Бердақ атындағы Қарақалпақ мәмлекетлик университети

Улыўма физика кафедрасы

КРИСТАЛЛОФИЗИКА

пәни бойынша

ОҚЫТЫЎ ТЕХНОЛОГИЯСЫ (ОҚЫЎ-МЕТОДИКАЛЫҚ КОМПЛЕКС, 2011-2012 оқыў жылы ушын)

Физика қәнигелиги студентлери
ушын дүзилген, 4-курс, 8-семестр.

Лекциялық сабақлар 32 (лекциялар саны 16), лабораториялық сабақлар 24 саат, студентлердиң өз бетинше жумысларының көлеми 50.

“Тастыйықлайман”
Оқыў ислери бойынша проректор

_______________ М. Ибрагимов
2011-жыл 29-июнь

Физика-техника факультетиниң физика қәнигелигигиниң (Тәлим бағдары: 544 – Физика) 4-курс студентлери ушын “Кристаллофизика” пәни бойынша

САБАҚЛАРҒА МӨЛШЕРЛЕНГЕН ОҚЫЎ ПРОГРАММАСЫ

Дүзиўши улыўма физика кафедрасының баслығы, физика-математика илимлериниң кандидаты, професссор Б. Абдикамалов.

Пәнниң сабақларға мөлшерленген оқыў программасы Қарақалпақ мәмлекетлик университетиниң оқыў-методикалық кеңесиниң 2011-жыл 29-июнь күнги мәжилисинде қарап шығылды ҳәм мақулланды. Протокол номери 6.

Пәнниң сабақларға мөлшерленген оқыў программасы улыўма физика кафедрасының 2011-жыл 25-июндеги мәжилисинде талқыланды ҳәм мақулланды. Протокол саны 11.

Пәнниң сабақларға мөлшерленген оқыў программасы физика-техника факультетиниң илимий кеңесиниң 2011-жыл 25-июндеги мәжилисинде талқыланды ҳәм мақулланды. Протокол саны 11.

Сабақларға мөлшерленген оқыў программасы

	Темалар атлары	Лек-ция-лар	Лаб.	Өз бетин ше
1	Кирисиў. Кристаллографиядан тийкарғы мағлыўматлар. Кристаллардың қурылысы ҳәм кеңислик пәнжереси. Кристаллардыңәпиўайы шекли симметрия элементлери. Кристаллографиялық категориялар, системалар ҳәм сингониялар. Кристаллар симметриясының ноқатлық топарлары	2		2

	(класслары).			
2	Кристаллардың 32 симметрия классын (симметрияның 32 ноқатлық топарын) келтирип шығарыў ҳәм тәриплеў. Симметрияның шеклик топарлары (Кюри топарлары). Кристаллар структурасының (қурылысының) симметриясы.	2		2
3	Кристаллар структурасы симметриясы элементлерин қосыў. Бравэ пәнжерелери. Симметрияның кеңисликтеги 230 топарлары. Кери пәнжере. Структуралық кристаллографияның тийкарғы формулалары.	2		2
4	Кристаллардың физикалық қәсийетлерин тензорлық ҳәм симметриялық тәриплеў усыллары. Кристал тутас бир текли анизотроп орталық сыпатында. Тензорлар ҳәм олардың түрлендириўлери. Векторлардың ҳәм 2-рангалы тензорлардың қураўшыларын түрлендириў.	2		4
5	Ҳәр қыйлы рангалардағы тензорлар. Псевдотензорлар (аксиал тензорлар). Симметриялық ҳәм антисимметриялық тензорлар. Тензорларды геометриялық жақтан интерпретациялаў.	2		4
6	Көрсеткиш бетлер. Скалярлардың, псевдоскалярлардың ҳәм векторлардың симметриясы. Физикалық қәсийетлердиң симметриясы. Кристаллофизикалық координаталар системасы.	2		2
7	Кристаллардың механикалық қәсийетлери. Кристаллардың серпимлилик қәсийетлери. Кристаллар ушын Гук нызамы.	2	4	4
8	Кристалдың симметриясының серпимлилик коэффициентлери тензорыдың түрине тәсири. Жылжыў менен болатуғын эластик деформация. Жылжыў элементлери.	2		4
9	Кристалдың сызықлы жыллылық кеңейиўи.	2	4	4

	Жыллылық өткизгишлик.			
10	Фазалық өтиўлер. Полиморфизм. Биринши ҳәм екинши әўлад фазалық өтиўлери. Атомлар тербелислери ҳәм полиморфлық өтиўлер. Дебай ҳал теңлемеси ҳәм Грюнайзен формуласы. Фаза-лықөтиўлер ҳәм кристаллар симметриясы.	2	2	2
11	Кристаллардың оптикалық қәсийетлери. Кристаллардың поляризациясы. Поляризацияның тийкарғы түрлери.	2	4	2
12	Электр өткизгишлик. Диэлектриклик жоғал-тыўлар. Пироэлектрлик қубылыслар. Пьезоэлектрлик эффект ҳәм электрострикция.	2	2	4
13	Ферроэлектриклердиң электрлик қәсийетлериниң өзгешеликлери ҳәм доменлик қурылысы. Кристал-лардың оптикалыққәсийетлери.	2		4
14	Кристаллардың структуралық анализи тийкарла-ры. Электрон тығызлығы функциясы. Фурье инте-гралы. Температуралық фактор. Кристаллардағы ди-фракция.	2	4	4
15	Лауэ шәртлери. Шашыраў сферасы. Структуралық амплитуда. Шашыраўлар интенсивлиги. Дифракциялық сүўреттиң симметриясы ҳәм оның кристалл симметриясының ноқатлық топары менен байланысы.	2	4	4
16	Дифракциялық сүўретте кристаллдың кеңисликтеги симметриясының көриниўи. Өшиўлер.	2		4
	Жәми	32	24	50

‘Кристаллофизика’ курсы бойынша жуўмақлаўшы қадағалаў сораўлары

1-вариант

1. Кристаллографиядан тийкарғы мағлыўматлар. Кристаллардың қурылысы ҳәм кеңислик пәнжереси. Симметрия ҳәм симметрия элементлери. Симметриялық операциялар.
2. Кристалдың сызықлы жыллылық кеңейиўи. Жыллылық өткизгишлик.

3. Жылжыў менен болатуғын эластик деформация. Жылжыў элементлери.
4. Кристаллардың механикалық қәсийетлери. Кристаллардың серпимлилик қәсийетлери. Кристаллар ушын Гук нызамы.
5. Әпиўайы куб тәризли пәнжерениң [100] ҳәм [001] түйинлери арқалы өтетуғын туўры сызық бағытының кристаллографиялық индекслери жазылсын.

2-вариант

1. Кристаллардың әпиўайы шекли симметрия элементлери. Симметриялық операция-лар.
2. Механикалық кернеў ҳәм деформация. Кернеў менен деформацияларды екинши рангалы тензорлар менен тәриплеў.
3. Кристаллардың жылылық, механикалық ҳәм электрлик қәсийетлери арасындағы байланыс.
4. Пироэлектрлик ҳәм сегнетоэлектрлик кристаллар.
5. Кальций кристаллының пәнжере параметри ҳәм бир бирине ең жақын жайласқан атомлар арасындағы аралық анықлансын (пәнжерениң қабырғалары орайласқан куб болып табылады). Кальций кристаллының тығызлығы $\rho = 1{,}55 \cdot 10^3 \ кг/м^3$.

3-вариант

1. Симметриялық ҳәм антисимметриялық тензорлар. Екинши рангалы тензорды симметриялы ҳәм антисимметрия тензорлардың қосындысы сыпатында көрсетиў.
2. Кристаллографиялық категориялар, системалар ҳәм сингониялар.
3. Кристаллардың жыллылық сыйымлығы. Кристаллардағы биринши ҳәм екинши әўлад фазалық өтиўлери.
4. Кристаллардың структурасын рентгенографиялық жоллар менен изертлеўдиң тийкарлары. Вульф-Брэгг теңлемеси ҳәм оның физикалық мәниси.
5. Төмендеги геометриялық фигуралардың симметриясының формулаларын жазыңыз:
а) квадрат, б) параллелограмм, в) куб г) тетраэдр, д) алты қапталлы призма е) алты қапталлы пирамида.

4-вариант

1. Кристаллардағы ашық ҳәм жабық симметрия элементлери. Кристаллар симметриясының ноқатлық топарлары. Кристаллографиялық класслар.
2. Кристаллардың серпимли берилгишлик тензоры менен серпимли қаттылық тензорлары.
3. Пироэлектрлик эффект ҳәм электрострикция.
4. Кристаллардың физикалық қәсийетлериниң симметриясы. Кюри топарлары.
5. Төмендеги геометриялық фигуралардың симметрия формулаларын жазыңыз: а) тетраэдр, б) алты қапталлы призма, с) алты қапталлы пирамида.

5-вариант

1. Кристаллардың 32 симметрия классын (симметрияның 32 ноқатлық топарын) келтирип шығарыў ҳәм тәриплеў.
2. Кристаллардың жыллылық кеңейиўи ҳәм жыллылық өткизгишлик.
3. Парамагнетиклер, диамагнетиклер ҳәм ферромагнетиклер. Ферромагнитлик доменлер.
4. Оптикалық поляризация. Оптикалық актив кристаллар. Кристаллардағы жақтылық нурларының поляризациясын бақлаў.

5. Төменде келтирилген симметриялық операциялардың избе-из тәсири жуўмақларын матрица формадасында жазыңыз: а) $2_x\overline{1}$, б) $6_z \cdot m_x$, в) $2_x 3_{111} m_z$.

6-вариант

1. Симметрияның шеклик топарлары (Кюри топарлары). Кристаллар структурасының (қурылысының) симметриясы.
2. Кристаллар ушын Ом нызамы. Салыстырмалы өткизгишлик ҳәм салыстырмалы қарсылық.
3. Кристаллардағы дифракциялық анализ тийкарлары. Вульф-Брэгг теңлемеси.
4. Кристаллар тутас анизотроп бир текли орталық сыпатында. Орайға карата симметриялы ҳәм орайғы қарата симметриялы емес керисталлар.
5. Кристаллографиялық индекслери (210) ҳәм (110) болған бетлер берилген. Усы бетлердиң кесилисиў сызығының (қырының) кристаллографиялық индекслери табылсын.

7-вариант

1. Бравэ пәнжерелери. Бравэ пәнжерелерин сайлап алыўдың үш шәрти.
2. Нолинши, биринши ҳәм екинши рангалы тензорлар. Тензорларды қосыў ҳәм көбейтиў.
3. Кристаллар ушын Гук нызамы. Кристаллардың механикалық қәсийетлери тензорлардың жәрдеминде тәриплеў.
4. Характеристикалық бет. Характеристикалық бетлер теңлемелери.
5. Көлемде ҳәм қапталда орайластырылған куб тәризли пәнжерениң бир элементар қутышасына сәйкес келетуғын түйинлер саны анықлансын.

8-вариант

1. Структуралық кристаллографияның тийкарғы формулалары. Кристаллографиялық тегисликлер арасындағы қашықлықлар ҳәм мүйешлер.
2. Кристаллардың механикалық қәсийетлери. Серпимли ҳәм эластик деформациялар.
3. Кристаллардың электр өткизгишлиги ҳәм оның шамасының кристаллографиялық бағытларға байланыслы екенлиги.
4. Биринши ҳәм екинши әўлад фазалық өтиўлери. Екинши әўлад фазалық өтиўлериндеги кристаллардың симметриясының өзгериўлери.
5. A(0, b/2, c/2) ҳәм B(a/2, 0, c/2) ноқатлары арқалы өтетуғын бағыттың символы анықлансын.

9-вариант

1. Кристаллардың физикалық қәсийетлерин тензорлық ҳәм симметриялық тәриплеў усыллары. Кристал тутас бир текли анизотроп орталық сыпатында.
2. Кристаллографиялық категориялар. Жоқары, орта, төменги категорияларға кириўши кристаллар ҳәм олардың физикалық қәсийетлери.
3. Ферромагнетизм. Ферромагнитлик доменлер. Ферромагнитлердеги гистерезис.
4. Кристаллардың структуралық анализиниң тийкарлары. Кристаллардағы рентген нурларының дифракциясы.
5. Кристаллогрфиялық индекслери (200) ҳәм (110) болған бетлердиң кесилисиў сызығының индекслери табылсын.

10-вариант

1. Тензорлар ҳәм олардың түрлендириўлери. Векторлардың ҳәм 2-рангалы тензорлардың қураўшыларын түрлендириў.

2. Кристаллардың курылысының ноқатлық симметриясы менен олардың физикалық қәсийетлериниң симметриясы арасындағы байланыс. Нейман принципи.

3. Кристаллардың структурасын рентгенографиялық жоллар менен изертлеўдиң тийкарлары. Вульф-Брэгг тенлемеси ҳәм оның физикалық мәниси.

4. Кристаллардың оптикалық қәсийетлери. Сыныў көрсеткиши. Оптикалық актив кристаллар.

5. Операцияның избе-из тәсири жуўмақларын матрицалық формада жазыңыз:

а) $2_x m_z 3_{111}$, б) $3_z \cdot m_x$, в) $m_x 3_z$,

11-вариант

1. Ҳәр қыйлы рангалардағы тензорлар. Псевдотензорлар (аксиал тензорлар).

2. Кристаллофизикадағы Кюри ҳәм Нейман принциплери.

3. Кристаллар ушын Ом нызамы. $\boldsymbol{j} = \sigma \boldsymbol{E}$ нызамын түсиндириў. Салыстырмалы өткизгишлик σ шамасының екинши рангалы тензор екенлигин дәлиллеў.

4. Кристаллардағы рентген нурларының дифракциясы. Лауэ усылы. Полихроматикалық усыл.

5. Кристаллографиялық индекслери 111 ҳәм $[311]$ болған қабырғалар қандай кристаллографиялық тегисликте жатады?

12-вариант

1. Скалярлар, тензорлар ҳәм екинши рангалы тензорлар. Скаляр ҳәм тензорлық физикалық шамалар.

2. Тензорларды геометриялық жақтан интерпретациялаў. Характеристикалық бетлер (Көрсеткиш бетлер).

3. Жылжыў менен болатуғын эластик деформация. Жылжыў элементлери. Жылжыў элементлериниң кристаллографиялық бағытлары.

4. Скалярлардың, псевдоскалярлардың ҳәм векторлардың симметриясы. Физикалық қәсийетлердиң симметриясы.

5. x, y, көшерлеринде сәйкес $2a$, ҳәм $3b$ шамаларына тең кесинделерди кесип өтетуғын z көшерлерине параллель тегисликтиң кристаллографиялық символлары анықлансын.

13-вариант

1. Кристаллардағы фазалық өтиўлер. Полиморфизм. Биринши ҳәм екинши әўлад фазалық өтиўлери. Фазалық өтиўлердеги кристаллардың симметриясының өзгерислери.

2. Еки векторды бир бири менен байланыстыратуғын екинши рангалы тензорлар (салыстырмалы электр өткизгишлик, жыллылық өткизгишлик коэффициентлери, диэлектриклик сиңиргишлик, магнитлик сиңиргишлик ҳәм басқа лар).

3. Электр поляризациясы. Электр майданының кернеўлилиги $\boldsymbol{E}$, поляризациясы $\boldsymbol{P}$ ҳәм диэлектриклик индукциясы $\boldsymbol{D}$ арасындағы байланыс.

4. Кристаллардың механикалық қәсийетлери. Кристаллардың серпимлилик қәсийетлери. Кристаллар ушын Гук нызамы.

5. Кублық кристаллдың бетине түсирилген нормал көшерлери менен $\alpha = 74^0, \beta = 57^0, \gamma = 36^0$ мүйеш жасайды, усы беттиң кристаллографиятық индекслери анықлансын.

14-вариант

1. Кристаллардың оптикалық қәсийетлери. Кристаллардың поляризациясы. Поляризацияның тийкарғы түрлери.

2. Екинши тәртипли характеристикалық бетлер. Бас көшерлер. $S_1x_1^2 + S_2x_2^2 + S_3x_3^2 = 0$ теңлемеси.

3. Кристаллардың парамагнитлик ҳәм диамагнитлик қабыллағышлығы. Олардың мәнислериниң кристаллографиялық бағытларға ғәрезлиги.

4. Кристалдың сызықлы жыллылық кеңейиўи. Жыллылық өткизгишлик. Кристаллардың жыллылық өткизгишлик коэффициенти.

5. Кристаллографиялық индекслери (346) болған тегисликтиң сәйкес кристаллограциялық көшерлери бойынша кесип өтетуғын кесиндилери табылсын.

15-вариант

1. Электр өткизгишлик. Диэлектриклик жоғалтыўлар. Пироэлектрлик қубылыслар. Пьезоэлектрлик эффект ҳәм электрострикция.

2. Кристаллографиядан тийкарғы мағлыўматлар. Кристаллардың қурылысы ҳәм кеңислик пәнжереси.

3. Кристаллардың әпиўайы шекли симметрия элементлери. Симметриялық операциялар.

4. Ферроэлектриклердиң электрлик қәсийетлериниң өзгешеликлери ҳәм доменлик қурылысы. Кристаллардың оптикалық қәсийетлери.

5. $x,\ y$ ҳәм z көшерлери бойынша сәйкес $\frac{1}{2}a,\ \frac{1}{3}b,\ \frac{1}{4}c$ кесинделерин кесип өтетуғын кристаллографиялық тегисликлер семейятвосы ушын Миллер индекслерин анықлаңыз.

16-вариант

1. Механикалық кернеў ҳәм деформация. Гук нызамы. Кернеў менен деформацияларды екинши рангалы тензорлар менен тәриплеў.

2. Кристаллардың жылылық, механикалық ҳәм электрлик қәсийетлери арасындағы байланыс.

3. Кристаллографиялық категориялар, системалар ҳәм сингониялар (сингониялыр саны, олардың ҳәр қайсысы ушын кристал турақлылары ($a, b, c, \alpha, \beta,$ ҳәм γ лар) ушын қойылатуғын шәртлер (мысалы кублық кристаллар ушын $a = b = c$ ҳәм $\alpha = \beta = \gamma = 90^0$).

4. Пироэлектрлик ҳәм сегнетоэлектрлик (ферроэлектрлик) кристаллар.

5. Кристаллограциялық тегисликлер семейятвосында [[200]], [[010]] ҳәм [[001]] түйинлеги жайласқан. Усы кристаллографиялық тегисликлер ушын Миллер инденкслери табылсын.

17-вариант

1. Симметриялық ҳәм антисимметриялық тензорлар. Екинши рангалы тензорды симметриялы ҳәм антисимметрия тензорлардың қосындысы сыпатында көрсетиў.

2. Кристаллар симметриясының ноқатлық топарлары. 32 ноқатлық топарларды келтирип шығарўға мысаллар. Кристаллографиялық класслар.

3. Кристаллардың жыллылық сыйымлығы. Кристаллардағы биринши ҳәм екинши әўлад фазалық өтиўлери.

4. Парамагнетиклер, диамагнетиклер ҳәм ферромагнетиклер. Ферромагнитлик доменлер.

5. Егер пәнжереси көлемде орайластырылған куб тәризли болса, онда неон кристалының тығызлығы табылсын. Пәнжере турақлысы $a = 0,452$ нм $= 4,52$ Å.

18-вариант

1. Кристаллардың структурасын рентгенографиялық жоллар менен изертлеўдиң тийкарлары. Вульф-Брэгг теңлемеси ҳәм оның физикалық мәниси. Кристаллографиялық тегисликлер арасындағы қашықлық d, дифракциялық мүйеши θ ҳәм рентген толқынларының толқын узынлыгы λ арасындағы байланыс.

2. Кристаллардың серпимли берилгишлик тензоры менен серпимли қаттылық тензорлары.

3. Пироэлектрлик эффект ҳәм электрострикция.

4. Оптикалық поляризация. Оптикалық актив кристаллар.

5. Куб тәризли пәнжереде туўры сызықтың бағыты $[11]$ индекслери менен берилген. Усы туўры сызық пенен (111) тегислиги арасындағы мүйеш табылсын.

19-вариант

1. Кристаллардың физикалық қәсийетлериниң симметриясы. Кюри топарлары. Кристаллофизикадағы Кюир принципи.

2. Кристаллардың 32 симметрия классын (симметрияның 32 ноқатлық топарын) келтирип шығарыў ҳәм тәриплеў.

3. Кристаллардың жыллылық кеңейиўи ҳәм жыллылық өткизгишлик.

4. Характеристикалық бет. Характеристикалық бетлер теңлемелери.

5. Куб тәризли пәнжередеги еки тегислик (010) ҳам (011) Миллер индекслери менен берилген. Тегисликлер арасындағы мүйеш табылсын.

20-вариант

1. Структуралық кристаллографияның тийкарғы формулалары. Кристаллографиялық тегисликлер арасындағы қашықлықлар ҳәм мүйешлер.

2. Кристаллар ушын Гук нызамы. Кристаллардың механикалық қәсийетлери тензорлардың жәрдеминде тәриплеў.

3. Ферромагнетизм. Ферромагнитлик доменлер. Парамагнетизи, диамагнетизм ҳәм ферромагнетизм қубылыслары арасындағы тийкарғы өзгешеликлер.

4. Биринши ҳәм екинши әўлад фазалық өтиўлери. Екинши әўлад фазалық өтиўлериндеги кристаллардың симметриясының өзгериўлери.

5. Төмендеги геометриялық фигуралардың симметрия формулаларын жазыңыз: а) тетраэдр, б) алты қапталлы призма, с) алты қапталлы пирамида.

21-вариант

1. Нолинши, биринши ҳәм екинши рангалы тензорлар. Тензорларды қосыў ҳәм көбейтиў.

2. Симметрияның шеклик топарлары (Кюри топарлары). Кристаллар структурасының (қурылысының) симметриясы.

3. Кристаллардың механикалық қәсийетлери. Серпимли ҳәм эластик деформациялар. Юнг модули. Кристаллардың серпимлик шегин анықлаў усыллары.

4. Кристаллар ушын Ом нызамы. Салыстырмалы өткизгишлик ҳәм салыстырмалы қарсылық.

5. Әпиўайы куб тәризли пәнжерениң [100] ҳәм [001] түйинлери арқалы өтетуғын туўры сызық бағытының кристаллографиялық индекслери жазылсын.

22-вариант

1. Кристаллардың курылысының ноқатлық симметриясы менен олардың физикалық қәсийетлериниң симметриясы арасындағы байланыс. Нейман принципи.

2. Кристаллардың электр өткизгишлиги ҳәм оның шамасының кристаллографиялық бағытларға байланыслы екенлиги.

3. Кристаллардың физикалық қәсийетлерин тензорлық ҳәм симметриялық тәриплеў усыллары. Кристал тутас бир текли анизотроп орталық сыпатында.

4. Кристаллардың атомлық-молекулалық қурылысын анықлаўдың физикалық тийкарлары. Рентгеноструктуралық анализдиң тийкарғы теңлемеси – Вульф-Брэгг теңлемеси.

5. Төмендеги геометриялық фигуралардың симметриясының формулаларын жазыңыз:

а) квадрат, б) параллелограмм, в) куб, г) тетраэдр, д) алты қапталлы призма, е) алты қапталлы пирамида.

23-вариант

1. Бравэ пәнжерелери. Симметрияның кеңисликтеги 230 топарлары. Кери пәнжере.

2. Көлемде ҳәм қапталда орайластырылған куб тәризли пәнжерениң бир элементар қутышасына сәйкес келетуғын түйинлер саны анықлансын.

3. Парамагнетиклер, диамагнетиклер ҳәм ферромагнетиклер. Ферромагнитлик доменлер.

4. Оптикалық поляризация. Оптикалық актив кристаллар. Кристаллардағы жақтылық нурларының поляризациясын бақлаў.

5. Кристаллографиялық индекслери (210) ҳәм (110) болған кристаллографиялық тегисликлер берилген. Усы кристаллографиялық тегисликлер кесилисиў сызығының (қырының) кристаллографиялық индекслери табылсын.

24-вариант

1. Кристаллографиялық категориялар. Жоқары, орта, төменги категорияларға кириўши кристаллар ҳәм олардың физикалық қәсийетлери.

2. Кристаллардың структуралық анализиниң тийкарлары. Кристаллардағы рентген нурларының дифракциясы.

3. Кристаллардағы дифракциялық анализ тийкарлары. Вульф-Брэгг теңлемеси.

4. Кристаллар бир текли, тутас анизотроп орталық сыпатында. Кристаллардың физикалық қәсийетлериниң анизотропиясының тийкарғы себеплери.

5. Кристаллографиялық индекслери (111) ҳәм (220) болған кристаллографиялық тегисликлер берилген. Усы кристаллографиялық тегисликлер кесилисиў сызығының (қырының) кристаллографиялық индекслери табылсын.

25-вариант

1. Тензорлар ҳәм олардың түрлендириўлери. Векторлардың ҳәм 2-рангалы тензорлардың қураўшыларын түрлендириў.

2. Кристаллардың структурасын рентгенографиялық жоллар менен изертлеўдиң тийкарлары. Вульф-Брэгг тенлемеси ҳәм оның физикалық мәниси.

3. Кристаллардың оптикалық қәсийетлери. Сыныў көрсеткиши. Қос нур сындырыў кубылысы.

4. Парамагнетиклер, диамагнетиклер ҳәм ферромагнетиклер. Ферромагнитлик доменлер.

5. Төменде келтирилген симметриялық операциялардың избе-из тәсири жуўмақларын матрица формасында жазыңыз: а) $2_x\bar{1}$, б) $6_z \cdot m_x$, в) $2_x 3_{111} m_z$.

26-вариант

1. Механикалық кернеў ҳәм деформация. Гук нызамы. Кернеў менен деформацияларды екинши рангалы тензорлар менен тәриплеў.

2. Кристаллардың оптикалық қәсийетлери. Кристаллардағы жақтылық нурының шағылысыўы, сыныўы ҳәм жутылыўы. Қос нур сындырыў.

3. Кристаллардың жыллылық сыйымлығы. Кристаллардағы биринши ҳәм екинши әўлад фазалық өтиўлери.

4. Кристаллографиялық категориялар, системалар ҳәм сингониялар (сингониялыр саны, олардың ҳәр қайсысы ушын кристал турақлылары ($a, b, c, \alpha, \beta,$ ҳәм γ лар) ушын қойылатуғын шәртлер (мысалы кублық кристаллар ушын $a = b = c$ ҳәм $\alpha = \beta = \gamma = 90^0$).

5. Кристаллогрфиялық индекслери (100) ҳәм (010) болған кристаллографиялық тегисликлердиң кесилисиў сызығына переллерль болған кристаллографиялық бағыттың кристаллогрфациялық индлекслери табылсын.

27-вариант

1. Симметриялық ҳәм антисимметриялық тензорлар. Екинши рангалы тензорды симметриялы ҳәм антисимметрия тензорлардың қосындысы сыпатында көрсетиў.

2. Кристаллардың жылылық, механикалық ҳәм электрлик қәсийетлери арасындағы байланыс.

3. Пироэлектрлик ҳәм сегнетоэлектрлик (ферроэлектрлик) кристаллар. Сегнетоэлектриклердиң электр майданындағы поляризациясы. Сегнетоэлектрлик гистерезис.

4. Кристаллар симметриясының ноқатлық топарлары. 32 ноқатлық топарларды келтирип шығарўға мысаллар. Кристаллографиялық класслар.

5. Кристаллограциялық тегисликлер семейственосында [[200]], [[010]] ҳәм [[001]] түйинлеги жайласқан. Усы кристаллографиялық тегисликлер ушын Миллер инденкслери табылсын.

28-вариант

1. Кристаллардың электр өткизгишлиги. Электр өткизгишликтиң кристаллографиятық бағытлардан ғәрезлиги

2. Кристаллографиядан тийкарғы мағлыўматлар. Кристаллографиялық категориялар (төменги, орта ҳәм жоқарғы категориялар). Сингониялар.

3. Симметриялық операциялар. Симметрияның ноқатлық топары симметриялық операциялар топары сыпатында.

4. Ферроэлектриклердиң электрлик қәсийетлериниң өзгешеликлери ҳәм доменлик қурылысы.

5. x, y ҳәм z көшерлери бойынша сәйкес $\frac{1}{2}a$, $\frac{1}{3}b$, $\frac{1}{4}c$ кесинделерин кесип өтетуғын кристаллографиялық тегисликлер семесйствосы ушын Миллер индекслерин анықлаңыз.

29-вариант

1. Кристаллографиядан тийкарғы мағлыўматлар. Кристаллардың қурылысы ҳәм кеңислик пәнжереси. Кристаллографиялық бағытлар, кристаллық пәнжере.

2. Кристалдың сызықлы жыллылық кеңейиўи. Жыллылық өткизгишлик. Кристаллар ушын жыллылық өткизгишлик коэффиценти еки векторды байланыстырыўшы екинши рангалы ьензор сыпатында.

3. Жылжыў менен болатуғын эластик деформация. Жылжыў элементлери.

4. Кристаллардың механикалық қәсийетлери. Кристаллардың серпимлилик қәсийетлери. Кристаллар ушын Гук нызамы.

5. Әпиўайы куб тәризли пәнжерениң [100] ҳәм [001] түйинлери арқалы өтетуғын туўры сызық бағытының кристаллографиялық индекслери жазылсын.

30-вариант

1. Кристаллардың әпиўайы шекли симметрия элементлери. Симметриялық операциялар. Симметрияның ноқатлық топарлары симметриялық операциялар топарлары сыпатында.

2. Механикалық кернеў ҳәм деформация. Кернеў менен деформацияларды екинши рангалы тензорлар менен тәриплеў. Гук нызамы ҳәм Юнг модули.

3. Кристаллардың жылылық, механикалық ҳәм электрлик қәсийетлери арасындағы байланыс.

4. Симметриялық ҳәм антисимметриялық тензорлар. Екинши рангалы тензорды симметриялы ҳәм антисимметрия тензорлардың қосындысы сыпатында көрсетиў.

5. Кальций кристаллының пәнжере параметри ҳәм бир бирине ең жақын жайласқан атомлар арасындағы аралық анықлансын (пәнжерениң қабырғалары орайласқан куб болып табылады). Кальций кристалының тығызлығы $\rho = 1{,}55 \cdot 10^3\ кг/м^3$.

Тийкарғы әдебият

М. П. Шаскольская. Кристаллография. Москва. "Высшая школа". 1984. 376 с.

Дж. Блейкмор. Физика твердого тела. Издательство "Мир". Москва. 1988. 608 с.

Ю. И. Сиротин, М. П. Шаскольская. Основы кристаллофизики. Издательство "Наука". Москва. 1975. 680 с.

Ч. Киттель. Введение в физику твердого тела. Издательство "Наука". Москва. 1978. 792 с.

Н. Ашкрофт, Н. Мермин. Физика твердого тела. Том 1. Издательство "Мир". Москва. 1979. 400 с.

Н. Ашкрофт, Н. Мермин. Физика твердого тела. Том 2. Издательство "Мир". Москва. 1979. 424 с.

Н. В. Переломова, М. М. Тагиева. Задачник по кристаллофизике. Издательство "Наука". Москва. 1982. 288 с.

Физика твердого тела. Спецпрактикум. Структура твердого тела и магнитные явления. Издательство Московского госуниверситета. Москва. 1982. 304 с.

Б. Абдикамалов. Кристаллофизика пәни бойынша лекциялар текстлери. 2011-жыл.

Қосымша әдебият

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

Современная кристаллография. Том 2. Структура кристаллов. Издательство "Наука". Москва. 1979. 360 с.

Современная кристаллография. Том 3. Образование кристаллов. Издательство "Наука". Москва. 1980. 408 с.

Современная кристаллография. Том 4. Физические свойства кристаллов. Издательство "Наука". Москва. 1981. 496 с.

Р. Вейсс. Физика твердого тела. Атомиздат. Москва. 1968. 456 с.

Ч. Уэрт, Р. Томсон. Физика твердого тела. Издательство "Мир". Москва. 1966. 568 с.

Дж. Най. Физические свойства кристаллов. Издательство "Мир". Москва. 1967. 386 с.

А. Келли, Г. Гровс. Кристаллография и дефекты в кристаллах. Издательство "Мир" Москва. 1974.

Студентлердиң билимин қадағалаў баллары

Сабақлар түрлери	Саат көлеми (лек+әмел +лаб)	Өз бетинше	Ағымда-ғы баҳалаў	Шегара-лық баҳалаў	Жуўмақ-лаўшы баҳалаў	Улыўма балл
Лекция	32	22	13	15	30	45
Лаборатория	24	12	14	15		35

Рейтинг қадағалаў түрлеринде ажыратылған қадағалаў түрлери балларын анықлаў усыллары

Қадағалаў түри	Қадағалаў усылы	Саны	Ўақты	Максимал балл
Ағымдағы қадағалаў	Аудиторияда ҳәм өз бе-тинше мәселелер шешиў	3	Кесте тийка-рында	13-14
Жәми				40
Шегаралық қадағалаў	Контрол жумысы	2	Кесте тийка-рында	15
	Тест сораўлары			
Жәми				30
Жуўмақлаўшы қадағалаў	Жуўмақлаўшы жазба жу-мысы	1	Кесте тийка-рында	30
Жәми		7		100

Лекциялар дизими

1-санлы лекция. Кирисиў. Кристаллографиядан тийкарғы мағлыўматлар. Кристаллардың қурылысы ҳәм кеңислик пәнжереси. Кристаллардыңәпиўайы шекли симметрия элементлери. Кристаллографиялық категориялар, системалар ҳәм сингониялар. Кристаллар симметриясының ноқатлық топарлары (класслары).

2-санлы лекция. Кристаллардың 32 симметрия классын (симметрияның 32 ноқатлық топарын) келтирип шығарыў ҳәм тәриплеў. Симметрияның шеклик топарлары (Кюри топарлары). Кристаллар структурасының (қурылысының) симметриясы.

3-санлы лекция. Кристаллар структурасы симметриясы элементлерин қосыў. Бравэ пәнжерелери. Симметрияның кеңисликтеги 230 топарлары. Кери пәнжере. Структуралық кристаллографияның тийкарғы формулалары.

4-санлы лекция. Кристаллардың физикалыққәсийетлерин тензорлық ҳәм симметриялық тәриплеў усыллары. Кристал тутас бир текли анизотроп орталық сыпатында. Тензорлар ҳәм олардың түрлендириўлери. Векторлардың ҳәм 2-рангалы тензорлардың қураўшыларын түрлендириў.

5-санлы лекция. Ҳәр қыйлы рангалардағы тензорлар. Псевдотензорлар (аксиал тензорлар). Симметриялық ҳәм антисимметриялық тензорлар. Тензорларды геометриялық жақтан интерпретациялаў.

6-санлы лекция. Көрсеткиш бетлер. Скалярлардың, псевдоскалярлардың ҳәм векторлардың симметриясы. Физикалық қәсийетлердиң симметриясы. Кристаллофизикалық координаталар системасы.

7-санлы лекция. Кристаллардың механикалық қәсийетлери. Кристаллардың серпимлилик қәсийетлери. Кристаллар ушын Гук нызамы.

8-санлы лекция. Кристалдың симметриясының серпимлилик коэффициентлери тензорыдың түрине тәсири. Жылжыў менен болатуғын эластик деформация. Жылжыў элементлери.

9-санлы лекция. Кристалдың сызықлы жыллылық кеңейиўи. Жыллылық өткизгишлик.

10-санлы лекция. Фазалық өтиўлер. Полиморфизм. Биринши ҳәм екинши әўлад фазалық өтиўлери. Атомлар тербелислери ҳәм полиморфлық өтиўлер. Дебай ҳал теңлемеси ҳәм Грюнайзен формуласы. Фазалық өтиўлер ҳәм кристаллар симметриясы.

11-санлы лекция. Кристаллардың оптикалық қәсийетлери. Кристаллардың поляризациясы. Поляризацияның тийкарғы түрлери.

12-санлы лекция. Электр өткизгишлик. Диэлектриклик жоғалтыўлар. Пироэлектрлик қубылыслар. Пьезоэлектрлик эффект ҳәм электрострикция.

13-санлы лекция. Ферроэлектриклердиң электрлик қәсийетлериниң өзгешеликлери ҳәм доменлик қурылысы. Кристаллардың оптикалыққәсийетлери.

14-санлы лекция. Кристаллардың структуралық анализи тийкарлары. Электрон тығыз-лығы функциясы. Фурье интегралы. Температуралық фактор. Кристаллардағы дифракция.

15-санлы лекция. Лауэ шәртлери. Шашыраў сферасы. Структуралық амплитуда. Шашыраўлар интенсивлиги. Дифракциялық сүўреттиң симметриясы ҳәм оның кристалл симметриясының ноқатлық топары менен байланысы.

16-санлы лекция. Дифракциялық сүўретте кристаллдың кеңисликтеги симметриясының көриниўи. Өшиўлер.

1-санлы лекция. Кирисиў. Кристаллографиядан тийкарғы мағлыўматлар. Кристаллардың қурылысы ҳәм кеңислик пәнжереси. Кристаллардыңәпиўайы шекли симметрия элементлери. Кристаллографиялық категориялар, системалар ҳәм сингониялар. Кристаллар симметриясының ноқатлық топарлары (класслары)

Техниканың пайда еткен машқалалары, кристаллардағы рентген нурларының дифракциясының ашылыўы, рентгенструктуралық анализдиң методларының исленип шығылыўы, соның менен бир қатарда қатты денелердиң атомлық-кристаллық қурылысын изертлеўдиң басқа да дифракциялық методларының ашылыўы XX әсирдиң басына шекем өзгермей келген кристаллография илиминиң тез раўажланып кетиўине үлкен түртки берди. Егер сол ўақытларға шекем кристаллография геологиялық-минералогиялық илимге жақын болып келген болса, енди ол физика, химия, техникалық илимлердиң көп тараўлары менен тиккелей байланыса баслады ҳәм кейинирек сол илимлер арасындағы байланыстырыўшы орайлық орынды ийеледи. Кристаллография илиминиң өзиниң орайы менен мақсети кристаллофизика тәрепке көбирек аўысты. Усының менен бирге кристаллардың қәсийетлерин изертлеўде математиканың тутқан орны артты.

Кристаллардың физикалық қәсийетлери өлшенген шамалар арасындағы қатнаслар менен тәрипленеди. Мысалы тығызлық масса менен көлем арасындағы қатнастан анықланады. Масса менен көлем бағытларға байланыссыз болғанлықтан тығызлық бағыттан ғәрезсиз қәсийет болып шығады. Керисинше салыстырмалы электр өткизгишлик сыяқлы қәсийетлер ҳәр қайсысы бағытқа байланыслы болған физикалық шамалар арасындағы қатнастан келип шығады (бул жағдайда электр майданының кернеўлилиги ҳәм тоқ тығызлығы). Экспериментлер ҳақыйқатында да кристаллардың көпшилик физикалық қәсийетлериниң усы физикалық қәсийет өлшенген бағытқа байланыслы екенлигин көрсетеди. Бундай жағдайларда кристалларды қарап атырылған қәсийетлерге қарата ***анизотроп*** деп қараймыз.

Демек кристаллардың физикалық қәсийетлерин қалай тәриплеймиз деген тәбийий сораў пайда болады. Усыған байланыслы лекциялар текстинде кристаллардың физикалық қәсийетлериниң тензорлық жазылыўларының тәртиплери берилген ҳәм усындай тензорлардың не екенлиги ҳәм қалай қолланылатуғынлығы түсиндирилген.

Биз дәслеп улыўма түрде кристаллардың жыллылық, электрлик ҳәм механикалық қәсийетлери арасындағы байланысларды көрсетип өтемиз. Бундай байланыслар усы кирисиў бөлиминде келтирилген А ҳәм В сүўретлеринде сәўлелендирилген. Сыртқы үш мүйешликтиң төбелеринде температура Т, электр майданының кернеўлилиги E_i, кернеўлер σ_{ij} қойылған. Бул шамаларды кристалларға түсирилген ‘күшлер’ деп қараўға болады. Ишки үш мүйешликтиң сәйкес төбелеринде S - көлем бирлигиндеги энтропия, D_i - электр индукциясы ҳәм ε_{ij} деформациясы жайласқан. Бул шамалар сәйкес күшлердиң тәсир етиўиниң тиккелей нәтийжеси болып табылады. Сыртқы ҳәм ишки үш мүйешликлердиң сәйкес төбелерин байланыстыратуғын жуўан сызықлар ***бас эффектлер*** деп аталатуғын үш бас эффектке сәйкес келеди.

1. Қайтымлы процессте температураның өсиўи бирлик көлемде энтропияның төмендегидей өзгерисин болдырады:

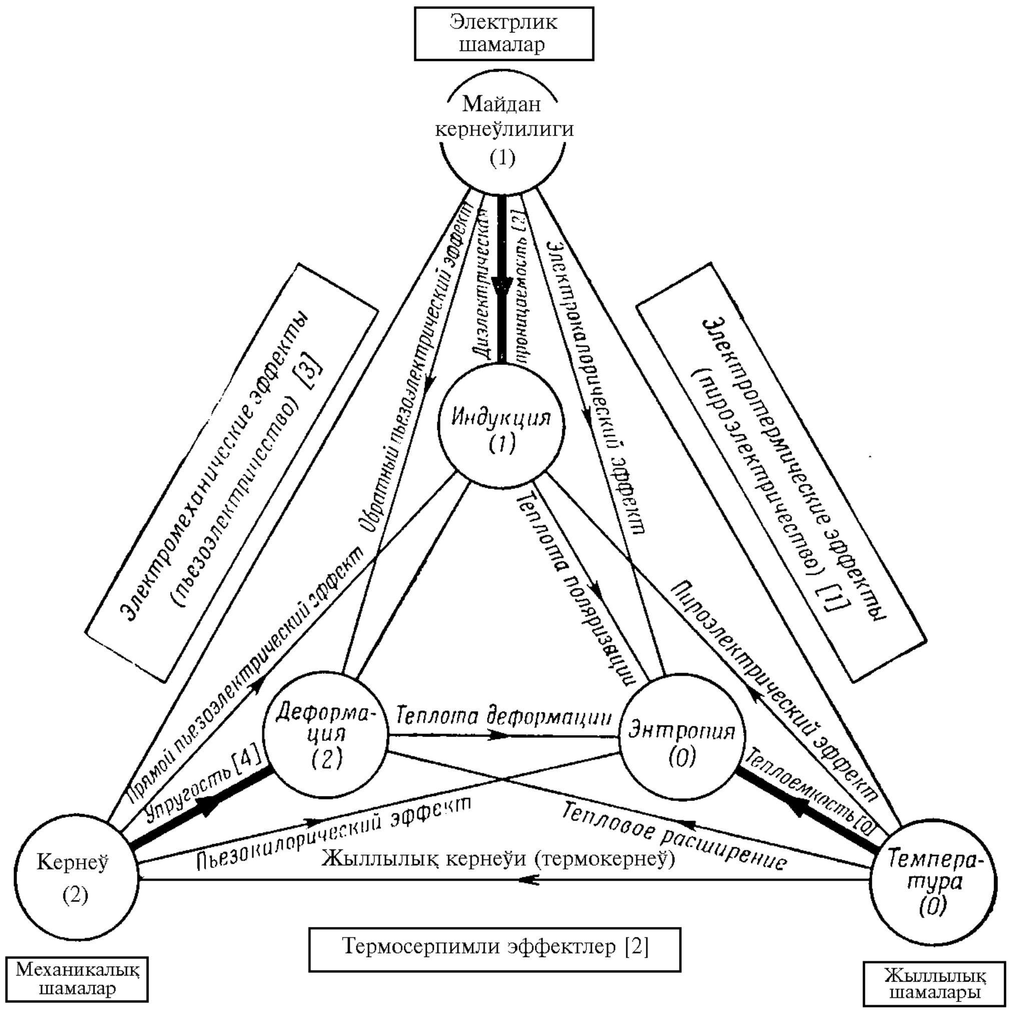
$$dS = (C/T)dT.$$

Бул аңлатпадағы скалярлар С бирлик көлем ушын жыллылық сыйымлылығы ҳәм Т - абсолют температура болып табылады.

2. Электр майданының киши өзгериси dE_i электр индукциясының өзгериси dD_i ди пайда етеди:

$$dD_i = \chi_{ij}dE_j.$$

Бул жерде χ_{ij} диэлектриклик сиңиргишлик тензоры болып табылады.



А сүўрет. Кристаллардың жыллылық, электрлик ҳәм механикалық қәсийетлери арасындағы қатнаслар.

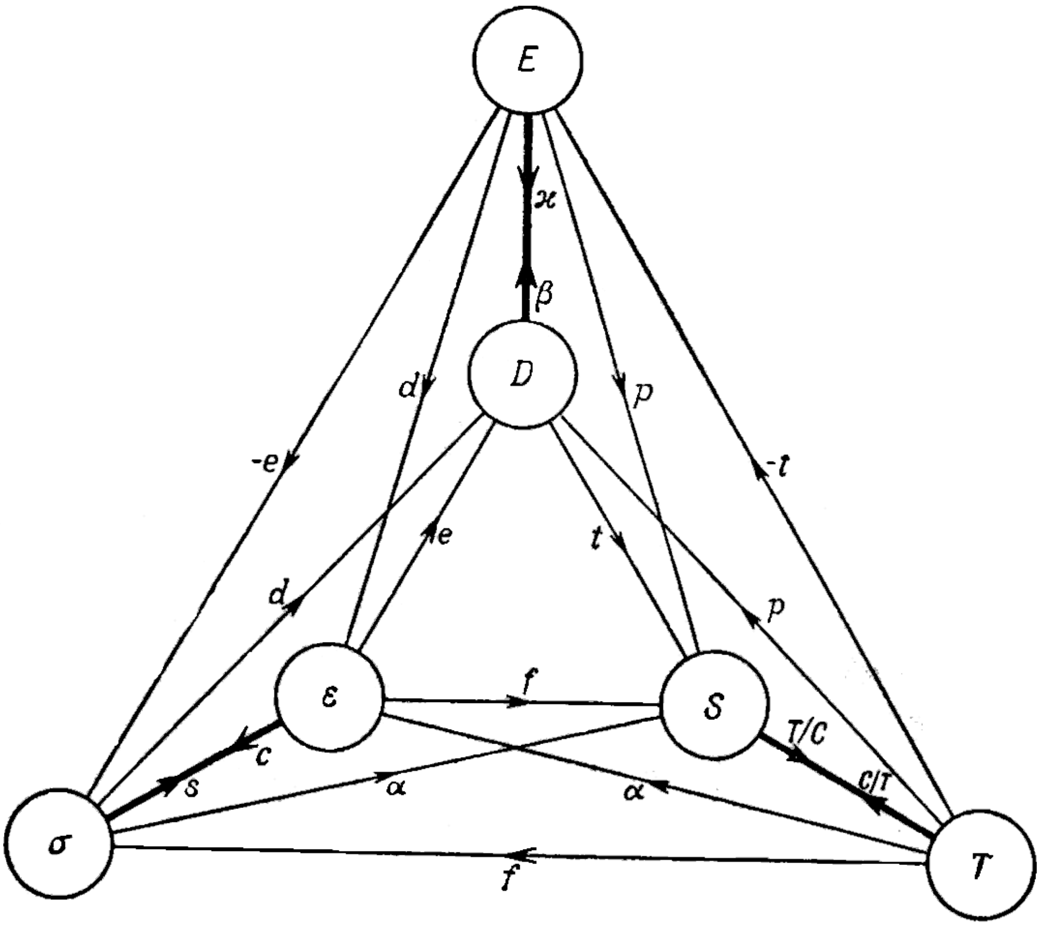
Ғәрезсиз өзгериўшилер ушын тензордың рангасы ушын дөңгелек қаўсырмалар, ал қәсийетлер ушын квадрат қаўсырмалар қолланылған.

3. Кернеўдиң киши өзгериси $d\sigma_{k1}$ төмендеги қатнас бойынша деформацияның өзгериси $d\varepsilon_{ij}$ ты пайда етеди.

$$d\varepsilon_{ij} = s_{ijk1} d\sigma_{k1}.$$

Бул жерде s_{ijk1} серпимли берилгишлик тензоры деп аталады.

Сүўретте келтирилген диаграмма ***жуплық эффектлер*** деп аталыўшы эффектлерди де сәўлелендиреди. Бундай эффектлер сыртқы ҳәм ишки үш мүйешликлерди тутастырыўшы сызықлар арқалы көрсетилген. Мысал ретинде диаграмманың төменги бөлиминдеги өз-ара параллел болған еки сызықты аламыз.



В сүўрет. Кристаллардың жыллылық, электрлик ҳәм механикалық қәсийетлерин тәриплеўши шамалар арасындағы қатнаслар.

Олардың бири жыллылық кеңейиўине (температураның өзгериўи менен жүретуғын деформация), ал екиншиси пьезокалориялық эффектке (механикалық кернеўдиң тәсиринде жыллылықтың бөлинип шығыўы) сәйкес келеди. Диаграмманың төменги бөлиминдеги еки горизонт бағытындағы сызықлар деформация салдарынан бөлинип шығатуғын жыллылықты ҳәм кристаллдың температурасы өзгергенде пайда болатуғын жыллылық кернеўин (термокернеўди) береди. Бундай жуплық эффектлер скаляр менен екинши рангалы тензорлар арасындағы қатнасларды аңлатады ҳәм сонлықтан олардың өзлери екинши рангалы тензорлар болып табылады. Мысалы жыллылық кеңейиўи ушын

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

аңлатпасын жаза аламыз.

Диаграмманың шеп тәрепи кристаллардың пьезоэлектрлик қәсийетлери менен байланыслы болған жуплық эффектлерди сәўлелендиреди. Туўры пьезоэлектрлик эффект дифференциал формада

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

теңлемеси менен тәрипленеди.

$$D_i = \chi_0 E_i + P_i$$

болғанлықтан

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

Сонлықтан, егер кристалда электр майданы турақлы етип услап турылатуғын болса төмендегидей формуланы жаза аламыз:

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

Солай етип туўры ҳәм кери пьезоэффектлер диаграмманың шеп тәрепиндеги диагоналлар менен тәрипленеди.

Жоқарыда келтирилгендей жоллар менен диаграмманың басқа тәреплеринде сәўлеленген байланысларды аңсат таба аламыз. В сүўретте болса физикалық шамалар қабыл етилген белгилеўлерде берилген.

Солай етип кристаллардың жыллылық, электрлик ҳәм механикалық қәсийетлериниң барлығын да биргеликте қараўымызға болады екен. Әлбетте сол қәсийетлер арасындағы байланысларды түсиниў ушын сәйкес процесслердиң термодинамикасын қарап шығыў керек. Бундай мәселелер ҳаққында лекциялар текстлеринде айқын процесслер қаралғанда толық айтылады.

Кристаллографиядан тийкарғы мағлыўматлар

Кристаллардың структурасы ҳәм кеңислик пәнжереси

Кристаллофизика ишки симметриясына ҳәм дискрет атомлық қурылысына байланыслы болған кристаллардың физикалық қубылыслардың нызамларын үйренеди. Ал кристаллардың тийкарғы өзгешелиги олардың симметрияға ийе болыўы болып табылады.

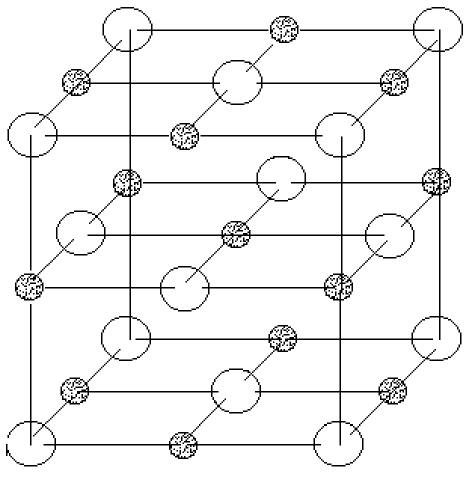
Атомлар арасындағы кеңисликтеги өз-ара қатнаслар ҳәм олар арасындағы өз-ара тәсир етисиў күшлери кристаллардың ишки қурылысының симметриясын, нызамлылықларын ҳәм дурыслығын тәриплейди. Кристалларды қурайтуғын бөлекшелер, яғный атомлар, ионлар, молекулалар, олардың комплекслери қатарлар, тегисликлер, пәнжере бойынша дурыс ҳәм симметриялы түрде жайласады. Ишки қурылысының симметриялы болғанлығы себепли кристаллардың физикалық қәсийетлери де, олардың сыртқы формалары да симметриялы болып келеди.

Кристалдың қәлиплескен структурасының симметриясы менен нызамлылығы көплеген күшлер менен процесслердиң динамикалық тең салмақлылығының нәтийжеси болып табылады. Сыртқы тәсирлер (мысалы электр майданы, механикалық қысыў ямаса кристалға басқа түрли атомларды киргизиў) динамикалық тең салмақлықтың бузылыўына алып келеди ҳәм соған сәйкес кристалдың физикалық қәсийетлерин өзгертеди. Бул техникада кристаллардың физикалық қәсийетлерин өзгертиўде кең түрде қолланылады.

Кристаллардың бир теклилиги, дискретлилик ҳәм анизотропиясы олардың қурылысының нызамлылығы менен симметриясының салдары болып табылады.

Кристаллар ишиндеги ҳәр бир ноқат улыўма жағдайларда ҳәр қыйлы аўҳалға ийе: бир ноқатта бир сорттағы бөлекшелер (мысалы NaC1 кристаллындағы Na ионының орайы), ал басқа ноқатта басқа сорттағы бөлекшелер (мысалы C1 ядросы) жайласады. Ал үшинши ноқатта болса ядролардың пүткиллей болмаўы мүмкин, бирақ бул ноқат электр потенциалының белгили бир мәниси менен, төртинши ноқат басқа бир мәниси менен тәрипленеди (1-сүўрет).

Бирақ тутасы менен алғанда кристал бир текли орталық болып табылады: оның қәлеген бир бөлими басқа бир бөлиминен артық та, кем де емес. Кристалдың бир теклилиги *бир теклилик радиусы* R диң болыўына байланыслы. Радиусы усындай болған шарды кристалдың қайсы бөлимине жайғастырсақ та, қәлеген ноқат пенен қатар усы ноқат пенен бирдей болған ноқат жайғасады (бул ноқат берилген ноқатқа карата гомологиялық ноқат деп аталады). Демек бир теклилик шарында кеминде еки Na ҳәм еки C1 ядросы жайғасады. Бир теклилик радиусы әдетте бир неше ангстремлерди қурайды. Соның менен бирге кристал дискрет - кристалдағы қәлеген ноқатты қәлеген сандағы киши радиусқа ийе бир теклилилик шары менен қоршаў мүмкин. Бундай жағдайда бул шарлардың ишинде биринши шардың ишине қарата гомологиялық бир де ноқат болмай шығады.



1-сүўрет. Тас дузының (ас дузының ямаса хлорлы натрийдың) қурылысы.

