

**Berdaq ati'ndag'i' Qaraqalpaq ma'mleketlik
universiteti**

Uli'wma fizika kafedrası'

**"Qatti' denelerdi difrakciyalı'q izertlew
usi'llari'"**

pa'ni boyi'nsha

OQI'W-METODIKALI'Q KOMPLEKS

Magistratura ushi'n du'zilgen, 1-kurs, 1-semestr.

Sabaqlardi'n' ko'lemi: lekciyalar 26 saat, a'meliy sabaqlar 10 saat,
seminarlar 20 saat, o'z betinshe jumi'slar 28 saat. Ja'mi 84 saat.

No'kis -2013

"Tasti'yi'qalayman"
Oqi'w isleri boyi'nsha prorektor

_____ M. Ibragimov
2013-jil 29-iyun

Magistratura ushi'n "Qatti' denelerdi difrakciyalı'q izertlew
usi'llari'" pa'ni boyi'nsha

SABAQLARG'A MO'LSHERLENGEN OQI'W PROGRAMMASI'

Du'ziwshi uli'wma fizika kafedrası'ni'n' professori' B. Abdikamalov.

Pa'nnin' cabaqlarg'a mo'lsherlengen oqi'w programması' Qaraqalpaq ma'mleketlik universitetinin' oqi'w-metodikali'q ken'esinin' 2012-jil 29-iyun ku'ngi ma'jilisinde qarap shi'g'i'ldi' ha'm maqullandi'. Protokol nomeri 6.

Pa'nnin' cabaqlarg'a mo'lsherlengen oqi'w programması' uli'wma fizika kafedrası'ni'n' 2012-jil 20-iyundegi ma'jilisinde talqi'landi' ha'm maqullandi'. Protokol sani' 11.

Pa'nnin' cabaqlarg'a mo'lsherlengen oqi'w programması' fizika-texnika fakultetinin' ilimiy ken'esinin' 2012-jil 25-iyundegi ma'jilisinde talqi'landi' ha'm maqullandi'. Protokol sani' 11.

Qatti' denelerdi difrakciyalı'q izertlew usı'lları'

Annotaciya

Kurs ti'n'lawshi'lardı' kristallı'q materiallardı'n' difrakciyalı'q analizini' tiykarları' menen tani'sti'ri'w ushi'n arnalg'an. Ha'zirgi zaman kristallografiyası'ni'n' a'hmiyetli tu'sinikleri kirgizilgen, simmetriyani'n' noqatlı'q ha'm ken'isliklik gruppaları', simmetriyani'n' xarakteristikaları'n' ani'qlaw usı'lları' bayanlang'an. Rentgen nurları'ni'n', soni'n' menen bir qatarda elektronlardı'n', a'ste qozg'alatug'i'n' neytronlardı'n' zatlar menen ta'sirlesiwinin' fizikalı'q tiykarları' qarap shı'g'i'ladi'. Zatlardı'n' atomlı'q-kristallı'q strukturası'n, haqı'yqı'y strukturası'n, fazalı'q o'tiwlerdegi strukturalı'q processlerdi izertlegendegi eksperimentallı'q ma'seleler tallanadı'. Son'g'i' onlag'an jı'llar ishinde ashi'lg'an strukturalı'q hallar bolg'an - kvazikristallarg'a, modulyaciyalang'an strukturalarg'a, fullerenlerge ayri'qsha itibar berilgen. Ti'n'lawshi'lar fizikani'n' ha'm ulı'wmalı'q ximiyani'n' tiykarı' bo'limleri menen tani's dep esaplanadı'.

Kursti'n' programması'

I. Kristallografiya elementleri. Ken'isliklik pa'njere teoriyası'.

1. Tu'yinlik tuwri'. Kristallografiyalı'q tegislik. Elementar qutı'. Pa'njere turaqlı'lari'. Simmetriyalı'q tu'rlandırılwr tu'rleri. Simmetriyani'n' jabı'q elementleri.
2. Simmetriya elementlerin qosı'w. Simmetriya elementleri generaciyalaw. Kristallografiyalı'q noqatlı'q gruppalar. Kristallografiyalı'q sistemalar - singoniyalar. Simmetriya operaciyaları' menen noqatlı'q gruppalardı' matricalar ja'rdeminde ko'rsetiw. Kyuridin' sheklik gruppaları'. Iksoedrlik singoniyani'n' noqatlı'q gruppaları'. Kvazikristall tu'sinigi.
3. Translyaciyalı'q gruppalar. Qutı'ni' saylap alı'w qag'i'ydaları' ha'm Bravenin' 14 pa'njeresi. Kristallı'q pa'njere ha'm kristallardı'n' atomlı'q strukturalı' tu'siniklerin salı'sti'ri'w.
4. Translyaciya simmetriya elementi si'pati'nda. Vintlik ko'sherler, jı'lji'p shashi'rati'wshi' tegislikler. Ashı'q simmetriya elementlerin matricalardı'n' ja'rdeminde ko'rsetiw. Xalı'q aralı'q sistema boyı'nsha simmetriya gruppaları'ni'n' belgileniwlari.
5. Noqatlardı'n' duri's sistemaları', noqatlardı'n' orbitaları'. Uli'wmalı'q ha'm dara ekvivalent awhallardı'n' sani'. Poziciyalardı'n' sani'na sa'ykes qutı'dag'i' atomlardı'n' sani' ha'm racionallı'q jaylası'wi' tu'sinigi. Kristaldı'n' belgili strukturası'ni'n' tolı'q ta'riyipleniwi. Ti'g'i'z jaylastı'ri'lg'an sharlar. Jaylastı'ri'wlar defektleri. Strukturadag'i' tera - ha'm okto boslı'qlar.
6. Kristallı'q ko'p mu'yeshlikler. Apiwayı' formalar – tegislikler orbitaları'. Platonni'n' ideallı'q figuraları' kublı'q ha'm iksoedrlik singoniyalardı'n' a'piwayı' formaları' si'pati'nda. Pa'njere ha'm pa'njere kompleksi. Kristallografiyalı'q proekciyalardı'n' tu'rleri - si'zi'qli', gnomoniyalı'q, stereografiyalı'q, gnomostereografiyalı'q. Vulf torı'.
7. Keri ken'islik metrikası'. Keri pa'njere ha'm oni'n' atomlı'q-kristallı'q pa'njerenin' xarakteristikaları' menen baylanı'sı'.

II. Rentgen nurları'ni'n' alı'ni'wi' ha'm olardı'n' zatlar menen ta'sir etisiwi.

8. Rentgen apparatları'. Rentgen trubkaları'ni'n' konstrukciyaları'ni'n' tipleri.
9. Rentgen diapazonı'ndag'i' spektr.

10. Sinxrotronli'q nurlari'w: sinxrotronli'q nurlardi' ali'w'di'n' fizikali'q prinsipleri ha'm olardi'n' ilim menen texnikadag'i' qollani'li'wi'.

11. Zatlardag'i' rentgen nurlari'ni'n' juti'li'wi' menen shashi'rawi'. Juti'li'w'di'n' si'zi'qli' koefficientleri, tolqi'n uzi'nli'g'i' menen atomli'q nomerden g'a'rezligi. Saylap ali'w menen bolatug'i'n juti'li'w ha'm filtrler.

12. Erkin elektronni'n' shashi'rati'wi'. Tomson formulasi'. Atomli'q shashi'raw funkciyasi'. Atomli'q shashi'raw funkciyasi' ushi'n uli'wmali'q an'latpani' keltirip shi'g'ari'w ha'm atomli'q shashi'rati'w amplitudasi'ni'n' ma'nisin esaplaw usi'llari'.

III. Kristallardag'i' rentgen nurlari'ni'n' difrakciyasi'.

13. SHashi'rati'wshi' oraylardi'n' u'sh o'lshemli pa'njeresindegi difrakciyani'n' "geometriyali'q" teoriyasi'. Vektorli'q ha'm skalyarli'q tu'rdegi Vulf-Bregg ten'lemesi. Evald quri'lmasi'. Brillyuen zonasi'ni'n' shegarasi'.

14. Keri pa'njere ko'rinishidegi tiykarg'i' difrakciyalig' sxemalar: Laue usi'li', untalg'an kristallar usi'li', aylani'w (terbeliw) usi'li', tarqali'wshi' da'ste usi'li', polikristalli'q ob'ekt penen monokristaldi'n' difraktometriyasi'.

15. Rentgen reflekslerinin' intensivligi. Bil elementar quti'dag'i' shashi'raw. Strukturali'q amplituda. Strukturali'q amplituda ushi'n uli'wmali'q an'latpani' keltirip shi'g'ari'w.

16. Lauenin' interferenciya'li'q funkciyasi'. Kishi kristaldi'n' shashi'rati'wi' haqqi'ndag'i' ma'sele. Difrakciyalig' maksimumlardi'n' payda boli'w sha'rtleri. Keri pa'njere tu'yinlerinin' formalari' ha'm o'lshemleri.

17. Difrakciya'g'a ushi'rag'an tolqi'n'lardi'n' intensivligin esaplaw formulalari'na o'tiw. Integrallig' faktori'. Tegislikler sistemasi'ni'n' sali'sti'rmali' shag'i'li'sti'ri'wshi'li'q qa'biletligi tu'sinigi. Ji'lli'li'q faktori'. Qaytalani'w faktori'. Mu'yeshlik faktor.

18. Strukturali'q amplitudalardi' tallaw. Brave pa'njeresinin' tipi, vintlik ko'sherlerdin', ji'lji'p shashi'rati'wshi' tegisliklerdin' bar boli'wi'ni'n' saldari'nan ju'zege keletug'in sistemali'q o'shiwler.

19. Fure sintezi kristallardi'n' atomli'q strukturasi'n tallawdi'n' usi'li' si'pati'nda. Elektronli'q ti'g'i'zli'qti' Furenin' u'sh o'lshemli qatari'na jayi'w. Strukturali'q amplitudalar Fure qatari'ni'n' koefficientleri si'pati'nda. Keri pa'njere, tu'yinlerdin' salmag'i', Fure jayi'wi'ni'n' geometriyali'q obrazi'.

IV. Rentgenstrukturali'q analiz usi'llari' menen sheshiletug'i'n tiykarg'i' ma'seleler.

20. Belgisiz strukturani'n' analizinin' etapları'. Singoniyani', simmetriyani'n' noqatli'q ha'm ken'isliklik gruppaları'n, elementar quti'dag'i' atomlar si'nan ani'qlawda rentgenstrukturali'q analiz usi'llari'n qollani'w'di'n' izbe-izligi. Quti'dag'i' atomlardi'n' koordinatalari'n ani'qlawdi'n' eksperimentalli'q ha'm esaplaw usi'llari'. Si'nap ko'riw ha'm qa'teler usi'li'. Patterson sintezi. Fure sintezi.

21. Metal sistemalardi' tallaw ma'sele. Hal diagrammalari'ndag'i' fazali'q oblastlardi'n' identifikaciya'si'. Qatti' eritpelerdin' ta'rtiplesiwi. quymalardag'i' dispersiyali'q qati'w, dyuralyuminiydin' qartayi'wi'ndag'i' "eki o'lshemli" zarodi'shlar.

22. Da'wirli emes kristallardi' ha'm strukturali'q o'tiwlerdi izertlegendegi eksperimentalli'q ma'seleler: diffuziyali'q emes martensitlik o'tiwler, politip kristallar, kvazikristallar, fullerenler semeystvosi'.

V. Elektronografiya menen neytronografiya tiykarlari'.

23. Elektronografiya. Tez qozg'alatug'i'n elektronlardi'n' difrakciyasi' usi'li'ni'n' prinsipleri ha'm o'zgesheliklari. Qollani'li'w oblastlari'. Kishi tezlik penen qozg'ali'wshi' elektronlardi'n' difrakciyasi' menen sheshiletug'i'n tiykarg'i' ma'seleler.

24. Neytronografiya. YAdroli'q shashi'raw. Kollani'li'wi'ni'n' prinsipleri. Magnitlik shashi'raw, ferro- ha'm antiferromagnetiklerdin' strukturasi'ndag'i' magnit momentlerinin' ta'rtiplesiwin ani'qlaw.

VI. Rentgen difrakciyalig'q mikroskopiyasi'.

25. Difrakciya teoriyasi'ndag'i' kinematikali'q ha'm dinamikali'q jaqi'nlasil'wlar tu'sinigi. Birinshi ha'm ekinshi ekstinkciya. Ideal kristall. Ideal mozaikli'q kristall.

26. Kristaldi'n' haqi'yki'y strukturasi'ni'n' analizi. Berg-Barret usi'li'. Fudjivara, SHulc, mu'yeshlik skannerlew usi'llari'.

27. Jetilisen kristallardi' u'yreniw usi'llari', dinamikali'q teoriya sheklerindegi qubi'li'slardi' paydalani'w. Lang sxemasi'. Anomalli'q o'tiw effekti, Borman usi'li'.

Tiykarg'i' a'debiyat

1. В.Шехтман, Р.Диланян. Введение в рентгеновскую кристаллографию. Учебное пособие для студентов и аспирантов, обучающихся по специальностям "физика конденсированных сред" и "физическое материаловедение". Подмосковный филиал Московского госуниверситета имени М.В.Ломоносова. Черноголовка. 2002. 144 с.

2. А.И.Китайгородский. Рентгеноструктурный анализ. Государственное издательство Техничко-теоретической литературы. Москва-Ленинград. 1950. 659 с.

3. Я.С. Уманский, Ю.А. Скаков, А.Н. Иванов, Л.Н. Расторгуев. Кристаллография, рентгенография и электронная микроскопия. Издательство "Металлургия". Москва. 1982. 632 с.

4. А. Гинье. Рентгенография кристаллов. Теория и практика. Перевод с французского. Государственное издательство физико-математической литературы. Москва. 1961. 604 с.

5. Современная кристаллография. Том 1. Б. К. Вайнштейн. Симметрия кристаллов. Методы структурной кристаллографии. Издательство "Наука". Москва. 1979. 384 с.

Qosi'msha a'debiyat

1. Г.Б.Бокий, М.А.Порай-Кошиц. Рентгеноструктурный анализ. Том I. Издательство Московского университета. Москва. 1964. 489 с.

2. М.А.Порай-Кошиц. Практический курс рентгеноструктурного анализа. Том II. Издательство Московского университета. Москва. 1960. 632 с.

3. Миркин Л.И. Рентгеноструктурный анализ. Индексирование рентгенограмм. Справочное руководство. – М., Наука, 1981, 496 с.

4. Миркин Л.И. Рентгеноструктурный анализ. Справочное руководство. Получение и измерение рентгенограмм. – М., Наука, 1986. 328 с.

5. Миркин Л.И. Рентгеноструктурный контроль машиностроительных материалов. Справочник. – М., Машиностроение, 1979, 134 с.

6. Китайгородский А.И. Рентгеноструктурный анализ мелкокристаллических и аморфных тел. Государственное издательство технико-теоретической литературы. Москва-Ленинград. 1952, 588 с.

8. Китайгородский А.И. Рентгеноструктурный анализ. Государственное издательство технико-теоретической литературы. Москва-Ленинград. 1950, 651 с.

9. Горелик С.С., Расторгуев Л.Н., Скаков Ю.А. Рентгенографический и электроннооптический анализ. Изд. 3-е, доп. и переработ. Мсква. МИСИС, 1994, 328 с.
10. Р.Джеймс. Оптические принципы дифракции рентгеновских лучей. Перевод с англайского Г.А.Гольдера и М.П.Шаскольской. Под редакцией В.И.Ивероновой. Издательство Иностранной литературы. Москва. 1950. 572 с.
11. А.И.Китайгородский. Рентгеноструктурный анализ. Государственное издательство технико-теоретической литературы. Москва, Ленинград. 1950. 650 с.
12. В.И.Иверонова, Г.П.Ревкевич. Теория рассеяния рентгеновских лучей. Издательство Московского университета. Москва. 1972. 246 с.
13. З.Г.Пинскер. Рентгеновская кристаллооптика. Издательство «Наука». Москва. 1982. 392 с.
14. Рентгендифракционные и электронно-микроскопические методы анализа атомно-кристаллической структуры материалов. Методическое пособие. Под редакцией Шехтмана В.Ш. и Суворова Э.В.. Институт физики твердого тела РАН. Черноголовка 2000. 138 с.
15. П.Хирш, А.Хови, Р.Никелсон, Д.Пэшли, М.Уэлан. Электронная микроскопия тонких кристаллов. Издательство «Мир». Москва. 1968. 574 с.
16. Сайт международного союза кристаллографов <http://www.iucr.org/>
17. Crystallography Open Database <http://www.crystallography.net/>
18. International Centre for Diffraction Data. <http://www.icdd.com/>.
19. Mark Ladd, Rex Palmer. Structure Determination by X-ray Crystallography. Analysis by X-rays and Neutrons. Fifth Edition. Springer. 2013.

Sabaqlarg'a mo'lsherlengen oqi'w programmasi'

Lekciyali'q sabaqlar (30 saat)

№	Temalardi'n' atlari'	Saatlar sani'
1	Kristallografiya elementleri. Ken'isliklik pa'njere teoriyasi'. Tu'yinlik tuwri' (Uzlovaya pnyamaya). Kristallografiyali'q tegislik. Elementar quti'sha. Pa'njere turaqli'lari'. Simmetriyali'q tu'rlendiriw tu'rleri. Simmetriyani'n' jabi'q elementleri. Simmetriya elementleri qosi'w. Simmetriya elementlerin generaciyalaw. Kristallografiyali'q noqatli'q toparlar (gruppalar). Kristallografiyali'q sistemalar -singoniyalar. Simmetriya operaciyalari'n' ha'm noqatli'q toparlardi' matricalar ja'rdeminde ko'rsetiw. Kyuridin' shektegi toparlari'. Ikosaedrlik singoniyali'n' noqatli'q toparlari'. Kvazikristallar haqqi'nda tu'sinik.	2
2	Translyaciya'q toparlar. Elementar quti'shani'n' ha'm 14 pa'njereni saylap ali'w qag'i'ydalari'. Kristallardi'n' atomli'q quri'li'si' (strukturasi') ha'm kristalli'q pa'njere tu'siniklerin sali'sti'ri'w. Translyaciya simmetriya elementi si'pati'nda. Vintlik ko'sherler, ji'lji'p shag'i'li'sti'ri'wshi' tegislikler. Simmetriyani'n' ashi'q elementlerin matricalar ja'rdeminde ko'rsetiw. Xali'q arali'q sistema boyi'nsha toparlardi' (gruppalardi') belgilew.	2
3	Noqatlardi'n' duri's sistemasi', noqatlardi'n' orbitasi'. Uli'wmali'q ha'm dara ekwivalentlik awhallardi'n' retliligi. Poziciyalardi'n' eseliligine sa'ykes quti'shadag'i' atomlardi'n' sani' ha'm olardi'n' racional jaylasi'wi'. Kristaldi'n' belgili strukturasi'ni'n' toli'q ta'riyipleniwi. Ti'g'i'z sharli'q	2

	jaylasti'ri'wlar. Jaylasti'ri'w defektlari (Defekti' upakovki). Strukturadag'i' tetra - ha'm okto - bosli'qlar.	
4	Kristalli'q ko'p mu'yeshlikler. A'piwayi' formalar - tegislikler orbitalari'. Platonni'n' idealli'q figuralari' kubli'q ha'm ikosaedrlik singoniyalardi'n' a'piwayi' formalari' si'pati'nda. Pa'njere ha'm pa'njere kompleksi. Kristallografiya'li'q proekciyalardi'n' tu'rleri: si'zi'qli', gnomoniya'li'q, stereografiya'li'q, gnomostereografiya'li'q. Vulf tori'. Keri ken'isliktin' metrikasi'. Keri pa'njere ha'm oni'n' atomli'q-kristalli'q pa'njerenin' xarakteristikalari' menen baylani'si'.	2
5	Rentgen nurlari'ni'n' ali'ni'wi' ha'm olardi'n' zatlar menen ta'sir etisiwi. Rentgen apparatlari'. Rentgen trubkalari'ni'n' konstrukciyalari'ni'n' tipleri. Rentgen diapazoni'ndag'i' spektr.	2
6	Sinxrotronli'q nurlani'w: sinxrotronli'q nurlani'wdi' ali'wdi'n' ha'm olardi' izertlewlerde ja'ne texnikada paydalani'wdi'n' prinsipleri. Rentgen nurlari'ni'n' zatlardi'n' juti'li'wi' ha'm shashi'rawi'. Juti'wdi'n' si'zi'qli' koefficientleri, tolqi'n uzi'nli'g'i'nan ha'm atomli'q nomerden g'a'rezlilik. Saylap ali'p juti'w ha'm filtrler.	2
7	Erkin elektron ta'repinen shashi'rati'w. Tomson formulasi'. Atomli'q shashi'rati'w funkciyasi'. SHashi'rati'wdi'n' atomli'q amplitudasi' esaplaw usi'llari' haqqi'nda tu'sinik, uli'wmali'q an'latpani' keltirip shi'g'ari'w.	2
8	Kristaldag'i' rentgen nurlari'ni'n' difrakciyasi'. SHashi'rati'wshi' oraylardi'n' u'sh o'lshemli pa'njeresindagi difrakciyani'n' "geometriya'li'q" teoriyasi'. Vektorli'q ha'm skalyar an'latpalardag'i' Vulf-Bregg ten'lemesi. Evald quri'li'si'. Brillyuen zonalari' shegaralari'.	2
9	Keri pa'njere ko'rinisindagi tiykarg'i' difrakciya'li'q sxemalar: Laue usi'li', poroshok usi'li', aylani'w (terbeliw) usi'li', ken' tarqalatug'i'n da'ste usi'li', polikristalli'q ob'ekt penen monokristaldi'n' difraktometriyasi'. Rentgen reflekslerinin' intensivligi. Bir elementar quti'sha ta'repinen shashi'rati'w. Strukturali'q amplituda, uli'wma an'latpani' keltirip shi'g'ari'w.	2
10	Lauenin' interferenciya'li'q funkciyasi'. Kishi kristal ta'repinen shashi'rati'w haqqi'ndag'i' ma'sele. Difrakciya'li'q maksimumlardin' payda boli'w sha'r'ti. Keri pa'njerenin' tu'yinlerinin' formalari' ha'm o'lshemleri. Intensivlikti esaplaw ushi'n arnalg'an formulalarg'a o'tiw. Integralli'q faktori'. Tegislikler sistemasi'ni'n' sali'sti'rmali' shashi'rati'wshi'li'q qa'biletligi haqqi'ndag'i' tu'sinik. Ji'lli'li'q faktori'. Qaytalani'wshi'li'q faktori'. Mu'yeshlik faktor.	2
11	Strukturali'q amplitudalardi' tallaw. Brave pa'njeresinin' tipine, vintlik ko'sherlerdin', ji'lji'p shashi'rati'wshi' tegisliklerdin' bar boli'wi'na baylani'sli' rentgen reflekslerinin' sistemali' tu'rde o'shiwi. Fure sintezi kristallardi'n' atomli'q strukturasi'n analizlew usi'li' si'pati'nda. Elektronli'q ti'g'i'zli'qti' Furenin' u'sh o'lshemli qatari'na jayi'w, strukturali'q amplitudalardi' qatardi'n' koefficientleri tu'rinde ko'rsetiw. Keri pa'njere, tu'yinlerdin' salmag'i', Fure jayi'wi'ni'n' (qatari'ni'n') geometriya'li'q obrazi'.	2
12	Rentgenstrukturali'q analiz usi'llari' menen sheshiletug'i'n tiykarg'i' ma'seleler. Belgisiz strukturani' analizlewdin' etaplar'i'. Singoniyani', Brave pa'njeresin ha'm simmetriyani'n' ken'isliktegi gruppalarin', elementar quti'shadag'i' atomlardin' sani'n ani'qlawdag'i' izertlewlerdin' izbe-izligi. Quti'shadag'i' atomlardin' koordinatalari'n ani'qlawdin'	2

	eksperimentalli'q ha'm esaplaw usi'llari'. Tekserip ko'riw ha'm qa'teler usi'li' (metod prob i oshibok). Patterson sintezi. Fure sintezi.	
13	Metalli'q sistemalardi' analizlew ma'seleleri. Hal diagrammalari'ndag'i' fazali'q oblastlardi' identifikaciyalaw. Qatti' eritpelerdin' ta'rtplesiw. Eritpelerdegı dispersiyali'q qati'w, dyuralyuminiydin' qartayi'wi'i'ndag'i' (pri starenii) "eki o'lshemli" zarodi'shlar. Strukturali'q aylani'slardi' ha'm da'wirli emes kristallardi' izertlewdegı eksperimentalli'q ma'seleler: diffuziyali'q emes martensitlik aylani'slar, politip kristallar, modulyaciyalang'an o'lshemi boyi'nsha sali'sti'ri'wg'a bolmaytug'i'n (neosizmerimi'e) strukturalar, kvazikristallar, fullerenler semeystvosi'.	2
14	Elektronografiya menen neytronografiya tiykarlari'. Elektronografiya. Tez qozg'ali'wshi' elektronlardi'n' difrakciyasi' usi'li'ni'n' principi ha'm o'zgeshelikleri. Qollani'li'w oblasti'. Kishi tezlikler menen qozg'ali'wshi' elektronlardi'n' difrakciyasi' ushi'n tiykarg'i' ma'seleler. Neytronografiya. YAdroli'q shashi'raw qollani'li'wi'ni'n' principi si'pati'nda. Magnitlik shashi'raw, ferro- ha'm antiferromagentiklerdin' strukturasi'ndag'i' magnit momentlerinin' ta'rtplesiwın ani'qlaw.	2
15	Rentgen difrakciyalı'q mikroskopiyasi'. Difrakciya teoriyasi'ndag'i' kinematikali'q ha'm dinamikali'q jaqi'nlası'wlar haqqi'ndag'i' tu'sinik. birinshi ha'm ekinshi ekstinkciya. Ideal kristall. Ideal mozaykali'q kristall. Kristaldi'n' xaqi'yqi'y strukturasi'ni'n' analizi. Berg-Barret usi'li'. Fudjivara, SHulc, mu'yeshlik skannerlew usi'llari'. Strukturasi' jetilisken kristallardi' u'yreniw usi'llari', dinamikali'q teoriya sheklerindegi qubi'li'slardi' paydalani'w. Lang sxemasi'. Anomalli'q o'tiw effekti, Borman usi'li'.	2
	Ja'mi	30

Seminar sabaqlari' (10 saat)

№	Temalardi'n' atlari'	Saatlar sani'
1	Tu'yinlik tuwri'. Kristallografiya'lı'q tegislik. Elementar quti'sha. Pa'njere turaqli'lari'. Simmetriyalı'q tu'rlendiriw tu'rleri. Simmetriyani'n' jabi'q elementleri. Simmetriya elementleri qosi'w. Simmetriya elementlerin generaciyalaw. Kristallografiya'lı'q noqatli'q toparlar (gruppalar). Kristallografiya'lı'q sistemalar -singoniyalar. Simmetriya operaciyalari'n ha'm noqatli'q toparlardi' matricalar ja'rdeminde ko'rsetiw. Kvazikristallar haqqi'nda tu'sinik. Translyaciya'lı'q toparlar. Elementar quti'shani'n' ha'm 14 pa'njereni saylap ali'w qag'i'ydalari'. Kristallardi'n' atomli'q quri'li'si' (strukturasi') ha'm kristalli'q pa'njere tu'siniklerin sali'sti'ri'w. Translyaciya simmetriya elementi si'pati'nda. Vintlik ko'sherler, ji'lji'p shag'i'li'sti'ri'wshi' tegislikler. Simmetriyani'n' ashi'q elemnetlerin matricalar ja'rdeminde ko'rsetiw. Xali'q arali'q sistema boyi'nsha toparlardi' (gruppalardi') belgilew. Noqatlardi'n' duri's sistemasi', noqatlardi'n' orbitasi'. Uli'wmali'q ha'm dara ekvivalentlik awhallardi'n' retliligi. Poziciyalardi'n' eseliligine sa'ykes quti'shadag'i' atomlardi'n' sani' ha'm olardi'n' racional jaylasi'wi'. Kristaldi'n' belgili strukturasi'ni'n' toli'q ta'riyipleniwi. Ti'g'i'z sharli'q jaylasti'ri'wlar. Keri ken'isliktin' metrikasi'. Keri pa'njere ha'm oni'n' atomli'q-kristalli'q pa'njerenin' xarakteristikalari' menen baylani'si'.	2

2	Rentgen nurlari'ni'n' ali'ni'wi' ha'm olardi'n' zatlar menen ta'sir etisiwi.	2
3	Kristaldag'i' rentgen nurlari'ni'n' difrakciyasi'. 13. Shashi'rati'wshi' oraylardi'n' u'sh o'lshemli pa'njeresindegi difrakciyani'n' "geometriyalı'q" teoriyasi'. Vektorli'q ha'm skalyar an'latpalardag'i' Vulfa-Bregg ten'lemesi. Evald quri'li'si'. Brillyuen zonalari' shegaralari'. 14. Keri pa'njere ko'rinishindegi tiykarg'i' difrakciyalı'q sxemalar: Laue usi'li', poroshok usi'li', aylani'w (terbeliw) usi'li', ken' tarqalatug'i'n da'ste usi'li', polikristalli'q ob'ekt penen monokristaldi'n' difraktometriyasi'. 15. Rentgen reflekslerinin' intensivligi. Bir elementar quti'sha ta'repinen shashi'rati'w. Strukturalı'q amplituda, uli'wma an'latpani' keltirip shi'g'ari'w. 16. Lauenin' interferenciyalı'q funkciyasi'. Kishi kristal ta'repinen shashi'rati'w haqqi'ndag'i' ma'sele. Difrakciyalı'q maksimumlardı'n' payda bolı'w sha'rti. Keri pa'njerenin' tu'yinlerinin' formalari' ha'm o'lshemleri.	2
4	Rentgen difraktometriyasi' tiykarlari'. Monokristallar ha'm polikristallar rentgenografiyasi'ni'n' usi'llari'.	2
5	Elektronlı'q mikroskopiya, elektronografiya ha'm neytronografiya tiykarlari'.	2
	Ja'mi	10 saat.

Laboratoriyalı'q sabaqlar (20 saat)

No	Laboratoriyalı'q jumi'slardı'n' atamalari'	Saat sani'
1	Polikristalli'q u'lgilerdi paydalani'p kristalli'q pa'njerenin' o'lshemleri menen tiplerin ani'qlaw.	4
2	Sapalı'q fazalı'q tallaw.	2
3	Kubli'q monokristallardı'n' orientaciyalari'n tabi'w.	4
4	Kristallardı' aylani'w ha'm terbeliw usi'llari'ni'n' ja'rdeminde u'yreniw.	4
5	Polikristallardı'n' rentgenogrammalari' boyi'nsha kristallardı'n' simmetriyasi'ni'n' ken'isliktegi gruppasi'n ani'qlaw.	4
6	Polikristallardı'n' rentgenogrammalari' boyi'nsha elementar quti'ni'n' parametrlerin da'l ani'qlaw (precizion ani'qlaw).	2
	Ja'mi	20 saat

Eskertiw: laboratoriyalı'q sabaqlar ushi'n arnawlı' oqi'w qollanbasi' du'zilgen. Avtorı' B.Abdikamalov. No'kis. 2012-jı'l.

"Qatti' denelerdi difrakciyalı'q izertlew usi'llari'" pa'ni boyi'nsha sorawlar

1. Ken'isliklik pa'njere tu'sinigi. Translyaciyalı'q pa'njereni geometriyalı'q ta'riyiplew. Ken' tu'rde qollani'latug'i'n tu'sinikler menen terminler.

2. Tu'yinler pa'njeresi. Pa'njere turaqlı'lari'. Oni'n' orientaciyalı'q xarakteristikaları' (indekslew).

3. Kristallografiyani'n' ta'jiriybede ashi'lg'an ni'zamlari'. Kristallardi'n' mu'yeshlerinin' turaqli'li'g'i' ni'zami'. Ko'sherlik kesindilerdin' qatnaslari'ni'n' racionalli'q ni'zami'.
4. Kristallardi'n' bir tekligi menen anizotropi'g'i' ni'zami'.
5. Ti'g'i'z jaylasti'ri'lg'an sharlar teoriyasi'. Jaylasti'ri'w simmetriyasi'. SHarlardi' ti'g'i'z jaylasti'ri'wda payda bolatug'i'n tetraedrlik ha'm oktaedrlik bosli'qlar. Olardi'n' geometriyalig' q xarakteristikalarig'.
6. Ionli'q kristallardi'n' quri'li'si'ni'n' qa'liplesiwindagi qag'i'ydalar.
7. Molekulalardi' ti'g'i'z jaylasti'ri'w teoriyasi'.
8. Kristallografiyalig' proekciyalar. Sferali'q proekciya. Stereografiyalig' proekciya. Gnomostereografiyalig' proekciya. Vulf setkasi'.
9. Tu'yinlik tuwri'. Oni'n' indeksleri.
10. Tu'yinlik tegislik. Miller indeksleri.
11. Strukturalig' kristallografiyani'n' tiykarg'i' formulalari'. Elementar quti'ni'n' ko'lemi.
12. Jabi'q simmetriya elementleri. Inversiya orayi'. Simmetriya ko'sherleri. Vintlik simmetriya ko'sherleri.
13. Kristallografiyalig' koordinatalar, sistemalar, singoniyalar.
14. Ashi'q simmetriya elementleri. Vintlik ko'sherler. Ji'lji'p shashi'rati'wshi' simmetriya tegislikleri.
15. Translyaciya simmetriyalig' operaciya si'pati'nda. Translyaciyalig' gruppalar.
16. Elementar quti'dag'i' simmetriya elementlerin generacijalaw. Simmetriya elementleri qosi'w haqqi'ndagi' teoremlar.
17. Simmetriyalig' operacijalar. Simmetriyalig' operacijalardi'n' gruppani' payda etetug'i'nli'g'i'. Gruppali'q aksiomalar. Simmetriyani'n' noqatli'q gruppasi'.
18. 32 dana noqatli'q gruppalardi' ta'riyiplew. Kristallografiyalig' klasslar.
19. Pa'njerede mu'mkin bolg'an jabi'q simmetriyalig' tu'rlendiriwler. Buri'w ko'sherleri ha'm infersiyalig' ko'sherler.
20. Birdey bolg'an simmetriya ko'sherleri arasi'ndagi' mu'mkin bolg'an mu'yeshler.
21. Elementar quti'ni' saylap ali'wdi'n' usi'llari'. Brave pa'njereleri.
22. Pa'njerenin' simmetriya elementlerinin' ja'rdeminde ori'nlanatug'i'n tu'rlendiriwler. Noqatti'n' tu'rlendiriliwi.
23. Pa'njerenin' simmetriya elementlerinin' ja'rdeminde ori'nlanatug'i'n tu'rlendiriwler. Kristallografiyalig' tegisliklerdi tu'rlendiriw.
24. Kristallardagi' difrakciyalig' effekt. Keri pa'njere. Keri ha'm tuwri' pa'njerenin' parametrleri arasi'ndagi' baylani's.
25. Keri vektordi'n' uzi'nli'g'i' ha'm tegislikler arasi'ndagi' qashi'qli'q. Zonalar ni'zami'.
26. Tu'yinlik tuwri' menen tu'yinlik tegisliktin' perpendikulyarli'g'a menen parallelligi sha'rti.
27. Tu'yinlik tuwri'lar menen tu'yinlik tegislikler arasi'ndagi' mu'yeshlerdin' ma'nislerin esaplaw.
28. Pa'njerenin' tiykarg'i' vektorlari'n yamasa koordinatalar ko'sherlerin saylap ali'wdi'n' ha'r qi'yli' usi'llari'.
29. Ken'islikti si'zi'qli' tu'rlendiriw. Parallel tu'rdegi ji'lji'w yamasa translyaciya.
30. Ken'islikti si'zi'qli' tu'rlendiriw. Ko'sher do'geregindegi buri'w.
31. Ken'islikti si'zi'qli' tu'rlendiriw. Inversiya. Inversiya ushi'n si'zi'qli' tu'rlendiriw koefficientlerinen du'zilgen ani'qlawshi'ni'n' qa'siyetleri.
32. Ken'islikti si'zi'qli' tu'rlendiriw. Si'zi'qli' tu'rlendiriw ushi'n uli'wmali'q jag'day. Si'zi'qli' tu'rlendiriw koefficientlerinen du'zilgen ani'qlawshi'ni'n' qa'siyetleri.
33. Rentgen trubkalari'. Rentgen apparatlari'. Olardi'n' konstrukciyalig' o'zgeshelikleri.
34. Rentgen nurlari'ni'n' spektri. Xarakteristikali'q ha'm tormozli'q rentgen nurlani'wi' (rentgen nurlari'ni'n' u'zliksiz spektri).
35. Xarakteristikali'q spektr. Xarakteristikali'q rentgen nurlari'ni'n' seriyalari'.

36. Rentgen nurlari' menen zatlardi'n' ta'sirlesiwini' uli'wmali'q kartinasi'. Juti'w koefficienti (ha'lsirew koefficienti). Filtrler.
37. Rentgen nurlari'ni'n' fotografiyalı'q ta'siri. Rentgen nurlari'ni'n' intensivligin fotoplenkani'n' qarawi'ti'wi' boyi'nsha o'lshe'w. Rentgenogrammalardi' fotometrlew.
38. Rentgen nurlari'ni'n' ionlasti'ri'w ta'siri ha'm intensivlikni' ani'qlawdi'n' ionizatsiyalı'q usi'li'. Ionizatsiyalı'q kameralar.
39. Kristallarda difraktsiyag'a ushi'rag'an rentgen nurlari'ni'n' bag'i'ti'.
40. Rentgen nurlari'ni'n' elektronlardag'i' shashi'rawi'.
41. Atomli'q faktor ha'm elektronlardı'n' tarqalı'wi'. Erkin atomlar ushi'n atomli'q faktordı' esaplaw.
42. Laue funktsiyası'. Oni'n' kristallar rentgenografiyası'nda tutqan orni'. Laue funktsiyası' menen kristaldı'n' o'lshe'mleri arası'ndag'i' baylanı's.
43. Laue usi'li'nda kristaldı'n' orientirovkası'n' ani'qlaw.
44. Laue usi'li'. Laue usi'li' kristaldı'n' simmetriyası'n' ani'qlawg'a mu'mkinshilik beretug'i'n' tiykarg'i' usi'l si'patı'nda. Usi'ldi'n' ideyası'. Interferentsiyalı'q kartinani'n' geometriyası'. Zonalı'q iymeklikler.
45. Laue usi'li'ni'n' ja'rdeminde monokristallardı'n' mu'yeshlik konstantaları'n' ani'qlaw.
46. Laue klassları'. Lauegrammalardı'n' 10 tipi.
47. Lauegrammalardı'n' gnomonli'q proektsiyaları'. Gnomonli'q si'zg'i'sh. Lauegrammalardı' indekslew.
48. Lauegramma boyi'nsha kristaldı'n' bag'i'tlari'n' ani'qlaw. Duri's formag'a iye monokristallardı'n' pa'njeresinin' ko'sherlerinin' bag'i'tlari'n' ani'qlaw.
49. Rentgenogrammalardı'n' simmetriyası'. Lauegrammalardı'n' simmetriyası'.
50. Bregg-Vulf ten'lemesi. Vektorli'q formadag'i' difraktsiyani'n' ten'lemesi.
51. Keri pa'njere. Keri pa'njere ko'rinishindegi difraktsiyalı'q sxemalar.
52. Kristallardı'n' strukturası'n' difraktsiyalı'q izertlewde qollanı'latug'i'n' nurlar ha'm olardı'n' derekleri.
53. Rentgen nurlari'. Rentgen nurlari' derekleri. Strukturalı'q analiz ushi'n qollanı'latug'i'n' rentgen trubkalari'ni'n' konstruktsiyası'ni'n' o'zgeshelikleri.
54. Rentgen nurlari'n' registratsiyalaw ushi'n arnalg'an detektorlar. Fotografiyalı'q registratsiyalaw.
55. Strukturalı'q analiz ushi'n arnalg'an rentgen apparatlari' ha'm kameralari'.
56. Neytronlar da'stelerinin' derekleri.
57. Elektronli'q difraktsiya apparatlari'. Elektronli'q mikroskoplar. Principialli'q du'zilisi.
58. Rentgen nurlari'ni'n' shashi'rawi'. SHashi'rawdi'n' elementar akti.
59. Difraktsiyag'a ushi'rag'an rentgen nurlari'ni' ji'lli'li'q terbelislerinin' ta'siri. Temperaturalı'q faktor.
60. Rentgen tolqi'nlari' ushi'n ji'lli'li'q diffuziyalı'q maksimumlari'. Tiykarg'i' faktler.
61. Diffuziyalı'q maksimumlar kartinasi' menen kristaldı'n' strukturası' arası'ndag'i' baylanı's.
62. Rentgen nurlari' ha'm elektronlar ushi'n shashi'rawdi'n' atomli'q faktori'.
63. "Utnalg'an" kristallar (polikristallar) usi'li' ushi'n qaytalani'w faktori'.
64. Idealli'q kristall. Birinshi ekstinktsiya.
65. Birinshi ekstinktsiyani' esapqa ali'w. Ideal mozaikalı'q kristall.
66. Elementar quti'dag'i' shashi'raw. Strukturalı'q faktor. Tiykarg'i' formulalar.
67. Strukturalı'q amplitudalardı' tallaw. Sistemalı'q o'shiwler. Strukturalı'q faktor formulaları' ushi'n dara jag'daylar.
68. Keri pa'njerenin' konfiguratsiyası' ha'm simmetriyası'ni'n' ken'isliklik gruppası'.
69. Kristaldag'i' rentgen nurlari'ni'n', elektronlardı'n' ha'm neytronlardı'n' shashi'rawi'. Lauenin' interferentsiyalı'q funktsiyası'.

70. Rentgen nurlari'ni'n' "kishi" kristallardag'i' shashi'rawi' (absorbciya menen ekstinkciyani' esapqa almag'an jag'day). Intensivliktin' maksimumi'ni'n' ken'ligi.
71. Keri pa'njere tu'yinlerinin' formasi' ha'm o'lshemleri. Tuwri' ha'm keri pa'njerenin' konfiguraciyalari' arasi'ndag'i' baylani's.
72. Elektronli'q ti'g'i'zli'qti'n' qatari' usi'li'. Fure qatari'na jayi'w ha'm strukturali'q analizdin' prinsipleri. Elektronli'q ti'g'i'zli'qti'n' u'sh o'lshemli qatari'.
73. Fure tolqi'nlari'ni'n' qa'siyeti ha'm kristaldi'n' keri pa'njeresi.
74. Difrakciyani'n' keri ma'selesi haqqi'nda. Fure sintezi. Patterson Sintezi.
75. Keri pa'njere ken'isligindegi interferenciyali'q (Laue) funkciyasi'. Strukturali'q faktor ha'm keri pa'njere.
76. Rentgen reflekslerdin' intensivligi. Rentgen nurlari'ni'n' kristallardi'g'i' shashi'rawi'ni'n' dinamikali'q teoriyasi'ni'n' elementleri.
77. Integralli'q intensivlik. Rentgen difraktometrinin' ja'rdeminde intergalli'q intensivlikti ani'qlaw.
78. Rentgen nurlari'nan, neytronlardan qorg'ani'w ha'm dozimetriya tiykarlari'.
79. Monokristallardan ali'ng'an rentgenogrammalardi' esaplawdag'i' sistemali'q izbe-izlik (kristaldi'n' orientirovkasi'n, turaqli'lari'n ha'm Bragg pa'njeresinin' tipin ani'qlawdag'i' izbe-izlik).
80. Strukturali'q analizdegi eksperimentalli'q bag'darlar. Monokristallar ha'm polikristallardag'i' rentgen nurlari'ni'n' difrakciyasi'ni'n' o'zgeshelikleri.
81. Belgisiz kristalli'q strukturani' rasshifrovkalawdi'n' fizikali'q tiykarlari' ha'm izbe-izligi.
82. Kristalli'q pa'njerenin' xarakteristikalarini' Aylani'w (terbeliw) usi'li'. Usi'ldi'n' ideyasi'. Qatlamli'q si'zi'qlar. Kristalli'q pa'njerenin' parametrlarin ani'qlaw.
83. Aylani'w (terbeliw) usi'li'. Kristalli'q pa'njerenin' parametrlarin ani'qlaw.
84. Aylani'w (terbeliw) usi'li'. Rentgenogrammalardi' indekslew. Aylani'w (terbeliw) usi'li'ni'n' ja'rdeminde ayi'ri'm kristallardi'n' simmetriyasi'ni'n' ken'isliktegi gruppasi'n ani'qlaw mu'mkinshilikleri.
85. Intensivlikti esapqa almaytug'i'n strukturali'q analiz. Usi'llardi'n' geometriyalı'q sxemalari'.
86. Ti'g'i'z jaylasti'ri'w teoriyasi'. Atomli'q ha'm molekulyali'q arali'q radiuslar. Koordinaciyali'q san.
87. Rentgenstrukturali'q analiz ushi'n polikristalli'q u'lgilerdi tayarlaw.
88. Polikristaldi'n' rentgenogrammasi'n teoriyalı'q esaplaw.
89. Kristalli'q pa'njerenin' da'wirlerin ha'm kristallografiyalı'q tegislikler arasi'ndag'i' qashi'qli'qlardi' precizionli'q (da'l) ani'qlaw.
90. Polikristallardi' difrakciyalı'q izertlew usi'llari'. Izertlewlerdin' ma'nisi menen maqsetleri. Polikristalli'q u'lginin' (yamasa untalg'an kristaldi'n') rentgenogrammasi'. Debay (Debye-Scherrer) usi'li'.
91. Polikristallardi' difrakciyalı'q izertlewdi'n' a'dettegi usi'li'. Rentgenogrammani'n' tu'ri. Rentgenogrammalardi' indekslew.
92. Kristallografiyalı'q tegislikler arasi'ndag'i' qashi'qli'qlar boyi'nsha mag'li'wmatlar tiykari'nda zatti' ani'qlaw.
93. Debay usi'li'nda kristalli'q pa'njerenin' turaqli'lari'ni'n' ma'nisin ani'qlawdi'n' da'lligi ha'm o'lshew da'lligin joqari'lati'w ilajlari'.
94. Debay usi'li'nda kristalli'q pa'njerenin' tipin ani'qlaw usi'llari'. Rentgen nurlari'ni'n' o'shiw qag'i'ydalari'.
95. Rentgenogrammlar boyi'nsha kristalli'q bo'lekshelerdin' o'lshemlerin ani'qlaw usi'llari'.
96. Sapali'q fazali'q analiz. Kristalli'q strukturani' ani'qlaw menen ali'p bari'latug'i'n sapali'q fazali'q analiz.

97. Sanli'q fazali'q rentgenstrukturali'q analiz. Difrakciyag'a ushi'rag'an rentgen tolqi'nlari'ni'n' intensivliklerin o'lishew ma'seleleri.

98. Rentgen difraktometriyasi'. Standart rentgen difraktometrinin' du'zilisi ha'm islew principleri.

99. Elektronografiya menen elektronli'q mikroskopiya. Elektronogrammani'n' qa'liplesiwinin' geometriyali'q o'zgesheliklari.

100. Elektronli'q mikroskopti'n' principialli'q optikali'q sxemasi'. Elektronli'q pushka, kondensor, elektronli'q linzalar.

101. Elektronli'q difrakciyali'q kontrastti'n' payda boli'wi'. Qaran'g'i' maydandag'i' ha'm jaqti' maydandag'i' kontrastlar.

102. Elektronografiyali'q izertlew ushi'n kristalli'q u'lgilerdi tayarlaw.

103. Kristalli'q pa'njere defektlerinin' elektronli'q difrakciyali'q kontarstti'n' payda boli'wi'na ta'siri.

104. Kristaldi'n' atomli'q-kristalli'q strukturasi'n' ani'qlawdi'n' izbe-izligi.

105. Fazali'q analiz. Sapali'q ha'm sapali'q fazali'q analiz. Difrakciyali'q eksperimentlerde ali'ng'an na'tiyjeler tiykari'nda hal diagrammalari'n du'ziw.

106. Difrakciyali'q mikroskopiya. Rentgen topografiyasi'. Mu'yeshlik skannerlew usi'li'.

107. Kristallardag'i' fazali'q o'tiwlerdi ha'm strukturali'q transformაციyalardi' difrakciyali'q izertlew din' fizikali'q tiykarlari'.

108. Elektronli'q mikroskoptag'i' elektronlar da'stesinin' payda boli'wi'. Elektronlar tolqi'nlari'ni'n' tolqi'n uzi'nli'g'i'.

109. Neytronografiyani'n' ja'rdeminde sheshiletug'i'n ma'seleler. Gidridler ha'm olardi'n' struktasi'n' ani'qlaw.

110. Neytronografiyani'n' ja'rdeminde sheshiletug'i'n ma'seleler. Ferromagnetikler menen antiferromagnetiklerdi izertlew din' fizikali'q tiykarlari'.

111. Elektronli'q mikroskopti'n' linzalari': kondensorli'q, ob'ektivlik, arali'qli'q, proekciyali'q.

112. Elektronli'q mikroskopti'n' u'lkeyte ali'wshi'li'q qa'diletligi ha'm oni'n' ob'ektivlik, arali'qli'q, proekciyali'q linzalardi'n' xarakteristikalarini'n g'a'rezligi.

113. Elektronli'q mikroskopti'q izertlew ushi'n replikalardi' ha'm poroshok tu'rindegi ob'ektlerdi tayarlaw.

114. U'lken materiallardan metall folgalardi' tayarlaw ha'm olardi' elektron-mikroskopiya'li'q ja'ne elektronografiya'li'q izertlew.

115. Elektron mikroskopi'nda substrukturani' ha'm dislokaciya'li'q strukturani'n' xarakteristikalarini'n izertlew usi'llari'.

116. Elektronli'q-mikroskopiya'li'q kontastti'n' payda boli'wi'ni'n' kinematikali'q ha'm dinamikali'q teoriyalari'ni'n' tiykarlari'.

117. Elektron mikroskopi'ndag'i' kontastti'n' payda boli'wi'ni'n' fizikali'q tiykarlari'. Ten'dey qali'n'li'qlar jolaqlari'.

118. Neytronografiyani'n' o'zine ta'n optikali'q o'zgesheliklari. Neytronlar da'stesin registraciya'law usi'llari'.

119. Ayi'ri'm dislokaciyalardi'n' ha'm dislokaciya'li'q strukturalardi'n' qanday xarakteristikalarini' elektronli'q-mikroskopiya'li'q izertlewlerdin' bari'si'nda ani'qlanadi'?

120. Elektronogrammalar boyi'nsha ha'r qi'yli' kristalli'q fazalardi'n' pa'njereleri arasi'ndag'i' orientaciya'li'q qatnaslardi' ani'qlaw usi'llari'.

121. Rentgen difraktometrinde difrakciya'li'q si'zi'qlardi'n' integralli'q intensivligini ani'qlaw usi'llari'.

122. Epigrama boyi'nsha monokristaldi'n' kristallografiya'li'q bag'i'tlari'n ani'qlaw.

"Qatti' denelerdi difrakciya'li'q izertlew usi'llari'" pa'ni boyi'nsha juwmaqlaw qadag'alawi' variantlari'

1-variant

1. Ken'isliklik pa'njere tu'sinigi. Translyაციyalı'q pa'njereni geometriyalı'q ta'riyiplew. Ken' tu'rde qollanı'latug'i'n tu'sinikler menen terminler.
2. Elektron mikroskopi'nda substrukturani' ha'm dislokaciyalı'q strukturani'n' xarakteristikaları'n izertlew usi'llari'.
3. Tu'yinlik tuwri'lar menen tu'yinlik tegislikler arası'ndag'i' mu'yeshlerdin' ma'nislerin esaplaw.
4. Kristallardag'i' fazalı'q o'tiwlerdi ha'm strukturalı'q transformaciyalardi' difrakciyalı'q izertlew din' fizikalı'q tiykarları'.
5. Intensivlikti esapqa almaytug'i'n strukturalı'q analiz. Usi'llardi'n' geometriyalı'q sxemaları'.

2-variant

1. Tu'yinler pa'njeresi. Pa'njere turaqlı'ları'. Oni'n' orientaciyalı'q xarakteristikaları' (indekslew).
2. Ken'islikti si'zi'qli' tu'rlendiriw. Inversiya. Inversiya ushi'n si'zi'qli' tu'rlendiriw koefficientlerinen du'zilgen ani'qlawshi'ni'n' qa'siyetleri.
3. Elektronlı'q mikroskoptag'i' elektronlar da'stesinin' payda boli'wi'. Elektronlar tolqi'nları'ni'n' tolqi'n uzi'nli'g'i'.
4. Ti'g'i'z jaylasti'ri'w teoriyası'. Atomlı'q ha'm molekulalı'q aralı'q radiuslar. Koordinaciyalı'q san.
5. Elektron mikroskopi'nda substrukturani' ha'm dislokaciyalı'q strukturani'n' xarakteristikaları'n izertlew usi'llari'.

3-variant

1. Kristallografiyani'n' ta'jiriybede ashi'lg'an ni'zamları'. Kristallardi'n' mu'yeshlerinin' turaqlı'li'g'i' ni'zami'. Ko'sherlik kesindilerdin' qatnasları'ni'n' racionallı'q ni'zami'.
2. Pa'njerenin' simmetriya elementlerinin' ja'rdeminde ori'nlanatug'i'n tu'rlendiriwler. Kristallografiyalı'q tegisliklerdi tu'rlendiriw.
3. Rentgen nurları'ni'n' spektri. Xarakteristikalı'q ha'm tormozlı'q rentgen nurlanı'wi' (rentgen nurları'ni'n' u'zliksiz spektri).
4. U'lken materiallardan metall folgalardi' tayarlaw ha'm olardi' elektron-mikroskopiyalı'q ja'ne elektronografiyalı'q izertlew.
5. Polikristallardi' difrakciyalı'q izertlew din' a'dettegi usi'li'. Rentgenogrammani'n' tu'ri. Rentgenogrammalardi' indekslew.

4-variant

1. Kristallardi'n' bir tekligi menen anizotropı'g'i' ni'zami'.
2. Rentgen nurları'ni'n' xarakteristikalı'q spektri. Xarakteristikalı'q rentgen nurları'ni'n' seriyaları'.
3. Keri pa'njere ken'isligindegi interferenciyalı'q (Laue) funkciyası'. Strukturalı'q faktor ha'm keri pa'njere.
4. Elektronlı'q mikroskopi'q izertlew ushi'n replikalardi' ha'm poroshok tu'rindegi ob'ektlerdi tayarlaw.
5. Integrallı'q intensivlik. Rentgen difraktometrini'n' ja'rdeminde intergallı'q intensivlikti ani'qlaw.

5-variant

1. Ti'g'i'z jaylasti'ri'lg'an sharlar teoriyasi'. Jaylasti'ri'w simmetriyasi'. SHarlardi' ti'g'i'z jaylasti'ri'wda payda bolatug'i'n tetraedrlik ha'm oktaedrlik bosli'qlar. Olardi'n' geometriyalig' xarakteristikalarig'.

2. Kristallardag'i' difraktsiyalig' effekt. Keri pa'njere. Keri ha'm tuwri' pa'njerenin' parametrleri arasi'ndag'i' baylanis'.

3. Elektronliq' mikroskopti'n' u'lkeyte ali'wshi'liq' qadiletligi ha'm oni'n' ob'ektivlik, araliqliq', proektsiyalig' linzalardi'n' xarakteristikalarig'nan g'a'rezligi.

4. Rentgen difraktometriyasi'. Standart rentgen difraktometrinin' du'zilisi ha'm islew principleri.

5. Laue klasslari'. Lauegrammalardi'n' 10 tipi.

6-variant

1. Ionliq' kristallardi'n' quri'li'si'ni'n' qaliplesiwindagi qag'i'ydalar.

2. Pa'njerede mu'mkin bolg'an jabiq' simmetriyalig' tu'rlendiriwler. Buri'w ko'sherleri ha'm infersiyalig' ko'sherler.

3. Laue funktsiyasi'. Oni'n' kristallar rentgenografiyasi'nda tutqan orni'. Laue funktsiyasi' menen kristaldi'n' o'lshemleri arasi'ndag'i' baylanis'.

4. Neytronografiyani'n' ja'rdeminde sheshiletug'i'n ma'seleler. Ferromagnetikler menen antiferromagnetiklerdi izertlewdi'n' fizikalig' tiykarlari'.

5. Elektronliq' mikroskopti'n' linzalari': kondensorliq', ob'ektivlik, araliqliq', proektsiyalig'.

7-variant

1. Molekulalardi' ti'g'i'z jaylasti'ri'w teoriyasi'.

2. Laue usi'li'ni'n' ja'rdeminde monokristallardi'n' mu'yeshlik konstantalari'n aniqlaw.

3. Neytronografiyani'n' ja'rdeminde sheshiletug'i'n ma'seleler. Gidridler ha'm olardi'n' strukturasi'n aniqlaw.

4. Keri vektordi'n' uzi'nli'g'i' ha'm tegislikler arasi'ndag'i' qashiqliq'. Zonalar ni'zami'.

5. Difraktsiyalig' mikroskopiya. Rentgen topografiyasi'. Mu'yeshlik skannerlew usi'li'.

8-variant

1. Kristallografiyalig' proektsiyalar. Sferalig' proektsiya. Stereografiyalig' proektsiya. Gnomostereografiyalig' proektsiya. Vulf setkasi'.

2. Rentgen trubkalari'. Rentgen apparatlari'. Olardi'n' konstruktsiyalig' o'zgeshelikleri.

3. Fazalig' analiz. Sapalig' ha'm sapalig' fazalig' analiz. Difraktsiyalig' eksperimentlerde ali'ng'an na'tiyjeler tiykari'nda hal diagrammalari'n du'ziw.

4. Lauegrammalardi'n' gnomonliq' proektsiyalari'. Gnomonliq' si'zg'i'sh. Lauegrammalardi' indekslew.

5. Kristaldi'n' atomliq'-kristallig' strukturasi'n aniqlawdi'n' izbe-izligi.

9-variant

1. Tu'yinlik tuwri'. Oni'n' indeksleri. Tu'yinlik tegislik. Miller indeksleri.

2. Ken'islikti si'ziqli' tu'rlendiriw. Si'ziqli' tu'rlendiriw ushi'n uli'wmalig' jag'day. Si'ziqli' tu'rlendiriw koeffitsientlerinen du'zilgen aniqlawshi'ni'n' qasiyetleri.

3. Kristallig' pa'njere defektlerinin' elektronliq' difraktsiyalig' kontrastti'n' payda boli'wi'na ta'siri.

4. Lauegramma boyi'nsha kristaldi'n' bag'i'tlari'n aniqlaw. Duri's formag'a iye monokristallardi'n' pa'njeresinin' ko'sherlerinin' bag'i'tlari'n aniqlaw.

5. Elektronografiyalig' izertlew ushi'n kristallig' u'lgilerdi tayarlaw.

10-variant

1. Strukturali'q kristallografiyani'n' tiykarg'i' formulalari'. Elementar quti'ni'n' ko'lemi.
2. Rentgen nurlari'ni'n' fotografiyali'q ta'siri. Rentgen nurlari'ni'n' intensivligin fotoplenkani'n' qarawi'ti'wi' boyi'nsha o'lshevw. Rentgenogrammalardi' fotometrlew.
3. Aylani'w (terbeliw) usi'li'. Kristalli'q pa'njerenin' parametrlarin ani'qlaw.
4. Sapali'q fazali'q analiz. Kristalli'q strukturani' ani'qlaw menen ali'p bari'latug'i'n sapali'q fazali'q analiz.
5. Elektronli'q difrakciyali'q kontrastti'n' payda boli'wi'. Qaran'g'i' maydandag'i' ha'm jaqti' maydandag'i' kontrastlar.

11-variant

1. Kristaldag'i' rentgen nurlari'ni'n', elektronlardi'n' ha'm neytronlardi'n' shashi'rawi'. Lauenin' interferenciya'q funkciyasi'.
2. Elektronli'q mikroskopi'ni' principiali'q optikali'q sxemasi'. Elektronli'q pushka, kondensor, elektronli'q linzalar.
3. Kristalli'q pa'njerenin' da'wirlerin ha'm kristallografiyali'q tegisliklar arasi'ndag'i' qashi'qli'qlardi' precizionli'q (da'l) ani'qlaw.
4. Tu'yinlik tuwri'. Oni'n' indeksleri. Tu'yinlik tegislik. Miller indeksleri.
5. Rentgen nurlari'n' registratsiyalaw ushi'n arnalg'an detektorlar. Fotografiyali'q registratsiyalaw.

12-variant

1. Jabi'q simmetriya elementleri. Inversiya orayi'. Simmetriya ko'sherleri. Vintlik simmetriya ko'sherleri.
2. Difrakciyag'a ushi'rag'an rentgen nurlari'ni' ji'lli'li'q terbelislerinin' ta'siri. Temperaturali'q faktor.
3. Elektronografiya menen elektronli'q mikroskopiya. Elektronogrammani'n' qaliplesiwinin' geometriyali'q o'zgesheliklari'.
4. Sanli'q fazali'q rentgenstrukturali'q analiz. Difrakciyag'a ushi'rag'an rentgen tolqi'nlari'ni'n' intensivliklarin o'lshevw ma'seleleri.
5. Debay usi'li'nda kristalli'q pa'njerenin' turaqli'lari'ni'n' ma'nisin ani'qlawdi'n' da'lligi ha'm o'lshevw da'lligin joqari'lati'w ila'jlari'.

13-variant

1. Kristallografiyali'q koordinatalar, sistemalar, singoniyalar.
2. Rentgen tolqi'nlari' ushi'n ji'lli'li'q diffuziyali'q maksimumlari'. Tiykarg'i' faktlar.
3. Elektronli'q ti'g'i'zli'qti'n' qatari' usi'li'. Fure qatari'na jayi'w ha'm strukturali'q analizdin' printsiplari. Elektronli'q ti'g'i'zli'qti'n' u'sh o'lshevmli qatari'.
4. Rentgenogrammlar boyi'nsha kristalli'q bo'lekshelerdin' o'lshevmli ani'qlaw usi'llari'.
5. Pa'njerenin' tiykarg'i' vektorlari'n yamasa koordinatalar ko'sherlarin saylap ali'wdi'n' ha'r qi'yli' usi'llari'.

14-variant

1. Ashi'q simmetriya elementleri. Vintlik ko'sherler. Ji'lji'p shashi'rati'wshi' simmetriya tegisliklari'.
2. Rentgen nurlari' menen zatlaridin' ta'sirlesiwinin' uli'wmali'q kartinasi'. Juti'w koeffitsienti (ha'lsirew koeffitsienti). Filtrlar.
3. Debay usi'li'nda kristalli'q pa'njerenin' tipin ani'qlaw usi'llari'. Rentgen nurlari'ni'n' o'shiw qag'i'ydalari'.

4. Kristallografiya qatlamli tegisliklar arasidagi qatlamli boy nishda mag'li'wmatlar tiykari'nda zatti' aniqlaw.
5. Birinchi ekstinkciyani' esapqa ali'w. Ideal mozaika qatlamli kristall modeli.

15-variant

1. Translyaciya simmetriya qatlamli operaciya si'pati'nda. Translyaciya qatlamli gruppalar.
2. Kristallarda difrakciya qatlamli ushi'rag'an rentgen nurlari'ni'ni' bag'i'ti'.
3. Elektronli'q difrakciya apparatlari'. Elektronli'q mikroskoplar. Prinsipialli'q du'zilisi.
4. Elementar quti'dagi' shashi'raw. Strukturali'q faktor. Tiykarg'i' formulalar.
5. Neytronlar da'stelerinin' derekleri.

16-variant

1. Elementar quti'dagi' simmetriya elementlerin generaciya qatlamli. Simmetriya elementleri qosi'w haqqi'ndagi' teoremlar.
2. Rentgen nurlari'ni'ni' ionlastiri'w ta'siri ha'm intensivlikni' aniqlawdi'n' ionizaciya qatlamli usi'li'. Ionizaciya qatlamli kameralar.
3. Bregg-Vulf ten'lemesi. Vektorli'q formadagi' difrakciyani'n' ten'lemesi.
4. Simmetriya qatlamli operaciya qatlamli. Simmetriya qatlamli operaciya qatlamli'n' gruppani' payda etetug'i'nli'g'i'. Gruppali'q aksiomalar. Simmetriyani'n' noqatli'q gruppasi'.
5. Belgisiz kristall qatlamli strukturani' rasshifrovkalawdi'n' fizika qatlamli tiykarlari' ha'm izbeizligi.

17-variant

1. 32 dana noqatli'q gruppalar qatlamli ta'riy qatlamli. Kristallografiya qatlamli klasslar.
2. Keri pa'njere. Keri pa'njere ko'rinishidagi difrakciya qatlamli sxemalar.
3. Kristall qatlamli'n' strukturasi'n difrakciya qatlamli izertlewde qollani'latug'i'n nurlar ha'm olardi'n' derekleri.
4. Ken'islikni' si'zi'qli' tu'rlendiriw. Parallel tu'rdegi ji'lji'w yamasa translyaciya.
5. Polikristall qatlamli difrakciya qatlamli izertlew usi'llari'. Izertlewlerdin' ma'nisi menen maqsetleri. Polikristall qatlamli u'lginin' (yamasa untalg'an kristall qatlamli'n') rentgenogrammasi'. Debay (Debye-Scherrer) usi'li'.

18-variant

1. Rentgen nurlari'ni'ni' elektronlardagi' shashi'rawi'.
2. Birdey bolg'an simmetriya ko'sherleri arasidagi' mu'mkin bolg'an mu'yeshler.
3. Laue usi'li'. Laue usi'li' kristall qatlamli'n' simmetriyasi'n aniqlawg'a mu'mkinshilik beretug'i'n tiykarg'i' usi'l si'pati'nda. Usi'ldi'n' ideyasi'. Interferenciya qatlamli kartinani'n geometriyasi'. Zonal qatlamli iymeklikler.
4. Fure tolqi'nlarini'ni'ni' qa'siyeti ha'm kristall qatlamli'n' keri pa'njeresi.
5. Polikristall qatlamli'n' rentgenogrammasi'n teoriya qatlamli esaplaw.

19-variant

1. Elementar quti'ni' saylap ali'wdi'n' usi'llari'. Brave pa'njereleri.
2. Diffuziya qatlamli maksimumlar kartinasi' menen kristall qatlamli'n' strukturasi' arasidagi' baylani's.
3. Atomli'q faktor ha'm elektronlardi'n' tarqali'wi'. Erkin atomlar ushi'n atomli'q faktordir esaplaw.
4. Pa'njerenin' simmetriya elementlerinin' ja'rdeminde ori'nlanatug'i'n tu'rlendiriwler. Noqatni'n' tu'rlendiriliwi.

5. Elektronli'q-mikroskopiyali'q kontastti'n' payda boli'wi'ni'n' kinematikali'q ha'm dinamikali'q teoriyalari'ni'n' tiykarlari'.

20-variant

1. Tu'yinlik tuwri' menen tu'yinlik tegisliktin' perpendikulyarli'g'i' menen parallelligi sha'rti.

2. Rentgen nurlari'. Rentgen nurlari' derekleri. Strukturali'q analiz ushi'n qollani'latug'i'n rentgen trubkalari'ni'n' konstrukciyasi'ni'n' o'zgeshelikleri.

3. Laue usi'li'nda monokristaldi'n' orientirovkasi'n' ani'qlaw.

4. Rentgen nurlari'ni'n' "kishi" kristallardag'i' shashi'rawi' (absorbciya menen ekstinkciyani' esapqa almag'an jag'day). Intensivliktin' maksimumi'ni'n' ken'ligi.

5. Rentgenstrukturali'q analiz ushi'n polikristalli'q u'lgilerdi tayarlaw.

21-variant

1. Ken'islikti si'zi'qli' tu'rlendiriw. Ko'sher do'geregindegi buri'w.

2. Rentgenogrammlardi'n' simmetriyasi'. Lauegrammalardi'n' simmetriyasi'. Laue klasslari'.

3. "Utnalg'an" kristallar (polikristallar) usi'li' ushi'n qaytalani'w faktori'.

4. Difrakciyani'n' keri ma'selesi haqqi'nda. Fure sintezi. Patterson Sintezi.

5. Elektron mikroskopi'ndag'i' kontastti'n' payda boli'wi'ni'n' fizikali'q tiykarlari'. Ten'dey qali'n'li'qlar jolaqlari'.

22-variant

1. Strukturali'q analiz ushi'n arnalg'an rentgen apparatlari' ha'm kameralari'.

2. Keri pa'njerenin' konfiguraciyasi' ha'm simmetriyasi'ni'n' ken'isliklik gruppasi'.

3. Strukturali'q amplitudalardi' tallaw. Sistemali'q o'shiwler. Strukturali'q faktor formulalari' ushi'n dara jag'daylar.

4. Neytronografiyani'n' o'zine ta'n optikali'q o'zgeshelikleri. Neytronlar da'stesin registraciyalaw usi'llari'.

5. Rentgen nurlari'ni'n' shashi'rawi'. SHashi'rawdi'n' elementar akti.

23-variant

1. Keri pa'njere tu'yinlerinin' formasi' ha'm o'lshemleri. Tuwri' ha'm keri pa'njerenin' konfiguraciyalari' arasi'ndag'i' baylani's.

2. Rentgen nurlari' ha'm elektronlar ushi'n shashi'rawdi'n' atomli'q faktori'.

3. Idealli'q kristall. Birinshi ekstinkciya.

4. Monokristallardan ali'ng'an rentgenogrammalardi' esaplawdag'i' sistemali'q izbe-izlik (kristaldi'n' orientirovkasi'n, turaqli'lari'n ha'm Bragg pa'njeresinin' tipin ani'qlawdag'i' izbe-izlik).

5. Aylani'w (terbeliw) usi'li'. Rentgenogrammalardi' indekslew. Aylani'w (terbeliw) usi'li'ni'n' ja'rdeminde ayi'ri'm kristallardi'n' simmetriyasi'ni'n' ken'isliktegi gruppasi'n ani'qlaw mu'mkinshilikleri.

24-variant

1. Rentgen reflekslerdin' intensivligi. Rentgen nurlari'ni'n' kristallardi'g'i' shashi'rawi'ni'n' dinamikali'q teoriyasi'ni'n' elementleri.

2. Rentgen nurlari'nan, neytronlardan qorg'ani'w ha'm dozimetriya tiykarlari'.

3. Strukturali'q analizdegi eksperimentalli'q bag'darlar. Monokristallar ha'm polikristallardag'i' rentgen nurlari'ni'n' difrakciyasi'ni'n' o'zgeshelikleri.

4. Ayi'ri'm dislokatsiyalardi'n' ha'm dislokatsiyali'q strukturalardi'n' qanday xarakteristikalari' elektronli'q-mikroskopiyali'q izertlewlerdin' bari'si'nda ani'qlanadi'?
5. Elektronli'q mikroskop penen elektronografti'n' du'zilisini' principialli'q o'zgeshelikleri. Mikroifraksiya rejimi.

25-variant

1. Elektronli'q mikroskopiyali'q izertlewlerde kristalli'q folgalardagi' dislokatsiyalardi'n' ti'g'i'zli'g'i'n ha'm Byurgers vektori'n ani'qlaw usi'llari'.
2. Kristalli'q pa'njerenin' xarakteristikalari' Aylani'w (terbeliw) usi'li'. Usi'ldi'n' ideyasi'. Qatlamli'q si'zi'qlar. Kristalli'q pa'njerenin' parametrlarin ani'qlaw.
3. Elektronogrammalar boyi'nsha ha'r qi'yli' kristalli'q fazalardi'n' pa'njereleri arasi'ndagi' orientatsiyali'q qatnaslardi' ani'qlaw usi'llari'.
4. Rentgen difraktometrde difraksiyalı'q si'zi'qlardi'n' integralli'q intensivligin ani'qlaw usi'llari'.
5. Epigrama boyi'nsha monokristaldi'n' kristallografiyalı'q bag'i'tlari'n ani'qlaw.

"Qatti' denelerdi difraksiyalı'q izertlew usi'llari'" pa'ni boyi'nsha lektsiyalar tekstleri

**Eskertiw: barli'q lektsiyali'q sabaqlar noutbuk penen elektronli'q
videoproektordi'n' ja'rdeminde o'tiledi.**

1-bo'lim. Kristallografiya elementleri.

1.1-bap. Translyatsiyali'q pa'njereni geometriyalı'q ta'riyplew. Tiykarg'i' tu'sinikler ha'm terminler

Tu'yinler pa'njeresi

Uli'wmali'q eskertiwler. Kristallardi' ta'riyplew ushi'n qollani'latug'i'n en' da'slepki quri'lma tu'yinlerdin' u'sh o'lishemli translyatsiyali'q pa'njeresi boli'p tabi'ladi' (1.1.1-su'wret). A'dette noqat penen sa'wlelendirilgen pa'njerenin' bir tu'yini koordinatalı'q komplanar emes bag'i'tlar tori'ni'n bazasi'nda sheksiz ko'p ret qoyi'li'p shi'g'i'lg'an element boli'p tabi'ladi'. Usi' jag'dayg'a baylani'sli' bir neshe eskertiwlerdi keltirgen maqsetke muwapi'q boladi'.

- Noqat tu'rindagi pa'njerenin' tu'yini translyatsiyalardi' tek simmetriyalı'q operatsiya tu'rinde paydalani'li'w mu'mkin bolg'an simvol tu'rinde xi'zmet etedi.

- En' da'slepten-aq mi'na jag'daydi' esapqa ali'w kerek: toli'q kristallografiyalı'q ko'z-qarasta turi'p tu'sindirgende translyatsiyali'q pa'njerenin' tu'yini tu'sinigi noqatti'n' matematikalı'q sheksiz kishi radiusqa iye obrazi'na sa'ykes kelmeydi. Eger ko'rgizbeli tu'rdegi ko'z-qaraslarda qalatug'i'n bolsaq, onda kristalli'q ken'isliktegi koordinatalari'ndagi' qa'legen noqat sferali'q formag'a iye "ju'da' kishi" figuralar emes, al olar to'menirek simmetriyag'a iye figuralar boli'p tabi'ladi'. To'mende quti'ni'n' ishindegi koordinatalari' berilgen noqatlardi'n' uli'wma jag'daylarda asimmetriyalı'q geometriyalı'q obrazg'a sa'ykes keletug'i'nli'g'i' ko'rsetiledi.

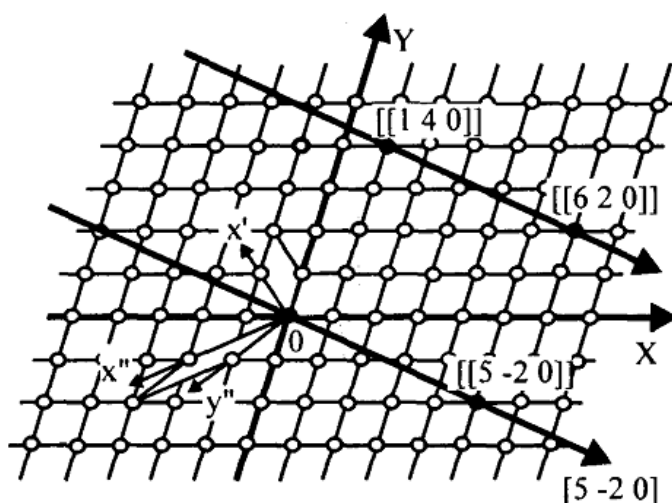
Ju'da' di'qqat penen qaraw kerek bolg'an jag'day "translyatsiyali'q (kristalli'q) pa'njere" tu'sinigi menen "kristalli'q struktura" tu'siniklari bir birinen ani'q tu'rde ayi'ri'wdi'n' za'ru'rli ekenligi menen baylani'sli'. Pa'njerenin' tu'rleri, olardi'n' berilgen o'lishemlerge iye

ken'isliktegi sanlari' ko'rgizbeli geometriya (intuitive geometry) bo'limine tiyisli matematikali'q ma'seleler qatari'na kiredi. Atomli'q-kristalli'q struktura fizika menen ximiya'ga tiyisli bolg'an sapali'q jaqtan pu'tkilley basqa tu'sinik. Ani'qlang'an strukturalardi'n' sani' onlag'an mi'n'g'a jetedi. Al taza elementler ushi'nqollani'latug'i'n bir neshe a'piwayi' mi'sallarda g'ana quti'dag'i' barli'q atomlardi'n' iyelegen ori'nlari' pa'njerenin' tu'yinlerinin' ori'nlari'na sa'ykes keledi. Bazi' bir qollanbalardag'i' paydalani'li'p kiyati'rg'an "quramali' pa'njere", "pa'njerenin' bazisi" tu'siniklari ko'p sanli' atomli'q strukturalardi' racionalli'q tu'rde tallawg'a tiykar bola almaydi'.

Bul bapta translyaciyali'q pa'njerenin' ba'rshe ta'repinen kabi'l etilgen ta'riyipleniwinin' geometriyali'q, ko'birek terminologiyali'q aspektlari qarap o'tiledi. Simmetriya prinsipleri izbe-iz qollani'latug'i'n ken' tu'rdegi tiykarlaw mashqalalari' bunnan keyingi baplardi'n' predmeti boli'p tabi'ladi'.

Elementar quti'. Ma'seleni abstraktli'q tu'rde qoyg'anda u'sh o'lshepli pa'njerenin' tuyinlari parallelepipedlerdin' to'beleri dep esaplanadi'. Usi'nday jollar menen saylap ali'ng'an parallelepipedquti' boli'p tabi'ladi' ha'm oni' o'zine parallel tu'rde ko'shiriw arqali' pa'njereni payda etedi.

Kristalli'q pa'njerenin' formalli'q su'wreti a'dette 1.1.1-su'wrettegi du'zilistin' ja'rdeminde tu'sindiriledi. Bunday jag'dayda u'sh **a, b, c** vektorlari'ni'n' ji'ynag'i' elementar uti'ni'n' parallel ko'shiriwlerdin' masshtablari'n ha'm bag'i'tlari'n ani'qlaydi'. Bul translyaciyali'r sheklenbegen halda saylap ali'ng'an koordinatalardi'n' basi'nda jaylasqan baslang'i'sh tu'yindi sheksiz ko'p ko'beytedi. Usi'nday jollar menen payda bolg'an tu'yinlerdin' ken'isliklik konfiguraciyasi' a'piwayi' translyaciyali'q pa'njere si'pati'nda ta'riyiplenedi. Bunday du'zilistin' masshtablari' bolg'an $a, b, c, \alpha, \beta, \gamma$ shamalari' paydalani'lg'an bazislik vektorlardi'n' skalyar xarakteristikalarini beredi. Olardi' kristalli'q pa'njerenin' turaqli'lari' (yamasa "da'wirleri", "parametrleri") dep ataydi'. Bazislik vektorlardi' saylap ali'w berilgen pa'njereni ha'm "bir quti'g'a" sa'ykes keliwshi tu'yinler sani'n ko'rgizbeli tu'rde ta'riyiplew ushi'n elementar parallelepipedtin' xarakterli tu'rin ani'qlaydi'. Mi'sali' parallelepipedtin' to'belerinin' ha'r biri qon'si'las segiz quti' ushi'n uli'wmali'q boladi'. Soni'n' na'tiyjesinde bir elementar quti'g'an tek bir tu'yin g'ana saykes keledi dep esaplaw mu'mkin. A'piwayi' emes quti'larda qaptallardi'n' (parallelogrammlardi'n') oraylari'nda yamasa quti'ni'n' (parallelepipedtin') oraylari'nda tu'yinler boladi'. To'mende qabi'l etilgen nomenklatura boyi'nsha quti'lardi'n' ha'r qi'yli' tiplari ta'riyiplenedi.



1.1.1-su'wret.
XY koordinatali'q tegisligindegi
tu'yinlerdin' translyaciyali'q
pa'njeresi.

Elementar palallelepipedlerdin' qabi'l etilgen belgileniwleri:

R – a'piwayi' quti', tu'yinler parallelepipedtin' tek to'belerinde jaylasqan; translyaciya vektorlari' **a**, **b**, **c** shamalari' boli'p tabi'ladi'; yuir elementar quti'g'an tek bir tu'yin sa'ykes keledi.

r – eki o'lshemli a'piwayi' pa'njere.

A – qaptalda oraylasqan quti', tu'yinler parallelepipedtin' to'belerinde g'ana emes, al Y0Z koordinata tegisligine parallel bolg'an qaptallardi'n' oraylari'nda da jaylasqan; **a**, **b**, **c** translyaciya vektorlari' saqlanadi', bul translyaciya vektori'na $(\mathbf{b} + \mathbf{s})/2$ translyaciya vektori' qosi'ladi'; bir elementar quti'g'a eki tu'yin sa'ykes keledi

Kristallografiyali'q kestelerde koordinata ko'sherlerin saylap ali'wg'a baylani'sli' to'mendegidey belgilewler de qollani'ladi':

V – qaptalda oraylasqan $(\mathbf{a} + \mathbf{s})/2$ arnawli' vektori'na iye.

S – bazada oraylasqan $(\mathbf{a} + \mathbf{b})/2$ arnawli' vektori'na iye.

s – eki o'lshemli oraylasqan pa'njere.

I – ko'lemde oraylasqan quti'; qosi'msha tu'yin parallelopipedtin' orayi'nda jaylasqan; arnawli' translyaciya vektori' $(\mathbf{a} + \mathbf{b} + \mathbf{s})/2$; bir elementar quti'g'a eki tu'yin sa'ykes keledi.

F – qaptalda oraylasqan quti'; tu'yinler barli'q qaptallardi'n' oraylari'nda bar; u'sh arnawli' translyaciya vektorlari' bar $(\mathbf{a} + \mathbf{b})/2$, $(\mathbf{a} + \mathbf{s})/2$, $(\mathbf{b} + \mathbf{s})/2$; bir elementar quti'g'a to'rt tu'yin sa'ykes keledi.

1.1.2. Orientაციyali'q xarakteristikalar (indekslew)

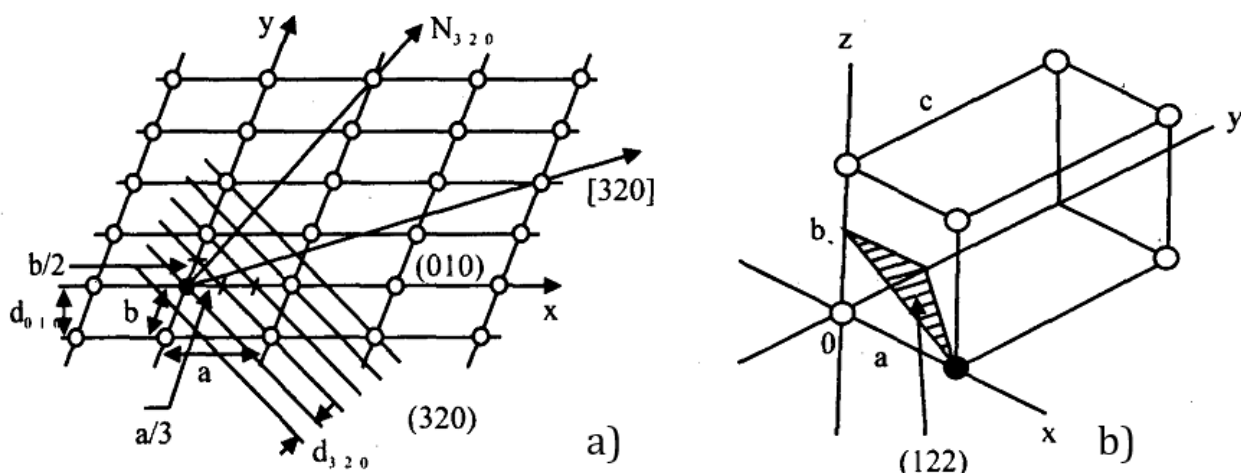
Tu'yinlik tuwri'lardi'n' indeksleri. Quti'ni'n' to'besindegi tu'yinnin' iyelegen orni'ni'n' koordinatasi' koordinata basi'nan baslap "adi'mlar sani'" na ten' (bul sanlar u'sh pu'tin ma'niske iye m, n, p translyaciyalari' boli'p tabi'ladi'). Bul sanlar eki kvadrat qawsi'rmag'a ali'p jazi'ladi' ha'm olar arasi'na u'tir qoyi'lmaydi'. Racionalli'q tu'yinlik tuwri'ni' barli'q waqi'tta da eki tu'yin arqali' o'tkeriw mu'mkin. Mi'sali' [[140]] ha'm [[620]]. Bul tu'yinlik tuwri'ni'n' boyi'nda principinde sheksiz ko'p sanli' tu'yinlerdin' boli'wi' mu'mkin (1.1.1-su'wret). Bul tuwri'ni'n' indekslerin ani'qlaw ushi'n tuwri'ni' o'z-o'zine parallel qaldi'ri'p koordinata basi'ndag'i' nollik tu'yin de jaylasatug'i'nday etip ko'shiremiz. Endi usi' tuwri' koordinata basi'nan keyin u'stinen o'tetug'i'n birinshi tu'yinnin' koordinatalari' [[5 -2 0]] usi' tu'yinlik tuwri'lardi'n' semeystvosi'ni'n' indekslerin ani'qlaydi'. Bul indekslerdi [5 -2 0] tu'rinde jazami'z. Bunday belgilewlerde koordinata basi'nan shi'g'atug'i'n $\mathbf{R} = m\mathbf{a} + n\mathbf{b} + p\mathbf{c}$ radius-vektori'ni'n' xarakteristikasi' bir kvadrat qawsi'rmalardag'i' [m n p] indeksleri si'pati'nda belgilenedi.

Qaytalani'w da'wiri (birdeylik da'wiri). Ha'r bir tu'yinlik tuwri'ni' da'wirli bir o'lshemli dizbek tu'rinde qaraw mu'mkin. Qaytalani'w da'wiri I_{mnp} oni'n' o'lshemlik xarakteristikasi' boi'p xi'zmet etedi. Bul o'lshemlik xarakteristika bul semeystvog'a kiriwshi koordinata basi'nan o'tetug'i'n si'zi'qtag'i' birinshi tu'yinnin' radius-vektori'ni'n' moduline ten': $I_{mnp} = |\mathbf{R}_{mnp}|$.

Atap aytqanda [110] ha'm [111] tipindegi diagonalli'q bag'i'tlardag'i' qaytalani'w da'wirin o'lshew arqali' eksperimentte oraylasqan elementar quti'ni' ayi'ri'w ha'm pa'njerenin' tipin ani'qlawg'a mu'mkinshilik beredi. Bunday terminologiyadag'i' pa'njerenin' turaqli'lari' **a**, **b**, **c** lar X, Y, Z ko'sherleri, yag'ni'y [100], [010], [001] bag'i'tlari'ndag'i' kaytalani'w da'wirleri boli'p tabi'ladi'. Tu'yinlik tuwri'ni'n' indekslerinin' sanli'q ma'nislari' u'lkeygende I_{mnp} qaytalani'w da'wirinin' ma'nisi de u'lkeyedi.

Tegisliklerdin' indeksleri. Pa'njere tu'yinleri arqali' o'tetug'i'n tegislikler sistemasini'n' sistemasin' qaraymi'z. Qa'legen racionalli'q tegislikti pa'njeredegi qa'legen u'sh tu'yin arqali' o'tkeriw mu'mkin. Principinde bul tegisliktin' betinde sheksiz ko'p tu'yinler jatadi'. Tu'yinlik tegisliktin' orientაციyasi'n (bag'i'ti'n) koordinata basi'nan o'tetug'i'n ha'm usi' tegislikke normal bag'i'tlang'an vektor ani'qlaydi'. Bul vektordin' boyi'ndag'i' qon'si'las eki tegislik arasi'ndag'i' qashi'qli'q tegislikler arasi'ndag'i' qashi'qli'q

d ni' beredi. Sonli'qtan pa'njereni bir birinen ten'dey qashi'qli'qta joylasqan bir birine parallel tu'yinlik tegisliklerdin' sistemasi' dep qaraw mu'mkin (1.1.2-a su'wret). Tegisliktin' orientაციyasi'ni'n' xarakteristikalari' si'pati'nda Miller indeksleri qollani'ladi'. Bul indeksler pa'njeredegi a'piwayi' geometriyalı'q qatnaslarg'a tiykarlang'an. Buni'n' ushi'n bir birine parallel tu'yinlik tegisliklerdin' ishinen koordinata basi'na en' jaqi'n joylasqan tegislik saylap ali'nadi'. Ha'r bir koordinata ko'sherinde bul tegislik $a/h, b/k, c/l$ bazislik vektori'ni'n' pu'tin ma'niske iye bo'leshindey kesindi kesip aladi'. Usi'nday jollar menen ali'ng'an a'piwayi' pu'tin u'sh san (hkl) tegisliginin' indeksi si'pati'nda xi'zmet etedi. Bul sanlar pa'njere ko'sherlerindeki bir birine parallel tu'yinlik tegislikler sistemasi'ni'n' bahi'ti'n ta'riyixleydi. Tegisliklerdi indekslewge mi'sallar 1.1.2-a su'wrette keltirilgen. Bul sxemada Z ko'sheri si'zi'lma tegisligine perpendikulyar etip ali'ng'an. Usi' jag'dayg'a sa'ykes Z ko'sherine parallel bolg'an barli'q tegislikler semeystvosi' ushi'n $l = 0$. Uli'wmaraq jag'day. 1.1.2-b su'wrette keltirilgen.



1.1.2-su'wret. Kristallografiyalı'q tegisliklerdi indekslewge mi'sallar. a) tegislik 0Z ko'sherine parallel, b) uli'wmali'q jag'day.

Tegislikler arasi'ndag'i' qashi'qli'q. Pa'njerenin' parametrleri berilgen bolsa tegislikler arasi'ndag'i' qashi'qli'q tegisliklerdin' usi' sistemasi'ni'n' indekslerinin' ja'rdeminde ani'qlanadi'. Ortogonalli'q pa'njereler ushi'n bunday baylani's

$$1/d^2 = (h/a)^2 + (k/b)^2 + (l/c)^2$$

kvadratli'q formasi'ni'n' ja'rdeminde ani'qlanadi'. Kubli'q singoniya ushi'n d menen Miller koefficientleri arasi'ndag'i' baylani's en' a'piwayi'si' boli'p tabi'ladi':

$$1/d^2 = (h^2 + k^2 + l^2)/a^2.$$

Barli'q singoniyalar ushi'n qollani'w mu'mkin bolg'an formula mi'na tu'rge iye boladi':

$$\begin{aligned} 1/d^2 &= [s_{11}h^2 + s_{22}k^2 + s_{33}l^2 + s_{12}hk + s_{23}kl + s_{13}hl]/V^2, \\ V^2 &= a^2b^2c^2[1 - \cos^2(\alpha) - \cos^2(\beta) - \cos^2(\gamma) + 2\cos(\alpha)\cos(\beta)\cos(\gamma)], \\ s_{11} &= b^2c^2\sin^2(\alpha); s_{22} = a^2c^2\sin^2(\beta); s_{33} = a^2b^2\sin^2(\gamma); \\ s_{12} &= abc^2[\cos(\alpha)\cos(\beta) - \cos(\gamma)]; s_{23} = a^2bc[\cos(\beta)\cos(\gamma) - \cos(\alpha)]; \\ s_{13} &= ab^2c[\cos(\gamma)\cos(\alpha) - \cos(\beta)] \end{aligned}$$

yamasa

$$d_{hkl} = \left[\frac{\left| \frac{h}{a} \cos \gamma \cos \beta \right| + \frac{k}{b} \left| \cos \gamma \frac{k}{b} \cos \alpha \right| + \frac{l}{c} \left| \cos \gamma \cos \alpha \frac{l}{c} \right|}{\left| \frac{h}{a} \frac{k}{b} 1 \cos \alpha \right| + \left| \frac{k}{b} \cos \gamma \frac{l}{c} 1 \right| + \left| \frac{l}{c} \cos \gamma 1 \frac{k}{b} \right|} + \frac{\left| \frac{1}{a} \cos \gamma \cos \beta \right| + \frac{k}{b} \left| \cos \gamma \frac{k}{b} \cos \alpha \right| + \frac{l}{c} \left| \cos \gamma \cos \alpha \frac{l}{c} \right|}{\left| \frac{1}{a} \cos \gamma \cos \beta \right| + \left| \cos \gamma \frac{k}{b} \cos \alpha \right| + \left| \cos \gamma \cos \alpha \frac{l}{c} \right|} \right]^{-1/2}$$

Joqari'da keltirilgan formulalardan en' u'lken d ni'n' {100} tipidagi koordinatali'q tegisliklarga sa'ykes keletug'i'nli'g'i' ko'rinip tur; barli'q jag'daylarda da indekslerdin' san ma'nislerinin' u'lkeyiwi tegisliklar arasi'ndag'i' qashi'qli'qlardi'n' kemeyiwine ali'p keledi; a'piwayi' ha'm oraylasqan pa'njereler arasi'ndag'i' ayi'rma bul jerde ko'rinbeydi. A'meliy ma'selelerdi sheshkende tu'yinlik tuwri'lardi'n' ha'm tegisliklerdin' indeksler arasi'ndag'i' baylani'sti'n' ori'n alatug'i'nli'g'i' na'zerde tuti'w kerek.

Tegislikler zonasi'. Eger tegislik koordinatalar ko'sherinin' birine parallel bolatug'i'n bolsa, onda sa'ykes indeks nolga aylanadi'. Usi'ni'n' na'tiyjesinde Z koordinatali'q ko'sheri indeksleri [001] bolg'an tuwri' boli'p tabi'ladi'. Al bul tuwri' bolsa indeksleri (hk0) bolg'an barli'q tegisliklerdin' kesilisiwinin' geometriyalig'i' orni' boli'p tabi'ladi'.

Barli'q singoniyalar ushi'n indeksleri [mnp] bolg'an tuwri' menen indeksleri (hkl) bolg'an tegisliktin' parallelligini' uli'wmali'q sha'rti bar: mh + nk + pl = 0. Usi'nday qatnasti' qanaatlandi'ratug'i'n tegisliklerdin' ji'ynag'i' tegisliklerdin' zonasi' tegisliklerdin' zonasi' si'pati'nda belgilenedi, al sa'ykes [mnp] tuwri'si' zonani'n' ko'sheri boli'p tabi'ladi'.

Qa'legen eki (h₁k₁l₁) ha'm (h₂k₂l₂) tegisliklar ushi'n olardi'n' "baylani'sti'ratug'i'n" zonani'n' ko'sherleri a'piwayi' u'sh sanni'n' ji'ynag'i' si'pati'nda

$$\begin{aligned} mh_1 + nk_1 + pl_1 &= 0, \\ mh_2 + nk_2 + pl_2 &= 0 \end{aligned}$$

ten'lemelerinin' ja'rdeminde ani'qlanadi'.

Normaldi'n' indeksleri haqqi'nda. Tek kubli'q pa'njerenin' konfiguratsiyasi'nda g'ana (hkl) tegisligine tu'sirilgan normal barli'q waqi'tta da indeksleri

$$m = h, n = k, p = l$$

bolg'an tu'yinlik tuwri'g'a sa'ykes keledi. Uli'wma jag'dayda basqa singoniyalar ushi'n tu'yinlik tegislikke tu'sirilgan normal racionallig'i' inleksi'larga iye tu'yinlik tuwri' si'pati'nda ta'riyiplene almaydi'. Illyustratsiya si'pati'nda 1.1.2-a su'wrette [320] tu'yinlik tuwri'si'ni'n' bag'i'ti' menen (320) tegisligine tu'sirilgan normaldi'n' bag'i'ti'ni'n' parallel emes ekenligi ko'rsetilgan. Soni'n' menen birge d₀₁₀ tegisliklar arasi'ndag'i' qashi'qli'qti'n' "b" parametri menen sa'ykes kelmeytug'i'nli'g'i' da ko'rinip tur.

Kristallografiyani'n' sistemikasi'

Pa'njerenin' geometriyalig'i' xarakteristikalarini' kristallografiyalig'i' klassifikatsiyadag'i' logikalig'i' izbe-izligini' tu'sindirig'i' mu'mkinshilik beredi.

Singoniya (singoniyalar sani' 7). Kristalli'q sistema – singoniya en' baslang'i'sh xarakteristika boli'p tabi'ladi'. En' a'piwayi' ta'riyiplewde belgili bir sistemag'a tiyisililiktiki kristallografiyalig'i' koordinatalar ko'sherleri arasi'ndag'i' mu'yeshlar menen elementar quti'ni'n' ayi'ri'm parametrlari arasi'ndag'i' ten'lik qatnaslar ani'qlaydi'. 1.1-kestede

keltirilgen elementar quti'lardi' saylap ali'w di'n geometriyalig' sha'rtleri bir o'lshemli (1D), eki o'lshemli (2D), u'sh o'lshemli (3D) pa'njereler ushi'n bazislik vektorlardi'n konfiguratsiyalari'n ta'riyipleydi. U'sh o'lshemli strukturalar ushi'n yeti singoniya ori'n aladi': triklinlik, monoklinlik, (orto)rombaliq, tetragonallig, trigonallig (romboedrlig), geksagonallig, kublig. "Rangasi'" boyi'nsha en' to'mengi singoniya triklinlik singoniya boli'p tabi'ladi'. Bunday singoniya ushi'n pa'njeredegi ayri'qsha qatnaslar ori'n almaydi' ha'm bazislik vektorlar ushi'n sheksiz ko'p sanlag'i variantlardi'n saylap ali'ni'wi' mu'mkin. Mi'sali', 1.1.1-su'wrettegi sxemada bir to'besi koordinata basi'nda jaylasqan ko'p sandag'i parallelogrammlar ko'rsetilgen. Olardi'n ha'r qaysi'si' triklinlik a'piwayi' quti' ushi'n elementar quti' boli'p xi'zmet ete aladi'. Bul jag'dayda koordinatalig ko'sherler arasi'ndag'i mu'yeshlin' ma'nisine qoyi'latug'i'n shek joq ekanligin atap o'temiz. Sonli'qtan gipotezaliq strukturalarda ha'tte kvadratlig elementar quti'g'a yie pa'njere de triklinlik singoniyag'a tiyisli bola aladi'.

Noqatliq gruppalar (sani' 32). Atomliq struktura ko'z-qaraslari'nda joqari'da keltirilgen mi'sal geometriyalig strukturani'n singoniyani' saylap ali'w ushi'n jetkilikli belgi boli'p tabi'lmaytug'i'nlig'i ko'rsetedi. Singoniyani' berilgen struktura ushi'n simmetriyani'n mu'mkin bolg'an tu'rlendiriwleri ani'qlaydi'. Al quti'ni'n formasi' bolsa bul qa'siyetti tek sa'wlelendiriwi kerek. Bunday traktovkada ha'r bir singoniya noqatliq gruppalardi'n birlespeleri boli'p qaladi'. Al noqatliq grupp (simmetriyani'n noqatliq gruppasi') bolsa simmetriyalig operatsiyalardi'n berilgen qosi'ndi'si'nan turatug'i'n shekli ta'rtiptegi ko'plik si'pati'nda xi'zmet etedi. 1.1-kestede bul rubrikatsiya berilgen. Translyatsiyaliq pa'njerelerdegi simmetriyalig tu'rlendiriwlerdin' qa'siyetlerinin' principiallig tiykarlari' 1.2-bapta tallanadi'.

Brave pa'njereleri (yamasa translyatsiyaliq gruppalar, sani' 14). Mu'mkin bolg'an elementar quti'lardi' ta'riyiplegende da'slep ko'rgizbeli geometriyalig ta'repi ayi'rip ko'rsetiledi. U'sh o'lshemli ken'islik ushi'n formal tu'rde ko'rsetiw ushi'n ha'r bir singoniyani'n a'piwayi' pa'njerelerine monoklinlik, ortorombaliq, tetragonallig ha'm kublig singoniyadag'i ja'ne yeti oraylasqan pa'njere qosi'ladi' (1.1-kesteg qaran'i'z). Usi'g'an sa'ykes eki o'lshemli torlar ushi'n bes a'piwayi' quti'ni'n ha'm oraylasqan pa'njerenin' biri (bul tuwri' mu'yeshli pa'njerede) ori'n ali'wi' mu'mkin. To'mende translyatsiyaliq pa'njereler sheksiz ta'rtpili simmetriya gruppalari' si'pati'nda traktovkalanadi'.

Ken'isliklik gruppalar (ken'isliklik gruppalar sani' 230). Bul kristallig pa'njerenin' simmetriyasi'ni'n ha'm atomliq strukturani'n barliq qa'ddileri ushi'n birlestiriwshi sistema boli'p tabi'ladi' Sheksiz ta'rtpili bul gruppalar bazasi'nda kristallardi'n strukturasi'ni'n toliq standart ta'riyipleniwi tiykarlang'an. To'mende (1.3-bapta) translyatsiyaliq ha'm ken'isliklik gruppalardi'n o'zgeshelikleri sistemali' tu'rde bayanlanadi'.

1.1-keste. Kristallig sistemalar. Simmetriya gruppalari'. Brave pa'njereleri.

