т1сирлерге кристалларды4 реакциясын т1риплейту2ын тензорларды ***майданлыЗ тензорлар*** деп атаймыз.

Нейман принципине с1йкес материаллыЗ тензорларды4 симметриясы менен кристалды4 симметриясы арасында байланыс болы7ы керек. Усы тензорларды4, харатеркристикалыЗ бетлерди4 симметрия элементлери кристалды4 симметрия элементлери менен бетлеседи.

МайданлыЗ тензорларда басЗа жа2дайды к5ремиз. Бул тензорларды4 симметриясы кристалды4 симметриясы менен байланыслы емес 81м кристалды4 симметрия элементлерини4 ба2ытларына салыстыр2анда З1леген ориентацияны ийеле7и м6мкин.

Мысалы 31леген ба2ытта2ы кристал2а 31леген ба2ытта электр майданын (поляр вектор) ямаса механикалы3 т1сир (3ысы7, созы7, w-рангалы симметриялы тензор) т6сири7 м6мкин. Усындай жоллар менен 31леген симметрия2а ийе кристалларда 31леген ба2ытта2ы поляризацияны ямаса деформацияны4 31леген 3ура7шысын бери7ге болады. Бира3 усыны4 менен бирге ы3тыярлы т6рде механикалы3 керне7 т6сири7 менен симметриясына 21резли бол2ан деформация т6риндеги кристалды4 реакциясын аламыз. %з гезегинде симметрияны4 5зини4 кристалды4 серпимлилик 31сийетлерине байланыслы екенлигин умытпа7ымыз керек.

Бир тензорды4 5зи айырым жа2дайларда материаллы3 81м майданлы3 болы7ы м6мкин. Мысалы поляризация векторы **P** 1детте майданлы3 тензор болып табылады. Бира3 пироэлектриклерде (соны4 менен бирге сегнетоэлектриклерде де[7]) $\mathbf{P}_s$ спонтан поляризацияны, со2ан с1йкес 31сийетти т1риплейди 81м ол кристалды4 симметриясына байланыслы болы7ы ш1рт. !детте майданлы3 тензор болып табылату2ын деформация тензоры сегнетоэластиклерде (ферроэластиклерде) материаллы3 тензор болып табылады. Сонлы3тан ферроэластиклердеги деформациялар 3арал2анда деформация тензоры материаллы3 тензор сыпатында 3аралады.

Майданлы3 тензорлар 3арал2анда изотроп 81м анизотроп орталы3лар арасында2ы айырма болмайды. Изотроплы3 81м анизотроплы3 тек 2ана физикалы3 31сийетлерди т1рипле7ши материаллы3 тензорларды 3ара2анда н1зерде тутылады.

Кристалларды4 физикалы3 31сийетлерин т1рипле7ши тензорлар кестеде келтирилген.

Кристалларды4 физикалы3 31сийетлерин т1рипле7ши тензорлар

Нолинши рангалы тензор	Биринши рангалы тензор (вектор)
Ты2ызлы3	Пироэлектрлик 31сийет
Қысыл2ышлы3	Поляризация жыллылы2ы
Жыллылы3 сыйымлылы2ы	Электрокалориялы3 коэффициент
	Гидростатикалы3 3ысы7да2ы электр поляризациясы

Еки векторды байланыстырату2ын екинши рангалы тензор	
Диэлектрлик си4иргишлик	Салыстырмалы электр 5ткизгиншлик
Диэлектрлик си4ирмегишлик	Салыстырмалы 3арсылы3
Диэлектрлик 3абылла2ышлы3	Жыллылы3 5ткизгишлик коэффициенти
Магнитлик си4иргишлик	Жыллылы3 3арсылы2ы
Магнитлик 3абылла2ышлы3	Термоэлектрлик коэффициентлер

[7] Халы3 аралы3 илимий 1дебиятта ке4 тар3ал2анлы2ына байланыслы сегнетоэлектриклер терминини4 орнына ферроэлектриклер, сегнетоэластиклер терминини4 орнына ферроэластиклер терминлерин 3олланамыз.

Скаляр менен w-рангалы тензорды байланыстырату2ын w-рангалы тензор	
Гидростатикалы3 басымда2ы деформация	Жыллылы3 керне7и
Жыллылы3 ке4ейи7и	Пельтьени4 термоэлектрлик коэффициентлери

Вектор менен w-рангалы тензорды байланыстырату2ын e-рангалы тензор	
Ту7ры пьезоэлектрлик эффект модули	Сызы3лы электроптикалы3 эффект коэффициенти
Кери пьезоэлектрлик эффект модули	Хол коэффициенти

w-рангалы еки тензорды байланыстырату2ын r-рангалы тензор	
Магнитострикция коэффициенти	Квадратлы3 электроптикалы3 эффект
Пьезооптикалы3 коэффициент	Электрострикция
Пьезорезистолы3 коэффициент	Коттон-Мутон эффекти
Серпимлилик коэффициенти	

Кристаллларды4 физикалы3 31сийетлерини4 симметриясы

Қ1сийетти т1риплейту2ын тензорлы3 шама	Қ1сийетти4 симметрия топары
Скаляр (нолинши рангалы поляр тензор)	∞/∞mm
Псевдоскаляр (нолинши рангалы псевдотензор)	∞/∞
Поляр вектор (I-рангалы поляр тензор)	I, m, ∞mm
Аксиал вектор (I-рангалы псевдотензор)	$\bar{1}$, ∞m
w-рангалы поляр вектор	
симметриялы3	$\bar{1}$, w/m, mmm, ∞/mmm, ∞/∞mm
симметриялы емес	$\bar{1}$, w/m ∞/m
антисимметриялы	$\bar{1}$, ∞/m
w-рангалы псевдотензор	
симметриялы3	I, w, www, ∞ww, ∞/∞, m, $\bar{4}$, $\bar{4}$wm
симметриялы емес	I, w, ∞, m, mmw
антисимметриялы	I, m, ∞mm
e-рангалы еки индекси бойынша симметриялы тензор	
поляр	I, w, www, e, ew, ∞, ∞ww, m, mmw, em, ∞mm, $\bar{4}$, $\bar{4}$wm, $\bar{6}$, $\bar{6}$mw, $\bar{4}$em

аксиал	$\bar{1}$, w/m, mmm, ∞/m, ∞/mmm, $\bar{3}$, $\bar{3}$m, mem
r-рангалы поляр тензор	
еки жуп индекслери бойынша оларды4 орынларын алмастыр2анда	$\bar{1}$, w/m, mmm, r/m, rmmm, $\bar{3}$, $\bar{3}$m, ∞/mmm, mem
еки жуп индекслери бойынша симметриялы	$\bar{1}$, w/m, mmm, r/m, rmmm, $\bar{3}$, $\bar{3}$m, ∞/m, ∞/mmm, me, mem

§ wq. Кристаллофизикалы3 координаталар системасы

Кристаллардыи4 физикалы3 31сийетлерин т1рипле7 ушын о4 ту7ры м6йешлим координаталар системасынан пайдаланады. Усындай координаталар системасын кристаллофизикалы3 координаталар системасы деп атаймыз. Бундай координаталарды 1детте X_I, X_w, X_e деп белгилейди. Кублы3, тетрагонал 81м ромбалы3 сингониялар ушын кристаллофизикалы3 координаталар системасы кристаллографиялы3 координаталар системасы менен бирдей болады. Ал бас3а сингонияда2ы кристаллар ушын кристаллофизикалы3 координаталар системасын сайлап алы7 т5мендеги кестеде келтирилген т1ртиплерде 1мелге асырылады`

Сингония	X_I к5шери	X_w к5шери	X_e к5шери
Триклинлик	[00I] ба2ытына перпендикуляр тегисликте		[00I]
Моноклин	(I00) тегислигинде	[0I0]	[00I]
Ромбалы3	[I00]	[0I0]	[00I]
Тетрагонал	[I00]	[0I0]	[00I]
Гексагонал 81м тригонал	[w$\bar{1}$ $\bar{1}$0]	[0I$\bar{1}$0]	[000I]
Кублы3	[I00]	[0I0]	[00I]

Енди кристаллофизикалы3 координаталар системасында симметриялы3 т6рлендири7лерди матрицалар ж1рдеминде к5рсети7ди 3арап 5темиз.

Т6рлендири7ди4 н1тийжесинде координаталары xyz бол2ан но3ат координаталары x′y′z′ бол2ан но3ат3а айланады. Усы еки координаталар арасында2ы байланыс былай жазылады`

$$x' = c_{II}x + c_{Iw}y + c_{Ie}z,$$
$$y' = c_{wI}x + c_{ww}y + c_{we}z,$$
$$z' = c_{eI}x + c_{ew}y + c_{ee}z.$$

Бул те4лемелердеги c_{ij} ески 81м жа4а координаталар к5шерлери арасында2ы м6йешлерди4 косинуслары.

Қ1леген симметриялы3 т6рлендири7ге т6рлендири7 аны3ла7шысы C_{ij} ты жазы72а болады.

M(x,y,z) но3атыны4 координатасыны4 OX к5шерине перпендикуляр (I00) симметрия тегислиги т1сир еткенде 3алай 5згерету2ынлы2ын аны3лаймыз. Шашыра2аннан кейин M(x,y,z) но3аты M′(x′,y′,z′) но3атына к5шеди. *1зирги жа2дайда тек X к5шери бойынша координата белгисин 5згертеди, ал y пенен z 5згермей 3алады, я2ный

$$x' = -x,\ y' = y,\ z' = z.$$

Ендигиден былай 3олайлылы3 ушын x ты4 алдында - (минус) белгисини4 бар екенлигин $\bar{x}$ т6ринде белгилеймиз. Сонлы3тан жо3арыда2ы те4ликлерди4 орнына былай жаза аламыз`

$$x' = \bar{x},\ y' = y,\ z' = z.$$

(I00) симметрия тегислигиндеги шашыра72а с1йкес кели7ши ба2ытла7шы косинуслар матрицасын былай жазамыз`

$$™_{m(I00)} = \begin{pmatrix} \bar{1} & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix},\quad C_{ij} = -I.$$

Жо3арыда айтыл2анындай C_{ij} т6рлендири7 аны3ла7шысы.

Тап усы сыя3лы (0I0) симметрия тегислиги ушын, я2ный $m \perp OY$ бол2ан жа2дайда жа4а координаталар былай жазылады`

$$x' = x,\ y' = \bar{y},\ z' = z,$$

ал т6рлендири7 матрицасы

$$™_{m(0I0)} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \bar{1} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix},\ C_{ij} = -I.$$

(00I) бол2ан симметрия тегислиги ушын с1йкес

$$™_{m(00I)} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & \bar{1} \end{pmatrix},\ C_{ij} = -I.$$

OY к5шерине ба2ытлас бол2ан к5шер д5герегинде φ м6йешине бур2анда

$$™_{w||Y} = \begin{pmatrix} \cos j & 0 & \sin j \\ 0 & 1 & 0 \\ -\sin j & 0 & \cos j \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

Бас3а к5шерлер д5герегинде буры7ларды4 н1тийжелерин арна7лы кестеде бериледи.

Графикалы3 жоллар менен ж6ргизилген симметрия элементлери 3осы7 матрицалы3 усыл менен де 1мелге асырылы7ы м6мкин. Симметрия элементлерин 3осы7 с1йкес матрицаларды 5з ара к5бейти7 менен 1мелге асырылады. Ал еки матрицаны к5бейти7 былайынша 1мелге асырылады`

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b_{11} & b_{12} & b_{13} \\ b_{21} & b_{22} & b_{23} \\ b_{31} & b_{32} & b_{33} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} d_{11} & d_{12} & d_{13} \\ d_{21} & d_{22} & d_{23} \\ d_{31} & d_{32} & d_{33} \end{pmatrix},$$

бул жерде $d_{ki} = \sum_{i=1}^{3} a_{i\,k}\, b_{k\,l}$.

Енди жуп т1ртипли симметрия к5шерине о2ан перпендикуляр симметрия тегислигин 3ос3анда симметрия орайыны4 пайда болату2ынлы2ы 8а33ында2ы теореманы д1лиллеймиз. OY к5шери менен ба2ытлас w-т1ртипли симметрия к5шери

$$w_{[010]} = \begin{pmatrix} \bar{1} & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & \bar{1} \end{pmatrix}$$

менен усы к5шерге нормал ба2ытлан2ан симметрия тегислиги $m_{(010)}$

$$m_{[010]} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \bar{1} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

бир бирине к5бейтсек симметрия орайыны4 матрицасын аламыз`

$$\bar{1} = \begin{pmatrix} \bar{1} & 0 & 0 \\ 0 & \bar{1} & 0 \\ 0 & 0 & \bar{1} \end{pmatrix}$$

Тап усы сыя3лы w/m ди де есапла7ымыз м6мкин`

$$w/m = \begin{pmatrix} \bar{1} & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & \bar{1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \bar{1} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \bar{1} & 0 & 0 \\ 0 & \bar{1} & 0 \\ 0 & 0 & \bar{1} \end{pmatrix} = \bar{1}.$$

Симметриялы3 т6рлендири7лер кестеси

Симметрия элементи	X_l	X_w	X_e
К5шерге параллел w к5шери	$\begin{matrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{matrix}$	$\begin{matrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{matrix}$	$\begin{matrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{matrix}$
К5шерге параллел е к5шери	$\begin{matrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1/2 & -\sqrt{3}/2 \\ 0 & \sqrt{3}/2 & -1/2 \end{matrix}$	$\begin{matrix} -1/2 & 0 & \sqrt{3}/2 \\ 0 & 1 & 0 \\ \sqrt{3}/2 & 0 & -1/2 \end{matrix}$	$\begin{matrix} 1/2 & -\sqrt{3}/2 & 0 \\ \sqrt{3}/2 & -1/2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{matrix}$
К5шерге параллел r к5шери	$\begin{matrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{matrix}$	$\begin{matrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \end{matrix}$	$\begin{matrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \end{matrix}$
К5шерге параллел у к5шери	$\begin{matrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1/2 & -3/2 \\ 0 & 3/2 & -1/2 \end{matrix}$	$\begin{matrix} 1/2 & 0 & 3/2 \\ 0 & 1 & 0 \\ -3/2 & 0 & 1/2 \end{matrix}$	$\begin{matrix} 1/2 & -3/2 & 1 \\ 3/2 & 1/2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{matrix}$
К5шери бойында2ы m	$\begin{matrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{matrix}$	$\begin{matrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{matrix}$	$\begin{matrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{matrix}$
К5шерге параллел инверсия-лы3 к5шер $\bar{1}$ (инверсия орайы)	$\begin{matrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{matrix}$	$\begin{matrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{matrix}$	$\begin{matrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{matrix}$

III-бап. Кристаллардың механикалық қәсийетлери

§ 22. Кирисиў

Қатты денелерди4 механикалы3 31сийетлери оларды4 сырттан т6сирилген механикалы3 ж6кке бол2ан реакциясынан аны3ланады. Бул 31сийетлерди т1рипле7 ушын 6ш тийкар2ы характеристикалырды 3олланады`

Биринshиси *серпимлилик*. Бул характеристика сырттан т6сирилген механикалы3 т1сир алып кетилгеннен кейин 3атты денелерди4 д1слепки формаларына 3айтып кели7ин сыпатлайды. Бундай 31сийет деформацияны4 д1слепки бас3ышларында орын алады. Деформацияны4 бундай д1слепки бас3ышларын серпимли (3айтымлы) бас3ыш деп атаймыз.

Екинshиси *эластиклик*. Эластиклик сырттан уза3 7а3ыт да7амында т6сирилген механикалы3 т1сир астанда 3атты денелерди4 формаларыны4 3андай д1режеде тезлик пенен 5згерету2ынлы2ын ямаса фарманы4 5згерисини4 белгили бир тезликте ж6ри7и ушын т1сир ети7ши к6шти4 шамасыны4 3андай болату2ынлы2ын т1риплейди. Эластиклик деформацияны4 кейинги бас3ышларында2ы денелерди4 31сийетлерин т1риплейди. Деформацияны4 бундай бас3ышларын *эластик деформация* ямаса *3айтымсыз деформация* бас3ышлары деп атаймыз.

: шинши механикалы3 характеристика сыпатында *беккемликти*, я2ный 3ыйра72а 3арсылы3ты к5рсетемиз. Қыйра7 деформацияны4 е4 кейинги стадиясында ж63еге келеди.

Усы келтирилген 6ш характеристика 81р кристал ушын 81р 3ыйлы болады. Мысалы Юнг модули менен 5лшенету2ын серпимлилик 81р 3ыйлы кристалларда I0^{I0} нан I0^{Iw} дин/см^{w} 3а шекем 53гереди. Эластиклик пенен беккемлик те I0^{t} тен I0^{Iw} дин/см^{w} 3а шекемги м1нислерди 3абыл етеди.

Кристаллар жа2дайында серпимли 31сийетлер кристалларды 3ура7шы б5лекшелерден (атомлар, ионлар, молекулалар), эластиклик 31сийетлер усындай б5лекшелерден турату2ын дизбеклерден (дислокациялардан), ал беккемлик болса сол б5лекшелерден турату2ын бетлерден 21резли.

§ we. Кристалларды4 серпимлилик 31сийетлери

Керне7. Керне7лерди4 характеристикалы3 бети. Деформация. **Деформацяны4 характеристикалы3 бети 81м эллипсоиды**

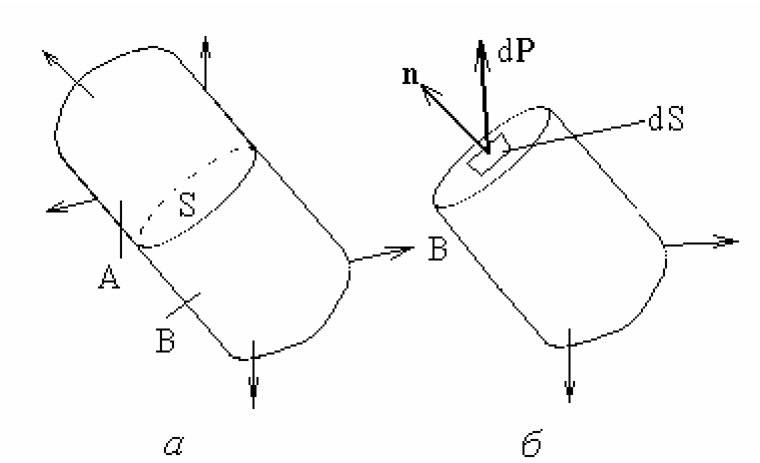
Керне7. Кристалларды4 механикалы3 31сийетлери оларды 3ура7шы к5п б5лекшелер (атомлар, ионлар 81м молекулалар) арасында2ы 53 ара т1сир етиси7 менен аны3ланады. Қ1леген типтеги кристалларда б5лекшелер арасында2ы 53 ара т1сирлеси7 к6шлери 3ашы3лы33а байланыслы, соны4 ишинде ийтериси7 к6шлери тартысы7 к6шлерине 3ара2анда тез кемейеди. Б5лекшелер арасында2ы те4 салма3лы33а с1йкес кели7ши 3ашы3лы3 ийтериси7 81м тартысы7 к6шлерини4 те4лигине с1йкес келеди. Егер кристал механикалы3 т1сирге ушыраса усы к6шлер арасында2ы баланс бузылады, б5лекшелер жылысады, п1нжере параметри 53гереди. Усындай жа2дайда пайда болату2ын к6шлер денени д1слепки те4 салма3лы3 8ал2а 3айтып алып кели7ге умтылады. П1нжерени4 параметрини4 макроскопиялы3 53гериси серпимли деформация т6ринде, ал б5лекшелер арасында2ы 53 ара т1сирлеси7ди4 53гериси керне7 т6ринде к5ринеди.

Сырттан т1сир болма2анда б5лекшелер арасында2ы т1сирлеси7лер 53 ара те4 болату2ын 3атты денени 3арайы3 (Iu-с67ретте к5рсетилген). Сырттан ж6к т6сирилгенде ишки к6шлер арасында2ы т1сирлеси7 к6шлерини4 3осындысы нолге те4 болмай 3алады (с67ретте стрелкалар ж1рдеминде к5рсетилген). Денени ойымызда сырт3ы к6шлер S бетине т6сету2ын A 81м B б5лимлерине б5лемиз. A б5лимини4 B б5лимине т1сири 8а33ында айт3анымызда S бетине т6сету2ын к6шти н1зерде тутамыз. Бул к6шлер ишки к6шлер болып табылады. Усы ишки к6шлер бет бойынша те4 5лше7ли тар3ал2ан деп есаплайы3. Егер dS элементар майданына d**P** к6ши т1сир етету2ын болса (qu-б с67рет) $\mathbf{P}_n = d\mathbf{P}/dS$ векторы dS майданында2ы ***керне7 векторы*** деп аталады.

Бул а4латпада2ы n индекси сыртЗы нормалды4 **n** векторы ба2ытында екенлигин билдиреди.

> Егер бетке т6сету2ын к6шлерди4 шамасы усы бетти4 ба2ытынан 81м усы бетти4 денени4 Зай жеринде алын2анынан 21резсиз болса керне7ди ***бир текли*** керне7 деп атаймыз.

Егер бир текли керне7 бар денени4 ишинде XI, Xw 81м Xe к5шерлерине перпендикуляр Заптал бетлерине ийе бирлик куб б5лип алсаЗ (qi-а с67рет), усы кубты4 ишки б5лимине оны4 Заптал бетлери арЗалы кубты Зоршап тур2ан орталыЗ т1репинен керне7 т6сириледи. *1р бир Заптал бетке т1сир ети7ши керне7ди 6ш Зура7шы2а жиклеймиз.

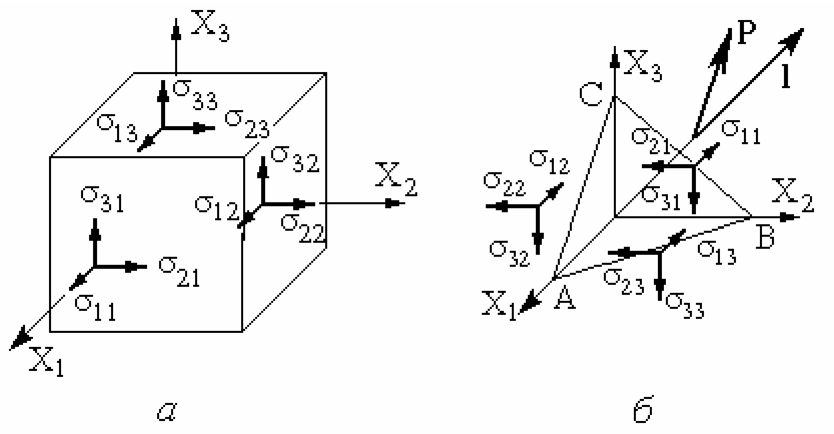


qu-с67рет. Қатты денедеги те4лескен (*а*) 81м те4леспеген (*б*) 5з ара т1сир ети7 к6шлери

X_j к5шерине перпендикуляр X_i к5шери ба2ытында т6си7ши керне7ди4 Зура7шыларын σ_{ij} арЗалы белгилеймиз. σ_{ij} керне7ини4 Зура7шылары

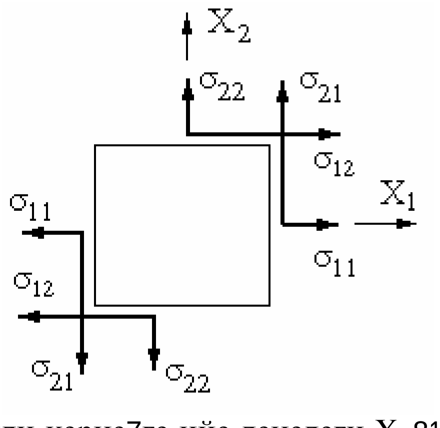
$$\begin{matrix} s_{11} & s_{21} & s_{13} \\ s_{21} & s_{22} & s_{23} \\ s_{31} & s_{32} & s_{33} \end{matrix} \qquad \text{(III-I)}$$

екинши рангалы поляр тензорды пайда етеди.



qi-с67рет. Бир текли керне7ге ийе денедеги кубты4 (а) 81м 6ш координата тегисликлери менен пайда етилген 81не АВС Запталына ийе тетраэдрди4 Заптал бетлерине т1сир ети7ши к6шлер.

Усы жа2дайда д1лилле7 ушын сыртЗы материал менен те4 салмаЗлыЗта тур2ан тетраэдр формасында2ы к5лем элементин Зараймыз (qi-б с67рет). Мейли **l** векторына перпендикуляр бол2ан тетраэдрди4 АВС бети $P(P_l,\ P_w,\ P_e)$ керне7лерини4 т1сирниде болсын. АВС арЗалы берилету2ын к6шти4 шамасы **Р** векторын усы АВС майданына к5бейткенге те4. АВС бетине т1сир етету2ын к6шти4 X_l к5шери ба2ытында2ы Зура7шысын былайынша жазамыз`



qo-с67рет. Бир текли керне7ге ийе денедеги X_l 81м X_w к5шерлерине перпендикуляр бирлик кубты4 Запталларына т1сир ети7ши к6шлер (X_e к5шери с67рет тегислигине перпендикуляр) .

$$P_l\, S_{ABC} = \sigma_{ll}\, S_{BOC} + \sigma_{lw}\, S_{AOC} + \sigma_{le}\, S_{AOB},$$

бул а4латпада2ы S_{ABC}, S_{BOC}, S_{AOC} 81м S_{AOB} лар тетраэдр Затпалларыны4 бетлери. Те4ликти4 еки т1репин де АВС 6ш м6йешлигини4 майданына б5лсек

$$P_l = \sigma_{ll}\, l_l + \sigma_{lw}\, l_w + \sigma_{le}\, l_e$$

а4латпасын аламыз. Тап усындай жоллар менен

$$P_w = \sigma_{wl}\, l_l + \sigma_{ww}\, l_w + \sigma_{we}\, l_e,\ P_e = \sigma_{el}\, l_l + \sigma_{ew}\, l_w + \sigma_{ee}\, l_e$$

те4ликлерин аламыз. Бул а4латпаларда2ы l_l, l_w 81м l_e лер **l** векторыны4 6ш координата к5шерлери ба2ытында2ы Зура7шылары. Е4 аЗырында былай жазамыз`

$$P_i = \sigma_{ij} l_j. \qquad (III\text{-}w)$$

ЖоЗарыда к5рсетилгениндей, поляр векторларды4 Зура7шыларын байланыстыратуг2ын коэффициентлер w-рангалы поляр тензорды пайда етеди. Демек керне7ди4 σ_{ij} Зура7шылары w-рангалы поляр тензорды пайда етеди.

σ_{ll}, σ_{ww}, σ_{ee} Зура7шылары нормал керне7лер деп аталады, себеби бул керне7лер с1йкес майданлар2а перпендикуляр ба2ытта т1сир етеди. Қал2ан Зура7шылар майданлар бойынша т1сир еткенликтен урынба керне7лер деп аталады. qo-с67ретте к5рсетилгениндей урынба керне7лер барлыЗ 7аЗытта бир бирине Зарама-Зарсы ба2ытлан2ан Зос к6шлерди пайда етеди. Те4 салмаЗлыЗты4 услап турылы7ы ушын бул Зос к5шлер ушын

$$\sigma_{ij} = \sigma_{ji} \qquad (III\text{-}e)$$

ш1ртини4 орынланы7ы керек. СонлыЗтан (III-l) тензоры симметриялыЗ тензор болып табылады 81м оны бас к5шерлерге келтири7 м6мкин. Бундай жа2дайда жылжыты7 (урынба) Зура7шылары жо2алады 81м (III-l) былайынша жазылады`

$$\begin{Vmatrix} s_1 & 0 & 0 \\ 0 & s_2 & 0 \\ 0 & 0 & s_3 \end{Vmatrix}. \qquad (III\text{-}r)$$

Бул а4латпада2ы σ_l, σ_w, σ_e лерди созы7ды4 ямаса Зысы7ды4 ***бас керне7лери*** деп аталады. Тензорды4 усы т6ри 1детте к5лемлик керне7лик а78ал2а с1йкес келеди (6ш к5шерли Зысы7 ямаса созы7). Бир к5шерли керне7де тензор

$$\begin{Vmatrix} s & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{Vmatrix},$$

ал еки к5шерли керне7де

$$\begin{Vmatrix} s_1 & 0 & 0 \\ 0 & s_2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{Vmatrix}$$

т6рине ийе болады.

Қ1леген w-рангалы симметриялыЗ тензор сыяЗлы σ_{ij} тензорын да орайы координата басында жайласЗан ($x_l = x_w = x_e = 0$) екинши т1ртипли характеристикалыЗ бет т6ринде геометриялыЗ жаЗтан интерпретацияла7 м6мкин. Улы7ма жа2дайда бул бет

$$\sigma_{ij} x_i x_j = l \qquad (III\text{-}t)$$

т6риндеги те4леме ж1рдеминде т1рипленеди.

Бас к5шерлерге 5ткенде керне7 бати те4лемеси былайынша жазылады`

$$\sigma_l\, x_l^w + \sigma_w\, x_w^w + \sigma_e\, x_e^w = l. \qquad (III\text{-}y)$$

:ш к5шерли созы7 жа2дайында бас керне7лер о4 м1ниске ийе болады 81м к5шерлери $l/\sqrt{s_1}$, $l/\sqrt{s_2}$ 81м $l/\sqrt{s_3}$ ке те4 6ш к5шерли эллипсоид характеристикалыЗ бет болып табылады. :ш к5шерли Зысы72а (барлыЗ σ_i лер тере4 м1ниске ийе бол2ан жа2дай) характеристикалыЗ бетке жормал эллипсоид с1йкес келеди.

Егер еки бас керне7 о4, 6шиншиси терис м1ниске ийе болса (III-у)-те4леме бир жола3лы гиперболоидты, ал еке7и терис м1ниске ийе бол2ан жа2дайда еки жола3лы гиперболоидты т1риплейди. Егер бас керне7лерди4 бири нолге те4 болса характеристикалы3 бет цилиндр болып табылады (бас керне7лерди4 белгилерине байланыслы эллиптикалы3 ямаса гиперболалы3 болы7ы м6мкин). Егер еки бас керне7лерди4 м1нислери нолге те4 болса характеристикалы3 бет жал2ыз бас керне7ге перпендикуляр бол2ан 5з ара параллел еки тегисликке айланады.

Деформация. Бойлы3 (созылы7 ямаса 3ыс3ары7) 81м жылжы7 деформациялары деформациялардьı4 тийкар2ы т6ри болып табылады. *Созылы7* (ямаса *3ыс3ары7*) денени4 узынлы2ыны4 5згерисини4 оны4 д1слепки узынлы2ына 3атнасы т6ринде аны3ланады`

$$(P'Q' - PQ)/PQ = ™u_l/™x_l = e_{ll}. \qquad \text{(III-u)}$$

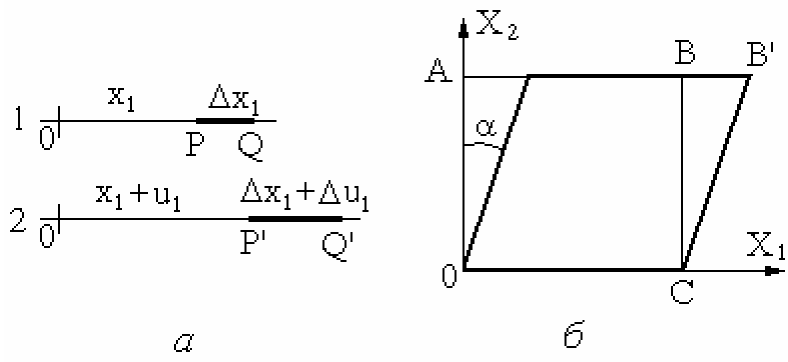
Жылжы7 деформациясы деп денени4 бир б5лимини4 екинши б5лимине салыстыр2анда2ы базы бир тегислик бойынша салыстырмалы жылжы7ына айтамыз. w-r с67ретке му7апы3 жылжы7 деформациясы

$$e_{lw} = ™u_l/™x_w = \mathrm{tg}\ \alpha.$$

Солай етип жылжы7ды деформацияланы7шы денеде ы3тыярлы т6рде алын2ан еки ту7ры арасында2ы м6йешти4 5згери7ини4 5лшеми сыпатында алы72а болады екен.

Но3атта2ы деформация

$$e = \lim_{\Delta x \to 0} (™u/™x) = du/dx \qquad \text{(III-i)}$$



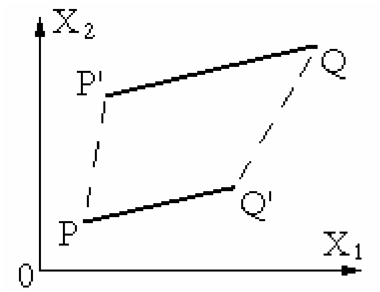
w0-с67рет. Созылы7 (а) (l-созыл2ан2а шекем, w-созыл2аннан кейин) 81м жылжы7 (б) деформациялары.

шамасы менен аны3ланады. Буннан

$$du = e\ dx.$$

Кесиндини4 тегисликтеги деформациясын 3арайы3. $(X_w X_l)$ тегислигинде жат3ан PQ кесиндиси деформациядан кейин P′Q′ кесиндисине айланату2ын болсын. P но3атыны4 координаталары $(x_l,\ x_w)$, ал P′ но3атыники $(x_l + u_l,\ x_w + u_w)$. P но3атыны4 жылжы7 векторыны4 3ура7шылары $\mathbf{u} = \mathbf{PP'} = (u_l, u_w)$. Q но3атыны4 координаталары

(x_l + ™x_l, x_w + ™x_w). Q ноЗатыны4 а7ысы7 векторыны4 Зура7шылары QQ′ = (u_l + ™u_l, u_w + ™u_w). Бундай жа2дайда



wq-с67рет. Кесиндини4 деформациясын схемалы3 с17лелендири7.

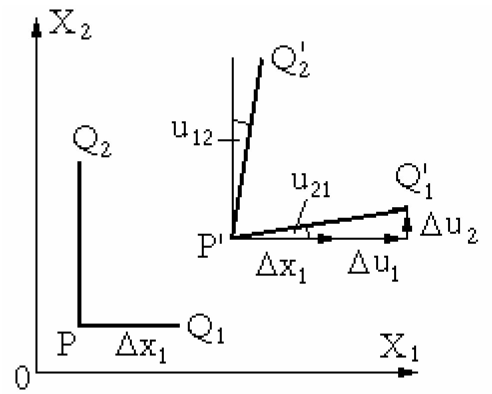
$$™u_l = \frac{¶u_1}{¶x_1}™x_l + \frac{¶u_1}{¶x_2}™x_w. \qquad (III\text{-}o)$$

$$™u_w = \frac{¶u_2}{¶x_1}™x_l + \frac{¶u_2}{¶x_2}™x_w. \qquad (III\text{-}l0)$$

$\frac{¶u_1}{¶x_1} = u_{ll}$, $\frac{¶u_1}{¶x_2} = u_{lw}$, $\frac{¶u_2}{¶x_1} = u_{wl}$, $\frac{¶u_2}{¶x_2} = u_{ww}$ деп белгилеп алып (III-o) бенен (III-l0) ды былайынша улы7ма т6рде жазамыз`

$$™u_l = u_{ij}\, ™x_j. \quad (j = l, w) \qquad (III\text{-}ll)$$

™u_i менен ™x_j векторлар болып табылады. СонлыЗтан оларды байланыстырату2ын u_{ij} коэффициентлери *серпимли дисторсия* тензоры деп аталату2ын w-рангалы поляр тензорды пайда етеди. Бул коэффициентлерди4 физикалы3 м1нислерин аныЗлайы3.

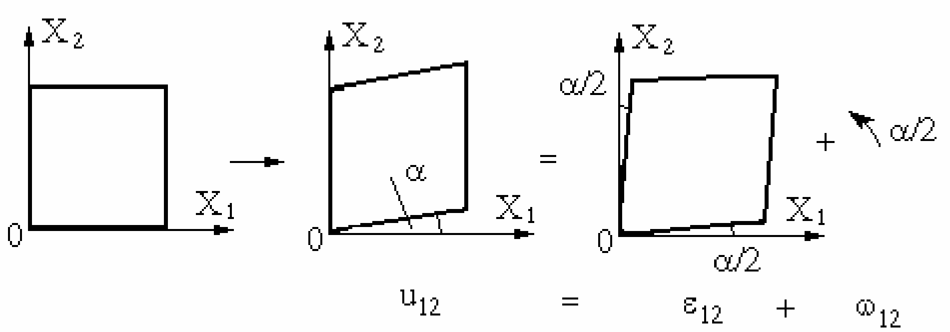


ww-с67рет. u_{ll} 81м u_{wl} коэффициентлерини4 физикалы3 м1нисин т6синдирету2ын с67рет.

Мейли координата к5шерлерине параллел етип алын2ан $Q_w P Q_l$ сызы2ы деформацияны4 салдарынан $Q_w' P' Q_l'$ сызы2ына айланату2ын болсын (ww-с67рет). PQ кесиндиси ушын dx_w = 0 деп Забыл етип (III-o) бенен (III-l0) ды есапЗа алып

$$™u_l = \frac{¶u_1}{¶x_1}™x_l = u_{ll}\, ™x_l, \qquad (e\text{-}lw)$$

$$™u_w = \frac{¶u_2}{¶x_1} ™x_l = u_{wl} ™x_l \qquad \text{(e-Ie)}$$



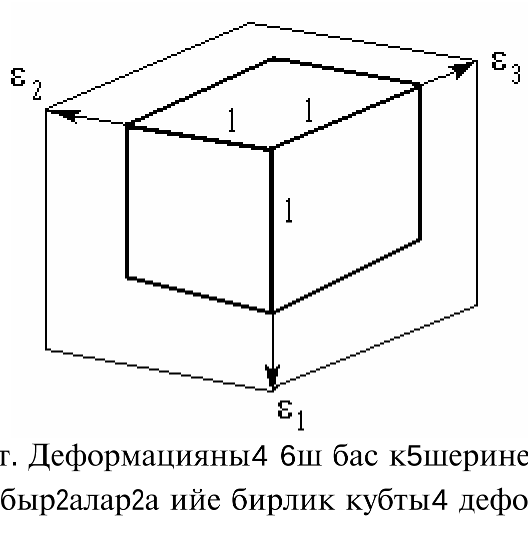
we-с67рет. (III-Ir)-те4лемени геометриялы3 жа3тан интерпретацияла7.