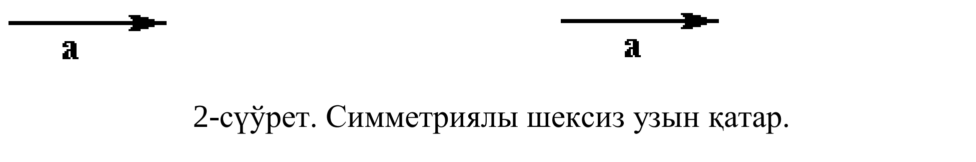
Бул жерде кристаллық затлардың структурасын тәриплеўде еки түрдеги көз-қарастың орын алатуғынлығын кеўил бөлемиз: кристалларды тутас (үзликсиз) деп те, дискрет (үзликли) деп те қараймыз. Ишки қурылыстың дискретлилиги кристал ишиндеги барлық ноқатлардың бирдей физикалық қәсийетке ийе болмайтуғынлығын көрсетеди. Бирақ кристаллардың көплеген қәсийетлерин тәриплегенде айырым атомлар менен молекулалардың көлемлерине салыстырғанда үлкен, бирақ кристалдың өзиниң көлемине салыстырғанда киши болған көлемлерди қараў жеткиликли. Усындый жоллар менен кристалларды тутас ҳәм бир текли орталық деп қарай аламыз.

Анизотропия деп кристаллардың ҳәр қыйлы бағытларда қәсийетлериниң ҳәр қыйлы екенлигин айтамыз. Кристалдың қурылысында ҳәр қыйлы бағытларда бөлекшелер арасындағы байланыс ҳәм қашықлықлар ҳәр қыйлы болғанлықтан кристалдың дерлик барлық ҳәр қыйлы бағытларындағы физикалық қәсийетлер ҳәр қыйлы болады (бирақ бир бирине симметриялық бағытларда бирдей). Кристаллардың өсиў тезлиги де анизотропиялық болады. Сонлықтан кристаллар симметриялық дурыс көпмүйешликлер формасында өседи.

Берилген заттың барлық кристалларында бирдей шараятларда сәйкес тәреплери арасындағы мүйешлердиң мәнислери бирдей болады. Бул ***кристаллардың мүйешлериниң турақлылығы нызамы*** деп аталады (Николай Стенон тәрепинен 1669-жылы ашылған). Әлбетте, кристаллардың мүйешлериниң турақлылығы нызамы ҳаққында айтылғанда заттың берилген модификациясын нәзерде тутыў керек.

Кристаллық көп мүйешликлердиң қаптал бетлери материаллық бөлекшелер тәрепинен дүзилген тегисликлерге, қабырғалары - материаллық бөлекшелер қатарларына сәйкес келеди. Бөлекшелердиң массалары орайлары қатарлар, тегис торлар, кристаллық пәнжерелерди пайда етеди.

Идеал кристаллар қурылысында барлық гомологиялық (бирдей болып жайласқан) ноқатлар шексиз узын дурыс симметриялық қатарлар түринде жайғасады (2-сүўрет). Кристаллық кеңислик ноқатлары анизотроп. Сонлықтан бул ноқатлар әдетте симметриялы емес фигуралар жәрдесинде сәўлелендириледи. Шексиз узын қатардағы гомологиялық ноқатлар арасындағы ең киши қашықлық ***ең қысқа*** ямаса тийкарғы ***трансляция*** деп аталады. Бул қашықлықты а ҳәрипи менен белгилеймиз ҳәм ***трансляция дәўири***, ***қатардың бирдейлик дәўири***, ***қатар параметри*** деп те атаймыз. Айтылып атырған қатарлар, торлар, кристаллық пәнжерелер ойымызда шексиз көп түрли болып алына бериўи мүмкин.



2-сүўрет. Симметриялы шексиз узын қатар.

Кеңисликте бағытын өзгертпей қайталанатуғын симметриялық түрлендириў (яғный параллел көшириў) ***трансляция жәрдеминде түрлендириў*** ямаса тек ***трансляция*** деп аталады. Трансляция жәрдеминде базы бир ноқатты қайталаў арқалы бир биринен a, 2a, 3a, ..., na, ... (n пүтин сан) қашықлықларында турған гомологиялық ноқатлардың шексиз узын дәўирли қатарын аламыз. Бул қатардың тәриплемеси болып **a** трансляциясы хызмет етеди ҳәм оның жәрдеминдеги симметриялық түрлендириў жолы менен алынған бир бирине байланысқан гомологиялық ноқатлар ***қатардың түйинлери*** деп аталады. Қатар түйининиң, тап сол сыяқлы тегис тордың ямаса кеңисликтеги пәнжерениң түйининиң материаллық ноқат пенен байланыслы болыўы (яғный усы түйинде материаллық ноқаттың жайласыўы) шәрт емес.

Симметриялық қатардың ноқатларын дәслепки трансляцияға параллел болмаған басқа $\mathbf{a}_2$ трансляциясының жәрдеминде қайталаў арқалы ***тегис тор*** түриндеги гомологиялық ноқатлар системасын аламыз (3-сүўрет). Еки өлшемли тегис тор $\mathbf{a}_1$ ҳәм $\mathbf{a}_2$ трансляциялары жәрдеминде толығы менен анықланады. Төбелери түйинлер болған параллелограмлар тегис тордың ***қутышалары*** деп аталады. Қапталлары элементар трансляциялар болған қутышалар тегис тордың ***элементар қутышасы*** деп аталады, ал ишинде түйин болмаған элементар қутыша ***әпиўайы*** элементар қутыша деп аталады. Әпиўайы элементар қутышаның майданы бир түйин ийелейтуғын майданға тең болады.

Түйинди бир бирине салыстырғанда компланар емес үш трансляция жәрдеминде шексиз көп қайталаў арқалы гомологиялық ноқатлардың үш өлшемли системасы болған ***кеңисликтеги пәнжере*** пайда етиледи. Бул жағдайда да тийкарғы үш $\mathbf{a}_1$, $\mathbf{a}_2$, $\mathbf{a}_3$ трансляцияларын көп санлы усыллар менен сайлап алыў мүмкин. Бирақ тегис тордағы сыяқлы бул жағдайда да пәнжерениң симметриясын анық сәўлелендире алатуғындай ең киши трансляциялар сайлап алынады.

Қабырғалары үш элементар трансляция болатуғын параллелопипед ***элементар қутыша*** ямаса ***элементар параллелопипед***, ал ишинде түйин болмайтуғын элементар параллелопипед әпиўайы элементар қутыша ямаса әпиўайы параллелопипед деп аталады.

Элементар трансляцияларды (элементар қутыша қабырғаларын) a, b ҳәм c ямаса a_1, a_2, a_3 ҳәриплери менен, ал олар арасындағы мүйешлерди α, β, γ грек ҳәриплери менен белгилеў қабыл етилген (4-сүўрет).

Элементар қутышаның трансляциялық топары (топарлар ҳаққында кейинирек кең түрде айтылады) пәнжерени толығы менен тәриплейтуғын ҳәм қутышаның үш қабырғасына сәйкес келетуғын $\mathbf{a}_1$, $\mathbf{a}_2$, $\mathbf{a}_3$ үш элементар трансляцияларын өз ишине алады.

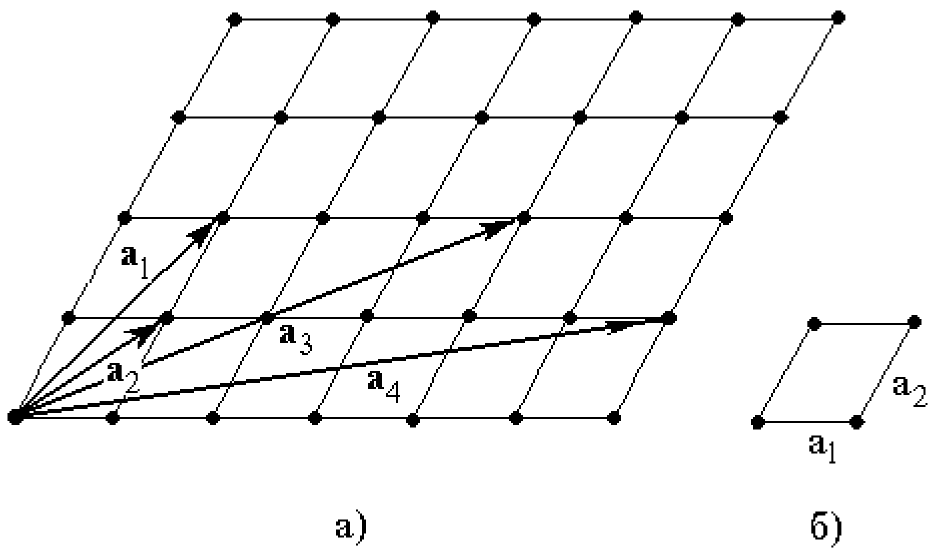
Егер $\mathbf{a}_1$, $\mathbf{a}_2$, $\mathbf{a}_3$ тийкарғы үш трансляциялары белгили болса пәнжередеги қәлеген түйинниң жайласқан орны

$$\mathbf{R} = m\mathbf{a}_1 + n\mathbf{a}_2 + p\mathbf{a}_3$$

векторы менен анықланады. m, n, p лар пүтин санлар, $\mathbf{a}_1$, $\mathbf{a}_2$, $\mathbf{a}_3$ лер пәнжерениң ***векторлық базисин*** қурайды.

Қос квадрат қаўсырмаға алынған [[m,n,p]] санлары ***түйинниң символы*** деп аталады.

Кристаллографиялық бағыт деп кеминде еки түйин арқалы өтетуғын туўры сызықтың бағытын айтамыз. Әдетте бул туўры бойында пәнжерениң шексиз көп түйинлери жатыўы керек. Усы түйинлердиң бирин [[000]] деп белгилеп, координата басы ретинде қабыл етиў керек. Кристаллографиялық бағыт координата басына жақын жайласқан түйин тәрепинен толығы менен анықланады (яғный кристаллографиялық бағыттың индекси координата басына ең жақын жайласқан түйинниң координатасы менен анықланады).



3-сүўрет. Симметриялы шексиз тегис тор фрагменти:
а) элементар трансляциялар болған a_1, a_2, a_3 ҳәм a_4 лерди сайлап алыўдың ҳәр қыйлы усыллары; б) тордың симметриясына сәйкес келетуғын ең киши трансляцияларда дүзилген элементар қутыша.

Кристаллографиялық бағыттың символы [mnp] түринде бир квадрат қаўсырмаға алынып жазамыз. m, n, p санлары берилген кристаллографиялық бағыттың ҳәм усы бағытқа параллел болған барлық бағытлардың ***Миллер индекслери*** деп аталады. Квадрат қаўсырмада жазылған үш сан ***қатар ушын Миллер индекслери*** деп аталады.

Кристаллографиялық координаталар көшерлери олар арасындағы мүйешлердиң мәнислерине ғәрезсиз X [100], У [010], Z [001] Миллер индекслерине ийе болады.

a, b, c, α, β, γ шамалары (кристал параметрлери ямаса кристал метрикасы деп те аталады) ҳәр бир кристаллық заттың материаллық константалары болып табылады. Улыўма жағдайда a ≠ b ≠ c, $\alpha \neq \beta \neq \gamma$, яғный тийкарғы трансляциялар бир бирине тең емес ҳәм ортогонал емес (4-сүўрет).

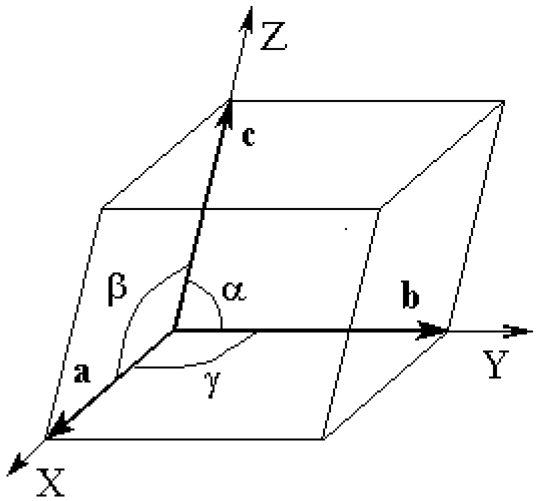
Кеңислик пәнжерелери кристаллографиялық координаталар системаларының бирден бир тийкары болып табылады. Координата басы ретинде қәлеген бир түйин қабыл етиледи. Ал усы түйинде кесилисетуғын элементар трансляциялар координата басынан шығатуғын $\mathbf{a}_1$, $\mathbf{a}_2$, $\mathbf{a}_3$ векторлары сыпатында қабыл етиледи. Ковариант базислик векторлар деп аталатуғын бул векторлар компланар векторлар болып табылмайды. Себеби бул векторлар компланар болғанда элементар қутышаның көлеми нолге тең болған болар еди. $\mathbf{a}_1$, $\mathbf{a}_2$, $\mathbf{a}_3$ векторлары оң үшлик векторды пайда етеди. Сонлықтан XYZ кристаллографиялық координаталар системасы барқулла туўры сызықлы ҳәм оң.

Кеңислик пәнжереси кристаллық кеңисликтеги гомологиялық ноқатларды анықлайтуғын геометриялық дүзилис, басқа сөз бенен айтқанда кеңислик пәнжереси кристалдың қурылысындағы бөлекшелердиң тарқалыўының үш өлшемли дәўирлилигиниң схемасы болып табылады. Пәнжере түйинниң айқын атом менен сәйкес келиўи ямаса келмеўинен ғәрезсиз кристал қурылысының симметриясын сәўлелендиреди.

Кристалдың қурылысы ҳаққында айтылғанда кеңисликтеги материаллық бөлекшелердиң айқын жайласыўы нәзерде тутылады.

Биз жоқарыда кристаллық пәнжере түйинлериниң, кристаллографиялық бағытлардың символлары менен танысқан едик. Енди тегисликлерге (қаптал бетлерге) символлар қойыў (тегисликлерди ямаса капталларды индекслеў) мәселеси менен шуғылланамыз.

Кеңисликтеги пәнжередеги тегис торлар ҳәм усы торларға параллел болған кристаллардың қаптал бетлери берилген координаталар системасына салыстырғанда белигили бир қыялықта жайласады. Кристалдың қәлеген қаптал бети қандай да бир тегис торға параллел (яғный шексиз көп санлы тегис торларға параллел).



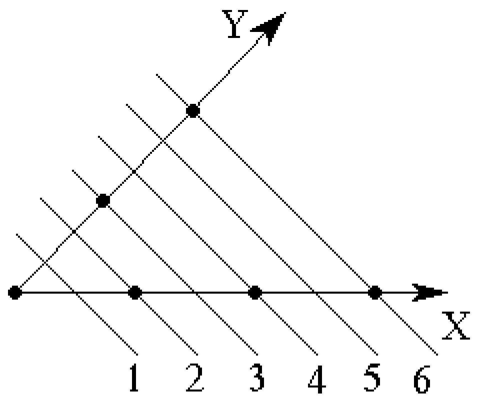
4-сүўрет. Элементар параллелопипед (стандарт белгилеўлер қолланылған)

Мейли пәнжерениң базы бир тегислиги барлық координата көшерлерин ma, nb, pc кесиндилеринде кесип өтетуғын болсын. m:n:p қатнасы тегисликтиң координаталар көшерине қыялығын тәриплейди. Усы тегисликке параллел болған барлық тегисликлер семейтвосының да қыялығы усы қатнас пенен анықланады.

5-сүўретте көрсетилген тегисликлер семейтвосы ушын төмендеги кестени аламыз:

Тегисликтиң	Көшерлер бойынша кесиндилер			m:n:p
қатар саны	X	6	Z	
1	a/2	b/3	∞	1/2:1/3:∞ = 3:2:∞
2	a	2b/3	∞	1:2/3:∞ = 3:2:∞
3	3a/2	b	∞	3/2:1:∞ = 3:2:∞
4	2a	4b/3	∞	2:4/3:∞ = 3:2:∞

Барлық өз ара параллел тегисликлер ушын рационал санлардың m:n:p қатнасын пүтин әпиўайы p:1:4 санларының қатнасындай етип көрсетиў мүмкин екен. Бул санларды ***Вейсс параметрлери*** деп атаймыз. Келтирилген мысалда 1/2:1/3:∞ = 1:2/3:∞ = 3/2:1:∞ = 2:4/3:∞ = 3:2:∞.



5-сүўрет. Параллел болған тегисликлер семейтвосы ушын символларды анықлаў ушын сүўрет.

Кристаллографияда тегисликлерди (ямаса усы тегисликке түсирилген нормалларды) параметрлер менен емес, ал ***Миллер индекслери*** менен бериў қабыл етилген. Миллер индекслери пүтин санларға келтирилген Вейсс параметрлериниң кери шамалары болып табылады. Егер тегисликлердиң параметрлери p, 1, 4 болса Миллер индекслери былайынша анықланады:

$$\frac{1}{p}:\frac{1}{q}:\frac{1}{r} = \text{h} : \text{k} : 1.$$

Келтирилген мысалда h:k:1 = 2:3:0.

h,k,1 санлары тегисликтиң ***индекслери*** деп аталады. Әпиўайы қаўсырмаға алып жазылған (hk1) санларын тегисликтиң символы деп атаймыз.

Кристаллардың әпиўайы шекли симметрия элементлери. Кристаллық кеңисликтиң (ямаса фигураның) ***геометриялық симметриясы*** деп базы бир симметриялық түрлендириўлердеги өзиниң дәслепки аўҳалындай аўҳал менен үйлесиў қәсийетине айтамыз. ***Симметриялық түрлендириў*** ямаса ***симметриялық операция*** кеңисликти (ямаса фигураны) өзи менен үйлесиўине алып келетуғын шашыратыў, бурыў (айландырыў), көшириўден турады.

Кристаллардың физикалық қәсийетлериниң симметриясы менен анизотропиясы кристаллардың сыртқы көп жақлы формаларында анық көринеди. Кристалдың көп жақлы формасы тек ғана өсиў тезлигиниң анизотропясының нәтийжеси болып табылмай, сол кристалдың өсиўинде туўдырылған сыртқы шараятлардың да нәтийжеси болып табылады (температура градиенти, қоңысылас кристаллар ямаса ыдыс дийўалларын менен тийисиў, салмақ күшиниң тәсири, орталықтың бир тексизлигиниң ақыбети ҳ.т.б.). Биз кристалдың өсиўиниң реал шараятларына кеўил бөлмей ҳәзирше тек ғана идеал кристаллық көп жақлылардың симметриясын қараймыз.

Симметриялы фигура ямаса ***симметриялы көп жақлы*** деп симметриялық түрлендириўдиң нәтийжесинде өзиниң дәслепки аўҳалындай аўҳал менен үйлесетуғын фигураларды айтамыз.

Симметрия элементлери деп фигураның симметриясы табылатуғын жәрдемши образларды (ноқатлар, туўры сызықлыр, тегисликлер) айтамыз. Барлық симметриялық түрлениўлерде фигураның барлық ноқатлары арасындағы қашықлықлар өзгермей қалады (яғный қысылыў, буралыў, иймейиў ҳәм сол сыяқлы өзгерислер болмайды).

Симметриялық түрлениўлерди (түрлендириўлерди) еки типке айырыўға болады: 1) фигураның ең кеминде бир ноқаты өз орнында қозғалмай қалатуғын ***шекли*** ямаса ***ноқатлық*** ҳәм 2) фигураның ҳеш бир ноқаты өз орнында қалмайтуғын ***шексиз*** ямаса ***кеңисликтеги*** симметриялық түрлендириў. Шекли симметриялық түрлениўлер (ямаса түрлендириўлер) идеал кристаллық көп жақлылар симметриясына, ал шексиз симметриялық түрлениўлер структура (қурылыс) симметриясына сәйкес келеди.

Биз симметрия элементлерин тәриплегенимизде Герман ҳәм Могенлер тәрепинен исленип шығылған халықаралық символлардан пайдаланамыз.

Әпиўайы шекли симметриялық операциялар. Шашыраў ҳәм айланыў (бураў) әпиўайы симметрия элементлери болып табылады. Олар төмендегидей симметрия элементлери менен тәрипленеди:

	Халықаралық символ
Симметрия тегислиги	m
Симметрия көшери	n (n = 1, 2, 3, 4, 6)
Симметрия орайы	$\bar{1}$

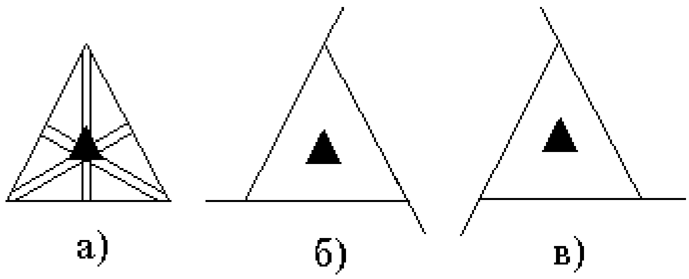
Бул кестедеги n көшердиң тәртибин аңлатады (мәниси кейинирек анықланады).

Симметрия тегислиги (m) деп фигураны бир бирине салыстырғанда еки айналық бөлимге бөлетуғын тегисликке айтамыз.

Мысалы тең қапталлы үш мүйешликте усы үш мүйешлик тегислигине перпендикуляр болған үш симметрия тегислиги бар (6-сүўрет).

Кубта 9 симметрия тегислигин көриўге болады. Олардың үшеўи кубтың қабырғаларына перпендикуляр, ал қалған алтаўы диагоналлық тегисликлер бойынша жайласады.

Симметрия көшери (n) деп дөгерегинде бурғанда фигура өз өзи менен бетлесетуғын туўры сызықты айтамыз. Бурыўдың элементар мүйеши (яғный фигураны өзиниң дәслепкидей аўҳалы менен бетлестиретуғын ең киши мүйештиң мәниси) 2π мүйеши ишинде пүтин сан еселенген муғдарда болады. ***Көшердиң тәртиби*** деп аталыўшы n саны фигураны толық бир рет бурғанда (яғный 360^0 қа бурғанымызда) өз өзи менен неше мәртебе бетлесетуғынлығын анықлайды.



6-сүўрет. Үш мүйешликтиң симметриясы: 3 көшери нейтраль ҳәм үш симметрия тегислиги (а), 3 көшери оң, симметрия тегислиги жоқ (б) ҳәм 3 көшери терис, симметрия тегислиги жоқ.

6-сүўретте үш тең қапталлы үш мүйешлик көрсетилген. Биринши үш мүйешликте үшинши тәртипли симметрия көшеринен басқа сүўрет тегислигине перпендикуляр болған үш симметрия тегислиги де, ал б) ҳәм в) сүўретлерде көрсетилген үш мүйешликлерде тек үшинши тәртипли симметрия көшери бар. Көшерлердиң биреўи оң, екиншиси терис. Усы геометриялық фигураларды материаллық фигура сыпатында қарап, оларды оң ҳәм терис үш мүйешликлер сыпатында қарай аламыз.

Биринши тәртипли симметрия көшери (1 көшери) қәлеген фигурада (геометриялық ҳәм материаллық) болады. Қәлеген бағыт әтирапында 360^0 қа бурылған қәлеген дене өз өзи менен бетлеседи.

Симметрия көшерлериниң жазылыў тәртибине кеўил бөлиў керек. Әдетте 1 ямаса 2 санлары 1- ҳәм 2- тәртипли симметрия көшерлерин аңлатады. Ал “-” (“инши”) белгиси қойылыўы шәрт жағдайларда бул белги де қоланылады. Қалған барлық симметрия көшерлери ушын да усы қағыйда өз күшинде қалады.

Шар ең жоқары симметрияға ийе фигура болып табылады. Оның диаметрлериниң шексиз көплиги ∞ тәртипли симметрия көшери болып табылады. Өз гезегинде ҳәр бир диаметр арқалы шексиз көп санлы симметрия тегисликлери өтеди.

Конуста бир дана ∞ тәртипли симметрия көшери болады. Усы көшер дөгерегинде конусты қәлеген мүйешке бурсақ та конустың аўҳалының өзгермейтуғынлығын көремиз. Соның менен бирге бул көшер арқалы шексиз көп санлы симметрия тегисликлери де өтеди.

Тәбийий объектлерде 1 ден ∞ тәртипли симметрия көшерине шекем қәлеген тәртиптеги симметрия көшерлерин табыўға болады. Ал кристаллардың геометриялық формаларында тек 1, 2, 3, 4 ҳәм 6 - тәртипли симметрия көшерлери болады. Әдетте кристалларда 5- ҳәм 6-тәртипли симметрия көшеринен жоқары тәртиптеги симметрия көшерлери болмайды.

Демек симметрия көшериниң тәртиби деп

$$n = 360^0/\varphi$$

санына айтады екенбиз. Бул жерде φ арқалы фигураны өз өзи менен бетлестиретуғын ең киши мүйештиң шамасы.

Соңғы ўақытлары айырым биологиялық тири организмлерде 5-тәртипли симметрия көшерлери табылды. Шамасы, бундай объектлерде кристаллық затлардағыдай симметрия көшерлериниң болмаўы тиришилик ушын гүрестиң нәтийжеси болса керек (егер кристаллардағыдай симметрия көшерлери болғанда тири организмлерде кристалланыў, демек өлиў қәўипи болған болар еди).

Симметрия орайы ($\bar{1}$, ***инверсия орайы*** ямаса ***кери теңлик орайы***) деп фигураның ишиндеги айрықша ноқатты түсинемиз. Усы ноқат арқалы өткерилген туўры ноқаттың еки тәрепинде бирдей қашықлықларда бирдей ноқатларды ушыратады. Демек симметрия орайындағы симметриялық түрлендириў дегенимиз ноқаттағы шашыратыў болып табылады екен. Симметрия орайы ушын мысаллар 7-сүўретте келтирилген.

Симметрия орайы бар кристалларда поляр туўрылардың болыўы мүмкин емес. Ҳәр қыйлы бағытлар бойынша қәсийетлер ҳәр қыйлы болатуғын туўрылар ***поляр туўрылар*** деп аталады.

m, 2, 3, 4, 6, $\bar{1}$ лердиң жыйнағы менен кристаллардағы әпиўайы симметрия элементлери питеди.

Фигураның ҳәр бир симметрия элементи жәрдеминде сәйкес симметрия операциялары оранланады: 3 көшери фигураны 120^0 ҳәм 240^0 қа; 4 көшери фигураны 90^0, 180^0, 270^0; ал 6 көшери 60^0, 120^0, 180^0, 240^0, 300^0 мүйешлерге бурады. Симметрия көшери тәрепинен орынланатуғын барлық бурыўларды бир элементар бурыўды қайталаўдың нәтийжеси деп қараўға болады: 2 көшери ушын 180^0, 3 көшери ушын 120^0, 4 ушын 90^0, 6 ушын 60^0. Туўры цифрлар менен белгиленген симметрия көшерлеринен элементар бурыўларды айырыў ушын курсив цифрлардан пайдаланамыз ҳәм бул цифрларға қайсы көшер дөгерегинде бурылғанлығын айқынластырыўшы индекс қойылады. Мысалы 2_x ҳәм 2_y лер (ямаса $2_{[100]}$ ҳәм $2_{[010]}$) сәйкес x ҳәм y көшерлери дөгерегиндеги 120^0 қа бурыўларды билдиреди. Бир неше элементар бурыўларды қайталаў элементар бурыўдың сәйкес дәрежеси деп қаралады. Мысалы, егер 60^0 қа бурыў 6_z деп белгиленген болса, онда усы көшер дөгерегиндеги 120^0, 180^0, 240^0, 300^0 қа бурыўлар 6_z^2, 6_z^3, 6_z^4, 6_z^5 деп белгиленеди. Демек

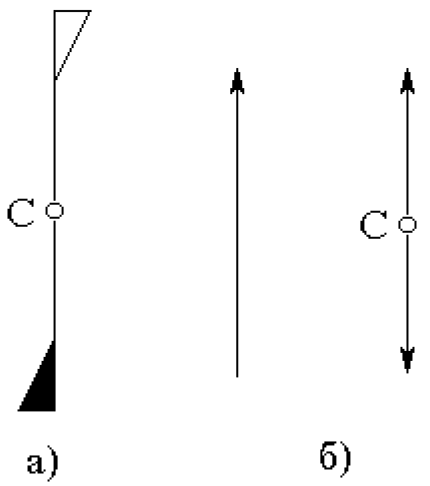
$$6_z^2 = 3_z,\ 6_z^3 = 2_z,\ 4_z^2 = 2_z$$

теңликлериниң дурыс екенлиги анық көринип тур.

m тегислигиндеги шашыраў операциясы индекс қойылған симметрия тегислигиниң символы менен белгиленеди. Бағыт келтирилген индекс симметрия тегислигиниң сол бағытқа перпендикуляр екенлигин аңлатады. Мысалы m_x ямаса $m_{(100)}$ белгилеўлери m ниң x қа ямаса перпендикуляр екенлигин ямаса (100) тегислигине параллел екенлигин билдиреди. Инверсия операциясы, яғный симметрия орайы $\bar{1}$ деги шашыраў сол $\bar{1}$ символы менен белгиленеди.

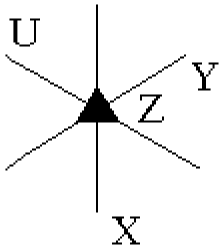
Жоқарыда айтылғанлар менен бирге симметрия операциялары қатарына **бирлик операция** (ямаса ***теңлестириў операциясы***) да киреди. Бул операцияны 1 арқалы белгилеймиз (яғный 1-тәртипли симметрия көшериниң белгиси).

Егер фигура бир неше симметрия элементлерине ийе болатуғын болса, онда олар биргеликте пайда ететуғын симметрия операциялары қурамаласады.



7-сүўрет. Симметрия орай жәрдеминдеги симметриялық түрлендириўлер (а), симметрия орайы жоқ поляр стрелка ҳәм орайға қарата симметриялы поляр емес стрелка (б)

Мысаллар келтиремиз. Мейли фигура 3 көшерин ҳәм оған перпендикуляр болған 2 ге ийе болсын (бул кварц кристалының симметриясы). 3 көшери *3* ҳәм 3^2 бурыўларын пайда етеди, ал 2 болса 2_x ти туўғызады (пайда етеди). Ҳәр бир симметрия операциясы фигураны өзи менен бетлестиретуғын болғанлықтан, бир биринен кейин орынланатуғын симметрия операциялары бул ***операциялардың көбеймеси*** деп аталады. Нәтийже де фигура өзиниң дәслепки аўҳалы менен бетлеседи ҳәм сонлықтан операциялардың көбеймеси де симметрия операциясы болып табылады. Бир биринен кейин исленген еки симметрия операциясының нәтийжесин көрейик: дәслеп 3_z, кейин 2_x операцияларын әмелге асырамыз. Бул еки операция 2_7 операциясына тең болып шығады (8-сүўретте көрсетилген). Демек биз бул жерде кварц қурылысында 3_z ҳәм 2_x симметрия элементеринен басқа 2_7 көшериниң де бар екенлиги көремиз. Тап усындай жоллар менен 2_y тиң бар екенлигине көз жеткериўге болады.



8-сүўрет. Еки симметрия операциясын избе-изликте орынлаўдың нәтийжеси:

$$3_z 2_x = 2_7.$$

Кварцтың қурылысында исләниўи мүмкин болған симметрия операцияларының жуплары төмендеги кестеде берилген:

Көбейтиўши		Оң					
		1	3_z	3_z^2	2_x	2_y	2_6
Терис	1	1	3_z	3_z^2	2_x	2_y	2_6
	3_z	3_z	3_z^2	1	2_y	2_y	2_x
	3_z^2	3_z^2	1	3_z	2_7	2_x	2_y
	2_x	2_x	2_7	2_y	1	3_z^2	3_z
	2_y	2_y	2_x	2_7	3_z	1	3_z^2
	2_7	2_7	2_y	2_x	3_z^2	3_z	1

Жоқарыда келтирилген дара мысалдан төмендегидей теорема келип шығады:

Теорема 1. Егер n-тәртипли көшерге перпендикуляр бағытта 2 көшери өтетуғын болса, онда усы n ге перпендикуляр болған n дана 2 орын алады.

Симметрия операцияларын көбейтиў бойынша және де бир неше теоремаларды келтиремиз:

Теорема 2. Еки симметрия тегислигиниң кесилисиў сызығы усы еки тегислик арасындағы мүйештен еки есе үлкен мүйешке буратуғын симметрия көшери болып табылады.

Теорема 2а (2-теоремаға қарама-қарсы). Симметрия көшери дөгерегиндеги бурыўды симметрия тегисликлериндеги еки шашыраў менен алмастырыў мүмкин.

Теорема 3. Жуп тәртипли симметрия көшери менен усы көшерге перпендикуляр болған симметрия көшериниң кесилисиў ноқаты симметрия орайы болып табылады.

n симметрия көшери менен оған перпендикуляр болған симметрия тегислигиниң қосындысы n/m деп белгиленеди. (усы қарап атырған жағдайымызда 2/m).

Теорема 3а. Егер жуп тәртипли симметрия көшери бойында симметрия орайы жайласқан болса, усы ноқат арқалы көшерге перпендикуляр симметрия тегислиги өтеди.

Теорема 3б. Егер симметрия орайы арқалы симметрия тегислиги өтетуғын болса, усы ноқат арқалы тегисликке перпендикуляр болған симметрия көшери өтеди.

Теорема 4. Егер n-тәртипли симметрия көшери бойынша симметрия тегислиги өтетуғын болса, усындай симметрия тегисликлериниң саны n ге тең болады. Симметрия элементлериниң бундай қосындысы nm түринде белгиленеди.

Симметрия операцияларын бир бирине көбейтиў арқалы бизге жоқарыда белгили болған ҳәм және де бир симметрия операциясын аламыз: элементар буралыў n менен инверсия $\bar{1}$ диң көбеймеси. Көбейтиўдиң қәлеген избе-излигинде ***элементар инверсиялық*** бурыў деп аталатуғын симметрия операциясы болады ҳәм $\bar{n}$ арқалы белгиленеди., яғный $\bar{1} \cdot n = n \cdot \bar{1} = \bar{n}$.

Әтирапында инверсиялық бурыўлар әмелге асырылатуғын көшерлер ***симметрияның инверсиялық көшерлери*** деп аталады. Симметриялық бурыў мүйешлери сыяқлы кристалларда 1-, 2-, 3-, 4- ҳәм 6- тәртипли инверсиялық симметрия көшерлери болады.

Инверсиялық бурыўлар ишинде жоқарыда айтылған еки симметрия операциясы бар: инверситялық 1 көшериниң тәсири инверсия орайының тәсириндей болады, ал 2 көшериниң дөгерегиндеги инверсиялық бурыў симметрия тегислигиниң тәсири менен бирдей, яғный $\bar{2} \equiv m$. Басқа инверсиялық бурыўлар жаңа симметрия операциялары болып табылады (яғный еле таныс емес жаңа симметрия элементлериниң тәсири болып табылады).

Элементар инверсиялық бурыўларды қайталаў төмендегидей нәтийжелерге алып келеди:

$$\bar{3}_z^{\,2} = 3_z\,;\ \ \bar{3}_z^{\,3} = \bar{1}\,;\ \bar{3}_z^{\,4} = 3_z\,;$$

$$\bar{4}_z;\quad \bar{4}_z^{\,2} = 2_z\,;\quad \bar{4}_z^{\,4} = 1.$$

Солай етип ***кристаллық көп жақлылардың симметриясы*** m, 1, 2, 3, 4, 6, $\bar{3}$, $\bar{4}$, $\bar{6}$ симметрия элементлериниң жыйнағы менен толық тәрипленеди.

Кристаллографиялық категориялар, системалар ҳәм сингониялар. Геометриялық симметриясы, өсиў формалары ҳәм физикалық қәсийетлериниң симметриясына байланыслы кристаллар категорияларға, системаларға ҳәм сингонияларға (сингония сөзи уқсас мүйешлер деген мәнини аңартады) бөлинеди.

Категориялар менен таныспастан бурын кристаллардағы айрықша (ямаса бирлик) бағытлар ҳаққындағы түсиник киргиземиз. Кристалда қайталанбайтуғын бағыт ***айрықша*** ямаса ***бирлик*** бағыт деп аталады. Мысалы ултаны квадрат болған пирамидадағы 4 көшери бағыты, алты мүйешли қәлемдеги 6 көшериниң бағытын бирлик бағыт (ямаса айрықша бағыт) болып табылады.

Кубта 4 көшери бирден бир көшер емес. Тап сол сыяқлы кубта қайталанбайтуғын симметрия көшерин таба алмаймыз. Сонлықтан кубта бирлик бағыт болмайды. Кристалларда симметрия элементелери жәрдеминде қайталанатуғын бағытлар ***симметриясы бойынша эквивалент бағытлар*** деп аталады.

Бирлик бағытлары ҳәм симметрия көшерлерине байланысқан кристаллар үш категорияға бөлинеди:

жоқары категория - бирлик бағыт жоқ, тәртиби 2 ден жоқары болған бир неше симметрия көшерлери бар;

орта категория - жалғыз 3, 4 ямаса 6 көшери (яғный 2 ден жоқары көшер) бағытында бир бирлик бағыты бар кристаллар (мысал ретинде үш, төрт, алты мүйешли призманы көрсетиўге болады);

төменги категория - бирнеше бирлик бағытлар, тәртиби 2 ден жоқары бир де симметрия көшери жоқ (мысалы үш 2 көшерге ийе ромба тәризли призма).

Жоқары категорияға жатыўшы кристалда 2 ден тәртиби жоқары болған бир неше симметрия көшерлери бар, соның менен бирге шәртли түрде 3 дана 3, олардан басқа 3 дана 4 ямаса $\bar{4}$ болыўы керек. Бул ең жоқары симметрияға ийе кублық кристаллар болып табылады. Бундай кристалларда бирлик бағыт жоқ. Жоқары категорияға кириўши кристалларда алынған қәлеген бағыт ушын симметриялық жақтан эквивалент басқа да бағытты табыўға болады. Симметриялық жақтан эквивалент бағытларда физикалық қәсийетлер бирдей. Сонлықтан бундай кристалларда физикалық қәсийетлер анизотропиясы ҳәлсиз бақланады. Ал екинши рангалы тензорлар менен тәрипленетуғын физикалық қәсийетлер болса (электр өткизгишлик, жыллылық өткизгишлик, диэлектриклик сиңиргишлик ҳ.т.б.) пүткиллей изотроп.

Орта категрияға бир бирлик бағыты, атап айтқанда 3, 4 ямаса 6 болған жалғыз симметрия көшери (әпиўайы ямаса инверсиялық) бар кристаллар киреди. Бундай кристаллардың физикалық қәсийетлериниң анизотропиясы жоқары категория кристалларына салыстырғанда кескин түрде көринеди.

Төменги категорияға тәртиби 2 ден жоқары болған көшерлери болмайтуғын, бирнеше бирлик бағытлары бар кристаллар киреди. Бул симметриясы ең төмен, ал физикалық қәсийетлериниң анизотропиясы ең жақсы бақланатуғын кристаллар болып табылады.

Төменги категория үш системаға бөлинеди:

триклин (үш рет қыяланған) система - бундай кристалларда симметрия көшерлери де, тегисликлери де болмайды;

моноклин (бир бағытта қыяланған) система - тек бир дана екинши тәртипли симметрия көшери ямаса бир дана симметрия тегислиги ямаса бир дана 2 ҳәм бир m болады;

ромбалық система - кристалда бирден аслам 2 ямаса бирден аслам m болады.

Орта категория да үш системаға бөлинеди:

тригонал - бир тийкарғы симметрия көшери 3 ямаса $\bar{3}$ болады;

тетрагонал - бир тийкарғы симметрия көшери 4 ямаса $\bar{4}$ болады;

гексагонал - бир тийкарғы симметрия көшери 6 ямаса $\bar{6}$ болады.

Жоқары категория кублық болған тек бир системадан турады. Бул система төрт дана үшинши тәртипли симметрия көшериниң болыўы менен тәрипленеди.

Жети системаға бөлиўдиң орнына категорияларды алты сингонияға бөлиўге болады.

Сингония түсиниги гексагонал ҳәм тригонал системалардан басқа системалардың барлығында да система түсиниги менен бирдей. Сингонияға бөлиўди координаталардың кристаллографиялық системасының сайлап алыныўы анықлайды.

Кристаллографиялық координата көшерлери барқулла симметрия көшерлери бағытында ямаса симметрия тегисликлерине нормал бағытларда сайлап алынады. Егер сәйкес симметрия элементлери болмаса (мысалы моноклин ямаса триклин кристалларда), онда кристаллографиялық координата көшерлери кристаллографиялық көп жақлылықлар қабырғалары бағытында ямаса кристаллық пәнжере қатарлары бағытларында сайлап алынады.

Кристалларды категорияларға, сингонияларға ҳәм системаларға бөлиў 1-кестеде келтирилген.

1-кесте

Кристалларды категорияларға, сингонияларға ҳәм системаларға бөлиў

Категория	Сингония	Система	Координаталар көшерлери
Төменги	Триклин	Триклин	$a \neq b \neq c$, $\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^0$
	Моноклин	Моноклин	$a \neq b \neq c$, $\alpha = \gamma = 90^0 \neq \beta$.
	Ромбалық	Ромбалық	$a \neq b \neq c$, $\alpha = \beta = \gamma = 90^0$.
Орта	Гексагонал	Гексагонал Тригонал[9)]	$a = b \neq c$, $\alpha = \beta = 90^0$, $\gamma = 120^0$.

	Тетрагонал	Тетрагонал	$a = b \neq c$. $\alpha = \beta = \gamma = 90^0$.
Жоқары	Кублық	Кублық	$a = b = c$, $\alpha = \beta = \gamma = 90^0$.

Көшерлерди ромбоэдрлик сайлап алыўда $a = b = c$, $\alpha = \beta = \gamma \neq 90^0$.

Кристаллар симметриясының ноқатлық топарлары (класслары). Идеал кристаллық көп жақлылардағы симметриялық операциялардың жыйнағы ***симметрия классын*** (түрин) ямаса ***симметрияның ноқатлық топарын*** пайда етеди. Топарға кириўши ҳәр қыйлы симметриялық операциялар саны ***топардың тәртиби*** деп аталады.

Усындай топарлардың ең әпиўайы қәсийетлери көрип өтемиз.

Егер базы бир операция салдарынан фигура өз өзи менен бетлесетуғын болса, онда қайтадан әмелге асырылатуғын усындай операциялардың нәтийжесинде де фигураның өз өзи менен бетлесетуғыны анық. Избе из өткерилген операциялардың нәтийжеси усы операцияның дәрежеси түринде көрсетилетуғын болғанлықтан, топарға операцияның өзи менен бир қатар да мүмкин болған дәрежелери де киреди. Буннан усындай дәрежелердиң саны шексиз үлкен деген жуўмақ келип шықпайды: кристаллографиялық симметрия операциясын қайталаў ең кейнинде кристалды өзиниң дәслепки ҳалына қайтарып алып келеди, яғный

$$\bar{1}^2 = 1,\ m^2 = 1,\ 2^2 = 1,\ 3^3 = 1,$$

$$4^4 = 1,\ 6^6 = 1,\ \bar{3}^6 = 1,\ \bar{4}^4 = 1,\ \bar{6}^6 = 1.$$

Бир симметрия элементи жәрдеминде пайда етилетуғын топарлар (бундай топарлар тек дәрежели бир операциядан турады) ***цикллық*** топарлар деп аталады. Кристаллографиялық цикллық топарлар усы топарларды пайда етиўши символлар менен белгиленеди. Бундай топарлар биринши тәртипли (1), екинши тәртипли ($\bar{1}$, m, 2), үшинши тәртипли (3), төртинши тәртипли (4, $\bar{4}$), алтыншы тәртипли (6, $\bar{3}^6$, $\bar{6}^6$) болыўы мүмкин.

Егер базы бир операция көп жақлыны өз өзи менен бетлестиретуғын болса, онда көп жақлыны дәслепки орнына қайтарып алып баратуғын операция да симметрия операциясы болып табылады. Бул операция дәслепки операцияға қарата ***кери*** операция болып табылады. Кери операция дәслепки операцияның -1 дәрежеси түринде белгиленеди.

Бир бирине кери болған операциялардың көбеймеси теңлестириў (демек бул жерде теңлестириў түсиниги пайда болды) 1 болып табылады. Демек көбеймеси 1 ге тең болған қәлеген еки симметрия операциясы бир бирине кери деген сөз. Бир бирине салыстырғанда кери болатуғын операциялар

$$\bar{1}\cdot\bar{1} = 1,\ m\cdot m = 1,\ 2\cdot 2 = 1,\ 3^2\cdot 3 = 1,\ 4^3\cdot 4 = 1,$$

$$6^5\cdot 6 = 1,\ \bar{3}\cdot\bar{3}^5 = 1,\ \bar{4}\cdot\bar{4}^3 = 1,\ \bar{6}\cdot\bar{6}^5 = 1.$$

Бул жерде $\bar{1}$, m ҳәм 2 ниң өз өзине кери екенлиги көринип тур.

Егер берилген еки операция кристаллық көп жақлыны өз өзи менен бетлестиретуғын болса, онда бул еки операцияны орынлаў да көп жақлыны өзине түрлендиреди. Демек сөз етилген еки операция менен бирге топарға усы еки операцияның көбеймеси де киреди.

Мысал ретинде базы бир кристаллық көп жақлының симметрия операцияларына 2_y пенен m_y лер киретуғын жағдайды қарайық. Жоқарыда келтирилген теорема 1 ден $\bar{1}$ де симметрия операциясы болатуғынлығын көремиз. Теңлестириў 1 менен бирге бул операциялар топарды пайда етеди. Себеби 2_y, m_y ҳәм 1 лерди өз ара көбейтиўлер жаңа операцияның пайда болыўына алып келмейди.

Төменде 2/m, 222 ҳәм mm2 топарлары ушын көбейтиў кестелери келтирилген.

2/m	1	2_y	m_y	$\bar{1}$
1	1	2_y	m_y	$\bar{1}$
2_y	2_y	1	$\bar{1}$	m_y
m_y	m_y	$\bar{1}$	1	2_y
$\bar{1}$	$\bar{1}$	m_y	2_y	1

222	1	2_x	2_y	2_z
2_x	1	2_x	2_y	2_z
2_x	2_x	1	2_z	2_y
2_y	2_y	2_z	1	2_x
2_z	2_z	2_y	2_x	1

mm2	1	m_x	m_y	2_z
1	1	m_x	m_y	2_z
m_x	m_x	1	2_z	m_y
m_y	m_y	2_z	1	m_x
2_z	2_z	m_y	m_x	1

2/m топарына кириўши барлық көбейтиўлер коммутативли, яғный көбейтиўшилердиң орынларын өзгертиўден ғәрезсиз. Сонлықтан жоқарыда келтирилген көбейтиў кестеси бас диагоналға қарата симметриялы. Демек 2/m коммутативли топар болып табылады. Барлық цикллық топарлар коммутативли болып табылатуғынлығын аңсат аңғарыўға болады. Бирақ барлық коммутативли топарлар цикллық емес.

Барлық көбейтиўлери коммутативли болып табылмайтуғын топарлар коммутатив емес топарлар деп аталады. Кварц кристаллының симметриясы топары 32 коммутативлик емес. Себеби бул жерде $3_z \cdot 2_x \neq 2_x \cdot 3_z$. Бул топардың көбейтиў кестеси бас диагоналына қарата симметриялы емес.

32 топары еки симметрия операциясы жәрдеминде туўдырылатуғын (пайда етилетуғын) топардың мысалы болып табылады. Усындай топарларға дурыс үш қапталлы ҳәм төрт қапталлы пирамидалардың топарлары 3m ҳәм 4m лер де киреди. Базы бир кристаллографиялық топарлар (симметрияның ноқатлық топарлары) үш операция менен пайда етиледи. Усындай топарлар қатарына дурыс төрт қапталлы призманың симметрия топары 4/mmm киреди. Топарды пайда етиўши (туўдырыўшы) операциялар гейпара жағдайларда ***топардың генераторлары*** деп аталады.

Топарға кириўши операциялардың бир бөлегиниң өзлериниң топар пайда етиў жағдайлары да болады. Әлбетте бул топарлардың тәртиби дәслепки топардың тәртибинен төмен болады. Бул киши топарды дәслепки топардың ***киши топары*** деп атаймыз. Демек киши топарды өз ишине алатуғын үлкенирек топарды киши топарға салыстырғандағы ***үстинде турыўшы топар*** деп атаймыз.

Солай етип 2/m топары үш киши топарға ийе болады: 2 $\{1, 2_y\}$, m $\{1, m_y\}$ ҳәм $\bar{1}$ $\{1, \bar{1}\}$, ал 32 топарында төрт киши топар бар: 3 $\{1, 3_z, 3_z^2\}$, 2 $\{1, 2_x\}$, 2 $\{1, 2_y\}$, 2 $\{1, 2_z\}$. 2/m топарының киши топары болған $\bar{1} \subset 2/m$ деп белгиленеди. Жалғыз операция болған 1 ден туратуғын 1 топары қәлеген топардың киши топары болып табылады. Сонлықтан киши топарларды санап шыққанды бул топар есапқа алынбайды.

Топардың тәртибиниң киши топарының тәртибине қатнасы ***киши топардың индекси*** деп аталады. Мысалы, 32 топарына қатнасы бойынша 3 топары 2 индексине ийе киши топар болып табылады.

Бир ўақытта еки топарға кириўши операциялар жыйнағы усы топарлардың ***кесилисиўи*** деп аталады. Еки топардың кесилисиўиниң өзиниң де топар болып табылатуғынлығын дәлиллеў қыйын емес. Сонлықтан еки топардың кесилисиўи бул топарлардың ең улыўмалық киши топары болып табылады. Еки ноқатлық топардың кесилисиўин изертлегенде симметрия элементлериниң өз ара жайласыўларына кеўил бөлиў керек. Егер бурын қаралған 32 ҳәм 2/m топарлары бир координаталар системаларында болса, онда бул топарлардың кесилисиўи 2 $\{1, 2_y\}$ болып табылады. Бул жағдай былайынша жазылады: 32

$\cap$ 2/m = 2 ямаса (егер симметрия элеменлериниң бағытларын көрсетиў керек болса) $3_z 2_y \cap 2_y/m_y = 2_y$.

Кристаллардың симметриясының ноқатлық топарлары математикалық топарлардың бир көриниси болып табылады. Математикада топар деп a, b, c, ... элементлериниң төмендегидей аксиомаларды қанаатландыратуғын G көплигине айтады (а элементиниң G көплигине тийисли екенлигин $a \in G$ деп жазамыз):

1) топардың ҳәр бир $a \in G$ ҳәм $b \in G$ еки элементи ушын усы элементлердиң көбеймеси деп аталатуғын бирден бир $c \in G$ элементи бар болады ҳәм $c = a{\cdot}b$;

2) топардың барлық элементлери ушын ассоциативлик нызам орын алады: $a{\cdot}(b{\cdot}c) = (a{\cdot}b){\cdot}c$;

3) топарда элементти оң тәрептен де, шеп тәрептен де көбейткенде бир нәтийже $a{\cdot}1 = 1{\cdot}a = a$ алынатуғын бирлик элемент $1 \in G$ болады;

4) топардың ҳәр бир $a \in G$ элементи ушын $a{\cdot}a^{-1} = a^{-1}{\cdot}a = 1$ шәртин қанаатландырыўшы $a^{-1} \in G$ кери элементи орын алады.

Егер топар жоқарыда келтирилген 4 аксеомадағыдай қәсийетлерге ийе болса ***абстракт топар*** деп аталады. Абстракт топар өзиниң көбейтиў кестесиниң жәрдеминде толығы менен анықланады.

Ноқатлық топарлар аксеомада келтирилген қәсийетлерден басқа көплеген қәсийетлерге ийе болады: олар орайға қарата симметриялы ямаса симметриялы емес, голоэдрлик ҳәм мероэдрлик болыўы мүмкин. Соның менен бирге топарлардың ҳәр бири анаў ямаса мынаў катерогияға, системаға, сингонияға киреди.

Кристаллографиялық жақтан ҳәр қыйлы ноқатлық топарлар абстракт жақтан бирдей болыўы мүмкин (яғный бирдей көбейтиў кестесине ийе болады). Бундай ноқатлық топарлар ***изоморф*** топарлар деп аталады. Кристаллографиялық жақтан ҳәр қыйлы болған, бирақ өз ара изоморфлы ноқатлық топарларға бир абстракт топар сәйкес келеди. 2/m, 222 ҳәм mm2 коммутативли топарлары усындай топарлар болып табылады.

Симметрияның кристаллографиялық классларын (ноқатлық топарларды) белгилеў ушын симметрия элементлерин көбейтиў ҳаққындағы теоремаларға тийкарланған символлар қолланылады.

Халықаралық символларды жазыўда төмендегидей белгилеўлер қабыл етилген: n - тәртипли симметрия көшери n арқалы (n = 2, 3, 4, 6), n-тәртипли инверсиялық көшер $\bar{n}$, m - симметрия тегислиги, nm - n-тәртипли симметрия көшери ҳәм усы көшер арқалы өтетуғын симметрия тегислиги, n/m (ямаса $\frac{n}{m}$) - n-тәртипли симметрия көшери ҳәм оған перпендикуляр симметрия тегислиги, $\frac{n}{m}$m ямаса n/mmm - n-тәртипли симметрия көшери менен оған параллел ҳәм перпендикуляр симметрия тегисликлери.

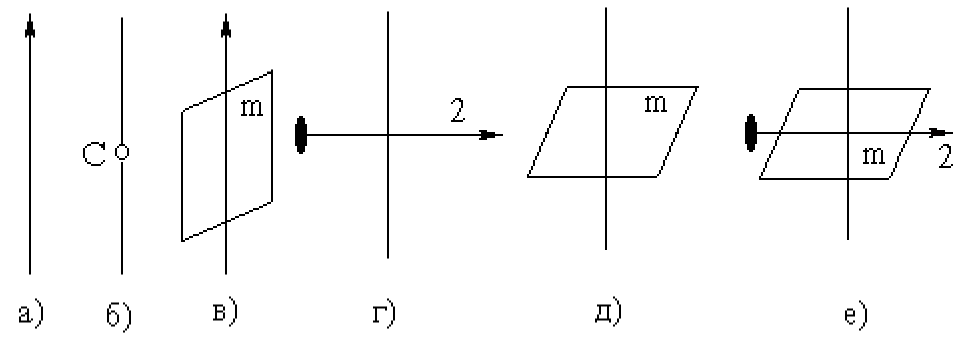
Симметрия классының халықаралық символларында тек туўғызыўшы симметрия элементлери болған тегисликлер менен көшерлер жазылады. Усының менен бирге символдағы ҳәрип симметрия тегислигине түсирилген нормалды аңғартады. Симметрия элементлерин қосыў ҳаққындағы теоремаларды биле отырып берилген класс ушын барлық симметрия элементлериниң жыйнағын билиў мүмкин. Символларды жазыўдың избеизлиги үлкен әҳмийетке ийе ҳәм бул тәртип 1.2-кестеде берилген.

Халықаралық белгилеўде симметрияның “координаталық” ҳәм “диагонал” элеменлерин бири биринен айырады: координаталық тегисликлер ямаса көшерлер координаталық тегисликлер бойынша өтеди, ал диагоналлық симметрия элементлери олар арасындағы мүйешлердиң биссектрисалары бойынша жүргизиледи.

2-санлы лекция. Кристаллардың 32 симметрия классын (симметрияның 32 ноқатлық топарын) келтирип шығарыў ҳәм тәриплеў. Симметрияның шеклик топарлары (Кюри топарлары). Кристаллар структурасының (қурылысының) симметриясы

Симметрияның 32 классын келтирип шығарыў ушын бир ноқатта кесилисетуғын симметрияның мүмкин болған барлық кристаллографиялық элементлериниң жыйнағын қараўымыз керек. Усындай мақсетте қандай да бир туўғызыўшы симметрия элементин сайлап аламыз ҳәм усы элементке туўғызыўшы элемент сыпатында басқа барлық симметрия элементлерин қосамыз. Жоқарыда келтирилген теоремалар тийкарында еки туўғызыўшы симметрия элементиниң қосылыўы салдарынан жаңа симметрия элементлери пайда болатуғынлығын есапқа аламыз.