	Sim-vol	Singoniya	Kristallografiyalig gruppalar	Ken'islikligi grupp. sani'	Koordinatalar sistemasi'		Brave pa'njere-si
					El.quti'ni' saylap ali'w sha'rtleri	Pa'njerenin' o'lshene-tug'i'n parametrleri	
1D	-	-	1, m	2	joq	a	-
2D	m	qi'ysi'q mu'yeshli	1, 2	2	joq	a, b, γ	mp
	o	tuwri' mu'yeshli	m, 2mm	7	$\gamma = 90^\circ$	a, b	op

							oc
	t	kvadrat	4. 4mm	3	$\alpha = \beta,$ $\gamma = 90^0$	a	tp
	h	geksagonalli'q	3, 6, 3m, 6mm	5	$\alpha = \beta,$ $\gamma = 90^0$	a	hp
3D	a	triklinik	1, 1	2	joq	$a, b, c,$ α, β, γ	aP
	m	monoklinik	2, m, 2/m	13	b ayri'qsha ko'sher $\alpha = \gamma = 90^0.$	a, b, c, β	mP mS (mC, mA)
					s ayri'qsha ko'sher $\alpha = \beta = 90^0$	a, b, c, γ	mP mS (mA, mB)
	o	ortorombali'q	222, mm2, mmm	59	$\alpha = \beta = \gamma =$ 90^0	a, b, c	oP oS (oC, oA, oB) ol oF
	t	tetragonalli'q	4, -4, 4/m, 422, 4mm, 42m, 4/mmm	68	$a = b,$ $\alpha = \beta = \gamma =$ 90^0	a, c	tP tI
	c	kubli'q	23, m3, 432, 43m, m3m	36	$a = b = c,$ $\alpha = \beta = \gamma =$ 90^0	a	cP cl cF
	h	trigonalli'q	3, -3, 32, 3m, 3m	18	$a = b$ $\alpha = \beta = 90^0,$ $\gamma = 120^0$ geksago- nalli'q ko'sherler	a, c	hP
				7	$a = b = c,$ $\alpha = \beta = \gamma$ romboedr- lik ko'- sherler	a, α	hR
	h	geksagonalli'q	6, -6, 6/m, 622, 6mm, 62m, 6/mmm	27	$a = b,$ $\alpha = \beta = 90^0,$ $\gamma = 120^0$	a, c	hP

1.2-bap. Noqatli'q gruppalar

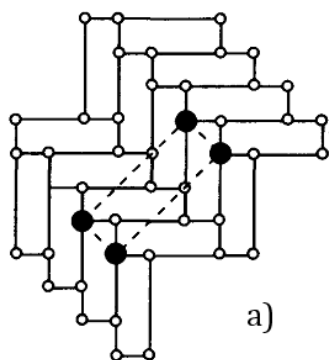
1.2.1. Simmetriyali'q tu'rlerdiriwler

Uli'wmali'q eskertiwler. Simmetriya principlerin kristallografiyani'n o'zine ta'n o'gesheliklerinin' biri boli'p tabi'ladi'. Bul principlerdi binalardi'n' quri'li'si'nda, buyi'mlardi'n' konstrukciyalari'nda basqa da tarawlarda professionalli'q penen paydalani'w ani'q tu'rde na'zerge taslanadi'. Simmetriyani'n' paydalani'wi'nda tek aynali'q simmetriyani'n' g'ana ko'zge tu'spegenligi, al oni'n' basqa da tu'rlerinin' itibarg'a ali'ng'anli'g'i'n' ani'q bilemiz. 1.2.1-su'wrette ku'ndelikli turmi'sta ayqi'n ko'rinetug'i'n 45 gradusli'q parket xarakterli mi'sal keltirilgen. Bul parket eki o'lsheмли jetkilikli da'rejedegi joqari' da'wirli simmetriyag'a iye.

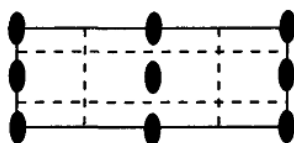
Rawajlani'wi'ni'n' da'slepki ji'llari'nda simmetriya problemalari'ni'n' islep shi'g'i'li'wi' kristallografiyali'q izertlew ushi'n u'lken a'hmiyetli ori'ng'a iye boldi'. Gyuygens penen Gayuidin' jumi'slari'nan baslap XIX a'sirdegi Brave, Fedorov, SHënflis, Gessel, Kyuri, Gadolin, Barlou ha'm basqalardi'n', bunnan keyin XX a'sirde ori'nlang'an basqa avtorlardi'n' jumi'slari'nda bul ilimiy bag'dar bilimnin' iri oblasti'ni'n' qaliplesiwine ali'p keldi. Ha'zirgi waqi'tlari' kristallografiyag'a baylani'sli' tu'sinikler menen analitikali'q usi'llardi'n' jetkilikli da'rejede rawajlang'an tarmaqlarg'a bo'lingen sistemasi' payda boldi'. Bul tarmaqlar o'z gezeginde ierarxiyali'q baylani'slarg'a, uli'wmalasqan simmetriyag'a ha'm joqari' o'lshemlerge iye ken'isliklerge shi'g'a aladi'. Biz to'mende bayanlawdi'n' logikasi' ha'm a'meliy jaqtan qollani'w ushi'n za'ru'rli bolg'an kristallografiyani'n' principialli'q bo'limin paydalanami'z.

En' basli' tiykar si'pati'nda kristaldi' diskret duri's noqatli'q sistema dep karaw ko'z-qarasi'n qabi'l etemiz. A'dettegi ko'rgizbeli formada kristalli'q pa'njereni traktovkalaw joqari'da keltirilip o'tildi. Strukturali'q kristallografiyani' ayqi'n tu'rde men'geriw ushi'n tiykarg'i' tu'siniklerdi ha'm simmetiya gruppasi'ni'n' algebrasi'n paydalani'w za'ru'r.

Buri'w ko'sherleri. Mi'naday ani'qlama kirgiziledi: simmetriyali'q tu'rlendiriw dep predmettin' keyingi awhali'n oni'n' da'slepki awhali'nday halg'a ali'p keliwshi si'zi'qli' tu'rlendiriwge aytami'z. Kristalda $M(x,y,z)$ noqati' elektronlardi'n' ti'g'i'zli'g'i' tap sonday bolg'an $M^*(x^*,u^*,z^*)$ noqati'na tu'rlendiriledi. Ma'seleni u'yreniw ushi'n qarap shi'g'i'wdi' en' baslang'i'sh elementler bolg'an buri'w ko'sherlerinen yamasa simmetriya ko'sherlerinen baslaymi'z. En' a'piwayi' ko'rgizbeli mi'sal kvadrat ultang'a iye piramida boli'p tabi'ladi'. Ultanni'n' orayi' menen to'beni tutasti'ri'wshi' piramidani'n' biyikligi simmetriya elementi – to'rtinshi ta'rtpi simmetriya ko'sheri boli'p tabi'ladi'. Bul termin mi'nani' an'g'artadi': bul ko'sherdin' do'gereginde piramidani' toli'q bir ret aylandi'rsa ol o'zinin' da'slepki hali'nday halda (da'slepki awhali'nday awhalda) to'rt ret boladi'. Basqa so'z benen aytqanda berilgen ko'sher ushi'n elementar buri'wdi'n' shamasi' 90° qa ten'. Kristalli'q pa'njere ushi'n to'mendegidey jag'daylardi'n' duri'sli'g'i'n da'lillewge boladi':



a)



b)

1.2.1-su'wret.

Parkettin' sxemasi' (a) ha'm p2gg simmetriya gruppasi' (b).

Buri'w ko'sheri racionalli'q tu'yinlik tuwri' boli'p tabi'ladi' ha'm tu'yinlik tegisliklerdin' birine perpendikulyar.

Elementar buri'w $2\cos(\alpha) = t$ (pu'tin san) ten'ligi ori'nlanatug'i'nday etip a'melge asi'ri'ladi'.

Da'lilleniwi:

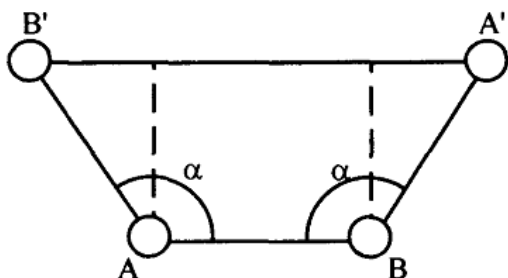
Tu'yinlik pa'njerenin' tegisliktegi fragmentin qaraymi'z (1.2.2-su'wret). AV kesindisinin' ushi' arqali' si'zi'lma tegisligine perpendikulyar bag'i'tta n-ta'rtpi simmetriya ko'sheri o'tedi. Bunday ko'sher shamas'i' $360^\circ/n$ bolg'an mu'yeshke buradi'. Elementar buri'w di' eki ret a'melge asi'rsa'q A ha'm V noqatlari'nan V* ha'm A* noqatlari'n alami'z. Bul noqatlar da tu'yinler boli'wi' kerek. Demek $A^*V^* = tAV$, bul an'latpada t arqali' pu'tin san belgilengen. Bunnan keyin

$$A^*V^* = AV + 2AB\cos(180 - \alpha) = AV(1 + 2\cos\alpha)$$

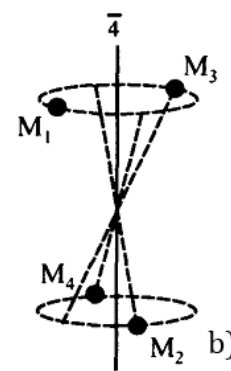
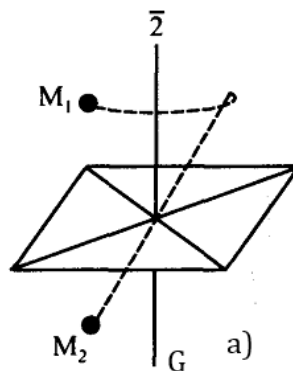
ten'liklerinin' ori'nlanatug'i'nli'g'i'n itibar beremiz. Sonli'qtan $1 + 2\cos\alpha = t$ an'latpasi'na iye bolami'z. Bunnan elementar mu'yeshlerdin' barli'q mu'mkin bolg'an ma'nisleri kelip shi'g'adi':

$\cos\alpha$	0	$\pm 1/2$	± 1
α	$[90^\circ]$	$[60^\circ], [120^\circ]$	$[180^\circ]$
ko'sherdin' ta'rtibi	4	6, 3	2

Inversiyali'q ko'sherler. Inversiya dep simmetriyani'n' mi'naday tu'rine aytami'z: bunday jag'dayda ha'r bir (x, u, z) noqati' og'an ekvivalent bolg'an $(-x, -u, -z)$ noqati' menen "simmetriya orayi'ndag'i' shag'i'li'si'w" arqali' baylani'sqan. Usi'g'an baylani'sli' kristalli'q deneler ushi'n buri'w ko'sheri menen usi' ko'sherdin' boyi'nda jaylasqan simmetriya orayi' menen kombinatsiyasi'ni'n' bar bolatug'i'nli'g'i' ko'rinip turadi'.



1.2.2-su'wret. α elementar buri'wi'na iye simmetriya ko'sherinin' ta'siri.



1.2.3-su'wret. Inversiyali'q ko'sherler: ekinshi ta'rtpi (a) ha'm to'rtinshi ta'rtpi (b).

Tap usi'nday jollar menen inversiyali'q-buri'w yamasa infersiyali'q ko'sherler kirgiziledi (1.2.3-su'wrette keltirilgen):

$\bar{1}$ inversiya orayi' (formal tu'rde ta'riyiplegende 360° qa buri'w + inversiya);

$\bar{2}$ 180° qa buri'w + inversiya; bul operatsiya aynali'q shag'i'li'sti'ri'w tegisliginin' ta'sirine ekvivalent, yag'ni'y $m = \bar{2}$;

$\bar{3}$ 120° qa buri'w + inversiya; bul operatsiyalardi'n' toli'q ji'ynag'i' $\bar{3} = 3^+$ elementlerinin' ta'sirinin' qosi'ndi'si'na ekvivalent;

$\bar{4}$ 90° qa buri'w + inversiya;

$\bar{6}$ 60° qa buri'w + inversiya; bul operaciyalardi'n' toli'q ji'ynag'i' $\bar{6} = 3 + m$ elementlerinin' toli'q qosi'ndi'si'na ten'.

Buri'w ko'sherlerinen inversiyali'q ko'sherlerdin' parqi'n atap o'temiz: inversiyali'q ko'sherdin' ta'sirin fizikali'q ju'zege keletug'i'n buri'w menen ko'rsetiw mu'mkin emes.

Solay etip translyaciya'q pa'njerenin' konfiguratsiyasi'na qarama-karsi' kelmeytug'i'n, sonli'qtan kristalli'q strukturada boli'wi' mu'mkin simmetriya elementleri menen operaciyalardi'n' dizimin (reestrin) keltiremiz:

Ko'sherler	1	2	3	4	6	$\bar{3}$	$\bar{4}$	$\bar{6}$
Inversiya ko'sheri	$\bar{1}$							
Simmetriya tegisligi	m							

Bunnan bi'lay qalap shi'g'i'latug'i'n ma'selelerde tek geometriyali'q (ko'rgizbeli) logikani' paydalani'p qoymay, gruppalar teoriyasi'ni'n' algebrali'q usi'llari'nda paydalanami'z.

Simmetriya gruppasi'ni'n' algebrasi'

Abstrakt gruppalari' ushi'n ani'qlamalardi'n' dizimi. Gruppa dep atalatug'i'n ko'plik $\{G\}$ ushi'n ori'nlani'wi' kerek to'rt gruppali'q aksioma belgili:

Ko'beytiw operatsiyasi'ni'n' bar boli'wi' $g_i \times g_j = g_k \in G$ (eger $g_i, g_j \in G$ bolsa).

Ko'beytiwdin' asociativligi $(g_i \times g_j) \times g_k = g_i \times (g_j \times g_k)$.

Birlik elementtin' bar boli'wi' $e \times g_i = g_i \times e, e \in G$.

Keri elementtin' bar boli'wi' $g_i \times g_i^{-1} = e, g_i^{-1} \in G$.

Gruppani'n' elementlerinin' ji'ynag'i' bi'layi'nsha jazi'ladi': $\{e, g_1, g_2, \dots, g_{n-1}\} \in G$.

Gruppani'n' elementlerinin' sani' n gruppani'n' ta'rtibi dep ataladi'; ta'rtibi shekli ha'm ta'rtibi sheksiz gruppalardi'n' bar boli'wi' mu'mkin.

Abel gruppasi': elementleri kommutatsiyalanadi' (yag'ni'y, ko'beymede ko'beytiwshilerdin' ori'nlarin' almasti'ri'p qoyi'wg'a boladi') ha'm ko'beytiw operatsiyasi'ni'n' izbe-izligi hesh qanday a'hmiyetke iye emes: $g_j \times g_k = g_k \times g_j$.

Ciklli'q gruppa: bunday gruppani'n' barli'q elementlerin gruppani'n' bir elementin (generatori'n) da'rejege ko'teriw arqali' ali'wg'a boladi', yag'ni'y $G = \{g, g^2, \dots, g^n = e\}$.

Gruppani'n' ko'beytiw kestesi (*Keli kvadrati'*) gruppani'n' qurami'n tallaw ushi'n qollani'ladi'

$$\begin{pmatrix} & e & g_1 & g_2 & g_3 & \cdot \\ e & e & g_1 & g_2 & g_3 & \cdot \\ g_1 & g_1 & g_1^2 & g_1 g_2 & g_1 g_3 & \cdot \\ g_2 & g_2 & g_2 g_1 & g_2^2 & g_2 g_3 & \cdot \\ g_3 & g_3 & g_3 g_1 & g_3 g_2 & g_3^2 & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \end{pmatrix}$$

$H \in G$ podgruppasi'n $l = n/h$ pu'tin san ta'riyiplenedi. Bul an'latpada h arqali' H gruppasi'ni'n' ta'rtibi belgilenedi. Bir elementti gruppani'n' barli'q elementlerine ko'beytiw $g_i G = G$ gruppa boyi'nsha ji'lji'w dep ataladi'. Bul an'latpada $g_i \in G$. Ko'beyme ushi'n keri element $(AV)^{-1} = V^{-1}A^{-1}$.

Simmetriya elementi aylani'wlardi'n' ciklli'q gruppasi' si'pati'nda. Joqarda atap o'tilgan simmetriya elementlerinin' ha'r birin bazi' bir ani'q gruppani'n' geometriyalig' simvoli' dep qarawg'a boladi'. Bul grupp bazi' bir abstrakt gruppag'a izomofli' boli'wi' kerek. Olardi' ta'riyiplew ushi'n xali'q arali'q kristallografiyalig' nomenklaturada qabi'l etilgen operaciyalardi'n' belgilerin qollanami'z. Kristallografiyalig' gruppalardi'n' qurami'ndag'i' birlik element 1 o'zine ten'lestiriw yamasa 360° qa a'piwayi' tu'rdegi aylandi'ri'w boli'p tabi'ladi'. Gruppani'n' elementlerinin' har biri buri'w operatori'na sa'ykes keletug'i'n belgige iye. Ciklli'q kristallografiyalig' gruppalar ushi'n quramalani'w bag'i'ti'nda bir qatar situaciyalardi' qarap o'temiz.

a) 1 gruppasi' en' a'piwayi' grupp, al bul grupp triklinlik singoniyani'n' en' to'mengi gruppasi' boli'p tabi'ladi'.

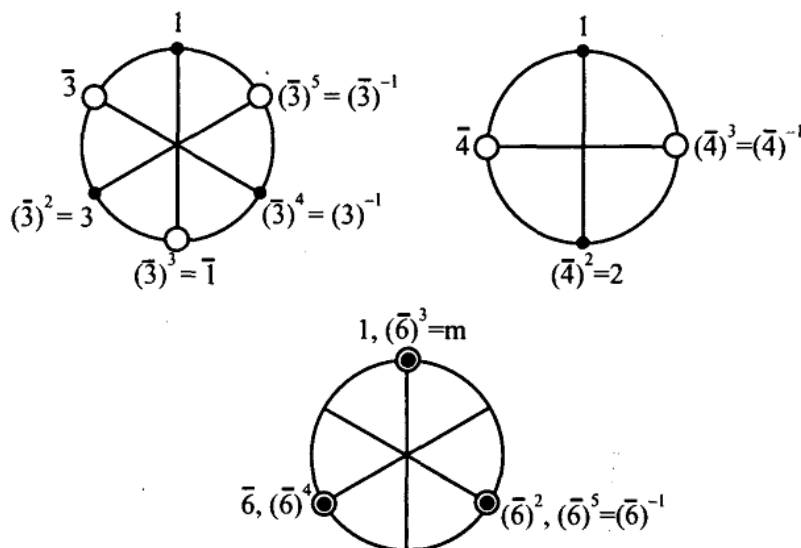
b). Bunnan keyin ekinshi ta'rtpili abstraktli'q grupp $\{e, A\}$ turadi'. Bul jag'dayda $A^2 = e$ yamasa $A = A^{-1}$ qatnasi' ori'n aladi'. Bunday sha'rtti $\bar{1} = \{1, \bar{1}\}$, $2 = \{1, 2\}$ ha'm $m = \{1, m\}$ gruppalari'qanaatlandi'radi'. Basqa so'z benen aytqanda bir absotaktli'q gruppag'a izomorfli' bolg'an u'sh aylani'w gruppalari' bar. Eger 1.1-kestege itibar beretug'ni' bolsaq, onda bul gruppalardi'n' birdey emes ekenligin an'g'ari'wg'a boladi'. Sebebi olar eki singoniyag'a – triklinlik ha'm monoklinlik singoniyalarg'a tiyisli.

c). U'shinshi ta'rtpili tek dana u'shinshi ta'rtpili kristallografiyalig' grupp bar. Bul trigonallig' singoniyani'n' $3 = \{1, 3, 3^2 = 3^{-1}\}$ ciklli'q gruppasi' boli'p tabi'ladi'. Bul jerde $3^3 = 1$ formasi'ndag'i' $A^3 = e$ qatnasi' ori'n aladi'.

d). To'rtinshi ta'rtpili abstraktli'q ciklli'q grupp $\{e, A, A^2, A^{-1}\}$ tetragonallig' singoniyani'n' eki gruppasi'nda ju'zege keledi. Bul 4 ha'm $\bar{4}$ gruppalari' boli'p tabi'ladi'. Bul gruppalarda $4^2 = 2$, $4^3 = 4^{-1}$ qatnaslari' ori'nlanadi'.

e). Alti'nshi' ta'rtpili ciklli'q gruppag'a mi'nalar izomorfli': geksagonallig' singoniyada 6 ko'sheri ha'm inversiyali'q $\bar{6}$ ko'sheri; trigonallig' singoniyada inversiyali'q $\bar{3}$ ko'sheri. Bul ko'sher $\bar{3} = \{1, \bar{3}, 3^{-1}, \bar{1}, 3, \bar{1}^{-1}\}$ qurami'na iye.

1.2.4-su'wrette keltirilgen mi'sallar joqarda keltirilgen jag'daylar ushi'n mi'sal bola aladi'.



1.2.4-su'wret. Inversiyali'q ko'sherlerdin' stereografiyalig'q proekciyalardag'i' ta'siri.

Joqari'da keltirilgen terminologiya boyi'nsha to'mendegilerdi atap o'temiz:

- simmetriya elementi buri'wdi'n' ciklli'q gruppasi'ni'n' obrazi' boli'p tabi'ladi';
- simmetriya operaciyasi' (simmetriyalig'q operaciya) simmetriyani'n' noqatli'q gruppasi'ni'n' elementi boli'p tabi'ladi';

- gruppani'n' elementlerinin' ko'beymesi dep (simmetriyalı'q operaciyalardi'n' ko'beymesi dep) operaciyalardi'n' ori'nlanı'w izbe-izligine aytami'z.

Buri'w matricasi'. Noqatli'q gruppalardi' bunnan bi'lay toli'q tu'rde qarag'ani'mi'zda operaciyalardi' matricali'q ta'riyiplewge o'tiw maqsetke muwapi'q boladi'. Bul jag'day gruppalardi' tallaw ushi'n tek ko'rgizbeli quri'lmalardi' paydani'p g'ana qoymay, standart algebrali'q tu'rlendiriwlerdi de qollani'wg'a mu'mkinshilik beredi.

Bul termonologiyada joqari'da qarap o'tilgen ha'r bir elementar buri'wg'a si'zi'qli' tu'rlendiriw operatori' – (3×3) o'lsheimga iye kvadrat matrica sa'ykes keledi:

$$\begin{pmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{13} \\ C_{21} & C_{22} & C_{23} \\ C_{31} & C_{32} & C_{33} \end{pmatrix} = (C_{ik}).$$

Bul an'latpadag'i' matrica elementleri bolg'an $C_{ik} = \cos(X_i', X_k)$ shamalari' bag'i'tlawshi' kosinuslar boli'p tabi'ladi'. Tu'rlendiriw da'slepki X_1, X_2, X_3 koordinatalar sistemasi' menen jan'a X_1', X_2', X_3' koordinatalar sistemasi' baylani'sti'radi'. Qabi'l etilgen klassifikaciya boyi'nsha buri'w matricasi' unitarli'q, haqi'yqi'y ha'm ortogonalli'q matrica boli'p tabi'ladi'. Bunday kategoriyani'n' algebrali'q belgileri

a) transponirlengen matrica kerı element si'pati'nda

$$\begin{pmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{13} \\ C_{21} & C_{22} & C_{23} \\ C_{31} & C_{32} & C_{33} \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} C_{11} & C_{21} & C_{31} \\ C_{12} & C_{22} & C_{32} \\ C_{13} & C_{23} & C_{33} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix};$$

b) matricali'q elementlerdin' bir birine g'a'rezligi:

$$\begin{aligned} C_{11}^2 + C_{22}^2 + C_{33}^2 &= 1 \\ C_{11}C_{21} + C_{12}C_{22} + C_{13}C_{23} &= 0 \end{aligned}$$

yamasa qi'sqasha tu'rde

$$\sum C_{ik} \cdot C_{jk} = \delta_{ij}, \text{ gde } \delta_{ij} = 0 (i \neq j), \delta_{ij} = 1 (i = j);$$

s) determinant tek eki ma'niske iye boladi' $\det(C_{ik}) = |C_{ik}| = 1$.

Bul jazi'wda simmetriya operaciyalari'ni'n' ha'r qi'yli' operaciyalarg'a bo'liniwin ani'qlawg'a boladi':

$|C_{ik}| = +1$: tek aylani'w (birinshi tu'rli operaciya; kongruentlik);

$|C_{ik}| = -1$: inversiyani'n' qatnasi'wi' (ekinshi tu'rli operaciya, enantiomorfli'q).

Si'zi'qli' tu'rlendiriw operatori'ni'n' (x, u, z) noqati'na ta'siri kvadratli'q matricani' matrica-bag'anag'a ko'beyiw din' na'tijyesi tu'rinde ta'riyiplenedi:

$$(C_{ik})R = R^*.$$

Matricag'a mi'sallar:

z ko'sherine parallel bolg'an 2 simmetriya ko'sheri:

$$\begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -x \\ -y \\ z \end{pmatrix} \quad |C_{ik}| = +1.$$

z ko'sheri bag'i'ti'ndag'i' 4 ko'sheri:

$$\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} y \\ -x \\ z \end{pmatrix} \quad |C_{ik}| = +1.$$

z ko'sherine perpendikulyar bolg'an m simmetriya tegisligi:

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x \\ y \\ -z \end{pmatrix} \quad |C_{ik}| = -1.$$

Eki matricani' bir birine ko'beytiw effekti eki buri'w operaciyasi'n izbe-iz o'tkeriwdi an'latadi'. Mi'sali' $\bar{1} \times 2 = m$ ko'beymesi da'slep 2 ni, bunnan keyin 1 di ori'nlap m tu'rlendiriwin alatug'i'nli'g'i'mi'zdi' an'g'artadi'. Basqa so'z benen aytqanda

$$\bar{1} \times 2 \times R = m \times R.$$

Buri'w matricasi'n rasshifrovkalaw. Bunday belgilewlerde (simvolikada) ayqi'n tu'rde jazi'lg'an ortogonalli'q matricani'n' o'zgesheliklerin tallaw an'sat usi'llar menen a'melge asi'ri'ladi'. To'mende buri'w matricalari'n rasshifrovka qi'li'wdi'n' bazi' bir xarakterli usi'llari' keltiriledi. Tap usi'nday jollar menen berilgen simmetriya elementinin' ta'rtibi ayqi'n tu'rde ani'qlanadi'. Buni'n' ushi'n matricani' da'rejege ko'teriw, yag'ni'y berilgen buri'w operaciyasi' izbe-iz a'melge asi'ri'ladi'. Ciklli'q gruppani'n' ta'rtibine (bul shama ko'sherdin' ta'rtibine ten') sa'ykes keliwshi belgili adi'mda tu'rlendiriw seriyasi'ni'n' na'tiyjesi birlik matrica yamasa ten'lestiriw operatori' boli'p tabi'ladi'. Bunnan keyin aqi'rg'i' juwapti' ali'w ushi'n si'nap ko'riw ushi'n arnalg'an vektorg'a matricani'n' qalay ta'sir etetug'i'nli'g'i'n ani'qlaw kerek boladi'. Bunnan keyin determinantti'n' o'zi ani'qlanadi'.

a).

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

matricasi' berilgen. Oni' kvadratqa ko'teriw

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

matricasi'n beredi.

$$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} z \\ y \\ x \end{pmatrix}.$$

Determinant $|S_{ij}| = -1$.

Juwabi': kubti'n' simmetriyasi'ni'n' diagonalli'q tegisligi, indeksleri (1 0 -1).

b) $\begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & -1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$ matricasi' berilgen. Oni' kvadratqa ko'teriw $\begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$

matricasi'n beredi (yag'ni'y OY ko'sheri bag'i'ti'ndag'i' 2 ko'sheri). Ushinshi da'rejege

ko'teriw $\begin{pmatrix} 0 & 0 & -1 \\ 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$ matricasi'n beredi. Bul da'slepki matricani'n' ker elementleri boli'p tabi'ladi'. Demek berilgen ciklli'q gruppani'n' ta'rtibi 4 ke ten' eken.

$$\text{Ta'sirdi tekserip ko'riw: } \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & -1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ -y \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} z \\ -y \\ -x \end{pmatrix}.$$

Determinant $|S_{ij}| = -1$.

Juwabi': y ko'sheri bag'i'ti'ndag'i' 4 inversiyali'q ko'sheri, [010] bag'i'ti'.

Ta'rtibinin' ma'nisi shekli bolg'an kristallografiyalı'q gruppalar

Uli'wmali'q eskertiwler. Jokari'dag'i' paragrafta 10 ciklli'q gruppa ko'rsetildi. Olardi'n' ha'r qaysi'si'na tek bir generator – simmetriya ko'sherlerinin' biri qoyi'ldi'. Kristallografiyalı'q gruppalardi'n' uli'wmali'q ji'ynag'i' o'zi ishine shekli ta'rtiptegi ciklli'q emes gruppalardi' da aladi'. Bunday ciklli'q emes gruppalar belgili generatorlardi'n' qosi'ndi'lari'na tiykarlang'an ha'm olardi' payda etiw ushi'n matricali'q algebrani'n' qag'i'ydalari' toli'g'i' menen jetkilikli. Biraq endi kombinatorldi'q variantlarda sapali'q jaqtan jan'a shekler payda boladi'. Bul jerde en' basli' talap mi'nadan ibarat: generatorlardi'n' ha'm olardi'n' tuwi'ndi'lari'ni'n' ta'sir etiwini'n' na'tiyjeleri gruppa elementlerinin' shekli ko'pligi boli'wi' sha'rt. Demek algebralı'q tekserip shi'g'i'wda Keli kvadrati' tuyi'q boli'wi' kerek degen so'z. Mi'sali' eger eki simmetriya ko'sheri bir biri menen kesilisetug'i'n bolsa, onda olar arasi'ndag'i' i'qti'yarli' mu'yesh jan'a ko'sherlerdin' sheksiz ko'p payda boli'wi' situaciyasi'na ali'p keledi. Sonli'qtan ko'sherlerdin' bir biri menen kesilisiwinin' tek belgili bir mu'yeshler menen boli'wi' qadag'alawshi' faktorg'a aylanadi'. Bunday jag'dayda shekli sandag'i' gruppa elementleri payda boladi'. To'mende kristallografiyalı'q noqatli'q gruppalardag'i' simmetriya ko'sherleri arasi'nda mu'mkin bolg'an mu'yeshlerdin' ma'nisleri keltirilgen:

$\angle 22$	60°	90°	120°
$\angle 33$	$70^\circ 32'$	$109^\circ 28'$	
$\angle 44$	90°		
$\angle 32$	$35^\circ 16'$	90°	
$\angle 42$	45°	90°	
$\angle 62$	90°		
$\angle 43$	$54^\circ 44'$		

Ha'r qanday atamalarg'a iye ko'sherlerdin' ortogonalli'q emes kombinaciyalari'na qoyi'latug'i'n qatan' tu'rdegi sheklerdi atap o'temiz: 2 den joqari' ta'rtiler ushi'n kubli'q singoniyadag'i' tek bir g'ana variant ko'rsetilgen. Kristallografiyalı'q simmetriyadan ti's jag'daylarda (yag'ni'y kristalli'q simmetriyag'a iye emes ob'ektlerde) bunday jag'day ikosaedrlik singoniya gruppalari'nda tek 5- ha'm 3- ta'rtili simmetriya ko'sherlerinin' qosi'li'wi'ni'n' bazasi'nda ju'zege keletug'i'nli'g'i' u'lken a'hmiyetke iye. To'mende tap usi'nday gruppalardi'n' translyaciyali'q simmetriyag'a iye emes kvazikristallardi'n' strukturasi'n ta'riyipleytug'i'nli'g'i' ko'rsetiledi.

Noqatli'q gruppalar haqqi'ndag'i' mag'li'wmatlardi'n' ji'ynag'i'. U'sh o'lshemli translyaciyali'q sistemalarda 32 noqatli'q gruppalarli'n' boli'wi' mu'mkin; olarg'a 18 dana abstrakt gruppa izomorfli'. Olar 1.2-kestede keltirilgen.

Gruppalardi'n' simvollari' haqqi'nda. Ilimiy a'debiyatta noqatli'q gruppalardi'n' ha'r ki'yli' belgileri qollani'ldi'. Olardi'n' ishinde gruppadag'i' simmetriya ko'sherlerinin' sani'na tiykarlang'an belgiler (simvolika) bar:

S – bir ko'sher, D ha'm T – eki ko'sher, O – u'sh ko'sher.

Strukturali'q analizde belgilewlerdin' xali'q arali'q standart sistemasi' qollani'ladi'. Bulday belgilewler tiykari'na simmetriya elementlerinin' belgileri ali'ng'an. Ha'r bir gruppani'n' belgisinde jetkilikli sandag'i' generatorlar keltirilgen. Bul generatorlar matricali'q operaciyalardi' ori'nlaw joli' menen gruppani'n' barli'q elementlerin payda etetug'i'n operatorlar boli'p tabi'ladi'. Simvoldi'n' (belginin') jaylasi'wi' boyi'nsha berilgen simmetriya tegisliginin' qanday tu'yinlik tuwri'ni'n' boyi'nsha jaylasatug'i'nli'g'i'n biliwge boladi' (yamasa qanday tuwri'g'a berilgen tegislik perpendikulyar). Singoniyalardi'n' ha'm biri ushi'n a'hmiyetli bag'i'tlardi'n' logikali'q izbe-izligi sa'ykes keledi:

monoklinlik	[010]	trigonalli'q	[111] [110]
ortorombali'q	[100] [010] [001]	geksagonalli'q	[001] [100] [110]
tatragonalli'q	[001] [100] [110]	kubli'q	[100] [111] [110]

1.1- ha'm 1.2-kestelerde keltirilgen mag'li'wmatlarda usi' belgilewler qolani'ldi'.

Qi'sqasha eskertiwler:

Terminologiya haqqi'nda. Ha'r bir singoniyada (ta'rtibi boyi'nsha) joqari' simmetriyag'a iye noqatli'q gruppa goloedrlik si'yaqli' belgilegendi. Bul gruppalardi'n' ha'r biri orayli'q simmetriyag'a iye.

Kubli'q singoniyani'n' noqatli'q gruppalari' haqqi'nda. Kvadratli'q qaptallarg'a iye bolg'anli'qtan kubti'n' figurasi' barli'q waqi'tta u'sh dana to'rtinshi ta'rtpili simmetiya ko'sheri menen ta'riyiplenedi. Al kristallografiyalı'q ko'z-qarasta turi'p qaraw qatan' tu'rdegi gradaciyanı' beredi: kubli'q simmetriyani'n' ori'n ali'wi' ushi'n kubti'n' ken'isliklik diagonallari' boyi'nsha to'rt dana 3-ta'rtpili simmetriya ko'sherinin' boli'wi' za'ru'rli ha'm jetkilikli. Kubli'q quti'ni'n' qabarg'alari' bag'i'ti'ndag'i' 4-ta'rtpili simmetriya ko'sherleri kubli'q sinoniyani'n' bes noqatli'q gruppasi'ni'n' tek u'shewin g'ana ta'riyipleydi. To'mengi 23 ha'm m3 gruppalari'nda 2-ta'rtpili simmetriya ko'sherleri qabi'rg'alarg'a parallel. Bunday formalli'q ta'riyiplew ko'rgizbeli tu'rdegi su'wretlewge qayshi' kelmeydi: kubti'n' qaptallari'n sa'ykes tu'rde shtrixlasaq usi'nday simmetriyag'a iye ob'ekttin' modelin du'ziwge boladi'.

1.2-keste. Simmetriyani'n' n'oqatli'q gruppalari'

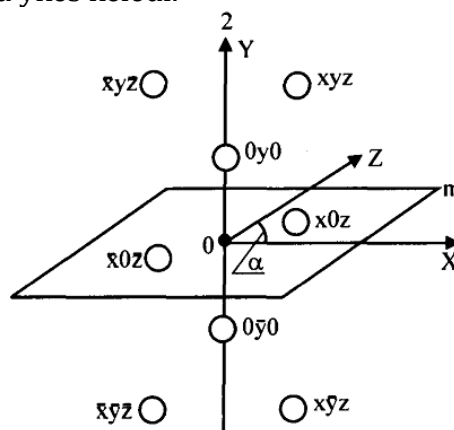
Группаның тәртіби	Группа (сингония)	Абстракт группаның анықлаушы қатнастары
1	1(трикл)	$A = e$
2	$\bar{1}$ (трикл), 2(мон), m (мон)	$A^2 = e$
3	3(триг)	$A^3 = e$
4	4(тетр), $\bar{4}$ (тетр)	$A^4 = e$
4	$2/m$ (мон), $mm2$ (орт), 222 (орт)	$A^2 = B^2 = (AB)^2 = e$
6	6(гекс), $\bar{6}$ (гекс), $\bar{3}$ (триг)	$A^6 = e$
6	32 (триг), $3m$ (триг)	$A^3 = B^2 = (AB)^2 = e$
8	mmm (орт)	$A^2 = B^2 = C^2 = (AB)^2 = (AC)^2 = (BC)^2 = e$
8	$4/m$ (тетр)	$A^4 = B^2 = ABA^3B = e$
8	$4mm$ (тетр), 422 (тетр), $\bar{4} 2m$ (тетр)	$A^4 = B^2 = (AB)^2 = e$
12	$6/m$ (гекс)	$A^6 = B^2 = ABA^5B = e$
12	$\bar{3} / m$ (триг), $\bar{6} m2$ (гекс), $6mm$ (гекс), 622 (гекс)	$A^6 = B^2 = (AB)^2 = e$
12	23 (куб)	$A^3 = B^2 = (AB)^3 = e$
16	$4/mmm$ (тетр)	$A^2 = B^2 = C^2 = (AB)^2 = (AC)^2 = (BC)^4 = e$
24	432 (куб), $\bar{4} 3m$ (куб)	$A^4 = B^2 = (AB)^3 = e$
24	$m\bar{3}$ (куб)	$A^3 = B^2 = (A^2BAB)^2 = e$
24	$6/mmm$ (гекс)	$A^2 = B^2 = C^2 = (AB)^2 = (AC)^2 = (BC)^6 = e$
48	$m\bar{3} 2/m$ (куб)	$A^4 = B^6 = (AB)^2 = e$

Gruppаларди'n' orbitalari': noqatlardi'n' ekvivalentli poziciyalari'.

Strukturani' ta'riyiplegende noqatqa yamasa tegislikke gruppani'n' elementlerinin' ji'ynag'i' ta'sir etkende payda bolatug'i'n konfiguraciyalar en' a'hmiyetli xarakteristikalar boli'p tabi'ladi'. Usi'nday ko'beyiwidin' na'tiyjeleri orbita termini menen belgilenedi. Orbita gruppani' ken'isliklik figuralar tu'rinde ko'rsetiwge sa'ykes keledi.

1.2.5-su'wret.

2/m gruppasi' ushi'n noqatlardi'n' orbitalari'.



$2/m \{1, 2, m, \bar{1}\}$ monoklinik singoniya ushi'n 1.2.5-su'wrette keltirilgen a'piwayi' illyustraciyani' qaraymi'z. Gruppani'n' barli'q elementleri koordinatalari' (x,y,z) i'qti'yarli' ma'niske iye noqatqa ta'siri eseligi 4 ke ten' (= gruppani'n' ta'rtibine) orbitani' payda etedi. Buni' to'rt ekvivalent noqattan turatug'i'n uli'wmali'q poziciya dep ataydi'.

Eger da'slepki noqatti' simmetriya elementinde (elementlerdin' kesilisiw noqati'nda) jaylasti'rsa, onda dara poziciyani'n' sistemasi' payda boladi'. Bul simmetriya elementinin' ta'siri bolmaydi', al poziciyani'n' eseligi ekige, to'rtke ha'm tag'i' basqa da ma'nislerge qi'sqaradi'. $P2/m$ gruppasi' ushi'n spravoshnikten ali'ng'an fragment 1.3-kestede ekvivalentlik poziciyalardi' standart ta'riyiplewge mi'sal retinde keltirilgen. Bul jerde qatardi'n' basi'nda turg'an san poziciyani'n' eseligin an'g'artadi', qawsi'rma ishindegi ha'ripler Uaykof boyi'nsha qatarlardi'n' numericiyasi' boli'p tabi'ladi'. Bunnan keyin usi' poziciyadag'i' noqatti'n' simmetriyasi', al en' aqi'ri'nda ko'rsetilgen noqatlardi'n' koordinatalari' jazi'lg'an

1.3-keste. $P2/m$ gruppasi' ushi'n spravoshnikten ali'ng'an mag'li'wmatlar fragmenti

4	(o)	1	$x, y, z; -x, y, -z; x, -y, z; -x, -y, -z$
2	(m)	m	$x, 0, z; -x, 0, -z$
2	(i)	2	$0, y, 0; 0, -y, 0$
1	(a)	2/m	$0, 0, 0$

Ekvivalentlik poziciyadag'a noqatlardi'n' koordshinalari' qa'legen quramali'qtag'i' atomli'q strukturani' stanlart ta'riyiplegende tiykar boli'p tabi'ladi'. Usi'ni'n' menen birge bul usi'l ha'r bir jag'dayda strukturani' ta'biyiy tu'rde traktovkalawg'a mu'mkinshilik beredi: ekvivalent poziciyag'a bir sorttag'i' atomlar sa'ykes keledi dep esaplanadi'.

Gipotezali'q mi'sal keltiremiz: meyli DF_2G_6 ximiya'i'q formulasi'na iye i'qti'yarli' tu'rdegi birikpe elementar quti'da 2/m gruppasi'ndag'i' tog'i'z atomg'a iye bolsi'n. Kestenin' bazasi'nda mi'naday juwmaqqa kelemiz: D atomlari' bir eselik (a) poziciyalari'nda jaylasadi'; F atomlari' ani'qlaw kerek bolg'an eki eselik poziciyalardi'n' birin iyeleydi. G elementinin' alti' atomi' ushi'n mi'naday variantlardi' boljaymi'z: uli'wmali'q (o) poziciyasi' + eki eselik yamasa u'sh eselik poziciyalardi'n' biri; qanday bolsa da bul elementtin' atomlari' strukturada qa'siyetleri boyi'nsha bo'lingen boli'p shi'g'adi'. Sebebi olar iyelegen poziciyalar simmetriyasi' boyi'nsha ha'r qi'yli' boladi'.

Gruppalardi'n' orbitalari': tegisliklerdin' a'piwayi' formalari'.

Pa'njerenin' tu'yinlik tegisligine gruppani'n' simmetriyalari'q operaciyalari'ni'n' ji'ynag'i'n qollani'w bazi' bir figurani'n' (tuyi'q yamasa tuyi'q emes ko'p qaptalli' figurani'n') ekvivalent qaptallari'ni'n' ji'ynag'i'n generaciyalaydi'. Bul figura berilgen gruppani'n' orbitasi' boli'p tabi'ladi' ha'm jabi'q yamasa ashi'q a'piwayi' forma tu'rinde belgilenedi. Tap sol si'yaqli' uli'wma tiptegi a'piwayi' forma {h k l} simmetriya elementlerinin' i'qti'yarli' inleksi'ge iye bolg'an tegislikke ta'sir etkende payda boladi'. Bul a'piwayi' formani'n' qaptallari'ni'n' sani' gruppani'n' ta'rtibine ten' ha'm simmetriyani'n' qa'ddin ko'rgizbeli tu'rde sa'wlelendiredi: mi'sali' monoklinlik simmetriyada ashi'q to'rt qaptalli' figura 2/m gruppasi' ushi'n rombali'q prizma, kubli'q singoniyada joqari' $m3m$ simmetriyasi' ushi'n 1.2.6-su'wrette keltirilgen tuyi'q 48 qaptalli' figura. Da'slepki tegisliktin' arnawli' tu'rdegi awhali' – simmetriya ko'sherine perpendikulyar ekenligi yamasa aynali'q shag'i'li'sti'ri'w tegisligine parallelligi bul simmetriya elementlerinin' ta'sirin joq etedi.

1.4-keste. Xali'q arali'q kestelerdegi a'piwayi' formalardi' ta'riyiplewge mi'sallar

$2/m C_{2h}$			Unique axis b	Unique axis c
4	c	l Rhombic prism Rectangle through origin (o)	$(h,k,l) (-h,k,-l) (-h,-k,-l) (h,-k,l)$	$(h,k,l) (-h,-k,l) (-h,-k,-l) (h,k,-l)$
2	b	m Pinacoid or parallelohedron Line segment through origin (m)	$(h,0,l) (-h,0,-l)$	$(h,k,0) (-h,-k,0)$
2	a	2 Pinacoid or parallelohedron Line segment through origin (i)	$(0,1,0) (0,-1,0)$	$(0,0,1) (0,0,-1)$

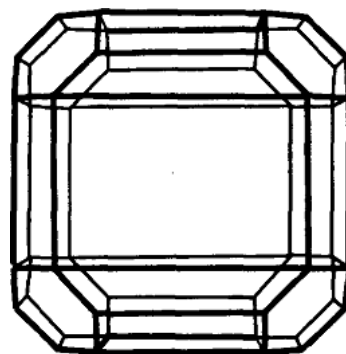
23 T				
12	c	1	Pentagon-tritetrahedron or tetartoid or tetrahedral pentagon-dodecahedron <i>Snub tetrahedron</i> (= <i>pentagon-tritetrahedron</i> + <i>two tetrahedra</i>) (j)	(h,k,l) (-h,-k,l) (-h,k,-l) (h,-k,-l) (l,h,k) (l,-h,-k) (-l,-h,k) (-l,h,-k) (k,l,h) (-k,l,-h) (k,-l,-h) (-k,-l,h)
			Trigon-tritetrahedron or tristetrahedron (for h < l) <i>Tetrahedron truncated by tetrahedron</i> (for x < z)	(h,h,l) (-h,-h,l) (-h,h,-l) (h,-h,-l) (l,h,h) (l,-h,-h) (-l,-h,h) (-l,h,-h) (h,l,h) (-h,l,-h) (h,-l,-h) (-h,-l,h)
			Tetragon-tritetrahedron or deltohedron or deltoid-dodecahedron (for h > l) <i>Cube & two tetrahedra</i> (for x < z)	
			Rhomb-dodecahedron <i>Cuboctahedron</i>	(0,1,1) (0,-1,1) (0,1,-1) (0,-1,-1) (1,0,1) (1,0,-1) (-1,0,1) (-1,0,-1) (1,1,0) (-1,1,0) (1,-1,0) (-1,-1,0)
8	b	.3.	Octahedron <i>Cube</i> (i)	(1,1,1) (-1,-1,1) (-1,1,-1) (1,-1,-1) (-1,-1,-1) (1,1,-1) (1,-1,1) (-1,1,1)
6	a	2m..	Cube or hexahedron <i>Octahedron</i> (e)	(1,0,0) (-1,0,0) (0,1,0) (0,-1,0) (0,0,1) (0,0,-1)
23 T				
12	c	1	Pentagon-tritetrahedron or tetartoid or tetrahedral pentagon-dodecahedron <i>Snub tetrahedron</i> (= <i>pentagon-tritetrahedron</i> + <i>two tetrahedra</i>) (j)	(h,k,l) (-h,-k,l) (-h,k,-l) (h,-k,-l) (l,h,k) (l,-h,-k) (-l,-h,k) (-l,h,-k) (k,l,h) (-k,l,-h) (k,-l,-h) (-k,-l,h)
			Trigon-tritetrahedron or tristetrahedron (for h < l) <i>Tetrahedron truncated by tetrahedron</i> (for x < z)	(h,h,l) (-h,-h,l) (-h,h,-l) (h,-h,-l) (l,h,h) (l,-h,-h) (-l,-h,h) (-l,h,-h) (h,l,h) (-h,l,-h) (h,-l,-h) (-h,-l,h)
			Tetragon-tritetrahedron or deltohedron or deltoid-dodecahedron (for h > l) <i>Cube & two tetrahedra</i> (for x < z)	
			Pentagon-dodecahedron or dihexahedron or pyritohedron <i>Irregular icosahedron</i> (= <i>pentagon-dodecahedron</i> + <i>octahedron</i>)	(0,k,l) (0,-k,l) (0,k,-l) (0,-k,-l) (l,0,k) (l,0,-k) (-l,0,k) (-l,0,-k) (k,l,0) (-k,l,0) (k,-l,0) (-k,-l,0)
			Rhomb-dodecahedron <i>Cuboctahedron</i>	(0,1,1) (0,-1,1) (0,1,-1) (0,-1,-1) (1,0,1) (1,0,-1) (-1,0,1) (-1,0,-1) (1,1,0) (-1,1,0) (1,-1,0) (-1,-1,0)
6	b	2..	Cube or hexahedron <i>Octahedron</i> (f)	(1,0,0) (-1,0,0) (0,1,0) (0,-1,0) (0,0,1) (0,0,-1)
4	a	.3.	Tetrahedron <i>Tetrahedron</i> (e)	(1,1,1) (-1,-1,1) (-1,1,-1) (1,-1,-1) or (-1,-1,-1) (1,1,-1) (1,-1,1) (-1,1,1)

Ba'rin qosqanda a'piwayi' formalardi'n' 47 tipi noqatli'q gruppalardi'n' wa'killeri bola aladi'. A'piwayi' formalardi'n' simvollari' figurali'q qawsi'rmalarda jazi'ladi' ha'm berilgen gruppani'n' simmetriyasi'n esapqa alg'andag'i' ekvivalent tegisliklardin' ji'ynag'i'na sa'ykes keledi. Mi'sali' (kubli'qtan basqa) barli'q sistemalar ushi'n {111} buri'w ko'sherlerinin' ta'sirin o'z ishine almaydi' ha'm uli'wmali'q tiptegi konfiguraciyan'i beredi. Mi'sali' joqari'da keltirilgen monoklinlik singoniyani'n' 2/m gruppasi' ushi'n bul jag'dayg'a tegisliklardin' uli'wmali'q formasi'na si'yaqli' to'rt qaptal sa'ykeslendiriledi. Kubli'q sistemani'n' 23 gruppasi' ushi'n {111} belgilewinde 3-ta'rtpili ko'sherdin' ta'siri bolmaydi'. Dara forma – tatraedr belgilenip ali'nadi'. m3 gruppasi' ushi'n (eseligi 24 ke ten') tap usi'nday azg'i'ni'w

segiz mu'yeshlik – oktaedrni payda etedi. 1.4-kestede keltirilgen a'piwayi' formalardi' ta'riyiplewge ayi'ri'm mi'sallar Xali'q arali'q kestelerdin' belgilewleri menen terminologiyasi'n ko'rsetedi International Tables for Crystallography. Vol. A. Ed.by Theo Hahn).

1.2.6-su'wret.

m3m gruppasi' ushi'n uli'wma tiptegi a'piwayi' forma (48 ta'replik).



Ilimiy a'debiyatta uli'wmali'q tiptegi a'piwayi' formag'a sa'ykes keliwshi ko'p mu'yeshlik boyi'nsha noqatli'q simmetriyani' belgilew ji'yi ugi'rasadi'. Bunday jag'dayda grupp kristallografiyalik klass dep ataladi'. Al ko'p mu'yeshliklerdin' atamalari' grek so'zleri tiykari'nda payda bolgan. Mi'sali' prizmalik klass (crystal class – prismatic, monoclinic holohedral) 2/m, al geksakisoktaedrlik klass (hexakis-octahedral) – m3m gruppasi'na ten'

1.2.4. Simmetriyalardi'n' ierarxiyasi'. Kyuridin' sheklik gruppalari'

Noqatli'q gruppalardi'n' bir biri menen baylani'si. Biz to'mende kristallar fizikasi'ni'n' (kristallofizikani'n') ha'r qi'yli' oblaslari' ha'm qatti' denelerdin' quri'li'si' teoriyasi' menen is ali'p barami'z. Usi' jag'dayg'a baylani'sli' ha'zir noqatli'q gruppalar sistemasi'ndag'a sub-, super- gruppali'q o'z-ara baylani'slardi' qi'sqasha qarap o'temiz.

Gruppali'q algebra terminlerinde noqatli'q gruppalar ishindegi ierarxiyalik baylani'slar mi'naday jag'daylarda ju'zege keledi:

(yamasa) to'mengi gruppani'n' barli'q elementlerin joqari' gruppag'a qosi'w arqali'

$$H \in G;$$

(yamasa) eki gruppani'n' bazi' bir to'mengi gruppada kesilisiwi boyi'nsha

$$H = G \cap T.$$

A'piwayi' mi'sal: 4 tetragonallik gruppani' gektagonallik 6 gruppasi'ni'na podgruppasi'pati'nda qosi'wg'a bolmaydi'; biraq $2 \in 4$ ha'm $2 \in 6$ ekenligi ba'rshege tu'sinikli. Demek eki gruppani'n' kesilisiwi

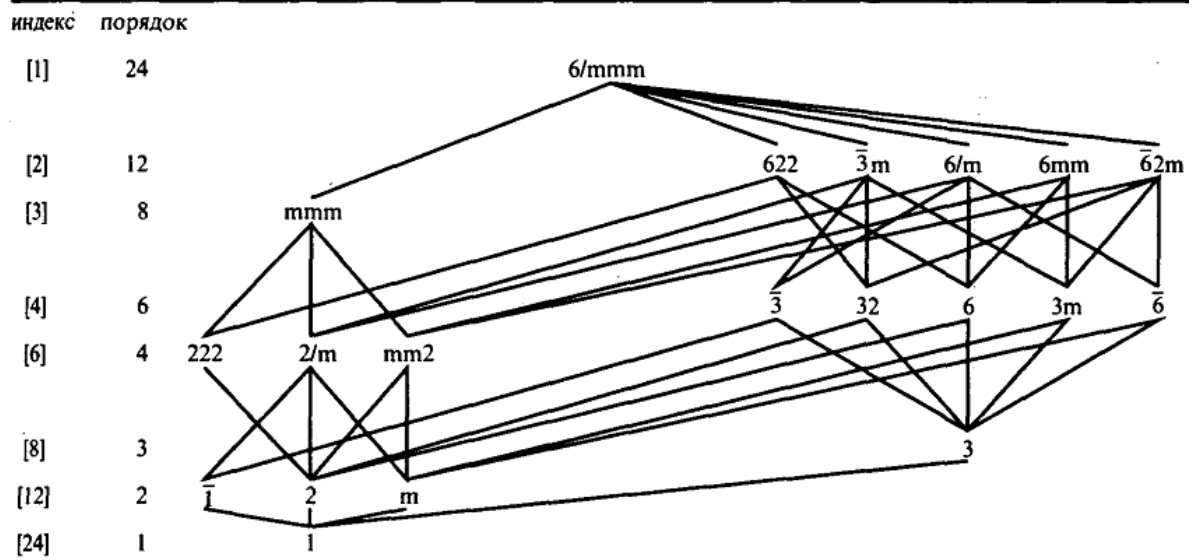
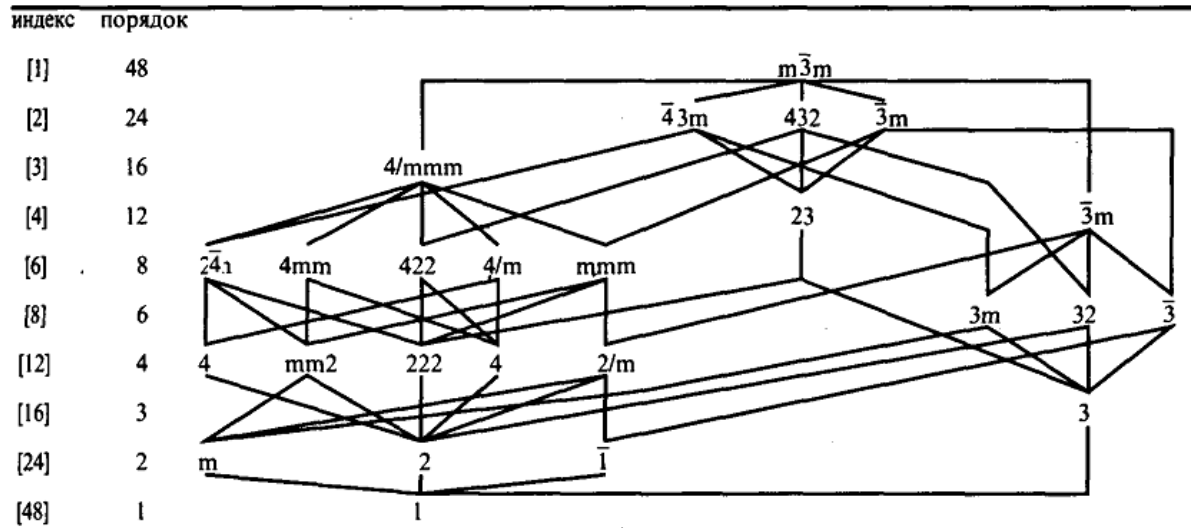
$$2 = 4 \cap 6$$

boli'p tabi'ladi'.

Usi' ayti'lg'anlarga sa'ykes, eger bazi' bir birikpeler joqari'da keltirilgen (t) ha'm (h) singoniyalardi'n' strukturalik modifikatsiyalari'na iye bolatug'ni' bolsa, onda bir birine aylani'wda ekinshi tu'rli fazalik o'tiw varianti'ni'n' ju'zege keliwi biykarlanadi'.

Ma'seleni tap usi'nday qoyi'wda simmetriya ko'z-qaraslari' boyi'nsha polattag'i' ($KOK \Leftrightarrow QOK$), III - V birikpeler kristallari'ndag'i' ha'm II – VI yari'm o'tkizgishlerindegi qaramali' mexanizmler menen strukturalik o'tiwlerdin' ju'zege keliwi ta'biyiy boli'p tabi'ladi' (kublik $\Leftrightarrow$ gektagonallik).

1.5-keste. Noqatli'q gruppalardi'n' ierarxiyasi'



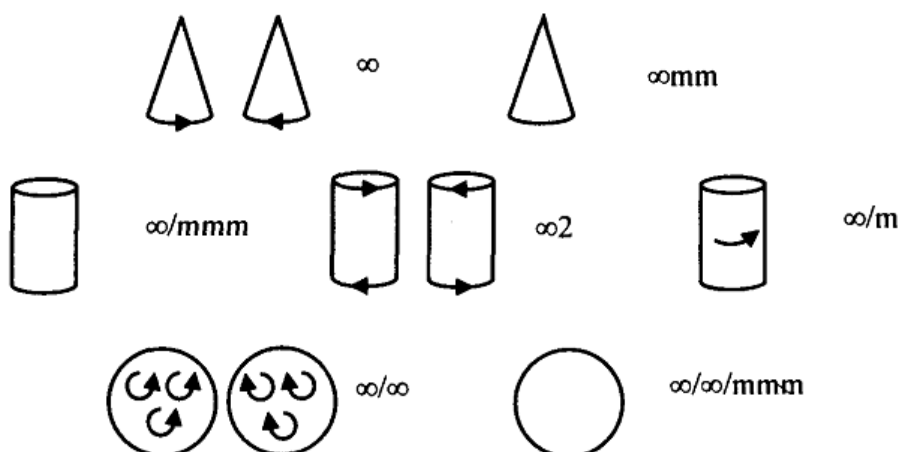
1.6-keste. Kyuridin' sheklik gruppaları'ni'n' bir birine bag'i'ni'w sistemasi'

Группа тәртиби	Шеклик группалар семействосы						
∞	∞	$\infty 22$	∞/m	∞mm	∞/mmm	∞/∞	$\infty/\infty/mmm$
120							m35
60						235	
48							m3m
24					6/mmm	432	
16					4/mmm		m3, 432
12		622	6/m	6mm	-6m2, -3m	23	
8		422	4/m	4mm	mmm, -42m		
6	6	32	-3, -6	3m			
4	4	2222	-4, 2/m	mm2			
3	3						
2	2						
			-1, m				

Spravoshniklerde noqatli'q gruppalar arasi'ndag'i' baylani'slardi'n' shaqalarg'i' tarmaqlang'an shaqalar sxemalari' ken'nen sa'wlelendirilgen. Bul tarmaqlardi'n' barli'g'i' da bir birinen g'a'rebsiz bolg'an "to'belerden" baslanadi'. Bunday to'belar kubli'q ha'm geksagonalli'q singoniyalardi'n' gruppalari' boli'p tabi'ladi'. Bunday baylani'slardi'n' ji'ynag'i' 1.5-kestede berilgen.

Kristallardi'n' fizikali'q qa'siyetleri menen baylani's.

Kristallofizikani'n' ma'seleleri ishinde kristallardag'i' fizikali'q qubi'li'slardi'n' sistemali' tu'rdegi ta'riypleniwi o'z aldi'na ken' bag'dar boli'p tabi'ladi'. Bul bag'darda tenzorli'q algebra menen gruppalar teoriyasi'ni'n' metodologiyasi' ken'nen qollani'ladi'. Bul kursti'n' kontekstinde biz simmetriya, og'an ta'n qa'siyet ha'm usi' qa'siyetke iye kristaldi'n' simmetriyasi' arasi'ndag'i' o'z-ara baylani'sti' qi'sqasha qarap o'temiz.

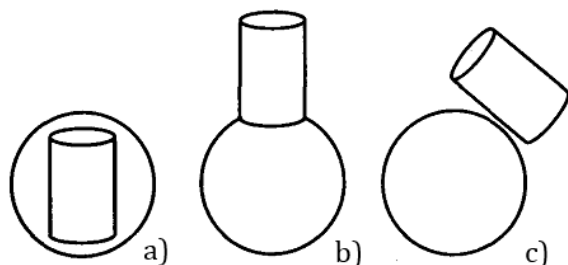


1.2.7-su'wret. Aylani'w figuralari' – Kyuridin' sheklik gruppalari'.

Bunday jag'dayda ma'selege qa'siyettin' simmetriyasi'n sa'wlelendiri'tug'i'n sheksiz ta'rtpi'li gruppalardi' kirgiziwimiz kerek. Bul gruppalarda generator si'pati'nda sheksiz kishi elementar buri'wg'a iye ∞ ta'rtpi'ke iye simmetriya ko'sheri bar boladi'. Bunday gruppalarg'a sa'ykes keliwshi ko'rgizbeli figuralar qa'siyettin' simmetriyasi'n sa'wlelendiri'tug'i'n obraz aylani'w figurasi' boli'p tabi'ladi'. Bunlday figuralardi'n' jети tipi bar ha'm olar 1.2.7-su'wrette

keltirilgen: ti'ni'shli'qta turg'an konus, aylani'p turg'an konus (on' ha'm teris), ti'ni'shli'qta turg'an cilindir, aylani'p turg'an cilindir, shi'yrati'lg'an cilindr (on' ha'm teris), ti'ni'shli'qta turg'an shar, aylani'wshi' shar (on' ha'm teris). Usi' jetti shekli ekstrapolyaciyanin' ha'r biri (u'lg'i figuralardi'n' ha'r biri) kristallografiyalı'q noqatli'q gruppalar ushi'n supergruppalar boli'p tabi'ladi'. Bul jag'day 1.6-kestede sxemali'q tu'rde ko'rsetilgen.

Fizikali'q maydanlardi'n' simmetriyasi' menen kristallardag'i' fizikali'q kubi'li'slar arasi'ndag'i' qatnaslardi' keltirip shi'g'ari'w Per Kyuridin' belgili jumi'slari'nan baslanadi'. Bul jerde simmetriyalardi'n' superpoziciyasi'ni'n' ta'siri principi en' basli' princip boli'p tabi'ladi': "Bir pu'tin dep qaralatug'i'n eki (yamasa ekiden de ko'p) ob'ektlardin' simmetriyasi'ni'n' gruppasi' olardi'n' simmetriya elementlerinin' bir birine sali'sti'rg'andag'i' jaylasi'wlari'n esapqa alg'anda ha'r bir ob'ekttin' simmetriyasi'ni'n' gruppalarini'n' en' joqarg'i' podgruppasi' boli'p tabi'ladi'". Simmetriya elementlerinin' bir birine sali'sti'rg'andag'i' jaylasi'wlari'na illyustraciya 1.2.8-su'wrette keltirilgen. Bul su'wrette eki denenin' (shar menen cilindrdin') ori'nlari'n o'zgerti'w menen usi' figuralardan turatug'i'n komplekstin' simmetriyasi'ni'n' u'lken o'zgerislerge ushi'raytug'i'nli'gi' ko'rinip tur.



1.2.8-su'wret.
Simmetriyalardi'n' superpoziciyasi'
principin illyustraciyalaw.

- a) ∞/mmm – cilindr,
- b) ∞mm – konus,
- c) m – tegislik.

Kristallofizikadag'i' ekinshi a'hmiyetli ni'zamli'q Neyman principi atamasi'na iye. Oni'n' ma'nisi mi'nalardan ibarat: "Kristaldi'n' qa'legen fizikali'q qa'siyetinin' simmetriyasi'ni'n' gruppasi' oni'n' noqatli'q gruppasi'n da o'z ishine ali'wi' kerek". Bul prinsiplardin' "qadag'an etiwshilik" xarakterin atap o'temiz – kristaldi'n' berilgen noqatli'q gruppaga tiyisli ekenligi oni'n' bir qatar fizikali'q qa'siyetlerinin' payda boli'wi'n shekleydi. Simmetriyani'n' tu'rlendiriliwi kristaldi'n' fizikali'q qa'siyetlerinin' o'zgeriwi menen ju'retug'i'n strukturali'q o'tiwlerdin' ju'da a'hmiyetli aspektlerinin' biri boli'p tabi'ladi'. Bul ma'selede en' xarakterli mi'sal retinde segnetoelektrik fazali'q o'tiwdi ko'rsetiwge boladi'. Spontan polyarizaciyanin' elektrik vektori' konusti'n' sheklik gruppasi' ∞mm bolg'adi'. Bul konusta inversiya orayi' bolmaydi'. Bunnan mi'naday jag'dayg'a iye bolami'z: eger kristaldi'n' da'slepki paraelektrik fazadag'i' strukturali'q orayg'a qarata simmetriyag'a iye bolsa, onda segnetoelektriklik fazag'a o'tiwde (fazali'q aylani'sti'n' saldari'nan) boli'p o'tetug'i'n strukturali'q o'zgerisler inversiya orayi'ni'n' jog'ali'wi'na ali'p keliwi kerek. Atap aytqanda tap usi'nday aylani'slar bariy titanati' ($m3m \Rightarrow 4mm$), triglicinsulfat ($2/m \Rightarrow 2$) ha'm basqa da birikpelerdin' kristallari'nda tabi'ldi'.

Ikosaedrlik noqatli'q gruppalar. Kyuridin' sheklik gruppalarini'n' ierarxiyasi' joqari'da ayti'p o'tilgen 5-ta'rtpili simmetriya ko'sherinin' kristallografiyalı'q emes ekenligin tu'sindiriwge mu'mkinshilik beredi. Ko'rsetpelilik ushi'n bes ko'p qaptalli'q ten turatug'i'n – Platonni'n' idealli'q figuralari'ni'n' "kristallografiyalı'q aspektin" paydalanami'z. En' a'piwayi' figuralar - tetraedr, kub, oktaedr kubli'q singoniyani'n' gruppalarini'n' dara formalari' si'pati'nda ko'rsetilip o'tildi. Bir kansha quramali' figuralar bolg'an u'sh mu'yeshli qaptallarg'a iye jigirma qaptalli'q (duri's ikosaedr), bes mu'yeshli on eki qaptalli'q (duri's pentagon – dodekaedr) tap sol si'yaqli' sapag'a iye. Gruppali'q algebra terminlerinde olar shekli ta'rtpitegi noqatli'q gruppalar ushi'n arnawli' orbitalar boli'p tabi'ladi'. Qabi'l etilgen belgilewlerde olar 235 (60-ta'rtpili) ha'm $m35$ (120-ta'rtpili) ikosaedrlik singoniyani' payda

etedi. Bul gruppalardi'n' ha'r qaysi'si' alti' dana 5-ta'rtpi simmetriya ko'sherine, on dana 3-ta'rtpi simmetriya ko'sherine, on bes dana 2-ta'rtpi simmetriya ko'sherine iye.

Endi 1.6-kestede keltirilgen sxemani' qaraymi'z. Bul kestede noqatli'q topalar Kyuridin' sheklik gruppalari'ni'n' semeystvolari' boyi'nsha bo'lingen. Konus penen cilindrdin' gruppalari'ni'n' barli'g'i' ushi'n prodgruppalardi'n' sani' ani'q emes u'lken: bas ko'sherdin' ta'rtibi N piramidani'n' yamasa prizmani'n' tiykari' duri's ko'p qaplalli'qti'n' qabi'rg'alari'ni'n' sani'n' ani'qlaydi', al shekte $N \Rightarrow \infty$. SHardi'n' podgruppalari'ni'n' arasi'nda basqa jag'day ori'n aladi'. Bul jag'dayda simmetriya ko'sherleri arasi'ndag'i' mu'yesh tin' tuwri' mu'yesh bolmawi' da mu'mkin. Bul jag'dayda shekli gruppalar ushi'n (translyaciyali'q pa'njerenin' boli'wi' yamasa bolmawi'n' g'a'rezsiz) qatan' tu'rdegi shekler ori'n aladi': ko'sherlerdin' ta'rtibi tek 2, 3, 4, 5; berilgen mu'yesh penen ko'sherlerdin' kombinaciyasi' tek: $4 + 3 + 2$, $2 + 3$, $2 + 3 + 5$. Inversiya orayi'n esapqa alg'anda shardi'n' sheklik gruppasi' ushi'n tek yeti podgruppani'n' boli'wi' mu'mkin: kublyaq singoniyada - bes grupp - eseligi 48 ge shekem, ikosaedrlik singoniyada - eki grupp - esaligi 120 g'a shekem. Solay etip translyaciyali'q da'wirlikten bas tarti'w standart reestr di tek iksoedrlik singoniya gruppali' menen toli'qti'radi' eken. Bunday jag'dayda shar semeystvosi' ishindeg i baylani'slardi' da ko'rsetiwge boladi': "to'mengi kubti'n'" eki gruppasi' da ikosaedrlik gruppalg'a bag'i'nadi'. Mi'sal retinde $m_{35} \cap m_{3m} = m_3$ kesilisiwine itibar beremiz.

Ha'zirgi zaman fizikali'q materialtani'wi'ndag'i' jan'a fenomen bolg'an kvazikristallardi'n' ashi'li'wi' iksoedrlik konfiguraciyani'n' haqi'yqat ekenligin ko'rsetti. Iksoedrlik konfiguraciya translyaciyali'q uzi'qtan ta'rtpi tin' jaki'n alternativi boli'p tabi'ladi'.

1.3-bap. Ken'isliktegi gruppalar

1.3.1. Brave pa'njereleri

Kristallografiyal i'q klassifikaciyani'n' a'hmiyetli bo'limi translyaciyali'q pa'njerelerdi ani'qlaw boli'p tabi'ladi'. Ogyust Bravenin' jumi'slari'n'nan baslanatug'i'n teoriyal i'q tallaw sapali'q jaqtan ha'r qi'yli' pa'njerelerdin' tek shekli sani'n yamasa 14 elementar pararrerepipedi beredi. Elementar quti'ni' saylap alg'anda to'mendegi izbe-izliktegi qag'i'ydalardi' saqlaw kerek boladi':

a) Quti'ni'n' simmetriyasi' berilgen singoniya ushi'n en' jokarg'i' (goloedrlik) simmetriyasi'na sa'ykes keliwi kerek;

b) (a) sha'rti ori'nlag'anda ko'sherler arasi'ndag'i' tuwri' mu'yeshlerdin' sani' maksimalli'q boli'wi' kerek;

c) (a) ha'm (b) sha'rtleri ori'nlang'anda quti'ni'n' ko'lemi minimalli'q boli'wi' kerek.

Eskertiw. (s) sha'rti ayi'ri'm jag'daylarda esapqa ali'nbaydi'.

Jokari'da 1.1-bapta quti'lardi'n' baslang'i'sh formalari' keltirilgen edi: R – primitivlik (a'piwayi'), A, V, S - qaptali' - (bazasi'-) oraylasqan, I – ko'lemde oraylasqan, F – qaptalda oraylasqan. Primitivni'e yasheyki predstavl eni' vo vse x singoniyax. Bravenin' barli'q yeti oraylasqan pa'njerelerin ko'rsetip o'temiz:

Monoklinlik	1) $A = C = I = F$		
Ortorombali'q	2) $A = B = C$	3) I	4) F
Tatragonalli'q	5) $I = F$		
Kubli'q	6) I	7) F	

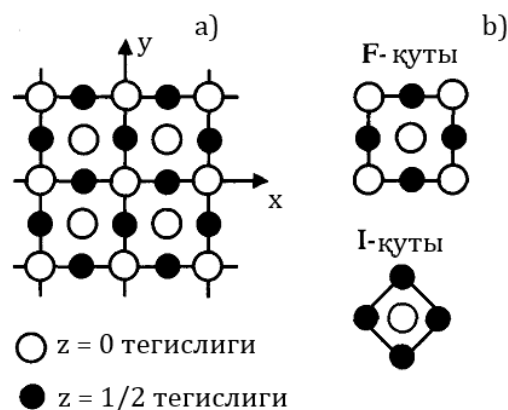
Ten'lik belgisi (=) ko'sherlerdi alternativlik saylap ali'wda tu'yinlerdin' konfiguraciyalari'ni'n' bir birine sa'ykes keletug'i'nli'g'i'n an'g'artadi'. Xarakterli mi'sal 1.3.1-su'wrette keltirilgen. Bul jag'dayda tetragonalli'q pa'njere ushi'n ko'lemde oraylasqan ha'm qatpalda oraylasqan qutlardi'n' birdey ekenligi ko'rini p tur.

1.3.1-su'wret.

Oraylasqan tetragonalli'q pa'njereler ushi'n quti'ni' saydap ali'w.

a) tu'yinlerdin' konfiguratsiyasi';

b) saylap ali'wdi'n' variantlari'.



Bul ma'seleni qarap shi'qqanda u'sh singoniya qatnaspaydi':

Triklinlik – ko'sherler i'qti'yarli' tu'rde saylap ali'ng'anda oraylasqan quti'lardi'n' boli'wi' mu'mkin emes.

Trigonalli'q, geksagonalli'q – 60° ha'm 120° qa ten' mu'yeshlerde quti'ni'n' oraylasqan boli'wi' mu'mkin emes.

Quti'lardi' saylap ali'wdi'n' detallari' 1.1-kestede keltirilgen.

1.3.2. Translyaciya simmetriyalik operatsiya si'pati'nda

Gruppalik algebra tiline o'tkende Brave pa'njereleri haqqi'nda ayti'lg'anlar ga'pler sheksiz ta'rtpke iye translyatsiyalik gruppalardi'n' bar bolatug'i'nli'g'i'na sa'ykes keledi:

- Translyatsiya vektori' t ni'n' belgisi kirgizileti. Bul vektor r noqati'n fizikalik jaqтан ayi'rmasi' joq r noqati'na o'tiwdi ani'qlaydi'.

- $T(t)$ translyatsiya operatori' $r' = T(t)r = r + t$ sha'rti boyi'nsha kirgizileti.

- Translyatsiyalar gruppasi' ushi'n ko'beytiw operatsiyasi' $t_1 + t_2 = t_3 \in T$ vektorlik qosi'w boli'p tabi'ladi'.

- Birlik element – nollik translyatsiya $T(0) = E$.

- Keri element - keri belgige iye vektor $(T(t))^{-1} = T(-t)$.

Translyatsiyalik gruppalarldi'n' ha'r biri ciklik, abellik, sheksiz ta'rtpioli boli'p xarakterleneti. Gruppani'n' elementi – translyatsiya vektori':

$$t = p_1a + p_2b + p_3c + t_c.$$

Bul an'latpada $p_1, p_2, p_3 = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm 8$. t_c arqali' oraylasqan pa'njereler ushi'n a'piwayi' emes (primitivlik emes) translyatsiyalar belgilengen.

Noqatlik (shekli) ha'm translyatsiyalik (sheksiz) gruppalardi'n' qosi'ndi'si' simmetriyani'n' ken'isliktegi gruppalari'n' payda etedi. Bunday gruppalardi'n' o'zgeshelikleri ha'rekettegi simmetriya elementlerinin' dizimi bunnan bi'lay ken'eytiw boli'p tabi'ladi'.

1.3.1. Ashi'q simmetriya elementleri – vintlik ko'sherler, ji'lji'p shashi'rati'wshi' simmetriya tegislikleri

Endi translyatsiya menen simmetriya ko'sherlerinin' bir biri ta'sirlesiwini karaymi'z. A'piwayi'lik ushi'n biz Zeytse penen Vignerdin' maricalari' qatnasatug'i'n racionallik texnikani' paydalanami'z. Simmetriya operatsiyalari' ushi'n ji'ynaq 4 matrica (to'rt matrica dep oqi'ladi') kirgizileti:

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ t & A \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ t_1 & a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ t_2 & a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ t_3 & a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{pmatrix}.$$

Bul jerde

$$1 \equiv 1, 0 \equiv \{0, 0, 0\}; \hat{t} = \begin{pmatrix} t_1 \\ t_2 \\ t_3 \end{pmatrix}; \hat{A} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{pmatrix}.$$

Noqatti'n' koordinatasi' r ushi'n matrica-bag'ana beriledi:

$$\vec{r} = \begin{pmatrix} 1 \\ x \\ y \\ z \end{pmatrix}.$$

Bunday jag'dayda noqatqa operaciyanin' ta'siri bi'layi'nsha jazi'ladi':

$$r' = Ar + t; \begin{pmatrix} 1 \\ r \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ t & A \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ t + Ar \end{pmatrix}.$$

Tek taza buri'w $\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & A \end{pmatrix}$, tek taza traslyaciya $\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ t & E \end{pmatrix}$.

Ayqi'n buri'w ko'sheri (simmetriya ko'sheri) ha'm translyaciya ushi'n qosi'ndi' matricani'n' qa'siyetelrin qaraymi'z.

Mi'sali' [010] bag'i'ti'ndag'i' ekinshi ta'rtpi simmetriya ko'sheri.

Da'slepki matricani' jazami'z (mu'mkin bolg'an translyaciylar ushi'n aldi'n ala qoyi'lg'an sha'rtlersiz); kvadratqa ko'tergennen keyin buri'w ko'sherinin' orni'na ten'lestiriw operatori'nt alami'z:

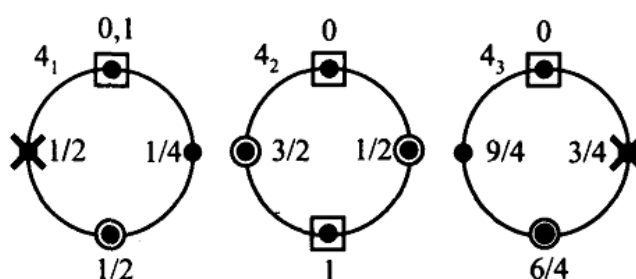
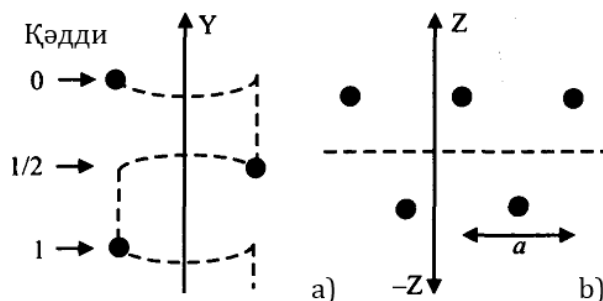
$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ t_1 & -1 & 0 & 0 \\ t_2 & 0 & 1 & 0 \\ t_3 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ t_1 & -1 & 0 & 0 \\ t_2 & 0 & 1 & 0 \\ t_3 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 2t_2 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Endi y ko'sheri bag'i'ti'ndag'i' translyaciyanin' $2t_1 = 1$ yamasa $t_1 = 1/2$ teppe ten' noqatqa ali'p keletug'i'nli'g'i'n alami'z. Na'tiyjede

$$2_1 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 1/2 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

matricasi'na iye bolami'z. Bul matricani'n' ta'siri simmetriyanin' jan'a elementi bolg'an [010] bag'i'ti'ndag'i' ekinshi ta'rtpi vintlik ko'sherin beredi. (1.3.2-a su'wretke qaran'i'z):

$$2_1 \cdot \vec{r} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 1/2 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ -x \\ y+1/2 \\ -z \end{pmatrix}.$$



Қәддилердің белгилениуі: $\square$ 0,1 $\odot$ 1/2 $\bullet$ 1/4 $\times$ 3/4 c)

1.3.2-su'wret. Simmetriyani'n' ashi'q elementlerinin' ta'sirine mi'sallar.

Mi'sal. Tegislik [001] bag'i'ti'na perpendikulyar bolg'an tegislik. Da'slepki matricani' jazami'z (mu'mkin bolg'an translyaciyalar ushi'n aldi'n ala sha'rt qoyli'mag'an jag'dayda). Kvadratqa ko'tergennen keyin buri'w bo'liminin' orni'nda ten'lestiriw operatori'n alami'z (teppe-ten'lik operatori'n alami'z):

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ t_1 & 1 & 0 & 0 \\ t_2 & 0 & 1 & 0 \\ t_3 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ t_1 & 1 & 0 & 0 \\ t_2 & 0 & 1 & 0 \\ t_3 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 2t_1 & 1 & 0 & 0 \\ 2t_2 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Endi u'sh variantti'n' ori'n ali'wi' mu'mkin: teppe-ten' noqat [100] bag'i'ti'nda $2t_1 = 1$ translyaciyasi'ni'n' na'tiyjesinde; yamasa [010] bag'i'ti'nda $2t_2 = 1$ translyaciyasi'ni'n' na'tiyjesinde; yamasa [110] diagonalini'n' bag'i'ti'nda $2(t_1 + t_2) = 1$ translyaciyasi'ni'n' na'tiyjesinde. Ali'ng'an matricalarini'n' ha'm birinin' ta'siri

$$a = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1/2 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}; b = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1/2 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}; n = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1/2 & 1 & 0 & 0 \\ 1/2 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

simmetriyani'n' jan'a elementi bolg'an berilgen bag'i'tta ji'lji'p shashi'rati'wshi' simmetriya tegisliginin' operaciyasi'n sa'wlelendiredi (1.3.26-su'wretke qaran'i'z).

Masi'l: [001] bag'i'ti'ndag'i' to'rtinshi ta'rtpi simmetriya ko'sheri.

Ja'ne mu'mkin bolg'an translyaciyalar ushi'n aldi'n ala sha'rt qoyli'mag'an jag'dayda da'slepki matricani' jazami'z. Bunnan keyin to'rtinshi da'rejege ko'tergennen keyin buri'li'wg'a sa'ykes keletug'i'n bo'limnin' orni'nda teppe-ten'lik operatori'n alami'z:

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ t_1 & 0 & 1 & 0 \\ t_2 & -1 & 0 & 0 \\ t_3 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}^4 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 4t_3 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Endi u'sh variant ruqsat etilgen: $4t_3 = 1$ yamasa 2 yamasa 3. Teppe-ten' noqat 90° qa buri'w menen z ko'sheri bag'i'ti'nda $1/4$ yamasa $1/2$ yamasa $3/4$ shamalari'na ten' translyaciyani'n' saldari'nan ali'nadi' (1.3.2-su'wretti qaran'i'z). 4-ta'rtpi vintlik ko'sherlerdin' u'sh tipine iye bolami'z: 4_1 , 4_2 ha'm 4_3 . Elementar translyaciya bo'lshek san ja'rdeminde berilgen (to'mengi indeks)/(ko'sherdin' ta'rtibi). Su'wretlerin salsaq 4_1 ha'm 4_3 ko'sherlerinin' enantiomorfli'q ekenligin, yag'ni'y aylani'w bag'i'ti' menen ayri'latug'i'nli'g'i'n ayqi'n ko'remiz. Standart belgilewlerde shep vintke barli'q waqi'tta da kishi to'mengi indeks jazi'ladi'.

1.7-keste. Simmetriyani'n' ken'isligindagi gruppalari'ni'n' belgilewlerinde qollani'latug'i'n simmetriya elementlerinin' dizimi (reestri)

Бұрыў көшерлері	1	2	3	4	6	
Инверсиялық көшерлер			$\bar{3}$	$\bar{4}$	$\bar{6}$	Жабық
Симметрия тегисликлері	m					
Винтлик көшерлер		2_1	3_1 3_2	4_1 4_2 4_3	6_1 6_2 6_3 6_4 6_5	Ашық
Жылжып шашыратыўшы симметрия тегисликлері	a	b	c	n	d	

Базы бир белгилеўлер					
	m		2		2_1
	c		2		2_1
	a		4		4_1
	n		$\bar{4}$		4_2
					4_3

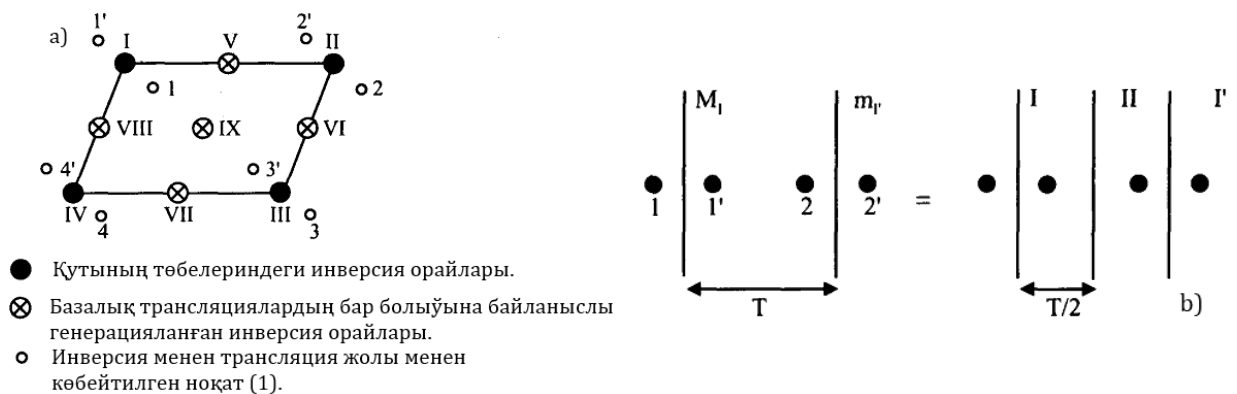
Joqari'da keltirilgen mi'sallar vintlik ko'sherlerdin', ji'lji'p shag'i'li'sti'ri'wshi' simmetriya tegisliklerinin' translyaciya (basqa so'z benen aytqanda birinshi ta'rtpi vintlik ko'sher) si'yaqli' sheksiz ciklli'q gruppalardi' sa'wlenendiretug'i'nli'g'i'nko'rsetedi. A'debiyatta olardi' simmetriyani'n' ashi'q elementleri dep ataydi'. Usi'g'an sa'ykes simmetriyani'n' jabi'q elementleri dep noqatli'q gruppalar qurami'ndag'i' buri'w ha'm buri'w-inversiyali'q ko'sherlerin ataydi'.

Simmetriyani'n' ken'isliktegi gruppalari'n payda etiwshi simmetriya elementlerinin' toli'q dizimi 1.7-kestede berilgen.

1.3.4. Quti'dag'i' simmetriya elementlerin generaciyalaw

Solay etip ha'r qa'dem sayi'n simmetriyani'n' ken'isliktegi gruppasi'ni'n' qurami' ayqi'nlaspaqta:

- oni'n' (simmetriyani'n' ken'isliktegi gruppasi'ni'n') tiykari'nda translyaciya'li'q gruppalardi'n' biri jatadi' (sheksiz ta'rtpili);
- og'an noqatli'q gruppalardi'n' biri kiredi (shekli ta'rtpili);
- simmetriya elementlerinin' ruqsat etilgen ji'ynag'i'n vintlik ko'sherler menen ji'lji'p shag'i'li'sti'ri'wii' simmetriya tegislikleri toli'qti'radi';
- simmetriya elementleri pa'njerenin' barli'q tu'yinleri boyi'nsha translyaciya'lar menen ko'beytilgen.



1.3.3-su'wret. Translyaciya'dag'i' (a) inversiya oraylari'ni'n' ha'm (b) aynali'q tegisliklerdin' ko'beyiwi.

Bunnan keyin translyaciya'ni'n' birlik operaciya'ni'n' tikkeley ju'zege keltiretug'i'n effektin qarap shi'g'i'w za'ru'r. Bul effekt quti'dag'i' buri'w, inversiya'li'q ha'm vintlik ko'sherlerdin' jan'a poziciya'si'n generaciyalawdan ibarat. Gruppali'q algebra terminlerinde bunday generaciyalaw sheksiz ta'rtpili gruppasi'n' elementlerin ko'beytiw operaciya'ni'n' na'tiyjesi boli'p tabi'ladi'. Bazi' bir xarakterli situaciya'ni' qarap o'temiz:

a) Inversiya orayi'ni'n' ko'beyiwi.

1.3.3-a su'wrette keltirilgen sxemada simmetriya orayi' koordinata basi'nda ha'm sog'an sa'ykes quti'ni'n' to'belerinde belgilengen.

1-1' noqatlari'ni'n' inverslik konfiguraciya'si'ni'n' qabi'rg'a bag'i'ti'ndag'i' translyaciya'da ekvivalent bol'gan 2-2' noqatqa o'tetug'i'nli'g'i' ko'rinip tur. Biraq bunday jag'dayda 1-2' ha'm 1'-2 noqatlari' jup-jup o'z-ara inverslik boli'p tabi'ladi'. Jan'a inversiya orayi' joqarg'i' qabi'rg'ani'n' ortasi'nda jaylasadi'. Tap usi'nday jag'day 3-3' ha'm 4-4' noqatlari'nda barli'q qabi'rg'alardi'n' ha'm parallelogramni'n' diagonallari'ni'n' ortasi'nda da baqlanadi'.

Joqari'dag'i' paraqrafti'n' analitika'li'q formasi'nda bul jag'daydi' koordinata basi'na qarata "taza" inversiya matricasi'n "taza" translyaciya matricasi'na ko'beytiw joli' menen ko'rsetiwge boladi':

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Ko'beytiw na'tiyjesi

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

qabi'rg'ani'n' ortasi'ndag'i' inversiya orayi' operatori' boli'p tabi'ladi' (1.3.3-su'wret). Solay etip orayg'a qarata simmetriyali'q gruppada inversiya oraylari' pa'njerenin' tek tu'yinlerinde emes, al ha'r bir quti'dag'i' arnawli' poziciyalar seriyasi'nda da jaylasadi' eken.

Juwmag'i': Bir quti'g'i' 8 dana bir birinen g'a'rezsiz inversiya orayi' sa'ykes keledi: birewi parallelepipedtin' to'besinde, u'shewi qaptallardi'n' oraylari'nda, u'shewi qabi'rg'alardi'n' ortasi'nda, beriwi ko'lemnin' orayi'nda.

b) **Simmetriya tegisliklerinin' ko'beyiwi**. Bul jerde de uqsas logika qollani'ladi': sxemada - Translyaciya T + ploskost m = T/2 translyaciyasi' + m tegisligi(1.3.3-b su'wret).

v) **Simmetriya tegisliklerinin' kesilisiw si'zi'qlari'nda simmetriya ko'sherlerinin' generaciyasi'**. Bul jerde elementar quti'dag'i' jan'a simmetriya ko'sherlerinin' payda boli'wi'ni'n' eki tu'ri haqqi'nda ga'p etiw mu'mkin. Eger eki aylani'q simmetriya tegisligi α mu'yeshi menen kesilisetug'i'n bolsa, onda kesilisiw si'zi'g'i' barli'q waqi'tta da 2α elementar mu'yeshke iye simmetriya ko'sheri boli'p tabi'ladi'. Eger kesilisiwde ji'lji'p shashi'rati'wshi' simmetriya tegisligi qatnasatug'i'n bolsa, onda na'tiyje a'piwayi' buri'w yamasa vintlik simmetriya ko'sheri boladi'. Olardi'n' o'z ara jaylasi'wlari' tegisliklerdin' kesilisiw mu'yeshi menen translyaciyani'n' bag'i'ti'nan g'a'rezli boladi'.

Ortogonal'li'q kesilisiwdin' bir neshe ko'rgizbeli variantlari' 1.3.4-su'wrette berilgen:

- ekinshi ta'rtpi buri'w mu'yeshi

eki aynali'q mm aynali'q shag'i'li'sti'ri'w tegisliklerinin' kesilisiw si'zi'g'i' si'pati'nda (a);

eki ji'lji'p tag'i'li'sti'ratug'i'n tegisliklerdin' kesilisiw si'zi'g'i' si'pati'nda (b);

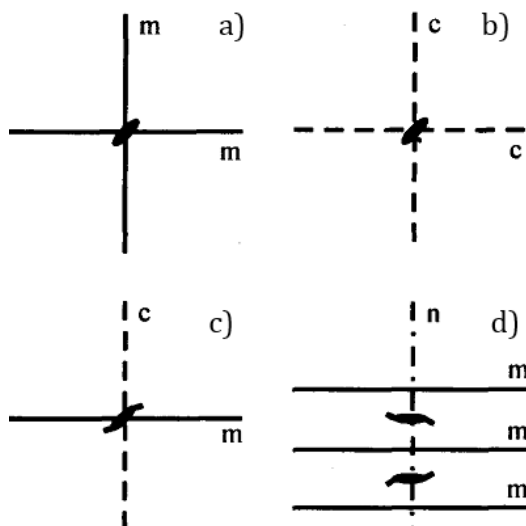
- ekinshi ta'rtpi vintlik ko'sheri:

aynali'q shag'i'li'sti'ri'wshi' ha'm ji'lji'p shag'i'li'sti'ri'wshi' tegisliklerdin' kesilisiw (mc) si'zi'g'i' si'pati'nda (c cu'wret);

mn tegisliklerinin' kesilisiw si'zi'g'i'nan awi'sqan poziciyada (d).

1.3.1. Ken'siliklik gruppalardi' belgilew haqqi'nda

Ken'isliktegi gruppa noqatli'q gruppani'n' biri menen translyaciyali'q gruppani'n' birinin' qosi'ndi'si' bolg'an sheksiz ta'rtpi gruppa boli'p tabi'ladi'. Ken'isliktegi mu'mkin bolg'an gruppalardi'n' sani'ni'n' 230 ekenligi 1891 g. E.S.Fedorov ha'm A.SHenflis ta'repinen ani'qlandi'. Ha'r bir singoniya ushi'n ken'isliktegi gruppalardi'n' sani' 1.1-kestede berilgen.



1.3.4-su'wret.

Simmetriya tegisliklari kesiliskende
simmetriya ko'sherlarining
generatsiyalari'wi' (payda bo'li'wi')

Ken'islikdagi gruppalarini' belgilovlarida joylashda keltirilgan kristallografiyalik simvolika qollaniladi'. Birinchi o'rinida Bragg pa'njeresinin' simvoli, bunnadan keyin [noqatli'q gruppaga'ni' si'yaqli', 1.2.3-su'wretke qaran'i'z] shartli turgan' radda bag'i'tlardini' izbe-izligida ayni' ha'm jami'q simmetriya elementlari arasi'nan gruppagini' generatorlari' jaziladi'. Xali'q arali'q kesimlardagi ken'isliklik gruppagini' nomeri ham beriladi. A'ldiyatda belgili bir gruppagini' qisqa yamasa toli'q belgilovlari ham beriladi. Qisqacha belgilov gruppagini' qurami'ni aniqlawga mu'mkinshilik beretug'i'ni jetkilikli generatordini' jinyag'i'nan turadi'. Toli'q belgilovda barli'q simmetriya ko'sherlari (bag'i'tlardini' tap shunday izbe-izligida) beriladi. To'mengi singoniyalardi' 1 simvoli berilgan koordinata boshlari bag'i'tida simmetriya ko'sherinin' bo'lmaytug'i'ni' an'gartadi'. Bul jag'day ayniqsha ko'sherdini' ham qutini' saylab aliw'di' atay o'tiwga mu'mkinshilik beradi. Misali':

monoklinlik 14-sanli' gruppasi, R_{21}/s yamasa $R_{121}/s1$
ortorombali'q 63-sanli' gruppasi, S_{mcm} yamasa $S 2/m 2/s 2_1/m$
kubli'q 206-sanli' gruppasi, $Ia\bar{3}$ yamasa $I_{21}/a\bar{3}$
kubli'q 226-sanli' gruppasi, $Fm\bar{3}m$ yamasa F_{432}/s

Simmetriyani'ni ken'islikdagi gruppalarini' belgilovlarida menen bir qatarda grafikali'q forma da qollaniladi': elementar qutidagi' barli'q simmetriya elementlarini' joylashi'wi'; elementar qutidagi' uliwmalik a'holida turgan noqatlardi'ni orbitalari' sa'wlelendiriladi'. Har bir gruppasi ushuni' kesimlarda uliwmalik ha'm dara ekvivalentlik pozitsiyalarda turgan noqatlardi'ni duri's sistemasi'ni'ni koordinatalari' kirgizilgan. Ushunday jollar menen noqatlardi'ni orbitasi' arqali' gruppagini' sa'wlelendiriw atomli'q-kristalli'q strukturani' tashkil qiladigan' tiykari' bo'lib tabiladi'.

1.3.6. $mm2$ ushuni' a'piwayi' ken'isliklik gruppalar

Har bir ken'islikdagi gruppagini' genezisi boshlang'i'sh noqat si'patida belgili bir noqatli'q gruppaga iye boladi'. Sonini' menen birga ham bir noqatli'q gruppasi sa'ykes ken'islikdagi gruppalarini'dini' seriyasi'ni keltirib shi'g'ari'wg'a mu'mkinshilik beradi. Misal retida ortorombali'q singoniyani'ni gruppalarini'ni' biri ushuni' ushunday keltirib shi'g'ari'w'dini' logikali'q izbe-izligini keltiremiz.

1.1-kesimda sa'ykes bunday singoniyada 59 ken'islikdagi gruppasi bar; olardi'ni' jigirma ekisi $mm2$ gruppasi'na tiyisli. Dastlabki gruppasi si'patida $mm2$ gruppasi'ni alimiz. Maseleni a'piwayi' pa'njerege iye ken'islikdagi gruppaga shekem shekleymiz. Bul noqatli'q gruppagini'ni' jetkilikli generatori' bo'lib eki simmetriya tegisligi xizmet etadi. Olar sa'ykes OX

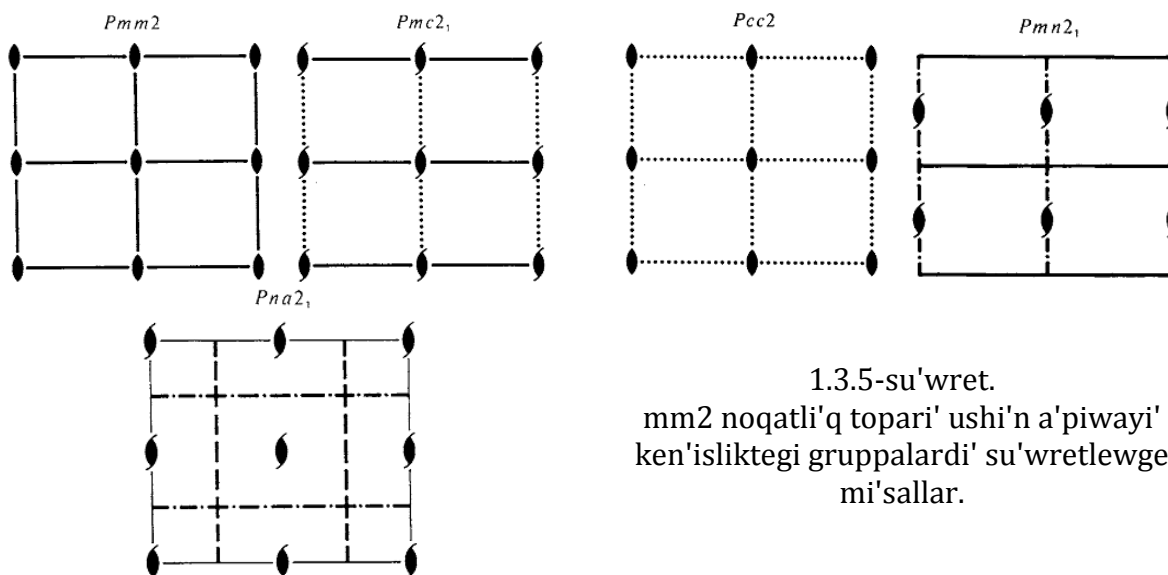
ha'm OY tegisliklerine perpendikulyar joylasqan. Ken'isliktegi gruppalar'ga o'tkende bul aynali'q tegislikler ushi'n tuwi'ndi' si'pati'nda ji'lji'p shashi'rati'wshi' simmetriya tegisligi ali'nadi'. Na'tiyjede mi'naday variantlardi' alami'z:

$$\begin{aligned} (100) \quad & m, b, s, n = (b + s)/2, \\ (010) \quad & m, a, s, n = (a + s)/2. \end{aligned}$$

Bunnan keyin ken'isliktegi gruppalar simmetriya tegisliklerinin' jup kombinacijalari'nan payda etiledi. A'piwayi' kombinatorika 16 sani'n beredi; eger kristallografiyalı'q teppe-ten'likti esapqa alsaq ($ma = bm$ tipindegi teppe-ten'lik) on dana kenisliktegi gruppa qaladi':

$Pmm2, Pmc2_1, Rss2, Pma2, Rsa2_1, Pnc2, Pmn2_1, Rba2, Pna2_1, Rnn2$.

Nomerleri 25-27, 31, 33 gruppalar'dag'i' simmetriya elemnetlerinin' joylasi'wlari' 1.3.5-su'wrette keltirilgen.



1.3.5-su'wret.
mm2 noqatli'q topari' ushi'n a'piwayi'
ken'isliktegi gruppalar'di' su'wretlewge
mi'sallar.

Tap usi'nday belgilewlerge uqsas belgilewler eki o'lishemli gruppalar'di' belgilew ushi'n da qollani'ladi'. Bul jag'dayda tek ji'lji'p shag'i'li'sti'ri'wshi' si'zi'qlar g'ana ashi'q simmetriya elementleri boli'p tabi'ladi'. Olardi' g arkali' belgileydi. Mi'sal retinde $p2gg$ gruppasi'n ko'rsetiw mumkin. Oni'n' simmetriyasi' 1.2.1-su'wrette keltirilgen parkettin' konstrukciyasi'na sa'ykes keledi.

1.4-bap. Belgili bolg'an strukturani'n' toli'q ta'riyipleniwi

1.4.1. Uli'wmali'q eskertiwler. Kristallografiyalı'q terminologiya

Belgili struktura haqqi'ndag'i' mag'li'wmatlar informaciyanı'n' eki qa'ddine sa'ykes keliwshi xarakteristikalar'di'n' belgili bir ji'ynag'i'nan turadi':

- en' da'slepki mag'li'wmatlar - strukturalı'q tip; singoniya; noqatli'q gruppa; Bravais pa'njeresi; pa'njere turaqli'lari';

- toli'q mag'li'wmatlar - jokari'dag'i' mag'li'wmatlar, solar menen birge elementar quti'dag'i' atomlar sani'; simmetriyanı'n' ken'isliktegi gruppasi'; atomlardı'n' ken'isliktegi gruppanı'n' ekvivalent poziciyalari' boyi'nsha tarqali'wi'; ekvivalent poziciyalardag'i' ha'r bir atomni'n' koordinatalari'ni'n' sanli' ma'nisleri.