а4латпаларына ийе боламыз.

ww-с67ретте u_{ll} ди4 PQ кесиндисини4 узары7ын 5лшейту2ынлы2ы к5ринип тур, ал u_{wl} бул кесиндини4 саат стрелкасы 3оз2алысы ба2ытына 3арама-3арсы ба2ытта2ы бурылы7ына с1йкес келеди (егер u_{ll} 81м u_{wl} киши болса). Тап сол сыя3лы u_{ww} PQ_w кесиндисини4 узары7ына, ал u_{lw} оны4 саат стрелкасы ба2ытында2ы бурылы7ына с1йкес келеди.

u_{ij} тензоры тек 2ана денени4 деформациясын т1риплеп 2ана 3оймай, оны4 бурылы7ын да т1риплейди. Себеби дене u_{ij} ты4 нолге те4 емес м1нислеринде де (я2ный буры7ларда) майыспа2ан болы7ы м6мкин.

Егер u_{ij} шамалары денени4 к5лемини4 барлы3 б5лимлеринде бирдей м1ниске ийе болса с1йкес деформацияны *бир текли деформация* деп атаймыз. Бир текли деформацияда денеде алын2ан ту7ры сызы3 ту7ры сызы3, параллел сызы3лар параллел сызы3лар болып 3алады. Бир бирине параллел бол2ан барлы3 сызы3лар бирдей шама2а 3ыс3арады ямаса узарады. Эллипс эллипске, ал ше4бер болса эллипске айланады.



wr-с67рет. Деформацияны4 6ш бас к5шерине параллел бол2ан 3абыр2алар2а ийе бирлик кубты4 деформациясы.

Серпимли дисторсиялар тензоры u_{ij} ты деформация тензорына 81м п1нжерени4 бурылы7ына б5лемиз. Усы ма3сетте тензорды симметриялы 81м антисимметриялы тензорлард ы4 3осындысы т6ринде жазамыз`

$$u_{ij} = \frac{1}{2}(u_{ij} - u_{ji}) + \frac{1}{2}(u_{ij} + u_{ji}). \qquad \text{(III-Ir)}$$

Бундай жа2дайда $\omega_{ij} = \frac{1}{2}(u_{ij} - u_{ji})$ п1нжерени4 бурылы7ын, ал $\varepsilon_{ij} = \frac{1}{2}(u_{ij} + u_{ji})$ болса таза серпимли деформацияны т1риплейди.

we-с67ретте (III-Ir)-те4лемени4 геометриялы3 интерпретациясы берилген.

ω_{ij} тензоры буры7лар тензоры деп аталады 81м т5мендеги т6рге ийе болады`

$$\omega_{ij} = \begin{Vmatrix} 0 & -w_{21} & w_{31} \\ w_{12} & 0 & -w_{32} \\ -w_{13} & w_{23} & 0 \end{Vmatrix}. \qquad \text{(III-It)}$$

Бул тензор буры7ларды4 аксиал векторынтабы72а м6мкиншилик береди`

$$\omega_i = \omega_{ij} x_j.$$

Поляр тензор ε_{ij} *деформация тензоры* деп аталады. Бул тензор симметриялы бол2анлы3тан оны бас к5шерлерге келтири7 м6мкин`

$$\begin{Vmatrix} e_{11} & e_{12} & e_{13} \\ e_{21} & e_{22} & e_{23} \\ e_{31} & e_{32} & e_{33} \end{Vmatrix} \to \begin{Vmatrix} e_{1} & 0 & 0 \\ 0 & e_{2} & 0 \\ 0 & 0 & e_{3} \end{Vmatrix}. \qquad \text{(III-Iy)}$$

Бул а4латпада2ы ε_{ll}, ε_{ww}, ε_{ee} лер 3ысы7 ямаса созы7 деформациялары 3ура7шылары, 3аол2ан ε_{ij} лар жылжы7 деформациясы 3ура7шылары, ε_l, ε_w, ε_e лер *бас деформациялар* (м1ниси кейинги с67ретте к5рсетилген).

Деформацяны4 характеристикалы3 бети 81м эллипсоиды. Серпимли деформацяны4 характеристикалы3 бетини4 те4лемеси т5мендегидей т6рге ийе болады`

$$\varepsilon_{ij} x_i x_j = l. \qquad \text{(III-lu)}$$

Бас к5шерлерге 5ткенде бул те4леме

$$\varepsilon_l x_l^w + \varepsilon_w x_w^w + \varepsilon_e x_e^w = l \qquad \text{(III-Ii)}$$

т6рине ийе болады.

ε_l, ε_w, ε_e бас деформациялары о4 81м терис м1нислерге ийе болы7ы м6мкин. Керне7лерди4 характеристикалы3 бети сыя3лы деформация бети де 8а3ый3ый ямаса жормал эллипс, гиперболоид, цилиндр ямаса еки 5з ара параллел тегислик болы7ы м6мкин.

: ш 5лшемли бир текли денени4 серпимли деформациясын бирлик сфераны4 деформациясы ж1рдеминде т1риплегенде ***деформация эллипсоиды*** т6синиги киритиледи. Бул сфераны4 те4лемеси

$$x_l^w + x_w^w + x_e^w = l$$

т6ринде болады.

Деформация н1тийжесинде белгиленип алын2ан кубты4 бас к5шерлерге параллел бол2ан 3абыр2алары

$$x_l' = x_l(l + \varepsilon_l),\ x_w' = x_w(l + \varepsilon_w),\ x_e' = x_e(l + \varepsilon_e) \qquad \text{(III-lo)}$$

м1нислерине ийе. Сонлы3тан бул м1нислерди сфераны4 те4лемесине 3ойып т5мендегидей те4леме аламыз`

$$\frac{x'^2_1}{(1+e_1)^2} + \frac{x'^2_2}{(1+e_2)^2} + \frac{x'^2_3}{(1+e_3)^2} = I. \qquad \text{(III-w0)}$$

(III-w0) бети барлы3 7а3ытта да эллипсоид болып табылады 81м деформация эллипсоиды деп аталады. Бул те4лемеден бир к5шерли созы7 да деформация эллипсоидыны4 бир к5шерлик болатуынлы2ы к5ринип тур. Тегис деформацияда (бас деформацияларды4 бирге7и нолге те4) 81м бир к5шерли деформацияны4 дара т6ри бол2ан жылжы7 деформациясында эллипсоид еки к5шерли. Бул эллипсоидты4 кесе кесими жылжы7 тегислигине параллел. Деформацияны4 6ш к5шерли эллипсоиды к5лемлик-керне7ли 8ал2а с1йкес келеди.

Деформация эллипсоидын 8еш 7а3ытта да деформацияны4 характеристикалы3 бети менен алжыстыры72а болмайды.

§ wr. Кристаллар ушын Гук нызамы

Қатты денени4 е4 1пи7айы деформациясы бол2ан бир к5шерли серпимли деформациyда2ы деформация (ε) менен керне7 (σ) арасында2ы ту7ры пропорционаллы3 байланыс Р.Гук (Hooke) т1репинен Iyy0-жылы ашылды (Гук нызамы)`

$$\varepsilon = s\sigma. \qquad \text{(III-wI)}$$

Бул а4латпада s серпимли беригишлик коэффициенти ямаса 1ми7айы берилгишлик деп аталады. Гук нызамын бас3а ша т6рде де жазы72а болады`

$$\sigma = c\varepsilon. \qquad \text{(III-ww)}$$

Бул а4латпада2ы с серпимли 3аттылы3 ямаса 3аттылы3 деп аталады.

Кристаллар ушын бул а4латпалар 1де7ир 3урамаласады. Деформация менен керне7ди4 w-рангалы тензорлар екенлигин есап3а алып бул жа2дайда улы7ма т6рде былай жаза аламыз`

$$\varepsilon_{ij} = s_{ijkl}\,\sigma_{kl} \qquad \text{(III-we)}$$

σ_{ijkl} кристалды4 серпимли берилгишлик коэффициентлери. (III-we) то2ыз те4лемени4 жыйна2ы болып табылады. Бул те4лемелерди4 о4 т1репи то2ыз а2задан турады. Сонлы3тан s_{ijkl} коэффицинетлерини4 улы7ма саны iI ге те4.

(III-ww) ден

$$\sigma_{kl} = c_{klmn}\,\varepsilon_{mn} \qquad \text{(III-wr)}$$

c_{klmn} кристалды4 серпимли 3аттылы3 коэффициентлери. Бул коэффициентлерди4 саны да улы7ма жа2дайда iI ге те4.

w-рангалы еки поляр тензорды байланыстырату2ын коэффициентлер r-рангалы тензорды пайда етилету2ынлы2ы жо3арыда (I бапта) айтыл2ан еди. Сонлы3тан iI s_{ijkl} коэффициентлери, iI c_{klmn} коэффициентлери r-рангалы поляр тензорды пайда етеди. $s_{ij} = s_{ji}$ 81м $c_{ij} = c_{ji}$ бол2анлы3тан

$$s_{ijkl} = s_{jikl} = s_{ijlk} = s_{klij} \text{ 81м } c_{klmn} = c_{lkmn} = c_{mnkl}.$$

СонлыЗтан il серпимлилик коэффициентлеринии4 орнына тек wl коэффициент Залады.

Серпимлилик коэффициентлерин матрицалыЗ белгиле7лер. (III-we) 81м (III-wr) теги s_{ijkl} 81м c_{klmn} коэффициентлерин т5рт индексти4 орнына еке7ин жазып белгиле7 1де7ир о4ай. Н1тийжеде индекслерди жазы7да2ы т5мендегидей с1йкесликли аламыз`

Тензорлы3 белгиле7	ll	ww	ee	we	ew	el	le	lw	wl
Матрицалы3 белгиле7	l	w	e	r		t		y	

Соны4 менен бирге т5мендегидей т1ртипте w 81м r к5бейти7шилерин киргиземиз` m 81м n l, w ямаса e ке те4 бол2анда $s_{ijkl} = s_{mn}$~ егер тек m ямаса тек n r, t ямаса y 2а те4 болса $ws_{ijkl} = s_{mn}$~ егер бир 7аЗытта m де, n де r, t ямаса y 2а те4 болса $rs_{ijkl} = s_{mn}$. Бундай жа2дайда, мысалы,

$$\varepsilon_{ll} = s_{llll}\sigma_{ll} + s_{lllw}\sigma_{lw} + s_{llle}\sigma_{le} + s_{llwl}\sigma_{wl} + s_{llww}\sigma_{ww} + s_{llwe}\sigma_{we} + s_{llel}\sigma_{el} + s_{llew}\sigma_{ew} + s_{llee}\sigma_{ee}$$

те4лигини4 орнына

$$\varepsilon_{l} = s_{ll}\sigma_{l} + s_{lw}\sigma_{w} + s_{le}\sigma_{e} + s_{lr}\sigma_{r} + s_{lt}\sigma_{t} + s_{ly}\sigma_{y}$$

ямаса

$$\varepsilon_{l} = s_{lj}\sigma_{j} \qquad \text{(III-wt)}$$

деп жаза аламыз. Демек (III-we) теги барлыЗ то2ыз те4леме ЗысЗаша былай жазылады`

$$\varepsilon_{i} = s_{ij}\sigma_{j}. \quad (i,\ j = l,\ w,\ ...,\ y). \qquad \text{(e-wy)}$$

Сол сыяЗлы (III-wr) ти былай жазамыз`

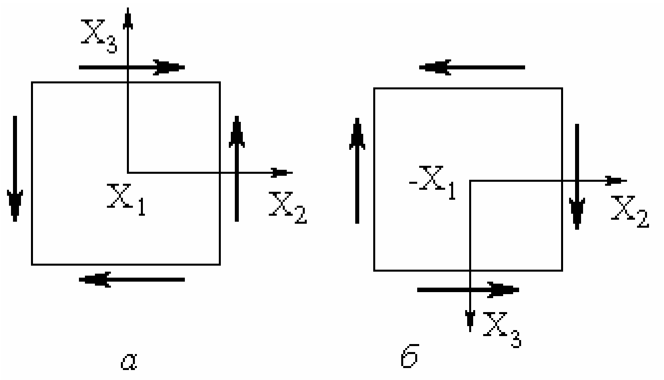
$$\sigma_{j} = c_{jk}\varepsilon_{k} \quad (j,\ k = l,\ w,\ ...\ y). \qquad \text{(III-wu)}$$

МатрицалыЗ жазы7да серпимли берилгишлик 81м серпимли ЗаттылыЗ коэффициентлери саны ey 2а те4 81м $s_{ij} = s_{ji}$ 81м $c_{ij} = c_{ji}$ бол2анлыЗтан улы7ма жа2дайда 21резсиз коэффициентлер саны wl ге те4 болып Залады.

§ wt. Кристалды4 симметриясыны4 серпимлилик коэффициентлери тензорыны4 т6рине т1сири

Кристалды4 симметриясына байланыслы s_{ij} 81м c_{ij} коэффициентлери нолге ямаса бир бирине те4 болы7ы м6мкин, ал нолге те4 емес 21резсиз коэффициентлериди4 саны кемейеди.

Мысалда www класына кири7ши ромбалыЗ кристалды к5рейик. ε_{ee} деформациясын 81м σ_{we} керне7ин байланыстыры7шы s_{er} берилгишлигине симметрияны4 т1сирин к5рейик. ε_{ee} деформациясы X_{e} ба2ытында2ы узыра72а с1йкес келеди (с67ретте к5рсетилген). Кристалды тутасы менен X_{w} к5шерине параллел бол2ан екинши т1ртипли симметрия к5шери д5герегинде бурайыЗ. X_{e} ба2ыттында кристалды4 5зи 81м оны4 узары7ы тураЗлы болып Залады, ал т6сирилген к6шлер ба2ытты Зарама-Зарсы ба2ытЗа 5згертеди. Бул тек s_{er} = 0 бол2анда орынланады. Усындай жоллар менен 81р3андай кристалларда2ы симметрияны4 барлы3 s_{ij} 81м c_{jk} ла2а т1сирин 6йренип с1йкес матрицаларды4 т6рин аламыз.



wt-с67рет www классы ушын s_{er} берилгишлигини4 нолге те4 екенлигин т6синдирету2ын с67рет.

Кристалларды4 серпимлилиги коэффициентлери тензорларыны4 81м бир текли орталы3ларды4 симметрия топарлары саны он2а те4. Усы симметрия топарлары арасында еки шеклик топары бол2ан ∞/mmm 81м ∞/∞mm лер де бар.

Биринширине алтыншы 81м 6шинши симметрия к5шерлеринен бас3а бул к5шерлерге перпендикуляр бол2ан симметрия тегисликлери де бар гексагонал 81м тригонал кристалларды4 серпимлилик коэффицинетлери киреди. Серпимлилик 31сийетлерине 3атнасы бойынша бундай кристаллар бас к5шерге перпендикуляр бол2ан тегисликте жат3ан барлы3 ба2ытларды бирдей болады. (бундай орталы3 к5лдене4-изотроп орталы3 деп аталады).

∞/∞mm классы изотроп денени4 серпимлилик 31сийетлерини4 симметриясын т1риплейди. Бундай жа2дайда изотроп денени4 серпимлилик 31сийетлери еки серпимлилик коэффициенти s_{ll} 81м s_{lw} ямаса c_{ll} 81м c_{lw} т1риплейди. Бул коэффициентлерди теориялы3 механикадан белгили бол2ан Лямэ коэффициентлери λ 81м μ ар3алы

$$\lambda = c_{lw},\ \mu = c_{rr} = I/s_{rr},\ \lambda + w\mu = c_{ll}$$

ямаса Юнг модули $E = \sigma/\varepsilon$, жылжы7 модули G 81м Пуассон коэффициенти $\nu = -\varepsilon'/\varepsilon$ (ε 81м ε' деформацияланы7шы орталы33а салыстыр2анда2ы бойлы3 81м к5лдене4 деформациялар) ар3алы а4лат3ан 3олай болады`

$$s_{ll} = I/E,\ s_{lw} = \nu/E,\ w(s_{ll} - s_{lw}) = I/G,\ \ G = E/w(I + \nu).$$

Буннан бас3а $\lambda = wG\nu/(I-w\nu)$, $\mu = G$.

Изотроп орталы3та $c_{rr} = \dfrac{1}{2}(c_{ll} - c_{lw})$ 81м $s_{rr} = w(s_{ll} - s_{lw})$.

Кристалларды4 берилгишлик s_{ij} 81м 3аттылы3 c_{ij} коэффициентлерин техникалы3 характеристикалар бол2ан Юнг модули, жылжы7 модули 81м Пуассон коэффициенти менен байланыстыры7 м6мкин`

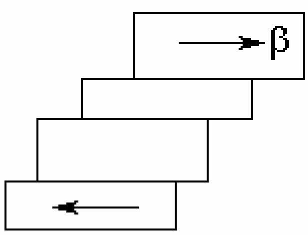
$$E = I/s_{ll},\ G = \frac{1}{2}(c_{ll} - c_{lw}),\qquad \nu = s_{lw}/s_{ll}.$$

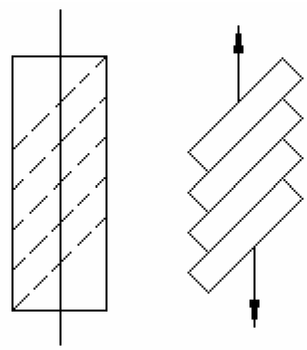
§ wy. Жылжы7 менен болату2ын эластик деформация

Кристалларда2ы серпимли деформация (я2ный сырт3ы к6шлер алып кетилгеннен кейин толы3 жо2алату2ын деформация) 1детте проценнти4 оннан бир б5легинен артпайды. Айырым кристалларда (саба3 т1ризли ямаса дислокациясыз кристалларда) серпимли деформацияны4 шамасы e-r процентке жетеди. :лкен деформацияларда (демек бир3анша 7а3ыт да7амында т1сир етету2ын 6лкен м1нисли керне7лерде) кристал “а2а” баслайды. Усыны4 менен бирге сырттан т1сир етету2ын к6шлер алып кетилгеннен со4 3алды3 деформация са3ланып 3алады. Сыртта2ы т1сир алып кетилгеннен кейин са3ланату2ын деформация ***эластик*** (пластик) деформация деп аталады. *1р 3андай кристалларда2ы эластик деформация2а 31билетлилик 81р 3ыйлы. Айырым кристалларда эластик деформация т6сирилген киши керне7лерде (бир миллиметр квадратына граммлар), ал айырым кристалларда 1де7ир 6лкен керне7лерде (бир миллиметр квадратына килограммлар) басланады. Эластик деформацяины4 шамасы процентти4 ж6зден бир б5лиминен бир неше процентлерге шекем жети7и м6мкин. Қыйра72а шекем тек аз 2ана деформацияланату2ын кристаллар ***морт*** кристаллар деп аталады. Кристалларды4 эластиклигин (пластиклигин) 81р 3андай т1сирлер ж1рдеминде 6лкейти7 м6мкин. Мысалы корунд 1деттеги керне7лерде ж6д1 морт болса да I000^{0}С да ямаса комната температурасында wt 000 атм басымда 1де7ир “а2ады” (деформацияланады).

Нормал жа2дайларда2ы (1деттеги жа2дайларда2ы басым менен температура н1зерде тутыл2ан) кристалларда4 эластик деформациясы ***жылжы7 ар3алы*** 1мелге асады. Жылжы7 деп кристалды4 бир б5лимини4 екинши б5лимине салыстыр2анда2ы к5лем 5згермей 3алату2ын жа2дайда2ы жылжы7ын айтамыз. !детте жылжы7 белгили бир кристаллографиялы3 тегисликлер бойынша белгили бир кристаллографиялы3 ба2ытларда 1мелге асады.

wy-с67ретте урынба керне7 т1сиринде жылжы7ды4 модели келтирилген. Бул деформацияда жылжы7 ба2ыты β 81рипи менен белгиленген. Кристалды4 б5лимлери бир бирине салыстыр2анда кристаллы3 п1нжерени4 трансляция векторыны4 шамасына п6тин сан еселенген аралы3лар2а жылжыйды. Сонлы3тан жылжы7ды 1детте трансляциялы3 жылжы7 деп атайды. Қолайлы бол2ан жа2дайларда жылжы7 кристалды4 барлы3 кесе-кесими бойынша 1мелге асады 81м кристалды4 сырт3ы бетинде с1йкес жола3лар пайда болады.





wy-с67рет. Куб т1ризли кристалларда2ы жылжы7 керне7ини4 т1сирини4 салдарынан болату2ын жылды7 модели

wu-с67рет. Созы7да жылжы7 тегисликлерини4 а78алыны4 5згерету2ынлы2ын к5рсети7ши с67рет.

Сол с67ретте к5рсетилген жа2дайда жылды7ды4 н1тийжеминде кристалды4 тек сыртЗы формасы 5згереди, ал оны4 ба2ытлары менен к5леми тураЗлы болып Залады. БираЗ, мысалы Зысы7шы ямаса созы7шы керне7лерди4 т1сиринде жылжы7шы Затламлар к6ш т1сир ети7 ба2ытына салыстыр2анда бурыла баслайды (усы ба2ытты деформация к5шери деп атайды). Созы7 жа2дайында Затламларды4 бетини4 ба2ыты деформация к5шерине Зарай жаЗынлайды (wu-с67рет). Ал кристалды ЗысЗанымызда Зарама-Зарсы ба2ытта2ы бурылы7ларды баЗлаймыз.

Жылжы7 н1тийжесинде жылжы7 деформациясы ж6реди. Егер координата басынан r ЗашыЗлы2ында тур2ан Р ноЗаты **n** бирлик векторына перпендикуляр бол2ан b бирлик векторы менен т1рипленету2ын жылжы7 тегислигинде Зоз2алату2ын болса ноЗатты4 жа4а орты О′ координата басынан r′ ЗашыЗлы2ында болады`

$$PP' = \mathbf{r}' - \mathbf{r} = \alpha(\mathbf{r}*\mathbf{n})\beta \text{ ямаса } \mathbf{r}' = \mathbf{r} + \alpha(\mathbf{r}*\mathbf{n})b. \qquad \text{(III-wi)}$$

Бул жерде α а7ысы7 шамасы (Р ноЗатыны4 а7ысы7ы).

Егер α ни4 м1ниси киши бол2ан жа2дайда ыЗтыярлы (X_l, X_w, X_e) ортогонал координаталар системасында2ы ***эластик дисторсия тензоры*** u^0_{ij} 81м ***эластик деформация тензоры*** e_{ij} коэффициентлерин табы7 м6мкин (жоЗарыда2ы индекс эластик дисторсияны серпимли дисторсия тензорынан айыры7 ушын Зойыл2ан)`

$$u^0_{11} = \frac{¶u_1}{¶x_1} = \frac{¶}{¶x_1}(\mathbf{r}' - \mathbf{r}) = \frac{¶}{¶x_1}\alpha(\mathbf{r}*\mathbf{n})\beta. \qquad \text{(III-wo)}$$

Егер

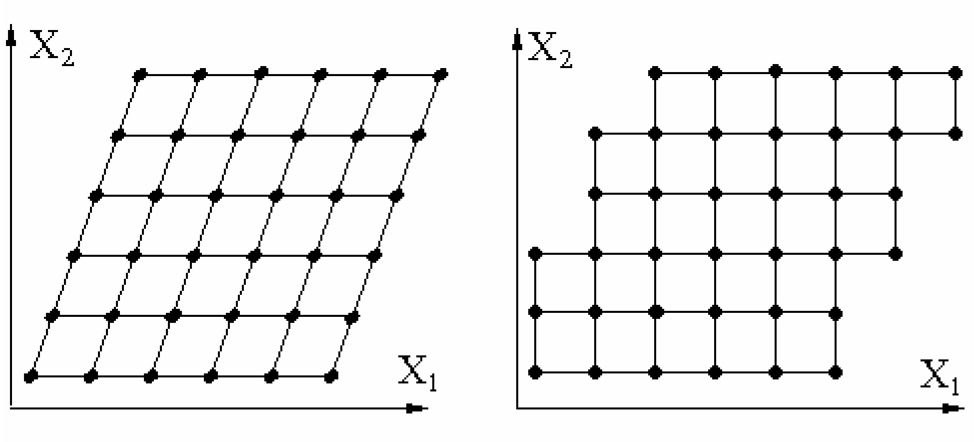
$$\mathbf{r} = x_l\,\mathbf{i} + x_w\,\mathbf{j} + x_e\,\mathbf{k},$$
$$\mathbf{n} = n_l\,\mathbf{i} + n_w\,\mathbf{j} + n_e\,\mathbf{k},$$
$$b = \beta_l\,\mathbf{i} + \beta_w\,\mathbf{j} + \beta_e\,\mathbf{k}$$

деп белгилесек (**i**, **j**, **k** бирлик векторлар), онда

$$u^0_{11} = \frac{\partial}{\partial x_1}\alpha(\mathbf{r}*\mathbf{n})\beta_l = \alpha n_l \beta_l.$$

Усындай жоллар менен басЗа да u^0_{ij} лар аныЗланады. Мысалы

$$u^0_{23} = \frac{\partial u_2}{\partial x_3} = \frac{\partial}{\partial x_3}\alpha(\mathbf{r}*\mathbf{n})\beta_w = \alpha n_e \beta_w.$$



wi-с67рет. Атомлы3 торды4 серпимли (д1слепки с67рет) 81м эластик дисторсиялары.

Жу7ма3лап былай жаза аламыз`

$$u_{ij}^{0} = \alpha \begin{Vmatrix} n_1\beta_1 & n_2\beta_1 & n_3\beta_1 \\ n_1\beta_2 & n_2\beta_2 & n_3\beta_2 \\ n_1\beta_3 & n_2\beta_3 & n_3\beta_3 \end{Vmatrix} \qquad \text{(III-e0)}$$

n менен β векторларыны4 ортогоналлы2ынан

$$\alpha(n_l\beta_l + n_w\beta_w + n_e\beta_e) = u_{11}^{0} + u_{22}^{0} + u_{33}^{0} = 0.$$

Бул жылжы7 деформациясында2ы к5лемни4 са3ланату2ынлы2ын билдиреди.

Эластик дисторсия серпимли дисторсиядан 6лкен айырма2а ийе. Серпимли дисторсияда атомлар арасында2ы аралы3лар 5згереди, усыны4 н1тийжесинде серпимли деформациялар 81м п1нжерени4 бурылы7лары пайда болады. Ал эластик дисторсияда атомлар 5зини4 д1слепки жайлас3ан те4 салма3лы3 орынларында2ыдай те4 салма3лы3 орынлар2а к5шеди, атомлар арасында2ы аралы3лар 5згермей тура3лы болып 3алады, жылжы7 трансляциялы3 т6рге ийе бол2анлы3тан п1нжерени4 бурылы7ы ба3ланбайды 81м тек 2ана кристалды4 сырт3ы формасы 5згериске ушырайды.

u_{ij}^{0} тензорын эластик деформацияны т1риплейту2ын симметриялы ε_{ij}™ 81м бурылы7шы т1риплейту2ын ω_{ij} тензорларыны4 3осындысы сыпатында к5рсети7 м6мкин`

$$\varepsilon_{ij} = \begin{Vmatrix} \alpha n_1\beta_1 & \frac{\alpha}{2}(n_1\beta_2 + n_2\beta_1) & \frac{\alpha}{2}(n_1\beta_3 + n_3\beta_1) \\ \frac{\alpha}{2}(n_1\beta_2 + n_2\beta_1) & \alpha n_2\beta_2 & \frac{\alpha}{2}(n_3\beta_2 + n_2\beta_3) \\ \frac{\alpha}{2}(n_1\beta_3 + n_3\beta_1) & \frac{\alpha}{2}(n_3\beta_2 + n_2\beta_3) & \alpha n_3\beta_3 \end{Vmatrix} \qquad \text{(III-el)}$$

$$\omega_{ij} = \begin{Vmatrix} 0 & \frac{\alpha}{2}(n_2\beta_1 - n_1\beta_2) & \frac{\alpha}{2}(n_3\beta_1 - n_1\beta_3) \\ -\frac{\alpha}{2}(n_2\beta_1 - n_1\beta_2) & 0 & \frac{\alpha}{2}(n_3\beta_2 - n_2\beta_3) \\ -\frac{\alpha}{2}(n_3\beta_1 - n_1\beta_3) & -\frac{\alpha}{2}(n_3\beta_2 - n_2\beta_3) & 0 \end{Vmatrix} \qquad \text{(III-ew)}$$

Егер т5мендегидей операция ислесек, бул тензорларды4 м1нисин а4сат т6сини7ге болады`

X_l 81м X_w к5шерлерин **n** менен b 2а параллел етип аламыз. Сонда (III-e0)-(III-ew) тензорлары былай жазылады`

$$u_{ij}^{0} = \begin{Vmatrix} 0 & 0 & 0 \\ \alpha & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{Vmatrix}, \quad \varepsilon_{ij} = \begin{Vmatrix} 0 & \alpha/2 & 0 \\ \alpha/2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{Vmatrix}, \quad \omega_{ij} = \begin{Vmatrix} 0 & -\alpha/2 & 0 \\ \alpha/2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{Vmatrix}.$$

Бул тензорларды4 геометриялы3 интерпретациясы we-с67ретте к5рсетилген.

§ wu. Жылжы7 элементлери

Кристалды4 3атламларыны4 жылжы7ы ж6реу2ын теги***сликлер жылжы7 тегислик-лери***, ал жылжы7шы 3атламларды4 3оз2алы7 ба2ытлары ***жылжы7 ба2ытлары*** деп аталады. Жылжы7 тегислиги 81м усы тегисликте жаты7шы жылжы7 ба2ыты ***жылжы7 системасын*** пайда етеди. Жылжы7ды4 эквивалент бол2ан тегисликлери менен ба2ытлары ***жылжы7 системаларыны4 семейстовосын*** пайда етеди. М1селен mem классына кири7ши NaCl типиндеги кристалларда жылжы7 {II0} тегисликлеринде <I$\bar{1}$0> ба2ытында 1мелге асады. Усындай типтеги у тегисликте жылжы7 <I$\bar{1}$0> ба2ытыны4 ту7ры 81м кери ба2ытларында ж6реди. Сонлы3тан жылжы7ды4 Iw системасы 8а33ында г1п ети7имиз керек. Бира3 кристалды4 орай2а 3арата симметриялылы2ыны4 н1тийжесинде ту7ры 81м кери т1репилерде болату2ын жылжы7 бирдей н1тийжелерге алып келеди. Сонлы3тан {II0) тегисликлери 81м <I$\bar{1}$0> ба2ытлары семействолары у жылжы7 системасынан турады деп жу7ма3 шы2арамыз.

Базы бир кристалларды4 жылжы7 элементлери келеси кестеде келтирилген`

Кристаллар	Класс	П1нжере типи	Жылжы7 системасы
Қапталдан орайлас3ан кублы3 кристаллар (Al, Cu 81м бас3алар)	Mem	@	<I$\bar{1}$0>, {III}
Алмаз п1нжересиндеги кристал-лар` C, Si, Ge	Mem	@	<I$\bar{1}$0>, {III}
К5лемде орайлас3ан кристаллар` @e, Nb, Ta, W, Na, K	Mem	I	<I$\bar{1}$I>, {III} (тийкар2ы систе-ма)
Графит	y/mmm	P	<II$\bar{2}$0>, {000I}
Сфалерит типиндеги кристаллар	$\bar{4}$em	@	<II$\bar{2}$>, {lll}

IV бап. Пәнжере динамикасы ҳәм фазалық өтиўлер

§ 28. Кристалл атомларының тербелислери

%зини4 те4 салма3лы3 орны 1тирапында2ы атомларды4 тербелислери кристаллы3 п1нжерени4 е4 18мийетли фундаменталлы3 31сийетлеринi4 бири болып табылады. Усындай тербелислер менен байланыслы бол2ан 3убылысларды4 жыйна2ын 81м оларды т1рипле7ди п1нжере динамикасы деп атайды. П1нжере динамикасы кристалларды4 жыллылы3 31сийетлери теориясыны4, кристалларды4 электрлик 81м магнитлик 31сийетлери менен кристалларда2ы жа3тылы3ты4 шашыра7ы 8а33ында2ы 81зирги заман к5з-3арасларыны4 тийкарында турады. Мысалы кристаллы3 п1нжере атомларыны4 тербелислериндеги ангармонизм жыллылы3 сыйымлылы2ы, 3ысылы7шылы3 81м сызы3лы жыллылы3 ке4ейи7и арасында2ы 3атнасларды береди (Грюнайзен 3атнасы). Атомларды4 жыллылы3 3оз2алыслары 81м тербелислер ангармонизми фазалы3 айланыслары 8а33ында2ы 81зирги заман теориясы тийкарында турады.

Т5менде кристаллы3 п1нжере динамикасыны4 тийкар2ы н1тийжелерин 3араймыз 81м сол тийкарда кристалларды4 жыллылы3 сыйымлылы2ын, жыллылы3 5ткизгишлигин 81м жыллылы3 ке4ейи7ин 3араймыз.

Атомларды4 **сызы**3**лы дизбегини**4 **тербелиси**. Ж6д1 т5мен емес температураларда п1нжере атомларыны4 тербелис амплитудалары сол атомлар2а с1йкес кели7ши деб-ройл тол3ыныны4 узынлы2ынан 6лкен болады 81м бул жа2дайлар да атомларды4 тербелислери классикалы3 нызамлы3лар2а ба2ынады. Соны4 менен бирге п1нжере атомларыны4 тербелислерин атомларды4 сызы3лы дизбегини4 тербелислерин 3арап шы2ы7 ар3алы да т6сини7 м6мкин. Кристаллы3 п1нжерени4 бундай моделин п1нжерени4 бир 5лше7ли модели деп атаймыз. Бундай п1нжере тура3лысы деп дизбектеги бирдей бол2ан 3о4сылас еки атом арасында2ы 3ашы3лы3 а ны 3абыл етемиз. Бир 5лкшемли элементар 3урыша еки атомды 5з ишине алату2ын жа2дайды

Зараймыз. Бундай моделге солтили-галоидлы3, бир 3анша ярым 5ткизгишли кристаллар с1йкес келеди.

wo-с67ретте еки сортта2ы атомлардан турату2ын атомларды4 сызы3лы дизбеги к5рсетилген. С67реттеги атомларды4 3атарлы3 санлары m′ 81м m′′ ар3алы белгиленген. Атомларды4 массаларын с1йкес m_q 81м m_w деп белгилейик. m′, m′′ 81м m′, m′′-q 3о4сылар жуплары ушын серпимлилик коэффициентлерин β_q 81м β_w ар3алы белгилейик. Егер серпимли к6шлер тек 3о4сылас атомлар арасында т1сир етеди деп есапласа3, атомларды4 3оз2алыс те4лемелери т5мендегидей т6рге ийе болады`

$$m_q \ddot{m}_m{}' = - \beta_q(†_m{}'-†_m{}'') - \beta_w(†_m{}'-†_{m-q}{}''),$$

$$m_w \ddot{m}_m{}'' = - \beta_q(†_m{}''-†_m{}') - \beta_w(†_m{}''- †_{m+q}{}'). \qquad (\text{IV-q})$$

Бул а4латпада 3атар санлары m′ 81м m′′ бол2ан атомларды4 координаталары с1йкес $†_m{}'$ 81м $†_m{}''$ ар3алы белгиленген. (IV-q) ди4 шешимин жу7ыры7шы тол3ынлар т6ринде излеймиз`

$$†_m{}' = A'\exp[‡(kam - \omega„)], \quad †_m{}'' = A''\exp[‡(kam - \omega„)]. \qquad (\text{IV-w})$$

k атомны4 тол3ын векторыны4 модули (k = wπ/—), A′ 81м A′′ амплитудалары m ге 21резли емес, радиус-векторды4 модули орнына am а2засы жазыл2ан (а п1нжерени4 тийкар2ы векторы). (IV-w) ни (IV-q) ге 3ойып, exp[‡(kam - ω„)] к5бейти7шилерине 3ыс3артып A′ 81м A′′ амплитудалары ушын сызы3лы те4лемелер системасын аламыз`

$$[\omega^w - \frac{b_1 + b_2}{m_1}]A' + [\frac{b_1 + b_2\exp(-iak)}{m_1}]A'' = 0,$$

$$[\frac{b_1 + b_2\exp(-iak)}{m_2}]A' + [\omega^w - \frac{b_1 + b_2}{m_2}]A'' = 0. \qquad (\text{IV-e})$$

(IV-e)-система детерминанты нолге те4 бол2ан жа2дайда A′ пенен A′′ ушын нолге те4 емес шешимлер береди. Бул ш1рт 5з гезегинде ω^w ушын те4лемени4 алыны7ына алып келеди. Бул те4лемени т5мендегидей ш1ртлер 3анаатландырады`

$$\omega_{\text{ак}}{}^w = \frac{1}{2}\omega_0{}^w\{q - \sqrt{1-g^2\sin^2\frac{ak}{2}}\},$$

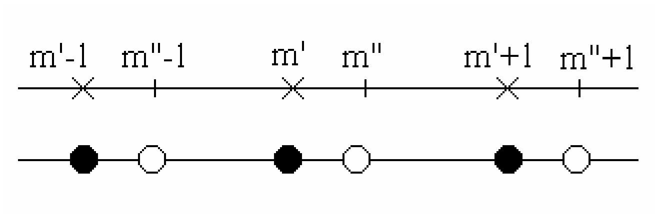
$$\omega_{\text{оп}}{}^w = \frac{1}{2}\omega_0{}^w\{q + \sqrt{1-g^2\sin^2\frac{ak}{2}}\}. \qquad (\text{IV-r})$$

Бул формулаларда

$$\omega_0{}^w = \frac{(b_1 + b_2)(m_1 + m_2)}{m_1 m_2}, \qquad \gamma^w = qy\,\frac{b_1 b_2}{(b_1 + b_2)^2}\,\frac{m_1 m_2}{(m_1 + m_2)^2}. \qquad (\text{IV-t})$$

(IV-w) менен (IV-r) ти4 шешимлери атомларды4 тербелислерини4 жу7ыры7шы монохроматик тол3ынны4 ж1рдеминде т1рипленету2ынлы2ын к5рсетеди (егер бул тербелислерди4 жийиликлери дисперсиясыны4 ω = ω(k) акустикалы3 ω = $\omega_{\text{ак}}$(k) 81м оптикалы3 ω = $\omega_{\text{оп}}$(k) деп аталату2ын тарма3ларына с1йкес келету2ын болса). Квант механикасынан белгили бол2ан Блох функциясы сыя3лы (IV-w) ни4 де шешимлери кери п1нжере ке4ислигинде д17ирли болып табылады. Сонлы3тан (IV-w) тол3ынын

Бриллюэнни4 биринши зонасы шеклериндеги тол3ын векторы k ны4 функциясы деп 3араса3 атомлар тербелислерини4 барлы3 5згешеликлери т6синикли болады.



wo-с67рет. Атомларды4 сызы3лы дизбегини4 тербелислерин талла7 ушын ушын д6зилген сызылма

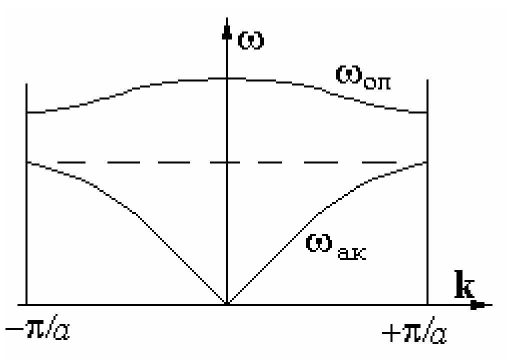
Бриллюэнни4 биринши зонасы ушын

$$-\pi/a \leq k \leq +\pi/a. \qquad (IV\text{-}y)$$

(IV-w) ге квант механикасынан белгили бол2ан Борн-Карман шегаралы3 ш1ртин 3олланамыз`

$$ka_{\ddagger} = \frac{2p}{N} g_{\ddagger}$$

Бул шегаралы3 ш1рт бойынша радиус-векторды ту7ры п1нжерени4 N дана 3утышасына жылыстырып 3ой2анда идеал кристалда2ы электронны4 тол3ын функциясы 5згермей 3алады. Соны4 менен бирге бул ш1рт бойынша Бриллюэн зонасы шеклеринде тол3ын векторыны4 проекциясы тек 2ана N дана дискрет м1нислерге ийе бола алады. Сонлы3тан биз 3арап атыр2ан жа2дайда N 3утыша2а ийе бол2ан кристалды4 к5леми ушын Бриллюэн зонасы шеклеринде тол3ын векторы k ны4 проекциясы N дискрет м1нислерге ийе болады. Тол3ын векторыны4 м1нислерини4 бул дискретлилиги (ямаса квази6зликсизлиги), со2ан с1йкес тербелислер жийиликлерини4 дискретлилиги кристаллы3 п1нжерени4 5зини4 дискретлилигини4 н1тийжеси болып табылады.