Төменги ҳәм орта категорияға кириўши кристаллардан баслаймыз. Жоқарыда айтылғандай бундай кристалларда айрықша бағыт (бирлик бағыт) болады. Туўдырыўшы симметрия элементи сыпатында сол бирлик бағытта өтиўши симметрия көшерин аламыз ҳәм 9-сүўретте көрсетилгендей етип басқа да симметрия элементлерин қосамыз.



9-сүўрет. Төменги ҳәм орта категориялар симметриясы классларын келтирип шығарыўды түсиндиретуғын сүўрет.

Әпиўайы симметрия классларында тек ғана бир симметрия элементи, атап айтқанда бирлик бағытта n-тәртипли бурыў көшери болады (9-а сүўрет).

Симметрия көшерине симметрия орайын қосыў арқалы орайлық классларды аламыз (9-б сүўрет):

Туўдырыўшы көшер	1	2	3	4	6
Туўылған элемент	-	m	-	m	m
Симметрия классы	1	2/m	$\bar{3}$	4/m	6/m

3 көшерине симметрия орайын қосқанда инверсиялық $\bar{3}$ көшерин аламыз. Усы класс-ты айырым жағдайларда орайлық классқа емес, ал инверсиялық-әпиўайы классқа жатқы-зады.

Туўдырыўшы симметрия көшерине бул көшер арқалы өтиўши симметрия тегислигин қосып m·n = nm схемасы бойынша планал классларды аламыз (9-в сүўрет):

Туўдырыўшы көшер	1	2	3	4	6
Симметрия классы	m	mm2	3m	4mm	6mm

4mm ҳәм 6mm символларының мәниси жоқарыда түсиндирилди: екинши орында симметрияның координаталық, ал үшинши орында симметрияның диагоналлық эле-ментлери жазылған. mm3 классы ромбалық сингонияға жатады. Бул жерде 2 көшери 2_z болыўы керек ҳәм сонлықтан оны үшинши орынға қойылады.

Туўдырыўшы көшерге перпендикуляр бағытта 2 ни қосып теорема 1 бойынша ***акси-аллық классларды*** аламыз:

Туўдырыўшы көшер	1	2	3	4	6
Симметрия классы	2	222	32	422	622

Жоқарыда келтирилгенлигине байланыслы бул кестедеги 2 рамкаға алынған. 422 ҳәм 622 де екинши орында координата бағытындағы 2 көшери тур, ал үшинши орында диагоналлық бағытлардағы 2 лер келтирилген.

2-кесте.

Ноқатлық топарлардың белгилениўлериндеги позициялар избе-излиги

<table>
<tr><th rowspan="2">Сингония</th><th colspan="3">Белгилеўлердеги позициялар</th></tr>
<tr><th>8</th><th>II</th><th>II8</th></tr>
<tr><td>Триклин</td><td>Кристалдағы қәлеген бағытқа сәйкес келиўши бир символ.</td><td></td><td></td></tr>
<tr><td>Моноклин</td><td>2 көшери ямаса X_2 бағытындағы m ге нормал (белгилеўдиң биринши түри) ямаса X_3 бағытындағы m ге нормал (белгилеўдиң екинши түри)</td><td></td><td></td></tr>
<tr><td rowspan="3">Ромбалық</td><td colspan="3">2 көшери ямаса m ге</td></tr>
<tr><td>X_1 көшери</td><td>X_2 көшери</td><td>X_3 көшери</td></tr>
<tr><td colspan="3">бағытында түсирилген нормал</td></tr>
<tr><td>Гексагонал
Тетрагонал</td><td>Бас симметрия көшери</td><td colspan="2">2 көшери ямаса m ге
координата бағынларында   диагонал бағытларда
түсирилген нормал</td></tr>
<tr><td>Кублық</td><td>Симметрияның координаталық элементлери</td><td>3</td><td>Диагоналлық симметрия элементлери</td></tr>
</table>

Туўдырыўшы көшерге перпендикуляр бағытта симметрия тегислигин қосыў арқалы (9-д сүўрет) жоқарыда айтылып өтилген (бул жерде рамкаға алынбаған) классларды аламыз:

Туўдырыўшы көшер	1	2	3	4	6
Симметрия классы	m	2/m	$\bar{6}$	4/m	6/m

Егер туўдырыўшы көшерге симметрия орайын, 2 көшерин ҳәм бойлық тегислик қосыў арқалы теорема 3 ҳәм 4 тийкарында планаксиаллық классларды аламыз (9-е сүўрет):

Туўдырыўшы көшер	1	2	3	4	6
Симметрия классы	2/m	mmm	$\bar{3}$m	4/mmm	6/mmm

Туўдырыўшы элемент симметрия көшери боған жағдайда алынатуғын симметрия классларының дизими усының менен тамам болады.

Енди инверсиялық симметрия көшерлерин қараў керек болады. Усындай жоллар менен ***инверсиялық-әпиўайы*** $\bar{3}$, $\bar{4}$, $\bar{6}$, ***инверсиялық-планаллық*** $\bar{4}$2m ҳәм $\bar{6}$m2 классларын алыў мүмкин. Солай етип егер $\bar{1}$, 3, 4 ҳәм 6 классларын қоссақ төменги ҳәм орта категорияға жатыўшы кристаллар ушын 27 симметрия классларын аламыз.

Жоқары категорияға жатыўшы кристалларды қараў арқалы және де

23, m3, 432, $\bar{4}$3m ҳәм m3m

классларын аламыз.

32 классты системалар ҳәм сингонияға бөлиў менен қатар симметриясының төмендегидей өзгешеликлерине байланыслы үлкенирек бөлимлерге бөлиўге болады:

1. Симметрия орайының болыўы ямаса болмаўы. Орайлық ҳәм планаксиал классларда поляр бағытлардың, соған сәйкес поляр симметрия менен тәрипленетуғын қәсийетлердиң болыўы мүмкин емес. Бундай класслардың саны 11.

2. Энантиоморфизм. Тек ғана симметрияның бурыў көшерлери бар, ал инверсиялық көшерлери, кесе тегисликлери, симметрия орайы жоқ кристаллар әдетте оң ҳәм терис болып екиге бөлинеди. Бундай кристалларда оң ҳәм терис формалар болады ҳәм поляризация тегислигин бурыў қәсийетине ийе. Әпиўайы ҳәм аксиал класслар энантиоморфлы болып табылады.

3. Симметрияның Лауэ класслары ямаса киши системалары. Фридел нызамы бойынша (ямаса басқа сөз бенен айтқанда дифракциялық эффектттиң орайға карата симметриялылығы нызамы) кристалдың дифракциялық симметриясы оның ноқатлық симметриясынан жоқары болады. Лауэ классы симметриясы кристалдың ноқатлық топарының симметриясы менен усы симметрияға симметрия орайын қосқанда алынатуғын симметрия элементеринен турады.

Симметрияның шеклик топарлары (Кюри топарлары). Биз жоқарыда кристаллардың ҳәм олардың физикалық қәсийетлерин үйрениўде еки түрли көз-қарас пенен қарай алатуғынлығымызды көрдик. Кристаллардың қурылысын үйренгенде дискрет орталық деп, ал олардың физикалық қәсийетлерин таллағанда (оптикалық, жыллылық, электрлик, серпимли ҳ.т.б.) кристаллар бир текли үзликсиз орталық деп қаралады. Кристалдың симметриясының топарларына 2-, 3-, 4-ҳәм 6-тәртипли симметрия көшерлери, ал физикалық қәсийетлериниң топарларына шексиз тәртипли симметрия көшерлери киреди. Жоқарыда бундай көшерлерди ∞ белгиси менен белгиледик. Соның менен бирге ∞ көшери кристалдағы физикалық майданлардың (электр, магнит, механикалық кернеўлер майданы) симметриясының топарларына киреди.

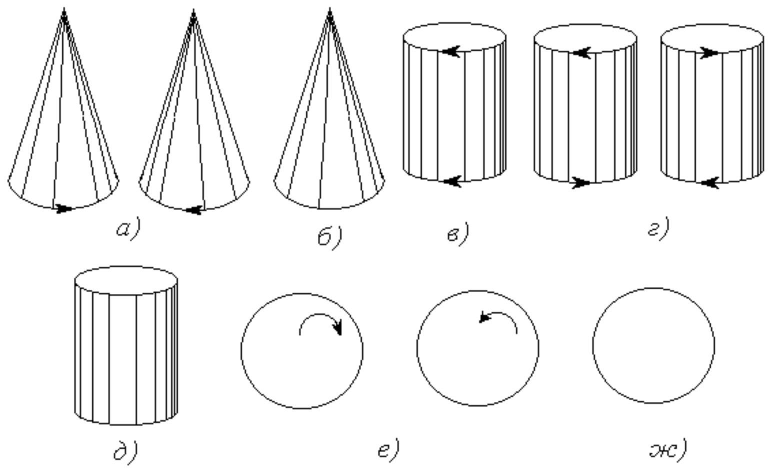
Симметрияның шексиз көшерлери киретуғын ноқатлық топарлар ***симметрияның шеклик топарлары*** ямаса ***Кюри топарлары*** деп аталады. Бундай ноқатлық топарлар саны 7 ҳәм кристаллардың 32 ноқатлық топарларының keминде биреўи усы жети топардың бириниң киши топары болып табылады. Мысалы 6, 4, 3, 2, 1 топарлары тек бир симметрия көшери ∞ болған топарға киреди. Өз көшери дөгерегинде айланыўшы конус ∞ ноқатлық топарына сәйкес келиўши геометриялық фигура. Бул фигура көшер дөгерегинде қәлеген мәнистеги киши мүйешке бурылса да өз өзи менен бетлеседи. Соның менен бирге бул фигурада басқа симметрия элементлери жоқ.

Тап усындай, бирақ өз көшери дөгерегинде айланбайтуғын конус ∞m ноқатлық топары менен тәрипленеди. Бундай топарда ∞ көшери менен бирге усы көшер арқалы өтиўши шексиз көп симметрия тегисликлери де бар. Конустағы симметрия көшери поляр. Усындай симметрияға бир текли электр майданы ийе болады, симметрия көшери электр күш майданларының бағыты менен сәйкес келеди.

Бир текли магнит майданының симметриясы ∞/m шеклик топары менен тәрипленеди (яғный ∞ көшери ҳәм оған перпендикуляр болған симметрия тегислиги). ∞/m топары ушын өз көшери дөгерегинде айланыўшы цилиндр характерли болып табылады. ∞/m топарына 6/m, 4/m, 2/m, m, $\bar{1}$, $\bar{3}$, $\bar{4}$, $\bar{6}$ топарлары бағынады. ∞ топарына бағынатуғын ноқатлық топарлар бул топардың киши топарлары болып табылады.

Симетрияның шеклик топарларына сәйкес келиўши фигуралар 10-сүўретте келтирилген.

Тыныш турған цилиндр, соның менен бирге қысылған ямаса созылған цилиндр ∞/mm симметриясы менен тәрипленеди. Бул жерде ∞ поляр емес көшер, усы көшер бойлап жайласқан шексиз көп симметрия тегисликлери m, көшерге перпендикуляр болған m, ∞ ге перпендикуляр болған шексиз көп 2 симметрия көшерлери ҳәм ∞ көшери менен оған перпендикуляр m кесилискен ноқатта симметрия орайы бар. Өз көшери дөгерегинде буралған цилиндр ∞2 симметриясына ийе, яғный бул жағдайда поляр емес ∞ көшерине ҳәм оған перпендикуляр болған шексиз көп 2 лерге ийе боламыз. Әдеттеги шар ∞∞m топары менен тәрипленеди (яғный шексиз көп ∞ көшерлери менен шексиз көп m). Бул топар ***ортогоналлық топар*** деп аталады.



10-сүўрет. Симметрияның шеклик топарларын сәўлелендиретуғын геометриялық фигуралар: ∞, оң ҳәм терис (а); ∞m (б); ∞/m (в); ∞2, оң ҳәм терис (г); ∞/mm (д); ∞∞, оң ҳәм терис (*е*); ∞∞m(*ж*).

Параграфтың кейнинде кристаллофизикада кеңнен қолланылатуғын Кюри ҳәм Нейман принциплери менен танысамыз.

Кюри принципи бойынша егер (ҳәр қыйлы) еки қубылыс бир бири менен қосылатуғын болса ямаса қубылыс пенен оны қоршап турған орталық қосылса (ямаса бир бири менен бетлестирилсе) ҳәм соның салдарынан бирден бир система пайда болса бул системада сол еки қубылыс ямаса қубылыс пенен оны қоршап турғын орталық ушын улыўмалық болған симметрия элементлери сақланып қалады. Бул жағдай ушын әпиўайы мысал 11-сүўретте сәўлеленген.

П.Кюридиң өзи ҳәзирги ўақытлары оның аты менен аталатуғын принципти былайынша жазды:

Егер анық бир себеплер сәйкес нәтийжелерди пайда ететуғын болса, усы себеплердиң симметрия элементлериниң нәтийжелерде де көриниўи керек. Егер қандай да бир қубылыста анық бир диссимметрия (яғный симметрия болмаса) бар болатуғын болса, усы диссимметрия пайда болған қубылыста да қәлиплеседи.

Кюри принципин қолланыўда төмендегидей еки жағдайға айрықша кеўил бөлиў керек:

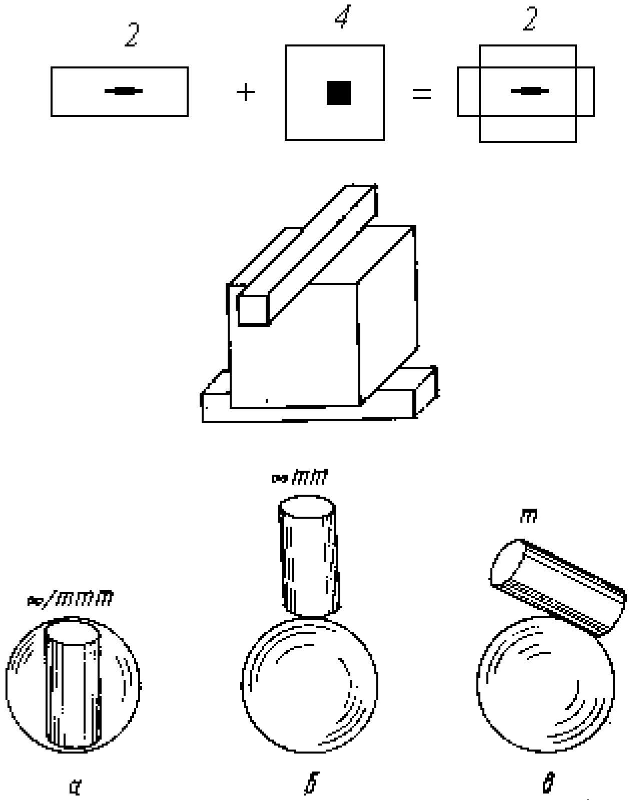
1. Қосылыўшы қубылыслар (фигуралар) симметриясы бойынша ҳәр қыйлы болыўы шәрт. Ал симметриясы бирдей болған фигураларды қосыў арқалы жоқары симметрияға ийе фигураларды алыў мүмкин.

2. Қубылысларды қосқанда симметрия элементлериниң бир бирине салыстырғандағы бағытларына айрықша итибар бериў керек. Принципте бир бири менен бағытлас болған симметрия элементлери нәзерде тутылады (1-9а сүўретте анық көрсетилген).

1)

2)

3)



11-сүўрет.

1). Туўры мүйешлик пенен квадраттың қосылыўындағы симметрияның қосылыўын сәўлелендиретуғын сүўрет. 2-тәртипли симметрия көшерине ийе фигура менен 4-тәртипли симметрия көшерине ийе фигура қосылғанда 2-тәртипли симметрия көшерине ийе фигура пайда болады.

2). Әпиўайы фигураларды қосыў мысалы. Бул жағдайда 2 ҳәм 4 ке ийе фигуралар қосылғанда тек 2 көшери бар фигура алынады.

3). Симметрияның шеклик топарлары ушын мысаллар.

Нейман принципи әдетте кристаллофизиканың тийкарғы нызамы деп те аталады. Бул принцип бойынша

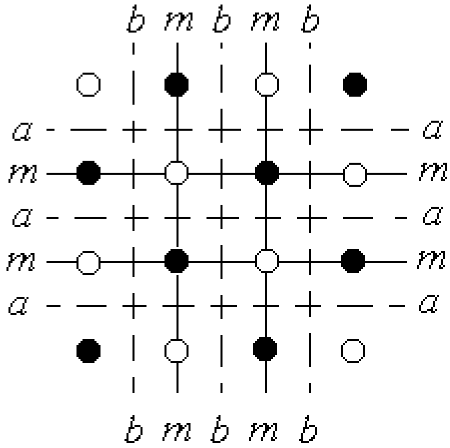
кристаллардың физикалық қәсийети кристалдың өзиниң симметриясына салыстырғанда жоқары симметрияға ийе бола алады, бирақ усы физикалық қәсийеттиң симметриясы кристалдың симметриясының ноқатлық топарын өз ишине алыўы керек.

Басқа сөз бенен айтқанда кристалдың физикалық қәсийетлериниң симметриясы ноқатлық топары оның симметриясының ноқатлық топарының ең жоқарғы топары болып табылады (яғный кристал симметриясының ноқатлық топары физикалық қәсийетиниң симметриясының ноқатлық топарына киреди).

Кристаллар структурасының (қурылысының) симметриясы. Кристаллардың қурылысында жоқарыда гәп етилген шекли симметриялық түрлендириўлерге шексиз симметриялық түрлендириўлер деп аталатуғын түрлендириўлер қосылады.

Тийкарғы шексиз симметриялық түрлендириў ***трансляция,*** яғный бир туўры бойынша көшириў дәўири (трансляция дәўири) деп аталатуғын бирдей болған қашықлықларға көшириў болып табылады.

Трансляцияны симметрия тегислигинде шашыратыўға көбейтиў қурамалы болған симметрия операциясын - жылжып шашыратыўшы тегислик жәрдеминде түрлендириўди пайда етеди. ***Жылжып шашыратыўшы тегислик*** - бул симметрия тегислиги менен усы тегисликке параллел ҳәм усы бағыттағы трансляцияның ярымына тең қашықлыққа көшириўди бир ўақытта әмелге асыратуғын симметрия элементи болып табылады. Бундай симметрия тегислигиниң тәсирин тас дузы қурылысында көрсетиўге болады (12-сүўрет). NaC1 кристаллары жағдайында Na ҳәм C1 ионлары координата тегисликлеринде шахматлық тәртипте қайталанады. Ионның өзине ең жақын жайласқан тап сондай ион менен бетлесиўи ушын a ямаса b тегисликлериндеги шашыраў a/2 ҳәм b/2 қашықлықларына тең трансляциялар менен бирге әмелге асырылыўы керек. Усындай көшириўлердиң нәтийжесинде шексиз үлкен майданды ийелеп турған сүўрет толығы менен көшеди: $5_{a/2} \cdot m_a = a$; $5_{b/2} \cdot m = b$.



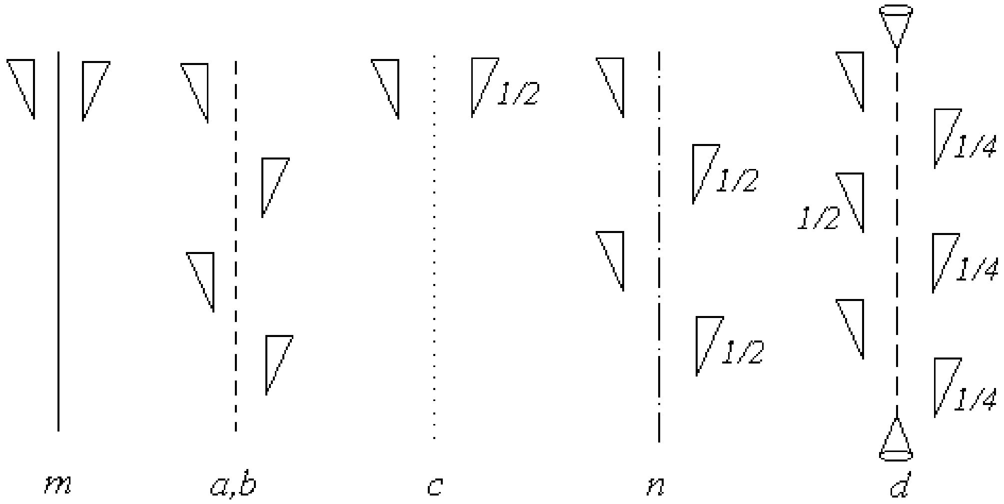
12-сүўрет. NaC1 кристалы қурылысындағы жылжып шашыратыўшы a, b ҳәм айналық шашыратыўшы m симметрия тегисликлери (қурылыс шексиз үлкен деп есапланыўы керек).

Ионлардың орайлары арқалы әпиўайы симметрия тегисликлери m өтеди. Ал олардың орталарында жылжып шашыратыўшы симметрия тегисликлери жайласады. Еки түрли симметрия тегисликлериниң санлары да шексиз көп. Егер жылжыў a, b,c көшерлери бағынында (XУZ көшерлери бағытында a/2, b/2, c/2 қашықлықларына) болатуғын болса жылжып шашыратыўшы симметрия тегисликлери сәйкес a, b, c ҳәртиплери менен белгиленеди.

Жылжыў элементар трансляциялар a, b, c ларда дүзилген параллелограмлардың диагоналы бағытында да болыўы мүмкин. Бундай жағдайда жылжыўдың шамасы (a+b)/2 ге тең болады ҳәм сәйкес жылжып шашыратыўшы симметрия тегислиги n ҳәрипи, ал жылжыўдың шамасы (a+b)/4 ке тең болса d ҳәрипи менен белгиленеди. d тегислигин “алмаз” тегислиги те деп аталады. Сызылмаларда жылжып шашыратыўшы симметрия тегисликлерин ҳәр қыйлы пунктирлер жәрдеминде сәўлелендиреди (1-11 сүўрет).

Симметрия күшери дөгерегиндеги бурыў менен трансляцияны қосыў винтлик бурыўды пайда етеди. Винтлик симметрия көшери деп симметрия көшери менен биргеликте ҳәрекет ететуғын усы көшер бойынша (көшерге параллел бағытта) көшириўге айтамыз.

Оң ҳәм сол винтлик көшерлерин бир биринен айырыў керек. Мысалы 3_1 винтлик көшери фигураны 120^0 қа бурыў менен усы көшер бағытында трансляцияның 1/3 шамасына көширеди. Ал 3_2 көшери болса фигураны 120^0 қа бурыў менен бирге 2/3 шамасына көширеди. Әпиўайы геометриялық таллаў жәрдеминде 3_1 көшериниң оң, ал 3_2 көшериниң сол (3_1 ге салыстырғанда) екенлигине көз жеткериў мүмкин. Тап сол сыяқлы 4_1 ҳәм 4_3 көшерлери де бир биринен тек оң ҳәм соллығы менен парқланады.



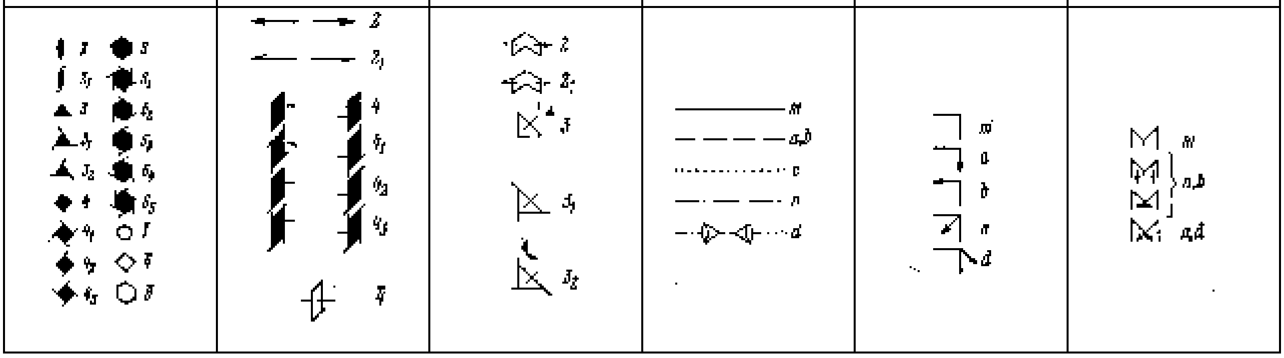
13-сүўрет. Айналық шашыратыўшы (m) ҳәм жылжып шашыратыўшы симметрия тегисликлери (*a, b, c, n, d*).

3-кестеде кристаллар қурылысының сызылма тегислигине перпендикуляр болған симметрия көшерлериниң шәртли түрдеги белгилениўлери көрсетилген.

3-кесте.

Кристаллар қурылысының симметрия элементлериниң шәртли түрдеги белгилениўлери

Көшерлер			Тегисликлер		
тик	горизонталь	қыя	тик	горизонталь	қыя



3-санлы лекция. Кристаллар структурасы симметриясы элементлерин қосыў. Бравэ пәнжерелери. Симметрияның кеңисликтеги 230 топарлары. Кери пәнжере. Структуралық кристаллографияның тийкарғы формулалары

Шексиз көп санлы қайталаў кристаллық структуралардағы тийкарғы симметриялық түрлендириў болып табылады. Бундай түрлендириўлер трансляциялар жәрдеминде әмелге асырылады. Нәтийжеде ҳеш бир ноқат өз орнында қалмайды, олардың барлығы да трансляциялар жәрдеминде түрленеди. Кристаллық структура симметрияның ҳәр қыйлы түрлендириўлери менен байланысқан бөлекшелерден ямаса бөлекшелер топарынан турады. Трансляция симметрия элементлериниң ҳәр бири менен тәсир етисип кеңисликте шексиз көп қайталанатуғын симметрияның жаңа элементлерин пайда етеди (генерациялайды).

Ҳәр бир кристаллық структура ушын оның элементар трансляцияларының жыйнағы ямаса ***трансляциялық топар*** тән. Усы трансляциялық топар ***кеңислик пәнжересин*** пайда етеди.

a, b, c лардың шамасы, бир бирине салыстырғандағы бағытларына байланыслы ҳәр қыйлы симметрияға ийе болған пәнжерелер алынады. Симметрия болса мүмкин болған пәнжерелерге шек қояды. Барлық кристаллық қурылыслар 14 трансляциялық топар жәрдеминде тәрипленеди. Усы трансляциялық топарлар Бравэниң 14 типтеги пәнжересине сәйкес келеди. ***Бравэ пәнжереси*** деп бир ноқатты трансляциялық қайталаўдың салдарынан алынатуғын шексиз сандағы ноқатлар системасына айтамыз.

Бравэниң 14 пәнжереси элементар қутышаларының формасы ҳәм симметриясы бойынша бир биринен айрылады ҳәм 6 сингонияға бөлинеди. Кристалларды сингонияға бөлиў XIX әсирдиң басында минераллардың сыртқы формасын үйрениў тийкарында әмелге асырыла баслады. Кеңисликтеги сфералық бөлекшелердиң (материаллық бөлекшелердиң) симметриялы жайласыў мәселесин шешиў барысында 1848-жылы О.Бравэ алты сингонияға тап усындай етип бөлиўдиң кереклиги ҳаққындағы жуўмаққа келди.

Кристаллық кеңисликтиң симметриясы мүмкин болған пәнжерелердиң санына шек қояды. Пәнжере берилген кристаллық кеңисликте мүмкин болған барлық симметриялық түрлендириўлерге қарата инвариант болыўы керек.

Бравэ пәнжерелери түйини элементар қутышалардың төбелери менен қатар қаптал бетлеринде, орайында да болыўы мүмкин. Усыған байланыслы қутышалардың (пәнжерениң) орайласыўына қарай пәнжерелер былайынша төртке бөлинеди:

a. Түйин тек ғана элементар бөлекшениң төбелеринде жайласады. Бундай жағдайда пәнжерени әпиўайы пәнжере деп атаймыз ҳәм Р ҳәрипи менен белгилеймиз.

b. Түйин элементар қутышаның төбелеринде ҳәм X, У ямаса Z көшерлерине перпендикуляр болған қапталлары орайланыда да жайласады. Бундай жағдайда базада орайласқан пәнжереге ийе боламыз. Мысалы X көшерине перпендикуляр қаптал орайласқан болса А пәнжере, У көшерине перпендикуляр бет орайласса В пәнжере ҳәм Z көшерине перпендикуляр бет орайласқан жағдайда С пәнжереге ийе боламыз.

c. Түйин элементар қутышаның төбелеринде ҳәм орайында жайласады. Бундай пәнжере көлемде орайласқан пәнжере деп аталады ҳәм 8 ҳәрипи менен белгиленеди.

d. Түйинлер элементар қутышалардың төбелеринде ҳәм қаптал бетлери орайларында жайласады. Бундай жағдайда “ ҳәрипи менен белгиленетуғын қапталдан орайласқан пәнжереге ийе боламыз.

Бравэ қутышасын сайлап алыў ушын төмендегидей үш шәрт қойылады:

1) элементар қутышаның симметриясы кристалдың симметриясына сәйкес келиўи, ал элементар қутышаның қабырғалары пәнжерениң трансляциялары болыўы керек;

2) элементар қутыша максимал мүмкин болған туўры мүйешлерге, бир бирине тең болған мүйешлерге ҳәм қабырғаларға ийе болыўы керек;

3) элементар қутыша минималлық көлемге ийе болыўы керек.

Усындай шәртлер тийкарында 6 түрли сингонияға (сингония сөзи уқсас мүйешлер деген мәнини аңартады) ийе элементар қутышалар ҳәм 14 типтеги Бравэ пәнжерелери қурылады.

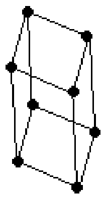
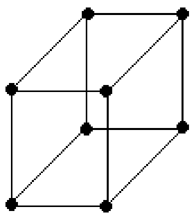
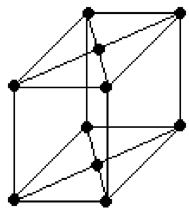
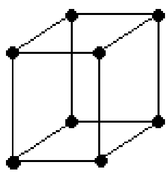
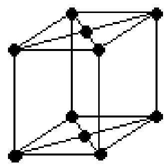
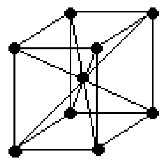
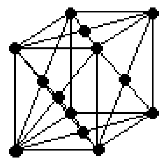
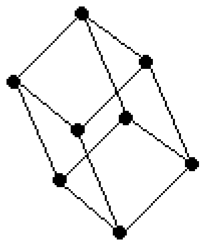
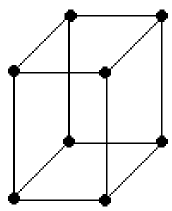
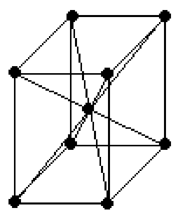
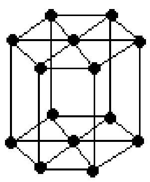
Бравэ пәнжерелери төмендегидей типте болыўы мүмкин: Р - әпиўайы, I - көлемде орайласқан, F - қапталда орайласқан, А, В, С - базада орайласқан, R - ромбоэдрлик (4-кестеде келтирилген).

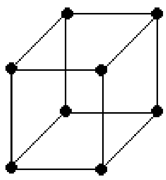
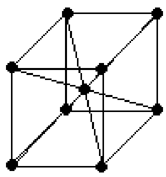
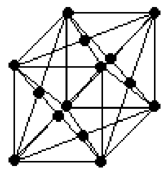
Бравэниң әпиўайы пәнжерелери тийкарында кристаллографиялық сингониялар айрылады.

Гексагонал қурылысқа сәйкес келиўши элементар қутыша үш әпиўайы қутышадан туратуғын алты мүйешли призма болып табылады. Бул элементар қутыша тригонал ҳәм гексагонал кристаллардың симметриясын анық көрсетеди.

4-кесте.

14 типтеги Бравэ пэнжерелери ҳаққында мағлыўмат

Сингония	Пэнжере типи			
	Әпиўайы	Базада орай-ласқан	Көлемде орай-ласқан	Қапталда орай-ласқан
Триклинлик				
Моноклинлик				
Ромбалық				
Тригоналлық (ромбоэдрлик)				
Тетрагоналлық				
Гексагоналлық				

Кублық				

Әпиўайы пәнжерелерде түйинлер қутышалардың тек төбелеринде жайласады. Ал қурамалы пәнжерелерде басқа да түйинлер болады: көлемде орайласқан 8 қутышада - қутышаның орайында бир түйин; “ қутышада - ҳәр бир қапталдың орайында бир түйиннен ҳ.т.б. Қутышаның төбесиндеги түйин бир ўақытта сегиз қутышаға сәйкес келеди. Сонлықтан ҳәр бир қутышаға төмендегидей сандағы түйинлер сәйкес келеди: I қутышағы 1, 8 қутышаға 2, “ қутышағы 4, С қутышаға 2 түйин сәйкес келеди.

Симметрияның кеңисликтеги 230 топарлары. ***Симметрияның кеңисликтеги топарлары*** деп кристаллық қурылыстың барлық симметриялық түрлендириўлериниң жыйнағына айтамыз. Симметрияның кеңисликтеги топарлары симметрияның ноқатлық топарлары сыяқлы кристал қурылысының симметриясын, кристалдың сыртқы формасының симметриясын ҳәм оның макроскопиялық қәсийетлериниң симметриясын тәриплейди.

Ҳәр бир ноқатлық топарға бир неше кеңисликтеги топарлар сәйкес келеди. Симметрияның кеңисликтеги топарынан ноқатлық топарды алыў ушын барлық тарнсляцияларды жоқ қылыў керек, яғный барлық жылжып шашыратыўшы симметрия тегисликлерин әпиўайы симметрия тегисликлерине, винтлик көшерлерди әпиўайы бурыў көшерлерине айландырыў, ал қалған барлық симметрия элементлерин бир ноқатқа жыйнаў керек.

Ноқатлық топардан усы топарға сәйкес келиўши барлық кеңисликтеги топарларды келтирип шығарыў әдеўир қурамалы мәселе болып табылады. Бул жерде барлық мүмкин болған симметрия элементлерин ҳәм Бравэ пәнжерелерин алып көриў керек. Мысалы егер ноқатлық топарға 3 ҳәм 2 көшерлери киретуғын болса кеңисликтеги топарды келтирип шығарыў ушын 3, 3_1, 3_2, 2, 2_1 көшерлериниң мүмкин болған қосындыларын алып көриледи.

Усындай жоллар менен барлық 230 симметрияның кеңисликтеги топарлары келтирилип шығылады. Усы топарлардың ҳәр бири математикалық топарлар аксеомаларын қанаатландырады.

230 топар 1890-1894 жыллары бир ўақытта ҳәм бир биринен ғәрезсиз Е.С.Федоров ҳәм А.Шенфлислер тәрепинен келтирлип шығылды.

Симметрияның кеңисликтеги топарларын белгилеў ушын көбинесе халықаралық символлар, ал айырым жағдайларда Е.С.Федоров символлары ҳәм А.Шенфлис символлары (екеўи еки түрли) қолланылады.

Халық аралық символларды жазыў тәртиби 5-кестеде келтирилген.

Ноқатлардың дурыс системасы деп кеңисликтеги топардың симметриялық түрлендириўлери менен байланысқан симметриялық жақтан эквивалент болған ноқатлардың жыйнағын айтамыз. Бундай система бир ноқатқа берилген кеңисликтеги топар ушын сәйкес келиўши барлық симметрия операцияларын қайталаўдың жәрдеминде алынады.

5-кесте.

Симметрияның кеңисликтеги топарларын жазыўдың тәртиби

<table>
<tr><td>Сингония</td><td colspan="4">Позициялар</td></tr>
<tr><td></td><td>I</td><td>II</td><td>III</td><td>IV</td></tr>
<tr><td>Триклин</td><td rowspan="8">Бравэ пэнжереси типи</td><td>Бар симметрия элементи</td><td></td><td></td></tr>
<tr><td rowspan="2">Моноклин</td><td>Бар симметрия элементи</td><td rowspan="2"></td><td rowspan="2"></td></tr>
<tr><td>2 ямаса 2_1 (ҳәм 2 ге нормал тегислик, егер бар болса)</td></tr>
<tr><td rowspan="2">Ромбалық</td><td colspan="3">Нормал бағытланған тегислик ямаса төмендеги көшерге параллел көшер</td></tr>
<tr><td>X көшерине</td><td>У көшерине</td><td>Z көшерине</td></tr>
<tr><td>Тетрагонал
Гексагонал</td><td>Жоқарғы тәртипли көшер (ямаса оған перпендикуляр болған тегислик)</td><td>Координаталық тегислик ямаса көшер</td><td>Диагонал тегислик ямаса көшер</td></tr>
<tr><td>Кублық</td><td>Координаталық тегисликлер ямаса көшерлер</td><td>3</td><td>Диагонал тегисликлер ямаса көшерлер</td></tr>
</table>

Ноқатлық топар ушын әпиўайы форма қандай әҳмийетке ийе болса, симметрияның кеңисликтеги топары ушын ноқатлардың дурыс системасы түсиниги сондай әҳмийетке ийе болады. Ноқатлардың дурыс системасы кристалдағы қурылыс бирликлериниң (атомлардың, молекулалардың ямаса олардың системаларының) кеңисликте жайласыўларының геометриялық нызамын тәриплейди.

Дурыс системаны билиў бир элементар қутышада жайластырыў мүмкин болған ҳәр қыйлы типтеги атомлар санын анықлаў ушын зәрүр. Дурыс системаның барлық ноқатлары кеңисликтеги топардың симметрия түрлендириўлери жәрдеминде бир бири менен бетлестирилетуғын болғанлықтан, ҳәр қыйлы сорттағы атомлардың бир системаға кириўиниң мүмкин емес екенлиги аңсат көриўге болады.

Әпиўайы формалар сыяқлы, ноқатлардың дурыс системасы ушын да улыўмалық ҳәм дара системалар түсиниги орын алады. Егер дәслепки ноқат симметрия элементлериниң биринде ямаса бирдей симметрия элементлеринен бирдей қашықлықларда туратуғын болса ноқатлардың дурыс системасы ***ноқатлардың дара дурыс системасы*** деп аталады. Дәслепки ноқат симметрия элементлериниң ҳеш бирине тиймейтуғын болса ямаса бирдей симметрия элементлеринен бирдей қашықлықларда туратуғын болмаса алынатуғын ноқатлардың дурыс системасы ***ноқатлардың улыўмалық дурыс системасы*** деп аталады.

Ноқатлардың дурыс системасының ***ретлилиги*** деп элементар қутышадағы бир бирине симметриялық жақтан эквивалент болған ноқатлардың жыйнағына айтамыз. Ретлилик әпиўайы формадағы қаптал бетлердиң саны сыяқлы анықланады.

Төмендегидей салыстырыў келтиремиз:

Шекли фигуралар (көп жақлылар)	Шексиз фигуралар (қурылыс)
Берилген ноқатлар (қаптал бетлер)	Берилген ноқатлар (структуралық бирликлердиң массалар орайлары)
Әпиўайы форма	Ноқатлардың дурыс системасы
Әпиўайы формалар (дара ҳәм улыўмалық)	Ноқатлардың дурыс системалары (дара ҳәм улыўмалық)
Қаптал бетлердиң саны (симметриялық жақтан эквивалент тегисликлер саны)	Ноқатлардың ретлилиги (элементар қутыша көлеминдеги симметриялық жақтан эквивалент болған ноқатлар саны)

International tab1es for X-ray Crysta11ography, V 1. 8, II, Ber1in, 1935, V 1. I, II, II8, Birmingham, 1952, 1959, 1962, 1969 (Структуралық кристаллография бойынша халық аралық кестелер) китабында симметрияның кеңисликтеги топарларының ҳәр бири ушын ноқатлардың дурыс системасы сүўретленген ҳәм усы эквивалент ноқатлардың координаталары берилген. Бул ҳаққында кристаллардың атомлық-кристаллық қурылысын дифракциялық изертлеў мәселелери қаралғанда және бир рет гәп етиледи.

Енди бир неше әпиўайы мысалда симметрияның кеңисликтеги топарлары менен танысамыз.

Триклин сингонияда тек ғана Бравэниң әпиўайы қутышаларының болыўы мүмкин. 1 белгиси менен белгиленетуғын класста ҳеш қандай макроскопиялық симметрия элементи жоқ, әпиўайы формалар тек моноэдрлер болыўы мүмкин. 1 кластағы кристаллар қурылысында бөлекшелер тек трансляция жәрдеминде симметрия болып қайталанады. Бул класстың бирден бир кеңисликтеги топарының белгиси P1 ҳәм ол 13-сүўретте көрсетилген.

Бул сүўретте ноқатлардың дурыс системасы көрсетилген. Қутышада ықтыярлы түрде x,y,z ноқатын орналастырамыз. Трансляция бул ноқатты басқа қутышаларға өткереди, ал усы қутышаның ишинде ноқат қайталанбайды. Демек системаның ретлилиги 1 ге тең.

Усы мысалда ноқатлардың дурыс системасын сфералық ноқатлар ямаса “шар” лардың жәрдеминде көрсетиўдиң мүмкин емеслиги көринип тур. Егер симметриялы ноқатлар қолланылған болғанда 13-б сүўретте көринип турғанындай сызылма тегислигинде жатыўшы қосымша 2 көшерлери пайда болған болар еди. Басқа сөз бенен айтқанда усындай 2-тәртипли симметрия көшерлери бул сызылмада жоқ деп дәлиллеўге болмайды. Егер дурыс системаның ноқатларын асимметриялық фигуралар жәрдеминде белгиленсе (13-в сүўрет) P1 топарында симметрия көшерлериниң жоқлығы ҳәм тек трансляциялардың бар екенлиги анық көринеди.

13-г сүўретте P1 топарының ноқатларының дурыс системасы “Халықаралық кестелер” тийкарында стандарт белгилеўлерде берилген.

Енди триклин системасының $\bar{1}$ класына өтемиз. Әпиўайы P қутышалардан туратуғын тордың ҳәр бир түйининде туўдырыўшы симметрия орайы жайласқан болады. Алынған кеңисликтеги топардың символы $P\bar{1}$. Бундай топарда ноқатлардың еки дурыс системасы болады: ***улыўмалық*** ҳәм ***дара***. xyz координатасына ийе қәлеген ноқат симметрия орайының тәсиринде координаталары $\bar{x}\ \bar{y}\ \bar{z}$ болған ноқатқа айландырылады. Сонлықтан элементар қутышаға еки ноқат сәйкес келеди, демек улыўмалық системаның ретлилиги екиге тең.

Қәлеген симметрия орайының үстинде жатқан ноқат қутышада қайталанбайды ҳәм соған сәйкес дара системаның ретлилиги 1 ге тең.

“Халықаралық кестелерге” муўапық ноқатлардың хәр бир дурыс системасы киши латын хәриплери менен белгиленеди хәм $P\bar{1}$ топарының ноқатларының дурыс системасы былай жазылады:

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

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

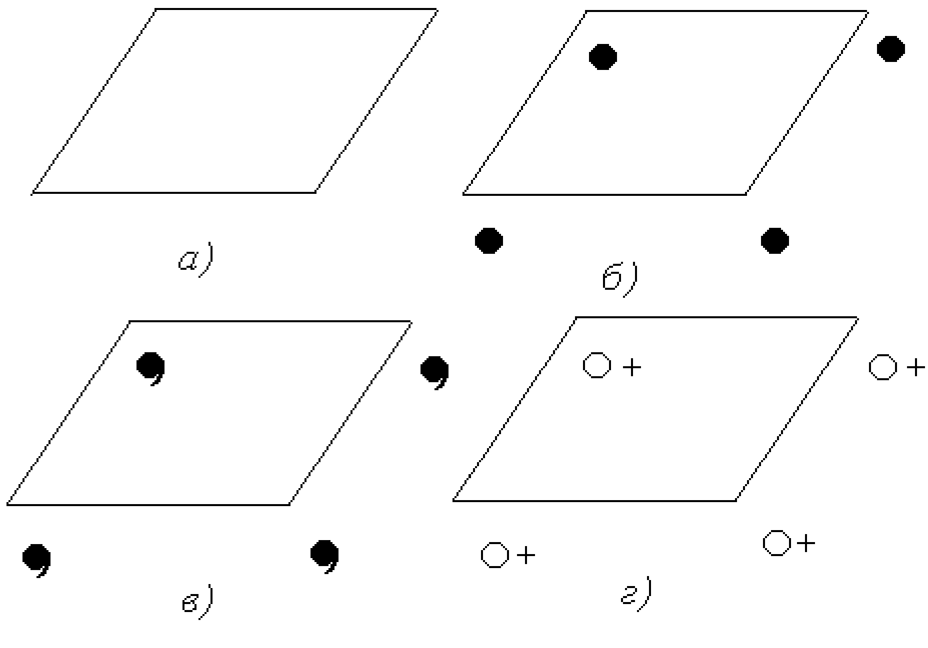
$$2: (8)\ xyz,\ \ \bar{x}\ \bar{y}\ \bar{z}.$$

Туўры пәнжерениң тегисликлери зонасына кери пәнжерениң ноқатларынан (түйинлерден) туратуғын торы сәйкес келеди. Соның менен бирге бул зона көшери кери пәнжере торы тегислигине нормал бағытланған. {hk1} тегисликлерине ийе кеңисликтеги туўры пәнжереге [[hk1]] ноқатларынан (түйинлеринен) туратуғын үш өлшемли кери пәнжере сәйкес келеди.

Кери пәнжерениң тийкарғы векторлары $\mathbf{a}^*$, $\mathbf{b}^*$, $\mathbf{c}^*$ лар (8-1) жәрдеминде ямаса төмендегидей скаляр көбеймелер бойынша анықланады:

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

$$(\mathbf{a}^* * \mathbf{b}) = (\mathbf{a}^* * \mathbf{c}) = (\mathbf{a}^* * \mathbf{a}) = (\mathbf{b}^* * \mathbf{c}) = (\mathbf{b}^* * \mathbf{a}) = (\mathbf{c}^* * \mathbf{a}) = (\mathbf{c}^* * \mathbf{b}) = 0. \quad (8\text{-}2)$$



13-сүўрет. P1 кеңисликтеги топары.

Элементар қутыша (а) хәм сфералық симметриялық ноқатлар (б), асимметриялық (симметриялық емес) фигуралар (в), стандарт белгилеўлердеги (г) ноқатлардың дурыс системасы.

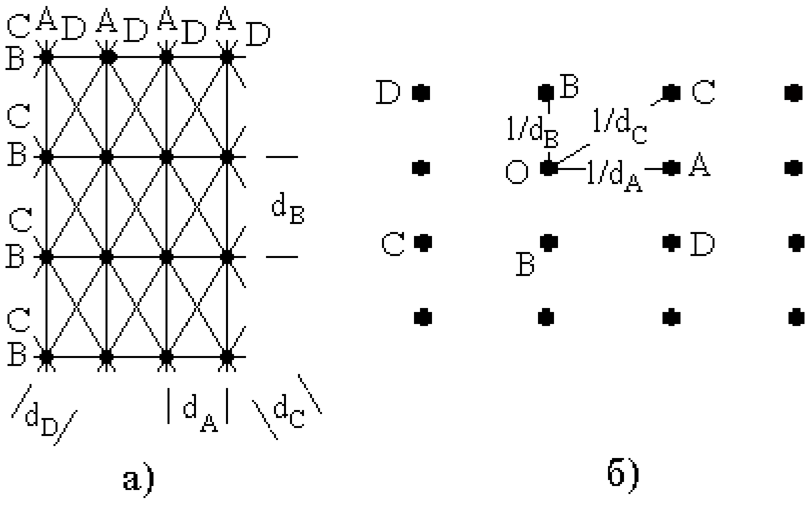
Кери пәнжере. Қатты денелер физикасында, атомлық-кристаллық қурылысты дифракциялық усыллар менен изертлегенде ***кери пәнжере***ден пайдаланыў үлкен жеңилликти пайда етеди. Бундай пәнжере былайынша қурылады:

1) егер туўры пәнжере **a**, **b**, **c** трансляция векторларында қурылған болса кери пәнжере көшерлери $\mathbf{a}^*$, $\mathbf{b}^*$, $\mathbf{c}^*$ векторларында қурылып, олар төмендегидей векторлық көбейме түринде анықланады:

$$\mathbf{a}^* = [\mathbf{b} \times \mathbf{c}], \quad \mathbf{b}^* = [\mathbf{c} \times \mathbf{a}], \quad \mathbf{c}^* = [\mathbf{a} \times \mathbf{b}]. \qquad (8\text{-}1)$$

2) кери пәнжерениң көшерлик параметрлери a^*, b^*, c^* кери пәнжередеги усы көшерлерге нормал бағытланған туўры пәнжере торлары арасындағы тегисликлер арасындағы қашықлықтың кери шамаларына тең.

Туўры пәнжередеги ҳәр бир (hk1) тегислигине кери пәнжереде [[hk1]] түйини сәйкес келеди. Туўры пәнжере аймағындағы өз ара параллел болған {hk1} тегисликлер семействосына кери пәнжереде усы тегисликкке перпендикуляр болған туўрының бойынша жатқан шексиз көп [[hk1]] ноқатлары сәйкес келеди. Координата басы деп қабыл етилген ноқаттан бул ноқатлардың қашықлығы сәйкес 1/d, 2/d, 3/d,... шамаларына тең болады. Бул жерде $d = d_{(hk1)}$ туўры пәнжередеги {hk1} тегисликлери арасындағы қашықлық (14-сүўрет).



14-сүўрет. Туўры (а) ҳәм кери (б) пәнжерелер.

(8-2) аңлатпасынан $\mathbf{a}^*$ векторының **b** ҳәм **c** векторлары жатқан тегисликке перпендикуляр екенлиги көринип тур. $\mathbf{a}^*$, $\mathbf{b}^*$ ҳәм $\mathbf{c}^*$ векторлары **a**, **b**, ҳәм **c** векторлары сыяқлы оң үшлик векторлар сыпатында сайлап алынады.

$\mathbf{a}^*$, $\mathbf{b}^*$ ҳәм $\mathbf{c}^*$ векторлары туўры пәнжере тегисликлери координаталарындағы элементар параллалограммлардың майданларын береди, ал абсолют шамалары бойынша олар туўры пәнжерениң тегисликтери арасындағы қашықлықларға кери пропорционал:

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

$$|\mathbf{c}^*| = [\mathbf{a} \times \mathbf{b}]/(\mathbf{c}*[\mathbf{a} \times \mathbf{b}]). \qquad (8\text{-}3)$$

Туўры ҳәм кери пәнжерелер өз-ара түйинлес, яғный **a**, **b**, **c** көшерлеринде дүзилген пәнжере $\mathbf{a}^*$, $\mathbf{b}^*$, $\mathbf{c}^*$ көшерлеринде дүзилген пәнжереге қарата кери, ал $\mathbf{a}^*$, $\mathbf{b}^*$, $\mathbf{c}^*$ көшерлеринде дүзилген пәнжере **a**, **b**, **c** көшерлеринде дүзилген пәнжереге қарата кери болып табылады.

Кери пәнжере төмендегидей қәсийетлерге ийе болады:

1. Кери пәнжере векторы $\mathbf{g}_{(hk1)} = h\mathbf{a}^* + k\mathbf{b}^* + 1\mathbf{c}^*$ туўры пәнжерениң (hk1) тегислигине перпендикуляр ҳәм шамасы жағынан туўры пәнжерениң {hk1} тегисликтери арасындағы қашықлық d_{hk1} диң кери шамасына тең, яғный

$$|\mathbf{g}_{(hk1)}| = |h\mathbf{a}^* + k\mathbf{b}^* + 1\mathbf{c}^*| = 1/d_{hk1}. \qquad (8\text{-}4)$$

2. Кери пәнжерениң элементар қутышасының көлеми V^* туўры пәнжерениң элементар қутышасының көлеми V ның кери шамасына тең (ҳәм керисинше):

$$V^* = (\mathbf{a}^* * [\mathbf{b}^* \times \mathbf{c}^*]) = 1/V,$$

$$V = (\mathbf{a} * [\mathbf{b} \times \mathbf{c}]) = 1/V^*. \qquad (8\text{-}5)$$

(8-1), (8-2) ҳәм (8-4) формулалардан пайдаланып туўры ҳәм кери пәнжерелер параметрлери **a**, **b**, **c**, $\mathbf{a}^*$, $\mathbf{b}^*$, $\mathbf{c}^*$ лар арасындағы байланысларды аңсат келтирип шығарыў мүмкин:

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

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

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

Буннан

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

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

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

Соның менен бирге

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

Кери пәнжере ҳаққындағы түсиник тийкарынан қысқа толқынлы нурлар (толқын узынлықлары a, b, c параметрлери менен барабар болған жағдайлар, яғный 0.05-0.1 ангстремнен 50-100 ангстремлерге шекемги рентген, электрон ҳәм нейтрон толқынлары) түскендеги кристаллардың шашыратыў (толқынлардың дифракциясын) қәсийетиниң дәўирлилигин тәриплеў ушын пайдаланылады. Усындай нурлардың кристаллардағы кристаллографиялық тегисликлердеги дифракциясы Вульф-Брэгг теңлемеси $2d_{(hk1)} \sin \theta = n\lambda$ менен тәрипленеди. Бул жерде λ - түсиўши нурдың толқын узынлығы, θ - дифракциялық мүйеш, n - пүтин сан.

Структуралық кристаллографияның тийкарғы формулалары. Кери пәнжере жәрдеминде структуралық кристаллографияның көплеген мәселелери шешиледи. Мысаллар келтиремиз:

(hk1) кристаллографиялық тегисликлери семейcтвосы ушын тегисликлер арасындағы қашықлықлар былай есапланады:

$$d_{(hk1)} = 1/\left| h\mathbf{a*} + k\mathbf{b}^* + 1\mathbf{c}^* \right| = 1/\left|\mathbf{g}_{(hk1)}\right|.$$

$\mathbf{g}_{(hk1)}$ векторының узынлығы былай есапланады:

$$\left| h\mathbf{a}^* + k\mathbf{b}^* + 1\mathbf{c}^* \right|^2 = (h\mathbf{a}^* + k\mathbf{b}^* + 1\mathbf{c}^*)*(h\mathbf{a}^* + k\mathbf{b}^* + 1\mathbf{c}^*) =$$
$$= h^2\mathbf{a}^{*2} + k^2\mathbf{b}^{*2} + 1^2\mathbf{c}^{*2} + 2k1\, \mathbf{b}^* * \mathbf{c}^* + 21h\, \mathbf{c}^* * \mathbf{a}^* + 2hk\, \mathbf{a}^* * \mathbf{b}^* =$$
$$= h^2\mathbf{a}^{*2} + k^2\mathbf{b}^{*2} + 1^2\mathbf{c}^{*2} + 2k1\, b^* * c^* \cos \alpha^* + 21h\, c^* * a^* \cos \beta^* + 2hk\, a^* * b^* \cos \gamma^*.$$

Бирақ бундай қурамалы ҳәм узын-шубай формула жәрдеминде тек триклинли кристаллар ушын есаплаўлар жүргизиў мүмкин. Ал басқа кристаллар ушын (a = b = c сыяқлы қатнаслардың бар екенлигине байланыслы) формулалар әдеўир әпиўайыласады:

миноклинли сингония ушын

$$d_{(hk1)}^2 = (h^2a^{*2} + k^2b^{*2} + 1^2c^{*2} + 21h\, c^* * a^* \cos \beta^*)^{-1},$$

бул жерде $\beta^* = 180^0 - \beta$; $a^* = (a*\sin \beta)^{-1}$; $b^* = b^{-1}$; $c^* = (\text{cosin } \beta)^{-1}$;

ромбалық сингонияда

$$d_{(hk1)}^2 = (h^2a^{*2} + k^2b^{*2} + 1^2c^{*2})^{-1},$$

бул жерде $a^* = a^{-1}$, $b^* = b^{-1}$, $c^* = c^{-1}$;

гексагоналлық сингонияда

$$d_{(hk1)}^2 = [(h^2 + k^2 + hk)a^{*2} + 1^2c^{*2}]^{-1},$$

бул жерде $a^* = 2/a\sqrt{3}$;

тригонал сингонияда

$$d_{(hk1)}^{2} = \{[(h^2 + k^2 + 1^2 + 2(hk + 1h + hk) \cos \alpha^{*}])a^{*2}\}^{-1} ,$$

бул жерде $\cos (\alpha^{*}/2) = 1/2\cos (\alpha/2)$, $a^{*} = 1/(a \sin \alpha * \sin \alpha^{*})$;

тетрагонал сингонияда

$$d_{(hk1)}^{2} = \{[(h^2 + k^2) a^{*2} + 1^2 c^{*2}]^{-1},$$

бул жерде $a^{*} = a^{-1}$, $c^{*} = c^{-1}$;

кублық сингонияда

$$d_{(hk1)}^{2} = [(h^2 + k^2 + 1^2) a^{*2}]^{-1},$$

бул жерде $a^{*} = a^{-1}$.