Solay etip ayqi'n strukturani' izbe-iz ta'riyiplew en' da'slepki mag'li'wmatlardan baslanadi'. Olardi' originalli'q dereklardan aladi' (masali' ilimiy jurnallardag'i' maqalalardan, ICPDS mag'li'wmatlar bazasi'nan ha'm tag'i' basqalardan). Elementar quti'dag'i' atomlardi'n' ken'isliktegi konfiguratsiyalari' haqqi'ndag'i' toli'q mag'li'wmatlar arnawli' kestelerdi paydalani'wdi' talap etedi: International Tables for Crystallography. Vol. A. (Xali'q arali'q kristallograflar awqami' ta'repinen baspadan shi'g'ari'lg'an).

Bul ma'selenin' o'zgesheliklerin ko'riw ushi'n yari'm o'tkizgish ha'm metalli'q fazalardi'n' o'zlerine xarakterli bolg'an strukturalari'n ko'rip o'tken maqsetke muwapi'q keledi.

1.4.4. Strukturani' ta'riyiplewge mi'sallar

Kremniy, Si

Almazdi'n' strukturali'q tipi, A4 yamasa cF8 tu'rinde belgilenedi (son'g'i' belgilew racionalli'q: s - kubli'q singoniya, F- qaptalda oraylasqan pa'njere 8 – quti'da 8 atom bar).

Singoniya	kubli'q;
Noqatli'q grupp	$m\bar{3}m$;
Pa'njere	qaptalda oraylasqan;
Parametr	$a = 5,420$ angstrom;
Elementar quti'dag'i' atomlar sani'	$A = 8$;
Simmetriyani'n' ken'isliktegi gruppasi'	$Fd\bar{3}m$;
Gruppani'n' xali'q arali'q kestedegi qatar sani'	No 227;
Atomlar iyeleytug'i'n pozitsiyalar	$8(s)$;

227-sanli' ken'isliklik gruppada $8(s)$ dara ekvivalent pozitsiyalar bi'layi'nsha ta'riyiplenedi

$(0, 0, 0; 0, 1/2, 1/2; 1/2, 0, 1/2; 1/2, 1/2, 0) + \dots$
 Si 8 (s) 0,0,0; $1/4, 1/4, 1/4$

$8(c)$ pozitsiyasi' ushi'n uli'wmali'q $h + k = 2n$, $h + l = 2n$, $k + l = 2n$ tu'rindegi uli'wmali'q sha'rt penen bir qatarda arnawli' $h + k + l = 2n$ yamasa $h + k + l = 4n$ tu'rindegi qosi'msha sha'rt ori'n aladi'.

Strukturali'q semeystvoni'n' kurami' - S, Ge, Si, Sn (sur qalayi').

Galliy fosfidi, GaP

Sfalerittin' yamasa cink obmankasi'ni'n' strukturali'q tipi (yamasa VZ; yamasa cF8).

Singoniya	kubli'q;
Noqatli'q grupp	$\bar{4}3m$;
Pa'njere	qaptalda oraylasqan;
Parametr	$a = 5,436$ angstrom;
Elementar quti'dag'i' atomlar sani'	$A = 8$;
Quti'dag'i' formulali'q birlikler (GaP) sani'	$M = 4$;
Simmetriyani'n' ken'isliktegi gruppasi'	$F\bar{4}3m$;

Xali'q arali'q kestelerdeg qatar sani'	No 216;
Atomlar joylasqan poziciyalar	4(a) ha'm 4(s).

Dara ekvivalent awhallar 4(a) ha'm 4 (s) bi'layi'nsha ta'riyplenedi (0, 0, 0; 0, 1/2, 1/2; 1/2, 0, 1/2; 1/2, 1/2, 0) + ...

R	4	(s)	1/4, 1/4, 1/4
Ga	4	(a)	0,0,0

Mu'mkin bolg'an shag'i'li'si'wlardi' (yag'ni'y rentgen yamasa basqa da nurlardi'n' kristalli'q pa'njereden difrakciyalig' shag'i'li'si'wi'na) qoyi'latug'i'n sha'rtler qaptalda oraylasqan kubli'q pa'ndere ushi'n uli'wmali'q: $h + k = 2n$, $h + l = 2n$, $k + l = 2n$. Bul struktura almazdi'n' s trukturasina ju'da' jaqi'n. Sfaleritte koordinatalardi'n' sanli'q ma'nislerinin' saqlanatug'i'nli'gi' ko'rinip tur. Biraq atomlar eki sortqa bo'lingen. Bunday jag'dayda binarli'q birikpe taza elementten to'menlew simmetriyasi' menen ayri'ladi'. Bul jag'day difrakciyalig' maksimumlardin' o'shiwinin' qatan'li'gi' to'menlew bolg'an sha'rtlerinde ko'rinedi.

Strukturalig' semeystvoni'n' qurami' – 150 den aslami'raq birikpeler.

Marganectin' alfa-modifikaciyasi', α -Mn.

Strukturalig' tip α -Mn, (A12 yamasa si58 tu'rinde de jazi'ladi').

Singoniya	kubli'q;
Noqatli'q grupp	$\bar{4}3m$;
Pa'njere	ko'lemde oraylasqan;
Parametr	$a = 8,896$ angstrom;
Elementar quti'dag'i' atomlar sani'	$A = 58$;
Simmetriyani'n' ken'isliktegi gruppasi'	$I\bar{4}3m$;
Xali'q arali'q kestelerdeg qatar sani'	No 217;

Atomlar to'mendegidey poziciyalarda joylasqan:

(0, 0, 0; 1/2, 1/2, 1/2) +

.....

Mn(1)	2	(a)	0, 0, 0	
Mn(2)	8	(c)	$x, x, x; x, -x, -x; -x, x, -x; -x, -x, x$	$x = 0.317$
Mn(3)	24	(g)	$x, x, z; z, x, x; x, z, x; -x, x, -z;$ $-z, x, -x; -x, z, -x; x, -x, -z; z, -x, -x;$ $x, -z, -x; -x, -x, z; -z, -x, x; -x, -z, x$	$x=0.356 \quad z=0.042$
Mn(4)	24	(g*)	(g) позициядағы сыяқлы	$x=0.089 \quad z=0.278$

Joqari'da keltirilgen struktura o'zine ta'n bir qatar o'zgesheliklarga iye. Bul o'zgeshelikler tiykari'nda ayi'ri'm kristallografiyalig' jag'daylardin' tu'sindiriw mumkin:

• Tek a'piwayi' strukturalarda g'ana (mi'sali' Cu, W ha'm tag'i' basqalar) ha'r bir atom Brave pa'njeresinin' tu'yinine sa'ykes keledi. Al bul jerde bolsa biz ko'lemde oraylasqan pa'njerege ha'm ha'r bir pa'njerede 58 atomg'a iyemiz. Demek α -Mn te pa'njerenin' ha'r bir tu'yini menen 29 atomni'n' konfiguraciyasi'n baylani'sti'ramiz;

• Marganectin' strukturasi' intuitivlik logikag'a qayshi' keledi – taza elementtin' atomlari' to'rt tu'rdegi quti'g'a bo'lingan boli'p shi'g'adi'. Soni'n' menen birge geometriyalig' bahalawlar (a) ha'm (s) pozitsiyalari'ndag'i' atomlardi'n' effektivlik radiuslari' (g) ha'm (g*) pozitsiyalardag'i' atomlardi'n' effektivlik radiusi'nan 5.5 procentke artiq' boli'p shi'g'adi'. Bul o'tiw (perexodnoy metaldi'n') metalli'ni'n' a'piwayi' emes fizikali'q qat'iyetleri (antiferromagnetizmda qosi'p esaplag'anda) strukturani'n' o'zine ta'n o'zgesheliklerine sa'ykes keledi [yag'ni'y eki- (to'rt-) qurawshi'dan turatug'i'n birikpelerdin' belgilerine iye].

• Joqari'da keltirilgan mi'sallardan ayi'rmasi' quti'dag'i' atomlardi'n' koordinatalari' a'piwayi' bo'lshekler menen ta'riyiplenbeydi. Qala berse 24 (g) dara ekvivalent awhal x penen z tin' ha'r qi'yli' sanli'q ma'nislerinin' esabi'nan eki realizatsiyada ko'rsetiledi. Bul simmetriyani'n' da, topologiyani'n' da principinde bir ken'isliklik gruppani'n', ha'tte bir orbitani'n' sheklerinde qa'legen sandag'i' individuallig' strukturalardi'n' payda boli'wi'na tosqi'nli'q jasamaytug'i'nli'g'i'n demonstratsiyalaydi'. Tek g'ana koordinatalardi'n' erkinlik ja'rejesin esapqa ali'w talap etiledi: mi'sali' uli'wmali'q awhal ushi'n x, u, z koordinatalari'n variatsiyalaw mu'mkin; 24(g) pozitsiyasi' ushi'n eki x ha'm z o'geriwshilerin, al 8(c) pozitsiyasi' ushi'n tek x o'zgeriwshisin variatsiyalawg'a boladi'. Al 2(a) pozitsiyasi' variatsiyasi'z parametrlar ushi'n.

Strukturalig' semeystvosi'ni'n' qurami' - 60 intermetall birikpeler.

Intermetallid, $ZrCo_2$

Strukturalig' tip – Laves fazasi' $MgCu_2(S15 \text{ yamasa } cF24)$.

Singoniya	kubli'q;
Noqatli'q grupp	m3m;
Pa'njere	qaptalda oraylasqan;
Parametr	a = 6,940 angstrom;
Elementar quti'dag'i' atomlar sani'	A = 24;
Formulali'q birlikler sani'	M = 8;
Simmetriyani'n' ken'isliktegi gruppasi'	Fd3m;
Xali'q arali'q kestelerdegi qatar sani'	No 227;

Atomlar mi'naday pozitsiyalarda jaylasqan:

(0,0,0; 0, 1/2, 1/2; 1/2, 0, 1/2; 1/2, 1/2, 0) + ...

Zr 8 (a) 0,0,0; 1/4, 1/4, 1/4

So 16 (d) 5/8, 5/8, 5/8; 5/8, 7/8, 7/8; 7/8, 5/8, 7/8; 7/8, 7/8, 5/8

Bunday strukturalig' tip binarli'q ha'm ko'p qurawshi'g'a iye metallig' sistemalarda ken'nen tarqalg'an. Barli'q jag'daylarda da hal diagrammalari'nda Laves fazasi' AV_2 formulasi'na sa'ykes keletug'i'n belgili quramg'a iye boladi'. Bul fenomendi qurawshi'lardi'n' valentlik qatnaslari' menen tu'sindiriwge bolmaydi'. Laves fazalari'ni'n' payda boli'wi' "razmerlik faktor" menen qadag'alanadi: 8(a) pozitsiyasi'ndag'i' A qurawshi'si' 16(d) pozitsiyasi'ndag'i' V qurawshi'si'na sali'sti'rg'anda u'lken atomli'q radius penen xarakterlenedi (22.5 procentke u'lken), shem atomi' komponenta V v pozitsii 16(d).

Strukturalig' semeystvoni'n' kurami' – shama menen 500 dey qos ha'm u'shlik birikpeler.

Intermetallid, $Al_{12}W$

Strukturalig' tip $Al_{12}W$, (yamasa sI26).

Singoniya	kubli'q;
Noqatli'q grupp	m3;
Pa'njere	ko'lemde oraylasqan;
Parametr	a = 7,580 angstrom;
Elementar quti'dag'i' atomlar sani'	A = 26;
Quti'dag'i' formulali'q birlikler sani'	M = 2;
Ken'isliktegi grupp	Im3;
Kestedegi qatar sani'	No. 204.

Atomlar to'mende ko'rsetilgen pozitsiyalarda joylasqan:

(0, 0, 0; 1/2, 1/2, 1/2) +

.....

Al	24	(g)	0, y, z; z, 0, y; y, z, 0; 0, -y, -z; -z, 0, -y; -y, -z, 0; 0, y, -z; -z, 0, y; y, -z, 0; 0, -y, z; z, 0, -y; -y, z, 0;	y=0.184; z=0.309;
W	2	(a)	0, 0, 0	

Joqari' temperaturali' asa o'tkizgishlar problemalari' intensivli tu'rde rawajlang'an da'wirlerde bul quramali' oksid bazali'q materiallardin' birine aylandi'. Atomlardin' quti'dag'i' konfiguratsiyalari'ni'n' detallari' bunday strukturalardi' ken'nen belgili bolg'an seggentoelektriklik kristallar bolg'an $VaTiO_3$ kristallari'na jaqi'nlasti'radi'. Usi'ni'n' saldari'nan a'debiyatta bul birikpeni strukturalari' boyi'nsha perovskitlerdin' strukturali'q tipi dep atalatug'i'n tipke qosadi'.

1.5-bap. Ti'g'i'z jaylasti'ri'w prinsipleri. Politipiya

1.5.1. Uli'wmali'q eskertiwler. Kristalloximiya oblasti'nan bazi' bir mag'li'wmatlar

Jokari'da keltirilgen materiallardin' barli'g'i' da translyatsiyali'q pa'njere koncepciyasi'nan kelip shiqqan halda kristalli'q strukturani' ta'riyiplewge tiykarlang'an. Bayanlang'an noqatlardin' duri's sistemasi' teoriiyasi' ko'z-qaraslardin' jabi'q sistemasi' bolip tabiladi' ha'm ol ha'r qi'yli' atomli'q strukturalardi' izbe-iz tu'sindiriwge mu'mkinshilik beredi. Bunday ta'riyiplewdin' belgili bir da'rejede abstraktli' ekenligi ta'biyiy ha'm fizikali'q materialtani'w ma'selelerinde ha'r qi'yli' modellik sxemalar menen tabisli' tu'rde toli'qti'ri'li'p bari'ladi'. Bul kursti'n' sheklerinde strukturani' atomlardin' ti'g'i'z etip jaylasti'ri'lg'an sistemasi' dep qarawg'a tiykarlang'an usi'ldi' rawajlandi'rami'z. Termodinamikali'q ko'z-qaraslarda qatti' denelerdi atomli'q qa'ddide ken'islik kompaktli' tu'rde tolti'ri'lg'an dep esaplani'ladi'. Sonli'qtan biz qarayi'n dep atirg'an ma'seleni fizikali'q jaqtan toli'q tiykarlang'an dep esaplaymi'z. Biz to'mende atomli'q strukturalardi' tap usi'nday jollar menen traktovkalag'anda paydalani'latug'i'n tiykarli' tu'sinikler menen tani'sami'z.

Strukturani'n' elementi si'pati'nda endi noqat (atomni'n' orayi') emes, al atomni'n' geometriyalı'q obrazi' si'pati'nda qollani'latug'i'n sfera ali'nadi'. Usi'g'an sa'ykes atomli'q radius tu'sinigi payda boladi'. Ionli'q kristallar menen molekullı'q birikpelerdi u'yrengende atomli'q radius tu'sinigi onsha turaqli' emes tu'sinikke aylanadi'. Sebebi valentlilikler menen baylani'slardin' uzi'nli'qlari'ni'n' shamalari' ko'p jag'daylarda o'zgermeli shamalar bolip tabiladi'. Biraq ko'p sanli' matelli'q ha'm fri'm o'tkizgishli fazalarda atomli'q radiusti'n' shaması' ornı'qli' ma'niske iye boladi'. Olardi'n' ma'nisin eksperimentlerde ani'qlang'an pa'njerenin' parametrleri menen quti'dag'i' atomlar sani'nan esaplaw arqali' tabadi'. En'

a'piwayi' mi'sal retinde mi'sti'n' strukturali'q tipin ali'w mu'mkin, qaptalda oraylasqan kub, quti'da 4 atom jaylasadi', $cF4$. Bul jag'dayda R atomli'q radiusi' quti'ni'n' to'besi menen qatpaldi'n' orayi' arasi'ndag'i' qashi'qli'q si'pati'nda esplanadi', yag'ni'y $R = \frac{a\sqrt{2}}{4}$ shamasina ten'. Metalliq mi's ushi'n $a = 3,61 \text{ \AA}$. Sonli'qtan $R = 1,28 \text{ \AA}$ shamasin' alami'z.

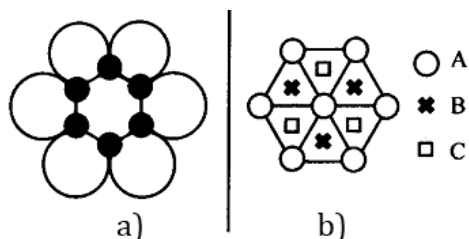
Jaylasti'ri'wdi'n' xarakteristikasi'ni'n' biri koordinaciyali'q san (KS) boli'p tabi'ladi'. Ko'rgizbeli formada bul sanni'n' ma'nisi strukturani'n' berilgen poziciyasi'ndag'i' atomdi' qorshap turg'an qon'si'lari'ni'n' sani' boli'p tabi'ladi'. Mi'sali' volframni'n' strukturasi'nda atomlar ko'lemde oraylasqan kubli'q quti'ni'n' tu'yinlerinin' poziciyalari'n' iyeleydi. Bunday strukturada quti'ni'n' orayi'nda jaylasqan atomni'n' quti'ni'n' to'besinde jaylasqan 8 qon'si'si'ni'n' bar ekenligin an'sat tu'rde ko'z aldi'g'a keltiriw mumkin. Demek KS = 8 eken.

Kristallografiyani'n' bul bo'limi haqqi'ndag'i' bilimlerde metalliq fazalardi'n' ha'm almaz semeystvosini'n' strukturalari'n' tallawdi'n' na'tiyjesinde ali'w mu'mkin.

1.5.2. SHarlardi' ti'g'i'z etip jaylasti'ri'w

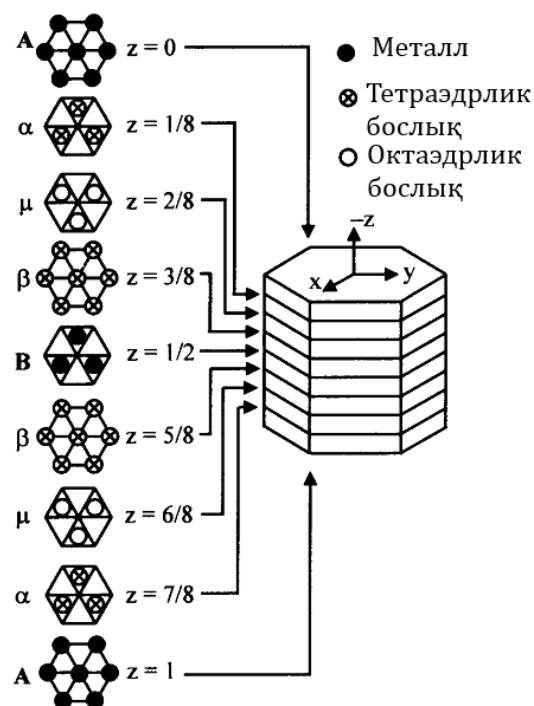
Belgilewler sistemasi'. Biz qarayi'n dep ati'rg'an ma'seleni sheshiwdegi baslang'i'sh konfiguraciya birdey R radiusi'na iye sharlardi'n' tegisliktegi ti'g'i'z etip jaylasti'ri'li'wi' boli'p tabi'ladi'. Bul jag'dayda ha'r bir shar birdey kashi'qli'qtagi' alti' konfiguraciya'ga iye boladi'. Soni'n' menen birge ha'r bir shardi' kese-kesiminde alti' u'sh mu'yeshli bolsi'qlar qorshap turadi'. Bul u'sh mu'yeshlikler kelesi qatlamdag'i' sharlardi' jaylasti'ri'wdag'i' mu'mkin bolg'an ori'nlar boli'p tabi'ladi' (1.5.1-su'wret). Ti'g'i'z etip jaylasti'ri'w ekinshi qatlamdag'i' sharlardi'n' birinshi qatlamni'n' u'stindeg'i' oyi'q ori'nlarida jaylasi'wi'n talap etedi. Usi'nday jag'dayda oyi'qlardi'n' oraylari'n' eki gruppaga bo'liwga bolatug'i'nli'g'i' ani'q ko'rinedi. Sebebi ekinshi qatlam birinshi qatlamdag'i' oyi'qlardi'n' tek yari'mi'n g'ana iyeleydi. SHarlardi'n' poziciyalari'ni'n' ji'ynag'i' ushi'n mi'naday belgilewlerdi qabi'l etemiz: A – birinshi qatlam, V yamasa S – ekinshi qatlam ushi'n variantlar. Bunday jag'dayda u'shinshi qatlam ushi'n eki variant ruqsat etilgen: A yamasa S. Bunnan keyingi jaylasti'ri'wlar kombinatorikani' ele de ken'eytedi. Kristallar ushi'n jaylasti'ri'wlar sistemasi' da'wirli bolatug'i'n bolg'anli'qtan qatlamlardi'n' kombinaciyasi' bazi' bir qatlamnan keyin qaytalani'wi' kerek. Bunday terminlerde birinshi qaytalani'wg'a shekemgi qatlamlardi'n' sani' strukturani'n' xarakteristikasi' boli'p tabi'ladi'.

O'lsheмлиk xarakteristikalar. 1.5.1-sxema boyi'nsha ori'nlang'an a'piwayi' esaplawlar tegis kese-kesimde sharlardi'n' matriallari' uli'wma maydanni'n' tek belgili bir bo'limin iyeleytug'i'nli'g'i'n ko'rsetedi: maydandi' tolti'ri'w koefficienti = 0,7777. Bul kese-kesimdegi barli'q u'sh mu'yeshli bosli'qlar birdey o'lshemlerge iye. Olardi'n' ha'r birinin' ortasi'na oranasti'ri'lg'an do'n'gelektin' radiusi' $r \approx 0.5774R$. Birdey radiusqa iye sharlardi' ti'g'i'z etip jaylasti'rsa ken'islikte tolti'ri'w koefficienti = 0.7405. Koordinaciyali'q san 12 strukturadag'i' ha'r bir atomni'n' qorshalg'anli'g'i'n xarakterleydi. Strukturadag'i' bosli'qlar qorshap turg'an atomlardan quralg'an ko'p mu'yeshliklerdin' konfiguraciyalari' boyi'nsha ayri'ladi': Tetraedrlik bosli'qlar to'rt atom menen qorshalg'an, og'an radiusi' $r_t = 0.225R$ shamasina ten' shardi' jaylasti'ri'w mumkin. Oktaedrlik bosli'q alti' atom menen qorshalg'an, bul bolsi'qqa radiusi' $r_o = 0.414R$ shamasina ten' shardi' jaylasti'ri'w mu'mkin.



1.5.1-su'wret.
SHarlardi'n' ti'g'i'z jaylasti'ri'li'wi'.
a) – tegis kesimde,
b) – qatlamlar belgilewlerinde.

1.5.2-su'wret.
Eki qatlamli' geksagonalli'q
jaylasti'ri'wdag'i' pozitsiyalardi'n' sxemasi'.



Jaylasti'ri'wlardi'n' tiplerinin' belgileri ayri'qsha bag'i't dep atalug'i'n bag'i'ttag'i' qaytalani'w da'wiri sheginegi qatlarm'lardi'n' izbe-izligin o'z ishine aladi'. Qi'sqasha simvol qatlarm'lardi'n' sani'n ha'm singoniyani' ayi'ri'p ko'rsetedi. Bunday simvollarda ayi'ri'm metallardag'i' atomlardi'n' (atomli'q qatlamlardi'n') jaylasi'wlari' bi'layi'nsha ta'riyiplenedi:

San	Jaylasti'ri'w tipi	Simvol	Ken'isliktegi grupp	Strukturali'q tip
2	AV A...	2N	P6 ₃ /mmc	Mg
3	AVS A...	3S	Fm3m	Cu
4	AVSV A...	4N	P6 ₃ /mmc	La
9	AVSVSASAV A...	9R	R3m	Sm

Bir qatar paydali' mi'sallardi' qarap o'temiz.

Ti'g'i'z geksagonalli'q jaylasti'ri'w (TGJ). Bunnan aldi'n'g'i' bapti'n' terminlerinde bul geksagonalli'q hP2 quti'da eki atomg'a iye magniydin' strukturali'q tipi boli'p tabi'ladi'. Alternativlik traktovka – (001) tegislikler semeystvosi'ni'n' eki qatlamli'q jaylasti'ri'li'wi'. Bunday struktura 1.5.2-su'wrette keltirilgen. Su'wrettegi arnawli' belgiler bul strukturadag'i' tetraedrlik ha'm oktaedrlik bosli'qlardi'n' jaylasi'wlari'n ko'rsetedi. Esaplawlar mi'naday balansti' beredi: quti'da 2 metalli'q atom, 2 oktaedrlik bosli'q, 4 tetraedrlik bosli'q bar. Demek ha'm bir atomg'a 1 oktaedrlik ha'm 2 tetraedrlik bosli'q sa'ykes keledi.

Ti'g'i'z kubli'q jaylasti'ri'w (TKJ) tek bir variantta ju'zege keledi – bul mi'sti'n' strukturali'q tipi, ha'm bir qaptalda oraylasqan cF4 kubli'q quti'g'a 4 atom sa'ykes keledi. Jan'a traktovkada bul (111) semeystvosi'na kiriwshi tegisliklerdin' atomlari'ni'n' u'sh qatlamli'q jaylasti'ri'li'wi' boli'p tabi'ladi' (1.5.3-su'wrette karan'i'z). Bul jerde arnawli' bosli'qlardi'n' oraylari'ni'n' pozitsiyalari'n ko'riwge boladi': oktaedrlik (O) – barli'q qabi'rg'alardi'n' ortasi' ha'm ko'lemnin' orayi' – barli'g'i' boli'p ha'r bir quti'g'a 4 dana; tetraedrlik (T) – kishi kublardi'n' (oktantlardi'n') oraylari'nda. Bir quti'gan sa'ykes keliwshi bunday bosli'qlardi'n' sani' 8. Solay etip bosli'qlardi'n' balansi' o'zgerissiz qaladi': metaldi'n' ha'm bir atomi' ushi'n 1-O + 2-T. Basqa ti'g'i'z etip jaylasti'ri'lgan strukturalardan parqi'

sonnan ibarat, bul jag'dayda bir emes, al to'rt dana jaylasti'ri'wlar bag'i'ti' bar. Bul bag'i'tlar kubti'n' barli'q ken'isliklik diagonalari' boli'p tabi'ladi'..

Geksagonalli'q ha'm kubli'q strukturalar arasi'ndag'i' baylani'sti'n' eki aspektine itibar beriw ju'da' paydali'. Birinshi aspekt quti'lardi'n' si'zi'qli' o'lsheplerine tiyisli. Tegisliklerdegi atomlardi'n' konfiguratsiyalari' (001)_{Geks} penen (111)_{kub} birdey, al jaylasti'ri'wlar da'wirlerinin' qatnaslari' 2:3 qatnasi'nday. Sonli'qtan, eger fazali'q o'tiwde qatlamlardi'n' jaylasi'w ta'rtibin o'zgeretug'i'n bolsa, onda elementar quti'ni'n' parametrleri arasi'nda a'piwayi' qatnaslar ori'n aladi':

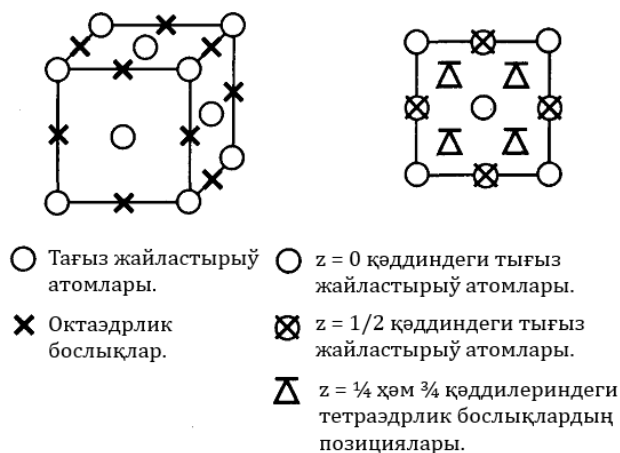
$$a_{\text{Geks}} = \frac{a_{\text{Kub}}}{\sqrt{2}}, \quad c_{\text{Geks}} = \frac{2}{3} a_{\text{Kub}} \sqrt{3}.$$

Bul qatrnaslardan a'piwayi' $\frac{c}{a} = 2\sqrt{2}/\sqrt{3}$ qatnasi' kelip shi'g'adi'. Bul katnas idealli'q 2N jaylasti'ri'wdi' ta'riyiplewi kerek. Haqi'yqati'nda da tek kubli'q ZS jaylasti'ri'w ushi'n birdey radiusi'qa iye sharlar ushi'n o'zi menen o'zi kelisilgen sha'rtler qoyi'lg'an (kubti'n' ko'lemlik diagonalini'n' uzi'nli'gi' barli'q waqi'tta da $a\sqrt{3}$ shamasina ten'). Geksagonalli'q singoniya ushi'n bunday sha'rt joq. Sonli'qtan a'melge ti'g'i'z etip jaylasti'ri'lg'an geksagonalli'q strukturag'a iye kristallarda idealli'q 1.633 shamasina ten' ko'sherlik qatnas ori'n almaydi'. Mi'sali' magniy standartqa jaqi'n, al cink penen cirkoniy ushi'n bul qatnasti'n' shamasini' anomal tu'rde u'lken (shama menen 1.58 ge ten'). Bunday jag'daydi'n' fizikali'q sebebi barli'q atomlardi'n' radiuslari' birdey emesliginde yamasa olardi'n' formasi'ni'n' sferali'q emesliginde boli'wi' mu'mkin.

Jaylasti'ri'w defektleri. ZS ha'm 2N strukturalardi' baylani'sti'ratug'i'n ekinshi aspekt qatlamlardi'n' kombinatorikasi' menen ani'qlanadi'. U'sh o'lshepli jaylasti'ri'wda jaylasti'ri'w qa'tesi (*stackingfaults*) yamasa jaylasti'ri'w defekti dep atalatug'i'n konfiguratsiya payda boladi'.

1.5.3-su'wret.

U'sh qatlamli' kubli'q jaylasti'ri'w ushi'n pozitsiyalar sxemasi'.



Kristallizatsiya processinde ABC... izbe-izligi bazi' bir qatlamnan baslap alternativlik (ha'm ruqsat etilgen) ASV... izbe-izligine aylanadi' dep boljayi'q. Bunday jag'dayda AVSAVSVASV... ten'dey huqi'qqa iye kubli'q strukturalar blogi' payda boladi'. Bul blokta geksagonalli'q VSV izbe-izlikke iye bo'liwshi qatlam payda boladi'. Bul qatlam duri's jaylasi'wdi'n' mu'mkin bolg'an buzi'li'wlari'ni'n' birine mi'sal bola aladi'.

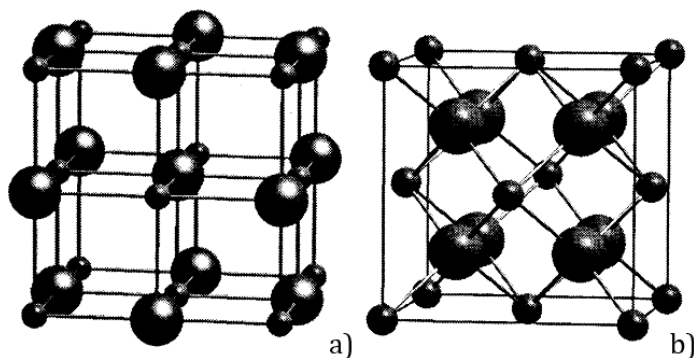
Prototipik jaylasti'ri'wlar arasi'ndag'i' jokari'da atap o'tilgen baylani'slar haqi'yqi'y strukturali'q processlerde ju'zege keledi. Atap aytqanda metalli'q kobalt penen baylani'sli' bolg'an strukturali'q ma'selelerdi sheshiw za'ru'rli'gi "jaylasti'ri'w defekti" fknomenin islep shi'g'i'w za'ru'rli'gin payda etti. QOK $\Leftrightarrow$ TJG (qatpaldi'n oraylasqan kub $\Leftrightarrow$ ti'g'i'z jaylasti'ri'lg'an geksagonalli'q) polimofri'q o'tiwin eksperimentalli'q izertlewlerde bul metalda metastabillik eki fazali' haldi'n' saqlani'wi'ni'n' mumkin ekenligi ani'qlandi'. Usi'g'an

sa'ykes bloklar arasi'ndag'i' shegaralarda geksagonalli'q yamasa kubli'q fazani'n' ju'da' juqa qatlamlari' si'pati'ndla jaylasti'ri'w defektlari baqlanadi'.

1.5.2. Binarli'q birikpeler

Eki qurawshi'g'a (komponentag'a) iye fazalarg'a o'tkende ti'g'i'z jaylasti'ri'w modelin paydalani'w ju'da' paydali' boladi'. Bul jerde poziciyalardi'n' eki gruppasi'n' tolti'ri'w haqqi'nda ga'p etiledi – atomlardi'n' jaylasatugi'n' tiykargi' ori'nlari' ha'm olar arasi'ndag'i' bosli'qlar. Bazi' bir belgili strukturalar atomlardi'n' jaylasi'wlari'ni'n' konkret illyustraciyasi' boli'p tabi'ladi'.

NaCl strukturali'q tipi. Ekviatomli'q quram'g'a iye fazalar arasi'nda bul struktura ken' tarqalg'an. Standart belgilewde - cF8, QOK pa'njere, elementar quti'da 8 atom bar. SHarlardi' ti'g'i'z etip jaylasti'ri'w modeli terminlerinde qurawshi'lardi'n' biri tiykarg'i' jaylasti'ri'w poziciyalari'n, al ekinshisi oktaedrlik bosli'qlardi' iyeleydi (1.5.4-su'wretke qaran'i'z). Bul jerde atomli'q radiuslardi'n' qatnaslari'nan g'a'rezlilikin' qalay ko'rinetug'i'nli'g'i' qi'zi'q. Mi'sali' bazali'q birikpe bolg'an as duzi'nda xlor ionlari' u'lken radiusqa iye ha'm olar ti'g'i'z etip jaylasti'ri'lg'an strukturani', al kishi radiusqa iye kationlar (natriy) barli'q oktaedrlik bosli'qlardi' iyeleydi. Metall fazalarda - karbidlerde, nitridlerde ha'm solarg'a usi'gan birikpelerde situaciya pu'tkilley qarama-qarsi'. Mi'sali' TiC strukturasi'nda titan atomlari' u'lken radiusqa iye, olar ti'g'i'z jaylasi'wlardi' qa'liplestiredi, al metall emes atomlari' (uglerod atomlari') oktaedrlik bosli'qlar poziciyalari'n iyeleydi.



1.5.4-su'wret.
Strukturalar modellari.
a) NaCl tipi,
b) CaF₂ tiki.

CaF₂ (fluorit) strukturali'q tipi. Standart belgilewde cF12, QOK pa'njere, quti'da 12 atom. Bul strukturani' da ti'g'i'z etip jaylasti'ri'lg'an struktura dep traktovkalaw mumkin. Bunday strukturada ekinshi kurawshi' barli'q tetraedrlik bosli'qlardi' tolti'ri'p turadi' (1.5.4-b su'wret). Ha'r qi'yli' fazalardi'n' bul ken' semeystvosi'nda quram o'zgergendegi atomli'q radiuslar arasi'ndag'i' qatnaslardi'n' o'zgerisinin' ta'sirin baqlawg'a boladi'. Fluorittin', bazi' bir metalli'q gidridlerdin' (mi'sali' TiH₂ gidridinin') bazali'q strukturasi'nda tetraedrlik bosli'qlar (poziciyalar) metall emesler menen tolg'an. Antiizomorfli'q tolti'ri'li'w mu'mkinshiligi ayi'ri'm akislerdin', sulfiderdin', telluridlerdin' (mi'sali' Na₂S, Li₂O ha'm basqalar) strukturalari'nda ju'zege keledi. Bul jag'dayda silti metallardi'n' atomlari' tetraedrlik koordinaciyag'a iye poziciyalarda jaylasadi', al metall emes bolsa tiykarg'i' strukturani' (jaylasi'wdi') payda etedi.

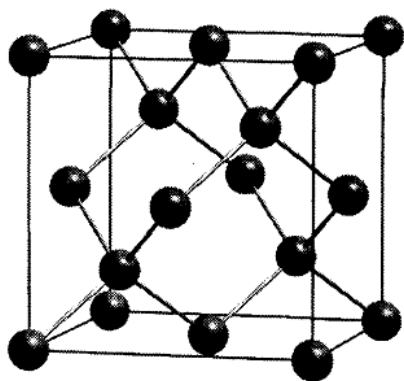
Solay etip ti'g'i'z jaylasti'ri'w modeli o'zinin' qollani'li'w oblasti'na iye eken. Buni'n' ushi'n atomli'q ha'm ionli'q radius ja'ne qatti' denelerdeg'i baylani'slardi'n' ta'biyati' haqqi'nda juwi'q tu'rdeg'i mag'li'wmatlarga su'yeniwimiz kerek. Soni'n' menen bir qatarda atomli'q dizbeklerdin', qatlamlardi'n', koordinaciyali'q ko'pqaptalli'qlardi' tallawg'a tiykarlang'an basqa da geometriyali'q sxemalar bar. Joqari'da keltirilgen mi'sallar ko'p tu'rli strukturalardi' traktovkalawda en' a'piwayi' jaqi'nlas'i'wlardi' illyustraciyalaydi'. Biraq usi'nday jag'daylarg'a qaramastan bunday koncepciyani' almazdi'n' strukturasi' menen baylani'sqan u'lken semeystvog'a qollani'w og'ada paydali' boli'p shi'qti'.

1.5.2. Almazli'q jaylasti'ri'w. Politipiya

Taza elementler. Almaz. Almazdi'n' bazali'q strukturasi' uglerodti'n' u'sh kristalli'q modifikatsiyasi'ni'n' biri tu'rinde belgili. Usi' strukturali'q tipke kremniy, germaniy ha'm qalayi'ni'n' to'mengi temperaturali' modifikatsiyasi' kiredi. Bul strukturani'n' standart ta'riyipleniwi kremniydin' mi'sali'nda 1.4.2-paragrafta keltirildi. Bul strukturada Si atomlari' Fd3m ken'isliktegi gruppani'n' 8(c) dara ekvivalentlik awhali'ni'n' pozitsiyasi'n' iyeleydi. Bul atomlardi'n' QOK pa'njerenin' tu'yinlerinde ha'm kubli'q quti'ni' bo'liw mu'mkin bolg'an segiz kishi oktantti'n' to'rtewinin' oraylari'nda jaylasqan (kubli'q quti'ni' segiz oktantqa bo'le alami'z). Atomlardi'n' sanli'q ma'nisleri materiallardi'n' u'lken "almazli'q" semeystvosi'ni'n' prototipleri boli'p tabi'ladi'.

Usi' strukturali'q tipti sharlardi' jaylasti'ri'w modeli terminlerinde qarap shi'gami'z. Bunday traktovkada birdey radiustag'i' sharlardi'n' eki u'sh qatlamli' jaylasti'ri'wlari' ori'n aladi'. Geometriyalig' quri'wdan mi'na jag'daydi' ko'remiz (1.5.5-su'wretke qaran'i'z): biz qarap ati'rg'an jag'dayg'a {111} tegislikler semeystvosi'ni'n' atomli'q tegisliklerinin' arnawli' alti' qatlamli' jaylasti'ri'wi' sa'ykes keledi. Atomli'q qatlamlardi'n' izbe-izligin AA*VV*SS*A... tu'rinde belgileymiz. Ti'g'i'z etip jaylasti'ri'lg'an kubli'q strukturadan parqi' sonnan ibarat, bul jag'dayda bir birine kiriwshi eki ABC... ha'm A*V*S*... qatlamlari' ori'n aladi'. Olar atomlari'ni'n' konfiguratsiyalari' parallel ji'lji'wlardi'n' berilgen izbe-izligine iye birdey bolg'an tegisliklerden turadi'. Bul izbe-izlikte tegislikten tegislikke shekemgi qashi'qli'qlar da belgili bir ma'nislerge iye boladi': birdey atamadag'i' tegislikler arasi'ndag'i' qashi'qli'q (u'lken) $a\sqrt{3}/4$ ha'm bunnan keyin kishi qashi'qli'q $a\left(\frac{\sqrt{3}}{3} - \sqrt{3}/4\right)$ (ha'r qi'yli' atamag'a iye, yag'ni'y A*V tipindegi qatlamlar arasi'ndag'i' qashi'qli'q) ha'm tag'i' basqalar (yag'ni'y usi'nday qashi'qli'qlar gezeklesedi). Bunday struktura jokari' qa'ddidegi simmetriyag'a iye, biraq atomlar tek tegis kese-kesimlerde g'ana ti'g'i'z jaylasqan. Ko'lemde ha'r bir atom duri's tetraedrini' orayi'nda jaylasadi', koordinatsiyali'q san 4 ke ten' ha'm materialdi'n' ti'g'i'zli'g'i' u'lken emes. Strukturani' ti'g'i'z etip jaylasti'ri'lg'an kubli'q kristaldi'n' strukturasi'nday etip ta'riyiplewde bul strukturani' geksagonalli'q ha'm romboedrlik izbe-izlikke paydalani'w logikali'q jaqtan o'zinin' duri's ekenligin ko'rsetedi. Taza elementler ushi'n strukturani'n' tek kvazi eki qatlamli' varianti' belgili. Bul lonsdeylit, yamasa geksagonalli'q almaz boli'p tabi'ladi' (lonsdeylit ulgerod ushi'n joqarg'i' basi'mlardag'i' faza boli'p tabi'ladi'). Al binarli'q birikpelerde bolatug'i'n bolsa, bunday kombinatorika ju'da' ken' tarqalg'an kombinatorika boli'p tabi'ladi' ha'm texnikali'q jaqtan a'hmiyetli bolg'an ju'da' ken'nen tarqalg'an yari'm o'tkizgishli materiallardi'n' u'lken diziminin' strukturali'q xarakteristikalarini' qadag'alaydi'.

Binar birikpeler. Sfalerit, vyurcit. Almazli'q jaylasti'ri'wg'a iye barli'q elementlerdin' da'wirlik sistemadag'i' IV gruppadag'i' elementlerge tiyisli ekenligin ko'remiz. Modellik interpretatsiyada baslang'i'sh 4 valentlilik tetraedrlik jaylasti'ri'wdi'n' geometriyasi'na sa'ykes keledi. Usi' traktovkani' rawajlandi'ri'p biz usi'nday strukturag'a III—V, II—VI, I—VII gruppalardi'n' binarli'q ekvivalentli'q birikpelerinin' kiretug'i'nli'g'i'n da atap o'temiz. Bunday birikpeler tiykari'nan yari'm o'tkizgishli materiallardi'n' dizimine kiredi. Mi'sal retinde InSb, GaAs, ZnS, BN, AlP, SiC ha'm basqa da birikpelerdi ko'rsetiwimiz mu'mkin. Bunday zatlar ushi'n bir birine jaqi'n strukturalardi'n' ken' ji'ynag'i' ta'n. Olardi' usi' bapti'n' terminlerinde ta'riyiplew olardi'n' kristallografiyalig' jaqtan uli'wmali'g'i'n ko'rsetedi. Ma'seleni xarakterli kubli'q strukturadan baslaymi'z.



1.5.5-su'wret.
Almazdi'n' strukturasi'ni'n' modeli.

Galliy fosfidi GaP, sfalerittin' (cinkovaya obmanka) strukturali'q tipi 1.4.2-paragrafta ko'setildi. Bul struktura almazdi'n' strukturasi'na ju'da' jaqi'n. Eger Si din' strukturasi' menen sali'sti'rsa, onda atomlardi'n' oraylari'ni'n' konfiguratsiyalari'ni'n' uqsas ekenligin, al koordinatalardi'n' sanli' ma'nislerinin' de birdey ekenligin ko'remiz. Bul uqsasli'qti' atomli'q tegisliklardin' joylasi'wi' terminlerinde de ko'riwge boladi'. Bunday jag'dayda A, V, S qatlamlari'n Ga atomlari'ni'n' qatlamlari', al A*V*S* qatlamlari'n R (fosfor) atomlari'ni'n' qatlamlari' dep qaraw kerek boladi'. Bunday jag'dayda AA*VV*SS*... ha'm tag'i' basqalar birikpenin' qurawshi'lari' boyi'nsha gezeklesiwdi an'g'artadi'. Strukturani'n' fragmentinin' ko'rgizbeli obrazi'n duri's tetraedr sa'wlelendiredi. Oni'n' to'belerinde fosfor, al orayi'nda galliy atomlari' joylasadi'.

Binarli'q birikpelerdin' strukturasi'nda ma'selenin' qatlamlardi'n' kombinatorikasi' ha'm almaz tipindegi ha'r qi'yli' joylasti'ri'wlar arasi'ndag'i' ma'selelerge bo'linetug'i'nli'g'i' jaqsi' ko'rinedi. Mi'sali' u'sh (alti') qatlamli' joylasti'ri'wdi' eki (to'rt) qatlamli' joylasti'ri'wg'a almasti'rg'anda kubli'q sfalerittin' orni'na oni'n' geksagonalli'q analogi' bolg'an vyurcitti alami'z.

Cink sulfidi, ZnS (o'zinin') strukturali'q tipi , vyurcit, basqasha V2, yamasa hR4. Ken'isliktegi grupp R63ms. Atomlar

Zn:	2	(b)	$1/3, 2/3, z; 2/3, 1/3, z+1/2$	$z=0;$
S:	2	(b)	$1/3, 2/3, z; 2/3, 1/3, z+1/2$	$z=0.375.$

pozitsiyalari'nda joylasqan. Ku'kirttin' tiykarg'i' joylasi'wlari' geksagonalli'q joylasti'ri'wlardi' payda etedi. Cink atomlari' sfalerittegi si'yaqli' tetraedrlilik pozitsiyalardi'n' yari'mi'n iyeleydi. Qatlamlardi'n' izbe-izligi AA*VV*A... si'pati'nda jazi'ladi'. (*) belgisi ekinshi qurawshi' atomlari' payda etken tegislikni an'latadi'.

Cink sulfidi ushi'n a'dettegi kristallizatsiya processini geksagonalli'q modifikatsiyani'n' payda boli'wi' menen ju'redi. Bunnan keyingi salqi'nlati'wda bul geksagonalli'q modifikatsiyani'n' orni'qli' sfaleritke aylani'wi' kerek. Haqi'yqati'nda bunday jag'dayda ha'r qi'yli' tu'rdegi eki o'lishemli defektlardin' ha'm strukturali'q qatlamlardi'n' gezeklesiwini'n' (izbe-izligini'n') ha'r qi'yli' variantlari'ni'n' ju'zege keliwi kerek.

Binar birikpeler. Politipiya. Taza metallar ishinde eki, u'sh qatlamli' ti'g'i'z joylasti'ri'lg'an strukturalar sheklerinen si'rtqa shi'g'i'w siyrek jer metallari' ushi'n a'dettegidey jag'day boli'p tabi'ladi'. Usi'nday siyrek jer elementlari ushi'n ani'qlangan eki joylasti'ri'w 1.5.2-paragrafta keltirildi. Bul 4 qatlamli', La strukturali'q tipi ha'm 9 qatlamli', Sm tipindegi strukturalar boli'p tabi'ladi'. Almazli'q qa'siyet ushi'n metallar menen sali'sti'rg'anda situatsiya pu'tkilley basqasha ha'm quramali'. Jokari'da atap o'tilgen eki bazali'q konstruksiyalar almazli'q qa'siyetke iye strukturalardi'n' ken' dizimin tek g'ana ashi'p beredi. Bul materiallardin' strukturali'q analizinde ko'p qatlamli' (to'rt ha'm onnan da ko'p) kombinatsiyalardi'n' payda boli'wi' ken' tarqalg'an fenomen boli'p tabi'ladi'. Bul

fenomen politipiya atamasi'n aldi'. Biz ha'zir bir katar kristallografiyali'q o'zgesheliklerin qarap o'temiz.

Principinde biz karap ati'rg'an strukturalardi'n' simmetriyasi' sharlardi'n' ti'g'i'z jaylasqan motivlerindegi tegis kesimdegi u'shinshi ta'rtpi simmetriya ko'sherinin' bar boli'wi' menen qadag'alanadi'. Usi'ni'n' menen bunday strukturalardi'n' tek kubli'q, trigonalli'q yamasa geksagonalli'q singoniyag'a kiretug'ni'li'g'i' beriledi. Teoriyali'q tallaw bul singoniyalardi'n' ishinen tek segiz ken'isliktegi gruppani'n' bar ekenligin ayi'ri'p ko'rsetedi. Bul segiz gruppag'a ti'g'i'z jaylasti'ri'w strukturalari' saykes keledi. Ti'g'i'z yamasa almazli'q jaylasti'ri'wdi'n' ekinshi xarakteristikasi' – quti'dag'i' qatlamlardi'n' sani' ha'r qi'yli' kristallar ushi'n ha'r qi'yli' boli'wi' mu'mkin. Basqa so'z benen aytqanda mu'mkin bolg'an individualli'q strukturali'q tiplerdin' sani' biz qarap ati'rg'na jag'dayda shekke iye emes.

2.3-bap. Neytronlardi'n' derekleri

1932-ji'li' Dj. SHedvik neytrondi' ashqanda bo'lekshelerdin' (elektronlardi'n') kristalli'q pa'njeredegi difrakciyasi'ni'n' principi' ani'qlang'an edi. Neytronlardi'n' difrakciyasi'ni'n' mu'mkin ekenligin birinshi ret V. Elzasser 1936-ji'li' itibar berdi. Tap sol ji'li' birinshi eksperimentlerdi Mitsell, Xalban ha'm Preysverkler a'melge asi'r'di'. Biz da'slep bunday dereklerden' o'zine ta'n o'zgesheliklerin qarap o'temiz.

Neytron – elementar bo'lekshe, massasi' $1.675 \cdot 10^{-24}$ g, zaryadi' $<10^{-18}-10^{-22}$ e, spini h birliklerinde $S = \frac{1}{2}$, yag'ni'y fermi-bo'lekshe boli'p tabi'ladi'. Magnit momenti Bor magnetoni'nan 1.91 ese u'lken. Erkin haldag'i' neytron radioaktivli, oni'n' yari'm i'di'raw da'wiri 500-700 s shamasi'nda. I'di'rawdi'n' na'tiyjesinde proton, elektron, ha'm elektronli'q antineytrino payda boladi'.

De Broyl ten'lemesinen neytronni'n' qozg'ali'w tezligi belgili bolg'an jag'dayda nurlani'wdi'n' tolqi'n uzi'nli'g'i' ushi'n esaplaw formulasi'n ali'w mu'mkin

$$\lambda = \frac{0,287}{\sqrt{E}}.$$

Bul formulada neytronni'n' kinetikali'q energiyasi' E elektron-voltlerde berilgende tolqi'n uzi'nli'g'i' angstromlarda ali'nadi'.

Arnawli' yadroli'q reaktorlar bolmag'an jag'daylarda neytronlardi'n' da'stelerin to'mendegidey yadroli'q reaksiyalardi'n' ja'rdeminde ali'nadi':

1) radon-berilliy aralaspasi', reaksiya ${}^9\text{Be}(\alpha, n){}^4\text{He}$; barli'q sferag'a ag'i's 10^7-10^8 s^{-1} ;

2) (γ, p) reaksiyada γ -derektin' ja'rdeminde 10^6 s^{-1} bag'i'tlang'an da'stesinin' ali'ni'wi' mu'mkin;

3) neytron generatorda protonlardi' (deytronlardi') tezletkishtin' ja'rdeminde (p, n) yamasa (d, n) reaksiyalari'ni'n' ja'rdeminde 10^{13} s^{-1} ag'i'si'n (da'stesin) aladi'.

Neytronografiyani'n' difrakciyali'q bag'dar si'pati'nda aktiv tu'rdegi rawajlani'wi' yadroli'q izertlew reaktorlari'ni'n' rawajlani'wi' menen tikkeley baylani'sli'. Neytronlardi'n' quwatli' derekleri bolg'an uran "qazanlari'ni'n'" islew principi' ha'zirgi waqi'tlari' ken'nen belgili. Biz to'mende difrakciyali'q ma'selelerdi sheshiw ushi'n xa'ru'rli bolg'an xarakteristikalaridi' u'yreniw menen shug'i'llanami'z.

Ilim-izertlew jumi'slari' ushi'n arnalg'an reaktorlarda uran yadrolari'ni'n' bo'liniwlerinin' saldari'nan energiyalari'ni'n' ma'nisleri ken' intervaldag'i' neytronlar payda boladi'. Neytron da'stelerin shi'g'ari'w ushi'n reaktordi'n' korpusi'nda arnawli' aynalar jaylasti'ri'lg'an boli'p, bul aynalarg'a eksperimentalli'q du'zilisler bekitiledi. Difrakciyali'q ma'selelerdi sheshiw ushi'n neytronlar da'stesi kollimator arqali' o'tkeriledi, bunnan keyin neytronlar koristall-monoxromatorg'a kelip tu'sedi. Bunnan keyin neytronlar neytronli'q

difraktometrge o'tedi. Neytronli'q difraktometrde izertlenetug'i'n u'lg'i ornalasti'ri'lg'an boladi'.

Kollamator arqali' shi'g'atug'i'n neytronlardi'n' spektralli'q qurami' strukturali'q izertlew ushi'n qolayli' boladi'. YAdroli'q fizikada qabi'l etilgen terminologiya boyi'nsha bul ji'lli'li'q neytronlari' boli'p tabi'ladi'. Bunday neytronlar i'di'raw (yamasa bo'liniw) reaksiyasi'nan keyin a'steletkishlerde (zamedlitellerde) ko'p sandag'i' shashi'rawlarga ushi'rag'an. Olardi'n' tezlik boyi'nsha tarqali'wi' ji'lli'li'q ten' salmaqli'g'i'na sa'ykes keledi. Ji'lli'li'q neytronlari' ushi'n de-Broyl tolqi'n uzi'nli'g'i' shama menen $\lambda = 1 \text{ \AA}$ boladi'. Al bul shama rentgen trubkalari'nan shi'qqan rentgen nurlari'ni'n' uzi'nli'g'i'na ten' (yag'ni'y rentgen trubkalari'ni'n' jumi's islewi parametrlarine ten'). Bunday jag'dayda $E = 0,08 \text{ eV}$ shamasi'n alami'z. Bunday kinetikali'q energiyag'a iye neytronni'n' qozg'ali's tezliginin' shama menen 4000 m/s ekenligin an'sat tabi'wg'a boladi'. Neytronlardi'n' maksvellik terqali'wi'nan kelip shi'qqan halda neytronlardi'n' sa'ykes (effektivlik) temperaturasi'n ani'qlaw mu'mkin. Bul shama $T \approx 600 \text{ K}$ shamasina ten' boli'p shi'g'adi'. 600 K temperaturasi' stacionar reakordi'n' temperaturali'q rejimine jaqi'n. Demek izertlew isleri ushi'n arnalg'an reaktordi'n' aynasi'nda ornalasti'ri'lg'an kristall-monoxromator spektralli'q tarqali'wdi'n' maksimumi'na tuwri'lang'an boli'wi' kerek. Bul jag'day rentgen difraktsiyasi' ushi'n qabi'l etilgen diapazondag'i' tolqi'n uzi'nli'qlari'ndag'i' neytronografiyalig'i' izertlewler ushi'n eksperimentalli'q sharayatlardi' ta'miynleydi.

Ha'r bir izertlew reaktori' iri, texnikali'q jaqtan quramali' quri'li's boli'p tabi'ladi'. A'dette reaktorlar kollektivler ta'repinen paydalani'latug'i'n oraylar boli'p tabi'ladi'. Da'slepki stacionar reaktordagi'n' konstruktsiyalari' og'ada u'lken o'zgerislerge ushi'radi'. Buni'n' birinshi sebebi neytronlar da'stesinin' sali'sti'rmali' to'men jarqi'nli'g'i' boli'p tabi'ladi'. Biz joqari'da ko'rsetken tolqi'n uzi'nli'qlari' diapazoni'nda absolyut birliklerde neytronli'q monoxromatordan shi'qqan nurlani'wdi'n' intensivligi standart rentgen trubkasi'nan shi'qqan rentgen nurlari'ni'n' intensivliginen $1000 - 10000$ ese kishi boladi'.

3-bap. Kristaldagi' shashi'raw. Laueni' interferentsiyali'q funktsiyasi'

Ma'seleni' qoyi'li'wi'

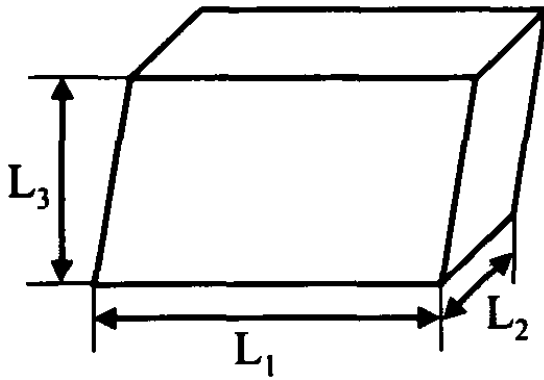
Atomlar gruppasi'ndagi' shashi'rawdi' na'tijesinde interferentsiyali'q effekt ha'm strukturali'q uamplituda tu'sinigi kirgizilgennen keyin elementar quti'lardi' ji'ynagi' si'pati'nda qaralatug'i'n kristaldagi' shashi'raw ma'selemine o'tiw maqsetke muvapi'q boladi'. Bunday ma'seleni sheshiwdi' na'tijesinde difraktsiyali'q maksimumlardi' payda boli'wi'ni' sha'rtlerin g'a'rezsiz tu'rde ali'w ha'm keri ke'islikti' qas'iyetleri haqqi'ndagi' mag'li'wmatlardi' toli'q sistemasi'n ali'w mu'mkin.

E' da'slepki boljaw kishi kristal ta'repinen shashi'rati'w termini menen a'lati'ladi'. Oni' ma'nisi to'mendegilerden ibarat:

kristal jetilisken da'irli strukturag'a iye boladi';

kristal kishi o'lshemlerge iye, yag'ni'y juti'li'di' esapqa almawg'a boladi';

baqlaw noqati'na shekemgi qashi'qli'qqa sali'sti'rg'nada kristal kishi o'lshemlerge iye (tegis tolqi'n, uzaqtag'i' maydanda registratsiyalaw).



3.3.1-su'wret.

Kishi kristaldag'i' shashi'raw ma'selesin sheshiw ushi'n paydalani'latug'i'n su'wret

Analitikali'q formani' a'piwayi'lasti'ri'w ushi'n kristaldi' parallelepiped formasi'na iye ha'm oni'q qabi'rg'alari' pa'njere ko'sherlerine parallel dep esalaymi'z (3.3.1-su'wret). Kristaldi'q o'lshemleri $L_1 = M_1a$, $L_2 = M_2b$, $L_3 = M_3c$ bolsi'n. Bunday jag'dayda elementar quti'lardi'q uli'wmali'q sani' $M = M_1M_2M_3$ ke te'q boladi'. Kristaldag'i' quti'lardi'q numeraciyasi'n t , p , r pu'tin sanlari'ni'q ja'rdeminde belgileymiz. Elementar quti' N dana atomg'ye bolsi'n. Quti'ni'q koordinatalari'ni'q basi' r_{mnp} g'a sa'ykes keledi dep esalaymi'z. Quti'ni'q ishi j - atom $r = r_{mnp} + r_j$ koordinatasi'na iye. Kristaldag'i' atomlardi'q uli'wmali'q sani' $N \times M = M_1 \times M_2 \times M_3$ shamasi'na te'q boladi'.

Indekslerdi'q ma'nisleri

$$m = 0, 1, 2, \dots, M_1 - 1,$$

$$n = 0, 1, 2, \dots, M_2 - 1,$$

$$p = 0, 1, 2, \dots, M_3 - 1,$$

$$j = 1, 2, \dots, N.$$

Ma'seleni sheshiwdi'q sxemasi'

Nomeri $[[mnp]]$ bolg'an quti'dag'i' j -atom ta'repinen $k - k_0 = g$ tolqi'n vektori' bag'i'ti'nda shashi'rag'an tolqi'nni'q amplitudasi'n joqari'da qabi'l etilgen belgilewler ha'm kristaldi'q koordinatalar basi' arasi'ndag'i' fazalar ayi'rmasi'n esapqa ali'w menen jazi'w mu'mkin:

$$E_{mnp,j} = E_e f_j \exp(i2\pi r g) = E_e \exp(i2\pi r_{mnp} g) f_j \exp(i2\pi r_j g).$$

Bunnan keyin kristaldag'i' barli'q atomlar ha'm to'rt indeks boyi'nsha summalaw kerek boladi':

$$E_k = E_e \sum_{m=0}^{M_1-1} \sum_{n=0}^{M_2-1} \sum_{p=0}^{M_3-1} \sum_{j=1}^N \exp(i2\pi r_{mnp} g) f_j \exp(i2\pi r_j g).$$

Summalaw belgilerin ayi'rg'annan keyin mi'na a'qlatpag'a iye bolami'z:

$$E_k = E_e \sum_{m=0}^{M_1-1} \sum_{n=0}^{M_2-1} \sum_{p=0}^{M_3-1} \exp(i2\pi r_{mnp} g) \sum_{j=1}^N f_j \exp(i2\pi r_j g).$$

So'ng'i' summai'q ("j" boyi'nsha ali'natug'i'n summani'q) strukturali'q amplituda ushi'n joqari'da ali'ng'an a'qlatpag'a sa'ykes keletug'i'nli'g'i' ko'rinip tur. Biraq g vektori'ni'q kerik ke'chiliktegi noqatti'q koordinatasi' si'pati'nda ani'qlang'an ekenligin este saqlaw kerek. Al g

ni'ň keri pa'ňjereniň radius-vektori' boli'wi' kerek degen sha'rtti ma'seleni sheshiwdiň tap usi' etapi'nda qoymaymi'z. Bizge ha'zirshi "difrakciya teňlemesi belgili emes".

Biz endi qi'sqasha tu'rdegi

$$E_k = E_e \cdot \Phi \cdot F$$

aňlatpasi'n jazami'z. Bul aňlatpadag'i'

$$\Phi = \sum_{m=0}^{M_1-1} \sum_{n=0}^{M_2-1} \sum_{p=0}^{M_3-1} \exp(i2\pi \mathbf{r}_{mnp} \mathbf{g})$$

funkciyasi'n Laueniň interferenciyali'q funkciyasi' dep ataymi'z.

Ekspontentalardi'ň ko'rsetkishleriniň skalyar ko'beymeleri jazi'ladi'. Vektorlar mi'naday tu'rge iye boladi':

$$\mathbf{g} = \mu \mathbf{a}^* + \eta \mathbf{b}^* + \nu \mathbf{c}^*,$$

$$\mathbf{r}_{mnp} = m\mathbf{a} + n\mathbf{b} + p\mathbf{c}.$$

Bul aňlatpadag'i' μ , η , ν shamalari' pu'tin ha'm bo'lshek ma'nislerge iye boladi' aladi'. Skalyar ko'beymeler ushi'n mi'na aňlatpalardi' alami'z:

$$\mathbf{g} \mathbf{r}_{mnp} = m\mu + n\eta + p\nu,$$

$$\mathbf{g} \mathbf{r}_j = x_j \mu + y_j \eta + z_j \nu.$$

Na'tiyjede

$$F(\mu\eta\nu) = \sum_{j=1}^N f_j \exp(i2\pi(x_j\mu + y_j\eta + z_j\nu)),$$

$$\Phi(\mu\eta\nu) = \sum_{m=0}^{M_1-1} \sum_{n=0}^{M_2-1} \sum_{p=0}^{M_3-1} \exp(i2\pi(m\mu + n\eta + p\nu)).$$

aňlatpalari'na iye bolami'z. Intensivlikke o'tiwde

$$J_k = \frac{c}{8\pi} \cdot |E_k|^2 = \frac{c}{8\pi} \cdot E_e^2 \cdot |F(\mu\eta\nu)|^2 \cdot |\Phi(\mu\eta\nu)|^2$$

yamasa

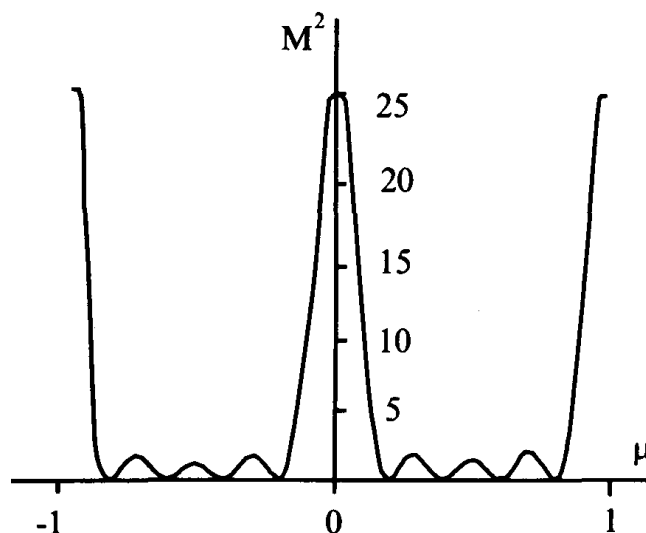
$$J_k = J_e \cdot |F(\mu\eta\nu)|^2 \cdot |\Phi(\mu\eta\nu)|^2$$

aňlatpasi'na iye bolami'z. Bul aňlatpadag'i'

$$|F(\mu\eta\nu)|^2 = F(\mu\eta\nu) \cdot F^*(\mu\eta\nu)$$

ko'beymesini intensivliktiň interferenciyali'q faktori' dep ataladi'. μ , η , ν indeksleri o'zgergendegi bul faktorli'ň o'zgerisleri shashi'rawdi'ň saylap ali'wshi'li'g'i'n, yag'ni'y interferenciya maksimumlari'ni'ň payda boli'w sha'rtlerin ani'qlaydi'.

3.3.2-su'wret.
Bir o'lsheimli tarqali'wdag'i'
interferenciyali'q funkciyani'ň
maksimumlari' menen minimumlari'.



Indeksler boyi'nsha u'shlik summani'

$$\Phi = \sum_{m=0}^{M_1-1} \exp(i2\pi m\mu) \cdot \sum_{n=0}^{M_2-1} \exp(i2\pi n\eta) \cdot \sum_{p=0}^{M_3-1} \exp(i2\pi p\nu)$$

ko'beytiwshilerine bo'liwdiň mu'mkin ekenligi ko'rinip tur. YAğ'ni'y

$$|\Phi|^2 = |\Phi_1(\mu)|^2 \cdot |\Phi_2(\eta)|^2 \cdot |\Phi_3(\nu)|^2.$$

Bir o'lsheimli fragmentti

$$\Phi_1(\mu) = \sum_{m=0}^{M_1-1} \exp(i2\pi m\mu) = 1 + \exp(i2\pi\mu) + \exp(2 \cdot i2\pi\mu) + \dots + \exp((M_1 - 1) \cdot i2\pi\mu)$$

tu'rindagi progressiya si'pati'nda qaraymi'z. Bunday progressiyani'ň summasi'

$$\Phi_1 = \frac{\exp(M_1 \cdot i2\pi\mu) - 1}{\exp(i2\pi\mu) - 1}$$

formulasi'ni'ň ja'rdeminde esaplanadi'. Endi interferenciyali'q faktordi' sinc-funkciyasi'ni'ň kvadrati' tu'rinde alami'z:

$$\Phi_1 \cdot \Phi_1^* = \frac{\sin^2(\pi M_1 \mu)}{\sin^2(\pi \mu)}.$$

Interferenciyali'q funkciyani'ň qa'siyetleri 3.3.2-su'wrette ayqi'nlasadi'. Bul shamani'ň barli'q

$$\mu = \frac{1}{M_1}, \frac{2}{M_1}, \dots, \frac{M_1 - 1}{M_1}$$

ma'nislerinde nolge aylanatug'i'nli'g'i' ko'rinip tur. $\mu = 1, 2, 3, \dots$ pu'tin ma'nislerinde nolge ali'mi' da, bo'limi de aylanadi' ha'm na'tiyjede ani'q emeslik payda boladi'. Lopital qagi'ydasi' boyi'nsha differenciallag'annan keyin μ diň qa'legen pu'tin ma'nisi ushi'n

$$\frac{\sin^2(\pi M_1 \mu)}{\sin^2(\pi \mu)} = M_1^2$$

aqlatpasi'n alami'z.

Demek bir o'lshefli tarqali'w su'wrette ko'rsetilgenindey bas maksimumlarga'a, noller sistemasi'na ha'm qosi'msha maksimumlarga'a iye boladi' eken. Maksimumlardi'ni biyikliklerini qatnaslari': bas maksimum - 100, birinshi qosi'msha - 4.5, ekinshi qosi'msha - 1.6 ha'm tag'i' basqalar. Funkciyani'ni nollari $1/M$ parametrini ja'rdeminde ani'qlanadi'. Basqa so'z benen aytqanda maksimumni'ni ke'ligi usi' ko'sher bag'i'ti'ndag'i' elementar quti'lar sani'na g'a'rezli eken. U'sh o'lshefli ta'riyiplegende bas maksimumlardi'ni ori'nleri $\mu = h, \eta = k, \nu = l$ sha'rtlerini ori'nlani'wi'n tabap etedi.

$$|\Phi(hkl)|^2 = M_1^2 \cdot M_2^2 \cdot M_3^2.$$

Bunday jag'dayda ayqi'n difrakciyalig' maksimumni'ni intensivligi ushi'n uli'wmali'q aqlatpa

$$J_k(hkl) = J_e \cdot M^2 \cdot |F(hkl)|^2$$

tu'rine iye boladi'. Na'tiyjede biz za'ru'rli bolg'an na'tiyjege iye bolami'z: haqi'yqati'nda biz qarap shi'qqan jag'dayda h, k, l shamalari' pu'tin ma'nislerge iye bolg'anda $k - k_0 = g(hkl)$ te'ngemesine qaytap kelemiz. Bul jag'dayda tolqi'nli'q sanlar ke'isliginde bas maksimumlar ushi'n noqatlar sistemasi' payda boladi'. Bul noqatlar sistemasi' keri pa'njereni payda etedi.

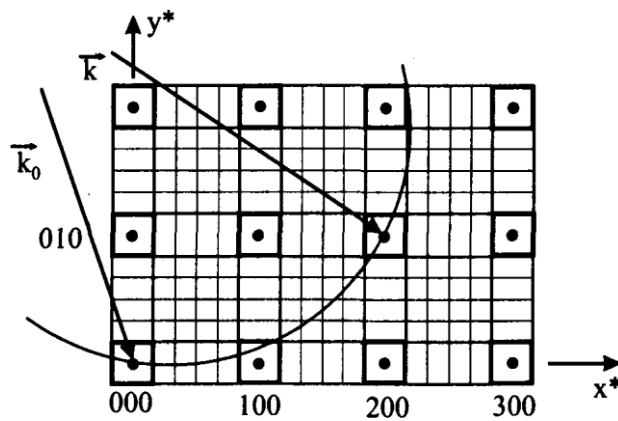
Keri pa'njereni'ni tu'yinlerini'ni formasi' ha'm o'lshefli

Biz qarap ati'rg'an kristall ushi'n interferenciya'ni funkciyani'ni tarqali'wi' sxema tu'rinde 3.3.3-su'wrette keltirilgen. Keri pa'njereni'ni ha'r bir koordinata ko'sheri bag'i'ti'ndag'i' tu'yinlerdi'ni (bas maksimumlardi'ni) si'zi'qli' o'lshefli kristaldi'ni usi' bag'i'ttag'i' o'lshefli (quti'lar sani') menen ani'qlanadi'. 3.3.2-su'wrette ko'rinip turg'ani'nday, sinc-funkciyani'ni grafiginde minimumnan minimumga'a shekemgi qashi'qli'q sali'sti'rmali' birliklerde $2/M_1$ ge te'ng. Keri ke'islikti'ni masshtabi'nda $\delta x^* = a \cdot 2/M_1$. Bunday jag'dayda keri pa'njereni'ni tu'yinini'ni ko'lemi $V^* = 8a \cdot b \cdot c / (M_1 M_2 M_3)$ shamasina te'ng ha'm difrakciya processinde qatnasatug'i'n kristalli'q ob'ektti'ni ko'lemi $V = abc(M_1 M_2 M_3)$ menen keri qatnas arqali' baylani'sqan.

Sanli'q bahalawdi' keltiremiz (san ma'nisin ani'qlaymi'z). Kub ta'rizli formaga'a iye kristalli'q u'lgige iyemiz dep esaplayiq. Kubti'ni qabi'rg'asi'ni'ni uzi'nli'gi' $L_1 = 0.1 \text{ mm} = 10^{-2} \text{ sm}$ bolsi'n. Elementar quti' ushi'n $a = 10 \text{ \AA} = 10^{-7} \text{ sm}$; quti'lar sani' $M_1 = L_1/a = 10^5$; keri pa'njere tuyinini'ni ke'ligi $\delta x^* = 2 \cdot 10^{-6} \text{ \AA}^{-1}$; mi's anodti'ni K_α -nurlani'wi' paydalani'latug'i'n bolsi'n $\lambda = 1.54 \text{ \AA}$, $|\mathbf{k}| = 0.65 \text{ \AA}^{-1}$. 3.3.3-si'zi'lma boyi'nsha $\mathbf{k}$ vektori' bag'i'ti'ndag'i', difrakciyalig' maksimumni'ni ke'ligi

$$\delta\theta = \delta x^* / |\mathbf{k}| = 3.08 \cdot 10^{-6} \text{ radian} \approx 0,2 \text{ mu'yeshlik sekunda}$$

shamasina te'ng boladi'.



3.3.3-su'wret.

Keri pa'njereniń kesimindegi interferenciya'lıq funkciya'niń tarqalı'wı: noqatlar bas maksimumlardıń poziciyalari'na, si'zi'qlar "funkciya'niń nollerine" sa'ykes keledi.

Fraunhofer difrakciyası'niń ulı'wmalı'q principlerine saykes interferenciya'lıq funkciyalardıń qa'siyetlerin izbe-iz tallaw keri pa'njereniń qutı'si'niń ishindegi intensivliktiń tarqalı'wı'niń "substrukturasi'n" tolı'q ta'riyiplewdi ta'miyinleydi. Fizikali'q optikaniń terminlerinde F funkciyası' keri keńislikte ani'qlang'an ha'm ha'r bir tu'yin (maksimum) kristalli'q ob'ekttiń si'rtqi' forması'niń fure-obrazi' si'pati'nda ta'riyiplenedi. Usı' jerde tu'siniklerdiń bo'liniwine ja'ne de bir ret itibar beremiz:

1) keri keńisliktiń metrikası' birinshi gezekte formal tu'rdegi matematikali'q problema bolı'p tabı'ladi';

2) keri pa'njere ha'm interferenciya'lıq funkciya'niń tu'ri – bul ayqi'n fizikali'q eksperimenttiń obrazlı'q ko'rinisi bolı'p tabı'ladi'; bul jerde konfiguraciya'g'a difrakciya'g'a qatnasatug'i'n kristaldiń o'lshemleri, tolqi'n uzi'nli'g'i', eksperimentalli'q sxemaniń geometriyası' ta'sir etedi.

Tap usı'nday ko'z-qarasta keń tarqalg'an "keri pa'njere "F²-dene" si'pati'nda" termininiń ma'nisi tu'sinikli boladi'. Interferenciya'lıq faktordıń tarqalı'wı' ayqi'n eksperimenttegi difrakciya'lıq maksimumniń profili menen piklik intensivligine tiykargı' sha'rtlerdi qoyadi'. Joqari'da keltirilgen mi'salda reflektiń jayı'li'wi' di'm kishi edi. Biraq fizikali'q materialtani'wdiń o'zine ta'n situaciyalari'nda (nanokristallar, kristalli'q bettegi eki o'lshemli qatlamlar, ha'r qı'yli' dispersiya'lıq kuymalar, turaqlı' magnitlerdiń strukturalari' ha'm basqalar) difrakciya'lıq eksperimentlerdiń o'zgeshelikleri keri pa'njereniń ayqi'n anizotropı'lıq forması' ta'repinen qadag'alanadi'.

3.4-bap. Fure qatari'na jayi'w ha'm strukturali'q analizdi'q principi'leri

Elektronli'q ti'g'i'zli'qti'ḡ u'sh o'lshe'mli qatari'

Kristallardi'ḡ atomli'q strukturasini ani'qlaw (rasshifrovkasi') kristaldi' elektronli'q ti'g'i'zli'qti'ḡ u'zliksiz tu'rdegi da'wirli tarqali'wi' dep qarawg'a tiykarlanadi'. Atom yadrolari'n esapqa ali'wdi' talap etpeytug'i'n bul fizikali'q model elektromagnit tolqi'nlari'ni'ḡ qatti' denelerdegi serpimli shashi'rawi'ni'ḡ haqi'yqi'y xarakteristikalarini'na tiykarlang'an.

Ma'seleni qoyi'wdi' strukturali'q amplitudani'ḡ

$$F(\mathbf{g}) = \int_V \rho(\mathbf{r}) \exp(i2\pi(\mathbf{r}\mathbf{g})) dV$$

tu'rindegi qisqasha jazi'li'wi'nan baslaymi'z. Bul aḡlatpa tegis tolqi'nni'ḡ shashi'rawi' haqqi'ndag'i' (Fraungofer jaqi'nlasi'wi'ndag'i') optikali'q ma'sele ushi'n arnalg'an aḡlatpani' atom ha'm molekula ushi'n paydalani'wg'a boladi'. Biz qarap ati'rg'an jag'dayda shashi'rati'w subʼekti kristaldi'ḡ elementar quti'si' boli'p esaplanadi'.

Faza ushi'n eksponentani'ḡ ko'rsetkishindegi skalyar ko'beyme tu'rindegi aḡlatpag'a o'temiz:

$$\mathbf{g} = h\mathbf{a}^* + k\mathbf{b}^* + l\mathbf{c}^*,$$

$$\mathbf{r} = x\mathbf{a} + y\mathbf{b} + z\mathbf{c}.$$

Bul aḡlatpalarda h, k, l arqali' berilgen shag'i'li'si'w ushi'n pu'tin sanlar belgilengen. x, y, z koordinatalari' 0 den 1 ge shekemgi ma'nislerdi qabi'l etedi.

$$x = \frac{x_1}{|a|}, \quad y = \frac{y_1}{|b|}, \quad z = \frac{z_1}{|c|}$$

aḡlatpasi'nda x_1, y_1, z_1 shamalari' arqali' noqatti'ḡ angstremlerdegi koordinatalari' belgilengen. Usi' ayti'lg'anlardi' esapqa ali'p mi'na aḡlatpani' jazi'w mu'mkin:

$$\begin{aligned} F(hkl) &= \int_0^a \int_0^b \int_0^c \rho(x, y, z) \exp(i2\pi(hx + ky + lz)) dx dy dz, \\ &= V_0 \int_0^1 \int_0^1 \int_0^1 \rho(x, y, z) \exp(i2\pi(hx + ky + lz)) dx dy dz. \end{aligned}$$

Endi $\rho(xyz)$ funkciyasi'ni'ḡ qa'siyetlerin keltirip shi'g'arami'z. Elektronli'q ti'g'i'zli'qti'ḡ tarqali'wi' Dirixle sha'rtlerin qanaatlandi'radi': funkciya u'zliksiz, barli'q u'sh o'lshe'm boyi'nsha da'wirli, ha'r bir x, y, z noqatlari'nda tuwi'ndi'g'a iye. Usi'g'an sa'ykes elektronli'q ti'g'i'zli'q funkciyasi'n Fure qatari'na jayi'w mu'mkin degen so'z:

$$\rho(xyz) = \sum_{p=-\infty}^{\infty} \sum_{q=-\infty}^{\infty} \sum_{r=-\infty}^{\infty} K_{pqr} \exp(-i2\pi(px + qy + rz)).$$

Biz a'piwayi'li'q ushi'n Fure katari'ni'ḡ eksponencialli'q formasi'n jazdi'q. Bul aḡlatpada $K_{pqr} = A_{pqr} - iB_{pqr}$ koeficientleri tek p, q, r shamalari'nan g'a rezli bolg'an kompleksli shamalar boli'p tabi'ladi'. Zapisana eksponencialnaya forma ryada kak samaya kompaktnaya.

Bir o'lshefli jag'day ushi'n matematikadan mag'li'wmatlar:

1. Fure qatari'n a'dette bi'layi'nsha jazadi':

$$f(x) = a_0 + \sum_{n=1}^{\infty} (a_n \cos(2\pi n \frac{x}{a}) + b_n \sin(2\pi n \frac{x}{a}));$$

2. Usi' qatardi'ḡ orayli'q simmetriyag'a iye bolg'na jag'daylar ushi'n jazi'li'wi':

$$f(x) = \sum_{-\infty}^{\infty} (A_n \cos(2\pi n \frac{x}{a}) + B_n \sin(2\pi n \frac{x}{a}));$$

3. Jazi'wdi'ḡ "kosinusli'q" formasi':

$$f(x) = \sum_{-\infty}^{\infty} C_n \cos(2\pi n \frac{x}{a} - \varphi_n),$$

$$f(x) = C_0 + \sum_{n=1}^{\infty} 2C_n \cos(2\pi n \frac{x}{a} - \varphi_n);$$

4. Jazi'li'wdi'ḡ eksponencialli'q formasi':

$$f(x) = \sum_{-\infty}^{\infty} K_n \exp(-i2\pi n \frac{x}{a});$$

Jazi'wdi'ḡ alternativlik formalari'ndag'i' koefficientler arasi'ndag'i' baylani's:

$$K_n = C_n \exp(-i\varphi_n) = A_n + iB_n;$$

$$A_n = A_{-n} = \frac{a_n}{2}; \quad B_n = -B_{-n} = \frac{b_n}{2}; \quad K_n = \frac{a_n}{2} + i \frac{b_n}{2}.$$

Bunnan keyin Fure koefficientleri haqqi'ndag'i' ma'seleni sheshiwdiḡ to'mendegidey standart logikali'q sxemasi' paydalani'ladi':

1. $\rho(xyz)$ qatari'n $F(hkl)$ integralli'q formada ko'rsetemiz:

$$F(hkl) = \sum_p \sum_q \sum_r \int_0^1 \int_0^1 \int_0^1 V_0 K_{pqr} \exp\{-i2\pi(px + qy + rz)\} \cdot \exp\{i2\pi(hx + ky + lz)\} dx dy dz.$$

Bul aḡlatpada V_0 arqali' elementar quti'ni'ḡ ko'lemi belgilengen.

2. Endi

$$\int_0^1 \exp\{i2\pi((h-p)x)\} dx = \int_0^1 \cos(2\pi(h-p)x) dx + i \int_0^1 \sin(2\pi(h-p)x) dx =$$

$$= \frac{\sin(2\pi(h-p))}{2\pi(h-p)} + i \left(\frac{-\cos(2\pi(h-p))}{2\pi(h-p)} + \frac{1}{2\pi(h-p)} \right).$$

tu'rindagi integraldi' tu'rlendiriwdi qaraymi'z. h penen p pu'tin ma'nislerge iye bolg'nada integral ba'rha' nolge teḡ. $h = p$ bolg'an jag'dayda bo'lshektiḡ ali'mi' da, bo'limi de nolge teḡ boladi' ha'm payda bolg'an ani'qsi'zli'q $\sin(0)/0 = 1$ tu'rinde ashi'ladi'. Bul qatardi'ḡ toli'q formasi'nda barqulla $F(hkl) = V_0 K_{hkl}$ ekenligin, yag'ni'y u'shlik summadan tek $p = h, q = k, r = l$ sha'rtin qanaatlandi'ratug'i'n tek bir ag'za qaladi'.

Demek qatardi'ning koefficienti:

$$K_{hkl} = \frac{F(hkl)}{V_0}.$$

Qatardi'ning nollik ag'zasi' ushi'n

$$K_{000} = A_{000} = \frac{F(000)}{V_0} = \bar{\rho}(xyz),$$

yag'ni'y jayi'wdi'ning da'wiri boyi'nsha funkciyani'ning ortasha ma'nisine teng. Tuwri' kelip tu'siwshi nurli'ning bag'i'ti'ndag'i' strukturali'q amplitudani' jazi'wdi'ning basqa da tu'ri bar:

$$F(000) = V_0 \iiint \rho(xyz) dx dy dz = \sum_{j=1}^N Z_j.$$

Na'tiyjede eñ aqi'rg'i' formulani' alami'z:

$$\rho(xyz) = \frac{1}{V_0} \sum_{h=-\infty}^{\infty} \sum_{k=-\infty}^{\infty} \sum_{l=-\infty}^{\infty} F(hkl) \exp(-i2\pi(hx + ky + lz)).$$

$[\rho(x,y,z)] = \text{sm}^{-3}$ o'lshem birligine itibar beremiz. Usi'g'an baylani'sli' qatardi'ning alternativlik formalari'n paydalani'w aqi'lg'a muwapi'q keledi. Usi'nday maqsette

$$F(hkl) = |F(hkl)| \exp(i\alpha_{hkl})$$

añlatpasi'nan paydalanami'z. Bul añlatpada

$$|F(hkl)| = \sqrt{F_A^2(hkl) + F_B^2(hkl)};$$

$$\text{tg}(\alpha_{hkl}) = \frac{F_B(hkl)}{F_A(hkl)}.$$

Bul añlatpalarda

[I]:

$$\rho(xyz) = \frac{1}{V_0} \sum_{h=-\infty}^{\infty} \sum_{k=-\infty}^{\infty} \sum_{l=-\infty}^{\infty} |F(hkl)| \cos[2\pi(hx + ky + lz) - \alpha_{hkl}];$$

[II]:

$$\rho(xyz) = \frac{1}{V_0} \sum_{h=-\infty}^{\infty} \sum_{k=-\infty}^{\infty} \sum_{l=-\infty}^{\infty} F_A(hkl) \cos[2\pi(hx + ky + lz)] - i F_B(hkl) \sin[2\pi(hx + ky + lz)].$$

Fure tolqi'nlari'ni'ning semeystvosi' ha'm kristaldi'ning keri pa'njeresi

Keri pa'njerenin' simmetriya orayi'. Ali'ng'an analitikali'q an'latpalardi' keri pa'njereni ha'm difrakciyalı'q eksperimenttin' o'zgesheliklerin fizikali'q jaqtan traktovkalaw ushi'n ju'da paydali'.

Birinshi gezekte kompleksli koefficientleri bar qatarg'a haqi'yqi'y shama – elektronli'q ti'g'i'zli'qti'n' tarqali'wi' $\rho(xyz)$ jayi'lg'anli'g'i'na ayri'qsha itibar beremiz. Bul jag'day tek mi'naday sha'rt ori'nlang'nada g'ana ori'n aladi': qatardi'n' ha'r bir ag'zasi'na summag'a

kiretug'i'n qatardi'n' kompleksli tu'yinles ag'zasi' tabi'ladi' ha'm bunday jag'dayda qatardi'n' summasi' haqi'yqi'y shamag'a aylanadi'. Usi'nday jollar menen Fure koefficientlari arasi'ndag'i' baylani's ornati'ladi':

$$F(\bar{h} \bar{k} \bar{l}) = F^*(hkl).$$

Demek

$$|F(\bar{h} \bar{k} \bar{l})| = |F(hkl)|, \quad \alpha(\bar{h} \bar{k} \bar{l}) = -\alpha(hkl).$$

Bunnan keri pa'njerenin' haqi'yqi'y obrazi'ni'n' yamasa F^2 -denenin' (000) koordinata basi'nda inversiya orayi'na iye bolatug'i'nli'g'i' kelip shi'g'adi'. Basqa so'z benen aytqanda pa'njerenin' eki tu'yini (h,k,l) ha'm (-h, -k, -l) birdey salmaqqa iye boladi' degen so'z. Difrakciyag'a ushi'rag'an tolqi'nni'n' intensivliginin' F^2 shamasina proporcional ekenligin eske tu'siremiz (yag'ni'y $I \sim F^2$). Demek rentgenogrammadag'i' difrakciyali'q maksimumlardin' jaylasi'wlari'nda ha'm intensivliklerinde inversiya orayi'ni'n' bar ekenligi tabi'lsa da, bul jag'day kristaldi'n' simmetriyasi'ni'n' orayg'a qarata simmetriyali' noqatli'q gruppaga jatatug'i'nli'g'i'n an'g'artpaydi'. Mi'sali', noqatli'q gruppasi' 2 bolg'an kristall ayri'qsha ko'sher bag'i'ti'nda su'wretke ali'ng'anda rentgenogrammada refleksler 2-ta'rtpili simmetriya ko'sherinin' bar boli'wi'na sa'ykes jaylasadi'. Eger kristaldi' bursaq ha'm 2-ta'rtpili simmetriya ko'sherin kelip tu'siwshi rentgen nuri'na perpendikulyar etip jaylasti'rsa, onda rentgenogrammadag'i' reflekslerdin' jaylasi'wlari' aynali'q shag'i'li'si'w simmetriya tegisliginin' bar ekenligin ko'rsetedi. Bul "m" simmetriya 2-ta'rtpili simmetriya ko'sherin keri pa'njerede barli'q waqi'tta qatnasatug'i'n simmetriya orayi'na ko'beytiwdin' saldari'nan ali'nadi'. Bul mi'saldan 2 gruppasi'ni'n' kristallari' da, m gruppasi'ni'n' kristallari' da simmetriyasi' boyi'nsha 2/m gruppasi'ni'n' rentgenogrammasi'nday rentgenogrammalardi' beretug'i'nli'g'i' kelip shi'g'adi'. Bul fenomendi a'dette "Fridel ni'zami'" dep te ataydi'.

Demek lauegrammalardi' tu'siriw kristaldi'n' singoniyasi' menen noqatli'q gruppasi'n "inversiya orayi' da'lligine shekemgi da'llikte" ani'qlaydi' eken. Usi'g'an baylani'sli'lauegrammalardag'i' daqlardi'n' jaylasi'wlari'ndag'i' simmetriyani' belgilew ushi'n a'debiyatta "Laue klassi'" termini paydalani'ladi'.

Difrakciyani'n' keri ma'selese haqqi'nda. Fure sintezi

(h,k,l) ha'm (-h,-k,-l) tu'yinleri elektronli'q ti'g'i'zli'qti'n' sinusoidalli'q tolqi'ni'ni'n' obrazi' boli'p tabi'ladi'. Eger [I]-formulani' paydalanatug'i'n bolsaq, onda mi'na an'latpani' jaza alami'z:

$$\rho(xyz) = \frac{1}{V_0} \sum_{h=-\infty}^{\infty} \sum_{k=-\infty}^{\infty} |F(hk0)| \cos[2\pi(hx + ky) - \alpha_{hk0}] + \\ + \frac{2}{V_0} \sum_{h=1}^{\infty} \sum_{k=1}^{\infty} \sum_{l=1}^{\infty} |F(hkl)| \cos[2\pi(hx + ky + lz) - \alpha_{hkl}].$$

Qatardi'n' ha'r bir ag'zasi' argument $hx + ky + lz = \text{const}$ argumentinin' ani'q bir ma'nisine sa'ykes keledi. Eger ayqi'n bolg'an (xyz) noqati' ushi'n qatarg'a jayi'wdi' qaraytug'i'n bolsaq, onda ali'ng'an an'latpa kristaldag'i' (hkl) tu'yinlik tegisligine parallel ha'm (xyz) noqati' arqali' o'tiwshi tegislikti ta'riyipleydi. Bunday jag'dayda $hx + ky + lz = \text{const}$ bolg'an jag'dayda $\rho = \text{const}$ bolg'an elektronli'q ti'g'i'zli'qti'n' ma'nisinin' ani'qlanganli'g'i'n esapqa ali'w kerek. Demek qatardi'n' bir ag'zasi'na sa'ykes keliwshi tarqali'w elektronli'q ti'g'i'zli'qti'n' tegis, qozg'almaytug'i'n (muzlatilg'an) tolqi'ni' eken: tolqi'nni'n' orientaciyasi' (hkl) tegisligine

tu'sirilgen normal vektori' menen berilgen; sinusoidani'n' da'wiri d/n nen shag'i'li'si'w ta'rtibi boyi'nsha ani'qlanadi'.

Bunnan keyin difrakciyalı'q optikani'n' belgili na'tiyjesin itibarg'a alami'z: shashi'rati'wshi' oraylardi'n' sinusoidali'q pa'njeresindegi difrakciyada tek 0, +1, -1 ta'rtipindegi maksimumlar g'ana boladi'. Bunday jag'dayda ta'biyiy tu'rde (hkl) ha'm (-h-k-l) tu'yinlerinin' ha'r bir jubi' tegis tolqi'nlardı'n' sinusoidali'q tarqali'wi'ni'n' birinshi (+,-) ta'rtpi difrakciyalı'q maksimumlari' dep qaraladi'. Demek kerı pa'njerenin' ha'r bir tu'yini (tu'yinler jubi') Furenin' u'sh o'lsheмли qatari'ni'n' bir garmonikasi'na sa'ykes keledi eken.

Solay etip kerı pa'njere berilgen kristaldi'n' difrakciyalı'q maksimumlari'ni'n' ji'ynag'i' ha'm Fure tolqi'nları'ni'n' semeystvosi' haqqi'nda mag'li'wmatlardı' beredi degen so'z. Fure tolqi'nları'n' summaw joli' menen shashi'rati'wshi' materiyanı'n' (elektronlı'q ti'g'i'zli'qti'n') tarqali'wi' haqqi'ndag'i' ko'rgizbeli ko'z-qaraslarg'a iye bola alami'z. Bunday jag'dayda tu'yinler sani'n sheklew (qatar ag'zalari'ni'n' sani'n sheklew) ko'zge ko'rinetug'i'n jaqti'li'q optikasi'ndag'i' su'wret payda bolg'anda aperturani' kishireytken menen birdey ku'she iye.

Joqari'da keltirilgen tallawlarda belgisiz kristalli'q strukturani' ani'qlaw proceduralari' jo'ninde a'piwayi'lasqan pikirlerdin' payda boli'yi' mu'mkin. Haqi'yqati'nda da elementar quti'ni'n' berilgen (xyz) noqati'ndag'i' elektronlı'q ti'g'i'zli'qti'n' haqi'yqi'y ma'nisin tabi'w ushi'n eksperimentte "tek" qatardi'n' koefficientlerinin' (strukturalı'q amplitudalardi'n') jetkilikli mug'dari'ni'n' ma'nislerin ani'qlap, bunnan keyin za'ru'rli bolg'an summawdi' a'melge asi'ri'w kerek boladi'. Bunnan keyin tap usi'nday summaw elementar quti'ni'n' ishindegi noqatlardi'n' toli'q seriyasi' ushi'n ju'rgiziledi. Ali'ng'an na'tiyjeler quti'dag'i' elektronlı'q ti'g'i'zli'qti'n' izosi'zi'qlari'n' (tuyi'q betlerdi) si'zi'wg'a mu'mkinshilik beredi. Bunday betlerdin' oraylari' quti'dag'i' atomlardı'n' oraylari'ni'n' poziciyalari'na sa'ykes keliwi kerek.

A'melde tap usi'nday jol (Fure sintezi) sezilerliktey da'rejede quramalasadi'. Sebebi joqari'da ayti'lg'ani'nday, strukturalı'q amplituda ushi'n fazani' ani'qlaw ma'selesı kesent boli'p tabi'ladi'. Usi'g'an baylani'sli' strukturalı'q ma'seleni toli'q sheshiw ushi'n quramalı eksperimentalli'q ha'm esaplaw sxemalari' islep shi'g'i'lg'an. Biz endi eksperimentte ani'qlani'wi' mu'mkin bolg'an parametr – strukturalı'q amplitudani'n' modulinin' kvadrati'n paydalani'wshi' analitikali'q sxemada toqtap o'temiz.

Patterson sintezi

Atomlar aralı'q vektorlar ken'isligi. F^2 strukturalı'q faktor ushi'n jazi'lg'an

$$|F(\mathbf{g})|^2 = F(\mathbf{g}) \cdot F^*(\mathbf{g}) = \sum_{n=1}^N \sum_{m=1}^N f_n f_m \exp(i2\pi[(\mathbf{r}_n - \mathbf{r}_m) \cdot \mathbf{g}])$$

an'latpani' tolgi'raq qarap o'temiz. Bul an'latpada "m", "n" ler boyi'nsha sumnen g'a'rezsiz. Bul an'latpada strukturalı'q faktordi'n' koordinatalardan emes, al atomlar aralı'q vektorlardan g'a'rezligi berilgen ekenligin an'g'arami'z. Atomlar aralı'q vektorlardı'n' qurawshi'lari'n arnawli' ken'islikte belgileyemiz

$$\mathbf{r}_n - \mathbf{r}_m = a\mathbf{u}_{nm} + b\mathbf{v}_{nm} + c\mathbf{w}_{nm} = a\mathbf{u}_j + b\mathbf{v}_j + c\mathbf{w}_j.$$

Bunday jag'dayda strukturalı'q faktordi'n' modulinin' kvadrati'n bi'layi'nsha jazi'wg'a boladi':

$$|F(hkl)|^2 = \sum_{j=1}^M q_j \exp(i2\pi(hu_j + kv_j + lw_j)).$$

Solay etip atomlar arali'q vektorlar ken'isligi kirgizildi. Bul ken'islikte u, v, w noqatlari'nda jaylasqan "tu'yinler" bar ha'm olar $q_i = f_n f_m$ salmag'i'na iye boladi'. Atomlar arali'q vektorlar uli'wmali'q koordinatalar basi'nan tu'siriledi ha'm olardi'n' sani' $M = N^2$ ten'liginin' ja'rdeminde ani'qlanadi'. Barli'q tu'yinlerdin' koordinata basi'nda atomlar arali'q vektordi'n' nollik moduline ten' keletug'i'nli'g'i'n esapqa alami'z ha'm $M = N^2 - N$ ten'ligine iye bolami'z. 3.4.1-su'wrette u'sh noqattan turatug'i'n predmet ushi'n bazi' bir formalli'q quri'lma ko'rsetilgen. Na'tiyjenin' koordinata basi'nda inversiya orayi'na iye noqatlardi'n' motivi bolatug'i'nli'g'i' ko'rinip tur. Bunnan strukturali'q faktor ushi'n an'latpada tek haqi'yqi'y qosi'li'wshi'lardi'n' qalatug'i'nli'g'i' ko'rinip tur

$$|F(hkl)|^2 = \sum_{j=1}^M q_j \cos(2\pi(hu_j + kv_j + lw_j)).$$

Jazi'wdi'n' integralli'q formasi'na o'tiw ushi'n strukturali'q faktor menen Fure tu'rlendiriwi menen baylani'sli' bolg'an $P(uvw)$ funkciyasi' kirgiziledi. Bunnan keyin mi'nani' jazi'w mu'mkin:

$$|F(hkl)|^2 = \int_{V_0} P(uvw) \exp(i2\pi(hu + kv + lw)) dV_{uvw}.$$

$P(uvw)$ menen $\rho(xyz)$ arasi'ndag'i' baylani'sti' tabami'z:

$$F(hkl) \cdot F^*(hkl) = \int_{V_0} \rho(x'y'z') \exp(i2\pi(hx' + ky' + lz')) dV' \int_{V_0} \rho(xyz) \exp(-i2\pi(hk + ky + lz)) dV$$

ha'm $x' = x + u, y' = y + v, z' = z + w$ belgilewlerinen keyin

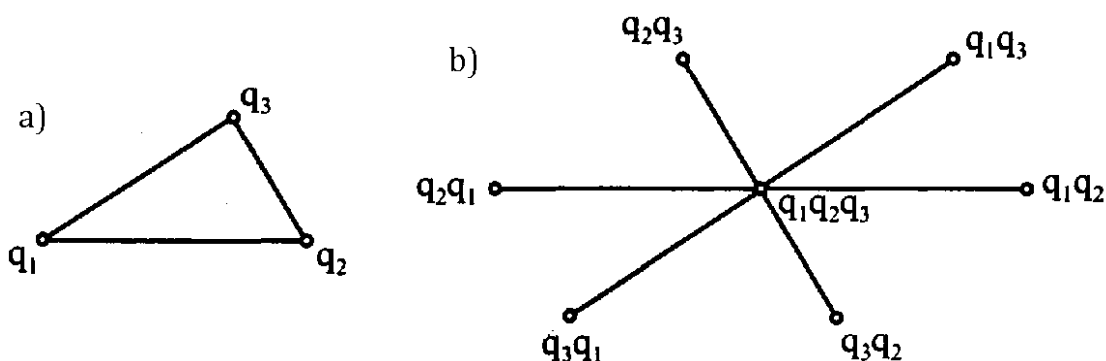
$$|F(hkl)|^2 = \int_{V_0} \left\{ \int_{V_0} \rho(xyz) \cdot \rho(x+u, y+v, z+w) dV \right\} \exp(i2\pi(hu + kv + lw)) dV_{uvw}$$

an'latpasi'n alami'z. Bul jerde mi'naday integrallaw izbe-izligi saylap ali'ng'an: vektor qurawshi'lari' menen barli'q quti' boyi'nsha ji'li'sti'ri'ladi', al bunnan keyin vektordi'n' parametrleri o'zgertiledi. En' aqi'rg'i' jazi'w:

$$P(uvw) = \int_{V_0} \rho(xyz) \cdot \rho(x+u, y+v, z+w) dV.$$

Bul atomlar arali'q funkciyani'n' turaqli' ko'beytiwshi da'lligindegi ani'qlamasi' boli'p tabi'ladi'. $\rho(xyz)$ ha'm $\rho(x+u, y+v, z+w)$ funkciyalari' vektordi'n' ushi'ndag'i' elektronli'q ti'g'i'zli'q boli'p tabi'ladi'.

$P(uvw)$ shamasi' Patterson funkciyasi' dep ataladi' ha'm matematikadag'i' avtokorrelyaciya funkciyasi' terminine sa'ykes keledi.