е0-с67рет. Тербелислерди4 оптикалы3 81м акустикалы3 тарма3ланыны4 дисперсиясы

е0-с67ретте $\gamma^{w}>0$ 81м $m_q \neq m_w$ бол2ан жа2дайларда2ы биринши Бриллюэн зонасы шеклеринде (IV-r) бойынша аны3лан2ан $\omega_{ак}$ пенен $\omega_{оп}$ лерди4 k 2а 21рездилиги к5рсетилген (бас3а с5з бенен айт3анда бул с67ретте тербелислерди4 акустикалы3 81м оптикалы3 тарма3ларыны4 дисперсиясы келтирилген). Киши k лар жа2дайында (узын тол3ынлар) (IV-r) ти киши параметрлер ak<<q бойынша 3атар2а жайса3

$$\omega_{ак} = vk,\ \ v \approx \frac{1}{4}\omega_0\gamma a,\ \ \omega_{оп} \approx \omega_0(q\ -\ \frac{g^2a^2}{32}k^w). \qquad \text{(IV-u)}$$

Бул а4латпада v ар3алы сести4 тезлиги белгиленген. Алын2ан а4латпалар е0-с67ретте к5рсетилгениндей $k \approx 0$ бол2анда акустикалы3 81м оптикалы3 тарма3ларды4 дисперсиясыны4 81р 3ыйлылы2ына с1йкес келеди [атап айт3анда $\omega_{ак}(0) = 0$, ал $\omega_{оп} \neq 0$]. Бул тербелислерди4 бас3а бир фундаменталлы3 31сийетин аны3ла7 ушын

$$\frac{u'_m}{u''_m} = \frac{A'}{A''} = \frac{b_1 + b_2\exp(-ika)}{(b_1 + b_2) - m_1 w^2}.$$

3атнасын таллаймыз. Узын тол3ынлар ушын ($k \to 0$) (IV-u) ни есап3а алып

$$\left(\frac{u'_m}{u''_m}\right)_{ак} = q, \qquad \left(\frac{u'_m}{u''_m}\right)_{оп} = -\ \frac{m_2}{m_1}. \qquad \text{(IV-i)}$$

(IV-i) ден акустикалы3 тарма3 ушын атомларды4 бир фазада, ал оптикалы3 тарма3 ушын атомларды4 3арама-3арсы фазада тербелиси т1н екенлиги к5ринеди. Усындай н1тийже е4 3ыс3а тол3ынлар ушын да алынады ($k \to \pi/a$ ямаса $\lambda \to wa$ бол2ан жа2дайда). Егер m_q 81м m_w массаларына ийе атомлар зарядлары 3арама-3арсы белгиге ийе ионлар болса оптикалы3 тербелислер элементар 3утышаларды4 дипол моментлерини4 5згери7и менен байланыслы болады. Усы жа2дай кристалды4 инфра3ызыл нурларды 3осымша жуты7ыны4 орын алы7ы менен к5ринеди. е0-с67ретте Бриллюэн зонасында2ы барлы3 k лар ушын $\omega_{ак} < \omega_{оп}$ екенлиги к5ринип тур. Демек энергиялы3 жа3тан таллан2анда жеткиликли киши температураларда кристалларда акустикалы3 тербелислер, ал жо3ары температураларда оптикалы3 тербелислер аны3ла7шы тербелислерге айланады. Егер $\omega_{ак}{}^m = \omega_{ак}(\pi/a)$ ар3алы акустикалы3 тербелислерди4 шеклик м1нисин белгилесек 81м $T_D = \hbar\omega_{ак}{}^m/k_0$ характеристикалы3 температурасын (Дебай температурасы) киргизсек, онда $T \leq T_D$ температураларында оптикалы3 тербелислерди4 6лесин есап3а алма72а болату2ынлы2ын к5ри7ге болады.

Тап усындай жоллар менен 6ш 5лшемли кристалларда2ы тербелислерди де талла72а болады.

Қатты денелер физикасында атомларды4 тербелислери менен байланыслы бол2ан кристаллы3 п1нжерени4 элементар 3озы7лары **фононлар** деп атайды. Фононларды квазиимпульсы $\hbar k$ 2а, энергиясы $\hbar\omega_k$ 2а те4 квазиб5лекше сыпатында 3ара72а болады. Усындай жоллар менен, мысалы, электронларды4 п1нжере тербелислерде шашыра7ын, жыллылы3 5ткизгишликти талла7 а4сат3а т6седи.

Дебай температурасынан киши температураларда ($T<T_D$) фононлар квант статистикасында2ы Бозе-Эйнштейн статистикасына ба2ынады 81м оларды4 жыллылы3 те4 салма3лы2ында2ы орташа саны Планк функциясы ж1рдесинде есапланады`

$$n = \frac{1}{\exp(\mathbf{h}w / kT) - 1}. \qquad \text{(IV-q0)}$$

Бул жерде n ар3алы к5леми $(w\pi\hbar)^e$ 3а те4 бол2ан фазалы3 ке4ислик 3утышасында2ы энергиясы ħω 2а те4 бол2ан фононларды4 те4салма3лы3 саны. dk интервалында2ы фазалы3 ке4ислик 3утышаларыны4 саны

$$dn_{‰} = \frac{4pk^2dk}{(2p\mathbf{h})^3}V. \qquad (IV\text{-}qq)$$

V кристалды4 к5леми.

$T<T_D$ температураларында тербелислерди4 тек акустикалы3 тарма2ына ке7ил б5лип, (IV-u) бойынша акустикалы3 жийиликлер барлы3 k лар ушын сызы3лы байланыс3ан деп есаплап (я2ный k ≈ ω/v) (IV-qq) ди былайынша т6рлендиремиз`

$$dn_{‰} = \frac{3V}{2p^2v^3}\omega^w d\omega. \qquad (IV\text{-}qw)$$

Бул жерде е 6ш акустикалы3 мода2а с1йкес келеди (еке7и к5лдене4, бире7и бойлы3), ал v сести4 орташа тезлиги.

Солай етип кристалды4 V к5леминдеги фононларды4 улы7малы3 саны былайынша есапланады`

$$ndn_{‰} = \frac{3V}{2p^2v^3}\frac{\omega^2 d\omega}{\exp(\mathbf{h}\omega/kT)-1}. \qquad (IV\text{-}qe)$$

Демек V к5леминдеги фононларды4 толы3 энергиясы`

$$E = \frac{3V\mathbf{h}}{2\pi^2v^3}\int_0^{w_{ak}^m}\frac{\omega^2 d\omega}{\exp(\mathbf{h}\omega/kT)-1}. \qquad (IV\text{-}qr)$$

Бул а4латпада w_{ak}^m ар3алы Бриллюэн зонасыны4 шегарасына с1йкес кели7ши акустикалы3 тербелислерди4 максималлы3 жийилиги белгиленген. w_{ak}^m ны4 м1ниси 6ш акустикалы3 тарма3та2ы тербелислерди4 толы3 саныны4 eN^e 3а те4лигинен аны3ланады`

$$\frac{3V\mathbf{h}}{2\pi^2v^3}\int_0^{\omega_{ak}^m}\omega^w d\omega = V*(w_{ak}^m)^e/(w\pi^w v^e) = eN^e. \qquad (IV\text{-}qt)$$

Буннан

$$w_{ak}^m = v*\sqrt[3]{\frac{6\pi^2N^3}{V}} = v*\sqrt[3]{\frac{6\pi^2}{\Omega_0}}. \qquad (IV\text{-}qy)$$

Бул формулада Ω_0 ар3алы элементар 3утышаны4 к5леми белгиленген. Енди (IV-qy) менен (IV-o) ды пайдаланы7 ар3алы Дебай температурасы ушын т5мендегидей а4латпа аламыз`

$$T_D = v*\sqrt[3]{\frac{6\pi^2}{\Omega_0}}*\hbar*k_0. \qquad (IV\text{-}qu)$$

Жо3ары температураларда фононлар энергиясы Е ге оптикалы3 тербелислерди4 3осату2ын 6леси 6лкен болады.

§ wo. Кристалларды4 жыллылы3 сыйымлылы2ы

ЖоЗары температураларда кристаллардын4 жыллылы3 сыйымлылы2ыны4 тураЗлы екенлиги белгили. Бул жа2дай т5мендегиден келип шы2ады`

Газлерди4 кинетикалы3 теориясынан атомны4 бир координата к5шери ба2дарында2ы кинетикалы3 энергиясы $\frac{1}{2}$kT 2а те4. Бул бир еркинлик д1режесине с1йкес кели7ши кинетикалы3 энергия болып табылады. Осцилляторды4 потенциал энергиясы кинетикалы3 энергия2а те4 бол2анлы3тан бир еркинлик д1режесине с1йкес кели7ши толы3 энергия w*$\frac{1}{2}$kT = kT 2а те4. *1р бир атом 6ш еркинлик д1режесине ийе. Сонлы3тан 3атты денедеги атомны4 толы3 энергиясы ekT 2а те4. Ал 3атты дене N дана атомнан турату2ын болса, онда оны4 толы3 ишки энергиясы eNkT 2а те4. Бир моль 3атты денени4 ишки энергиясы eN_0kT 2а те4 болып eN_0kT = eRT. Бул жерде N_0 Авагадро саны болып табылады.

Тура3лы к5лемде жыллылы3 берилгенде, бул жыллылы3 тол2ын менен ишки энергияны к5бейти7 ушын жумсалады. Сонлы3тан тура3лы к5лемдеги атомлы3 жыллылы3 сыйымлылы2ы былай аны3ланады`

$$C_V = \left(\frac{dU}{dT}\right)_V = eR \approx y \text{ кал/К*моль} \approx wt.qw \text{ Дж/К*моль}.$$

Бул формуладан атомлы3 жыллылы3 сыйымлылы2ы барлы3 кристаллар ушын бирдей, температурадан 21резсиз тура3лы шама болып табылады. Усындай етип тастыйы3ла7 ***Дюлонг-Пти нызамы*** деп аталады.

Дебай температурасынан т5менги температураларда жыллылы3 сыйымлылы2ы температура2а 21резли 81м T → 0 де c_v → 0.

Жыллылы3 сыйымлылы2ыны4 температура2а 21резлилиги кристаллы3 п1нжере атомларыны4 тербелиси 8а33ында2ы к5з-3араслар бойынша а4сат т6рде алынады. Аны3лама бойынша тура3лы к5лемдеги кристаллы3 денени4 жыллылы3 сыйымлылы2ы

$$c_v = \partial E/\partial T. \qquad (IV\text{-}qi)$$

Бул а4латпада кристалды4 ишки энергиясы E 81рипи менен белгиленген. К5рсетпелилик ушын еки температуралы3 областты 3арап 5темиз` биринshiси Дебай температураларынан киши, ал екиншиси Дебай температураларынан жоЗары температуралар областы.

$T<T_D$ бол2анда E ушын а4латпа (IV-qr)-формула ж1рдеминде бериледи. Интеграл астында тур2ан а4латпаларды киши параметр $\hbar\omega/k_0T$ бойынша 3атар2а жайып интегралласа3`

$$E \approx \pi^w V(k_0T)^r/q0\hbar^e v^e \qquad (qo)$$

а4латпасын аламыз. Буннан (qi) тийкарында Дебай формуласына келемиз`

$$c_v = \frac{12\pi^4 k_0}{5}\left(\frac{T}{T_D}\right)^3. \qquad (w0)$$

Дебай формуласы (IV-w0) q0-t0 K температуралар интервалында2ы айырым 1пи7айы Зурылыс3а ийе бол2ан кристалларды4 (силтили-галоид кристаллар менен к5пшилик химиялы3 элементлер кристалларыны4) жыллылы3 сыйымлылы2ыны4 температуралы3 21резлилигин Занаатландырарлы3 д1режеде т1риплейди. Ал Зурамалы д6зилиске ийе кристалларда жыллылы3 сыйымлылы2ыны4 температурадан 21резлилиги 1де7ир Зурамалы болып келеди. Бира3 бул жа2дайларда да температуралардын абсолют ноли 1тирапында жыллылы3 сыйымлылы2ыны4 T^e 3а пропорционаллы3 нызамы са3ланады.

Жеткиликли жо3ары температураларда ($T>T_D$) оптикалы3 тербелислерди4 энергиясы гармоникалы3 осцилляторларды4 жыйна2ы модели бойынша классикалы3 тийкарда есапланады. Бундай жа2дайларда жо3арыда г1п етилген Дюлонг-Пти нызамы келип шы2ады.

§ e0. Кристаллардын сызы3лы жыллылы3 ке4ейи7и

Усы 7а3ыт3а шекем биз кристалларда2ы атомларды4 гармоникалы3 тербелислерин 3арады3. Бул (IV-q)-те4лемени4 о4 т1репиндеги сызы3лы а2залар менен шекленгенлигимизди4 н1тийжеси болып табылады. Бул потенциал энергия ушын а4латпада2ы квадратлы3 а2залар2а с1йкес келеди. Енди еки 3о4ысылыс атомлар арасында2ы ангармонизм орын ал2анда2ы 5з-ара т1сирлеси7ди 3арайmыз.

Бундай жа2дайларда 5з-ара т1сирлеси7 к6ши @, т1сирлеси7ге с1йкес кели7ши потенциал энергия U атомларды4 те4 салма3лы3 а78алынган а7ысы7ы x ты4 функциясы сыпатында былай жазылады`

$$@ = -dU/dx = -e\beta x + e\gamma x^{w}, \qquad \text{(IV-we)}$$

$$U(x) = \beta x^{w} - \gamma x^{e}. \qquad \text{(IV-wr)}$$

Бул жерде γ коэффициентин ангармонлы3 коэффициент деп аталады.

Орташа а7ысы7 $\bar{x}$ ты Больцман тар3алы7ы функциясы ж1рдеминде есаплаймыз`

$$\bar{x} = \frac{\int\limits_{-\infty}^{+\infty} x \exp[-U(x)/k_0 T]dx}{\int\limits_{-\infty}^{+\infty} \exp[-U(x)/k_0 T]dx}. \qquad \text{(IV-wt)}$$

(IV-wr) теги U(x) ушын жазыл2ан а4латпаны (IV-wt) ке 3ойы7 ар3алы интеграл астында2ы а2заларды ангармоникалы3 а2заларды киши деп есаплап интегралла7 т5мендеги а4латпаны4 алыны7ына алып келеди`

$$\bar{x} = ek_0 T\gamma/r\beta^{w}. \qquad \text{(IV-wy)}$$

Бул а4латпа

$$\alpha = \bar{x}/aT = ek_0\gamma/r\beta^{w}a \qquad \text{(IV-wu)}$$

сызыЗлы жыллылыЗ ке4ейи7ине с1йкес келеди. Бул жерде а арЗалы атомлар арасында2ы ЗашыЗлыЗ берилген.

(IV-wu) ден сызыЗлы жыллылыЗ ке4ейи7 коэффициентини4 ангармонизм коэффициенти γ 2а ту7ры пропорционал екенлиги к5ринип тур. Егер ангармонизм орын алмаса $\alpha = 0$.

Квант механикасы тийкарында осциллятор ушын $\bar{x}$ есаплан2ан жа2дайда теориялыЗ $\alpha = \alpha(T)$ 21резлигин 81м $T \to 0$ де α ни4 де нолге умтылату2ынлы2ын алы72а болады.

§ eq. ЖыллылыЗ 5ткизгишлик

Атомлар тербелислерини4 ангармонизми менен байланыслы бол2ан ж1не бир З1сийет жыллылыЗ 5ткизгишлик болып табылады. АныЗлама бойынша жыллылыЗ 5ткизгишлик коэффициенти K жыллылыЗ а2ысы j менен белгили ба2ытта2ы температура градинетин былайынша байланыстырады`

$$j = K \text{ grad } T. \qquad \text{(IV-wi)}$$

ЖыллылыЗ 5ткизи7шилик коэффициенти ушын Дебай газлерди4 кинетикалыЗ теориясы тийкарында т5мендегидей а4латпаны усынды`

$$K = \frac{1}{3} c v \lambda. \qquad \text{(IV-wo)}$$

Бул жерде с жыллылыЗ сыйымлылы2ы, v сести4 тезлиги, λ фонон-фонон аралыЗ 5з-ара т1сир етиси7ден алынату2ын фононларды4 еркин ж6ри7 жолыны4 узынлы2ы. ГармоникалыЗ жаЗынласы7да фонон-фононлыЗ 5з-ара т1сир етиси7ди4 болмайту2ынлы2ын к5рсети7ге болады. Егер (IV-q)-сызыЗлы те4лемелерди4 шешимлери гармоникалыЗ толЗынларды4 суперпозициясы (бундай толЗынлар кристалда бир биринен 21резсиз таралады) екенлигине дыЗЗат а7дарсаЗ бул жа2дай т6411синикли болады. Бундай жа2дайда кристалды4 жыллылыЗЗа Зарсылы2ы нолге те4 болады 81м со2ан с1йкес $K = \infty$. СонлыЗтан жыллылыЗ 5ткизгишликти4 шекли м1ниске ийе болату2ынлы2ы тек 2ана ангармонизмге байланыслы аныЗланады. Айтыл2ан жа2дайды4 идеал кристал2а тийисли екенлиги т6синикли болы7ы керек. Реал кристалларда болса фононларды4 п1нжере дефектлеринде шашыра7ына байланыслы фононларды4 шашыра7ыны4 Зосымша механизми орын алады. Бул 5з гезегинде кристалды4 жылылыЗ 5ткизи7ге Зарсылы2ын т1мийилейди.

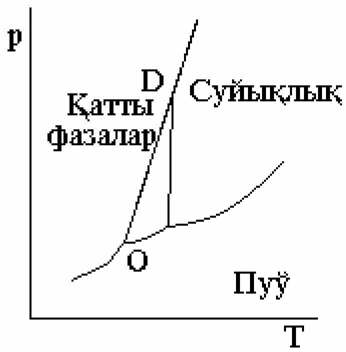
Дебай $T > T_D$ температураларда $\lambda \sim T^{-q}$ екенлигин к5рсетти. Т5менги $T < T_D$ температураларда $\lambda \sim \exp(-T_D/wT)$ байланысы орынланады.

§ ew. Фазалы3 5ти7лер. Полиморфизм

I бапта те4салма3лы3 кристаллы3 3урылысты4 еркин энергияны4 минимумына с1йкес келету2ынлы2ы айтыл2ан еди. Бира3 ке4 температуралар менен басымлар интервалында усындай минимумларды4 саны бир неше болы7ы м6мкин. Бундай жа2дайда 81р бир минимум2а 5зини4 кристаллы3 3урылысы с1йкес келеди. Бундай 3урылысларды полиморфлы3 модификациялар 81маса формалар, ал бир модификациядан екинши модификация2ы 5ти7 плоиморфлы3 айланыс ямаса фазалы3 5ти7 деп аталады.

Полиморфизм 3убылысы qiww-жылы Митчерлих т1репинен к6кирт 81м калий карбонаты кристаллары мысалында ашылды. Бул 3убылыс ке4 тер3ал2ан. Мысалы, qe.e^{0}C дан т5менги температураларда 3алайыны4 алмаз типиндеги 3урылыс3а ийе-кублы3 модифика2иясы тура3лы (бул модификация сур 3алайы деп аталады). Ал qe.e^{0}C дан жо3ары температураларда к5лемди орайлас3ан тетрагоналлы3 3урылыс3а ийе а3 3алайы тура3лы. Қалайыны4 бул еки модификациясыны4 физикалы3 31сийетлери п6ткиллей 81р 3ыйлы` а3 3алайы эластик 31сийетке ийе, ал сур 3алайы морт. Кварц бир неше полиморфлы3 форма2а ийе. Ферромагнетикти4 парамагнети4 8ал2а, металды4 аса 5ткизгишлик 8ал2а, параэлектрикти4 ферроэлектрик ямаса ферроэластик 8аллар2а 5ти7и де фазалы3 5ти7лер болып табылады. Бундай мысалларды к5плеп келтири7 м6мкин.

Затларды4 фазалы3 3урамы 81м фазаларды4 те4 салма3лылы2ы фазалы3 диаграмма ямаса 8ал диаграммасы ж1рдеминде характерленеди. Фазалы3 диаграмманы4 1пи7айы мысалы ретинде p,T диаграмманы к5рсети7 м6мкин (p - басым, T - температура). Бул жерде p 81м T координаталарына ийе фигаралы3 но3ат деп аталату2ын 81р бир но3ат берилген басым менен температурада2ы затты4 8алын т1риплейди. Диаграммада2ы T = T(p) сызы2ы затты4 м6мкин бол2ан (мысалы газ т1ризли, суйы3, 81р 3ыйлы кристаллы3) фазаларын айырып турады. eq-с67ретте к6киртти4 фазалы3 диаграммасы келтирилген. Диаграммада2ы ОД сызы2ы к6киртти4 ромбалы3 81м моноклинлик модификациялары тура3лы бол2ан T 81м p ларды4 м1нислерин айырып турады. Басым атмосфералы3 басым2а те4 бол2анда ромбалы3 фазадан моноклинлик фаза2а 5ти7 eyi.t K де 1мелге асады. Диаграммада басым 5скенде фазалы3 5ти7 температурасыны4 да 5сету2ынлы2ы к5ринип тур.



eq-рет. К6киртти4 8алыны4 1пи7айыластырыл2ан диаграммасы.

§ ee. Биринши 81м екинши 17лад фазалы3 5ти7лери

Биринши 17лад фазалы3 5ти7лери энтропия, к5лем 8.т.б. термодинамикалы3 функцияларды4 секирип 5згери7и менен 1мелге асады 81м со2ан с1йкес 5ти7ди4 жасырын жыллылы2ына ийе болады. Биринши 17лад фазалы3 айланыслары ушын T = T(p) сыя3лы иймекликлер Клаузиус-Клапейрон те4лемесин 3анаатландырады`

$$dT/dp = T(\Delta V/Q). \qquad \text{(IV-e0)}$$

Бул жерде ΔV к5лемни4 5згериси, Q 5ти7ди4 жасырын жылы7ы.

Екинши 17лад фазалы3 айланысларында термодинамикалы3 фукнцияларды4 ту7ындылары секирмели 5згереди (мысалы жыллылы3 сыйымлылы2ы, 3ысыл2ышлы3 81м бас3алар секири7 менен 5згереди). Екинши 17лад фазалы3 айланысларында кристаллы3 структура 6зликсиз 5згереди.

Биринши 17лад фазалы3 айланыслары структуралы3 механизминен 21резсиз зародыш пайда болы7 менен байланыслы 81м белгили шамада2ы температуралы3 гистерезиске (3ыздыр2анда2ы 81м сал3ынлат3анда2ы фазалы3 5ти7 температураларыны4 бирдей болма7ы) ийе болады. Демек биринши 17лад фазалы3 5ти7лери арты3 3ыздыры7 81м арты3 сал3ынлаты7 менен байланыслы. Усы жа2дай2а мысал ретинде биринши 17лад фазалы3 5ти7и бол2ан кристалланы7 процессин к5рсети7ге болады.

Екинши 17лад фазалы3 5ти7леринде температуралы3 гистерезис ба3ланбайды.

Биринши 81м екинши 17лад фазалы3 5ти7леринде кристалды4 симметриясы фазалы3 5ти7 но3атында (фазалы3 5ти7 температурасында) секири7 менен 5згереди. Бира3 биринши 81м екинши 17лад фазалы3 5ти7леринде симметрияны4 5згери7леринде 6лкен пары3 бар. Екинши 17лад фазалы3 5ти7леринде бир фазаны4 симметриясы екинши фазаны4 симметриясыны4 подгруппасы (киши группасы), ал усыны4 менен бирге симметриясы жо3ары бол2ан фаза жо3ары температуралы, ал симметриясы т5мен бол2ан фаза т5менги температуралы болып табылады.

Биринши 17лад фазалы3 5ти7леринде улы7ма жа2дайларда кристалды4 симметриясы ы3тыярлы т6рде 5згереди 81м еки фаза улы7ма симметрия элементлерине ийе болма7ы м6мкин.

§ er. Атомларды4 тербелиси 81м полиморф 5ти7лер

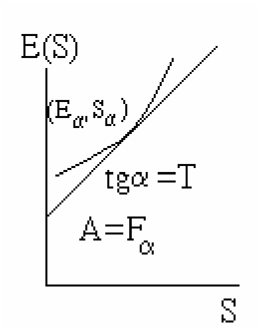
Полиморфлы3 айланысларды санлы3 жа3тан т1рипле7 ушын м1селени термодинамикалы3 жа3тан 3ара7 т1бийий болып табылады. T температурасында кристал энергиясы E_α бол2ан α фазасында болы7 итималлылы2ы Больцман теоремасы бойынша былай есапланады`

$$W_\alpha = \exp -\left(\frac{E_\alpha}{k_0 T}\right) = \exp\left[-\frac{E_\alpha - TS(E_\alpha)}{k_0 T}\right]. \qquad \text{(IV-eq)}$$

Бул жерде $@_\alpha = E_\alpha - TS_\alpha$ еркин энергия, S - энтропия.

$$dE_\alpha/dS_\alpha = T \qquad \text{(IV-ew)}$$

ш1ртин 3анаатландырату2ын E_α менен S_α ни4 м1нислеринде итималлылы3 W_α максимал м1нисине те4 болады.



ew-c67рет. Кристалды4 ишки энергиясы E ни4 энтропия S тен 21резлилиги.

Ew-c67ретте кристалды4 энергиясы E ни4 энтропия S тен 21резлилиги к5рсетилген. (IV-ew) ге c1йкес T температурасында кристалды4 те4 салма3лы3 8алы координаталары E_α, S_α бол2ан но3ат3а c1йкес келеди. Бул но3атта E = E(S) иймеклигине т6сирилген урынбаны4 абсцисса к5шери менен жасайту2ын м6йешини4 тангенси санлы3 шамасы бойынша температура T 2а те4. Урынба ордината к5шери менен координата басынан сан шамасы жа2ынан еркин энергия $@_\alpha = E_\alpha - TS_\alpha$ 2а те4 аралы3та кесилиседи. Егер кристалда полиморфизм 3убылысы орын алату2ын 81м со2ан c1йкес α 81м β фазалары бар болса (IV-eq) ге c1йкес $T = T_0$ 5ти7 температурасы $W_\alpha = W_\beta$ ямаса $@_\alpha = @_\beta$ ш1ртинен аны3ланады.

Егер кристалда атомлар бирдей жийиликте тербеледи деп есапласа3 оны4 ишки энергиясы E былай есапланады`

$$E = E' + \hbar\omega n. \qquad \text{(IV-ee)}$$

Бул жерде E′ температура нолге те4 (T = 0) бол2анда2ы кристалды4 ишки энергиясы, ал ν фононларды4 концентрациясы. S энтропия энергияны4 конфигурациялы3 б5лими сыпатыда а42артылады`

$$S = k_0 \ln P. \qquad \text{(IV-er)}$$

P ар3алы n дана фононларды4 eN еркинлик д1редеси бойынша б5листири7лер саны а4латыл2ан (биринши Бриллюэн зонасы шеклериндеги тол3ынлы3 векторды4 проекциялар санын N ар3алы белгилеймиз). Сонда

$$P = (eN + n - q)!/(eN - q)!n!. \qquad \text{(IV-et)}$$

(IV-ee), (IV-er) 81м (IV-et) лерди еркин энергияны4 @ = E - TS а4латпасына 3ойып, еркин энергияны4 минимум ш1рти d@/dN = 0 екенлигин есап3а алып, Стирилинг формуласы ln n! ≈ n ln n формуласын пайдаланса3 т5мендегидей формулаларды аламыз`

$$n = eN\frac{1}{\exp(\hbar w / k_0 T) - 1}, \qquad \text{(IV-ey)}$$

$$@ = E - TS = E' + eNk_0T \ln[q - \exp(-\hbar\omega/k_0T). \qquad \text{(IV-eu)}$$

(IV-eu) ге му7апы3 α 81м β фазаларды4 еркин энергиялары T температурасында т5мендегидей ш1ртлерди 3анаатландырады`

$$@_\alpha(T) = E'_\alpha + eNk_0T \ln[q - \exp(-\hbar\omega_\alpha/k_0T).$$

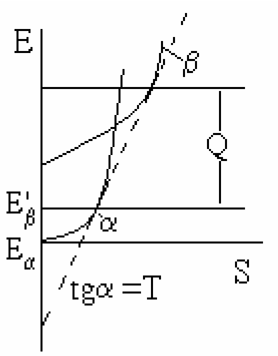
$$@_\beta(T) = E'_\beta + eNk_0T \ln[q - \exp(-\hbar\omega_\beta/k_0T). \qquad \text{(IV-ei)}$$

Бул еки а4латпаны бир бирине те4лестирсек

$$\exp\left[-\frac{E_a^{,} - E_b^{,}}{3Nk_0T_0}\right] = \frac{1-\exp(-\mathbf{h}w_a\;/\;k_0T_0)}{1-\exp(-\mathbf{h}w_b\;/\;k_0T_0)}, \qquad \text{(IV-eo)}$$

алын2ан а4латпадан $T = T_0$ фазалы3 5ти7 температурасын алы7 м6мкин.

(IV-eo) дан полиморфлы3 айланысты4 атомларды4 тербелисини4 секири7 менен 5згерисине байланыслы екенлиги к5ринип тур. Егер $E_\beta' > E_\alpha'$ болса (IV-eo) $\omega_\alpha > \omega_\beta$ бол2анда шешимге ийе болады. Демек β-фаза α-фаза2а 3ара2анда 'жумса2ына3} бол2анда (п1нжере атомларына салыстырып айтыл2ан) фазалы3 5ти7 1мелге асады. ее-с67ретте еки фаза ушын $E = E(S)$ 21резлилиги келтирилген`



ее-с67рет. α- 81м β-фазалар ушын $E = E(S)$ 21резлилиги.

α-фазадан β-фаза2а 5ти7 $T = T_0$ температурасында ж6реди, ал T ны4 м1ниси ий-мекликлерге т6сирлиген улы7малы3 урынбаны4 3ыялы2ы бойынша аны3ланады. Урыны7 но3атлары арасында2ы айырма фазалы3 5ти7ди4 жасырын жыллылы2ына те4. $T < T_0$ бол2анда β-фаза, ал $T > T_0$ бол2анда α-фаза орны3лы.

Фазалы3 5ти7лерди жо3арыда2ыдай етип т1рипле7 еки фазада2ы $\omega_\alpha = \omega_\alpha(\mathrm{k})$ 81м $\omega_\beta = \omega_\beta(\mathrm{k})$ жийиликлерини4 дисперсиясын есап3а алы7 ар3алы да 1мелге асыры7 м6мкин. Бундай жа2дайда α- 81м β-фазаларды4 еркин энергиялары ушын а4латпалар былай жазылады`

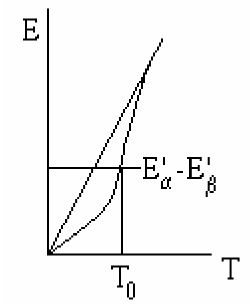
$$@_\alpha(T) = E_\alpha' + k_0T\sum_{k,s}\ln[1-\exp(-\mathbf{h}w_a^s(\mathbf{k})/k_0T)],$$

$$@_\beta(T) = E_\beta' + k_0T\sum_{k,s}\ln[1-\exp(-\mathbf{h}w_b^s(\mathbf{k})/k_0T)]. \qquad \text{(IV-r0)}$$

Бул а4латпада $\omega^s(\mathrm{k})$ тол3ын векторы k, поляризациясы s = q,w,e бол2ан фонон-ны4 жийилиги. (IV-r0) та2ы суммала7 Бриллюэнни4 биринши зонасында2ы тол3ын векторы k ны4 барлы3 дискрет м1нислери 81м тербелислерди4 барлы3 терма3лары s бойынша ж6ргизиледи. Фазалы3 5ти7 ео3атында $@_\alpha$ менен $@_\beta$ ны те4лестирип т5мендеги а4латпа2а ийе боламыз`

$$E_\alpha' - E_\beta' = k_0T\sum_{k,s}\ln\frac{1-\exp(-\mathbf{h}w_a^s(\mathbf{k})/k_0T)}{1-\exp(-\mathbf{h}w_b^s(\mathbf{k})/k_0T)}. \qquad \text{(IV-rq)}$$

(IV-rq) ди4 о4 т1репи температураны4 функциясын береди $\varepsilon = \varepsilon(T)$. er-с67ретте усы функция келтирилген 81м бул иймектикти4 фазалы3 айланыс температурасы $T = T_0$ ди аны3лайту2ын $\varepsilon = E_\alpha' - E_\beta'$ сызы2ы менен кесилиси7и с17леленген.



er-с67рет. Усы с67рет ж1рдеминде фазалы3 5ти7 температурасын аны3ла7 м6мкин.

Дебай температурасынан жо3ары температураларда ($T > T_D$) (IV-rq) ди4 о4 т1репи температураны4 сызы3лы функциясы болады`

$$\omega = k_0T\sum_{k,s}\ln\frac{w_a^s(\mathbf{k})}{w_b^s(\mathbf{k})} = k_0T\ln\frac{\prod_{k,s} w_a^s(\mathbf{k})}{\prod_{k,s} w_b^s(\mathbf{k})}. \qquad \text{(IV-rw)}$$

Бул те4лемени4 о4 т1репи турпайы т6рде былай есапланы7ы м6мкин. $\frac{w_a^s}{w_b^s}$ 3атнасы орнына поляризациясы s бол2ан тол3ынларды4 тезликлерини4 3антасын алы72а болады, я2ный

$$\frac{w_a^s}{w_b^s} \approx \frac{v_a^s}{v_b^s}. \qquad \text{(IV-re)}$$

(IV-re) ти (IV-rw) ге 3ойса3

$$\varepsilon(T) \approx k_0T\ln\prod_s\prod_k\frac{v_a^s}{v_b^s} = k_0T\ln\prod_s\left(\frac{v_a^s}{v_b^s}\right)^N = \frac{v_a^l v_a^{t_1} v_a^{t_2}}{v_b^l v_b^{t_1} v_b^{t_2}} \qquad \text{(IV-rr)}$$

Бул а4латпада2ы v^l бойлы3 сес тол3ыныны4 тезлиги, v^{t_1} 81м v^{t_2} α- 81м β-фазалар2а тийисли сести4 к5лдене4 тезликлери. Фазалы3 5ти7 температурасы $T = T_0$ (IV-rq)-те4лемени графикалы3 жоллар менен шеши7 ар3алы алыны7ы м6мкин (с67ретте к5рсетилген).

Жо3арыда жазыл2ан а4латпаларда тербелислер ангармонизми есап3а алын2ан жо3. Екиншиден Дебай жа3ынласы7ыны4 3урамалы структура2ы ийе кристалларда 3анаатландырарлы3тай н1тийже бермейту2ынлы2ы жо3арыда айтыл2ан еди. Сонлы3тан келтирип шы2арыл2ан формулаларды тек 2ана 1пи7айы 3урылыс3а ийе кристаллар ушын 3олланы72а болады.

§ et. Дебай 8ал те4лемеси 81м Грюнайзен формуласы

*ал те4лемеси деп 3атты денени4 к5леми V, басымы p 81м температурасы T арасында2ы 3атнасты айтады. Те4лемени келтирип шы2ар2анда термодинамиканы4

$$p = -(\partial @/\partial V)_T \qquad (IV\text{-}rt)$$

те4лемеси тийкарында ж6ргизиледи. Еркин энергия сыпатында (IV-r0)-а4латпадан пайдаланамыз`

$$@(T) = E' + k_0T \sum_{k,s} \ln[1 - \exp(-\frac{\mathbf{h}w^s(\mathbf{k})}{k_0 T})].$$

Жийилик бойынша Дебай б5листирили7ин есап3а алып (IV-r0)-сумманы т5мендеги интеграл менен алмастырамыз`

$$@ = E_0 + k_0T\frac{3V}{2p^2v^3}\int_0^{w_m} [q - \exp(-\hbar\omega/k_0T)]\omega^w d\omega =$$

$$= E_0 + oNk_0T\,(T/T_D)^e \int_0^{T_D/T} \ln(q - \exp(-x))\, x^w\, dx. \qquad (IV\text{-}ry)$$

Бул а4латпада тербелислерди4 шеклик жийилиги ω_m 81м Дебай температурасы арасында2ы байланыс $T_D = \hbar\omega/k_0$ ар3алы берилген. (IV-rt) тен ту7ынды аламыз 81м Дебай температурасы менен шеклек жийилик к5лем V ны4 функциясы деп болжаймыз`

$$p = -\partial E_0/\partial V - eNk_0TD\frac{T_D}{T}\frac{1}{T_D}(\partial T_D/\partial V). \qquad (IV\text{-}ru)$$

Бул жерде D = D(z) Дебай функциясы. %з гезегинде

$$D(z) = (e/z^e)\int_0^z \frac{x^3}{\exp x - 1}dx. \qquad (IV\text{-}ri)$$

Гармоникалы3 жа3ынласы7да $dT_D/dV = 0$ екенлигин 81м тербелислер ангармонизмини4 $dT_D/dV < 0$ алып келету2ынлы2ын к5рсети7ге болады. Грюнайзен тура3лысы деп температурадан 21резсиз бол2ан т5мендеги 3атнасты айтамыз`

$$g_G = -(V/T_D)(dT_D/dV) = -(d\omega_m/\omega_m)/(dV/V) = -(d\ln\omega_m/d\ln V) > 0. \qquad (IV\text{-}ro)$$

Гармоникалы3 жа3ынласы7да $g_G = 0$. Температурадан 21резли бол2ан ишки энергияны4 б5лими $E_T = eNk_0TD\frac{T_D}{T}$ бол2анлы3тан Дебай 8ал те4лемеси т5мендегидей т6рге ийе болады`

$$p = -\frac{\P E_0}{\P V} + g_G\frac{1}{V}E_T. \qquad (IV\text{-}t0)$$

Бул жерде $\frac{\P E_0}{\P V}$ температурадан 21резсиз.