Элементар қутышаның көлеми (10-5) формула бойынша анықланады:

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

Қаўсырманы ашамыз

$$V^2 = (abc)^2 - a^2 (\mathbf{b}*\mathbf{c})^2 - b^2 (\mathbf{c}*\mathbf{a})^2 - c^2 (\mathbf{a}*\mathbf{b})^2 + 2(\mathbf{b}*\mathbf{c}) (\mathbf{c}*\mathbf{a}) (\mathbf{a}*\mathbf{b}),$$

яғный $V = abc (1 - \cos^2 \alpha - \cos^2 \beta - \cos^2 \gamma + 2 \cos \alpha \cos \beta \cos \gamma)^{1/2}$.

Усы формуланың жәрдеминде триклин пәнжерениң көлеми есапланады. Ал қалған сингониядағы кристаллар ушын аңлатпалар әдеўир әпиўайыласады:

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

ромбалық сингонияда $V = abc$;

гексагонал сингонияда $V = \sqrt{3}\, a^2c$;

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

тетрагонал сингонияда $V = a^2c$;

кублық сингонияда $V = a^3$.

$(h_1k_11_1)$ ҳәм $(h_2k_21_2)$ тегисликлери арасындағы φ мүйешин

$$\mathbf{g}_1 = h_1\mathbf{a}^{*} + k_1\mathbf{b}^{*} + 1_1\mathbf{c}^{*}$$

$$\mathbf{g}_2 = h_2\mathbf{a}^{*} + k_2\mathbf{b}^{*} + 1_2\mathbf{c}^{*}$$

векторлары арасындағы мүйеш сыпатында табамыз. Усы векторлардың скаляр көбеймесин $(\mathbf{g}_1\, \mathbf{g}_2) = |\mathbf{g}_1|\,|\mathbf{g}_2|\cos \varphi$ сыпатында жазып төмендегидей аңлатпаны аламыз:

$$\cos \varphi = d_{h_1k_1l_1}\, d_{h_2k_{2}l_2} \{h_1h_2\, a^{*2} + k_1k_2\, b^{*2} + 1_11_2\, c^{*2} + (k_21_1 + k_1\, 1_2)b^{*}c^{*} \cos \alpha^{*} +$$

$$(h_21_1 + h_1\, 1_2)a^{*}c^{*} \cos \beta^{*} +(h_2k_1 + h_1\, k_2)a^{*}b^{*} \cos \gamma^{*} \}.$$

Бул аңлатпадағы $d_{h_1k_1l_1}$ ҳәм $d_{h_2k_{2}l_2}$ сәйкес $(h_1k_11_1)$ ҳәм $(h_1k_21_2)$ тегисликлер семействолары ушын тегисликлер арасындағы қашықлықлар.

Егер $\mathbf{g}_1$, $\mathbf{g}_2$ ҳәм $\mathbf{g}_3$ векторлары компланар болса сәйкес $(h_1k_11_1)$, $(h_2k_21_2)$ ҳәм $(h_3k_31_3)$ тегисликлери бир зонаға киреди ҳәм кери пәнжерениң усы векторларында дүзилген параллелопипедтиң көлеми нолге тең болады, яғный

$$(\mathbf{g}_1 * [\mathbf{g}_2 \times \mathbf{g}_3]) = 0,$$

ямаса

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

4-санлы лекция. Кристаллардың физикалық қәсийетлерин тензорлық ҳәм симметриялық тәриплеў усыллары. Кристал тутас бир текли анизотроп орталық сыпатында. Тензорлар ҳәм олардың түрлендириўлери. Векторлардың ҳәм 2-рангалы тензорлардың қураўшыларын түрлендириў

Кристаллардың макроскопиялық физикалық қәсийетлерин қарағанымызда оның дискрет атомлық қурылысына итибар бермеўге болады. Бундай жағдайда кристалл тутас бир текли анизотроп орталық сыпатында қаралады.

Кристаллардың макроскопиялық физикалық қәсийетлерин қарағанымызда биз атомлар арасындағы қашықлықлардан әдеўир үлкен болған аралықлар, элементар қутыша көлеминен салыстырмас дәрежеде үлкен көлемлер менен ис алып барамыз. Сонлықтан кристалды тутас (үзликсиз) орталық деп қарай аламыз.

Кристалдың ҳәр бир ноқатындағы қәсийетлерин бирдей деп есаплай аламыз. Басқа сөз бенен айтқанда изертленип атырылған кристалдың элеменар көлемин кристалдың қәлеген бөлиминен алыўға болады. Демек кристалды тек ***тутас орталық*** деп қарап қоймай ***бир текли*** орталық деп те қарай аламыз. Бундай жағдайда кристаллардың дискрет қурылысын итибардан шетте қалдырыў менен бирге реал кристалларда орын алатуғын ҳәр қыйлы қосымталар менен қурылыс бузықларының бар екенлигин есапқа алмаймыз. Сонлықтан кристалларды тутас бир текли орталық деп белгили бир дәлликте ҳәм усындай жағдайға сәйкес келиўши мәселелерди қарағанымызда айта аламыз.

Ең кейнинде жоқарыда айтылған қәсийетлер менен бир қатарда кристалдың базы бир физикалық қәсийетлери анизотроп, басқа сөз бенен айтқанда усындай қәсийетлерди тәриплегенде координаталар системасының бағытына ғәрезлилиги есапқа алынады. Сонлықтан кристаллық орталық анизотроп қәсийетлерге ийе болады.

Енди усы айтылғанларға қосымша мәселени былайынша түсиндиремиз:

Элементар көлем түсиниги тутас орталықлар теориясының тийкарғы түсиниклериниң бири болып табылады. Бул элементар көлемниң өлшемлери еки шәртти қанаатландырыўы керек: 1) бул көлемди жеткиликли дәлликте бир текли деп қарай алыў ушын усы көлем ишинде көп сандағы структуралық бирликлердиң (кристал жағдайында элементар қутышалар, шийшепластик жағдайында шийше сабақлар ҳ.т.б.), 2) усы көлем шеклеринде физикалық майданлардың өзгерисин есапқа алмаслықтай дәрежеде элементар көлем киши болыўы керек, бир элементар көлем шеклеринде физикалық майданлар (электр, магнит, механикалық кернеўлер майданлары) бир текли деп қаралады. Пәнжере турақлысын а, элементар көлемниң характерли өлшемин $\sqrt[3]{v}$, ал майдан градиенти ħЕ/ħх деп белгиленсе жоқарыда келтирилген еки талапты былайынша жаза аламыз:

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

Егер майдан кеңисликте дәўирли түрде өзгеретуғын ҳәм λ толқын узынлығы менен характерленетуғын болса жоқарыдағы теңсизликлер былай жазылады

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

Қәлеген физикалық қәсийеттиң симметриясының топары $T_{\tau_1\tau_2\tau_3}$ шамасын кристаллографиялық ямаса шеклик болған базы бир симметрияның анық ноқатлық топары G_0^3 ға көбейткенге тең. $T_{\tau_1\tau_2\tau_3}$ шамасы макроскопиялық жақтан тәриплегенде басым көпшилик кристаллар ушын бирдей болғанлықтан айқын қәсийеттиң симметриясын қарағанда G_0^3 топарын қараў менен шекленеди. Бул белгилеўлердиң мәниси кейинирек анықланады.

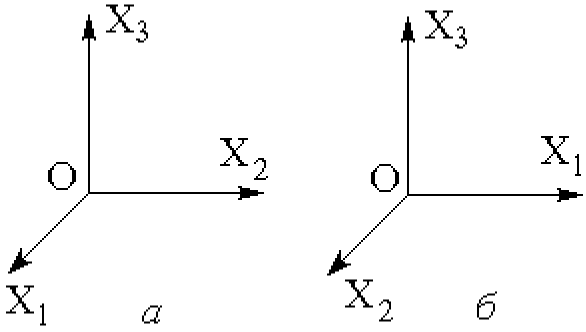
Кристаллардың физикалық қәсийетлерин X_1, X_2, X_3 (ямаса X, Y, Z) ***декарт координаталар системасында*** қараў қабыл етилген. Әдетте көпшилик жағдайларда оң система қолланылады (15-сүўрет). Оң координаталар системасында X_1 көшеринен X_2 көшерине қарай ең қысқа бурыў саат стрелкасының жүриў бағытына қарама-қарсы бағытта әмелге асады. Усындай қозғалғанда оң бурғы X_3 көшериниң бағытында жылжыйды. Тек ғана айырым жағдайларды қарағанда оң емес, ал сол координаталар системасы қолланылады.

Кристаллардың физикалық қәсийетлерин бир мәнисте тәриплеў ушын кристаллографиялық көшерлерге салыстырғанда анық бир бағытқа ийе ***кристаллофизикалық координаталар системасы*** деп аталатуғын Декарт координаталар системасы қолланылады. Бирақ бир қатар мәселелер шешилгенде кристаллофизикалық емес, ал арнаўлы түрде сайлап алынған Декарт координаталар системасы қолланылады.

Координата басмы бир ноқатта жайласқан X_1, X_2, X_3 координаталар системасынан X_1', X_2', X_3' координаталар системасына өтиў жазылыўы төменде көрсетилгендей теңлемелер системасы жәрдеминде әмелге асырылады:

$$e_i' = \alpha_{ij}\, e_j\,. \qquad (\text{II-1})$$

Бул аңлатпадағы e_i' ҳәм e_j сәйкес жаңа ҳәм бурынғы координаталар системасындағы бирлик векторлар, α_{ij} болса жаңа X_i' көшерлери менен бурынғы X_i көшерлери арасындағы бағытлаўшы косинуслар. Бул косинуслардың мәнислерин ортогонал түрлендириў матрицасы жәрдеминде жаза аламыз:



15-сүўрет. Оң (*а*) ҳәм терис (*б*) ортогонал координаталар системасы

$$\left\|\alpha_{ij}\right\| = \begin{Vmatrix} \alpha_{11} & \alpha_{12} & \alpha_{13} \\ \alpha_{21} & \alpha_{22} & \alpha_{23} \\ \alpha_{31} & \alpha_{32} & \alpha_{33} \end{Vmatrix}. \qquad (\text{II-2})$$

Тоғыз α_{ij} косинуслары арасында барлық ўақытта алты қатнас орын алады (бул қатнаслар ортогоналлық қатнаслары деп аталады ҳәм үш косинустың бир биринен ғәрезсизлиги менен байланыслы):

$$\alpha_{8k}\, \alpha_{jk\Delta} = \begin{cases} 1\,(i = j) \\ 0\,(i \neq j) \end{cases}. \qquad (\text{II-3})$$

Демек бир координаталар системасынан екиншисине өтиў барлық ўақытта үш ғәрезсиз параметрдиң жәрдеминде берилиўи мүмкин екен (мысалы Эйлер мүйешлериниң жәрдеминде).

Жаңа X_i' координаталар системасынан бурынғы X_j координаталар системасына өтиў

$$e_j = \alpha_{ij}'\, e_i' \qquad (\text{II-4})$$

теңлемелер системасы жәрдеминде әмелге асырылады. Ал бул ортогоналлық түрлендириў матрицасы $\left\|\alpha_{ij}\right\|$ матрицасына қарата транспонласқан болады:

$$\left\|\alpha_{ij}'\right\| = \left\|\alpha_{ji}\right\| = \begin{Vmatrix} \alpha_{11} & \alpha_{21} & \alpha_{31} \\ \alpha_{12} & \alpha_{22} & \alpha_{32} \\ \alpha_{13} & \alpha_{23} & \alpha_{33} \end{Vmatrix}. \qquad (\text{II-5})$$

Қәлеген ортогоналлық түрлендириў матрицасының анықлаўшысы ± 1 ге тең болады, яғный

$$\left|\alpha_{ij}\right| = \pm 1,$$

қала берсе ***биринши әўлад*** түрлендириўлери ушын (меншикли айланыў яғный әпиўайы айланыўлар)

$$\left|\alpha_{ij}\right| = 1,$$

ал екинши әўлад түрлендириўлери ушын (меншикли емес айланыў, тегисликтеги шашыраў, инверсия, айналық ямаса инверсиялық бурыў)

$$\left|\alpha_{ij}\right| = -1.$$

Демек биринши әўлад түрлендириўлеринде оң система оң болып, сол система сол болып, ал екинши әўлад түрлендириўлеринде оң система сол системаға, сол система оң системаға айланады.

Бул параграфтың ақырында 6-параграфта қысқаша гәп етилген **кристаллофизикадағы симметрия принципине** қайта ораламыз.

Кристаллофизикалық көз-қарас бойынша 39 дана симметрияның кристаллографиялық (32 дана) ҳәм шеклик (7 дана) топарлары тутас орталықтың анизотропиясы ҳәм симметриясы арасындағы өз-ара тәсирлесиўдиң мүмкин болған 39 типи болып табылады (басқа сөз бенен усы еки фактор арасындағы гүрестиң 39 типи деп те айтамыз). Олардың бири - 1 классы усы гүрестеги анизотропияның толық жеңиси менен тәрипленеди. Бундай классқа кириўши кристалларда анизотропия толық көринеди. Еки шеклик класс - ∞∞m ҳәм ∞∞ болса анизотропияның толық жеңилиўи менен тәрипленеди. Усындай симметрияға ийе орталықларда барлық бағытлар эквивалент, ал бул жағдай усындай классларға кириўши кристалларда анизотропия пүткиллей болмайды. Қалған 36 класстың ҳәр бири анаў ямаса мынаў физикалық қәсийеттиң анизотропиясына белгили болған анық шеклердиң қойылыўы менен характерленеди. Қойылатуғын бул шеклер кристалдың симметриясының логикалық нәтийжеси болып табылады.

Симметрияның барлық физикалық қубылысларға тәсирин анықлаўшы улыўмалық принцип 1893-1895 жыллары Пьер Кюри тәрепинен анықланған еди (Кюри принципи) ҳәм бул принцип былайынша жазылды: ‘Айқын себеп айқын болған нәтийжелерге алып келетуғын болса, себептиң симметрия элементлери нәтийжелерде де көриниўи керек.

Қандай да бир қубылысларда белгили бир диссимметрия табылған жағдайда, усы диссимметрия бул қубылысларды туўдырған қубылысларда да көриниўи керек.

Бул жағдайға кери болған жағдайлар ең кеминде практикалық жақтан дурыс емес, басқа сөз бенен айтқанда нәтийжениң симметриясы себептиң симметриясынан жоқары болады'.

Кристаллардың барлық қәсийетлери олардың қурылысы тәрепинен анықланады. Сонлықтан кристаллардың қәсийетлерине қолланылатуғын болса Кюри принципи кристалдың барлық симметрия элементлери оның (усы кристалдың) қәлеген физикалық қәсийетиниң де симметрия элементи болып табылады деп тастыйықлайды. Соның менен бир қатарда кристалдың қандай да бир қәсийетиниң диссимметриясы оның қурылысының диссимметриясы хаққында дерек береди.

Кристалдың физикалық қәсийети ҳаққында гәп еткенимизде оның бир текли екенлигин нәзерде тутамыз ҳәм сонлықтан макроскопиялық физикалық қәсийетти түсинемиз. Сонлықтан ҳәр бир кристалдың физикалық қәсийетиниң (макроскопиялық) симметриясы кристалдың қурылысының симметриясының кеңисликтеги топары арқалы емес, ал симметрияның ноқатлық топары арқалы анықланады. Бундай деп жуўмақлаў Нейманның (1 II5) белгили болған принципине сәйкес келеди. Бул принцип (6-параграфты қараў керек) ҳәзирги тилде былай айтылады: Кристалдың қәлеген физикалық қәсийетиниң симметрия элементлери өз ишине кристалдың симметриясының ноқатлық топарының симметрия элементлерин де алыўы керек. Солай етип Нейман принципин Кюри принципиниң нәтийжеси сыпатында қараўға болады.

Нейман принципиниң Кюри принципинен бурын ашылғанлығын ҳәм бул принциптиң кристаллофизиканың раўажланыўына үлкен тәсир жасағанлығын айтып өтемиз.

Тензорлар ҳәм олардың түрлениўлери. Егер қандай да бир физикалық шама бағыт пенен байланыссыз ҳәм координаталарды түрлендиргенде өзгермей қалатуғын болып, тек сан шамасы менен анықланатуғын болса, бундай шаманы ***скаляр*** деп атаймыз. Масса, температура, жыллылық сыйымлылығы энтропия скаляр шамалар болып табылады.

Координаталарды түрлендиргенде өзиниң шамасы сақлап қалатуғын, бирақ екинши әўлад түрлендириўлеринде белгисин өзгертетуғын физикалық шамалар бар. Бундай шамаларды ***псевдоскалярлар*** деп атаймыз. Бундай псевдоскалярға салыстырмалы оптикалық айланыў мысал бола алады. Демек скаляр ямаса псевдоскалярдың модули координаталарды қәлеген түрдеги түрлендириўлерге қарата инвариант болып табылады.

Векторлар менен тензорлар болса анизотроплық қәсийетлерге ийе болып, координаталарды түрлендиргенде олар өзлериниң санлық шамаларын өзгертеди. Вектор ең әпиўайы анизотропиялық шама болып табылады. **a** векторы узынлығы ҳәм бағыты ямаса ***қураўшылары*** берилген болса толығы менен анықланған болып саналады. $\mathbf{a} = [a_1, a_2, a_3]$, ал усы вектордың узынлығы

$$|\mathbf{a}| = \sqrt{a_1^2 + a_2^2 + a_3^2}\,. \qquad (\text{II-6})$$

Бир векторлық шама екинши векторлық шаманың функциясы болыўы мүмкин, яғный $\mathbf{b} = f(\mathbf{a})$. Бундай жағдайда бир вектор екиншиси тәрепинен индукцияланған деп аталады. Әпиўайы жағдайларда еки вектор арасындағы байланыс скалярдың жәрдеминде әмелге асырылады, яғный $\mathbf{b} = s\mathbf{a}$.

Улыўмалық жағдайларда (усындай жағдайлар кристаллар ҳәм басқа да анизотроплық орталықлар ушын орынланады) **b** ҳәм **a** векторлары арасындағы байланыс бағытларға ғәрезли болады. Егер **b** векторының ҳәр бир қураўшысы **a** векторының ҳәр бир қураўшысының сызықлы функциясы болса төмендегидей теңлемелер орынлы болады:

$$\begin{aligned} b_1 &= T_{11} a_1 + T_{12} a_2 + T_{13} a_3, \\ b_2 &= T_{21} a_1 + T_{22} a_2 + T_{23} a_3, \qquad (\text{II-7}) \\ b_3 &= T_{31} a_1 + T_{32} a_2 + T_{33} a_3. \end{aligned}$$

(II-7)-теңлемелер системасы жәрдеминде $\mathbf{b} = [b_1, b_2, b_3]$ векторы менен $\mathbf{a} = [a_1, a_2, a_3]$ векторларын байланыстыратуғын шама төмендеги кесте түринде жазылады:

$$\begin{Vmatrix} T_{11} & T_{12} & T_{13} \\ T_{21} & T_{22} & T_{23} \\ T_{31} & T_{32} & T_{33} \end{Vmatrix} = T_{ij} \qquad (\text{II-8})$$

ҳәм 2-***рангалы тензор*** деп аталады. Бул тензордың тоғыз коэффициенттиң ҳәр бири болған T_{11}, T_{12}, T_{13}, T_{21}, ... лар тензордың қураўшылары деп аталады ҳәм олардың ҳәр бири физикалық ҳәм геометриялық мәниске ийе. T_{11}, T_{22}, T_{33} қураўшылары **b** векторының **a** векторы X_1 көшерине параллел болған жағдайдағы сәйкес X_1, X_2, X_3 координата көшерлери бағытындағы қураўшылары болып табылады. **b** менен **a** векторларының өз ара параллел қураўшыларын байланыстыратуғын болғанлықтан тензордың бас диагоналында турған T_{11}, T_{22}, T_{33} қураўшылары тензордың ***бойлық қураўшылары*** деп аталады. Тензордың басқа қураўшылары көлденең қураўшылар деп аталады, себеби олар **b** менен **a** ның өз ара перпендикуляр болған қураўшыларын байланыстырады.

Қосыў индекслерин пайдаланыў арқалы (II-7) ни былай жазамыз:

$$b_8 = T_{ij}\, a_j. \qquad (\text{II-9})$$

Векторлар ҳәм 2-рангалы тензорлар менен тәрипленетуғын физикалық шамалар менен кристаллар қәсийетери бойынша мысаллар келтиремиз:

Берилген вектор	Индукцияланған вектор	Тензорлық қәсийет
Электр майданының кернеўлилиги (**E**)	Диэлектриклик поляризация (**P**)	Диэлектриклик қабыллағышлық.
Электр майданының кернеўлилиги (**E**)	Электр индукциясы (**D**)	Диэлектриклик сиңиргишлик
Электр майданының кернеўлилиги (**E**)	Электр тоғының тығызлығы (**j**)	Салыстырмалы электр өткизгишлик
Температура градиенти (grad T)	Жыллылық ағысы тығызлығы (**1**)	Жыллылық өткизгишлик коэффициентлери
Магнит майданының кернеўлилиги	Магнит индукциясы	Магнитлик сиңиргишлик
Магнит майданының кернеўлилиги	Магнитленгенлик	Магнитлик қабыллағышлық

(II-7)-теңлемелерди ықшамлы түрде былай жаза аламыз:

$$b_1 = \sum_{j=1}^{3} T_{1j}\, a_j,$$

$$b_2 = \sum_{j=1}^{3} T_{2j}\, a_j, \qquad \text{(II-10)}$$

$$b_3 = \sum_{j=1}^{3} T_{3j}\, a_j, \qquad \text{(II-11)}$$

Бул жазыўды еле де ықшамластырыў мүмкин:

$$b_8 = \sum_{j=1}^{3} T_{ij}\, a_j \qquad (8 = 1, 2, 3) \qquad \text{(II-12)}$$

Қосыў белгисин алып таслап

$$b_8 = T_{ij}\, a_j \qquad (8, j = 1, 2, 3) \qquad \text{(II-13)}$$

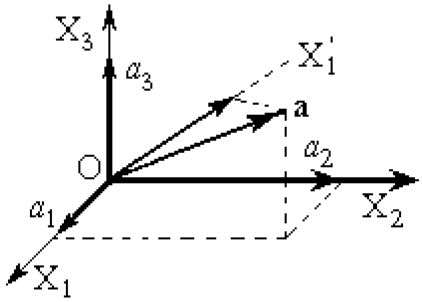
қосыўдың және де бир қағыйдасын әмелге ендиремиз (А.Эйнштейн бойынша): *егер бир ағзада индекс еки рет қайталанса усы индекс бойынша қосынды алыў керек.*

(II-13) теги j қосыў индекси деп аталады. Ал 8 *еркин* индекс деп аталады.

Векторлардың ҳәм 2-рангалы тензорлардың қураўшыларын түрлендириў. Егер **a** векторы ески X_1, X_2, X_3 координаталарда a_1, a_2, a_3 қураўшыларға, ал жаңа X'_1, X'_2, X'_3 координаталарында (II-1)-теңлемелер менен анықланған а’$_1$, а’$_2$, а’$_3$ қураўшыларына ийе болса, жаңа қураўшы а’$_1$ ески вектолардың барлдық қураўшыларының Х’$_1$ көшерине түсирилген проекциялары менен анықланады (16-сүўрет):

$$a_1' = a_1 \cos \widehat{X_1' X_1} + a_2 \cos \widehat{X_1' X_2} + a_3 \cos \widehat{X_1' X_3} = \alpha_{11}\, a_1 + \alpha_{12}\, a_2 + \alpha_{13}\, a_3. \quad (\text{II-14})$$

Бул аңлатпада $\widehat{X_1' X_1}$ арқалы Х$_1$’ ҳәм Х$_1$ көшерлери арасындағы мүйеш.



16-сүўрет. **а** векторының қураўшыларын түрлендириў.

Тап усындай жоллар менен табамыз:

$$a_2' = \alpha_{21}\, a_1 + \alpha_{22}\, a_2 + \alpha_{23}\, a_3,$$

$$a_3' = \alpha_{31}\, a_1 + \alpha_{32}\, a_2 + \alpha_{33}\, a_3. \qquad (\text{II-14a})$$

Қысқартылған белгилеўлерди қолланыў менен төмендегидей аңлатпаны аламыз:

$$a_i' = \alpha_{ij}\, a_j. \qquad (\text{II-15})$$

Усындай етип пикирлеў арқалы жаңа координаталардан ески координаталарға түрлендириў формулаларын аламыз:

$$a_i = \alpha_{ji}\, a_j'. \qquad (\text{II-6})$$

Кери түрлендириўдиң α_{ji} матрицасы туўры түрлендириў мартицалары α_{ji} дың транспонирленген матрицасы болып табылады. Соның менен бирге (II-15) пенен (II-16) дағы индекслердиң жазылыў тәртибине дыққат қойыў керек: туўры түрлендириўде қосыў индекслери қатар турады, ал кери түрлендириўде индекслер бир биринен айрылған.

(II-15)-аңлатпадан

$$a_j \cdot a_j = a_I \cdot a_i$$

екенлигин аңсат көрсетиўге болады. Демек вектордың узынлығын анықлаўшы қураўшыларының квадратларының қосындысы ортогонал түрлендириўлерге қарата инвариант екен.

Мейли, X_8 координаталар системасында еки **b** ҳәм **a** векторлары

$$b_k = T_{k1}\, a_1 \qquad (\text{II-17})$$

аңлатпасы арқалы байланысқан болсын. Сонлықтан T_{k1} 2-рангалы тензор болып табылады.

Жаңа X_i’ координаталар системасына өткенде (II-15) ҳәм (II-16) дан

$$b_8' = \alpha_{ik} b_k, \ a_1 = \alpha_{j1} a_j' \qquad (II-18)$$

аңлатпаларын аламыз. (II-17) менен (II-18) ден

$$b_i' = \alpha_{ik} b_k = \alpha_{ik} T_{k1} a_1 = \alpha_{ik} T_{k1} \alpha_{j1} a_j' = T_{ij}' a_j'. \qquad (II-19)$$

Бул аңлатпадағы

$$T_{ij}' = \alpha_{ik} \alpha_{j1} T_{k1}. \qquad (II-20)$$

(II-19)-теңлеме (II-17)-теңлеме сыяқлы **b** менен **a** векторларының жаңа қураўшыларын бир бири менен байланыстырады. Сонлықтан T_{ij}’ тың тоғыз коэффициенти T_{k1} 2-рангалы тензорының жаңа координаталар системасындағы қураўшылары болып табылады. (II-20)-теңлеме 2-рангалы ***тензордың түрлендириў нызамы*** болып табылады. (II-16)-теңлеме тоғыз теңлемениң жазылыўының қысқаша түри болып табылады. Усы тоғыз теңлемениң ҳәр қайсысы оң тәрепинде тоғыз қосылыўшыдан турады.

Ески қураўшыларды жаңа қураўшылар арқалы аңлататуғын кери түрлердириўдиң

$$T_{k1} = \alpha_{8k} \alpha_{j1} T_{ij}' \qquad (II-21)$$

түринде болатуғынлығын аңсат көрсетиўге болады.

Тензорды түрлендиргенде усы тензор тәриплейтуғын физикалық шама өзгермейди. Физикалық шаманың мәниси сайлап алынған айқын координаталар системасынан ғәрезсиз. Түрлендириўлерде усы физикалық шаманы бериўдиң усылы ғана өзгереди.

5-санлы лекция. Ҳәр қыйлы рангалардағы тензорлар. Псевдотензорлар (аксиал тензорлар). Симметриялық ҳәм антисимметриялық тензорлар. Тензорларды геометриялық жақтан интерпретациялаў

2-рангалы тензорлар менен қандай әмел қылған болсақ

$$T'_{n9p} = \alpha_{n8} \alpha_{9j} \alpha_{pk} T_{ijk}, \qquad (II-22)$$

$$T'_{n9p1} = \alpha_{n8} \alpha_{9j} \alpha_{pk} \alpha_{11} T_{ijk1}, \qquad (II-23)$$

$$T'_{n9p14} = \alpha_{n8} \alpha_{9j} \alpha_{pk} \alpha_{11} \alpha_{4m} T_{ijk1m}, \qquad (II-24)$$

. . . .

аңлатпалары ушын түрлендириў теңлемелерин жазып бул аңлатпаларды анықлама түринде пайдалана аламыз. (II-22)-теңлеме 3-рангалы, (II-23)-теңлеме 4-рангалы, (II-25)-

теңлеме 5-рангалы тензорларды анықлайды. Усындай жоллар менен 1-рангалы ҳәи ***нолинши рангалы*** тензорды да анықлай аламыз.

Демек N-рангалы тензор үш өлшемли кеңисликте 1 ден 3 ке шекемги мәнисти қабыл ете алатуғын N дана индекске ийе болады. Сонлықтан N-рангалы тензор 3N қураўшыға ийе болады.

Тензорларды түрлендириў нызамлары

		Түрлендириў нызамы	
Аты	Тензор ранги	Жаңа қураўшылар ескилери арқалы	Ески қураўшылар жаңа қураўшылар арқалы
Скаляр	0	φ‘ = φ	φ = φ‘
Вектор	1	$a_8' = \alpha_{ij} p_j$	$a_8 = \alpha_{ji} a_j$‘
-	2	$T_{ij}' = \alpha_{ik}\alpha_{j1}T_{k1}$	$T_{ij} = \alpha_{k8}\alpha_{1j}T_{k1}'$
-	3	T_{ijk}‘ $= \alpha_{i1}\alpha_{jm}\alpha_{kn}T_{1mn}$	$T_{ijk} = \alpha_{1i}\alpha_{mj}\alpha_{nk}T_{1mn}$‘
-	4	$T_{ijk1}' = \alpha_{im}\alpha_{jn}\alpha_{ko}\alpha_{1p}T_{mnop}$	$T_{ijk1} = \alpha_{mi}\alpha_{nj}\alpha_{ok}\alpha_{1p}T_{mnop}'$

2-рангалы тензор еки векторды байланыстыратуғын болғанлықтан, 3-рангалы тензор вектор менен 2-рангалы тензорды байланыстырады, яғный

$$a_8 = T_{ijk} 1_{jk}. \qquad (II\text{-}25)$$

4-рангалы тензор (мысалы серпимлилик коэффициенти) еки 2-рангалы тензорды

$$4_{ij} = T_{ijk1} 1_{k1} \qquad (II\text{-}26)$$

ямаса вектор менен 3-рангалы тензорды байланыстырады:

$$a_8 = T_{ijk1} 4_{jk1}. \qquad (II\text{-}27)$$

Улыўма алғанда егер N-рангалы тензор 1 ҳәм M рангалы тензорларды байланыстыратуғын болса 1 + M = N.

Тензорларды тензорлардан тензорлар бойынша алынған туўынды сыпатында қараў мүмкин. Мысалы вектордан вектор бойынша алынған туўынды ямаса скалярдан векторлық аргумент бойынша алынған екинши тәртипли туўынды 2-рангалы тензор болып табылады. Сонлықтан

$$T_{ij} = \frac{\partial a_i}{\partial b_j} \text{ ямаса } 4_{ij} = \frac{\partial a}{\partial b_i \partial c_j}. \qquad (II\text{-}28)$$

Бул шамаларды (II-20) формула жәрдеминде түрлендириўге болатуғынлығын аңсат көрсетиўге болады. Сонлықтан 2-рангалы тензордың қураўшылары болып табылады.

Улыўма алғанда K рангалы тензордан 1 ҳәм M рангалы тензорлар бойынша алынған дара туўынды

$$N = K + 1 + M$$

рангалы тензордың қураўшылары болып табылады.

Псевдотензорлар (аксиал тензорлар). Биз жоқарыда псевдоскаляр түсинигин киргизген едик. Тап сол сыяқлы псевдотензор түсинигин киргиземиз. Псевдотензор тензордан тек ғана оның қураўшыларын түрлендиргенде түрлендириў детерминанты $|\alpha_{ij}|$ ға көбейтилиўи менен парқланады. Демек N-рангалы тензор ушын оның анықламасы ретинде төмендеги түрдеги түрлендириў нызамы қолланылады:

$$P_{ijk1} = |\alpha_{ij}| \alpha_{ip}\, \alpha_{i1}\, \alpha_{k4}\, \alpha_{1s} \ldots P_{p14s} \ldots \qquad (II\text{-}29)$$

Биринши әўлад түрлендириўлеринде псевдотензор әдеттегидей тензордай болады ($|\alpha_{ij}| = +1$). Ал екинши әўлад түрлендириўлеринде ($|\alpha_{ij}| = -1$) псевдотензордың қураўшылары әдеттеги тензордың қураўшыларына салыстырғанда белгилерин өзгертеди.

Псевдотензорлардың (гейпара жағдайларда псевдотензорларды ***аксиал тензорлар*** деп те атайды) парқын басқалардан анығырақ атап өтиў ушын әдеттеги тензорларды ***поляр тензорлар*** деп те атайды. Бирақ биз ҳәр қандай түсинбеўшиликлерди ямаса гүман пайда етпеў ушын әдеттеги тензорларды (яғный поляр тензорларды) тензорлар деп атай беремиз.

Мысаллар келтиремиз. ***Нолинши рангалы*** (псевдоскаляр) псевдотензор сыпатында биз жоқарыда салыстырмалы оптикалық бурылыўды көрсеттик. 1-рангалы псевдотензордың (***аксиал вектордың***) мысалына магнит майданының кернеўлилиги магнитленгенлик, магнит индукциясы ҳ.т.б. киреди. 2-рангалы псевдотензорға кристаллардың оптикалық қәсийетлерин тәриплеўши гирация тензоры киреди.

Егер **a** ҳәм **1** поляр ҳәм аксиал векторлары арасында байланыс болатуғын болса усы байланыс 2-рангалы псевдотензор жәрдеминде белгиленеди. Еки аксиал векторлар арасындағы байланыс 2-рангалы поляр тензор арқалы анықланады. Ал поляр вектор (аксиал вектор) ҳәм 2-рангалы псевдотензор арасындағы байланыс 3-рангалы псевдотензор менен анықланады. Улыўма алғанда поляр тензордың псевдотензорға көбеймеси псевдотензор, ал еки псевдотензордың көбеймеси поляр тензор болып табылады.

Жоқарыда кристаллардың барлық анизотроп физикалық қәсийетлери тензорлар менен тәрипленетуғынлығы (поляр ямаса аксиал тензорлар нәзерде тутылып атыр) айтылған еди. Ал квадрат түбир астындағы $\sqrt{T_{ij}}$ шамасының тензор емес екенлигин аңсат көрсетиўге болады. Себеби бул шама (II-20)-формулада көрсетилген нызам бойынша түрленбейди. Демек, мысалы, сындырыў көрсеткишлери $n_8 = \sqrt{\varepsilon_i}$ анизотроп қәсийетти тәриплейтуғын болса да, кристалдың тензорлық қәсийетин тәриплемейди.

Симметриялық ҳәм антисимметриялық тензорлар. Поляр тензорлар сыяқлы аксиал тензорлар да өзлериниң индекслерине қарата симметрияға ийе болыўы мүмкин. Егер тензор қураўшыларының еки ямаса екиден аслам индекслериниң орынларын алмастырғанда мәнислери өзгермесе усы индекслерге қарата тензор симметриялы деп аталады.

Демек 2-рангалы симметриялы тензорды былай жазамыз:

$$T_{ij} = T_{ji}. \qquad (II-30)$$

$$T_{ijk} = T_{ikj} \qquad (II-31)$$

болған жағдайда тензорды кейинги еки индекске қарата симметриялы деп атаймыз.

$$T_{ijk1} = T_{k1\ ij} \qquad (II-32)$$

болған жағдайда тензорды биринши ҳәм екинши жуп индекслердиң орынларын алмастырыўға қарата симметриялы деймиз.

Симметрияның болыўына байланыслы (II-30)-(II-32) лердеги бир биринен ғәрезсиз болған қураўшылардың санлары кемейеди. Мысалы 2-рангалы симметриялық тензордың 9 қураўшысының тек алтаўы бир биринен ғәрезсиз.

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

3-рангалы еки индекске қарата симметриялы тензорда $3^3 = 27$ қураўшыдан бир бирине 18 қураўшы ғәрезсиз. Улыўма алғанда N-рангалы тензордың жуп индекслер бойынша симметриялылығы оның қураўшылары арасында 3^{N-1} қатнас пайда етеди ҳәм ғәрезсизлер санын (бир биринен ғәрезсиз қураўшылар санын)

$$3^N - 3^{N-1} = 293^{N-1} \qquad (II-33)$$

ге шекем кемейтеди.

Соның менен бирге N-рангалы индекслер жупларына (жоқарыда жуп индекслер ҳаққында гәп болғанлығын умытпаў керек) қарата симметриялылығы олар арасындағы 593^{N-2} қатнасты пайда етеди ҳәм ғәрезсиз қураўшылар санын

$$3^N - 593^{N-2} = 493^{N-2} \qquad (II-34)$$

ге шекем кемейтеди.

Егер индекслерди жуп рет орынларын алмастығанда тензордың қураўшылары өзгермей қалатуғын, ал индекслерди тақ рет орын алмастырғанда қураўшылар белгисин өзгертетуғын болса тензор антисимметриялық (ямаса ***қыя симметриялы***) деп аталады.

Егер

$$T_{ij} = - T_{ji} \qquad \text{(II-35)}$$

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

$$T_{ijk} = - T_{ikj} \qquad \text{(II-36)}$$

болған жағдайда T_{ijk} тензорын 2- ҳәм 3-индекслерге қарата антисимметриялы деп атаймыз.

(II-35)-(II-36) теңлемелерден антисимметриялық тензорлардың ғәрезсиз қураўшылары өз ара тең болып ғана қоймай, айырым қураўшылары нолге айланып кетеди. 2-рангалы тензор ушын

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

болыўы керек. Бул теңлик тек ғана $T_{ii} = - T_{ii} = 0$ болған жағдайда ғана орынланады ҳәм тензор төмендегидей түрге

$$\begin{Vmatrix} 0 & -T_{12} & T_{13} \\ T_{12} & 0 & -T_{23} \\ -T_{13} & T_{23} & 0 \end{Vmatrix}$$

ҳәм үш ғәрезсиз қураўшысына ийе болады.

Тензор бир координаталар системасынан екиншисине өткенде өзиниң симметриялылығын ямаса антисимметриялылығын сақлайды, яғный тензордың симметриялылығы (индекслердиң орынларын алмастырыўға қарата симметриялылығы) ортогонал түрлендириўлерге қарата инвариант болады деген жуўмаққа келемиз. Тензордың бул қәсийети тензорлардың ***ишки симметриясын*** тәриплейди.

2-рангалы қәлеген тензорды симметриялы ҳәм антисимметриялы тензорлардың қосындысынан туратуғынлығын аңсат көрсетиўге болады. Ҳақыйқатында да ықтыярлы түрде алынған 2-рангалы тензорды былай жаза аламыз:

$$b_{ij} = \beta_{ij} + \omega_{ij}. \qquad \text{(II-37)}$$

Бул жерде

$$\beta_{ij} = 1/2\,(b_{ij} + b_{ji}), \quad \omega_{ij} = 1/2\,(b_{ij} - b_{ji}). \qquad \text{(II-38)}$$

Усындай жоллар менен алынған β_{ij} тензорының симметриялық, ал ω_{ij} тензорының атнисимметриялық (себеби $\omega_{ij} = - \omega_{ji}$) екенлигин аңсат дәлиллеўге болады. Бирақ айқын физикалық қәсийетти тәриплейтуғын тензордың симметриялық екенлигин дәлиллеў ушын әдетте термодинамикалық жақтан қарап шығыў зәрүрлиги талап етиледи.

Тензорлардың ишки симметриясын тәриплеў ушын әдетте төмендегидей символлар (нышанлар) қолланылады:

Егер N-рангалы поляр тензор 1 индекслер бойынша симметриялық болса, онда оның ишки симметриясы $[V^1]V^{N-1}$ ямаса $V^{N-1}[V^1]$ түринде белгиленеди.

(II-35)-аңлатпа бойынша тәрипленетуғын тензордың ишки симметриясы $[V^2]$, ал (II-36)-аңлатпаға сәйкес келиўши тензордың ишки симметриясы $V[V^2]$ түринде белгиленеди. Барлық жағдайда да V ның дәрежелериниң қосындысы тензордың рангасы N ге тең. Солай етип егер рангасы жуп N де тензор барлық индекслер бойынша да симметриялы болатуғын болса, оның ишки симметриясы $[V^2]^{N/2}$ түринде белгиленеди. Егер усындай тензор барлық индекслер жупларына қарата симметриялы болса, оның симметриясы $[[V^2]^{N/2}]$ түринде аңлатылады. Соның менен бирге жуп рангалы тензор тек ғана жуп индекслериниң орын алмастырыўына қарата симметриялы болса, оның ишки симметриясы $[[V^2]^{N/2}]$ түринде жазылады. (II-37)-аңлатпа түринде жазылатуғын тензордың ишки симметриясы $[[V^2]^{2}]$ деп белгиленеди.

Жоқарыда гәп етилгендей символлар антисимметриялық тензорларды тәриплеў ушын да қолланылады. Бул жағдайда [,] түриндеги қаўсырмалар фигуралық {, } түриндеги қаўсырмалар менен алмастырылады.

Псевдотензорлардың ишки симметриясын тәриплеў ушын жоқарыда гәп етилгендей символлар қолланылып, усы символлардың алдына қосымша ε белгиси қойылады (ε псевдоскалярдың ишки симметриясын аңғартады).

Жоқарыда 2-рангалы антисимметриялық поляр тензор тек үш ғәрезсиз қураўшыға ийе болатуғынлығы айтылған еди. Соның менен бирге екинши әўлад түрлендириўлерде тензордың қураўшылары белгисин өзгертетуғынлығын аңсат аңғарыўға болады. Усы жағдайдың 2-рангалы поляр тензордың аксиал векторға дуал екенлигин (яғный екеўин де бир геометриялық (физикалық) объектти тәриплеў ушын қалланыўға болатуғынлығы) сәўлелендиретуғынлағын аңсат дәлиллеўге болады. Соның менен бирге 2-рангалы антисимметриялық тензор поляр векторға дуал.

6-санлы лекция. Тензорларды геометриялық жақтан интерпретациялаў. Көрсеткиш бетлер. Скалярлардың, псевдоскалярлардың ҳәм векторлардың симметриясы.

Физикалық қәсийетлердиң симметриясы.
Кристаллофизикалық координаталар системасы

2-рангалы симметриялы поляр тензор кристаллардың физикалық қәсийетлерин тәриплеўде ең көп қолланылатуғын тензор болып табылады. Сонлықтан бундай тензорларды толығырақ үйренемиз ҳәм оларды геометриялық жақтан интерпретациялаў мәселесин көремиз.

Аналитикалық геометриядан орайы координата басында орналасқан екинши тәртипли орайлық беттиң улыўма түрдеги теңлемесин былай жазыўға болады:

$$T_{ij}\, x_8\, x_j = 1. \qquad (\text{II-39})$$

Бул жерде $T_{ij} = T_{ji}$. Бул теңлемени жаңа координаталар системасы ушын түрлендиремиз. Беттиң берилген ноқатының координаталарының радиус-вектордың қураўшылары екенлигин есапқа аламыз. Сонлықтан түрлендириў (II-15)-нызам бойынша әмелге асырылады:

$$x_8 = \alpha_{k\,8} x_k, \quad x_j = \alpha_{1\,j}\, x_1'. \qquad (\text{II-40})$$

(II-40) ты (II-39) ға қоямыз

$$T_{ij}\,\alpha_{k\,8}\,\alpha_{1\,j}\,x_k' x_1' = 1 \text{ ямаса } T_{k1}' x_k' x_1' = 1.$$

Бул жерде

$$T_{k1}' = \alpha_{k\,8}\,\alpha_{1\,j}\, T_{ij}. \qquad (\text{II-41})$$

(II-41) менен (II-20) ны салыстырып, олардың бирдей екенлигин көремиз.

Демек екинши тәртипли бет теңлемесин түрлендириў нызамы 2-рангалы симметриялық тензорды түрлендириў нызамы менен сәйкес келеди. Сонлықтан симметриялы 2-рангалы тензордың қалайынша түрленетуғынлығын табыў ушын орайы координата басында, коэффициентлери тензордың қураўшыларына тең болған екинши тәртипли орайлық беттиң теңлемесиниң түрлениўин қарап шығыў жеткиликли. Сонлықтан усындай бет ***2-рангалы симметриялы тензор ушын характеристикалық бет*** деп аталады ҳәм усындай тензор менен берилген кристаллардың қәлеген қәсийетин тәриплеў ушын қолланылады.

Қәлеген екинши тәртипли орайлық бет үш өз ара перпендикуляр бағытлаға - ***бас көшерлерине*** ийе. Усы үш бағытта координата көшерлери бағыты сыпатында қабыл етсек бет теңлемеси (II-39) әпиўайыласқан түрге енеди:

$$T_1 x_1^2 + T_2 x_2^2 + T_3 x_3^2 = 1. \qquad (\text{II-42})$$

Тап усы сыяқлы 2-рангалы симметриялық тензор да бас көшерлерге алып келиниўи мүмкин. Бундай жағдайда

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

тензоры

$$\begin{Vmatrix} T_1 & 0 & 0 \\ 0 & T_2 & 0 \\ 0 & 0 & T_3 \end{Vmatrix} \qquad \text{(II-43)}$$

түрине енеди. Бул жағдайда T_1, T_2, T_3 лер T_{ij} тензорының (ямаса усы тензор тәриплейтуғын қәсийеттиң) ***қураўшыларының бас мәнислери*** деп аталады ҳәм (II-42) деги коэффициентлерге тең келеди. Тензордың бас көшерлерине параллел болған координаталар системасы ***тензордың бас координата системасы*** деп аталады. Демек бас көшерлер характеристикалық беттиң симметрия элементлери (көшерлери) менен бетлеседи деп жуўмақ шығарамыз.

Бас көшерге келтирилген тензорда (гейпара жағдайларда ***диагонал түрге*** келтирилген тензорда деп айтады) ғәрезсиз қураўшылар саны үшке шекем кемейеди. Бирақ белгиленип алынған координаталардың бас көшерлериниң бағытларын (тензордың бас көшерлерин) анықлаў ушын және де үш санның зәрүрлигине байланыслы “еркинлик дәрежеси” алтығы тең болып қала береди.

Егер еки векторды байланыстыратуғын тензор

$$a_8 = T_{ij}\, b_j$$

симметриялы болса ықтыярлы координаталар системасынан тензордың бас көшерлерине өткенде бул теңлеме әпиўайыласады ҳәм төмендегидей түрлерге ийе болады:

$$a_i = T_{ii}\, b_i = T_i\, b_i, \text{ яғный } a_1 = T_1 b_1,\ a_2 = T_2 b_2,\ a_3 = T_3 b_3. \qquad \text{(II-44)}$$

b векторы тензордың қәлеген бас көшери менен бағытлас болса (II-44) тен **a** векторының да оған параллел екенлиги көринип тур. Бирақ векторлар арасындағы пропорционаллық коэффициентлери үш көшер ушын ҳәр қыйлы мәнислерге ийе. Бул тензорлық байланыстың (ал скалярлық байланыстың емес) нәтийжеси болып табылады. Егер **b** векторы T_{ij} тензорының ҳеш бир бас көшери менен коллиниар болмаса, ҳәр қыйлы қураўшылары арасындағы пропорционаллық коэффициентлериниң ҳәр қандай болыўына байланыслы **a** ҳәм **b** векторлары өз ара параллел емес деп жуўмақ шығарамыз.

Скалярлардың, псевдоскалярлардың ҳәм векторлардың симметриясы. Скаляр менен псевдоскалярдың симметриясы топарлары сәйкес ∞/∞mm ҳәм ∞/∞ симметрияның шеклик топарлары болып табылады. Себеби скаляр шама ∞/∞mm толық ортогонал топары менен түрлендирилгенде өз өзи менен бетлеседи, ал псевдоскаляр қәлеген бурыўларда (яғный биринши әўлад түрлендириўлеринде) өз өзи менен бетлеседи, яғный ∞/∞ топары менен бетлеседи. Қәлеген екинши әўлад түрлендириўлеринде псевдоскаляр радиусларды бурыўда “белгисин” өзгертеди (энантиоморф формасына өтеди).

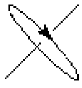
Енди **a** поляр векторының симметрия элементлерин табамыз. Координата көшерлерин усы көшерлердиң биреўи (мысалы X_3) **a** векторына параллел етип аламыз (**a** = $[0,0,a_3]$). Бундай жағдайда

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

матрицасы менен берилетуғын X_3 көшериниң әтирапындағы қәлеген бурыўда $a_8' = a_3 = a_8$ екенлигин аламыз. Демек поляр вектор ∞ симметрия көшерине ийе болады деген сөз. Усы көшер бойында жатқан, мысалы, X_1X_3 симметрия тегислигиндеги шашыратыў да $a_8' = a_3 = a_8$ теңликлерине алып келеди. Бирақ көлденең болған X_1X_2 тегислигинде шашыратыў $a_8' = -a_3 = -a_8$ нәтийжесине алып келеди. Демек көлденең X_1X_2 тегислиги а векторы ушын симметрия тегислиги емес деген сөз (соның менен бирге симметрия орайы да жоқ деген сөз). Ал бойлық X_1X_3 тегислиги усы вектор ушын симметрия тегислиги болып табылады ҳәм бундай тегисликлердиң саны шексиз көп.

Демек поляр вектордың симметриясы ∞mm деген жуўмақ шығарамыз. Поляр вектордың геометриялық образы ретинде стрелканы қабыл етемиз.

Аксиал вектордың симметриясын табамыз. Бизге бул вектордың симметрия орайына ийе екенлиги белгили. Соның менен бирге биринши әўлад түрлендириўлеринде аксиал вектор поляр вектор қәсийетине ийе. Биринши әўлад симметрия элементи болған ∞ көшери аксиал вектор болып табылады ҳәм ол поляр вектор сыяқлы ∞ көшерине ийе. Айналық шашыратыў екинши әўлад түрлендириўи болып табылады. Бул жағдай шашыратыўды аксиал вектордың қураўшыларының поляр вектордың қураўшыларындай болып белгилерин өзгертетуғынлығын билдиреди. Демек поляр вектор ушын жүргизилген таллаўдан аксиал вектордағы бойлық симметрия тегислигиниң жоқ, соның менен бирге көлденең симметрия тегислигиниң бар екенлиги келип шығады.

Демек аксиал вектордың симметриясының ∞/m екенлигине ийе боламыз. Аксиал вектордың симметриясын тәриплеўши геометриялық образ ретинде стрелка менен қаршап алынған кесинди  қолланылады.

Поляр векторындағыдай аксиал векторда еки ушын бир биринен ажырата аламыз (түслик ҳәм арқа полюслар). Бирақ поляр векторда ушлар өз ара тең емес (айналық тең емес). Ал аксиал векторда болса ушлары өз ара айналық теңлик орынланатуғын болса да, өз ара тең емес. Усындай айырма электр ҳәм магнит векторлары арасындағы айырмаға сәйкес келеди.

Енди 2-рангалы симметриялық тензордың симметриясын қараўға өтемиз. Оның симметриясын аналитикалық жақтан излеўдиң орнына оның характеристикалық бетиниң симметриясын қараймыз. Себеби биз жоқарыда характеристикалық беттиң 2-рангалы симметриялық тензордың геометриялық образы екенлигин, ҳәм олардың бирдей симметрияға ийе екенлигин айтып өткен едик.

Диагоналлық түрге келтирилген 2-рангалы симметриялық T_{ij} тензорының характеристикалық бети (II-42) теңлеме түринде бериледи. Анықлық ушын (II-45) теги беттиң барлық бас коэффициентлери $T_i > 0$ (T_{ij} тензорының бас қураўшылары) деп есаплаймыз ҳәм T_{ij} тензорының орайға қарата симметриялылығын есапқа алып T_i лердиң ҳәр қыйлы қатнасларындағы (II-45) бетиниң симметриясының қандай болатуғынлығын қараймыз.

$T_1 = T_2 = T_3$ болған жағдайда характеристикалық бет сфераға айланады ҳәм бул жағдайда тензордың симметриясы $\infty/\infty mm$, яғный T_{ij} тензоры бул жағдайда скалярға айланады.

$T_1 = T_2 \neq T_3$ болған жағдайда (II-45) бети X_3 көшериниң бағытында ∞ көшерине ийе айланыў эллипсоидына айланады ҳәм оның симметриясы ∞/mmm.

$T_1 \neq T_2 \neq T_3$ болған жағдайда (II-45) бети симметриясы mmm болған үш өлшемли эллипсоидқа айланады. Тап усындай симметрияға T_{ij} тензоры да ийе болады. Усының менен бирге 2-тәртипли симметрия көшерлери ҳәм симметрия тегисликлерине түсирилген нормаллар характеристикалық беттиң ҳәм T_{ij} тензорының бас көшерлери менен бағытлас болады.

Солай етип 2-рангалы симметриялық тензор өзиниң бас қураўшылары арасындағы қатнасларға байланыслы mmm, ∞/mmm ямаса $\infty/\infty mm$ меншикли симметриясына ийе болады екен.

Антиисимметриялық поляр тензор аксиал вектор сыяқлы ∞/m симметриясына ийе болады.