3.4.1-su'wret. a) – u'sh noqattan turatug'i'n predmet; q_i arqali' noqatlardi'n' jarqi'nli'g'i' belgilengen; b) – Patterson funkciyasi'ni'n' konfiguratsiyasi'; q_iq_k arqali' usi' jag'daydag'i' noqatlardi'n' jarqi'nli'g'i' belgilengen.

Atomlar arali'q vektorlar funkciyasi'ni'n' an'latpasi'n tap usi'nday etip keltirip shagari'w F Fure-tu'rlendiriw arqali' o'z-ara baylani'sti'n' formalli'q analogiyasi'n sa'wlelendiredi:

$$F \xrightarrow{\Phi} \rho(xyz),$$

$$|F|^2 \xrightarrow{\Phi} P(uvw).$$

Bunday jag'dayda analogiya boyi'nsha P-funkciyasi'e qatarg'a jayi'w mu'mkin ha'm tu'rlendiriwlerden keyin mi'naday an'latpa ali'nadi'

$$P(uvw) = \frac{1}{V_0} \sum_h \sum_k \sum_l |F(hkl)|^2 \exp(-i2\pi(hu + kv + lw)).$$

Bul qatar fazali'q konstantalari'z tek kosinuslar boyi'nsha summalawdi' o'z ishine aladi'.

Solay etip kvadratli'q detektorlawg'a baylani'sli' baqlanatug'i'n difraktsiyali'q su'wret predmettin' fure-tu'rlendiriwi emes, al predmettin' avtokorrelyatsiyasi'ni'n' bazi' bir funkciyasi'na sa'ykes keledi eken. Eger golografiya terminologiyasi'nan paydalansaq, onda kristaldi'n' strukturasini'ni'n' difraktsiyali'q su'wretinen payda etiw atomli'q arali'q vektorlar ken'isligindagi predmettin' quramalasqan obrazi' si'patini'nda avtokorrelyatsiya funkciyasi'ni'n' tarqali'wi'n beredi.

Bul tarqali'wini'n' o'zgesheliklerin atap o'tiw mumkin:

- 1) funkciya haqiqiy;
- 2) qatardi'n' koeffitsientleri haqiqiy ha'm on' ma'nislerge iye, yag'ni'y qatarg'a jayi'wini'n' barli'q garmonikalari' o'zini'n' do'n'es ushastkalari' menen koordinata basi'nan o'tedi;
- 3) $P(uvw)$ tarqali'wi' (xyz) si'yaqli' da'wirlikke iye;
- 4) $N^2 - N$ maksimumlar sani' quti'dagi' atomlar sani'nan azmaz u'lken;
- 5) ha'r bir maksimumni'n' salmag'i' atomli'q nomerlerdin' ko'beymesi arqali' ani'qlanadi':

$$\int P_{nm} dV_{uvw} = Z_n \cdot Z_m;$$

6) maksimumlar atomli'q arali'q vektorlar ken'isliginin' (uvw) noqatlari'nda jaylasqan, maksimumlar (xyz) shamasina sali'sti'rg'nada ko'birek jayi'lg'an;

7) R-funkciyani'n' maksimumlari' koordinata basi'nda jaylasqan inversiya orayi'nda jup-juptan baylani'sqan.

Qatardi'n' koefitsientleri eksperimentte o'lshengen intensivliklerden tikkeley kelip shi'g'atug'i'n bolg'anli'qtan atomlar arali'q funkciyani' paydalani'w strukturali'q rasshifrovkada belgili bir alg'a ilgerilewlerdi ta'miyinley aladi'. Bul $P(uvw)$ tarkali'wi'ni'n'

aldi'n ala strukturali'q modeldi du'zbesten-aq esaplanatug'i'nli'g'i'n ha'm quti'dag'i' atomlardi'n' haqi'yqi'y konfiguratsiyasi' atomlar arali'q funktsiyasini'n' quramali' nag'i'shlari'ni'n' ja'rdeminde ko'rsetiletug'i'nli'g'i'n bildiredi. Strukturali'q ma'seleni sheshiwdin' bunnan keyingi etapi'nda bir qatar quramali' jag'daylar payda boladi' – vektorli'q sistemani'n' simmetriyasi' o'z ishini "arti'q" simmetriya orayi'n aladi', quti'dag'i' atomlardi'n' jaylasi'wlari'ndag'i' haqi'yqi'y *motivti* ayi'ri'p ali'w arnawli' tu'rdegi jaqi'nlas'i'wlardi' talap etedi h.t.b. Biraq usi'nday jag'daylarga qaramastan bunday procedura haqi'yqi'y procedura boli'p tabi'ladi' ha'm laboratoriyalarda a'meliy ma'seleler sheshilgende ken' tu'rde paydalani'ladi'.

IV bap. Rentgen topografiyasi'nda monokristallardi'n' topografiyali'q su'wretinin' qa'liplesiw

Kirisiw

Bizin' ku'nlerimizdegi qatti' deneler fizikasi' menen fizikali'q materialtani'wdag'i' en' ko'zge tu'serlik jag'day kristalli'q denelerdin' haqi'yqi'y quri'li'si'n teren'irek izertlew boli'p tabi'ladi'. Kristallardi'n' xaqi'yqi'y strukturasini' olardi'n' tiykarg'i' fizikali'q ha'm fizikali'q-texnologiyali'q qa'siyetlerin toli'g'i' menen ani'qlaydi'. Rentgen nurlari'ni'n' ashi'li'wi', Jer ju'zindegi ko'p sanli' ma'mleketlerdi jemisli tu'rde jumi's islep ati'rg'an ilimpazlardi'n' miynetlerinin' na'tijesinde kristalli'q denelerdin' quri'li'si'n izertlew din' ko'p sanli' usi'llari' ashi'ldi'. Bul usi'llar difraktsiyali'q su'wretlerdin' qa'liplesiwini'n' geometriyasi', paydalani'latug'i'n nurlani'wdi'n' spektrleri ha'm paydalani'li'wi' boyi'nsha bir birinen ayri'ladi'.

Ha'zirgi zaman rentgenografiyasi' qatti' deneler fizikasi' menen fizikali'q materialtani'wdi'n' en' zor qurallari'ni'n' biri boli'p tabi'ladi'. Ko'plegen jular dawami'nda kristalli'q quri'li'si'n' ha'r qi'yl'i' defektleri bolg'an dislokatsiyalardi', sub da'nesheler arasi'ndag'i' shegaralardi', jaylasti'ri'w defektlerin, noqatli'q defektlerdi u'yreniw boyi'nsha ken' tu'rde jumi'slar ali'p bari'lmaqta. biraq usi' jag'daylarga qaramastan rentgenografiyani' teren'irek izertlew, jan'a a'sbap u'skenelerdin', solardi'n' ishinde rentgen nurlari'ni'n' noqatli'q dereklerinin' payda boli'wi' paylalani'li'p ju'rgen rentgenografiyali'q usi'llardi' jetilistiriwdin' mu'mkinshiliklerinin' bar ekenligin ko'rsetedi. Usi'nday talqi'lawlar kristalli'q denelerdegi rentgen nurlari'ni'n' difraktsiyasini'n' jan'a sxemalari'n usi'ni'w mu'mkinshiliklerin beredi.

I BAP. KRISTALLAR RENTGENOGRAFIYASI'NDAG'I' RENTGENTOPOGRAFIYALI'Q USI'LLAR

1-§. SHulc ha'm Fudjivara usi'llari'

Polixromatli'q SHulc (L.G.Schulz) usi'li' monokristalli'q denelerdin' quri'li'si'n izertlew ushi'n qollani'ladi'. Bul usi'ldi' qollang'anda oni'n' jaqsi' mu'yeshlik ayi'ra ali'wshi'li'q qa'biletligi ayri'qsha ori'ndi' iyeleydi. Bul usi'lda su'wrettin' qa'liplesiw toli'q tu'rde tallang'an. Topogrammadag'i' kristalli'q bloklar arasi'ndag'i' shegarani'n' ken'liginin' usi' bloklar arasi'ndag'i' mu'yesh penen bloklar bag'i'tlari' arasi'ndag'i' baylani's tabi'lg'an.

1-su'wrette SHulc usi'li'ni'n' sxemasi' keltirilgen. Polixromat rentgen nurlari'ni'n' noqatli'q deregi S kristaldi'n' betinen D qashi'qli'qta joylasqan. Kristaldi'n' betine kelip tu'sken rentgen nurlari' Vulf-Bregg sha'rti dep atalatug'i'n

$$2d \sin \theta = n\lambda \quad (1-1)$$

ko'pshilikke belgili sha'rti tiykari'nda difrakciya'ga ushi'raydi'. Bul formulada d arqali' kristallografiyalik tegisliklar arasi'ndag'i' qashi'qli'q, θ arqali' difraktsiyali'q mu'yesh, λ arqali' rentgen nurlari'ni'n' tolqi'n uzi'nli'g'i', al n arqali' 1, 2, ... ma'nislarin qabi'l etiwshi pu'tin san belgilengen.

(1-1)-formula boyi'nsha ha'r bir λ tolqi'n uzi'nli'g'i'na kristaldi'n' betindagi bir si'zi'q boyi'nsha shag'i'li'si'w (difraktsiya) sa'ykes keledi. Fotoplenka betindagi su'wret usi'nday si'zi'qlar kesindilerinen turi'p, sol kesindiler boyi'nda tolqi'n uzi'nli'g'i' turaqli' ma'niske iye boladi'. Usi'nday si'zi'qlardi'n' ten'lemesi jumi'sta ken'nen tarqali'wshi' rentgen nurlari' usi'li' ushi'n keltirilip shi'g'ari'lg'an edi. Bul usi'lda fotoplenka kristaldi'n' betine parallel ra'wishte kristaldi'n' betinen A arali'g'i'nda joylasti'ri'ladi'. Ten'leme mi'na tu'rge iye:

$$R(\theta, \varphi) = \left[\frac{\cos \theta}{\cos \alpha} \frac{D}{\sin(\theta - \theta_1)} + \frac{A}{\sin(\theta + \theta_1)} \right]. \quad (1-2)$$

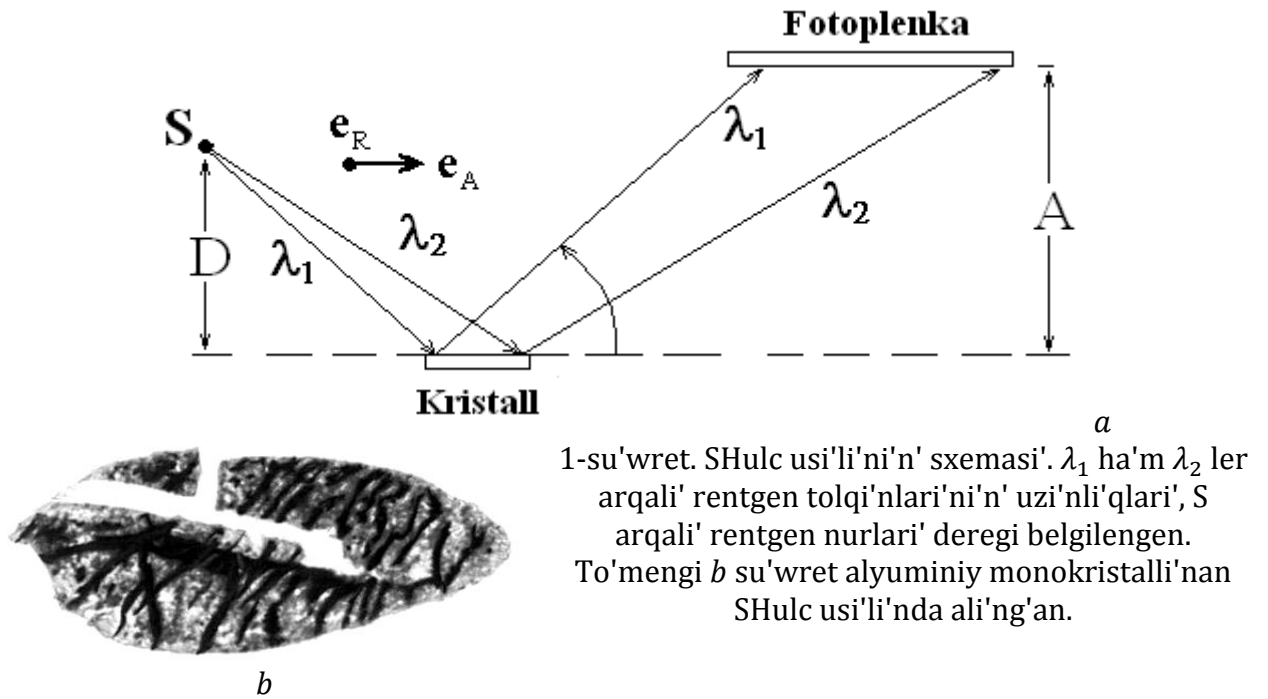
Bul ten'lemede $\theta_1 = \arcsin(\sin \alpha \cos \varphi)$, α arqali' shashi'rati'wshi' tegisliklar menen kristaldi'n' beti arasi'ndag'i' mu'yesh, $R(\theta, \varphi)$ ha'm φ arqali' fotoplenka betindagi difraktsiyali'q si'zi'qti'n' polyar koordinatalari' belgilengen. Koordinata basi' bolg'an O noqati' plenka tegisligi menen shashi'rati'wshi' tegisliklarga tu'sirilgen normaldi'n' kesilisiw noqati'nda joylasqan. φ mu'yeshinin' ma'nisi bul normaldi'n' plenka'ga tu'sirilgen proektsiyasi'nan baslap esaplanadi'.

SHulc usi'li'nda kristaldi' zonasi'ni'n' ko'sheri azimutalli'q bag'i'tta joylasqan tegisliklardan shashi'raw ali'natug'i'nday etip joylasti'radi'.

Biz bul jerde azimutalli'q ha'm radialli'q bag'i'tlar tuwrali' mi'nalardi' atap o'temiz: fotoplenkadag'i' radialli'q bag'i't (e_R) dep kristal'ga kelip tu'siwshi ha'm kristalda shag'i'li'sqan bag'i'tlar jatatug'i'n tegisliktegi bag'i'tti', al azimutalli'q (e_A) bag'i't dep og'an perpendikulyar bolg'an bag'i'tti' tu'sinemiz. Fotoplenkadag'i' radialli'q bag'i't O koordinata basi'nan baslanatug'i'n $R(\theta, \varphi)$ bag'i'ti'na sa'ykes keledi.

A'dette kristaldi'n' o'lshemleri $R(\theta, \varphi)$ qashi'qli'g'i'na sali'sti'rg'anda kishi. Eger kristaldi'n' orientatsiyasi'n esapqa alsaq ha'm kishiligi boyi'nsha ekinshi ta'rtpi ag'zalardi' esapqa almasaq, onda (10-1)-formula tiykari'nda $R(\theta, \varphi)$ shamasini φ mu'yeshinen g'a rezsiz dep esaplay alami'z (a'dette $\varphi \ll 1$ ha'm $\theta_1 = \alpha$), al φ turaqli' boli'p qalatug'i'n jag'daylardag'i' si'zi'qlardi'n' kesindileri α mu'yeshinin' qa'legen ma'nisindegi shen'berlerdin' kesindileri boli'p tabi'ladi'.

Usi'nday boljawlar ori'n alg'an jag'daylar ushi'n kristaldi'n' betinin' elementleri menen fotoplenkadag'i' su'wreti arasi'ndag'i' baylani's tabi'ldi'.



(1-2)-formulasi'n paydalani'p radial ha'm azimutal bag'i'tlardag'i' usi'ldi'n' u'lkeytiw koeficientleri P_R ha'm P_A shamalari'n esaplaymi'z. Usi'nday maqsette su'wrettegi kesindinin' kristaldag'i' sa'ykes kesindinin' uzi'nli'qlari'ni'n' qatnasi'n paydalanami'z:

$$P_R = 1 + \frac{1 + R'_2 \sin(\theta - \alpha)}{R'_1 \sin(\theta + \alpha)}, \quad (1-3)$$

$$P_A = 1 + \frac{R'_2}{R'_1}. \quad (1-4)$$

Bul formulalarda $R'_1 = \frac{D}{\sin(\theta - \alpha)}$, $R'_2 = \frac{A}{\sin(\theta + \alpha)}$, α arqali' shashi'rati'wshi' tegislikler menen u'lginin' beti arasi'ndag'i' mu'yesh belgilengen. $\alpha \neq 0$ bolg'an jag'daylarda P_R ha'm P_A koeficientleri ha'r qi'yli' ha'm θ mu'yeshinin' u'lkeyiwi menen radialli'q bag'i'tta o'sedi. Usi'ni'n' na'tiyjesinde topogrammadag'i' kristaldi'n' su'wreti kristaldi'n' o'zinin' formasi'na usamaydi' (yag'ni'y rentgentopografiyalig' su'wret mayi'sqan boli'p shi'g'adi').

Solay etip SHulc usi'li'nda turaqli' λ ge iye shen'berdin' kesindileri ta'repinen qal'iplesedi eken. $\alpha \neq 0$ bolg'an jag'daylarda kristaldi'n' betinin' elementlerinin' formasi' su'wrette mayi'sqan. Su'wrette kristaldag'i' bag'i'tlar arasi'ndag'i' mu'yeshler saqlanbaydi'.

SHulc usi'li'nda kristalli'q u'lginin' bir birine sali'sti'rg'anda buril'g'an bo'lekleri ayi'ri'm su'wretlerdi payda etedi. Kristalli'q bloklar arasi'ndag'i' shegaralar jaqti'li' (eger qon'i'si'las bloklardi'n' su'wretleri bir birinin' u'stine tu'setug'i'n bolsa) yamasa karan'g'i' (eger qon'i'si'las bloklardi'n' su'wretleri bir birinen bazi' bir qashi'qli'qta payda bolsa) jolaqlar tu'rinde payda boladi'. Su'wrettin' payda boli'wi'n tallaw usi'nday su'wretler arasi'ndag'i' qashi'qli'qlar to'mendegidey formulalar menen esaplanatug'i'nli'g'i'n ko'rsetedi:

$$b_R = R(\theta + \delta_R, \alpha + \delta_R) - R(\theta, \alpha) - \frac{A - D}{(\cos \alpha)^2} \delta_R = - \frac{2A}{[\sin(\theta + \alpha)]^2} \delta_R \quad (1-5)$$

$$b_A = \frac{A - D}{\cos \alpha} \delta_A - R(\theta, \alpha) \Delta \varphi = \frac{2A \sin \theta}{\sin(\theta + \alpha)} \delta_A \quad (1-6)$$

Bul an'latpalarda b_R ha'm b_A arqali' radialli'q ha'm azimutalli'q bag'i'tlardag'i' su'wretler arasi'ndag'i' qashi'qli'q, δ_R menen δ_A arqali' radialli'q ha'm azimutalli'q bag'i'tlardag'i' kristalli'q bloklar arasi'ndag'i' mu'yeshler belgilengen.

SHulc usi'li'nda topografiyali'q su'wrettin' payda boli'wi' toli'q tallang'an. Bul jumi'sta topogrammadag'i' kristaldi'n' betinin' su'wreti boyi'nsha kristalli'q bloklardi'n' formalari'n, o'lshemlerin ha'm bir birine sali'sti'rg'anda qanday mu'yeshlerge buri'lg'anli'g'in ani'qlawdi'n' mu'mkin ekenligi ko'rsetilgen. Subda'nesheler arasi'ndag'i' mu'yeshlerdi ani'qlaw usi'li' usi'ni'lg'an. Basqa topografiyati'q usi'llar SHulc usi'li'nan topogramma ali'wdi'n' geometriyasi' menen ani'qlanatug'i'nli'g'i', usi'g'an baylani'sli' kristaldi'n' si'zi'qli' ha'm mu'yeshlik o'lshemlerin ani'qlaytug'i'n formulalardi'n' basqa tu'rge iye bolatug'i'nli'g'i' atap o'tilgen. Fudjivara, Berg-Barret (W.Berg - C.S.Barrett) ha'm basqa da usi'llardi' paydalang'anda ali'natug'i'n na'tiyjelerdi joqari'da keltirilgen tallawlar tiykari'nda qayta ko'rip shi'g'i'wdi'n' za'ru'rli'gi da'lilengen.

YAponiyali' fizik T.Fudjivara (T.Fujiwara) ta'repinen usi'ni'lg'an rentgentopografiyali'q usi'lda juqa monokristalli'q u'lgi arqali' o'tiwshi rentgen tolqi'nlarini'n' difrakciyasi' paydalani'ladi'. Bul usi'lda rentgen nurlari'ni'n' noqatli'q dereginen shi'qqan ken' tarqali'wshi' nurlardi'n' ko'sherine izertleniletug'i'n monokristalli'q u'lginide, fotoplenkani' da perpendikulyar etip jaylasti'radi'. Bul jag'day 2-su'wrette keltirilgen. A'lbette ken' tarqali'wshi' da'stenin' ko'sherinin' fotoplenkani' kesip o'tiwi mu'mkin emes. Sebebi tuwri' tu'sken rentgen nurlari' fotoplenkada qara daqti' payda etedi. Bul usi'l rengenografiyadag'i' Laue usi'li'n eske tu'siredi. Ayi'rma sonnan ibarat, Laue usi'li'nda polixromatik rentgen nurlari'ni'n' diametri 1-2 mm bolg'an tegis-parallel da'stesi paydalani'ladi'. Al Fudjivara usi'li'nda bolsa noqatli'q derekten barli'q ta'replerge tarqali'wshi' polixromatik rentgen nurlari' qollani'ladi'. Sonli'qtan fotoplenkada noqatli'q emes Laue daqlari'nan turatug'i'n su'wret payda boladi'. Ayi'ri'm daqlarda xarakteristikali'q rentgen nurlari'ni'n' izlerinin' de ko'riniwi mu'mkin (biz usi'nayi'n dep ati'rg'an usi'lda sol izler paydalani'ladi'). Ha'r bir refleks (daq) shashi'rati'wshi' tegisliklerdin' bag'i'ti'na sa'ykes keliwshi kristaldi'n' quri'li'si'ni'n' topografiyali'q su'wretin sa'wlelendiredi. Eger izertlenip ati'rg'an monokristalli'q u'lgi bir birine sali'sti'rg'anda bazi' bir mu'yeshlerge buri'lg'an subda'neshelerden (yamasa kristalli'q bloklardan) turatug'i'n bolsa, onda topogrammadag'i'f refleks (su'wret) quramali' quri'li'sqa iye boladi' ha'm ha'r bir blokni'n' su'wretlerinin' qosi'ndi'si'nan turadi'. Bul daqlardi'n' quri'li'si' boyi'nsha substrukturani'n' elementlerinin' si'zi'qli'q o'lshemleri ha'm olar arasi'ndag'i' bir birine sali'sti'rg'andag'i' buri'li'w mu'yeshleri ani'qlanadi'. Eger bir waqi'tta bir neshe tegisliklerden topografiyali'q su'wret ali'natug'i'n bolsa, onda izertlenip arti'rg'an kristaldag'i' substruktura elementerinin' u'sh o'lshemli ken'isliktegi jaylasi'wi' haqqi'ndag'i' toli'q informaciyalarg'a iye boli'w mu'mkin.

Fudjivara usi'li'nda azimutalli'q bag'i'ttag'i' bloklar arasi'ndag'i' mu'yeshli ani'qlaw ushi'n

$$\delta_A = \frac{m_A \cos 2\theta}{2A \sin \theta} \pm \frac{\gamma_A}{2 \sin \theta} \quad (1-7)$$

formulasi' qollani'ladi'. Al radialli'q bag'i't ushi'n mi'naday an'latpag'a iye bolami'z:

$$\delta_R = \frac{m_R (\cos 2\theta)^2}{A + D}. \quad (1-8)$$

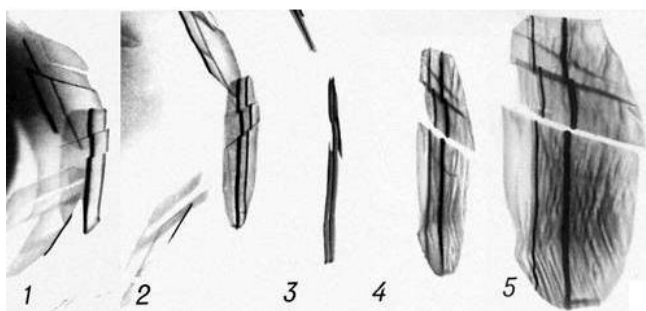
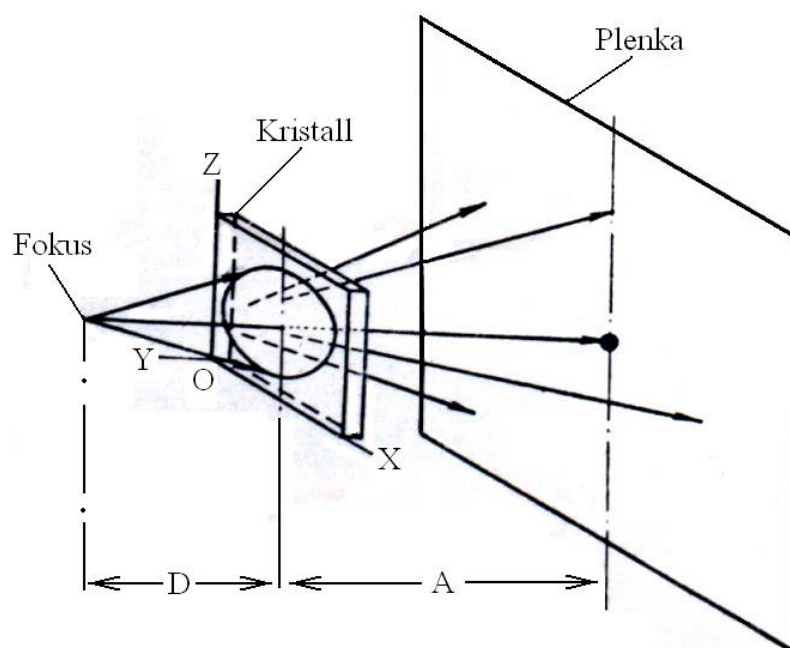
Bul an'latpalarda m_A menen m_R arqali' ha'r qi'yli' subda'neshelerde shashi'rag'an xarakteristikali'q rentgen nurlari'ni'n' bir birinen sa'ykes azimutalli'q ha'm radialli'q bag'i'tlardag'i' awi'si'wi' belgilengen (3-su'wretti qaran'i'z). γ_A ha'm γ_R arqali' tu'siwshi

da'stenin' ji'ynaqli'li'q mu'yeshi. Bul belgilewdi tu'siniw ushi'n $\gamma = \frac{f}{D}$ ekenligin atap o'temiz. Bul jerde f arqali' rentgen trubkasi'ni'n' fokalli'q dagi'ni'n' si'zi'qli' o'lshemi, al D arqali' kristalli'q u'lgi – fokus arasi'ndag'i' qashi'qli'q belgilengen.

Fudjivara usi'li'ni'n' ja'rdeminde substrukura elementlerinin' bir birine sali'sti'rg'anda perpendikulyar bolg'an u'sh ko'sher menen jasaytug'i'n mu'yeshlerin ani'qlawg'a mu'mkinshilik beredi. OZ ko'sheri do'geregindagi subda'neshenin' buri'li'w mu'yeshi fotoplenkadag'i' sa'ykes su'wretler arasi'ndag'i' shegarali'q jolaqti'n' radialli'q bag'i'ttag'i' ken'ligi menen to'mendegi formulani'n' ja'rdeminde ani'qlanadi' (3-su'wretti qaran'i'z).

$$\delta_R = \frac{1}{2} \left(\frac{m_R (\cos 2\theta)^2}{A} \pm \gamma_R \right). \quad (1-9)$$

Bul mu'yeshlerdin' ma'nislerin usi' difrakciyalı'q daqtag'i' xarakteristikali'q rentgen nurlari' berges si'zi'qlardi'n' awi'si'wi' boyi'nsha da ani'qlawg'a boladi' [(1-8)-formula].



2-su'wret. Fudjivara usi'li' boyi'nsha su'wretke tu'siriw sxemasi' (bul su'wret <http://vseslova.com.ua/word> sayti'nda berilgen). Alyuminiy monokristalli'ni'n' su'wreti to'mende keltirilgen.

OX ko'sheri do'geregindagi subda'neshelerdin' bir birinen buri'li'w mu'yeshi xarakteristikali'q si'zi'qti'n' awi'si'wi'na yamasa plenkanı'n' vertikalli'q diametrindagi interferenciya'lı'q daqtag'i' gorizont bag'i'ti'ndag'i' shegarali'q jolaqlardi'n' payda boli'wi'na ali'p keledi. Bul awi'si'wdi'n' shaması' boyi'nsha yamasa sa'ykes shegarali'q oblastti'n' ken'ligi boyi'nsha buri'li'w mu'yeshinin' ma'nisi esaplanadi' [(1-8)- ha'm (1-9)-formulalar].

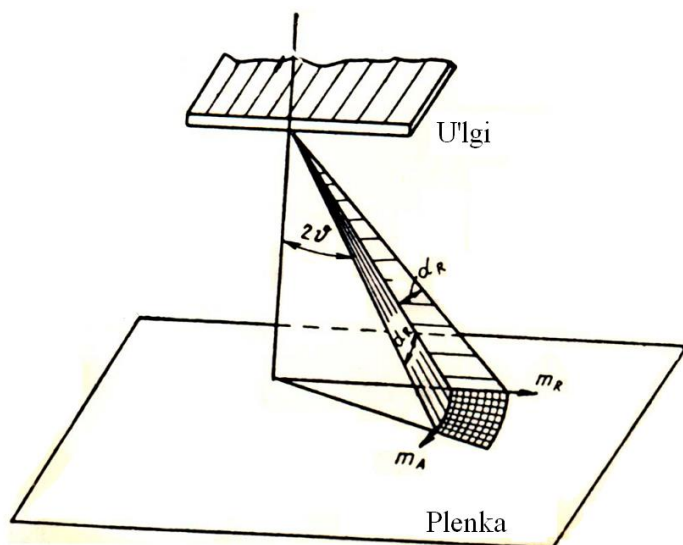
Subda'neshelerdin' OY ko'sheri do'geregindagi buri'li'wlari' fotoplenkada radial bag'i'ttag'i' shegarali'q jolaqti' payda etedi. Bul jolaqlardi'n' ken'ligi boyi'nsha buri'li'w mu'yeshi ani'qlanadi' [(1-7)-formula]. (1-7)-formula ja'rdeminde ali'ng'an buri'li'w mu'yeshinin' ma'nisinen shashi'rati'wshi' tegisliktin' OZ (vertikal bag'i'ttag'i' diametrde

jaylasqan refleksler ushi'n) yamasa OX (gorizont bag'i'ti'nda jaylasqan refleksler ushi'n) ko'sherine perpendikulyar emes ekenliginen kelip shi'g'atug'i'n shamani' (du'zetiwdi) ali'p taslaw za'ru'rli'gi payda boladi'.

Vertikalli'q diametrde jaylasqan refleksler ushi'n bunday du'zetiwdin' shamasi' $\delta_z \sin \varphi$, al gorizont bag'i'ti'ndag'i' diametrde jaylasqan daqlar ushi'n $\delta_x \sin \psi$. Bul du'zetiwlerde φ menen ψ arqali' shashi'rati'wshi' tegisliklerdin' XOY ha'm ZOY tegisliklerine sali'sti'rg'andag'i' buri'lg'an mu'yeshleri belgilengen. δ_z penen δ_x bolsa subda'neshelerdin' sa'ykes OZ ha'm OX ko'sherleri do'geregindagi buri'li'w mu'yeshleri.

Solay etip Fudjivara usi'li'nda kristalli'q u'lginin' bir waqi'tta ko'p sanli' topografiyalı'q su'wretleri ali'nadi'. Kristaldi'n' su'wretlerin tallawdi'n' bari'si'nda subda'nesheler arasi'ndag'i' mu'yeshler ha'm sol da'neshelerdin' o'lshemleri ani'qlanadi'.

Bul ayti'lg'anlardin' barli'g'i' da subda'neshelerdin' o'lshemleri rentgen trubkasi'ni'n' fokusi'ni'n' o'lshemi bolg'an f shamasi'nan u'lken bolg'an jag'daylarda g'ana ori'nlanadi'.

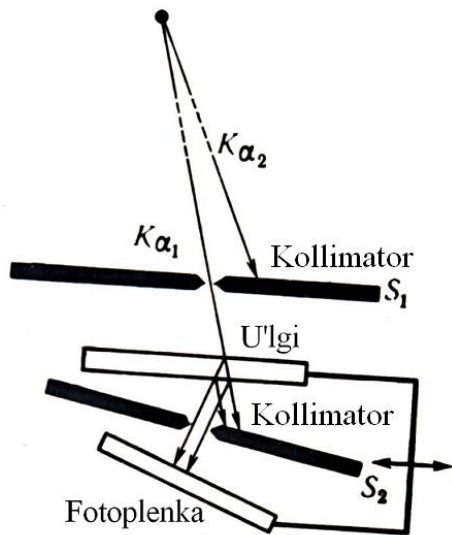


3-su'wret.

Fudjivara usi'li' menen su'wretke tu'siriwde kristalli'q blok arasi'ndag'i' buri'li'w mu'yeshin ani'qlaw ushi'n arnalg'an sxema

2-§. Lang usi'li'

Kristallar rentgenografiyasi'nda ken' tarqalg'an ha'm monoxromat rentgen nurlari' paydalani'latug'i'n Lang usi'li' sali'sti'rmali' juqa kristallardag'i' kristalli'q quri'li'slardin' defektlerin u'yreniw ushi'n qollani'ladi'. Bunday juqa kristallar ushi'n $\mu t < 1$ sha'rtinin' ori'nlani'wi' lazi'm. Bul ten'sizlikte μ arqali' kristaldi'n' si'zi'qli' juti'w koefficienti, al t arqali' oni'n' qali'n'li'g'i' belgilengen. Bul usi'lda rentgentopografiyalı'q su'wretke tu'siriw sxemasi' 4-su'wrette berilgen. Si'zi'qli' rentgen nurlari' dereginen (4-su'wrette bul si'zi'q sxema tegisligine perpendikulyar) shi'qqan rentgen nurlari' shashi'rati'w awhali'na qoyi'lg'an kristalg'a kelip tu'sedi. Bregg (Breg) bag'i'ti'nda u'lken ayi'ra ali'wshi'li'qqa jetiw ushi'n nurlani'wdi'n' tek $K\alpha_1$ qurawshi'si' g'ana paydalani'ladi'. Bul $K\alpha_1$ qurawshi'si'n spektrdin' basqa bo'limlerinen ayi'ri'p ali'w ushi'n rentgen trubkasi'nan keliwshi nurlar aldi'na S_1 san'lag'i'n qoyadi'. Bul san'laqti'n' ken'ligin saylap alg'anda rentgen nurlari'ni'n' da'stesinin' jayi'li'w mu'yeshi $K\alpha_1$ menen $K\alpha_2$ dubletleri arasi'ndag'i' qashi'qli'qtan kishi boli'wi' kerek. Fotoplenka aldi'ndag'i' S_2 san'lag'i' bolsa tek difrakciyag'a ushi'rag'an nurdi' g'anan o'tkeredi ha'm plenkanı' trubkadan tuwri' kelip tu'siwshi rentgen nuri'nan qorg'aydi'. Kristaldi'n' u'lken oblasti'nan topografiyalı'q su'wret ali'w ushi'n u'lgı menen plenkag'a usi' plenkanı'n' betine parallel bag'i'tta qaytalanbali'-ilgerilemeli qozg'ali's (skannerlew) beriledi. Usi'ni'n' saldari'nan kristaldi'n' betinin' u'lken bo'liminin' yamasa bettin' barli'q bo'liminin' u'zliksiz su'wreti ali'nadi'.



4-su'wret.
Lang usi'li' boyi'nsha
rentgentopografiyalik su'wret ali'wdi'n'
sxemasi'

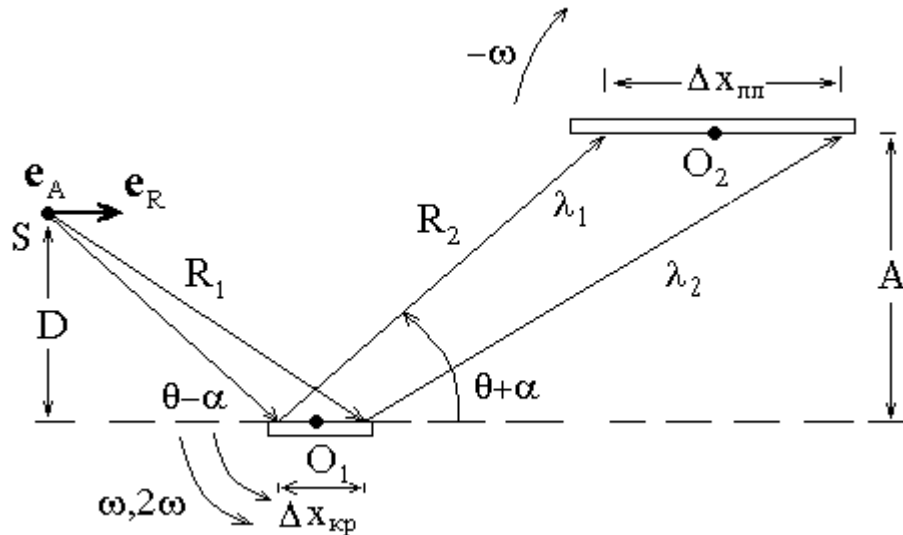
Ali'ng'an topogrammalarda u'lgidegi strukturalik defektlerdi (mi'sali' dislokatsiyalardi') qorshap turg'an ortali'qti'n' su'wreti joqari'raq intensivlikke iye ushastkalar tu'rinde qaliplesedi. Dislokatsiyalardagi' kontrastti'n' payda boli'wi'ni'n' teoriyasi' ko'p sanli' ilimiy jumi'slarda rawajlandi'ri'lg'an. Bul jumi'slarda dislokatsiya si'zi'qlari' a'tirapi'ndagi' kristaldi' mozaykali'q kristall si'pati'nda qaraydi'. Al mozaykali'q kristallarda bolsa rentgen nurlari'ni'n' shashi'rawi'ni'n' kinematikali'q teoriyasi' ori'nli' boladi' ha'm bunday u'lgilerde birinshi ekstinktsiya baqlanbaydi'. Sonli'qtan bunday ushastkalarda shashi'rag'an rentgen nurlari' dislokatsiyalar joq ori'nlardagi' shashi'rag'an nurlarg'a sali'sti'rg'anda u'lkenirek intensivlikke iye boladi'. Sonli'qtan difraktsiyalik su'wrettegi bunday kontrasti' a'dette ekstinktsiyalik kontrast dep ataydi'.

Lang usi'li'nda ayi'ri'm dislokatsiyalardi' baqlaw mu'mkin. Biraq bunday baqlawlar ju'rgiziletug'i'n kristallik denelerde dislokatsiyalardi'n' ti'g'i'zli'gi' 10^6 sm^{-2} shamasi'nan u'lken bolmawi' kerek.

3-§. Mu'yeshlik skannerlew usi'li'

Noqatli'q derekten shi'qqan polixromatik rentgen nurlari' qollani'latug'i'n SHulc, Fudjivara ha'm monoxromatik rentgen nurlari' qollani'latug'i'n Lang usi'llari'ni'n' en' ko'zge tu'setug'i'n kemshiliklerinin' biri u'lken ekspozitsiya waqi'ti' boli'p tabi'ladi'. Bul usi'llar menen bir topografiyalik su'wret onlag'an saat waqi't kerek boladi'.

Rentgentopografiyalik usi'llardi'n' ekspressligin (kishi waqi'tlar ishinde topografiyalik su'wretler ali'w) artti'ri'w maqsetinde kristallardi'n' topografiyalik su'wretin ali'wdi' nurlani'wdi'n' xarakteristikali'q spektrin qosi'msha tu'rde paydalani'w usi'ni'ldi'. Bunday usi'ldi'n' optikalik sxemasi' 5-su'wrette berilgen.



5-su'wret. Mu'yeshlik skannerlew usi'li'ni'n' sxemasi'.

S arqali' rentgen nurlari' deregi, e_R ha'm e_A arqali' sa'ykes radialli'q ha'm azimutalli'q bag'ati'lar (keyingisi su'wret tegisligine perpendikulyar), R_1 ha'm R_2 arqali' sa'ykes derek-u'lgi ha'm u'lgi-fotoplenka qashi'qli'qlari' belgilengen.

S arqali' belgilengen noqatli'q rentgen nurlari' dereginen rentgen goniometrii ko'sherine ornati'lg'an u'lgi' kelip tu'sedi. Kristalli'q u'lgidan A qashi'qli'gi'na jaylasti'ri'lg'an fotoplenkada SHulc usi'li'ndag'i' jag'daydag'i'day ha'r bir waqi't momentinde kristaldi'n' betinin' topografiyalig' su'wreti qal'iplesedi. Ekspoziciya bari'si'nda kristall O_1 ko'sherinin' do'gereginde $\Delta\varphi$ mu'yeshlik intervali'nda ω mu'yeshlik tezligi menen skannerlenedi (buni' mu'yeshlik skannerlew dep ataymi'z). Al plenka bolsa quramali' tu'rde qozg'ali'wi' kerek. Ol O_1 ko'sheri do'gereginde 2ω mu'yeshlik tezligi, al O_2 ko'sheri do'gereginde $-\omega$ tezligi menen qozg'aladi'. Bunday qozg'ali'sta fotoplenkani'n' beti krnistaldi'n' betine parallel boli'p qaladi', al O_1 noqati'nda difrakciyag'a ushi'rag'an nur O_2 noqati'na kelip tu'sedi. Kristaldi'n' ha'r bir ushaskasi'ni'n' topografiyalig' su'wreti ha'r qi'yli' waqi't momentinde ha'r qi'yli' uzi'nli'qtag'i' tolqi'nlar ta'repinen payda etiledi. Bunday geometriyada su'wretke tu'sirgende bir birinen' u'stine tu'sedi. Sonli'qtan su'wretti payda etiwshi tolqi'n uzi'nli'qlari' intervali'na xarakteristikali'q spektr si'zi'g'i' kiretug'i'n bolsa topogramma ali'w ushi'n ketetug'i'n waqi't SHulc usi'li'nda topogramma ali'w ushi'n kerek bolg'an waqi'tqa sali'sti'rg'anda a'dewir kemeyedi.

Kristaldi'n' fragmentlerinin' su'wrettegi u'lkeyiw koefficientleri (1-3) ha'm (1-4) formulalar ja'rdeminde esaplanadi'.

Eger derek-u'lgi ha'm u'lgi fotoplenka qashi'qli'qlari' R_1 ha'm R_2 (yamasa A ha'm D) izertlenetug'i'n kristalli'q u'lginin' si'zi'qli' o'lshemlerine sali'sti'rg'anda a'dewir u'lken bolsa, onda kristaldi'n' ha'r qi'yli' noqatlari' arasi'ndag'i' qashi'qli'qlar R_1' ha'm R_2' shamalari'ni'n' o'zgerisin az dep esaplawg'a, soni'n' menen birge bul qashi'qli'qlardi' R_1 ha'm R_2 qashi'kli'qlari'na ten' dep qabi'l etiw mu'mkin. Bul usi'lda R_1 ha'm R_2 shamalari' o'zgerissiz qaladi', al kristaldi'n' su'wretin payda etiwge qatnasatug'i'n tolqi'n uzi'nli'qlari' ushi'n θ mu'yeshi ha'r qi'yli' ma'nislerge iye boladi'. $\alpha \neq 0$ ha'm $\alpha \neq \frac{\pi}{2}$ bolg'an jag'daylarda $P_R = P_R(\theta)$ ha'm usi'g'an sa'ykes kristaldi'n' su'wreti ha'r bir tolqi'n uzi'nli'g'i'nda o'zine sa'ykes P_R u'lkeytiw koefficienti menen beriledi. Usi'nday awhaldi'n' kesirinen mu'yeshliku skannerlew usi'li'ni'n' si'zi'qli' ha'm mu'yeshlik aji'rata ali'wshi'li'q qa'biletlikleri SHulc usi'li'ni'n' ayi'ra ali'w qa'biletliklerinen to'men boladi'.

Solay etip mu'yeshlik skannerlew usi'li' SHulc usi'li'ni'n' da'l analogi' boli'p tabi'lmaydi'. Bul usi'ldi'n' aji'rata ali'w qa'biletligi u'lginin' skannerlew intervali' $\Delta\varphi$, θ , α mu'yeshlerinin' funkciyalari' boli'p tabi'ladi'.

Ko'p sanli' eksperimentalli'q jumi'slarda $\Delta\varphi \leq 2 - 3^0$ bolg'an jag'daylarda ekspozitsiya vaqti'ni'n' (topogrammani' ali'w ushi'n ketetug'i'n waqi't) SHulc usi'li'ndag'i' ekspozitsiya waqi'ti'na sali'sti'rg'anda 5-10 ese kem bolatug'i'nli'g'i' ani'qlandi'.

Mu'yeshlik skannerlew kamerasi'n izertlenetug'i'n kristalli'q u'lg'i menen esaplag'i'shti'n' tezlikleri sa'ykes ω ha'm 2ω bolg'an qa'legen rentgen goniometrii tiykari'nda sog'i'w mu'mkin. Bul pitkeriw qa'nigelik jumi'si'n ori'nlaw ushi'n GUR-4 (URS-50 apparati'), GUR-5 (DRON-2 apparati') ha'm GUR-8 (DRON-2 apparati') rentgen goniometrleri qollani'ldi'.

I bap. Mu'yeshlik skannerlew usi'li'nda kristaldan o'tiwshi rentgen nurlari' ta'repinen topografiyalig' su'wrettin' qa'liplesiwi

5-§. Paydalani'latug'i'n eksperimentalli'q a'sbap-u'skeneler

Eksperimentlerdi o'tkeriw bari'si'nda a'dette o'tkir fokusli' BSV-5 yamasa BSM-1 rentgen trubkasi'na iye URS-0,02 apparati' paydalani'ladi'. Bul apparat eki blokdan turadi': turaqli' joqari' kernewli derek penen basqari'w pulti ha'm qorg'awshi' qapqa iye shtativ. Bloklar bir biri menen uzi'nli'g'i' 2 m bolg'an joqari' kernewli kabel menen tutasti'ri'lg'an. Korg'awshi' qap rentgen trubkasi'n salqi'nlati'wshi' may ortalig'i'nda ornalasti'ri'w ushi'n paydalani'ladi'.

Rentgen trubkasi' ornati'lg'an qorg'awshi' qap arnawli' bag'anag'a (stoykag'a) bekitiledi. Bul bag'ana rentgen nurlari' degerinin' joqari' ko'teriliwin yamasa to'men tu'siriliwin, sonday-aq oni'n' on' ha'm shep ta'replerge erkin tu'rde bi'ri'li'wi'n ta'miyinleydi. Qorg'awshi' qapti' bag'anani'n' do'gereginde ha'm o'zinin' ko'sherinin' do'gereginde qa'legen mu'yeshke buri'w mu'mkin.

Elektr energiyasi'n jetkerip beriw ha'm basqari'w blogi' joqari' voltli transformatoridan, kernew stabilizatori'nan ha'm basqari'w panelinen turadi'.

Rentgen trubkai'ni'n' anodi'ndag'i' kernewdin' maksimalli'q ma'nisi 45 kv shamasina ten', al anaod tog'i'ni'n' maksimalli'q ma'nisi 450 mikroamper (μ a). Paydalani'w quwatligi' 140 vt shamasinan ko'p emes.

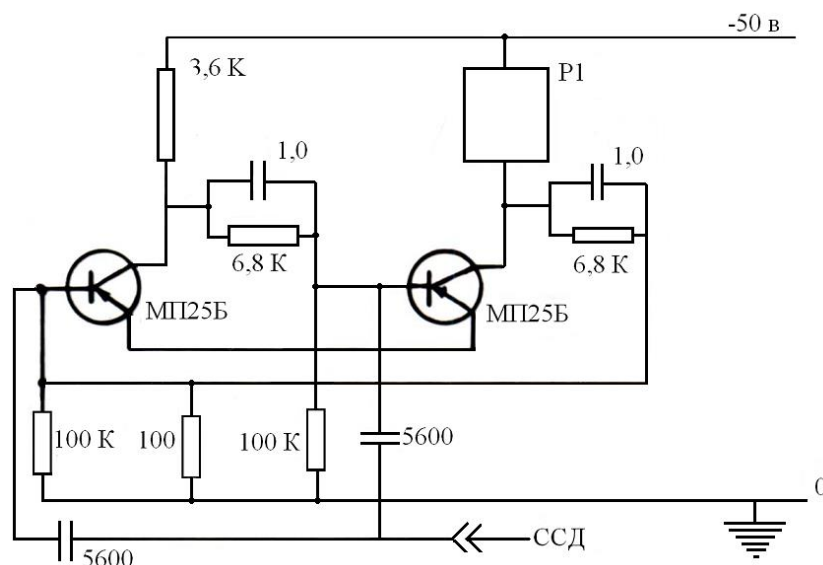
MARS-2 apparati' (oni' URS-0,1 dep te ataydi') rentgenostrukturalig' analiz ushi'n arnalg'an boli'p, quwatligi' 0,1 kvat, mikrofokusli' rentgen trubkasi'na (BSV-7 tipindegi) iye. Oni'n' anodi'ni'n' o'lshemleri 0,1x0,1 mm. Maksimalli'q anod kernewi 50 kv, anod tog'i'ni'n' shamasig' 4,5 ma g'a shekem.

Goniometrlig' du'zilis. Joqari'da ga'p etilgenindey pitkeriw qa'nigelik jumi'si'n ori'nlaw ushi'n ushi'n GUR-4 (URS-50 apparati'), GUR-5 (DRON-2 apparati') ha'm GUR-8 (DRON-2 apparati') rentgen goniometrleri qollani'ldi'. Bul rentgen goniometrleri (GUR-5 ha'm GUR-8) jan'a tiptegi rentgen goniometrleri boli'p, ken' mu'yeshlik intervali'nda (-90^0 tan 170^0 qa shekem) rentgen difraktsiyali'q su'wretke ali'wdi', rentgendifraktsiometriyalig' izertlewler ju'rgiziwge mu'mkinshilik beredi. Difraktsiyali'q mu'yeshlin' ma'nisin $\pm 0,1^0$ da'lliginde ani'qlawg'a mu'mkinshilik beredi.

Eksperimentlerdi ori'nlaw bari'si'nda GUR-4 goniometri (basqa goniometrler de) mu'yeshlik skannerlew usi'li'nda rentgen topogrammalari'n tu'siriw ushi'n qollani'ldi'.

GUR-4 goniometrde ciklilig' mu'yeshlik skannerlewdi a'melge asi'ri'w. En' a'piwayi' GUR-4 rentgen goniometrde ciklilig' skannerlewdi a'melge asi'ri'w ushi'n 6-su'wrette ko'rsetilgen elektrlik sxemasi' tiykari'nda islewshi elektr a'sbapi' paydalani'ldi'. Bul sxema eki yari'm o'tkizgishli MP 25 B triggerinen ha'm R₁ relesinen turadi'. A'sbapti'n' kiriw kanali'nan SSV registratsiyalawshi' apparati'nan belgili bir waqi't arali'qlari'nan si'na

si'yaqli' signal berildi. usi'ni'n' saldari'nan R_1 rele si iske tu'sirildi ha'm GUR-4 goniometrini' aylandi'ri'wshi' magnit maydani'ni'n' bag'i'ti' o'zgartildi. Usi'ni'n' na'tiyjesinde izertleniwshi kristalli'q u'lginin' ha'm fotoplenkani'n' aylani'w bag'i'ti' o'zgartildi.



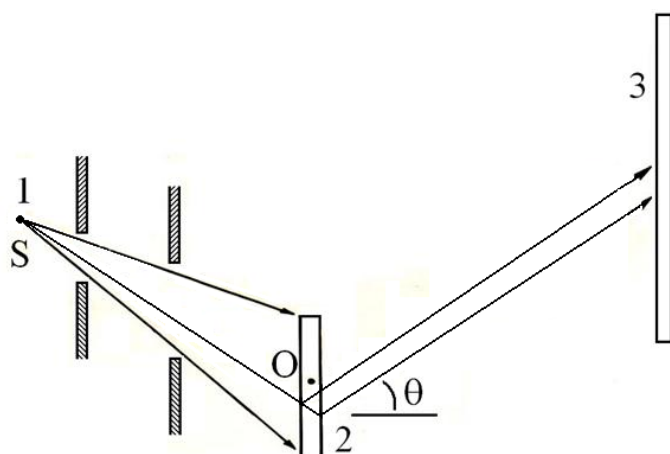
6-su'wret. GUR-4 rentgen goniometrinde paydalani'lg'an ciklli'q mu'yeshlik skannerlewdi a'melge asi'ri'w ushi'n paydalani'lg'an elektrlik sxema.

Blok 50 voltlik tuwri'lag'i'shtan elektr energiyasi' menen ta'miyinlendi.

6-§. Mu'yeshlik skannelew usi'li'nda kristaldan o'tiwshi rentgen nurlari' ta'repinen topografiyalı'q su'wretin' ali'ni'wi'

4-paragrafta ayti'li'p o'tilgenindey mu'yeshlik skannerlew usi'li' boyi'nsha rentgenografiyalı'q topografiyalı'q su'wretler ali'w ushi'n izertlenetug'i'n u'lginin' ortasi' arkali' o'tiwshi ko'sher do'gereginde kristaldi'n' ω mu'yeshlik tezligi, al fotoplenkani'n' sol ko'sherdin' do'gereginde 2ω mu'yeshlik tezligi menen aylani'wi'n ta'miyinlewimiz kerek. Usi'g'an baylani'sli' eksperimentlerdi o'tkeriw ushi'n uli'wma maqsetler ushi'n arnalg'an URS-50IM rentgen difraktometrini' qurami'na kiriwshi GUR-4 rentgen goniometrinen paydalani'ldi'.

7-su'wrette topogrammalardi' ali'wdi'n'sxemasi' ko'rsetilgen. Rentgen goniometrini' ko'sherine jaylasti'ri'lg'an kristall 2 ge 1 arqali' belgilengen rentgen nurlari'ni'n' nokatli'q dereginen tarqali'wshi' tolqi'n kelip tu'sedi. Dirfakciyag'a ushi'rag'an nurlar nurlardi'n' tarqali'w bag'i'ti'na perpendikulyar qoyi'lg'an 3 fotolastinkada kristaldi'n' su'wretin qa'liplestiriwshi difrakciyalı'q daq payda etedi. Ekspoziciya waqi'ti'nda kristall 0 ko'sherinin' do'gereginde $\omega \pm \Delta\theta/2$ intervali'nda ω mu'eshlik tezligi menen skannerleniwi kerek. Kristaldi'n' aylani'w bari'si'nda fotoplenkani' qozg'ali'ssi'z kaldi'ri'wg'a da, goniometr ko'sheri do'gereginde belgili bir mu'yeshlik tezlik penen skannerlew de mu'mkin. Bul qollani'lg'an usi'ldi'n' radial bag'i'ttag'i' u'lkeytiw qa'biletliginin' o'zgerisine ali'p keledi. Soni'n' menen birge plenkani'n' betin u'lginin' betine parallel etip te qoyi'w mu'mkin. Biraq bunday o'zgerislerdin' aqi'betinde ali'ng'an na'tiyjelerde principialli'q o'zgerisler ju'z bermeydi. Bul jag'dayda usi'ldi'n' radial bag'i'ttag'i' u'lkeytiw koefficientinin' ma'nisi o'zgeredi.



7-su'wret. Mu'yeshlik skannerlew usi'li'nda rentgentopografiyalı'q su'wretke tu'siriwdin' optikalı'q sxemasi'.

1 – rentgen nurlari'ni'n' noqatli'q deregi, 2 – izertlenetug'i'n u'lgi, 3 – fotoplenka, O – u'lgi menen fotoplenkani'n' aylani'w ko'sheri, θ arqali' difrakciyalı'q mu'yeshstin' ma'nisi belgilengen.

Biz usi'ni'p ati'rg'an usi'lda kristalli'q u'lginin' ha'r bir ushastkasi'ni'n' su'wreti ha'r qiyli' tolqi'n uzi'nli'qlari' ta'repinen payda boladi'. Tallawlar su'wretke tu'siriwdin' usi'nday geometriyasi'nda bir birinin' u'stine tu'speytug'i'nli'g'i'n ko'rsetedi. Sonli'qtan topogrammada aylanbali' qozg'ali'sti'n' aqibetinen rentgen trubkalari'ni'n' polixromat tormozli'q nurlani'wi'na belgili bir fon sa'ykes keledi. Eger $2d \sin \theta = n\lambda$ Vulf-Bregg sha'rti qanaatlandi'ri'latug'i'n tolqi'n uzi'nli'qrai' intervali'na xarakteristikali'q rentgen nurlari' kiretug'i'n bolsa (mi'sali' $K\beta$ – spektralli'q si'zi'g'i'), onda polixromatli'q nurlardi'n' foni'nda kristaldi'n' topografiyalı'q su'wreti payda boladi'. Usi'ni'n' menen birge topogrammani' ali'w ushi'n za'ru'rli' bolg'an waqi'tti'n' shamasi' aytarli'qtay kemeyedi.

8-su'wrette o'tiwge tiykarlang'an mu'yeshlik skannerlew usi'li'n' optikalı'q sxemasi' keltirilgen. SHashi'rati'wshi' atomli'q tegislikler u'lginin' betine perpendikulyar jaylasqan. Su'wrettegi awhal $2d \sin \theta = n\lambda$ Vulf-Bregg sha'rti kristaldi'n' da'l ortasi'nda ori'nlanatug'i'n jag'dayg'a sa'ykes keledi. Usi' momentte fotoplenkada goniometr'din' ko'sherine parallel bolg'an difrakciyalı'q daq payda boladi'. 8-su'wretten usi' si'zi'qti'n' ken'liginin' u'lginin' qali'nli'g'i'na baylani'sli' bolatug'i'nli'g'i' ko'rinip tur. U'lginin' toli'q su'wretin ali'w ushi'n kristaldi' O_1 ko'sherinin' do'geriginde $\pm \Delta\varphi/2$ mu'yeshine skannerlew kerek (yag'ni'y u'lginin' toli'q burili'w mu'yeshi $\Delta\varphi$ shamasina ten').

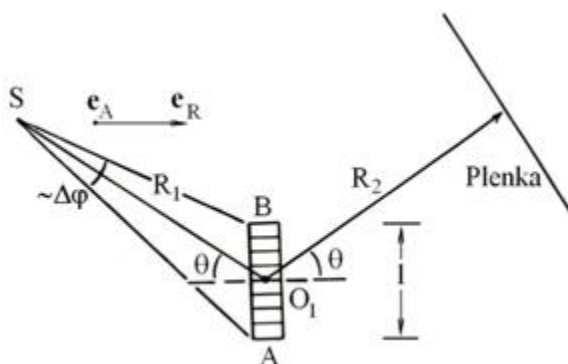
$\Delta\varphi$ mu'yeshinin' shamasi' u'lginin' o'lshemlerine ha'm rentgen nurlari' deregi menen izertlenetug'i'n u'lfige shekemgi arali'qqa baylani'sli'. – su'wrette ko'rinip turg'ani'nday, eger kristaldi'n' beti kelip tu'siwshi rentgen nurlari'ni'n' tarqali'w bag'i'ti'na perpendikulyar bolsa, onda $\Delta\varphi$ ushi'n mi'naday an'latpani' alami'z:

$$\Delta\varphi = \arctg \frac{l}{2R_1}. \quad (2-1)$$

Bul an'latpada l arqali' si'zi'lma tegisligi bag'dari'ndag'i' u'lginin' uzi'nli'g'i', R_1 arqali' rentgen trubkasi'ni'n' fokusi'nan O_1 noqati'na shekemgi qashiqli'q belgilengen. Uli'wma jag'dayda $\alpha \neq 90^\circ$ ma'nisine iye bolami'z ha'm mi'nag'an iye bolami'z:

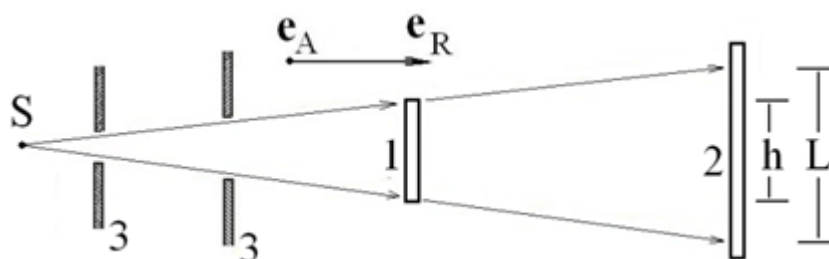
$$\Delta\varphi = \arctg \frac{l \cos \theta}{2R_1}. \quad (2-2)$$

Biz bul jerde ha'm bunnan keyin de izertlenetug'i'n u'lgi menen rentgen nurlari'n shag'i'li'sti'ratug'i'n tegislikler arasi'ndag'i' mu'yesh 90° qa ten' bolg'an jag'daylardi' qaraymi'z, yag'ni'y endi $\alpha = 90^\circ$ dep esaplaymi'z.



8- su'wret. Mu'yeshlik skannerlew usi'li'ni'n' optikali'q sxemasi'.

S arqali' rentgen nurlari'ni'n' deregi, e_R arqali' radial bag'i't, e_A arqali' azimutal bag'i't (si'zi'lma tegisligine perpendikulyar), R_1 ha'm R_2 arqali' derek-u'lgi ha'm u'lgi-fotoplenka qashi'qli'qlari', AB arqali' izertlenetug'i'n kristall (u'lgi). Fotoplenka Plenka dep belgilengen.



9- su'wret. Azimutal bag'i'tta u'lkeytiw coefficientin ani'qlaw ushi'n za'ru'rli bolg'an su'wret. S arqali' rentgen nurlari'ni'n' deregi, 1 arqali' kristalli'q u'lgi, 2 arqali' fotoplenka, e_R arqali' radial bag'i't, e_A arqali' azimutal bag'i't (si'zi'lma tegisligine perpendikulyar), 3 arqali' san'laqlar (kollimatorlar) belgilengen.

Mu'yeshlik skannerlew usi'li'ni'n' azimutal bag'i'ttag'i' u'lkeytiw coefficienti 9-su'wret ja'rdeminde ani'qlanadi'. Bul su'wrette $\frac{L}{R_1+R_2} = \frac{h}{R_1}$ ten'liginin' ori'nlanatug'i'nli'g'i ko'rinip tur. Bul an'latpada L arqali' su'wrettin' biyikligi, al h arqali' izertlenip ati'rg'an u'lginin' biyikligi belgilengen. R_1 ha'm R_2 shamalari' sa'ykes anod-u'lgi ha'm u'lgi-fotoplenka qashi'qli'qlari'. Demek

$$P_A = \frac{L}{h} = \frac{R_2}{R_1} \quad (2-3)$$

an'latpasi'na iye bolami'z. Radial bag'i't ha'm fotoplenka qozg'almay turatug'i'n bolg'an jag'day ushi'n (bul haqqi'nda kelesi paragrafta toli'g'i'raq ga'p etiledi)

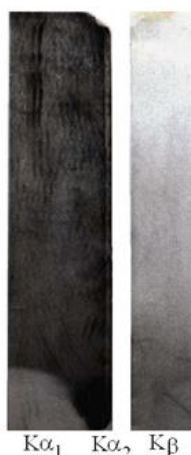
$$P_R = \left(\frac{R_2}{R_1} - 1 \right) \cos \theta \quad (2-4)$$

an'latpasi'na iye bolami'z. Sonli'qtan

$$\frac{P_R}{P_A} = \left(\frac{R_2 - R_1}{R_1 + R_2} \right) \cos \theta \quad (2-5)$$

ha'm uli'wma jag'dayda kristaldi'n' fotoplenkadag'i' su'wreti konformli'q bola almaydi' ha'm kristaldi'n' fragmentlerinin' su'wrettegi formalari' mayi'sqan boli'p shi'g'adi'.

Biz bul jerde biz qarap ati'rg'an rentgentopografiyalı'q usi'lda da, kristalli'q u'lginin' betinin' su'wretin tu'siriwshi mu'yeshlik skannerlew usi'li'nda da $P_R = P_R(\theta)$ baylani'si'ni'n' ori'n alatug'i'nli'g'i'na itibar beremiz. Bul jag'day mi'nalarg'a baylani'sli': kristaldi'n' su'wreti ha'r qanday tolqi'n uzi'nli'g'i'na iye rentgen tolqi'nlari' ta'repinen ha'r qi'yli' P_R koefficientleri menen payda etiledi. Bul unamsi'z jag'day usi'ldi'n' si'zi'qli' ayi'ra ali'wshi'li'q uqi'bi'n da, mu'yeshlik ayi'ra ali'wshi'li'q uqi'bi'n da basqa rentgentopografiyalı'q usi'llarg'a (mi'sali' SHulc ha'm Lang usi'llari') sali'sti'rg'anda to'menletedi.



10-su'wret.

Mu'yeshlik skannerlew usi'li' boyi'nsha ali'ng'an kvarc kristalli'ni'n' AT-kesiminin' topografiyalı'q su'wreti. $K\alpha_1$ menen $K\alpha_2$ spektralli'q nurlani'wi' ta'repinen payda etilgen topografiyalı'q su'wretler bir biri menen qabatlasadi' (birinshi su'wrettin' on' ta'repinde eki su'wrettin' qabatlasqanli'g'i' ko'rinip tur). Al $K\beta$ nurlani'wi' bolsa o'z aldi'na su'wret beredi.

10-su'wrette kvarc kristalli'ni'n' topogramamasi' ko'rsetilgen. Bul topogramma u'sh su'wrettin' qosi'ndi'si'nan turadi'. Bir birinin' u'stine tu'sken eki su'wret rentgen trubkasi'ni'n' mi's anodi'ni'n' $K\alpha_1$ ha'm $K\alpha_2$ spektralli'q nurlani'wi' ta'repinen payda etilgen. Al on' ta'reptegi a'zzirek su'wretti $K\beta$ nurlani'wi' payda etken (mi's anodi' ta'repinen qozdri'lg'an rentgen nurlari' ushi'n $\lambda_{K\alpha_1} = 1,5442740$, $\lambda_{K\alpha_2} = 1,5409290$ ha'm $\lambda_{K\beta} = 1,3922320$ angstrom).

Tilekke qarsi' mi's anodi'na nurlanatug'i'n $K\beta$ rentgen nuri' bir si'zi'qtan ibarat emes. Eger biz "Rentgen nurlari' ushi'n xali'q arali'q kristallografiyalı'q kestenin'" (International Tables for X-Ray Crystallography. Volume C. Mathematical, Physical and Chemical Tables) 3-tomi'ni'n' 203-betinde mi'naday mag'li'wmatlardi' ko'remiz:

4.2. X-RAYS

Table 4.2.2.1. *K-series reference wavelengths in Å; bold numbers indicate a directly measured line*

Numbers in parentheses are standard uncertainties in the least-significant figures.

Z	Symbol	A	$K\alpha_2$	$K\alpha_1$	$K\beta_3$	$K\beta_1$	References
12	Mg		9.89153 (10)	9.889554 (88)			(a)
13	Al		8.341831 (58)	8.339514 (58)			(a)
14	Si		7.12801 (14)	7.125588 (78)			(b)
16	S		5.374960 (89)	5.372200 (78)			(b)
17	Cl		4.730693 (71)	4.727818 (71)			(b)
18	Ar		4.194939 (23)	4.191938 (23)			(c)
19	K		3.7443932 (68)	3.7412838 (56)			(d)
24	Cr		2.2936510 (30)	2.2897260 (30)	2.0848810 (40)	2.0848810 (40)	(e)
25	Mn		2.1058220 (30)	2.1018540 (30)	1.9102160 (40)	1.9102160 (40)	(e)
26	Fe		1.9399730 (30)	1.9360410 (30)	1.7566040 (40)	1.7566040 (40)	(e)
27	Co		1.7928350 (10)	1.7889960 (10)	1.6208260 (30)	1.6208260 (30)	(e)
28	Ni		1.6617560 (10)	1.6579300 (10)	1.5001520 (30)	1.5001520 (30)	(e)
29	Cu		1.54442740 (50)	1.54059290 (50)	1.3922340 (60)	1.3922340 (60)	(e)

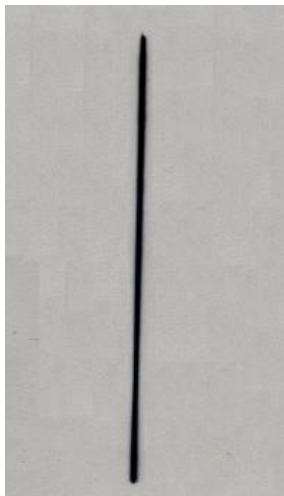
A'l'bette $\lambda_{K\beta_1}$ din' qasi'nda $\lambda_{K\beta_2}$ spektralli'q si'zi'qti'n' bar ekenligi biz usi'ni'p ati'rg'an usi'ldi'n' a'hmiyetin to'menletedi.

Izertlenetug'i'n kristalli'q u'lgilerdin' si'zi'qli' o'lshemleri kishi (1 sm^2 shamasi'nan u'lken emes) ha'm kishi difrakciyalı'q mu'yeshlerde (difrakciyalı'q mu'yeshtin' ma'nisi $\theta <$

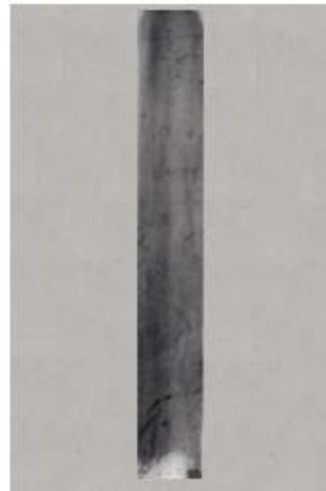
15^o) $K\alpha$ ha'm $K\beta$ nurlari' ta'repinen payda etilgen su'wretlerdin' bir birinin' u'stine tu'siwi ori'n aladi'. Bul unamsi'z jag'daydan qashi'w maqsetinde bizin' qollani'wi'mi'z ushi'n kerekli bolg'an difrakciyalig' mu'yeshtin' ma'nislerinin' intervali'n tabami'z. A'piwayi' geometriyalig' tallaw θ difrakciyalig' mu'yeshinin' to'mengi sha'rtti qanaatlandi'ri'wi'ni'n' kerek ekenligin ko'rsetedi:

$$\theta \geq \arccos \left\{ \frac{R_2}{l \left(1 + \frac{R_1}{R_2} \right)} \tan \left[\arcsin \frac{n\lambda_\alpha}{2d} - \arcsin \frac{n\lambda_\beta}{2d} \right] \right\}. \quad (2-5)$$

O'tkerilgen eksperimentler (2-3), (2-4) ha'm (2-5) formulalardi'n' duri's ekenligin tasti'yi'qladi'.



a)



11-su'wret. Ulgi-fotoplenka arasi'ndag'i' qashi'qli'q R_2 nin' ha'r qi'yli' ma'nislerinde ali'ng'an topografiyalig' su'wretler.

a) $R_2 = 14$ sm, b) $R_2 = 25$ sm.

Rentgen nurlari' optikasi'nda kristall arqali' tutas spektrge iye rentgen nuri' o'tetug'i'n bolsa, bul nurdi'n' radial bag'i'tta fokuslanatug'i'nli'g'i' belgili. Bul qubi'li'sti' baqlaw ushi'n ha'm fokusli'q qashi'qli'qti' eksperimentte o'lshe'w ushi'n topografiyalig' su'wretke tu'siriwlerdin' bir seriyasi' o'tkerildi. Bul jag'day 12-su'wrette demonstraciyalang'an. 12-a su'wrette ali'ng'an topogramma $R_2 = 14$ sm bolg'anda, al ekinshi topogramma $R_2 = 25$ sm bolg'anda tu'sirildi. Esaplawlar eki jag'dayda da fokus penen u'lgi arasi'ndag'i' qashi'qli'qti'n' 13 sm bolg'anli'g'i'n ha'm bul qashi'qli'qti'n' R_1 din' shamasina ten' ekenligin ko'rsetti (bizin' eksperimentlerimizde R_1 din' shamasig' haqi'yqati'nda da 13 sm ge ten' edi). Demek (2-4) formuladag'i' $R_1 = R_2$ bolg'an jag'dayda usi'ldi'n' radial bag'i'ttag'i' u'lkeytiw koefficienti bolg'an P_R shamasini'n' nolge ten' bolatug'i'nli'gi'ni'n' (yag'ni'y $R_1 = 0$) sebebi polixromat rentgen nurlari'ni'n' goniometr din' ko'sherine parallel bolg'an si'zi'qqa fokuslani'wi' boli'p tabi'ladi' eken.

Solay etip $\theta < 45^\circ$ bolg'an jag'daylarda azimutal bag'i'tta sozi'lg'an si'zi'qti'n' boyi'nsha polixromat rentgen nurlari'ni'n' fokuslani'wi' ori'n aladi' eken. Bul fokuslani'wdi'n' sebebi paydalani'lg'an rentgen spektrinin' u'zliksizligi boli'p tabi'ladi'.

Monoxromat nurlani'wdi' paydalang'anda ha'm kristaldi' $\Delta\varphi$ mu'yeshlik intervali'nda skannerlegenimizde kristaldi'n' ha'r qi'yli' noqatlari'nan shi'qqan barli'q difrakciyag'a ushi'rag'an nurlar polixromatik nurlani'w ushi'n fokusta jatatug'i'n bir si'zi'q arqali' o'tedi. Sonli'qtan $R_2 > R_1$ sha'rti ori'nlang'anda topogrammada kristaldi'n' 180° qa aylandi'ri'lg'an su'wreti payda boladi' (yag'ni'y radial bag'i'ttag'i' on'i' menen shep ta'repi almasqan, basqa

so'z benen aytqanda 8- ha'm 9-su'wretlerdegi O noqati'ni'n' a'tirapi'nda 180 gradusqa buri'lg'an).

Bul jumi'sta Fudjivara usi'li'n menen o'tiwge tiykarlang'an mu'yeshlik skannerlew usi'li' menen sali'sti'ri'w boli'p tabi'ladi'. Usi' usi'llardi'n' o'zgesheliklerin ha'm arti'qmashli'g'i'n' ani'qlaw ushi'n difrakciyalig' eksperimentler seriyasi' o'tkerilip, olar to'mendegidey na'tiyjelerdi berdi:

1). Radial bag'i'tta kristalldi'n' o'lshemi menen oni'n' su'wretinin' o'lsheminin' birdey boli'wi' ushi'n kristall menen fotoplenkani'n' birdey mu'yeshlik tezlik penen skannerleniwi kerek. Bunday jag'dayda kristallig' u'lg'i ω mu'yeshlik tezligi menen, al fotoplenka bolsa sol bag'i'tta 2ω mu'yeshlik tezligi menen qozg'ali'wi' sha'rt. Fudjivara ha'm mu'yeshlik skannerlew usi'li' menen ali'ng'an topografiyalig' su'wretlerdi bir biri menen sali'sti'ri'w kristall menen fotoplenka birgelikte qozg'alg'anda u'lg'i menen topografiyalig' su'wrettin' u'lkenlikleri radiallig' bag'i'tta bazi' bir shamag'a ayri'ladi' (mi'sali' $R_2 = 25$ sm bolg'anda mu'yeshlik skannerlew usi'li'nda P_R din' shamasi' Fudjivara usi'ni'ndag'i'g'a qarag'anda a'dewir u'lken). Geometriyalig' tallaw bunday ayi'rmani'n' paydjalani'lg'an rentgen nurlari'ni'n' qurami'na baylani'sli' ekenligin ko'rsetedi. Fudjivara usi'li'nda u'lginin' bir birine qarama-qarsi' shetlerinde (8-su'wrettegi A ha'm V noqatlari') difrakciyalig' shag'i'li'si'w ha'r qi'yli' difrakciyalig' mu'yeshler (Bregg mu'yeshleri menen) menen boladi'. Bul rentgen nurlari'ni'n' bir si'zi'qqa fokuslani'wi'n boldi'radi' ha'm si'zi'lmag'a parallel bolg'an bag'i'tta u'lgiden ali'natug'i'n su'wrettin' o'lshemlerin kishireytedi. Al mu'yeshlik skannerlew usi'li'nda bolsa kristallig' u'lginin' barli'q noqatlari'nda difrakciyalig' mu'yetin' ma'nisleri birdey boladi' ha'm usi'g'an sa'ykes u'lkeytiw koefficienti bul jag'dayda sali'sti'rmali' u'lken ma'niske iye boladi'.

2). 12-su'wrette Fudjivara usi'li' menen mu'yeshlik skannerlew usi'llari'ndag'i' kontrastli'qti'n' ha'r qi'yli' bolatug'i'nli'g'i' ko'rsetilgen. 12-a ha'm 12- su'wretlerdi sali'sti'ri'w mu'yeshlik skannerlew usi'li'nda kristalldig'i' strukturalig' defektlerdin' su'wretlerinin' u'lken kontrastqa iye bolatug'i'nli'g'i'n' ani'q ko'rsetedi. Fudjivara usi'li' menen ali'ng'an topogrammada kontrastli'q to'menlew (tap usi'nday jag'day SHulc usi'li' menen shashi'rawg'a tiykarlang'an mu'yeshlik skannerlew usi'li'n sali'sti'rg'anda da baqlang'an edi). Bul jag'day mu'yeshlik skannerlew usi'li'ni'n' (yag'ni'y monoxromat rentgen nurlari'n qollani'wdi'n') Fudjivara usi'li'ni'n' aldi'ndag'i' arti'qmashli'g'i'n' da'lilleydi. Turpayi'raq bahalawlar mu'yeshlik skannerlew usi'li'nda kontrastli'qti'n' Fudjivara usi'li'ndagig'a qarag'anda 1,5 ese u'lken bolatug'i'nli'g'i'n' ko'rsetedi.



a)



b)



c)



d)

12-su'wret. Bir kVARC kristalli'ni'n' o'tiwge tiykarlang'an mu'yeshlik skannerlew (a), Fudjivara (b), Lang (d) ha'm shashi'rawg'a tiykarlang'an mu'yeshlik skannerlew (c) usi'llari'ni'n' ja'rdeminde ali'ng'an su'wretleri (a, b, c topogrammalari' mi's anodi'ni'n' nurlani'wi'nda, d su'wrettegi topogramma molibden anodi'ni'n' nurlani'wi'nda ali'ndi').

3). 12-s su'wrette ko'rsetilgen topogramma shashi'rawg'a tiykarlang'an mu'yeshlik skannerlew usi'li' boyi'nsha ali'ndi'. Su'wretlerdi sali'sti'ri'p ko'riw bizin' usi'ni'p ati'rg'an sxemami'z boyi'nsha topogrammalar tu'sirilgende sali'sti'rmali' bay informatsiya ali'natug'i'nli'g'i'n ko'rsetedi.

4). 12-d su'wrette ali'ng'an rentgentopografiyalig' su'wret Lang usi'li' menen KRS kamerasi'nda molibden anodi'ni'n' nurlani'wi'nda tu'sirildi. Topografiyalig' su'wrette strukturalig' defektlerdin' izleri (bir teklikliktin' joqli'g'i', si'zi'qlar ha'm basqalar) baqlanadi') ani'q ko'rinip tur. Bul jag'day Lang usi'li'ni'n' aji'rata ali'wshi'li'q qa'biletliginin' mu'yeshlik skannerlew usi'li'ni'n' aji'rata ali'w qa'biletliginen a'dewir joqari' ekenligin ko'rsetedi.

5). Eksperimentler mu'yeshlik skannerlew usi'li'nda ekspozitsiya waqi'ti'ni'n' ~ 2-4 saatti' quraytug'i'nli'g'i'n ko'rsetti. Bul Fudjivara usi'li'ndag'i'g'a sali'sti'rg'anda ekspozitsiya waqi'ti'ni'n' shama menen 4 ese kem ekenligin ko'rsetedi (birdey rentgen nurlari' deregin paydalang'anda). Rentgen nurlari' dereginin' (rentgen trubkasi'ni'n') birdey quwati'nda ha'm birdey bolg'an R_1 menen R_2 larde kVARC kristallari'n su'wretke alg'anda ekspozitsiya waqi'ti' ushi'n to'mendegidey na'tiyjeler ali'ndi':

	Usi'l	Ekspozitsiya waqi'ti'
1	Mu'yeshlik skannerlew usi'li' (o'tiwshi tolqi'nlardag'i')	2,5 saat.
2	Fudjivara usi'li'	10 saat.
3	Mu'yeshlik skannerlew usi'li' (shashi'raw tolqi'nleri')	0,2 saat
4	Lang usi'li'	15 saat.

Ali'ng'an su'wretlerde baqlang'an kontrastli' si'zi'qlar, jolaqlar ha'm basqalar kristallig' u'lgidegi joqari' kernewli ushastkalar'ga sa'ykes keledi. Bul ushastkalar ekstinktsiya effektinin' ha'lsirewin ta'miyinleydi ha'm bul kristaldi'n' shashi'rati'wshi'li'q qa'biletligin u'lkeytedi.

Ppolarizatsiyalanbag'an rentgen nurlari' ushi'n mozaykali' (ideal jetilispegen monokristall yamasa polikristall) kristallardag'i' integrallig' shag'i'li'sti'ri'w to'mendegidey formula boyi'nsha esaplanadi':

$$\rho_m = \frac{N^2 \lambda^3}{2\mu} |F|^2 \left(\frac{e^2}{m c^2} \right)^2 \frac{1 + \cos^2 2\theta}{2 \sin 2\theta}. \quad (2-6)$$

Ideal jetiliskan kristallar ushi'n (2-6) ni'n' orni'na

$$\rho_i = \frac{8}{3\pi} N|F| \lambda^2 \frac{e^2}{m c^2} \frac{1 + \cos 2\theta}{2 \sin 2\theta} \quad (2-7)$$

formulasi'na iye bolami'z. Bul an'latpalarda N arqali' kristaldi'n' ko'leminin' birligindagi elementar quti'shalar sani', F arqali' sol elementar quti'shalardi'n' shashi'rati'w faktori' (strukturali'q faktor). θ arqali' difraktsiyali'q mu'yesh, μ arqali' si'zi'qli' ha'lsirew koeffitsienti, $\frac{e^2}{m c^2} = 2,818 \cdot 10^{-13}$ arqali' elektronni'n' klasskali'q radiusi' belgilengen. (2-6) menen (2-7) ni sali'sti'ri'p mi'naday sanli'q mag'li'wmatlardi' alami'z:

$$\frac{\rho_m}{\rho_i} = \frac{\frac{N^2 \lambda^3}{2\mu} |F|^2 \left(\frac{e^2}{m c^2} \right)^2 \frac{1 + \cos^2 2\theta}{2 \sin 2\theta}}{\frac{8}{3\pi} N|F| \lambda^2 \frac{e^2}{m c^2} \frac{1 + \cos 2\theta}{2 \sin 2\theta}}.$$

Bul qatnasqa kvarc (SiO_2) ushi'n sa'ykes ma'nislerdi qoysaq (yag'ni'y $F \approx 50$, $N \approx 10^{21} \text{ sm}^{-3}$, $\lambda = 1,5418 \cdot 10^{-8} \text{ sm}$, $\mu = 200 \text{ sm}^{-1}$), onda

$$\frac{\rho_m}{\rho_i} = \frac{\frac{N^2 \lambda^3}{2\mu} |F|^2 \left(\frac{e^2}{m c^2} \right)^2 \frac{1 + \cos^2 2\theta}{2 \sin 2\theta}}{\frac{8}{3\pi} N|F| \lambda^2 \frac{e^2}{m c^2} \frac{1 + \cos 2\theta}{2 \sin 2\theta}} = 10 \quad (2-9)$$

shamasi'n alami'z. Demek mozaykali' kvarc kristallari' quri'li'si' ideal jetilskan kvarcqa sali'sti'rganda rentgen nurlari'n shama menen 10 ese ku'shlirek shashi'ratadi' eken. Bizin' jag'dayi'mi'zda izertlenligen kristallardi'n' ha'r qi'yli' ushastkalari'nda difraktsiyalang'an rentgen nurlari'ni'n' intensivligi bir birinen 2-3 ese pari'q qiladi'. Bul jag'day ali'ng'na eksperimentalli'q mag'li'wmatlardi'n' esaplawlardi'n' na'tiyjelerine qayshi' kelmeytug'i'nli'g'i'n ko'rsetedi.

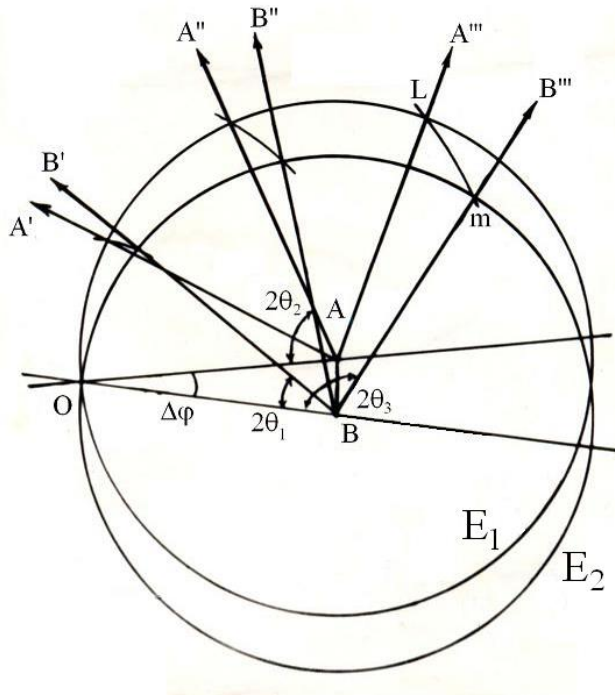
Biz rentgenografiyalı'q su'wrettin' sapasi'ni'n' paydalani'lg'an rentgen nuri'ni'n' uzi'nli'gi'na baylani'sli' ekenligin atap o'temiz. Basqa so'z benen aytqanda si'zi'qli' juti'li'w koeffitsienti μ tolqi'n uzi'nli'g'i' λ nin' funktsiyasi' boli'p tabi'ladi'. Sonli'qtan bul ma'seleni ayqi'n tu'rde sheshiw maqsetinde ha'r ki'yli' tolqi'n uzi'nli'qlari'nda eksperimentler o'tkeriw za'ru'rli'gi payda boladi'. Biraq texnikali'q qi'yi'nshi'li'qlarg'a baylani'sli' bunday eksperimentler islenbedi.

7-§. Difraktsiyali'q sxemani'n' keri ken'isliktegi interpretatsiyasi'

Qa'legen dirfaktsiyali'q eksperimentti (optikali'q rentgenografiyalı'q, elektronli'q mikroskopiyali'q, neytronografiyalı'w, atomli'q yamasa ionli'q ha'm basqalar) keri ken'islikte interpretatsiyalaw bul eksperimenttin' korgizbeliligin joqari'latadi' ha'm oni'n' tiykarg'i' fizikali'q ma'nisin teren' tu'siniwge mu'mkinshilik beredi.

13-su'wrette mu'yeshlik skannerlew topogrammalari'ni'n' keri ken'islikte payda etiliwinin' sxemasi' ko'rsetilgen. E_1 menen E_2 ler Evald sferasi'ni'n' eki awhali'na sa'ykes keledi.

Tallawlari'mi'zdi'n' a'piwayi' boli'wi' ushi'n Evald sferasi'n O ko'sheri do'gereginde bazi' bir $\Delta\varphi$ mu'yeshlik intervali'nda qozg'alatug'i'n, skannerlenetug'i'n dep esaplaymi'z. Evald sferasi'ni'n' radiusi' $\frac{1}{\lambda}$ ge ten' boli'p, λ arqali' xarakteristikali'q nurlani'wdi'n' birinin' tolqi'n uzi'nli'g'i' belgilengen.



13-su'wret.

Mu'yeshlik skannerlew usi'li'n keri ken'islikte interpretaciyalaw. O arqali' koordinata basi', A ha'm V arqali' E₁ ha'm E₂ Evald sferalari'ni'n' oraylari', $\theta_1, \theta_2, \theta_3$ arqali' difrakciyalig mu'yeshler belgilengen. Keri pa'njerenin' tu'yinleri mL tipidegi si'zi'qlar boylap sozi'lg'an.

A ha'm V noqatlari'na kristalli'q u'lginin' shetki noqatlari' sa'ykes keledi. OA menen OV si'zi'qlari' arqali' A ha'm V noqatlari'na kelip tu'setug'i'n rentgen nurlari' belgilengen. AA', BB', AA'', BB'' ha'm basqalar difrakciyag'a ushi'rag'an nurlarg'a sa'ykes keledi.

$\theta > 45^\circ$ mu'yeshlerde rentgen su'wretinin' fokuslani'wi'ni'n' ori'n almaytug'i'nli'g'i' ko'rinip tur. Fokuslani'w $\theta < \theta_\varphi$ mu'yeshlerinde ori'n ali'p, bunday jag'dayda BB' nuri' A noqati' arqali' o'tedi. Sonli'qtan $\theta_\varphi = 45^\circ - \Delta\varphi$. Joqari'da ayti'li'p o'tilgenindey $\Delta\varphi$ mu'yeshinin' shamasii' kristalli'q u'lginin' radial bag'i'ttag'i' o'lshe'mlerinen g'a'rezli [(2-2)-formula].

Usi'ldi'n' radial bag'i'ttag'i' aji'rata ali'w koefficienti P_R din' AA' ha'm BB' nurlari' arasi'ndag'i' mu'yesh $\Delta\varphi$ ha'm difrakciyalig mu'yesh θ arqali' ari'qlanatug'i'nli'g'i'n joqari'da ayti'p o'tken edik. usi'g'an baylani'sli' P_R koefficientinin' $\Delta\varphi$ ha'm θ shamalari'nan g'a'rezligin ani'qlaymi'z. R_2 arkali' buri'ng'i'day u'lg'i menen fotoplenka arasi'ndag'i' qashi'qli'qti' belgileymiz (5-su'wretke qaran'i'z).

14-su'wrette $\theta = 0$ bolg'anda fokusli'q kashi'qli'qti'n' Evald sferasi'ni'n' radiusi'na ten' bolatug'i'nli'g'i' ko'rinip tur. $\theta = 90^\circ - \Delta\varphi$ sha'rti ori'nlang'anda fokus kristaldi'n' beti tegisliginde jaylasadi'. Sonli'qtan $\theta = 0$ ha'm $R_2 = 2R_1$ sha'rtleri ori'nlang'anda $P_R = 0$. Al $\theta = 90^\circ$ ha'm $R_2 = R_1$ sha'rti ori'nlang'anda $P_R = 2$. Uli'wma jag'dayda, $\theta = 0$ ha'm $R_2 > R_1$ ori'nlang'an jag'dayda mi'naday ten'liklerden paydalanami'z:

$$L = 2(R_2 - R_1) \tan \Delta\varphi, \quad (2-9)$$

$$l = \frac{2R_1 \tan \Delta\varphi}{\cos \theta}. \quad (2-10)$$

Sonli'qtan

$$P_R = \frac{L}{l} = \left(\frac{L = 2(R_2 - R_1) \tan \Delta\varphi}{\frac{2R_1 \tan \Delta\varphi}{\cos \theta}} \right) = \left(\frac{R_2}{R_1} - 1 \right) \cos \theta = \frac{R_2}{R_1} - 1. \quad (2-11)$$

Bunnan $R_2 = 2R_1$ sha'rti ori'nlang'anda haqiy'qati'nda da $P_R = 1$ ten'liginin' ori'nlanatug'i'nli'g'i'na isenemiz.

$\theta = 90^\circ$ bolg'an jag'dayda

$$\frac{l}{R_1} = \frac{L}{R_1 + R_2}. \quad (2-12)$$

Demek

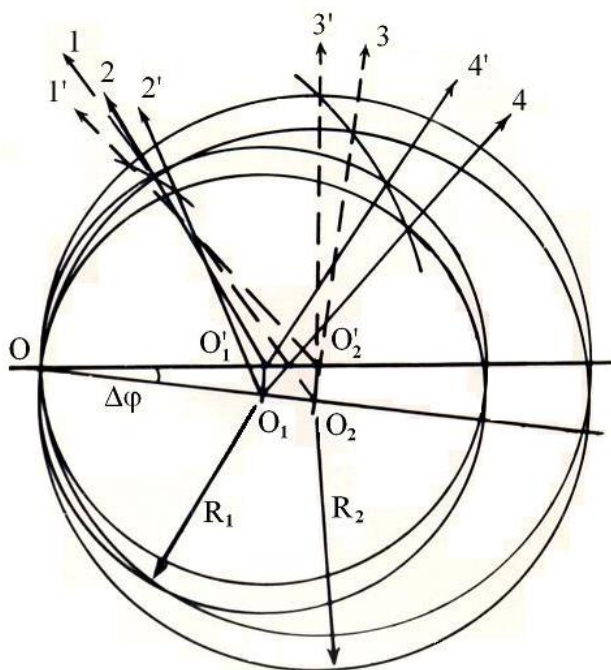
$$P_R = \frac{L}{l} = \left(\frac{R_1}{R_2} + 1 \right) \cos \theta = 0. \quad (2-13)$$

Bul jag'day mi'nani' an'g'artadi: $\theta = 90^\circ$ bolg'anda u'lgi tegisligi rentgen trubkasi'ni'n' fokusi'na karap turadi' ha'm su'wrettin' o'lshemleri usi'ldi'n' geometriyali'q o'zgesheliklerinen emes, al kristaldi'n' qali'n'li'g'i'nan g'ana g'a'rezli boladi' (bunday jag'dayda difrakciyali'q su'wret ali'nbaydi' degen so'z).

Solay etip P_R shamasi' difrakciyali'q mu'yeshtin' 0° tan 90° qa shekemgi intervali'nda $\frac{R_2}{R_1} - 1$ den 0 ge shekem o'zgeredi eken. Sonli'qtan uli'wma jag'day ushi'n

$$P_R = \left(\frac{R_2}{R_1} - 1 \right) \cos \theta \quad (2-14)$$

formulasi'nan paydalanami'z. Bul formulani'n' o'tken paragrafta keltirilip shi'g'ari'lg'anli'g'i'n eske tu'siremiz. Endi xarakteristikali'q rentgen nurlari'ni'n' dubletlerinin' ta'sirin qarap shi'g'ami'z. Buni'n' ushi'n $K\alpha_1$ ha'm $K\alpha_2$ spektralli'q si'zi'qlari' ushi'n Evald sferalari'n qarap o'temiz.



14-su'wret.

Mu'yeshlik skannerlew usi'li'nda rentgen nurlari'ni'n' xarakteristikali'q nurlani'wi'ni'n' su'wrettin' payda boli'wi'na ta'sirin tu'sindiriw ushi'n arnalg'an su'wret.

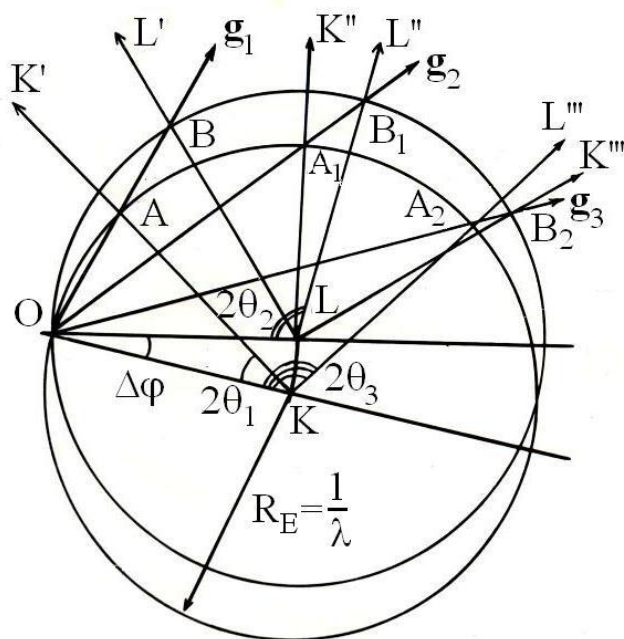
$R_1 = \frac{1}{\lambda_1}, R_2 = \frac{1}{\lambda_2}$. O_1 menen O_2 noqatlari' Evald sferalari'ni'n' orayi'na sa'ykes keledi.

14-su'wrette R_1 menen R_2 arqali' rentgen nurlari'ni'n' spektrinin' $K\alpha_1$ ha'm $K\alpha_2$ spektralli'q si'zi'qlari'na sa'ykes keliwshi Evald sferalari'ni'n' radiuslari' belgilengen. Ha'r bir xarakteristikali'q nurlani'w ushi'n o'z aldi'na su'wrettin' sa'ykes keletug'i'nli'g'i' ko'rinip tur. Bul su'wretler O_11 ha'm $O_1'1'$, O_12 ha'm $O_1'2'$ tipindegi si'zi'qlar menen sheklengen.

Joqari'da keltirilgen sxemalar tiykari'nda Fudjivara usi'li'n keru ken'islikte interpretaciyalaw (tu'sindiriw) mu'mkinshiligine iyemiz. Ilimiy a'debiyatlardi' u'yreniw bunday intepretaciyalawdi'n' izertlewshilerdin' di'qqati'nan shette qalg'anli'g'i'n ko'rsetedi.

Bul jag'dayda polixromat nurlardi'n' paydalni'wi'ni'n' sebebinen radiusi' u'zliksiz tu'rde o'zgeretug'i'n Evald sferalari'n qolani'wi'mi'z kerek dep boljawi'mi'z mu'mkin. Biraq

usi'ndayc jollar menen geometriyalı'q tallaw u'lken ki'yi'nshi'li'qlardi' payda etedi. Usi'g'an baylani'sli' bir Evald sferasi' menen u'zliksiz spektrge sa'ykes keliwshi keri pa'njerenin' sozi'lg'an radius-vektorlari'n paydalanami'z.



15-su'wret.

Keri ken'islikte Fudjivara usi'li'n sa'wlelendiriw.

g_1, g_2 ha'm g_3 belgileri arqali' keri pa'njerenin' radius-vektorlari' belgilengen.

Usi'ni'li'p ati'rg'an sxema 15-su'wrette berilgen. Bul su'wrette g_1, g_2 ha'm g_3 ler keri pa'njerenin' u'sh radius-vektori'na sa'ykes keledi. AV_1, A_1V_1 ha'm A_2V_2 belgileri menen sheklengen vektordi'n' kesindileri ushi'n difrakciya sha'rti ori'nlanadi'. Noqatti'n' su'wreti KK', KK'' ha'm KK''' nurlari' tu'repinen payda etiledi, al L noqati'nan bolsa LL', LL'', LL''' nurlari' difrakciyag'a ushi'raydi'. Sonli'qtan biz mi'naday juwmaq shi'g'arami'z: biz qarap ati'rg'an jag'dayda da, u'lginin' betindegi rentgen nurlari'ni'n' shashi'rawi'n paydalanatug'i'n mu'yeshlik skannerlew usi'li'nda da fotolenkani'n' (topogrammani'n') betindegi difrakciyalı'q su'wret boyi'nsha tolqi'n uzi'nli'g'i' turaqli' qalatug'i'n si'zi'qlardi'n' kesindilerinen payda boladi'. Bunday si'zi'qlardi'n' ten'lemesi ken'nen tarqali'wshi' da'ste usi'li' ushi'n keltirilip shi'g'ari'lg'an edi. Usi'nnan biz ta'repinen usi'ni'li'p ati'rg'an mu'yeshlik skannerlew usi'li'n da, Fudjivara usi'li'n da ko'p sanli' jumi'slarda keltirilgen tallaw tiykari'nda toli'q tu'sindiriw mu'mkin dep juwmaq shi'g'arami'z. Biz bunday tallawdi' o'tkermeymiz, sebebi bunday fizikali'q tallaw pitkeriw qa'nigelik jumi'si'ni'n' sheklerinen shi'g'i'p ketedi.

8-§. Mu'yeshlik skannelew usi'li'n kristallografiyalı'q difrakciyalı'q eksperimentte qollani'w

Joqari'da keltirilgen paragraflarda bir neshe ret usi'ni'li'p ati'rg'an mu'yeshlik skannerlew usi'li'ni'n' o'zgeshelikleri atap o'tildi. Biraq oni'n' mu'mkinshiliklerine duri's tu'rde baha beriw ushi'n oni'n' na'tiyjelerin basqa da usi'llar menen ali'ng'an na'tiyjeler menen sali'sti'ri'p ko'riw za'ru'r boladi'. Bunday sali'sti'rwidi' biz to'mendegidey tu'rde keltiremiz:

Lang usi'li'.

Kristalli'q u'lginin' qozg'ali'wi': ilgerilemeli, qozg'ali'w joli'ni'n' uzi'nli'g'i' sol bag'i'ttag'i' kristalli'q u'lginin' uzi'nli'g'i'nday.

Fotoplenkani'n' qozg'ali'wi': kristalli'q u'lgi menen birlikte ilgerilemeli.

Rentntgen nurlari'ni'n' tutas spektrin qollani'w effektleri: qollani'lmaydi', tutas spektr unamsi'z na'tiyjelerdi beredi.

Kristalli'q u'lginin' qali'n'li'g'i': $\mu t \leq 1$.

R_1 menen R_2 nin' shamalari'na qoyi'latug'i'n talap: $R_2 < R_1$.

Kristalli'q u'lginin' goniometrde ornati'li'wi'na qoyi'latug'i'n talap: og'ada qatan'.

Fudjivarap usi'li'.

Kristalli'q u'lginin' qozg'ali'wi': qozg'almaydi'.

Fotoplenkani'n' qozg'ali'wi': qozg'almaydi'.

Rentntgen nurlari'ni'n' tutas spektrin qollani'w effektleri: rentgen nuri'ni'n' tutas spektri qollani'ladi'.

Kristalli'q u'lginin' qali'n'li'g'i': $\mu t \leq 1$.

R_1 menen R_2 nin' shamalari'na qoyi'latug'i'n talap: $R_2 > R_1$

Kristalli'q u'lginin' goniometrde ornati'li'wi'na qoyi'latug'i'n talap: talap qoyi'lmaydi'.