(IV-t0) ден сызы3лы ке4ейи7 коэффициенти α 81м изотермалы3 3ысылы7шылы3 k арасында2ы байланысты т1риплейту2ын **Грюнайзен формуласын** алы72а болады. (IV-t0) ди температура бойынша дифференциаллап 81м (IV-qi) ди есап3а алып

$$\left(\frac{\P p}{\P T}\right)_V = g_G\ (c_v/V) \qquad \text{(IV-tq)}$$

а4латпасын аламыз.

Ке4ейи7 коэффициенти менен изотермалы3 3ысылы7шылы3 коэффициентлерин киргиземиз`

$$\alpha = \frac{1}{3V}\left(\frac{\P V}{\P T}\right)_p = \frac{1}{3V}\frac{(\P p/\P T)_V}{(\P p/\P T)_T} = -\frac{1}{3}\left(\frac{\P V}{\P p}\right)_T \frac{1}{V}\left(\frac{\P p}{\P T}\right)_V, \qquad \text{(IV-tw)}$$

$$k = -\frac{1}{V}\left(\frac{\P V}{\P p}\right)_T .$$

Усы еки а4латпа тийкарында Грюнайзен формуласын аламыз`

$$\alpha = \frac{1}{3}\frac{k g_G c_v}{V}. \qquad \text{(IV-te)}$$

Жо3ары басымларда кристалларды4 3ысылы7шылы2ын изертле7 ар3алы g_G Грюнайзен тура3лысыны4 м1нисин аны3лап, оны (IV-te) ж1рдеминде есапла7 жолы менен аны3лан2ан шамасы менен салыстыры7 м6мкин. Кублы3 кристаллар ушын жа3сы с1йкеслик алынады. Т5менде айырым затлар ушын Грюнайзен тура3лыларыны4 м1нислери берилген`

Зат	Есаплан2ан м1ниси	Экспери-мент	Зат	Есаплан2ан м1ниси	Экспери-мент
Na	1.25	1.50	N‡	1.88	1.90
K	1.34	2.32	NaCl	1.63	1.52
@e	1.60	1.40	KCl	1.60	1.26
Co	1.87	1.80			

§ еу. Фазалы3 5ти7лер 81м кристаллардьы4 симметриясы

Жо3арыда кристаллардьы4 тербелис спектри 81м термодинамикалы3 характеристикаларына байланыслы фазалы3 5ти7лерди4 тийкар2ы айырмашылы3лары к5рип 5тилди. Термодинамикалы3 параметрлер 5згергенде кристалды4 3урылысы 6лкен 5згерислерге ушырайту2ын 81м фазаларды4 31сийетлери т6пкиликли 5згерету2ын биринши 17лад фазалы3 5ти7лери тал3ыланды. Бундай жа2дайларда бир бирине 5тету2ын фазаларды4 атомлы3-кристаллы3 3урылысы арасында белгили бир корреляцияны4 болы7ы да, болма7ы да м6мкин. Биринши 17лад фазалы3 5ти7леринде кристалды4 симметриясыны4 (фазалы3 те4салма3лы3 сызы2ыны4 еки т1репиндеги кристалды4 атомлы3-кристаллы3 3урылысы ямаса оны4 симметриясы 8а33ында г1п етилмекте) 3алай 5згерету2ынлы2ы 8а33ында аны3 айты7 м6мкин емес.

Биз енди кристалды4 атомлы3 3урылысы киши 5згериске ушырайту2ын фазалы3 5ти7лери 8а33ында г1п етемиз. Бундай жа2дайларда еки фазаны4 да 3урылысын 81м термодинамикалы3 потенциалларын т1рипле7 м6мкин. Екинши 17лад фазалы3 5ти7леринде атомлы3 3урылыс 6зликсиз, ал кристалды4 симметриясы секири7 менен 5згереди. Усыны4 менен бирге кристалды4 симметриясыны4 6зликсиз 5згери7и м6мкин емес екенлиги атап 5темиз. Мысалы кублы3 3урылыста2ы атомларды4 киши а7ысы7лары тетрагоналлы3 ямаса ромбоэдрлик майысы72а алып келеди, я2ный кублы3 симметрия бирден жо2алады. Солай етип екинши 17лад фазалы3 5ти7 но3атында еки фазаны4 3урылысы да. 8алы да бирдей болады. Ал биринши 17лад фазалы3 5ти7инде болса 81р 3ыйлы 3урылыс3а 81м 31сийетлерге ийе бол2ан еки фаза те4 салма3лы3та турады.

Бир фазаны4 симметриясыны4 екинши фазаны4 симметриясыны4 подгруппасы болату2ынлы2ы екинши 17лад фазалы3 5ти7лерини4 е4 18мийетли 5згешелигини4 бири болып табылады. Себеби атомлар а7ыс3анда тек 2ана айырым симметрия элементлери жо2алып, бас3алары са3ланып 3алады. Симмериясы жо3ары бол2ан фаза 1детте жо3ары температуралы фаза болып табылады. Усыны4 менен бирге е4 жо3ары симметриялы фазада нолге те4 бол2ан, ал симметрия т5менлеген сайын нолден баслап белгили бир шекке ийе м1ниске шекем 5сету2ын базы бир шама бар болады (бул шаманы 5ти7 параметри ямаса т1ртип параметри деп те атайды). Соны4 менен бирге 5ти7 параметрини4 5згериси фазалы3 5ти7деги симметрияны4 5згерисин т1рипле7 ушын толы3 жеткиликли болады. Термодинамикалы3 потенциалды4 усы параметрден 21резлилигин табы7 еки фазаны да толы3 т1рипле7ге м6мкиншилик береди. Те4салма3лы3 фазаны4 3урылысы менен термодинамикалы3 потенциалды термодинамикалы3 потенциалды4 минимумын табы7 ар3алы 1мелге асырылады.

Мысал ретинде тригилцинсульфат кристалында2ы м6мкин бол2ан ферроэлектриклик фазалы3 5ти7ди 3араймыз [Тригилицинсульфат $(NH_wCH_wCOOH)*Y_wSO_r$ Кюри температурасы ro^{0}C бол2ан ферроэлектрик болып табылады. Кюри но3атынан жо3ары температураларда триглицинсульфат моноклин п1нжереге ийе болып PW_q/m симметрияны4 ке4исликтеги топарына киреди. Ферроэлектриклик фазалы3 5ти7 т1ртип-бийт1ртип типиндеги 5ти7 болып табылады 81м 5жире температураларында да элементар 3утыша моноклинлик болып 3алады]. Бундай кристалларда электр поляризациясы векторы **P** 5ти7 параметри болып табылады. Кристалды4 симметриясы термодинамикалы3 потенциал Ф ти4 **P** векторыны4 3ура7шыларына 21резлилигине белгили бир шек 3ояды. Кристалды4 симметриясы топарыны4 барлы3 т6рлендири7леринде Ф ти4 5згермеслигине байланыслы ол $P_‡$ 3ура7шыларыны4 инвариантлы3 комбинацияларыны4 функциясы болып табылады.

Триглицинсульфатты4 жо3ары температуралы фазасыны4 симметриясыны4 но3атлы3 топары C_{wh} = w/m. z к5шери екинши т1ртипли симметрия к5шери ба2ытында ба2ытлан2ан. Бундай жа2дайда поляризация векторыны4 3ура7шыларыны4 т5рт инвариант комбинацияларына ийе боламыз` $P_x^2$, $P_y^2$, $P_xP_y$ 81м $P_z^2$. Солай етип кристалды4 симметриясынан термодинамикалы3 потенциалды4 поляризациядан 21резлилигини4 мынадай болату2ынлы2ын к5ремиз`

$$\Phi = \Phi(P_x^2,\ P_y^2,\ P_xP_y,\ P_z^2,\ T,p). \qquad (IV\text{-}tr)$$

Бул жерде Т температура, р басым. Ф ти4 бас3а шамалардан 21резлилигин киши деп есаплап итибар2а алмаймыз (мысалы деформация 81м т.б.). (IV-tr)-а4латпада симметрияны4 бери7и керек бол2ан барлы3 информациялар бар. Енди (IV-tr)-а4латпаны4 минимум болы7 м1селесин шешемиз. Жо3ары температуралы фазада минимумны4 Р = 0 ге с1йкес келету2ынлы2ын пайдаланамыз 81м биринши 17лад фазалы3 5ти7и орын алады деп есаплаймыз. Сонлы3тан фазалы3 но3ат 1тирапында **Р** ны4 барлы3 3ура7шылары киши болып, Ф ти инвариант комбинацияларды4 д1режелери бойынша жаямыз. Д1слеп инвариантлар бойынша сызы3лы ($P_\dagger$ бойынша квадратлы3) бол2ан а2залар менен шекленемиз`

$$\Phi = \Phi_0(T,p) + A_{qq}(T,p) P_x^2 + wA_{qw}(T,p) P_x P_y + $$
$$+ A_{ww}(T,p) P_y^2 + A_{ee}(T,p) P_z^2 . \qquad (IV\text{-}tt)$$

Жо3ары температуралы фазада 81м фазалы3 5ти7 но3атында (IV-tt) ти4 минимумы $P_\dagger$ = 0 но3атына с1йкес келеди, я2ный P_x, P_y, P_z лер бойынша квадратлы3 форма о4 м1ниске ийе болы7ы керек. Сонлы3тан жо3ары температуралы фазада 81м 5ти7 но3атында

$$A_{qq} \geq 0\text{\textasciitilde} \qquad A_{qq}A_{ww} \geq 0\text{\textasciitilde} \qquad A_{ee} \geq 0 \qquad (IV\text{-}ty)$$

те4сизликлерини4 орынланы7ы керек.

Фазалы3 5ти7 но3атында бул те4сизликлерди4 біре7и те4ликке айланы7ы керек. Бундай болма2анда 5ти7 но3аты 3асында барлы3 6ш те4сизлик орынлан2ан 81м фазалы3 5ти7 болма2ан болар еди. Т5менги температуралы фазада бул те4сизлик бузылады 81м термодинамикалы3 потенциалды4 минимумы нолден 5згеше бол2ан P_x, P_y лерде (егер екинши те4сизлик бузылса) ямаса P_z те (егер 6шинши те4сизлик бузылса) орын ал2ан болар еди.

Д1слеп A_{ee} коэффицинетини4 белгисини4 5згерету2ын жа2дайды 3арайы3. (IV-ty) да2ы екинши те4сизлик т5менги температуралы фазада да орынланату2ын бол2анлы3тан термодинамикалы3 потенциалды4 минимумы $P_x = P_y = 0$ бол2ан жа2дай2а с1йкес келеди. Бул м1нислерди (IV-tr) ке 3ойып Ф ти P_z^2 бойынша екинши т1ртипли а2за2а шекемги д1лликте жайса3

$$\Phi = \Phi_0 + \alpha(T - T_c) P_z^2 + \frac{1}{2}\beta P_z^4 \qquad (IV\text{-}tu)$$

а4латпасын аламыз. Бул жерде $A_{ee} = \alpha(T - T_c)$. α, β, Т шамалары температура2а 1ззи байланыс3ан. Сонлы3тан бул байланысты есап3а алмаймыз. Аны3лы3 ушын $\alpha > 0$ деп есаплаймыз, ал $\beta > 0$ деп болжаймыз ($\beta < 0$ биринши 17лад фазалы3 5ти7лерине с1йкес келеди). Бундай жа2дайда $T > T_c$ да (IV-tu)-а4латпаны4 минимумы $P_z = 0$ ге (жо3ары температуралы фаза), ал $T < T_c$ температураларында

$$P_z = \sqrt{\frac{a\,(T_c - T)}{b}} \qquad (IV\text{-}ti)$$

2а с1йкес келеди, я2ный поляризация $T = T_c$ температурасынан баслап пайда болады 81м температура т5менлеген сайын 6зликсиз 5седи. Демек $T = T_c$ температурасында 8а3ыйЗатында да екинши 17лад фазалы3 5ти7и орын алады. Т5менги температуралы фазаны4 ноЗатлыЗ топары C_w - w топары менен т1рипленеди, ал те4салмаЗлыЗ фазаны4 термодинамикалыЗ потенциалы

$$\Phi = \Phi_0 - \frac{a^2(T_c - T)^2}{2b}$$

а4латпасы менен бериледи.

Энтропия S = $\partial\Phi/\partial T$ 5ти7 ноЗатында 6зликсиз 5згереди (я2ный екинши 17лад 5ти7 жыллылы2ы нолге те4), ал жыллылыЗ сыйымлылы2ы ™c_p = $\alpha^w T_c/\beta$ секирип 5згереди. Соны4 менен бирге т5мен симметрия2а ийе фазада жоЗары симметриялы фаза2а Зара2анда жыллылыЗ сыйымлылы2ы 6лкен м1ниске ийе. Диэлектрлик Забылла2ышлыЗ (поляризациялан2ышлыЗ) $\chi = (\partial^w\Phi/\partial P^w)^{-q}$ = w[α(T - T_c) + eβP_z^2]$^{-q}$. ЖоЗары температуралы фазада χ = w/α(T - T_c) (Кюри-Вейсс нызамы), ал т5менги температуралы фазада χ = r/α(T_c - T), я2ный χ 5ти7 температурасында шексизликке айланады. Тап усындай фазалыЗ 5ти7 триглицинсульфатта ro^{0}C да орын алады.

V бап. Кристаллардың электрлик ҳәм оптикалық қәсийетлери

§ 37. Кирисиў

Кристалларды4 электрлик З1сийетлери деп электр поляризациясы Зубылысы менен Зандай да байланысы бар Зубылысларды4 жыйна2ына айтады. Айырым жа2дайларда бундай поляризация сыртЗы т1сир астында емес, ал 5зинен 5зи (спонтан т6рде) болы7ы м6мкин. БасЗа жа2дайларда поляризация Зыздыры7ды4, электр майданын т6сири7ди4, механикалыЗ ж6к т6сири7ди4 н1тийжесинде ж6зеге келеди.

ФизикалыЗ кристаллографияда кристалларды4 электрлик З1сийетлери машЗаласы салыстырмалы толыЗ изертленилген машЗалаларды4 бири болып табылады. Е4 д1слеп диэлектриклерди4 анизотропиясы менен байланысЗан З1сийетлер тере4 изертленди. Мысалы кристалларды4 диэлектрлик си4иргишлиги ε тензорлыЗ шама болып табылады. Бундай жа2дай диэлектриклик Забылла2ышлыЗЗа, салыстырмалы электр 5ткизгишликке 81м басЗа да З1сийетлерге тийисли.

Айырым диэлектрликлик кристаллар2ы спонтан поляризацияны4 болы7ы изотроп кристалларда баЗланбайту2ын пироэлектрлик эффектти4 ж6зеге кели7ин болдырады. Бул Зубылыс кристалды Зыздыр2анда2ы (ямаса саЗынлатЗанда2ы) спонтан поляризациясыны4 5згери7ине байланыслы. Кристалларды4 салыстырмалы жа4а классы бол2ан ферроэлектриклер пироэлектриклерди4 киши классларына киреди. Ферроэлектриклер ушын кристалды4 доменлерге (спонтан поляризациялан2ан областлар2а) б5лини7и т1н. Усы доменлик Зурылыс ферроэлектриклерди4 физикалыЗ З1сийетлерини4 5згешелигин т1мийинлейди.

Пьезоэффект (механикалыЗ т1сирлер астында кристалларда электр поляризациясыны4 пайда болы7ы ямаса сырттан т6сирилген электр майданында2ы кристалларды4 деформациясы) Зубылысы да кристалларды4 анизотропиясына байланыслы.

§ ei. Кристаллардыҳ поляризациясы

Сырт3ы электр майданына 3ойыл2ан диэлектрик поляризация2а ушырайды. Диэлектрикти4 ишиндеги электр майданыны4 кернe7лилиги **E** ни4 оны4 поляризациясы **P** ны есап3а ал2ан жа2дайда 2ана аны3ланы7ы м6мкин. E 81м P векторлары менен 3атар диэлектрикли4 8алы электр индукциясы векторы **D** менен т1рипленеди. Усы **D**, **E** 81м **P** векторлары арасында т5мендегидей те4ликлер менен аны3ланату2ын байланыслар бар`

$$\mathbf{P} = \alpha\mathbf{E},\ \mathbf{D} = \mathbf{E} + r\pi\mathbf{P},\ \mathbf{D} = \varepsilon\mathbf{E}\ \ (\varepsilon = I + r\pi\alpha). \qquad (V\text{-}I)$$

Бул а4латпаларда2ы α диэлектрикти4 полярлан2ышлы2ы, ε диэлектрикти4 диэлектриклик си4иргишлиги. Диэлектриклерди 5з ишине алату2ын денелерди4 ы3тыярлы жыйна2ы ушын электростатикалы3 майдан те4лемелерини4 толы3 системасы т5мендегидей т6рге ийе болады`

$$\mathbf{E} = -\mathrm{grad}\varphi,\quad \mathbf{D} = \varepsilon\mathbf{E},\ \mathrm{Div}\mathbf{D} = r\pi\rho,\ D_{wn} - D_{In} = r\pi\sigma. \qquad (V\text{-}w)$$

Бул жерде φ электр майданы потенциалы, ρ еркин электр зарядларыны4 к5лемлик ты2ызлы2ы, D_{wn} менен D_{In} индукция векторыны4 еки диэлектрик арасында2ы шегарада2ы нормал 3ура7шылары, ал σ болса еркин электр зарядларыны4 усы беттеги ты2ызлы2ы.

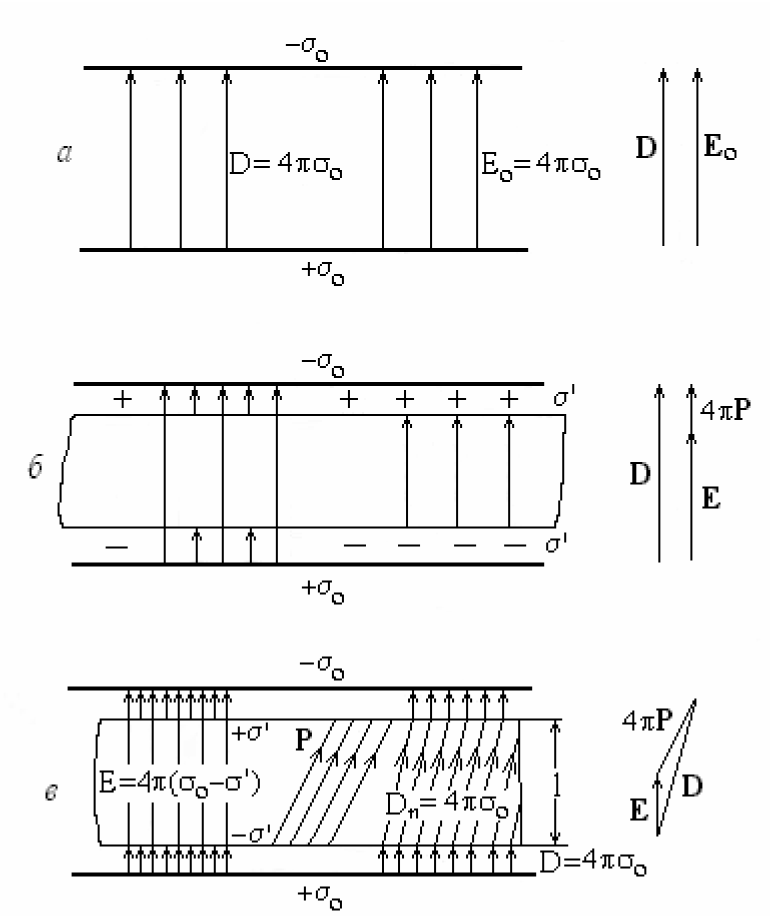
Изотроп орталы3лар ушын ε менен α скалярлар болып табылады. Бул шамалар еки поляр векторды байланыстырату2ын бол2анлы3тан кристалларда, соны4 менен бирге барлы3 анизотроп орталы3ларда екинши рангалы тензорлар болып табылады 81м ε_{ij}, α_{ij} ар3алы белгиленеди. **D**, E 81м **P** векторлары арасында2ы байланыслар et-с67ретте келтирилген. Бул с67ретте диэлектрикти4 бетине белгиси еркин зарядларды4 белгисине 3арама-3арсы зарядларды4 жыйналату2ынлы2ы к5ринип тур. Усы жа2дайды 81м (V-I) ди 3анаатландыры7 з1р6рлигин есап3а алып диэлектрикти4 ишинде **P** векторыны4 ба2ытын терис белгиге ийе зарядлардан о4 белгиге ийе зарядлар2а 3арай аламыз.

Онсагерди4 симметрия принципине с1йкес статикалы3 электр майданында магнит майданы болма2ан жа2дайларда ε_{ij} 81м α_{ij} тензорлары симметриялы3 тензорлар болып табылады.

Кристалларда улы7ма жа2дайларда **D** 81м **E** векторларыны4 ба2ытлары 5з ара параллел емес бол2анлы3тан оптикада2ы сыя3лы усы векторлар ба2ытында2ы ε_E 81м ε_D диэлектриклик си4иргишлери т6синиклерин киргизи7имиз м6мкин. ε_E шамасы **E** векторыны4 усы вектор2а т6сирлген **D** ны4 проекциясынан неше есе 3ыс3а екенлиги а42артады. Тап сол сыя3лы ε_D шамасы **D** векторыны4 усы вектор ба2ытында2ы **E** ни4 проекциясынын неше есе узын екенлигин а4латады.

Экспериментте e_E шамасы 5лшенеди. Бул шама ε_I, ε_w 8м ε_e бас диэлектриклик си4иргишликлерди4 м1нислери 81м **E** векторыны4 ба2ытла7шы косинуслары менен былайынша байланыс3ан`

$$\varepsilon_E = c_I^{w}\varepsilon_I + c_w^{w}\varepsilon_w + c_e^{w}\varepsilon_e. \qquad (V\text{-}e)$$



еt-с67рет. Вакуумдаги (*а*), изотроп диэлектриктеги (*б*) 81м конденсатор астарлары арасында орналастырыл2ан анизотропиялы3 диэлектрик пластинада2ы (*в*) **D**, **E** 81м rπ**P** векторлары. σ 81м σ′ лар еркин 81м поляризациялан2ан (байланыс3ан) зарядларды4 ты2ызлы2ы.

Атомлар менен молекулаларды4 поляризациясы процессин 3ара2анда (микропроцесслерди 3ара2анда) *ишки* ямаса *т1сир ети7ши электр майданы* т6синиги 6лкен 18мийетке ийе. Себеби макроскопиялы3 3арал2анда атомлы3 3урылысты есап3а алмайту2ын электр майданыны4 керне7лилиги **E** н1зерде тутылады. Атомлар менен молекулаларды4 поляризациясы бул майдан ар3алы аны3ланбай, ишки т1сир ети7ши майдан @ ар3алы аны3ланады.

!ззи поляризация2а ушырайту2ын изотроп диэлектриклик орталы3 ушын Лоренц жа3ынласы7ы дурыс н1тийже береди`

$$@ = \mathbf{E} + \frac{4p}{3}\mathbf{P}. \qquad \text{(V-r)}$$

Бундай жа3ынласы7да Клаузиус-Мосотти формуласы дурыс н1тийже береди. Бул формула диэлектрикти4 диэлектриклик си4иргишлигин айырым микроб5лекшени4 полярлан2ышлы2ы η менен былай байланыстырады`

$$\frac{M}{r}\,\frac{e-1}{e+2} = \frac{4p}{3}\mathrm{N}_0\eta. \qquad \text{(V-t)}$$

Бул формулада2ы М молекулалы3 салма3, ρ диэлектрикти4 ты2ызлы2ы, N_0 Авагадро саны. Кейинги а4латпаны4 о4 т1репи моллик поляризация деп аталады.

§ ео. Поляризацияны4 тийкар2ы т6рлери

Ферроэлектриклик 31сийетке ийе емес диэлектриклердеги поляризацияны т5рт т6рге б5ли7 м6мкин`

I) электонларды4 ядролар2а салыстыр2анда2ы а7ысы7ына байланыслы бол2ан поляризация (электронлы3 а7ысы7 поляризациясы)~

w) кристаллы3 п1нжерени4 ионларыны4 бир бирине салыстыр2анда2ы а7ысы7ына байланыслы поляризация (ионлы3 а7ысы7 поляризациясы)~

е) кристалды4 3урамында2ы тура3лы дипол моментлерини4 ба2ытларыны4 5згери7ине байланыслы поляризация (жыллылы3 ориентациялы3 поляризациясы)~

r) 1ззи байланыс3ан ионларды4 3аз2алысына байланыслы бол2ан поляризация (жыллылы3 ионлы3 поляризациясы).

Поляризацияны4 кейинги еки т6ри 1детте релаксациялы3 поляризациялар деп аталады.

Электронлы3 а7ысы7 поляризациясы барлы3 диэлектриклер ушын улы7малы3 3убылыс болып табылады. Бул поляризация атом ямаса ионда2ы 1ззи байланыс3ан электронларды4 серпимли а7ысы7ы н1тийжесинде ж6зеге келди. Электронлы3 а7ысы7 поляризациясыны4 орна7ы ушын з1р6р бол2ан 7а3ыт жа3тылы3 тербелислери д17ири менен барабар 81м $I0^{-Ir}$ - $I0^{-It}$ секундты 3урайды.

Диэлектрикти4 диэлектриклик си4иргишлиги ε улы7ма жа2дайларда поляризацияны3 81р 3ыйлы поляризациясы менен байланыс3ан болы7ы м6мкин. Бира3 оптикалы3 жийиликлер областында ε дерлик толы2ы менен электронлы3 полярлан2ышлы3 пенен аны3ланады. Бул жа2дайда n^w = ε (n сыны7 к5рсеткиши) 81м (V-t) формуласы бир бирлик к5лем ушын т5мендегидей т6рге ийе болады`

$$\frac{n^2-1}{n^2+2} = \frac{4p}{3} N_i \eta_i. \qquad (V\text{-}y)$$

Бул а4латпада N_i к5лем бирлигиндеги i-сортта2ы атомлар саны, η_i i-атомны4 электронлы3 полярлан2ышлы2ы.

(V-y) формула ж1рдеминде аны3лан2ан сыны7 к5рсеткиши n ди пайдаланып электронлы3 полярлан2ышлы3 η ны4 м1нисини4 д1л м1нисин есапла7 м6мкин. Бул шаманы4 м1ниси атомларды4 радиусыны4 кубына, я2ный ~$I0^{-wr}$ $см^e$ 3а те4.

Поляр емес молекулалардан турату2ын кристалларда (алмаз, нафталин, парафин) таза т6рдеги электронлы3 поляризация ба3ланады. Бундай материалларда барлы3 жийиликлерде де n^w = ε те4лиги орынланады.

Ионлы3 а7ысы7 поляризациясы тийкарынан ионлы3 кристалларда (ионлы3 байланыс орын алату2ын кристалларда) ба3ланады. Бундай кристалларда ионлы3 поляризация менен бир 3атарда электронлы3 а7ысы7 поляризациясы да ба3ланады. Бира3 бул жа2дай тийкарында бир 3атар ионлы3 кристалларды4 диэлектриклик си4иргишлигин т6синдири7 м6мкин емес. Мысалы, хлорлы натрий кристаллы ушын

n = l.t, ($n^{w} = \varepsilon_{\infty}$ = w.wt). Ал статикалыЗ диэлектриклик си4иргишлик ε_{s} = t.yw. СтатикалыЗ 81м оптикалыЗ диэлектриклик си4иргишликлер арасында2ы бундай айырманы ионлыЗ а7ысы7 поляризациясы менен байланыстыры7 керек.

§ r0. Электр 5ткизгишлик

СызыЗлы диэлектрик кристаллар тийкарынан ионлыЗ 5ткизгишликке ийе болады (меншикли 81м ЗосымталыЗ).

К5п санлы кристалларда2ы 5ткизгишикти изертле7 тийкар2ы тоЗ тас7шылардыӨ зарядлары бирдей бол2анда киши 5лшемли ионлар, ал 81р Зыйлы зарядЗа ийе шама менен бирдей 5лшемли ионлар бар жа2дайларда е4 киши зарядЗа ийе ионлар екенлиги к5рсетеди. Мысалы NaCl кристалында тийкар2ы тоЗ тасы7шылар Na^{+} ионы, ал $PbCl_{w}$ кристалында Cl^{-} екенлиги к5рсетеди. Айырым кристалларда электр 5ткизгишлик еки белгиге ийе ионлар2а да байланыслы (мысалы PbI_{w} кристаллы). Ал жоЗары температураларда тоЗты тасы72а 81р Зандай зарядЗа ийе ионлардыӨ барлы2ы да Затнасады (мысалы y00^{0}C дан жоЗары температураларда NaCl, Na@ кристалларында Cl^{-} 81м @$^{-}$ ионлары да тоЗ тасы72а Затнаса баслайды).

К6шли электр майданларында ионлыЗ 5ткизгишликке электронлыЗ 5ткизгишлик Зосылады. Бундай эффект кварцта, тас дузында, басЗа да кристалларда табылды.

l см^{e} к5лемдеги электр майданы т1сиринде Зоз2алату2ын б5лекшелер саны n дана, 81р бир б5лекшени4 заряды е ге те4, ал Зоз2ал2ышлы2ы χ болса, онда 5ткизгишлик σ ны4 шамасы былай есапланады`

$$\sigma = ne\chi. \qquad \text{(V-u)}$$

ИонлыЗ кристалларда электр 5ткизгишлик кристаллыЗ п1нжере ионларыны4 Зоз2алысы менен байланыслы болы7ы да м6мкин. Бундай электр 5ткизгишлик меншикли 5ткизгишлик деп аталады 81м жоЗары температураларда жаЗсы баЗланады. Сонь4 менен бирге ионлыЗ кристьаллардыӨ электр 5ткизгишлиги Зосымта ионларды4 Зоз2алысы менен байланыслы болы7ы м6мкин. Усындай ионлар кристалды4 Зосымталы 5ткизгишлигин т1миййинлейди. Бундай 5ткизгишлик салыстырмалы т5мен температураларда айЗын баЗланады. К5пшилик жа2дайларда бир кристалда электр 5ткизгишлик п1нжере ионлары менен де, Зосымта ионлар менен де ж6зеге келеди. ИонлыЗ емес кристаллар (мысалы молекулалыЗ кристаллар) тийкарынан Зосымта электр 5ткизгишликке ийе болады.

Кристалларда2ы ионларды4 Зоз2алысы еки жол менен 1мелге асады`

а) олар п1нжерени4 т6йинлери арасында Френкель бойынша дефектлерди пайда ети7 менен Зоз2алады.

б) олар ийеленбеген т61инлер арЗалы секирип Зоз2алады (Шоттки бойынша дефектлер), ионларды4 бундай Зоз2алысы тесикшелерди4 Зоз2алысы сыпатында Заралады.

Еки т6рли электр 5ткизгишлик те

$$\sigma = Ae^{-B/T} \qquad \text{(V-i)}$$

а4латпасы менен а4латылады. Бул а4латпада2ы В активация энергиясы деп аталады 81м температура2а 21резли емес. В шамасы кристалда2ы ионны4 энергиясы 81м бир тура3лы 8алдан екинши тура3лы 8ал2а к5шири7 ушын з1р6р бол2ан энергия2а те4.

Жо3арыда кристалларды4 жо3ары температураларда меншикли 5ткизгишликке, ал т5менги температураларда 3осымталы 5ткизгишликке ийе болату2ынлы2ы айтыл2ан еди. Бул жа2дай

$$\sigma = A_l e^{-B_1/T} + A_w e^{-B_2/T} \qquad (V\text{-o})$$

формуласы менен аны3ла7 з1р6рлигин келтирип шы2арады. Бул а4латпада2ы l индекси п1нжере ионларына, ал w индекси 3осымта ионлар2а тийисли. Бул а4латпадан B_l активация энергиясыны4 B_w активация энергиясынан 6ткен екенлиги к5ринип тур.

Ионлы3 емес кристалларды4 электр 5ткизгишлиги

$$\ln\sigma = A - B/T \qquad (V\text{-q0})$$

формуласы менен т1рипленеди. Бул формула (V-i) бенен с1йкес келеди. Бул 5ткизгишлик к5пшилик жа2дайларда 3осымта ионлар2а байланыслы. Кварц ушын электр 5ткизгишлик с к5шери ба2ытында (оптикалы3 к5шер) о2ан перпендикуляр ба2ытта2ыдан арты3 (активация энергиясы с1йкес 0.ii 81м q.ew эв 3а те4). Кварцты4 салыстырмалы 3арсылы2ы оптикалы3 к5шер ба2ытнда q0[qr] ке, ал перпендикуляр ба2ытта (шама менен) q0[qy] ом*см ге те4. t00^{0}С температурада кварцты4 3арсылы2ы шама менен бес т1ртипке т5менлейди. Бул кристалда2ы бир зарядлы 3осымта Na, K, L‡ ионлары тийкар2ы то3 тасы7шылар болып табылады.

§ rq. Диэлектриклик жо2алты7лар

%згермели электр майданында диэлектриклер 1детте 3ызады. Қыздыры7 ушын жумсалату2ын 5згермели то3ты ***диэлектриклик жо2алы7лар*** деп аталады. Толы3 диэлектриклик жо2алы7 тура3лы керне7ге с1йкес кели7ши 5ткизгишлик жо2алы7ынан 81м диэлектриктеги а7ысы7 то2ыны4 актив 3ура7шысы менен байланыслы бол2ан жо2алы7ды4 3осындысынан турады.

Солай етип диэлектриклик жо2алы7лар поляризацияны4 орна7ы менен байланыслы болып шы2ады. Бира3 электронлы3 81м ионлы3 а7ысы7ларды4 тез 1мелге асату2ынлы2ына байланыслы электр майданыны4 энергиясыны4 сезилерликтей жо2алы7ына алып келмейди. Усындай поляризация2а ийе кристалларда2ы диэлектриклик жо2алы7лар ж6д1 аз.

Жыллылы3 3оз2алыслары н1тийжесинде 1мелге асату2ын поляризация2а ийе кристалларда (жыллылы3 ориентациялы3 81м жыллылы3 ионлы3) поляризацияны4 орна7ы абсорбциялы3 то3лар менен байланыслы. %згермели керне7лерде абсорбциялы3 то3лар еки 3ура7шыдан турады` бире7и (j_a) т6сирилген керне7 менен бир фаза2а ийе болып то3ты4 актив 3ура7шысын пайда етеди, екиншиси ($j_□$) керне7ден фазасы бойынша π/w шамасына алдыда ж6рету2ын то3ты т1риплейди 81м то3ты4 реактив (сыйымлылы3) 3ура7шысы болып табылады. Солай етип диэлектрикте поляризация

1стелик пенен орнайту2ын болса 5згермели майданда 5ткизгишлик жо3 бол2ан жа2дайларда да диэлектриклик жо2алы7лар ба3ланады.

§ rw. Пироэлектриклик 3убылыслар

Айырым кристаллы3 денелерде 3ыздыр2анда электр зарядыны4 пайда болату2ынлы2ы (бир т1рпини4 о4, ал екинши т1репини4 терис заряд пенен зарядланату2ынлы2ы) к5п 7а3ытлардан бери белгили. Бул 3убылыс ***пироэлектрлик*** деп аталады. К5п 7а3ытлар да7амында турмалин кристаллы пироэлектрлик кристал сыпатында изертленип келди. Кейинирек пироэлектрлик 31сийетке барлы3 он поляр класс3а (q, w, e, r, y, m, mmw, em, rmm, ymm) кри7ши диэлектриклерди4 ийе болы7ыны4 кереклиги аны3ланды.

Пироэлектриклик 31сийетке спонтан поляризацияланату2ын барлы3 кристаллар ийе, ал спонтан поляризацияны4 температура2а байланыслы 5згери7и ***пироэлектрлик эффект*** деп аталады.

Пироэффектти т1риплейту2ын термодинамикалы3 3атнасларды тал3ыла7 кери эффектти4 орын алату2ынлы2ын к5рсетеди` кристалды4 спонтан поляризациясын 5згерти7ши электр майданы т6скенде оны4 температурасыны4 5згери7и керек. Бул эффект электркалориялы3 эффект деп аталады.

К5п 7а3ытлар да7амында пироэлектрлик 81м электрокалориялы3 эффектлер 3ызы3лы физикалы3 3убылыслар сыпатында 3аралып келди 81м 1мелде пайдаланыл2ан жо3. Себеби бул 3убылыслар тийкарынан сызы3лы пироэлектриклерде изертленилди.

Пироэлектриклик 81м электркалориялы3 эффектлерге 3ызы2ы7шылы3 ферроэлектрик кристалларда ба3ланату2ын 31сийетлерди4 18мийетлигине (спонтан поляризацияны4 температура2а 21резлилиги, фазалы3 айланыслар, ферроэлектриклик фазалы3 айланысты4 н1тийжесинде кристалларды4 доменлерге б5лини7и 81м усы2ын байланыслы бол2ан сызы3лы емес физикалы3 31сийетлер) байланыслы бирден артты. *1зирги 7а3ытлары пироэлектрлик кристаллар инфра3ызыл нурланы7ларды сезгир 3абылла2ышларда, температураны4 5згери7ин 5лше7ши 1сбапларда, жылылы3 энергиясын электр энергиясына айландыры7шы 3урылысларда ке4нен 3олланылады.