Енди симметриялы емес 2-рангалы тензордың симметриясын табамыз. Бундай тензорды барлық ўақытта да симметриялы ҳәм антисимметриялы еки тензордың қосындысы сыпатында қараўға болатуғынлығын есапқа аламыз. Соның менен бирге усындай еки тензорда бас көшерлердиң бағытлары ҳәр қыйлы болыўы, ал тензордың симметриялы бөлегинде бас қураўшылары арасында ҳәр қыйлы қатнаслардың орын алыўы мүмкин. Сонлықтан 2-рангалы симметриялық емес поляр тензордың симметриясы Кюри принципине сәйкес симметриялы ҳәм симметриялы емес бөлимлериниң улыўмалық симметрия элементлериниң бар ямаса жоқлығына қарай анықланады. Егер симметриялы бөлиминиң симметрия топары ∞ болса ҳәм усы бағыт симметриялы емес бөлиминиң ∞ көшериниң бағытына сәйкес келсе 2-рангалы симметриялы емес поляр тензордың симметриясы ∞/m. Ал усы айтылған көшерлер өз ара перпендикуляр болса 2/m ге ийе боламыз. Бундай жағдай симметриялы бөлими mmm симметриясына ийе ҳәм симметрия көшерлери менен тегисликлери өз ара бағытлас болғанда да орын алады. Ең ақырында тензордың еки бөлиминиң өз ара жайласыўы ықтыярлы болғанды тек симметрия орайы $\bar{1}$ сақланып қалады.

Скалярлардың, псевдоскалярлардың, векторлардың ҳәм 2-рангалы тензорлардың меншикли симметриясы

Тензорлық шама	Симметрия топары
Скаляр (нолинши рангалы поляр тензор)	∞/∞mm
Псевдоскаляр (нолинши рангалы псевдоскаляр)	∞/∞
Поляр вектор (1-рангалы поляр тензор)	∞mm
Аксиал вектор (1-рангалы псевдотензор)	∞/m
2-рангалы псевдотензор	
симметриялық	∞/∞mm, ∞/mm, mmm
симметриялық емес	∞/m, 2/m, $\bar{1}$
антисимметриялық	∞/m
2-рангалы аксиал тензор	
симметриялық	∞/∞, ∞22, 222, $\bar{4}$ 2m
симметриялық емес	∞, 2, 1, mm2, m
антисимметриялық	∞mm

Скалярлардың, псевдоскалярлардың, векторлардың ҳәм 2-рангалы тензорлардың меншикли симметриясы кестеде берилген.

Физикалық қәсийетлердиң симметриясы. Усы ўақытқа шекем тензорлардың улыўмалық қәсийетлерин ҳәм меншикли симметриясын қарағанымызда олардың айқын физикалық мазмунына итибар берилген жоқ. Бирақ енди тензорлардың объектлерге қатнасын айқынласытырыўымыз керек. Ҳақыйқатында да берилген физикалық объектке қатнасына байланыслы тензорларды екиге бөлемиз: кристалдың физикалық қәсийетин (яғный өлшенген физикалық шамалар арасындағы қатнасларды белгилеўши) тәриплеўши тензорларды ***материаллық тензорлар***, ал сыртқы күшлердиң тәсирин ҳәм усы тәсирлерге кристаллардың реакциясын тәриплейтуғын тензорларды ***майданлық тензорлар*** деп атаймыз.

Нейман принципине сәйкес материаллық тензорлардың симметриясы менен кристалдың симметриясы арасында байланыс болыўы керек. Усы тензорлардың, хараеткристикалық бетлердиң симметрия элементлери кристалдың симметрия элементлери менен бетлеседи.

Майданлық тензорларда басқа жағдайды көремиз. Бул тензорлардың симметриясы кристалдың симметриясы менен байланыслы емес ҳәм кристалдың симметрия элементлериниң бағытларына салыстырғанда қәлеген ориентацияны ийелеўи мүмкин. Мысалы қәлеген бағыттағы кристалға қәлеген бағытта электр майданын (поляр вектор) ямаса механикалық тәсир (қысыў, созыў, 2-рангалы симметриялы тензор) түсириў мүмкин. Усындай жоллар менен қәлеген симметрияға ийе кристалларда қәлеген бағыттағы поляризацияны ямаса деформацияның қәлеген қураўшысын бериўге болады. Бирақ усының менен бирге ықтыярлы түрде механикалық кернеў түсириў менен симметриясына ғәрезли болған деформация түриндеги кристалдың реакциясын аламыз. Өз гезегинде симметрияның өзиниң кристалдың серпимлилик қәсийетлерине байланыслы екенлигин умытпаўымыз керек.

Бир тензордың өзи айырым жағдайларда материаллық ҳәм майданлық болыўы мүмкин. Мысалы поляризация векторы **P** әдетте майданлық тензор болып табылады. Бирақ пироэлектриклерде (соның менен бирге сегнетоэлектриклерде де) $\mathbf{P}_s$ спонтан поляризацияны, соған сәйкес қәсийетти тәриплейди ҳәм ол кристалдың симметриясына байланыслы болыўы шәрт. Әдетте майданлық тензор болып табылатуғын деформация тензоры сегнетоэластиклерде (ферроэластиклерде) материаллық тензор болып табылады. Сонлықтан ферроэластиклердеги деформациялар қаралғанда деформация тензоры материаллық тензор сыпатында қаралады.

Майданлық тензорлар қаралғанда изотроп ҳәм анизотроп орталықлар арасындағы айырма болмайды. Изотроплық ҳәм анизотроплық тек ғана физикалық қәсийетлерди тәриплеўши материаллық тензорларды қарағанда нәзерде тутылады.

Кристаллардың физикалық қәсийетлерин тәриплеўши тензорлар кестеде келтирилген.

Кристаллардың физикалық қәсийетлерин тәриплеўши тензорлар

Нолинши рангалы тензор	Биринши рангалы тензор (вектор)
Тығызлық	Пироэлектрлик қәсийет
Қысылғышлық	Поляризация жыллылығы
Жыллылық сыйымлылығы	Электрокалориялық коэффициент
	Гидростатикалық қысыўдағы электр поляризациясы

Еки векторды байланыстыратуғын екинши рангалы тензор	
Диэлектрлик сиңиргишлик	Салыстырмалы электр өткизгиншлик
Диэлектрлик сиңирмегишлик	Салыстырмалы қарсылық
Диэлектрлик қабыллағышлық	Жыллылық өткизгишлик коэффициенти
Магнитлик сиңиргишлик	Жыллылық қарсылығы
Магнитлик қабыллағышлық	Термоэлектрлик коэффициентлер

Скаляр менен 2-рангалы тензорды байланыстыратуғын 2-рангалы тензор	
Гидростатикалық басымдағы деформация	Жыллылық кернеўи
Жыллылық кеңейиўи	Пельтьениң термоэлектрлик коэффици-ентлери

Вектор менен 2-рангалы тензорды байланыстыратуғын 3-рангалы тензор	
Туўры пьезоэлектрлик эффект модули	Сызықлы электроптикалық эффект коэф-фициенти
Кери пьезоэлектрлик эффект модули	Хол коэффициенти

2-рангалы еки тензорды байланыстыратуғын 4-рангалы тензор	
Магнитострикция коэффициенти	Квадратлық электроптикалық эффект
Пьезооптикалық коэффициент	Электрострикция

Пьезорезистолық коэффициент	Коттон-Мутон эффекти
Серпимлилик коэффициенти	

Кристаллардың физикалық қәсийетлериниң симметриясы

Қәсийетти тәриплейтуғын тензорлық шама	Қәсийеттиң симметрия топары
Скаляр (нолинши рангалы поляр тензор)	∞/∞mm
Псевдоскаляр (нолинши рангалы псевдотензор)	∞/∞
Поляр вектор (1-рангалы поляр тензор)	1, m, ∞mm
Аксиал вектор (1-рангалы псевдотензор)	$\bar{1}$, ∞m
2-рангалы поляр вектор	
симметриялық	$\bar{1}$, 2/m, mmm, ∞/mmm, ∞/∞mm
симметриялы емес	$\bar{1}$, 2/m ∞/m
антисимметриялы	$\bar{1}$, ∞/m
2-рангалы псевдотензор	
симметриялық	1, 2, 222, ∞22, ∞/∞, m, $\bar{4}$, $\bar{4}$2m
симметриялы емес	1, 2, ∞, m, mm2
антисимметриялы	1, m, ∞mm
3-рангалы еки индекси бойынша симметриялы тензор	
поляр	1, 2, 222, 3, 32, ∞, ∞22, m, mm2, 3m, ∞mm, $\bar{4}$, $\bar{4}$2m, $\bar{6}$, $\bar{6}$m2, $\bar{4}$3m
аксиал	$\bar{1}$, 2/m, mmm, ∞/m, ∞/mmm, $\bar{3}$, $\bar{3}$m, m3m
4-рангалы поляр тензор	
еки жуп индекслери бойынша олардың орынларын алмастырғанда	$\bar{1}$, 2/m, mmm, 4/m, 4mmm, $\bar{3}$, $\bar{3}$m, ∞/mmm, m3m
еки жуп индекслери бойынша симметриялы	$\bar{1}$, 2/m, mmm, 4/m, 4mmm, $\bar{3}$, $\bar{3}$m, ∞/m, ∞/mmm, m3, m3m

Кристаллофизикалық координаталар системасы. Кристаллардың физикалық қәсийетлерин тәриплеў ушын оң туўры мүйешлим координаталар системасынан пайдаланады. Усындай координаталар системасын кристаллофизикалық координаталар системасы деп атаймыз. Бундай координаталарды әдетте X_1, X_2, X_3 деп белгилейди. Кублық, тетрагонал ҳәм ромбалық сингониялар ушын кристаллофизикалық координаталар системасы кристаллографиялық координаталар системасы менен бирдей болады. Ал басқа сингониядағы кристаллар ушын кристаллофизикалық координаталар системасын сайлап алыў төмендеги кестеде келтирилген тәртиплерде әмелге асырылады:

Сингония	X_1 көшери	X_2 көшери	X_3 көшери
Триклинлик	[001] бағытына перпендикуляр тегисликте		[001]
Моноклин	(100) тегислигинде	[010]	[001]
Ромбалық	[100]	[010]	[001]
Тетрагонал	[100]	[010]	[001]
Гексагонал ҳәм тригонал	$[2\bar{1}\bar{1}0]$	$[01\bar{1}0]$	[0001]
Кублық	[100]	[010]	[001]

Енди кристаллофизикалық координаталар системасында симметриялық түрлендириўлерди матрицалар жәрдеминде көрсетиўди қарап өтемиз.

Түрлендириўдиң нәтийжесинде координаталары xyz болған ноқат координаталары x'y'z' болған ноқатқа айланады. Усы еки координаталар арасындағы байланыс былай жазылады:

$$x' = c_{11}x + c_{12}y + c_{13}z,$$

$$y' = c_{21}x + c_{22}y + c_{23}z,$$

$$z' = c_{31}x + c_{32}y + c_{33}z.$$

Бул теңлемелердеги c_{ij} ески ҳәм жаңа координаталар көшерлери арасындағы мүйешлердиң косинуслары.

Қәлеген симметриялық түрлендириўге түрлендириў анықлаўшысы C_{ij} ты жазыўға болады.

M(x,y,z) ноқатының координатасының OX көшерине перпендикуляр (100) симметрия тегислиги тәсир еткенде қалай өзгеретуғынлығын анықлаймыз. Шашыраған нан кейин

M(x,y,z) ноқаты M’(x’,y’,z‘) ноқатына көшеди. Ҳәзирги жағдайда тек X көшери бойынша координата белгисин өзгертеди, ал y пенен z өзгермей қалады, яғный

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

Ендигиден былай қолайлылық ушын x тың алдында - (минус) белгисиниң бар екенлигин $\bar{x}$ түринде белгилеймиз. Сонлықтан жоқарыдағы теңликлердиң орнына былай жаза аламыз:

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

(100) симметрия тегислигиндеги шашыраўға сәйкес келиўши бағытлаўшы косинуслар матрицасын былай жазамыз:

$$\Delta_{m(100)} = \begin{pmatrix} \bar{1} & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix},\ C_{ij} = -1.$$

Жоқарыда айтылғанындай C_{ij} түрлендириў анықлаўшысы.

Тап усы сыяқлы (010) симметрия тегислиги ушын, яғный $m \perp O6$ болған жағдайда жаңа координаталар былай жазылады:

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

ал түрлендириў матрицасы

$$\Delta_{m(010)} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \bar{1} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix},\ C_{ij} = -1.$$

(001) болған симметрия тегислиги ушын сәйкес

$$\Delta_{m(001)} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & \bar{1} \end{pmatrix},\ C_{ij} = -1.$$

O6 көшерине бағытлас болған көшер дөгерегинде φ мүйешине бурғанда

$$\Delta_{2||6} = \begin{pmatrix} \cos\varphi & 0 & \sin\varphi \\ 0 & 1 & 0 \\ -\sin\varphi & 0 & \cos\varphi \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

Басқа көшерлер дөгерегинде бурыўлардың нәтийжелерин арнаўлы кестеде бериледи.

Графикалық жоллар менен жүргизилген симметрия элементлери қосыў матрицалық усыл менен де әмелге асырылыўы мүмкин. Симметрия элементлерин қосыў сәйкес матрицаларды өз ара көбейтиў менен әмелге асырылады. Ал еки матрицаны көбейтиў былайынша әмелге асырылады:

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

бул жерде $d_{ki} = \sum_{i=1}^{3} a_{ik} b_{k1}$.

Енди жуп тәртипли симметрия көшерине оған перпендикуляр симметрия тегислигин қосқанда симметрия орайының пайда болатуғынлығы ҳаққындағы теореманы дәлиллеймиз. О6 көшери менен бағытлас 2-тәртипли симметрия көшери

$$2_{[010]} = \begin{pmatrix} \bar{1} & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & \bar{1} \end{pmatrix}$$

менен усы көшерге нормал бағытланған симметрия тегислиги $m_{(010)}$

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

бир бирине көбейтсек симметрия орайының матрицасын аламыз:

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

Тап усы сыяқлы 2/m ди де есаплаўымыз мүмкин:

$$2/m = \begin{pmatrix} \bar{1} & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & \bar{1} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \bar{1} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \bar{1} & 0 & 0 \\ 0 & \bar{1} & 0 \\ 0 & 0 & \bar{1} \end{pmatrix} = \bar{1}.$$

Симметриялық түрлендириўлер кестеси

Симметрия элементи	X_1	X_2	X_3

Көшерге параллел 2 көшери	$\begin{matrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{matrix}$	$\begin{matrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{matrix}$	$\begin{matrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{matrix}$
Көшерге параллел 3 көшери	$\begin{matrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1/2 & -\sqrt{3}/2 \\ 0 & \sqrt{3}/2 & -1/2 \end{matrix}$	$\begin{matrix} -1/2 & 0 & \sqrt{3}/2 \\ 0 & 1 & 0 \\ \sqrt{3}/2 & 0 & -1/2 \end{matrix}$	$\begin{matrix} 1/2 & -\sqrt{3}/2 & 0 \\ \sqrt{3}/2 & -1/2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{matrix}$
Көшерге параллел 4 көшери	$\begin{matrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{matrix}$	$\begin{matrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \end{matrix}$	$\begin{matrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \end{matrix}$
Көшерге параллел 6 көшери	$\begin{matrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1/2 & -3/2 \\ 0 & 3/2 & -1/2 \end{matrix}$	$\begin{matrix} 1/2 & 0 & 3/2 \\ 0 & 1 & 0 \\ -3/2 & 0 & 1/2 \end{matrix}$	$\begin{matrix} 1/2 & -3/2 & 1 \\ 3/2 & 1/2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{matrix}$
Көшери бойындағы m	$\begin{matrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{matrix}$	$\begin{matrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{matrix}$	$\begin{matrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{matrix}$
Көшерге параллел инверсиялық көшер $\bar{1}$ (инверсия орайы)	$\begin{matrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{matrix}$	$\begin{matrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{matrix}$	$\begin{matrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{matrix}$

7-санлы лекция. Кристаллардың механикалық қәсийетлери. Кристаллардың серпимлилик қәсийетлери. Кристаллар ушын Гук нызамы

Қатты денелердиң механикалық қәсийетлери олардың сырттан түсирилген механикалық жүкке болған реакциясынан анықланады. Бул қәсийетлерди тәриплеў ушын үш тийкарғы характеристикалырды қолланады:

Биринշиси *серпимлилик*. Бул характеристика сырттан түсирилген механикалық тәсир алып кетилгеннен кейин қатты денелердиң дәслепки формаларына қайтып келиўин сыпатлайды. Бундай қәсийет деформацияның дәслепки басқышларында орын алады. Деформацияның бундай дәслепки басқышларын серпимли (қайтымлы) басқыш деп атаймыз.

Екиншиси *эластиклик*. Эластиклик сырттан узақ ўақыт даўамында түсирилген механикалық тәсир астанда қатты денелердиң формаларының қандай дәрежеде тезлик пенен өзгеретуғынлығын ямаса фарманың өзгерисиниң белгили бир тезликте жүриўи ушын тәсир етиўши күштиң шамасының қандай болатуғынлығын тәриплейди. Эластиклик деформацияның кейинги басқышларындағы денелердиң қәсийетлерин тәриплейди. Деформацияның бундай басқышларын *эластик деформация* ямаса *қайтымсыз деформация* басқышлары деп атаймыз.

Үшинши механикалық характеристика сыпатында *беккемликти*, яғный қыйраўға қарсылықты көрсетемиз. Қыйраў деформацияның ең кейинги стадиясында жүзеге келеди.

Усы келтирилген үш характеристика ҳәр кристал ушын ҳәр қыйлы болады. Мысалы Юнг модули менен өлшенетуғын серпимлилик ҳәр қыйлы кристалларда 10^{10} нан 10^{12} дин/см^2 қа шекем өзгереди. Эластиклик пенен беккемлик те 10^5 тен 10^{12} дин/см^2 қа шекемги мәнислерди қабыл етеди.

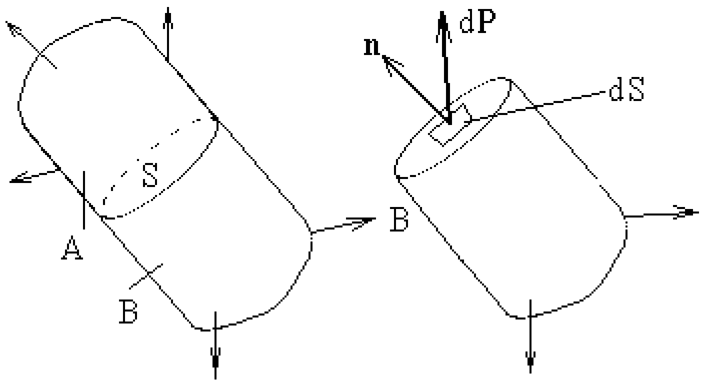
Кристаллар жағдайында серпимли қәсийетлер кристалларды қураўшы бөлекшелерден (атомлар, ионлар, молекулалар), эластиклик қәсийетлер усындай бөлекшелерден туратуғын дизбеклерден (дислокациялардан), ал беккемлик болса сол бөлекшелерден туратуғын бетлерден ғәрезли.

Кристаллардың серпимлилик қәсийетлери. Кернеў. Кристаллардың механикалық қәсийетлери оларды қураўшы көп бөлекшелер (атомлар, ионлар ҳәм молекулалар) арасындағы өз ара тәсир етисиў менен анықланады. Қәлеген типтеги кристалларда бөлекшелер арасындағы өз ара тәсирлесиў күшлери қашықлыққа байланыслы, соның ишинде ийтерисиў күшлери тартысыў күшлерине қарағанда тез кемейеди. Бөлекшелер арасындағы тең салмақлыққа сәйкес келиўши қашықлық ийтерисиў ҳәм тартысыў күшлериниң теңлигине сәйкес келеди. Егер кристал механикалық тәсирге ушыраса усы күшлер арасындағы баланс бузылады, бөлекшелер жылысады, пәнжере параметри өзгереди. Усындай жағдайда пайда болатуғын күшлер денени дәслепки тең салмақлық ҳалға қайтып алып келиўге умтылады. Пәнжерениң параметриниң макроскопиялық өзгериси серпимли деформация түринде, ал бөлекшелер арасындағы өз ара тәсирлесиўдиң өзгериси кернеў түринде көринеди.

Сырттан тәсир болмағанда бөлекшелер арасындағы тәсирлесиўлер өз ара тең болатуғын қатты денени қарайық (17-сүўретте көрсетилген). Сырттан жүк түсирилгенде ишки күшлер арасындағы тәсирлесиў күшлериниң қосындысы нолге тең болмай қалады (сүўретте стрелкалар жәрдеминде көрсетилген). Денени ойымызда сыртқы күшлер S бетине түсетуғын A ҳәм B бөлимлерине бөлемиз. A бөлиминиң B бөлимине тәсири ҳаққында айтқанымызда S бетине түсетуғын күшти нәзерде тутамыз. Бул күшлер ишки күшлер болып табылады. Усы ишки күшлер бет бойынша тең өлшеўли тарқалған деп есаплайық. Егер dS элементар майданына d**P** күши тәсир ететуғын болса (17-б сүўрет) $\mathbf{P}_n = d\mathbf{P}/dS$ векторы dS майданындағы ***кернеў векторы*** деп аталады. Бул аңлатпадағы n индекси сыртқы нормалдың **n** векторы бағытында екенлигин билдиреди.

Егер бетке түсетуғын күшлердиң шамасы усы беттиң бағытынан ҳәм усы беттиң денениң қай жеринде алынғанынан ғәрезсиз болса кернеўди ***бир текли*** кернеў деп атаймыз.

Егер бир текли кернеў бар денениң ишинде X1, X2 ҳәм X3 көшерлерине перпендикуляр қаптал бетлерине ийе бирлик куб бөлип алсақ (18-а сүўрет), усы кубтың ишки бөлимине оның қаптал бетлери арқалы кубты қоршап турған орталық тәрепинен кернеў түсириледи. Ҳәр бир қаптал бетке тәсир етиўши кернеўди үш қураўшыға жиклеймиз.

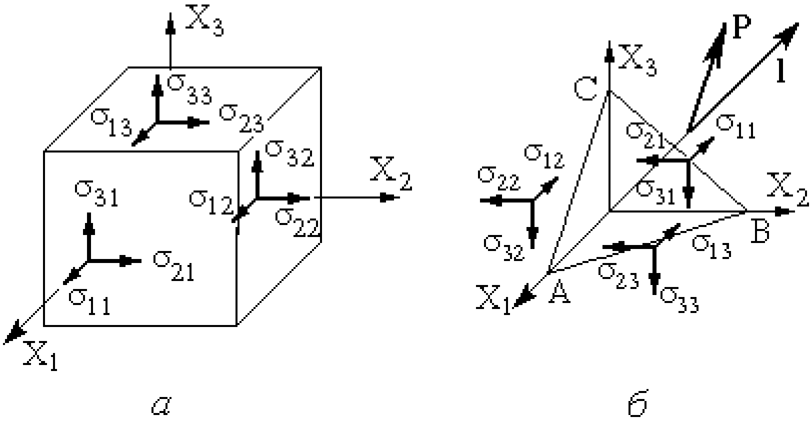


17-сүўрет. Қатты денедеги теңлескен (*а*) ҳәм теңлеспеген (*б*) өз ара тәсир етиў күшлери

X_j көшерине перпендикуляр X_8 көшери бағытында түсиўши кернеўдиң қураўшыларын σ_{ij} арқалы белгилеймиз. σ_{ij} кернеўиниң қураўшылары

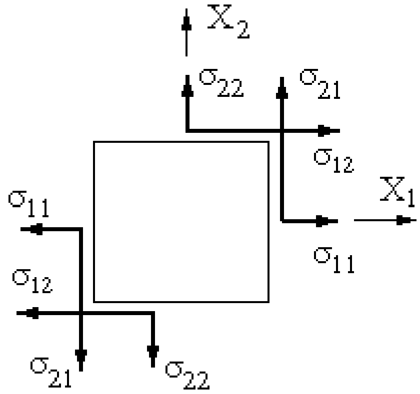
$$\begin{matrix} \sigma_{11} & \sigma_{21} & \sigma_{13} \\ \sigma_{21} & \sigma_{22} & \sigma_{23} \\ \sigma_{31} & \sigma_{32} & \sigma_{33} \end{matrix} \qquad \text{(II8-1)}$$

екинши рангалы поляр тензорды пайда етеди.



18-сүўрет. Бир текли кернеўге ийе денедеги кубтың (а) ҳәм үш координата тегисликлери менен пайда етилген ҳәне ABC қапталына ийе тетраэдрдиң қаптал бетлерине тәсир етиўши күшлер.

Усы жағдайда дәлиллеў ушын сыртқы материал менен тең салмақлықта турған тетраэдр формасындағы көлем элементин қараймыз (18-б сүўрет). Мейли **1** векторына перпендикуляр болған тетраэдрдиң ABC бети $P(P_1, P_2, P_3)$ кернеўлериниң тәсирниде болсын. ABC арқалы берилетуғын күштиң шамасы **P** векторын усы ABC майданына көбейткенге тең. ABC бетине тәсир ететуғын күштиң X_1 көшери бағытындағы қураўшысын былайынша жазамыз:



19-сүўрет. Бир текли кернеўге ийе денедеги X_1 ҳәм X_2 көшерлерине перпендикуляр бирлик кубтың қапталларына тәсир етиўши күшлер (X_3 көшери сүўрет тегислигине перпендикуляр) .

$$P1\, S_{ABC} = \sigma_{11} S_{BOC} + \sigma_{12} S_{AOC} + \sigma_{13} S_{AOB},$$

бул аңлатпадағы S_{ABC}, S_{BOC}, S_{AOC} ҳәм S_{AOB} лар тетраэдр қатпалларының бетлери. Теңликтиң еки тәрепин де ABC үш мүйешлигиниң майданына бөлсек

$$P1 = \sigma_{11} 1_1 + \sigma_{12} 1_2 + \sigma_{13} 1_3$$

аңлатпасын аламыз. Тап усындай жоллар менен

$$P_2 = \sigma_{21}\, 1_1 + \sigma_{22}\, 1_2 + \sigma_{23}\, 1_3,\ P_3 = \sigma_{31}\, 1_1 + \sigma_{32}\, 1_2 + \sigma_{33}\, 1_3$$

теңликлерин аламыз. Бул аңлатпалардағы 1_1, 1_2 ҳәм 1_3 лер **1** векторының үш координата көшерлери бағытындағы қураўшылары. Ең ақырында былай жазамыз:

$$P_i = \sigma_{ij} 1_j. \qquad (\text{II8-2})$$

Жоқарыда көрсетилгениндей, поляр векторлардың қураўшыларын байланыстыратуғын коэффициентлер 2-рангалы поляр тензорды пайда етеди. Демек кернеўдиң σ_{ij} қураўшылары 2-рангалы поляр тензорды пайда етеди.

σ_{11}, σ_{22}, σ_{33} қураўшылары нормал кернеўлер деп аталады, себеби бул кернеўлер сәйкес майданларға перпендикуляр бағытта тәсир етеди. Қалған қураўшылар майданлар бойынша тәсир еткенликтен урынба кернеўлер деп аталады. 19-сүўретте көрсетилгениндей урынба кернеўлер барлық ўақытта бир бирине қарама-қарсы бағытланған қос күшлерди пайда етеди. Тең салмақлықтың услап турылыўы ушын бул қос көшлер ушын

$$\sigma_{ij} = \sigma_{j8} \qquad (\text{II8-3})$$

шәртиниң орынланыўы керек. Сонлықтан (II8-1) тензоры симметриялық тензор болып табылады ҳәм оны бас көшерлерге келтириў мүмкин. Бундай жағдайда жылжытыў (урынба) қураўшылары жоғалады ҳәм (II8-1) былайынша жазылады:

$$\begin{Vmatrix} \sigma_1 & 0 & 0 \\ 0 & \sigma_2 & 0 \\ 0 & 0 & \sigma_3 \end{Vmatrix}. \qquad (\text{II8-4})$$

Бул аңлатпадағы σ_1, σ_2, σ_3 лерди созыўдың ямаса қысыўдың ***бас кернеўлери*** деп аталады. Тензордың усы түри әдетте көлемлик кернеўлик аўҳалға сәйкес келеди (үш көшерли қысыў ямаса созыў). Бир көшерли кернеўде тензор

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

ал еки көшерли кернеўде

$$\begin{Vmatrix} \sigma_1 & 0 & 0 \\ 0 & \sigma_2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{Vmatrix}$$

түрине ийе болады.

Қәлеген 2-рангалы симметриялық тензор сыяқлы σ_{ij} тензорын да орайы координата басында жайласқан ($x_1 = x_2 = x_3 = 0$) екинши тәртипли характеристикалық бет түринде геометриялық жақтан интерпретациялаў мүмкин. Улыўма жағдайда бул бет

$$\sigma_{ij}x_8x_j = 1 \qquad (\text{II8-5})$$

түриндеги теңлеме жәрдеминде тәрипленеди.

Бас көшерлерге өткенде кернеў бати теңлемеси былайынша жазылады:

$$\sigma_1 x_1^2 + \sigma_2 x_2^2 + \sigma_3 x_3^2 = 1. \qquad (\text{II8-6})$$

Үш көшерли созыў жағдайында бас кернеўлер оң мәниске ийе болады ҳәм көшерлери $1/\sqrt{\sigma_1}$, $1/\sqrt{\sigma_2}$ ҳәм $1/\sqrt{\sigma_3}$ ке тең үш көшерли эллипсоид характеристикалық бет болып табылады. Үш көшерли қысыўға (барлық σ_8 лер терең мәниске ийе болған жағдай) характеристикалық бетке жормал эллипсоид сәйкес келеди.

Егер еки бас кернеў оң, үшиншиси терис мәниске ийе болса (II8-6)-теңлеме бир жолақлы гиперболоидты, ал екеўи терис мәниске ийе болған жағдайда еки жолақлы гиперболоидты тәриплейди. Егер бас кернеўлердиң бири нолге тең болса характеристикалық бет цилиндр болып табылады (бас кернеўлердиң белгилерине байланыслы эллиптикалық ямаса гиперболалық болыўы мүмкин). Егер еки бас кернеўлердиң мәнислери нолге тең болса характеристикалық бет жалғыз бас кернеўге перпендикуляр болған өз ара параллел еки тегисликке айланады.

Деформация. Бойлық (созылыў ямаса қысқарыў) ҳәм жылжыў деформациялары деформациялардың тийкарғы түри болып табылады. *Созылыў* (ямаса *қысқарыў*) денениң узынлығының өзгерисиниң оның дәслепки узынлығына қатнасы түринде анықланады:

$$(P'1' - P1)/P1 = \Delta 7_1/\Delta x_1 = e_{11}. \qquad (\text{II8-7})$$

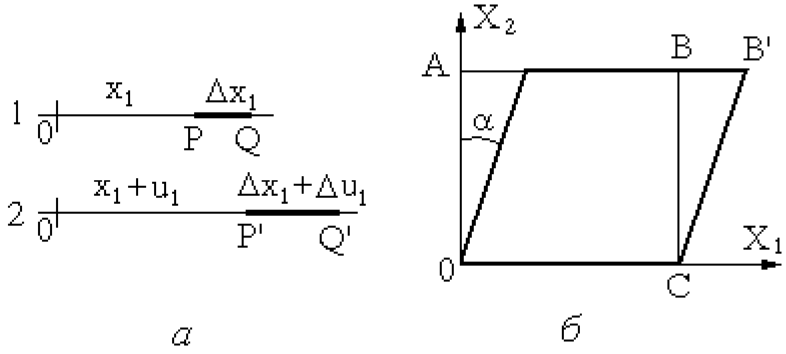
Жылжыў деформациясы деп денениң бир бөлиминиң екинши бөлимине салыстырғандағы базы бир тегислик бойынша салыстырмалы жылжыўына айтамыз. 2-4 сүўретке муўапық жылжыў деформациясы

$$e_{12} = \Delta 7_1/\Delta x_2 = 5g\ \alpha.$$

Солай етип жылжыўды деформацияланыўшы денеде ықтыярлы түрде алынған еки туўры арасындағы мүйештиң өзгериўиниң өлшеми сыпатында алыўға болады екен.

Ноқаттағы деформация

$$e = \lim_{\Delta x \to 0} (\Delta 7/\Delta x) = d7/dx \qquad (\text{II8-8})$$

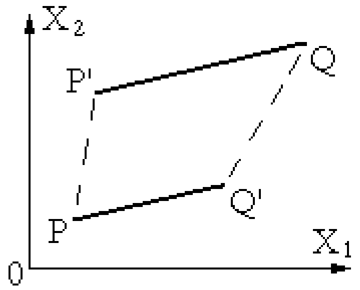


20-сүўрет. Созылыў (а) (1-созылғанға шекем, 2-созылғаннан кейин) ҳәм жылжыў (б) деформациялары.

шамасы менен анықланады. Буннан

$$du = e\,dx.$$

Кесиндиниң тегисликтеги деформациясын қарайық. (X_2X_1) тегислигинде жатқан P1 кесиндиси деформациядан кейин P'1' кесиндисине айланатуғын болсын. P ноқатының координаталары (x_1, x_2), ал P' ноқатынике (x_1+y_1, x_2+y_2). P ноқатының жылжыў векторының қураўшылары **y** = **PP'** = (y_1,y_2). 1 ноқатының координаталары ($x_1+\Delta x_1$, $x_2+\Delta x_2$). 1 ноқатының аўысыў векторының қураўшылары 11' = ($y_1+\Delta y_1$, y_2+y_2). Бундай жағдайда



21-сүўрет. Кесиндиниң деформациясын схемалық сәўлелендириў.

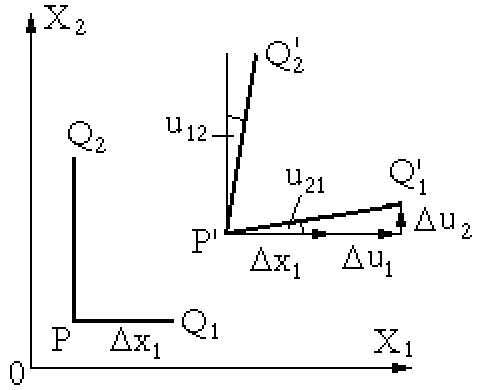
$$\Delta y_1 = \frac{\partial u_1}{\partial x_1}\Delta x_1 + \frac{\partial u_1}{\partial x_2}\Delta x_2. \qquad \text{(II8-9)}$$

$$\Delta y_2 = \frac{\partial u_2}{\partial x_1}\Delta x_1 + \frac{\partial u_2}{\partial x_2}\Delta x_2. \qquad \text{(II8-10)}$$

$\frac{\partial u_1}{\partial x_1} = u_{11}$, $\frac{\partial u_1}{\partial x_2} = u_{12}$, $\frac{\partial u_2}{\partial x_1} = u_{21}$, $\frac{\partial u_2}{\partial x_2} = u_{22}$ деп белгилеп алып (II8-9) бенен (II8-10) ды былайынша улыўма түрде жазамыз:

$$\Delta y_1 = u_{ij}\,\Delta x_j. \quad (j = 1, 2) \qquad (\text{ II8-11})$$

Δy_i менен Δx_j векторлар болып табылады. Сонлықтан оларды байланыстыратуғын u_{ij} коэффициентлери *серпимли дисторсия* тензоры деп аталатуғын 2-рангалы поляр тензорды пайда етеди. Бул коэффициентлердиң физикалық мәнислерин анықлайық.

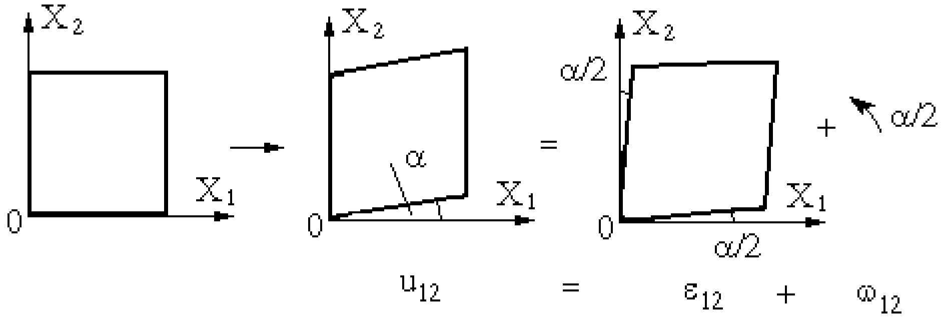


22-сүўрет. u_{11} ҳәм u_{21} коэффициентлериниң физикалық мәнисин түсиндиретуғын сүўрет.

Мейли координата көшерлерине параллел етип алынған 1_2P1_1 сызығы деформацияның салдарынан $1_2'P'1_1'$ сызығына айланатуғын болсын (22-сүўрет). P1 кесиндиси ушын $dx_2 = 0$ деп қабыл етип (II8-9) бенен (II8-10) ды есапқа алып

$$\Delta y_1 = \frac{\partial u_1}{\partial x_1}\Delta x_1 = u_{11}\,\Delta x_1, \qquad (3\text{-}12)$$

$$\Delta y_2 = \frac{\partial u_2}{\partial x_1}\Delta x_1 = u_{21}\,\Delta x_1 \qquad (3\text{-}13)$$



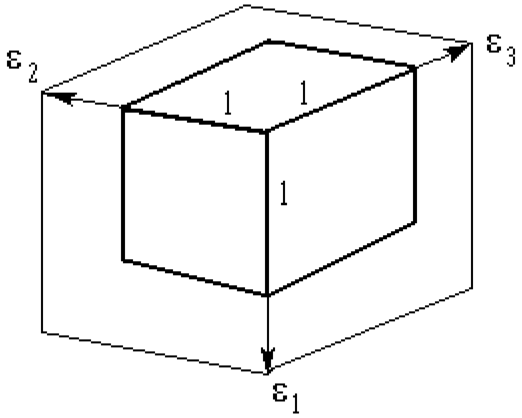
23-сүўрет. (II8-14)-теңлемени геометриялық жақтан интерпретациялаў.

аңлатпаларына ийе боламыз.

22-сүўретте u_{11} диң P1 кесиндисиниң узарыўын өлшейтуғынлығы көринип тур, ал u_{21} бул кесиндиниң саат стрелкасы қозғалысы бағытына қарама-қарсы бағыттағы бурылыўына сәйкес келеди (егер u_{11} ҳәм u_{21} киши болса). Тап сол сыяқлы u_{22} $P1_2$ кесиндисиниң узарыўына, ал u_{12} оның саат стрелкасы бағытындағы бурылыўына сәйкес келеди.

u_{ij} тензоры тек ғана денениң деформациясын тәриплеп ғана қоймай, оның бурылыўын да тәриплейди. Себеби дене u_{ij} тың нолге тең емес мәнислеринде де (яғный бурыўларда) майыспаған болыўы мүмкин.

Егер u_{ij} шамалары денениң көлеминиң барлық бөлимлеринде бирдей мәниске ийе болса сәйкес деформацияны *бир текли деформация* деп атаймыз. Бир текли деформацияда денеде алынған туўры сызық туўры сызық, параллел сызықлар параллел сызықлар болып қалады. Бир бирине параллел болған барлық сызықлар бирдей шамаға қысқарады ямаса узарады. Эллипс эллипске, ал шеңбер болса эллипске айланады.



24-сүўрет. Деформацияның үш бас көшерине параллел болған қабырғаларға ийе бирлик кубтың деформациясы.

Серпимли дисторсиялар тензоры u_{ij} ты деформация тензорына ҳәм пәнжерениң бурылыўына бөлемиз. Усы мақсетте тензорды симметриялы ҳәм антисимметриялы тензорлардың қосындысы түринде жазамыз:

$$u_{ij} = \frac{1}{2}(u_{ij} - u_{ji}) + \frac{1}{2}(u_{ij} + u_{ji}). \qquad \text{(II8-14)}$$

Бундай жағдайда $\omega_{ij} = \frac{1}{2}(u_{ij} - u_{ji})$ пәнжерениң бурылыўын, ал $\varepsilon_{ij} = \frac{1}{2}(u_{ij} + 7_{ji})$ болса таза серпимли деформацияны тәриплейди.

23-сүўретте (II8-14)-теңлемениң геометриялық интерпретациясы берилген.

ω_{ij} тензоры бурыўлар тензоры деп аталады ҳәм төмендеги түрге ийе болады:

$$\omega_{ij} = \begin{Vmatrix} 0 & -\omega_{21} & \omega_{31} \\ \omega_{12} & 0 & -\omega_{32} \\ -\omega_{13} & \omega_{23} & 0 \end{Vmatrix}. \qquad (\text{II8-15})$$

Бул тензор бурыўлардың аксиал векторынтабыўға мүмкиншилик береди:

$$\omega_8 = \omega_{ij} x_j.$$

Поляр тензор ε_{ij} *деформация тензоры* деп аталады. Бул тензор симметриялы болғанлықтан оны бас көшерлерге келтириў мүмкин:

$$\begin{Vmatrix} \varepsilon_{11} & \varepsilon_{12} & \varepsilon_{13} \\ \varepsilon_{21} & \varepsilon_{22} & \varepsilon_{23} \\ \varepsilon_{31} & \varepsilon_{32} & \varepsilon_{33} \end{Vmatrix} \rightarrow \begin{Vmatrix} \varepsilon_1 & 0 & 0 \\ 0 & \varepsilon_2 & 0 \\ 0 & 0 & \varepsilon_3 \end{Vmatrix}. \qquad (\text{II8-16})$$

Бул аңлатпадағы ε_{11}, ε_{22}, ε_{33} лер қысыў ямаса созыў деформациялары қураўшылары, қаолған ε_{ij} лар жылжыў деформациясы қураўшылары, ε_1, ε_2, ε_3 лер *бас деформациялар* (мәниси кейинги сүўретте көрсетилген).

Деформацяның характеристикалық бети ҳәм эллипсоиды. Серпимли деформацяның характеристикалық бетиниң теңлемеси төмендегидей түрге ийе болады:

$$\varepsilon_{ij} x_i x_j = 1. \qquad (\text{II8-17})$$

Бас көшерлерге өткенде бул теңлеме

$$\varepsilon_1 x_1^2 + \varepsilon_2 x_2^2 + \varepsilon_3 x_3^2 = 1 \qquad (\text{II8-18})$$

түрине ийе болады.

ε_1, ε_2, ε_3 бас деформациялары оң ҳәм терис мәнислерге ийе болыўы мүмкин. Кернеўлердиң характеристикалық бети сыяқлы деформация бети де ҳақыйқый ямаса жормал эллипс, гиперболоид, цилиндр ямаса еки өз ара параллел тегислик болыўы мүмкин.

Үш өлшемли бир текли дененың серпимли деформациясын бирлик сфераның деформациясы жәрдеминде тәриплегенде ***деформация эллипсоиды*** түсиниги киритиледи. Бул сфераның теңлемеси

$$x_1^2 + x_2^2 + x_3^2 = 1$$

түринде болады.

Деформация нәтийжесинде белгиленип алынған кубтың бас көшерлерге параллел болған қабырғалары

$$x_1' = x_1(1+\varepsilon_1),\ x_2' = x_2(1+\varepsilon_2),\ x_3' = x_3(1+\varepsilon_3) \qquad (\text{II8-19})$$

мәнислерине ийе. Сонлықтан бул мәнислерди сфераның теңлемесине қойып төмендегидей теңлеме аламыз:

$$\frac{x'^2_1}{(1+\varepsilon_1)^2} + \frac{x'^2_2}{(1+\varepsilon_2)^2} + \frac{x'^2_3}{(1+\varepsilon_3)^2} = 1. \qquad (\text{II8-20})$$

(II8-20) бети барлық ўақытта да эллипсоид болып табылады ҳәм деформация эллипсоиды деп аталады. Бул теңлемеден бир көшерли созыў да деформация эллипсоидының бир көшерлик болатуынлығы көринип тур. Тегис деформацияда (бас деформациялардың биргеўи нолге тең) ҳәм бир көшерли деформацияның дара түри болған жылжыў деформациясында эллипсоид еки көшерли. Бул эллипсоидтың кесе кесими жылжыў тегислигине параллел. Деформацияның үш көшерли эллипсоиды көлемлик-кернеўли ҳалға сәйкес келеди.

Деформация эллипсоидын ҳеш ўақытта да деформацияның характеристикалық бети менен алжыстырыўға болмайды.

Кристаллар ушын Гук нызамы. Қатты денениң ең әпиўайы деформациясы болған бир көшерли серпимли деформациядағы деформация (ε) менен кернеў (σ) арасындағы туўры пропорционаллық байланыс Р.Гук (Hooke) тәрепинен 1660-жылы ашылды (Гук нызамы):

$$\varepsilon = s\sigma. \qquad (\text{II8-21})$$

Бул аңлатпада s серпимли беригишлик коэффициенти ямаса әмиўайы берилгишлик деп аталады. Гук нызамын басқа ша түрде де жазыўға болады:

$$\sigma = c\varepsilon. \qquad (\text{II8-22})$$

Бул аңлатпадағы c серпимли қаттылық ямаса қаттылық деп аталады.

Кристаллар ушын бул аңлатпалар әдеўир қурамаласады. Деформация менен кернеўдиң 2-рангалы тензорлар екенлигин есапқа алып бул жағдайда улыўма түрде былай жаза аламыз:

$$\varepsilon_{ij} = s_{ijk1}\,\sigma_{k1} \qquad (\text{II8-23})$$

σ_{ijk1} кристалдың серпимли берилгишлик коэффициентлери. (II8-23) тоғыз теңлемениң жыйнағы болып табылады. Бул теңлемелердиң оң тәрепи тоғыз ағзадан турады. Сонлықтан s_{ijk1} коэффицинетлериниң улыўма саны 81 ге тең.

(II8-22) ден

$$\sigma_{k1} = c_{k1mn}\,\varepsilon_{mn} \qquad (\text{II8-24})$$

c_{k1mn} кристалдың серпимли қаттылық коэффициентлери. Бул коэффициентлердиң саны да улыўма жағдайда 81 ге тең.

2-рангалы еки поляр тензорды байланыстыратуғын коэффициентлер 4-рангалы тензорды пайда етилетуғынлығы жоқарыда (8 бапта) айтылған еди. Сонлықтан 81 s_{ijk1} коэффициентлери, 81 c_{k1mn} коэффициентлери 4-рангалы поляр тензорды пайда етеди. $s_{ij} = s_{j8}$ ҳәм $c_{ij} = c_{j8}$ болғанлықтан

$$s_{ijk1} = s_{jik1} = s_{ij1k} = s_{k1ij} \text{ ҳәм } c_{k1mn} = c_{1kmn} = c_{mnk1}.$$

Сонлықтан 81 серпимлилик коэффициентлерининиң орнына тек 21 коэффициент қалады.

Серпимлилик коэффициентлерин матрицалық белгилеўлер. (II8-23) ҳәм (II8-24) теги s_{ijk1} ҳәм c_{k1mn} коэффициентлерин төрт индекстиң орнына екеўин жазып белгилеў әдеўир оңай. Нәтийжеде индекслерди жазыўдағы төмендегидей сәйкесликли аламыз:

Тензорлық белгилеў	11	22	33	23	32	31	13	12	21
Матрицалық белгилеў	1	2	3	4		5		6	

Соның менен бирге төмендегидей тәртипте 2 ҳәм 4 көбейтиўшилерин киргиземиз: m ҳәм n 1, 2 ямаса 3 ке тең болғанда $s_{ijk1} = s_{mn}$; егер тек m ямаса тек n 4, 5 ямаса 6 ға тең болса $2s_{ijk1} = s_{mn}$; егер бир ўақытта m де, n де 4, 5 ямаса 6 ға тең болса $4s_{ijk1} = s_{mn}$. Бундай жағдайда, мысалы,

$$\varepsilon_{11} = s_{1111}\sigma_{11} + s_{1112}\sigma_{12} + s_{1113}\sigma_{13} + s_{1121}\sigma_{21} + s_{1122}\sigma_{22} + s_{1123}\sigma_{23} + s_{1131}\sigma_{31} + s_{1132}\sigma_{32} + s_{1133}\sigma_{33}$$

теңлигиниң орнына

$$\varepsilon_1 = s_{11}\sigma_1 + s_{12}\sigma_2 + s_{13}\sigma_3 + s_{14}\sigma_4 + s_{15}\sigma_5 + s_{16}\sigma_6$$

ямаса

$$\varepsilon_1 = s_{1j}\sigma_j \qquad \text{(II8-25)}$$

деп жаза аламыз. Демек (II8-23) теги барлық тоғыз теңлеме қысқаша былай жазылады:

$$\varepsilon_8 = s_{ij}\sigma_j. \quad (8, j = 1, 2, ..., 6). \qquad (3\text{-}26)$$

Сол сыяқлы (II8-24) ти былай жазамыз:

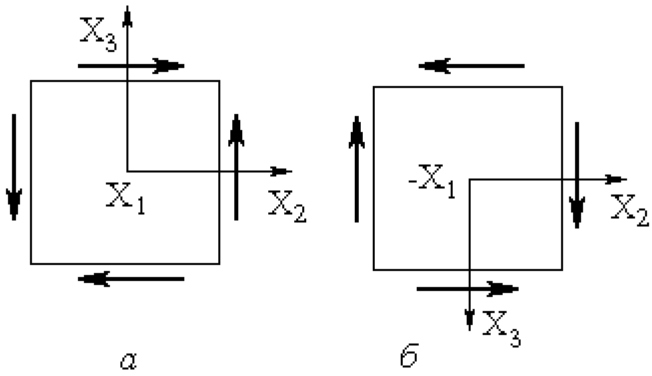
$$\sigma_j = c_{jk}\varepsilon_k \quad (j, k = 1, 2, ... 6). \qquad \text{(II8-27)}$$

Матрицалық жазыўда серпимли берилгишлик ҳәм серпимли қаттылық коэффициентлери саны 36 ға тең ҳәм $s_{ij} = s_{ji}$ ҳәм $c_{ij} = c_{ji}$ болғанлықтан улыўма жағдайда ғәрезсиз коэффициентлер саны 21 ге тең болып қалады.

8-санлы лекция. Кристалдың симметриясының серпимлилик коэффициентлери тензорыдың түрине тәсири. Жылжыў менен болатуғын эластик деформация. Жылжыў элементлери

Кристалдың симметриясына байланыслы s_{ij} ҳәм c_{ij} коэффициентлери нолге ямаса бир бирине тең болыўы мүмкин, ал нолге тең емес ғәрезсиз коэффициентлеридиң саны кемейеди.

Мысалда 222 класына кириўши ромбалық кристалды көрейик. ε_{33} деформациясын ҳәм σ_{23} кернеўин байланыстырыўшы s_{34} берилгишлигине симметрияның тәсирин көрейик. ε_{33} деформациясы X_3 бағытындағы узыраўға сәйкес келеди (сүўретте көрсетилген). Кристалды тутасы менен X_2 көшерине параллел болған екинши тәртипли симметрия көшери дөгерегинде бурайық. X_3 бағыттында кристалдың өзи ҳәм оның узарыўы турақлы болып қалады, ал түсирилген күшлер бағытты қарама-қарсы бағытқа өзгертеди. Бул тек $s_{34} = 0$ болғанда орынланады. Усындай жоллар менен ҳәрқандай кристаллардағы симметрияның барлық s_{ij} ҳәм c_{jk} лаға тәсирин үйренип сәйкес матрицалардың түрин аламыз.



25-сүўрет 222 классы ушын s_{34} берилгишлигиниң нолге тең екенлигин түсиндиретуғын сүўрет.

Кристаллардың серпимлилиги коэффициентлери тензорларының ҳәм бир текли орталықлардың симметрия топарлары саны онға тең. Усы симметрия топарлары арасында еки шеклик топары болған ∞/mmm ҳәм ∞/∞mm лер де бар.

Бириншисине алтыншы ҳәм үшинши симметрия көшерлеринен басқа бул көшерлерге перпендикуляр болған симметрия тегисликлери де бар гексагонал ҳәм тригонал кристаллардың серпимлилик коэффицинетлери киреди. Серпимлилик қәсийетлерине қатнасы бойынша бундай кристаллар бас көшерге перпендикуляр болған тегисликте жатқан барлық бағытларды бирдей болады. (бундай орталық көлденең-изотроп орталық деп аталады).

$\infty/\infty mm$ классы изотроп дененин серпимлилик қәсийетлериниң симметриясын тәриплейди. Бундай жағдайда изотроп дененин серпимлилик қәсийетлери еки серпимлилик коэффициенти s_{11} ҳәм s_{12} ямаса c_{11} ҳәм c_{12} тәриплейди. Бул коэффициентлерди териялық механикадан белгили болған Лямэ коэффициентлери λ ҳәм μ арқалы

$$\lambda = c_{12},\ \mu = c_{44} = 1/s_{44},\ \lambda + 2\mu = c_{11}$$

ямаса Юнг модули $E = \sigma/\varepsilon$, жылжыў модули G ҳәм Пуассон коэффициенти $\nu = -\varepsilon'/\varepsilon$ (ε ҳәм ε' деформацияланыўшы орталыққа салыстырғандағы бойлық ҳәм көлденең деформациялар) арқалы аңлатқан қолай болады:

$$s_{11} = 1/E,\ s_{12} = \nu/E,\ 2(s_{11} - s_{12}) = 1/G,\ \ G = E/2(1+\nu).$$

Буннан басқа $\lambda = 2G\nu/(1-2\nu)$, $\mu = G$.

Изотроп орталықта $c_{44} = \frac{1}{2}(c_{11} - c_{12})$ ҳәм $s_{44} = 2(s_{11} - s_{12})$.

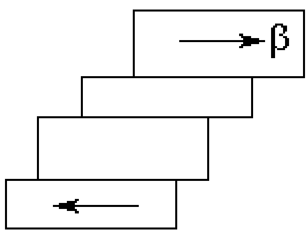
Кристаллардың берилгишлик s_{ij} ҳәм қаттылық c_{ij} коэффициентлерин техникалық характеристикалар болған Юнг модули, жылжыў модули ҳәм Пуассон коэффициенти менен байланыстырыў мүмкин:

$$E = 1/s_{11},\ G = \frac{1}{2}(c_{11} - c_{12}),\qquad \nu = s_{12}/s_{11}.$$

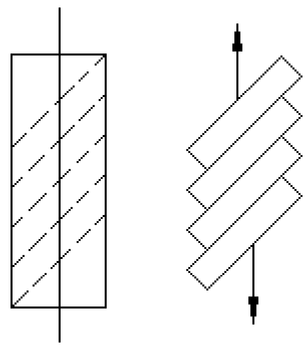
Жылжыў менен болатуғын эластик деформация. Кристаллардағы серпимли деформация (яғный сыртқы күшлер алып кетилгеннен кейин толық жоғалатуғын деформация) әдетте проценнтиң оннан бир бөлегинен артпайды. Айырым кристалларда (сабақ тәризли ямаса дислокациясыз кристалларда) серпимли деформацияның шамасы 3-4 процентке жетеди. Үлкен деформацияларда (демек бирқанша ўақыт даўамында тәсир ететуғын үлкен мәнисли кернеўлерде) кристал "аға" баслайды. Усының менен бирге сырттан тәсир ететуғын күшлер алып кетилгеннен соң қалдық деформация сақланып қалады. Сырттағы тәсир алып кетилгеннен кейин сақланатуғын деформация ***эластик*** (пластик) деформация деп аталады. Ҳәр қандай кристаллардағы эластик деформацияға қәбилетлилик ҳәр қыйлы. Айырым кристалларда эластик деформация түсирилген киши кернеўлерде (бир миллиметр квадратына граммлар), ал айырым кристалларда әдеўир үлкен кернеўлерде (бир миллиметр квадратына килограммлар) басланады. Эластик деформацяиның шамасы проценттиң жүзден бир бөлиминен бир неше процентлерге шекем жетиўи мүмкин. Қыйраўға шекем тек аз ғана деформацияланатуғын кристаллар ***морт*** кристаллар деп аталады. Кристаллардың эластиклигин (пластиклигин) ҳәр қандай тәсирлер жәрдеминде үлкейтиў мүмкин. Мысалы корунд әдеттеги кернеўлерде жүдә морт болса да 1000^0C да ямаса комната температурасында 25 000 атм басымда әдеўир “ағады” (деформацияланады).