SHashi'rawg'a tiykarlang'an mu'yeshlik skannerlew usi'li'.

Kristalli'q u'lginin' qozg'ali'wi': rentgen goniometrinin' ko'sherine ornati'lg'an kristalli'q u'gli ω mu'yeshlik tezligi menen qozg'aladi' (mu'yeshlik skannerlenedi).

Fotoplenkani'n' qozg'ali'wi': rentgen goniometrindagi difrakciyag'a ushi'rag'an rentgen tolqi'nlari'n registraciyalawshi' esaplag'i'shti'n' orni'na ortani'ti'ladi' ha'm goniometr ko'sherinin' do'gereginde 2ω mu'yeshlik tezliginde fotoplenka menen bir bag'i'tta qozg'aladi'.

Rentntgen nurlari'ni'n' tutas spektrin qollani'w effektleri: tutas spektr de su'wrettin' payda boli'wi'na qatnasadi'.

Kristalli'q u'lginin' qali'n'li'g'i': qa'legen qali'n'li'qtag'i' u'lgiler paydalani'ladi', sebebi bul usi'lda topografiyali'q su'wretti payda etiwge kristaldi'n' betinde shashi'rag'an rentgen nurlari' qatnasadi'.

R_1 menen R_2 nin' shamalari'na qoyi'latug'i'n talap: talap qoyi'lmaydi'.

Kristalli'q u'lginin' goniometrde ornati'li'wi'na qoyi'latug'i'n talap: qatan' emes.

O'tiwge tiykarlang'an mu'yeshlik skannerlew usi'li'.

Kristalli'q u'lginin' qozg'ali'wi': aylanbali' qozg'ali's jasaydi'.

Fotoplenkani'n' qozg'ali'wi': talap qoyi'lmaydi'.

Rentntgen nurlari'ni'n' tutas spektrin qollani'w effektleri: tutas spektr unamsi'z ta'sirin jasaydi'.

Kristalli'q u'lginin' qali'n'li'g'i': $\mu t \leq 1$.

R_1 menen R_2 nin' shamalari'na qoyi'latug'i'n talap: $R_2 > R_1$.

Kristalli'q u'lginin' goniometrde ornati'li'wi'na qoyi'latug'i'n talap: qatan' emes.

16-su'wrette mu'yeshlik skannerlew usi'li'n ayqi'n izertlewlerde, atap aytqanda mezastrukturag'a iye kvarc kristallari'ni'n' haqi'yqi'y strukturasi'n izertlew bari'si'nda ha'm bul usi'lda ali'ng'an na'tiyjelerdi basqa usi'llarda ali'ng'an eksperimentalli'q su'wretler menen sali'sti'ri'w maqsetinde o'tkerilgen eksperimentlerdin' bergin na'tiyjeleri keltirilgen.



a)



b)



c)

16-su'wret.

Mezastrukturag'a iye kvarc kristallari'ni'n' topogrammalari'ni'n' su'wretleri.

- a) o'tiwge tiykarlang'an mu'yeshlik skannerlew usi'li'nda ali'ng'an,
- b) shag'i'li'si'wg'a tiykarlang'an mu'yeshlik skannerlew usi'li'nda ali'ng'an,
- c) Lang usi'li'nda tu'sirilgen.

II bo'lim. Studentlerdin' o'z betinshe u'yreniwi ushi'n arnalg'an oqi'w materiallari'

I bap. Rentgen nurlari'ni'n' kristalli'q zatlardag'i' shashi'rawi'

1-§. Elektronlardag'i' rentgen nurlari'ni'n' shashi'rawi'

Kogerent shashi'raw. Rentgen nuri'ni'n' tarqalatug'i'n bag'i'tta joylasqan zatti'n' atomlari' menen ta'sirlesiw processinin' ju'da' quramali' ekenligin an'sat ko'riwge boladi'. Ta'sirlesiw din' barli'q ni'zamli'qlari'n ha'rta'repleme u'yreniw ushi'n mikrodu'nyani'n' quri'li'si' menen processlerin' ha'zirgi zaman kvant mexanikasi'n paydalani'w kerek boladi'. Biraq difrakciyalig' effektin' tiykari'nda jati'wshi' rentgen nurlari'ni'n' kogerent shashi'rawi' processin (bunday processte rentgen nurlari'ni'n' tolqi'n uzi'nli'qlari' o'zgermeydi) klassikalig'q elektrodinamikali'q teoriya tiykari'nda da tu'sindiriw mu'mkin.

Klassikalig'q elektrodinamika ko'z-karaslari'nda elektromagnit tolqi'nlari'ni'n' kogerentli shashi'rawi'n qos process tu'rinde sa'wlelendiriw mu'mkin: o'zgermeli elektromagnit maydani'ni'n' ta'sirinde zaryadlang'an bo'leksheler terbelmeli qozg'ali's jasay baslaydi'; al terbelmeli qozg'ali'stag'i' zaryadlang'an bo'leksheler bolsazari'dti'n' do'gereginde barli'q bag'i'tlarda tarqalatug'i'n elektromagnit tolqi'nlari'n nurlandi'radi'. Solay etip birinshi akt kelip tu'siwshi elektromagnit maydani'ni'n' energiyasi'ni'n' zaryadlang'an bo'lekshenin' kinetikali'q energiyasi'na aylani'wdan, al ekinshi akt maxinkali'q energiyani'n' elektromagnit maydani'ni'n' aylani'wi'nan turadi'.

Kelip tu'siwshi tolqi'nni'n' ta'sirindegi zaryadlang'an bo'lekshenin' qozg'ali'si' mexanikasi'n' to'mendegidey ten'lemesine bag'i'nadi':

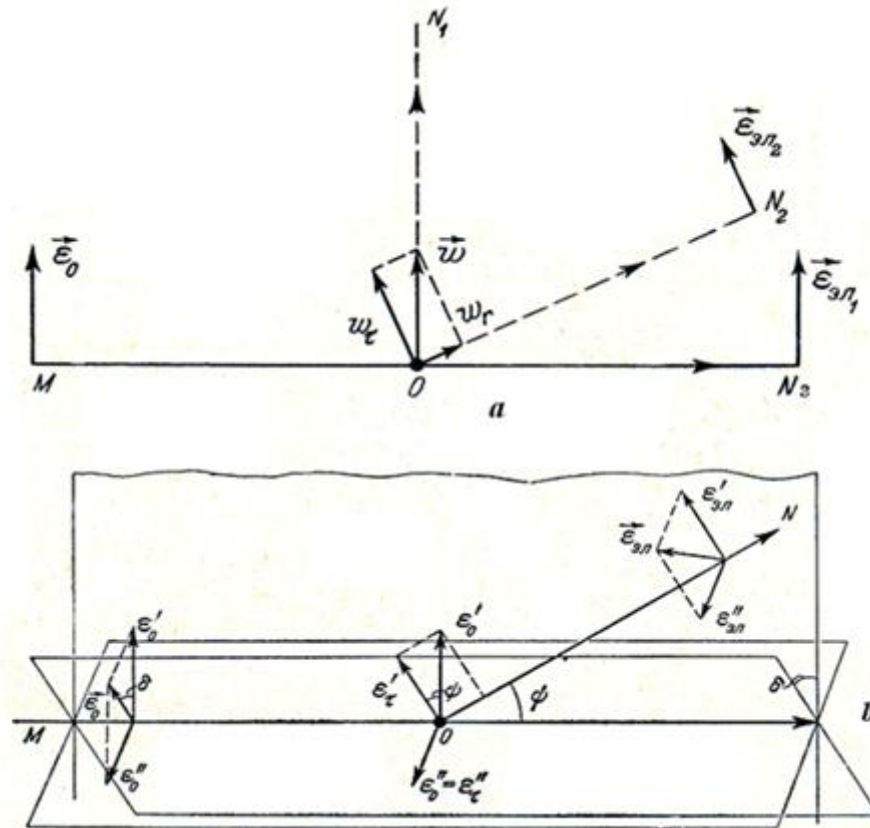
$$m\mathbf{a} = e\mathbf{E}. \quad (1)$$

Bul ten'lemede m arqali' zaryadlang'an bo'lekshenin' massasi', $\mathbf{a}$ arqali' oni'n' alatug'i'n tezleniwi, e arqali' oni'n' zaryadi', al $\mathbf{E}$ arqali' elektr maydani'ni'n' kernewligi belgilengen.

Terbele baslag'an zaryadlang'an bo'leksheler o'zinen elektromagnit tolqi'nlari'n nurlandi'ra baslaydi'. Usi' zaryadlan R qashi'qli'g'i'nda turg'an noqattag'i' elektr maydani'ni'n' kernewligi to'mendegidey elektrodinamika ten'lemesi ja'rdeminde ani'qlanadi':

$$|\mathbf{E}_{el}| = \frac{e}{c^2} \frac{\omega_r}{R}. \quad (2)$$

Bul ten'lemede c arqali' jaqti'li'qti'n' vakuumdegi tezligi, ω_r arqali' tezleniwidin' tangensial' q qurawshi'si' belgilengen.



2-su'wret. Kelip tu'siwshi tolqi'nni'n' polyarizatsiyasi'nan shashi'rag'an tolqi'nni'n' g'a'rezligi.

(2)-an'latpani'n' ma'nisi 2-a su'wrette tu'sindirileadi. O noqati'nda zaryadlang'an bo'lekshe ornatilgan. Warqali' oni'n' tezleniw vektori' belgilengen. N_1 , N_2 ha'm N_3 ler bolsa ha'r qi'yli' baqlaw noqatlari'. Bo'lekshe ta'repinen shashi'rag'an elektromagnit tolqi'nni'n' maydan kernewligi baqlaw noqati' bag'i'ti'ndag'i' bo'lekshenin' awi'si'wi'nan g'a'rezli emes. Kernewlik bo'lekshenin' ko'ldenen' bag'i'ttag'i' awi'si'wi'ni'n' shamasii' menen ani'qlanadi'. Sonli'qtan N_1 baqlaw noqati'na karay shashi'rag'an tolqi'n tarqalmaydi'. Al N_3 noqati'nda bolsa shashi'rag'an tolqi'nni'n' maydani'ni'n' kernewligi maksimal ma'niske jetedi ha'm $\frac{e}{c^2} \frac{\omega_r}{R}$ shamasii'na ten' boladi'.

ON_2 bag'i'ti'nda tarqalatug'i'n tolqi'nni'n' maydani'ni'n' kernewligin tabi'w ushi'n $a_{\text{tezleniwin}}$ radialli'q a_r ha'm tangensial' q a_t qurawshi'larg'a jiklew kerek. Olardi'n' birinshisi ON_2 bag'i'ti'nda tarqalatug'i'n shashi'rag'an tolqi'ndi' payda etpeydi. Ekinshisi bolsa zaryadi'n' ko'ldenen' bag'i'ttag'i' awi'si'wi'n ta'miyinleydi ha'm sonli'qtan maydanni'n' kernewligin ani'qlaydi'. Solay etip elektron ta'repinen shashi'rati'lg'an tolqi'nni'n' kernewligi uli'wma jag'dayda (2)-an'latpani'n' ja'rdeminde ani'qlanadi'. Tek g'ana kelip tu'siwshi tolqi'nni'n' kernewligi ε_0 menen shashi'rag'an tolqi'nni'n' kernewligi ε_{el} arasi'ndag'i' baylani'sti' tabi'w ushi'n (1)- ha'm (2)-ten'lemelerdi sali'sti'ri'w kerek. Na'tiyjede

$$|\varepsilon_{el}| = \frac{e^2}{mc^2} \frac{\omega_r}{R} \quad (3)$$

an'latpasi'na iye bolami'z.

Endi polarizatsiyalangan ha'm polarizatsiyalanmagan (ta'biyiy) nurlar ushi'n sa'ykes formulalardi' ali'wi'mi'z kerek.

1-b su'wretteg'i ε^0 ha'm ε_0'' vektorlari'na sa'ykes keliwshi eki dara jag'daydi' qaraymi'z. Da'slep tu'siwshi tolqi'nni'n' elektr maydani'ni'n' kernewligi vektori' bolg'an ε_0' vektori' *ON* si'zi'g'i' (elektronnan baqlaw noqati'na qaray) jatqan tegislikte jatadi' dep esaplaymi'z. $\varepsilon_\tau' = \varepsilon_0' \cos \psi$ ekenligine an'sat iseniwge boladi'. Bul an'latpada ψ arqali' kelip tu'siwshi tolqi'nni'n' ha'm shashi'rag'an tolqi'nni'n' bag'i'tlari' arasi'ndag'i' mu'yesh belgilengen. Sonli'qtan

$$\varepsilon_{el}' = \frac{e^2}{mc^2} \frac{\varepsilon_0'}{R} \cos \psi.$$

Ekinshi jag'dayda kelip tu'siwshi tolqi'nni'n' kernewlik vektori' ε_0'' «tu'siw-shashi'raw» tegisligine perpendikulyar. Endi $\varepsilon_\tau = \varepsilon_0''$ ha'm usi'g'an sa'ykes

$$\varepsilon_{el}'' = \frac{e^2}{mc^2} \frac{\varepsilon_0''}{R}.$$

Uli'wma jag'dayda ε_0 vektori' menen *MON* tegisligi arasi'nda bazi' bir δ su'yir mu'yeshi boladi'. 2-b su'wrette «tu'siw-shashi'raw» tegisligi si'zi'lma tegisligi boli'p tabi'ladi' (*MO* ha'm *ON* tuwri'lari') Al ε_0 vektori' ha'm *MO* tuwri'lari' arqali' o'tiwshi tegislik penen birinshi tegislik arasi'ndag'i' mu'yesh δ shamasina ten' boladi'.

Vektorlardi' qurawshi'larg'a jiklewdin' a'piwayi' procedurasi', sol qurawshi'lardi'n' ha'r biri menen basqalari'nan g'a rezsiz bolg'an matematikali'q operatsiyalardi' islew ha'm qurawshi'lardi' bir biri menen biriktiriw bizge

$$\begin{aligned} \varepsilon' &= \varepsilon_0 \cos \delta, \varepsilon'' = \varepsilon_0 \sin \delta, \\ \varepsilon_{el}' &= \frac{e^2}{mc^2} \frac{\varepsilon_0}{R} \cos \delta \cos \psi, \varepsilon_{el}'' = \frac{e^2}{mc^2} \frac{\varepsilon_0}{R} \sin \delta \end{aligned}$$

an'latpalari'n beredi. En' aqi'ri'nda

$$\varepsilon_{el} = \sqrt{(\varepsilon_{el}')^2 + (\varepsilon_{el}'')^2} = \frac{e^2}{mc^2} \frac{\varepsilon_0}{R} \sqrt{\cos^2 \delta \cos^2 \psi + \cos^2 \delta}$$

formulasi'na iye bolami'z.

Sa'ykes an'latpani'n' shashi'rag'i'n ha'm kelip tu'sken tolqi'n'lardi'n' kernewliklerinin' amplitudali'q ma'nislari bolg'an E_{el} ha'm E_0 shamalari'nda bir biri menen baylani'sti'ra aladi'. Waqi't boyi'nsha ortashalasti'ri'lg'an intensivliktin' ma'nisi

$$I = \frac{c}{8\pi} E_0^2$$

formulasi' menen beriledi. Demek

$$I_{el} = \frac{c}{8\pi} \left(\frac{e^2}{mc^2} \right)^2 \frac{E_0^2}{R^2} (\cos^2 \delta \cos^2 \psi + \cos^2 \delta)$$

yamasa

$$I_{el} = \left(\frac{e^2}{mc^2} \right)^2 \frac{I_0}{R^2} (\cos^2 \delta \cos^2 \psi + \cos^2 \delta)$$

formulalari'na iye bolami'z. Bul jerde I_0 arqali' kelip tu'siwshi tolqi'nni'n' intensivligi, al I_{el} arqali' berilgen bag'i'tta shashi'rag'an tolqi'nlardi'n' intensivlikleri. Biraq bul formulani'n' si'zi'qli' polyarizatsiyalang'an tolqi'nlari ushi'n duri's ekenligin an'g'ari'wi'mi'z sha'rt (yag'ni'y ε_0 vektori' o'zinin' bag'i'ti'n saqlaydi'). Al rentgen trubkasi'nan shi'qqan rentgen tolqi'nlari' polyarizatsiyalanbag'an ha'm sonli'qtan δ mu'yeshi qa'legen ma'nisti qabi'l ete aladi'. Sonli'qtan waqi't boyi'nsha ortasha bolg'an intensivlikni esaplawi'mi'z kerek boladi'. Intensivlikni bunday ma'nisi ushi'n

$$I_{el} = \left(\frac{e^2}{mc^2} \right)^2 \frac{I_0}{R^2} \frac{1 + \cos^2 \psi}{2} \quad (4)$$

formulasi'n an'sat tu'rde alami'z.

Demek berilgen bag'i'tta shashi'rag'an tolqi'nni'n' intensivligi kelip tu'siwshi tolqi'nni'n' intensivligine tuwri' proporcional, al shashi'rati'wshi' noqattan baqlaw noqati'na shekemgi qashi'qli'qti'n' kvadrati'na kerri proporcional eken.

(4)-an'latpadan shashi'rag'an tolqi'nni'n' intensivliginin' shashi'rati'wshi' bo'lekshenin' massasi'ni'n' kvadrati'na kerri proporcional ekenligi de ko'rinip tur. Usi' jag'dayg'a tiykarlani'p biz rentgen nurlari'n atomlardagi' elektronlar g'ana shashi'ratadi' dep esaplay alami'z. Atom yadrolari' rentgen nurlari'n shashi'rati'wg'a derlik qatnaspaydi'. Haqi'yqati'nda da protonni'n' massasi' elektronni'n' massasi'nan 1835 ese u'lken. Sonli'qtan elektron protong'a qarag'anda rentgen nurlari'n $3,37 \cdot 10^6$ ese ku'shlirek shashi'ratadi' degen so'z.

(4)-an'latpadagi' $\frac{1 + \cos^2 \psi}{2}$ ko'beytiwshisin polyarizatsiyali'q faktor dep ataymi'z. Biz tuwri' kelip tu'siwshi ha'm difraktsiyag'a ushi'rag'an nur arasi'ndagi' ψ mu'yeshin' shamasini'n' Vulf-Bregg sha'rtidagi 2θ mu'yeshine ten' ekenligin bilemiz. Sonli'qtan polyarizatsiyali'q faktordi'

$$P(\theta) = \frac{1 + \cos^2 2\theta}{2}$$

tu'rinde jazami'z.

2-§. Atom ta'repinen rentgen nurlari'ni'n' shashi'rati'li'wi'. «Atomli'q amplituda»

Elektronli'q ti'g'i'zli'q. Elektronnan atomg'a o'tkende shashi'rag'an tolqi'nlardi'n' intensivliginin' shashi'raw mu'yeshinen g'a'rezligi a'dewir quramalasadi'. Polyarizatsiyali'q faktorg'a atomni'n' ha'r qi'yli' bo'limlerinde shashi'rag'an tolqi'nlardi'n' interferentsiyasi'ni'n' ta'siri de qosi'ladi'. Bunday jan'a baylani'sti'n' xarakterin ani'qlaw ushi'n quramali' bolg'an sanli'q esaplawlardi' ju'rgiziwdin'qa'jeti joq. Uli'wmali'q jag'daylar sapali'q tallaw o'tkergende de jetkilikli da'rejede ayqi'nlasadi'.

Atomni'n' ha'r qi'yli' noqatlari'nda jaylasqan eki elektronda bazi' bir bag'i'tta shashi'rag'an tolqi'nlari baqlaw noqati'na jetkende fazalar ayi'rmasi'na iye boladi'. Sebebi sol elektrondan baqlaw noqati'na shekemgi arali'qlar bir birine ten' emes. Sonli'qtan eki elektronda shashi'rag'an tolqi'nlardi'n' qosi'ndi' intensivligi atomdag'i' sol eki elektronni'n' bir birine sali'sti'rg'andagi' jaylasilari'nan ha'm shashi'raw mu'yeshinen g'a'rezli boladi'. Bizdi intensivlikni bir zamatli'q ma'nisi emes, al ortasha ma'nisi qi'zi'qti'radi'. Sonli'qtan bizdi elektrondardi'n' qanday da bir waqi't momentidagi iyelegen ori'nlari' bizin' ushi'n a'hmiyetli emes. Al elektrondardi'n' sheksiz ko'p traektoriyalari'n qosqanda ali'natug'in

«elektronli'q bult» bizin' ushi'n kerek boladi'. Solay etip biz atomni'n' Z dana diskret atomlari'na emes, al shamasi' eZ bolg'an u'zliksiz tarqalg'an zaryadqa iye bolami'z.

Kvant mexanikasi' ko'z-qaraslari' boyi'nsha ha'r bir elektron o'zinin' $\psi_j(xyz)$ tolqi'n funkciyasi'na iye boladi'. Bul tolqi'n funkciyasi' ken'isliktegi zaryadti'n' statistikali'q tarqali'wi'n beredi. Tolqi'n funkciyasi'n sa'ykes tu'rde normirovkalag'anda oni'n' modulinin' kvadrati' $[\psi_j(xyz)]^2$ elektrondi' atomni'n' ana yamasa mi'na noqati'nda tabi'wdi'n'itimalli'g'i'n beredi. Atom boyi'nsha barli'q elektronlardi'n' tarqali'wi'ni'n' qosi'ndi' funkciyasi'

$$\rho(xyz) = \sum_{j=1}^Z [\psi_j(xyz)]^2$$

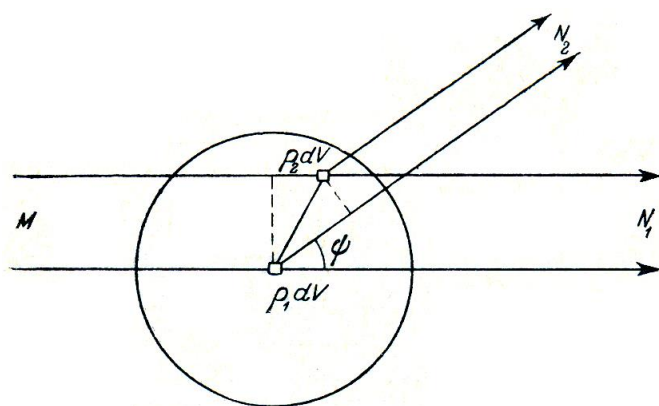
ko'lemnin' bir birligindagi ha'r qi'yli' noqatlardagi' elektronlardi'n' waqi't boyi'nsha ortasha sani'n ani'qlaydi'. Bul funkciyani' «elektronli'q ti'g'i'zli'q» dep ataydi'.

Ayi'ri'm elektronlardi'n' tarqali'w funkciyasi' bolg'an $[\psi_j(xyz)]^2$ funkciyasi'n juwi'q tu'rdegi kvantmexanikali'q esaplawlar joli' menen ani'qlawg'a boladi'. Atomni'n' ha'rqi'yli'qabi'qlari'ndagi' elektronlarga sa'ykes keliwshi tarqali'w funkciyalari'n qossa,q, onda berilgen noqattan atomni'n' orayi'na shekemgi ko'lemdegi qosi'ndi' elektronli'q ti'g'i'zli'qti' ani'qlaymi'z.

Atom ta'repinen rentgen nurlari'ni'n' shashi'rati'li'wi'. Atomda eki sheksiz kishi dV ko'lemdi ayi'ri'p alami'z: birinshisi atomni'n' orayi'nda (elektronli'q ti'g'i'zli'q ρ_1), ekinshisi qa'legen noqatta (elektronli'q ti'g'i'zli'q ρ_2). Birinshi ko'lem $\rho_1 dV$, al ekinshisi $\rho_2 dV$ elektrong'a iye boladi'.

Rentgen nurlari' shashi'rag'anda birinshi ko'lem kernewliginin' amplitudasi' $E_{el\rho_1 dV}$, al ekinshi ko'lem kernewliginin' amplitudasi' $E_{el\rho_2 dV}$ bolg'an shashi'rag'an tolqi'nlar di' payda etedi.

Ayi'ri'p ali'ng'an eki ko'lemler ta'repinen ha'rqi'yli'bag'i'tlardashashi'rati'lg'an rentgen nurlari'ni'n' qosi'ndi'si'n tabami'z. Bul jag'day 3-su'wrette ko'rsetilgen.

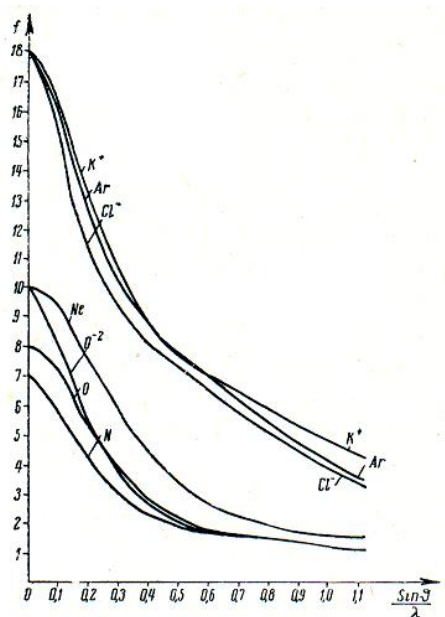


3-su'wret.

Atomni'n' ha'r qi'yli' noqatlari'nda shashi'rawdi'n' na'tijesinde fazalar ayi'rmasi'ni'n' payda boli'wi'.

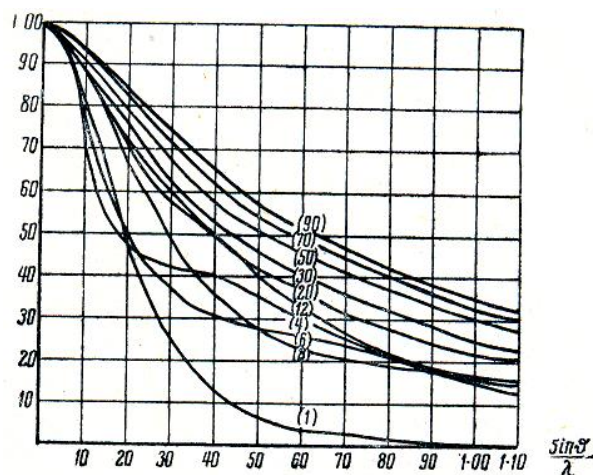
Kelip tu'siwshi nurlardi'n' bag'i'ti' menen sa'ykes keliwshi N_1 bag'i'ti'nan baslaymi'z. Bul bag'i'tta eki ko'lem arqaldi' o'tiwshitolki'nlar di'n' ju'risler ayi'rmasi' birdey, nurlari'di'n' fazalari' birdey, al qosi'ndi' amplituda $E_{el\rho_1 dV} + E_{el\rho_2 dV}$ qosi'ndi'si'na ten'. Basqa bag'i'tlarda nurlar arasi'nda fazalar ayi'rmasi' payda boladi' ha'm sog'an sa'ykes qosi'ndi' nur di'n' amplitudasi' kemeyedi. ψ mu'yeshinin' shamasi' qansha u'lken bolg'an sayi'n fazalar ayi'rmasi'ni'n' da shamasi' u'lkeyedi ha'm sheksiz kishi eki ko'lem ta'repinen shashi'rag'an qosi'ndi' tolqi'nni'n' intensivligi de kishi boladi'.

Atomni'n si'zi'qli' o'lishemleri rentgen tolqi'nlari'ni'n' uzi'nli'g'i'na barabar. Eger dV_1 ha'm dV_2 ko'lemleri bir birinen u'lkenirek qashi'qli'qta ali'ng'an bolsa shashi'rawdi'n' bazi' bir mu'yeshlerinde π den de u'lken boli'wi', al ayi'ri'm jag'daylarda ha'tte 2π ge de jaqi'nlas'i'wi' mu'mkin. Bunday jag'dayda qosi'ndi' amplitudani'n' ma'nisi u'lkeye baslaydi'. Biraq elektronli'q ti'g'i'zli'qti'n' tarqali'wi'ni'n' uli'wmali'q xarakterinen rentgen nurlari'n shashi'rati'wg'a tiykari'nan atomni'n' orayli'q bo'liminde joylasqan bo'limlerdin' qatnasatug'i'nli'g'i'n ko'riwge boladi'. Al atomni'n' orayli'q bo'liminde bolsa elektronli'q ti'g'i'zli'q en' u'lken ma'niske iye boladi'. Rentgen nurlari'n effektivli tu'rde shashi'ratug'i'n bunday bo'limler bir birinen λ ge sali'sti'rg'anda a'dewir kishi qashi'qli'qlarda joylasadi'. Bul jag'day shashi'raw mu'yeshinin' u'lkeyiwi menen shashi'rag'an tolqi'nlardi'n' intensivliginin' monotonli' tu'rde kishireyiwin ta'miynleydi (4-su'wret).



4-su'wret.

$f = f\left(\sin \frac{\theta}{\lambda}\right)$ atomli'q amplitudalar iymeklikleri.



5-su'wret.

$\hat{f} = \hat{f}\left(\sin \frac{\theta}{\lambda}\right)$ birlik atomli'q amplitudalar iymeklikleri.

Tap sol si'yaqli' tallawlar tiykari'nda basqa da ni'zamli'qti' – shashi'rag'an tolqi'nlardi'n' intensivliginin' tolqi'n uzi'nli'g'i'nan g'a'rezligin ani'qlawg'a mu'mkinshilik beredi.

3-su'wretke qayti'p kelemiz. SHashi'raw mu'yeshinin' ma'nisi berilgen, al rentgen nurlari'ni'n' tolqi'n uzi'nli'qlari'n o'zgermeli dep esaplaymi'z. Tolqi'n uzi'nli'g'i'ni'n' kemeyiwinin' nurlar arasi'ndag'i' fazalar ayi'rmasi'ni'n' u'lkeyiwine ali'p keletug'i'nli'g'i'n tu'siniw qi'yi'n emes. Sonli'qtan 1- ha'm 2-ko'lemlerde shashi'rag'an tolqi'nlardi'n' qosi'ndi'si'ni'n' amplitudasi'ni'n' shashi'raw mu'yeshinin' ma'nisinin' u'lkeyiwi ha'm tolqi'n uzi'nli'g'i'ni'n' kishireyiwi menen kishireyetug'i'nli'g'i'n ko'remiz

Atom boyi'nsha elektronlardi'n' ti'g'i'zli'g'i'ni'n' statistikali'q tarqali'wi'n esapqa alatug'i'n sanli'q esaplawlar joqari'da keltirilgen tallawlardi'n' duri's ekenligin tasti'yi'qlaydi'. Atom ta'repinen shashi'rati'lg'an tolqi'nni'n' qosi'ndi' amplitudasi' E_a shashi'raw mu'yeshi ψ ha'm $1/\lambda$ shamalari'ni'n' monotonli' tu'rde kishireyiwshi funkciyasi' boli'p tabi'ladi'. Bul esaplawlar ψ ha'm $1/\lambda$ shamalari'n bir waqi'tta esapqa ali'wshi' funkcionalli'q g'a'rezlilikni $\frac{\sin(\frac{\psi}{2})}{\lambda}$ funkciyasi'ni'n' beretug'i'nli'g'i'n da'lilleydi.

Atomli'q amplituda. Kelip tu'siwshi tolqi'nlar bag'i'ti'nda atomni'n' barli'q ushastkalari' ta'repinen shashi'rag'an nurlari' fazalari' boyi'nsha birdey boladi' $E_a = ZE_{el}$ shamasi'na ten'.

Basqa bag'i'ltlarda E_a shamasini'n' ma'nisi kishi ha'm $\frac{\sin \vartheta}{\lambda}$ shamasidan g'a'rozli boladi'. E_a ni'n' ma'nisin berilgen ϑ ha'm λ shamalari' ushi'n $E_a = f\left(\frac{\sin \vartheta}{\lambda}\right) E_{el}$ tu'rinde jazami'z. $\vartheta = 0$ bolg'an jag'dayda $f\left(\frac{\sin \vartheta}{\lambda}\right)$ funkciyasi'ni'n' ma'nisi Z ke ten'. Al mu'yeshtin' basqa ma'nislerinde Z ten kishi. Bul shamani'n' ma'nisi berilgen bag'i'tta atom ta'repinen shashi'rati'lg'an tolki'nni'n' amplitudasi'ni'n' elektron ta'repinen shashi'rati'lg'an tolqi'nni'n' amplitudasi'nan neshe ese u'lken ekenligine ten' ha'm oni' atomli'q shashi'raw funkciyasi' yamasa atomli'q amplituda dep ataymi'z.

Usi'nday sali'sti'rmali' shamalar atomlar, molekulalar ha'm kristallar ta'repinen rentgen nurlari'ni'nshashi'rati'w processlerin u'yrengende jiyi ushi'rasadi'. Usi'g'an baylani'sli' biz elektronli'q birliklerde jazi'lg'an shamalardi' kirgizemiz. Bunday jag'dayda elektron ta'repinen berilgen bag'i'tta shashi'rati'lg'antolki'nni'n' amplitudasi'n birge ten' dep qabi'l etemiz (bunday jag'dayda sa'ykes intensivlikte birge ten' boladi'). Sa'ykes iymeklikler 4-ha'm 5-su'wretlerde keltirilgen.

3-§. Kishi kristallardag'i' rentgen nurlari'ni'n' difrakciyasi'. Intensivliktin' strukturali'q faktori'

Kristalli'q pa'njerenin' elementar quti'si'ndag'i' atomlardi'n' ji'ynag'i'n bazi' bir molekula dep karawg'a boladi'. Kristaldan qi'yali'mi'zda ayi'ri'p ali'ng'an elementar quti' rentgen nurlari'n barli'q bag'i'tta shashi'ratadi'. Elementar quti'da shashi'rag'an nurlardi'n' amplitudasi', baslang'i'sh fazasi' ha'm intensivlikleri molekulalar ushi'n ali'ng'an

$$E_m = E_{el}|F_m| = E_{el}\sqrt{F_A^2 + F_B^2}, \quad (5)$$

$$\operatorname{tg} \alpha_m = \frac{F_B}{F_A}, \quad (6)$$

$$I_m = I_{el}|F_m|^2 = \left(\frac{e^2}{mc^2}\right)^2 \frac{I_0}{R^2} P(\psi) f^2 \quad (7)$$

formulalar boyi'nsha ani'qlanadi'. Bul formulalarda:

F_m molekula ushi'n shashi'rawdi'n' strukturali'q faktori'. f arqali' (f_j arqali' -atom ushi'n) atomli'q faktor, al $P(\psi)$ arqali' polyarizatsiyali'q faktor belgilengen.

$$I_m = \frac{c}{8\pi} E_{el}^2 \left\{ \left[\sum_{j=1}^N f_j \cos \delta_j \right]^2 + \left[\sum_{j=1}^N f_j \sin \delta_j \right]^2 \right\},$$

$$F_A = \sum_{j=1}^N f_j \cos \delta_j,$$

$$F_B = \sum_{j=1}^N f_j \sin \delta_j.$$

$$|F_m|^2 = F_A^2 + F_B^2 = \left[\sum_{j=1}^N f_j \cos \delta_j \right]^2 + \left[\sum_{j=1}^N f_j \sin \delta_j \right]^2.$$

Biz qarap ati'rg'an jag'dayda koordinata basi' orni'n pa'njerenin' sa'ykes tu'yini iyeleydi. Al koordinata basi' bolsa atomlardi'n' koordinatalari'n, shashi'rag'an tolqi'nlarid'n' baslang'i'sh fazalari'n esaplaw ushi'n tiykar boli'p tabi'ladi'.

Ekinshi ta'repten tutasi' menen ali'ng'an kristaldan ali'natug'i'n qosi'ndi' shashi'rawdi'n' effekti de jaqsi' belgili. Ayi'ri'm elementar quti'lar ta'repinen shashi'rag'an tolqi'nlarid'n' interferenciyasi'ni'n' na'tiyjesinde nurlar tek bazi' bir bag'i'tlarda g'ana tarqaladi'. Bunday bag'i'tlarda nurlardi'n' fazalari'ni'n' birdey boli'wi' kerek. Qosi'ndi' nurdi'n' amplitudasi'ni'n' E_m amplitudalari'ni'n' a'piwayi' arifmetikali'q qosi'ndi'si' ME_m ko'beymesine ten' bolatug'i'nli'g'i' tu'sinikli (M arqali' kristaldag'i' elementar quti'lardi'n' sani' belgilengen). Solay etip

$$E_k = ME_m, \quad (8)$$

$$I_k = M^2 I_m. \quad (9)$$

Bul formulalarda E_k arqali' kristalda shashi'rag'an tolqi'nni'n' amplitudasi', al I_k arqali' intensivligi belgilengen.

Strukturali'q faktor. SHashi'rag'an tolqi'nlarid'n' intensivliklerinin' formulalari'na qayta keliw arqali' difrakciyag'a ushi'rag'an nurlardi'n' intensivligin elementar quti'dag'i' atomlardi'n' koordinatalari' arqali' an'lati'w mu'mkinshiligine iye bolami'z:

$$I_k = I_{el} M^2 |F(hkl)|^2 = \left(\frac{e^2}{mc^2} \right)^2 \frac{I_0}{R^2} P(\vartheta) M^2 |F(hkl)|^2. \quad (10)$$

Bul an'latpada

$$|F(hkl)|^2 = \left[\sum_{j=1}^N f_j \cos 2\pi(hx_j + ky_j + lz_j) \right]^2 + \left[\sum_{j=1}^N f_j \sin 2\pi(hx_j + ky_j + lz_j) \right]^2. \quad (11)$$

(11)-an'latpadag'i' $F(hkl)$ shamas'i'n strukturali'q faktor dep ataydi'. Bul faktordi'n' san ma'nisi difrakciyali'q bag'i'ttag'i' bir elementar quti'dan shashi'rag'an tolqi'nlarid'n' elektronli'q birliklerdegi intensivligine ten'.

Strukturali'q faktor atomli'q-kristalli'q quri'li'sti'n' o'zgesheliklerine baylani'sli' difrakciyag'a ushi'ri'g'an tolqi'nlarid'n' intensivliklerinin' ha'r qi'yli' bolatug'i'nli'g'i'n ta'miyinleydi. Strukturali'q faktor ushi'n jazi'lg'an an'latpadag'i' argument $hx_j + ky_j + lz_j$ tikkeley fizikali'q ma'niske iye: oni'n' shamas'i' elementar quti'dag'i' j-atom arqali' o'tkerilgen atomli'q tordi'n' usi' tordi'n' betine perpendikulyar bag'i'ttag'i' awi'si'wi'na ten', al $2\pi(hx_j + ky_j + lz_j)$ bolsa joqari'dag'i' awi'si'widi'n' saldari'nan payda bolg'an usi' atomli'q torda shashi'rag'an nurdi'n' baslang'i'sh fazasi'.

Solay etip elementar quti'dag'i' atomlardi'n' jaylasi'wlari'n bile oti'ri'p qa'legen hkl shashi'rawi'ni'n' intensivligin ani'qlawg'a boladi' eken (hkl indeksleri kristallografiyali'q tegislikler seriyasi'ni'n' indeksleri yamasa Miller indeksleri dep ataladi').

Izertlewshiler aldi'nda pu'tkilley qarama-qarsi' mazmundag'i' ma'sele qoyi'ladi': difrakciyag'a ushi'rag'an tolqi'nlarid'n' intensivlikleri boyi'nsha elementar quti'dag'i' atomlardi'n' koordinatalari'n ani'qlaw kerek boladi'. Bul ma'sele rentgenstrukturali'q analizdin' tiykgarg'i' ma'selelerinin' biri boli'p esaplanadi'.

4-§. Strukturali'q amplitudalar. Uli'wmali'q formulalar

Strukturali'q amplituda rentgen nurlari'ni'n' shashi'rawi'ni'n' atomlardi'n' bir birine sali'sti'rg'andag'i' jaylasi'wlari'nan, olardi'n' shashi'rati'wshi'li'q qa'siyetlerinen ha'm nurlardi'n' bag'i'ti'nan g'a'rezlilikni an'latadi'.

Strukturali'q amplituda tu'sinigi tutasi' menen ali'ng'an kristalg'a o'tpesten buri'n atomlardi'n' shekli toparlari'ni'n' (molekula yamasa elementar quti' atomlari') shashi'rati'wi'n tallawdi'n' bari'si'nda kirgizildi. Ayi'ri'm ali'ng'an elementar quti'g'a qatnasi' boyi'nsha strukturali'q amplituda kompleksli shama tu'rinde ani'qlanadi'. Oni'n' moduli elektronli'q birliklerdegi nurdi'n'amplitudasi'na, alargumenti bul nurdi'n' baslang'i'sh fazasi'na ten'.

Fizikali'q jaqtan bul jag'day mi'nalardi' bildiredi: strukturali'q amplituda nurdi'n' amplitudasi' menen baslang'i'sh fazasi'ni'n' atomlardi' xarakterleytug'i'n parametrlardan ha'm nurdi'n' bag'i'ti'nan g'a'rezlikni an'latadi'. Strukturali'q amplitudani'n' kompleksli formasi' eki funkcionalli'q g'a'rezlilikni bo'lip ko'rsetiwge mu'mkinshilik beredi: moduli amplitudani', alargumenti baslang'i'sh fazani' ani'qlaydi'.

Kristalg'a qatnasi' boyi'nsha strukturali'q amplituda difrakciyag'a ushi'rag'an nurlardi'n' intensivligin ani'qlawshi' faktorlardi'n' biri g'ana boli'p tabi'ladi'. Sonli'qtan shi'g'i'li'si'wdi'n' strukturali'q amplitudasi'n ani'qlaw baskasharaq formada a'melge asi'ri'li'wi' kerek. Qosi'msha faktorlardan quti'li'w ushi'n (integralli'q, juti'li'w, ekstinkciya faktorlari') kristaldi' sheksiz u'lken, jutpaytug'i'n ha'm ideal mozaykali'q dep esaplaymi'z. Bunday jag'dayda difrakciyalig' sha'rtlerdi qanaatlandi'ri'wshi' (Vulf-Bregg sha'rtin qanaatlandi'ri'wshi') bag'i'tta tarqali'wshi' nurdi'n' kompleksli amplitudasi' to'mendegidey tu'rge iye boladi':

$$\tilde{E}(hkl) = E_{el}MF(hkl).$$

Demek

$$F(hkl) = \frac{\tilde{E}(hkl)}{E_{el}M} = \frac{E(hkl)}{E_{el}M} e^{i\alpha(hkl)}. \quad (12)$$

SHag'i'li'si'wdi'n' strukturali'q amplitudasi'ni'n' moduli sheksiz u'lken, jutpaytug'i'n, ideal mozaykali'q kristalda difrakciyag'a ushi'rag'an nurdi'n' amplitudasi'na ten' (bir elementar quti'g'a tiyisli elektronli'q birliklerdegi).

Strukturali'q amplituda ushi'n uli'wmali'q an'latpa (11)-an'latpa boli'p tabi'ladi'. Oni' bi'layi'nsha ko'shirip jazami'z:

$$F(hkl) = \sum_{j=1}^N f_j e^{i2\pi(hx_j + ky_j + lz_j)} = \sum_{j=1}^N f_j e^{i\theta_j}. \quad (13)$$

Bul algebrali'q formulani'n' ja'rdeminde strukturali'q amplituda atomli'q amplitudalarha'm shashi'rati'wshi' atomlardi'n' oraylari'ni'n' koordinatalari' x_j, y_j ha'm k_j shamalari' menen baylani'sti'ri'ladi'. Bul koordinatalar a, b ha'm c da'wirlerinin' (turaqli'lari'ni'n') u'leslerinde berilgen. Sonli'qtan

$$F(hkl) = \int_{v_0} f_j e^{i2\pi(hx_j + ky_j + lz_j)} dv = \int_{v_0} \rho(xyz) f_j e^{i\theta} dv \quad (14)$$

tu'rine enedi. Bul formulada strukturali'q faktor elektronli'q ti'g'i'zli'qti'n' tarqali'wi' menen baylani'sqan. Bul jerde $2\pi(hx_j + ky_j + lz_j)$ argumentin a'dette θ arqali' an'latatug'i'ni'mi'z ko'rinip tur.

Joqari'da keltirilgen algebrali'q formula atomlardi'n' kristaldi'n' quti'si'ndag'i' koordinatalari' berilgen jag'daylar ushi'n strukturali'q faktordi'n' ma'nislerin ani'qlaw ushi'n paydalani'latug'i'n formulalar ekenligin atap o'temiz. Biz tiykari'nan (13)- yamasa (14)-tu'rdegi formulalardan paydalanami'z.

Joqari'da keltirilgen formulalarda eksponencialli'q ag'zalar trigonometriyalig' formada ko'rsetiliwi mu'mkin. Bunday jag'dayda kompleksli strukturali'q amplitudani'n' haqi'yqi'y ha'm jormal bo'leklerin ayi'ri'p jazami'z:

$$F(hkl) = \sum_{j=1}^N f_j A_j + i \sum_{j=1}^N f_j B_j. \quad (15)$$

Bul an'latpada

$$\begin{aligned} A_j &= \cos 2\pi(hx_j + ky_j + lz_j), \\ B_j &= \sin 2\pi(hx_j + ky_j + lz_j). \end{aligned}$$

Eger kristalda inversiya orayi' bolsa (yamasa koordinatalar basi' inversiya oraylari'ni'n' birewinde jaylasti'ri'lg'an bolsa), onda strukturali'q amplituda haqi'yqi'y ma'niske iye boladi' ha'm

$$F(hkl) = \sum_{j=1}^{N/2} f_j A_j = 2 \sum_{j=1}^{N/2} f_j \cos 2\pi(hx_j + ky_j + zk_j)$$

tu'rine enedi. Bul jag'day u'lken a'hmiyetke iye. Bul a'hmiyet esaplawlardi'n' ko'leminin' eki ese kemeyiwinde emes, al haqi'yqi'y $F(hkl)$ shag'i'li'si'wlardag'i' da'slepki fazani' ani'qlaw mashqalasi'n an'satlasti'radi'. Orayg'a qarata simmetriyalig' kristaldag'i' (egersimmetriya orayi' koordinatalar basi' si'pati'nda saylap ali'ng'an bolsa) qa'legen difrakciyag'a ushi'rag'an nur tek 0 ge yamasa π ge ten' baslang'i'sh fazag'a iye boladi'. Eger $F(hkl) > 0$ bolsa, onda baslang'i'sh faza nolge ten', al $F(hkl) < 0$ bolg'an jag'dayda baslang'i'sh faza π ge ten'.

Berilgen struktura ushi'n strukturali'q amplitudani' esaplaw tiykarg'i' soni'n' menen birge en' miynetti ko'p talap etetug'i'n ma'selelerdin' biri boli'p tabi'ladi'. A'sirese elementar quti'dag'i' atomlardi'n' sani' ko'p bolsa (mi'sali' organikali'q birikpelerde) strukturali'q faktordi' esaplaw og'ada u'lken ko'lemdegi esaplawlardi'n' o'tkeriliwin talap etedi.

Mi'sal retinde $Ni(NC_5H_5)_4Cl_2$ kristalli'n ali'p qaraymi'z. Bul kristaldi'n' elementar quti'si'nda 8 molekula, yag'ni'y 376 atom jaylasqan boladi'. Demek tek bir shag'i'li'si'w (difrakciyag'a ushi'rag'an nur) ushi'n eksponencialli'q funkciyani'n' 376 ma'nisin tabi'w kerek. Bunnan keyin bul shamalardi' atomli'q faktorlardi'n' ma'nislerine ko'beytiw ha'm ali'ng'an ko'beymelerdi bir birine qosi'w kerek. Bunday operaciylar difrakciyag'a ushi'rag'an nurlardi'n' sani'na baylani'sli' ju'zlegen yamasa mi'n'lag'an ret qaytalawg'a tuwri' keledi.

6-§. Simmetriyasi'ni'n' ken'isliktegi topari' ha'r qi'yli' bolg'an kristallar ushi'n strukturali'q amplitudani'n' formulalari'n keltirip shi'g'ari'w

Simmetriya elementlerinin' bar boli'wi' ha'm pa'njerenin' a'piwayi' emesligi elementar quti'dagi' ha'r qi'yli' atomlardi'n' koordinatalari' arasi'ndag'i' o'z-ara baylani'sti' ta'miyinleydi. Usi'nday o'z-ara baylani'sli'qti'n' en' a'piwayi' formasi'n oraylasqan pa'njereler beredi. Mi'sali' ko'lemde oraylasqan pa'njerede barli'q atomlar jup-juptan baylani'sqan: eger bir atom x_j, y_j, z_j koordinatalari'na iye bolsa, onda koordinatalari' $x_j' = x_j + 1/2, y_j' = y_j + 1/2, z_j' = z_j + 1/2$ bolg'an tap sonday sorttag'i' atom so'zsiz tabi'ladi'. (13-15) formulalardag'i' sa'ykes jup ag'zalardi' bir birine qosi'w arqali' mi'nag'an iye bolami'z:

$$\begin{aligned} f_j \text{Exp}[2\pi i(hx_j + ky_j + lz_j)] + f_j \text{Exp} \left\{ 2\pi i \left[h(x_j + 1/2) + k(y_j + \frac{1}{2}) + l(z_j + 1/2) \right] \right\} = \\ = f_j \text{Exp}[2\pi i(hx_j + ky_j + lz_j)] [1 + \text{Exp} i\pi(h + k + l)] = \\ = 2f_j \text{Exp}[2\pi i(hx_j + ky_j + lz_j)] \cos^2 \frac{\pi}{2} (h + k + l). \end{aligned}$$

Barli'q formula tutasi' menen

$$F(hkl) = 2\cos^2 \frac{\pi}{2} (h + k + l) \sum_{j=1}^{\frac{N}{2}} f_j \text{Exp}[2\pi i(hx_j + ky_j + lz_j)]$$

formulasi'na ali'p klinedi.

Summa belgisinin' aldi'nda turg'an koefficient tek eki ma'niske iye bola aladi': eger $h + k + l = 2n$ bolsa (n arqali' pu'tin san belgilengen, $2n$ shamasi' bolsa $h + k + l$ qosi'ndi'si'ni'n' teñ), onda $F(hkl) = 1$. Eger $h + k + l = 2n + 1$ bolsa, onda $F(hkl) = 0$. Demek rentgenogrammada payda bolg'an reflekslerdin' indeksleri ushi'n $h + k + l$ qosi'ndi'si' jup sang'a ten' boli'wi' kerek. Biz ko'lemde oraylasqan kristallar ushi'n belgili bolg'an so'niw qag'i'ydalari'n aldi'q degen so'z.

Tap sonday jollar menen ken'isliktegi simmetriyasi'ni'n' toparlari' basqa bolg'an kristallar ushi'n da strukturali'q faktorlardi'n' ma'nislerin ha'm so'niw qag'i'ydalari'n keltirip shi'g'ari'wi'mi'z mu'mkin. Joqari'da keltirilgen mi'saldan elementar quti'dag'i' barli'q atomlar boyi'nsha qosi'ndi'lardi' ali'p oti'ri'wdi'n' da kerek emes ekenligin ko'rsetedi. Biraq biz bul jumi'sta esaplawlardi'n' ko'lemin kishireytiwdi aldi'mi'zg'a maqset etip qoymaymi'z.

Simmetriya elementlerinin' boli'wi'na baylani'sli' formulalardi' tu'rlendiriw. Simmetriya elementlerinin' qatnasi'wi' qosi'ndi'ni'n' ag'zalari'ni'n' sani'n azayti'p g'ana qoymay, a'piwayi'lasti'ri'lg'an formulalardi'n' tu'rlerin de o'zgertedi.

Birinshi mi'sal retinde orayg'a qarata simmetriyasi' bar strukturani' qaraymi'z: eger koordinatalar basi' simmetriya orayi'nda jaylasti'ri'lg'an bolsa, onda strukturali'q amplitudani'n' tek haqi'yqi'y bo'legi g'ana (summadag'i' kosinus funkciyasi' bar ag'zalar g'ana) qaladi'. Basqa simmetriya elementleri de formulalardi'n' bir qansha tu'rlendiriliwin ta'miyinleydi.

Eger kristalda Z ko'sherine parallel bolg'an ekinshi ta'rtpi simmetriya ko'sheri bolsa (yag'ni'y 2 bolsa), onda koordinatalari' x_j, y_j, z_j ha'm $-x_j, -y_j, z_j$ bolg'an atomlar jup-juptan birigedi. Bul jag'daydan mi'nag'an iye bolami'z:

$$\begin{aligned} \text{Exp}[2\pi i(hx_j + ky_j + lz_j)] + \text{Exp}[2\pi i(-hx_j - ky_j + lz_j)] = \\ = \text{Exp}(i2\pi lz_j) 2 \cos 2\pi(hx_j + ky_j). \end{aligned}$$

Demek bul jag'dayda strukturali'q amplitudani'n' formulasi'

$$F(hkl) = 2 \sum_{j=1}^{\frac{N}{2}} f_j \cos 2\pi i (hx_j + ky_j) \exp(i2\pi lz_j) \quad (16)$$

tu'rine enedi.

Bul formulani' trigonometriyali'q formag'a aylandi'rsa, onda

$$F(hkl) = 2 \sum_{j=1}^{\frac{N}{2}} f_j \cos 2\pi i (hx_j + ky_j) \cos(2\pi lz_j) + \\ + 2i \sum_{j=1}^{\frac{N}{2}} f_j \cos 2\pi i (hx_j + ky_j) \sin(2\pi lz_j) \quad (17)$$

formulasi'na iye bolami'z.

Joqari'da aytalg'an si'yaqli' Z ko'sherine perpendikulyar bolg'an simmetriya tegisligi m strukturali'q amplituda formulasi'n

$$F(hkl) = 2 \sum_{j=1}^{\frac{N}{2}} f_j \cos(2\pi lz_j) \exp[2\pi i (hx_j + ky_j)]$$

tu'rine endiredi. Bul formulani' basqasha etip jazsaq, onda

$$F(hkl) = 2 \sum_{j=1}^{\frac{N}{2}} f_j \cos(2\pi lz_j) \cos[2\pi (hx_j + ky_j)] + \\ + 2i \sum_{j=1}^{\frac{N}{2}} f_j \cos(2\pi lz_j) \sin[2\pi (hx_j + ky_j)]$$

formulasi'na iye bolami'z. Sebebi bul jag'dayda x_j, y_j, z_j ha'm $x_j, y_j, -z_j$ noqatlari'nda jaylasqan atomlar jup-juptan birlesedi.

Joqari' ta'rtiptegi simmetriya ko'sherleri, vintlikko'sherler, ji'lji'p shashi'rati'wshi' simmetriya tegisliklari bolg'an jag'dayda esaplawlar a'dewir quramalasadi'. Mi'sali' XY tegisligi arqali' o'tiwshi a ji'lji'p shashi'rati'wshi' simmetriya tegisligi koordinatalari' x, y, z bolg'an atomlar menen koordinatalari' $x + \frac{1}{2}, y, -z$ bolg'an atomlardi' jup-juptan birlestiredi. Usi'nday o'zgerislerge sa'ykes ag'zalardi' bir biri menen baylani'sti'ri'w joli' menen biz to'mendegidey formulalarg'a iye bolami'z:

$$\exp[2\pi i (hx_j + ky_j + lz_j)] + \exp[2\pi i (hx_j + h/2 + ky_j - lz_j)] = \\ = \exp[2\pi i (hx_j + ky_j + lz_j)] \{ \exp[2\pi i (lz_j - h/4)] \} + \exp[2\pi i (h/4 - lz_j)] = \\ = 2 \cos 2\pi (lz_j - h/4) \exp[2\pi i (hx_j + ky_j + lz_j)]$$

ha'm

$$F(hkl) = 2 \sum_{j=1}^{\frac{N}{2}} f_j \cos 2\pi (lz_j - h/4) \exp[2\pi i (hx_j + ky_j + h/4)] =$$

$$\begin{aligned}
&= 2 \sum_{j=1}^{\frac{N}{2}} f_j \cos 2\pi(lz_j - h/4) \cos 2\pi(hx_j + ky_j + h/4) + \\
&+ 2i \sum_{j=1}^{\frac{N}{2}} f_j \cos 2\pi(lz_j - h/4) \sin 2\pi(hx_j + ky_j + h/4)
\end{aligned}$$

formulasi'n alami'z.

Vintlik ko'sherlerge ha'm ji'lji'p shashi'rati'wshi' simmetriya tegisliklerine juwap beretug'i'n formulalar sa'ykes simmetriya elementin ta'riyipleytug'i'n so'niw qag'i'ydalari'na da iye boladi'. Mi'sali' a ji'lji'p shashi'rati'wshi' simmetriya tegisligi bar jag'dayg'a sa'ykes keliwshi en' aqi'rg'i' formula boyi'nsha $h = 2n - 1$ bolg'an jag'dayda (yag'ni'y h ti'n' ma'nisi taq san bolsa) $F(hk0) = 0$. Bunnan

$$F(hk0) = 2 \cos \frac{\pi}{2} h \sum_{j=1}^{\frac{N}{2}} f_j \exp [i2\pi \cos 2\pi(hx_j + ky_j + h/4)]$$

Bul shama h ti'n' ma'nisi taq bolg'anda nolge aylanadi'.

Simmetriya elementlerinin' kombinatsiyalari' ja'ne de formulalardi'n' tu'rlerinin' o'zgerislerine ali'p keledi. Mi'sali' $P2/m$ topari'nda 2 ko'sheri Z ke parallel, al m tegisligi bolsa XY tegisliginde jatadi' dep esaplasaq, onda strukturali'q amplitudani'n' ma'nisi

$$F(hkl) = \sum_{j=1}^{\frac{N}{4}} f_j \cos 2\pi(hx_j + ky_j) \cos 2\pi lz_j$$

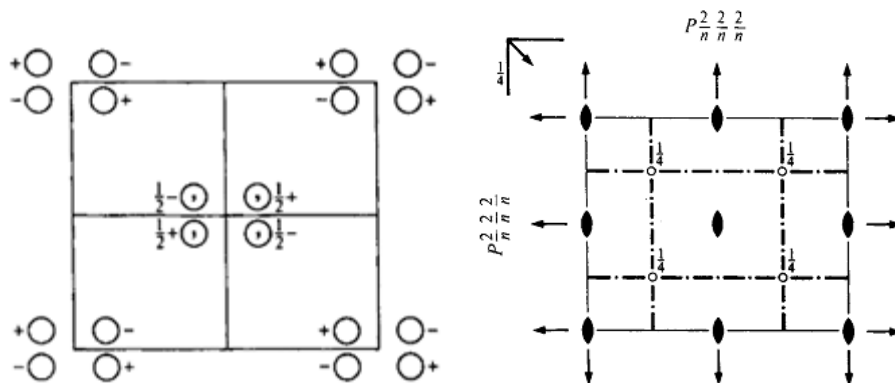
an'latpasi'n alami'z.

$Pmmm$ topari' formulalardi' bunnan da beter a'piwayi'lasti'radi'. Bul jag'dayda

$$F(hkl) = 8 \sum_{j=1}^{\frac{N}{8}} f_j \cos 2\pi hx_j \cos 2\pi ky_j \cos 2\pi lz_j.$$

Ctrukturali'q amplituda simmetriyani'n' $P2/m$ topari'nda da, $Pmmm$ topari'nda da haqi'yqi'y ma'niske iye boladi'. Sebebi bunday kristallarda koordinatalar basi' simmetriya orayi' menen bir noqatta jaylasqan.

$Pnnn$ topari'nda koordinata basi' ekinshi ta'rtpili u'sh simmetriya ko'sheri kesiliken noqatta saylap ali'nadi'. Bul jag'day 6-su'wrette ko'rsetilgen. Esaplawlar na'tiyjesinde biz bul jag'dayda strukturali'q amplitudani'n' to'mendegidey kompleksli ma'niske iye bolatug'i'nli'g'i'n ko'remiz:



6-su'wret. Simmetriyani'n' ken'isliktegi topari' $Pnnn(D_{2h}^2)$ (qatar sani' 48-bolg'an topar) jag'daydag'i' elementar quti' ha'm simmetriya elementlarinin' o'z-ara jaylasi'wlari'.

$$F(hkl) = 8 \cos^2 2\pi \frac{h+k+l}{4} \sum_{j=1}^{N/8} f_j \cos 2\pi h x_j \cos 2\pi k y_j \cos 2\pi l z_j + \\ + i \sin^2 2\pi \frac{h+k+l}{4} \sum_{j=1}^{N/8} f_j \sin 2\pi \left(h x_j - \frac{h}{4} \right) \sin 2\pi \left(k y_j + \frac{h}{4} \right) \sin 2\pi l z_j.$$

Tap usi'nday jag'day inversiya orayi'na iye emes toparlarda da ori'n aladi'. Mi'sali' $Ima2$ (International Tables for Crystallography (2006). Vol.A, Space group 46, pp. 260-261.) topari' ushi'n (7-su'wret)

$$F(hkl) = 8 \cos^2 2\pi \frac{h+k+l}{4} \left\{ \sum_{j=1}^{N/8} f_j \cos 2\pi \left(h x_j - \frac{h}{4} \right) \cos 2\pi \left(k y_j + \frac{h}{4} \right) \cos 2\pi l z_j + \right. \\ \left. + i \sum_{j=1}^{N/8} f_j \cos 2\pi \left(h x_j - \frac{h}{4} \right) \cos 2\pi \left(k y_j + \frac{h}{4} \right) \sin 2\pi l z_j \right\}.$$



7-su'wret. Simmetriyani'n' ken'isliktegi topari' $Ima2 (C_{2v}^{22})$ (qatar sani' 46-bolg'an topar) jag'daydag'i' elementar quti' ha'm simmetriya elementlarinin' o'z-ara jaylasi'wlari'.

Simmetriyani'n' ha'r bir ken'isliktegi topari' o'zinin' tu'rlendirilgen formulasi' menen ta'riyiplenedi. Bul formula strukturali'q amplitudalardi' esaplag'anda a'dette tiykarg'i' formula si'pati'nda xi'zmet etedi. Sa'ykes mag'li'wmatlar rentgenstrukturali'q analiz boyi'nsha spravoshniklerde, rentgen kristallografiyasi' boyi'nsha xali'q arali'q kestelerde keltirilgen. A'dette bizdi qi'zi'qti'ratug'i'n formula

$$F(hkl) = \sum_{j=1}^{N/p} f_j A_j + i \sum_{j=1}^{N/p} f_j B_j$$

tu'rine ali'p kelingan dep esaplanadi' ha'm joqari'da atap o'tilgan a'debiyatlarda A menen B shamalari'ni'n' ma'nisleri beriledi. Mi'sali' $Pnnn$ topari' ushi'n xali'q arali'q kestelerde

$$A = 8 \cos^2 2\pi \frac{h+k+l}{4} \cos 2\pi h x \cos 2\pi k y \cos 2\pi l z,$$

$$B = 8 \cos^2 2\pi \frac{h+k+l}{4} \sin 2\pi h x \sin 2\pi k y \sin 2\pi l z,$$

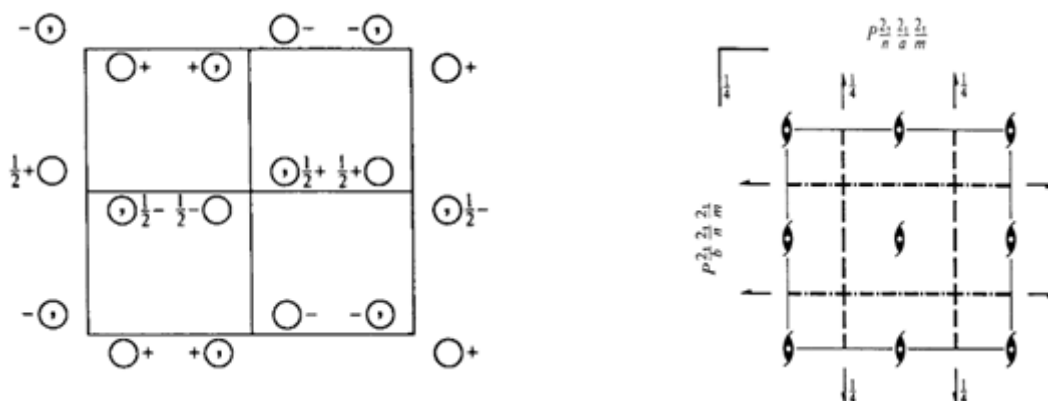
al, $Ima2$ topari' ushi'n

$$A = 8 \cos^2 2\pi \frac{h+k+l}{4} \cos 2\pi \left(hx - \frac{h}{4}\right) \cos 2\pi \left(ky + \frac{h}{4}\right) \cos 2\pi h z,$$

$$B = 8 \cos^2 2\pi \frac{h+k+l}{4} \cos 2\pi \left(hx - \frac{h}{4}\right) \cos 2\pi \left(ky + \frac{h}{4}\right) \sin 2\pi h z$$

formulalari' berilgen.

Strukturali'q amplitudalardi' esaplaw ushi'n qolaylasti'ri'lg'an formulalardi' ayi'ri'p alg'an jaqsi'. Haqi'yqati'nda da $\cos^2 2\pi \frac{h+k+l}{4}$ tipindagi ko'beytiwshi rentgen nurlari'n shashi'rati'wg'a $h+k+l = 2n-1$ sha'rtin qanaatlandi'ratug'i'n kristallografiyalı'q tegislikler semeystvolari'ni'n' qatnaspaytug'i'nli'g'i'n bildiredi. Al $\cos 2\pi \left(hx - \frac{h}{4}\right) \cos 2\pi \left(ky + \frac{h}{4}\right)$ ko'beytiwshisi bolsa h jup bolg'anda $\cos 2\pi h x \cos 2\pi k y$ ko'beymesin beredi. Al h indeksinin' ma'nisi taq bolsa $\sin 2\pi h x \sin 2\pi k y$ ko'beymesin alami'z.



8-su'wret. Simmetriyani'n' ken'isliktegi topari' $Pnma(D_{2h}^{16})$ (qatar sani' 46-bolg'an topar) jag'daydag'i' elementar quti' ha'm simmetriya elementlerinin' o'z-ara jaylasi'wlari'.

En' aqi'ri'nda $Pnnn$ topari' ushi'n to'mendegidey qatnaslarg'a iye bolami'z:

$h+k+l = 2n$ bolg'anda	$A = 8 \cos 2\pi h x \cos 2\pi k y \cos 2\pi l z,$
	$B = 0.$
$h+k+l = 2n-1$ bolg'anda	$A = 0,$
	$\sin 2\pi h x \sin 2\pi k y \sin 2\pi l z,$

($h + k + l = 2n$ bolg'anda degen so'z h, k ha'm l shamalari'ni'n' bir waqi'tta jup yamasa bir waqi'tta tek ekewinin' jup, al u'shinshisinin' taq bolatug'i'n an'g'artadi').

Simmetriyani'n' ken'isliktegi $Ima2$ topari' ushi'n to'mendegidey mag'li'wmatlarg'a iye bolami'z:

$h + k + l = 2n$ ha'm $h = 2n$ bolg'anda	$A = 8 \cos 2\pi hx \cos 2\pi ky \cos 2\pi lz,$
	$B = 8 \cos 2\pi hx \cos 2\pi ky \sin 2\pi lz,$
$h + k + l = 2n$ ha'm $h = 2n - 1$ bolg'anda	$A = -8 \sin 2\pi hx \sin 2\pi ky \cos 2\pi lz,$
	$B = -8 \sin 2\pi hx \sin 2\pi ky \sin 2\pi lz,$
$h + k + l = 2n - 1$ bolg'anda	$A = 0$ ha'm $B = 0.$

Kristallar (metallar yamasa qatti' deneler) rentgenografiyani'n' tiykarg'i' ma'selesi rentgen nurlari'ni'n' kristalli'q denelerdegi difrakciyasi'ni'n' ja'rdeminde strukturali'q analizdin' (tallawdi'n') tiykarg'i' ma'selesin sheshiw boli'p tabi'ladi'. Rentgenografiyalig' usi'llar menen kristallardi'n' atomli'q-kristalli'q, substrukturasi'n ani'qlaw ma'selesi menen rentgenstrukturali'q analiz (rentgendifrakciyalig' analiz) shug'i'llanadi'. Al strukturali'q analizdin' fizikali'q tiykari' bolsa kristaldi'n', amorf denenin', suyi'qli'qti'n', ha'm zatti'n' basqa da kondensaciyalang'an hallari'ndag'i' zatli'q ob'ekttin' (atomlar menen molekullardi'n') mikrobo'listiriliwinin' belgisiz bolg'an funkciyasi'n, olardi'n' jaylasi'wi'ndag'i' simmetriyani', kristalli'q pa'njerenin' parametrlarin, fazali'q quramdi' ha'm sog'an usag'an jag'daylardi' eksperimentalli'q jollar menen ani'qlaw boli'p tabi'ladi'. Kristallardag'i' rentgen nurlari'ni'n' shashi'rawi' mikrotarqali'wdi'n' Fure-analizinin' du'ziliwine ali'p keledi. Keri matematikali'q operaciya bolg'an Fure-sintezdin' ja'rdeminde izlenip ati'rg'an mikrotarqali'w funkciyasi'n tabi'w mu'mkin.

Rentgenstrukturali'q analizdin' ja'rdeminde to'mendegilerdi ani'qlaw mu'mkin:

a) kristaldi'n' atomli'q-molekulali'q quri'li'si'ni'n' da'wirli sistemasi'n, oni'n' noqatli'q ha'm translyaciya'li'q simmetriyasi'n, elementar quti'dag'i' atomlar menen molekullardi'n' koordinatalari'n;

b) kristallardag'i' defektlerdi - nol o'lshemli - noqatli'q defektler ha'm olardi'n' koncentraciyasi', bir o'lshemli dislokaciya'lar (su'wreti ha'm koncentraciyasi'), dislokaciya'lar a'tirapi'ndag'i' kernewler maydani' defekti (dinamikali'q ha'm statikali'q), eki o'lshemli defektler - jaylasi'wlar defektleri menen kristalli'q bloklar, egizler arasi'ndag'i' shegaralar, jaylasti'ri'w defektlerinin' koncentraciyalari'), u'sh o'lshemli defektlerdi (polikristalli'q denelerdegi da'nesheler arasi'ndag'i' shegaralar, bul shegaralardi'n' si'rtqi' mexanikali'q ta'sirlerdegi ji'li'si'wlari' ha'm basqalar);

v) amorf deneler menen suyi'qli'qlardag'i' jaqi'n arali'qlarda ori'n alatug'i'n ta'rtipler;

g) gaz molekullari'ni'n' quri'li'si';

d) zatlardi'n' fazali'q qurami'.

Internet tarmag'i'ndag'i' Vikipediya universalli'q enciklopediyasi'nda rentgenstrukturali'q analiz haqqi'nda to'mendegidey mag'li'wmatlar keltirilgen:

Rentgenstrukturali'q analiz (rentgendifrakciyalig' analiz) - zatlardi'n' quri'li'si'n izertlew din' difrakciyalig' usi'llari'ni'n' biri. Bul usi'ldi'n' tiykari'nda rentgen nurlari'ni'n' u'sh o'lshemli kristalli'q pa'njeredegi difrakciya qubi'li'si' jatadi'.

Kristallardag'i' rentgen nurlari'ni'n' difrakciyasi' qubi'li'si' Laue ta'repinen ashi'ldi', bul qubi'li'sqa teoriyalig' tiykardi' Vulf-Breggler berdi (Vulf-Bregg sha'rti). Zatlardi'n' quri'li'si'n izertlew usi'li' si'pati'nda rentgenstrukturali'q analiz Debay (Peter Debye) ha'm SHerer (Paul Scherrer) ta'repinen islep shi'g'i'ldi'.

Usi'l zatlardi'n' atomli'q quri'li'si'n ani'qlawg'a mu'mkinshilik beredi ha'm ol o'z ishine elementar quti'ni'n' simmetriyasi'ni'n' ken'isliktegi topari'n, oni'n' o'lshemleri menen formasi'n, soni'n' menen birge kristaldi'n' simmetriyasi'ni'n' topari'n ani'qlaydi'.

Rentgenstrukturali'q analiz a'piwayi'li'g'i' ha'm sali'sti'rmali' arzung'a tu'setug'i'nli'g'i'na baylani'sli' usi'ku'nlergeshekem zatlardi'n' quri'li'si'n ani'qlaytug'i'n en' ko'p tarqalg'an usi'l boli'p tabi'ladi'.

Usi'ldi'n' (rentgenstrukturali'q analizdin') tu'rleri:

- **Laue usi'li'** monokristallar ushi'n qollani'ladi'. Izertlenetug'i'n kristalli'q u'lgi rentgen nurlari'ni'n' u'zliksiz spektrinin' jin'ishke da'stesi menen nurlandi'ri'ladi', da'ste menen kristall arasi'ndag'i' bag'i't o'zgermeydi. Difrakciyag'a ushi'rag'an nurlani'wdi'n' mu'yeshlik tarqali'wi' ayi'ri'm difrakciyali'q daqlar tu'rine iye (lauegramma).

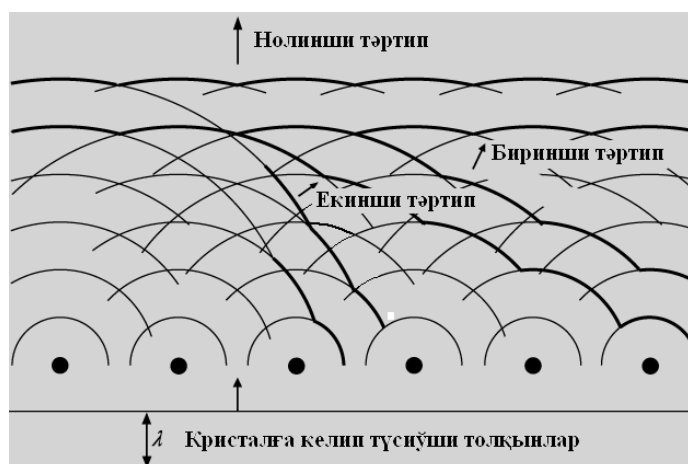
- **Rentgengoniometriya** (rentgen nurlari'ni'n' ja'rdeminde kristallardi'n' quri'li'si'na baylani'sli' bolg'an mu'yeshlerdin' ma'nislerin o'lshevi).

- **Debay-SHerrer usi'li'** polikristallardi' ha'm olardi'n' aralaspalari'n izertlew ushi'n qollani'ladi'. Kristalg'a kelip tu'siwshi monoxromat rentgen nurlari'ni'n' bag'i'ti'na sali'sti'rg'anda u'lgidegi kristallardi'n' ta'rtipsiz (xaotikali'q) jaylasi'wlari' difrakciyag'a ushi'rag'an nurlardi' ko'sheri u'lgige kelip tu'siwshi rentgen nurlari' da'stesi bolg'an kaossialli'q konuslardi'n' semeystvosi'na aylandi'radi'. Olardi'n' rentgenogramalardag'i' (fotoplenkadag'i' yamasa debaegrammadag'i') su'wreti koncentrlik saqi'ynalar tu'rinde payda boli'p, olardi'n' intensivlikleri izertlenip ati'rg'an zatlti'n' qurami' haqqi'nda mag'li'wmatlardi' beredi.

Kristallar rentgenografiyasi'ni'n' analizdin' fizikali'q tiykarlari'

Rentgenostrukturali'q analiz zatlardi'n' atomli'q-molekulali'q quri'li'si'n izertlew usi'li' boli'p tabi'ladi'. Bul usi'lda kristalli'q denelerdin' atomli'q-kristalli'q quri'li'si'n izertlew tiykari'nan rentgen nurlari'ni'n' usi'nday kristallarda difrakciyag'a ushi'rawi' paydalani'ladi'. Solay etip rentgenstrukturali'q analiz kristalli'q, amorf, suyi'q ha'm gaz ta'rezli denelerdeg'i' rentgen tolqi'nlari'ni'n' difrakciyasi'n paydalanadi' eken.

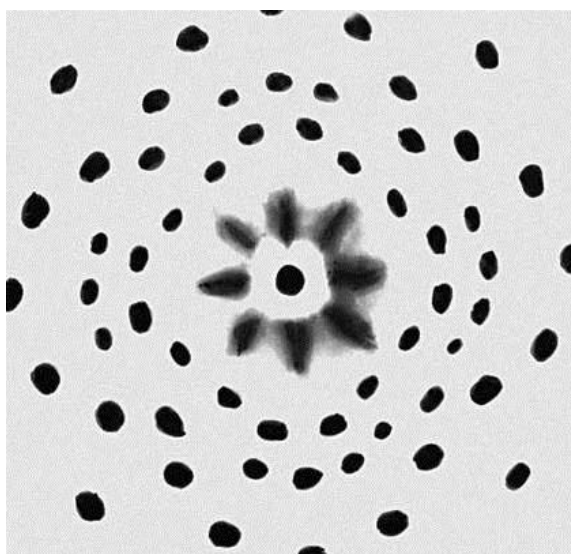
Rentgen nurlari' 1995-ji'li' nemis fizigi Rentgen (nemishe Wilhelm Conrad Röntgen) ta'repinen ashi'ldi'. Bul nurlardi'n' ta'biyati' belgisiz bolg'anli'qtan olardi' da'slep X nurlari' dep atadi' (rawajlang'an shet el ilimiy a'debiyati'nda bul termin ha'zirge shekem paydalani'ladi'). Rentgen nurlari'ni'n' elektromagnit tolqi'nlari'ni'n' bir tu'ri ekenligin tekserip ko'riw ushi'n M.Laue (von Laue M.) 1912-ji'li' o'zinin' qarawi'nda islewshi ilimiy xi'zmetkerler Fridrix (Friedrich W.) ha'm Knippingke (Knipping P.) sol nurlardi' kristallar arqali' o'tkerip, ali'ng'an na'tiyjelerdin' qanday bolatug'i'nli'g'i'n tekserip ko'riwdi usi'ndi' [1]. Ta'jiriybe ku'tilgendey na'tiyjelerdi berdi. Bul ta'jiriybenin' tiykari'nda a'dettegi optika kursi'nan belgili bolg'an difrakciya qubi'li'si' menen analogiya jatqan edi. Eger jaqti'li'q da'stesi bir birinen jaqti'li'q tolqi'nlari'ni'n' uzi'nli'g'i'nday qashi'qli'qlarda jaylasqan san'laqlar arqali' o'tse ekranda jaqti'li' ha'm qaran'g'i' oblastlardi'n' izbe-izliginen ibarat bolg'an interferenciya'li'q (biz «interferenciya'li'q» ha'm «difrakciya'li'q» so'zlerin bir ma'niste qollanami'z) su'wret ali'nadi'. Rentgen nurlari' jag'dayi'nda olardi'n' tolqi'n uzi'nli'qlari' kristaldag'i' atomlar arasi'ndag'i' qashi'qli'qlar menen birdey. Sonli'qtan kristalli'q denelerge rentgen tolqi'nlari' kelip tu'skende fotoplastinkada difrakciya'li'q su'wret payda boladi'.



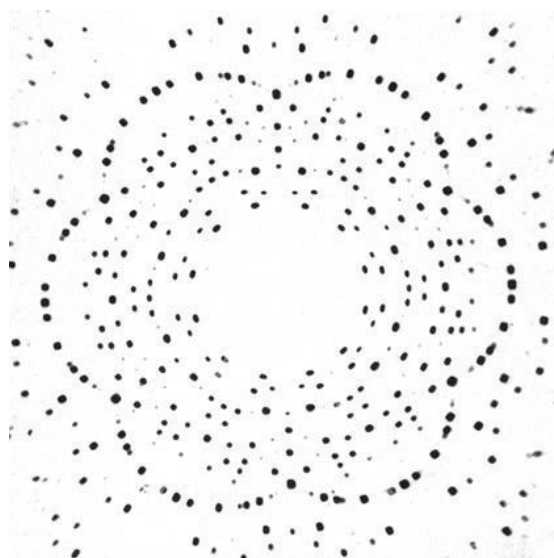
1-su'wret.

Rentgen nurlari'ni'n' kristalli'q denelerdegi difrakciyasi' qubi'li'si'ni'n' ma'nisin tu'sindiriwge arnalg'an sxema.

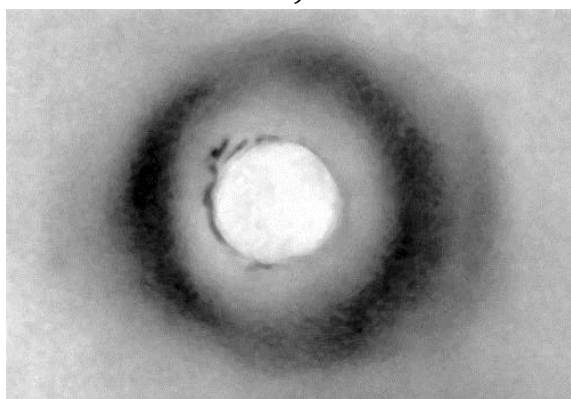
Difrakciya qubi'li'si'ni'n' fizikali'q ma'nisi 1-su'wrette berilgen. Bul jerde shashi'rati'wshi' oraylar qatari'na kelip tu'siwshi tegis tolqi'nlr sa'wlelengen. Kelip tu'siwshi tolqi'nlardi'n' ta'sirinde usi'nday ha'r bir oray o'zinen sferali'q tolqi'nlardi' nurlandi'radi', bul nurlar bir biri menen interferenciyanadi', na'tiyjede tek kelip tu'siwshi tolqi'nni'n' bag'i'ti'nda emes, al basqa bag'i'tlarda da tarqalatug'i'n tolqi'n frontlari' payda boladi'. Laue difrakciyasi' (lauegramma) dep atalatug'i'n difrakciyalı'q su'wret juqa kristalli'q plastinka arqali' rentgen nurlari' o'tkende payda boladi'. Lauegrammalarg'a mi'sallar 2-su'wrette berilgen.



a)



b)



c)

2-cu'wret.

NaCl ha'm beril kristallari'ni'n' a) ha'm b), suwdi'n' lauegrammalari'.

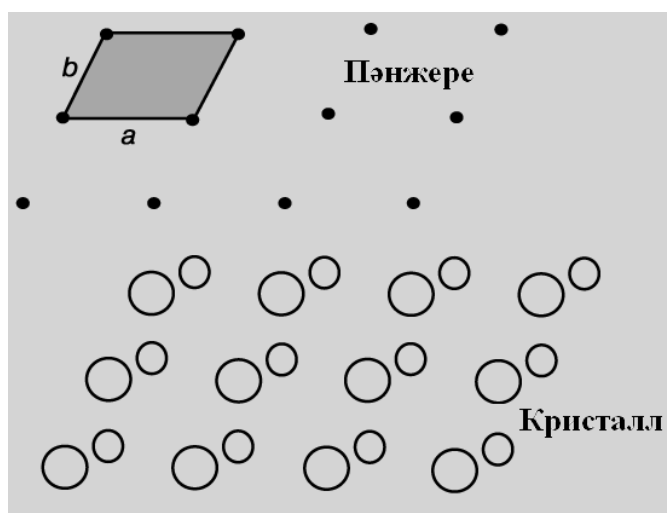
Berill kristalli'nan ali'ng'an [berill kristalli'ni'n' ximiyali'q formulasi' $Al_2Be_3(Si_{16}O_{18})$ geksagonalli'q kristallar qatari'na kiredi, simmetriyasi'ni'n' noqatli'q topari' 6/mmm (6/m 2/m 2/m), simmetriyasi'ni'n' ken'isliktegi topari' P6/mcc (P6/m 2/c 2/c), kristalli'q pa'njerenin' turaqli'lari' $a = 9.21\text{\AA}$ ha'm $c = 9.19\text{\AA}$] lauegrammada alti'nshi' ta'rtpili simmetriya ko'sheri ani'q ko'rinedi. Usi' tiykarda rentgendifrakciyalig' su'wret kristaldi'n' quri'li'si' haqqi'nda a'hmiyetli mag'li'wmatlarga iye boladi' dep ayta alami'z. Bul qubi'li'si' 1912-1913 ji'llari' a'keli-balali' U. Bregg ha'm U. Breggler (balasi' William Lawrence Bragg, a'kesi William Henry Bragg) ta'repinen muqi'yatli' tu'rde izertlendi [2]. Usi'ni'n' na'tiyjesinde olar kristallardi'n' rentgenstrukturalig'q analizinin' bahali' eksperimentallig'q metodi'n islep shi'qti'. Olardi'n' jumi'slari' ha'zirgi zaman rentgenstrukturalig'q analizinin' rawajlani'wi'ni'n' baslamasi' boli'p tabi'ladi'. Kompyuterler menen birgelikte isleytug'i'n jan'a rentgen a'sbap-u'skeneleri ushi'n quramali' kristallardag'i' atomlardi'n' koordinatalari'n ani'qlaw jumi'slari' a'dettegi jumi'slarga aylandi'.

Rentgenstrukturalig'q analizdin' ja'rdeminde kristallardi'n' quri'li'si' haqqi'nda qanday informaciyalardi' ali'w mu'mkin degen soraw beriledi. Rentgen nurlari' elektromagnit nurlari' boli'p, bul nurlardi'n' elektr maydanlari' denelerdegi atomlar ha'm elektronlar menen ta'sirlesiwdi. Elektronlardi'n' massalari' atomlardi'n' massalari'nan a'dewir kishi bolg'anli'qtan rentgen nurlari' elektronlarda effektivli tu'rde shashi'raydi'. Solay etip rentgenogramma elektronlardi'n' tarqali'wi' haqqi'nda mag'li'wmatlardi' beredi. Nurlani'w difrakciyag'a ushi'rag'an bag'i'tlari' bilip kristaldi'n' simmetriyasi'ni'n' tipin yamasa kristalli'q klassi', soni'n' menen birge kristalli'q pa'njere turaqli'lari'ni'n' ma'nislerin o'lshevi mu'mkin. Difrakciyalig'q maksimumlardin' sali'sti'rmali' intensivlikleri boyi'nsha elementar kuti'shalardag'i' atomlardi'n' koordinatalari'n (iyelegen ori'nleri'n) ani'qlaw mu'mkin.

O'zinin' fizikalig'q mag'anasi' boyi'nsha difrakciyalig'q su'wret kristaldag'i' elektronlardi'n' tarqali'wi'ni'n' matematikalig'q jaqtan qaytadan tu'rlendirilgen su'wreti, yag'ni'y fure-obrazi' boli'p tabi'ladi'. Demek difrakciyalig'q su'wret atomlar arasi'ndag'i' ximiyali'q baylani'slardin' quri'li'si' haqqi'nda da mag'li'wmatlarga iye degen so'z. Soni'n' menen birge bir difrakciyalig'q maksimumdag'i' intensivliktin' tarqali'wi' kristallitlerdin' o'lshevi, pa'njerenin' defektlari, mexanikalig'q kernewler ha'm kristalli'q quri'li'si'n' basqa da o'zgeshelikleri haqqi'nda mag'li'wmatlarga iye boladi'.

2-§. Kristalli'q quri'li's ha'm difrakciya

Kristal bo'lekshelerdin' u'sh o'lshevi diskret da'wirli ko'lemlik sistemasi' boli'p tabi'ladi'. Makroskopiyalig'q jaqtan bul jag'day kristaldi'n' bir tekliginde, olardi'n' qaptal ta'replari arasi'ndag'i' mu'yeshlerdin' usi' kristal ushi'n ta'n ekenliginde, soni'n' menen birge ko'pshilik jag'daylarda kristalli'q denelerdin' belgisi bir tegislik boyi'nsha si'natug'i'nli'g'i'nda ko'rinedi. Mikroskopiyalig'q jaqtan kristaldi' kristalli'q pa'njere si'pati'nda ta'riyiplei alami'z. Kristalli'q pa'njerede noqatlar (kristaldi' payda etiwshi bo'lekshelerdin' salmaq oraylari') sistemasi' da'wirli tu'rde qaytalanadi'. Bul da'wirliklik komplanar emes u'sh ko'sherli translyaciya ha'm olar arasi'ndag'i' u'sh mu'yesh penen xarakterlenadi. Kristal menen kristalli'q pa'njere sxema tu'rinde 3-su'wrette keltirilgen.

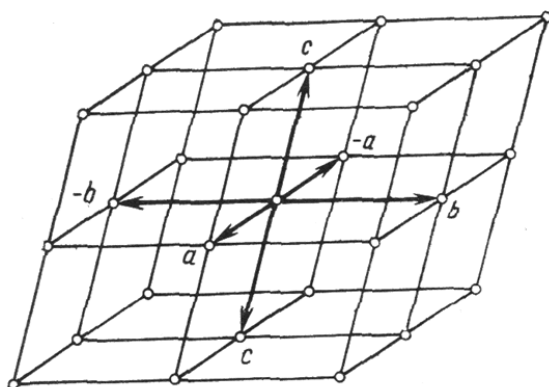


3-su'wret.

Kristal (to'mende) ha'm kristalli'q pa'njere (joqari'da).

Kristal ayqi'n atomlardan yamasa molekulalardan, al pa'njere bolsa noqatlardan (pa'njere tu'yinlerinen) turadi'.

Kristalli'q pa'njerede ali'ng'an translyაციyali'q quti' ha'm translyაციyalar da'stesi 4-su'wrette keltirilgen.



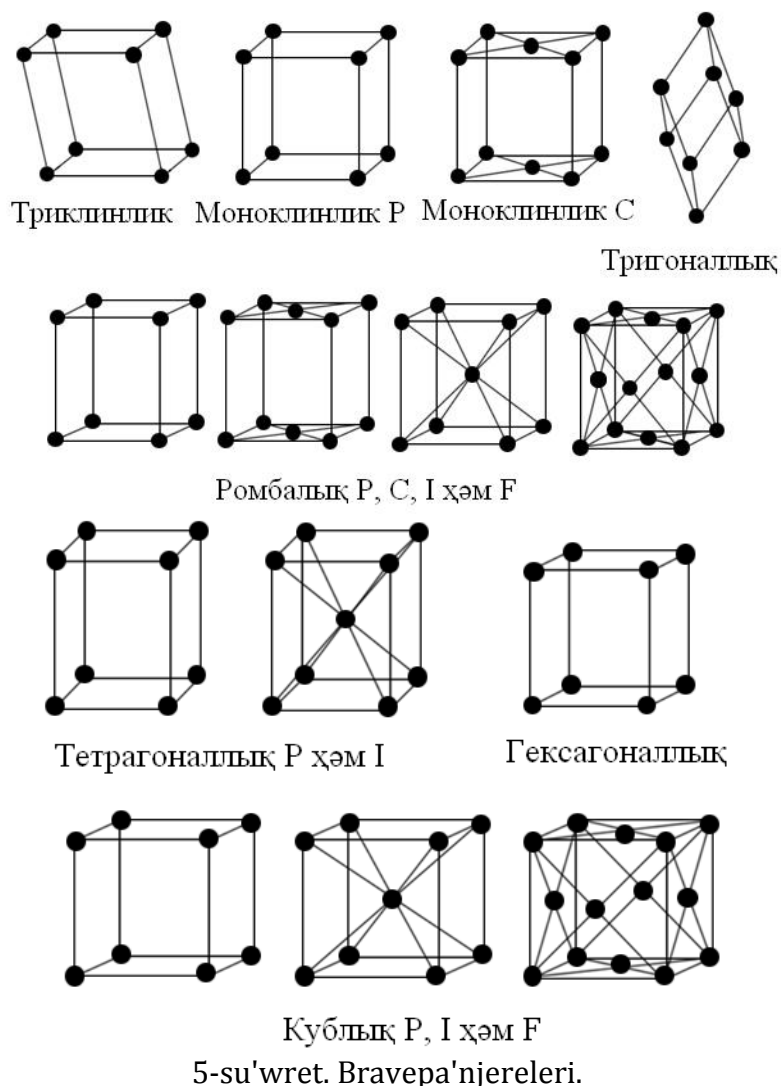
4-su'wret.

Translyაციyali'q quti' ha'm translyაციyalar da'stesi.

SHamasi' boyi'nsha bir birine ten' ha'm bir birine ten' emes translyაციyalardi', bir birine ten' ha'm ten' emes olar arasi'ndag'i' mu'yeshlerdi ayi'ri'p barli'q kristalli'q pa'njerelerdi jetti singoniyag'a to'mendegishe bo'liw mu'mkin:

Триклиник	$a \neq b \neq c, \alpha \neq \beta \neq \gamma, \alpha \neq \gamma$
Моноклиник	$a \neq b \neq c, \alpha \neq \gamma = 90^\circ, \beta \neq 90^\circ$
Ромбали'q	$a \neq b \neq c, \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
Тригонalli'q	$a = b = c, \alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$
Татрагонalli'q	$a = b \neq c, \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
Гексaгонalli'q	$a = b \neq c, \alpha = \beta = 90^\circ, \gamma = 120^\circ$
Кубли'q	$a = b = c, \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$

Eger translyაციyali'q simmetriyani' esapqa alatug'i'n bolsaq, onda 14 translyაციyali'q topar payda boladi' ha'm olardi'n' ha'r biri Bragg pa'njeresin payda etedi (5-su'wret)[4].



Brave pa'njereleri bir noqatti' translyaciyali'q qaytalaw joli' menen ali'natug'i'n noqatlardi'n' sheksiz sistemasi' boli'p tabi'ladi'. Kristaldi'n' qa'legen quri'li'si' Bravenin' 14 pa'njeresinin' birinin' ja'rdeminde ko'rsetiliwi mu'mkin. Kristalli'q deneler kishi tezlikler menen payda bolg'anda ha'm o'skende iri monokristallar payda boladi'. Bunday monokristallar si'pati'nda minerallardi' keltiriwge boladi'. Kristallar u'lkenirek tezlikler menen o'skende polikristalli'q konglomerat payda boladi'. Bunday polikristalli'q konglomeratlarg'a metallar menen quymalar kiredi. Kristallarg'a ta'n bolg'an uzaqtan ta'sirlesiw (uzaqtan ta'rtiplesiw) amorf deneler menen suyi'qli'qlarg'a o'tkende jog'aladi'. Bunday denelerde (materiallarda) atomlar menen molekulalardi'n' jaylasi'wi'nda tez jaqi'nnan ta'rtiplesiw ori'n aladi'.

Brave pa'njeresindeki elementar quti'lardi'n' radiusi' vektorin' bi'layi'nsha jazi'wi'mi'z mu'mkin:

$$R = n_1 a_1 + n_2 a_2 + n_3 a_3.$$

Bul formulada a_1 , a_2 ha'm a_3 arqali' kristalli'q pa'njeredegi translyaciyali'r, al n_1 , n_2 ha'm n_3 arqali' pu'tin sanlar belgilengen. Bul pu'tin sanlardi'n' ma'nisi ushi'n shek qoyil'mag'i'n. Sonli'qtan biz elementar quti'lardi'n' sani'ni'n' sheksiz ko'p bolatug'i'nli'g'i'n atap o'temiz.

Rentgenstrukturali'q analizdin' arti'qmashli'g'i' oni'n' joqari' saylap ali'wshi'li'g'i'nda. Eger monoxromat rentgen nurlari'ni'n' da'stesi monokristalg'a qa'legen bag'i'tta tu'setug'i'n bolsa, onda tap sol bag'i'ttag'i' kristaldan shi'g'i'wshi'da'steni de baqlawg'a boladi'. Bul da'stedifrakciyag'a ushi'rag'an da'ste emes. Difrakciyag'a ushi'rag'an da'steler

kristallografiyalı'q ko'sherlerge ha'm kelip tu'siwshi rentgen nurlari' da'stesinin' bag'i'ti'na sali'sti'rg'anda diskret ma'nistegi belgili bir mu'yeshlerge buri'lg'an boladi'. Bul sha'rt kristallar rentgenografiyasi'ndag'i' aylani'w usi'li'ni'n' tiykari'nda jatadi'. Bul usi'lda kristal belgili bir ko'sherdin' do'gereginde aylani'sta boladi' ha'm difrakciya qubi'li'si' baqlanatug'i'n bag'i'tlar da'l ani'qlanadi'.

Basqa rentgenografiyalı'q eksperimentlerde untalg'an kristallar yamasa polikristallar paydalani'ladi'. Bul usi'l Debay-SHerer usi'li' dep ataladi' (bir qatar jag'daylarda Debay usi'li' dep te ataladi'). Bunday eksperimentlerde ayi'ri'm kristallitlerdin' orientacijalari'ni'n' u'zliksiz spektrine iye bolami'z. Biraq baqlani'wi' mu'mkin bolg'an intensivli difrakciyalı'q da'stelardi belgili bag'i'tlarg'a iye kristallitler beredi. Untalg'an kristallar (polikristallar) usi'li' iri monokristallardi'o'siriwdi talap etpeydi ha'm sonli'qtan Laue ha'm aylani'w usi'llari'ni'n' aldi'nda geypara arti'qmashli'qlarg'a iye boladi'. Laue usi'li'nda monokristal ha'm rentgen nurlari'ni'n' u'zliksiz spektri qollani'ladi'. Usi'ni'n' saldari'nan kristaldi'n' o'zi difrakciyalı'q su'wrettin' payda boli'wi' ushi'n za'ru'rli bolg'an tolqi'n uzi'nli'qlari'n saylap aladi'.

Solay etip rentgenstrukturalı'q analizdin' tiykarg'i' formulasi' Vulf-Bregg ten'lemesi boli'p tabi'ladi' [5]:

$$2d \sin \theta = n\lambda. \quad (1)$$

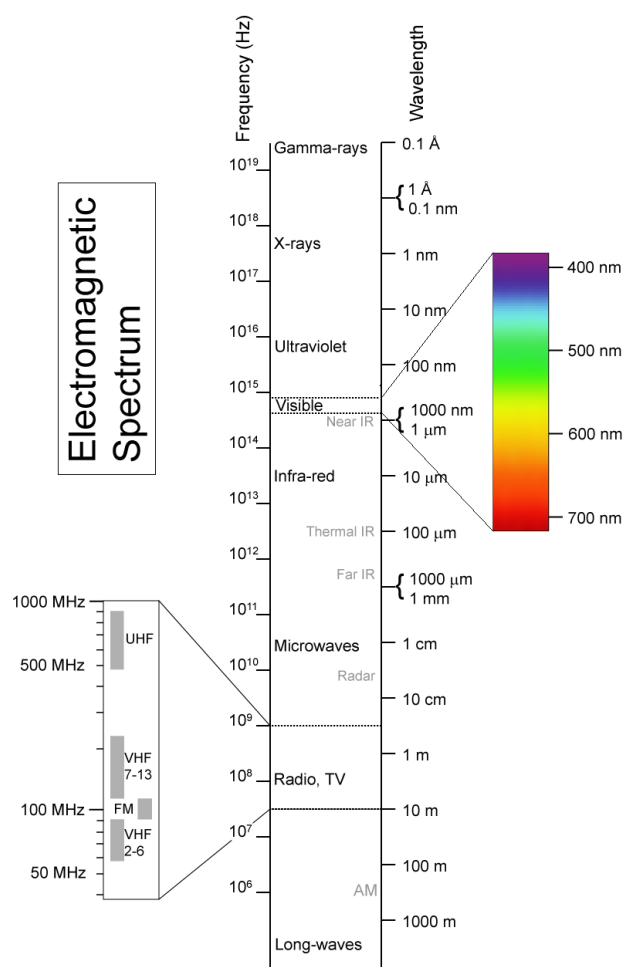
Bul formulada d arqali' kristallografiyalı'q tegislikler arasi'ndag'i' qashi'qli'q, θ arqali' difrakciyalı'q mu'yesh, al λ arqali' rentgen tolqi'nlari' ushi'n tolqi'n uzi'nli'g'i' belgilengen. Rentgenografiyalı'q usi'llarda sol u'sh fizikalı'q shamalardi'n' birewi turaqli' etip ali'nadi'.

1-keste.

Turaqli' shama	O'zgermeli shamalar	Rentgenografiyalı'q usi'l
θ	d ha'm θ (d shamasini'n' har bir ma'nisine ani'q λ sa'ykes keledi)	Laue usi'li'
d	θ ha'm λ	Debay-SHerer usi'li'.
λ	θ ha'm d	Aylani'w (terbeliw) usi'li'.

Polixromat rentgen nurlani'wi' Laue usi'li'nda difrakciyalı'q su'wretti beredi (λ shamasini' o'zgermeli). Debay-SHerer usi'li'nda u'zliksiz polixromat nurlani'w rentgenogrammada fon payda etedi, al aylani'w (terbeliw) usi'li'nda bolsa θ difrakciyalı'q mu'yeshinin' o'zgeriw bag'i'ti'nda reflekslerdi sozadi'. Sonli'qtan Debay-SHerer ha'm aylani'w (terbeliw) usi'llari'nda monoxromat rentgen nurlari'n paydalani'w maqsetke sa'ykes keledi.

Rentgenstrukturalı'q analiz qatti' denelerdi atomlarqa'ddindeu'yreniwdin' eski usi'llari'ni'n' biri bolsa da (rentgenstrukturalı'q analizdin' payda bolg'ani'na derlik 100 ji'l bolg'anli'g'i'n eske ali'p o'temiz) oni'n' usi'llari' rawajlani'p ha'm jetilisip ati'r. Mi'sali' ha'zirgi waqi'tlari' rentgenstrukturalı'q analiz rentgen nurlari'ni'n' quwatli' dereklerinin' biri bolg'an sinxrotronli'q nurlani'wdi' paydalanbaqta. Sinxrotron bolsa elektronlardi' ju'da' u'lken tezliklerge shekem tezletiwshi tezletkish boli'p tabi'ladi'. Bunday u'skene a'dette yadroli'q fizikada qollani'ladi'. Elektronlar ultrafioletten rentgen nurlari'na shekemgi diapazonda elektromagnit nurlani'w payda etedi. Bul quwatli' (u'lken intensivlikke iye) nurlani'wdi'n' ja'rdeminde qatti' denelerdin' quri'li'si' boyi'nsha ko'p sanli' mag'li'wmatlardi' ali'w mu'mkin [6].



6-su'wret.

Rentgen nurlari'ni'n' elektromagnit tolqi'nlari' spektrinde iyelegen orni' (Internettarmag'i'ndag'i' Vikipediya universalli'q enciklopediyasi'nan ali'ng'an su'wret).

Rentgen nurlari'ni'n' elektromagnit tolqi'nlari' spektrinde iyelegen orni' 6-su'wrette keltirilgan.