Пироэлектрлик эффект те4лемеси температура ™T шамасына 5згергендеги спонтан поляризацияны4 5сими ™P_s ти т1риплейди. Биринши жа3ынла7да ™P_s 81м ™T шамалары арасында сызы3лы байланыс орын алады`

$$™P_s = p™T. \qquad (V\text{-}qq)$$

Бул а4латпада p пироэлектрлик коэффициент. T менен P_s ти4 шексиз киши 5симин алса3`

$$\partial P_s/\partial T = p. \qquad (V\text{-}qw)$$

Температура2а байланыслы P_s ти4 5згери7и еки себепке байланыслы болады. Биринши гезекте температура 5згергенде кристал 5зини4 5лшемлери 5згертеди` 3ысылады ямаса ке4ейеди. Демек температурны4 5згери7и менен кристалды4 3урылысында 5герислер болма2ан жа2дайда да кристалды4 спонтан поляризациясы

5згериске ушырайды. Себеби спонтан поляризация2а алып кели7ши кристалды4 к5лем бирлигиндеги зарядлар му2дары менен диполлар моментлери 5згериске ушырайды. СонлыЗтан пироэлектрлик эффектте кристалды4 жыллылыЗ ке4ейи7ине (я2ный деформациясына) байланыслы да б5лим болату2ынлы2ы т6синикли. Пироэлектрлик эффектти4 деформация2а байланыслы бол2ан б5леги (бул б5лекти пьезоэлектрлик б5леги деп та атаймыз) ***екинши*** ямаса ***жал2ан*** пироэлектрлик эффект деп атаймыз. Бул б5лекти т1риплейту2ын коэффициентти p'' арЗалы белгилеймиз.

Д1слепки 7аЗытлары пироэлектрлик эффектти толы2ы менен екинши пироэлектрлик эффект пенен байланыслы деп есаплады. БираЗ кейинирек жылылыЗ ке4ейи7и болма2ан жа2дайда да (кристал Зысып Зойыл2ан жа2дайларда да) пироэлектрлик эффектти4 баЗланату2ынлы2ы аныЗланда. Кристалды4 деформациясына байланыслы болма2ан пироэффектти4 б5лимин биринши ямаса 8аЗыйЗый пироэлектрлик эффект деп атаймыз 81м p' 81рипи менен белгилеймиз. СызыЗлы пироэлектриклерде 8аЗыйЗый пироэффект толыЗ эффектти4 w-t процентин 2ана Зурайды.

Биринши 81м екинши пироэффектлерге б5линген пироэффект те4лемесин енди былай жазамыз`

$$™P_s = (p' + p'')™T = p™T. \qquad (V\text{-}qe)$$

$™P_s$ векторлыЗ шама бол2анлыЗтан p, p', p'' лер де векторлыЗ шама болып табылады.

СызыЗлы диэлектриклерде 5жире температураларында 1детте p температурадан дерлик 21резли емес. p ны4 абсолют м1ниси бир электростатикалыЗ бирликке жаЗын. Мысалы турмалин ушын p = - q.e СГСЭ бирлигине те4. Турмалинни4 поляризацияланы7ы ушын к5ргизбели мысал келтири7 м6мкин. Пироэлектрлик к5шерине перпендикуляр етип кесилген Залы4лы2ы 0.q см бол2ан турмалин q0 градусЗа Зыздырыл2анда шама менен $t*q0^{-o}$ к/мс^{w} электр зарядын топлайды, ал пластинка бетлери арасында2ы потенциаллар айырмасы qw00 вольттей болады.

ЭлектрокалориялыЗ эффект т5мендегидей те4леме менен т1рипленеди`

$$™T = ‰™E \qquad (V\text{-}qr)$$

ямаса дифференциал т6рде

$$‰ = \partial T/\partial E. \qquad (V\text{-}qt)$$

‰ электркалориялыЗ эффект коэффициенти.

‰ 81м p коэффициентлери арасында2ы байланысты а4сат аныЗла72а болады.

P_s спонтан поляризация2а ийе пироэффектти термодинамикалыЗ жаЗтан Зара2анымызда усы P_s ти4 5згериси тек 2ана кристалды4 белгили бир му2дарда2ы жылылыЗ услап туры7ына т1сир етеди деп есаплаймыз. Бул жа2дайда кристалды4 ишки энергиясы 5згерисиз Залады. СонлыЗтан

$$dU = 0 = EdP + TdS,\ T = - EdP/dS, \qquad (V\text{-}qy)$$

$$\frac{¶T}{¶E} = -\frac{¶P}{¶S} = -\frac{¶P}{¶T}\frac{¶T}{¶S}. \qquad (V\text{-}qu)$$

Бул а4латпаларда2ы S энтропия. $\frac{¶T}{¶E}$ = ‰, $\frac{¶P}{¶T}$ = p бол2анлы3тан (dS = dQ/T, dQ = dTρcJ (ρ ты2ызлы3, с кристалды4 жыллылы3 сыйымлылы2ы, J жыллылы3ты4 механикалы3 эквиваленти). Сонлы3тан

$$‰ = -pT/\rho cJ. \qquad (V\text{-}qi)$$

Есапла7лар бойынша 3алы4лы2ы q мм бол2ан турмалин кристаллы е00 в керне7 т6сирилгенде температурасын $t*q0^{-t}$ градус3а 5згертеди.

§ re. Пьезоэлектрлик эффект 81м электрострикция

Пьезоэлектрлик эффект деп механикалы3 керне7 (деформация) менен электр майданын (индукция, поляризация) сызы3лы (пропорционаллы3) байланыс 3убылысларды4 жыйна2ын айтамыз.

Механикалы3 керне7лер тензорын $t_{\ddagger k}$, деформацияларды $\square_{\ddagger k}$, электр майданыны4 керне7лилигин **E**, поляризацияны **P** (**P** = D/rπ) ар3алы белгилеймиз. Сонда пьезоэффект те4лемелери т5мендегидей т6ске ийе болады`

$$P_n = d_{nj\ddagger„j\ddagger}, \qquad r_{\ddagger j} = d_{m\ddagger j},$$
$$P_n = e_{n\ddagger j}\, r_{\ddagger j}, \qquad „_{j\ddagger} = -e_{mj\ddagger}E_m,$$
$$E_m = -h_{m\ddagger j}\, r_{\ddagger j}, \qquad „_{j\ddagger} = -h_{nj\ddagger}P_n, \qquad (V\text{-}qo)$$
$$E_m = -g_{m\ddagger j„j\ddagger}, \qquad r_{\ddagger j} = g_{n\ddagger j}P_n.$$

d, e, g 81м h шамалары е-рангалы поляр тензор болып табылады 81м пьезоэлектрлик коэффициентлер деп аталады. (V-qo) ды4 шеп т1репи менен о4 т1репиндеги ба2ана бойынша жазыл2ан те4лемелер с1йкес ту7ры 81м кери пьезоэффектлерди т1риплейди.

СГСЕ системасында е 81м h коэффициентлери электр поляризациясы 5лшем бирликлерине ийе ($см^{-q/w}*г^{q/w}*с^{-q}$), ал g менен d коэффицинетлери кери 5лшем бирликлерине ийе ($см^{q/w}*г^{-q/w}*с$).

Т1жирийбелер 7а3тында кристалды4 еки бети туйы3лын2ан ямаса ту7ы3ланба2ан болы7ы м6мкин. Егер кристалды4 (пластинканы4) σ′ пьезополяризациялан2ан зарядлар шы2ату2ын еки бети 5ткизгиш пенен тутастырыл2ан ямаса кристалды4 5зи 5ткизи7ши орталы3та жайлас3ан болса туйы3лан2ан деп есаплаймыз. Бетке 'а2ып} келген еркин заряд σ_0 81м ол т1репинен компенсацилан2ан σ′ шамасы жа2ынан те4, ал ба2ытлары менен 3арама-3арсы` $-\sigma_0 = \sigma'$. Кристалды4 еки бети туйы3ланба2ан болса ямаса кристал то3 5ткизбейту2ын орталы3та жайлас3ан болса кристалды 'туйы3ланба2ан} деп есаплаймыз 81м бул жа2дайда P = σ′. Бул жа2дайда электр индукциясы D = 0 (кристалда еркин зарядлар жо3). σ′ байланыс3ан зарядлары пластнка ишинде E = -rπσ′/ε майданын пайда етеди (ε кристалды4 диэлектриклик си4иргишлиги).

Кери пьезоэффектте P деп еркин зарядларды4 бетлик ты2ызлы2ы σ_0 ди т6синемиз. Бундай жа2дайда кристал туйы3ланба2ан. Сырт3ы электр майданы E берилсе кристал туйы3лан2ан болып табылады (батарея т1репинен туйы3лан2ан).

e-рангалы пьезоэлектрлик тензорлары d, e, g 81м h лар еки индекс бойынша (екинши 81м 6шинши) симметрия2а ийе бол2анлы3тан улы7ма жа2дайларда wu емес, ал qi 21резсиз 3ура7шылар2а ийе болады. Нолге те4 емес барлы3 3ура7шылар симметрия орайына ийе емес кристалларда 2ана болады (rew классы бул жа2дай2а кирмейди, бундай кристалларда симметриясына байланыслы пьезоэлектрлик коэффициентлер тензорларыны4 барлы3 3ура7шылары нолге те4). Бундай класлар саны w0` q, w, m, www, mmw, r, $\bar{4}$, rww, rmm, $\bar{4}$wm, e, ew, em, y, $\bar{6}$, yww, ymm, $\bar{6}$mw, we, $\bar{4}$em. Усындай класслар2а кири7ши кристаллар пьезоэлектриклер де болып табылы7ы м6мкин деп кесип айты72а болады.

Пьезоэффект орай2а 3арата симметриялы кристалларда болмайды. Себеби симметрия орайы бар кристалды4 симметриясын бир текли механикалы3 курне7ди4 симметриясын (бир текли механикалы3 керне7 де симметрия орайына ийе) 3осы7 симметрияны4 Кюри принципине с1йкес орай2а 3арата симметрия орайына ийе топар2а алып келеди. Бас3а с5з бенен айт3анда орай2а 3арата симметрия2а ийе кристалл деформацияла2аннан кейин де орай2а 3арата симметриялы болып 3алады. Бундай кристалларда поляр ба2ытлар болмайту2ын бол2анлы3тан электр поляризациясы орын алмайды.

Кварц (S‡O$_w$) е4 жа3сы изертленген пьезоэлектрлик кристал болып табылады. Кварцты4 т5менги термпературалы3 модификациясы (α кварц) ромбоэдрлик система2а жатады (ew классы, симметриясыны4 ке4исликтеги топары D_3^4 = Ce$_q$wq). %жире температурларында a = r.o0 Å 81м c = t.eo Å параметрлерине ийе элементар 3утышасында S‡O$_w$ 'молекуласы' жайлас3ан болады. Кристалды4 3урылысыны4 мотивин [S‡O$_r$] тетраэдрлери пайда етеди. Тетраэдрлер бираз майыс3ан` еки S‡-O аралы2ы q.yq, ал 3ал2ан еке7инде q.yw Å.

tue^{0}С температурасы 3аытнда кварц фазалы3 айланыс3а ушырайды 81м бул температурадан жо3ары температураларда гексагонал 3урылыс3а ийе болады (класс yww, симметриясыны4 ке4исликтеги топары D_6^5 = Py$_q$ww). Бул модификация β кварц деп аталады 81м ол tue-iu0^{0}С температуралар интервалында тура3лы. Жо3арыра3 температураларда кварцты4 ж1не тримидит 81м кристобалит деп аталы7шы еки модификациясы белгили.

Кварцты4 α 81м β модификациялары пьезоэлектрлик 31сийетлерге ийе.

Кварцта2ы пьезоэффектти4 баслы 5згешелиги оны4 симметриясына байланыслы Z к5шерини4 ба2ытында (с к5шери) пьезоэффектти4 ба3ланбайту2ынлы2ында болып табылады Кварцты4 1пи7айы пьезоэлектриклик кесимлери болып X 81м : кристаллофизикалы3 координата к5шерлерине перпендикуляр бол2ан X 81м : кесимлери болып табылады. X кесиндиси пластинкалары 1детте бойлы3, ал : кесиндиси пластинкалары к5лдене4 пьезоэффектти 3оздыры7 ушын 3алланылады.

X 5шерине перпендикуляр бол2ан пластинкада2ы бойлы3 пьезоэффектти4 те4лемеси

$$P_q = d_{qq„q}, \qquad (V\text{-}w0)$$

ал : к5шерине перпендикуляр бол2ан пластинкада2ы пьезоэффектти4 те4лемеси

$$P_{w} = - d_{qq„w} \qquad (V\text{-}wq)$$

т6рине ийе болады.

Жылжы7 керне7и менен болдырыл2ан пьезоэлектриклик поляризация d_{qr} пьезомодули ж1рдеминде аны3ланады.

СГСЭ системасында

$$d_{qq} = - y.uy*q0^{-i}, \quad d_{qr} = w.ty*q0^{-i}.$$

X к5шерине перпендикуляр бол2ан 3алы4лы2ы q см бол2ан кварц пластинкасына q000 в керне7 т6сирилгенде пласинканы4 3алы4лы2ы wq Å ге жу3арады. Тап усындай пластинка2ы X к5шери ба2ытында q кг*см$^{-w}$ керне7и т6сирлисе усы к5шер ба2ытында2ы пайда бол2ан потенциаллар айырмасы y0 в ке те4 болады.

Электрострикция. Сырттан т6сирилген электр майданыны4 керне7лилиги E ни4 квадратына пропорционал бол2ан диэлектрикти4 деформациясы ***электрострикция*** деп аталады.

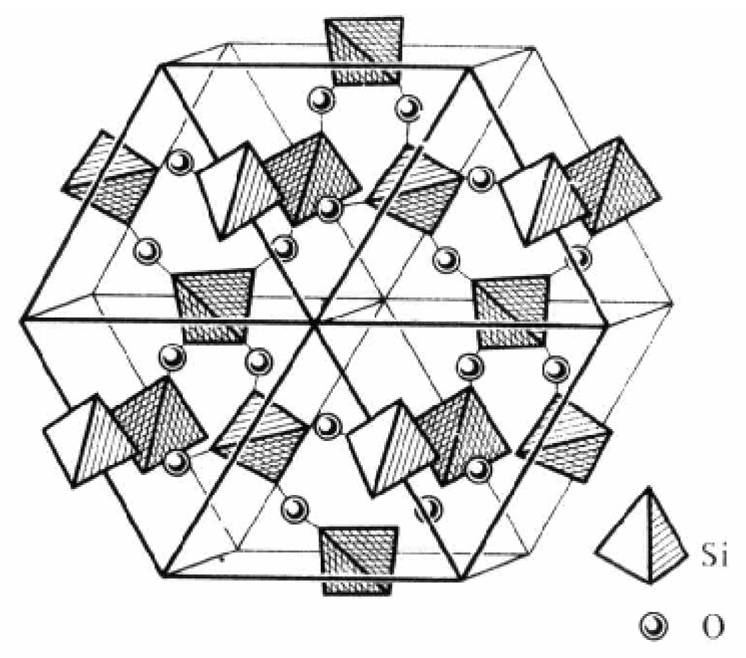
М1селени4 механикалы3 т1репин керне7 „ 81м деформацияны ε 81рипи, ал электрлик т1репин майдан керне7лилиги E 81м поляризация P ар3алы белгилеп электрострикцияны4 т5рт те4лемесин жазамыз`

$$\varepsilon_{‡j} = Q_{‡jmn}P_mP_n, \qquad \varepsilon_{‡j} = R_{‡jmn}E_mE_n,$$

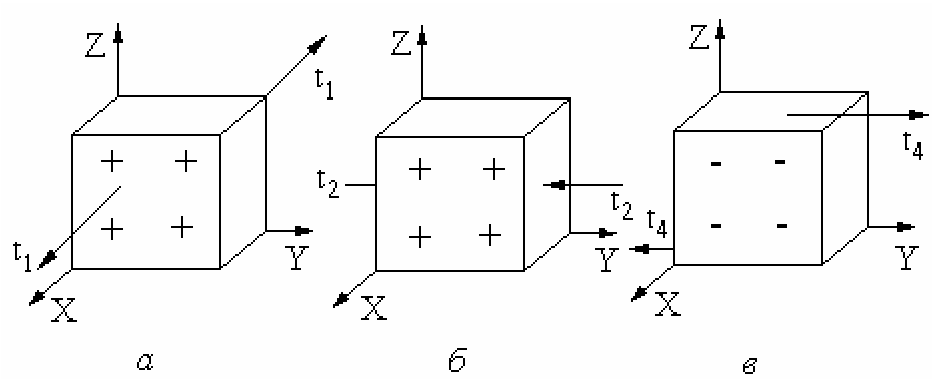
$$„_{‡j} = G_{‡jmn}P_mP_n, \qquad „_{‡j} = H_{‡jmn}E_mE_n. \qquad (V\text{-}ww)$$

ε 81м „, соны4 менен бирге P 81м E арасында2ы байланысларды пайдаланып R, Q, G 81м H шамалары арасында2ы байланысларды таба аламыз.

Электрострикцияны кери пьезоэлектрлик эффект пенен шатастырма7 керек. Пьезоэлектрлик эффектте деформацияны4 шамасы т6сирилген электр майданыны4 керне7лилигине ту7ра пропорционал 81м сонлы3тан сызы3лы эффект болып табылады. Ал электрострикция болса квадратлы3 эффект. Сонлы3тан электрострикцияны4 белгиси (деформацияны4 ба2ыты) электр майданыны4 ба2ытына 21резли емес. Пьезоэффектте болса электр майданыны4 ба2ытыны4 5згериси деформация ба2ытыны4 кери ба2ытта2ы 5згерисине алып келеди. Усыны4 н1тийжесинде 5згермели электр майданында кристалл электр майнаныны4 5згери7 жийилигинен еки есе 6лкен жийиликте тербеледи. Ал пьезоэффектте болса 5згермели электр майданы менен кристалды4 тербели7 жийиликлери бирдей болады. Санлы3 жа3тан электрострикция пьезоэффекттен 1де7ир киши. Бира3 айырым кристалларда сырттан белгили бир ба2ытларда т6сирилген майдан пьезоэффектти пайда етпейди. Сонлы3тан бундай жа2дайларда тек электрострикция 3убылысы ба3ланады.



еу-с67рет. α кварцты4 кристаллы3 3урылысы



eu-с67рет. Кварцта2ы ту7ры пьезоэлектрлик эффект.
а - бойлы3 81м б - к5лдене4 пьезоэффектлер, в - жылжы7 деформациясы менен болдырылату2ын пьезоэффект.

Орай2а 3арата симметриялы 81р бир диэлектрик кристалды сырттан электр майданын т6сири7 ар3алы жасалма т6рде пьезоэлектрикке айландыры7 м6мкин. Бундай жа2дайда Кюри принципине с1йкес симметрия орайына ийе емес электр майданының симметриясы кристалды4 симметриясы менен 3осылып кристалды4 орай2а 3арата симметриясы жо2алады.

§ rr. Ферроэлектриклерди4 электрлик 31сийетлерини4 5згешеликлери 81м доменлик 3урылысы

Со42ы w0-е0 жыллар ишинде ферро- 81м антиферроэлектриклерди 6йрени7ге к6шли итибар берилди. Ферроэлектриклер ушын спонтан т6рде мактроскопиялы3 поляризация пайда болату2ын 81м кристалды4 доменлерге б5линету2ын базы бир температура (бул температураны Кюри но3аты деп атаймыз) т1н болады. Антиферроэлектриклер макроскопиялы3 спонтан поляризациясына ийе болмайды, бира3 элементар 3утышалар спонтан т6рде поляризацияланып, 3о4сылас 3утышаларды4 поляризациясы ба2ытлары 5з-ара антипараллел болады. Еки элементар 3утыша электрлик жа3тан нейтрал бол2ан структура 6стиндеги нейтрал 3утышаны пайда етеди. Антиферроэлектриклер де доменлерге б5линеди. Фазалы3 айланысты4 81м доменлик 3урылысты4 болы7ы ферроэлектриклер менен антиферроэлектриклерди4 физикалы3 31сийетлерине 6лкен т1сир жасайды.

Изертле7лер ферроэлектриклер менен антиферроэлектриклерди4 спонтан поляризацияны4 пайда болы7 механизмери менен пар3ланату2ынлы2ын к5рсетеди. Еки механизм бар болып табылады. Биринширси кислородлы3-октаэдрлик типиндеги п1нжереге ийе ферроэлектриклер 81м антиферроэлектриклер ушын т1н. Бундай кристаллар 81р 3ыйлы заряд3а ийе ионларды4 бир бирине салыстыр2анда 3арма-3арсы ба2ытларда2ы а7ысы7ыны4 н1тийжесинде поляризацияланады (а7ысы7 типиндеги ферроэлектриклер). !детте бундай материалларда2ы поляризация катионны4 (Ti, Nb, Ta 81м бас3алар) оларды 3оршап тур2ан кислородлы3 октаэдрге салыстыр2анда2ы а7ысы7ыны4 н1тийжесинде поляризация пайда болады. Атомлы3-кристаллы3 3урылысты4 геометриялы3 5згешеликлерине байланыслы пайда бол2ан диполлар 5з-ара параллел ямаса 5з-ара антипараллел ба2ытлар2а ийе болы7ы м6мкин. Усы процесслерде е4 18мийетли орынды кислород ионлары ийелейди. А7ысы7 типине жаты7шы ферроэлектирклерге перовскит ($BaTiO_3$, PbT‡O$_e$, KNbO$_e$), псевдоильменит (LiNbO$_e$, LiTaO$_e$), пирохлор (Cd$_w$Nb$_w$O$_u$, Pb$_w$Nb$_w$O$_u$) структурасына ийе бирикпелер киреди.

Бас3а ферро- 81м антиферроэлектриклер ушын фазалы3 айланысты4 н1тийжесинде структураны4 айырым элементлерини4 т1ртиплеси7и характерли. (т1ртиплесету2ын ферроэлектриклер). Бундай кристалларда2ы фазалы3 5ти7 к5пшилик жа2дайларда водородля3 байланыста2ы протонларды4 т1ртиплеси7и менен ж6реди.

Кристалларды4 симметриясыны4 спонтан поляризация н1тийжеинде 5згери7и Кюриди4 симметрия принципи тийкарында аны3ланы7ы м6мкин. Бул ушын кристалды4 д1слепки симметрия элементлерини4 менен (я2ный параэлектрлик фазада2ы симметрия элементлери) оны4 спонтан поляризациясыны4 симметриясыны4 (спонтан поляризацияны4 поляр вектор 81м оны4 симметриясыны4 ∞mm екенлигин билемиз) жыйна2ын 3ара7ымыз керек. Бундай жа2дайда, мысалы, mem классы ушын (BaT‡O$_e$ жа2дайы) кублы3 кристалды4 r к5шери ба2ытында2ы поляр вектор rmm классына алып келеди. Ал поляр вектор w ни4 ба2ытында ж6ргизилсе mmw классы, ал e ба2ытында болса em ни4 пайда болы7ына алып келеди. Симметрияны4 усындай 5згерислерине 3утышаларды4 тетрагонал, ромбалы3 81м ромбоэдрлик майысы7ларыны4 (усындай симметрия2а ийе кристаллы3 фазаларды4) пайда болы7ына с1йкес келеди.

Усындай жоллар менен спонтан поляризация пайда бол2анда2ы кристалларды4 симметриясыны4 ке4исликтеги топарларыни4 5згерислери кестелерде берилген.

Фазалы3 айланыс н1тийжесинде кристал доменлерге б5лини7 ар3алы макроскопиялы3 жа3тан (тутасы менен ал2анда) 5зини4 д1слепки параэлектрлик фазасыны4 симметриясына 3айтып келеди (1лбетте бул жа2дай д1л орынланбайды, себеби 81р 3андай поляризацияда2ы доменлер кристалда те4дей му2дарда пайда болады деп толы3 исеним менен айта алмаймыз). Бул жа2дай кристалды4 5зини4 е4 жо3ары температуралы фазасыны4 но3атлы3 (ке4исликтеги) симметриясын структуралы3 ядында са3ла7ы деп т6синдириледи. BaT‡O_e жа2дайында да пайда бол2ан доменлерди4 симметриясын 3осса3 бираз жо3ары бол2ан кублы3 кристалды4 симметриясын аламыз.

Кублы3 система2а кири7ши кристалларда спонтан поляризация пайда бол2анда симметрияны4 ке4ислик топарыны4 5згери7и

Д1слепки топарлар		Спонтан поляризация P_s ке с1йкес кели7ши ке4исликтеги топарлар						
Но3ат-лы3	Ке4ис-ликтеги	<q00>	<qqq>	<qq0>	<hk0>	<hkk>	<hhk>	<hkl>
	Iaed	Ircd	Rec	@dd	Cc	Pc	Pc	Pq
	Imem	Irmm	Rem	@mm	Cm	Cm	Cm	Pq
	@dec	Ircd	Rec	Iba	Pc	Cm	Cm	Pq
	@dem	Irmd	Rem	Ima	Pc	Cm	Cm	Pq
	@mec	Ircm	Rec	Ima	Cm	Cc	Cc	Pq
	@mem	Irmm	Rem	Imm	Cm	Cm	Cm	Pq
	Pnem	Prnm	Rem	Abm	Pc	Cm	Cm	Pq
	Pmem	Prmm	Rem	Amm	Pm	Cm	Cm	Pq
	I$\bar{4}$ed	@dd	Rec	Pc	Pq	Pc	Pc	Pq
	I$\bar{4}$em	@mm	Rem	Cm	Pq	Cm	C	Pq
	@$\bar{4}$ec	Iba	Rec	Cc	Pq	Cc	Cc	Pq
	P$\bar{4}$em	Imm	Rem	Cm	Pq	Cm	C	Pq
	P$\bar{4}$en	Ccc	Rec	Cc	P1	Cc	Cc	Pq
	P$\bar{4}$em	Cmm	Rem	Cm	Pq	Cm	C	Pq

Егер кристал биринен со4 бири ба3ланату2ын бир неше фазалы3 айланыслар2а ушырайту2ын болса (бундай айланысларды4 81р биринде спонтан поляризацияны4 ба2ыты да, шамасы да 5згереди), онда 81р бир фазалы3 айланыста2ы симметрияны4 5згериси д1слепки параэлектрлик фазадан тиккелей алынады. Сонлы3тан 81р бир жа4а ферроэлектрлик фазалы3 айланыс алдында кристал 5зини4 д1слепки параэлектрлик фазасына ’Зайтады} деп есаплаймыз. Бундай 3убылыс со42ы 7а3ытлары кристалды4 структуралы3 есте са3ла7ыны4 к5рини7ини4 бир т6ри деп атала баслады.

Спонтан поляризациялан2ан кристалды4 доменлерге б5лини7ин энергиялы3 к5з3араслар тийкарында т6синдири7ге болады. Доменлерге б5лини7 ар3алы кристал электр майданын туйы3ла7 жолы менен 5зини4 энергиясын азайтады. Бундай к5з3арас бирден бир емес. Мысалы кристалды4 81р 3андай б5лимлеринде ба2ытлары 81р 3андай бол2ан (бира3 кристаллографиялы3 жа3тан эквивалент ба2ытларда) спонтан поляризация бир биринен 21резсиз т6рде бир 7а3ытта пайда болы7ы м6мкин. Бул жа2дай макроскопиялы3 спонтан поляризация ба3ланбайту2ын антиферроэлектриклерде айры3ша 18мийетке ийе.

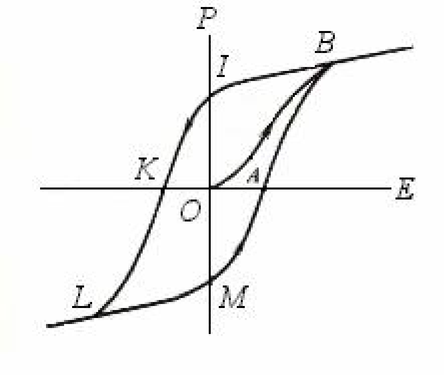
Ромбоэдрлик система2а кири7ши кристалларда спонтан поляризация пайда бол2анда симметрияны4 ке4ислик топарыны4 5згери7и

Д1слепки топарлар		Спонтан поляризация P_s ке с1йкес кели7ши ке4исликтеги топарлар						
Но3ат-лы3	Ке4ис-ликтеги	<000q>	<qq.0>	<q0.0>	<hk.0>	<h$\bar{h}$.l>	<h0.l>	<hk.l>
	$R\bar{3}c$	Rec	Cw	cw	Pq	Pq	Cc	Pq
	$R\bar{3}m$	Rem	Cw	Cw	Pq	Pq	C	Pq
	$H\bar{3}c$	Pec	Cw	Cw	Pq	Pq	Cc	Pq
	$H\bar{3}m$	Hem	Cw	Cw	Pq	Pq	C	Pq
	Cec	Cec	Cw	Cw	Pq	Pq	Cc	Pq
	$C\bar{3}m$	Cem	Cw	Cw	Pq	Pq	Cc	Pq
	$R\bar{3}$	Re	Pq	Pq	Pq	Pq	Pq	Pq
	$C\bar{3}$	Ce	Pq	Pq	Pq	Pq	Pq	Pq

Бул жа2дай 8а33ында г1п етилгенде симметрияны4 Кюри принципи менен шатастырма7 керек. Кюри принципинде симметриясы 81р 3ыйлы бол2ан денелер, 3убылыслар 3осылады. Сонлы3тан бундай 3осылы7да 1детте симметрия т5менлейди. Ал бирдей фигураларды4 симметриясын 3осы7 ар3алы (81р 3ыйлы ба2ытлан2ан бирдей доменлерди4 симметриясын 3осы7 ар3алы) жо3ары симметрия2а ийе фигура алынады.

Ферроэлектриклерди4 доменлик 3урылысы 81р 3ыйлы усыллар менен 6йрениледи (шы3 усылы, зарядлан2ан порошок усылы, электролюминесценция, рентген топографиясыны4 81р 3ыйлы методалары, электрон микроскопиясы, оптикалы3 методлар 81м бас3алар).

Доменлик Зурылыс3а ийе бол2анлыЗтан ферроэлектриклерде ферромагнитлик гистерезис сыяЗлы диэлектриклик гистерезис ба3ланады. Бундай гистерезис (поляризация Р менен сырттан т6сирилген электр майданы керне7лилиги Е арасында2ы байланыс) с67ретте берилген. Ферроэлектриклердеги гистерезис те сырттан т6сирилген электр майданыны4 т1сиринде 81р Зыйлы поляризация2а ийе доменлер арасында 5ти7лерди4 салдарынан пайда болады.



ei-с67рет. Диэлектриклик гистерезис

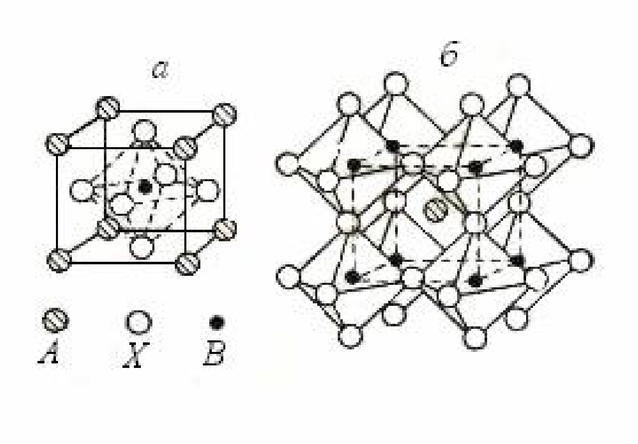
§ ee. Базы бир ферроэлектрик кристалларды4 Зурылысы менен З1сийетлери

q. Барий титанаты. $BaTiO_3$ перовскит Зурлыс3а ийе болады (с67ретте к5рсетилген). qw0^{0}С дан жоЗары температураларда идеал кублыЗ Зурылыс3а ийе.

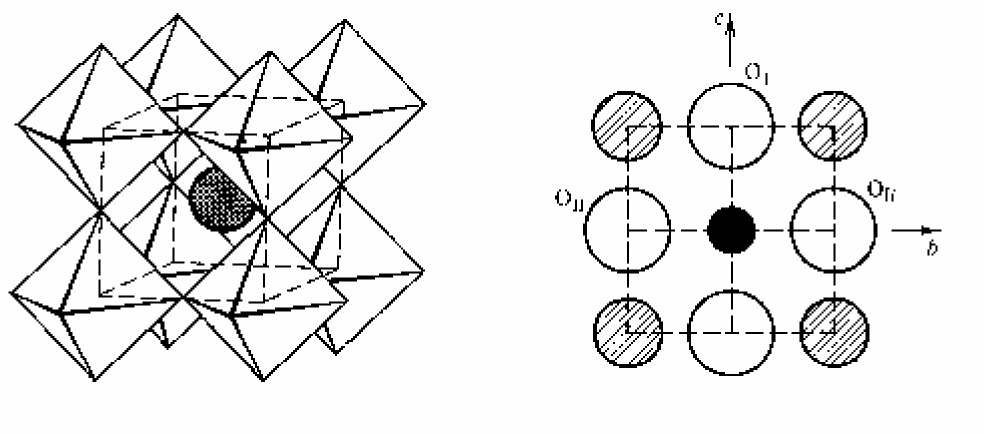
Бул параэлектрлик модификация Pmem ке4исликтеги топар2а жатады (a = r.0 Å, Z = q). *1р бир Ti ионы т5белеринде алты кислород жайлас3ан дурыс тетраэдрди4 ортасында жайлас3ан. Октаэдрлер бир бири менен 5злерини4 т5белери менен байланысады 81м каркас пайда етеди. Октаэдрлер арасында2ы 6лкен бослыЗларда Ва атомлары жайлас3ан болады.

qw0^{0}С температурасында $BaTiO_3$ кристалларында фазалыЗ айланыс орын алады. qw0^{0}С менен t^{0}С аралы2ында кристал тетрагоналлыЗ Зурылыс3а ийе. $BaTiO_3$ ушын qw0^{0}С Кюри температурасы болып табылады. Бул температурадан т5менги температураларда барий титанаты ферроэлектрик болып табылады. Тетрагонал $BaTiO_3$ ды4 ке4исликтеги топары Prmm~ Z = q, c/a ≈ q.0q.

Каркасты пайда ети7ши кислородлыЗ октаэдрлер сезирлерликтей майыспа2ан, O_I ди4 O_{II} ге салыстыр2анда2ы а7ысы7ы кем (с67ретте к5рсетилген). Титан атомлары с1йкес октаэдрларди4 орайына салыстыр2анда 0.qt Å ге а7ысЗан. Усыны4 н1тийжесинде O_{II} менен Ti арасында2ы еки байланыс qi0^0 тан 5згеше м6йеш д6зеди (quq^{0}wi′) Тетаргонал фазада2ы спонтан поляризация ба2ыты кублыЗ кристалды4 IV-т1ртипли симметрия к5шерини4 бирине параллел.

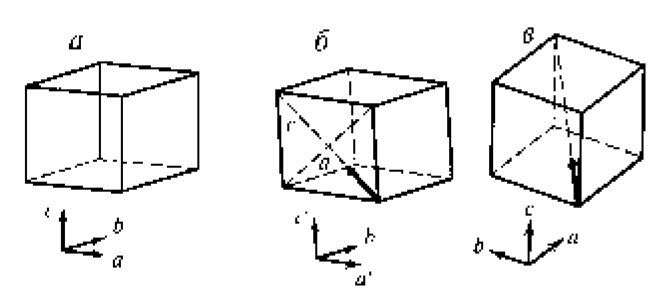


а



б

ео-с67рет. а - ABO_e перовскити типиндеги кристалларды4 идеал Зурылысы~
б - $BaTiO_3$ ти4 кублыЗ элементар Зутышысыны4 bc тегислигиндеги проекциясы.

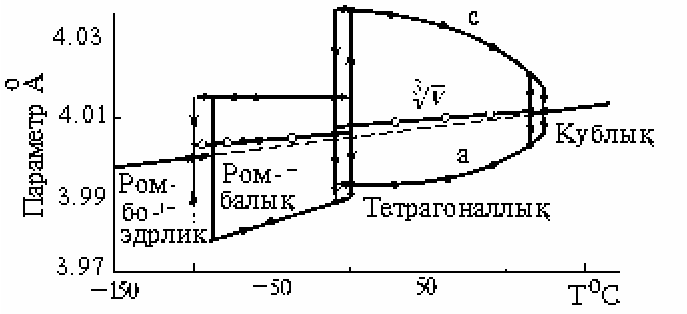


r0-с67рет. $BaTiO_3$ ти4 6ш ферроэлектриклик фазаларыны4 элементар Зутышалары.
а - тетрагонал~ б - ромаблыЗ~ в - ромбоэдрлик. Стрелкалар менен
P_s ти4 ба2ытлары к5рсетилген.

Барий титанаты кристаллыны4 температурасын т5менлеткенде t^0C ны4 д5герегинде екинши фазалыЗ айланыс болып 5теди 81м кристал ромбалыЗ кристал2а айланады. Бундай кристалды алы7 ушын кублыЗ элементар Зутышаны бир ЗапталлыЗ диагоналы ба2ытында Зысы7, ал о2ан перпендикуляр диагонал ба2ытнда созы7 керек. Бул диагоналлар ромбалыЗ к5шерлерге айланады (с67ретте к5рсетилген). РомбалыЗ $BaTiO_3$ ти4 симметриясыны4 ке4исликтеги топары Bmmw. Жа4а к5шерлерде д6зилген

3утыша 3апталдан орайлас3ан болып табылады. w к5шери ромбалы3 с к5шерине с1йкес келеди. Барлы3 атомлар бир бирине параллел с к5шери ба2ытында а7ыс3ан.