Нормал жағдайлардағы (әдеттеги жағдайлардағы басым менен температура нәзерде тутылған) кристаллардаң эластик деформациясы ***жылжыў арқалы*** әмелге асады. Жылжыў деп кристалдың бир бөлиминиң екинши бөлимине салыстырғандағы көлем өзгермей қалатуғын жағдайдағы жылжыўын айтамыз. Әдетте жылжыў белгили бир кристаллографиялық тегисликлер бойынша белгили бир кристаллографиялық бағытларда әмелге асады.

26-сүўретте урынба кернеў тәсиринде жылжыўдың модели келтирилген. Бул деформацияда жылжыў бағыты β ҳәрипи менен белгиленген. Кристалдың бөлимлери бир бирине салыстырғанда кристаллық пәнжерениң трансляция векторының шамасына пүтин сан еселенген аралықларға жылжыйды. Сонлықтан жылжыўды әдетте трансляциялық жылжыў деп атайды. Қолайлы болған жағдайларда жылжыў кристалдың барлық кесе-кесими бойынша әмелге асады ҳәм кристалдың сыртқы бетинде сәйкес жолақлар пайда болады.



26-сүўрет. Куб тәризли кристаллардағы жылжыў кернеўиниң тәсириниң салдарынан болатуғын жылдыў модели



27-сүўрет. Созыўда жылжыў тегисликлериниң аўҳалының өзгеретуғынлығын көрсетиўши сүўрет.

Сол сүўретте көрсетилген жағдайда жылдыўдың нәтийжеминде кристалдың тек сыртқы формасы өзгереди, ал оның бағытлары менен көлеми турақлы болып қалады. Бирақ, мысалы қысыўшы ямаса созыўшы кернеўлердиң тәсиринде жылжыўшы қатламлар күш тәсир етиў бағытына салыстырғанда бурыла баслайды (усы бағытты деформация көшери деп атайды). Созыў жағдайында қатламлардың бетиниң бағыты деформация көшерине қарай жақынлайды (27-сүўрет). Ал кристалды қысқанымызда қарама-қарсы бағыттағы бурылыўларды бақлаймыз.

Жылжыў нәтийжесинде жылжыў деформациясы жүреди. Егер координата басынан 4 қашықлығында турған Р ноқаты **n** бирлик векторына перпендикуляр болған **β** бирлик векторы менен тәрипленетуғын жылжыў тегислигинде қозғалатуғын болса ноқаттың жаңа орты O’ координата басынан R’ қашықлығында болады:

$$PP' = \mathbf{R}' - \mathbf{R} = \alpha(\mathbf{R}*\mathbf{n})\beta \text{ ямаса } \mathbf{R}' = \mathbf{R} + \alpha(\mathbf{R}*\mathbf{n})\beta. \qquad (\text{II8-28})$$

Бул жерде α аўысыў шамасы (P ноқатының аўысыўы).

Егер α ниң мәниси киши болған жағдайда ықтыярлы (X_1, X_2, X_3) ортогонал координаталар системасындағы ***эластик дисторсия тензоры*** u_{ij}^0 ҳәм ***эластик деформация тензоры*** ε_{ij} коэффициентлерин табыў мүмкин (жоқарыдағы индекс эластик дисторсияны серпимли дисторсия тензорынан айырыў ушын қойылған):

$$u_{11}^0 = \frac{\partial u_1}{\partial x_1} = \frac{\partial}{\partial x_1}(\mathbf{R}' - \mathbf{R}) = \frac{\partial}{\partial x_1}\alpha(\mathbf{R}*\mathbf{n})\beta. \qquad (\text{II8-29})$$

Егер

$$\mathbf{R} = x_{1i} + x_2\,\mathbf{j} + x_3\,\mathbf{k},$$

$$\mathbf{n} = n_{1i} + n_2\,\mathbf{j} + n_3\,\mathbf{k},$$

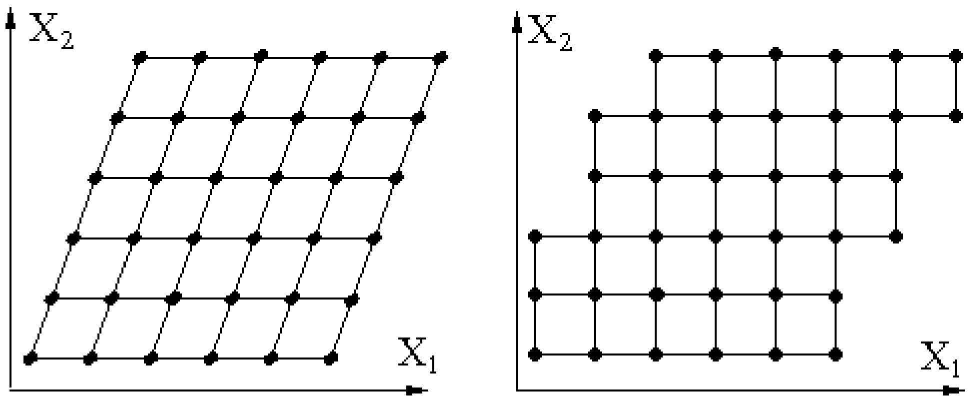
$$\boldsymbol{\beta} = \beta_{1i} + \beta_2\,\mathbf{j} + \beta_3\,\mathbf{k}$$

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

$$u_{11}^0 = \frac{\partial}{\partial x_1}\alpha(\mathbf{R}*\mathbf{n})\beta_1 = \alpha n_1\beta_1.$$

Усындай жоллар менен басқа да u_{ij}^0 лар анықланады. Мысалы

$$u_{23}^0 = \frac{\partial u_2}{\partial x_3} = \frac{\partial}{\partial x_3}\alpha(\mathbf{R}*\mathbf{n})\beta_2 = \alpha n_3\beta_2.$$



28-сүўрет. Атомлық тордың серпимли (дәслепки сүўрет) ҳәм эластик дисторсиялары.

Жуўмақлап былай жаза аламыз:

$$u_{ij}^{0} = \alpha \begin{Vmatrix} n_1\beta_1 & n_2\beta_1 & n_3\beta_1 \\ n_1\beta_2 & n_2\beta_2 & n_3\beta_2 \\ n_1\beta_3 & n_2\beta_3 & n_3\beta_3 \end{Vmatrix} \qquad (\text{II8-30})$$

n менен β векторларының ортогоналлығынан

$$\alpha(n_1\beta_1 + n_2\beta_2 + n_3\beta_3) = u_{11}^{0} + u_{22}^{0} + u_{33}^{0} = 0.$$

Бул жылжыў деформациясындағы көлемниң сақланатуғынлығын билдиреди.

Эластик дисторсия серпимли дисторсиядан үлкен айырмаға ийе. Серпимли дисторсияда атомлар арасындағы аралықлар өзгереди, усының нәтийжесинде серпимли деформациялар ҳәм пәнжерениң бурылыўлары пайда болады. Ал эластик дисторсияда атомлар өзиниң дәслепки жайласқан тең салмақлық орынларындағыдай тең салмақлық орынларға көшеди, атомлар арасындағы аралықлар өзгермей турақлы болып қалады, жылжыў трансляциялық түрге ийе болғанлықтан пәнжерениң бурылыўы бақланбайды ҳәм тек ғана кристалдың сыртқы формасы өзгериске ушырайды.

u_{ij}^{0} тензорын эластик деформацияны тәриплейтуғын симметриялы $\varepsilon_{ij\Delta}$ ҳәм бурылыўшы тәриплейтуғын ω_{ij} тензорларының қосындысы сыпатында көрсетиў мүмкин:

$$\varepsilon_{ij} = \begin{Vmatrix} \alpha n_1\beta_1 & \frac{\alpha}{2}(n_1\beta_2 + n_2\beta_1) & \frac{\alpha}{2}(n_1\beta_3 + n_3\beta_1) \\ \frac{\alpha}{2}(n_1\beta_2 + n_2\beta_1) & \alpha n_2\beta_2 & \frac{\alpha}{2}(n_3\beta_2 + n_2\beta_3) \\ \frac{\alpha}{2}(n_1\beta_3 + n_3\beta_1) & \frac{\alpha}{2}(n_3\beta_2 + n_2\beta_3) & \alpha n_3\beta_3 \end{Vmatrix} \qquad (\text{II8-31})$$

$$\omega_{ij} = \begin{Vmatrix} 0 & \frac{\alpha}{2}(n_2\beta_1 - n_1\beta_2) & \frac{\alpha}{2}(n_3\beta_1 - n_1\beta_3) \\ -\frac{\alpha}{2}(n_2\beta_1 - n_1\beta_2) & 0 & \frac{\alpha}{2}(n_3\beta_2 - n_2\beta_3) \\ -\frac{\alpha}{2}(n_3\beta_1 - n_1\beta_3) & -\frac{\alpha}{2}(n_3\beta_2 - n_2\beta_3) & 0 \end{Vmatrix} \qquad (\text{II8-32})$$

Егер төмендегидей операция ислесек, бул тензорлардың мәнисин аңсат түсиниўге болады:

X_1 ҳәм X_2 көшерлерин **n** менен β ға параллел етип аламыз. Сонда (II8-30)-(II8-32) тензорлары былай жазылады:

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

Бул тензорлардың геометриялық интерпретациясы 23-сүўретте көрсетилген.

Жылжыў элементлери. Кристалдың қатламларының жылжыўы жүреуғын теги***сли-клер жылжыў тегисликлери,*** ал жылжыўшы қатламлардың қозғалыў бағытлары ***жыл-жыў бағытлары*** деп аталады. Жылжыў тегислиги ҳәм усы тегисликте жатыўшы жылжыў бағыты ***жылжыў системасын*** пайда етеди. Жылжыўдың эквивалент болған тегисликле-ри менен бағытлары ***жылжыў системаларының семейთствосын*** пайда етеди. Мәселен m3m классына кириўши NaC1 типиндеги кристалларда жылжыў {110} тегисликлеринде $<1\bar{1}0>$ бағытында әмелге асады. Усындай типтеги 6 тегисликте жылжыў $<1\bar{1}0>$ бағыты-ның туўры ҳәм кери бағытларында жүреди. Сонлықтан жылжыўдың 12 системасы ҳаққында гәп етиўимиз керек. Бирақ кристалдың орайға қарата симметриялылығының нәтийжесинде туўры ҳәм кери тәрепилерде болатуғын жылжыў бирдей нәтийжелерге алып келеди. Сонлықтан {110) тегисликлери ҳәм $<1\bar{1}0>$ бағытлары семействолары 6 жы-лжыў системасынан турады деп жуўмақ шығарамыз.

Базы бир кристаллардың жылжыў элементлери келеси кестеде келтирилген:

Кристаллар	Класс	Пәнжере типи	Жылжыў системасы
Қапталдан орайласқан кублық кристаллар (A1, Cu ҳәм басқалар)	m3m	F	$<1\bar{1}0>$, {111}
Алмаз пәнжересиндеги кристал-лар: C, Si, Ge	m3m	F	$<1\bar{1}0>$, {111}
Көлемде орайласқан кристаллар: Fe, Nb, Ra, W, Na, K	m3m	I	$<1\bar{1}1>$, {111} (тийкарғы си-стема)
Графит	6/mmm	P	$<11\bar{2}0>$, {0001}
Сфалерит типиндеги кристаллар	$\bar{4}3m$	F	$<11\bar{2}>$, {111}

9-санлы лекция. Кристалдың сызықлы жыллылық кеңейиўи. Жыллылық өткизгишлик.

Кристаллардың сызықлы жыллылық кеңейиўи. Усы ўақытқа шекем биз кристаллардағы атомлардың гармоникалық тербелислерин қарадық. Бул (8V-1)-теңлемениң оң тәрепиндеги сызықлы ағзалар менен шекленгенлигимиздиң нәтийжеси болып табылады. Бул потенциал энергия ушын аңлатпадағы квадратлық ағзаларға сәйкес келеди. Енди еки қоңысылыс атомлар арасындағы ангармонизм орын алғандағы өз-ара тәсирлесиўди қараймыз.

Бундай жағдайларда өз-ара тәсирлесиў күши Ғ, тәсирлесиўге сәйкес келиўши потенциал энергия U атомлардың тең салмақлық аўҳалынган аўысыўы x тың функциясы сыпатында былай жазылады:

$$Ғ = - dU/dx = - 3\beta x + 3\gamma x^2, \qquad (8V\text{-}23)$$

$$U(x) = \beta x^2 - \gamma x^3. \qquad (8V\text{-}24)$$

Бул жерде γ коэффициентин ангармонлық коэффициент деп аталады.

Орташа аўысыў $\bar{x}$ ты Больцман тарқалыўы функциясы жәрдеминде есаплаймыз:

$$\bar{x} = \frac{\int_{-\infty}^{+\infty} x \exp[-U(x)/k_0 T]dx}{\int_{-\infty}^{+\infty} \exp[-U(x)/k_0 T]dx}. \qquad (8V\text{-}25)$$

(8V-24) теги 7(x) ушын жазылған аңлатпаны (8V-25) ке қойыў арқалы интеграл астындағы ағзаларды ангармоникалық ағзаларды киши деп есаплап интеграллаў төменде-ги аңлатпаның алыныўына алып келеди:

$$\bar{x} = 3k_0T\gamma/4\beta^2. \qquad (8V\text{-}26)$$

Бул аңлатпа

$$\alpha = \bar{x}/aT = 3k_0\gamma/4\beta^2 a \qquad (8V\text{-}27)$$

сызықлы жыллылық кеңейиўине сәйкес келеди. Бул жерде a арқалы атомлар арасындағы қашықлық берилген.

(8V-27) ден сызықлы жыллылық кеңейиў коэффициентиниң ангармонизм коэффици-енти γ ға туўры пропорционал екенлиги көринип тур. Егер ангармонизм орын алмаса α = 0.

Квант механикасы тийкарында осциллятор ушын $\bar{x}$ есапланған жағдайда теориялық $\alpha = \alpha(T)$ ғәрезлигин ҳәм $T \to 0$ де α ниң де нолге умтылатуғынлығын алыўға болады.

Жыллылық өткизгишлик. Атомлар тербелислериниң ангармонизми менен байланыслы болған және бир қәсийет жыллылық өткизгишлик болып табылады. Анықлама бойынша жыллылық өткизгишлик коэффициенти К жыллылық ағысы j менен белгили бағыттағы температура градинетин былайынша байланыстырады:

$$j = K\, g\!f\!ad\ T. \qquad (8V\text{-}28)$$

Жыллылық өткизиўшилик коэффициенти ушын Дебай газлердиң кинетикалық теориясы тийкарында төмендегидей аңлатпаны усынды:

$$K = \frac{1}{3} c v \lambda. \qquad (8V\text{-}29)$$

Бул жерде с жыллылық сыйымлылығы, v сестиң тезлиги, λ фонон-фонон аралық өз-ара тәсир етисиўден алынатуғын фононлардың еркин жүриў жолының узынлығы. Гармоникалық жақынласыўда фонон-фононлық өз-ара тәсир етисиўдиң болмайтуғынлығын көрсетиўге болады. Егер (8V-1)-сызықлы теңлемелердиң шешимлери гармоникалық толқынлардың суперпозициясы (бундай толқынлар кристалда бир биринен ғәрезсиз таралады) екенлигине дыққат аўдарсақ бул жағдай түсиникли болады. Бундай жағдайда кристалдың жыллылыққа қарсылығы нолге тең болады ҳәм соған сәйкес $K = \infty$. Сонлықтан жыллылық өткизгишликтиң шекли мәниске ийе болатуғынлығы тек ғана ангармонизмге байланыслы анықланады. Айтылған жағдайдың идеал кристалға тийисли екенлиги түсиникли болыўы керек. Реал кристалларда болса фононлардың пәнжере дефектлеринде шашыраўына байланыслы фононлардың шашыраўының қосымша механизми орын алады. Бул өз гезегинде кристалдың жылылық өткизиўге қарсылығын тәмийилейди.

Дебай $T > T_D$ температураларда $\lambda \sim T^{-1}$ екенлигин көрсетти. Төменги $T < T_D$ температураларда $\lambda \sim \exp(-T_D/2T)$ байланысы орынланады.

10-санлы лекция. Фазалық өтиўлер. Полиморфизм. Биринши ҳәм екинши әўлад фазалық өтиўлери. Атомлар тербелислери ҳәм полиморфлық өтиўлер. Дебай ҳал теңлемеси ҳәм Грюнайзен формуласы. Фазалық өтиўлер ҳәм кристаллар симметриясы

Өзиниң тең салмақлық орны әтирапындағы атомлардың тербелислери кристаллық пәнжерениң ең әҳмийетли фундаменталлық қәсийетлериниң бири болып табылады. Усындай тербелислер менен байланыслы болған қубылыслардың жыйнағын ҳәм оларды тәриплеўди пәнжере динамикасы деп атайды. Пәнжере динамикасы кристаллардың жыллылық қәсийетлери теориясының, кристаллардың электрлик ҳәм магнитлик қәсийетлери менен кристаллардағы жақтылықтың шашыраўы ҳаққындағы ҳәзирги заман көз-карасларының тийкарында турады. Мысалы кристаллық пәнжере атомларының тербелислериндеги ангармонизм жыллылық сыйымлылығы, қысылыўшылық ҳәм сызықлы жыллылық кеңейиўи арасындағы қатнасларды береди (Грюнайзен қатнасы). Атомлардың жыллылық қозғалыслары ҳәм тербелислер ангармонизми фазалық айланыслары ҳаққындағы ҳәзирги заман теориясы тийкарында турады.

Төменде кристаллық пәнжере динамикасының тийкарғы нәтийжелерин қараймыз ҳәм сол тийкарда кристаллардың жыллылық сыйымлылығын, жыллылық өткизгишлигин ҳәм жыллылық кеңейиўин қараймыз.

Атомлардың сызықлы дизбегиниң тербелиси. Жүдә төмен емес температураларда пәнжере атомларының тербелис амплитудалары сол атомларға сәйкес келиўши дебройл толқынының узынлығынан үлкен болады ҳәм бул жағдайлар да атомлардың тербелислери классикалық нызамлықларға бағынады. Соның менен бирге пәнжере атомларының тербелислерин атомлардың сызықлы дизбегиниң тербелислерин қарап шығыў арқалы да түсиниў мүмкин. Кристаллық пәнжерениң бундай моделин пәнжерениң бир өлшеўли модели деп атаймыз. Бундай пәнжере турақлысы деп дизбектеги бирдей болған қоңсылас еки атом арасындағы қашықлық а ны қабыл етемиз. Бир өлкшемли элементар қурыша еки атомды өз ишине алатуғын жағдайды қараймыз. Бундай моделге солтили-галоидлық, бир қанша ярым өткизгишли кристаллар сәйкес келеди.

29-сүўретте еки сорттағы атомлардан туратуғын атомлардың сызықлы дизбеги көрсетилген. Сүўреттеги атомлардың қатарлық санлары m’ ҳәм m’’ арқалы белгиленген. Атомлардың массаларын сәйкес m_1 ҳәм m_2 деп белгилейик. m’, m’’ ҳәм m’, m’’-1 қоңсылар жуплары ушын серпимлилик коэффициентлерин β_1 ҳәм β_2 арқалы белгилейик. Егер серпимли күшлер тек қоңсылас атомлар арасында тәсир етеди деп есапласақ, атомлардың қозғалыс теңлемелери төмендегидей түрге ийе болады:

$$m_1 \ddot{m}_m' = -\beta_1(u_m' - u_m'') - \beta_2(u_m' - u_{m-1}''),$$

$$m_2 \ddot{m}_m'' = -\beta_1(u_m'' - u_m') - \beta_2(u_m'' - u_{m+1}'). \qquad (8V\text{-}1)$$

Бул аңлатпада қатар санлары m’ ҳәм m’’ болған атомлардың координаталары сәйкес u_m’ ҳәм u_m’’ арқалы белгиленген. (8V-1) диң шешимин жуўырыўшы толқынлар түринде излеймиз:

$$u_m' = A'\exp[i(kam - \omega t)], \quad u_m'' = A''\exp[i(kam - \omega t)]. \qquad (8V\text{-}2)$$

k атомның толқын векторының модули (k = 2π/—), A’ ҳəм A’’ амплитудалары m ге ғəрезли емес, радиус-вектордың модули орнына am ағзасы жазылған (a пəнжерениң тийкарғы векторы). (8V-2) ни (8V-1) ге қойып, exp[i(kam - ωt)] көбейтиўшилерине қысқартып A’ ҳəм A’’ амплитудалары ушын сызықлы теңлемелер системасын аламыз:

$$[\omega^2 - \frac{\beta_1 + \beta_2}{m_1}]A' + [\frac{\beta_1 + \beta_2 \exp(-iak)}{m_1}]A'' = 0,$$

$$[\frac{\beta_1 + \beta_2 \exp(-iak)}{m_2}]A' + [\omega^2 - \frac{\beta_1 + \beta_2}{m_2}]A'' = 0. \qquad (8V\text{-}3)$$

(8V-3)-система детерминанты нолге тең болған жағдайда A’ пенен A’’ ушын нолге тең емес шешимлер береди. Бул шəрт өз гезегинде ω^2 ушын теңлемениң алыныўына алып келеди. Бул теңлемени төмендегидей шəртлер қанаатландырады:

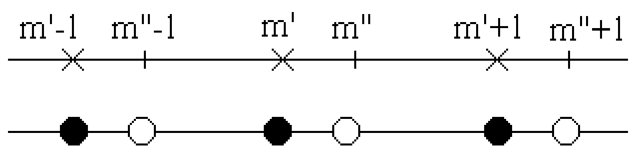
$$\omega_{ак}^2 = \frac{1}{2}\omega_0^2\{1 - \sqrt{1-\gamma^2 \sin^2\frac{ak}{2}}\},$$

$$\omega_{оп}^2 = \frac{1}{2}\omega_0^2\{1 + \sqrt{1-\gamma^2 \sin^2\frac{ak}{2}}\}. \qquad (8V\text{-}4)$$

Бул формулаларда

$$\omega_0^2 = \frac{(\beta_1+\beta_2)(m_1+m_2)}{m_1 m_2}, \qquad \gamma^2 = 16\,\frac{\beta_1\beta_2}{(\beta_1+\beta_2)^2}\,\frac{m_1 m_2}{(m_1+m_2)^2}. \qquad (8V\text{-}5)$$

(8V-2) менен (8V-4) тиң шешимлери атомлардың тербелислериниң жуўырыўшы монохроматик толқынның жəрдеминде тəрипленетуғынлығын көрсетеди (егер бул тербелислердиң жийиликлери дисперсиясының ω = ω(k) акустикалық $\omega = \omega_{ак}(k)$ ҳəм оптикалық $\omega = \omega_{оп}(k)$ деп аталатуғын тармақларына сəйкес келетуғын болса). Квант механикасынан белгили болған Блох функциясы сыяқлы (8V-2) ниң де шешимлери кери пəнжере кеңислигинде дəўирли болып табылады. Сонлықтан (8V-2) толқынын Бриллюэнниң биринши зонасы шеклериндеги толқын векторы k ның функциясы деп қарасақ атомлар тербелислериниң барлық өзгешеликлери түсиникли болады.



29-сүўрет. Атомлардың сызықлы дизбегиниң тербелислерин таллаў ушын

ушын дүзилген сызылма

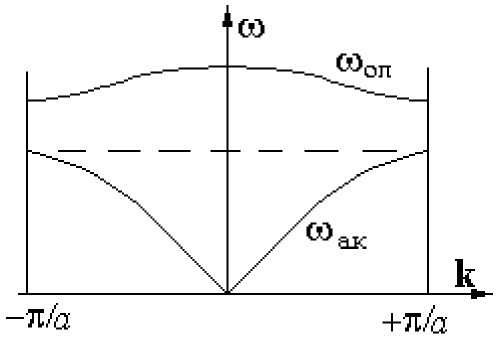
Бриллюэнниң биринши зонасы ушын

$$-\pi/a \le k \le +\pi/a. \qquad (8V\text{-}6)$$

(8V-2) ге квант механикасынан белгили болған Борн-Карман шегаралық шәртин қолланамыз:

$$ka_i = \frac{2\pi}{N} g_i$$

Бул шегаралық шәрт бойынша радиус-векторды туўры пәнжерениң N дана қутышасына жылыстырып қойғанда идеал кристалдағы электронның толқын функциясы өзгермей қалады. Соның менен бирге бул шәрт бойынша Бриллюэн зонасы шеклеринде толқын векторының проекциясы тек ғана N дана дискрет мәнислерге ийе бола алады. Сонлықтан биз қарап атырған жағдайда N қутышаға ийе болған кристалдың көлеми ушын Бриллюэн зонасы шеклеринде толқын векторы k ның проекциясы N дискрет мәнислерге ийе болады. Толқын векторының мәнислериниң бул дискретлилиги (ямаса квазиүзликсизлиги), соған сәйкес тербелислер жийиликлериниң дискретлилиги кристаллық пәнжерениң өзиниң дискретлилигиниң нәтийжеси болып табылады.



30-сүўрет. Тербелислердиң оптикалық ҳәм акустикалық тармақланының дисперсиясы

30-сүўретте $\gamma^2>0$ ҳәм $m_1 \neq m_2$ болған жағдайлардағы биринши Бриллюэн зонасы шеклеринде (8V-4) бойынша анықланған $\omega_{ак}$ пенен $\omega_{оп}$ лердиң k ға ғәрездилиги көрсетилген (басқа сөз бенен айтқанда бул сүўретте тербелислердиң акустикалық ҳәм оптикалық тармақларының дисперсиясы келтирилген). Киши k лар жағдайында (узын толқынлар) (8V-4) ти киши параметрлер ak<<1 бойынша қатарға жайсақ

$$\omega_{ак} = vk,\ \ v \approx \frac{1}{4}\omega_0\gamma a,\ \ \omega_{оп} \approx \omega_0\left(1 - \frac{\gamma^2 a^2}{32}k^2\right). \qquad (8V\text{-}7)$$

Бул аңлатпада v арқалы сестиң тезлиги белгиленген. Алынған аңлатпалар 30-сүўретте көрсетилгениндей $k \approx 0$ болғанда акустикалық ҳәм оптикалық тармақлардың дисперсиясының хәр қыйлылығына сәйкес келеди [атап айтқанда $\omega_{ак}(0) = 0$, ал $\omega_{оп} \neq 0$]. Бул тербелислердиң басқа бир фундаменталлық қәсийетин анықлаў ушын

$$\frac{u'_m}{u''_m} = \frac{A'}{A''} = \frac{\beta_1 + \beta_2 \exp(-ika)}{(\beta_1 + \beta_2) - m_1\omega^2}.$$

қатнасын таллаймыз. Узын толқынлар ушын ($k \to 0$) (8V-7) ни есапқа алып

$$\left(\frac{u'_m}{u''_m}\right)_{ак} = 1, \qquad \left(\frac{u'_m}{u''_m}\right)_{оп} = -\frac{m_2}{m_1}. \qquad (8V\text{-}8)$$

(8V-8) ден акустикалық тармақ ушын атомлардың бир фазада, ал оптикалық тармақ ушын атомлардың қарама-қарсы фазада тербелиси тән екенлиги көринеди. Усындай нәтийже ең қысқа толқынлар ушын да алынады ($k \to \pi/a$ ямаса $\lambda \to 2a$ болған жағдайда). Егер m_1 хәм m_2 массаларына ийе атомлар зарядлары қарама-қарсы белгиге ийе ионлар болса оптикалық тербелислер элементар қутышалардың дипол моментлериниң өзгериўи менен байланыслы болады. Усы жағдай кристалдың инфрақызыл нурларды қосымша жутыўының орын алыўы менен көринеди. 30-сүўретте Бриллюэн зонасындағы барлық k лар ушын $\omega_{ак} < \omega_{оп}$ екенлиги көринип тур. Демек энергиялық жақтан талланғанда жеткиликли киши температураларда кристалларда акустикалық тербелислер, ал жоқары температураларда оптикалық тербелислер анықлаўшы тербелислерге айланады. Егер $\omega_{ак}^m = \omega_{ак}(\pi/a)$ арқалы акустикалық тербелислердиң шеклик мәнисин белгилесек хәм $T_D = \hbar\omega_{ак}^m/k_0$ характеристикалық температурасын (Дебай температурасы) киргизсек, онда $T \leq T_D$ температураларында оптикалық тербелислердиң үлесин есапқа алмаўға болатуғынлығын көриўге болады.

Тап усындай жоллар менен үш өлшемли кристаллардағы тербелислерди де таллаўға болады.

Қатты денелер физикасында атомлардың тербелислери менен байланыслы болған кристаллық пәнжерениң элементар қозыўлары **фононлар** деп атайды. Фононларды квазиимпульсы $\hbar k$ ға, энергиясы $\hbar\omega_k$ ға тең квазибөлекше сыпатында қараўға болады. Усындай жоллар менен, мысалы, электронлардың пәнжере тербелислерде шашыраўын, жыллылық өткизгишликти таллаў аңсатқа түседи.

Дебай температурасынан киши температураларда ($T<T_D$) фононлар квант статистикасындағы Бозе-Эйнштейн статистикасына бағынады хәм олардың жыллылық тең салмақлығындағы орташа саны Планк функциясы жәрдесинде есапланады:

$$n = \frac{1}{\exp(\hbar\omega / kT) - 1}. \qquad (8V\text{-}10)$$

Бул жерде n арқалы көлеми $(2\pi\hbar)^3$ қа тең болған фазалық кеңислик қутышасындағы энергиясы ħω ға тең болған фононлардың теңсалмақлық саны. dk интервалындағы фазалық кеңислик қутышаларының саны

$$dn_q = \frac{4\pi k^2 dk}{(2\pi\hbar)^3} V. \qquad (8V\text{-}11)$$

V кристалдың көлеми.

$T<T_D$ температураларында тербелислердиң тек акустикалық тармағына кеўил бөлип, (8V-7) бойынша акустикалық жийиликлер барлық k лар ушын сызықлы байланысқан деп есаплап (яғный $k \approx \omega/v$) (8V-11) ди былайынша түрлендиремиз:

$$dn_q = \frac{3V}{2\pi^2 v^3} \omega^2 d\omega. \qquad (8V\text{-}12)$$

Бул жерде 3 үш акустикалық модаға сәйкес келеди (екеўи көлденең, биреўи бойлық), ал v сестиң орташа тезлиги.

Солай етип кристалдың V көлеминдеги фононлардың улыўмалық саны былайынша есапланады:

$$ndn_q = \frac{3V}{2\pi^2 v^3} \frac{\omega^2 d\omega}{\exp(\hbar\omega/kT)-1}. \qquad (8V\text{-}13)$$

Демек V көлеминдеги фононлардың толық энергиясы:

$$E = \frac{3V\hbar}{2\pi^2 v^3} \int_0^{\omega_{ak}^m} \frac{\omega^2 d\omega}{\exp(\hbar\omega/kT)-1}. \qquad (8V\text{-}14)$$

Бул аңлатпада ω_{ak}^m арқалы Бриллюэн зонасының шегарасына сәйкес келиўши акустикалық тербелислердиң максималлық жийилиги белгиленген. ω_{ak}^m ның мәниси үш акустикалық тармақтағы тербелислердиң толық санының $3N^3$ қа теңлигинен анықланады:

$$\frac{3V\hbar}{2\pi^2 v^3} \int_0^{\omega_{ak}^m} \omega^2 d\omega = V*(\omega_{ak}^m)^3/(2\pi^2 v^3) = 3N^3. \qquad (8V\text{-}15)$$

Буннан

$$\omega_{ak}^m = v * \sqrt[3]{\frac{6\pi^2 N^3}{V}} = v * \sqrt[3]{\frac{6\pi^2}{\Omega_0}}. \qquad (8V\text{-}16)$$

Бул формулада Ω_0 арқалы элементар қутышаның көлеми белгиленген. Енди (8V-16) менен (8V-9) ды пайдаланыў арқалы Дебай температурасы ушын төмендегидей аңлатпа аламыз:

$$T_D = v * \sqrt[3]{\frac{6\pi^2}{\Omega_0}} * \hbar * k_0. \qquad (8V\text{-}17)$$

Жоқары температураларда фононлар энергиясы E ге оптикалық тербелислердиң қосатуғын үлеси үлкен болады.

Кристаллардың жыллылық сыйымлылығы. Жоқары температураларда кристаллардың жыллылық сыйымлылығының турақлы екенлиги белгили. Бул жағдай төмендегиден келип шығады:

Газлердиң кинетикалық теориясынан атомның бир координата көшери бағдарындағы кинетикалық энергиясы $\frac{1}{2}kT$ ға тең. Бул бир еркинлик дәрежесине сәйкес келиўши кинетикалық энергия болып табылады. Осциллятордың потенциал энергиясы кинетикалық энергияға тең болғанлықтан бир еркинлик дәрежесине сәйкес келиўши толық энергия $2*\frac{1}{2}kT = kT$ ға тең. Ҳәр бир атом үш еркинлик дәрежесине ийе. Сонлықтан қатты денедеги атомның толық энергиясы $3kT$ ға тең. Ал қатты дене N дана атомнан туратуғын болса, онда оның толық ишки энергиясы $3NkT$ ға тең. Бир моль қатты денениң ишки энергиясы $3N_0kT$ ға тең болып $3N_0kT = 3RT$. Бул жерде N_0 Авагадро саны болып табылады.

Турақлы көлемде жыллылық берилгенде, бул жыллылық толғын менен ишки энергияны көбейтиў ушын жумсалады. Сонлықтан турақлы көлемдеги атомлық жыллылық сыйымлылығы былай анықланады:

$$C_V = \left(\frac{dU}{dT}\right)_V = 34 \approx 6 \text{ кал/К*моль} \approx 25.12 \text{ Дж/К*моль}.$$

Бул формуладан атомлық жыллылық сыйымлылығы барлық кристаллар ушын бирдей, температурадан ғәрезсиз турақлы шама болып табылады. Усындай етип тастыйықлаў ***Дюлонг-Пти нызамы*** деп аталады.

Дебай температурасынан төменги температураларда жыллылық сыйымлылығы температураға ғәрезли ҳәм $T \to 0$ де $c_v \to 0$.

Жыллылық сыйымлылығының температураға ғәрезлилиги кристаллық пәнжере атомларының тербелиси ҳаққындағы көз-қараслар бойынша аңсат түрде алынады. Анықлама бойынша турақлы көлемдеги кристаллық денениң жыллылық сыйымлылығы

$$c_v = \hbar E/\hbar T. \qquad (8V\text{-}18)$$

Бул аңлатпада кристалдың ишки энергиясы E ҳәрипи менен белгиленген. Көрсетпелилик ушын еки температуралық областты қарап өтемиз: биринши Дебай температураларынан киши, ал екиншиси Дебай температураларынан жоқары температуралар областы.

$T<T_D$ болғанда E ушын аңлатпа (8V-14)-формула жәрдеминде бериледи. Интеграл астында турған аңлатпаларды киши параметр $\hbar\omega/k_0T$ бойынша қатарға жайып интеграллasaқ:

$$E \approx \pi^2 V(k_0T)^4/10\hbar^3 v^3 \qquad (19)$$

аңлатпасын аламыз. Буннан (18) тийкарында Дебай формуласына келемиз:

$$c_v = \frac{12\pi^4 k_0}{5}\left(\frac{T}{T_D}\right)^3. \qquad (20)$$

Дебай формуласы (8V-20) 10-50 K температуралар интервалындағы айырым әпиўайы қурылысқа ийе болған кристаллардың (силтили-галоид кристаллар менен көпшилик химиялық элементлер кристалларының) жыллылық сыйымлылығының температуралық ғәрезлилигин қанаатландырарлық дәрежеде тәриплейди. Ал қурамалы дүзилиске ийе кристалларда жыллылық сыйымлылығының температурадан ғәрезлилиги әдеўир қурамалы болып келеди. Бирақ бул жағдайларда да температуралардың абсолют ноли әтирапында жыллылық сыйымлылығының T^3 қа пропорционаллық нызамы сақланады.

Жеткиликли жоқары температураларда ($T>T_D$) оптикалық тербелислердиң энергиясы гармоникалық осцилляторлардың жыйнағы модели бойынша классикалық тийкарда есапланады. Бундай жағдайларда жоқарыда гәп етилген Дюлонг-Пти нызамы келип шығады.

Фазалық өтиўлер. Полиморфизм. Жоқарыда тең салмақлық кристаллық қурылыстың еркин энергияның минимумына сәйкес келетуғынлығы айтылған еди. Бирақ кең температуралар менен басымлар интервалында усындай минимумлардың саны бир неше болыўы мүмкин. Бундай жағдайда ҳәр бир минимумға өзиниң кристаллық қурылысы сәйкес келеди. Бундай қурылысларды полиморфлық модификациялар ҳәмаса формалар, ал бир модификациядан екинши модификацияға өтиў полиморфлық айланыс ямаса фазалық өтиў деп аталады.

Полиморфизм қубылысы 1822-жылы Митчерлих тәрепинен күкирт ҳәм калий карбонаты кристаллары мысалында ашылды. Бул қубылыс кең тарқалған. Мысалы, 13.3^0C дан төменги температураларда қалайының алмаз типиндеги қурылысқа ийекублық модификағиясы турақлы (бул модификация сур қалайы деп аталады). Ал 13.3^0C дан жоқары температураларда көлемди орайласқан тетрагоналлық қурылысқа ийе ақ қалайы турақлы. Қалайының бул еки модификациясының физикалық қәсийетлери пүткиллей ҳәр қыйлы: ақ қалайы эластик қәсийетке ийе, ал сур қалайы морт. Кварц бир неше полиморфлық формаға ийе. Ферромагнетиктиң парамагнетиң ҳалға, металдың аса өткизгишлик ҳалға, параэлектриктиң ферроэлектрик ямаса ферроэластик ҳалларға өтиўи де фазалық өтиўлер болып табылады. Бундай мысалларды көплеп келтириў мүмкин.

Затлардың фазалық қурамы ҳәм фазалардың тең салмақлылығы фазалық диаграмма ямаса ҳал диаграммасы жәрдеминде характерленеди. Фазалық диаграмманың әпиўайы мысалы ретинде p,T диаграмманы көрсетиў мүмкин (p - басым, T - температура). Бул жерде p ҳәм T координаталарына ийе фигаралық ноқат деп аталатуғын ҳәр бир ноқат берилген басым менен температурадағы заттың ҳалын тәриплейди. Диаграммадағы T = T(p) сызығы заттың мүмкин болған (мысалы газ тәризли, суйық, ҳәр қыйлы кристаллық) фазаларын айырып турады. 31-сүўретте күкирттиң фазалық диаграммасы келтирилген. Диаграммадағы ОД сызығы күкирттиң ромбалық ҳәм моноклинлик модификациялары турақлы болған T ҳәм p лардың мәнислерин айырып турады. Басым атмосфералық басымға тең болғанда ромбалық фазадан моноклинлик фазаға өтиў 368.5 K де әмелге асады. Диаграммада басым өскенде фазалық өтиў температурасының да өсетуғынлығы көринип тур.

31-рет. Күкирттиң ҳалының әпиўайыластырылған диаграммасы.

Биринши ҳәм екинши әўлад фазалық өтиўлери. Биринши әўлад фазалық өтиўлери энтропия, көлем ҳ.т.б. термодинамикалық функциялардың секирип өзгериўи менен әмелге асады ҳәм соған сәйкес өтиўдиң жасырын жыллылығына ийе болады. Биринши әўлад фазалық айланыслары ушын T = T(p) сықлы иймекликлер Клаузиус-Клапейрон теңлемесин қанаатландырады:

$$dT/dp = T(\Delta V/1). \qquad (8V\text{-}30)$$

Бул жерде ΔV көлемниң өзгериси, 1 өтиўдиң жасырын жылыўы.

Екинши әўлад фазалық айланысларында термодинамикалық фукнциялардың туўындылары секирмели өзгереди (мысалы жыллылық сыйымлылығы, қысылғышлық ҳәм басқалар секириў менен өзгереди). Екинши әўлад фазалық айланысларында кристаллық структура үзликсиз өзгереди.

Биринши әўлад фазалық айланыслары структуралық механизминен ғәрезсиз зародыш пайда болыў менен байланыслы ҳәм белгили шамадағы температуралық гистерезиске (қыздырғандағы ҳәм салқынлатқандағы фазалық өтиў температураларының бирдей болмаўы) ийе болады. Демек биринши әўлад фазалық өтиўлери артық қыздырыў ҳәм артық салқынлатыў менен байланыслы. Усы жағдайға мысал ретинде биринши әўлад фазалық өтиўи болған кристалланыў процессин көрсетиўге болады.

Екинши әўлад фазалық өтиўлеринде температуралық гистерезис бақланбайды.

Биринши ҳәм екинши әўлад фазалық өтиўлеринде кристалдың симметриясы фазалық өтиў ноқатында (фазалық өтиў температурасында) секириў менен өзгереди. Бирақ биринши ҳәм екинши әўлад фазалық өтиўлеринде симметрияның өзгериўлеринде үлкен парық бар. Екинши әўлад фазалық өтиўлеринде бир фазаның симметриясы екинши фазаның симметриясының подгруппасы (киши группасы), ал усының менен бирге симметриясы жоқары болған фаза жоқары температуралы, ал симметриясы төмен болған фаза төменги температуралы болып табылады.

Биринши әўлад фазалық өтиўлеринде улыўма жағдайларда кристалдың симметриясы ықтыярлы түрде өзгереди ҳәм еки фаза улыўма симметрия элементлерине ийе болмаўы мүмкин.

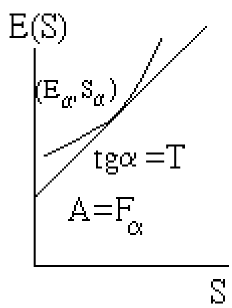
Атомлардың тербелислери ҳәм полиморф өтиўлер. Полиморфлық айланысларды санлық жақтан тәриплеў ушын мәселени термодинамикалық жақтан қараў тәбийий болып табылады. T температурасында кристал энергиясы E_α болған α фазасында болыў итималлылығы Больцман теоремасы бойынша былай есапланады:

$$2_\alpha = \exp -\left(\frac{E_\alpha}{k_0 T}\right) = \exp\left[-\frac{E_\alpha - TS(E_\alpha)}{k_0 T}\right]. \qquad (8V\text{-}31)$$

Бул жерде Ғ$_\alpha$ = E_α - TS_α еркин энергия, S - энтропия.

$$dE_\alpha/dS_\alpha = T \qquad (8V\text{-}32)$$

шәртин қанаатландыратуғын E_α менен S_α ниң мәнислеринде итималлылық 2_α максимал мәнисине тең болады.



32-сүўрет. Кристалдың ишки энергиясы E ниң энтропия S тен ғәрезлилиги.

32-сүўретте кристалдың энергиясы E ниң энтропия S тен ғәрезлилиги көрсетилген. (8V-32) ге сәйкес T температурасында кристалдың тең салмақлық ҳалы координаталары E_α, S_α болған ноқатқа сәйкес келеди. Бул ноқатта E = E(S) иймеклигине түсирилген урынбаның абсцисса көшери менен жасайтуғын мүйешиниң тангенси санлық шамасы бойынша температура T ға тең. Урынба ордината көшери менен координата басынан сан шамасы жағынан еркин энергия $Ғ_\alpha = E_\alpha - TS_\alpha$ ға тең аралықта кесилиседи. Егер кристалда полиморфизм қубылысы орын алатуғын ҳәм соған сәйкес α ҳәм β фазалары бар болса (8V-31) ге сәйкес $T = T_0$ өтиў температурасы $2_\alpha = 2_\beta$ ямаса $Ғ_\alpha = Ғ_\beta$ шәртинен анықланады.

Егер кристалда атомлар бирдей жийиликте тербеледи деп есапласақ оның ишки энергиясы E былай есапланады:

$$E = E' + \hbar\omega n. \qquad (8V\text{-}33)$$

Бул жерде E' температура нолге тең (T = 0) болғандағы кристалдың ишки энергиясы, ал ν фононлардың концентрациясы. S энтропия энергияның конфигурациялық бөлими сыпатыда аңғартылады:

$$S = k_0 \, 1nP. \qquad (8V\text{-}34)$$

P арқалы n дана фононлардың 3N еркинлик дәредеси бойынша бөлистириўлер саны аңлатылған (биринши Бриллюэн зонасы шеклериндеги толқынлық вектордың проекциялар санын N арқалы белгилеймиз). Сонда

$$P = (3N + n - 1)Ё/(3N - 1)ЁnЁ. \qquad (8V\text{-}35)$$

(8V-33), (8V-34) ҳәм (8V-35) лерди еркин энергияның Ғ = E - TS аңлатпасына қойып, еркин энергияның минимум шәрти dҒ/dN = 0 екенлигин есапқа алып, Стирилинг формуласы 1n nЁ $\approx$ n 1n n формуласын пайдалансақ төмендегидей формулаларды аламыз:

$$n = 3N \frac{1}{\exp(\hbar\omega / k_0 T) - 1}, \qquad (8V\text{-}36)$$

$$Ғ = E - TS = E' + 3Nk_0T \, 1n[1 - \exp(-\hbar\omega/k_0T). \qquad (8V\text{-}37)$$

(8V-37) ге муўапық α ҳәм β фазалардың еркин энергиялары T температурасында төмендегидей шәртлерди қанаатландырады:

$$Ғ_\alpha(T) = E'_\alpha + 3Nk_0T \, 1n[1 - \exp(-\hbar\omega_\alpha/k_0T).$$

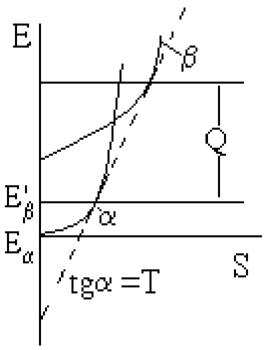
$$Ғ_\beta(T) = E'_\beta + 3Nk_0T \, 1n[1 - \exp(-\hbar\omega_\beta/k_0T). \qquad (8V\text{-}38)$$

Бул еки аңлатпаны бир бирине теңлестирсек

$$\exp\left[-\frac{E'_\alpha - E'_\beta}{3Nk_0T_0}\right] = \frac{1 - \exp(-\hbar\omega_\alpha / k_0T_0)}{1 - \exp(-\hbar\omega_\beta / k_0T_0)}, \qquad (8V\text{-}39)$$

алынған аңлатпадан $T = T_0$ фазалық өтиў температурасын алыў мүмкин.

(8V-39) дан полиморфлық айланыстың атомлардың тербелисиниң секириў менен өзгерисине байланыслы екенлиги көринип тур. Егер E_β‘ > E_α‘ болса (8V-39) $\omega_\alpha > \omega_\beta$ болғанда шешимге ийе болады. Демек β-фаза α-фазаға қарағанда ‘жумсағынақ} болғанда (пәнжере атомларына салыстырып айтылған) фазалық өтиў әмелге асады. 33-сүўретте еки фаза ушын E = E(S) ғәрезлилиги келтирилген:



33-сүўрет. α- ҳәм β-фазалар ушын E = E(S) ғәрезлилиги.

α-фазадан β-фазаға өтиў $T = T_0$ температурасында жүреди, ал T ның мәниси иймекликлерге түсирлиген улыўмалық урынбаның қыялығы бойынша анықланады. Урыныў ноқатлары арасындағы айырма фазалық өтиўдиң жасырын жыллылығына тең. $T < T_0$ болғанда β-фаза, ал $T > T_0$ болғанда α-фаза орнықлы.

Фазалық өтиўлерди жоқарыдағыдай етип тәриплеў еки фазадағы $\omega_\alpha = \omega_\alpha(k)$ ҳәм $\omega_\beta = \omega_\beta(k)$ жийиликлериниң дисперсиясын есапқа алыў арқалы да әмелге асырыў мүмкин. Бундай жағдайда α- ҳәм β-фазалардың еркин энергиялары ушын аңлатпалар былай жазылады:

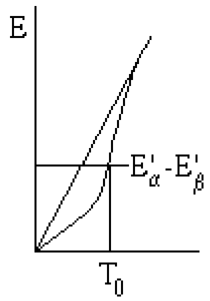
$$Ғ_\alpha(T) = E_\alpha' + k_0 T \sum_{k,s} \ln[1-\exp(-\hbar\omega_\alpha^s(\mathbf{k})/k_0T)],$$

$$Ғ_\beta(T) = E_\beta' + k_0 T \sum_{k,s} \ln[1-\exp(-\hbar\omega_\beta^s(\mathbf{k})/k_0T)]. \qquad (8V\text{-}40)$$

Бул аңлатпада $\omega^s(\mathbf{k})$ толқын векторы **k**, поляризациясы s = 1,2,3 болған фононның жийилиги. (8V-40) тағы суммалаў Бриллюэнниң биринши зонасындағы толқын векторы **k** ның барлық дискрет мәнислери ҳәм тербелислердиң барлық тармақлары s бойынша жүргизиледи. Фазалық өтиў еоқатында $Ғ_\alpha$ менен $Ғ_\beta$ ны теңлестирип төмендеги аңлатпаға ийе боламыз:

$$E_\alpha' - E_\beta' = k_0 T \sum_{k,s} \ln \frac{1-\exp(-\hbar\omega_\alpha^s(\mathbf{k})/k_0T)}{1-\exp(-\hbar\omega_\beta^s(\mathbf{k})/k_0T)}. \qquad (8V\text{-}41)$$

(8V-41) диң оң тәрепи температураның функциясын береди ε = ε(T). 34-сүўретте усы функция келтирилген ҳәм бул иймектиктиң фазалық айланыс температурасы $T = T_0$ ди анықлайтуғын $\varepsilon = E_\alpha' - E_\beta'$ сызығы менен кесилисиўи сәўлеленген.



34-сүўрет. Усы сүўрет жәрдеминде фазалық өтиў температурасын анықлаў мүмкин.

Дебай температурасынан жоқары температураларда ($T > T_D$) (8V-41) диң оң тәрепи температураның сызықлы функциясы болады:

$$\omega = k_0 T \sum_{k,s} \ln \frac{\omega_\alpha^s(\mathbf{k})}{\omega_\beta^s(\mathbf{k})} = k_0 T \ 1n \ \frac{\prod_{k,s} \omega_\alpha^s(\mathbf{k})}{\prod_{k,s} \omega_\beta^s(\mathbf{k})}. \qquad (8V\text{-}42)$$

Бул теңлемениң оң тәрепи турпайы түрде былай есапланыўы мүмкин. $\frac{\omega_\alpha^s}{\omega_\beta^s}$ қатнасы орнына поляризациясы s болған толқынлардың тезликлериниң қантасын алыўға болады, яғный

$$\frac{\omega_\alpha^s}{\omega_\beta^s} \approx \frac{v_\alpha^s}{v_\beta^s}. \qquad (8V\text{-}43)$$

(8V-43) ти (8V-42) ге қойсақ

$$\varepsilon(T) \approx k_0 T \ 1n \prod_s \prod_k \frac{v_\alpha^s}{v_\beta^s} = k_0 T \ 1n \prod_s \left(\frac{v_\alpha^s}{v_\beta^s}\right)^N = \frac{v_\alpha^l v_\alpha^{t_1} v_\alpha^{t_2}}{v_\beta^l v_\beta^{t_1} v_\beta^{t_2}} \qquad (8V\text{-}44)$$

Бул аңлатпадағы v^1 бойлық сес толқынының тезлиги, v^{t_1} ҳәм v^{t_2} α- ҳәм β-фазаларға тийисли сестиң көлденең тезликлери. Фазалық өтиў температурасы $T = T_0$ (8V-41)-теңлемени графикалық жоллар менен шешиў арқалы алыныўы мүмкин (сүўретте көрсетилген).

Жоқарыда жазылған аңлатпаларда тербелислер ангармонизми есапқа алынған жоқ. Екиншиден Дебай жақынласыўының қурамалы структурағы ийе кристалларда қанаатландырарлықтай нәтийже бермейтуғынлығы жоқарыда айтылған еди. Сонлықтан келтирип шығарылған формулаларды тек ғана әпиўайы қурылысқа ийе кристаллар ушын қолланыўға болады.

Дебай ҳал теңлемеси ҳәм Грюнайзен формуласы. Ҳал теңлемеси деп қатты денениң көлеми V, басымы p ҳәм температурасы T арасындағы қатнасты айтады. Теңлемени келтирип шығарғанда термодинамиканың

$$p = -(\partial p/\partial V)_T \qquad (8V\text{-}45)$$

теңлемеси тийкарында жүргизиледи. Еркин энергия сыпатында (8V-40)-аңлатпадан пайдаланамыз:

$$Ғ(T) = E_0 + k_0T \sum_{k,s} \ln[1 - \exp(-\frac{\hbar\omega^s(\mathbf{k})}{k_0T})].$$

Жийилик бойынша Дебай бөлистирилиўин есапқа алып (8V-40)-сумманы төмендеги интеграл менен алмастырамыз:

$$Ғ = E_0 + k_0T\frac{3V}{2\pi^2 v^3}\int_0^{\omega_m}[1 - \exp(-\hbar\omega/k_0T)]\omega^2 d\omega =$$

$$= E_0 + 9Nk_0T\,(T/T_D)^3\int_0^{T_D/T} 1n(1 - \exp(-x)\,x^2\,dx. \qquad (8V\text{-}46)$$

Бул аңлатпада тербелислердиң шеклик жийилиги ω_m ҳәм Дебай температурасы арасындағы байланыс $T_D = \hbar\omega/k_0$ арқалы берилген. (8V-45) тен туўынды аламыз ҳәм Дебай температурасы менен шеклек жийилик көлем V ның функциясы деп болжаймыз:

$$p = -\hbar E_0/\hbar V - 3Nk_0TD\frac{T_D}{T}\frac{1}{T_D}(\hbar T_D/\hbar V). \qquad (8V\text{-}47)$$

Бул жерде D = D(z) Дебай функциясы. Өз гезегинде

$$D(z) = (3/z^3)\int_0^z \frac{x^3}{\exp x - 1}dx. \qquad (8V\text{-}48)$$

Гармоникалық жақынласыўда $dT_D/dV = 0$ екенлигин ҳәм тербелислер ангармонизминиң $dT_D/dV < 0$ алып келетуғынлығын көрсетиўге болады. Грюнайзен турақлысы деп температурадан ғәрезсиз болған төмендеги қатнасты айтамыз:

$$g_G = -(V/T_D)(dT_D/dV) = -(d\omega_m/\omega_m)/(dV/V) = -(d\,1n\,\omega_m/d\,1n\,V) > 0. \qquad (8V\text{-}49)$$

Гармоникалық жақынласыўда g_G = 0. Температурадан ғәрезли болған ишки энергияның бөлими $E_T = 3Nk_0TD\frac{T_D}{T}$ болғанлықтан Дебай ҳал теңлемеси төмендегидей түрге ийе болады:

$$p = -\frac{\partial E_0}{\partial V} + g_G\frac{1}{V}E_T. \qquad (8V\text{-}50)$$

Бул жерде $\frac{\partial E_0}{\partial V}$ температурадан ғәрезсиз.

(8V-50) ден сызықлы кеңейиў коэффициенти α ҳәм изотермалық қысылыўшылық k арасындағы байланысты тәриплейтуғын **Грюнайзен формуласын** алыўға болады. (8V-50) ди температура бойынша дифференциаллап ҳәм (8V-18) ди есапқа алып

$$\left(\frac{\partial p}{\partial T}\right)_V = g_G\,(c_v/V) \qquad (8V\text{-}51)$$

аңлатпасын аламыз.