3-§. Rentgen nurlari'ni'n' zatlar menen ta'sirlesiw

Zatlar arqali' o'tkende rentgen nurlari'ni'n' bir bo'limi qanday da bir da'rejede zatlarda juti'ladi'. Ekinshi bo'limi zatlar arqali' o'tedi. Juti'lg'an rentgen nurlari'ni'n' mug'dari' zatlardi'n' qali'n'li'g'i'na, rentgen nurlari'ni'n' tolqi'n uzi'nli'g'i'na ha'm zatlardi'n' juti'wshi'li'q qa'siyetlerine baylani'sli'. Rentgen nurlari' zatlar arqali' o'tkende to'mendegidey eki processke baylani'sli' o'zinin' energiyasi'n jog'altadi' (ha'lsireydi yamasa intensivligi kemeyedi):

1. Haqi'yqi'y juti'li'w. Bunday jag'dayda rentgen nurlari' fotonlari'ni'n' energiyalari' energiyani'n' basqa tu'rlerine aylanadi';

2. Rentgen nurlari'ni'n' zatlardag'i' shashi'rawi'. Bunday jag'dayda zatqa kelip tu'siwshi rentgen nurlari'ni'n' tarqali'w bag'i'ti' o'zgeredi.

Nurlardi' juti'wshi' zatlardag'i' bir tekli nurlardi'n' ha'lsirewin sanli' tu'rde ani'klaytug'ni' ni'zamdi' bi'layi'nsha keltirip shi'g'ari'w mu'mkin: bir tekli zatti'n' birdey qali'n'li'qlari'nda nurlani'wdi'n' birdey mug'dardag'i' energiyalari' juti'ladi'. Eger zatqa kelip tu'siwshi nurlardi'n' intensivligin I_0 arqali' belgilesek, al qali'n'li'g'i' t bolg'an plastinka (qali'n'ldi'q) arqali' o'tken nurdin' intensivligin I_t arqali' belgilesek, onda biz izlep ati'rg'an ni'zamdi' bi'layi'nsha jaza alami'z:

$$dI \sim -I_0 dx,$$

$$dI = -\mu I_0 dx,$$

$$\frac{dI}{I_0} = -\mu dx,$$

$$-\int_{I_0}^{I_t} \frac{dI}{I} = \mu \int_0^t dx, I_t = I_0 e^{-\mu t}$$

Bul an'latpalarda μ arqali' juti'wshi' denenin' fizikali'q qa'siyetlerinen g'a'rezli bolg'an proporcionalli'q koefficient belgilengen. Oni'n' sanli'q ma'nisi $\mu = \ln\left(\frac{I_0}{I_{t=1}}\right)$ shamasina (nurlar bir birlik qali'n'li'q arqali' o'tkende intensivliginin' sali'sti'rmali' o'zgerisinin' logarifmine) ten'. Rentgenografiyada μ koefficientin ha'lsirewdin' nurlardi' juti'wdi'n' toli'q si'zi'qli'q koefficienti yamasa zatti'n' massali'q juti'w koefficienti dep ataydi'. Si'zi'qli' juti'li'w koefficienti $\mu\rho$ shamasina ten' (ρ arqali' zatti'n' ti'g'i'zli'g'i' belgilengen).

Ayi'ri'm zatlardi'n' massali'q juti'li'w koefficientlerinin' ma'nisleri to'mendegi keste berilgen.

Keste. Ayi'ri'm massali'q juti'li'w koefficientlerinin' ma'nisleri $\left(\frac{\mu}{\rho}\right)$

Element	Tolqi'n uzi'nli'g'i', Å						
	0,200	0,498	0,632 <i>Mo Kβ</i>	0,711 <i>Mo Kα</i>	1,542 <i>Cu Kα</i>	1,948 <i>Fe Kα</i>	2,500
Na	0,225	1,18	2,30	3,30	32,1	61,3	128
Al	0,270	1,90	3,73	5,22	49,0	93,5	193
Fe	1,10	14,0	27,5	38,5	328	71,2	147
Cu	1,59	18,9	37,2	51,0	50,9	96,3	197
Ag	5,40	10,5	19,6	27,5	217	405	710
Au	4,40	48,5	87	120	213	385	

5-§. Rentgenstrukturali'q analiz usi'llari'

Rentgenstrukturali'q analizde tiykari'nan to'mendegi usi'llar qollani'ladi':

1. Laue usi'li'. Bul usi'lda polixromat rentgen nurlari' da'stesi qozg'almaytug'i'n monokristal u'lgige kelip tu'sedi. U'lginin' o'lshe'mleri a'dette 1-2 mm den u'lken bolmawi' kerek. Difrakciyalig' su'wret qozg'almaytug'i'n fotoplenkadatu'siriledi. Laue kamerasi' 7-*a* su'wrette keltirilgen.

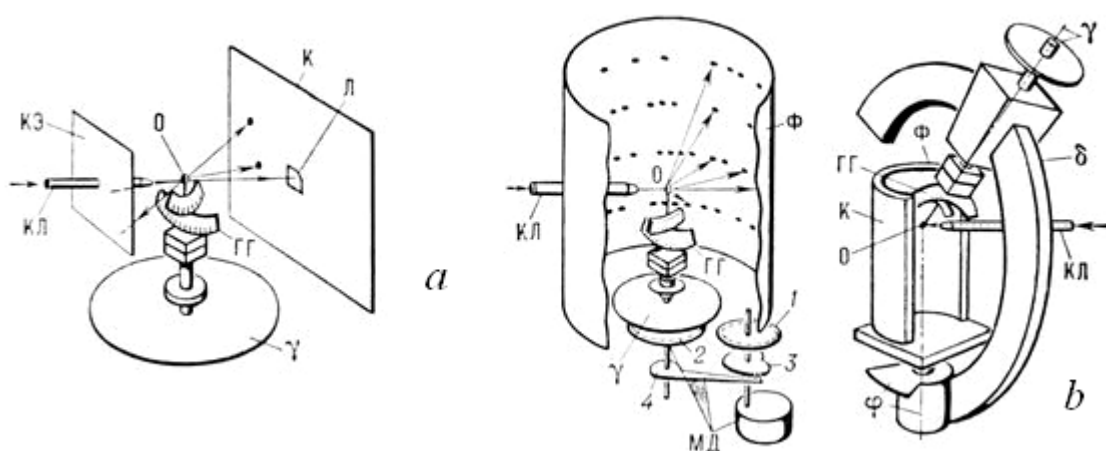
2. Aylani'w (terbeliw) usi'li'. Monoxromat rentgen nurlari' da'stesi bazi' bir kristallografiyalig' ko'sher do'gereginde aylani'wshi' (yamasa terbeliwshi) kristalg'a kelip tu'sedi. Sol kristallografiyalig' bag'i't kamerasi'n' aylani'w (terbeliw) bag'i'ti'na da'l parallel etip ali'nadi'. Difrakciyalig' su'wret cilindr ta'rizli qozg'almaytug'i'n fotoplenkada ali'nadi'. Ayi'ri'm jag'daylarda fotoplenka u'lg'i menen sinxronli' ra'wishte aylani's jasaydi'; aylani'w usi'li'ni'n' bunday tu'rinqatlamli'q si'zi'qlardi' tu'sirip ali'w usi'li' dep ataydi' (7-*b* su'wret).

Aylani'w usi'li'nda monoxromat rentgen nurlari' emes, al a'dette polixromat rentgen nurlari' paydalani'ladi' (sebebi intensivli monoxromat rentgen nurlari'n ali'w an'sat emes). Fotoplenkadag'i' difrakciyalig' su'wret bolsa tiykari'nan xarakteristikali'q nurlani'wdi'n' esabi'nan qaliplesedi. Al u'zliksiz spektr bolsa rentgen reflekslerinin' a'tirapi'nda belgili bir bag'i'tlardag'i' fondi' payda etedi.

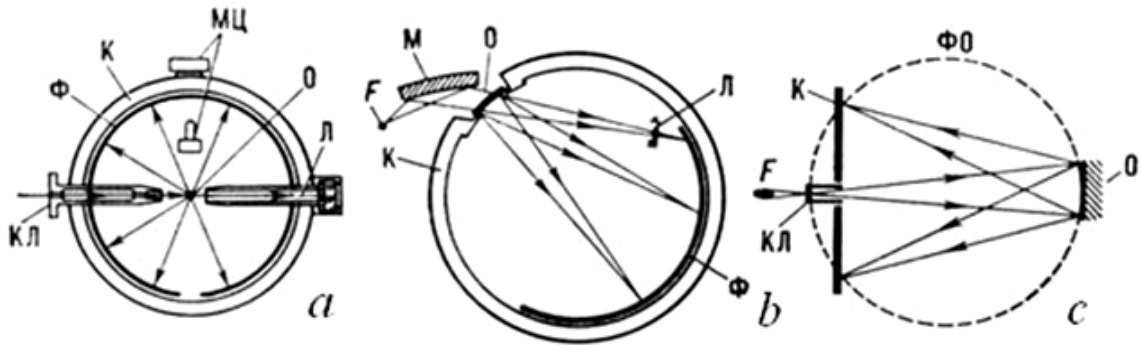
3. Untalg'an kristallar (yamasa polikristallar) usi'li' (Debay-SHerer usi'li'). Bul usi'lda da monoxromat rentgen nurlari'n paydalani'w kerek. Izertlenetug'i'n u'lgipolikristal yamasa untalg'an kristal boli'p tabi'ladi'. Untalg'an kristaldi' shiyshe iyneg'e rentgen nurlari'n kem shashi'ratatug'i'n jelimnin' ja'rdeminde jabi'sti'radi'.

Laue usi'li'. Bul usi'l kristallardi'n' atomli'q-kristalli'q quri'li'si'n izertlew din' en' baslang'i'sh etapi'nda qollani'ladi'. Laue usi'li'ni'n' ja'rdeminde kristallardi'n' singoniyasi' ha'm Laue klassi' ani'qlanadi'. Fridel ni'zami' (Friedel and Bijvoet mates, qaran'i'z http://en.wikipedia.org/wiki/Laue_diffraction#Friedel_and_Bijvoet_mates) boyi'nsha lauegramma (barli'q rentgenogramma) ja'rdeminde kristallardag'i' simmetriya orayi'ni'n' joq ekenligin ani'qlawg'a bolmaydi' (barli'q rentgenogrammalarda simmetriya orayi' ori'n aladi'). Sonli'qtan 32 noqatli'q toparg'a simmetriya orayi'n qosi'w olardi'n' sani'n 11 ge shekem kemeytedi. Sonli'qtan 11 Laue klassi' bar dep esaplaydi'.

Laue usi'li' monokristallardi', polidomenli kristallardi' ha'm iri kristallitlik u'lgilerdi izertlew ushi'n qollani'ladi'. Joqari'da ayti'li'p o'tilgenindey bul usi'lda qozg'almaytug'i'n kristalli'q u'lgige diametri 1-2 mm bolg'an u'zliksiz spektrge iye polixromat rentgen nuri' kelip tu'sedi.



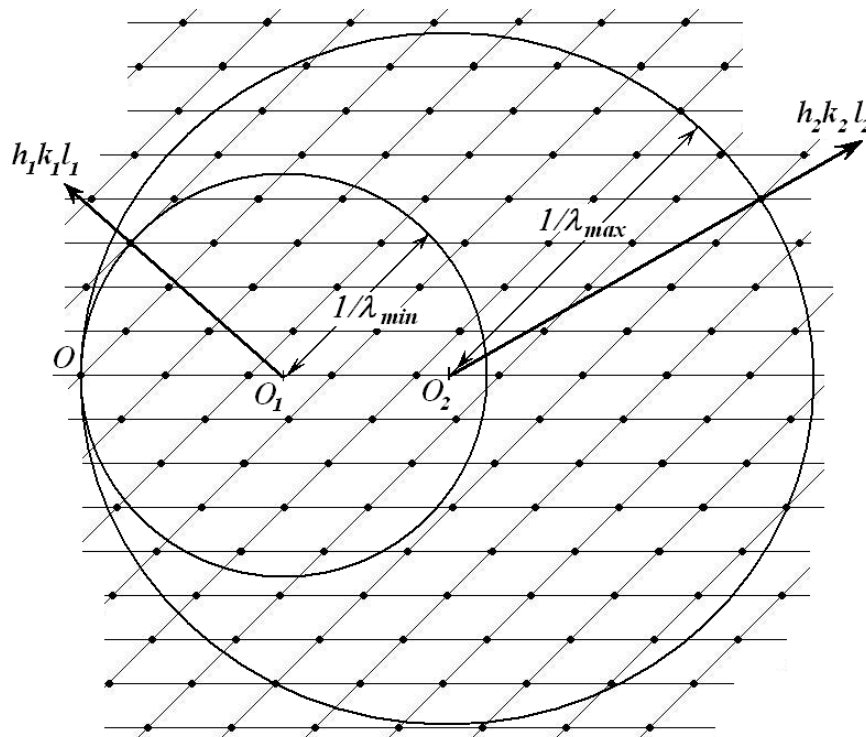
7-su'wret. Monokristallardi' izertlew ushi'n arnalg'an rentgen kameralari'ni'n' tiyarg'i' sxemalari': *a*—Laue usi'li' menen qozg'almaytug'i'n kristallardi' izertlew kamerasi'; *b* — aylani'w (terbeliw) kamerasi'. Fotoplenkada qatlamli'q si'zi'qlardi'n' boyi'nda joylasqan difrakciyalı'q maksimumlar ko'rinip tur; eger toli'q aylani'wdi' belgili bir mu'yeshlik intervaldag'i' terbeliw menen almasti'rsa (aylani'w usi'li'nda izertlenetug'i'n kristal kamera ko'sheri do'gereginde aylani'sta boladi' ha'm ekspoziciya bari'si'nda bir neshe ret aylani'p shi'g'adi', al terbeliw usi'li'nda kristal ekspoziciya bari'si'nda kamera ko'sheri do'gereginde belgili bir mu'yeshlik intervalda g'ana aldi'g'a ha'm keyinge bir neshe ret buriladi'), onda terbeliw intervali'ni'n' ma'nisine baylani'sli' qatlamli'q si'zi'qlardag'i' refleksler sani' kemeyedi. U'lginin' aylani'wi' 1- ha'm 2-tislerdin' ja'rdeminde a'melge asi'ri'ladi', terbelis bolsa 3 penen 4-ri'shag ja'rdeminde ju'zege keledi. *c* — elementar quti'ni'n' formalari'n ha'm o'lshemlerin ani'qlaw kamerasi'. O — u'lgi; GG — u'lgi ornalasti'ri'latug'i'n goniometrlik du'zilis; γ — limb ha'm u'lgi ornalasti'ri'latug'i'n goniometrlik du'zilistin' buri'li'w ko'sheri; KL — kollimator; K bolsa F fotoplenkasi' bar kasseta; KE arqali' epigramma tu'siriw ushi'n arnalg'an fotokasseta ko'rsetilgen (keri bag'i'tta su'wretke ali'w); MD arqali' u'lgini aylandi'ratug'i'n yamasa terbeletug'i'n mexanizm ko'rsetilgen.; φ — limb ha'm u'lginin' terbelis ko'sheri; δ — goniometrlik du'zilistin' ko'sherin dog'a tu'rindagi bag'i'tlag'i'sh.



8-su'wret. Polikristallardi' (yamasa untalg'an kristallardi') izertlew ushi'n arnalg'an rentgen kameralari'ni'n' tiykarg'i' sxemalari': *a* — Debay kamerasi'; *b* — iymeytilgen kristall-monoxromatorg'a iye fokuslawshi' kamera, bul kamera izertlenetug'i'n u'lgi arqali' o'tiwshi nurlarda, yag'ni'y kishi difrakciyalig' mu'yeshlerde isleydi; *c* — keru bag'i'tta (u'lken difrakciyalig' mu'yeshler) tegis kassetada su'wret alatug'i'n fokuslawshi' kamera. Strelkalar ja'rdeminde u'lgige tuwri' kelip tu'setug'i'n ha'm difrakciyag'a ushi'rag'an nurlardi'n' bag'i'tlari' ko'rsetilgen. O — u'lgi; F — rentgen trubkasi'ni'n' fokusi'; M — kristall-monoxromator; K — fotoplenkasi' bar kassetada; L — paydalani'lmag'an rentgen nuri'n uslap qali'wshi'; FO — fokuslani'w shen'beri (difrakciyalig' maksimumlar jaylasatug'i'n shen'ber); KL — kollimator; MC — u'lgini orayg'a ali'p keliwge ja'rdem beretug'i'n mexanizm.

Rentgen trubkasi'nan shi'qqan en' kishi tolqi'n uzi'nli'g'i' trubkadag'i' anod penen katod arasi'na tu'sken kernewdin' ma'nisinen g'a'rezli. Haqi'yqati'nda da $eU = h\nu = \hbar\omega = 2\pi\hbar\frac{c}{\lambda}$. Bul formulada e arqali' elektronni'n' zaryadi', U arqali' anodli'q kernewdin' ma'nisi, h arqali' Plank turaqli'si' ($h = 2\pi\hbar$), ν arqali' rentgen tolqi'ni'ni'n' jiyiligi, ω arkali' tolqi'nni'n' ciklik jiyiligi, c arqali' jaqti'li'qti'n' vakuumdegi tezligi, al λ arqali' rentgen tolqi'ni'ni'n' tolqi'n uzi'nli'g'i' belgilengen. Bunnan λ menen U arasi'ndag'i' baylani'sti' an'sat tabami'z: $\lambda = \frac{2\pi\hbar c}{eU}$. Eger biz anodli'q kernewdi kilovoltlerde beretug'i'n, al tolqi'n uzi'nli'g'i'n angstromlerde esaplaytug'i'n bolsaq, onda ken'nen ma'lim bolg'an $\lambda_{min} = \frac{12,3}{U}$ formulasi'na iye bolami'z. Bunday jag'dayda anod kernewinin' ma'nisi 36 kilovolt bolg'anda (mi's anodi' bar rentgen trubkasi'nda usi'nday kernewde islew usi'ni'ladi') $\lambda_{min} = 0,344 \text{ \AA}$ shamasina iye bolami'z. Difrakciyalig' su'wretti payda etiwge qatnasatug'i'n rentgen tolqi'ni'ni'n' maksimallig' uzi'nli'g'i'n tabi'w ushi'n qa'ddi fonni'n' qa'dinen keminde 5-10 % joqari' bolg'an tolqi'nni'n' uzi'nli'g'i'n alami'z. Mi's anodi' (antikatodi') ushi'n bul tolqi'nni'n' uzi'nli'g'i' shama menen 3 angstromnen u'lken emes. Usi'g'an baylani'sli' mi's anodi'nda payda bolg'an (qozg'an) u'zliksiz rentgen spektrinde lauegrammalardi' payda etiw ushi'n uzi'nli'g'i' shama menen 0,3 angstromnen 3 angstromge shekemgi uzi'nli'qtag'i' rentgen tolqi'nlari' qatnasadi' dep esaplaymi'z. $\lambda_{max} - \lambda_{min}$ spektrine radiuslari' $\frac{1}{\lambda_{min}}$ shamasinan $\frac{1}{\lambda_{max}}$ shamasina shekemgi Evald sferalari' (Ewald's sphere, qaran'i'z http://en.wikipedia.org/wiki/Ewald%27s_sphere) arasi'nda jaylasqan keru pa'njere tu'yinleri qatnasadi'. Bul jag'day 8-su'wrette keltirilgen.

Qi'zi'g'i' sonnan ibarat, lauegrammada payda bolg'an reflekslerdin' sani' $\lambda_{max} - \lambda_{min}$ ayi'rmasi'nan g'a'rezli. Usi' g'a'rezlilik tiyayki'nlasti'ri'w ushi'n kompyuterdin' ja'rdeminde Delphi programmali'q tilinde teoriyalig' lauegrammalar seriyasi' du'zildi. 10-asu'wrette $\lambda_{min} = 0,36 \text{ \AA}$ ha'm $\lambda_{max} = 3 \text{ \AA}$. 10- *b* su'wrette bolsa $\lambda_{min} = 0,036 \text{ \AA}$ ha'm $\lambda_{max} = 30 \text{ \AA}$. Bul su'wretlerde $\lambda_{max} - \lambda_{min}$ ayi'rmasi'ni'n' lauegrammalardi'n' reflekslerinin' payda boli'wi'na qanday ta'sirin tiygizetug'i'nli'g'i' ani'q ko'rinip tur.

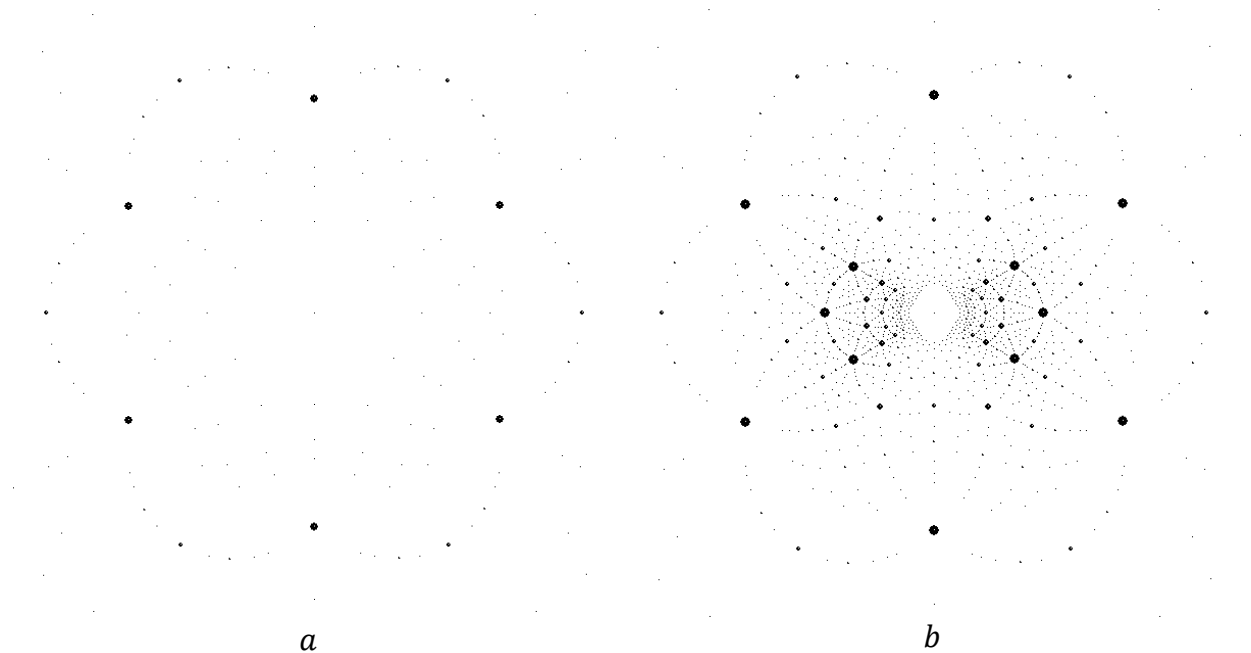


9-su'wret.

Lauegrammani'n' payda boli'wi'n sa'wlelendiretug'i'n sxema. Fotoplenkadag'i' difrakciyalig' daqlardi' radiuslari' $1/\lambda_{\min}$ ha'm $1/\lambda_{\max}$ bolg'an Evald sferalari' arasi'nda jaylasqan keripajnerenin' tu'yinlari beredi. Vulf-Bregg shartinin' orinlani'wi' ushi'n keripajnerenin' tu'yininin' Evald sferasi'ni'n' beti menen kesilisiwi kerek. Sonli'qtan ha'r bir tu'yin ushi'n belgili bir radiusqa iye (yag'ni'y belgili bir toqi'n uzi'nlig'i'na sa'ykes keliwshi) Evald sferasi' sa'ykes keledi. Demek ha'm bir d (kristallografiyalig' tegislikler arasi'ndag'i' kashiqli'q) o'zine sa'ykes tolqi'n uzi'nlig'i'n saylap aladi' degen so'z (1-kesteni qaran'i'z). Soni'n' menen birge indeksleri hkl , $2h2k2l$, $3h3k3l$, ...bolg'an bir tu'yinler tuwri'si'ni'n' boyi'nsha jaylasqan tu'yinler ushi'n difrakciyalig' mu'yesh θ ni'n' ma'nisleri birdey boladi' ha'm olardi'n' barli'g'i' da fotoplenkani'n' bir noqati'nda difrakciyalig' daq payda etedi. Sonli'qtan lauegrammalardag'i' rentgen refleksleri «ren'li» boli'wi' kerek (yag'ni'y bir reflekti payda etiw ushi'n ha'r qiyli' uzi'nli'qtag'i' tolqi'nlar qatnasadi').

Lauegrammalar tu'siriw ushi'n Laue kamerasi' (RKSO kamerasi') paydalani'ladi'. RKSO kamerasi'ni'n' fotosu'wreti 7-su'wrette keltirilgen.

Aylani'w (terbeliw) usi'li'. Bul usi'l kristallardi'n' atomli'q-kristallig' quri'li'si'n ani'qlawdag'i' tiykarg'i' usi'llardi'n' biri boli'p tabi'ladi'. Aylani'w (terbeliw) usi'li'ni'n' ja'rdeminde elementar quti'ni'n' o'lshemlerin, bir quti'g'a sa'ykes keliwshi atomlardi'n' yamasa molekullardi'n' sani'n, rentgen nurlari'ni'n' o'shiw ni'zamlari'n ani'qlap, kristallardi'n' simmetriyasi'ni'n' ken'isliktegi topari'n ani'qlawg'a shekemgi ma'seleler sheshiledi. Soni'n' menen bir qatarda bul usi'ldi'n' ja'rdeminde kristallardag'i' strukturalig' domenlerdin' quri'li'si', strukturalig' domenler arasi'ndag'i' orientaciyalig' qatnaslar, qatti' denelerdeg'i' fazalig' o'tiwlerdi izertlew mu'mkin [9-12].



10-su'wret. Lauegrammadag'i' refleksler sani'ni'n' ha'm olardi'n' intensivliginin' λ_{max} – λ_{min} ayi'rmasi'nan g'a'rezli ekenligin illyustraciyalawshi' esaplaw joli' menen ali'ng'an su'wretler. *a* su'wrette $\lambda_{min} = 0,36 \text{ \AA}$ ha'm $\lambda_{max} = 3 \text{ \AA}$. *b* su'wrette $\lambda_{min} = 0,036 \text{ \AA}$ ha'm $\lambda_{max} = 30 \text{ \AA}$.

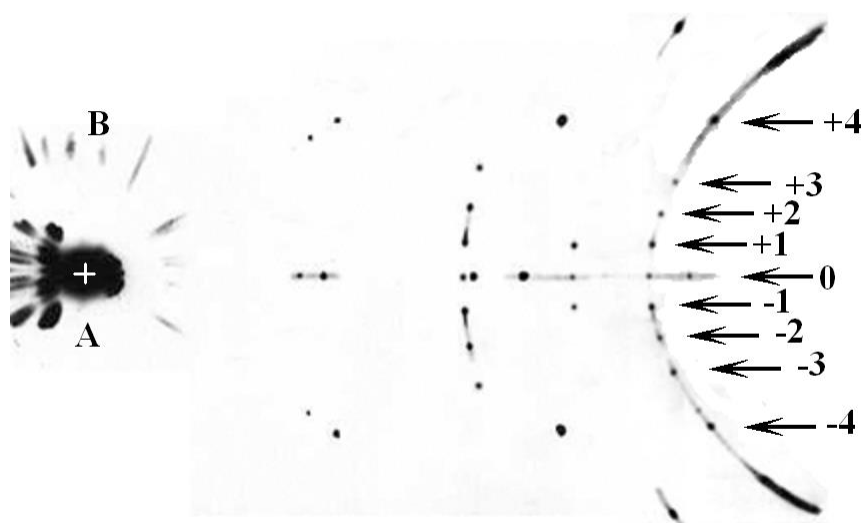
Rentgenogrammalardi' aylani'w (terbelis) usi'li' menen tu'sirgende kristal belgili bir kristallografiyalig' bag'i't a'tirapi'nda aylandi'ri'ladi' yamasa belgili bir mu'yesh intervali'nda mu'yeshlik skannerlenedi (mi'sali' rentgen kamerasi'nda 210 gradustan 225 gradus arali'g'i'nda arman-berman buri'ladi'). Kristalg'a monoxromat rentgen nurlari' yamasa polixromat rentgen nurlari' tu'siriledi. Rentgenogrammalardag'i' dirfakciyalig' refleksler (daqlar) xaraktristikali'q rentgen nurlari'ni'n' difrakciyasi'ni'n' saldari'nan ali'nadi'.

Rentgen trubkasi'nan shi'qqan (trubkani'n' fokusi'ni'n' noqatli'q bolg'ani' maqsetke muwapi'q keledi) rentgen nurlari' uzi'n kollimator arqali' izertlenetug'i'n kristalg'a kelip tu'sedi. Kollimatori'n' eki ushi'nda diametri 0,5-22 millimetrlik do'n'gelek tesikler boli'p, bul tesikler kristalli'q u'glige do'n'gelek formadag'i' rentgen nuri'ni'n' tu'siwin ta'miynileydi. Aylani'w (terbeliw) rentgenogrammalari'n' almastan buri'n goniometrik du'ziliske ornalasti'ri'lg'an u'lg'i Laue usi'li'ni'n' ja'rdeminde qatan' tu'rde bag'i'tlanadi'. Usi'nday aldi'n-ala o'tkerilgen operaciylar kristaldi'n' [100], [010], [001] yamasa basqa da bizin' ushi'n maqsetke muwapi'q bolg'an bag'i'tlari'n rentgen kamerasi'ni'n' aylani'w (terbeliw) ko'sherine da'l parallel etip qoyi'wg'a mu'mkinshilik beredi. Aylani'w rentgenogrammalari' a'dette diametri 86,6 mm bolg'an cilindr formasi'na iye fotokasseta ishindeg'i fotoplenkada payda boladi'.

Joqari'da ayti'li'p o'tilgenindey, aylani'w rentgenogrammasi'nda refleksler qatlamli'q si'zi'qlar dep atalatug'i'n si'zi'qlar boylap jaylasadi' (11-su'wret).

Nolinshi qatlamli'qsi'zi'qtan birinshi (yamasa minus birinshi) katlamli'qsi'zi'qqa shekemgi arali'qti' l arqali' belgileyik. Bunday jag'dayda l arali'g'i'na keri pa'njerede d^* sa'ykes keledi (12-su'wret). Ani'qlama boyi'nsha tuwri' pa'njeredegi tegislikler semeystvosi' arasi'ndag'i' qashi'qli'q bolg'an d shamasi' $1/d^*$ shamasi'na ten'. Olay bolsa $\frac{l}{R} = \tan \varphi$. Bul an'latpada R arqali' cilindr ta'rezli rentgen plenkasi'ni'n' radiusi' belgilengen. Ekinshi ta'repten $\frac{d^*}{R_E} = \tan \varphi = \frac{l}{R}$. Bul an'latpada $R_E = \frac{1}{\lambda}$ arqali' Evald sferasi'ni'n' radiusi' belgilengen. Bul an'latpalardan $d = \frac{R}{l} \lambda$ formulasi'na iye bolami'z. Solay etip aylani'w

(terbelis) rentgenogrammalari' ja'rdeminde biz aylani'w ko'sheri bag'i'ti'ndag'i' kristalli'q pa'njerenin' translyaciya vektori'ni'n' uzi'nli'g'i'n - kristalli'q pa'njerenin' turaqli'si'n ani'qlay alami'z.

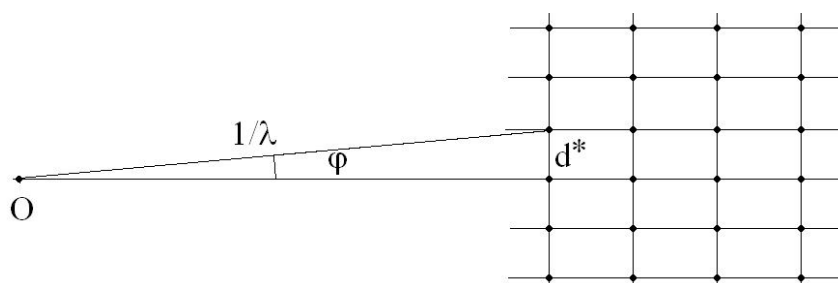


11-su'wret. ZnS kristallari'ni'n' 6H politipinen ali'ng'an terbelis rentgenogrammasi'ni'n' fotosu'wreti. Strelkalar menen qatlamli'q si'zi'qlar, al sanlar menen olardi'n' qatar sani' belgilengen. A arqali' u'lgige tuwri' kelip tu'sken rentgen nuri'ni'n' izi, al V arqali' rentgen spektrinin' polixromat bo'leginin' rentgen plenkasi'nda payda etken daqlari' ko'rsetilgen.

Aylani'w (terbeliw) ko'sheri [0001]bag'i'ti'na sa'ykes keledi ha'm ol vertikal bag'i'tta.

Sonli'qtan su'wrettegi rentgenogramma kristaldi'n' [0001] bag'i'ttag'i' turaqli'si'n ani'qlawg'a mu'mkinshilik beredi.

Terbelis rentgenogrammalari'n indekslew (yag'ni'y ha'r bir reflekske sa'ykes keliwshi kristallografiyalı'q tegislikler semeystvosı'ni'n' kristallografiyalı'q indekslerin ani'klaw) arqali' izertlenip ati'rg'an kristalli'q u'lginin' simmetriyasi'ni'n' ken'isliktegi topari'n ani'qlaw mu'mkin. Biz usi' jerde rentgenogrammalarda ba'rqulla simmetriya orayi'ni'n' qatnasatug'i'nli'g'i'n esletip o'temiz (Fridel ni'zami'). Sonli'qtan rentgenografiyada biz kristalda simmetriya orayi'ni'n' bar yamasa joq ekenligin ani'qlay almaymi'z. Bunday jag'dayda ma'selenin' bir ma'nisli sheshiliwi ushi'n kristaldi'n' basqa da fizikali'q qa'siyetleri haqqi'ndag'i' mag'li'wmatlardi'n' za'ru'rli'gi payda boladi'. Mi'sali' kristal piroelektriklik qa'siyetke iye bolsa simmetriya orayi'ni'n' bunday kristallarda bolmaytug'i'nli'g'i'n ani'q ayta alami'z.



12-su'wret. Aylani'w (terbeliw) rentgenogrammalari' ja'rdeminde aylani'w (terbeliw) ko'sheri bag'i'ti'nda kristalli'q pa'njerenin' translyaciya vektori'ni'n' uzi'nli'g'i'n ani'qlaw ushi'n si'zi'lg'an sxema.

Kristallardi'n' simmetriyasi'ni'n' ken'isliktegi topari'n ani'qlaw kristallardag'i' rentgen nurlari'ni'n' o'shiw ni'zami'n tekserip ko'riw menen a'melge asi'ri'ladi'. Ken'isliktegi ha'r bir

topar belgili bir o'shiw ni'zami' menen ta'riyiplenedi. O'shiw ni'zami' kristallografiyalı'q indekslerdin' belgili bir topari' ushi'n strukturalı'q faktordı'n' nolge ten' ekenligi menen baylani'sli'. O'shiw ni'zami' 230 topardı'n' ha'r bir ushi'n ta'n ha'm bul jag'day «Rentgen kristallografiyasi'ni'n' xalı'q aralı'q kestelerinde» tolı'q tu'rde berilgen.

Aylani'w yamasa terbeliw usi'li' tiykari'nda ali'ng'an rentgenogrammalardı' indekslew processinde Bernal setkasi' ken'nen paydalani'ladi'. Bernal setkasi'n islep shi'g'i'w boyi'nsha rentgenstrukturalı'q analizde ma'sele de bar. Biraq ha'zirgi waqi'tlari' personallı'q kompyuterler jaqsi' rawajlang'an da'wirlerde Bernal setkasi'n jan'asha quri'w ma'sele si pu'tkilley jan'a ma'selelerdin' biri boladı'. Bul ma'seleni sheshiw menen shug'i'llanami'z.

Birinshi gezekte kerı pa'njere koordinatalari'nan cilindr ta'rizli fotoplenkadag'i' (Bernal setkasi'ndag'i') reflekslerdin' koordinatalari' arasi'ndag'i' baylani'sti' qarap shi'g'ami'z. Kerı pa'njerenin' tu'yinlerinin' koordinatalari'n ζ ha'm ξ arqalı' belgileyimiz. Al fotoplenkadag'i' (Bernal setkasi'ndag'i') sa'ykes koordinatalardı' x ha'm y arqalı' belgileyik. Bunday jag'dayda to'mendegidey formulalarg'a iye bolami'z:

$$y = R \frac{\zeta}{\sqrt{1 - \zeta^2}},$$

$$x = R \cdot \text{ArcCos} \left(\frac{2 - \zeta^2 - \xi^2}{2\sqrt{1 - \zeta^2}} \right).$$

Bul an'latpalarda R arqalı' rentgen kamerasi'ni'n' radiusi' belgilengen.

Tegis rentgen plenkası' ushi'n joqari'dag'i' formulalar

$$y = D \frac{2\zeta}{2 - \zeta^2 - \xi^2},$$

$$x = D \text{Tan} \left[\text{ArcCos} \left(\frac{2 - \zeta^2 - \xi^2}{2\sqrt{1 - \zeta^2}} \right) \right]$$

tu'rine iye boladı'.

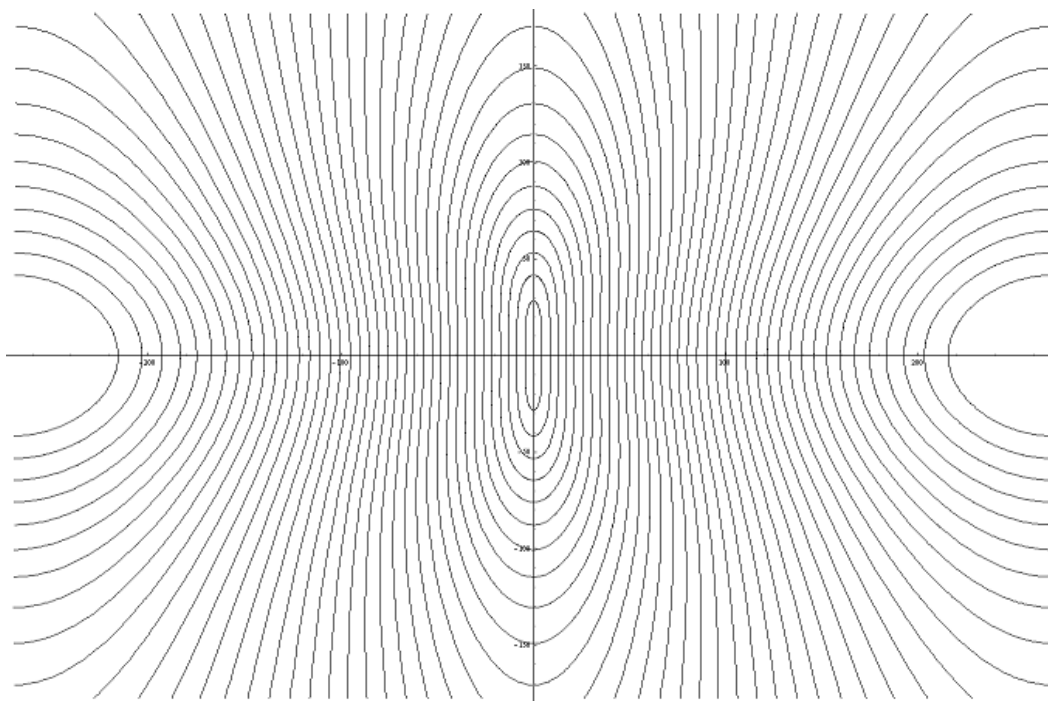
Joqari'da keltirilgen formulalar boyi'nsha esaplawlar ha'm sa'ykes grafikti si'zi'w Mathematica programmalaw tili ja'rdeminde ori'nlandi'. Cilindr tu'rindegi fotoplenka ushi'n ali'ng'an Bernal setkasi' 13-su'wrette, al tegis fotoplenkada ushi'n quri'lg'an Bernal setkasi' 14-su'wrette keltirilgen ($R = 86,6$ mm dep esaplandı'). Setkani'n' bir si'zi'g'i'nsi'zi'w ushi'n arnalg'an sa'ykes matematikalı'q programma

```
R=86; x=0.05; ParametricPlot[{{R*ArcCos[(2-y^2-x^2)/(2*sqrt(1-y^2))],Ry/(2*sqrt(1-y^2))}, {y,-0.7,0.7}}, PlotStyle->Directive[Opacity[3],Black],ImageSize->1400]
```

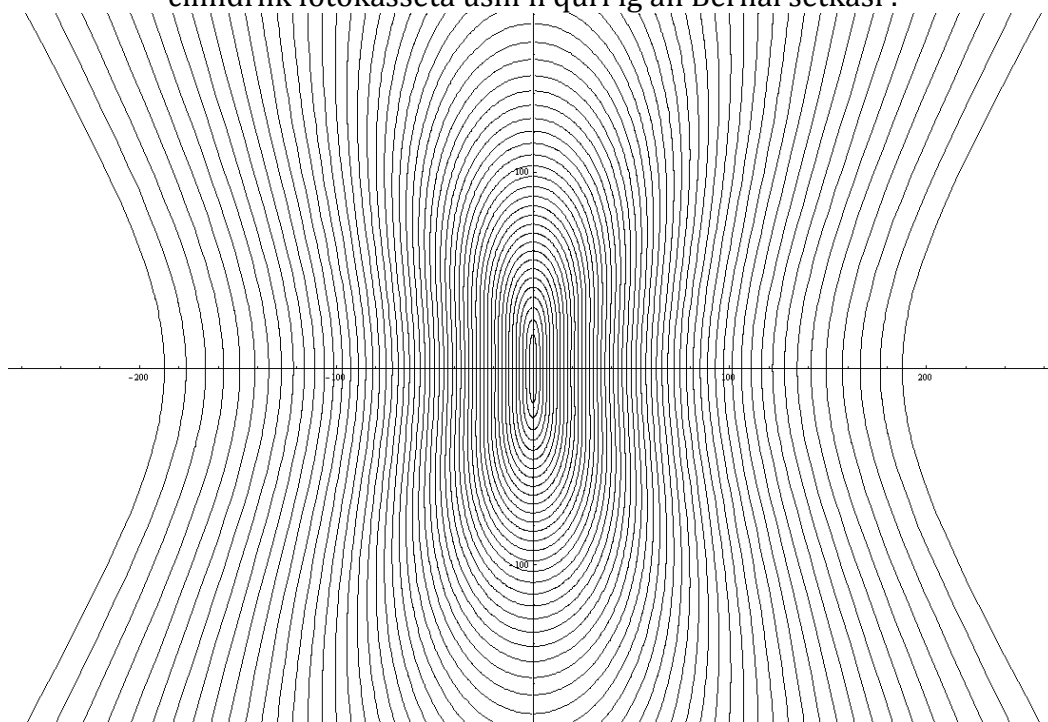
(cilindrilik fotoplenka ushi'n) ha'm

```
R=86; x=0.05; ParametricPlot[{{R*Tan[ArcCos[(2-y^2-(x1)^2)/(2*(2*sqrt(1-y^2)))]], R(2y)/(2-y^2-(x1)^2)}, {y,-0.9,0.9}}, PlotStyle->Directive[Opacity[3],Black],ImageSize->1600]
```

(tegis fotoplenka ushi'n) tu'rine iye boladı'. x boyi'nsha adi'm 0,05ke ten' etip ali'ndi'.



13-su'wret. Personalli'q kompyuterde Mathematica 6 programmalaw tili ja'rdeminde cilindrlik fotokasseta ushi'n quri'lg'an Bernal setkasi'.



14-su'wret. Personalli'q kompyuterde Mathematica programmalaw tili ja'rdeminde tegis fotokasseta ushi'n quri'lg'an Bernal setkasi'.

Untalg'an kristallar usi'li' (poroshok usi'li'). Polikristalli'q materiallardi' yamasa untalg'an kristalli'q zatlardi' izertleytug'i'n a'dettegi a'piwayi' usi'lda u'lgi rentgen nurlari'ni'n' jin'ishke da'stesi menen nurlandi'ri'ladi'. Monoxromat rentgen nurlari'n ali'w u'lken mashqalalardi' payda etetug'i'n bolg'anli'qtan basi'm ko'pshilik jag'daylarda rentgen trubkasi'nan shi'qqan polixromat rentgen nurlari' qollani'ladi'. Rentgenogrammalardag'i' refleksler spektrdin' xarakteristikali'q nurlari'ni'n' difrakciyasi'ni'n' esabi'nan qa'liplesedi, al u'zliksiz spektr rentgen plenkasi'nda tutas fon payda etedi.

Polikristalli'q materiallardi' yamasa untalg'an kristalli'q zatlardi' izertleytug'i'n rentgenografiyali'q usi'ldi' Debay-SHerer usi'li' dep ataydi' (rentgenografiyani'n' en' birinshiler qatari'nda payda bolg'an usi'llari'ni'n' biri).

Difrakciyali'q su'wret a'dette cilindrlik betke ornati'lg'an eni kishi bolg'an rentgen plenksi'na tu'siriledi ha'm oni' debaegramma dep ataydi'. Cilindrdin' orayi'nda izertleniwshi u'lg'i jaylasti'ri'ladi' (8-su'wret). Geypara jag'daylarda debaegramma tegis fotoplenkag'a da tu'siriledi.

Polikristallardag'i' kristallitlerdin' bag'i'tlari', soni'n' menen birge untalg'an kristallardag'i' mayda kristallardi'n' bag'i'tlari' ken'islikte ten'dey itimalli'q penen tarqalg'an. Sonli'qtan bunday u'lgige rentgen nuri' kelip tu'skende Vulf-Bregg sha'rtin (difrakciya sha'rtin) kanaatlandi'ratug'i'n jag'dayda ko'plegen kristallitlerdin' yamasa mayda kristallardi'n' turi'wi' mu'mkin. Bunday kristallitler o'zine kelip tu'sken nurlardi' konusli'q bette jaylasqan bag'i'tlar boyi'nsha difrakciyag'a ushi'ratadi' ha'm tegis fotoplenkada bir daq emes, al do'n'gelek difrakciyali'q refleks payda boladi'. Bul do'n'gelek refleksdin' radiusi'n r arqali' belgileyik. U'lg'i menen fotoplenka arasi'ndag'i' kashi'qli'q R shamasi'na ten' bolsi'n. Bunday jag'dayda $\frac{r}{R} = \tan 2\theta$ shamasi'na ten' boladi' (θ arqali' difrakciyali'q mu'yeshdin' ma'nisi belgilengen). Al difrakciyali'q mu'yesh θ bolsi'n Vulf-Bregg ten'lemesi boyi'nsha kristallografiyali'q semeystvodag'i' tegislikler arasi'ndag'i' qashi'qli'q d_{hkl} shamalari'n ani'qlawg'a mu'mkinshilik beredi.

Solay etip Debay-SHerer usi'li'nda kristallografiyali'q tegislikler arasi'ndag'i' qashi'qli'qlar tikkeley ani'qlanadi' eken. Eger bir sol tegislikler arasi'ndag'i' qashi'qli'qlardi'n' dizimin du'zetug'i'n bolsaq ha'm bul tegislikler ushi'n kristallografiyali'q indekslerdi ani'qlasaq, onda biz kristaldi'n' simmetriyasi'ni'n' ken'isliktegi topari' haqqi'nda tikkeley ga'p ete alami'z.

Debay-SHerer usi'li'ni'n' ja'rdeminde kristalli'q pa'njere turaqli'lari'ni'n' ma'nisin da'l ani'qlaw mu'mkinshiligine iye bolami'z. Haqi'yqati'nda da Vulf-Bregg ten'lemesinen sali'sti'rmali' qa'telik ushi'n

$$\frac{\Delta d}{d} = -ctg \theta \cdot \Delta \theta + \frac{\Delta \lambda}{\lambda}$$

an'latpasi'n alami'z. A'dette $\Delta \lambda = 0$ dep qabi'l etiledi. Difrakciyali'q mu'yesh θ ni'n' ma'nisi 90° qa umti'lg'anda bul sali'sti'rmali' qa'teliktin' ma'nisi nolge umti'ladi'. Biraq bunday u'lken difrakciyali'q mu'yeshlerde difrakciyali'q maksimumlardi' ali'w u'lken qi'yi'nshi'li'qlardi' payda etedi. Soni'n' menen birge bunday u'lken mu'yeshlerde Debay saqi'ynalari'ni'n' (reflekslerin') eni a'dewir u'lkeyedi. Sonli'qtan Debay-SHerer usi'li'nda kristalli'q pa'njerenin' turaqli'lari'ni'n' ma'nislerin da'l esaplaw ushi'n $\theta \rightarrow 90^\circ$ qa karay ekstropolyaciylaydi'.

A'melde ko'pshilik jag'daylarda Nelson-Rayl ekstrapolyaciyali'q funkciyasi' qollani'ladi':

$$F(\theta) = \frac{1}{2} \left(\frac{\cos^2 \theta}{\sin \theta} + \frac{\cos^2 \theta}{\theta} \right)$$

Bul funkciya ekstropolyaciya'dag'i' en' jaqsi' si'zi'qli'li'qti' ta'miyinleydi.

II bap. Rentgen ha'm elektronlardi'n' katti' denelerde shashi'rawi'ni'n' kinematikali'q ha'm dinamikali'q teoriyalari' haqqi'nda

1-§. Rentgen ha'm elektronlar tolqi'nlari'ni'n' difrakciyasi'ni'n' kinematikali'q ha'm dinamikali'q teoriyalari'

Qatti' deneler fizikasi' menen fizikali'q materialtani'wdi'n' rawajlani'wi'nda rentgenstrukturali'q analiz benen elektronli'q mikroskopiya'ni'n' tutqan orni' og'ada ulli'. 1912-ji'li' ashi'lg'an rentgen nurlari'ni'n' kristallardag'i' difrakciyasi' [M. fon Laue (M. von Laue), V.Fridrix (W.Friedrich) ha'm P.Knipping (P.Knippung)] bunday ob'etlerdegi atomlar menen molekulalardi'n' belgili ni'zamlar boyi'nsha ta'rtpi'li' jaylasqanli'g'i' haqqi'ndag'i' birinshi eksperimentalli'q mag'li'wmatlardi' berdi (yag'ni'y kristalli'q deneler rentgen nurlari' ushi'n kristalli'q pa'njerenin' (reshetkani'n') orni'n iyeleydi degen so'z). Rentgen nurlari' difrakciyasi'ni'n' birinshi en' a'piwayi' teoriyasi' (bul teoriyani' kinematikali'q teoriya dep ataydi') 1913-ji'li' Laue ta'repinen berildi. Usi' ji'li' U.L.Bregg (W.L.Bragg) ha'm G.V.Vulf rentgen nurlari'ni'n' difrakciyasi'n kristaldag'a bir birine parallel bolg'an atomli'q tegislikler sistemasi'ndag'i' shashi'rawi' dep interpretaciyaladi' ha'm Vulf-Bregg sha'rti dep atalatug'i'n rentgenografiyadag'i' en' ko'p qollani'latug'i'n

$$2d \sin \vartheta = n\lambda \quad (1)$$

formulasi'n keltirip shi'g'ardi'. Bul an'latpada d arqali' atomli'q tegislikler arasi'ndag'i' qashi'qli'q, ϑ arqali' difrakciyalig' mu'yesh ha'm λ arqali' rentgen nurlari'ni'n' toliq'n uzi'nli'g'i' belgilengen. $n = 1, 2 \dots$ (pu'tin sanlar). (1)-ten'lemeni Vulf-Bregg sha'rti dep ataydi' (ko'pshilik jag'daylarda Vulf-Bregg ten'lemesinde difrakciyalig' mu'yesh θ ha'ripi arqali' belgileydi. Biz bul jumi'si'mi'zda difrakciyalig' mu'yesh ϑ arqali' belgileymiz).

1914-ji'li' SH.Darvin (Ch.Darvin) rentgen nurlari'ni'n' difrakciyasi'ni'n' dinamikali'q teoriyasi'ni'n' tiykari'n do'retti. Bunnan keyin 1917-ji'li' P.Evald (P.Ewald) ortalig'ni' noqatli'q dipolleri menen nurlani'w maydani' arasi'ndag'i' bir biri menen kelisilgen teoriyasi'n islep shi'qti' (teoriya samosoglasovannogo vzaimodeystviya tosheshni'x dipoley sredi' i polya izlusheniya). 1931-ji'li' M.Laue rentgen nurlari'ni'n' difrakciyasi'n nurlani'wdi'n' polyarizaciyalari'wshi'li'g'i' u'sh o'lishemli da'wirli $\chi(r, \omega)$ bolg'an ortalig' qta tarqali'wi'ni'n' elektrodinamikali'q ma'selesi si'pati'nda sheshiw menen shug'i'llandi'.

Na'tiyjede XIX a'sirdin' ekinshi yari'mi'nda rawajlang'an fizikali'q kristallografiya eksperimentalli'q tasti'yi'qlani'wg'a iye boldi'. Da'rha'l rentgen difraktometriyasi', keyinirek rentgen topografiyasi' qaliplesti ha'm tez pa'tler menen rawajlana basladi'. Ilimpazlar kristalli'q denelerdegi difrakciyag'a ushi'rag'an nurlardi'n' intensivligin u'yreniw menen sol denelerdin' atomlardi'n' qanday ni'zamlig'lar menen jaylasqanli'g'i'n ani'qlaw usi'llari'n islep shi'qti'. Da'slepki da'wirlerde kristarli'q pa'njerenin' oraylasig'wleri' (ko'lemde, qatpalda, bazada oraylasqan kristalli'q quri'li'lar, krisladdig' pa'njerelele), keyinirek quramali' organikali'q ximiyali'q birikpelerdegi atomlardi'n' elementar quti'lardi'g'i' koordinatalari' ani'qlana basladi'. Son'g'i' 10 ji'l ishindeg'i' DNK molekulalari'ni'n' quri'li'si'n ani'qlaw boyi'nsha ori'nlang'an jumi'slar bul bag'dardag'i' islengen jumi'slardi'n' en' jokarg'i' shi'n'i' boli'p tabi'ladi' dep esaplanadi'.

Rentgen nurlari'ni'n' difrakciyasi' tiykari'nda do'retilgen barli'q usi'llardi'n' ji'ynag'i'n (rentgen plenikasi'nda difrakciyalig' su'wretlerdin' ali'ni'wi', rentgen topografiyasi'ni'n' ko'p sanli' sxemalari', rentgen difraktometriyasi', parallel da'stelerdegi ha'm tarqali'wshi' da'stelerdegi rentgen nurlari'ni'n' difrakciyasi', kristallardi'g'i' elektronli'q ti'g'i'zli'qtardi'n' izertleniwi, rentgen nurlari'ni'n' difrakciyasi'ni'n' kinematikali'q ha'm dinamikali'q teorialari' ha'm usi'g'an sa'ykes usi'llar) biz bir so'z benen kristallar rentgenografiyasi' dep ataymi'z.

Kvant mexanikasi'ni'n' rawajlani'wi', a'sirese korpuskulali'q dualizm menen De Broyl gipotezasi' elektronlardi'n' kristalli'q denelerdegi difrakciyasi'n a'melge asi'ri'wg'a ali'p keldi. Na'tiyjede 1930-ji'llarlan keyin elektron mikroskoplari', keyinirek olardi'n' jan'a modifikaciyalari' bolg'an elektronli'q ha'm ionli'q proektorlar, rastli'q elektronli'q mikroskoplar do'retildi. Na'tiyjede adamzat ayi'ri'm atomlardi'n' su'wretlerin ko'riw mu'mkinshiligine iye boldi'.

Rentgenografiya ha'm elektronli'q mikroskopiyani'n' ja'ne bir a'hmiyeti ha'r qi'yli' si'rtqi' ta'sirlerdin' ta'sirinde (mexanikali'q deformaciya, qi'zdi'ri'w ha'm salqi'nlati'w, elektr ha'm magnit maydanlari'ni'n', jaqti'li'qti'n', radioaktivli nurlardi'n') kristallarda boli'p o'tetug'i'n' strukturali'q aylani'slardi' izertlew menen baylani'sli'. Usi'ni'n' na'tiyjesinde kristalli'q denelerdin' fizika-ximiyali'q ha'm texnologiyali'q qa'siyetlerinin' olardi'n' ayqi'n' atomli'q-kristalli'q ja'ne substrukturali'q qa'ddidegi quri'li'si'nan g'arezli ekenligin ko'rsetti. Na'tiyjede berilgen atomli'q-kristalli'q quri'li'sqa ha'm substrukturag'a, usi'g'an sa'ykes fizikali'q ha'm texnologiyali'q qa'siyetlerge iye kristalli'q deneler ali'w problemi' qa'liplesti. Bul bag'darda Jer ju'zindegi en' rawajlang'an ellerinin' (AQSH, Angliya, Franciya, Germaniya, Rossiya, YAponiya ha'm basqa da eller) ilimpazlari'ni'n' birlesip bir bag'dardag'i' ti'ri'si'wlari'ni'n' na'tiyjesinde (fizikali'q materialtani'w, qatti' deneler fizikasi', yari'm o'tkizgishler fizikasi' ha'm tag'i' basqalar) u'lken jetiskenliklerge erisildi. Usi'ni'n' na'tiyjesinde ha'zirgi waqi'tlarda kosmos texnikasi'nda, kompyuterler ha'm basqa da elektronli'q abap-u'skenelr sog'i'wdi' ken'nen paydalani'p ati'rg'an jan'a materiallar do'retildi.

2-§. Dirfrakciyag'a ushi'rag'an rentgen nurlari'ni'n' intensivligi (kinematikali'q ha'm dinamikali'k ma'seleler)

Kristalli'q denelerge tolqi'n uzi'nli'g'i' 0,1-10 angstrom bolg'an elektromagnit tolqi'nlar (rentgen tolqi'nleri') yamasa elektronlar tolqi'nleri' kelip tu'skende joqari'da keltirilib o'tilgen (1)-Vulf-Bregg sha'rti boyi'nsha difrakciyag'a ushi'raydi'. Difrakciyag'a ushi'rag'an nurlardi' (basqa so'z benen aytqanda difrakciyalig'a maksimumlar) kristaldag'i' atomlarda shashi'rag'an nurlar birdey fazada tarqalatug'i'n' bag'i'tlarda payda boladi. Kristallarda fazirovkani'n' bunday sha'rti bir o'lshemli difrakciyalig'a pa'njeredegi u'sh sha'rttin' bir waqi'tta ori'nlani'wi'n talap etedi:

$$\begin{aligned} a(\cos \alpha - \cos \alpha_0) &= H\lambda; & b(\cos \beta - \cos \beta_0) &= K\lambda; \\ c(\cos \gamma - \cos \gamma_0) &= L\lambda. \end{aligned} \quad (2)$$

Bul an'latpadag'i' a , b ha'm c lar kristaldi'n' pa'njeresinin' u'sh ko'sher boyi'nsha da'wirleri, α_0 , β_0 ha'm γ_0 arqali' kristalg'a kelip tu'sken nurdi'n', al α , β ha'm γ ler arqali' difrakciyag'a ushi'rag'an nurdi'n' kristaldi'n' pa'njeresinin' ko'sherleri arasi'ndag'i' mu'yesh belgilengen. H , K ha'm L arqali' atomli'q tegisliklerdin' kristallografiyalig'a sistemalari'ni'n' indekslerine proporcional bolg'an pu'tin sanlar belgilengen. (2)-ten'lemelerdi Vulf-Bregg sha'rti tu'rinde de jazi'w mu'mkin. α_0 , β_0 ha'm γ_0 mu'yeshleri ani'q ma'nislerge iye bolg'anli'qtan, al α , β ha'm γ shamalari' bir birinen g'a'rebsiz bolg'anli'qtan (2)-sistema ju'da' az pu'tin sanli'q sheshimlarga iye boladi. Basqa so'z benen aytqanda qozg'almaytug'i'n kristallarg'a monoxromatik nurlar tu'skende difrakciyalig'a maksimumlardin' sani' ju'da' az boladi'.

Kristaldi'n' shashi'rati'w qa'biletligi oni'n' o'lshemlerinen ha'm quri'li'si'nan g'a'rezli boladi. Fragmentlerinin' o'lshemleri $l \leq 10^{-5}$ sm bolg'an ideal mozaykali'q kristallar ha'm polikristallarda shashi'rag'an nurlani'wlar rentgen nurlari'ni'n' difrakciyasi'ni'n' kinematikali'q jaqi'nlati'w (kinematizatsiya) ja'rdeminde ta'riyiplenedi. Bunday shashi'rawdi' u'yreniya isleri tiykari'nan 1950-ji'llarg'a shekem pitken ha'm olar ha'zirgi waqi'tlari' og'ada siyrek ushi'rasatug'i'n kitaplarda toli'q bayan etilgen [1-3]. Rentgen nurlari'ni'n' difrakciyasi'ni'n' kinematikali'q teoriyasi'nda kristalda shashi'rag'an tolqi'nni'n' intensivligi kristalg'a kelip tu'siwshi nurdi'n' intensivliginen kishi dep esaplanadi. Bunday jaqi'nlati'wdi'n' ko'pshilik kristallar ushi'n duri's ekenligi ba'rshege ani'q. Klassikali'q elektrodinamikag'a sa'ykes nurdi'n' elektr maydani' E_0 , jiyiligi ω ha'm tolqi'n vektori' k_0 bolg'an kristalg'a kelip tu'siwshi tolqi'n atomlardin' o'zgermeli dipollik momentin payda

etedi. Usi'ni'n' na'tiyjesinde ha'r bir atom ekinshi (shashi'rag'an) sferali'q tolqi'nni'n' deregine aylanadi'. Bunday shashi'rag'an sferali'q tolqi'nni'n' amplitudasi' atomni'n' shashi'rati'wshi'li'q qa'siyeti arqali', al fazasi' sol atomni'n' kristaldag'i' iyelegen orni' menen ani'qlanadi'. bir atom ta'repinen shashi'rati'lg'an maydanni'n' elektr maydani'ni'n' kernewlilik vektori'

$$\mathbf{E}_j(s) = \frac{1}{R} [\mathbf{k}_s [\mathbf{k}_s, \mathbf{k}_0]] \left(\frac{e^2}{m\omega^2} \right) f(s) \exp[i(\mathbf{s} \cdot \mathbf{r}_j)] \quad (3)$$

an'latpasi'ni'n' ja'rdeminde ani'qlanadi'. Bul an'latpada $f(s)$ arqali' atomli'q faktor (bul faktor o'z ishine kristaldi'n' temperaturasi'na baylani'sli' bolg'an Debay-Uoller faktori'n da aladi' dep esaplang'an), $\mathbf{r}_j = m\mathbf{a} + n\mathbf{b} + p\mathbf{c}$ arqali' j – atomni'n' radius-vektori', m, n ha'm p arqali' pu'tin sanlar, $\mathbf{s} = \mathbf{k}_s - \mathbf{k}_0$ arqali' shashi'raw vektori' belgilengen. $s = \frac{4\pi \cos \vartheta}{\lambda}$, 2ϑ arqali' $\mathbf{k}_0$ ha'm $\mathbf{k}_s$ vektorlar arasi'ndag'i' mu'yesh, R arkali' shashi'raw noqati'nan baqlaw noqati'na shekemgi arali'q belgilengen. ϑ mu'yeshin shashi'raw mu'yeshi yamasa Bregg mu'yeshi dep ataydi'. Qos vektorli'q ko'beyme polyarizatsiyali'q g'a'rezlilik $\mathbf{E}_j(s)$ ti ani'qlaydi'. Shashi'rag'i'n tolqi'nni'n' toli'q amplitudasi' $\mathbf{E}(s)$ kristaldag'i' barli'q N dana atomdag'i' shashi'rag'an tolqi'nlaridn' amplitudalari'ni'n' qosi'ndi'si'na ten': $\mathbf{E}(s) = \sum_{j=1}^N \mathbf{E}_j(s)$.

Bir birlik denelik mu'yesh ishindeg'i' shashi'rag'an tolqi'nlaridn' sali'sti'rmali' intensivligi

$$\frac{I_s}{I_0} = \int |\mathbf{E}(s)|^2 R^2 d\Omega = \sigma_e P(\vartheta) |f(s)|^2 \sum_{j=1}^N \sum_{k=1}^N \exp[i(\mathbf{s}, \mathbf{r}_j - \mathbf{r}_k)] \quad (4)$$

an'latpasi' ja'rdeminde esaplani'ladi'. Bul an'latpada I_0 arqali' kristalg'a kelip tu'sken rentgen nuri'ni'n' intensivligi, $\sigma_e = \left(\frac{e^2}{mc^2} \right)^2$ arqali' elektron ta'repinen shashi'raw kese-kesimi (m arqali' elektronni'n' massasi', e arqali' zaryadi', c arqali' jaqti'li'qti'n' tezligi belgilengen), al $P(\vartheta)$ arqali' polyarizatsiyali'q eo'beytiwshi an'lati'lg'an. Polyarizatsiyalang'an nurlani'w ushi'n $P(\vartheta) = (1 + \cos^2 2\vartheta)/2$. $\sigma_e P(\vartheta) |f(s)|^2$ ko'beytiwshisi atom ta'repinen shashi'raw kese-kesimine ten'. (4)-an'latpadag'i' eksponentalar j - ha'm k -atomlarda shashi'rag'an tolqi'nlar arasi'ndag'i' fazalardi'n' ji'lji'wi'n esapqa aladi'. Elementar quti'si'nda bir neshe atomlar bar kristallar ushi'n (4)-an'latpadag'i' $f(s)$ ti strauturali'q faktor $F(s)$ penen almasti'ri'w kerek. Bunday jag'dayda $\mathbf{r}_j$ shamasi' j – elementar quti'ni'n' radius-vektori' boli'p tabi'ladi'.

Ideal kristallar ushi'n (4)-an'latpadag'i' summalar geometriyalig' progressiyalar boli'p tabi'ladi'. Eger kristall paralelepiped formasi'na iye bolsa, onda $N = N_a N_b N_c$ elementar quti'g'a iye boladi' (demek a ko'sheri bag'i'ti'nda N_a elementar quti' boladi' degen so'z). Bunday jag'dayda (4)-an'latpadag'i' summalar Laue interferentsiyali'q funktsiyalari'na ali'p keledi:

$$\frac{\sin^2 \left[N_a \left(\frac{\mathbf{s}\mathbf{a}}{2} \right) \right]}{\sin^2 \left(\frac{\mathbf{s}\mathbf{a}}{2} \right)} \cdot \frac{\sin^2 \left[N_b \left(\frac{\mathbf{s}\mathbf{b}}{2} \right) \right]}{\sin^2 \left(\frac{\mathbf{s}\mathbf{b}}{2} \right)} \cdot \frac{\sin^2 \left[N_c \left(\frac{\mathbf{s}\mathbf{c}}{2} \right) \right]}{\sin^2 \left(\frac{\mathbf{s}\mathbf{c}}{2} \right)} \quad (5)$$

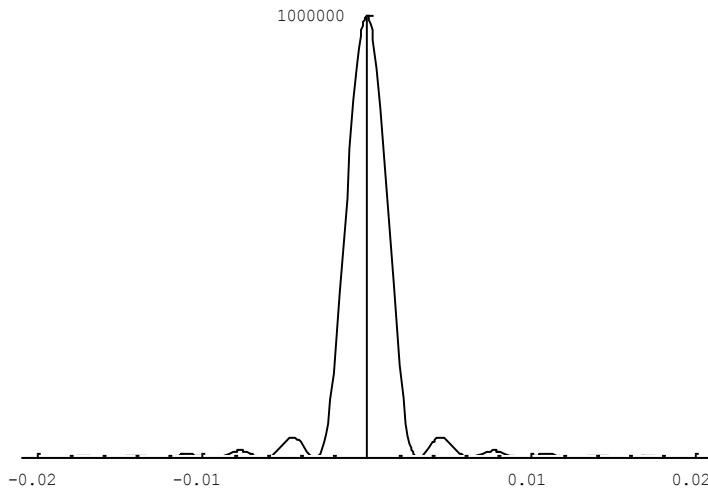
Bul funktsiyani'n' maksimalli'q ma'nisi (difraktsiyali'q maksimumi') s, a, b, c lardi'n' (2)-Laue sha'rtlerine ekvivalent bolg'an ma'nislerinde: $(\mathbf{s}\mathbf{a}) = 2\pi H$, $(\mathbf{s}\mathbf{b}) = 2\pi K$ ha'm $(\mathbf{s}\mathbf{c}) = 2\pi L$ bolg'anda $(N_a N_b N_c)^2$ shamasi'na, yag'ni'y kristaldi'n' ko'lemi V^2 qa ten'. Bcl sha'rtler s

shashi'raw vektori'ni'n' ma'nisinin' kerri pa'njere vektori' $\mathbf{g}$ g'a ten' ekenligin bildiredi, yag'ni'y $\mathbf{k}_g = \mathbf{k}_0 + \mathbf{g}$. Tu'siw tegisligindagi difrakciyalig' maksimumli'n' mu'yeshlik ken'ligi $\frac{2\pi}{N_g}$ g'a ten'. Bul jerde N_g arqali' $\mathbf{g}$ vektori'ni'n' bag'i'ti'ndagi' kristaldi'n' da'wirlerinin' sani'. Mi'sali' $N_g \sim 10^4$ bolsa, onda maksimumli'n' mu'yeshlik ken'ligi $\sim 10^{-4}$ radiang'a ten' boladi'. Kristaldi'n' ko'lemi u'lkeygende bas difrakciyalig' maksimumni'n' intensivligi $\sim V^2$ shamasi'na tuwri' proporcional o'sedi, al olardi'n' ken'ligi $\sim V^{-\frac{2}{3}}$ shamasi'na proporcional o'zgeredi (1-su'wret).

Kristaldi'n' mu'yeshler boyi'nsha integrallig' shashi'rati'wshi'li'q qa'biletligi onnan o'tiwshi nurlari' ushi'n kristaldi'n' ko'lemi V g'a proporcional, yag'ni'y sali'sti'rmali' integrallig' intensivligi

$$I_i^g = Q(g)V \quad (6)$$

shamasi'na ten'. Bul an'latpadagi' $Q(g) = K\sigma_e P(\vartheta) L(\vartheta) |F(g)|^2 \lambda^3 / V_{el}^2$ shamasi' kristaldi'n' sali'sti'rmali' shashi'rati'wshi'li'q qa'libetligi dep ataladi', λ arqali' nurlani'wdi'n' tolqi'n uzi'nli'g'i', V_{el} arqali' elementar kuti'shani'n' ko'lemi belgilengen. K konstantasi'ni'n' ma'nisi integrallig' faktor $L(\vartheta)$ difrakciyani'n' sxemasi' tiykari'nda ani'qlanadi'. Mozayikalig' kristallardagi' rentgen nurlari'ni'n' difrakciyasi'nda ekilemenshi (vtorishnaya) ekstinkciya qubi'li'si' ori'n aladi'.



1-a su'wret.

$\frac{\sin^2[N_a(\frac{sa}{2})]}{\sin^2(\frac{sa}{2})}$ funkciyasi'ni'n' grafigi.

A'piwayi'li'q ushi'n $\frac{[\sin(kx)]^2}{[\sin(x)]^2}$ funkciyasi' ali'ni'p, $k = 1000$, x ti'n' shamasi' -0,02 den +0,02 ge shekem o'zgeritilgen. Mathematica 5 tilinde grafik du'zilgen.

Da'wirlik quri'li'si'nda buzi'qli'qlarg'a iye, sonday-aq amorf denelerde, shiyshelede ha'm suyi'qli'qlarda rentgen nurlari'ni'n' kinematikali'q difrakciyasi'nda intensivlikti atomlardi'n' ken'isliktegi mu'mkin bolg'an barli'q konfiguraciyalari' boyi'nsha (4)-an'latpa boyi'nsha ortashalap tabadi'. Al atomlardi'n' ken'isliktegi mu'mkin bolg'an barli'q konfiguraciyalari' $\omega(r_{jk})$ korrelyaciya funkciyasi' arqali'

$$\begin{aligned} & \left\langle \frac{I_s}{I_0 \sigma_e P(\vartheta) |f(s)|^2} \right\rangle = \\ & = N + N(N-1) \int_0^V \int_0^V \exp[i(\mathbf{s}, \mathbf{r}_j - \mathbf{r}_k)] \frac{dv_j}{V} \frac{dv_k}{V} - \\ & - N(N-1) \int_0^V \int_0^V \omega(r_{jk}) \exp[i(\mathbf{s}, \mathbf{r}_j - \mathbf{r}_k)] \frac{dv_j}{V} \frac{dv_k}{V} \end{aligned} \quad (7)$$

an'latpasi' tu'rinden esaplanadi'. N ge proporcional ag'za N atomnan turatug'i'n ta'rpitke sali'nbag'an ji'ynaqtan nurlani'wdi'n' shashi'rawi'n ta'riyipleydi. Ekinshi ag'za – kristaldi'n' formasi'ni'n' fure-obrazi'ni'n' modulinin' kvadrati' Fraungofer difrakciyasi'na sa'ykes keledi (Fraungofer difrakciyasi' – parallel nurlardi'n' difrakciyasi').

Polikristalli'q ob'ektler ushi'n $\omega(r_{jk})$ funkciyasi' a'dette izotrop boli'p, sonli'qtan difrakciyag'a ushi'rag'an nurdi'n' intensivligi ob'ektke kelip tu'siwshi nurg'a sali'sti'rg'anda aksialli'q simmetriyag'a iye. Difrakciyali'q maksimumlar saqi'ynalar tu'rine iye boladi', olardi'n' intensivligi ϑ mu'yeshinin' u'lkeyiwi menen $\left|f\left[\sin\left(\frac{\vartheta}{\lambda}\right)\right]\right|^2$ shamasi'na proporcional tez kemeyedi.

Rentgen nurlari'ni'n' difrakciyasi'ni'n' kinematikali'q jaqi'nulasi'wi' to'mende keltirilgen (9)-ten'lemenin' sheshiminin' Bornli'q jaqi'nulasi'wi' boli'p tabi'ladi'. Kristaldi'n' nurlani'w menen ta'sirlesiwini'n' diskret (atomli'q faktor $f(g)$ tiykari'ndag'i') ha'm kontinualli'q (polyarlani'w $\chi(\mathbf{r}, \omega)$ tiykari'ndag'i') ta'rpileniwi $\chi_g = -4\pi \left(\frac{e^2}{m\omega^2}\right) \frac{1}{V_{el}} F(\mathbf{g})$ an'latpasi' menen ko'rsetiledi. Bul an'latpadag'i' χ_g shamasi' $\chi(\mathbf{r}, \omega)$ funkciyasi'n keri pa'njere vektori' $\mathbf{g}$ boyi'nsha qatarg'a jayg'andag'i' fure-qurawshi' (fure-komponenta). Bul qatnasti' qollani'p (6)-integralli'q shashi'rati'wshi'li'q qa'biletlikti mi'na tu'rde ko'rsetiwge boladi':

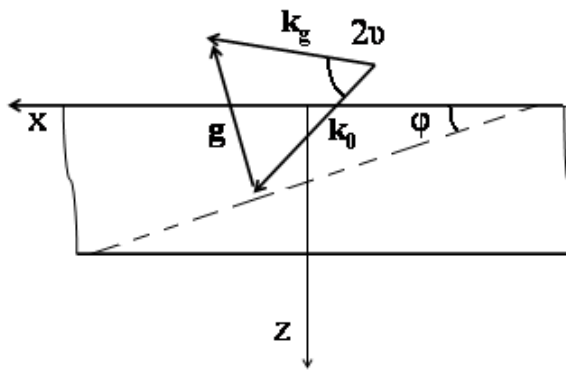
$$\frac{I_g}{I_0} - \pi^2 \frac{1 + \cos^2 2\vartheta}{2 \sin 2\vartheta} |\chi_g|^2 \frac{V}{\lambda}. \quad (8)$$

Eger ideal kristaldi'n' si'zi'qli' o'lshemleri $l > 10^{-5}$ sm bolsa, onda kinematikali'q jaqi'nulasi'wdi' qollani'wg'a bolmaydi'. Rentgen nurlari'ni'n' difrakciyasi' bunday jag'daylarda dinamikali'q teoriya ja'rdeminde ta'riyiplenedi. Bul teoriya boyi'nsha ideal kristaldi'n' sali'sti'rmali' ha'm integral shashi'rati'wshi'li'q qa'biletligi ha'm oni'n' ko'lemindegi maydanni'n' quri'li'si' rentgen nurlari'ni'n' difrakciyasi'ni'n' kinematikali'q teoriyasi'nan pu'tkilley basqasha tu'rge iye boladi'.

Rentgen nurlari'ni'n' difrakciyasi'ni'n' dinamikali'q teoriyasi' difrakciyag'a ushi'rag'an nurdi'n' kristalg'a kelip tu'siwshi nurg'a keri ta'sirin esapqa alg'an halda tolqi'n ten'lemesin elektr awi'si'wi' $\mathbf{D}(\mathbf{r}, \omega)$ vektori' ushi'n toli'g'i'raq sheshiwge tiykarlang'an [4-5].

$$\Delta \mathbf{D} + k^2 \mathbf{D} \approx -\text{rot rot } (\chi \mathbf{D}). \quad (9)$$

Bul anlatpani'n' on' ta'repi kristalda si'rtqi' ta'sirde (rentgen nurlari'ni'n' kelip tu'siwinin' ta'sirinde) qozdi'ri'lg'an ekinshi maydan boli'p tabi'ladi' (Biz ori's terminologiyasi'nda qa'liplesken «vtorishnoe pole» so'zin «ekinshi maydan» dep awdarami'z). (9) di' sheshiwidin' tiykarg'i' usi'li' Fure usi'li' boli'p tabi'ladi'. Bul usi'l «dispersiyali'q bet» tu'sinigine ali'p keledi [1, 3]. (9) di' sheshiw ushi'n a'stelik penen o'zgeriwshi amplitudalar usi'li' da qollani'ladi' («Metod medlenno menyayushixsya amplitud» na'zerde tuti'lmaqta).



1-b su'wret.

Kristalli'q plastinkadag'i' eki nurli' difrakciya. 2φ arqali' kristaldan o'tiwshi k_g ha'm kristalg'a tuwri' kelip tu'siwshi vektor k_0 arasi'ndag'i' mu'yesh, φ arqali' x ha'm shashi'rati'wshi' atomli'q tegislik (punktir menen ko'rsetilgen) arasi'ndag'i' mu'yesh belgilengen. g bolsa difrakciya vektori' (keri pa'njere vektori').

Rentgen nurlari'ni'n' difrakciyasi'ni'n' dinamikali'q teoriyasi'ni'n' o'zine ta'n o'zgesheliklari' eki tolqi'n esapqa ali'natug'i'n a'piwayi' jag'dayda ayqi'n ko'rinedi. Bul eki tolqi'nni'n' birinshisi tuwri' o'tken tolqi'n (0), al ekinshisi difrakciyag'a ushi'rag'an tolqi'n (g) boli'p tabi'ladi'. En' a'hmiyetli jag'daylardi'n' biri kristalli'q plastinkadag'i' tegis tolqi'nni'n' difrakciyasi' boli'p tabi'ladi' (1-b su'wret).

(9)-ten'lemenin' sheshimi kristallarda shashi'rag'an tolqi'nlar (Breg shashi'rawi', Bul jag'dayda difrakciyalig' su'wret rentgen nurlari'ni'n' degeri menen kristaldi'n' arali'g'i'na qoyil'g'an fotoplenkada ali'nadi') ushi'n bir tu'rli, al kristall arqali' o'tken difrakciyag'a ushi'rag'an tolqi'nlar (Laue o'tiwi) ushi'n pu'tkilley basqa tu'rge iye boladi' (Bul jag'dayda kristall difrakciyalig' su'wret ali'natug'i'n fotoplenka menen rentgen nurlari'ni'n' deregi arasi'na qoyiladi'). Biz bul jag'daylardi' qarap qarap shi'g'i'w menen shug'i'llanbaymi'z.

Breg shashi'rawi' menen Laue o'tkeriwi monoxromatik ha'm tegis parallel rentgen nurlari'n ali'w ushi'n ken'nen qollani'ladi'.

Gamma nurlari'ni'n' neytronlardi'n' ha'm elektronlardi'n' difrakciyasi' o'zlerine ta'n o'zgesheliklarga iye boladi'. Bul o'zgeshelikler ta'sirlesiw shamasi' ha'm tolqi'n uzi'nli'qlari' menen baylani'sli'. Dinamikali'q difrakciya optikali'q diapazonda da xoleristikali'q ha'm kolloidli'q suyi'q kristallardi' izertlew processinde baqlanadi'. Endigi paragrafta biz elektronlardi'n' difrakciyasi'n qarap o'temiz.

3-§. Difrakciyag'a ushi'rag'an elektronlardi'n' intensivligi

Elektronlardi'n' difrakciyasi' dep a'dette olardi'n' kristallardag'i' yamasa suyi'qli'qlar menen gazlerdin' molekulari'ndag'i' serpimli shashi'rawi'ni'n' kelip tu'sken da'stenden bazi' bir mu'yeshke buri'lg'an basqa da'stenin' payda boli'wi'na aytadi'. Bul da'stenin' kelip tu'sken da'stege sali'sti'rg'andag'i' bag'i'ti', intensivligi shashi'rati'wshi' ob'ekttin' quri'li'si'nan g'a'rezli. 1927-ji'di' K.Devisson (C.Davisson) ha'm L.Djermer (L.Garmer) ta'repinen ashi'lg'an elektronlardi'n' difrakciyasi' L. de Broyldin' (L. de Broglie) bo'lekshelerdin' tolqi'nli'q qa'siyetleri haqqi'ndag'i' gipotezasi'n toli'q da'lilledi.

Biz da'slep elektronlar tolqi'nlarini'n' uzi'nli'g'i'n esaplaw menen shug'i'llanami'z ha'm usi' jerde belgili bolg'an ilimiy a'debiyatta usi'nday esaplawlar ju'rgizgende metodikali'q jaqtan u'lken qa'teliklarga jol qoyi'li'p ati'rg'anli'g'i'n atap o'temiz. Derlik barli'q a'debiyatlarda (mi'sali' elektroli'q mikroskopiya boyi'nsha ko'pshilikke belgili P.Xirshti'n', A.Xovidin' ha'm basqalardi'n' «Elektronnaya mikroskopiya tonkix kristallov» kitabi', Fizikali'q enciklopediyani'n' 1-tomi'ndag'i' «Difrakciya elektronov» atli' maqala) massani'n' tezlikke baylani'sli' dep esaplap ati' shi'qqan (shawqi'mi' jer jarg'an) $m = m_0 / \sqrt{1 - v^2/c^2}$ formulasi'nan paydalanadi'. Bul formulani' tek esaplawlardi' jen'illestiriw ushi'n g'ana paydalani'w mu'mkin. Al haqi'yqati'nda massa relyativistlik invariant boli'p, oni'n' ma'nisi tezlikten g'a'rezli emes.

De Broylidi'n' formulasi'

$$\lambda = \frac{h}{p}. \quad (10)$$

Bul an'latpada $h = 6,6260755 \cdot 10^{-27}$ erg·s, al impuls $p = \frac{mv}{\sqrt{1-v^2/c^2}}$ formulasi' ja'rdeminde esaplani'ladi'. Demek tezliktin' qa'legen ma'nisi ushi'n (10)-an'latpani' bi'layi'nsha jazi'wi'mi'z kerek:

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{mv} \sqrt{1 - v^2/c^2} \quad (11)$$

tu'rinde jazi'wi'mi'z kerek.

Katod penen anod arasi'nda elektron elektr maydani'ni'n' ta'sirinde $E = eU$ energiyasi'na iye boladi'. Bul an'latpada U arqali' anod penen katod arasi'ndag'i' kernew (anodli'q kernew), al e arqali' elektronni'n' zaryadi' belgilengen. E energiyasi' ushi'n $E = \frac{mc^2}{\sqrt{1-v^2/c^2}}$ formulasi' ori'n aladi' [8]. Bul massasi' m ha'm tezligi v bolg'an elektronni'n' toli'q energiyasi' boli'p tabi'ladi'. Bizge kinetikali'q energiya E_{kin} kerek, al $E_{kin} = \frac{mc^2}{\sqrt{1-v^2/c^2}} - mc^2 = eU$ shamasi'na ten' (kinetikali'q energiya = toli'q energiya - ti'ni'shli'qtag'i' energiya). Bunnan

$$v = c \sqrt{1 - \frac{m^2 c^2}{(eU + mc^2)^2}} \quad (11)$$

an'latpasi'n alami'z. (11)-an'latpadag'i' tezliktin' ma'nisin (11)-an'latpag'a qoyi'wi'mi'z kerek. Bunday jag'dayda bir qansha a'piwayi'lasti'ri'wlardan keyin mi'naday an'latpalarg'a iye bolami'z:

$$\lambda = \frac{h}{mc \sqrt{1 - \frac{m^2 c^4}{(eU + mc^2)^2}}} \frac{mc^2}{eU + mc^2} = \frac{hmc^2}{mc \sqrt{e^2 U^2 + 2eUmc^2}} \quad (12)$$

Eger elektronni'n' massasi'ni'n', zaryadi'ni'n', Plank turaqli'si'ni'n', jaqti'li'qti'n' vakuumdegi tezliginin' SGS sistemasi'ndag'i' ma'nislerin, sonday-aq $1 \text{ sm} = 10^{-8}$ angstrom ekenligin (12)-formulag'a qoyatug'i'n bolsaq, onda

$$\frac{1.98645 \cdot 10^{-8}}{\sqrt{2.62344 \cdot 10^{-18} U + 2.56697 \cdot 10^{-24} U^2}} \text{ angstrom} \quad (13)$$

formulasi'na iye bolami'z. Bul formula boyi'nsha U di'n' ma'nisleri voltlerde beriliwi kerek, al na'tiye (ko'rinip turg'ani'nday) angstromlerde ali'nadi'.

Eger biz (12)- ha'm (13)-formulalarg'a $U = 100000$ volt ma'nisin qoysaq, onda $\lambda = 0.0370444 \text{ Å}$ tolqi'n uzi'nli'g'i'n alami'z. Bul arnawli' kestelerde berilgen tolqi'n uzi'nli'g'i'ni'n' ma'nisine da'l sa'ykes keledi.

Eger biz internacionalli'q birlikler sistemasi'nan (SI) paydalanatug'i'n bolsaq, onda $m_e = 9,10938188 \cdot 10^{-31}$ g; $c = 2,99792458 \cdot 10^8$ sm/c; $e = 1,602176462 \cdot 10^{-19}$ Kl; $h = 6.62606876 \cdot 10^{-34}$ Dj·s [9] ha'm (13) tin' orni'na

$$\frac{1.98645 \cdot 10^{-15}}{\sqrt{2.62344 \cdot 10^{-32}U + 2.56697 \cdot 10^{-38}U^2}} \text{ angstrom} \quad (14)$$

an'latpasi'n alami'z. Bul an'latpalardi'n' barli'g'i' da da'l an'latpalar boli'p tabi'ladi' ha'm u'tirden keyingi 7-belgige shekem duri's na'tiyje beredi. Biz elektron mikroskoplari'nda ko'p qollani'latug'i'n kernewler ushi'n angstremlerdegi elektronlar tolqi'nlarini'n' uzi'nli'qlari'n beremiz:

Anodli'q kernew, voltlerde	Elektronlardi'n' tolqi'n uzi'nli'g'i', Å.
50 000	0,0535531
75 000	0,0432248
100 000	0,0370144
125 000	0,0327439
150 000	0,0295704

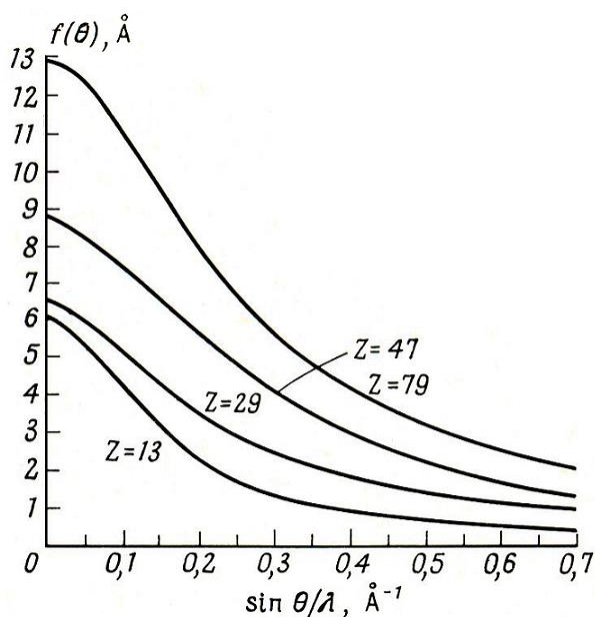
Solay etip biz duri's fizikali'q talqi'lawlar tiykari'nda elektron mikroskopi'ndag'i' elektronlar tolqi'nlarini'n' uzi'nli'g'i'n da'l ma'nisin esaplaytug'i'n formulalardi' keltirip shi'g'ardi'q.

Endi elektronlar difrakciyasi'ni'n' teoriyasi' menen shug'i'llanami'z.

Elektronlardi'n' kristalli'q denelerdegi difrakciyasi'ni'n' teoriyasi' rentgen nurlari'ni'n' difrakciyasi' teoriyasi'na sa'ykes do'retildi. Biraq bul eki qubi'li'sti'n' ta'biyatlari' pu'tkilley basqasha. Rentgen nurlari' atomlardi'n' elektronli'q ti'g'i'zli'qlari'nda shashi'raydi'. Al zaryadlari' bar bolg'anli'qtan elektronlar on' zaryadlarg'a iye atom yadrolari' ha'm atomlardag'i' elektronlar payda etken elektrostatikali'q maydan menen ta'sirlesedi. Solay etip atomni'n' shashi'rati'wshi'li'q qa'siyetleri atomlardi'n' quri'li'si'na baylani'sli' ha'm sonli'qtan ha'r qi'yli' ximiyali'q elementlerdin' elektronlardi' shashi'rati'wshi'li'q qa'siyetleri ha'r qi'yli'. Sanli'q jaqtan atomni'n' elektronlardi' shashi'rati'wshi'li'q qa'siyeti $f_e(\theta)$ atomlardi'n' nomeri Z ten g'a'rezli boli'p mi'na an'latpani'n' ja'rdeminde beriledi:

$$f_e(\theta) = \frac{me^2}{2h^2} \left(\frac{\lambda}{\sin \theta} \right)^2 (Z - f_p) \quad (14)$$

Bul an'latpadag'i' $\frac{me^2}{2h^2} = 2,38 \cdot 10^6$ sm⁻¹, f_p arqali' rentgen nurlari' ushi'n atomli'q ampilituda belgilengen. θ ni'n' ma'nisinin' o'siwi menen f_e nin' ma'nisi tez kemeyedi. $f_e \sim (\sin \theta)^{-2}$ (bul jag'day 2-su'wrette keltirilgen). SHashi'rawdi'n' atomli'q amplitudasi' shashi'rag'an nurdi'n' intensivligin xarakterleydi, al bul intensivliktin' ma'nisi f_e^2 qa tuwri' proporcional.



2-su'wret.

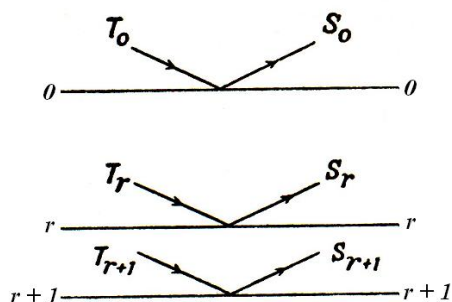
Elektronlardi'n' shashi'rawi'ni'n' $f_e(\theta)$ atomli'q amplitudalari' [6]:

Al ($Z = 13$), Cu ($Z = 29$), Ag ($Z = 47$)
ha'm Au ($Z = 79$) ushi'n berilgen.

Elektronlar atomlar menen rentgen nurlari'na sali'sti'rg'anda millionlag'an ese ku'shli'rek ta'sirlesedi. Usi'g'an baylani'sli' elektronlardi'n' shashi'raw amplitudasi' rentgen nurlari'ni'n' shashi'raw amplitudasi'nan mi'n'lag'an ese, al elektronlardi'n' shashi'rag'an dastesinin' intensivligi rentgen nurlari'ni'n' intensivliginen 1000 000 - 10 000 000 (million - on million) ese u'lken. Elektronlar atomlar menen ku'shli ta'sirlesetug'i'n bolg'anli'qtan eksperimentlerdi joqari' vakuumde o'tkeredi, al izertlenetug'i'n ob'ektlardan o'tiwshi elektronlar da'stesi paydalani'latug'i'n jag'dayda (prosveshivayushaya elektronnaya mikroskopiya jag'daydari'nda) izertlenetug'i'n ob'ektlar si'pati'nda qali'n'li'g'i' shama menen 10 - 50 nm (100 - 500 Å) folgalar (plastinkalar) qollani'ladi'. Juqa kristalli'q ob'ektlar ali'w problemesi'nan quti'li'w ushi'n izertlewshiler geypara jag'dayda ob'ektlardin' betinen shashi'rag'an elektron nurlari'n da paydalanadi'. Biraq bunday jag'daydarda ali'ng'an difrakciyalig' su'wret izertlenilip ati'rg'an denenin' qali'n'li'g'i' 1 - 10 nm bolg'an betinen g'ana informaciyalardi' ala aladi' (sebebi 1 - 10 nm den arti'g'i'raq teren'likte joylasqan oblastlardan difrakciyag'a ushi'rag'an elektronlar tolqi'nlari' sezilerliktey intensivlikte baqlanbaydi').

4-§. Rentgen nurlari'ni'n' shashi'rawi'ni'n' Darvin boyi'nsha teoriyasi'

1914-ji'li' SH.Darvin (Ch.Darvin) shashi'rati'wshi' kristallografiyalig' tegislikleri kristalli'q u'lginin' (obrazectin') betine parallel bolg'an ideal kristallardag'i' rentgen nurlari'ni'n' shashi'rawi'n izertledi [10]. Usi'nday sxemada baqlanatug'i'n rentgen nurlari'ni'n' difrakciyasi'n Bregg difrakciyasi' (Bregg boyi'nsha difrakciya) dep ataymi'z (1-paragrafti' qaran'i'z).



3-su'wret.

xy tegisligi menen sheklengen, ken'isliktin' yari'mi'n tolti'ri'p turatug'i'n ideal kristaldi'n' rentgen nurlari'n shashi'rati'wi'.

xy tegisligi menen sheklengen, ken'isliktin' yari'mi'n toltiri'p turatug'i'n ideal kristaldi'n' rentgen nurlari'n shashi'rati'wi'n qaraymi'z (3-su'wret). Su'wrettegi tuwri' si'zi'qlar shashi'rati'wshi' tegisliklerdin' izlerine sa'ykes keledi. Bul tegislikler 0, 1, 2, ..., r sanlari' ja'rdeminde nomerlengen. Meyli kristalg'a amplitudasi' T_0 bolg'an tegis tolqi'n ϑ mu'yeshi menen kelip tu'setug'i'n bolsi'n. Bazi' bir r tegisligine tu'siwshi tolqi'nni'n' amplitudasi'ni'n' usi' tegisliktin' tikkeley u'stindeg'i ma'nisin T_r arkali' belgileymiz. Usi'g'an sa'ykes shashi'rag'an tolqi'nlaridin' amplitudalari'n S_0, S_r arkali' belgileymiz

Bir atomli'q tegislik ta'repinen shashi'raw bag'i'ti'ndag'i' shashi'rati'lg'an tolqi'nni'n' amplitudasi'ni'n' tu'siwshi tolqi'nni'n' amplitudasi'na qatnasi' $\frac{A_p}{A_0} = -iq$ shamasina ten' ekenligi belgili. Bul jerde

$$q = -\frac{Nd\lambda}{\sin\vartheta} F(2\vartheta) \frac{e^2}{mc^2}. \quad (15)$$

Sol tegislik ta'repinen o'tken nur bag'i'ti'ndag'i' tolqi'n ushi'n $\frac{A_p}{A_0}$ qatnasi'ni'n' ma'nisinin' $-iq_0$ ekenligi ani'q. Bul jerde

$$q_0 = -\frac{Nd\lambda}{\sin\vartheta} F(0) \frac{e^2}{mc^2}. \quad (15)$$

Bunday jag'dayda r -nomerli tegislik arkali' o'tken tolqi'nni'n' amplitudasi'n $T_r(1 - iq_0 - \delta)$ tu'rinde jaza alami'z. Bul an'latpada δ arkali' juti'li'wdi'n' saldari'nan tegislikten o'tip ati'rg'an nurdi'n' amplitudasi'ni'n' jog'ali'wi'ni'n' u'lesi.

r tegisliginde shashi'rag'an tolqi'nni'n' amplitudasi'n $-iqT_r$ tu'rinde jazi'w mu'mkin. Bunday jag'dayda tolqi'n atomli'q tegislikler arkali' o'tkendegi fazani'n' o'zgerisin φ arkali' belgilep T_{r-1}, T_{r+1}, S_r ha'm S_{r+1} lerdi baylani'sti'ratug'i'n ten'lemelerpdi jazi'wg'a boladi'. Haqi'yqati'nda da T_{r+1} shamasi' r tegisligi arkali' o'tiwshi T_r tolqi'ni'nan, r menen $r+1$ tegislikleri arasi'ndag'i' joldan, r tegisligi arkali' ker'i bag'i'tta shashi'rag'an S_{r+1} tolqi'ni'nan qosi'ladi'. Bul tolqi'n fazalar ayi'rmasi' 2φ shamasina o'zgeretug'i'n qos joldi' o'tedi. Bunday jag'dayda

$$T_{r+1} = T_r(1 - iq_0 - \delta)e^{-i\varphi} - iqS_{r+1}e^{-2i\varphi}. \quad (16)$$

T_r menen S_r ler ushi'n mi'nani' jazi'wg'a boladi':

$$T_r = T_{r-1}(1 - iq_0 - \delta)e^{-i\varphi} - iqS_re^{-2i\varphi}, \quad (17)$$

$$S_r = -iqT_r + S_{r+1}(1 - iq_0 - \delta)e^{-i\varphi}. \quad (18)$$

Endi

$$e^{-i\varphi} = b, \quad 1 - iq_0 - \delta = a \quad (19)$$

belgilewlerin kirgizemiz. Bunday jag'dayda (16)-(18) ten'lemeler sistemasi'n mi'na tu'rde ko'shirip jazami'z:

$$T_{r+1} = T_r ab - iqS_{r+1}b^2, \quad (20)$$

$$T_r = T_{r-1}ab - iqS_rb^2, \quad (21)$$

$$S_r = -iqT_r + S_{r+1}ab. \quad (22)$$

(20)-(22) tenlemeler sistemasi'nan S_r menen S_{r+1} shamalari'n joq etemiz. Buni'n' ushi'n u'shinshi ten'lemen $b^2(-iq)$ g'a, al ekinshisin $-ab$ g'a ko'beytemiz ha'm bunnan keyin olardi' bir birine qosami'z. Na'tiyjede T_r ushi'n mi'na tu'rdegi rekurrent ten'lemen alami'z:

$$(T_{r+1} - T_{r-1})ab = T_r(1 + a^2b^2 + b^2q^2). \quad (23)$$

T_r shamasini r din' o'siwi menen a'ste-aqi'ri'n kemeyedi. Sonli'qtan sheshimdi $T_{r+1} = xT_r$ tu'rinde izleyemiz. Bul an'latpadagi' $x < 1$. x arqali' an'latilg'an T_{r+1} menen T_{r-1} shamalari'n (23)-an'latpag'a qoyi'p

$$x^2 - \frac{1 + a^2b^2 + b^2q^2}{ab}x + 1 = 0 \quad (24)$$

ten'lemesini alami'z. Bunday tenlemenin' tu'birlerinin' (korenlerinin') $x_1x_2 = 1$ qanaatlandi'ratug'i'nli'g'i'n bilemiz. demek ten'lemenin' tu'birlerinin' biri 1 den u'lken, al ekinshisi 1 den kishi. Tu'birlerdin' 1 den kishi bolg'ani' g'ana fizikali'q ma'niske iye boladi'.

(20)- ha'm (21)-an'latpalarg'a $T_{r-1} = \frac{T_r}{x}$ ha'm $T_{r+1} = xT_r$ shamalari'n qoyi'p $S_{r+1} = xS_r$ ekenligin da'rha'l biliwge boladi'. Bunday jag'dayda (22)-ten'lemeden mi'nani' alami'z:

$$\frac{S_r}{T_r} = \frac{-iq}{1 - abx} = \frac{S_0}{T_0}. \quad (25)$$

x ti'n' ma'nisin (24)-an'latpadan, al a menen b ni'n' ma'nislerin (19)-an'latpadan ali'p $\frac{S_0}{T_0}$ din' shamasini esaplaymi'z. Usi'ni'n' menen ma'sele sheshildi dep esaplawg'a boladi'. Biraq bunnan keyingi esaplawlardi'n' qolayli' boli'wi' ushi'n biz bazi' bir a'piwayi'lasti'ri'wlar menen shug'i'llanami'z.

Bir tegislikten ekinshi tegislikke o'tkende ori'n alatug'i'n fazalar ayi'rmasi' $\frac{2d}{\lambda} d \sin \vartheta = m\pi + v$ shamasina ten'. Bul an'latpadagi' v kishi shama, sebebi ϑ mu'yeshinin' ma'nisi Breggtin' shashi'raw mu'yeshinen az shama'g'a ayraladi'. Rentgen nurlari' juti'lmaydi' dep esaplaymi'z, yag'ni'y $\delta = 0$. x ti'n' orni'na $x = (1 - \xi)e^{im\pi}$ ten'ligi ori'nlanatug'i'nday etip jan'a ξ o'zgeriwshisin kirgizemiz (bul o'zgeriwshinin' kompleks shama boli'wi' mu'mkin). ξ, q, q_0 ha'm v si'yaqli' kvadratlari' kishi bolg'an shamalardi' saqlap qalami'z. Bunday jag'dayda (24)-an'latpa mi'na tu'ske enedi:

$$\xi^2 = q^2 - (q_0 + v)^2 \quad (26)$$

Bo'limindegi kishi ag'zalardi'n' kvadratlari'n esapqa almay (25)-ten'lemeden

$$\frac{S_0}{T_0} = \frac{-q}{q_0 + v \pm \sqrt{(q_0 + v)^2 - q^2}}$$

an'latpasi'n alami'z. $q_0 + v = \varepsilon$ dep belgilesek, onda

$$\frac{S_0}{T_0} = \frac{-q}{\varepsilon \pm \sqrt{\varepsilon^2 - q^2}} \quad (27)$$

ten'lemesine iye bolami'z.