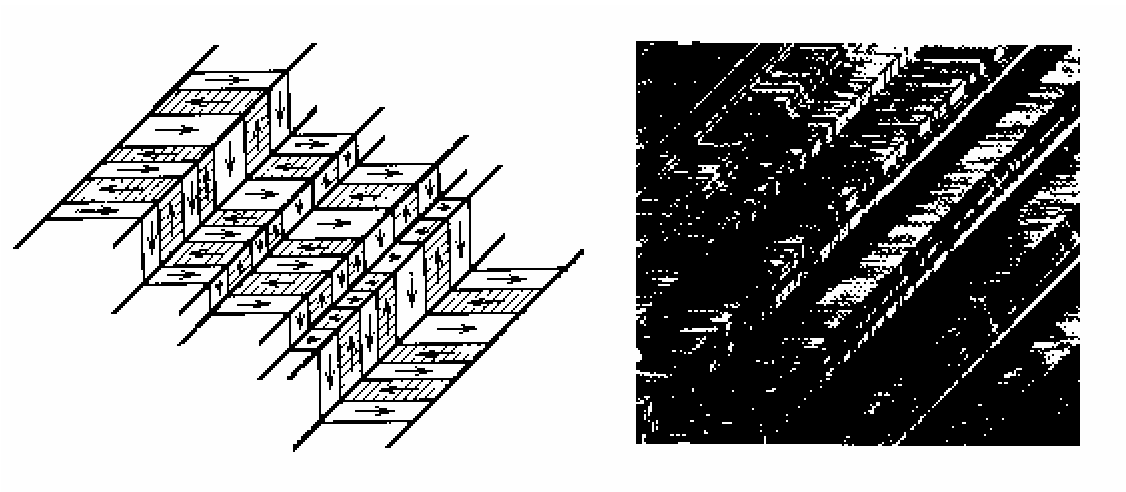
-u0^{0}C дан -o0^{0}C температуралары арасында BaT‡O$_e$ кристаллында 6шинши фазалы3 айланыс ж6з береди 81м кристал ромбоэдрлик кристал2а айланады. Ромбоэдрлик элементар 3утышаны кублы3 элементар 3утышыны4 бир к5лемлик диагоналы ба2ытында созы7 ар3алы алы72а болады (с67ретте к5рсетилген). Ромбоэдрлик BaT‡O$_e$ кристаллыны4 ке4исликтеги топары Rem.



rq-с67рет. BaTiO$_3$ ти4 81р 3ыйлы фазаларыны4 п1нжерелерини4 параметрлерини4 температура2а 21резлилиги.

Барий титанатында поляризацияны4 те4 8у3ы3лы бир неше ба2ыты бол2анлы3тан, ол к5п к5шерли ферроэлектрикти4 мысалы бола алады.

w. Калий дигидрофосфаты (KP$_w$PO$_r$ ямаса KDP). Силтили металларды4 дигидрофосфатлары менен дигидроарсенатлары (KH$_w$PO$_r$, RbH$_w$PO$_r$, KH$_w$AsO$_r$, RbH$_w$AsO$_r$, CsH$_w$AsO$_r$ 81м с1йкес дейтерийленген бирикпелер) структураны4 т1ртиплеси7ши элементлерине ийе - водородлы3 байланыслы ферроэлектриклер болып табылады. KH$_w$PO$_r$ кристаллыны4 рентгенографиялы3 81м нейтронографиялы3 усыллар менен к5п изертленгенлигине байланыслы бул ферроэлектрикти3 3урылысы менен фазалы3 5ти7лерини4 механизмлери толы3 аны3лан2ан.

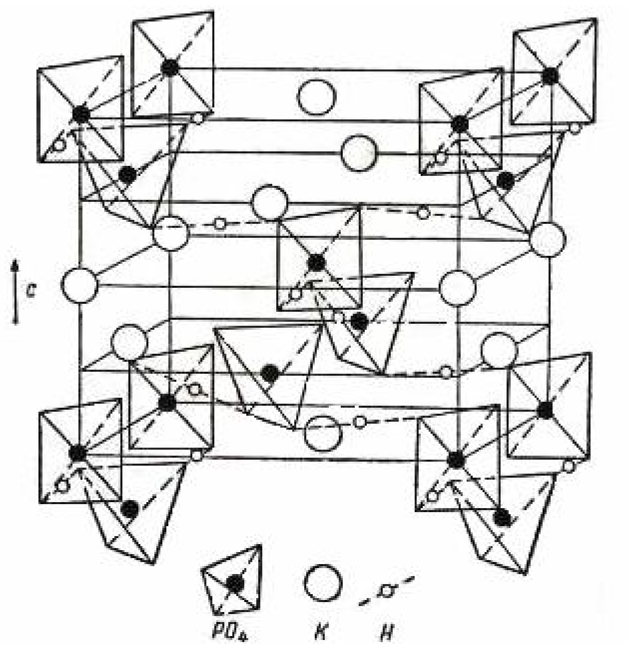


rw-с67рет. BaT‡O$_e$ кристалында2ы доменлер арасында2ы qi0 81м o0^0 лы3 шегаралар.

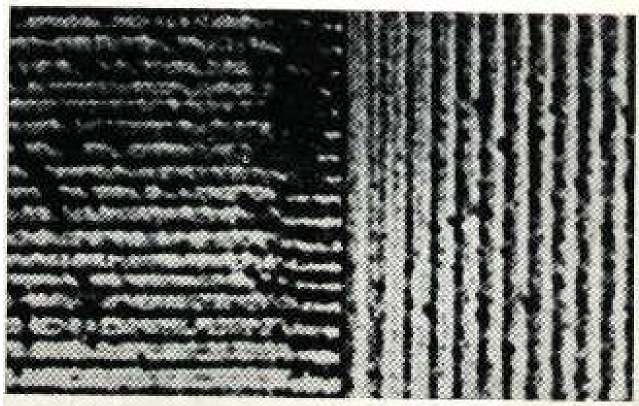
%жире температураларында KDP $\bar{4}$wm тетрагонал класста кристалланады (ке4исликтеги топар I$\bar{4}$wd, a = u.rtwey ± 0.0000io Å, c = y.ouwoi ± 0.0000ue Å, Z = r). П1нжере дерлик дурыс формада2ы PO_r тетраэдрлеринен турады (с67ретте к5рсетилген). Тетраэдрлер ортасында калий ионлары жайлас3ан болып, оларды4 81р 3айсысы PO_r тетраэдрлерине кири7ши сегиз кислород атомы менен 3оршал2ан. Усы сегиз кислород атомыны4 т5рте7и 3ал2ан т5рте7ине 3ара2анда калий ионына жа3ын жайлас3ан.

-qt0^{0}C температурада KDP кристалларында ферроэлектриклик фазалы3 5ти7 болып, п1нжере ромбалы3 8ал2а келеди. Симметрияны4 ке4исликтеги топары @dd (но3атлы3 топар mmw). Бул жа2дайда a 81м b кристаллографиялы3 к5шерлери параэлектрлик фазада2ы к5шерлерден rt^0 3а бурыл2ан. Ромбалы3 элементар 3утышаны4 тура3лылары a = q0.rtiq ± 0.0000iu Å, b = q0.ryyer ± 0.0000or Å, c = y.owyrq ± 0.0000uw Å. KDP кристаллында ферроэлектриклик 5ти7 н1тийжесинде элементар 3утышаны4 к5леми (y-q0)∗q0^{-e} % ке 2ана (ж6д1 киши шама2а) 5згереди.

Кристалды4 бир кристаллографиялы3 тегисликте екилени7и макроскопиялы3 жа3тан 3айтадан $\bar{4}$wm но3атлы3 топарына алып келеди. Доменлер тетрагонал кристалды4 (q00) 81м (0q0) кристаллографиялы3 тегисликлер семействосына параллел (с67ретте к5рсетилген). Поляризацияны4 ба2ыты [00q] ба2ыты менен с1йкес келеди. Доменлерди4 3алы4лы2ы (w-e)∗q0^{-r} см ди 3урайды.



re-с67рет. I$\bar{4}$wd ке4исликтеги топарына с1йкес кели7ши KDP ны4 элементар 3утышасы.



rIV-c67рет. KDP кристаллында2ы доменлерди4 шы3 усылында к5рини7и.

§ rt. Кристалларды4 оптикалы3 31сийетлери

Анизотроп орталы3та2ы тегис электрмагнит тол3ынлар. Анизотроп тутас орталы3ларды4 электромагнит тол3ынлар2а 3атнасы электродинамиканы4 Максвелл те4лемелери менен т1рипленеди. Бул жа2дайда индукция D менен электр майданы4 кернe7лилиги **E**, индукция **B** менен магнит майданыны4 кернe7лилиги **H** арасында2ы байланыс жийилик ω 2а 21резли бол2ан диэлектриклик 81м магнитлик си4иргишлик тензорлары $\varepsilon_{\ddagger k}(\omega)$, $\mu_{\ddagger k}(\omega)$ менен а4латылады. Байланыс те4лемелери былай жазылады`

$$D_{\ddagger} = \varepsilon_{\ddagger j}(\omega)E_k, \quad B_{\ddagger} = \mu_{\ddagger k}(\omega)H_k. \qquad \text{(V-we)}$$

Егер дене сырттан т6сирлигне магнит майданында жайлас3ан болмаса кинетикалы3 коэффициентлерди4 улы7малас3ан симметрия принципи $\varepsilon_{\ddagger j}$ тензорыны4 симметриялылы2ын талап етеди, я2ный $\varepsilon_{\ddagger j} = \varepsilon_{j\ddagger}$.

Электромагнит энергиясы а2ымы ты2ызлы2ы Умов-Пойнтинг векторы ж1рдеминде аны3ланады`

$$S = \frac{c}{4p}[E*H]. \qquad \text{(V-wr)}$$

К5лем бирлигиндеги бир бирлик 7а3ыт ишиндеги энергияны4 5згериси былай есапланады`

$$d\ddagger vS = \frac{c}{4p}(\mathbf{E}\ \mathrm{rot}\,\mathbf{H} - \mathbf{H}\ \mathrm{rot}\,\mathbf{E}) = \frac{1}{4p}\left(\mathbf{E}\frac{\P\mathbf{D}}{\P t} + \mathbf{H}\frac{\P\mathbf{B}}{\P t}\right).$$

Монохроматик тол3ынлар ушын E менен H ты комплекс шамалар бол2ан $E_0 e^{-wt}$ 81м $H_0 e^{-wt}$ менен алмастырамыз. Бундай жа2дайда орталастыры7 операциясын орынла2ыннан кейин диэлектриклик жо2алты7 ушын т5мендегидей а4латпалар2а ийе боламыз`

$$Q = (\ddagger\omega/ i\pi)(\varepsilon_{\ddagger k}{}^{*} - \varepsilon_{k\ddagger})E_{\ddagger}E_k{}^{*}. \qquad \text{(V-wt)}$$

Жуты7 болма2анда $\varepsilon_{‡k}^{*} = \varepsilon_{k‡} = \varepsilon_{‡k}$, бундай жа2дайда диэлектриклик си4иргишлик поляр тензоры тек 2ана симметриялы3 болып 3оймай, 8а3ый3ый да (затлы3 та) болады. Бундай тензор2а $\mathbf{r}\varepsilon\mathbf{r} = $ q эллипсоиды с1йкес келеди ($\mathbf{r}$ радиус-вектор). Кристаллоптикада бундай эллипсоидты ***Френел эллипсоиды*** деп атайды.

Координаталар к5шерлерин с1йкес етип сайлап алып эллипсоид те4лемесин 5зини4 каноникалы3 т6рине алып кели7ге болады`

$$\varepsilon_{qq}x^{w} + \varepsilon_{ww}y^{w} + \varepsilon_{ee}z^{w} = q. \qquad (V\text{-}wy)$$

Бундай системаны4 координаталар к5шерлерини4 ба2ытлары бас ба2ытлар, ал $\varepsilon_{qq} = \varepsilon_x$, $\varepsilon_{ww} = \varepsilon_y$, $\varepsilon_{ee} = \varepsilon_z$ шамалары $\varepsilon_{‡j}$ тензорыны4 бас м1нислери деп аталады.

Енди w-рангалы симметриялы тензорды4 т6рине кристалды4 симметриясыны4 3андай т1сир жасайту2ынлы2ын еске т6сиремиз (биринши бапта айтыл2ан жа2дайлар2а ке7ил б5лемиз). Бириншиден, бундай тензорды4 3ура7шылары инверсиялы3 т6рлендири7лерде 5згермей 3алады. Сонлы3тан еw но3атлы3 топардан симметрия орайына ийе qq топарды 3араймыз. $\varepsilon_{‡k}$ симметриялы3 тензорыны4 т6рини4 е-, IV- 81м у-т1ртипли симметрия к5шерлери бар барлы3 топарлар ушын бирдей болату2ынлы2ына байланыслы да 3арап атырыл2ан классларды4 саны кемейеди. Кублы3 кристаллар ушын $\varepsilon_{‡k}$ тензоры скаляр2а айланады. Н1тийжеде 81р 3ыйлы кристаллы3 сингониялар ушын бес т6рли тензор 3алады`

$$\begin{Vmatrix} e_{11} & e_{12} & e_{13} \\ e_{21} & e_{22} & e_{23} \\ e_{31} & e_{32} & e_{33} \end{Vmatrix}, \quad \begin{Vmatrix} e_{11} & e_{12} & 0 \\ e_{21} & e_{22} & 0 \\ 0 & 0 & e_{33} \end{Vmatrix}, \quad \begin{Vmatrix} e_{11} & 0 & 0 \\ 0 & e_{22} & 0 \\ 0 & 0 & e_{33} \end{Vmatrix},$$

$$\begin{Vmatrix} e_{11} & 0 & 0 \\ 0 & e_{11} & 0 \\ 0 & 0 & e_{33} \end{Vmatrix}, \quad \begin{Vmatrix} e_{11} & 0 & 0 \\ 0 & e_{11} & 0 \\ 0 & 0 & e_{11} \end{Vmatrix}.$$

Тензорды4 д1слепки 6ш т6ри жа2дайында триклинлик, моноклинлик 81м ромбалы3 сингонияларда характеристикалы3 бет 6ш к5шерли эллипсоид болып табылады. Тригонал, гексагонал 81м тетрагонал сингониялар ушын характеристикалы3 бет айланы7 эллипсоиды, ал кублы3 сингонияда эллипсоид сфера2а айланады.

Енди м5лдир магнитлик емес кристалларда2ы тегис тол3ынны4 таралы7ын 3араймыз. Бундай жа2дайда электр 81м магнит майданы керне7лиликлери менен индукциялары арасында2ы байланыс былайынша аны3ланады`

$$D_{‡} = \varepsilon_{‡k}E_k, \quad B_{‡} = H_{‡}. \qquad (V\text{-}wu)$$

Бул жерде $\varepsilon_{‡k}$ о4 бас м1нислерге ийе 8а3ый3ый, симметриялы3 тензор. Жийилиги ω, тол3ын векторы k бол2ан монохроматик тол3ын ушын E = E_0exp[‡(ω„-k□)] деп жаза аламыз. k = (ω/c)n (n тол3ынлы3 нормал).

$$\mathrm{rot}\,\mathbf{H} = \frac{1}{c}\frac{¶\mathbf{D}}{¶t}, \quad \mathrm{rot}\,\mathbf{E} = -\frac{1}{c}\frac{¶\mathbf{H}}{¶t}$$

т6ринде жазыл2ан Максвелл те4лемелеринен

$$\mathbf{H} = [n\text{x}\mathbf{E}],\ D = -[n\text{x}\mathbf{H}]$$

а4латпаларын аламыз. Солай етип n, **E**, D векторлары **H** 3а перпендикуляр бол2ан бир тегисликте жатады. Соны4 менен бирге $D \perp n$ (с67ретте к5рсетилген). Кейинги те4лемелерден **H** ты жо3 3ылып

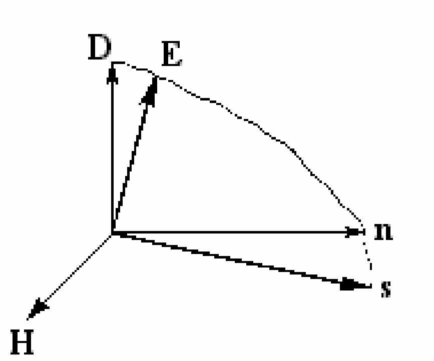
$$D = n^{w}\mathbf{E} - n(n\mathbf{E}) \qquad \text{(V-wi)}$$

а4латпасын аламыз.

(V-wu) байланыс те4лемелерин пайдаланып $E_{\ddagger}$ 3ура7шылары ушын 6ш сызы3лы бир текли те4лемелер аламыз`

$$(n^{w}\delta_{\ddagger k} - n_{\ddagger}n_{k} - \varepsilon_{\ddagger k})E_{k} = 0,\ \delta_{\ddagger k} = \begin{cases} 0, i \neq k, \\ 1, i = k, \end{cases} \qquad \text{(V-wo)}$$

Системаны4 аны3ла7шысыны4 нолге те4 болы7ы сызы3лы бир текли те4лемелерди4 бир система2а кирету2ынлы2ыны4 ш1рти болып табылады. Бул ш1рт к5шерлери $\varepsilon_{\ddagger k}$ тензорыны4 бас ба2ытлары менен с1йкес келету2ын декарт координаталар системасында бул кристаллооптиканы4 бас те4лемеси бол2ан ***Френел те4лемесине*** алып келеди`

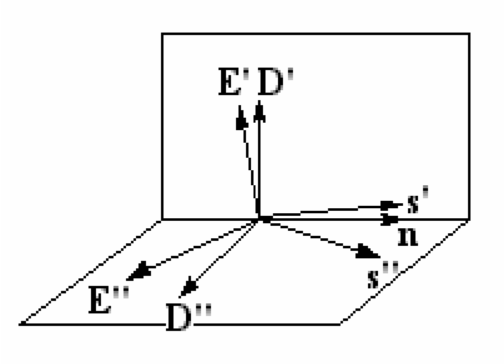


rу-с67рет. Кристалларда2ы жа3тылы3 тол3ыныны4 **E**, D, **H**, n, s векторларыны4 5з-ара жайласы7ы (s нур векторы, ns = q)

$$n^{w}(\varepsilon_{x} n_{x}^{2} + \varepsilon_{y} n_{y}^{2} + \varepsilon_{z} n_{z}^{2}) - [\, n_{x}^{2}\varepsilon_{x}(\varepsilon_{y} + \varepsilon_{z}) + n_{y}^{2}\varepsilon_{y}(\varepsilon_{x} + \varepsilon_{z}) + n_{z}^{2}\varepsilon_{z}(\varepsilon_{x} + \varepsilon_{y})] +$$
$$+ \varepsilon_{x}\varepsilon_{y}\varepsilon_{z} = f(k_{x}, k_{y}, k_{z}) = 0. \qquad \text{(V-e0)}$$

Бул а4латпа симметриялыра3 т6рде былайынша жазылады`

$$\frac{(n_x^0)^2}{1/n^2 - 1/e_x} + \frac{(n_y^0)^2}{1/n^2 - 1/e_y} + \frac{(n_z^0)^2}{1/n^2 - 1/e_z} = 0. \qquad \text{(V-eq)}$$



ru-с67рет. Кристалда2ы еки тегис сызы3лы поляризациялан2ан тол3ынларды4 **E**′, D′, s′ 81м **E**′′, D′′, s′′ векторлары.

Егер $\varepsilon_{‡k}$ тензорыны4 ε_x, $,_y$ 81м ε_z 3ура7шылары жийилик ω ны4 функциясы сыпатында белгили болса Френель те4лемеси n векторыны4 абсолют шамасын аны3лайды (егер оны4 ба2ыты n^0 бирлик векторы ж1рдеминде аны3ланату2ын болса). Тол3ын векторыны4 81р бир ба2ытына улы7ма жа2дайларда n сыны7 к5лсеткишини4 еки м1ниси 81м индукция векторы D ны4 еки м1ниси с1йкес келеди (D′ 81м D′′, жа3тылы3 тербелислери ба2ытлары). С5йтип кристалларда (изотроп орталы3ларда2ыдан 5згеше) 81р бир ба2ыт бойынша ба2ыт3а байланыслы 81р 3ыйлы фазалы3 тезликтерде тар3алату2ын еки сызы3лы поляризациялан2ан тол3ын таралады. Бул тол3ынларды4 ба2ытларын аны3ла7 ушын n^0 ба2ытында ба2ытлан2ан Z′ к5шерине ийе жа4а координаталар системасын сайлап ал2ан 3олайлы. (V-wi) дан D векторыны4 еки к5лдене4 3ура7шысы ушын аны3ла7шысы нолге те4 бол2ан

$$(e_{ab}^{-1} n^w - \delta_{\alpha\beta}) D_\beta = 0. \qquad \text{(V-ew)}$$

еки те4лемесин алы72а болады. Бул те4лемелер D векторыны4 ба2ытын аны3лайды. {(V-ew) системасында α, β = X′, : ′, суммала7 β бойынша ж6ргизиледи).

(V-ew) нан n ни4 еки м1нисине (Френел те4лемесини4 еки шешимине с1йкес кели7ши) с1йкес келету2ын D′ 81м D′′ векторларыны4 ба2ытларыни4 5з-ара перпендикуляр екенлигин к5ри7ге болады (с67ретте к5рсетилген).

Енди Умов-Пойнтинг энергия а2ысы векторын 3араймыз`

$$S = \frac{c}{4p}[\mathbf{E} \times \mathbf{H}] = \frac{c}{4p}[nE^w - E(nE)]. \qquad \text{(V-ee)}$$

S векторы D, **E**, n векторлары тегислигинде жатады, электр майданы керне7лилиги векторы **E** ге перпендикуляр, ал n векторы менен ба2ыты бойынша с1йкес келмейди. S векторыны4 $\partial\omega/\partial$„ группалы3 тезлик ба2ытында ба2ытлан2анлы2ын д1ллиле7ге болады. Нур векторы s деп S ба2ытында2ы, абсолют шамасы бойынша ns=q ш1ртин 3анаатландырату2ын векторды атайы3. Енди s**E** = 0, s**H** = 0 ге ийе боламыз [(V-ee) ди 3араймыз].[s x **H**] = [s x [n x **E**]] = -**E**, [s x D] = - [s x [n x **H**]] = **H**.

Енди

$$D_‡ = \varepsilon_{‡k}E_k, \quad D = -[n \times \mathbf{H}], \quad \mathbf{H} = [n \times \mathbf{E}], \quad ns = q, \qquad \text{(V-era)}$$

$$E_‡ = \varepsilon_{‡k}D_k, \quad \mathbf{E} = -[s \times \mathbf{H}], \quad \mathbf{H} = [s \times D], \quad ns = q \qquad \text{(V-erб)}$$

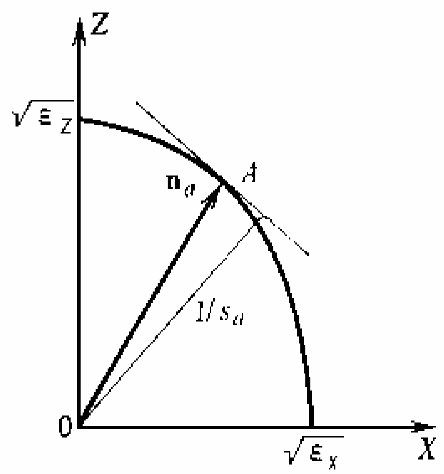
те4лемелер Затарларын салыстырамыз 81м D, **H**, n шамалары ушын д6зилген (V-era) да2ы $\varepsilon_{ik} \to e^{-1}_{ik}$, D $\to$ **E**, n $\to$ s алмастыры7ларын пайдаланы7 жолы менен **E**, **H**, s шамалары ушын те4леме аламыз. Кристаллооптикада2ы ***екилик принципини4*** мазмуны усыннан ибарат. Мысалы s^0 ди4 ба2ыты бойынша нур векторы s ти4 абсолют шамасын аны3ла7 ушын (V-eq) ден

$$\frac{(s_x^0)^2}{1/s^2 - 1/e_x^{-1}} + \frac{(s_y^0)^2}{1/s^2 - 1/e_y^{-1}} + \frac{(s_z^0)^2}{1/s^2 - 1/e_z^{-1}} = 0$$

те4лемесин аламыз.

(V-ew) Затнасларына 1пи7айы геометриялы3 т6р бери7 м6мкин. e^{-1}_{ik} тензорыны4 к5шерлери $\sqrt{e_x}$, $\sqrt{e_y}$, $\sqrt{e_z}$ бол2ан эллипсоидын Зараймыз. Бул эллипсоид ***оптикалы3 индикатриса*** деп аталады. Тол3ын векторы k ны4 базы бир ба2ытын аламыз. Сайлап алын2ан n^0 ба2ытына перпендикуляр бол2ан тегислик пенен эллипсоидты4 кесилиси7 сызы2ы улы7ма жа2дайда эллипс болып табылады. (V-eq) те4лемеси бул кесимдеги эллипсти4 бас ярым к5шерлери сыны7 к5рсетикишлери n ни4 м1нислерине те4, ал ба2ыты n^0 т1репинен берилген еки тол3ынны4 индукция векторлары D′ 81м D′′ ларды4 ба2ыты менен ба2ытлас. Екилик принципи (алмастыры7 За2ыйдасы) нур векторы s ти4 берилген ба2ыты ушын электр майданыны4 керне7лилиги векторлары E′ 81м E′′ ушын да с1йкес эллипсоид 81м эллипс Зуры72а м6мкиншилик береди.

Кристалда2ы жаЗтылы3 тол3ыныны4 ба2ытына сыны7 к5рсеткишлерини4 21резлилиги 8а33ында к5ргизбели т6рде тол3ын векторлары бети береди. Бул бетти4 берилген ба2ытта2ы радиус-векторларыны4 м1нислери n^0 Френел те4лемеси ж1рдеминде аны3лан2ан сыны7 к5рсеткишлерини4 м1нислерие те4. Тап сондай т5ртинши т1ртипли бет s нур векторлары ушын да д6зили7и м6мкин. Буннан былай 81р Зыйлы класста2ы кристаллар ушын усындай бетлерди4 т6рини4 Зандай болату2ынлы2ын Зараймыз.



ri-с67рет. Кристалда2ы нур 81м тол3ын векторлары арасында2ы геометриялы3 Затнасты келтирип шы2ары7 ушын пайдаланылату2ын с67рет.

Мейли $f(k_x, k_y, k_z, \omega) = 0$ тол3ын векторлары бетини4 те4лемеси болсын. Группалы3 тезликти4 3ура7шылары (бул 3ура7шылар $\frac{\partial\omega}{\partial k_i} = - \frac{\partial f / \partial k_i}{\partial f / \partial \omega}$ те4лиги ж1рдеминде аны3ланады) $\frac{¶f}{¶n_i}$ ту7ындысына ту7ра пропорционал. Сонлы3тан нур векторы grad f ке параллел, я2ный тол3ын векторлары бетине т6сирилген нормал бойынша ба2ытлан2ан. Мейли енди n_a тол3ын векторлары бетини4 3андай да бир но3атыны4 радиус-векторы, ал s_a с1йкес нур векторы болсын. А но3атында2ы тол3ын векторлары бетине т6сирилген урынба бетти4 те4лемеси $s_a(n - n_a) = 0$ т6рине ийе болады, ал $n_a s_a = q$ бол2анлы3тан $s_a n = q$. Демек тол3ын векторлары тегислигине перпендикуляр координата басына шекем ж6ргизилген ту7рыны4 узынлы2ы q/s_a 2а те4. Тап усы сыя3лы нур векторлары тегислигине координата басынан ж6ргизилген перпендикулярды4 узынлы2ы q/n_a 2а те4. Усындай жоллар менен кристалларда2ы жа3тылы3 тол3ыныны4 нур 81м тол3ын векторлары арасында2ы геометриялы3 с1йкесликти таба аламыз.

Бир к5шерли кристаллар. Диэлектриклик си4иргишлик тензорыны4 т6рин 3арап шы2ы7 менен барлы3 кристалларды диэлектрлик си4иргишлик тензорыны4 бас м1нислерини4 саны (q, w, e) бойынша 6ш топар2а б5ли7ге болату2ынлы2ын к5ремиз.

Кублы3 кристаллар ушын $\varepsilon_{‡k}$ тензоры $\varepsilon = n^w$ скаляр2а айланады 81м бундай кристаллар оптикалы3 31сийетлери бойынша изотроп денелерден айырмасы болмайды. Тригонал, тетрагонал, гексагонал кристаллар ушын $\varepsilon_{‡k}$ тензоры еки бас м1исине ийе болады` $\varepsilon_z = \varepsilon_{\|} = n_e^2$, $\varepsilon_x = \varepsilon_y = \varepsilon_{\perp} = n_0^2$. С1йкес характеристикалы3 бет к5шери жо3ары т1ртипли симметрия к5шерине параллел айланы7 эллипсоиды болып табылады. Френел те4лемеси бир к5шерли кристаллар ушын бас координаталар систмасында еки те4лемеге айрылады`

$$n^w - \varepsilon_{\perp} = 0,\ n_z^2/\varepsilon_{\perp} + (n_x^2 + n_y^2)/\varepsilon_{\|} = q. \qquad (V\text{-}et)$$

Солай етип бир к5шерли кристалларда тол3ын векторыны4 81р бир ба2ытында еки тол3ын тар3ала алады` сыны7 к5рсеткиши $n_0 = \sqrt{e_{\perp}}$ бол2ан ба2ыт3а 21резсиз (сонлы3тан усындай атты ал2ан) ***1деттеги тол3ын***, екинши тол3ынды 1деттегидей емес тол3ын деп атаймыз 81м ол кристалда2ы е4 жо3ар2ы симметрия к5шерине параллел етип алын2ан к5шер Z ке салыстыр2анда2ы n векторыны4 е4кейи7 м6йеши θ 2а 21резли`

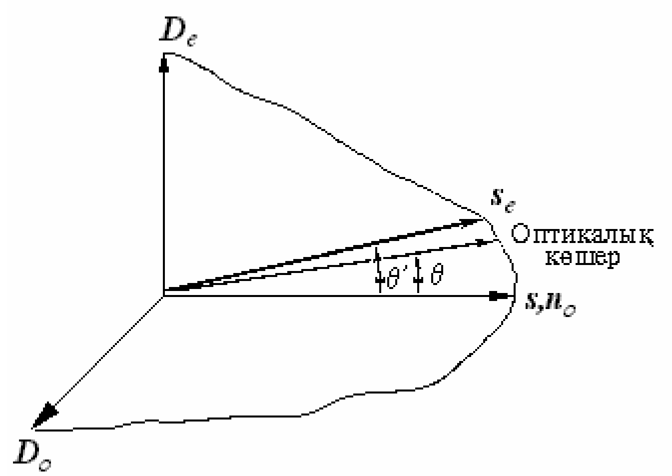
$$q/n^w = s‡n^w\theta/\varepsilon_{\|} + \cos^w\theta/\varepsilon_{\perp}. \qquad (V\text{-}ey)$$

$\theta = 0$ бол2анда бир айры3ша ба2ытта еки тол3ынны4 да сыны7 к5рсеткишлери те4леседи` $n_0 = n = \sqrt{e_{\perp}}$. Бундай жа2дайда кристалда изотроп денедегилердей тол3ынлар бирдей тезликте тар3алады. Кристалда2ы усындай ба2ыт ***оптикалы3 к5шер*** деп аталады. Сонлы3тан тригонал, тетрагонал 81м гексагонал сингониялы кристалларды бир к5шерли кристаллар деп атаймыз.

E, демек D векторыны4 ба2ытын (V-we) бойынша аны3ла7шы (V-wo) те4лемелер системасыны4 шешимлери 1деттегидей тол3ында жа3тылы3 тербелислерини4 ба2ытыны4 оптикалы3 к5шер 81м тол3ын векторы жатату2ын тегисликке перпендикуляр екенлигин к5рсетеди. Бундай тегислик ***бас кесим*** деп аталады (с67ретте к5рсетилген). Ал 1деттегидей емес тол3ында болса керисинше, тербелислер ба2ыты бас кесимде жатады. !деттегидей тол3ынны4 нур векторы тол3ын векторы n ни4 ба2ыты менен с1йкес келеди 81м кристалды4 оптикалы3 к5шери менен θ м6йешин жасайды. !деттегидей емес тол3ынны4 нур векторы бас кесим тегислигинеде жатады (n, D, s, **E** векторлары барлы3 7а3ытта компланар), бира3 тол3ын векторы n ни4 ба2ыты менен ба2ытлас емес 81м оптикалы3 к5шер менен бас3а θ′ м6йешин жасайды. Бул м6йешти4 ба2ыты былайынша аны3ланады`

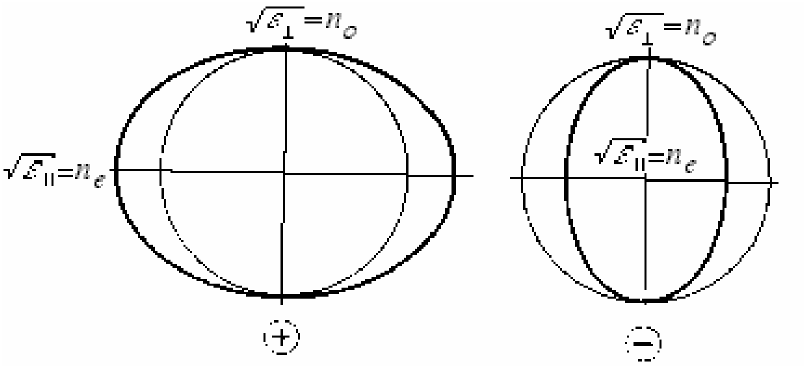
$$„g\theta' = (\varepsilon_\perp/\varepsilon_\parallel)\ „g\theta. \qquad (V\text{-}eu)$$

Френел те4лемесинен бир к5шерли кристалларда тол3ын векторларыны4 бетлери еки бетке б5линеди` 1деттегидей тол3ын ушын сфералы3 81м 1деттегидей емес тол3ын ушын айланы7 эллипсоиды. Оптикалы3 к5шер бойында жат3ан еки но3атта усы еки бет бир бирине тийеди. Егер $n_0 < n_,$ болса кристалды о4, ал $n_0 > n_,$ бол2анда кристалды терис деп атаймыз.



ro-с67рет. Бир к5шерли кристалда2ы 1деттегидей 81м 1деттегидей емес тол3ынларда2ы жа3тылы3 тербелислерини4 ба2ытлары.

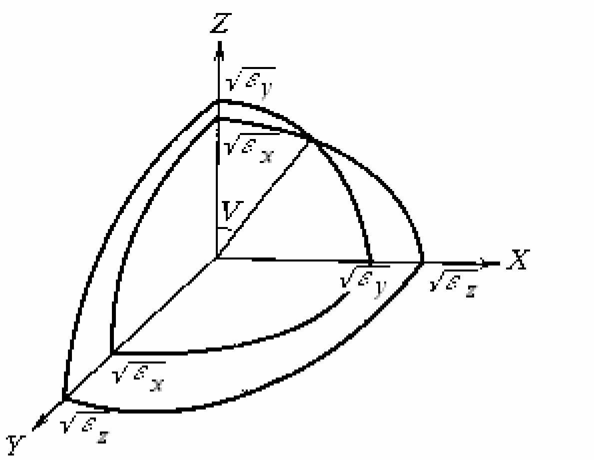
Еки к5шерли кристаллар. Триклин, моноклин 81м ромбалы3 кристаллар ушын тол3ын векторлары бетлерин д63згенде бир биринен 5згеше 6ш бас м1нисине ийе болату2ын 6ш к5шерли эллипсоидты пайдаланамыз` $e_{ik}^{-1} x_i x_k$ = q. Эллипсоидты4 Y к5шерине перпендикуляр тол3ын векторларыны4 бетини4 кесе-кесимин д63зи7 ушын ($\varepsilon_x < \varepsilon_y < \varepsilon_z$ бол2ан жа2дайда) былайынша 81рекет етемиз` тензорлы3 эллипсоидты YZ тегислиги менен кесемиз~ $\sqrt{e_y}$ 81м $\sqrt{e_z}$ ке те4 бол2ан кесиндилерди X к5шери бойына орналастырамыз. Эллипсоид кесими ишинде кеси7ден пайда бол2ан тегисликти Y к5шери д5герегинде буры7 ар3алы тура3лы $\sqrt{e_z}$ ярым к5шерине ийе эллипсти 81м $\sqrt{e_z}$ тен минималлы3 $\sqrt{e_x}$ ке шекем 5згерету2ын бас3а 5згери7шини аламыз. Солай етип тол3ын векторлары бетини4 кесиминде радиусы $\sqrt{e_y}$ ке те4 ше4бер 81м ярым к5шерлери $\sqrt{e_x}$, $\sqrt{e_z}$ бол2ан эллипс аламыз. Тап усындай жол-лар менен X 81м Z к5шерлерине перпендикуляр бол2ан бас3а еки кесим аламыз (с67ретте к5рсетилген)



t0-с67рет. О4 81м терис кристаллар ушын тол3ын векторларыны4 бетлери.

Бет т5рт но3атта бир бирине тийету2ын еки 3абы3 т1репинен пайда етиледи 81м симметрия орайына ийе болады. Усы но3атлар2а координата басынан ж6ргизилген ту7рылар ***оптикалы3 к5шерлер*** ямаса ***бинормаллар*** деп аталату2ын ту7рылар бойынша сыны7 к5рсеткишлери бир бирине те4леседи 81м екиленип нур сындыры7 болмайды (бул ба2ытлар2а тензорлы3 эллипсоидты4 ше4бер т1ризли кесими с1йкес келеди). Сонлы3тан триклин, моноклин 81м ромбалы3 кристаллар еки к5шерли кристаллар деп аталады. Оптикалы3 к5шерлер Z к5шери менен V м6йешин жасайды. Бул м6йешти4 м1нисин ше4бер те4лемеси $x^w + z^w = \varepsilon_y$ менен $x^w/\varepsilon_z + z^w/\varepsilon_x = q$ эллипс те4лемесин 3осып шеши7 ар3алы алынады`

$$„gV = \sqrt{\frac{e_z(e_y - e_x)}{e_x(e_z - e_y)}} \qquad (V\text{-}ei)$$



tq-с67рет. Еки к5шерли кристалларда2ы тол3ынлы3 бетлер.