Кеңейиў коэффициенти менен изотермалық қысылыўшылық коэффициентлерин киргиземиз:

$$\alpha = \frac{1}{3V}\left(\frac{\partial V}{\partial T}\right)_p = \frac{1}{3V}\frac{(\partial p/\partial T)_V}{(\partial p/\partial T)_T} = -\frac{1}{3}\left(\frac{\partial V}{\partial p}\right)_T\frac{1}{V}\left(\frac{\partial p}{\partial T}\right)_V, \qquad (8V\text{-}52)$$

$$k = -\frac{1}{V}\left(\frac{\partial V}{\partial p}\right)_T.$$

Усы еки аңлатпа тийкарында Грюнайзен формуласын аламыз:

$$\alpha = \frac{1}{3}\frac{kg_Gc_v}{V}. \qquad (8V\text{-}53)$$

Жоқары басымларда кристаллардың қысылыўшылығын изертлеў арқалы g_G Грюнайзен турақлысының мәнисин анықлап, оны (8V-53) жәрдеминде есаплаў жолы менен анықланған шамасы менен салыстырыў мүмкин. Кублық кристаллар ушын жақсы сәйкеслик алынады. Төменде айырым затлар ушын Грюнайзен турақлыларының мәнислери берилген:

Зат	Есапланған мәниси	Экспери-мент	Зат	Есапланған мәниси	Экспери-мент
Na	1.25	1.50	Ni	1.88	1.90
K	1.34	2.32	NaC1	1.63	1.52
Fe	1.60	1.40	KC1	1.60	1.26

Co	1.87	1.80			

Фазалық өтиўлер ҳәм кристаллардың симметриясы. Жоқарыда кристаллардың тербелис спектри ҳәм термодинамикалық характеристикаларына байланыслы фазалық өтиўлердиң тийкарғы айырмашылықлары көрип өтилди. Термодинамикалық параметрлер өзгергенде кристалдың қурылысы үлкен өзгерислерге ушырайтуғын ҳәм фазалардың қәсийетлери түпкиликли өзгеретуғын биринши әўлад фазалық өтиўлери талқыланды. Бундай жағдайларда бир бирине өтетуғын фазалардың атомлық-кристаллық қурылысы арасында белгили бир корреляцияның болыўы да, болмаўы да мүмкин. Биринши әўлад фазалық өтиўлеринде кристалдың симметриясының (фазалық теңсалмақлық сызығының еки тәрепиндеги кристалдың атомлық-кристаллық қурылысы ямаса оның симметриясы ҳаққында гәп етилмекте) қалай өзгеретуғынлығы ҳаққында анық айтыў мүмкин емес.

Биз енди кристалдың атомлық қурылысы киши өзгериске ушырайтуғын фазалық өтиўлери ҳаққында гәп етемиз. Бундай жағдайларда еки фазаның да қурылысын ҳәм термодинамикалық потенциалларын тәриплеў мүмкин. Екинши әўлад фазалық өтиўлеринде атомлық қурылыс үзликсиз, ал кристалдың симметриясы секириў менен өзгереди. Усының менен бирге кристалдың симметриясының үзликсиз өзгериўи мүмкин емес екенлиги атап өтемиз. Мысалы кублық қурылыстағы атомлардың киши аўысыўлары тетрагоналлық ямаса ромбоэдрлик майысыўға алып келеди, яғный кублық симметрия бирден жоғалады. Солай етип екинши әўлад фазалық өтиў ноқатында еки фазаның қурылысы да. ҳалы да бирдей болады. Ал биринши әўлад фазалық өтиўинде болса ҳәр қыйлы қурылысқа ҳәм қәсийетлерге ийе болған еки фаза тең салмақлықта турады.

Бир фазаның симметриясының екинши фазаның симметриясының подгруппасы болатуғынлығы екинши әўлад фазалық өтиўлериниң ең әҳмийетли өзгешелигиниң бири болып табылады. Себеби атомлар аўысқанда тек ғана айырым симметрия элементлери жоғалып, басқалары сақланып қалады. Симмериясы жоқары болған фаза әдетте жоқары температуралы фаза болып табылады. Усының менен бирге ең жоқары симметриялы фазада нолге тең болған, ал симметрия төменлеген сайын нолден баслап белгили бир шекке ийе мәниске шекем өсетуғын базы бир шама бар болады (бул шаманы өтиў параметри ямаса тәртип параметри деп те атайды). Соның менен бирге өтиў параметриниң өзгериси фазалық өтиўдеги симметрияның өзгерисин тәриплеў ушын толық жеткиликли болады. Термодинамикалық потенциалдың усы параметрден ғәрезлилигин табыў еки фазаны да толық тәриплеўге мүмкиншилик береди. Теңсалмақлық фазаның қурылысы менен термодинамикалық потенциалды термодинамикалық потенциалдың минимумын табыў арқалы әмелге асырылады.

Мысал ретинде тригилцинсульфат кристалындағы мүмкин болған ферроэлектриклик фазалық өтиўди қараймыз [Тригилицинсульфат $(NH_2CH_2COOH)*6_2SO_4$ Кюри температурасы 49^0C болған ферроэлектрик болып табылады. Кюри ноқатынан жоқары температураларда триглицинсульфат моноклин пәнжереге ийе болып $P2_1/m$ симметрияның кеңисликтеги топарына киреди. Ферроэлектриклик фазалық өтиў тәртип-бийтәртип типиндеги өтиў болып табылады ҳәм өжире температураларында да элементар қутыша моноклинлик болып қалады]. Бундай кристалларда электр поляризациясы векторы **P** өтиў параметри болып табылады. Кристалдың симметриясы термодинамикалық потенциал Ф тиң **P** векторының қураўшыларына ғәрезлилигине белгили бир шек қояды. Кристалдың симметриясы топарының барлық түрлендириўлеринде Ф тиң өзгермеслигине байланыслы ол P_i қураўшыларының инвариантлық комбинацияларының функциясы болып табылады.

Триглицинсульфаттың жоқары температуралы фазасының симметриясының ноқатлық топары C_{2h} = 2/m. z көшери екинши тәртипли симметрия көшери бағытында бағытланған. Бундай жағдайда поляризация векторының қураўшыларының төрт инвариант комбинацияларына ийе боламыз: P_x^2, P_y^2, $P_x P_y$ ҳәм P_z^2. Солай етип кристалдың симметриясынан термодинамикалық потенциалдың поляризациядан ғәрезлилигиниң мынадай болатуғынлығын көремиз:

$$\Phi = \Phi(P_x^2,\ P_y^2,\ P_x P_y, P_z^2, T,p). \qquad (8V\text{-}54)$$

Бул жерде T температура, p басым. Ф тиң басқа шамалардан ғәрезлилигин киши деп есаплап итибарға алмаймыз (мысалы деформация ҳәм т.б.). (8V-54)-аңлатпада симметрияның бериўи керек болған барлық информациялар бар. Енди (8V-54)-аңлатпаның минимум болыў мәселесин шешемиз. Жоқары температуралы фазада минимумның P = 0 ге сәйкес келетуғынлығын пайдаланамыз ҳәм биринши әўлад фазалық өтиўи орын алады деп есаплаймыз. Сонлықтан фазалық ноқат әтирапында **P** ның барлық қураўшылары киши болып, Ф ти инвариант комбинациялардың дәрежелери бойынша жаямыз. Дәслеп инвариантлар бойынша сызықлы (P_i бойынша квадратлық) болған ағзалар менен шекленемиз:

$$\Phi = \Phi_0(T,p) + A_{11}(T,p)P_x^2 + 2A_{12}(T,p)P_xP_y +$$

$$+ A_{22}(T,p)P_y^2 + A_{33}(T,p)P_z^2. \qquad (8V\text{-}55)$$

Жоқары температуралы фазада ҳәм фазалық өтиў ноқатында (8V-55) тиң минимумы $P_i = 0$ ноқатына сәйкес келеди, яғный P_x, P_y, P_z лер бойынша квадратлық форма оң мәниске ийе болыўы керек. Сонлықтан жоқары температуралы фазада ҳәм өтиў ноқатында

$$A_{11} \geq 0; \qquad A_{11}A_{22} \geq 0; \qquad A_{33} \geq 0 \qquad (8V\text{-}56)$$

теңсизликлериниң орынланыўы керек.

Фазалық өтиў ноқатында бул теңсизликлердиң биреўи теңликке айланыўы керек. Бундай болмағанда өтиў ноқаты қасында барлық үш теңсизлик орынланған ҳәм фазалық өтиў болмаған болар еди. Төменги температуралы фазада бул теңсизлик бузылады ҳәм термодинамикалық потенциалдың минимумы нолден өзгеше болған P_x, P_y лерде (егер екинши теңсизлик бузылса) ямаса P_z те (егер үшинши теңсизлик бузылса) орын алған болар еди.

Дәслеп A_{33} коэффицинетиниң белгисиниң өзгеретуғын жағдайды қарайық. (8V-56) дағы екинши теңсизлик төменги температуралы фазада да орынланатуғын болғанлықтан термодинамикалық потенциалдың минимумы $P_x = P_y = 0$ болған жағдайға сәйкес келеди. Бул мәнислерди (8V-54) ке қойып Ф ти P_z^2 бойынша екинши тәртипли ағзаға шекемги дәлликте жайсақ

$$\Phi = \Phi_0 + \alpha(T - T_c) P_z^2 + \frac{1}{2}\beta P_z^4 \qquad (8V\text{-}57)$$

аңлатпасын аламыз. Бул жерде $A_{33} = \alpha(T - T_c)$. α, β, T шамалары температураға әззи байланысқан. Сонлықтан бул байланысты есапқа алмаймыз. Анықлық ушын $\alpha > 0$ деп есаплаймыз, ал $\beta > 0$ деп болжаймыз ($\beta < 0$ биринши әўлад фазалық өтиўлерине сәйкес келеди). Бундай жағдайда $T > T_c$ да (8V-57)-аңлатпаның минимумы $P_z = 0$ ге (жоқары температуралы фаза), ал $T < T_c$ температураларында

$$P_z = \sqrt{\frac{\alpha(T_c - T)}{\beta}} \qquad (8V\text{-}58)$$

ға сәйкес келеди, яғный поляризация $T = T_c$ температурасынан баслап пайда болады ҳәм температура төменлеген сайын үзликсиз өседи. Демек $T = T_c$ температурасында ҳақыйқатында да екинши әўлад фазалық өтиўи орын алады. Төменги температуралы фазаның ноқатлық топары C_2 - 2 топары менен тәрипленеди, ал теңсалмақлық фазаның термодинамикалық потенциалы

$$\Phi = \Phi_0 - \frac{\alpha^2 (T_c - T)^2}{2\beta}$$

аңлатпасы менен бериледи.

Энтропия S = ħФ/ħT өтиў ноқатында үзликсиз өзгереди (яғный екинши әўлад өтиў жыллылығы нолге тең), ал жыллылық сыйымлылығы $\Delta c_p = \alpha^2 T_c/\beta$ секирип өзгереди. Соның менен бирге төмен симметрияға ийе фазада жоқары симметриялы фазаға қарағанда жыллылық сыйымлылығы үлкен мәниске ийе. Диэлектрлик қабыллағышлық (поляризацияланғышлық) $\chi = (\hbar^2\Phi/\hbar P^2)^{-1} = 2[\alpha(T - T_c) + 3\beta P_z^2]^{-1}$. Жоқары температуралы фазада $\chi = 2/\alpha(T - T_c)$ (Кюри-Вейсс нызамы), ал төменги температуралы фазада $\chi = 4/\alpha(T_c - T)$, яғный

χ өтиў температурасында шексизликке айланады. Тап усындай фазалық өтиў триглицин-сульфатта 49^0С да орын алады.

11-санлы лекция. Кристаллардың оптикалық қәсийетлери. Кристаллардың поляризациясы. Поляризацияның тийкарғы түрлери

Кристаллардың электрлик қәсийетлери деп электр поляризациясы қубылысы менен қандай да байланысы бар қубылыслардың жыйнағына айтады. Айырым жағдайларда бундай поляризация сыртқы тәсир астында емес, ал өзинен өзи (спонтан түрде) болыўы мүмкин. Басқа жағдайларда поляризация қыздырыўдың, электр майданын түсириўдиң, механикалық жүк түсириўдиң нәтийжесинде жүзеге келеди.

Физикалық кристаллографияда кристаллардың электрлик қәсийетлери машқаласы салыстырмалы толық изертленилген машқалалардың бири болып табылады. Ең дәслеп диэлектриклердиң анизотропиясы менен байланысқан қәсийетлер терең изертленди. Мысалы кристаллардың диэлектрлик сиңиргишлиги ε тензорлық шама болып табылады. Бундай жағдай диэлектриклик қабыллағышлыққа, салыстырмалы электр өткизгишликке ҳәм басқа да қәсийетлерге тийисли.

Айырым диэлектрликлик кристаллардағы спонтан поляризацияның болыўы изотроп кристалларда бақланбайтуғын пироэлектрлик эффекттиң жүзеге келиўин болдырады. Бул қубылыс кристалды қыздырғандағы (ямаса сақынлатқандағы) спонтан поляризациясының өзгериўине байланыслы. Кристаллардың салыстырмалы жаңа классы болған ферроэлектриклер пироэлектриклердиң киши классларына киреди. Ферроэлектриклер ушын кристалдың доменлерге (спонтан поляризацияланған областларға) бөлиниўи тән. Усы доменлик қурылыс ферроэлектриклердиң физикалық қәсийетлериниң өзгешелигин тәмийинлейди.

Пьезоэффект (механикалық тәсирлер астында кристалларда электр поляризациясының пайда болыўы ямаса сырттан түсирилген электр майданындағы кристаллардың деформациясы) қубылысы да кристаллардың анизотропиясына байланыслы.

Кристаллардың поляризациясы. Сыртқы электр майданына қойылған диэлектрик поляризацияға ушырайды. Диэлектриктиң ишиндеги электр майданының кернеўлилиги **E** ниң оның поляризациясы **P** ны есапқа алған жағдайда ғана анықланыўы мүмкин. E ҳәм P векторлары менен қатар диэлектриклиң ҳалы электр индукциясы векторы **D** менен тәрипленеди. Усы **D**, **E** ҳәм **P** векторлары арасында төмендегидей теңликлер менен анықланатуғын байланыслар бар:

$$\mathbf{P} = \alpha\mathbf{E},\ \mathbf{D} = \mathbf{E} + 4\pi\mathbf{P},\ \mathbf{D} = \varepsilon\mathbf{E}\ \ (\varepsilon = 1 + 4\pi\alpha). \qquad (V\text{-}1)$$

Бул аңлатпалардағы α диэлектриктиң полярланғышлығы, ε диэлектриктиң диэлектриклик сиңиргишлиги. Диэлектриклерди өз ишине алатуғын денелердиң ықтыярлы жыйнағы ушын электростатикалық майдан теңлемелериниң толық системасы төмендегидей түрге ийе болады:

$$\mathbf{E} = -\mathrm{grad}\varphi, \quad \mathbf{D} = \varepsilon\mathbf{E},\ \ \mathrm{Div}\mathbf{D} = 4\pi\rho,\ \ D_{2n} - D_{1n} = 4\pi\sigma. \qquad (V\text{-}2)$$

Бул жерде φ электр майданы потенциалы, ρ еркин электр зарядларының көлемлик тығызлығы, D_{2n} менен D_{1n} индукция векторының еки диэлектрик арасындағы шегарадағы нормал қураўшылары, ал σ болса еркин электр зарядларының усы беттеги тығызлығы.

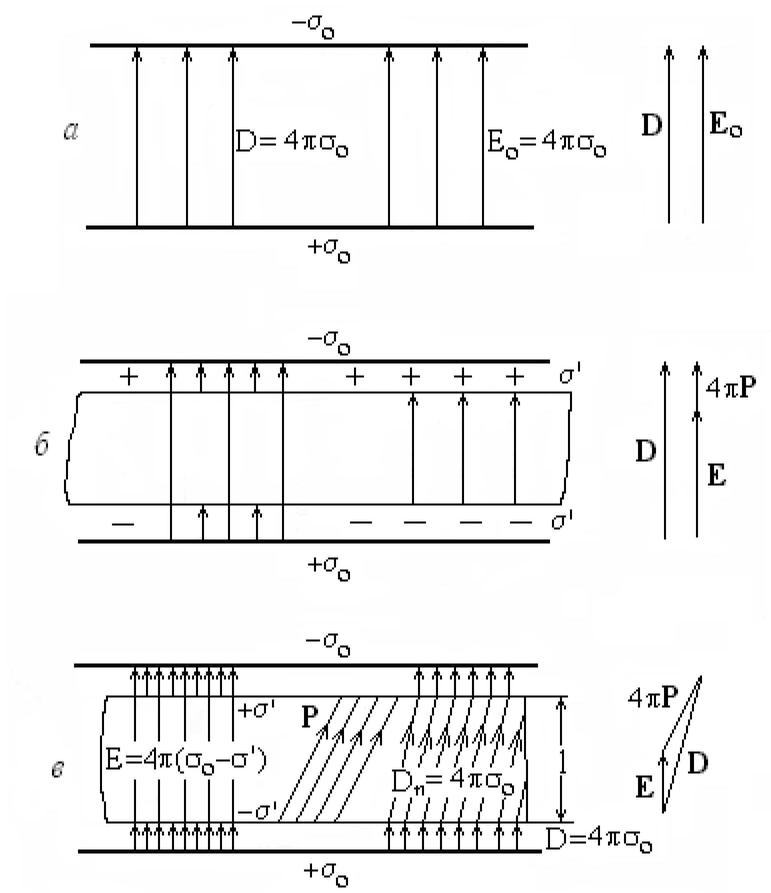
Изотроп орталықлар ушын ε менен α скалярлар болып табылады. Бул шамалар еки поляр векторды байланыстыратуғын болғанлықтан кристалларда, соның менен бирге барлық анизотроп орталықларда екинши рангалы тензорлар болып табылады ҳәм ε_{ij}, α_{ij} арқалы белгиленеди. **D**, **E** ҳәм **P** векторлары арасындағы байланыслар 35-сүўретте келтирилген. Бул сүўретте диэлектриктиң бетине белгиси еркин зарядлардың белгисине қарама-қарсы зарядлардың жыйналатуғынлығы көринип тур. Усы жағдайды ҳәм (V-1) ди қанаатландырыў зәрүрлигин есапқа алып диэлектриктиң ишинде **P** векторының бағытын терис белгиге ийе зарядлардан оң белгиге ийе зарядларға қарай аламыз.

Онсагердиң симметрия принципине сәйкес статикалық электр майданында магнит майданы болмаған жағдайларда ε_{ij} ҳәм α_{ij} тензорлары симметриялық тензорлар болып табылады.

Кристалларда улыўма жағдайларда **D** ҳәм **E** векторларының бағытлары өз ара параллел емес болғанлықтан оптикадағы сыяқлы усы векторлар бағытындағы ε_E ҳәм ε_D диэлектриклик сиңиргишлери түсиниклерин киргизиўимиз мүмкин. ε_E шамасы **E** векторының усы векторға түсирлген **D** ның проекциясынан неше есе қысқа екенлиги аңғартады. Тап сол сыяқлы ε_D шамасы **D** векторының усы вектор бағытындағы **E** ниң проекциясынын неше есе узын екенлигин аңлатады.

Экспериментте $З_E$ шамасы өлшенеди. Бул шама ε_1, ε_2 хм ε_3 бас диэлектриклик сиңиргишликлердиң мәнислери ҳәм **E** векторының бағытлаўшы косинуслары менен былайынша байланысқан:

$$\varepsilon_E = c_1^2\varepsilon_1 + c_2^2\varepsilon_2 + c_3^2\varepsilon_3. \qquad (V\text{-}3)$$



35-сүўрет. Вакуумдаги (*а*), изотроп диэлектриктеги (*б*) ҳәм конденсатор астарлары арасында орналастырылған анизотропиялық диэлектрик пластинадағы (*в*) **D**, **E** ҳәм 4π**P** векторлары. σ ҳәм σ‘ лар еркин ҳәм поляризацияланған (байланысқан) зарядлардың тығызлығы.

Атомлар менен молекулалардың поляризациясы процессин қарағанда (микропроцесслерди қарағанда) *ишки* ямаса *тәсир етиўши электр майданы* түсиниги үлкен әҳмийетке ийе. Себеби макроскопиялық қаралғанда атомлық қурылысты есапқа алмайтуғын электр майданының кернеўлилиги **E** нәзерде тутылады. Атомлар менен молекулалардың поляризациясы бул майдан арқалы анықланбай, ишки тәсир етиўши майдан **Ғ** арқалы анықланады.

Әззи поляризацияға ушырайтуғын изотроп диэлектриклик орталық ушын Лоренц жақынласыўы дурыс нәтийже береди:

$$\mathbf{Ғ} = \mathbf{E} + \frac{4\pi}{3}\mathbf{P}. \qquad \text{(V-4)}$$

Бундай жақынласыўда Клаузиус-Мосотти формуласы дурыс нәтийже береди. Бул формула диэлектриктиң диэлектриклик сиңиргишлигин айырым микробөлекшениң поляризация поляранғышлығы η менен былай байланыстырады:

$$\frac{M}{\rho}\,\frac{\varepsilon-1}{\varepsilon+2} = \frac{4\pi}{3}N_0\eta. \qquad \text{(V-5)}$$

Бул формуладағы M молекулалық салмақ, ρ диэлектриктиң тығызлығы, N_0 Авагадро саны. Кейинги аңлатпаның оң тәрепи моллик поляризация деп аталады.

Поляризацияның тийкарғы түрлери. Ферроэлектриклик қәсийетке ийе емес диэлектриклердеги поляризацияны төрт түрге бөлиў мүмкин:

1) электонлардың ядроларға салыстырғандағы аўысыўына байланыслы болған поляризация (электронлық аўысыў поляризациясы);

2) кристаллық пәнжерениң ионларының бир бирине салыстырғандағы аўысыўына байланыслы поляризация (ионлық аўысыў поляризациясы);

3) кристалдың қурамындағы турақлы дипол моментлериниң бағытларының өзгериўине байланыслы поляризация (жыллылық ориентациялық поляризациясы);

4) әззи байланысқан ионлардың қазғалысына байланыслы болған поляризация (жыллылық ионлық поляризациясы).

Поляризацияның кейинги еки түри әдетте релаксациялық поляризациялар деп аталады.

Электронлық аўысыў поляризациясы барлық диэлектриклер ушын улыўмалық қубылыс болып табылады. Бул поляризация атом ямаса иондағы әззи байланысқан электронлардың серпимли аўысыўы нәтийжесинде жүзеге келди. Электронлық аўысыў поляризациясының орнаўы ушын зәрүр болған ўақыт жақтылық тербелислери дәўири менен барабар ҳәм 10^{-14} - 10^{-15} секундты қурайды.

Диэлектриктиң диэлектриклик сиңиргишлиги ε улыўма жағдайларда поляризацияның ҳәр қыйлы поляризациясы менен байланысқан болыўы мүмкин. Бирақ оптикалық жийиликлер областында ε дерлик толығы менен электронлық полярланғышлық пенен анықланады. Бул жағдайда n^2 = ε (n сыныў көрсеткиши) ҳәм (V-5) формуласы бир бирлик көлем ушын төмендегидей түрге ийе болады:

$$\frac{n^2-1}{n^2+2} = \frac{4\pi}{3}N_8\eta_8. \qquad \text{(V-6)}$$

Бул аңлатпада N_8 көлем бирлигиндеги 8-сорттағы атомлар саны, η_8 8-атомның электронлық полярланғышлығы.

(V-6) формула жәрдеминде анықланған сыныў көрсеткиши n ди пайдаланып электронлық полярланғышлық η ның мәнисиниң дәл мәнисин есаплаў мүмкин. Бул шаманың мәниси атомлардың радиусының кубына, яғный ;10^{-24} $см^3$ қа тең.

Поляр емес молекулалардан туратуғын кристалларда (алмаз, нафталин, парафин) таза түрдеги электронлық поляризация бақланады. Бундай материалларда барлық жийиликлерде де $n^2 = \varepsilon$ теңлиги орынланады.

Ионлық аўысыў поляризациясы тийкарынан ионлық кристалларда (ионлық байланыс орын алатуғын кристалларда) бақланады. Бундай кристалларда ионлық поляризация менен бир қатарда электронлық аўысыў поляризациясы да бақланады. Бирақ бул жағдай тийкарында бир қатар ионлық кристаллардың диэлектриклик сиңиргишлигин түсиндириў мүмкин емес. Мысалы, хлорлы натрий кристаллы ушын n = 1.5, ($n^2 = \varepsilon_\infty = 2.25$). Ал статикалық диэлектриклик сиңиргишлик $\varepsilon_s = 5.62$. Статикалық ҳәм оптикалық диэлектриклик сиңиргишликлер арасындағы бундай айырманы ионлық аўысыў поляризациясы менен байланыстырыў керек.

12-санлы лекция. Электр өткизгишлик. Диэлектриклик жоғалтыўлар. Пироэлектрлик қубылыслар. Пьезоэлектрлик эффект ҳәм электрострикция

Сызықлы диэлектрик кристаллар тийкарынан ионлық өткизгишликке ийе болады (меншикли ҳәм қосымталық).

Көп санлы кристаллардағы өткизгишикти изертлеў тийкарғы тоқ тасўшылардың зарядлары бирдей болғанда киши өлшемли ионлар, ал ҳәр қыйлы зарядқа ийе шама менен бирдей өлшемли ионлар бар жағдайларда ең киши зарядқа ийе ионлар екенлиги көрсетеди. Мысалы NaC1 кристалында тийкарғы тоқ тасыўшылар Na^+ ионы, ал $PbC1_2$ кристалында $C1^-$ екенлиги көрсетеди. Айырым кристалларда электр өткизгишлик еки белгиге ийе ионларға да байланыслы (мысалы $Pb8_2$ кристаллы). Ал жоқары температураларда тоқты тасыўға ҳәр қандай зарядқа ийе ионлардың барлығы да қатнасады (мысалы 600^0C дан жоқары температураларда NaC1, NaF кристалларында $C1^-$ ҳәм F^- ионлары да тоқ тасыўға қатнаса баслайды).

Күшли электр майданларында ионлық өткизгишликке электронлық өткизгишлик қосылады. Бундай эффект кварцта, тас дузында, басқа да кристалларда табылды.

1 см^3 көлемдеги электр майданы тәсиринде қозғалатуғын бөлекшелер саны n дана, ҳәр бир бөлекшениң заряды e ге тең, ал қозғалғышлығы χ болса, онда өткизгишлик σ ның шамасы былай есапланады:

$$\sigma = ne\chi. \qquad \text{(V-7)}$$

Ионлық кристалларда электр өткизгишлик кристаллық пәнжере ионларының қозғалысы менен байланыслы болыўы да мүмкин. Бундай электр өткизгишлик меншикли өткизгишлик деп аталады ҳәм жоқары температураларда жақсы бақланады. Соның менен бирге ионлық кристьаллардың электр өткизгишлиги қосымта ионлардың қозғалысы менен байланыслы болыўы мүмкин. Усындай ионлар кристалдың қосымталы өткизгишлигин тәмийинлейди. Бундай өткизгишлик салыстырмалы төмен температураларда айқын бақланады. Көпшилик жағдайларда бир кристалда электр өткизгишлик пәнжере ионлары менен де, қосымта ионлар менен де жүзеге келеди. Ионлық емес кристаллар (мысалы молекулалық кристаллар) тийкарынан қосымта электр өткизгишликке ийе болады.

Кристаллардағы ионлардың қозғалысы еки жол менен әмелге асады:

а) олар пәнжерениң түйинлери арасында Френкель бойынша дефектлерди пайда етиў менен қозғалады.

б) олар ийеленбеген түәинлер арқалы секирип қозғалады (Шоттки бойынша дефектлер), ионлардың бундай қозғалысы тесикшелердиң қозғалысы сыпатында қаралады.

Еки түрли электр өткизгишлик те

$$\sigma = Ae^{-B/T} \qquad \text{(V-8)}$$

аңлатпасы менен аңлатылады. Бул аңлатпадағы B активация энергиясы деп аталады ҳәм температураға ғәрезли емес. B шамасы кристалдағы ионның энергиясы ҳәм бир турақлы ҳалдан екинши турақлы ҳалға көшириў ушын зәрүр болған энергияға тең.

Жоқарыда кристаллардың жоқары температураларда меншикли өткизгишликке, ал төменги температураларда қосымталы өткизгишликке ийе болатуғынлығы айтылған еди. Бул жағдай

$$\sigma = A_1 e^{-B_1/T} + A_2 e^{-B_2/T} \qquad \text{(V-9)}$$

формуласы менен анықлаў зәрүрлигин келтирип шығарады. Бул аңлатпадағы 1 индекси пәнжере ионларына, ал 2 индекси қосымта ионларға тийисли. Бул аңлатпадан B_1 активация энергиясының B_2 активация энергиясынан үткен екенлиги көринип тур.

Ионлық емес кристаллардың электр өткизгишлиги

$$1n\sigma = A - B/T \qquad \text{(V-10)}$$

формуласы менен тәрипленеди. Бул формула (V-8) бенен сәйкес келеди. Бул өткизгишлик көпшилик жағдайларда қосымта ионларға байланыслы. Кварц ушын электр өткизгишлик с көшери бағытында (оптикалық көшер) оған перпендикуляр бағыттағыдан артық (активация энергиясы сәйкес 0. II ҳәм 1.32 эв қа тең). Кварцтың салыстырмалы қарсылығы оптикалық көшер бағытнда 10^{14} ке, ал перпендикуляр бағытта (шама менен) 10^{16} ом∗см ге тең. 500^0С температурада кварцтың қарсылығы шама менен бес тәртипке төменлейди. Бул кристалдағы бир зарядлы қосымта Na, K, 1i ионлары тийкарғы тоқ тасыўшылар болып табылады.

Диэлектриклик жоғалтыўлар. Өзгермели электр майданында диэлектриклер әдетте қызады. Қыздырыў ушын жумсалатуғын өзгермели тоқты ***диэлектриклик жоғалыўлар*** деп аталады. Толық диэлектриклик жоғалыў турақлы кернеўге сәйкес келиўши өткизгишлик жоғалыўынан ҳәм диэлектриктеги аўысыў тоғының актив қураўшысы менен байланыслы болған жоғалыўдың қосындысынан турады.

Солай етип диэлектриклик жоғалыўлар поляризацияның орнаўы менен байланыслы болып шығады. Бирақ электронлық ҳәм ионлық аўысыўлардың тез әмелге асатуғынлығына байланыслы электр майданының энергиясының сезилерликтей жоғалыўына алып келмейди. Усындай поляризацияға ийе кристаллардағы диэлектриклик жоғалыўлар жүдә аз.

Жыллылық қозғалыслары нәтийжесинде әмелге асатуғын поляризацияға ийе кристалларда (жыллылық ориентациялық ҳәм жыллылық ионлық) поляризацияның орнаўы абсорбциялық тоқлар менен байланыслы. Өзгермели кернеўлерде абсорбциялық тоқлар еки қураўшыдан турады: биреўи (j_a) түсирилген кернеў менен бир фазаға ийе болып тоқтың актив қураўшысын пайда етеди, екиншиси (j_w) кернеўден фазасы бойынша $\pi/2$ шамасына алдыда жүретуғын тоқты тәриплейди ҳәм тоқтың реактив (сыйымлылық) қураўшысы болып табылады. Солай етип диэлектрикте поляризация әстелик пенен орнайтуғын болса өзгермели майданда өткизгишлик жоқ болған жағдайларда да диэлектриклик жоғалыўлар бақланады.

Пироэлектриклик қубылыслар. Айырым кристаллық денелерде қыздырғанда электр зарядының пайда болатуғынлығы (бир тәрпиниң оң, ал екинши тәрепиниң терис заряд пенен зарядланатуғынлығы) көп ўақытлардан бери белгили. Бул қубылыс ***пироэлектрлик*** деп аталады. Көп ўақытлар даўамында турмалин кристаллы пироэлектрлик кристал сыпатында изертленип келди. Кейинирек пироэлектрлик қәсийетке барлық он поляр классқа (1, 2, 3, 4, 6, m, mm2, 3m, 4mm, 6mm) криўши диэлектриклердиң ийе болыўының кереклиги анықланды.

Пироэлектриклик қәсийетке спонтан поляризацияланатуғын барлық кристаллар ийе, ал спонтан поляризацияның температураға байланыслы өзгериўи ***пироэлектрлик эффект*** деп аталады.

Пироэффектти тәриплейтуғын термодинамикалық қатнасларды талқылаў кери эффекттиң орын алатуғынлығын көрсетеди: кристалдың спонтан поляризациясын өзгертиўши электр майданы түскенде оның температурасының өзгериўи керек. Бул эффект электркалориялық эффект деп аталады.

Көп ўақытлар даўамында пироэлектрлик ҳәм электрокалориялық эффектлер қызықлы физикалық қубылыслар сыпатында қаралып келди ҳәм әмелде пайдаланылған жоқ. Себеби бул қубылыслар тийкарынан сызықлы пироэлектриклерде изертленилди.

Пироэлектриклик ҳәм электркалориялық эффектлерге қызығыўшылық ферроэлектрик кристалларда бақланатуғын қәсийетлердиң әҳмийетлигине (спонтан поляризацияның температураға ғәрезлилиги, фазалық айланыслар, ферроэлектриклик фазалық айланыстың нәтийжесинде кристаллардың доменлерге бөлиниўи ҳәм усығын байланыслы болған сызықлы емес физикалық қәсийетлер) байланыслы бирден артты. Ҳәзирги ўақытлары пироэлектрлик кристаллар инфрақызыл нурланыўларды сезгир қабыллағышларда, температураның өзгериўин өлшеўши әсбапларда, жылылық энергиясын электр энергиясына айландырыўшы қурылысларда кеңнен қолланылады.

Пироэлектрлик эффект теңлемеси температура ΔT шамасына өзгергендеги спонтан поляризацияның өсими ΔP_s ти тәриплейди. Биринши жақынлаўда ΔP_s ҳәм ΔT шамалары арасында сызықлы байланыс орын алады:

$$\Delta P_s = p\Delta T. \qquad \text{(V-11)}$$

Бул аңлатпада p пироэлектрлик коэффициент. T менен P_s тиң шексиз киши өсимин алсақ:

$$\partial P_s/\partial T = p. \qquad \text{(V-12)}$$

Температураға байланыслы P_s тиң өзгериўи еки себепке байланыслы болады. Биринши гезекте температура өзгергенде кристал өзиниң өлшемлери өзгертеди: қысылады ямаса кеңейеди. Демек температурның өзгериўи менен кристалдың қурылысында өзгерислер болмаған жағдайда да кристалдың спонтан поляризациясы өзгериске ушырайды. Себеби спонтан поляризацияға алып келиўши кристалдың көлем бирлигиндеги зарядлар муғдары менен диполлар моментлери өзгериске ушырайды. Сонлықтан пироэлектрлик эффектте кристалдың жыллылық кеңейиўине (яғный деформациясына) байланыслы да бөлим болатуғынлығы түсиникли. Пироэлектрлик эффекттиң деформацияға байланыслы болған бөлеги (бул бөлекти пьезоэлектрлик бөлеги деп та атаймыз) ***екинши*** ямаса ***жалған*** пироэлектрлик эффект деп атаймыз. Бул бөлекти тәриплейтуғын коэффициентти p’’ арқалы белгилеймиз.

Дәслепки ўақытлары пироэлектрлик эффектти толығы менен екинши пироэлектрлик эффект пенен байланыслы деп есаплады. Бирақ кейинирек жылылық кеңейиўи болмаған жағдайда да (кристал қысып қойылған жағдайларда да) пироэлектрлик эффекттиң бақланатуғынлығы анықланда. Кристалдың деформациясына байланыслы болмаған пироэффекттиң бөлимин биринши ямаса ҳақыйқый пироэлектрлик эффект деп атаймыз ҳәм p’ ҳәрипи менен белгилеймиз. Сызықлы пироэлектриклерде ҳақыйқый пироэффект толық эффекттиң 2-5 процентин ғана қурайды.

Биринши ҳәм екинши пироэффектлерге бөлинген пироэффект теңлемесин енди былай жазамыз:

$$\Delta P_s = (p' + p'')\,\Delta T = p\Delta T. \qquad \text{(V-13)}$$

ΔP_s векторлық шама болғанлықтан p, p’, p’’ лер де векторлық шама болып табылады.

Сызықлы диэлектриклерде өжире температураларында әдетте p температурадан дерлик ғәрезли емес. p ның абсолют мәниси бир электростатикалық бирликке жақын. Мысалы турмалин ушын p = - 1.3 СГСЭ бирлигине тең. Турмалинниң поляризацияланыўы ушын көргизбели мысал келтириў мүмкин. Пироэлектрлик көшерине перпендикуляр етип кесилген қалыңлығы 0.1 см болған турмалин 10 градусқа қыздырылғанда шама менен $5*10^{-9}$ к/мс^2 электр зарядын топлайды, ал пластинка бетлери арасындағы потенциаллар айырмасы 1200 вольттей болады.

Электрокалориялық эффект төмендегидей теңлеме менен тәрипленеди:

$$\Delta T = q\Delta E \qquad \text{(V-14)}$$

ямаса дифференциал түрде

$$q = \hbar T/\hbar E. \qquad \text{(V-15)}$$

q электркалориялық эффект коэффициенти.

q ҳәм p коэффициентлери арасындағы байланысты аңсат анықлаўға болады.

P_s спонтан поляризацияға ийе пироэффектти термодинамикалық жақтан қарағанымызда усы P_s тиң өзгериси тек ғана кристалдың белгили бир муғдардағы жылылық услап турыўына тәсир етеди деп есаплаймыз. Бул жағдайда кристалдың ишки энергиясы өзгерисиз қалады. Сонлықтан

$$d7 = 0 = EdP + TdS,\ T = -\,EdP/dS, \qquad \text{(V-16)}$$

$$\frac{\partial T}{\partial E} = -\frac{\partial P}{\partial S} = -\frac{\partial P}{\partial T}\frac{\partial T}{\partial S}. \qquad \text{(V-17)}$$

Бул аңлатпалардағы S энтропия. $\frac{\partial T}{\partial E} = q$, $\frac{\partial P}{\partial T} = p$ болғанлықтан (dS = d1/T, d1 = dTρcJ

(ρ тығызлық, c кристалдың жыллылық сыйымлылығы, J жыллылықтың механикалық эквиваленти). Сонлықтан

$$q = -\,pT/\rho cJ. \qquad \text{(V-18)}$$

Есаплаўлар бойынша қалыңлығы 1 мм болған турмалин кристаллы 300 в кернеў түсирилгенде температурасын $5*10^{-5}$ градусқа өзгертеди.

Пьезоэлектрлик эффект ҳәм электрострикция. Пьезоэлектрлик эффект деп механикалық кернеў (деформация) менен электр майданын (индукция, поляризация) сызықлы (пропорционаллық) байланыс қубылыслардың жыйнағын айтамыз.

Механикалық кернеўлер тензорын t_{ik}, деформацияларды ε_{ik}, электр майданының кернеўлилигин **E**, поляризацияны **P** (**P** = **D**/4π) арқалы белгилеймиз. Сонда пьезоэффект теңлемелери төмендегидей түске ийе болады:

$$P_n = d_{nji}t_{ji}, \qquad f_{ij} = d_{mij},$$
$$P_n = e_{nij}\, f_{ij}, \qquad t_{ji} = -\, e_{mji}E_m,$$
$$E_m = -\, h_{mij}\, f_{ij}, \qquad t_{ji} = -\, h_{nji}P_n, \qquad (V\text{-}19)$$
$$E_m = -\, g_{mij}t_{ji}, \qquad f_{ij} = g_{nij}P_n.$$

d, e, g ҳәм h шамалары 3-рангалы поляр тензор болып табылады ҳәм пьезоэлектрлик коэффициентлер деп аталады. (V-19) дың шеп тәрепи менен оң тәрепиндеги бағана бойынша жазылған теңлемелер сәйкес туўры ҳәм кери пьезоээфектлерди тәриплейди.

СГСЕ системасында e ҳәм h коэффициентлери электр поляризациясы өлшем бирликлерине ийе ($см^{-1/2}\cdot г^{1/2}\cdot с^{-1}$), ал g менен d коэффицинетлери кери өлшем бирликлерине ийе ($см^{1/2}\cdot г^{-1/2}\cdot с$).

Тәжирийбелер ўақтында кристалдың еки бети туйықлынған ямаса туўықланбаған болыўы мүмкин. Егер кристалдың (пластинканың) σ‘ пьезополяризацияланған зарядлар шығатуғын еки бети өткизгиш пенен тутастырылған ямаса кристалдың өзи өткизиўши орталықта жайласқан болса туйықланған деп есаплаймыз. Бетке ‘ағып} келген еркин заряд σ_0 ҳәм ол тәрепинен компенсациланған σ‘ шамасы жағынан тең, ал бағытлары менен қарама-қарсы: $-\sigma_0 = \sigma‘$. Кристалдың еки бети туйықланбаған болса ямаса кристал тоқ өткизбейтуғын орталықта жайласқан болса кристалды “туйықланбаған” деп есаплаймыз ҳәм бул жағдайда P = σ‘. Бул жағдайда электр индукциясы D = 0 (кристалда еркин зарядлар жоқ). σ‘ байланысқан зарядлары пластнка ишинде E = -4πσ‘/ε майданын пайда етеди (ε кристалдың диэлектриклик сиңиргишлиги).

Кери пьезоэффектте P деп еркин зарядлардың бетлик тығызлығы σ_0 ди түсинемиз. Бундай жағдайда кристал туйықланбаған. Сыртқы электр майданы E берилсе кристал туйықланған болып табылады (батарея тәрепинен туйықланған).

3-рангалы пьезоэлектрлик тензорлары d, e, g ҳәм h лар еки индекс бойынша (екинши ҳәм үшинши) симметрияға ийе болғанлықтан улыўма жағдайларда 27 емес, ал 18 ғәрезсиз қураўшыларға ийе болады. Нолге тең емес барлық қураўшылар симметрия орайына ийе емес кристалларда ғана болады (432 классы бул жағдайға кирмейди, бундай кристалларда симметриясына байланыслы пьезоэлектрлик коэффициентлер тензорларының барлық қураўшылары нолге тең). Бундай класлар саны 20: 1, 2, m, 222, mm2, 4, $\bar{4}$, 422, 4mm, $\bar{4}$2m, 3, 32, 3m, 6, $\bar{6}$, 622, 2mm, $\bar{6}$m2, 23, $\bar{4}$3m. Усындай классларға кириўши кристаллар пьезоэлектриклер де болып табылыўы мүмкин деп кесип айтыўға болады.

Пьезоэффект орайға қарата симметриялы кристалларда болмайды. Себеби симметрия орайы бар кристалдың симметриясын бир текли механикалық курнеўдиң симметриясын (бир текли механикалық кернеў де симметрия орайына ийе) қосыў симметрияның Кюри принципине сәйкес орайға қарата симметрия орайына ийе топарға алып келеди. Басқа сөз бенен айтқанда орайға қарата симметрияға ийе кристалл деформациялағаннан кейин де орайға қарата симметриялы болып қалады. Бундай кристалларда поляр бағытлар болмайтуғын болғанлықтан электр поляризациясы орын алмайды.

Кварц (SiO_2) ең жақсы изертленген пьезоэлектрлик кристал болып табылады. Кварцтың төменги термпературалық модификациясы (α кварц) ромбоэдрлик системаға жатады (32 классы, симметриясының кеңисликтеги топары D_3^4 = C3$_1$21). Өжире температурларында а = 4.90 Å ҳәм с = 5.39 Å параметрлерине ийе элементар қутышасында SiO_2 “молекуласы” жайласқан болады. Кристалдың қурылысының мотивин [SiO_4] тетраэдрлери пайда етеди. Тетраэдрлер бираз майысқан: еки Si-O аралығы 1.61, ал қалған екеўинде 1.62 Å.

573^{0}C температурасы қаытнда кварц фазалық айланысқа ушырайды ҳәм бул температурадан жоқары температураларда гексагонал қурылысқа ийе болады (класс 622, симметриясының кеңисликтеги топары D_6^5 = P6$_1$22). Бул модификация β кварц деп аталады ҳәм ол 573-870^{0}C температуралар интервалында турақлы. Жоқарырақ температураларда кварцтың және тримидит ҳәм кристобалит деп аталыўшы еки модификациясы белгили.

Кварцтың α ҳәм β модификациялары пьезоэлектрлик қәсийетлерге ийе.

Кварцтағы пьезоэффекттиң баслы өзгешелиги оның симметриясына байланыслы Z көшериниң бағытында (с көшери) пьезоэффекттиң бақланбайтуғынлығында болып табылады Кварцтың әпиўайы пьезоэлектриклик кесимлери болып X ҳәм Y кристаллофизикалық координата көшерлерине перпендикуляр болған X ҳәм Y кесимлери болып табылады. X кесиндиси пластинкалары әдетте бойлық, ал Y кесиндиси пластинкалары көлденең пьезоэффектти қоздырыў ушын қалланылады.

X өшерине перпендикуляр болған пластинкадағы бойлық пьезоэффекттиң теңлемеси

$$P_1 = d_{11}t_1, \qquad (V\text{-}20)$$

ал Y көшерине перпендикуляр болған пластинкадағы пьезоэффекттиң теңлемеси

$$P_2 = - d_{11}t_2 \qquad (V\text{-}21)$$

түрине ийе болады.

Жылжыў кернеўи менен болдырылған пьезоэлектриклик поляризация d_{14} пьезомодули жәрдеминде анықланады.

СГСЭ системасында

$$d_{11} = - 6.76*10^{-8}, \; d_{14} = 2.56*10^{-8}.$$

X көшерине перпендикуляр болған қалыңлығы 1 см болған кварц пластинкасына 1000 в кернеў түсирилгенде пласинканың қалыңлығы 21 $\overset{o}{A}$ ге жуқарады. Тап усындай пластинкағы X көшери бағытында 1 кг*см$^{-2}$ кернеўи түсирлисе усы көшер бағытындағы пайда болған потенциаллар айырмасы 60 в ке тең болады.

Электрострикция. Сырттан түсирилген электр майданының кернеўлилиги E ниң квадратына пропорционал болған диэлектриктиң деформациясы ***электрострикция*** деп аталады.

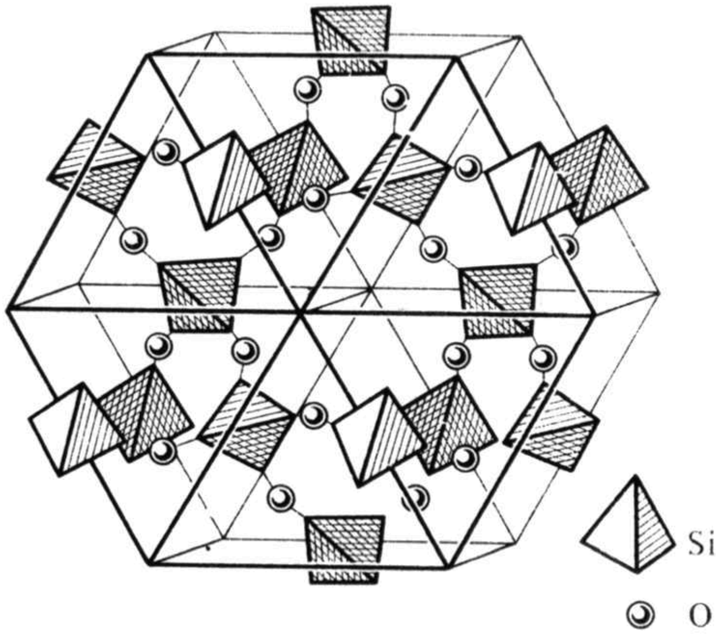
Мәселениң механикалық тәрепин кернеў t ҳәм деформацияны ε ҳәрипи, ал электрлик тәрепин майдан кернеўлилиги E ҳәм поляризация P арқалы белгилеп электрострикцияның төрт теңлемесин жазамыз:

$$\varepsilon_{ij} = 1_{ijmn}P_mP_n, \qquad \varepsilon_{ij} = 4_{ijmn}E_mE_n,$$

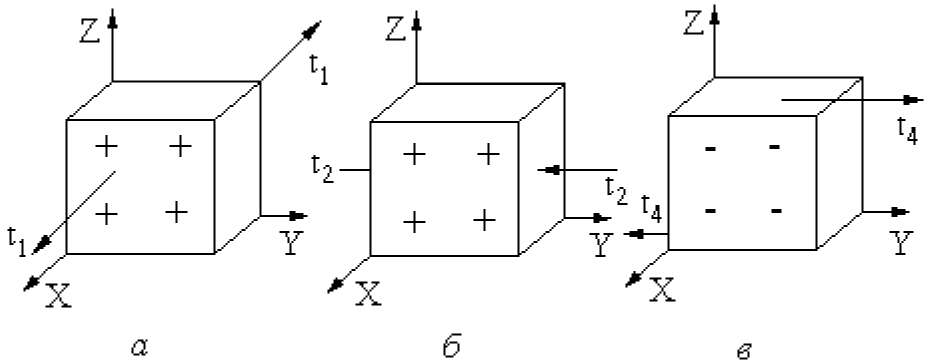
$$t_{ij} = G_{ijmn}P_mP_n, \qquad t_{ij} = H_{ijmn}E_mE_n. \qquad (V\text{-}22)$$

ε ҳәм t, соның менен бирге P ҳәм E арасындағы байланысларды пайдаланып 4, 1, G ҳәм H шамалары арасындағы байланысларды таба аламыз.

Электрострикцияны кери пьезоэлектрлик эффект пенен шатастырмаў керек. Пьезоэлектрлик эффектте деформацияның шамасы түсирилген электр майданының кернеўлилигине туўра пропорционал ҳәм сонлықтан сызықлы эффект болып табылады. Ал электрострикция болса квадратлық эффект. Сонлықтан электрострикцияның белгиси (деформацияның бағыты) электр майданының бағытына ғәрезли емес. Пьезоэффектте болса электр майданының бағытының өзгериси деформация бағытының кери бағыттағы өзгерисине алып келеди. Усының нәтийжесинде өзгермели электр майданында кристалл электр майнанының өзгериў жийилигинен еки есе үлкен жийиликте тербеледи. Ал пьезоэффектте болса өзгермели электр майданы менен кристалдың тербелиў жийиликлери бирдей болады. Санлық жақтан электрострикция пьезоэффекттен әдеўир киши. Бирақ айырым кристалларда сырттан белгили бир бағытларда түсирилген майдан пьезоэффектти пайда етпейди. Сонлықтан бундай жағдайларда тек электрострикция қубылысы бақланады.



36-сүўрет. α кварцтың кристаллық қурылысы



37-сүўрет. Кварцтағы туўры пьезоэлектрлик эффект.

а - бойлық ҳәм б - көлденең пьезоэффектлер, в - жылжыў деформациясы менен болдырылатуғын пьезоэффект.

Орайға қарата симметриялы ҳәр бир диэлектрик кристалды сырттан электр майданын түсириў арқалы жасалма түрде пьезоэлектрикке айландырыў мүмкин. Бундай жағдайда Кюри принципине сәйкес симметрия орайына ийе емес электр майданының симметриясы кристалдың симметриясы менен қосылып кристалдың орайға қарата симметриясы жоғалады.

13-санлы лекция. Ферроэлектриклердиң электрлик қәсийетлериниң өзгешеликлери ҳәм доменлик қурылысы. Кристаллардың оптикалық қәсийетлери

Соңғы 20-30 жыллар ишинде ферро- ҳәм антиферроэлектриклерди үйрениўге күшли итибар берилди. Ферроэлектриклер ушын спонтан түрде мактроскопиялық поляризация пайда болатуғын ҳәм кристалдың доменлерге бөлинетуғын базы бир температура (бул температураны Кюри ноқаты деп атаймыз) тән болады. Антиферроэлектриклер макроскопиялық спонтан поляризациясына ийе болмайды, бирақ элементар қутышалар спонтан түрде поляризацияланып, қоңсылас қутышалардың поляризациясы бағытлары өз-ара антипараллел болады. Еки элементар қутыша электрлик жақтан нейтрал болған структура үстиндеги нейтрал қутышаны пайда етеди. Антиферроэлектриклер де доменлерге бөлинеди. Фазалық айланыстың ҳәм доменлик қурылыстың болыўы ферроэлектриклер менен антиферроэлектриклердиң физикалық қәсийетлерине үлкен тәсир жасайды.

Изертлеўлер ферроэлектриклер менен антиферроэлектриклердиң спонтан поляризацияның пайда болыў механизмери менен парқланатуғынлығын көрсетеди. Еки механизм бар болып табылады. Биринshiси кислородлық-октаэдрлик типиндеги пәнжереге ийе ферроэлектриклер ҳәм антиферроэлектриклер ушын тән. Бундай кристаллар ҳәр қыйлы зарядқа ийе ионлардың бир бирине салыстырғанда қарма-қарсы бағытлардағы аўысыўының нәтийжесинде поляризацияланады (аўысыў типиндеги ферроэлектриклер). Әдетте бундай материаллардағы поляризация катионның (TI, Nb, Ta ҳәм басқалар) оларды қоршап турған кислородлық октаэдрге салыстырғандағы аўысыўының нәтийжесинде поляризация пайда болады. Атомлық-кристаллық қурылыстың геометриялық өзгешеликлерине байланыслы пайда болған диполлар өз-ара параллел ямаса өз-ара антипараллел бағытларға ийе болыўы мүмкин. Усы процесслерде ең әҳмийетли орынды кислород ионлары ийелейди. Аўысыў типине жатыўшы ферроэлектирклерге перовскит ($BaTiO_к$, $PbTiO_3$, $KNbO_3$), псевдоильменит ($1iNbO_3$, $1iTaO_3$), пирохлор ($Cd_2Nb_2O_7$, $Pb_2Nb_2O_7$) структурасына ийе бирикпелер киреди.

Басқа ферро- ҳәм антиферроэлектриклер ушын фазалық айланыстың нәтийжесинде структураның айырым элементлериниң тәртиплесиўи характерли. (тәртиплесетуғын ферроэлектриклер). Бундай кристаллардағы фазалық өтиў көпшилик жағдайларда водородляқ байланыстағы протонлардың тәртиплесиўи менен жүреди.

Кристаллардың симметриясының спонтан поляризация нәтийжеинде өзгериўи Кюридиң симметрия принципи тийкарында анықланыўы мүмкин. Бул ушын кристалдың дәслепки симметрия элементлериниң менен (яғный параэлектрлик фазадағы симметрия элементлери) оның спонтан поляризациясының симметриясының (спонтан поляризацияның поляр вектор ҳәм оның симметриясының ∞mm екенлигин билемиз) жыйнағын қараўымыз керек. Бундай жағдайда, мысалы, m3m классы ушын ($BaTiO_3$ жағдайы) кублық кристалдың 4 көшери бағытындағы поляр вектор 4mm классына алып келеди. Ал поляр вектор 2 ниң бағытында жүргизилсе mm2 классы, ал 3 бағытында болса 3m ниң пайда болыўына алып келеди. Симметрияның усындай өзгерислерине қутышалардың тетрагонал, ромбалық ҳәм ромбоэдрлик майысыўларының (усындай симметрияға ийе кристаллық фазалардың) пайда болыўына сәйкес келеди.