(27)-ten'leme ε nin' kishi bolg'an $-q < \varepsilon < +q$ ma'nislerinde $\frac{S_0^2}{T_0^2}$ qatnashi'ni'n' birge ten' ekenligin, yag'ni'y toli'q shag'i'li'si'wdi'n' ori'n alatug'i'nli'g'i'n ko'rsetedi. Haqi'yqati'nda da (27)-formulani'n' bo'limi kompleksli shama ha'm o'zinin' tu'yinlesine ko'beytilse q g'a

aylanadi'. ε nin' bul intervaldi'n' eki ta'repinen de u'lkeyiwi menen shashi'raw amplitudasi' ha'm og'an sa'ykes shashi'raw intensivligi tez kemeyedi. Eger $\varepsilon > +q$ bolsa, onda (27)-formulada plyus belgisin, al $\varepsilon < -q$ da minus belgisin paydalani'w kerek.

Biz belgilewlerde bir qansha ani'qliqlar kirgizemiz. q arqali' biz sheksiz u'lken atomli'q tegislik ta'repinen usi' tegislikke kelip tu'setug'i'n' tolqi'nni'n' amplitudasi' birge ten', bul tolqi'ndag'i' E vektori' tolqi'nni'n' tu'siw tegisligine perpendikulyar bolg'an jag'daydag'i' shashi'rag'an tolqi'nni'n' amplitudasi'. Eger (1)-ten'lemedegi (Vulf-Bregg ten'lemesi) difrakciyalı'q mu'yeshti ϑ_0 arqali' belgilesek, onda $\vartheta = \vartheta_0 + \varepsilon$ boli'p, qosi'msha jazil'g'an kishi mu'yesh ε qosi'msha fazalar ayi'rmasi'ni'n' payda boli'wi'na ali'p keledi. Basqa so'z benen aytqanda

$$\frac{4\pi}{\lambda} d[\sin(\vartheta_0 + \varepsilon) - \sin \vartheta_0] = \frac{4\pi d \varepsilon}{\lambda} \cos \vartheta_0 = \delta.$$

Kristalg'a kelip tu'siwshi tolqi'nni'n' amplitudasi'n 1 (bir) ge ten' dep esaplasaq, onda bir birine parallel, al ara qashi'qli'g'i' d bolg'an N dana tegislik ta'repinen shashi'rati'lg'an tolqi'nni'n' amplitudasi'

$$A = q[1 + e^{-i\delta} + e^{-2i\delta} + \dots + e^{-(N-1)i\delta}] = q \frac{1 - e^{-Ni\delta}}{1 - e^{-i\delta}}$$

formulasi' menen ani'qlanatug'i'nli'g'i'n ko'remiz. Al amplitudani'n' kvadrati' bolsa

$$A^2 = |q|^2 \frac{\sin^2 \left(N \frac{2\pi d \varepsilon}{\lambda} \cos \vartheta_0 \right)}{\sin^2 \left(\frac{2\pi d \varepsilon}{\lambda} \cos \vartheta_0 \right)} \quad (28)$$

formulasi'ni'n' ja'rdeminde esaplanadi' (bul funkciyag'a uqsas funkciyani'n' grafigi 1-su'wrette keltirilgen).

Eger usi'nday plastinka ushi'n integralli'q shashi'raw koefficienti bolg'an ρ shamasi'n esaplaytug'i'n bolsaq, onda

$$\rho = \frac{E\omega}{I_0} = \frac{n^2 \lambda^2}{\sin 2\vartheta} F^2 \left(\frac{e^2}{mc^2} \right)^2 \frac{1 + \cos^2 2\vartheta}{2} U \quad (29)$$

an'latpasi'n alami'z. Bul an'latpada n arqali' kristaldi'n' ko'lem birligindegi elementar quti'lar sani', F arqali' strukturalı'q faktor, al U arqali' kristaldi'n' toli'q ko'lemi belgilengen.

(29)-an'latpa ideal-mozaykali'q kristallar ushi'n krinematikali'q teoriya tiykari'nda keltirilip shi'g'ari'lg'an an'latpa boli'p tabi'ladi'. Bun an'latpa to'mende dinamikali'q teoriya tiykari'nda ali'ng'an an'latpa menen sali'sti'ri'w ushi'n kerek boladi' [(30)-formula].

Biz endi esaplawlari'mi'zdi' dawam ete alami'z.

Rentgen nurlari'ni'n' kristaldi'n' shegarasi'ndag'i' si'ni'wi'n esapqa almasaq ha'm ϑ din' ma'nisi ϑ_0 ge ten' bolatug'i'n bolsa, onda onda ani'qlama boyi'nsha ϑ nolge ten'

$$\frac{2\pi}{\lambda} d \sin \vartheta = m\pi + \vartheta \text{ sha'rtinen}$$

$$\vartheta = \frac{2\pi}{\lambda} d \cos \vartheta (\vartheta - \vartheta_0)$$

ekenligi ko'rinip tur. Eger biz ϑ ni'n' kishi ekenligin esapqa alsaq, onda $\cos \vartheta$ di shama menen $\cos \vartheta_0$ shamasi'na ten' dep ali'wg'a boladi'. Bunnan

$$\vartheta - \vartheta_0 = \frac{\lambda}{2\pi d \cos \vartheta} \vartheta = \frac{\lambda}{2\pi d \cos \vartheta_0} \vartheta$$

an'latpasi'n alami'z.

Integralli'n' shag'i'li'si'w ρ shag'i'li'si'w iymekligi asti'ndag'i' maydang'a ten':

$$\rho = \int_{-\infty}^{+\infty} \mathcal{R}(\vartheta) d\vartheta = \int_{-\infty}^{+\infty} \left| \frac{S_0}{T_0} \right|^2 d\vartheta = \int_{-\infty}^{+\infty} \left| \frac{S_0}{T_0} \right|^2 d\varepsilon \frac{d\vartheta}{d\varepsilon}.$$

$\vartheta - \vartheta_1 = \Delta\vartheta = \frac{\lambda\varepsilon}{2\pi d \cos \vartheta_0}$ formulasi'nan $\frac{d\vartheta}{d\varepsilon} = \frac{\lambda}{2\pi d \cos \vartheta_0}$ ekenligine iye bolami'z. Integral u'sh oblastqa bo'linedi:

birinshisi $\varepsilon < -q$;

ekinshisi $-q < \varepsilon < +q$;

u'shinshisi $\varepsilon > +q$.

Bunday jag'dayda

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{+\infty} \left| \frac{S_0}{T_0} \right|^2 d\varepsilon &= 2q + 2 \int_q^{\infty} \frac{q^2}{(\varepsilon + \sqrt{\varepsilon^2 - q^2})^2} d\varepsilon \text{ ha'm} \\ \int_q^{\infty} \frac{q^2}{(\varepsilon + \sqrt{\varepsilon^2 - q^2})^2} d\varepsilon &= \frac{1}{q^2} \int_q^{\infty} (2\varepsilon^2 - 2\varepsilon\sqrt{\varepsilon^2 - q^2} - q^2) d\varepsilon = \\ &= \frac{1}{q^2} \left[\frac{2}{3} \varepsilon^3 - \frac{2}{3} (\varepsilon^2 - q^2)^{3/2} - \varepsilon q^2 \right]_q^{\infty} = \frac{1}{3} q. \end{aligned}$$

Bunnan tu'siw tegisligine perpendikulyar bag'i'tta polyarlang'an nurlani'w ushi'n mi'na an'latpani' alami'z:

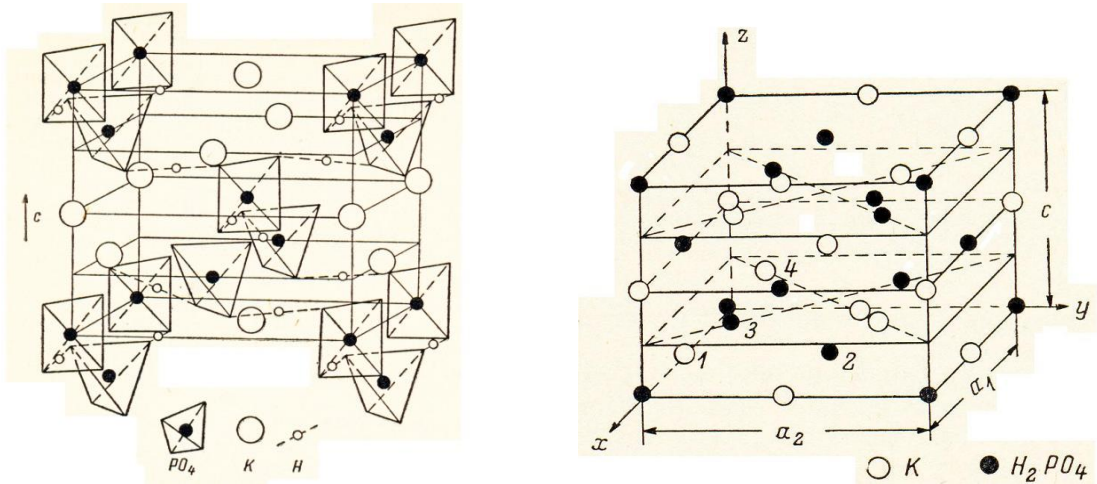
$$\rho = \frac{8}{3} q \frac{\lambda}{2\pi d \cos \vartheta} = \frac{8}{3\pi} \cdot \frac{N\lambda^2}{\sin 2\vartheta} \frac{e^2}{mc^2} F(2\vartheta) \quad (30)$$

Eger kristallarg'a kelip tu'siwshi nurdi'n' polyarizatsiyalanbag'anli'g'i'n esapqa alatug'i'n bolsaq ha'm oni' polyarizatsiyani'n' eki qurawshi'lari'na jaysaq, onda shashi'rawdi'n' integralli'q intensivligi ushi'n mi'na formulani' alami'z:

$$\rho = \frac{8}{3\pi} \cdot \frac{e^2}{mc^2} \cdot \frac{1 + |\cos 2\vartheta|}{2 \sin 2\vartheta} N\lambda^2 F(2\vartheta). \quad (31)$$

Bul formula Laueni'n' kinematikali'q teoriyasi'nda ideal-mozaykali'q kristall ushi'n ali'ng'an (29)-formuladan u'lken ayi'rmag'a iye. Ideal kristall jag'dayi'nda ρ strukturali'q faktor $F(2\vartheta)$ tin' birinshi da'rejesine tuwri' proporcional, al kinematikali'q teoriyada bolsa strukturali'q faktordi'n' kvadrati'na proporcional. Mu'yeshlik ko'beytiwshiler de, tolqi'n uzi'nli'g'i'na g'a'rezlilik te ha'm $\frac{e^2}{mc^2}$ ko'beytiwshisinin' da'rejesi de birdey emes.

Endi $\frac{e^2}{mc^2} = 2,8132 \cdot 10^{-13}$ sm ko'beytiwshisi haqqi'nda mag'li'wmat beri o'temiz. Bul shamani' elektronni'n' klassikali'q radiusi' dep ataymi'z. Bul shama $\frac{e^2}{R}$ shamasi'n (potencial energiya) elektronni'n' ti'ni'shli'qtag'i' mc^2 energiyasi'na ten'lestiriw joli' menen ali'nadi'.



4-su'wret. KH_2PO_4 kaliy digidrofosfati' kristallari'ni'n' elementar quti'lari'.

(a) Kyuri noqati'nan joqari' temperaturalarda (tetragonalli'q parafazada, quramali' model) ha'm (b) Kyuri noqati'nan to'mengi temperaturalarda (ferroelektriklik ortorombali'q fazada, a'piwayi'lasti'ri'lg'an model). 1 – 4 cifralari' menen bir birine ekvivalent emes strukturali'q birlikler belgilengen.

Endi ayqi'n esaplawlarg'a o'temiz. Ko'pshilikke belgili ferroelektriklik kaliy digidrofosfati' KH_2PO_4 kristallari' ushi'n ali'ng'an na'tiyjelerdi ko'remiz. Bul kristall o'jire temperaturalari'nda paraelektrik (a'dettegidey si'zi'qli' dielektrik) boli'p tetragonalli'q quri'li'ska iye: $a = 7,45236 \text{ \AA}$, $c = 6,97298 \text{ \AA}$ (simmetriyani'n' ken'isliktegi topari' $I\bar{4}2d$). 121,3 – 122 K temperaturalarda KH_2PO_4 kristallari'nda ferroelektriklik fazali'q o'tiw ori'n ali'p, usi'ni'n' saldari'nan kristall ortorombali'q kristalg'a aylanadi'. 105 K temperaturadagi' kristalli'q pa'njerenin' turaqli'lari': $a = 10,54581 \text{ \AA}$, $b = 10,46634 \text{ \AA}$ ha'm $c = 6,92241 \text{ \AA}$ (simmetriyani'n' ken'isliktegi topari' $Fdd2$). Ferroelektriklik fazali'q o'tiw din' saldari'nan kristaldi'n' elementar quti'si'ni'n' ko'lemi sezilerliktey o'zgermeydi $[(6 - 10) \cdot 10^{-3} \text{ procent g'ana}]$.

Ferroelektriklik fazali'q o'tiwde kristalda polidomenlik quri'li's payda boladi'. Na'tiyjede atomli'q-kristalli'q quri'li'si' jetilisken u'lgiler polidomenlik kristallarg'a aylanadi'. Usi'g'an baylani'sli' paraelektriklik xaldagi' KH_2PO_4 kristallari'n jetilisken atomli'q-kristalli'q kuri'li'sqa iye, sonli'qtan olar ushi'n rentgen nurlari'ni'n' difrakciyasi'ni'n' dinamikali'q teoriyasi'n paydalani'wg'a boladi', al ferroelektriklik halg'a o'tken kristallardi'n' quri'li'si' defektli, sonli'qtan olardi' ideal-mozaykali'q kristall dep qarawi'mi'zg'a boladi' ha'm sonli'qtan rentgen nurlari'ni'n' difrakciyasi'ni'n' kinematikali'q teoriyasi'n paydalani'wg'ap boladi' dep boljaymi'z. Usi' boljawdi'n' duri's yamasa duri's emes ekenligin sanli' bahalaw ushi'n KH_2PO_4 kristallari'ni'n' eki modifikaciyasi' ushi'n strukturali'q faktordi'n' ma'nislerin esaplaymi'z.

Strukturali'q faktordi'n'

$$F_{hkl} = \sum_{k=1}^N f_k e^{i2\pi(hx_k + ky_k + lz_k)} \quad (32)$$

formulasi' ja'rdeminde esaplanatug'i'nli'g'i' ken'nen ma'lim. Eger kristall simmetriya orayi'na iye bolatug'i'n bolsa (32)-an'latpa a'piwayi'lasadi' ha'm

$$F_{hkl} = 2 \sum_{k=1}^{N/2} f_k \cos 2\pi(hx_k + ky_k + lz_k) \quad (33)$$

tu'rine enedi. Solay etip kaliy digidrofosfati' kristaldi'n' tetragonalli'q paraelektrik fazasi' ushi'n strukturali'q faktor (33)-formula menen, al ferroelektrik ortorombali' fazasi' ushi'n (32)-formula tiykari'nda esaplani'wi' kerek.

Bul formulani' bi'layi'nsha da jaza alami'z:

$$|F(h, k, l)|^2 = \left[\sum_{j=1}^N f_j \cos 2\pi(hx_j + ky_j + lz_j) \right]^2 + \left[\sum_{j=1}^N f_j \sin 2\pi(hx_j + ky_j + lz_j) \right]^2 \quad (34)$$

Bul haqi'yqi'y funkciya boli'p tabi'ladi' (kvadratqa ko'teriw menen kompleksli strukturali'q faktordan quti'ldi'q).

Strukturali'q faktordi' esapqa ali'w menen (yag'ni'y elementar quti'dag'i' atomlardi'n' koordinatalari'n esapqa ali'w menen) biz qa'legen *hkl* shashi'rawi'ni'n' (shag'i'li'si'wi'ni'n', *hkl* indeksli difrakciyag'a ushi'rag'an nurdi'n') sali'sti'rmali' intensivligin ani'q ayta aladi' ekenbiz. Bul juwmaq elektronlar tolqi'nlarini'n' kristalli'q denelerdegi difrakciyasi' ushi'n da duri's.

Kaliy digidrofosfati' ushi'n strukturali'q amplituda bi'layi'nsha esaplanadi' (to'rt tu'rli atomlardi'n' strukturali'q amplitudalari'ni'n' qosi'ndi'si'):

$$F = \sum_K + \sum_P + \sum_O + \sum_H. \quad (35)$$

Bul an'latpalarda $\sum_K$ kaliy boyi'nsha, $\sum_P$ fosfor boyi'nsha, $\sum_O$ kislorod boyi'nsha ha'm $\sum_H$ vodorod boyi'nsha strukturali'q amplituda.

Fosfor boyi'nsha strukturali'q amplituda bi'layi'nsha esaplanadi':

$\sum_P = \frac{1}{4} f_P \sum_{j \in I} \exp(hx_j + ky_j + lz_j)$ ha'm tag'i' basqalar. Bul an'latpada f_P arqali' fosfor ushi'n atomli'q faktor belgilengen.

Fosfor atomlari'ni'n' elementar quti'lardag'i' koordinatalari'n esapqa alami'z. Olar mi'nalar: (000), (0,1/2,1/4), (1/2,1/2,1/2). Usi' shamalardi' esapqa ali'p biz mi'nag'an iye bolami'z:

$$\sum_{j \in I} \exp(hx_j + ky_j + lz_j) = [1 + e^{i\pi(h+k+l)}][1 + e^{i\pi(k+l/2)}].$$

Usi' an'latpalardi' esapqa alg'an halda so'niwlerdi tabami'z:

(h,0,0) difrakciyali'q maksimumlari' arasi'nda $h = 2n$ ha'm $\sum_P = f_P$.

(h,h,0) difrakciyali'q maksimumlari' arasi'nda $h = 2n$ ha'm $\sum_P = f_P$.

(0,0,l) difrakciyali'q maksimumlari' arasi'nda $l = 4n$ ha'm $\sum_P = f_P$.

Kaliy atomlari' ushi'n sa'ykes mi'na baylani'slardi' alami'z:

(h,0,0) difrakciyali'q maksimumlari' arasi'nda $h = 2n$ ha'm $\sum_K = f_K$.

(h,h,0) difrakciyali'q maksimumlari' arasi'nda $h = 2n$ ha'm $\sum_K = f_K$.

(0,0,l) difrakciyali'q maksimumlari' arasi'nda $l = 4n$ ha'm $\sum_K = f_K$.

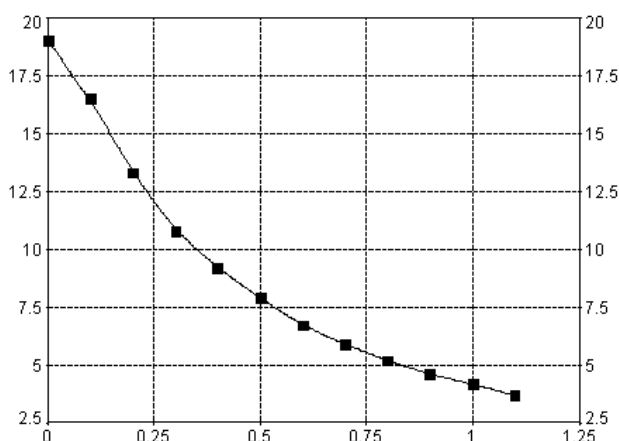
Kaliy, fosfor, vodorod ha'm kislorod atomlari' ushi'n rentgen tolqi'nlarini'n' atomli'q shashi'rawi'ni'n' $\sin\theta/\lambda$ den g'a'rezligin tabi'w qi'yi'nli'q payda etpeydi. Haqi'yqati'nda da qolda bar a'debiyatlarda bul atomlar ushi'n mi'naday atomli'q faktorlardi'n' ma'nislerin beredi:

$\frac{\sin\theta}{\lambda}$	0	0.1	0.2	0.3	0.4	0.5	0.6	0.7	0.8	0.9	1.0	1.1
$\frac{\lambda}{2\sin\theta}$		5	2.5	1.667	1.25	1	0.833	0.714	0.625	0.556	0.5	0.455
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
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
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
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

Eskertiw: $\frac{\lambda}{2\sin\theta}$ shamasi' kristallografiyalig' tegisliklar arasi'ndagi' qashiq'li'qqa ten', yag'ni'y $d = \frac{\lambda}{2\sin\theta}$.

Endigi ma'sele bul kestelik mag'li'wmatlardi' analitikali'q an'latpag'a aylandi'ri'w boli'p tabi'ladi' (matematikali'q til menen aytqanda approksimaciya menen shug'i'llani'wi'mi'z kerek).

Ma'seleni sheshiw ushi'n biz SYSTAT TableCurve 2D 5.01 programmasi'nan paydalanami'z. Bul matematika iliminin' ha'r qi'ylig' tarawlari'nan ali'ng'an 3665 funkciyani'n' ja'rdeminde eksperimentte ali'ng'an na'tiyjelerdi avtomatlasti'ri'wg'a mu'mkinshilik beredi. Kelesi su'wrette usi' programma ja'rdeminde kaliy ushi'n joqari'dagi' kestede berilgen mag'li'wmatlar ha'm qayta islewdir' na'tiyjesinde ali'ng'an approksimaciyalig' iymeklik berilgen.



SHashi'rawdi'n' atomli'q faktori'ni'n' kaliy ushi'n ali'ng'an approksimaciyalig' iymekligi.

Abcissada $\sin\theta/\lambda$ ni'n', al ordinatada shashi'rawdi'n' atomli'q faktori'ni'n' ma'nisi berilgen. To'rt mu'yeshlikler joqari'da keltirilgen kestede mag'li'wmatlarg'a sa'ykes keledi.

Biz strukturalig' faktordi' «Mathematica» programmalaw tilinde esaplawdi' a'melge asir'dig' ha'm usi'g'an baylani'sli' esaplawlar algoritmin bere alami'z. Esaplaw sxemasi' to'mendegilerden ibarat:

1. Izertlenip ati'rg'an kristalli'q ob'ektke kiriwshi ximiyali'q elementlerdin' atomli'q faktori'ni'n' difrakciyalig' mu'yeshke g'a'rezliginin' juwi'q tu'rdegi analitikali'q an'latpasi'n ali'w (bizin' jag'dayi'mi'zda kaliy, fosfor, vodorod ha'm kislorod ushi'n). Bul keyinirek elektronlar tolqi'nlari' ushi'n ko'rsetiledi.

2. Elementar quti'lardagi' atomlar iyetep turg'an noqatlardi'n' da'l koordinatalari'n biliw.

3. Strukturalig' faktor ushi'n (35)-formulag'a sa'ykes keliwshi toli'q an'latpa jazi'w.

4. Rentgen nurlari'ni'n' o'shiw ni'zamli'qlari'n (usloviya ili zakoni' pogasaniya) biliw ha'm bull ni'zamli'qlar ori'nlanatug'i'n keri pa'njere tu'yinlerin esaplawlardan ali'p taslaw.

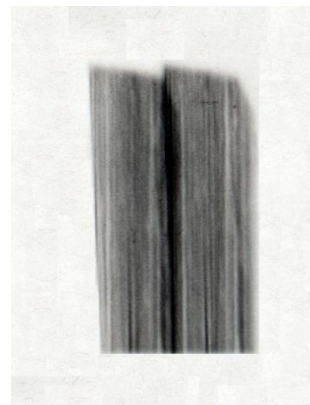
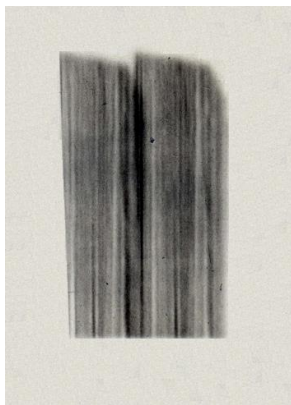
5. Paydalani'latug'i'n rentgen tolqi'nlari'ni'n' tolqi'n uzi'nli'qlari'na saykes polarizaciyanbag'an nurlar ushi'n strukturalig' faktordi'n' o'zinin' da'l ma'nislerin esaplaw ha'm ali'ng'an na'tiyjelerdi eksperimentte o'lshegen na'tiyjeler menen sali'sti'ri'w.

Vodorod ha'm kislorod boyi'nsha bir qansha quramali'raq bolg'an na'tiyjeler ali'nadi'. Esaplawlar

$$\frac{(F_{hkl})_{kin}}{(F_{hkl})_{din}} \approx 4 \quad (34)$$

ekenligin ko'rsetti. Bul eksperimentlerde ali'ng'an na'tiyjelerge toli'q sa'ykes keldi.

KH_2PO_4 kristallari'ni'n' ferroelektriklik fazalari'n rentgentopografiyalig' izertlewler bari'si'nda rentgen tolqi'nlari'ni'n' difrakciyasi'ni'n' dinamikali'q ha'm kinematikali'q teoriyalari'n bir biri menen sali'sti'ri'p ko'riw mu'mkinshiligi tuwi'ladi'.



5-su'wret. Ferroelektriklik KH_2PO_4 kristalli'nan ali'ng'an rentgentopografiyalig' su'wretler [kristalli'q u'lginin' beti tetragonallig' fazalag'i' (110) kristallografiyalig' betke parallel, c ko'sheri vertikal bag'i'tta bag'i'tlang'an, rentgentopografiyalig' mu'yeshlik skannerlew metodi' (usi'li')].

KH_2PO_4 kristallari'nda ferroelektriklik fazali'q o'tiwlerde polidomenlik quri'li's payda boli'p, bul quri'li's eki domenler sistemasi'nan turadi'. Strukturalig' domenlerdin' payda boli'wi' kristaldi'n' sezilerliktey mayi'si'wi'na ali'p kelmeydi. Biraq polidomenlik kompleksler arasi'nda kristall ku'shli mayi'sadi' ha'm idel-mozaikali'q kristallardi'n' modelin beredi. Solay etip polidomenlik kompleksler arasi'ndag'i' o'tiw oblasti'nda rentgen nurlari'ni'n' shashi'raw rentgen nurlari'ni'n' difrakciyasi'ni'n' kinematikali'q teoriyasi', al ayi'ri'm domenlerde yamasa polidomenlik komplekslerde shashi'raw dinamikali'q teoriya ja'rdeminde ta'riyiplenedi dep boljawg'a boladi'.

5-su'wrette ferroelektriklik KH_2PO_4 kristalli'nan ali'ng'an rentgentopografiyalig' su'wret keltirilgen [kristalli'q u'lginin' beti tetragonallig' fazalag'i' (110) kristallografiyalig' betke parallel, c ko'sheri vertikal bag'i'tta bag'i'tlang'an, rentgentopografiyalig' mu'yeshlik skannerlew usi'li']. Su'wrettegi [001] ko'sherine parallel bolg'an jolaqlar polidomenlik komplekslerdin' izleri boli'p tabi'ladi'. Bizin' ma'selemiz [001] ko'sherine perpendikulyar bag'i'tta (yag'ni'y [110] ko'sheri bag'i'ti'nda) fotoplenkani' fotometrlew (yag'ni'y difrakciyag'a ushi'rag'an rentgen nurlari'ni'n' intensivliklerin o'lshew) boli'p tabi'ladi'. Bul jag'dayda da shama menen $\frac{(F_{hkl})_{kin}}{(F_{hkl})_{din}} \approx 4$ ma'nisi ali'ndi'.

Solay etip biz rentgen tolqi'nlari'ni'n' difrakciyasi'ni'n' kinematikali'q ha'm kinematikali'q teoriyalari'n bir ob'ektke qollani'w ma'selesin bir ob'ektti izertlew bari'si'nda sheshe aladi' ekenbiz. Biz alg'an na'tiyjeler KH_2PO_4 kristallari'ni'n' ideal-mozaikali'q ta'emes, ideal da'emes ekenligin ko'rsetedi.

Endi ρ ni'n' joqari'dag'i' (29)- ja'ne (31)- eki formula menen esaplang'an ha'm eksperimentte ali'ng'an ma'nislerin sali'sti'ri'p ko'riw ushi'n beremiz.

Kristalli'q zat	hkl	ρ_{Din}	ρ_{Kin}	ρ_{eksper}
Al	111	19,6	818,3	580
	222	6,3	157,9	144,1
	333	0,37	1,39	1,43
CaCO ₃	$\sin \vartheta$	ρ_{Din}	ρ_{Kin}	ρ_{eksper}
	0,1	30,9	1220	240
	0,5	1,7	12,5	2,4

Joqari'da keltirilgan kestelerdegil mag'li'wmatlar Al menen CaCO₃ kristallari'ni'n' da idealli'q-mozaikali'q yamasa ideal emes ekenligin ko'rsetedi.

5-§. Rentgen nurlari'ni'n' shashi'rawi'ni'n' Evald boyi'nsha teoriyasi'ni'n' elementlari

Rentgen nurlari'ni'n' difrakciyasi'ni'n' Evald boyi'nsha (dinamikali'q) teoriyasi'nda kristalli'q ken'isliktegi elektromagnitlik tolqi'nni'n' tarqali'wi' qarap shi'g'i'ladi' ha'm elektromagnit tolqi'nlaridin' ortalig' penen dinamikali'q ta'sirlesiw esapqa ali'nadi'. Pa'njerede on' zaryad ken'isliktin' ha'r bir noqatindagi' elektronli'q ti'g'i'zli'g'i'na ten'dey ti'g'i'zli'q penen tarqalg'an ha'm olar qozg'almaydi' dep esaplanadi'. Bunday jag'dayda ortalig' erkin zaryadqa iye emes sistema dep qabi'l etiledi. Biraq bul zaryad pa'njerede da'wirlik tu'rde o'zgeredi (o'zgeriw da'wiri kristalli'q pa'njerenin' da'wirine ten').

Bunday ortalig'lardagi' elektromagnitlik tolqi'nlaridin' tarqali'wi' haqqi'ndagi' ma'seleni sheshkende indukciya vektori' $\mathbf{D}||\mathbf{E}$ dep esaplanadi' (yag'ni'y kristallardagi' anizotropiya esapqa ali'nbaydi'). Bunday boljaw rentgen nurlari' ushi'n si'ni'w ko'rsetkishi $n = \sqrt{\epsilon}$ shamasini'n' shama menen birge ten'liginde (birden 10^{-6} - 10^{-7} shamasina ayri'ladi').

Usi'nday boljawlar tiykari'nda

$$\mathbf{D}(\mathbf{r}) = \mathbf{A}(\mathbf{r})e^{2\pi i(\mathbf{v}t - \mathbf{K}_0\mathbf{r})} \quad (35)$$

an'latpasi' menen ta'riyiplenetug'i'n tegis tolqi'nlar tu'rindagi stabilli (waqi'tqa g'a'rezli emes) sheshimler izlenedi. Tolqi'nni'n' amplitudasi' $\mathbf{A}$ waqi'ttan g'a'rezli emes, al koordinatadan g'a'rezli boli'wi' mu'mkin. Sebebi elektronlar tarqali'wshi' tolqi'nlaridin' ta'sirinde terbeledi ha'm sonli'qtan olar (elektronlar) ta'repinen tarqalatug'i'n tolqi'nlar bir biri ha'm kelip tu'siwshi tolqi'n menen interferenciya'ga ushi'raydi'. Na'tiyjede amplitudasi' ken'islikte da'wirli tu'rde o'zgeretug'i'n bazi' bir turaqli' elektromagnit tolqi'n payda boladi'. Bul da'wirlik pa'njerenin' da'wirindey boli'wi' kerek, yag'ni'y $\mathbf{A}(\mathbf{r})$ u'sh bag'i't boyi'nsha da'wirlikke iye funkciya boli'p tabi'ladi'. Bul funkciyani' pa'njerelik summa (qosi'ndi') tu'rinde ko'rsetiw mu'mkin:

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}) = \sum_m \mathbf{D}_m e^{-2\pi i(\mathbf{r}, \mathbf{H}_m)} \quad (36)$$

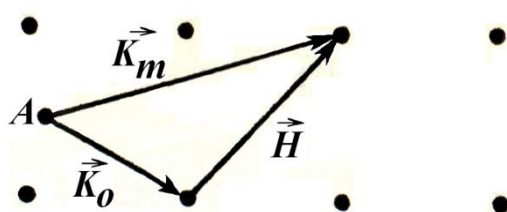
Bul an'latpada $\mathbf{H}_m$ arqali' keri pa'njerenin' vektori' belgilengen. Bunday jag'dayda sheshim bir qatar tegis tolqi'nlaridin' summasi' si'pati'ndagi' sheshimge iye boladi':

$$\mathbf{D} = \sum_m \mathbf{D}_m e^{-2\pi i[\mathbf{v}t - (\mathbf{K}_0 + \mathbf{H}_m\mathbf{r})]} = \sum_m \mathbf{D}_m e^{-2\pi i[\mathbf{v}t - (\mathbf{K}_m\mathbf{r})]}. \quad (37)$$

(37)-an'latpada $\mathbf{K}_m = \mathbf{K}_0 + \mathbf{H}_m$.

Eger ma'seleni a'piwayi'lasti'rsaq ha'm zaryadlardi' pa'njerenin' tu'yinlerinde jaylasqan dep esaplasaq, onda sheshimnin' tu'rinin' qanday bolatug'i'nli'gi'n ani'q boladi'.

Haqiyqati'nda da, eger zaryadlar koordinatalari' $\mathbf{r} = \mathbf{ma} + \mathbf{nb} + \mathbf{pc}$ bolg'an pa'njerenin' tu'yinlerinde jaylasqan bolsa, onda $(\mathbf{r}, \mathbf{H}) = hm + kn + lp$ shamasi'na ten' boli'p, barli'q waqi'tta da pu'tin ma'niske iye boladi'. Bunday jag'dayda (35)-ten'lemedegi $\mathbf{K}_0$ di $\mathbf{K}_0 + \mathbf{H}$ ka almasti'ri'w mu'mkin ha'm $\mathbf{H}$ qa pari'q ki'latug'i'n barli'q tolqi'n vektorlari'n bir birine ekvivalent dep esaplawg'a boladi'. 6-su'wrette keru pa'njere ko'rsetilgen. $\mathbf{K}_0$ vektori' (000) tu'yinine qaray bag'i'tlang'an. A noqati'nan keru pa'njerenin' qa'legen tu'yinine karay bag'i'tlang'an qa'legen vektordi' Maksvell ten'lemelerinin' sheshimine kiriwshi qa'legen vektor dep qarawg'a boladi'.



6-su'wret.

Keru pa'njerenin' bir tegisliginin' fragmenti. $\mathbf{K}_0$ vektori' (000) tu'yinine qaray bag'i'tlang'an.

Ortali'qta tarqali'wshi' elektromagnit maydani' ushi'n Maksvell ten'lemelerin jazami'z:

$$\frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t} = c \operatorname{rot} \mathbf{H}; \quad \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} = c \operatorname{rot} \mathbf{E} = c \operatorname{rot} \frac{\mathbf{D}}{\varepsilon}. \quad (38)$$

Bunnan

$$\frac{\partial^2 \mathbf{D}}{\partial t^2} = -c^2 \operatorname{rot} \operatorname{rot} \frac{\mathbf{D}}{\varepsilon}. \quad (39)$$

ten'lemesine iye bolami'z.

Dielektriklik sin'irgishligi ε bolg'an ortali'qta $\mathbf{D}$, $\mathbf{E}$ ha'm $\mathbf{P}$ vektorlari' bi'layi'nsha baylani'sqan:

$$\mathbf{D} = \mathbf{E} + 4\pi\mathbf{P} = \varepsilon\mathbf{E}. \quad (40)$$

Bunnan

$$4\pi\mathbf{P} = \mathbf{D} - \mathbf{E} = (\varepsilon - 1)\mathbf{E} = \chi\mathbf{E}$$

ten'lemesine iye bolami'z. Bul ten'lemede χ arqali' ortali'qti'n' polyarizaciyalani'wshi'li'g'i' belgilengen.

Dielektriklik sin'irgishlik ε u'sh bag'i't boyi'nsha da'wirli tu'rde o'zgeretug'i'n bolg'anli'qtan (da'wirleri a, b ha'm c , elementar quti'lardi'n' da'wirleri) χ da u'sh bag'i't boyi'nsha da'wirli o'zgeredi. Oni' qatarg'a jayi'p mi'na tu'rde ko'rsetiwge boladi':

$$\chi = \sum \chi_h e^{2\pi i(\mathbf{H}_h, \mathbf{r})}$$

Qatarg'a jayi'wdi'n' χ_h koefficientleri boyi'nsha an'latpani' jen'il tu'rde tabi'wg'a boladi'. Haqiyqati'nda da, eger elektron bazi' bir noqatta jaylasqan bolsa, onda elektromagnit tolqi'ni'ni'n' ta'sirindegi qozg'ali's ten'lemesi mi'na tu'rde jazi'ladi':

$$\ddot{x} + kx + \omega_0^2 x = \frac{e}{m} E_0 e^{i\omega t}.$$

Bul an'latpa elektr zaryadi'ni'n' awi'si'wi'n tabi'wg'a mu'mkinshilik beredi:

$$x = \frac{e}{m} \frac{E_0 e^{i\omega t}}{\omega_0^2 - \omega^2 + i\omega t}.$$

Ken'isliktin' berilgen noqati'ndag'i' ko'lem birligindagi polyarizaciya P ni'n' ma'nisi $P = \frac{\Sigma ex}{\Delta v}$ sha'rtinen ani'qlanadi'. Summalaw bazi' bir Δv ko'lemindegi barli'q zaryadlar boyi'nsha ju'rgiziledi.

Rentgen nurlari' ushi'n a'dette $\omega^2 \gg \omega_0^2$. Sonli'qtan P ni' bi'layi'nsha jazami'z:

$$4\pi P = -\frac{4\pi e^2}{m\omega^2} \frac{\Delta N}{\Delta v} E_0 e^{i\omega t} = -\frac{e^2}{m\pi v^2} \rho E_0 e^{i\omega t}.$$

Demek

$$\chi = -\frac{e^2}{m\pi v^2} \rho = -\frac{e^2 \lambda^2}{m\pi c^2} \rho = -\frac{e^2 \lambda^2}{m\pi c^2} \frac{1}{v} \sum_{hkl} F_{hkl} e^{2\pi i(\mathbf{H}_{hkl}, \mathbf{r})}. \quad (41)$$

Usi'g'an baylansli'

$$\chi = -\frac{e^2 \lambda^2}{m\pi c^2} \frac{F_h}{v}. \quad (42)$$

Bul an'latpada v arqali' elementar quti'ni'n' ko'lemi belgilengen.

Strukturali'q amplitudadag'i' dispersiyali'q du'zetiwlardi ($ik\omega$ ni') esapqa alg'anda atomli'q faktordin' jormal ag'zasi' $i\Delta f''$ payda boladi'. Bunday jag'dayda χ_h penen $\chi_{\bar{h}}$ shamalari' kompleksli tu'yinles shamalar boli'wdan qaladi' ha'm χ shamasi' kompleks shamag'a aylanadi'. Soni'n' menen birge ε nin' shamasi' 1 (bir) den az shamag'a ayri'latug'i'n bolg'anli'qtan, ondi' mi'na an'latpani' jazi'w mu'mkinshililine iye bolami'z:

$$\chi = \varepsilon - 1 \approx \frac{\varepsilon - 1}{\varepsilon} = 1 - \frac{1}{\varepsilon}.$$

Usi' jag'daylarga baylani'sli' (39)-ten'lemeneni bi'layi'nsha ko'shirip jazami'z:

$$\frac{\partial^2 \mathbf{D}}{\partial t^2} = -c^2 \operatorname{rot} \operatorname{rot} \mathbf{D} + c^2 \operatorname{rot} \operatorname{rot} \chi \mathbf{D}.$$

Bunnan ha'm $\operatorname{rot} \operatorname{rot} \mathbf{D} = \operatorname{grad} \operatorname{div} \mathbf{D} - \nabla^2 \mathbf{D}$ bolg'anli'qtan ha'm erkin zaryadlardi'n' joq ekenligi sha'rtinen $\operatorname{div} \mathbf{D} = 0$ (39)-ten'lemenin' en' aqi'rg'i' tu'rin alami'z

$$\nabla^2 \mathbf{D} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \mathbf{D}}{\partial t^2} = -c^2 \operatorname{rot} \operatorname{rot} (\chi \mathbf{D}). \quad (43)$$

(37)- ha'm (41)-formadag'i' $\mathbf{D}$ menen χ ni'n' ma'nislerin esapqa ali'p $\chi \mathbf{D}$ ko'beymesin mi'na tu'rde esaplap shi'g'ari'wg'a boladi':

$$\begin{aligned} \chi \mathbf{D} &= \sum_n \sum_q \psi_h D_n \exp[2\pi i(vt - (K_n + H_k, r)) = \\ &= \sum_n \sum_q (\chi \mathbf{D})_m \exp[2\pi i(vt - (K_n + H_k, r)). \end{aligned} \quad (44)$$

Bul jerde

$$(\chi \mathbf{D})_m = \sum_n \chi_{m-n} \mathbf{D}_n.$$

(43)-ten'lemege (40)-an'latpadan $\mathbf{D}$ ni', al (44)-an'latpadan $\chi \mathbf{D}$ ni' qoysaq ha'm ali'ng'an ten'lemeneni sheshemiz. Buni'n' ushi'n eger vektor $\mathbf{u} = \mathbf{u}(r, t) = \mathbf{A} e^{2\pi i(vt - \mathbf{K}r)}$ berilgen bolsa, onda

$$\operatorname{div} \mathbf{u} = -2\pi i(\mathbf{K}, \mathbf{u}),$$

$$\begin{aligned}
\nabla^2 \mathbf{u} &= -4\pi^2 K^2 \mathbf{u}, \\
\frac{\partial^2 \mathbf{u}}{\partial t^2} &= -4\pi^2 v^2 \mathbf{u}, \\
\text{rot } \mathbf{u} &= -2\pi i [\mathbf{K} \times \mathbf{u}], \\
\text{rot rot } \mathbf{u} &= 4\pi^2 \{K^2 \mathbf{u} - \mathbf{K}(\mathbf{K}, \mathbf{u})\} = 4\pi^2 K^2 (\mathbf{u})_K
\end{aligned}$$

ekenligin eske alami'z. Bul ten'lemedegi $(\mathbf{u})_K$ arqali' $\mathbf{K}$ vektori'na perpendikulyar bolg'an $\mathbf{u}$ di'n' qurawshi'si' belgilengen (ten'lemenini toli'q sheshiwdi biz bul tekstke kirgizbeymiz) Bunday jag'dayda (43)-ten'lemenin' sheshimin

$$\frac{K_m^2 - K^2}{K_m^2} \mathbf{D}_m = \sum_n \chi_{m-n} (\mathbf{D}_n)_m \quad (45)$$

ten'lemeler sistemasi' tu'rinde alami'z. Bul an'latpada $(\mathbf{D}_n)_m$ arqali' $\mathbf{D}_n$ vektori'ni'n' $\mathbf{K}_m$ vektori'ni'n' bag'i'ti'ndagi' proekciyasi' boli'p tabi'ladi'. $\mathbf{K}$ bolsa tolqi'n vektori'ni'n' bosli'qtag'i' ma'nisi.

(45)-ten'lemeler si'zi'qli' ten'lemeler sistemasi' boli'p tabi'ladi'. Bul ten'lemelerdin' sani' indukciyasi' $\mathbf{D}_m$ bolg'an tolqi'nlar sani'na ten'. Polyarizaciyalanbag'an tolqi'n ushi'n polyarizaciyani'n' eki hali' bir birinen g'a'rezsiz bolg'anli'qtan $\mathbf{D}_m$ nin' n ma'nisi ushi'n $2n$ ten'lemege iye bolami'z.

(45)-ten'lemeler sistemasi' principinde sheksiz ko'p ten'lemeler sistemasi'nan turi'wi' mu'mkin. Biraq bull ten'lemeler sistemasi'n di'qqat penen u'yreniw $K_m^2 - K^2$ ayi'rmasi'ni'n' o'siwi menen $\mathbf{D}_m$ shamalari'ni'n' sani'ni'n' ju'da' kemeyip ketetug'i'nli'g'i'n ko'rsetedi. Haqi'yqati'nda da (45)-sistemani'n' on' ta'repi bull sistemadag'i' bir ten'lemeden ekinshi ten'lemege o'tkende u'lken shamag'a o'zgere almaydi', yag'ni'y $K_m^2 - K^2$ ayi'rmasi'ni'n' ma'nisi kishi bolsa $\mathbf{D}_m$ nin' ma'nisi u'lken boladi'. Bunday jag'dayda ten'lemeler sistemasi'ndag'i' ten'lemeler sani' kemeyedi.

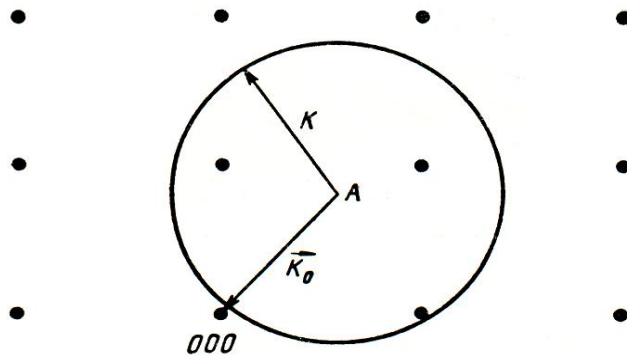
$K_m^2 - K^2$ ayi'rmasi' kishi bolg'anli'qtan (45)-ten'lemenini bi'layi'nsha ko'shirip jaza alami'z:

$$2\varepsilon_m \mathbf{D}_m = \sum_n \chi_{m-n} (\mathbf{D}_n)_m \quad (46)$$

Bul an'latpada $\varepsilon_m = \frac{|\mathbf{K}_m| - |\mathbf{K}|}{|\mathbf{K}|}$ ju'da' kishi shama boladi' (tolqi'n vektori' $K = \frac{1}{\lambda}$ bolg'anli'qtan biz $|\mathbf{K}_m| - |\mathbf{K}|$ ayi'rmasi'n nolge ten' dep oylawi'mi'z mu'mkin). Biraq (45)-ten'leme joqari'da ayti'lg'anlarg'a qosi'msha $|\mathbf{K}_m|$ nin' $|\mathbf{K}|$ g'a ten' bola almaytug'i'nli'g'i'n da ko'rsetedi. Demek kristall ishindeg'i' tolqi'nni'n' tarqali'w tezligi bosli'qtag'i' tolqi'nni'n' tarqali'w tezligine ten' bolmaydi' dep juwmaq shi'g'arami'z. Haqi'yqati'nda da ε shamasini'n' nolge ten' boli'wi' $\mathbf{D}_m$ shamasini ushi'n sheksizlikti beredi. Al bunday jag'day fizikali'q ma'niske iye bola almaydi'. Bul ε shamasini rezonansli'q qa'telik atamasi'na iye boldi'.

Joqari'da ayti'li'p o'tilgenindey $\mathbf{K}_m$ nin' bir neshe ma'nisi ushi'n ε_m lerdin' ma'nisleri kishi bolsa (ε_m nin' ma'nisleri haki'yqati'nda da kishi shama ha'm 10^{-5} ten aspaydi'), onda sa'ykes $\mathbf{D}_m$ ler u'lken ma'niske iye boladi'. Bunday jag'dayda (46)-sistemani' sheshkende basqa barli'q ag'zalardi' esapqa almawg'a boladi'. Bul a'piwayi' usi'l Evald sferasi'n paydalani'p ku'shli $\mathbf{D}_m$ lerdi saylap ali'w mu'mkinshiligin beredi. Tap usi'nday a'piwayi' jollar menen kinematikali'q teoriyada difrakciyag'a ushi'rag'an nurlardi'n' bag'i'ti'n ani'qlaydi'.

Meyli kerri pa'njerede tolqi'n vektori' K_0 bolg'an tolqi'n tarqalatug'i'n bolsi'n (demek bul vektordi'n' uzi'nli'g'i' da, bag'i'ti' da belgili degen so'z, 6-su'wret). Difrakciyag'a ushi'rag'an tolqi'nlardi'n' shashi'raw orayi'n A arqali' belgileymiz ha'm usi' noqattan (000) tu'yinine K_0 vektori'n ju'rgizemiz [A noqati' menen (000) tu'yinine shekemgi qashi'qli'q K_0 vektori'ni'n' uzi'nli'g'i'na ten' degen so'z]. A noqati' orayi' ha'm radiusi' K bolg'an sfera ju'rgizemiz (Rentgenografiyada bul sferani' Evald sferasi' dep ataydi'). Bul sfera (000) tu'yini arqali' o'tpeydi. Sebebi $|K_m| \neq |K|$. Biraq (000) noqati' sferag'a ju'da' jaqi'n jaylasqan boladi'. Sebebi $\Delta K = K\varepsilon_0 = K(n-1) \approx K \cdot 10^{-5}$. Eger kerri pa'njerenin' qanday da bir baska tu'yini Evald sferasi'na jaqi'n jaylasqan bolsa, onda oni'n' ushi'n ε_m shamasi' kishi, biraq D_m nin' shamasi' u'lken boladi'.



7-su'wret.
Dinamikali'q teoriya boyi'nsha Evald sferasi' menen kerri pa'njere vektori'ni'n' o'z-ara jaylasi'wlari'.

7-su'wrette keltirilgen jag'day rentgen nurlari'ni'n' difrakciyasi'ni'n' dinamikali'q teoriyasi'nda ori'n alg'an jag'daydi'n' rentgen nurlari'ni'n' difrakciyasi'ni'n' kinematikali'q teoriyasi'nda da ori'n alatug'i'nli'g'i'n ayqi'n ko'rsetedi. Ayi'rma sonnan ibarat, kinematikali'q teoriyada (000) noqati'nan K_0 vektori' emes, al K vektori' ju'rgiziledi.

6-§. Elektronlar tolqi'nlari' ushi'n dinamikali'q teoriyani'n' qollani'li'wi'

Elektronlardi'n' difrakciyasi'ni'n' kinematikali'q teoriyasi' elektronli'q-mikroskopiya'li'q su'wretlerdi interpretaciyalaw ushi'n sapali'q jaqtan paydali' teoriya boli'p tabi'lsa da, bul teoriyani' difrakciyag'a ushi'rag'an tolqi'nni'n' amplitudasi' q_g kristalg'a kelip tusi'wshi tolqi'nni'n' amplitudasi' q_0 dan kishi bolg'an jag'dayda g'ana tabi'sli' tu'rde paydalani'w mu'mkin. Qali'nli'g'i' t bolg'an jetilispegen kristaldagi' z teren'ligindagi' atomlardi'n' awi'si'wlari' $R(z)$ bolsi'n. Bunday jag'dayda izertleniwshi kristalli'q folgani'n' to'mengi betindagi difrakciyag'a ushi'rag'an tolqi'nni'n' amplitudasi' q_g mi'na shamag'a ten':

$$q_g = \frac{\pi i}{\xi_g} q_0 \int_0^t e^{[-2\pi i s z - 2\pi i g \cdot R(z)]} dz. \quad (47)$$

Bul an'latpada ξ_g arqali' ekstinkciya'li'q uzi'nli'q, al s arqali' da'l Bregg awhali'nan awi'si'w belgilengen. g bolsa kerri pa'njerenin' vektori'. Bul ten'leme ayi'ri'm atomlar ta'repinen shashi'rati'lg'an tolqi'nlardi'n' amplitudalari'n fazani' esapqa alg'an halda qosi'wdi'n' ja'rdeminde ali'ng'an. Biraq, eger difrakciyag'a ushi'rag'an tolqi'nni'n' amplitudasi' ξ_g u'lken ma'niske iye bolsa, onda difrakciyag'a ushi'rag'an tolqi'nlardi'n' o'zlerinin' atomlardagi' shashi'rawi'n esapqa ali'wi'mi'z kerek boladi'. Kinematikali'q teoriyani'n' bul sheklengenligi a'sirese s tin' ma'nisi ju'da' kishi bolg'anda (Bregg sha'rti da'l ori'nlang'anda) ayqi'n ko'rinedi. Bul jag'day (47)-an'latpada kelip tusi'wshi tolqi'nni'n' amplitudasi' $q_0 = 1$ bolg'anda ani'q ko'rinedi:

$$|q_g|^2 = \frac{\pi^2}{\xi_g^2} \frac{\sin^2 \pi t s}{(\pi s)^2}. \quad (48)$$

Bul an'latpa $s = 0$ sha'rti ori'nlang'anda

$$|q_g|^2 = \left(\frac{\pi t}{\xi_g}\right)^2.$$

Bul an'latpadan difrakciyag'a ushi'rag'an tolqi'nni'n' intensivliginin' kristalg'a kelip tu'siwshi tolqi'nni'n' intensivliginen u'lken boli'p shi'g'i'w mu'mkinshiligi payda boladi'. Haqi'yqati'nda da t ni'n' ma'nisi $\frac{\xi_g}{\pi}$ den u'lken bolsa $q_g > q_0$ boli'p shi'g'adi'. Elektron mikroskoplari'nda izertlenetug'i'n kristalli'q denelerdin' qali'n'li'g'i' a'dette $10\xi_g$ den u'lken bolmaydi'. Demek bunday jag'daydarda kinematikali'q teoriya duri's na'tiyjelerdi bermeydi. Sonli'qtan kristaldag'i' atomlarda shashi'rag'an barli'q tolqi'nlardi'n' (izertlenetug'i'n kristalli'q denege kondensorli'q linzadan kelip tu'siwshi, difrakciyag'a ushi'rag'an tolqi'nlardi'n') fazalari'n esapqa ali'w menen qosi'w za'ru'rli'gi payda boladi'. Usi'nday jag'daydardi' esapqa ali'p kristallarda difrakciyag'a ushi'rag'an tolqi'nlardi'n' intensivligin esaplaytug'i'n teoriyani' dinamikali'q teoriya dep ataydi'.

Dinamikali'q teoriya elektronlar tolqi'nlari'ni'n' kristalli'q denelerdegi difrakciyasi'n izertlew bari'si'nda pu'tkilley ku'tilmegen jan'a kubi'li'slardi'n' ori'n alatug'i'nli'g'i'n da ko'rsetedi. Bunday qubi'li'slar qatari'na adsorbciyali'q dep atalatug'i'n fizikali'q effektlar kiredi. Sonli'qtan biz kinematikali'q teoriyani'n' a'piwayi'li'g'i' oni'n' en' u'lken arti'qmashli'g'i' boli'p esaplansa da, oni'n' kemshilikleri rentgen nurlari'ni'n' kristalli'q denelerdegi kinematikali'q difrakciyasi'nan a'dewir u'lken orni' iyeleydi ha'm elektronlardi'n' difrakciyasi'nda dinamikali'q teoriya tiyqarg'i' ori'ndi' iyeleydi.

Biz joqari'da elektronlar tolqi'nlari'ni'n' tolqi'n uzi'nli'g'i'ni'n' rentgen tolqi'nlari'ni'n' tolqi'n uzi'nli'g'i'nan a'dewir kishi bolatug'i'nli'g'i'n ko'rgen edik. Olardi'n' tolqi'n uzi'nli'qlari'n ha'm ZnS kristallari'ndag'i' (220) tegisliklar semeystvosi'nda $\left(d_{220} = \frac{a}{\sqrt{8}} = \frac{5,4145}{\sqrt{8}} = 1,91431\right)$ qanday difrakciyali'q mu'yeshke buri'latug'i'nli'g'i'n mi'na keste ja'rdeminde beremiz:

Tolqi'n	$d, \text{\AA}$	$2\theta = \arcsin\left(\frac{\lambda}{2d}\right)$, mu'yeshlik gradus
Rentgen tolqi'ni' (Cu anodi'ni'n' α -spektri).	1.5418	49,5
Elektronlar tolqi'ni', anodli'q kernew 100 kV bolg'anda.	0,0370144	1,10787

Solay etip a'dettegi rentgenografiyadag'i' 50 gradusli'q difrakciyali'q mu'yeshin' orni'na elektron mikroskopiyasi'nda shama menen 1 gradusli'q mu'yesh ca'ykes keledi. Sonli'qtan elektronlar kristaldi'n' betine derlik perpendikulyar jaylasqan atomli'q tegisliklerde difrakciyag'a ushi'raydi' ha'm difrakciyag'a ushi'rag'an tolqi'nlardi' kristaldi'n' ishinde oni'n' betine perpendikulyar etip ali'ng'an jin'ishke kolonka arqali' tarqaladi' dep esaplawg'a boladi' (8-su'wret).

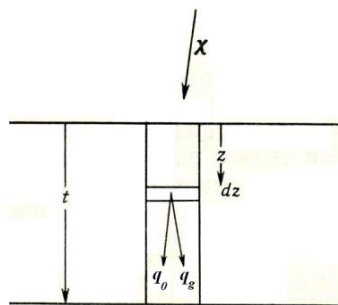
Biz kristalda tarqalatug'i'n eki tolqi'ndi' esapqa alami'z. Olardi'n' birinshisi kristalg'a kelip tu'setug'i'n tolqi'n [amplitudasi' $q_g(z)$], ekinshisi kristalda difrakciyag'a ushi'rag'an tolqi'n [amplitudasi' $q_0(z)$], z arqali' kristaldi'n' betine perpendikulyar bag'i'ttag'i' koordinata belgilengen. Bunday jag'dayda elektronlar

$$\psi(z) = q_0(z) \exp(2\pi i \chi \cdot \mathbf{r}) + q_g(z) \exp(2\pi i \chi' \cdot \mathbf{r}) \quad (49)$$

Bul an'latpada χ arqali' energiyasi' eU bolg'an elektronlardi'n' tolqi'n vektori' belgilengen (yag'ni'y $\frac{h^2\chi^2}{2} = eU$) . χ' bolsa uzi'nli'g'i' χ ni'n' uzi'nli'g'i'nday bolg'an shashi'rag'an (difrakciyag'a ushi'rag'an) tolqi'nni'n' tolqi'n vektori'. Kinematikali'q teoriyadag'i'day mi'na an'latpani' jazami'z:

$$\chi' = \chi + g + s. \quad (50)$$

Bul an'latpada s arqali' Bregg awhali'nan awi'si'wdi' ani'qlaytug'i'n kishi vektor.



8-su'wret.

Kristaldag'i' kolonka ishinde tarqali'wshi' tuwri' tu'siwshi q_0 ha'm difrakciyag'a ushi'rag'an q_g tolqi'nlari'

Elektronlardi'n' difrakciyasi'ni'n' kinematikali'q teoriyasi'nda tu'siwshi nurdi'n' amplitudasi' q_0 turaqli' shama dep esaplanadi'. Biraq kristaldi'n' ishinde bul tolqi'nni'n' atomlarda (atomli'q tegisliklerde) ko'p qaytara shashi'rag'ani' sebepli bul shamani' da, difrakciyag'a ushi'rag'an tolqi'nni'n' amplitudasi' bolg'an q_g shamasini' da turaqli' dep esaplay almaymi'z. Olar kristaldi'n' teren'ligi z ke baylani'sli' o'zgeredi (kemeyedi, 8-su'wretti qaran'i'z).

A'llette folgadag'i' (izertlenetug'i'n juqa kristalli'q denedegi) atomlar tu'siwshi tolqi'nda da, difrakciyag'a ushi'rag'an tolqi'ndi' da barli'q bag'i'tlarda shashi'ratadi'. Biraq biz ko'pshilik bag'i'tlarda shashi'rag'an tolqi'nlardi'n' interferenciyanin' saldari'nan bir birin so'ndiretug'i'nli'g'i'n esapqa alami'z (Freneldin' yari'm da'wirlik zonalari'n eske tu'siremisiz). Biz eki bag'i'tti'n' bar ekenligin ha'm usi' bag'i'tlarda tolqi'nlardi'n' bir birin ku'sheyetug'i'nli'g'i'n bilemisiz. Olardi'n' birinshisi tuwri' bag'i'tta tarqalatug'i'n nurlar, bul nurlar $\chi \rightarrow \chi$, $\chi' \rightarrow \chi'$ bag'i'tlarda fazalas (birdey fazada) tarqaladi'. Ekinshisi Bregg mu'yeshinde tarqalatug'i'n nurlar, yag'ni'y $\chi \rightarrow \chi'$, $\chi' \rightarrow \chi$ nurlari' bir biri menen s shamasini'n' ma'nisli baylani'sli' fazada boladi'. Sonli'qtan difrakciyag'a ushi'rag'an tolqi'nni'n' qali'n'li'g'i' dz bolg'an kristall arqali' o'tkendegi o'simi dq_g mi'nag'an ten' boladi':

$$dq_g = \left\{ \frac{\pi i}{\xi_0} q_g(z) + \frac{\pi i}{\xi_g} q_0(z) \exp[2\pi i(\chi - \chi') \cdot r] \right\} dz. \quad (51)$$

Bul an'latpadag'i' $q_g(z)$ ke proporcional bolg'an birinshi ag'za tuwri' bag'i'ttag'i' shashi'rawg'a u'les, al ekinshi $q_0(z)$ ke proporcional ha'm a'dettegidey fazali'q ko'beytiwshige iye ha'm kinematikali'q teoriyada qollani'latug'i'n ag'za Bregg shashi'rawi'ni'n' qosqan u'lesi boli'p tabi'ladi'. Eki ag'za da plastinkani'n' qali'n'li'g'i' dz ke proporcional ha'm eki ag'za da i ko'beytiwshisine iye. Bul jag'day shashi'rag'an tolqi'nlardi'n' amplitudasi'ni'n' plastinkani'n' to'mengi betindegi ma'nisin alg'ani'mi'zdi', bul jerde olardi'n' fazasi'ni'n' tuwri' tu'sken tolqi'nni'n' fazasi'nan 90° qa aji'ralatug'i'nli'g'i'n bildiredi. (51)-ten'lemedegi ξ_0 ha'm ξ_g shamalari' $f(0)$ ha'm $f(2\theta)$ shamalari'na kerii proporcional (bul shamalar atomli'q shashi'raw amplitudalari' boli'p tabi'ladi'). Haqi'yki'ti'nda ξ_g shamasini' ekstinkciyalig' uzi'nli'q boli'p tabi'ladi'. Biraq biz ha'zir ol shamalardi' fundamentallig' fizikali'q turaqli'lar arqali' an'latpaymi'z.

Endi tuwri' tu'siwshi tolqi'n ushi'n (51)-an'latpag'a sa'ykes an'latpani' jazami'z:

$$dq_0 = \left\{ \frac{\pi i}{\xi_0} q_0(z) + \frac{\pi i}{\xi_g} q_g(z) \exp[2\pi i(\chi' - \chi) \cdot r] \right\} dz. \quad (52)$$

(50)-an'latpani' paydalani'p ha'm s vektori'ni'n' z ko'sheri bag'i'ti'ndag'i' vektor ekenligin esapqa ali'p biz (51)- ha'm (52)- ten'lemelerdi

$$\begin{aligned} \frac{dq_0}{dz} &= \frac{\pi i}{\xi_0} q_0 + \frac{\pi i}{\xi_g} q_g \exp(2\pi i s z), \\ \frac{dq_g}{dz} &= \frac{\pi i}{\xi_0} q_g + \frac{\pi i}{\xi_g} q_0 \exp(-2\pi i s z) \end{aligned} \quad (53)$$

tu'rine ali'p kelemiz.

q_0 ha'm q_g amplitudalari'n bir biri menen baylani'sti'ratug'i'n bul birinshi ta'rtpi differencial ten'lemeler jubi' dinamikali'q teoriyadag'i' tiykarg'i' ten'lemeler sistemasi' dep esaplanadi'.

(53)-ten'lemelerdi quri'li'si'nda bi'zi'qli'qlar (defektler) bolg'an (quri'li'si' jetilspegen) kristallar ushi'n jen'il tu'rde uli'wmalasti'ri'w mu'mkin. Biz bul jerde kristallardi'n' quri'li'si'ndag'i' buzi'qli'qlardi'n' atomlardi'n' duri's ori'nlarina R awi'si'wi'na ali'p keletug'i'nli'g'i'n eske tu'siremez (basqa so'z benen aytqanda kristaldag'i' buzi'qli'qlar (strukturali'q defektler) kristaldi'n' ayi'ri'm oblastlari'ni'n' mayi'si'wi'na, yag'ni'y atomlardi'n' awi'si'wi'na ali'p keledi). Usi' jag'daydi' esapqa alsaq biz defektleri bar kristallar ushi'n tolqi'nlari amplitudasi' ushi'n mi'na ten'lemeler sistemasi'n alami'z:

$$\begin{aligned} \frac{dq_0}{dz} &= \frac{\pi i}{\xi_0} q_0 + \frac{\pi i}{\xi_g} q_g \exp(2\pi i s z + 2\pi i \mathbf{g} \cdot \mathbf{R}), \\ \frac{dq_g}{dz} &= \frac{\pi i}{\xi_0} q_g + \frac{\pi i}{\xi_g} q_0 \exp(-2\pi i s z - 2\pi i \mathbf{g} \cdot \mathbf{R}) \end{aligned} \quad (54)$$

Biz joqari'da keltirgen jag'daylar kristal arqali' tuwri' o'tiwshi ha'm kristalda shashi'rag'an (difrakciyag'a ushi'rag'an) tolqi'nlardi'n' amplitudalari'ni'n' qanday jollar menen esaplanatug'i'nli'g'i'n ko'rsetedi. Soni'n' menen birge kristaldag'i' defektlerdin' elektronlar tolqi'nlari'ni'n' difrakciyasi' ushi'n tek atomlardi'n' o'z orni'nan awi'si'wi' R menen g'ana ko'rinetug'i'nli'g'i'n an'g'ardi'q.

Ayqi'n kristallar ushi'n (53)- ha'm (54)-ten'lemeler sistemasi'n da'l sheshiw ha'zirgi waqi'tlari' hesh kanday qi'yi'nshi'li'qti' payda etpeydi. Sebebi bizin' ku'ndelikli turmi'si'mi'zda ken'nen qollani'li'p ju'rgen «Mathematica 5» si'yaqli' programmalaw tilleri differenciallar ten'lemelerin sanli' tu'rde sheshiwde bizge og'ada jaqsi' imkaniyatlar di jarati'p beredi.

III bap. Elektronli'q mikroskopiya tiykarlari'

Ha'zirgi zaman elektron mikroskopiya' eksperimentatorlar ta'repinen fizikali'q material tani'wda, qatti' deneler fizikasi'nda, biologiyada, medicinada ha'm ilimnin' basqa da tarawlarda jiyi paydalani'latug'i'n izertlew din' en' joqari' informaciya'li'q usi'llari'ni'n' biri boli'p tabi'ladi'. A'dettegi optikali'q mikroskopqa sali'sti'rg'anda o'tiw elektronli'q mikroskopi' bir qansha arti'qmashli'qqa iye. Bul arti'qmashli'qlardi' biz to'mende ko'rip o'temiz. Zatlardi'n' quri'li'si'n mikroskopiya'li'q izertlew din' tiykarg'i' xarakteristikasi' ayi'ra ali'wshi'li'q qa'biletlik - su'wreti bir biri menen qosi'li'p ketpeytug'i'n ob'ektin' eki noqati' arasi'ndag'i' qashi'qli'q boli'p tabi'ladi' (Qatan' tu'rde aytqanda ayi'ra ali'w yamasa ayi'ra

ali'wshi'li'q qa'biletlik dep uzi'nli'qti'n' o'lshe mine iye ob'ekttin' eki noqati' arasi'ndag'i' qashi'qli'qti' emes al usi' qashi'qli'qqa keri shamani' aytadi' (mi'sali' fotoplastinkani'n' ayi'ra ali'w qa'biletligi 400 si'zi'q/mm, yag'ni'y bo'lek su'wretlenetug'i'n noqatlar arasi'ndag'i' qashi'qli'q qanshama kishi bolsa, ayi'ri' ali'w qa'biletligi sonshama joqari' boladi'). Biraq a'dette ayi'ra ali'w si'pati'nda a'dette usi' qashi'qli'qti'n' o'zin ko'rsetedi (keltirilgen mi'sal ushi'n 2,5 mkm).

Optikada baqlawdi'n' qa'legen usi'li'ni'n' ayi'ra ali'wshi'li'g'i' principinde paydalani'li'p ati'rg'an nurlani'wdi'n' tolqi'n uzi'nli'g'i'nan joqari' bola almaydi'. Bul shama jaqti'li'q nuri' ushi'n 0.5-0.7 mkm di' quraydi'. Elektronni'n' tolqi'n uzi'nli'g'i' oni'n' impuls menen, yag'ni'y potentsiali' V bolg'an tezletiwshi elektr maydani'na baylani'sli':

$$\lambda = \frac{1}{k} = \frac{h}{p}. \quad (1.1)$$

Bul an'latpada $h = 6,62606876(52) \cdot 10^{-34}$ Dj's arqali' Plank turaqli'si', p arqali' elektronni'n' impuls belgilengen. Relyativistlik emes jaqi'nlasiwda (Nyuton mexanikasi' tilinde) impuls mi'na formula ja'rdeminde esaplanadi':

$$\frac{p^2}{2m} = eV. \quad (1.2)$$

Bul an'latpadag'i' m elektronni'n' massasi' al e oni'n' zaryadi'ni'n' absolyut ma'nisi. (1.1)-aqlatpani' (1.2)-aqlapag'a qoyi'p tolqi'n uzi'nli'g'i' ushi'n formula alami'z:

$$\lambda = \frac{12,225}{\sqrt{V}}. \quad (1.3)$$

Relyativistlik jaqi'nlasiwda massa, energiya ha'm impuls arasi'ndag'i' baylani'slar basqasha formulalar menen beriledi. Bul jag'dayda (1.3)-aqlatpani'ning tin' orni'na mi'na formulani' alami'z:

$$\lambda = \frac{12,27}{(1 + 0,978 \cdot 10^{-6} V) \sqrt{V}} \quad (1.4)$$

Bul formulalardi' paydalani'p elektron mikroskopi'ndag'i' elektronni'n' tolqi'n uzi'nli'g'i'n an'sat esaplawg'a boladi'. Ju'da' jiyy paydalani'latug'i'n tezletiwshi potentsial $V = 100$ kv bolg'anda $\lambda = 0,037$ Å. Bul shama jaqti'li'q tolqi'ni'ni'n' tolqi'n uzi'nli'g'i'na sali'sti'rg'anda ju'da' kishi. Sonli'qtan elektron mikroskopi'ni'n' ayi'ri'a ali'wshi'li'q qa'biletligi optikali'q mikroskopti'n' ayi'ra ali'wshi'li'q qa'biletligine sali'sti'rg'anda a'dewir jaqsi'. A'lbette elektron mikroskopi' ob'ekttegi elektronlardi'n' difrakciyasi'n (difraktogrammani') baqlawg'a da mu'mkinshilik beretug'i'nli'g'i' tu'sinikli. Basqa so'z benen aytqanda elektron mikroskopi' u'lginin' keri pa'njeresinin' kesimin baqlawg'a mu'mkinshilik beredi. Bul jag'day elektron mikroskopi'n kristalli'q pa'njerenin' simmetriyasi', quri'li's defektlari, izertlenip ati'rg'an kristalli'q quri'li'si' haqqi'nda bahali' mag'li'wmtalardi' beretug'i'n ten'i joq a'sbapqa aylandi'radi'. Mikrofotosu'wretlerdi elektron difrakciyasi' su'wretleri menen sali'sti'ri'p eksperimentator kristalli'q saylap ali'ng'an ushastkasi'ni'n' difraktogrammasi'n u'yreniw, haqi'yqi'y waqi't rejiminde izertlenip ati'rg'an ob'ekttin' quri'li'si'na ta'sir eteug'i'n processlerdi tikkeley baqlawg'a mu'mkinshilik aladi'. Soni'n' menen birge elektron da'stesi izertlenetug'i'n zat penen

ta'sirleskende payda bolatug'i'n nurlani'wdi' registraciyalaytug'i'n ha'r qi'yli' qosi'msha du'zilislerdi («Qosi'msha du'zilis» termini «pristavka» terminine sa'ykes keledi) paydalang'anda u'lginin' saylap ali'ng'an ushastkasi'ni'n' elementlik qurami'n ani'qlawg'a mu'mkinshilik alami'z.

Elektronli'q mikroskopti'n' payda ob'ekttin' su'wretin qansha shamag'a u'lkeyte alatug'i'nli'g'i' ayri'qsha a'hmiyetke iye. Oni'n' ushi'n biz mikroskopti'n' ha'r bir linzasi'ni'n' u'lkeytiwi haqqi'nda mi'na mag'li'wmatlardi' keltiremiz:

Ob'ektivlik linza	x 50
Arali'qli'q linza	x 10
Proekciyalı'q linza	x 100

Demek biz keltirgen mag'li'wmatlar boyi'nsha elektron mikroskopi'nda $50 \times 20 \times 100 = 100000$ ese u'lkeytiwge iye bolami'z (yag'ni'y vodorod atomi'ni'n' diametri 10^{-2} sm ge shekem u'lkeyedi).

Elektronli'q mikroskop Berdaq ati'ndagi' Qaraqalpaq ma'mleketlik universitetinin' fizika fakultetinin' uli'wma fizika kafedrası'ni'n' laboratoriyaları'nda bir qatar strukturalı'q ma'selelerdi sheshiw ushi'n 1980-jı'llardan baslap paydalani'ldi' (UEMV-100k ha'm EMV-100 lm mikroskoplari') ha'm ZnS, ZnSe, Pb₃(VO₄) kristallari'n, tiykari' uglerod bolg'an ko'p qatlamli' kristalli'q zatları'n' quri'li'si'n izertlew processinde bir qansha ilimiy na'tiyjeler ali'ndi'.

§ 1. Tariyxi'y sholi'w

Tiykarg'i' materialdi' bayanlamastan buri'n a'dette qarap shi'g'i'layi'n dep ati'rg'an ma'selenin' tariyxi'n bayanlaydi'. Elektron mikroskopiya'sında buni' islew an'sat. Sebebi oni'n' payda boli'w tariyxi' a'debiyatta jaqsi' sa'wlelengen, al oni'n' tiykari'n sali'wshi'lar ishinde du'nyalı'q ataqa iye ilimpazlar ko'p. Soni'n' menen birge tariyxi'y kirisiw pitkeriw qa'nigelik jumi'si' ushi'n za'ru'rli bolg'an bazi' bir ma'selelerdi toli'g'i'raq sa'wlelendiriw ushi'n da kerek. Mi'sali' elektronni'n' fizikali'q qa'siyetleri elektron mikroskopiya'si' ushi'n ju'da' a'hmiyetli ori'n iyeleydi. Soni'n' ushi'n bul ma'sele tariyxi'y sholi'wda ayti'li'p o'tiledi.

En' da'slep korpuskulalı'q-nurli'q optikali'q a'sbaplardi'n' fizikali'q tiykari'ni'n' elektronli'q mikroskoplar payda bolmastan derlik ju'z ji'lday buri'n 1834-jı'li' U.R.Gamilton ta'repinen qalang'anli'g'i'n atap o'temiz. Ol optikali'q bir tekli emes ortalı'qlardan jaqti'li'q nurlari'ni'n' o'tiwi menen ku'sh maydanları'ndagi' bo'lekshelerdin' traektoriyaları' arası'nda uqsasli'qti'n' bar ekenligin tapti'.

Magnit linzalarg'a iye ha'zirgi zaman elektron mikroskopi'n do'retiw ha'r tu'rli bolg'an eksperimentalli'q ha'm teoriyalı'q izertlewlerdin' zor juwmag'i' boli'p tabi'ladi'. Ol jumi'slardi'n' en' tiykari' Dj.Tomsonni'n' gaz razryadları'nda payda bolatug'i'n katod nurlari' menen islegen jumi'slari' boli'p tabi'ladi'. Ol katod nurlari'ni'n' elektr maydani'ni'n' ta'sirinde buri'latug'i'nli'g'i'n, bul nurlardi'n' massasi' vodorod atomi'ni'n' massasi'nan mi'n' esedey kishi bolg'an teoriya zaryadlang'an bo'lekshelerdin' ag'i'mi' ekenligin ko'rsetti. Magnit ha'm elektr maydanları'ni'n' tasirinde Dj.Tomsong'a elektronni'n' zaryadi'ni'n' oni'n' massasi'na qatnasi'n ani'qlawdi'n' sa'ti tu'sti ha'm oni'n' ha'zirgi waqitlarda qabi'l etilgen ma'nisi $e/m = 1,758820174 \cdot 10^{-7}$ Kl/kg shamasi'na teḡ («Uspexi fizisheskix nauk» jurnali'. Tom 173. № 3. 2003-jı'l. 339-344 betler. Fizikali'q shamalar menen fizikali'q turaqli'lardi'n' ma'nislerinin' barli'g'i' usi' maqaladan ali'ndi'). Bul qatnas ju'da' u'lken a'hmiyetke iye, sebebi oni'n' ja'rdeminde elektronni'n' impulsi ani'qlanadi':

$$Hr = \frac{m}{e} v. \quad (1.5)$$

Bul formulada r arqali' v tezligi menen qozg'ali'wshi', kernewliligi H bolg'an si'rtqi' magnit maydani'na perpendikulyar bag'i'tta qozgalatug'i'n elektronni'n' traektoriyasi'ni'n' iymeklilik radiusi' belgilengen. Elektron da'stesinin' magnit maydani'nda si'ni'wi' qubi'li'si' ashi'lgan bolg'anli'qtan e/m qatnasi' linzalardi' esaplaw ushi'n tikkeley ma'niske iye boladi'. Biraq usi'g'an karmastan Bush 1926-ji'li' birinshi magnit linzasi' haqqi'nda maqalasi'n' baspadan shi'g'arg'ansha bir neshe ji'llar o'tti. Bunnan buri'ni'raq basqa bir a'hmiyetli eksperimentte, atap aytqanda Milliken ta'repinen elektronni'n' zaryadi' ani'qlangan edi, al bul oni'n' massasi'n' da'rha'l ani'qlawg'a imkaniyat berdi. Ha'zirgi waqi'tlardag'i' elektronni'n' zaryadi'

$$e = 1,602176462(63) \cdot 10^{-19} \text{ Kl.}$$

Bunnan ha'zirgi waqi'tlari' qabi'l etilgen elektronni'n' massasi'

$$m = 9,10938188(72) \cdot 10^{-31} \text{ kg.}$$

Bul e ha'm m nin' ma'nisleri, magnit maydani'nda qozg'ali'wshi' elektrong'a ta'sir etiwshi ku'shtin' shamasii' elektrostatikali'q tezleniwidin' shamasii' menen birge ja'ne si'ni'w elektron pushkalari'n, magnit yamasa elektrostatikali'q linzalardi' konstrukciyalaw ushi'n en' za'ru'rli bolg'an shamalar boli'p tabi'ladi'.

Dj.Tomsonni'n' birinshi eksperimentlerinen keyin elektron mashqalalari'n sheshiwge a'sirese Lorenc ha'm Eynshteyn si'yaqli' teoretikler teperish tu'rde qatnasti'. Lorenc elektron teoriyasi'n rawajlandi'ri'w menen shugi'llandi'. Lorenc boyi'nsha elektrondi' Maksvell teoriyasi'na sa'ykes zaryad penen maydan tarqalg'an bo'lekshe si'pati'nda ko'z aldi'g'a elesletiw kerek. O'zinin' qozg'ali'wshi' koordinatalar sistemasi'n tu'rlendiriw teoriyasi'na sa'ykes Lorenc massani'n' tezlikten mi'na ta'rdegi g'a'rezliligin boljadi':

$$m = m_0 / (1 - \gamma^2)^{1/2}. \quad (1.6)$$

Bul formuladag'i' $\gamma = v/c$ - bo'lekshenin' tezliginin' jaqti'li'q tezligine qatnasi'. m_0 arqali' bo'lekshe qozg'almay turg'an koordinatalar sistemasi'ndag'i' massasi'. (2)-formulani' ilimga kirgiziw menen Lorenc ta'limati' massani'n' fizikali'q ta'biyati' haqqi'nda duri's emes ta'limatti'n' payda boli'wi'na ali'p keldi. Ha'zirgi waqi'tlari' massani'n' relyativistlik invariant ekenligi, oni'n' tezlikten g'a'rezsizligi ko'pshilikke belgili. Soni'n' menen birge ilimiy ha'm oqi'w a'debiyatlari'nda massani'n' tezlikten g'a'rezliliginin' birinshi avtorlari'ni'n' biri Eynshteynnin' o'zi, bul juwmaq Kaufman ta'repinen eksperimentte tasti'yi'qlandi' degen de mag'li'wmatlar ko'p ushi'rasadi'. Biraq bul pikirge biz qosi'lmaymi'z. Sebebi o'zini'g' ilimiy miynetlerini'g' birinde Eynshteyn mi'naday juwmaqlar shi'g'aradi' (Qaran'i'z: A.Eynshteyn. Zavisit li inerciya tela ot soderjasheysya v nem energii. Ann. Phys., 1905, 18, 639-641. Internet te www.physics1189.front.ru/EinshteinEmc2.pdf):

«Denenin' massasi' onda toplang'an energiyani'n' o'lshemi; eger energiya L shamasii'na o'zgeretug'i'n bolsa, onda oni'n' massasi' sa'ykes $L/(9 \cdot 10^{20})$ shamasii'na o'zgeredi, qala berse bul jerde energiya erglerde, al massa grammlarda o'lshengen... Eger teoriya faktlerge sa'ykes keletug'i'n bolsa, onda nur nurlani'wshi' deneden juti'wshi' deneye inerciya ali'p keledi».

Bul ga'plerden hesh waqi'tta da massani'n' tezlikten g'a'rezliligi haqqi'ndag'i' pikir kelip shi'qqaydi', al massa menen energiyani'n' ekvivalentligin ani'q an'g'ari'w mu'mkin [Biz qa'legen massag'a $E = mc^2 / (1 - v^2/c^2)^{1/2}$ formulasi'na sa'ykes energiyani'n' ani'q ma'nisinin'

sa'ykes keletug'i'nli'g'i'n ha'm energiyag'a massani'n' sa'ykes kelmewinin' mu'mkin ekenligin bilemiz (mi'sali' A'lemdi tolti'ri'p turg'an «qaran'g'i' energiya» g'a massa sa'ykes kelmeydi)].

Sali'sti'rmali'q teoriyasi'nan elektronni'n' ti'ni'shli'qtag'i' energiyasi' $E = mc^2$ shamasina ten'. Al v tezligi menen qozg'ali'wshi' elektronni'n' teli'q energiyasi' mi'na formula ja'rdeminde ani'qlanadi':

$$E = \frac{mc^2}{\sqrt{1-\gamma^2}}. \quad (1.7)$$

Al bo'lekshenin' (elektronni'n') kinetikali'q energiyasi' mi'nag'an ten' boladi':

$$E_{\text{kin}} = \frac{mc^2}{\sqrt{1-\gamma^2}} - mc^2 = mc^2 \left[\frac{1}{\sqrt{1-\gamma^2}} - 1 \right]. \quad (1.8)$$

Nurlani'wdi'n' korpuskulali'q qa'siyetke iye bolatug'i'nli'g'i'ni'n' biz fotoeffekt penen Kompton effektinen bilemiz. Ekinshi ta'repten interferenciya qubi'li'si'nda biz nurlani'wdi'n' tolqi'nli'q qa'siyetin ko'remiz. Plank E energiyasi'na v jiyiliginin' sa'ykes keletug'i'nli'g'i'n tapti' ha'm qo'pshilikke belgili mi'na formulani' usi'ndi':

$$E = hv. \quad (1.9)$$

Bul an'latpadag'i' $h = 6,62606876(52) \cdot 10^{-34}$ Dj's Plank turaqli'si' boli'p tabi'ladi'. Bul quramali' jag'daydan shi'g'i'wdi' 1924-j'i'li' de Broyl ta'repinen tabi'ldi'. Ol o'zinin' doktorli'q dissertaciyasi'nda materiyani'n' tolqi'nli'q teoriyasi'n usi'ndi'. Bazi' bir talqi'lawlardan keyin dissertaciya qabi'l etilgen ha'm baspada basi'li'p shi'qti'. Bul jumi'sta mi'na ju'da' belgili bolg'an qatnas ori'n alg'an:

$$\lambda = \frac{h}{p}. \quad (1.1)$$

Bul an'latpada λ arqali' tolqi'nni'n' de Broyl uzi'nli'g'i', p arqali' bo'lekshenin' impuls'i' belgelinegen $\left(p = \frac{mv}{\sqrt{1-v^2/c^2}} \right)$. Fizikali'q optikani'n' tolqi'n ten'lemesine kirgizilgen bul jag'day SHredingerdin' belgili ten'lemesinin' du'ziliwine ha'm tolqi'n mexanikasi'ni'n' payda boli'wi'na ali'p keldi. (1.1)-qatnas 1927-j'i'li' Devisson ha'm Djermerler ta'repinen tasti'yi'qlandi'. Olar elektronlardi'n' difrakciyasi' qubi'li'si'n ashti' ha'm (1.1)-formulani'n' duri'sli'g'i'n da'lilledi. Bul eksperimentte energiyasi' 100 ev bolg'an elektronlar nikel kristalli'ni'n' betinen shashi'radi' (bul jag'daydi' ha'riz difrakciyani'n' Bregg jag'dayi' dep ataydi'). Usi' ji'li' ju'da' qi'zi'qli' sa'ykes keliwshilik ori'n aldi'. Devisson ha'm Djermerdin' maqalasi' basi'lg'an Nature jurnali'ni'n' tap sol sani'nda G.Tomson menen Reydtin' maqalasi' basi'li'p, onda juqa plastmassa plenikasi'nan o'tiwshi elektronlar da'stesinin' difrakciyasi'n izertlew boyi'nsha jumi'slari'ni'n' na'tiyjeleri bayanlang'an. Tomson-Reydtin' ta'jiriybesinde 16800 ev energiyag'a iye elektron da'stesi qollani'ldi' ha'm olardi'n' u'skenesi elektronli'q difrakciyani' izertlew ushi'n arnalg'an ha'zirgi zaman u'skenelerinin' prototipi boli'p tabi'ladi'.

Elektronlardi'n' difrakciyasi' kubi'li'si'n ashqanli'g'i'na baylani'sli' Devisson ha'm G.Tomson Nobel si'yli'g'i'n ali'wg'a miyasar boldi'. Solay etip a'kesi ha'm balasi' Dj.Tomson ha'm G.Tomson elektron mikroskopiya'si' tariyxi'nda tiyqarg'i' ori'nlardi'n' birin iyeledi.

De Broyldin' teoriyasi' eksperimentte tasti'yi'qlang'annan keyin ko'p waqi't o'tpey Bete elektronlardi'n' difrakciyasi'ni'n' dinamikali'q teoriyasi'n – kristaldag'i' elektronni'n' qozg'ali'si'ni'n' kvant mexanikasi'n islep shi'qti'. Bul teoriya Evald ta'repinen on ji'liday buri'n islep shi'g'i'lg'an rentgen nurlari' difrakciyasi'ni'n' dinamikali'q teoriyasi'n ju'da' uqsas. Bete difrakciyani'n' Laue jag'dayi'n toli'q talqi'ladi', al Morz, Devission-Djermer eksperimentinin' detallari'n tu'sindiriw ushi'n keyinirek Bregg jag'dayi' ushi'n teoriyani' rawajlandi'rdi'. Elektron difrakciyasi'n paydalani'w teperish tu'rde rawajlansa da dinamikali'q teoriya bazi' bir waqi'tlar dawami'nda itibarg'a ali'nbadi', al rentgen nurlari' difrakciyasi' ushi'n rawajlandi'ri'lg'an a'dewir a'piwayi' bolg'an kinematikali'q teoriya paydalani'ldi'.

Elektronni'n' zaryadlangan bo'lekshe ekenligin paydalani'p Knol ha'm Ruska magnit linzag'a iye birinshi elektron mikroskopi'n soqti'. Bul jerde elektronlardi'n' rraektoriyasi'n ta'riyiplew ushi'n geometriyali'q optika jaramli' boli'p shi'qti' ha'm sog'an sa'ykes usi' waqi'tlardan baslap elektronli'q optika rawajlana basladi'. Bryuxe ha'm Ioganson elektronli'k linzalardi' do'retiwdin' mu'mkinshiliklerin izertledi ha'm bunnan bi'lay linzalardi'n' eki tipi (elektrostatikali'q ha'm magnitlik) parallel tu'rde rawajlana basladi'. Biraq bir qansha texnikali'q sebeplerge baylani'sli' elektrostatikali'q linzalar ko'p tarqalmadi'.



Ruska ha'm Knol o'zleri islep shi'qqan mikroskopti'n' qasi'nda.
(Ruska E. (1980) *The Early History of the Electron Microscope*. Verlag GmbH & Co.)

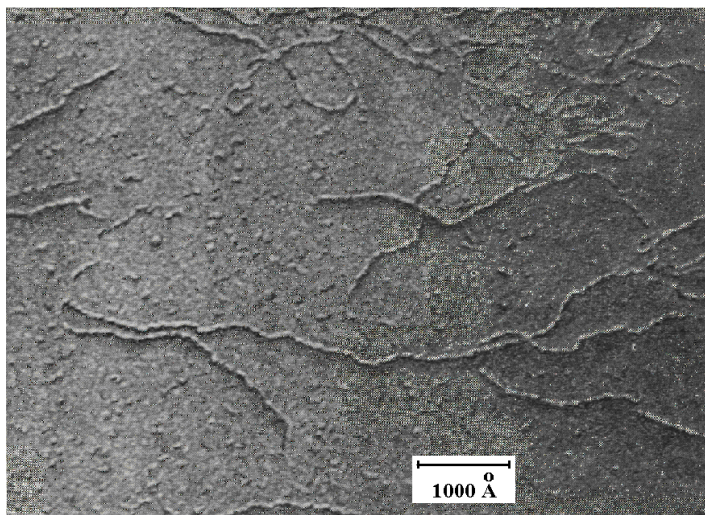
1934-ji'li' Marton magnit linzalarg'a iye elektron mikroskopi' haqqi'nda xabarladi' ha'm biologiyali'q ob'ektlardin' birinshi elektronli'q mikrofotosu'wretlerin aldi'. Arqa Amerikada birinshi mikroskop 1939-ji'li' Barton ni'n' basshi'li'g'i'nda Prebas ha'm Xile ta'repinen Toronto universitetinde islep shi'g'i'ldi'. Al AQSH tag'i' birinshi o'ndiriske engen mikroskop Xile ta'repinen Marton menen birgelikte islep shi'g'i'lg'an edi. Bul mikroskop «Reydio korporeyshn of Amerika» firmasi' ta'repinen shi'g'ari'li'p, Borrisom ha'm Ruska ta'repinen do'retilgen ha'm Germaniyadag'i' Siemens-Xalske firmasi' ta'repinen shi'g'ari'lg'an a'sbapqa di'm uqsas edi. Keyinirek sog'an usag'an magnit linzalarg'a iye elektronli'q mikroskoplar ko'p firmalar ta'repinen shi'g'ari'la basladi' (Xitashi, «Djapan elektron optike», Filips, RCA, Bendiks, AEI, UEMV-100lm ha'm basqalar).

1940-ji'llarg'a shekem elektronli'q difrakciya teoriyasi' elektronlardi'n' tolqi'nli'q qa'siyetine tiykarlani'p rawajlandi' ha'm elektron mikroskopiya'si'nda o'zinin' qollani'li'wi'n taba almadi'. Al sol waqi'tlardag'i' elektron-mikroskopiya'si' su'wret teoriyasi' tiykari'nan ob'ekttin' «effektiv qali'nli'g'i'» (mass-thickness) ko'z-qarasi'na tiykarlang'an edi. 1940-ji'li' Borris ha'm Ruska xrom okisinin' su'wretlerindegi intensivliktin' o'zgerisleri haqqi'nda maqala jazdi' ha'm ol «effektiv qali'nli'g'i'» interpretaciya'si'n sa'ykes kelmedi. Xile ha'm Bekerdin' jumi'si'nda $Al_2O_3 \cdot 3H_2O$ ni'n' mikrofotoografiyalari' jari'q ko'rди. Bul su'wretlerde Bregg shashi'rawlari'ni'n' bar ekenligi ko'rindi. R.Xeydenrayx MgO kristalli'n izertlew

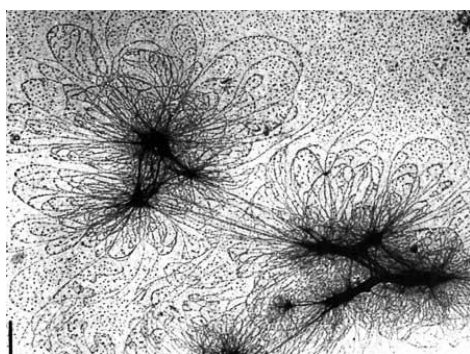
bari'si'nda su'wrette bir tekli intensivlikler jolaqlari'ni'n' ali'natug'i'nli'g'i'n tapti' ha'm oni' ko'p qaytalanatug'i'n breg shashi'rawi' tiykari'nda tu'sindirdi. Bërsh kristallardi'n' su'wretlerindegi interferenciyali'q effektlerdin' mi'sallari'n keltirdi. Kossel Kinder ta'repinen MgO kristallari' izertlegende ali'ng'an jolaqlardi'n' payda boli'w sebeplerin tu'sindire aldi'. Xeydenrayx ha'm Sterki kubli'q MgO ha'm CdO kristallari'ni'n' su'wretlerindegi intensivlik jolaqlari'n o'lishedi ha'm Bete teoriyasi' tiykari'nda Fure potentsialdi'n' koefitsientlerin esapladi'. Bunnan buri'ni'raq Blekman ta'repinen difrakciyani'n' kinematikali'q teoriyasi'ni'n' kemshilikleri qarap shi'g'i'ldi', soni'n' saldari'nan joqari'da bayanlang'an elektronli'q-mikroskopiya'li'q baqlawlar ko'p waqi'tlarg'a shekem sheshilmegen bul ma'seleni qaytadan qoydi'. Usi' jag'daylarg'a qaramastan elektronli'q su'wretlerdegi interferenciyali'q effektlerdin' tutqan orni'ni'n' a'hmiyeti jetkilikli tu'rde ani'qlang'an edi.

Usi' jag'daylar menen bir qatarda bakteriologiyada elektron mikroskopiya'si'n ken'nen qollani'w baslandi' ha'm ali'ng'an su'wretler «effektiv qali'n'li'q» ko'z-karaslari'nda tu'sindirildi. Biologiyali'q ob'ektlerdi sektionlasti'ri'w ushi'n (juqa ob'ektler ali'w ushi'n) mikrotomlar jetilistirildi (Mikrotomlar - juqa ob'ektler ali'w ushi'n kollani'latug'i'n u'skeneler). Soni'n' ushi'n usi'nday strukturalardi' izertlegende mikrotom bahasi' joq quralg'a aylandi'. Biologiyali'q ob'ektlerdi mikrotomda bekittkende, ob'ektlerdi keptirgende u'lken qi'ynshi'li'qlar payda boldi' (sebebi elektron mikroskopi'nda tek keptilirilgen ob'ektler izertleniledi). Sonli'qtan ob'ektten izertlew ushi'n juqa folgalardi' tayarlawda suwdi'n' kritikali'q noqati' ha'm salqi'nlati'lg'an halda keptiriw usi'llari' islenip shi'g'i'ldi'.

Org'anikali'q emes ob'ektlerdi elektron mikroskopi'ni'n' ja'rdeminde izertlew islerin eki usi'l og'ada ken'eytti. Olardi'n' birinshisi Mal ta'repinen usi'ni'lg'an ob'ektlerdin' betinin' ko'shirmelerin ali'w, ekinshisi Myuller ha'm onnan g'a'rezsiz Vilyams penen Vikov ta'repinen usi'ni'lg'an metallar ja'rdeminde ko'len'keler payda etiw (ko'len'ke tusiriw) usi'li' boli'p tabi'ladi'. 1954-ji'li' Bredli ko'mir tamg'alardi' paydalani'wdi' elektron mikroskopiya'si'na kirgizdi (Ori'ssha «Otpeshatok» so'zi «tamg'a» so'zi menen qaraqalpaqshag'a awdari'lg'an, tekste bunnan keyin paydalani'latug'i'n «replika» so'zi usi' ma'nisti an'g'artadi'). Usi'nnan baslap ko'mir replikalar usi'li' betlik ko'len'ke tu'siriw («Ottenenie» so'zin «ko'len'ke tu'siriw» dep awdarami'z) usi'li' menen birgelikte kontrast penen ayi'ra ali'wshi'li'qti' a'dewir joqari'latti' (50 Å ge shekem). SiO ni' puwlandi'ri'w menen ali'natug'i'n replikalardi' qollani'w 1980-ji'llarg'a shekem dawam etti. Xoll podlojka si'pati'nda awi'r metallar menen ko'len'ke tu'sirilgen slyudani', al plenka materiali' si'pati'nda kremniy okisin paydalani'wdi' usi'ndi'. Usi' usi'ldan' ja'rdeminde ayi'ri'm molekulalardi'n' su'wreti ali'ndi'. 2-su'wrette diametri shama menen 20 Å bolg'an iyne ta'rizli DNK molekulasini'n' mikrofotosu'wreti keltirilgen.

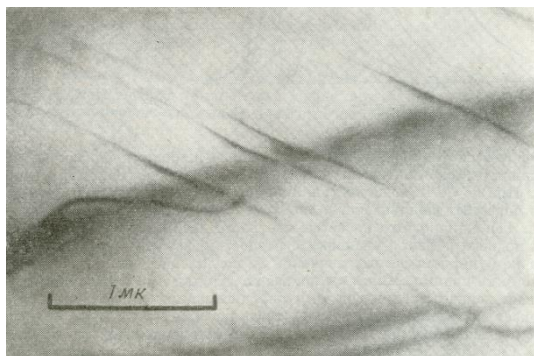


1-su'wret. Slyudani'n' si'ni'w tegisligindegi DNK molekulalari'ni'n' elektronli'q mikrofotosu'wreti. Molekulalardi'n' diametri shama menen 20 angstromge (Å) ten'.

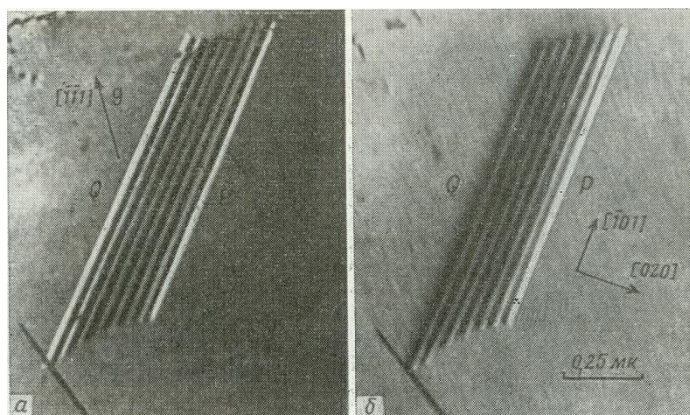


2-su'wret. DNK molekulasi'ni'n' ha'zirgi zaman elektron mikroskopi'nda ali'ng'an su'wreti.

Metall kristallarda replikalar usi'li' qanaatlandi'rarli' na'tiyjeler bermegenlikten ji'lji'w jolaqlari'n o'tiwshi elektronlar da'stesinde baqlawg'a ha'reketler islendi. Bunday jag'dayda na'tiyjelerdi tu'sindiriw ushi'n dinamikali'q teoriyadan paydalani'w za'ru'rli'gi kelip shi'qti' ha'm bul usi'ldi'n' u'lken perspektivag'a iye ekenligin ko'rsetetug'i'n mag'li'wmatlar ali'ndi'. Biraq tezletiwshi kernewdin' to'menligi ha'm izertleniwshi u'lginin' saylap ali'ng'an bo'liminen difrakciya ali'wdi'n' qi'yi'n ekenligi o'tiw arqali' izertlew usi'li'n ju'zege keltiriwge mu'mkinshilik bermedi. Bul awhal Siemens firmasi'ni'n' tezletiwshi kernewi 100 kv bolg'an ha'm jup kondensori' bar Elmiskop-I mikroskopi' payda bolg'annan keyin jo'nlendi. 1956-ji'li' Bolman ha'm Xirsh ta'repinen metallardag'i' dislokაციyalardi'n' en' birinshi su'wretleri ali'ndi'. 3-su'wrette o'tkeriwshi mikroskopta ali'ng'an dislokაციyani'n' ken'nen tarqalg'an su'wreti keltirilgen («Prosveshivayushiy mikroskop» so'zi «o'tkeriwshi mikroskop» dep awdari'lg'an). Dislokაციyalar menen qatar kristallardag'i' jaylasti'ri'w defektlari de tabi'ldi' («Jaylasti'ri'w defektrleri» so'zleri «Defekti' upakovki» russha so'zlerinin' ma'nisin beredi). 4-su'wrette alyuminiydegi jaylasti'ri'w defektlarinin' ko'rinisi keltirilgen. Usi'nday su'wretlerdi tu'sindiriw ushi'n («tu'sindiriw ushi'n» so'zi menen bir qatarda «interpretაციyalaw» so'zinde bir ma'niste qollanami'z) elektronlar difrakciyasi' teoriyasi'ni'n' bar barli'q na'tiyjelerin paydalani'w za'ru'r. Sebebi haqi'yqatta ali'ng'an su'wretlerdin' detallari' a'dette mayi'sqan boli'p, su'wrettegi qashi'qli'qlar ob'ekttegi qashi'qli'qlarg'a sa'ykes kelmeydi, al difrakciyalı'q sha'rtler menen ani'qlanadi'. Eger difrakciyag'a ushi'rag'an da'ste ob'ektivlik linza arqali' o'tip su'wret tegisliginde o'tiwshi daste menen betlesse, onda su'wretlerdegi qashi'qli'qlar ob'ekttegi haqi'yqi'y qashi'qli'qlarg'a sa'ykes keledi. 1956-ji'li' Menter platina ftalocianinine saykes keliwshi birinshi jumi'sti' baspadan shi'g'ardi' (tegislikler arasi'ndag'i' qashi'qli'q 12 Å shaması'nda). Baset penen Menter din' jumi'slari'nda MoO₃ kristalli'ndag'i' d₍₀₂₀₎ tegislikleri arasi'ndag'i' qashi'qli'qqa sa'ykes keliwshi su'wret ali'ndi' (6,93 Å). 5-su'wrette sonday jollar menen ali'ng'an pa'njerenin' su'wreti keltirilgen.