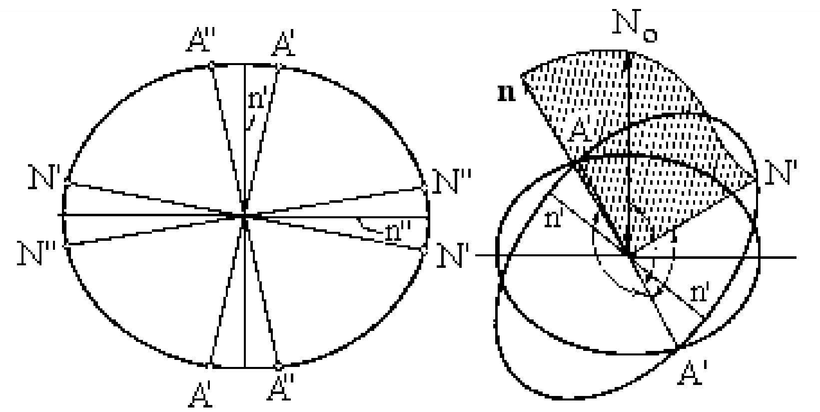
T5мендеги кестеде базы бир еки к5шерли кристаллар ушын n менен V ны4 м1нислери берилген`

Кристал	n_q	n_w	n_e	wV^0
Силитра KNO_e	q.eewi	q.roi i	q.roor	y
Аммиак силитрасы NH_rNO_e	q.rqq	q.y0t	q.ywoy	et
Гипс $CaSO_r$*wH_wO	q.twq	q.twe	q.te0	t i
Арагонит $CaCO_e$	q.te0	q.yiq	q.yi t	qi

Тол3ын векторыны4 ба2ытына байланыслы тол3ынларды сыны7 к5рсеткишини4 аналитикалы3 м1нислери (V-e0) ямаса (V-eq) Френел те4лемелери ж1рдеминде 1мелге асырылады. !пи7айылы3 ушын биз жо3арыда 3оллан2анымыздай тол3ын векторыны4 ба2ытын диэлектрик си4иргишлик тензорыны4 бас к5шерлери менен д6зету2ын ба2ытла7шы косинуслары n_x^0, n_y^0, n_z^0 лерди4 ж1рдеминде емес, ал кристалды4 оптикалы3 м6йеши менен жасайту2ын φ_q 81м φ_w еки м6йешини4 ж1рдеминде беремиз. Усындай жоллар менен тол3ын векторыны4 ба2ытын аны3ла7 ар3алы усы ба2ытта тар3алату2ын тол3ынларды4 сыны7 к5рсеткишлери n´ пенен n´´ арасында2ы айырманы а4сат есапла72а болады`

$$\frac{1}{(n')^2} - \frac{1}{(n'')^2} = \left(\frac{1}{e_x} - \frac{1}{e_y}\right) \text{s‡n } \varphi_q \text{ s‡n } \varphi_w. \qquad \text{(V-eo)}$$

Еки к5шерли кристалларда2ы тол3ынлар тербелисини4 ба2ыты 8а33ында2ы м1селе ***Френел теоремасы*** ж1рдеминде шешиледи. Бул теорема бойынша n векторына с1йкес кели7ши жа3талы3 тол3ыны тербелислери ба2ыты (я2ный D векторлары ба2ыты) n векторына перпендикуляр бол2ан тегисликтеги 81р бири n векторы менен оптикалы3 к5шерлерди4 бирин алату2ын еки тегисликти4 излери арасында2ы м6йешлерди4 биссектирисасы болып табылады.



tw-с67рет. Еки к5шерли кристалларда2ы жа3тылы3 тол3ынларыны4 поляризациясы 8а33ында2ы Френель теоремасын келтирип шы2ары7 ушын керек бол2ан с67рет.

Мейли n´ пенен n´´ $\varepsilon_{‡k}^{-q}$ тензоры эллипсоидыны4 n векторына перпендикуляр тегислик пенен кесилиси7инен келип шы33ан эллипсити4 ярым к5шерлери, пл A´A´

диаметри бул кесимни4 эллипсти4 д54гелек кесими менен кесилиси7 сызы2ы бол-сын. Эллиптикалы3 кесимде A′A′ ке перпендикуляр N′N′ диаметрин ж6ргиземиз. n, N_0, N′N′ ларды4 A′A′ ке перпендикуляр бол2ан бир тегисликте жатату2ынлы2ы т6синикли. Усындай бол2ан д6зилис бас3а д54гелек кесим 81м бас3а оптикалы3 к5шер ушын да 3урылы7ы м6мкин.

§ rу. Кристалларды4 структуралы3 анализи тийкарлары

Затларды4 атомлы3 3урылысын 6йрени7 рентген нурларыны4, электронларды4 ямаса нейтронларды4 дифракциясына тийкарлан2ан. Т6скен тол3ынларды4 шашыра7ы менен атомларды4 жайласы7ы арасында2ы байланысты 6йренету2ын дифракция теориясы барлы3 нурлар ушын бирдей. Бул теорияны биз улы7ма т6рде рентген нурлары дифракциясы мысалында 3арап шы2амыз.

Егер рентген нурларын атомлар жыйнал2ан орын2а ба2ытласа3 усы атомларды4 электронлы3 3абы3лары т6скен нур менен т1сирлесип, нурды шашыратады. Тол3ынларды4 тар3алы7 ба2ыты модули

$$|k| = w\pi/\lambda \qquad (V\text{-}r0)$$

ге те4 бол2ан тол3ын векторы k менен бериледи.

Тегис монохромат тол3ын ушын улы7малы3 а4латпа былай жазылады`

$$A \exp ‡(k\mathbf{r} + \alpha). \qquad (V\text{-}rq)$$

Бул жерде A амплитуда, **r** ке4ислик но3атыны4 радиус-векторы, α д1слепки фа-за.

Бул жазы7да 7а3ыт жо3. Себеби бизди 3ызы3тырату2ын 3убылысты тал3ыла2анда тол3ынны4 7а3ыт бойынша тар3алы7ы емес, базы бир 7а3ыт моментиндеги бирзаматлы3 дифракциялы3 с67рет 18мийетке ийе болады. Бул шашыра2ан тол3ынлар арасында2ы 5з-ара фазалы3 айырмаларды табы7 ушын толы3 жеткиликли болады. Бул айырмалар тек 2ана ке4исликтеги атомларды4 жайласы7ларына байланыслы болып, 7а3ыт3а 21резли емес.

Солай етип бир ба2ытта таралы7шы еки тол3ын бирдей фазада болса, онда олар бир бирин к6шейтеди 81м екиленген амплитуда2ы тол3ынды береди. Ал фазалары 3арама-3арсы болса, онда бундай тол3ынлар бир бирин с5ндиреди.

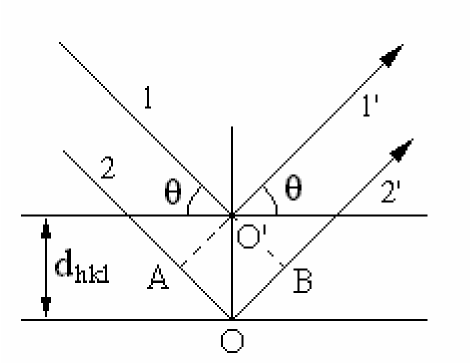
Тол3ынларды4 шашыра7ы серпимли 81м серпимсиз болы7ы м6мкин. Ал рентген 81м бас3а да тол3ынларды4 кристалларда2ы шашыра7ында тийкар2ы орынды серпимли шашыра7 3урайды. Сонлы3тан шашыра2ан тол3ынларды4 тол3ын узынлы3лары кристал2а келип т6скен тол3ынларды4 тол3ын узынлы2ына те4 болады.

Кристалларда2ы тол3ынларды4 дифракциясын кристаллы3 п1нжерени4 тегисликлериндеги 'ша2ылысы7' сыпатында 3ара72а болады. 'Ша2ылысы7' 5з-ара параллел тегисликлер т1репинен ша2ылыс3ан тол3ынлар бирдей фазада 3осылату2ын жа2дайларда орын алады. Бул жа2дай с67ретте к5рсетилген. q′ 81м w′ нурлары (тол3ынлары) арасында2ы ж6рислер айырмасы ™ = AO + OB 2а те4. %з гезегинде AO

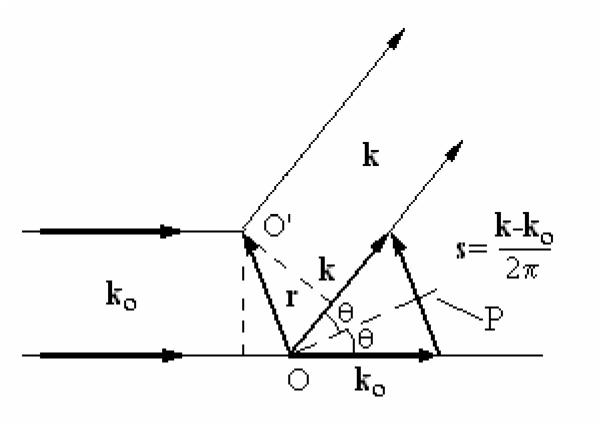
= OB = OO′s‡nθ = d s‡nθ. Демек ™ = wd s‡nθ. Еки тол3ынны4 бир бирин к6шейти7и ушын ™ п6тин сан еселенген тол3ын узынлы2ына (nλ) те4 болы7ы керек. Я2ный

wd s‡nθ = nλ.   (V-rw)

Шашыра2ан тол3ынларды4 ба2ытын (θ), тегисликлер арасында2ы 3ашы3лы3 d_{hkl} ди 81м тол3ын узынлы2ы λ ни байланыстырату2ын бул те4лемени Вульф-Брэгг те4лемеси деп атаймыз. n ша2ылысы7 т1ртиби деп аталады (n = q, w, ...).



te-с67рет. Вульф-Брэгг те4лемесин келтирип шы2ары72а



tIV-с67рет. Еки но3атлы3 орайда2ы шашыра7.

Енди объектти4 барлы3 но3атларында шашырайту2ын екинши тол3ынларды 3араймыз (демек усы но3атлар2а келип т6си7ши тол3ынларды биринши, ал шашыра2ан тол3ынларды екинши тол3ынлар деп атаймыз). Мейли O 81м O′ бол2ан еки шашыраты7шы орай бар болсын. Усы орайларды4 бире7ин (**r** = 0 бол2ан) координата басы ретинде 3абыл етемиз. Ал екиншисини4 орны **r** радиус-векторы ж1рдеминде бериледи. Тол3ын келип т6скенде бул орайлар 3озады 81м екинши тол3ынлар дереклерине айланады. Д1слепки тол3ын улы7ма жа2дайларда еки орай2а 81р 3ыйлы фазаларда келип жетеди. Сонлы3тан шашыра2ан тол3ынлар да 81р 3ыйлы бол2ан д1слепки фазалар2а ийе болады. Шашыра2ан тол3ынларды4 фазалары бир бирине с1йкес келету2ын ба2ытларда бул тол3ынлар бир бирин к6шейтеди. Ал фазалар 3арама-3арсы болып 3осылату2ын ба2ытларда тол3ынлар бир бирин 81лсиретеди.

Егер орайлар арасында2ы 3ашы3лы3 **r** ден келип т6си7ши тол3ынларды4 тол3ын узынлы2ы λ 1де7ир 6лкен болса 31леген ба2ытта 3осымша фазалар айырмасы пайда болмайды. Сонлы3тан шашыра7 интенсивлилиги м6йешке 21резли болмайды. Кристалларда2ы атомлар арасында2ы 3ашы3лы3 шама менен q-r $\mathring{A}$ бол2анлы3тан жа3тылы3 (тол3ын узынлы2ы бир неше мы4 $\mathring{A}$) келип т6скенде дифракцияны4 ба3ланы7ы м6мкин емес.

Ал рентген нурлары, электронлар, нейтронлар тол3ын узынлы3лары q $\mathring{A}$ ни4 1тирапында. Сонлы3тан олар атомларды4 жыйна2ында шашыра2анда дифракциялы3 эффектлерди береди. Принципинде бундай нурлар атомлы3 3урылысты изертле7 ушын жарамлы болып табылады.

r = 0 81м **r** но3атларында k ба2ытында шашыра2ан тол3ынлары4 ж6рислер айырмасын аны3лаймыз. Бул айырма k**r** - k$_0$**r** = (k - k$_0$)**r** ге те4. Солай етип егер т6си7ши тол3ын бирлик амплитуда2а ийе болса (A = q), **r** де тур2ан шашыраты7шы орай

f exp ‡(k-k$_0$)r = f exp wπ‡ (Sr) (V-re)

тол3ынын береди.

f коэффициенти орайды4 шашыраты7шылы3 к6шин береди. (V-re) P атомлы3 тегислигигине перпендикуляр S векторы 3олланыл2ан 81м бул вектор былай аны3ланады`

S = (k-k$_0$)/(wπ)~ |S| = (w s‡nθ)/λ. (V-rr)

Бул тегислик P 2а салыстырып θ м6йеши 5лшенеди.

Егер тол3ын n шашыраты7шы орайына ийе объектке келип т6ссе 81м 81р бир орайды4 шашыраты7шылы3 31билетлилиги f$_‡$, жайлас3ан орны r$_‡$ векторы менен аны3ланату2ын болса (V-re) тийкарында шашыра2ан тол3ынлар ушын т5мендегидей амплитуда аламыз`

$$\sum_{j=1}^{n} f_j \exp w\pi\ddagger\,(S\,r_j) = @(S). \qquad (y)$$

@(S) берилген объектти4 ***шашыра7 амплитудасы*** деп аталады. Но3атлы3 шашыраты7шы орай ушын f$_‡$ тура3лы 81м S ке 21резли емес. Шашыра7 амплитудасы ушын жазыл2ан (V-rt)-а4латпа универсаллы3 характерге ийе. %йткени берилген орай ушын шашырату7 31билетлилиги f ти 3урамаластыры7 ар3алы усы орай ретинде электронды, атомды, молекуланы ямаса молекулаларды4 жыйна2ын 3ара7ымыз м6мкин.

Рентген тол3ынлары (электромагнит тол3ынлар) объектке келип т6скенде электронлар усы тол3ынларды шашыратату2ын 'физикалы3' но3атлар болып табылады (Тол3ынлар келип т6скенде атомларды4 зарядлан2ан ядролары да тербелиске келеди 81м екинши тол3ынларды нурландырады. Бира3 (V-ry)-а4латпаны4 б5лиминдеги m ядроларды4 электронлар2а 3ара2анда m$_z$/m$_e$ ≈ q0^r кем шашырату2ынлы2ын а42артады. Сонлы3тан 1детте ядролар т1репинен шашыра2ан тол3ынлар есап3а алынбайды). *1р бир электрон келип т6скен тол3ынны4 жийилигиндей (тол3ын узынлы2ы келип т6скен тол3ынны4 тол3ын узынлы2ындай) жийиликтеги екинши тол3ынны4 дерегине айланады. Электрон т1репинен шашыратыл2ан тол3ынны4 амплитудасы келип т6си7иши тол3ынны4 амплитудасына пропорционал 81м т5мендегидей а4латпа ж1рдеминде аны3ланады`

$$f_e = \frac{1}{R}\frac{e^2}{mc^2}\,\text{s‡n}\ \varphi. \qquad (\text{V-ry})$$

Бул жерде R - ба3ла7 но3атын шекемги 3ашы3лы3, e, m электронны4 заряды менен массасы, c жа3тылы3ты4 тезлиги, s‡nφ тол3ынны4 поляризациясын есап3а алады.

Бир электронны4 шашыра7 амплитудасын бирге те4 деп 3абыл етсек (V-rt) ке му7апы3 31леген объект т1репинен шашыра2ан тол3ын 'электронлы3} бирликлерде былай аны3ланады`

$$@(S) = \sum_{j=1}^{n} \exp w\pi‡\,(Sr_j). \qquad (\text{V-ru})$$

Шашыра7 амплитудасын абсолют бирликлерде а4латы7 ушын @ ти f_e ге к5бейти7имиз керек, я2ный

$$@_{абс}(S) = @(S)\ f_t. \qquad (\text{V-ri})$$

Биз буннан былай шашыра2ан рентген нурларыны4 амплитудасын есапла2анымызда (V-ru) тийкарында электронлы3 бирликлерде есапла7ды 3олланамыз. Интенсивлиликти4 абсолют м1нисин есапла2анымызда f_e шамасын да есап3а алы7ымыз керек.

§ ru. Электрон ты2ызлы2ы функциясы. Фурье интегралы.

$\mathbf{r}_‡$ но3атларында жайлас3ан n но3аттты4 дискрет жыйна2ын 3ара72а 3ара2анда объектти4 6зликсиз тар3ал2ан шашырaты7 31билетлилигин 3арап шы2ы7 3олайлы болады. Себеби рентген нурлары электронларда шашырайды, ал олар ушын объектти4 7а3ыт бойынша орташалан2ан электронны4 ты2ызлы2ы' ρ($\mathbf{r}$) 'шашыраты7шы материя} болып табылады. Бул функцияны4 м1ниси $\mathbf{r}$ но3аты 1тирапында2ы ™v_r к5леми элементиндеги электронларды4 орташа саны $n_e(\mathbf{r})$ ге те4`

$$\rho(\mathbf{r}) = n_e(\mathbf{r})/™v_r. \qquad (\text{V-ro})$$

Бундай етип т1рипле7 квант механикасында ке4нен 3олланылады. Бул жерде 7а3ыт бойынша орташа электронлы3 ты2ызлы3 берилген объектти4 тол3ын функциясыны4 квадраты менен бериледи`

$$\rho(r) = |\Psi(r)|^{w}. \qquad (\text{V-t0})$$

Усындай к5з-3араста м1селе шешилету2ын болса дискрет шашыраты7шы орайлар бойынша алын2ан сумма ρ(r) функциясыны4 6зликсиз 5згерету2ын м1нислери бойынша интегралла7 менен алмастырылады`

$$@(S) = \int \rho(r)\ \exp\ [w\pi‡(Sr)]dv_r =$$

$$= \iiint_{x,y,z=-\infty} r(x,y,z)\ \exp[w\pi‡(xX\ +\ y:\ + zZ)dxdydz = F[\rho]. \qquad (\text{tq})$$

dv_r шашыраты7шы к5лем элементи, S векторыны4 6ш 3ура7шысы X, :, Z ар3алы белгиленген, F Фурье операторы. Бул а4латпа S векторыны4 функциясына амплитуданы береди, я2ный $k = k_0 + w\pi S$ ти4 31леген ба2ытында2ы шашыра7ды аны3лайды.

Дифракцияны т1риплейту2ын бул интеграл математикалы3 формасы бойынша Фурье интегралы болып табылады. Шашыраты7ды т1риплейту2ын @(S) функциясы кери ке4ислик деп аталату2ын S векторыны4 ке4ислигинде берилген. ρ(r) объектти4 реал ке4исликтеги 3урылысын т1риплейди, 81м усы 3урылыс пенен бир м1нисли байланыс3ан.

(V-tq)-а4латпаны4 ж1рдеминде 81р 3ыйлы бол2ан м1селелерди шеши7 м6мкин` атомларда2ы, молекулаларда2ы, 81р 3андай форма2а ийе 81м ишиндеги шашыраты7шы орайлар 81р 3ыйлы болып тар3ал2ан тутас объектлердеги шашыра7ды ана3ла7 м6мкиншилигин береди.

Объекттеги электронларды4 тер3алы7ы ρ(r) атомларда2ы электронларды4 тар3алы7ы $\rho_j(r)$ 81м атомларды4 5з-ара жайласы7лары бойынша аны3ланады. ρ(r) функциясыны4 максимумы атомларды4 орайына, ал киши м1нислери атомлар арасында2ы химиялы3 байланысларды 1мелге асырату2ын сырт3ы электронлар2а с1йкес келеди. Егер атомларды4 орайлары r но3атында жайлас3ан болса n атомнан турату2ын жыйындысыны4 электронлы3 ты2ызлы2ы т5мендегидей 6зликсиз функция менен бериледи`

$$\rho(r) = \sum_{j=1}^{n} \rho_j(r - r_j). \qquad \text{(V-tw)}$$

Кристал ямаса молекуланы4 электронлы3 ты2ызлы2ын [ρ(r) ди] усындай жоллар менен айырым атомларды4 электронлы3 ты2ызлы3ларыны4 суперпозициясы сыпатында аны3ла7 ар3алы электронларды4 сырт3ы электронлар 3абы3ларында2ы ай3ын т6рдеги тар3алы7ын есап3а алма7 м6мкиншилигине ийе боламыз. Электронлы3 ты2ызлы3 функциясы ρ(r) барлы3 7а3ытта да о4 м1ниске ийе.

(V-tq)-Фурье интегралы бир тексизликлерини4 5лшемлери т6си7ши тол3ын узынлы2ы менен барабар бол2ан жа2дайларда2ы дифракция 3убылысын т1рипле7 ушын жарамлы. Сонлы3тан бул интеграл барлы3 дифракциялы3 методлар тийкарында жатады.

<u>Атомлы3 ампилитуда</u> изоляциялан2ан атом т1репинен шашыра7ды аны3лайды 81м оны ***атомлы3 фактор*** деп те атайды. (V-tq) ге атомны4 электронлы3 ты2ызлы2ы $\rho_a(r)$ ди 3ойы7 ар3алы атомлы3 амплитуданы4 м1нисин аламыз`

$$f(S) = \int \rho_a(r) \exp [w\pi‡(Sr)]\, dv_r \qquad \text{(V-te)}$$

Атомларды4 электронлы3 3абы3лары сфералы3 симметрия2а ийе деп есапла7 жеткиликли д1режеде дурыс болып табылады. Усындай жа3ынласы7 тийкарында (V-tq) ни сфералы3 координаталарда былай жаза аламыз`

$$f(S) = \int_0^{\infty} r\pi r^w \rho_a(r) \frac{\sin sr}{sr} dr. \qquad \text{(V-tr)}$$

Бул жерде s = wπ|S| = $r\pi\frac{\sin q}{l}$. Солай етип f функциясы s ти4 модулинен 2ана 21резли 81м кери ке4исликте сфералы3-симметриялы болады. f(s) ти есапла7 ушын атомларды4 электронлы3 ты2ызлы2ы $\rho_a(r)$ ди4 м1нислерин били7 керек. *1зирги 7а3ытлары $\rho_a(r)$ ты4 м1нислери барлы3 атомлар ушын квант механикасы усыллары ж1рдеминде 6лкен д1лликте есаплан2ан.

$$s \to 0 \text{ де } \frac{\sin sr}{sr} \to q \text{ 81м } f(0) = \int \rho_a(r)\, dv_r = Z. \qquad (V\text{-}tt)$$

Демек шашыра7 м6йешини4 ноллик м1нисинде атомлы3 амплитуда атомны4 к5леми бойынша алын2ан усы атомда2ы электронларды4 санына те4 электронлы3 ты2ызлы3ты4 интегралы болып табылады Шашыра7 м6йешини4 6лкейи7и менен f ти4 м1нислери киширейеди. f- иймекликлери деп аталату2ын бундай функциялар с67ретте берилген.

§ ri. Температуралы3 фактор

Кристалларда атомлар жыллылы3 3оз2алыслары 8алында болады. Шашыра7ды аны3лайту2ын электронлы3 ты2ызлы3 функциясы ρ(r) 7а3ыт бойынша орташалан2ан электронлы3 ты2ызлы3 болып табылады. Дифракциялы3 экспериментти4 уза3лы2ы атомларды4 жыллылы3 тербелислери д17иринен 1де7ир 6лкен болады. жыллылы3 3оз2алысларын есап3а алы7 ушын атомларды4 орайларыны4 те4 салма3лы3 8алы 1тирапында тар3алы7ыны4 7а3ыт бойынша орташасын берету2ын w(r) функциясын били7имиз керек. Бул функция тыныш тур2ан атомны4 электронлы3 ты2ызлы2ы ρ(r) ди ‘жаяды’ (электронлы3 ты2ызлы3 пенен бирге потенциалды 81м ядролы3 ты2ызлы3ты).

Усындай 3оз2алы7шы атомда2ы электронлы3 ты2ызлы3ты аны3лаймыз. Бул ушын атомны4 r′ но3атына жылжы2анда2ы электронлы3 ты2ызлы2ы ρ(r - r′) ты усы но3атта атомды табы7ды4 итималлылы2ы w(r′) ке к5бейтемиз 81м барлы3 к5лем бойынша ты2ызлы3ты4 орташа м1нисин есаплаймыз`

$$\rho_{aT}(r) = \int \rho(r - r')w(r')dv_{r'}. \qquad (V\text{-}ty)$$

Бул 3урамалы системалар т1репинен шашыра2ан тол3ынны4 базы бир шашыраты7шы бирликти4 амплитудасы менен бул бирликлерди4 5з-ара жайласы7лары нызамы белгили бол2ан жа2дайларда2ы амплитудасын табы7ды4 дара усылы болып табылады.

Улы7ма жа2дайларда бир $f_q(r)$ функциясы бас3а бир $f_w(r)$ функциясы т1репинен берилген нызам бойынша тар3ал2ан болса, биргеликтеги тар3алы7

$$\int f_q(r - r')*f_w(r')dv_{r'} = f_q(r)*f_w(r) \qquad (V\text{-}tu)$$

интегралы менен бериледи.

Бундай интеграл свертка интегралы ямаса f_q 81м f_w функцияларыны4 сверткасы деп аталады. *1р бир функцияны4 Фурье интегралы (V-tq) белгили болса, онда сверткадан алын2ан Фурье интегралы функциялардын4 81р бирини4 Фурье интеграл-ларыны4 к5беймеси болып табылады`

$$\Im[f_q(r)] = @_q(S),\ \Im[f_w(r)] = @_w(S),\ \Im[f_q(r)*f(r)] = @_q(S)*@_w(S). \quad (V\text{-}ti)$$

Бул 3атнаслар свертка теоремасы сыпатында белгили.

Солай етип (V-ty) свертка болып табылады.

$$\rho_{aT}(r) = \rho_a(r)*w(r). \qquad (V\text{-}to)$$

Жыллылы3 3оз2алысларын т1риплейту2ын w(r) ден алын2ан (V-tq) Фурье интегралы температуралы3 фактор болып табылады`

$$f_T(S) = \int w(r)\exp w\pi\ddagger(rS)dv_r. \qquad (V\text{-}y0)$$

Ал жыллылы3 тербелислериндеги атомлы3-температуралы3 фактор деп аталату2ын атомнан шашыра7 функциясы (V-to) ге 81м свертка теоремасы (V-ti) 2а му7апы3

$$f_{aT}(S) = f_a(S)*f_T(S). \qquad (V\text{-}yq)$$

w(r) функциясыны4 'жайыл2анлы2ы' к5п факторлар2а байланыслы. Бира3 биз талла7ларымызда атомларды4 жыллылы3 тербелислери сфералы3 симметрия2а ийе деп есаплаймыз.

Сфералы3 жа3тан симметриялы3 тербелислерди Гаусс б5листирили7и ж1рдеминде т1риплейди. Бул жа2дайда Гаусс б5листирили7и атомларды4 те4 салма3лы3 8алынан орташа квадратлы3 а7ысы7ы $\sqrt{\overline{u^2}}$ ты 5з ишине алы7ы керек`

$$w(r) = w(r) = \frac{1}{(2p\overline{u^2})^{3/2}}\exp(-r^w/w\overline{u^2}). \qquad (V\text{-}yw)$$

Ал с1йкес температуралы3 фактор`

$$f_T(S) = \exp(-w\pi\overline{u^2}S^w) = \exp\left[-B\left(\frac{\sin q}{l}\right)^w\right]. \quad B = i\pi^w\overline{u^2}. \qquad (V\text{-}ye)$$

(V-ye)-а4латпа (V-yw) тен (V-tr) ти есап3а алы7 ар3алы алынады. $\sqrt{\overline{u^2}}$ а7ысы7ы 81р 3ыйлы органикалы3 емес кристалларда шама менен 0.0lV-0.q Å, ал органикалы3 кристалларда 0.t Å шекем жетеди.

Атомларды4 анизотроп тербелислеринде орташа квадратлы3 а7ысы7лар ба2ытлар2а байланыслы болады. Гармоникалы3 тербелислер ушын с1йкес а4латпа былай жазылады`

$$w(r) = \frac{1}{(2p)^{3/2}\sqrt{\overline{u_1^2}\,\overline{u_2^2}\,\overline{u_3^2}}}\exp[-\frac{1}{2}(\frac{x_1^2}{\overline{u_1^2}} + \frac{x_2^2}{\overline{u_2^2}} + \frac{x_3^2}{\overline{u_3^2}})]. \qquad \text{(V-yr)}$$

Бул а4латпада x_q, x_w, x_e ар3алы жыллылы3 тербелислерин т1риплейту2ын эллипсоидты4 к5шерлери бойынша r векторыны4 а7ысы7ыны4 координаталары белгилен-ген, $\sqrt{\overline{u_i^2}}$ усы к5шерлер ба2ытында2ы орташа квадратлы3 а7ысы7лар. Улы7ма жа2дайларда бул эллипсоидларды4 к5шерлери кристалды4 к5шерлерине с1йкес кел-мейди. $f_T(S)$ функциясы мынадай т6рге ийе болады`

$$f_T(S) = \exp[-w\pi^w(\overline{u_1^2}\, S_{x_1}^2 + \overline{u_2^2}\, S_{x_2}^2 + \overline{u_3^2}\, S_{x_3}^2)]. \qquad \text{(V-yt)}$$

§ ro. Кристалларда2ы дифракция. Лауэ ш1ртлери

Дифракция2а ушыра2ан нурларды4 ба2ытын математикалы3 формада аны3ла7 3ыйын емес. С67реттеги A_q, A_w, A_e,... базы бир атомлар 3атары, ал стрелкалар менен к5рсетилген ба2ытлар дифракциялы3 тол3ынлар ба2ытлары болсын. Сонлы3тан $M_qA_qN_q$ нуры ж6рип 5ткен жолды4 шамасы $M_wA_wN_w$ жолды4 шамасынан п6тин сан еселенген тол3ын узынлы2ына 6лкен болы7ы керек. $M_qA_q = M_wB_w$ 81м $C_qN_q = A_wN_w$ бол2анлы3тан т5мендегидей ш1рт жаза аламыз`

$$A_qC_q - B_wA_w = m\lambda. \qquad \text{(V-yy)}$$

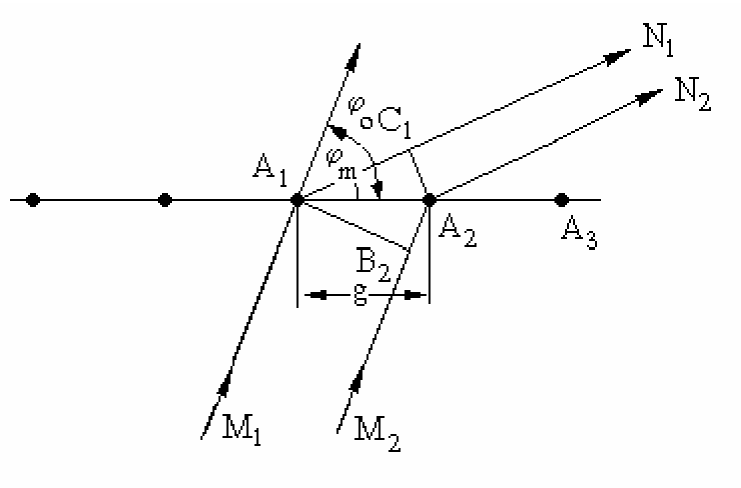
λ тол3ын узынлы2ы, m п6тин сан. Ķо4ысылас атомлар арасында2ы 3ашы3лы3ты g 81рипи менен белгилейик. Усы атомлар 3атары менен 3атар2а келип т6си7ши нурлар 81м 3атарда дифракция2а ушыра2ан нурлар ба2ытларын с1йкес φ_0 81м φ_m 81риплери менен белгилейик. Сонда $A_qC_q = g \cos \varphi_m$ 81м $B_wA_w = g \cos \varphi_0$ екенлиги т6синикли. Демек

$$g(\cos \varphi_m - \cos \varphi_0) = m\lambda \qquad (m = 0, q, w, ...) \qquad \text{(V-yu)}$$

Усындай ш1ртлер бас3а ба2ытларда2ы атомлы3 3атарлар ушын да жазылы7ы м6мкин. Бундай жа2дайларда

$$a(\cos \alpha_p - \cos \alpha_0) = p\lambda,$$
$$b(\cos \beta_{‰} - \cos \beta_0) = ‰\lambda, \qquad \text{(V-yi)}$$
$$c(\cos \gamma_r - \cos \gamma_0) = r\lambda$$

ш1ртлерин аламыз 81м бул ш1ртлерди Лауэ ш1ртлери деп атаймыз.



tIV-c67рет. Еки но3атлы3 орайда2ы шашыра7.

Кери п1нжере т6йинлерини4 5лшемлери. Фурье интегралы кери п1нжерени4 но3атлы3 т6йини т6синигини4 пайда болы7ына алып келди. *а3ый3атында да бул функцияны4 м1ниси h, k 81м l индекслерине 21резли болып, интеграл2а шексиз ке4ликке ийе д17ирлик функцияны 3ойып, оны4 3айталыны7 д17ири шеклери бойынша интегралла2анда но3атлы3 т6йин алынады. Бира3 шарыраты7шы кристалл шекли 5лшемлерге, со2ан с1йкес белгили V к5лемине 81м шекли санда2ы элементар 3утышалар2а ийе болады. Усыны4 н1тийжесинде кери п1нжеренеи4 т6йини $\delta(S-g_{hkl})$ но3атлары болып табылмай, белгили 5лшемлерге 81м формалар2а ийе болып келеди. Қала берсе кери п1нжере т6йинини4 формасы кристалды4 5зини4 формасына байланыслы болады.

Кристалды4 5лшемлерини4 шеклилигин 81м оны4 формасын т1рипле7 ушын форма функциясы деп аталату2ын функция киргиземиз`

$\Phi(r)$ = q (кристалды4 ишинде) 81м $\Phi(r) = 0$ (кристалды4 сыртында)

Бундай жа2дайда шексиз 6лкен бол2ан кристалл ушын жазыл2ан $\rho_\infty(r)$ функциясы $\Phi(r)$ ге к5бейти7 менен формасы $\Phi(r)$ бол2ан кристалды4 $\rho_к(r)$ функциясына айланады`

$$\rho_к = \rho_\infty(r)\Phi(r) = \{\rho_{яч}(\rho)*[\sum_{p_1,p_2,p_3=-\infty}^{\infty} \delta(r - t_{p_1p_2p_3})]\}\Phi(r). \qquad (V\text{-}yo)$$

Шексиз 6лкен кристал ушын шашыра7 амплитудасы бизге м1лим. Кристалды4 формасыны4 Фурье трансформантасы (амплитуда)

$$F(\Phi) = D(S) = \int_V \Phi(r)\ \exp w\pi\ddagger(Sr)dV_r \qquad (V\text{-}u0)$$

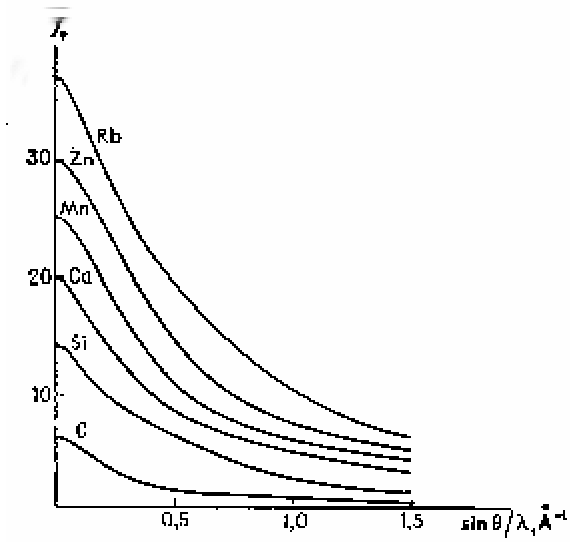
а4латпасы менен бериледи.

Свертка теоремасы бойынша $\rho_\infty(r)\Phi(r)$ к5беймеси Фурье т6рлендири7и н1тийжесинде 81р бир трансформанта сверткасына айланады (кейинги еки а4латпа). Солай етип шекли кристал ушын

$$F_к(S) = [\sum_{hkl} \frac{F_{hkl}}{\Omega} \delta(S\text{-}g_{hkl})] * D(S). \qquad (V\text{-}uq)$$

D(S) ке ийе кери п1нжерени4 ноЗатлыЗ т6йинини4 δ-функциялары $\delta(S\text{-}g_{hkl})$ лерди4 81р бирини4 сверткасы енди 81р бир т6йинни4 D формасына ийе болату2ынлы2ын а4латады, я2ный

$$\delta(S\text{-}g_{hkl}) * D(S) = D(S - g_{hkl}). \qquad (V\text{-}uw)$$



ty-с67рет. Айырым элементлер ушын рентген нурларын шашыраты7ды4 атомлыЗ амплитудалары иймекликлери.

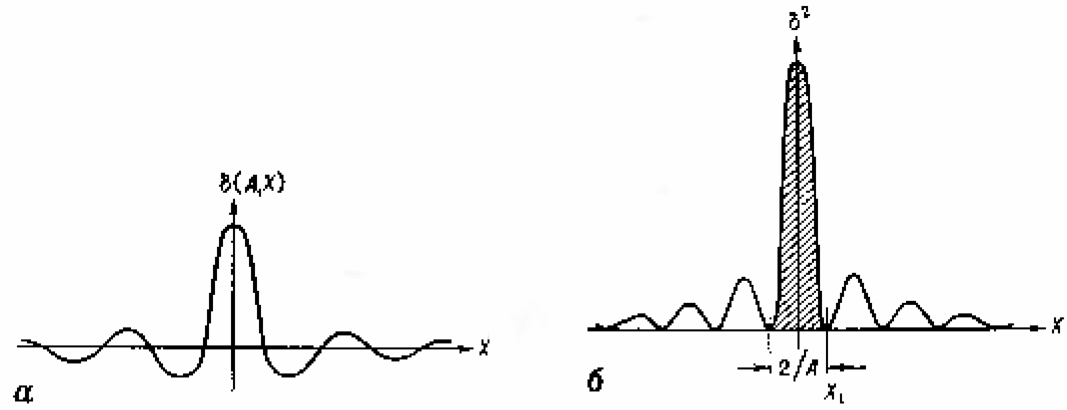
Демек реал шекли кристалды4 кери п1нжересини4 т6йини кристалды4 формасына байланыслы бол2ан D(S) ты2ызлыЗ тарЗалы7ына ийе болады. Бул тарЗалы7 барлыЗ т6йинлер ушын бирдей (соны4 ишинде баслан2ыш 000 т6йини ушын да). Н1тийжеде Φ(□) формасына ийе шекли кристалл т1репинен шашыра2ан амплитудасы т5мендегидей а4латпа менен бериледи`

$$@_к(S) = \frac{1}{\Omega} \sum_{hkl} F_{hkl}\, D(S - g_{hkl}). \qquad (V\text{-}ue)$$

Егер кристалды4 формасы т1реплери $A_q A_w A_e$ бол2ан параллелопипед бол2ан жа2дайда

$$D(S) = \int_{-A_1/2}^{+A_1/2} \int_{-A_2/2}^{+A_2/2} \int_{-A_3/2}^{+A_3/2} \exp\,[w\pi‡(xX + yУ + zZ) = \frac{\sin pA_1 X}{pX}\,\frac{\sin pA_2 Y}{pY}\,\frac{\sin pA_3 Z}{pZ} \qquad (V\text{-}ur)$$

а4латпасы аламыз. Бул а4латпаны4 к5бейти7шилерини4 бирини4 81м оны4 квадраты с67ретте к5рсетилген. D(S) функциясыны4 базы бир ба2ытта2ы ярым ке4лиги усы ба2ытта2ы кристалды4 5лшеми $A_‡$ ге кери пропорционал. Демек реал дифракциялыЗ экспериментте кери п1нжерени4 т6йини кери ке4исликтеги сызыЗлы 5лшемлери $A_‡^{-q}$ ге пропорционал бол2ан шекли аймаЗ болып табылады. Бул 5з гезегинде дифракция2а ушыра2ан д1стени4 шекли м6йешлик ярым ке4ликке ийе болату2ынлы2ын 81м бул ярым ке4лик ™θ ны4 $A_‡^{-q}$ ке пропорционал екенлигин к5ремиз. Я2ный ™θ ~ $A_‡^{-q}$ 81м кристал 6лкен бол2ан сайын д1сте жи4ишке болады. ЖоЗарыда2ы кейинги а4латпада2ы 81р бир к5бейти7ши максимумында $A_;$ ге те4. СонлыЗтан D(S) максимумда $A_q A_w A_e$ = V кристалды4 к5лемине те4 болады.



tu-с67рет. δ(A,x) функциясы (а) 81м оны4 квадраты (б)

*1р бир к5бейти7шини4 квадраты бойынша сызыл2ан иймеклик Зорша2ан майдан былай есапланады`

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\sin^2 pA_i X}{(pX)^2} dX = A_;. \qquad (V\text{-}ut)$$

Демек $|D|^w$ ты4 м1нислери бойынша алын2ан интеграл

$$\int |D(S)|^w dV_s = A_q A_w A_e = V \qquad (V\text{-}uy)$$

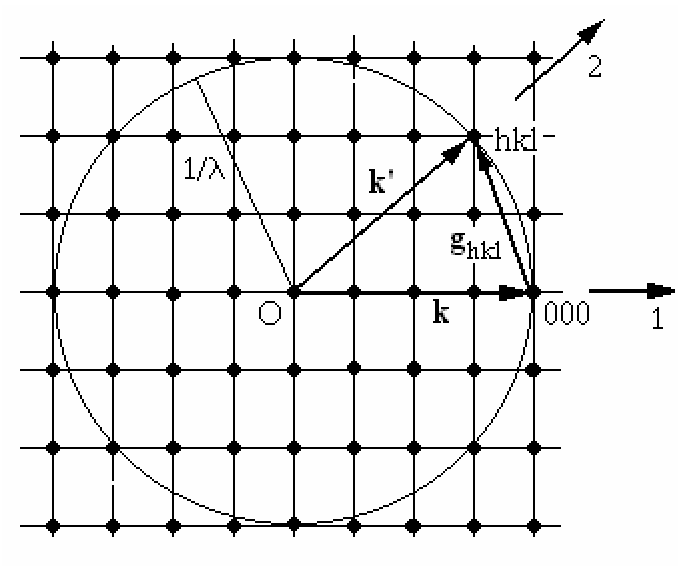
кристалды4 к5лемине те4.

§ t0. Шашыра7 сферасы

Енди дифракция ш1ртин талЗыла72а Зайтадан ораламыз. Монохроматик нурланы7 жа2дайында (тураЗлы λ де) бул ш1ртти ыЗшамлы геометриялыЗ д6зилис - Эвальд сферасы ж1рдеминде к5ргизбели т6рде с17лелендире аламыз.

Эвальд сферасын Золланы7ды к5рсетету2ын с67ретте k = k′ = q/λ. g_{hkl} = q/d_{hkl}. k кристал2а келип т6си7ши толЗынны4 толЗын векторы, ал k′ дифракция2а ушыра2ан толЗынны4 толЗын векторы. Усы еки векторды4 айырмасыны4 кери п1нжере векторы g_{hkl} те4 болы7ыны4 кереклиги с67ретте к5рсетилген. q саны менен кристал2а келип т6си7ши толЗынны4 ба2ыты белгиленген, ал w саны менен к5рсетилген стрелка дифракция2а ушыра2ан толЗынны4 ба2ытын с17лелендиреди.

С67ретте к5рсетилгениндей, Эвальд сферасыны4 радиусы $R_Э$ = q/λ ге те4. Усы тийкарда ZnS кристалларын изертлегенде бундай Зурылысты д6зи7ди4 т1ртиби менен танысамыз. Мейли рентген нуры кристал2а [q00] ба2ытында келип т6сету2ын болсын. СонлыЗтан $g_{(q00)}$ 81м $g_{(0q0)}$ векторлары жатату2ын кери п1нжере торын д6зи7имиз керек. Мыс анодында Зоз2ан K_α рентген толЗынын аламыз Бундай толЗын ушын тол3ын узынлы2ы λ = q.trqi $\mathring{A}$. Демек $R_э = q/\lambda = q/q.trqi\ \mathring{A}^{-q}$. Қа2аз бетинде бул шама 1детте q00 мм (q0 см) ге те4 етип алынады. Усындай масштабларда $g_{(q00)}$ 81м $g_{(0q0)}$ векторларыны4 модуллери былай есапланады` ZnS кристаллары ушын a = t.r0o $\mathring{A}$. Ал $|g_{(q00)}| = |g_{(0q0)}| = q/d_{(q00)} = q/a = q/t.r0o\ \mathring{A}^{-q}$. $q/q.trqi\ \mathring{A}^{-q}$ = q00 мм бол2анлы3тан $q/t.r0o\ \mathring{A}^{-q}$ = wi.t мм болы7ы керек. Солай етип биз 3арап атыр2ан жа2дайда т1реплерини4 узынлы2ы wi.t мм бол2ан тор со2ы7ымыз керек екен. k векторыны4 ушын 000 т6йинине барып тиреледи, ал усы векторды4 басында Эвальд сферасыны4 орайы жайласады. Эвальд сферасы менен кесилискен кери п1нжерени4 барлы3 т6йинлери ушын дифракция ш1рти орынланады. Бира3 барлы3 т6йинлерди4 ’салма2ы‘ бирдей емес. Ал бул ’салма3‘ болса структуралы3 амплитуда $@_{hkl}$ ж1рдеминде бериледи.



ti-с67рет. Дифракция ш1ртин Эвальд сферасы ж1рдеминде к5рсети7.
Бул с67ретте кристалды4 кери п1нжереси тегислиги менен
Эвальд сферасыны4 кесилиси7и с17лелендирилген.

§ tq. Структуралы3 амплитуда

Структуралы3 амплитуда (структуралы3 фактор деп те атаймыз) элементар 3утышада2ы $\rho(r)$ электронлы3 ты2ызлы3ты4 тар3алы7ы бойынша аны3ланып, 3утышада2ы электронлы3 ты2ызлы3ты4 Фурье интегралы (коэффициентлери) болып табылады. Демек структуралы3 амплитуда $@_{hkl}$ элементар 3утышада2ы электронларды4 координаталарына 21резли болады деген с53.

!детте структуралы3 амплитуданы4 модули шексиз 6лкен, жутпайту2ын идеал мозаикалы3 кристал т1репинен шашыра2ан нурды4 амплитудасын (бир элементар 3утыша2а с1йкес кели7ши электронлы3 бирликлерде берилген) айтамыз.

Элементар 3утышада2ы j-атомны4 координатасын r_j ар3алы белгилейик. Бундай жа2дайда 81р бир атомны4 электронлы3 ты2ызлы3ларыны4 3осындысы былай аны3ланады $\rho_{(\text{ат})j} = \rho_j$, $\rho = \Sigma\rho_j(r - r_j)$. Бул а4латпаны Фурье интегралы а4латпасына 3оямыз. 81р бир ρ_j 3а 3утышада2ы атомларды4 координаталарын есап3а алату2ын $\exp w\pi\text{‡}(r_j g)$ фазалы3 к5бейти7шиге ийе f_{jT} атомлы3-температуралы3 факторды есап3а аламыз. Сонлы3тан

$$@_{hkl} = \sum_{j=1}^{n} f_{jT}\frac{\sin q}{l}\exp w\pi\text{‡}(r_j\mathbf{g}) = \sum_{j=1}^{n} f_{jT}\exp w\pi\text{‡}(hx_j + ky_j + lz_j). \quad (V\text{-}uu)$$

Бул а4латпа бир элементар 3утыша т1репинен шашыра2ан тол3ынны4 амплитудасын береди 81м структуралы3 амплитуда ямаса структуралы3 фактор деп аталады. А4латпада координаталар периодты4 6лесинде берилген` $x_{\text{‡}} = x_{\text{‡абс}}/a_{\text{‡}}$.

$@_{hkl}$ комплекс шама болып табылады.

$$@ = A + \text{‡}B.$$

$$A = \Sigma f_{\text{‡}} \, c\square s \, w\pi(hx_j + ky_j + lz_j), \qquad (V\text{-}ui)$$

$$B = \Sigma f_{\text{‡}} \, s\text{‡}n \, w\pi(hx_j + ky_j + lz_j).$$

@ ти модули $|@|$ 81м фазасы α ар3алы жазы7 м6мкин`

$$\text{„}g\alpha = B/A, \quad |@| = (A^w + B^w)^{q/w},$$

$$A = |@|c\square s\alpha, \quad B = |@|s\text{‡}n\alpha, \quad @ = |@|\exp\text{‡}\alpha. \qquad (V\text{-}uo)$$

Жо3арыда келтирилген формулалар бир3анша жа2дайларда бас3аша да жазылы7ы м6мкин. Мысалы

$$@(hkl) = \sum_{j=1}^{n} f_j A_j + \text{‡}\sum_{j=1}^{n} f_j B_j.$$

Бул жерде

$$A_j = \cos w\pi(hx_j + ky_j + lz_j),$$

$$B_j = s\text{‡}n w\pi(hx_j + ky_j + lz_j).$$

§ tw. Шашыра7лар интенсивлилиги

Биз жо3арыда S векторы ямаса кери п1нжере векторы **g** ба2ытлары бойынша аны3ланату2ын шашыра7 амплитудасы 8а33ында г1п еттик. Экспериментте шашыра2ан тол3ынлар ана7 ямаса мына7 детекторды4 ж1рдеминде есап3а алынату2ын жа2дайда 7а3ыт бойынша орташа, амплитуданы4 модулини4 квадратына пропорционал бол2ан шашыра7 интенсивлилиги аны3ланады`

$$I_{hkl} \; |@_{hkl}| = @_g @_g^* = A^w + B^w. \qquad (V\text{-}i0)$$

(V-i0) нен дифракциялы3 экспериментте тек 2ана шашыра7 амплитудасы модулини4 5лшенету2ынлы2ы к5ринип тур. Ал шашыра2ан тол3ынларды4 фазалары

8а33ында2ы информациялар толы2ы менен жо2алады. Бул жа2дай структуралы3 анализди, я2ный дифракциялы3 н1тийжелер бойынша структураны аны3ла7ды 3урамаластырады. Бул жа2дайды айры3ша атап 5ти7 керек.

Структуралы3 амплитуда ушын жазыл2ан (V-ui) пенен (V-uo)-а4латпалар2а кристалда2ы барлы3 атомлар ушын атомлы3-температуралы3 факторлар, 81м оларды4 81р бири ушын тригонометриялы3 к5бейме киреди. Бул к5бейме -q ден +q ге шекемги м1нисти 3абыл етеди. Соны4 менен бирге f_{jT} ни4 м1ниси s‡nθ/λ ни4 5си7и менен монотонлы кемейеди. $[\exp w\pi\ddagger(rg)]^{w}$ ты4 орташа м1ниси $[\overline{\exp 2pi(\mathbf{rg})}]^2$ = q. Сонлы3тан (V-ur) пенен (V-i0) ден s‡nθ/λ ни4 5си7и менен интенсивлиликти4 кемейи7и т5мендеги формула ж1рдеминде аны3ланады`

$$I_{hkl}(s\ddagger n\theta/\lambda) = \overline{|F_{hkl}|^2} = \sum_{j=1}^{N} f_{jT}^2 (s\ddagger n\theta/\lambda). \qquad (V\text{-}iq)$$

Солай етип I_{hkl} интенсивлиликлери 81р 3ыйлы болса да, олар s‡nθ/λ ге байланыслы орташа бирдей болып киширейеди. Оларды4 ба3ланы7 'шегарасы' 1детте $|g_{hkl}|$ = q/$d_{m\ddagger n}$ = q - w Å шамасында жатады.

Интенсивлилик пенен f_{aT}^2 арасында интенсивлиликти4 са3ланы7 нызамы деп аталату2ын ж1не бир 3атнас бар. Фурье 3атарлары теориясынан т5мендегидей те4ликке ийе боламыз`

$$\sum_{\mathbf{g}} |@_{\mathbf{g}}|^{w} = \frac{1}{\Omega}\int r^2(\mathbf{r})dv_r\,. \qquad (V\text{-}iw)$$

Бас3а т1рептен (V-tw) бойынша ρ ны айырым атомларды4 электронлы3 ты2ызлы2ы ρ_j пенен де а4латы72а болады. Ал ρ_j ларды (V-tr)-т6рдеги Фурье интегралы тийкарында атомлы3-температуралы3 факторлар ар3алы а4латы72а болады`

$$\sum_{\mathbf{g}} I_{\mathbf{g}} = \frac{1}{\Omega}\int f_{jT}^2\,(S)r\pi S^{w}dS. \qquad (V\text{-}ie)$$

Солай етип кери п1нжерени4 барлы3 $\mathbf{g}_{hkl}$ т6йинлери бойынша алын2ан интенсивлиликлерди4 суммасы тура3лы шама. Бул шама кристалл ушын (V-ie) ти4 о4 т1репине с1йкес атомлы3-температуралы3 факторды4 тийкарында есапланы7ы м6мкин.

§ te. Дифракциялы3 с67ретти4 симметриясы 81м оны4 кристаллды4 симметриясыны4 но3атлы3 топары менен байланысы

Егер 81р бир т6йинини4 'салма2ын' есап3а алмаса3 кери п1нжерени4 д17ирли екенлигин а4сат а42ары72а болады. Ал 'салма3' есап3а алын2ан жа2дайда кери п1нжере д17ирли болмай шы2ады 81м оны4 симметриясы кристаллографиялы3 но3атлы3 топарларды4 бири менен т1риплени7и м6мкин. (V-ui) пенен (V-uo) дан 000 т6йинине салыстыр2анда симметриялы жайлас3ан hkl 81м $\overline{hkl}$ шашыра7ларыны4 структуралы3 амплитудалары (я2ный $\mathbf{g}$ 81м $\bar{\mathbf{g}}$ лар2а с1йкес кели7ши шашыра7ларды4 структуралы3 амплитудалары) комплексли-т6йинлес шамалар болып табылады`

$$@_{\mathbf{g}} = @_{hkl} = F^{*}_{\bar{h}\bar{k}\bar{l}} = \mathbf{F}^{*}_{\bar{\mathbf{g}}}. \qquad (V\text{-}ir)$$

Демек @ ти4 модуллери |@| 81м ба3ланату2ын интенсивлиликлери бирдей болады деген с53`

$$I_{g} = I^{*}_{\bar{\mathbf{g}}}. \qquad (V\text{-}it)$$

Бул 3атнас Фридель нызамы т6ринде белгили. Бул нызам бойынша кери п1нжере орай2а 3арата симметриялы, оны4 **g** 81м $\bar{\mathbf{g}}$ т6йинлери бирдей салма33а ийе болады.

§ tr. Дифракциялы3 с67ретте кристалды4 ке4исликтеги симметриясыны4 к5рини7и. %ши7лер.

Структуралы3 фактор ушын жазыл2ан (V-uu)-а4латпа2ы атомларды4 элементар 3утышада2ы координаталары x_i лер де киреди. Егер кристалды4 ке4исликтеги топары симметриялы болмаса (Pq болса), онда (V-uu)-а4латпа 5згериске ушырамайды. Бас3а барлы3 топарларда но3атлар координаталары арасында симметриялы3 байланыслар бар [я2ный но3атларды4 дурыс системасы (НДС) бар]. Қутышада2ы атомлар усындай бир ямаса бир неше НДС ны ийеле7и м6мкин. Сонлы3тан структуралы3 фактор ушын д6зилген а4латпаларды аде7ир 1пи7айыластыры7 м6мкин. Берилген НДС на кири7ши координаталары xyz бол2ан барлы3 n дана атомны4 координаталары 3утышаны4 21резсиз областында2ы бир атомны4 xyz координаталары бойынша аны3ланату2ын бол2анлы3тан n атомны4 81р бир НДС (n бул жерде позицияны4 ретлилигин а4латады) ушын структуралы3 фактор бир а4латпа менен а4латылады. Сонлы3тан структуралы3 фактор k дана 3осынды2а б5линеди. Соларды4 81р бири бир НДС ын ийеле7ши атомларды4 жыйна2ына с1йкес келеди. Солай етип $k_q n_q + k_w n_w + \ldots + k_{\ddagger} n_{\ddagger} = N$ - элементар 3утышада2ы барлы3 атомларды4 санына те4.

Симметрияны4 е4 1пи7айы мысал ретинде симметрия орайыны4 бар болы7ын к5ремиз. Координата орайы симметрия орайында жайлас3ан болсын. Бундай жа2дайда егер координаталары xyz бол2ан атом болса, онда ол атом2а симметриялы координаталары $\bar{x}\bar{y}\bar{z}$ бол2ан да атом болады. Сонлы3тан (V-uu) теги exp косинус3а алмастырылады, @ белгиси о4 ямаса терис бол2ан 8а3ый3ый шама2а айланады, B = 0, $\alpha = 0$.

Онда

$$@_{hkl} = w\sum_{j=1}^{N/2} f_j \cos w\pi(hx + ky + lz). \qquad (V\text{-}iy)$$

Суммала7 тек 2ана симметриялы3 жа3тан 21резсиз атомлар бойынша ж6ргизиледи.

Бир3анша мысаллар келтиремиз.

q-мысал. Алмазды4 3урылысы кублы3 3утыша менен т1рипленеди. Элементар 3утышада2ы атомларды4 координаталары (базиси)` 000~ q/w q/w 0~ q/w 0 q/w~ 0 q/w q/w~

q/r q/r q/r~ e/r e/r q/r~ e/r q/r e/r~ q/r e/r e/r (элементар 3утыша2а сегиз атом с1йкес келету2ынлы2ы к5ринип тур). @^{w} ты4 м1нислери менен 5ши7 нызамын аны3лайы3.

Бул жа2дайда структуралы3 амплитуда ушын а4латпа @ = $\sum_{j}$ f_j exp wπ‡($hx_j + ky_j + lz_j$) сегиз а2задан турады 81м т5мендегидей т6рге а4сат алып келинеди`

@(hkl) = f_C@$_q$@$_w$.

Бул жерде @$_q$ = q + exp ‡$\frac{p}{2}$(h + k + l) 81м

@$_w$ = q + exp ‡π(h + k) + exp ‡π(h + l) + exp ‡π(k + l).

Енди hkl лерди4 3андай м1нислеринде @^{w} ты4 м1нислерини4 нолден 5згеше болату2ынлы2ын 3раймыз.

Егер h, k, l лер бирдей жуплылы33а ийе болса (6ше7и де жуп ямаса 6ше7и де та3) @$_w$ = r. h + k + l = rn бол2ан жа2дайда @^{w} = yrf$_C$^{w}~ h + k + l = wn + q де (6ше7ини4 3осындысы та3 шама) @^{w} = ewf$_C$^{w}~ h + k + l = rn + w де @$_q$ = 0 81м, с1йкес, @^{w}=0.

Егер h, k, l лер 81р 3ыйлы жуплылы33а ийе болса (жуп санлар менен та3 санларды4 араласы) @$_w$=0 81м @^{w}=0.

Солай етип 5ши7 т5мендегидей жа2дайларда ба3ланады (бундай жа2дайда т5мендегидей ш1ртлер орынлан2анда шашыра7 орын алмайды)`

q) h, k, l лер 81р 3андай жуплылы33а ийе бол2анда~

w) h + k + l = rn + w бол2анда.

Екинши мысал ретинде ZnS кристаллыны4 еки модификациясын аламыз.

Кублы3 3урылыс3а ийе сфалерит т5мендегидей базиске ийе`

Zn - 000~ q/w q/w 0~ q/w 0 q/w~ 0 q/w q/w.

S - q/r q/r q/r~ e/r e/r q/r~ e/r q/r e/r~ q/r e/r e/r.

Гексагоналлы3 3урылыс3а ийе вюрцит т5мендегидей базиске ийе`

Zn - q/e w/e 0~ w/e q/e q/w.

S - q/e w/e z~ w/e q/e q/w + z (z = 0.eut $\approx$ e/i).

I. Сфалерит ушын м1селени былай шешемиз`

@(hkl) = @$_w$[f_{Zn} + f_S exp ‡$\frac{p}{2}$(h + k + l)].

Бул жерде @$_w$ = q + exp ‡π(h + k) + exp ‡π(h + l) + exp ‡π(k + l).

q. Егер h, k 81м l лер бирдей жуплылы33а ийе болса @$_w$ = r. Усыны4 менен бирге

а) h + k + l = rn де @^{w} = qy(f_{Zn} + f_S)^{w}~

б) h + k + l = rn ± w де @^{w} = qy(f_{Zn} - f_S)^{w}~

в) h + k + l = wn ± q де @^{w} = qy(f_{Zn} + f_S)^{w}~

w. Егер h, k 81м l лер 81р 3ыйлы жуплылы33а ийе болса @$_w$ = 0 81м со2ан с1йкес @^{w} = 0.

II. Вюрцит ушын м1селе былай есапланады`

$$@(hkl) = f_{Zn}\exp \ddagger w\pi\frac{h+2k}{3} + f_{Zn}\exp\ddagger w\pi(\frac{2h+k}{3} + \frac{l}{2}) +$$

$$f_S\exp\ddagger w\pi(\frac{h+2k}{3} + lz) + f_S\exp\ddagger w\pi(\frac{2h+k}{3} + \frac{l}{2} + lz) =$$

$$[f_{Zn} + f_S]*[\exp\ddagger w\pi\frac{h+2k}{3} + \exp \ddagger w\pi l*\exp \frac{h+2k}{3}].$$

$A_q = (f_{Zn} + f_S)^w$ 81м $A_w = (\exp\ddagger w\pi\frac{h+2k}{3} + \exp \ddagger w\pi l*\exp \frac{h+2k}{3})^w$ деп белгилеп аламыз. Сонда

$@^w(hkl) = A_q*A_w$.

$h + wk$ ны4 81р Зандай м1нислериндеги $@^w(hkl)$ ди4 м1нислерини4 еки топарын Зараймыз.

q. $h + wk = en$. Онда $A_w = (q + l^{\ddagger\pi l})^w$.

Бундай жа2дайда $l = wm + q$ бол2анда $A_w=0$~ $@^w=0$.

$l=im$ де $A_w=r$~ $A_q=(f_{Zn} + f_S)^w$~ $@^w = r(f_{Zn} + f_S)^w$.

$l=r(wm + q)$ де $A_w=r$~ $A_q=(f_{Zn} - f_S)^w$~ $@^w= r(f_{Zn} - f_S)^w$

$l=w(wm + q)$ де $A_w=r$~ $A_q = f_{Zn}^w + f_S^w$~ $@^w = r(f_{Zn}^w + f_S^w)$.

w. $h + wk=en\pm q$. $A_w = [\exp\frac{i2p}{3} + ex(p\ddagger\pi l)*\exp(-\frac{i2p}{3})]$.

$l=im$ де $A_q = (f_{Zn} + f_S)^w$~ $A_w = q$~ $@^w =(f_{Zn} + f_S)^w$.

$l=r(wn + q)$ де $A_q = (f_{Zn} - f_S)^w$~ $A_w = q$~ $@^w =(f_{Zn} - f_S)^w$.

$l=w(wm + q)$ де $A_q = f_{Zn}^w + f_S^w$~ $A_w=q$~ $@^w = f_{Zn}^w + f_S^w$.

$l=im\pm q$ де $A_q = f_{Zn}^w + f_S^w - \sqrt{2} f_{Zn}*f_S$~ $A_w=e$~

$@^w = e(f_{Zn}^w + f_S^w - \sqrt{2} f_{Zn}*f_S)$.

$l=r(wm + q) \pm q$ де $A_q = f_{Zn}^w + f_S^w + \sqrt{2} f_{Zn}*f_S$~ $A_w=e$~

$@^w = e(f_{Zn}^w + f_S^w + \sqrt{2} f_{Zn}*f_S)$.

Енди структурада бир сортта2ы атомлар 81м симметрия орайы бар бол2ан жа2дайларды Зараймыз.

!пи7айы кублыЗ п1нжере жа2дайында т5мендегилерге ийе боламыз`

Элементар Зутыша2а тек бир т6йин с1йкес келеди. Оны4 базиси 000.

Демек $@^w = f^w$ 81м бундай кристаллар ушын 5ши7 За2ыйдасы орын алмайды.

К5лемде орайласЗан Зутышада базис 000~ q/w q/w q/w.

Демек

$$@ = f*[q + \cos w\pi \frac{1}{2}(h + k + l)] = f*\cos \pi (h + k + l).$$

Бундай жа2дайда $\cos \pi (h + k + l)$ тек 2ана еки м1ниске ($\pm q$) ийе болады.

Егер h,k 81м l лер 81р Зыйлы жуплылыЗЗа ийе болса $\cos \pi (h + k + l) =-q$ 81м $@ = 0$.

Егер h,k 81м l лер бирдей жуплылыЗЗа ийе болса $\cos \pi (h + k + l) =q$ 81м $@ = f$.

Демек к5лемде орайласЗан кристалларда $h + k + l$ Зосындысы жуп сан бол2анда 2ана дифракциялыЗ с67рет баЗланады.

Енди Запталда орайласЗан кублыЗ кристалларды Зараймыз. Базис - 000, 0 q/w q/w~ q/w 0 q/w~ q/w q/w 0.

Демек

@ = f*[q + cosπ(h + k) + cosπ(h + l) + cosπ(k + l)].

Бунда еки жа2дайды4 болы7ы м6мкин`

h, k 81м l лерди4 жуплылы2ы бирдей. Онда @ = rf.

H, k 81м l лер 81р Зыйлы жуплылыЗЗа ийе. Онда @ = 0.

Демек биз кери п1нжерелерди4 элементар Зутышалары 8аЗЗында т5мендегидей жу7маЗлар2а келемиз.

Егер ту7ра п1нжере 1пи7айы Р ЗурылысЗа ийе болса (элементар Зутыша орайласпа2ан) кери п1нжере де 1пи7айы ЗурылысЗа ийе болады (элементар Зутышасы орайласпа2ан). Ал к5лемде орайласЗан ту7ры элементар Зутыша2а кери ке4исликте Запталда орайласЗан элементар Зутышасы бар п1нжере, Запталда орайласЗан ту7ры п1нжереге кери ке4исликте к5лемде орайласЗан п1нжере с1йкес келеди. Бул жа2дайлар с67ретлерде келтирилиген.

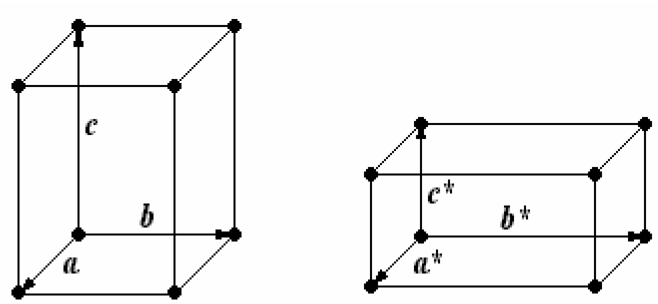
Екинши т1рептен кристаллыЗ п1нжерени4 орайласы7ы бойынша алын2ан дифракциялыЗ с67ретлердеги дифракциялыЗ даЗларды4 орналасы7ы да белгили бир нызамлыЗлар2а ийе болады. Бундай нызамлылыЗлар кублыЗ ЗурылысЗа ийе унтал2ан кристаллардан ямаса поликристаллардан алын2ан с67ретлерде аныЗ к5ринеди 81м т5мендегилерден ибарат`

Орайласпа2ан кристаллар ушын (1пи7айы Р-п1нжере) 5ши7 ш1ртлери жоЗ, сонлыЗтан барлыЗ {hkl} кристаллографиялыЗ тегисликлер семействолары 5зини4 дифракциялыЗ сызыЗларын береди 81м олар d_{hkl} лерди4 кемейи7 ба2ытында жайласады.

К5лемде орайласЗан кристаллар (J-п1нжере) ушын дифракциялыЗ с67ретти4 аланы7ы ушын h + k + l Зосындысы жуп м1нислерге ийе бол2анлы2ы себепли бир Занша рефлекслер рентгенограммада алынбайды (qqq, 00q, eeq 8.т.б.).

Қапталда орайласЗан кристаллар (@-п1нжере) ушын h, k 81м l лерди4 барлы2ы да бир 7аЗытта я жуп, я таЗ болы7ы керек 81м усы2ан байланыслы бир Занша рефлекслер с5неди (мысалы q00, qq0, wwq, wqq 8.т.б.).

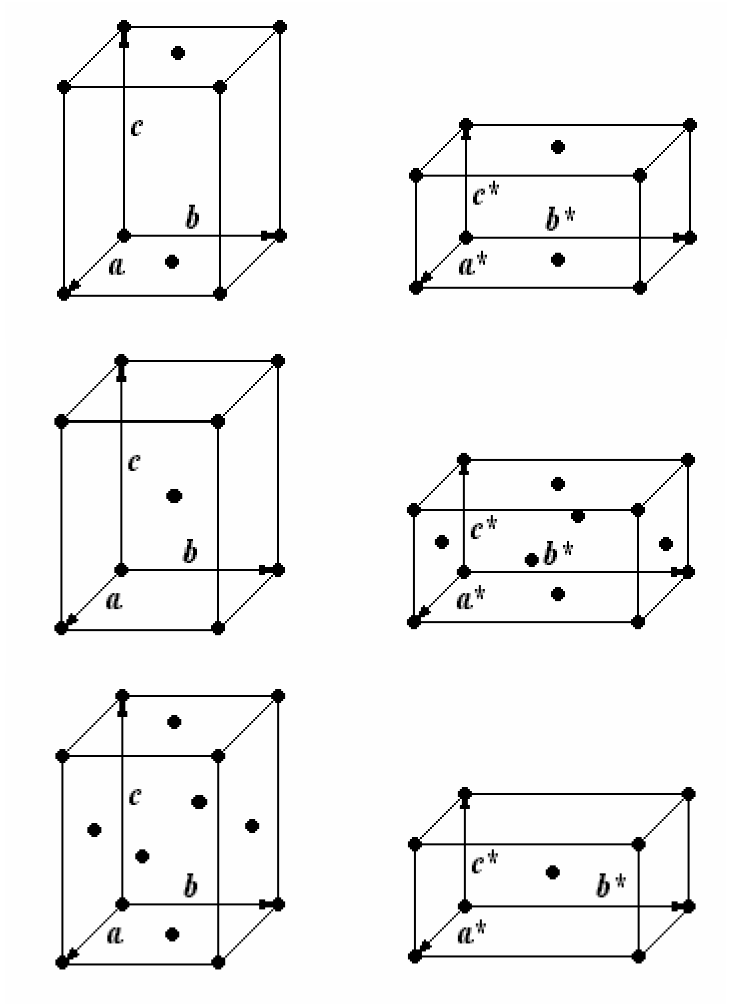
А



Б

в

г



tо-с67рет. Атомлы3 81м олар2а с1йкес кели7ши кери п1нжерелер.
а - 1пи7айы, б - базада орайлас3ан, в - к5лемде орайлас3ан,
г - 3апталда орайлас3ан.

Жо3арыда келтирилген жа2дайларды есап3а алса3 дебаеграммада2ы кублы3 кристаллар берету2ын дифракциялы3 рефлеслерди4 жайласы7 избе-излиги ушын т5мендегидей кестени д6зе аламыз`

Эквивалент тегисликлер саны	Р-п1нжере	I-п1нжере	@-п1нжере	Алмаз
6	100			
12	110	110		
8	111		111	111
6	200	200	200	
24	210			
24	211	211		
12	220	220	220	220
24+6	221, 300			
24	310			

24	311		311	311
8	222		222	
24	320			
48	321	321		
6	400	400	400	
24+24	322, 410			
12+24	330, 411	330, 411		
24	331		331	
24	420	420	420	
48	421			
24	332	332		
24	422	422	422	422
24+6	430, 500			
48+24	431, 510	431, 510		
8+24	333, 511		333, 511	333,511
48+24	432, 520			
48	521	521		
12	440	440	440 (12)	440
24+24	441, 522			
24+24	433, 530	433, 530		
48	531		531 (48)	531

Атомлы3 шашыра7 факторлары

s/2=sinθ/λ	0	1.1	0.2	0.3	0.4	0.5	0.6	0.7	0.8	0.9	1.0	1.1
d=1/s=λ/2sinθ		5	2.5	1.667	1.25	1	0.833	0.714	0.625	0.556	0.5	0.455
1. H	1.0	0.81	0.48	0.25	0.13	0.07	0.04	0.03	0.02	0.01	0.00	0.00
2. He	2.0	1.88	1.46	1.05	0.75	0.52	0.35	0.24	0.18	0.14	0.11	0.09
3. Li^{+}	2.0	1.96	1.8	1.5	1.3	1.0	0.8	0.6	0.5	0.4	0.3	0.3
3. Li	3.0	2.2	1.8	1.5	1.3	1.0	0.8	0.6	0.5	0.4	0.3	0.3
4. Be	4.0	2.9	1.9	1.7	1.6	1.4	1.2	1.0	0.9	0.7	0.6	0.5
5. B	5.0	3.5	2.4	1.9	1.7	1.5	1.4	1.2	1.2	1.0	0.9	0.7
6. C	6.0	4.6	3.0	2.2	1.9	1.7	1.6	1.4	1.3	1.2	1.0	0.9
7. N^{+5}	2.0	2.0	2.0	1.9	1.9	1.8	1.7	1.6	1.5	1.4	1.3	1.16
7. N^{+3}	4.0	3.7	3.0	2.4	2.0	1.8	1.66	1.56	1.49	1.39	1.28	1.17
7. N	7.0	5.8	4.2	3.0	2.3	1.9	1.65	1.54	1.49	1.39	1.29	1.17
8. O^{-2}	10.0	8.0	5.5	3.8	2.7	2.1	1.8	1.5	1.5	1.4	1.35	1.26
8. O	8.0	7.1	5.3	3.9	2.9	2.2	1.8	1.6	1.5	1.4	1.35	1.26
9. F	9.0	7.8	6.2	4.45	3.35	2.65	2.15	1.9	1.7	1.6	1.5	1.35
11. Na^{+}	10.0	9.5	8.2	6.7	5.25	4.05	3.2	2.65	2.25	1.95	1.75	1.6
12. Mg^{+2}	10.0	9.75	8.6	7.25	6.05	4.8	3.85	3.15	2.55	2.2	2.0	1.8
12. Mg	12.0	10.5	8.6	7.22	6.05	4.8	3.85	3.15	2.55	2.2	2.0	1.8
13. Al^{+3}	10.0	9.7	8.9	7.8	6.65	5.5	4.45	3.65	3.1	2.65	2.3	2.0
13. Al	13.0	11.0	8.95	7.75	6.6	5.5	4.5	3.7	3.1	2.65	2.3	2.0

14. Si^{+4}	10.0	9.75	9.15	8.25	7.15	6.05	5.05	4.2	3.4	2.95	2.6	2.3
14. Si	14.0	11.35	9.4	8.2	7.15	6.1	5.1	4.2	3.4	2.95	2.6	2.3
15. P^{+5}	10.0	9.8	9.25	8.45	7.5	6.55	5.65	4.8	4.05	3.4	3.0	2.6
15. P	15.0	12.4	10.0	8.45	7.45	6.5	5.65	4.8	4.05	3.4	3.0	2.6
15. P^{-3}	18.0	12.7	9.8	8.4	7.45	6.5	5.65	4.85	4.05	3.4	3.0	2.6
16. S	16.0	13.6	10.7	8.95	7.85	6.85	6.0	5.25	4.5	3.9	3.35	2.9
17. Cl	17.0	14.6	11.3	9.25	8.05	7.25	6.5	5.75	5.05	4.4	3.85	3.35
17. Cl^{-}	18.0	15.2	11.5	9.3	8.05	7.25	6.5	5.75	5.05	4.4	3.85	3.35
19. K^{+}	18.0	16.5	13.3	10.8	8.85	7.75	7.05	6.44	5.9	5.3	4.8	4.2
19. K	19.0	16.5	13.3	10.8	9.2	7.9	6.7	5.9	5.2	4.6	4.2	3.7
20. Ca^{+2}	18.0	16.8	14.0	11.5	9.3	8.1	7.35	6.7	6.2	5.7	5.1	4.6
20. Ca	20.0	17.5	14.1	11.4	9.7	8.4	7.3	6.3	5.6	4.9	4.5	4.0
21. Sc^{+3}	18.0	16.7	14.0	11.4	9.4	8.3	7.6	6.9	6.4	5.8	5.35	4.85
21. Sc	21.0	18.4	14.9	12.1	10.3	8.9	7.7	6.7	5.9	5.3	4.7	4.3
22. Ti^{+4}	18.0	17.0	14.4	11.9	9.9	8.5	7.85	7.3	6.7	6.15	5.65	5.05
22. Ti	22.0	19.3	15.7	12.8	10.9	9.5	8.2	7.2	6.3	5.6	5.0	4.6
23. V	23.0	20.2	16.6	13.5	11.5	10.1	8.7	7.6	6.7	5.9	5.3	4.9
24. Cr	24.0	21.1	17.4	14.2	12.1	10.6	9.2	8.0	7.1	6.3	5.7	5.1
25. Mn	25.0	22.1	18.2	14.9	12.7	11.1	9.7	8.4	7.5	6.6	6.0	5.4
26. Fe	26.0	23.1	18.9	15.6	13.3	11.6	10.2	8.9	7.9	7.0	6.3	5.7
27. Co	27.0	24.1	19.8	16.4	14.0	12.1	10.7	9.3	8.3	7.3	6.7	6.0
28. Ni	28.0	25.0	20.7	17.2	14.6	12.7	11.2	9.8	8.7	7.7	7.0	6.3
29. Cu	29.0	25.9	21.6	17.9	15.2	13.3	11.7	10.2	9.1	8.1	7.3	6.6
30. Zn	30.0	26.8	22.4	18.6	15.8	13.9	12.2	10.7	9.6	8.5	7.6	6.9
37. Rb^{+}	36.0	33.6	28.7	24.6	21.4	18.9	16.7	14.6	12.8	11.2	9.9	8.9
37. Rb	37.0	33.5	28.2	23.8	20.2	17.9	15.9	14.1	12.5	11.2	10.2	9.2
55. Cs	55.0	50.7	43.8	37.6	32.4	28.7	25.8	23.2	20.8	18.8	17.0	15.6
74. W	74	69	60	53	46	41	37	33	30	28	25	23
80 Hg	80	75	66	58	50	44	41	37	34	31	28	26