3-su'wret. Alyuminiydegi dislokaciylar.



4-su'wret.

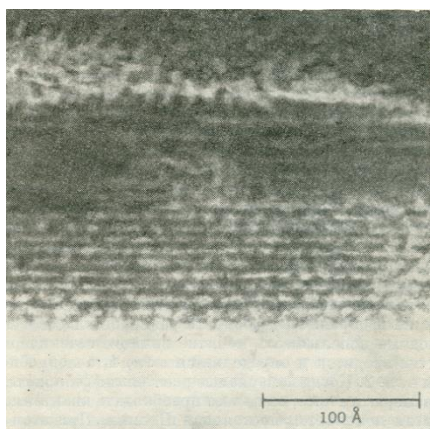
Cu+ 7% salmaq boyi'nsha Al quymasi'ndag'i' jaylasti'ri'w defektlerinin' su'wretleri.

Orientaciya -[101], shag'i'li'si'w $K=[111]$.

a - jaqti' maydandag'i' su'wret, *b* - qaran'g'i' maydandag'i' su'wret (Russha a'debiyattag'i' «svetlopolnoe izobrajenie» ha'm «temnopolnoe izobrajenie» so'zleri sa'ykes «jaqti' maydandag'i' su'wret» ha'm «qaran'g'i' maydandag'i' su'wret» dep awdari'lg'an).

A'llette ha'zirgi waqi'tlari' elektron mikroskoplari'ni'n' ayi'ra ali'wshi'li'q qa'biletliklari joqari' ha'm olar ayi'ri'm atomlardi' ko're aladi'. Mi'sali' YAponiyada shi'qqan SMH-5 elektron mikroskopi' ja'rdeminde tegisliklari arasi'ndag'i' qashi'qli'q 1 Å bolg'an pa'njerenin' su'wretin sali'sti'mali' an'sat ali'wg'a boladi'.

Soni' ayti'p o'tiw a'hmiyetli boladi', YAponiya elektron mikroskoplari'n shi'g'ari'w, elektron mikroskopiya'si' usi'llari'n rawajlandi'ri'w boyi'nsha en' aldi'n'g'i' ma'mleketler qatari'na birinshi boli'p kirdi. Bug'an tiykar retinde «Uspexi fizisheskix nauk» jurnali'ni'n' 1957-ji'l, LXIII tomi'ni'n' 4-sani'nda (827-845 betler) basi'li'p shi'qqan Aziya ha'm Okeaniya ma'mleketlerinin' Tokio qalasi'nda 1956-ji'li' oktyabr ayi'nda boli'p o'tken elektronli'q mikroskopiya boyi'nsha birinshi regionalli'q konferenciya na'tiyjeleri haqqi'ndag'i' «Elektronnaya mikroskopiya v YAponii» maqalasi'n ko'rsetiwge boladi'. Bul maqaladan ali'ng'an YAponiya elektronli'q mikroskoplari'ni'n' sali'sti'rmasi' kestesi to'mende keltirilgen ha'm bul kestden 1956-ji'ldi'n' o'zinde YAponiya elektronli'q mikroskoplari'ni'n' qanday da'rejede joqari' rawajlang'anli'g'i'n ani'q ko'riwge boladi'.



5-su'wret.
MoO₃ kristalli'ndag'i' (020) tegisliklerinin'
Fure-su'wreti
(d = 6,93 Å).

Сравнительная таблица японских электронных микроскопов.

	№ п/п.	Тип	Разрешение в Å	Ускоряющее напряжение в кВ	Увеличение электронное	Конденсоры	Количество линз	Стигматор
Высокое разрешение	1	JEM-5	15	50,80	600—100000	2	4	Магнитн. регулир.
	2	HU-10	15	50,75, 100	400—100000	2	3	Магнитн. регулир.
Среднее разрешение	3	JEM-T4	25	50	2000—20000	1	3	Магнитн. регулир.
	4	HS-5	25	50	2000—20000	1	3 пост. магн.	Нет
	5	SMV-80	20	80	500—50000	—	—	—
	6	TRS-50D	30	50	500—10000	Нет	3	Магнитн. нерегулир.
Низкое разрешение	7	JEM-T1	50	50	2500; 5000	Нет	2	Нет
	8	SM-C3	40	50	500—10000	Нет	3	Нет
	9	HM-2	100	40	1500; 2000; 3000; 4000	Нет	2 пост. магн.	Нет

Atomlar arasi'ndag'i' qashi'qli'qlardi' tikkeley o'lshevedgi qi'yi'nshi'li'qlar materiyani'n' tolqi'nli'q qa'siyetlerinin' tuwri'dan-tuwri' na'tiyjesi boli'p tabi'ladi'. Tolqi'nli'q qa'siyetke ani'qsi'zli'q ta'n, al bul ani'qsi'zli'q shashi'rati'wshi' ob'ektti tek itimalli'q ko'z-qarasi'nan ta'riyiplewge mu'mkinshilik beredi. Atomlardi'n' elektronli'q mikroskopiyali'q su'wretinin' qaliplesiwi ushi'n process yamasa aylani's a'sbapti'n' defekti menen sheklenip qalmawi' kerek. Bul process u'lgige tu'siwshi elektronlar menen baylani'sli' boli'p, olardi'n' u'lgı betindegi orni' (predmetlik bettegi orni') shama menen 300 Å lik ani'qsi'zli'q penen ta'riyiplenedi. Eger su'wret tegisligine kelip tu'siwshi elektronnan atomni'n' turg'an ori'ni'ni'n' u'lkeytilgen su'wreti talap etiletug'i'n bolsa, onda oni'n' berilgen fokal tegisliktegi tolqi'n paketi og'ada ushli' (ostri'y) boli'wi' kerek. Solay etip da'slep diffuziyali'q tu'siwshi elektron ob'ektten atomli'q qashi'qli'qlar xaqqi'nda qanday da bir informaciyalardi' ali'p ketedi. Biraq informaciyani'n' shaması' usi' shashi'rawdi'n' qanshama ani'q an'lati'lg'anli'g'i'na baylani'sli'. Bul qashi'qli'q qanshama tez-tezden qaytalanatug'i'n bolsa su'wret tegisligine ol haqqi'nda ali'p kelinetug'i'n informaciya sonshama ko'p boladi'. Demek ob'ekt joqari' jetilisken kristall boli'wi' kerek ha'm oni'n' formasi'ni'n' transformantasi' delta-funkciya bolg'anday o'lshevmge iye boli'wi' sha'rt. Pa'njerenin' da'wirliliginin' qa'legen mayi'si'wi' ta'rtipsizlikke yamasa artqi' fokal tegisliktegi elektronni'n' tolqi'n paketinin' ken'eyiwine ali'p keledi. Basqa ta'repten jetilisken u'lken o'lshemlerge iye kristallar ushi'n

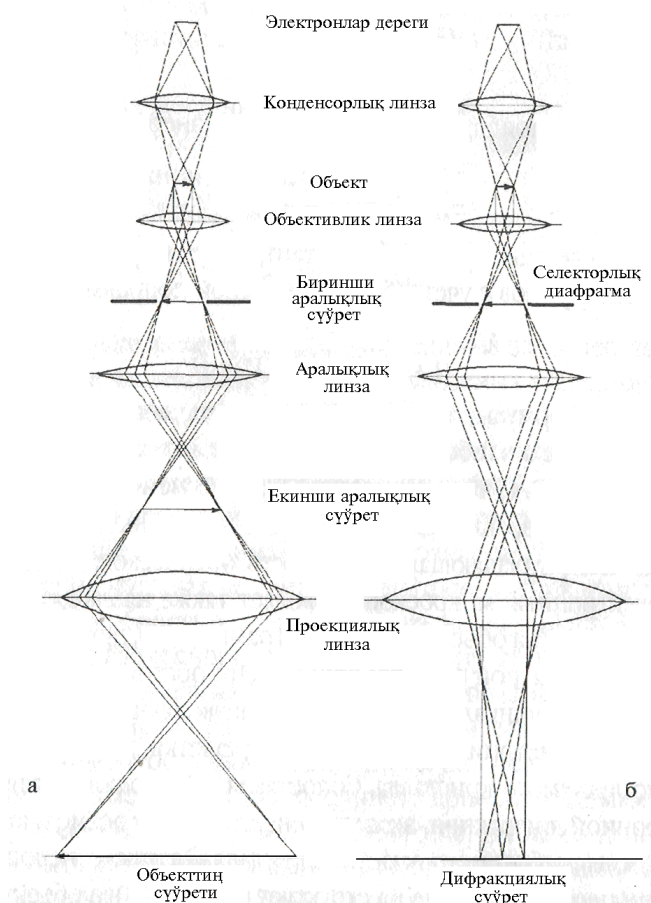
da tolqi'n paketinin' ken'eyiwine ali'p keletug'i'n eki faktor bar: birinshisi ji'lli'li'q qozg'ali'slari' ha'm serpimli emes soqli'g'i'si'wlar. Bul faktorlar ob'ekte shashi'rag'an elektrong'a qashi'qli'qlardi'n' qanday da bir pu'tin intervali'n beredi. Olar haqqi'nda da elektron su'wret tegisligine informaciya ali'p keledi. Al bul o'z gezeginde su'wret tegisliginde itimalli'raq yamasa xarakterlirek qashi'qli'qti'n' ob'ekte bar basqa da qashi'qli'qlar menen jabi'li'p, ko'rinbey qalatug'i'nli'g'i'n an'g'artadi' (a'l'bette bul qubi'li'sti'x kontrastti'n' joqli'g'i'ni'n' aqi'betinde ju'zege keletug'i'nli'g'i'n a'xsat tu'siniwge boladi').

§ 2. Elektron mikroskopi'ni'n' elektronli'q-optikali'q sxemasi'

Elektronli'q mikroskopti'n' tiykarg'i' bo'leklerine elektronlar deregi bolg'an elektron pushkasi'nan ha'm su'wretti payda etetug'i'n linzalar sistemasi'nan turadi'. Derekten shi'qqan elektronlar dastesi kondensorli'q linzalar ta'repinen tu'rlandıriledi ha'm bunnank eyin ob'ektivlik linza ni'n' polyuslik nakoneshnigi jani'nda ornati'lg'an izertlenetug'i'n u'lgige kelip tu'sedi.

O'tkeriwshi elektron mikroskopi'ndag'i' elektronlardi'n' eki mi'na jag'daydag'i' bunnan bi'layg'i' ju'rislerin qaraymi'z: birinshisinde mikroskop u'lkeytilgen su'wret ali'w, ekinshisinde mikroskop elektronograf (mikrodifrakciya ali'w) rejiminde isleydi. U'lkeytiw rejiminde (6-a su'wretti qaran'i'z) ob'ektiv ta'repinen u'lkeytilgen su'wret I_1 arali'qli'q linza ushi'n ob'ekt boli'p, bul linza I_2 su'wretin beredi. Bul su'wret bolsa o'z gezeginde proekciyalı'q linza ta'repinen u'lkeytiledi. Ali'ng'an su'wret fluorescent ekranda vizualizaciyalanadi' (ko'zge ko'rinetug'i'n halg'a ali'p klinedi), al ekranni'n' tikkeley asti'nda su'wretti tu'sirip ali'w ushi'n fotoplastinka ornati'lg'an boladi'.

Magnit linzalari'ni'n' katushkalari'ndag'i' toqti' o'zgerte oti'ri'p u'lgiden shi'qqan elektronlar da'stesinin' ha'r biri ekranda fokuslengenday etip saylap ali'wg'a boladi'. (1.b su'wret). Qala berse bul noqatti'n' orni' bul da'stenin' bag'i'ti'na bir ma'nisli sa'ykes keledi. Bunday jag'dayda difrakciyalı'q kartina baqlanadi' (bunday difrakciyalı'q kartinani' elektronogramma dep ataymi'z).



6-su'wret.

O'tkeriwshi elektron mikroskopi'ni'n' elektronli'q-optikali'q sxemasi'.

a) U'lkeytiw rejimindegi nurlar joli', b) mikrodiffraktsiya rejimindegi nurlar joli'.

§ 3. Su'wretin' payda boli'wi' ha'm difraktsiyali'q kontrast

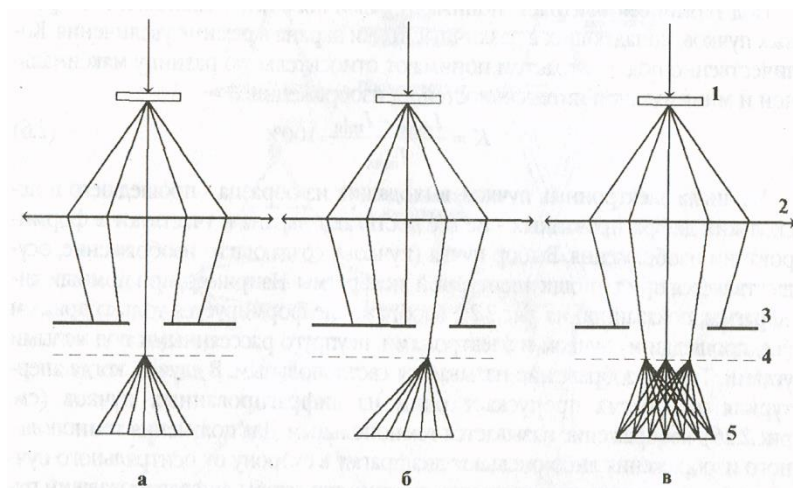
«Kontrast» termini u'lkeytiw rejiminde ekranni'n' ha'r qiyli' noqatlari'na tu'sken elektron da'telerinin' intensivliklerinin' ayi'rmasi'na sa'ykes keledi. Sanli'q jaqtan kontrast degenimizde su'wrettegi maksimali'q ha'm minimalli'q intensivliklerdin' sali'sti'rmali' ayi'rmasi'n tu'sinedi:

$$K = \frac{I_{\max} - I_{\min}}{I_{\max}} \cdot 100 \% \quad (1.10)$$

U'lgi arqali' o'tiwshi elektron da'stelerinin' bir neshe da'stenin' barli'g'i' da ekrang'a jetip kelmeydi ha'm su'wretti payda etiwge qatnaspaydi'. Su'wretti payda etiwshi da'steni saylap ali'w (yamasa da'stelerdi saylap ali'w) aperturali'q diafragma ja'rdeminde a'melge asi'ri'ladi'. Mi'sali' 7-a su'wrette ko'rsetilgen diafragmani'n' ja'rdeminde su'wret tek tuwri' o'tken (yag'ni'y u'lgi arqali' tuwri' o'tken) da'ste ta'repinen ha'm kishi mu'yeshlerge serpimli emes shashi'rag'an elektronlar ta'repinen payda etiledi. Bunday su'wretti jaqti' maydandag'i' su'wret (svetlopolnoe izobrajenie) dep ataydi'. Eger aperturali'q diafragma difraktsiyag'a ushi'rag'an da'stelerdin' birewin o'tkeretug'i'n bolsa (7-b su'wret) su'wret qaran'g'i' maydandag'i' su'wret (temnopolnoe izobrajenie) dep ataladi'. Qaran'g'i' maydandag'i' su'wretti ali'w ushi'n eki joldi' paydalanadi': diafragmani' orayli'q da'stege qaray i'si'radi' yamasa difraktsiyag'a ushi'rag'an da'ste ob'ektivlik linzani'n' ko'sheri arqali'

o'tetug'i'nday etip jaqti'landi'ri'wshi' sistemani' en'keytedi. Joqari' ayi'ra ali'wshi' elektron mikroskopiyasi'nda (High Resolution Electron Microscopy - HREM) su'wret tuwri' o'tiwshi nur menen difrakciyag'a ushi'rag'an bir neshe da'stelerdi qosi'w menen ali'nadi'. Bul jag'day 7-v su'wrette keltirilgen. U'lgiden shi'g'i'wshi' dastelerdin' intensivlikleri u'lgidegi difrakciya processi ha'm juti'w arqali' ani'qlanadi' ha'm soni'n' menen birge u'lginin' quri'li'si' menen qurami'nan, oni'n' qali'n'li'g'i'nan, orientაციyasi'nan, tolqi'n uzi'nli'g'i' λ den (yag'ni'y elektronni'n' energiyasi'nan) g'a'rozli boladi'. Soni'n' menen birge u'lgiden shi'g'i'wshi' dastelerdin' intensivlikleri elektronlardi'n' shashi'rawi'ni'n' dinamikali'q teoriyasi' menen ta'riyiplenedi. Al bul teoriyani'n' matematikali'q apparati' SHredinger ten'lemesi boli'p tabi'ladi'.

Joqari'da o'tkeriwshi elektron mikroskopiyasi'nda u'lginin' bir ushastkasi'ni'n' su'wretin de, difrakciyali'q su'wretin de ali'wg'a boladi' dep ayti'lg'an edi. Soni' da ayti'p o'tiw kerek, elektron da'steleri magnit linzalar arqali' o'tiwdin' bari'si'nda magnit maydani'ni'n' linzani'n' ko'sheri bag'i'ti'ndag'i' boyli'q qurawshi'si'ni'n' bar boli'w saldari'nan spiral ta'rizli mayi'sadi'. Usi'ni'n' na'tiyesinde linza arqali' o'tkende elektronlar da'stesinin' barli'q ji'ynag'i' linzani'n' optikali'q ku'shine g'a'rozli mu'yeshke buri'ladi'. U'lkeytiw rejiminen mikrodifrakciya rejimine o'tkende arali'qli'q linzani'n' optikali'q ku'shinin' o'zgartiliwi talap etiledi. Sonli'qtan mikrodifrakciyali'q su'wretin' u'lginin' quri'li'si'ni'n' su'wretine sali'sti'rg'anda buri'li'wi' ori'n aladi'. Sol buri'li'w mu'yeshin eksperimentte yamasa linzalar di'n' parametrlarin biliw arqali' esaplawg'a boladi'.



7-su'wret. Elektron mikroskopi'ndag'i' su'wretin' payda boli'wi': a) – jaqti' maydandag'i' su'wret (su'wretke u'lesti tek tuwri' o'tiwshi da'ste beredi); b) – qaran'g'i' maydandag'i' su'wret (su'wretin' payda boli'wi'na u'lesti tek bir difrakciyag'a ushi'rag'an da'ste beredi); v) – ko'p sandag'i' difrakciyag'a ushi'rag'an da'steler ta'repinen payda etiletug'i'n pa'njerenin' tuwri' su'wreti; 1 – u'lg'i; 2 ha'm 4 - linzalar; 3 - aperturali'q diafragma; 5 – ekran

§ 4. O'tkeriwshi elektro mikroskoplari' ushi'n u'lgiler tayarlaw

O'tkeriwshi elektron mikroskoplari'nda izertleniwi kerek bolg'an u'lgiler bir qatar talaplardi' qanaatlandi'ri'wi' kerek. Birinshiden olardi'n' juqa ($500 - 5000 \text{ \AA}$) ha'm olardi'n' betleri derlik parallel boli'w sha'rt. Elektronlardi'n' ko'p juti'li'wi' u'lgilerdin' kali'n'li'g'i'na shek qoyadi', al parallellikke talap usi'nday qali'n'li'qti'n u'lginin' u'lken maydani'nda orni' ali'wi'ni'n' kerekliginen kelip shi'g'adi'. Sebebi qali'n' ushastkalar elektron da'stesi ushi'n derlik mo'ldir emes. Ekinshiden u'lgiler taza betke iye boli'wi' lazim, sebebi amorf plenkanin' og'ada juqa qatlami'ni'n' o'zi kontarst payda etpey-aq u'lginin' mo'ldirligin keskin tu'rde u'lkeytip jibere aladi'. A'dette u'lken materialdi' da'slep qali'n'li'g'i' kishi

bolg'an juqa plastinkalarg'a kesedi. Usi'ni'n' na'tiyjesinde kesilgen denenin' beti tegis emes ha'm pataslang'an boli'p shi'g'adi'. Sonli'qtan kesiwden keyin shlifovkani' qollanadi'. SHlifovka processi shlifovkalawshi' qag'az u'stinde a'melge asi'ri'ladi'. Bunnan keyin Al_2O_3 , MgO yamasa arnawli' almaz pastalardan tayarlang'an emulsiyani' paydalani'p jumsaq gezleme u'stinde polirovkalanadi'. Kesiw, shlifovkalaw ha'm mexanikli'q polirovkawdi'n' bari'si'nda payda bolg'an deformaciyalang'an betlik qatlam ximiyali'q yamasa elektroximiyali'q polirovka ja'rdeminde ali'p taslanadi'. Ximiyali'q polirovka processinin' ma'nisi saykes ximiyali'q reagentler bolg'an silteler, kislotalar, olardi'n' aralaspasi' ha'm duzlari' menen ta'sirleskendegi u'lginin' betinin' eriwi boli'p tabi'ladi'. Ximiyali'q polirovkani'n' tiykarg'i' arti'qmashli'g'i' oni'n' a'piwayi'li'g'i'nda. Bul usi'l ha'r qi'yli' jollar menen a'mege asi'ri'ladi' (eritpege bati'ri'w, ag'i'sta polirovkaw). U'lgi ximiyali'q eritpege sali'ng'an baslang'i'sh momentte reaksiya u'lken tezlik penen o'tedi, al keyinirek reaksiya ten' o'lsheqli ju'redi. Bul jag'day bar ekenligi ayqi'n ko'rinetug'i'n relefke iye betlik mexanikali'q buzi'lg'an qatlamni'n' bar ekenligi menen tu'sindiriledi. Bul qatlam ta'sirlesiwidin' effektivlik maydani'n u'lkeytedi. Ximiyali'q birikpe betlerdegi mikrojarl'qlarg'a kiredi, olardi' ken'eytedi ha'm su'yir mu'yeshli relefti tegisleydi. Deformaciyalang'an qatlam jog'alti'lg'annan keyin kristaldi'n' buzi'lmag'an qatlami'ni'n' eriwi ten' o'lsheqli o'tedi. Polirovka tezligi reaksiya o'nimlerin (ximiyali'q reaksiya na'tiyjesinde payda bolatug'i'n birikpeler) ali'p ketiw (polirovkalani'wshi'f betten qashi'qlati'w) ha'm eritkishtin' (travitedin') jan'a porciyasi'ni'n' ali'p keliniw tezligine baylani'sli'. Aralasti'ri'w eritkishtin' (eritkish so'zi rus tilindegi «travitel» so'zinin' ma'nisin beredi) qurami'ni'n' tezden ten'lesiwine ali'p keledi, usi'ni'n' saldari'nan u'lginin' juqari'w tezligi a'dette u'lkeyedi. Eger u'lgi ha'm elektrlitke bati'ri'lg'an metall elektrod arqali' elektr tog'i' o'tkerilse a'dettegi elektroliz processi baslanadi'. Usi'ni'n' aqi'betinde u'lginin' betinin' eriwi ori'n aladi'. Eritkishlerdin' qurami' menen elektropolirovka sha'rtleri spravoshniklerde berilgen.

Son'g'i' waqi'tlari' ionlar menen juqarti'w usi'li' ken'nen qollani'lmaqta. Bul usi'lda u'lginin' betinen atomlar energiyasi' 1:1 kev bolg'an ionlardi'n' uri'li'wi' menen uri'p shi'g'ari'ladi'. Bunday etip juqarti'w processi og'ada kishi tezlikler menen ju'redi (shama menen 0.1 mkm/min). Sonli'qtan ol tek juqarti'w processinin' en' keyingi etapi'nda paydalani'ladi'. A'l'bette ionli'q bombalaw ju'da' taza bettin' payda boli'wi'n ta'miyinleydi. Soni'n' menen birge juqa plenkalar di' vakuumde puwlandi'ri'w yamasa elektrlik oti'rg'i'zi'w (elektroosajdenie) joli' menen de aladi'. Biraq bul jag'dayda oti'ri'zi'lg'an qatlamlardi'n' o'zlerine ta'n quri'li'sqa iye bolatug'i'nli'g'i'n esapka ali'w kerek. Jen'il si'natug'i'n betke iye qatlamli' kristallardi' u'lgini ko'p ret sol betler boyi'nsha si'ni'qlarg'a si'ndi'ri'w arqali' jukarti'wg'a boladi'. Buni'n' ushi'n u'lgi jabi'sqaq lentani'n' eki bo'legi menen bo'leklerge ayi'radi'. Za'ru'rli kali'n'li'qtag'i' u'lgi ali'ng'anda lenteni' eritkishke sali'p u'lgini jazdi'ri'p ali'w mu'mkin. Soni'n' menen birge joqari'da elektron mikroskopiya' ushi'n jetkilikli da'rejede taza betke iye u'lgilerdin' kerek ekenligi ayti'li'p o'tilgen edi. Sonli'qtan juqarti'w processinen keyin u'lgiler abaylap juwi'ladi'. Eger juwi'lg'annan keyin de u'lgi jetkilikli da'rejede taza bolmasa, onda oni' ultrases ja'rdeminde tazalawg'a tuwri' keledi. Al tayarlang'an u'lgilerdi tezden mikroskopta izertlew yamasa inert gazdin' atmosferasi'nda saqlaw kerek. Sebebi ximiyali'q aktiv zatlardi'n' betleri hawada saqlag'anda tezden buzi'li'p ketedi (tiykari'nan okislenedi).

§ 5. Elektronogrammalardi' interpretaciyalaw

Izertleniwshi kristaldi'n' quri'li'si' haqqi'nda informaciya ali'w ushi'n ali'ng'an elektronogrammalardi' oqi'y biliw kerek. Elektronogramma bazi' bir jaqi'nlasiwda keri pa'njerenin' tegislik penen kesilisiwde payda bolg'an kese-kesimi bolg'anli'qtan en' da'slep keri pa'njerenin' su'wretin sali'w kerek. Keri pa'njere tu'sinigi to'mende qaralaturg'i'n

mi'saldan ta'biyiy tu'rde kelip shi'g'adi'. Kristall orqali' elektron tolqi'ni'ni'n' tarqali'wi' SHredinger ten'lemesi menen ta'riyiplenedi:

$$\Delta\psi(r) + \frac{8\pi^2 me}{h^2} [E + V(r)]\psi(r) = 0. \quad (1.11)$$

Bul an'latpadag'i' eE elektronni'n' toli'q energiyasi', eV(r) elektronni'n' potencial energiyasi' (u'lgi pa'njeresinin' atomlari'ni'n' elektronlari' ha'm yadrolari' menen ta'sir etisiwdin' na'tiyjesinde payda boladi'), $\psi(r)$ orqali' elektronlardi'n' tolqi'n funkciyasi' belgilengen. SHEksiz u'lken jetilisen kristall ushi'n potencialdi'n' Fure qatari' tu'rinde jazi'li'wi' mu'mkin:

$$V(r) = \sum_H V_H \cdot \exp[i(\mathbf{H}, \mathbf{r})] \quad (1.12)$$

Bul an'latpada $\mathbf{H}$ orqali' ha'r qi'yli' atomli'q tegisliklarga sa'ykes keliwshi «keri pa'njerenin' vektor» lari', V_H orqali' Fure qatari'ni'n' koefficientleri belgilengen. Bul koefficientler elementar quti'ni'n' atomlari' boyi'nsha summa ali'w orqali' ani'qlanadi':

$$V_H = \frac{1}{v} \sum_j V_j(r) \cdot \exp[-i(\mathbf{H}, \mathbf{r}_j)] \quad (1.13)$$

Bul an'latpada $V_j(\mathbf{r})$ orqali' j-atomni'n' potenciali' belgilengen. Bazi' bir $\mathbf{H}$ lar ushi'n ha'r qi'yli' atomlardi'n' u'lesleri bir birin kompensaciyalaydi' ha'm $V_j(\mathbf{r}) = 0$ boladi'. Usi'g'an baylani'sli' elektronogrammada sa'ykes tu'yin bolmaydi' (so'nedi dep aytami'z, strukturali'q analizde ken' tu'rde qollani'latug'i'n rus tilindegi «Pravila pogasaniya» so'zleri «so'niw qag'i'ydalari'» dep awdari'lg'an) ha'm $\mathbf{H}(h, k, l)$ vektorlari'ni'n' qurawshi'lari' (h, k, l indeksleri Miller indeksleri boli'p tabi'ladi') ha'm elementar quti'ni'n' tipleri boyi'nsha usi'nday tu'yinlerdi ani'qlawg'a mu'mkinshilik beretug'i'n qag'i'ydalardi' so'niw kag'i'ydalari' dep ataymi'z. Mi'sali' qaptaldan oraylasqan pa'njereleler ushi'n h, k ha'm l indekslerinin' ma'nislerinin' barli'g'i' bir waqi'tta taq yamasa jup boli'wi' sha'rt. Bul sha'rtti matematikali'q tu'rde bi'layi'nsha jazami'z: $h + k = 2n$, $k + l = 2n$, $h + l = 2n$, n pu'tin san (demek $2n$ degenimiz bul sanni'n' jup ekenligin an'g'artadi'). Ko'lemde oraylasqan pa'njere ushi'n $h + k + l = 2n$. Al almaz strukturasi'na iye kristallar ushi'n (kremniy, germaniy ha'm basqalar) - h, k, l = $2n + 1$ yamasa h, k, l = $2n$ ha'm $h + k + l = 4n$.

Keri pa'njere noqatlardi'n' ji'yngag'i' boli'p, bul noqatlarda koordinata basi'nan baslap qoyi'lg'an, so'niw qag'i'ydalari' ta'repinen «ruqsat etilgen» $\mathbf{H}$ vektorlari' tamam boladi'.

SEkli kristall ushi'n keri pa'njere tu'sinigi Fure integrali' ja'rdeminde keltirilip shi'g'ari'ladi' (al Fure qatari' tu'sinigi ja'rdeminde emes):

$$F(\mathbf{H}) = \frac{1}{v} \int_v V(r) \cdot \exp[-i(\mathbf{H}, \mathbf{r})] dr. \quad (1.14)$$

Bul an'latpadag'i' integrallaw kristaldi'n' barli'q ko'lemi v boyi'nsha ali'nadi'. Bul jag'dayda $|F(\mathbf{H})|^2$ funkciyasi'ni'n' maksimumlari' keri pa'njerenin' tu'yinleri dep ataladi'. Olar endi shekli ko'lemlerge ha'm kristaldi'n' formalari'na g'a'rezli bolgan formalarg'a iye boladi'. Mi'sali' juqa folga ushi'n bul maksimumlar folga tegisligine perpendikulyar sterjenlerdin' tu'rine iye boladi', qala berse sol sterjenlerdin' uzi'nli'qlari' folgani'n' qali'nli'g'i'na keri proporcional.

Keri pa'njere to'mendegidey etip ani'qlang'anda da so'niw qag'i'ydalari'n sapali'q jaqtan qollani'w mu'mkin. Ko'pshilik jag'daylarda elektronlardi'n' serpimli shashi'rawi' dep

atalatug'i'n shashi'raw izertlenedi. Bunday jag'dayda shashi'rag'an elektronlardi'n' energiyalari' kelip tu'sken elektronlardi'n' energiyalari'na ten'. Elektronni'n' energiyasi' oni'n' tolqi'n vektori' menen bir ma'nisli baylani'sqan bolg'anli'qtan barli'g'i' da bir noqattan baslanatug'i'n barli'q elektron da'stelerinin' tolqi'n vektorlari' (kelip tu'siwshi ha'm difrakciyag'a ushi'rag'an elektronlardi'n' tolqi'n vektorlari') bir sferani'n' betinde tamam boli'wi' kerek. Bul sfera tarqali'w sferasi' yamasa Evald sferasi' dep ataladi'. Eger shashi'rati'w sferasi' keri pa'njerenin' tu'yinin kesip o'tetug'i'n bolsa g'ana ku'shli shag'i'li'sti'ri'w ori'n aladi'. Eger $\mathbf{K}_0$ arqali' tu'siwshi da'stenin' tolqi'n vektori'n, $\mathbf{K}_0$ $\mathbf{K}_H$ arqali' shashi'rag'an tolqi'nni'n' tolqi'n vektori'n, $\mathbf{H}$ arqali' keri pa'njerenin' vektori'n belgilesek onda joqari'da ayti'lg'an sha'rt bi'layi'nsha jaziladi':

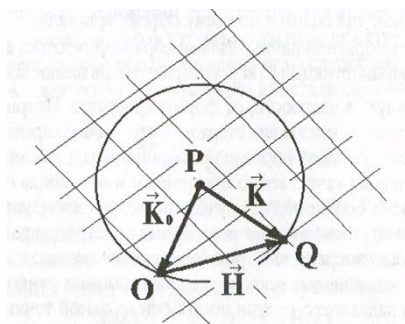
$$\mathbf{K}_H = \mathbf{K}_0 + \mathbf{H}. \quad (1.15)$$

Bunnan shashi'rawdi' ani'qlawdi'n' a'piwayi' geometriyalig' usi'li' kelip shi'g'adi'. Keri pa'njereni du'zemiz. O orayi'nan $\mathbf{K}_0$ vektori'n ju'rgizemiz ha'm oni'n' ushi'nan radiusi' $1/\lambda$ bolg'an sfera ju'rgizemiz. Bul sfera shashi'rati'w sferasi' (Evald sferasi') boli'p tabiladi'. Sol sferani'n' keri pa'njerenin' tu'yinleri menen ha'r bir kesilisiw noqati' shashi'rag'an tolqi'nni'n' $\mathbf{K}_H$ vektori'ni'n' ushi' boli'p tabiladi'.

Eger tezletiwshi kernewdin' shamasi' 100 kv bolsa sferani'n' radiusi' 27 Å ge ten' boladi'. Bul shama keri pa'njerenin' parametrlariga sali'sti'rg'anda a'dewir u'lken. Sonli'qtan sferani' tegislik dep approksimaciyalaw mu'mkin.

Solay etip biz difrakciyag'a ushi'rag'an da'stenin' bag'i'ti'n an'sat ani'qlay alami'z (8-su'wrette keltirilgen) ha'm fotoplastinkada keri pa'njerenin' kese-kesiminin' proekciyasi'n alami'z. Keri ken'isliktegi o'lshemler menen fotoplastinkadag'i' o'lshemler arasi'ndag'i' proporcionalli'q koefficientti bi'layi'nsha ani'qlaw mu'mkin: Tegislikleri arasi'ndag'i' qashi'qli'q $d_{hkl} = 1/|\mathbf{H}_{hkl}|$ shamasi'na ten' bolg'an tegisliklerden ali'ng'an fotoplastinkadag'i' daqti'n' qaysi' ori'nda turg'anli'g'i' mi'na an'latpa ja'rdeminde ani'qlanadi':

$$R = \lambda L / d_{hkl} = \lambda L |\mathbf{H}|. \quad (1.16)$$



8-su'wret. Keri ken'isliktegi difrakciyasi' ushi'n Evald sxemasi'. O arqali' keri ken'isliktegi koordinatalar basi', OP arqali' keri pa'njerenin' koordinata basi' belgilengen.

Bul an'latpada R arqali' orayli'q daqqa shekemgi qashi'qli'q, λ arqali' tolqi'n uzi'nli'g'i', L arqali' kamerani'n' uzi'nli'g'i' (u'lgiden fotoplastinkag'a shekemgi qashi'qli'q belgilengen. λL shamasi' mikroskopti'n' difrakciyalig' turaqli'si' dep ataladi'. Oni'n' ma'nisi fotoplastinkadag'i' qashi'qli'qlardi'n' kristaldi'n' keri pa'njeresindegi tegisliktegi qashi'qli'qlardan qansha shamag'a ayri'latug'i'nli'g'i'n bildiredi.

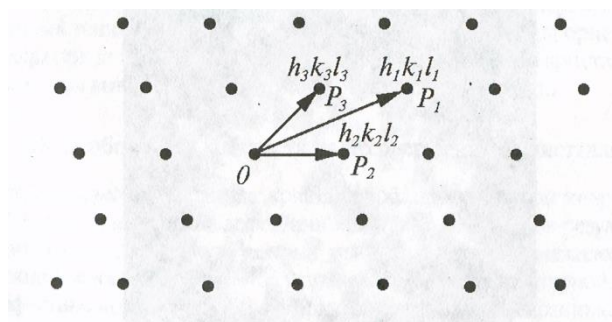
§ 6. Elektronogrammalardi' indekslew

Endi elektronogrammasi' ali'natug'i'n kristaldi'n' elementar quti'si' belgili, biraq oni'n' orientaciyasi' belgisiz bolsi'n. 9-su'wrette baqlanatug'i'n difrakciyalig' su'wret ko'rsetilgen. U'sh P_1 , P_2 ha'm P_3 tu'yinlerin saylap alami'z. Olar kooridanata basi' O menen

parallelogramm payda etedi. Usi' shag'i'li'si'wlarg'a sa'ykes keliwshi PH shamalari'n o'lsheymiz ha'm (1.16) formulasi'na sa'ykes tegislikler arasi'ndag'i' qashi'qli'qlardi' ani'qlaymi'z. Bul qashi'qli'qlar tiykari'nda Miller indekslerinin' mu'mkin bolg'an ji'ynaqlari'n tabami'z. Izertewdin' usi' basqi'shi'nda tegisliklerdin' ha'r bir qatari' ushi'n qaytalani'w faktori'na sa'ykes keliwshi indekslewdin' ja'ne de bir qansha usi'llari' bar. Mi'na sha'rtlerdin' ori'nlani'wi' ushi'n si'nap ko'riw ha'm qa'telik jiberiw usi'li' (sabaqti'ni bari'si'nda «Metod prob i oshibok» so'zlerin «si'nap ko'riw ha'm qa'telik jiberiw usi'li'» so'zleri menen almasti'rami'z) tiykari'nda bir birine sa'ykes keliwshi bir qatar indekslerdi saylap alami'z:

$$\begin{aligned} h_3 &= h_1 + h_2, \\ k_3 &= k_1 + k_2, \\ l_3 &= l_1 + l_2. \end{aligned} \quad (1.17)$$

Elektronogrammani'n' qalg'an barli'q tu'yinleri bunnan keyin a'piwayi' vektorli'q qosi'w usi'li' menen ani'qlanadi'.



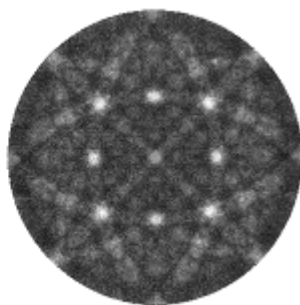
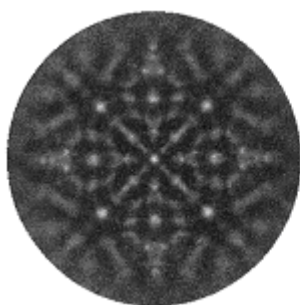
9-su'wret. Belgisiz elektronogrammani' indekslewge mi'sal.

Jiyi tu'rde paydalani'latug'i'n basqa bir usi'lda da'slep OP2 ha'm OP1 ler arasi'ndag'i' mu'yesh o'lsheynedi ha'm bunnan keyin kestelik mag'li'wmatlar menen sali'sti'ri'w yamasa P2 ha'm P3 ler ushi'n sa'ykes keliwshi indekslerdi esaplaw arqali' ma'sele sheshiledi.

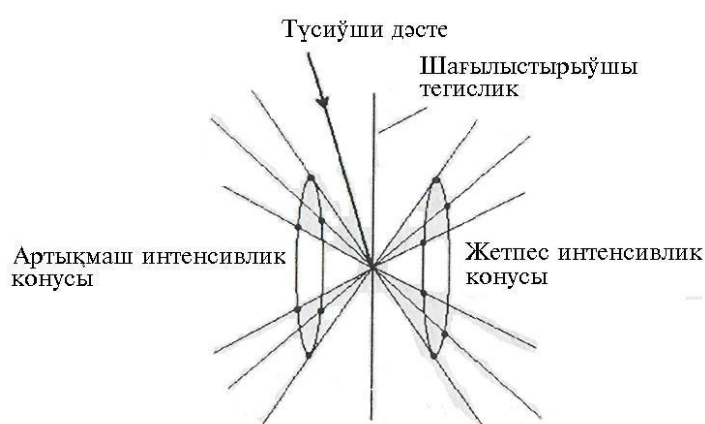
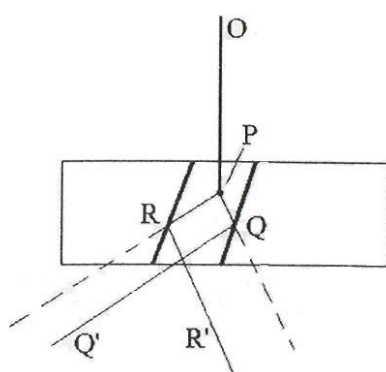
§ 7. Kikushi si'zi'qlari' ja'rdeminde kristaldi'n' orientaciyalari'n ani'qlaw

Kristaldi'n' qali'n'li'g'i' u'lkeytilgende elektronogrammadag'i' daqlar menen birge Kikushi si'zi'qlari' dep atalatug'i'n si'zi'qlardi'n' quramali' su'wreti payda boladi' (10-su'wretti qaran'i'z, Kikushi Yaponiyali' fizik boli'p, usi'nday si'zi'qlardi'n' ali'ni'wi' haqqi'ndag'i' maqalasi' 1928-ji'li' baspadan shi'qti': Kiruchi S., Japan Journ. Phys., 5, 83, (1928.)). Elektronogrammani'n' diffuziyali'q foni'nda bul si'zi'qlar detallari' jetkilikli da'rejede quramali' bolg'an bazi' bir strukturani' payda etedi. Bul si'zi'qlardi'n' payda boli'wi' serpimli emes shashi'rag'an elektronlardi'n' Bregg shag'i'li'si'wi' menen baylani'sqan boli'p, ma'selege toli'q juwap beriw ushi'n dinamikali'q teoriyani' paydalani'wg'a tuwri' keledi. Biraq Kikushi si'zi'qlari'ni'n' geometriyasi' u'lginin' orientaciyasi'n joqari' da'llikte ani'qlaw ushi'n ju'da' qolayli' qural boli'p tabi'ladi'. A'piwayi' tu'rde Kikushi si'zi'qlari'ni'n' payda boli'w mexanizmin bi'layi'nsha ko'z aldi'g'a keltiriw mu'mkin: Orayg'a jaqi'n bazi' bir noqatta (11-su'wretti qaran'i'z) tu'siwshi da'stenin' elektronlari'ni'n' serpimli emes shashi'rawi' ori'n aladi'. Bul shashi'rawda tolqi'n vektori'ni'n' bag'i'ti' o'zgeredi ja'ne elektronni'n' energiyasi' kemeyedi. Soni'n' menen birge serpimli emes shashi'raw intensivligi shashi'raw mu'yeshinin' u'lkeyiwi menen monoton tu'rde kemeyedi. Eger serpimli emes shashi'rag'an da'ste menen kristaldag'i' bazi' bir tegislikler arasi'ndag'i' mu'yesh Bregg mu'eshi θ g'a ten' bolsa, onda bul tegisliklerden serpimli shashi'raw ori'n aladi'. Usi' tegislik penen θ mu'yeshin jasawshi' barli'q nurlardi'n'

ji'ynag'i' mu'yeshini'n' shamas'i' (ugol rastvora) $\pi/2 + \theta$ bolg'an 11-su'wrette ko'rsetilgandey eki konusti' payda etedi. Solay etip shashi'rati'wshi' tegislikler sistemasi'ni'n' ha'r qaysi'si' ushi'n nurlardi'n' eki konusi' payda boli'p, ular ekran menen kesiliskende eki giperbolani' payda etedi. θ mu'yeshi kishi bolg'anali'qtan bul giperbolalar tuwri' si'zi'qqa jaqi'n.



10-su'wret. Kikushi si'zi'qlari'ni'n' jiyi ushi'rasatug'i'n ko'rinisi



11-su'wret. Kikushi si'zi'qlari'ni'n' payda boli'w sxemasi'

Joqari'da atap o'tilgenindey, serpimli emes shashi'raw intensivligi shashi'raw mu'yeshinin' u'lkeyiwi menen kemeyedi. Usi'nday g'a'rezlilikdin' ori'n ali'wi' mi'nag'an ali'p keledi: kristallografiyali'q tegisliklerdin' bir sistemasi'ndag'a difrakciyada payda bolg'an Kikushi si'zi'qlari'ni'n' tu'siwshi da'stenin' bag'i'ti'na jaqi'n turatug'i'n ha'r bir jubi' ushi'n elektronogrammani'n' orayi'na sali'sti'rg'anda qashi'qlaw jaylasqan si'zi'qti'n' intensivliligi sol jupti'n' ekinshi si'zi'g'i'ni'n' intensivliliginen kishi boladi'. Si'zi'qlar arasi'ndag'i' mu'yeshlik qashi'qli'q 20 g'a ten'. Bul si'zi'qlar shashi'rati'wshi' tegislik penen ekranni'n' kesilisiw si'zi'g'i'na sali'sti'rg'anda simmetriyali' jaylasadi'. Sonli'qtan u'lgini en'keytsek yamasa bursaq, onda Kikushi si'zi'qlari' u'lgi menen bekkem baylani'sqan si'yaqli' boli'p o'zgeredi. Bul jag'day Kikushi si'zi'qlari'ni'n' ornin' almasti'ri'w bag'i'tlari' ha'm shamas'i' boyi'nsha kristaldi'n' orientaciyasi'n da'l ani'qlawg'a mu'mkinshilik beredi. A'dette eksperimentator Kikushi su'wretinin' orayi' ekranni'n' orayi'nda jaylasatug'i'nday etip kristaldi' buradi'. Bul kristaldi'n' orientaciyasi'n Kikushi si'zi'qlari' boyi'nsha ani'qlawdag'i' en' tiykarg'i' operaciya boli'p tabi'ladi'.

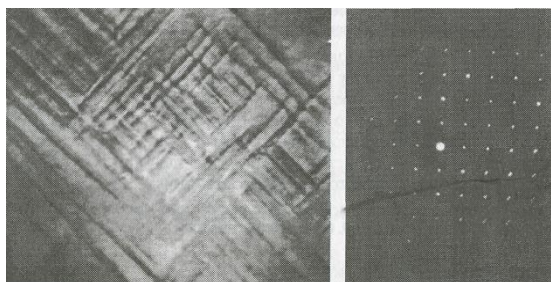
§ 8. Kontrastti'n' jetilispegen (strukturali'q defektli) kristallardag'i' o'zgeshelikleri

A'melde paydalani'li'p ju'rgen kristallar quramali' mikrostrukturag'a iye boladi'. Kristaldi'n' quri'li'si'ndag'i' defektler menen baylani'sli' kontrast difrakciyali'q sha'rtlerdin'

lokalli'q o'zgerislerinin' saldari'nan payda boladi'. Bunday o'zgerislerge tegisliklar arasi'ndag'i' qashi'qli'qlardi'n' o'zgerisleri, pa'njerenin' lokalli'q buri'li'wlari', strukturali'q amplitudani'n' o'zgerisleri, u'lginin' qali'n'li'g'i'ni'n' effektivlik qalan'li'g'i'ni'n' o'zgerisi, bo'liw shegaralari'ndag'i' fazali'q o'zgerisler (mi'sali' jaylasti'ri'w defektlari ha'm tag'i' basqalar) kiredi. Kristaldag'i' sonday defektler shashi'rag'an tolqi'nni'n' amplitudasi'nda qosi'msha $\alpha = 2\pi(\mathbf{H}, \mathbf{R})$ fazali'q ko'beytiwshisinin' payda boli'wi'na ali'p keledi. Bul an'latpada $\mathbf{H}$ keru pa'njerenin' vektori', $\mathbf{R}$ arqali' elementar quti'dag'i' atomni'n' defekt joq bolg'andag'i' haldan awi'si'wi' belgilengen. Eger $(\mathbf{H}, \mathbf{R})$ ko'beymesi nolge ten' bolsa, onda quri'li's defektinin' su'wretindegi kontrast nolge ten' boladi'. Bul defettin' keru pa'njere vektori'na perpendikulyar bag'i'tta awi'si'w payda etetug'i'nli'g'i'n bildiredi (shashi'rati'wshi' tegislikke parallel). «Su'wrettin' so'niwi» dep atali'wshi' bul uli'wmali'q sha'rt kristallardi'n' quri'li'si'ni'n' defektlerin tallaw ushi'n qollani'ladi'.

4- ha'm 12-su'wretlerde kristallardag'i' jaylasti'ri'w defektlari menen dvoyniklerdin' su'wretleri berilgen.

12-su'wrette $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$ kristalli'ndag'i' si'n'arlas (dvoynik) qatlamni'n' su'wreti berilgen. Qon'i'si'las si'n'arlas (rus tilinlegi «dvoynikovi'e orientacii» so'zleri «si'n'arlas orientaciyalar» dep awdari'lg'an) orientaciyalar tu'sken dasteni ha'r qi'yli' etip shashi'rataug'i'n bolg'anli'qtan, olar ushi'n o'tken da'stenin' intensivlikleri ha'r qi'yli'. Sonli'qtan su'wrette ha'r qi'yli' intensivlikke iye jolaqlar payda boladi'. Kristalda si'n'arlas kristallardi'n' bar boli'wi' (dvoyniklerdin' bar boli'wi') elektronogrammada bazi' bir reflekslerdin' bir neshe reflekslerge bo'liniwin ta'miyinleydi (12-b su'wret). Elektronli'q-mikroskopiyali'q su'wret penen difrakciyalig' kartinani' birgelikte tallaw tiykari'nda kristalda si'n'arlas bo'limlerdin' bar ekenligi haqqi'nda juwmaq shi'g'ari'wg'a ha'm oni'n' parametrlarin ani'qawg'a mu'mkinshilik beredi (si'n'arlasig'w tegisligi ha'm mu'yeshi haqqi'nda). Mi'sali' 12-b su'wrette mikrofotosu'wreti ha'm elektronogrammasi' keltirilgen kristalda si'n'arlasig'w tegisligi o'z-ara perpendikulyar bolg'an si'n'arlardi'n' eki sistemasig' ori'n aladi': $[110]$ ha'm $[1\bar{1}0]$. Si'n'arlasig'w mu'yeshi $\varphi = 0.87^\circ$. Kristaldag'i' usi' ori'nnan ali'ng'an elektronogrammada refleksler to'rt daqqa ayri'ladi' (ekewi si'n'arlardi'n' bir sistemasig', qalg'an ekewi ekinshi sistemasig' ushi'n).



12-su'wret. $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$ kristallari'ndag'i' dvoyniklerdin' su'wretleri:
a)-elektronli'q-mikroskopiyali'q su'wret; b) xarakterli elektronogramma. Ali'stag'i' reflekslerde daqlardi'n' bir neshe daqlarg'a bo'liniwi ayqi'n ko'rinip tur. Bul jag'day dvoyniklerdin' bar ekenliginen derek beredi.

§ 9. Dislokaciylardi'n' Byurgers vektori'ni'n' bag'i'ti'n ani'qlaw

Dislokaciylar elektron mikroskopi'nda qaran'g'i' si'zi'q tu'rinde su'wret payda etedi. Bul karan'g'i' si'zi'q dislokaciyalig'n' haqi'yqatta iyelegen ori'nni'n' bir ta'reipnde jatadi'. Kontrasti'na karap dislokaciyalig'n' Byurgers vektori'ni'n' bag'i'ti'n ani'qlaw mu'mkin. Sebebi kontart dislokaciyanig'n' sebebinen deformaciya'g'a ushi'rag'i'n kristalli'q pa'njerenin' tegisliklerinen g'ana ali'nadi'. Birinshi jaqi'nlasig'wda dislokaciyanig'n' Byurgers vektori'na parallel bolg'an tegislikter tegis boli'p kaladi'. Sebebi barli'q awi'si'wlar usi'nday tegisliklerge parallel. Elektronli'q-mikroskopiyali'q su'wrette $\mathbf{K}$ difrakciyalig' vektor ($\mathbf{K}, \mathbf{b}$) =

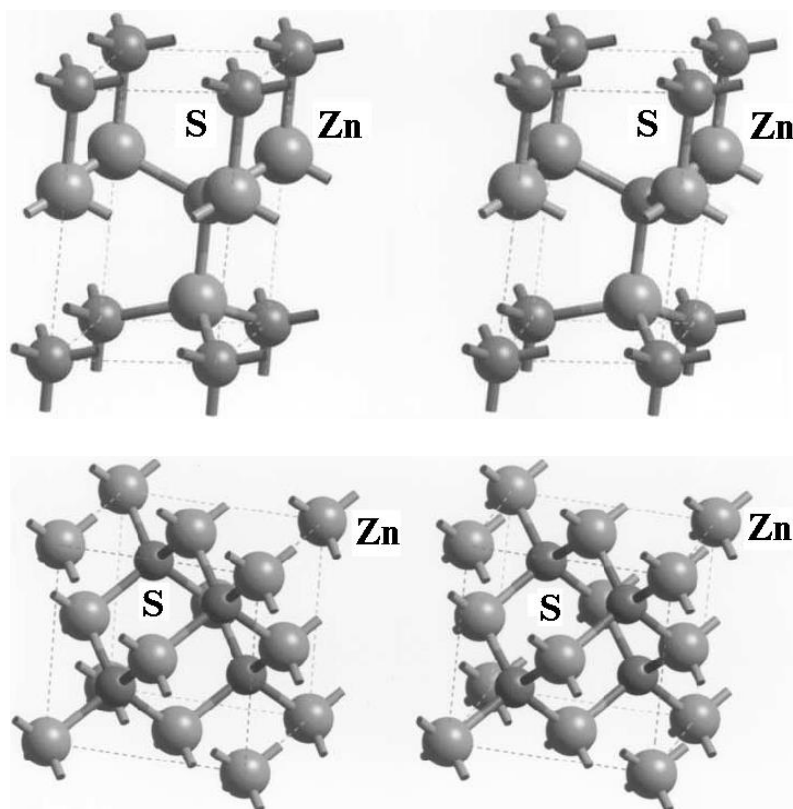
0 sha'rtin ori'nlag'anda kontrast baqlanbayli'. Solay etip Byurgers vektori'ni'n' bag'i'ti'n ani'qlaw ushi'n joqari'dag'i' sha'rtti qanaatlandi'ratug'i'n difrakciyalig' vektorlari' K_1 , K_2 bolg'an tegisliklerdin' eki a'wladi'n tabi'wdan ibarat boladi' eken. Bunday jag'dayda Byurgers vektori' b bag'i'ti' boyi'nsha $[K_1, K_2]$ vektori'na parallel boladi'. Dislokaciylar haqqi'nda qosi'msha mag'li'wmatlar bolg'an jag'dayda (mi'sali' oni'n' ji'lji'w tegisligi belgili bolsa) Byurgers vektori'ni'n' bag'i'ti'n difrakciyani'n' so'niwinin' tek bir sha'rti boyi'nsha ani'qlawg'a mu'mkin bolgan bolar edi.

Solay etip dislokaciyanin' Byurgers vektori'ni'n' bag'i'ti'n ani'qlaw ushi'n usi' dislokaciyanin' ha'r qi'ylig' reflekslerdegi mikrodifrakciyalig' kartinasi'n tu'siriw ha'm usi' su'wretlerdin' ishinen dislokaciya'dan ali'natug'i'n kontrast jog'alatug'i'n bir yamasa eki shag'i'li'si'wdi' tabi'w kerek eken. Buni'n' ushi'n mikroskopqa bir birine perpendikulyar eki bag'i'tlarda buri'wg'a mu'mkinshilik beretug'i'n goniometr ornati'lg'an boli'wi' lazi'm.

Elektron mikroskopi'n ayi'ri'm kristalli'q denelerdin' haqqi'yqi'y quri'li'si'n izertlew ushi'n qollani'w

§ 11. ZnS ha'm ZnSe kristallari'

Ilimiy a'debiyatlarda ZnS (ku'kirtli cink, cink sulfidi) ha'm ZnSe (selenlik cink yamasa cink selenidi) kristallari'ni'n' atomli'q-kristalli'q quri'li'si', oni'n' substrukturasig' haqqi'nda mag'li'wmatlar og'ada ko'p. Olardi'n' quri'sli'si' «cink aldawshi'si» («cinkovaya obmanka») dep atali'p almaz quri'li'si'na sa'ykes keledi. ZnS tin' joqari' temperaturadag'i' geksagonallig' modifikaciyasig' vyurcittegi atomlardin' jaylasig'wlarig' 12-a swu'rette, al o'jirie temperaturalarig'ndag'i' kubli'q sfalerit modifikaciyasig'ndag'i' atomlardin' jaylasig'wi' 12-b su'wrette berilgen.



a),

b).

12-su'wret. ZnS ha'm ZnSe kristallari'ni'n' quri'li'si' sxemasi'. a) joqari' teperaturali'q vyurcit, b) o'jire temperaturasi'ndag'i' sfalerit modifikaciylari'.

ZnS kristallari' ushi'n en' xarakterli na'rse ko'p sanli' politiplik modifikatsiyalardi'n' bar ekenliginde (A'debiy sholi'wlar politiplik modifikatsiyalari'ni'n' ko'pligi boyi'nsha kremniy karbidi (SiC) kristallari'ni'n' en' birinshi ori'ndi' iyeleytug'i'nli'g'i'n ko'rsetedi (Mi'sali' qaran'i'z T. L. DAULTON, T. J. BERNATOWICZ, R. S. LEWIS, S. MESSENGER, F. J. STADERMANN, S. AMARI. *Geochimica et Cosmochimica Acta*, Vol. 67, No. 24, pp. 4743–4767, 2003. Fayl 2003_GCA67_7). Bul boyi'nsha to'mendegilerdi bayanlaymi'z.

Eki qatlamli' vyurcittin' quri'li'si'ndag'i' atomlar qatlamlari'ni'n' birden-bir [0001] bag'i'ti'ndag'i' izbe-izligi ushi'n bi'lay jaza alami'z: $A\alpha B\beta A\alpha B\beta A\alpha B\beta \dots$ Bul izbe-izlikte A qatlami' Zn atomlari'na sa'ykes kelse, α qatlami' S atomlari' qatlami'na sa'ykes keledi. Biz bunnan bi'lay $A\alpha B\beta A\alpha B\beta A\alpha B\beta \dots$ izbe-izliklerin a'piwayi'li'q ushi'n AVAVAV.. tu'rinde jazami'z ha'm bul jag'dayda almaz quri'li'si' ushi'n jazi'lg'an ha'r bir ha'ripke eki qatlamnan sa'ykes keletug'i'nli'g'i'n an'g'arami'z (usi' ayti'lg'an so'zler ZnSe kristallari' ushi'n da duri's). Al kubli'q sfalerit modifikatsiyasi' ushi'n ABCABCABC... izbe izligi ori'n aladi'. Ko'p sanli' politiplik modifikatsiyalar geksagonalli'q vyurcit modifikatsiyasi' menen kubli'q sfaleritlik modifikatsiyani'n' arasi'ndag'i' arali'qli'q fazalar boli'p esaplanadi'. Olardi'n' en' ko'p tarqalg'anlari' to'mendegiler:

Modifikatsiya	Atomlar qatlamlari'ni'ning izbe-izligi
2H (geksagonalli'q)	AB AB AB AB ...
4H (geksagonalli'q)	ABAC ABAC ABAC ...
6H (geksagonalli'q)	ABCACB ABCACB ABCACB ...
3R (kubli'q)	ABC ABC ABC ...

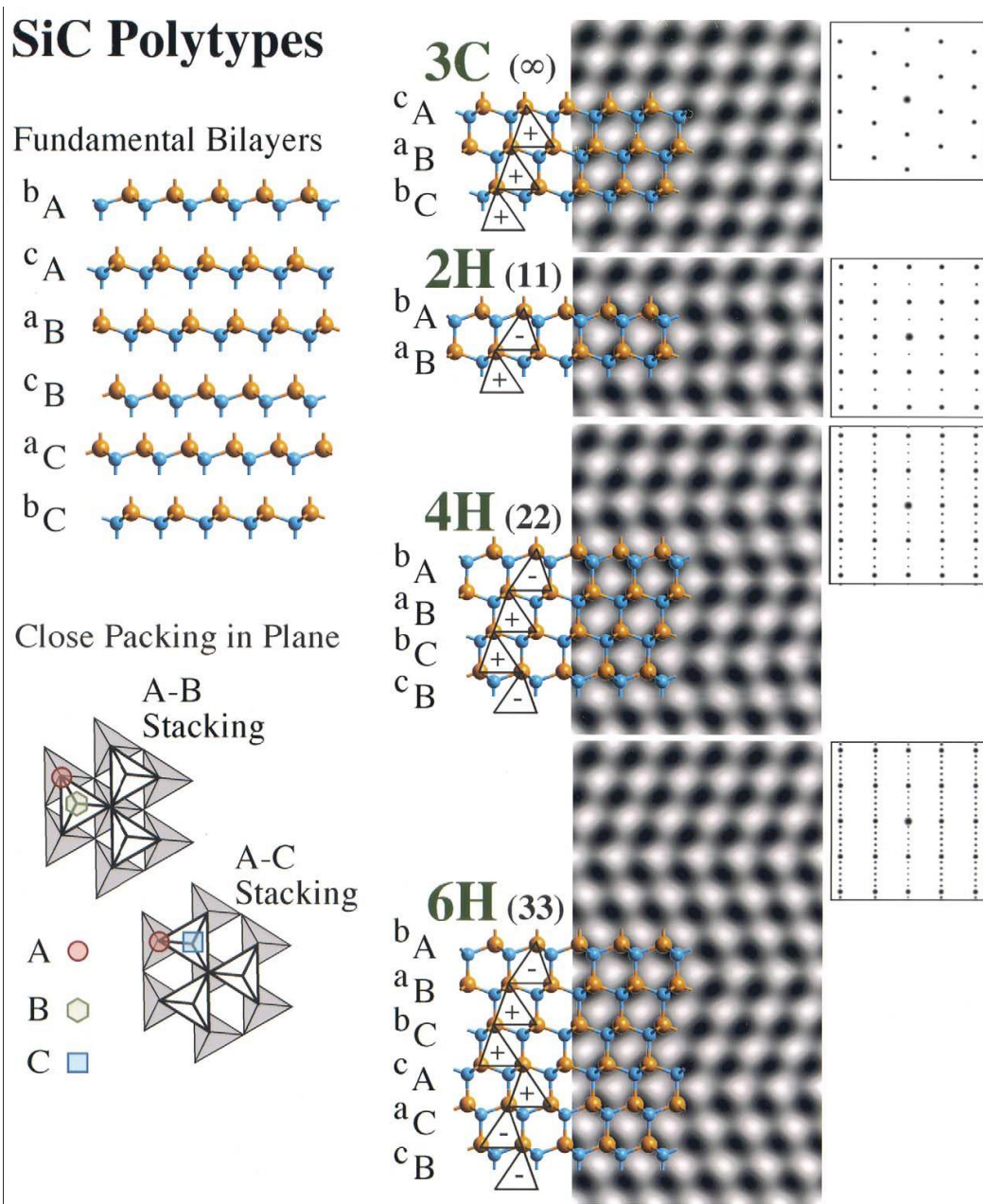
A'l'bette ha'r bir politiplik modifikatsiya ushi'n o'zine ta'n elektronli'q mikroskopiyali'q su'wret ali'nadi'. Bul boyi'nsha SiC (kremniy karbidi) kristallari' ju'da' jaqsi' izertlengen ha'm 13-su'wrette usi'nday politiplerden ali'ng'an elektronli'q mikroskopiyali'q su'wretler ha'm elektronogrammlar keltirilgen.

Biz ZnS ha'm ZnSe kristallari'ni'n' joqari' ha'm to'mengi temperaturalaridag'i' geksagonalli'q ha'm kubli'q modifikatsiyalari' arasi'ndag'i' tiykarg'i' baylani'sti' atap o'tiwimiz kerek. Bul baylani's kubli'q ZnS penen ZnSe kristallari'ni'n' substrukturasi'ni'n' qal'iplesiwinde tiykarg'i' ori'ndi' iyeleydi.

Geksagonalli'q fazani'n' kubli'q fazag'a aylani'si' temperaturani'n' tomenlewi menen boladi' (ZnS ushi'n vyurcit modifikatsiyasi' 1100°S dan joqari' temperaturalarda turaqli' tu'rde jasad'i') [ZnS kristallari'ni'ning eriw temperaturasi' 1900°S, qaynaw temperaturasi' 2185°S]. YAg'ni'y fazali'q o'tiw skalyar ta'sirdin' (salqi'nlati'wdi'n') na'tijesinde ju'zege keledi. Skalyar tasirdin' simmetriyasi' ti'ni'shli'qta turg'an sferani'n' simmetriyasi'n sa'ykes keledi. Sonli'qtan kristallofizikali'q Kyuri principi boyi'nsha geksagonalli'q simmetriyani'n' o'zgermewi kerek.

Al termodinamikali'q ko'z-qaraslar boyi'nsha o'jire temperaturalarida ZnS ha'm ZnSe kristallari'ni'n' kubli'q modifikatsiyasi' turaqli'. Olay bolsa biz o'jire temperaturalarida qalayi'nsha kubli'q simmetriyani'n' saqlani'wi'ni'n' mu'mkinshiligin tabi'wi'mi'z kerek. Haqi'yqati'nda da geksagonalli'q AB AB AB ... izbe-izliginin' kooperativ tu'rde ABC ABC ABC... yamasa ASV ASV ASV ... izbe-izliklerine aylani'wi'n a'piwayi' etip ko'rsetiw qi'yi'n emes. Bunday jag'dayda AB AB AB ... izbe-izliginin' atomli'q qatlamlardi'n' bir birine sali'sti'rg'andag'i' ji'li'si'wlari'ni'n' bari'si'nda ABC ABC ABC... yamasa ASV ASV ASV ... izbe-izliklerinin' payda bolatug'i'nli'g'i' a'debiyatta ko'rgizbeli tu'rde ken'nen sa'wlelendirilgen [Mi'sali' Hindistan fiziklari Verma ha'm Krishnani'n' jumi'slari'nda, Verma A. R. and Krishna P. (1966) Silicon carbide and other polytypic substances. In *Polymorphism and Polytypism in Crystals*, pp. 92–135. John Wiley & Sons, New York]. Solay etip biz vyurcitten ABC ABC ABC... yamasa ASV ASV ASV ... izbe-izliklerindeki sfalerittin' payda bolatug'i'nli'g'i'n ha'm

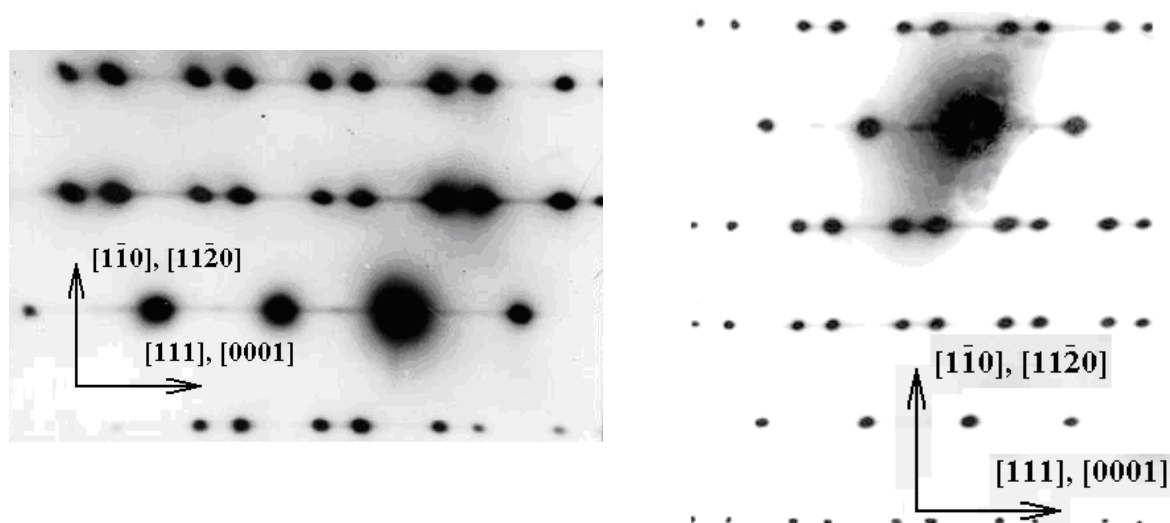
fazali'q aylani'sti'n' aqi'betinde ABC ABC ABC... ASV ASV ASV ... izbe izligindegi polisintetikali'q dvoyniktin' payda bolatug'i'nli'g'i'n (polidomenlik strukturag'a iye kristall) an'sat tabami'z. Al bul quri'li'stag'i' kristallar o'z gezeginde geksagonalli'q simmetriyani' saqlaydi'. Soni'n' menen birge eki-izbe-izlik arasi'ndag'i' shegara ... ABC ACB... jaylasti'ri'w defekti boli'p tabi'ladi'. A'dettegi polisintetikali'q ZnS tegi jaylasti'ri'w defektlari arasi'ndag'i' ortasha qashi'qli'qti'n' 30 Å ekenligi ani'qlandi'.



13-su'wret SiC kristallari'ni'n' ji'yi ushi'rasatug'i'n politipleri ha'm olardan ali'natug'i'n elektronli'q-mikroskopiya'li'q su'wretler.

Solay etip ZnS ha'm ZnSe kristallari'nan ali'natug'i'n difrakciya'li'q su'wretler geksagonalli'q simmetriya'g'a iye boladi' dep boljaw kerek. Bul jag'day elektronli'q-mikroskopiya'li'q su'wretler tusirilgenda haqi'yqattan da da'lillendi. Ali'ng'an elektronogrammalardi'n' su'wretleri 14-su'wrette keltirilgen. Bul elektronogrammalardag'i' en' birinshi ko'zge taslanatug'i'n jag'day reflekslerdin' bir bag'i'tta sozi'li'wi' boli'p tabi'ladi'. Bul sfalerittin' ABCABCABC... yamasa ACBACBACB... qatlamlari'ni'n' qali'n'li'g'i'ni'n' turaqli' emes, al bazi' bir shamalar arasi'ndag'i' variaciya'si'ni'n' ori'n alatug'i'nli'g'i'ni'nn' da'lili

boli'p tabi'ladi'. A'lbette qatlamni'n' en' kishi ma'nisi AB qatlami'ni'n' qali'n'li'g'i' – vyurcit elementar quti'si'ni'n' biyikligine (s turaqli'si'na) ten' ekenligin boljaw mu'mkin. Al en' qali'n' qatlamni'n' qali'n'li'g'i' (ortasha qali'n'li'q $30 \text{ \AA}$ bolg'anda) $50\text{--}70 \text{ \AA}$ di qurawi' sha'rt.



14-su'wret. ZnS kristalli'nan ali'ng'an elektronogrammalar. UEMV-100k elektron mikroskopi'. Tezletiwshi kernew 50 kv. U'sh sannan turatug'i'n indeksler kubli'q modifikaciya'g'a, al to'rt sannan turatug'i'n indeksler geksagonalli'q modifikaciya'g'a tiyisli.

Solay etip biz elektronogrammada polisintetikali'q (polidomenlik) ZnS kristalli'na tiyisli mi'naday o'zgesheliklerge iye bolami'z:

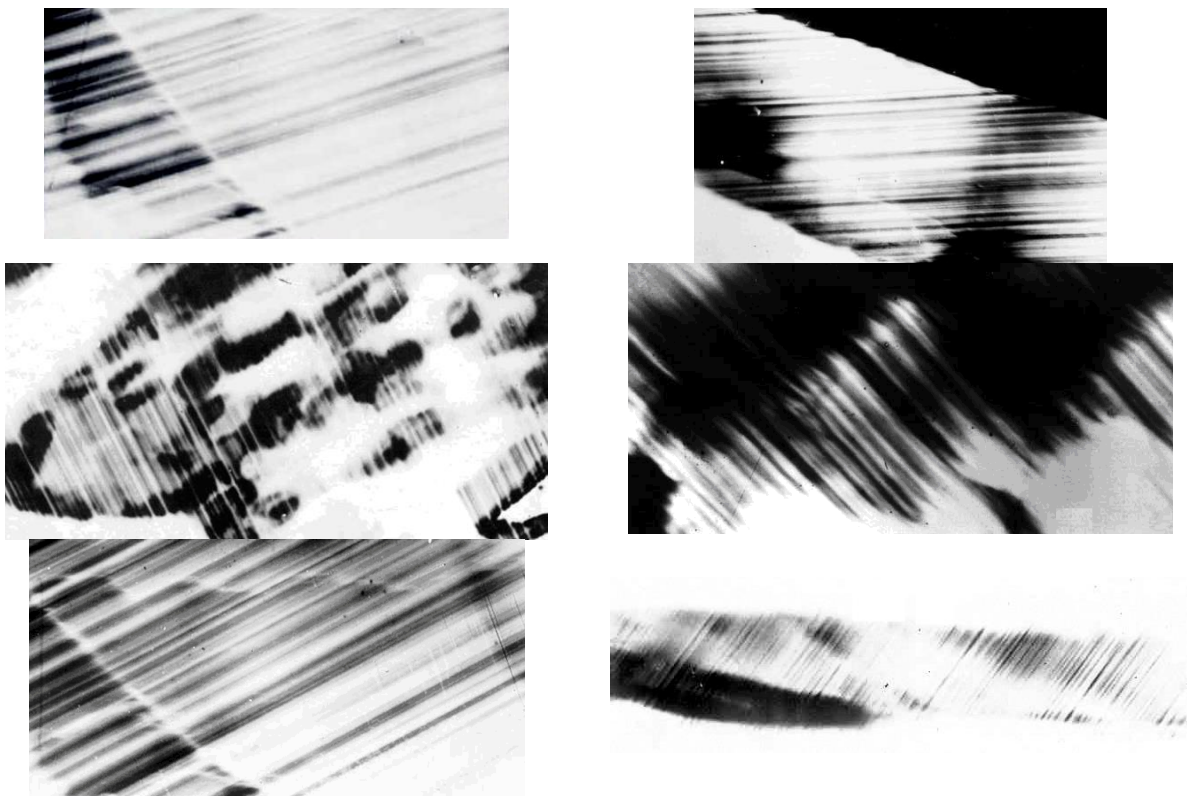
Birinshiden, reflekslerdin' jaylasi'wi'nda geksagonalli'q modifikaciya'ni'n' (0001) tegisligine, al kubli'q modifikaciya'ni'n' (111) tegisligine sali'sti'rg'anda aynali'q simmetriya ori'n aladi'. Biz kristallografiyadan kubli'q kristalda (111) tegisliginin' simmetriya tegisligi emes ekenligin bilemiz. Demek usi'nday simmetriya'ni'n' bar ekenligi kristaldi'n' polidomenlik quri'li'sqa iye ekenliginen derek beredi. Soni'n' ushi'n (111) tegisligine qarata simmetriya jormal simmetriya boli'p tabi'ladi'. Soni'n' menen birge indeksleri $h + k + l = 3N + 1$ bolg'an tu'yinler kubli'q pa'njerenin' [111] bag'i'ti'nda (geksagonalli'q pa'njerenin' [0001] bag'i'ti', soni'n' menen birge keri pa'njerenin' $\mathbf{H}_{(111)}$ vektori' bag'i'ti'nda (biz keri pa'njerenin' vektori' ushi'n joqari'da keltirilgendey $\mathbf{H}_{(hkl)}$ jazi'li'wi'nan paydalani'p, rentgenstrukturali'q tallawda ko'p qollani'latug'i'n $\mathbf{g}_{(hkl)}$ belgileniwin qollanbaymi'z) sozi'lg'an. Bul sfalerit qatlamlari'ni'n' qali'n'li'g'i'ni'n' haqi'ykatida da statistikali'q tarqalg'ani'nan derek beredi. Usi'ni'n' menen bir qatarda $h + k + l = 3N$ sha'rtin qanaatlandi'ratug'i'n tu'yinlerdin' formasi'ni'n' derlik do'n'gelek ekenligi ayqi'n ko'rinedi. Bunday tu'yinler jaylasti'ri'w defektlari arqali' hesh bir mayi'si'wsi'z o'tetug'i'n kristallografiyali'q tegisliklerge tiyisli boladi'.

Ekinshiden elektronogrammani' o'lshevlardan kubli'q modifikaciya'ni'n' turaqli'si'ni'n' ZnS tin' kubli'q modifikaciya'si'ni'n' kristalli'q pa'njeresinin' turaqli'si'na ten' ekenligi kelip shi'g'adi' ($a = 5,4107 \text{ \AA}$). Bul jag'day kristaldi'n' polidomenlik ekenligin, geksagonalli'q simmetriyasi'ni'n' jormal simmetriya ekenligin ja'ne bir ret da'lilleydi.

Endi elektronogrammalardi' o'lshew joli' menen ali'ng'an ZnS kristallari'ni'n' pa'njelerinin' turaqli'lari'n beremiz:

	Modifikatsiyalardi'n' belgileniwi		Simmetriyasi'ni'n' ken'isliklik topari'	Elementar quti' turaqli'lari'	
	klassikali'q			a	S
1	AV AV AV ...	2N	P6 ₃ mc	3.819	6.246
2	AVS AVS ...	3S	F4mc	3.827	9.369

Joqari'da ayti'lg'ani'nday ZnS tin' domenlerinin' ortasha qali'n'li'g'i' shama menen 30 Å. Sonli'qtan oni' ko'riw (vizuatsiyalaw) ma'selesi qoyi'li'p, o'tkerilgen elektronli'q difraktsiyali'q eksperimentlerde ali'ng'an su'wretler 15-su'wrette keltirilgen.



15-su'wret. ZnS kristallari'nan ali'ng'an jaqti' maydandag'i' elektronli'q-mikroskopiyali'q su'wretler.

ZnSe kristallari'ndag'i' betleri [111] ([0001] bag'i'ti') bag'i'ti'na perpendikulyar sfalerit domenlerinin' qali'n'li'g'i'ni'n' ZnS tin' domenlerinin' qali'n'li'g'i'na sali'sti'rg'anda a'dewir u'lken, makroskopiyali'q o'lshemlerde ekenligi belgili (Qaran'i'z Abdikamalov B.A., Ametov K.K., Ismailova K.X. Elektronografisheskoe izushenie strukturni'x prevrasheniy pri plasticheskoy deformatsii v ZnS. Statya. Vestnik Karakalpakskogo filiala AN UzSSR. № 3. S. 15-19). Sonli'qtan ZnSe kristallari'nan ali'ng'an sa'ykes elektronogrammalarda reflekslerdin' [111] ([0001] bag'i'ti') bag'i'ti'ndag'i' sozi'li'wi' baqlanbaydi', al sol domenlerdin' o'zlerinin' su'wretleri ani'q ko'rinedi. Sonli'qtan bunday kristallardi' (ZnSe si'yaqli') izertlewde elektronli'q mikroskopiya emes, al rentgenografiya ko'birek na'tiyjelerdi beredi.

Solay etip o'tkerilgen elektronli'q-mikroskopiyali'q izertlewler ZnS ha'm ZnSe kristallari'ni'n' atomli'q-kristalli'q strukturasi'n ha'm sub strukturasi'n ani'qlawg'a mu'mkinshilik berdi ha'm sol ali'ng'an difraktsiyali'q mag'lawatlar boyi'nsha to'mendegidey qi'sqasha juwmaqlardi' shi'g'ari'wg'a boladi':

O'jire temperaturalarini'nda ZnS ha'm ZnSe kubli'q strukturag'a iye boli'p kristallar toli'g'i' menen polisintetikalik'q substrukturag'a iye boladi'. Sfaleritlik faza juqa, betleri o'z-ara

parallel bolg'an domenlerge iye boli'p, bul juqa domenler joqari' temperaturali' geksagonalli'q fazadag'i' kristaldi'n' (0001) tegisligine parallel. ZnS kristallardag'i' domenlerdin' qali'n'li'g'i' ju'da' kishi bolg'anli'q tan (ortasha qali'n'li'q 30 Å) olardi' vizualizatsiyalar tek elektronli'q mikroskopiyali'q usi'llar menen g'ana a'melge asiri'ladi'.

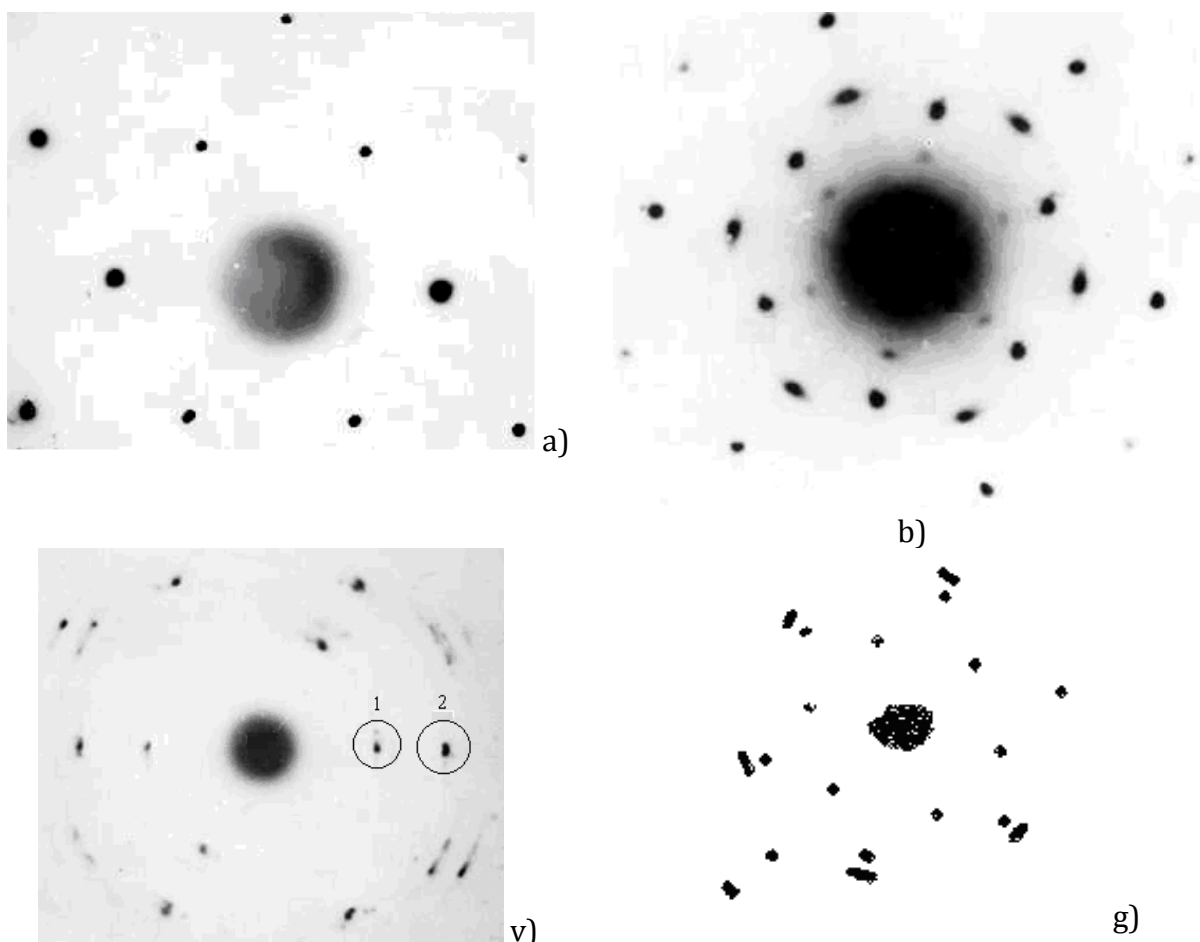
§ 12. Tiykari' grafit bolg'an qatlamli'q kristalli'q materiallardi' izertlew

Grafitin' ha'm tiykari' grafit bolg'an materiallardi'n' atomli'q-kristalli'q strukturasi' jaqsi' izertlengen boli'p, og'an ko'p sanli' ilimiy a'debiyat bag'i'shlang'an. Biraq usi' jag'dayg'i' qaramastan, a'sirese son'g'i' waqitlari' bekkemligi jag'i'nan joqari', al salmag'i' boyi'nsha kishi grafit penen oni'n' ha'r qiyli' ximiyali'q zatlar menen bolg'an birikpelerinin' turmi'sta ken'nen qollana baslag'anli'g'i'na baylani'sli' tiykari' grafit bolgan kristalli'q materiallardi'n' atomli'q ha'm substrukturali'q qurili'slari'n izertlew a'hmiyetli ori'nlardi' iyeleydi.

Grafitin' metallardi'n' xloridleri menen bolg'an qatlamli'q birikpeleri a'dette kishi ha'm juqa japi'raqshalardan ibarat boli'p [diametri 1 mm den kishi, japi'raqsha beti geksegonalli'q pa'njerenin' (0001) tegisligine parallel], usi'ni'n' saldari'nan olardi'n' ko'pshiligi elektronli'q-mikroskopiyali'q izertlew ushi'n aldi'n-ala juqa ulgiler tayarlaw procedurasi'n ju'rgiziwdi talap etpeydi.

Biz grafitin' metallardi'n' xloridleri menen bolg'an qatlamli'q birikpelerinin' elektronli'q-mikroskopiyali'q izertlew na'tiyjelerin ko'remiz. 16-su'wretlerde ali'ng'an elektronogrammalar keltirilgen. Bul difraktsiyali'q su'wretlerde grafitin' ker pa'njeresinin' tu'yinlerine ha'm ayri'li'p shig'i'w fazalari'na sa'ykes keliwshi refleksler payda boladi' («Ayri'li'p shig'i'w fazasi'» so'zleri «faza vi'deleniya» so'zine sa'ykes keledi). Ol reflekslerdin' belgili bir kristallografiyalı'q bag'itlar boyi'nsha jaylasatug'i'nli'g'i' ha'm sog'an sa'ykes grafitin' pa'njeresi menen ayri'li'p shig'i'w fazalari'ni'n' arasi'nda kristallografiyalı'q qatnasti'n' bar ekenligi ayki'n ko'rinedi. Biraq bul jag'day grafitin' CuCl₂ menen bolg'an birikpesinde ju'zege kelmeydi. Ali'ng'an elektronogrammalarda noqatli'q refleksler Debay saqi'ynalari'ni'n' boyi'nsha jaylasqan. Demek bul kristalli'q materiallarda ayiri'li'p shig'i'w fazasi' blokli'q (kristallar bloklari') qurili'sqa iye boladi'.

Ayri'li'w fazasi' kristallari'ni'n' elementar quti'lari'ni'n' turaqli'lari'n tabi'w ushi'n etalan si'pati'nda grafit qollani'ldi'. Esaplawlar MeSl₂ formulasi' menen ani'qlanatug'i'n (Me = Cu, Co, Mn ha'm Ni) fazalardi'n' noqatli'q maksimumlari'ni'n' kristall tu'rindagi MeSl₂ ge teyisli ekenligi belgili boldi'. Soni'n' menen birge grafitin' FeCl₃ menen bolg'an qatlamli'q birikpesinde pu'tkilley basqa na'tiyjeler ali'ndi'. Bul jag'dayda ali'ng'an $a = 5,6 \text{ Å}$ shaması' FeCl₂ birikpesinin' kristalli'q pa'njere turaqli'si'na jaqi'n. Grafitin' FeCl₃ menen birikpesinde grafit ha'm FeCl₃ birikpelerinin' kristalli'q pa'njereleri o'z-ara parallel, al grafit ha'm MeSl₂ (Me=Co, Mn ha'm Ni) jag'dayi'nda sol pa'njereler [0001] ko'sheri do'gereginde 30° qa buri'lg'an.



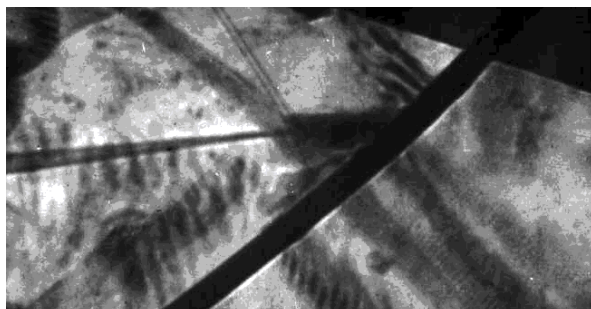
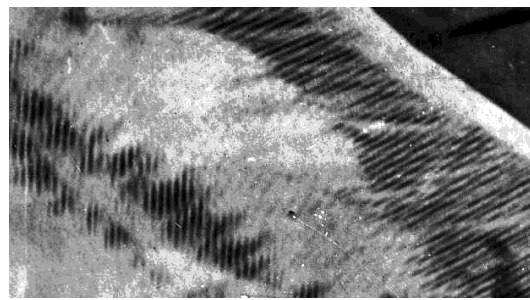
16-su'wret. Tiykari' grafit bolg'an materiallardan ali'ng'an elektronogrammlar.

a) taza grafit, b) grafit + FeCl_3 , v) grafit + CuCl_2 , g) grafit + MnCl_2 .

v) dag'i' a'zzi Debay saqi'ynasi'n su'wrette di'qqat penen qarag'anda an'g'ari'w mu'mkin.

Joqari'da keltirilgen xloridlerdin' ku'shli gigroskopiya'li'q qa'siyetlerge iye boli'wi'na qaramastan ayri'li'w fazalari' olardi' atmosferada bir neshe ay dawami'nda saqlag'anda da o'zlerinin' kristalli'q hali'n saqladi'. Bunnan ayri'li'w fazalari'ni'n xawa menen kontaktqa iye emes ekenligin, al grafit matrica ishindeg'i ishki san'laqlar yamasa bosli'qlarda jaylasatug'i'nli'g'i'n ko'rsetedi.

Ha'r qanday kristalli'q fazalardi'n' pa'njereleri arasi'nda duri's kristallografiya'li'q katnaslar tomendige eki jag'dayda ori'n aladi': eger eki faza birgelikte o'setug'i'n bolsa ha'm qatti' eritpelerdin' qurawshi'lari' qatlamlarg'a ayri'latug'i'n bolsa. Biraq biz alg'an eksperimentalli'q na'tiyjelerde qatlamli'q birikpelerdeg'i qurawshi'lardi'n' qatlamlarg'a ayri'li'wi' ori'n almaytug'i'nli'g'i' ko'rinedi. Sonli'qtan jan'a fazani'n' kristallitlerinin' osiwi xaqqi'nda ga'p ete alami'z. Biraq usi'nday jag'daydi'n' ori'n ali'yai' ushi'n eki zatti'n' kristallitlerinin' kristalli'q pa'njeresi turaqli'lari' u'lken shamag'a ayri'li'wi' mu'mkin emes (15 procentten arti'q emes shamag'a). Bul jag'daydi'n' biz qarap ati'rg'an birikpeler ushi'n ori'nlanbaytug'i'nli'g'i' ta'biyiy ha'm biz eksperimentte alg'an na'tiyjelerdi tu'sindiriw ushi'n ilimiy a'debiyatta keltirilgen mag'li'wmatlar tiykari'nda ayi'ri'li'p shi'g'i'w fazalari'ni'n' si'rtqi' qatlamlari' menen ulgerodti'n' qatlamli'q birikpeleri arasi'nda taza uglerod qatlami' arqali' baylani'sadi' dep boljaymi'z.



17-su'wret. Tiykari' grafit bolg'an materiallardan ali'ng'an elektronli'q-mikroskopiyali'q su'wretler.

Solay etip grafitin' qatlamli'q birikpeleri u'lgilerinde tabi'lg'an jetilisken quri'li'sqa ha'm eki bag'i't boyi'nsha a'dewir u'lken o'lshemlerge iye ayri'li'w fazalari' sintez processinde payda bolg'an dep boljaymi'z. Soni'n' menen birge onday fazalar qi'zdi'rg'anda yamasa ko'p waqi't u'lgilerdi xawada saqlag'anda (eki-u'sh ay) payda boladi' eken. Bul fazalardi'n' kristalli'q pa'njereleri grafit tegisligine sali'sti'rg'anda [0001] bag'i'ti' a'tirapi'nda 0 ha'm 30° qa buril'lg'an.

§ 13. Qorg'asi'n ortovanadati' kristallari'n izertlew

Menshikli emes segnetoelastik qorg'asi'n ortovanadati' $Pb_3(VO_4)_2$ shama menen 100°S ni'n' a'tirapi'nda I a'wlad fazali'q o'tiwine ushi'raydi' ha'm oni'n' simmetriyasi' romboedrlik $R3m$ nen monoklinlik $P2_1/c$ ge shekem to'menleydi. Usi'ni'n' na'tiyjesinde quramali' polidomenlik struktura payda boli'p, bul struktura polarizatsiyali'q mikroskopta an'sat baqlanadi'. $Pb_3(VO_4)_2$ kristallari'ndag'i' domenlerdin' quri'li'si' rentgenografiyalı'q usi'llar menen izertlendi ha'm bul kristallarda strukturalı'q este saqlaw effekti baqlandi' (Qaran'i'z: B.A.Abdikamalov. Memory Effect in Lead Orthovanadate Crystals (Effekt pamyati v kristallax ortovanadata svinca). Uzbekskiy fizisheskiy jurnal. 2000. Vol. 2 (№ 5-6), S. 469-470). Biraq qorg'asi'n ortovanadati'ndag'i' domenler quri'li'si'ni'n' quramali'li'g'i' qosi'msha elektronografiyalı'q ha'm elektronli'q-mikroskopiyali'q izertlewlerdi ju'rgiziwdi talap etti.

$Pb_3(VO_4)_2$ kristallari'ni'n' kristallografiyalı'q mag'li'wmatlari' mi'na kestede berilgen:

Fazani'n' belgisi ha'm temperatura, K.	Simmetriyani'n' ken'islik-tegi topari'	Kristalli'q pa'njere turaqli'lari', Å.
g- faza. $T > 373$	$R3m$	$a_g = 5.76,$ $s_g = 20.368.$
b- faza. $273 < T < 373$	$P2_1/n$	$a = 7.515,$ $b = 6.1062,$ $c = 9/2831,$ $b = 111.86^\circ$ pri 300°.

a - faza. T<273	P2 ₁	a = 15.042, b = 6.106, c = 18.596 b = 111.88° pri 230 K.
--------------------	-----------------	---

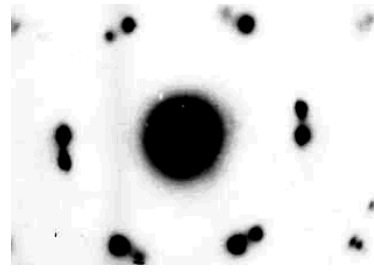
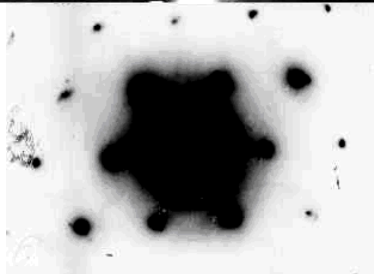
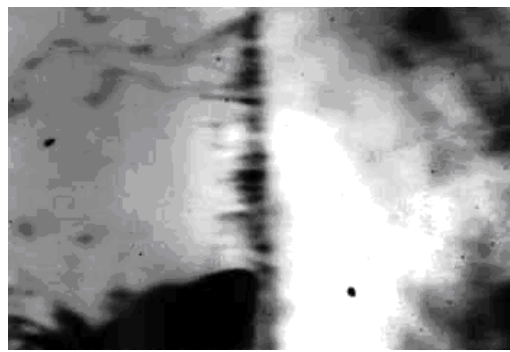
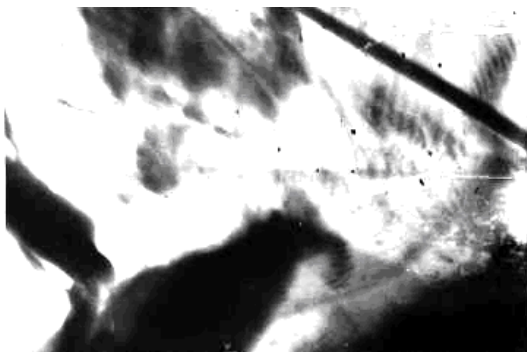
Korg'asi'n ortovanadati' kristallari'ni'n' monoklinlik β -fazasi'ni'n' elektronogrammalari' 18-su'wrette keltirilgen. Bul su'wretlerde romboedrlilik pa'njerenin' monoklinlik pa'njerege o'tiwinin' birden eki mexanizm menen ju'zege keletugi'nli'g'i' ko'rinip tur. Fazali'q o'tiwler eki tegislikte si'n'arlasiw joli' menen tomendegidey sxemalarda ju'redi:

1. $\{11\bar{2}0\}$ tipindegi tegisliklerde si'n'arlasiw, ji'lji'w tegisligi (00.1), ji'lji'w bag'i'ti' $\langle 11\bar{2}0 \rangle$;

2. $\{11\bar{2}0\}$ tegisligindegi si'n'arlasiw, ji'lji'w tegisligi (00.1), ji'lji'w bag'i'ti' $\langle 11\bar{2}0 \rangle$ (indekslerdin' barli'g'i' da joqari' temperaturali' fazani'n' geksgonalli'q quri'li'si'na tiyisli).

Monoklinlik pa'njerenin' $[0k0]$ ha'm $[h\ 0\ 2h]$ bag'i'tlari'ndag'i' difrakciyalik maksimumlari' o'zlerine ta'n ayri'qshali'qqa iye. Ha'r bir ekinshi maksimumnan keyin daqti'n' intensivligi ku'shli tu'rde kemeyedi. Bul qubi'li'sti' qos difrakciya qubi'li'si' menen baylani'sti'rami'z. Usi'ni'n' saldari'nan qadag'an etilgen refleksler payda boladi' (Rentenografiyalik terbeliw rentgenogrammalari'nda bul refleksler elektronogrammalardag'i' si'yaqli' intensivliklari' ku'shli ayri'lmaytug'i'nli'g'i' atap o'temiz).

Su'wretlerdi ko'rinip turg'ani'nday si'n'arlasiwdi'n' eki mexanizminin' bir waqi'tta islewinin' na'tiyjesinde formalari' ha'r qi'yli' bolg'an reflekslerdin' ali'natug'i'nli'g'i' ko'rinedi. Mi'sali' $\{11\bar{2}0\}$ tegisliklerindegi si'n'arlasiwlarda payda bolg'an quri'li'sqa juwap beriwshi refleksler $[11\bar{2}0]$ bag'i'ti'na parallel bag'i'tlarda sozi'lg'an ha'm olardi'n' qurawshi'lari' bir biri menen a'zzi jolaqlar menen tutasqan. Bunday jolaqlar yamasa sozi'li'wlar $\{11\bar{2}0\}$ tegisligindegi si'n'arlasiwlarda payda bolmaydi'.



18-su'wret. Qorg'asi'n ortovanadati' kristallari'nan ali'ng'an elektron-mikroskopiya'li'q su'wretler ha'm elektronogrammalar.

Solay etip qorg'asi'n ortovanadati' kristallari'nda 80-140°S temperaturalar intervali'nda atomli'q-kristalli'q quri'li'sti'n' a'dewir u'lken o'zgerisleri ori'n aladi'. Bul ozgerisler bir waqi'tta birden eki tegislikte si'n'arlasiw arqali' ju'zege keledi. Bir waqi'tta eki tegislikte si'n'arlasiw og'ada kuramali' polidomenlik quri'li'sti'n' payda boli'wi'na ali'p kelip, bul

ayri'qsha jag'daydi' ele de toli'g'i'raq izertlew u'lken ilimiy ha'm texnikali'q a'hmiyetke iye boladi'.

A'debiyatlar dizimi

1. R.Djeys. Optisheskie principi' difrakcii rentgenovskix lushey. Perevod s anglayskogo G.A.Goldera i M.P.SHaskolskoy. Pod redakciey V.I.Iveronovoy. Izdatelstvo Inostrannoy literaturi'. Moskva. 1950. 572 s.
2. A.I.Kitaygorodskiy. Rentgenostrukturni'y analiz. Gosudarstvennoe izdatelstvo texniko-teoretisheskoy literaturi'. Moskva, Leningrad. 1950. 650 s.
3. V.I.Iveronova, G.P.Revkevish. Teoriya rasseyaniya rentgenovskix lushey. Izdatelstvo Moskovskogo universiteta. Moskva. 1972. 246 s.
4. Z.G.Pinsker. Rentgenovskaya kristallooptika. Izdatelstvo «Nauka». Moskva. 1982. 392 s.
5. Rentgendifrakcionni'e i elektronno-mikroskopisheskie metodi' analiza atomno-kristallisheskoy strukturi' materialov. Metodisheskoe posobie. Pod redakciey SHextmana V.SH. i Suvorova E.V.. Institut fiziki tverdogo tela RAN. SHernogolovka 2000. 138 s.
6. P.Xirsh, A.Xovi, R.Nikelson, D.Peshli, M.Uelan. Elektronnyaya mikroskopiya tonkix kristallov. Izdatelstvo «Mir». Moskva. 1968. 574 s.
7. Fizisheskaya enciklopediya. Tom 1. Moskva. «Sovetskaya enciklopediya». 1988. 704 s.
8. L.D.Landau, E.M.Lifshic. Teoretisheskaya fiziki. Tom II. Teoriya polya. 8-izdanie. Izdatelstvo «Nauka». Moskva. 2001. 534 s.
9. Fundamentalni'e fizisheskie postoyanni'e (1998). Uspexi fizisheskix nauk. Tom 173. № 3. 2003.339-344.
10. M.A.Krivoglaz. Difrakciya rentgenovskix lushey i neytronov v neidealni'x kristallax. Izdatelstvo «Naukova dumka». Kiev. 1983. 408 s.
11. A.Gine. Rentgenografiya kristallov. Gosudarstvennoe izdatelstvo fiziko-matematisheskoy literaturi'. Moskva. 1961. 604 s.