Усындай жоллар менен спонтан поляризация пайда болғандағы кристаллардың симметриясының кеңисликтеги топарларының өзгерислери кестелерде берилген.

Фазалық айланыс нәтийжесинде кристал доменлерге бөлиниў арқалы макроскопиялық жақтан (тутасы менен алғанда) өзиниң дәслепки параэлектрлик фазасының симметриясына қайтып келеди (әлбетте бул жағдай дәл орынланбайды, себеби ҳәр қандай поляризациядағы доменлер кристалда теңдей муғдарда пайда болады деп толық исеним менен айта алмаймыз). Бул жағдай кристалдың өзиниң ең жоқары температуралы фазасының ноқатлық (кеңисликтеги) симметриясын структуралық ядында сақлаўы деп түсиндириледи. $BaTiO_3$ жағдайында да пайда болған доменлердиң симметриясын қоссақ бираз жоқары болған кублық кристалдың симметриясын аламыз.

Кублық системаға кириўши кристалларда спонтан поляризация пайда болғанда симметрияның кеңислик топарының өзгериўи

Дәслепки топарлар		Спонтан поляризация P_s ке сәйкес келиўши кеңисликтеги топарлар						
Ноқатлық	Кеңисликтеги	<100>	<111>	<110>	<hk0>	<hkk>	<hhk>	<hk1>
	8a3d	84cd	43c	Ғdd	Cc	Pc	Pc	P1
	8m3m	84mm	43m	Ғmm	Cm	Cm	Cm	P1
	Ғd3c	84cd	43c	8ba	Pc	Cm	Cm	P1
	Ғd3m	84md	43m	8ma	Pc	Cm	Cm	P1

	Ғm3c	84cm	43c	8ma	Cm	Cc	Cc	P1
	Ғm3m	84mm	43m	8mm	Cm	Cm	Cm	P1
	Pn3m	P4nm	43m	Abm	Pc	Cm	Cm	P1
	Pm3m	P4mm	43m	Amm	Pm	Cm	Cm	P1
	8$\bar{4}$3d	Ғdd	43c	Pc	P1	Pc	Pc	P1
	8$\bar{4}$3m	Ғmm	43m	Cm	P1	Cm	C	P1
	Ғ$\bar{4}$3c	8ba	43c	Cc	P1	Cc	Cc	P1
	P$\bar{4}$3m	8mm	43m	Cm	P1	Cm	C	P1
	P$\bar{4}$3n	Ccc	43c	Cc	Pə	Cc	Cc	P1
	P$\bar{4}$3m	Cmm	43m	Cm	P1	Cm	C	P1

Егер кристал биринен соң бири бақланатуғын бир неше фазалық айланысларға ушырайтуғын болса (бундай айланыслардың ҳәр биринде спонтан поляризацияның бағыты да, шамасы да өзгереди), онда ҳәр бир фазалық айланыстағы симметрияның өзгериси дәслепки параэлектрлик фазадан тиккелей алынады. Сонлықтан ҳәр бир жаңа ферроэлектрлик фазалық айланыс алдында кристал өзиниң дәслепки параэлектрлик фазасына ‘қайтады} деп есаплаймыз. Бундай қубылыс соңғы ўақытлары кристалдың структуралық есте сақлаўының көриниўиниң бир түри деп атала баслады.

Спонтан поляризацияланған кристалдың доменлерге бөлиниўин энергиялық көз-қараслар тийкарында түсиндириўге болады. Доменлерге бөлиниў арқалы кристал электр майданын туйықлаў жолы менен өзиниң энергиясын азайтады. Бундай көз-қарас бирден бир емес. Мысалы кристалдың ҳәр қандай бөлимлеринде бағытлары ҳәр қандай болған (бирақ кристаллографиялық жақтан эквивалент бағытларда) спонтан поляризация бир биринен ғәрезсиз түрде бир ўақытта пайда болыўы мүмкин. Бул жағдай макроскопиялық спонтан поляризация бақланбайтуғын антиферроэлектриклерде айрықша әҳмийетке ийе.

Ромбоэдрлик системаға кириўши кристалларда спонтан поляризация пайда болғанда симметрияның кеңислик топарының өзгериўи

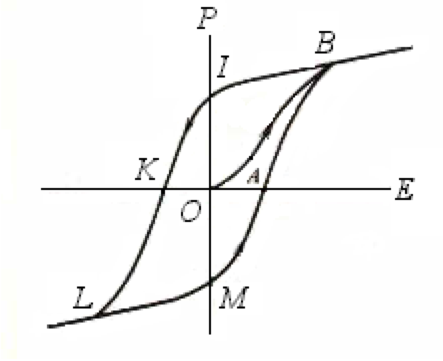
Дәслепки топарлар	Спонтан поляризация P_s ке сәйкес келиўши кеңисликтеги топарлар

Ноқатлық	Кеңисликтеги	<0001>	<11.0>	<10.0>	<hk.0>	<h$\bar{h}$.1>	<h0.1>	<hk.1>
	4$\bar{3}$c	43c	C2	c2	P1	P1	Cc	P1
	4$\bar{3}$m	43m	C2	C2	P1	P1	C	P1
	H$\bar{3}$c	P3c	C2	C2	P1	P1	Cc	P1
	H$\bar{3}$m	H3m	C2	C2	P1	P1	C	P1
	C3c	C3c	C2	C2	P1	P1	Cc	P1
	C$\bar{3}$m	C3m	C2	C2	P1	P1	Cc	P1
	4$\bar{3}$	43	P1	P1	P1	P1	P1	P1
	C$\bar{3}$	C3	P1	P1	P1	P1	P1	P1

Бул жағдай ҳаққында гәп етилгенде симметрияның Кюри принципи менен шатастырмаў керек. Кюри принципинде симметриясы ҳәр қыйлы болған денелер, қубылыслар қосылады. Сонлықтан бундай қосылыўда әдетте симметрия төменлейди. Ал бирдей фигуралардың симметриясын қосыў арқалы (ҳәр қыйлы бағытланған бирдей доменлердиң симметриясын қосыў арқалы) жоқары симметрияға ийе фигура алынады.

Ферроэлектриклердиң доменлик қурылысы ҳәр қыйлы усыллар менен үйрениледи (шық усылы, зарядланған порошок усылы, электролюминесценция, рентген топографиясының ҳәр қыйлы методалары, электрон микроскопиясы, оптикалық методлар ҳәм басқалар).

Доменлик қурылысқа ийе болғанлықтан ферроэлектриклерде ферромагнитлик гистерезис сыяқлы диэлектриклик гистерезис бақланады. Бундай гистерезис (поляризация P менен сырттан түсирилген электр майданы кернеўлилиги E арасындағы байланыс) сүўретте берилген. Ферроэлектриклердеги гистерезис те сырттан түсирилген электр майданының тәсиринде ҳәр қыйлы поляризацияға ийе доменлер арасында өтиўлердиң салдарынан пайда болады.



38-сүўрет. Диэлектриклик гистерезис

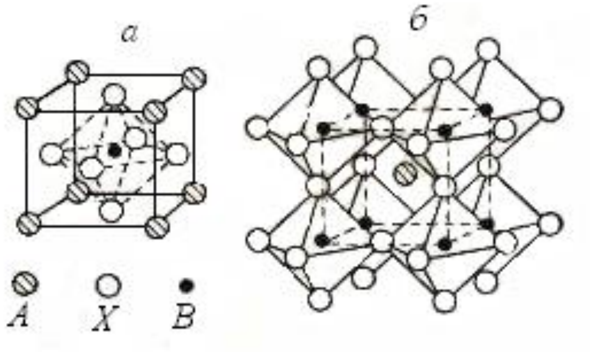
Базы бир ферроэлектрик кристаллардың қурылысы менен қәсийетлери.

1. Барий титанаты. $BaTiO_3$ перовскит қурлысқа ийе болады (сүўретте көрсетилген). 120^0С дан жоқары температураларда идеал кублық қурылысқа ийе.

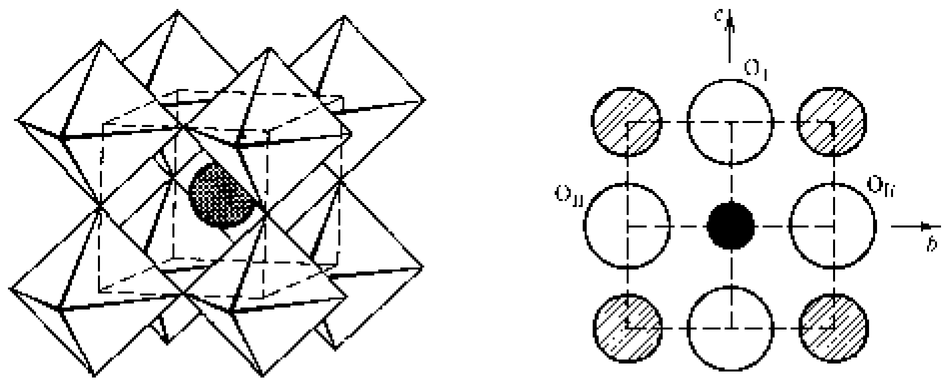
Бул параэлектрлик модификация Pm3m кеңисликтеги топарға жатады (a = 4.0 $\overset{o}{A}$, Z = 1). Ҳәр бир Ti ионы төбелеринде алты кислород жайласқан дурыс тетраэдрдиң ортасында жайласқан. Октаэдрлер бир бири менен өзлериниң төбелери менен байланысады ҳәм каркас пайда етеди. Октаэдрлер арасындағы үлкен бослықларда Ва атомлары жайласқан болады.

120^0С температурасында $BaTiO_3$ кристалларында фазалық айланыс орын алады. 120^0С менен 5^0С аралығында кристал тетрагоналлық қурылысқа ийе. $BaTiO_3$ ушын 120^0С Кюри температурасы болып табылады. Бул температурадан төменги температураларда барий титанаты ферроэлектрик болып табылады. Тетрагонал $BaTiO_к$ дың кеңисликтеги топары P4mm; Z = 1, c/a ≈ 1.01.

Каркасты пайда етиўши кислородлық октаэдрлер сезирлерликтей майыспаған, O_8 диң O_{II} ге салыстырғандағы аўысыўы кем (сүўретте көрсетилген). Титан атомлары сәйкес октаэдрлардиң орайына салыстырғанда 0.15 $\overset{o}{A}$ ге аўысқан. Усының нәтийжесинде O_{II} менен Ti арасындағы еки байланыс 180^0 тан өзгеше мүйеш дүзеди ($171^0$28’) Тетаргонал фазадағы спонтан поляризация бағыты кублық кристалдың 8V-тәртипли симметрия көшериниң бирине параллел.

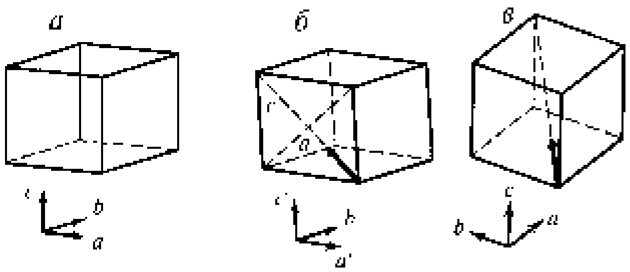


а



б

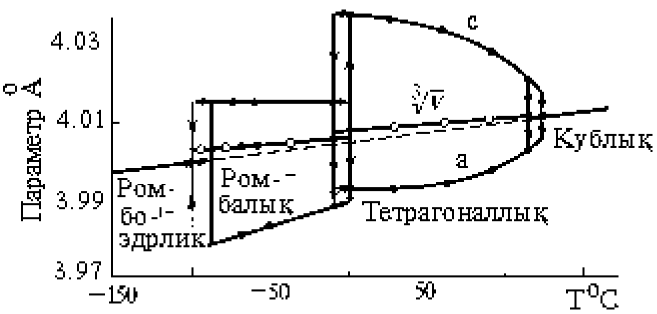
39-сүўрет. а - ABO_3 перовскити типиндеги кристаллардың идеал қурылысы;
б - $BaTiO_3$ тиң кублық элементар қутышысының bc тегислигиндеги проекциясы.



40-сүўрет. $BaTiO_3$ тиң үш ферроэлектриклик фазаларының элементар қутышалары.
а - тетрагонал; б - ромаблық; в - ромбоэдрлик. Стрелкалар менен
P_s тиң бағытлары көрсетилген.

Барий титанаты кристаллының температурасын төменлеткенде 5^0C ның дөгерегинде екинши фазалық айланыс болып өтеди ҳәм кристал ромбалық кристалға айланады. Бундай кристалды алыў ушын кублық элементар қутышаны бир қапталлық диагоналы бағытында қысыў, ал оған перпендикуляр диагонал бағытнда созыў керек. Бул диагоналлар ромбалық көшерлерге айланады (сүўретте көрсетилген). Ромбалық $BaTiO_3$ тиң симметриясының кеңисликтеги топары Bmm2. Жаңа көшерлерде дүзилген қутыша қапталдан орайласқан болып табылады. 2 көшери ромбалық с көшерине сәйкес келеди. Барлық атомлар бир бирине параллел с көшери бағытында аўысқан.

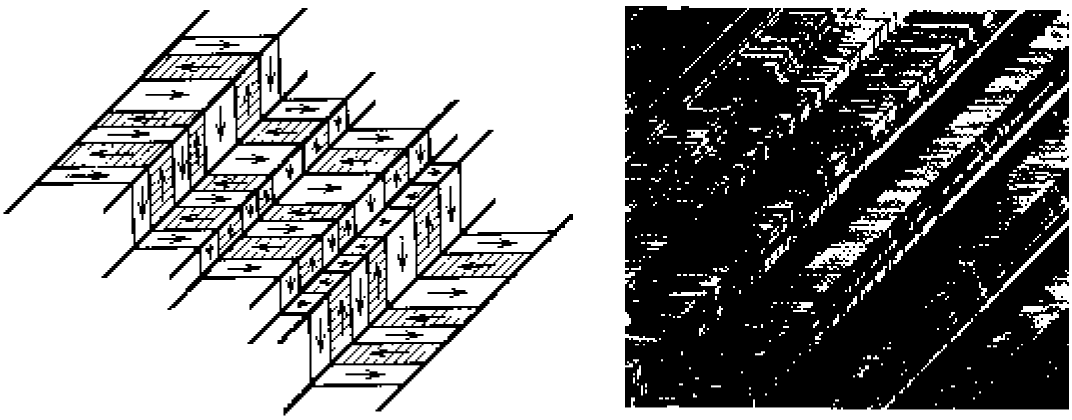
-70^{0}С дан -90^{0}С температуралары арасында $BaTiO_3$ кристаллында үшинши фазалық айланыс жүз береди ҳәм кристал ромбоэдрлик кристалға айланады. Ромбоэдрлик элементар қутышаны кублық элементар қутышының бир көлемлик диагоналы бағытында созыў арқалы алыўға болады (сүўретте көрсетилген). Ромбоэдрлик $BaTiO_3$ кристаллының кеңисликтеги топары 43m.



41-сүўрет. $BaTiO_к$ тиң ҳәр қыйлы фазаларының пәнжерелериниң параметрлериниң температураға ғәрезлилиги.

Барий титанатында поляризацияның тең ҳуқықлы бир неше бағыты болғанлықтан, ол көп көшерли ферроэлектриктиң мысалы бола алады.

2. Калий дигидрофосфаты (KP_2PO_4 ямаса KDP). Силтили металлардың дигидрофосфатлары менен дигидроарсенатлары (KH_2PO_4, $4bH_2PO_4$, KH_2AsO_4, RbH_2AsO_4, CsH_2AsO_4 ҳәм сәйкес дейтерийленген бирикпелер) структураның тәртиплесиўши элементлерине ийе - водородлық байланыслы ферроэлектриклер болып табылады. KH_2PO_4 кристаллының рентгенографиялық ҳәм нейтронографиялық усыллар менен көп изертленгенлигине байланыслы бул ферроэлектриктиқ қурылысы менен фазалық өтиўлериниң механизмлери толық анықланған.

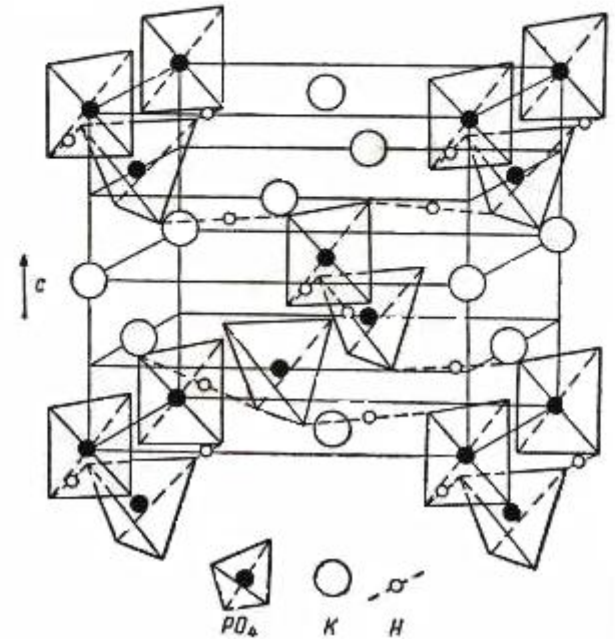


42-сүўрет. $BaTiO_3$ кристалындағы доменлер арасындағы 180 ҳәм 90 градуслық шегаралар.

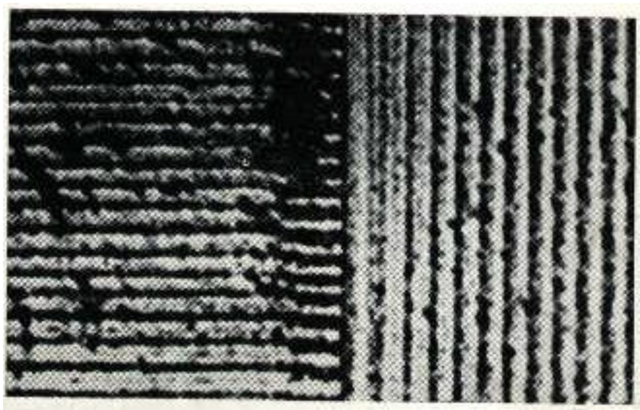
Өжире температураларында KDP $\bar{4}2m$ тетрагонал класста кристалланады (кеңисликтеги топар $I\bar{4}2d$, a = 7.45236 ± 0.000089 Å, c = 6.97298 ± 0.000073 Å, Z = 4). Пәнжере дерлик дурыс формадағы PO_4 тетраэдрлеринен турады (сүўретте көрсетилген). Тетраэдрлер ортасында калий ионлары жайласқан болып, олардың ҳәр қайсысы PO_4 тетраэдрлерине кириўши сегиз кислород атомы менен қоршалған. Усы сегиз кислород атомының төртеўи қалған төртеўине қарағанда калий ионына жақын жайласқан.

-150^{0}С температурада KDP кристалларында ферроэлектриклик фазалық өтиў болып, пәнжере ромбалық ҳалға келеди. Симметрияның кеңисликтеги топары Ғdd (ноқатлық топар mm2). Бул жағдайда a ҳәм b кристаллографиялық көшерлери параэлектрлик фазадағы көшерлерден 45^0 қа бурылған. Ромбалық элементар қутышаның турақлылары a = 10.54581 ± 0.000087 Å, b = 10.46634 ± 0.000094 Å, c = 6.92641 ± 0.000072 Å. KDP кристаллында ферроэлектриклик өтиў нәтийжесинде элементар қутышаның көлеми (6-10)$\cdot 10^{-3}$ % ке ғана (жүдә киши шамаға) өзгереди.

Кристалдың бир кристаллографиялық тегисликте екилениўи макроскопиялық жақтан қайтадан $\bar{4}2m$ ноқатлық топарына алып келеди. Доменлер тетрагонал кристалдың (100) ҳәм (010) кристаллографиялық тегисликлер семейственсына параллел (сүўретте көрсетилген). Поляризацияның бағыты [001] бағыты менен сәйкес келеди. Доменлердиң қалыңлығы (2-3)$*10^{-4}$ см ди қурайды.



43-сүўрет. $I\bar{4}2d$ кеңисликтеги топарына сәйкес келиўши KDP ның элементар қутышасы.



48V-сүўрет. KDP кристаллындағы доменлердиң шық усылында көриниўи.

Кристаллардың оптикалық қәсийетлери. **Анизотроп орталықтағы тегис электрмагнит толқынлар**. Анизотроп тутас орталықлардың электромагнит толқынларға қатнасы электродинамиканың Максвелл теңлемелери менен тәрипленеди. Бул жағдайда индукция **D** менен электр майданының кернеўлилиги **E**, индукция **B** менен магнит майданының кернеўлилиги **H** арасындағы байланыс жийилик ω ға ғәрезли болған диэлектриклик ҳәм магнитлик сиңиргишлик тензорлары $\varepsilon_{ik}(\omega)$, $\mu_{ik}(\omega)$ менен аңлатылады. Байланыс теңлемелери былай жазылады:

$$D_i = \varepsilon_{ij}(\omega)E_k, \quad B_i = \mu_{ik}(\omega)H_k. \qquad \text{(V-23)}$$

Егер дене сырттан түсирлигне магнит майданында жайласқан болмаса кинетикалық коэффициентлердиң улыўмаласқан симметрия принципи ε_{ij} тензорының симметриялылығын талап етеди, яғный $\varepsilon_{ij} = \varepsilon_{ji}$.

Электромагнит энергиясы ағымы тығызлығы Умов-Пойнтинг векторы жәрдеминде анықланады:

$$S = \frac{c}{4\pi}[E*H]. \qquad \text{(V-24)}$$

Көлем бирлигиндеги бир бирлик ўақыт ишиндеги энергияның өзгериси былай есапланады:

$$\mathrm{div}\mathbf{S} = \frac{c}{4\pi}(\mathbf{E}\ \mathrm{rot}\,\mathbf{H} - \mathbf{H}\ \mathrm{rot}\,\mathbf{E}) = \frac{1}{4\pi}(\mathbf{E}\frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t} + \mathbf{H}\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t}).$$

Монохроматик толқынлар ушын E менен H ты комплекс шамалар болған $E_0 e^{-\omega t}$ хәм $H_0 e^{-\omega t}$ менен алмастырамыз. Бундай жағдайда орталастырыў операциясын орынлағыннан кейин диэлектриклик жоғалтыў ушын төмендегидей аңлатпаларға ийе боламыз:

$$1 = (i\omega/8\pi)(\varepsilon_{ik}^* - \varepsilon_{ki})E_iE_k^*. \qquad \text{(V-25)}$$

Жутыў болмағанда $\varepsilon_{ik}^* = \varepsilon_{ki} = \varepsilon_{ik}$, бундай жағдайда диэлектриклик сиңиргишлик поляр тензоры тек ғана симметриялық болып қоймай, ҳақыйқый да (затлық та) болады. Бундай тензорға $\mathbf{r}\varepsilon\mathbf{r} = 1$ эллипсоиды сәйкес келеди ($\mathbf{r}$ радиус-вектор). Кристаллоптикада бундай эллипсоидты ***Френел эллипсоиды*** деп атайды.

Координаталар көшерлерин сәйкес етип сайлап алып эллипсоид теңлемесин өзиниң каноникалық түрине алып келиўге болады:

$$\varepsilon_{11}x^2 + \varepsilon_{22}y^2 + \varepsilon_{33}z^2 = 1. \qquad \text{(V-26)}$$

Бундай системаның координаталар көшерлериниң бағытлары бас бағытлар, ал $\varepsilon_{11} = \varepsilon_x$, $\varepsilon_{22} = \varepsilon_y$, $\varepsilon_{33} = \varepsilon_z$ шамалары ε_{ij} тензорының бас мәнислери деп аталады.

Енди 2-рангалы симметриялы тензордың түрине кристалдың симметриясының қандай тәсир жасайтуғынлығын еске түсиремиз (биринши бапта айтылған жағдайларға кеўил бөлемиз). Биринщиден, бундай тензордың қураўшылары инверсиялық түрлендириўлерде өзгермей қалады. Сонлықтан 32 ноқатлық топардан симметрия орайына ийе 11 топарды қараймыз. ε_{ik} симметриялық тензорының түриниң 3-, 8V- хәм 6-тәртипли симметрия көшерлери бар барлық топарлар ушын бирдей болатуғынлығына байланыслы да қарап атырылған класслардың саны кемейеди. Кублық кристаллар ушын ε_{ik} тензоры скалярға айланады. Нәтийжеде хәр қыйлы кристаллық сингониялар ушын бес түрли тензор қалады:

$$\begin{Vmatrix} \varepsilon_{11} & \varepsilon_{12} & \varepsilon_{13} \\ \varepsilon_{21} & \varepsilon_{22} & \varepsilon_{23} \\ \varepsilon_{31} & \varepsilon_{32} & \varepsilon_{33} \end{Vmatrix}, \begin{Vmatrix} \varepsilon_{11} & \varepsilon_{12} & 0 \\ \varepsilon_{21} & \varepsilon_{22} & 0 \\ 0 & 0 & \varepsilon_{33} \end{Vmatrix}, \begin{Vmatrix} \varepsilon_{11} & 0 & 0 \\ 0 & \varepsilon_{22} & 0 \\ 0 & 0 & \varepsilon_{33} \end{Vmatrix},$$

$$\begin{Vmatrix} \varepsilon_{11} & 0 & 0 \\ 0 & \varepsilon_{11} & 0 \\ 0 & 0 & \varepsilon_{33} \end{Vmatrix}, \begin{Vmatrix} \varepsilon_{11} & 0 & 0 \\ 0 & \varepsilon_{11} & 0 \\ 0 & 0 & \varepsilon_{11} \end{Vmatrix}.$$

Тензордың дәслепки үш түри жағдайында триклинлик, моноклинлик ҳәм ромбалық сингонияларда характеристикалық бет үш көшерли эллипсоид болып табылады. Тригонал, гексагонал ҳәм тетрагонал сингониялар ушын характеристикалық бет айланыў эллипсоиды, ал кублық сингонияда эллипсоид сфераға айланады.

Енди мөлдир магнитлик емес кристаллардағы тегис толқынның таралыўын қараймыз. Бундай жағдайда электр ҳәм магнит майданы кернеўлиликлери менен индукциялары арасындағы байланыс былайынша анықланады:

$$D_i = \varepsilon_{ik}E_k, \ \ B_i = H_i. \qquad \text{(V-27)}$$

Бул жерде ε_{ik} оң бас мәнислерге ийе ҳақыйқый, симметриялық тензор. Жийилиги ω, толқын векторы **k** болған монохроматик толқын ушын $E = E_0 \exp[i(\omega t - \mathbf{kw})]$ деп жаза аламыз. $\mathbf{k} = (\omega/c)\mathbf{n}$ (**n** толқынлық нормал).

$$\mathrm{rot}\,\mathbf{H} = \frac{1}{c}\frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t}, \ \ \mathrm{rot}\,\mathbf{E} = -\frac{1}{c}\frac{\partial \mathbf{H}}{\partial t}$$

түринде жазылған Максвелл теңлемелеринен

$$\mathbf{H} = [\mathbf{n}\mathrm{x}\mathbf{E}], \ \mathbf{D} = -[\mathbf{n}\mathrm{x}\mathbf{H}]$$

аңлатпаларын аламыз. Солай етип **n**, **E**, **D** векторлары **H** қа перпендикуляр болған бир тегисликте жатады. Соның менен бирге $\mathbf{D} \perp \mathbf{n}$ (сүўретте көрсетилген). Кейинги теңлемелерден **H** ты жоқ қылып

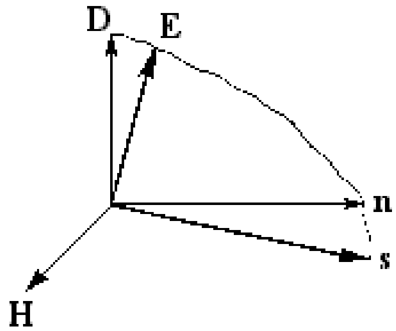
$$\mathbf{D} = \mathbf{n}^2\mathbf{E} - \mathbf{n}(\mathbf{nE}) \qquad \text{(V-28)}$$

аңлатпасын аламыз.

(V-27) байланыс теңлемелерин пайдаланып E_i қураўшылары ушын үш сызықлы бир текли теңлемелер аламыз:

$$(n^2\delta_{ik} - n_i n_k - \varepsilon_{ik})E_k = 0,\ \delta_{ik} = \begin{cases} 0, i \neq k, \\ 1, i = k, \end{cases} \qquad \text{(V-29)}$$

Системаның анықлаўшысының нолге тең болыўы сызықлы бир текли теңлемелердиң бир системаға киретуғынлығының шәрти болып табылады. Бул шәрт көшерлери ε_{ik} тензорының бас бағытлары менен сәйкес келетуғын декарт координаталар системасында бул кристаллооптиканың бас теңлемеси болған ***Френел теңлемесине*** алып келеди:

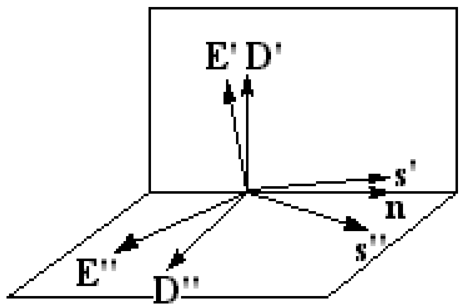


46-сүўрет. Кристаллардағы жақтылық толқынының **E**, **D**, **H**, **n**, **s** векторларының өз-ара жайласыўы (**s** нур векторы, **ns** = 1)

$$n^2(\varepsilon_x n_x^2 + \varepsilon_y n_y^2 + \varepsilon_z n_z^2) - [n_x^2 \varepsilon_x(\varepsilon_y+\varepsilon_z) + n_y^2 \varepsilon_y(\varepsilon_x+\varepsilon_z) + n_z^2 \varepsilon_z(\varepsilon_x+\varepsilon_y)] +$$
$$+ \varepsilon_x\varepsilon_y\varepsilon_z = f(k_x, k_y, k_z) = 0. \qquad \text{(V-30)}$$

Бул аңлатпа симметриялырақ түрде былайынша жазылады:

$$\frac{(n_x^0)^2}{1/n^2 - 1/\varepsilon_x} + \frac{(n_y^0)^2}{1/n^2 - 1/\varepsilon_y} + \frac{(n_z^0)^2}{1/n^2 - 1/\varepsilon_z} = 0. \qquad \text{(V-31)}$$



47-сүўрет. Кристалдағы еки тегис сызықлы поляризацияланған толқынлардың **E**’, **D**’, **s**’ ҳәм **E**’’, **D**’’, **s**’’ векторлары.

Егер ε_{ik} тензорының ε_x, $,_y$ хәм ε_z қураўшылары жийилик ω ның функциясы сыпатында белгили болса Френель теңлемеси **n** векторының абсолют шамасын анықлайды (егер оның бағыты $\mathbf{n}^0$ бирлик векторы жәрдеминде анықланатуғын болса). Толқын векторының хәр бир бағытына улыўма жағдайларда n сыныў көлсеткишиниң еки мәниси хәм индукция векторы D ның еки мәниси сәйкес келеди (D' хәм D'', жақтылық тербелислери бағытлары). Сөйтип кристалларда (изотроп орталықлардағыдан өзгеше) хәр бир бағыт бойынша бағытқа байланыслы хәр қыйлы фазалық тезликтерде тарқалатуғын еки сызықлы поляризацияланған толқын таралады. Бул толқынлардың бағытларын анықлаў ушын n^0 бағытында бағытланған Z' көшерине ийе жаңа координаталар системасын сайлап алған қолайлы. (V-28) дан **D** векторының еки көлденең қураўшысы ушын анықлаўшысы нолге тең болған

$$(\varepsilon_{\alpha\beta}^{-1} n^2 - \delta_{\alpha\beta}) D_\beta = 0. \qquad \text{(V-32)}$$

еки теңлемесин алыўға болады. Бул теңлемелер **D** векторының бағытын анықлайды. {(V-32) системасында α, β = X', Y', суммалаў β бойынша жүргизиледи).

(V-32) нан n ниң еки мәнисине (Френел теңлемесиниң еки шешимине сәйкес келиўши) сәйкес келетуғын D' хәм D'' векторларының бағытларыниң өз-ара перпендикуляр екенлигин көриўге болады (сүўретте көрсетилген).

Енди Умов-Пойнтинг энергия ағысы векторын қараймыз:

$$\mathbf{S} = \frac{c}{4\pi}[\mathbf{E} \times \mathbf{H}] = \frac{c}{4\pi}[nE^2 - E(nE)]. \qquad \text{(V-33)}$$

S векторы **D**, **E**, **n** векторлары тегислигинде жатады, электр майданы кернеўлилиги векторы **E** ге перпендикуляр, ал **n** векторы менен бағыты бойынша сәйкес келмейди. **S** векторының ħω/ħt группалық тезлик бағытында бағытланғанлығын дәллилеўге болады. Нур векторы **s** деп **S** бағытындағы, абсолют шамасы бойынша **ns**=1 шәртин қанаатландыратуғын векторды атайық. Енди **sE** = 0, **sH** = 0 ге ийе боламыз [(V-33) ди қараймыз].[**s** x **H**] = [**s** x [**n** x **E**]] = -**E**, [**s** x **D**] = - [**s** x [**n** x **H**]] = **H**.

Енди

$$D_i = \varepsilon_{ik}E_k, \quad \mathbf{D} = -[\mathbf{n} \times \mathbf{H}], \quad \mathbf{H} = [\mathbf{n} \times \mathbf{E}], \quad \mathbf{ns} = 1, \qquad \text{(V-34a)}$$

$$E_i = \varepsilon_{ik}D_k, \quad \mathbf{E} = -[\mathbf{s} \times \mathbf{H}], \quad \mathbf{H} = [\mathbf{s} \times \mathbf{D}], \quad \mathbf{ns} = 1 \qquad \text{(V-34б)}$$

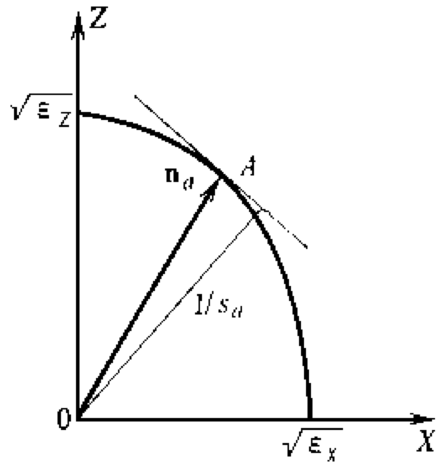
теңлемелер қатарларын салыстырамыз хәм **D**, **H**, **n** шамалары ушын дүзилген (V-34a) дағы $\varepsilon_{ik} \to \varepsilon_{ik}^{-1}$, **D** $\to$ **E**, **n** $\to$ **s** алмастырыўларын пайдаланыў жолы менен **E**, **H**, **s** шамалары ушын теңлеме аламыз. Кристаллооптикадағы ***екилик принципиниң*** мазмуны усыннан ибарат. Мысалы s^0 диң бағыты бойынша нур векторы s тиң абсолют шамасын анықлаў ушын (V-31) ден

$$\frac{(s_x^0)^2}{1/s^2-1/\varepsilon_x^{-1}}+\frac{(s_y^0)^2}{1/s^2-1/\varepsilon_y^{-1}}+\frac{(s_z^0)^2}{1/s^2-1/\varepsilon_z^{-1}}=0$$

теңлемесин аламыз.

(V-32) қатнасларына әпиўайы геометриялық түр бериў мүмкин. ε_{ik}^{-1} тензорының көшерлери $\sqrt{\varepsilon_x}$, $\sqrt{\varepsilon_y}$, $\sqrt{\varepsilon_z}$ болған эллипсоидын қараймыз. Бул эллипсоид ***оптикалық индикатриса*** деп аталады. Толқын векторы k ның базы бир бағытын аламыз. Сайлап алынған n^0 бағытына перпендикуляр болған тегислик пенен эллипсоидтың кесилисиў сызығы улыўма жағдайда эллипс болып табылады. (V-31) теңлемеси бул кесимдеги эллипстиң бас ярым көшерлери сыныў көрсетикишлери n ниң мәнислерине тең, ал бағыты n^0 тәрепинен берилген еки толқынның индукция векторлары D’ ҳәм D’’ лардың бағыты менен бағытлас. Екилик принципи (алмастырыў қағыйдасы) нур векторы **s** тиң берилген бағыты ушын электр майданының кернеўлилиги векторлары E’ ҳәм E’’ ушын да сәйкес эллипсоид ҳәм эллипс қурыўға мүмкиншилик береди.

Кристалдағы жақтылық толқынының бағытына сыныў көрсеткишлериниң ғәрезлилиги ҳаққында көргизбели түрде толқын векторлары бети береди. Бул беттиң берилген бағыттағы радиус-векторларының мәнислери $\mathbf{n}^0$ Френел теңлемеси жәрдеминде анықланған сыныў көрсеткишлериниң мәнислерие тең. Тап сондай төртинши тәртипли бет **s** нур векторлары ушын да дүзилиўи мүмкин. Буннан былай ҳәр қыйлы класстағы кристаллар ушын усындай бетлердиң түриниң қандай болатуғынлығын қараймыз.



48-сүўрет. Кристалдағы нур ҳәм толқын векторлары арасындағы геометриялық қатнасты келтирип шығарыў ушын пайдаланылатуғын сүўрет.

Мейли $f(k_x, k_y, k_z, \omega) = 0$ толқын векторлары бетиниң теңлемеси болсын. Группалық тезликтиң қураўшылары (бул қураўшылар $\frac{\partial\omega}{\partial k_i} = -\frac{\partial f / \partial k_i}{\partial f / \partial\omega}$ теңлиги жәрдеминде анықланады) $\frac{\partial f}{\partial n_i}$ туўындысына туўра пропорционал. Сонлықтан нур векторы g$f$ad f ке параллел, яғный толқын векторлары бетине түсирилген нормал бойынша бағытланған. Мейли енди $\mathbf{n}_a$ толқын векторлары бетиниң қандай да бир ноқатының радиус-векторы, ал s_a сәйкес нур векторы болсын. А ноқатындағы толқын векторлары бетине түсирилген урынба беттиң теңлемеси $\mathbf{s}_a(\mathbf{n} - \mathbf{n}_a) = 0$ түрине ийе болады, ал $\mathbf{n}_a\mathbf{s}_a = 1$ болғанлықтан $\mathbf{s}_a\mathbf{n} = 1$. Демек толқын векторлары тегислигине перпендикуляр координата басына шекем жүргизилген туўрының узынлығы $1/s_a$ ға тең. Тап усы сыяқлы нур векторлары тегислигине координата басынан жүргизилген перпендикулярдың узынлығы $1/n_a$ ға тең. Усындай жоллар менен кристаллардағы жақтылық толқынының нур ҳәм толқын векторлары арасындағы геометриялық сәйкесликти таба аламыз.

Бир көшерли кристаллар. Диэлектриклик сиңиргишлик тензорының түрин қарап шығыў менен барлық кристалларды диэлектрлик сиңиргишлик тензорының бас мәнислериниң саны (1, 2, 3) бойынша үш топарға бөлиўге болатуғынлығын көремиз.

Кублық кристаллар ушын ε_{ik} тензоры $\varepsilon = n^2$ скалярға айланады ҳәм бундай кристаллар оптикалық қәсийетлери бойынша изотроп денелерден айырмасы болмайды. Тригонал, тетрагонал, гексагонал кристаллар ушын ε_{ik} тензоры еки бас мәисине ийе болады: $\varepsilon_z = \varepsilon_{||} = n_e^2$, $\varepsilon_x = \varepsilon_y = \varepsilon_\perp = n_0^2$. Сәйкес характеристикалық бет көшери жоқары тәртипли симметрия көшерине параллел айланыў эллипсоиды болып табылады. Френел теңлемеси бир көшерли кристаллар ушын бас координаталар систмасында еки теңлемеге айрылады:

$$n^2 - \varepsilon_\perp = 0,\ n_z^2/\varepsilon_\perp + (n_x^2 + n_y^2)/\varepsilon_{||} = 1. \qquad \text{(V-35)}$$

Солай етип бир көшерли кристалларда толқын векторының ҳәр бир бағытында еки толқын тарқала алады: сыныў көрсеткиши $n_0 = \sqrt{\varepsilon_\perp}$ болған бағытқа ғәрезсиз (сонлықтан усындай атты алған) ***әдеттеги толқын***, екинши толқынды әдеттегидей емес толқын деп атаймыз ҳәм ол кристалдағы ең жоқарғы симметрия көшерине параллел етип алынған көшер Z ке салыстырғандағы **n** векторының еңкейиў мүйеши θ ға ғәрезли:

$$1/n^2 = \sin^2\theta/\varepsilon_{||} + c\hat{}s^2\theta/\varepsilon_\perp. \qquad \text{(V-36)}$$

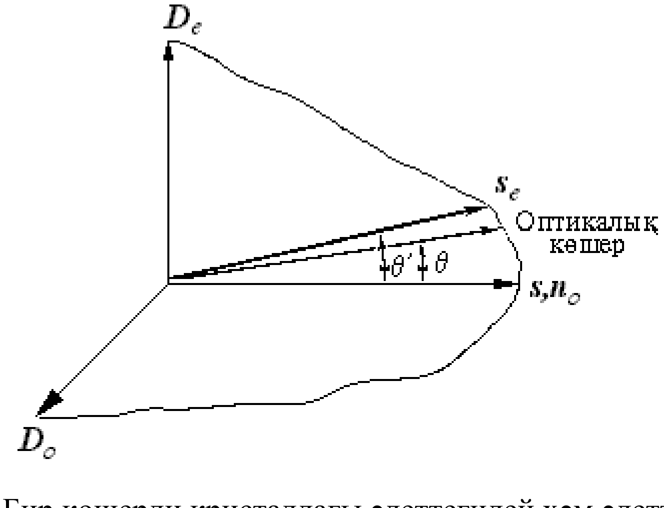
θ = 0 болғанда бир айрықша бағытта еки толқынның да сыныў көрсеткишлери теңleседи: $n_0 = n = \sqrt{\varepsilon_\perp}$. Бундай жағдайда кристалда изотроп денедегилердей толқынлар бирдей тезликте тарқалады. Кристалдағы усындай бағыт ***оптикалық көшер*** деп аталады.

Сонлықтан тригонал, тетрагонал ҳәм гексагонал сингониялы кристалларды бир көшерли кристаллар деп атаймыз.

E, демек **D** векторының бағытын (V-23) бойынша анықлаўшы (V-29) теңлемелер системасының шешимлери әдеттегидей толқында жақтылық тербелислериниң бағытының оптикалық көшер ҳәм толқын векторы жататуғын тегисликке перпендикуляр екенлигин көрсетеди. Бундай тегислик ***бас кесим*** деп аталады (сүўретте көрсетилген). Ал әдеттегидей емес толқында болса керисинше, тербелислер бағыты бас кесимде жатады. Әдеттегидей толқынның нур векторы толқын векторы n ниң бағыты менен сәйкес келеди ҳәм кристалдың оптикалық көшери менен θ мүйешин жасайды. Әдеттегидей емес толқынның нур векторы бас кесим тегислигинеде жатады (**n**, **D**, **s**, **E** векторлары барлық ўақытта компланар), бирақ толқын векторы **n** ниң бағыты менен бағытлас емес ҳәм оптикалық көшер менен басқа θ‘ мүйешин жасайды. Бул мүйештиң бағыты былайынша анықланады:

$$\mathrm{tg}\theta' = (\varepsilon_{\perp}/\varepsilon_{\parallel})\,\mathrm{tg}\theta. \qquad \text{(V-37)}$$

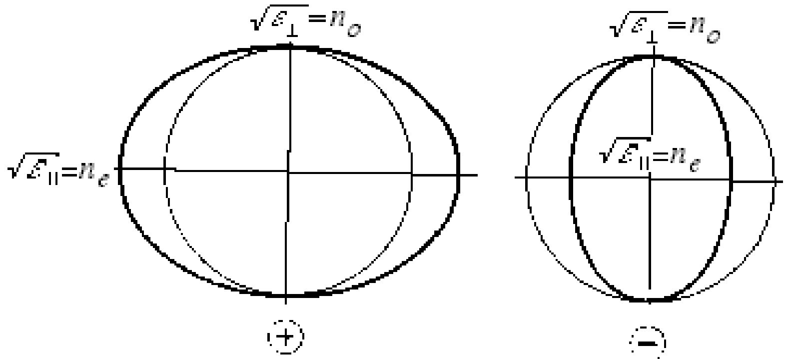
Френел теңлемесинен бир көшерли кристалларда толқын векторларының бетлери еки бетке бөлинеди: әдеттегидей толқын ушын сфералық ҳәм әдеттегидей емес толқын ушын айланыў эллипсоиды. Оптикалық көшер бойында жатқан еки ноқатта усы еки бет бир бирине тийеди. Егер $n_0 < n_,$ болса кристалды оң, ал $n_0 > n_,$ болғанда кристалды терис деп атаймыз.



49-сүўрет. Бир көшерли кристалдағы әдеттегидей ҳәм әдеттегидей емес толқынлардағы жақтылық тербелислериниң бағытлары.

Еки көшерли кристаллар. Триклин, моноклин ҳәм ромбалық кристаллар ушын толқын векторлары бетлерин дүзгенде бир биринен өзгеше үш бас мәнисине ийе болатуғын үш көшерли эллипсоидты пайдаланамыз: $\varepsilon_{ik}^{-1} x_i x_k = 1$. Эллипсоидтың 6 көшерине перпендикуляр толқын векторларының бетиниң кесе-кесимин дүзиў ушын ($\varepsilon_x < \varepsilon_y < \varepsilon_z$

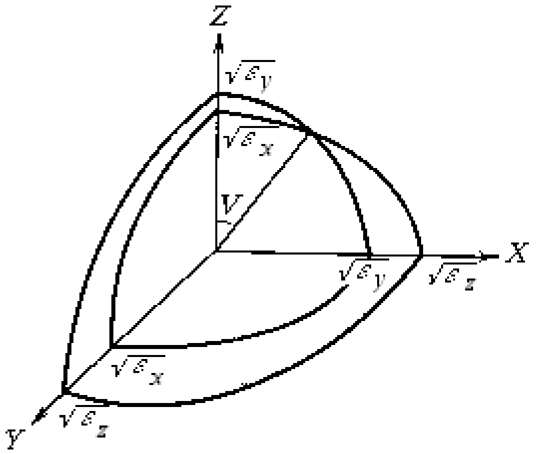
болған жағдайда) былайынша ҳәрекет етемиз: тензорлық эллипсоидты 6Z тегислиги менен кесемиз; $\sqrt{\varepsilon_y}$ ҳәм $\sqrt{\varepsilon_z}$ ке тең болған кесиндилерди X көшери бойына орналастырамыз. Эллипсоид кесими ишинде кесиўден пайда болған тегисликти 6 көшери дөгерегинде бурыў арқалы турақлы $\sqrt{\varepsilon_z}$ ярым көшерине ийе эллипсти ҳәм $\sqrt{\varepsilon_z}$ тен минималлық $\sqrt{\varepsilon_x}$ ке шекем өзгеретуғын басқа өзгериўшини аламыз. Солай етип толқын векторлары бетиниң кесиминде радиусы $\sqrt{\varepsilon_y}$ ке тең шеңбер ҳәм ярым көшерлери $\sqrt{\varepsilon_x}$, $\sqrt{\varepsilon_z}$ болған эллипс аламыз. Тап усындай жоллар менен X ҳәм Z көшерлерине перпендикуляр болған басқа еки кесим аламыз (сүўретте көрсетилген)



50-сүўрет. Оң ҳәм терис кристаллар ушын толқын векторларының бетлери.

Бет төрт ноқатта бир бирине тийетуғын еки қабық тәрепинен пайда етиледи ҳәм симметрия орайына ийе болады. Усы ноқатларға координата басынан жүргизилген туўрылар ***оптикалық көшерлер*** ямаса ***бинормаллар*** деп аталатуғын туўрылар бойынша сыныў көрсеткишлери бир бирине теңлеседи ҳәм екиленип нур сындырыў болмайды (бул бағытларға тензорлық эллипсоидтың шеңбер тәризли кесими сәйкес келеди). Сонлықтан триклин, моноклин ҳәм ромбалық кристаллар еки көшерли кристаллар деп аталады. Оптикалық көшерлер Z көшери менен V мүйешин жасайды. Бул мүйештиң мәнисин шеңбер теңлемеси $x^2 + z^2 = \varepsilon_y$ менен $x^2/\varepsilon_z + z^2/\varepsilon_x = 1$ эллипс теңлемесин қосып шешиў арқалы алынады:

$$\mathrm{tg}V = \sqrt{\frac{\varepsilon_z(\varepsilon_y - \varepsilon_x)}{\varepsilon_x(\varepsilon_z - \varepsilon_y)}} \qquad \text{(V-38)}$$



51-сүўрет. Еки көшерли кристаллардағы толқынлық бетлер.

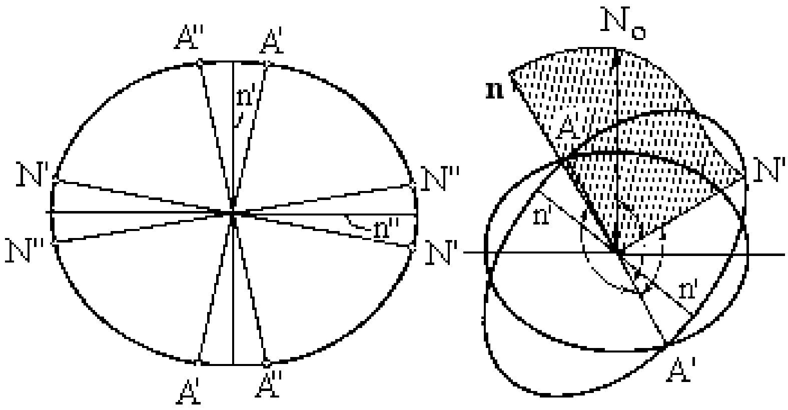
Төмендеги кестеде базы бир еки көшерли кристаллар ушын n менен V ның мәнислери берилген:

Кристал	n_1	n_2	n_3	$2V^0$
Силитра KNO_3	1.3328	1.49 II	1.4994	6
Аммиак силитрасы NH_4NO_3	1.411	1.605	1.6296	35
Гипс $CaSO_4*2H_2O$	1.521	1.523	1.530	58
Арагонит $CaCO_3$	1.530	1.681	1.685	18

Толқын векторының бағытына байланыслы толқынларды сыныў көрсеткишиниң аналитикалық мәнислери (V-30) ямаса (V-31) Френел теңлемелери жәрдеминде әмелге асырылады. Әпиўайылық ушын биз жоқарыда қолланғанымыздай толқын векторының бағытын диэлектрик сиңиргишлик тензорының бас көшерлери менен дүзетуғын бағытлаўшы косинуслары n_x^0, n_y^0, n_z^0 лердиң жәрдеминде емес, ал кристалдың оптикалық мүйеши менен жасайтуғын φ_1 ҳәм φ_2 еки мүйешиниң жәрдеминде беремиз. Усындай жоллар менен толқын векторының бағытын анықлаў арқалы усы бағытта тарқалатуғын толқынлардың сыныў көрсеткишлери n' пенен n'' арасындағы айырманы аңсат есаплаўға болады:

$$\frac{1}{(n')^2} - \frac{1}{(n'')^2} = \left(\frac{1}{\varepsilon_x} - \frac{1}{\varepsilon_y}\right) \sin\varphi_1 \sin\varphi_2. \qquad \text{(V-39)}$$

Еки көшерли кристаллардағы толқынлар тербелисиниң бағыты ҳаққындағы мәселе ***Френел теоремасы*** жәрдеминде шешиледи. Бул теорема бойынша **n** векторына сәйкес келиўши жақталық толқыны тербелислери бағыты (яғный **D** векторлары бағыты) n векторына перпендикуляр болған тегисликтеги ҳәр бири **n** векторы менен оптикалық көшерлердиң бирин алатуғын еки тегисликтиң излери арасындағы мүйешлердиң биссектирисасы болып табылады.



52-сүўрет. Еки көшерли кристаллардағы жақтылық толқынларының поляризациясы ҳаққындағы Френель теоремасын келтирип шығарыў ушын керек болған сүўрет.

Мейли n’ пенен n’’ ε_{ik}^{-1} тензоры эллипсоидының n векторына перпендикуляр тегислик пенен кесилисиўинен келип шыққан эллипситиң ярым көшерлери, пл A’A’ диаметри бул кесимниң эллипстиң дөңгелек кесими менен кесилисиў сызығы болсын. Эллиптикалық кесимде A’A’ ке перпендикуляр N’N’ диаметрин жүргиземиз. **n**, **N**$_0$, N’N’ лардың A’A’ ке перпендикуляр болған бир тегисликте жататуғынлығы түсиникли. Усындай болған дүзилис басқа дөңгелек кесим ҳәм басқа оптикалық көшер ушын да қурылыўы мүмкин.

14-санлы лекция. Кристаллардың структуралық анализи тийкарлары. Электрон тығызлығы функциясы. Фурье интегралы. Температуралық фактор. Кристаллардағы дифракция

Затлардың атомлық қурылысын үйрениў рентген нурларының, электронлардың ямаса нейтронлардың дифракциясына тийкарланған. Түскен толқынлардың шашыраўы менен атомлардың жайласыўы арасындағы байланысты үйренетуғын дифракция теориясы барлық нурлар ушын бирдей. Бул теорияны биз улыўма түрде рентген нурлары дифракциясы мысалында қарап шығамыз.

Егер рентген нурларын атомлар жыйналған орынға бағытласақ усы атомлардың электронлық қабықлары түскен нур менен тәсирлесип, нурды шашыратады. Толқынлардың тарқалыў бағыты модули

$$|\mathbf{k}| = 2\pi/\lambda \qquad \text{(V-40)}$$

ге тең болған толқын векторы **k** менен бериледи.

Тегис монохромат толқын ушын улыўмалық аңлатпа былай жазылады:

$$A \exp i(k\mathbf{r} + \alpha). \qquad \text{(V-41)}$$

Бул жерде A амплитуда, **r** кеңислик ноқатының радиус-векторы, α дәслепки фаза.

Бул жазыўда ўақыт жоқ. Себеби бизди қызықтыратуғын қубылысты талқылағанда толқынның ўақыт бойынша тарқалыўы емес, базы бир ўақыт моментиндеги бирзаматлық дифракциялық сүўрет әҳмийетке ийе болады. Бул шашыраған толқынлар арасындағы өз-ара фазалық айырмаларды табыў ушын толық жеткиликли болады. Бул айырмалар тек ғана кеңисликтеги атомлардың жайласыўларына байланыслы болып, ўақытқа ғәрезли емес.

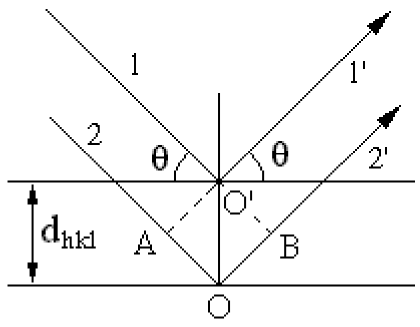
Солай етип бир бағытта таралыўшы еки толқын бирдей фазада болса, онда олар бир бирин күшейтеди ҳәм екиленген амплитудағы толқынды береди. Ал фазалары қарама-қарсы болса, онда бундай толқынлар бир бирин сөндиреди.

Толқынлардың шашыраўы серпимли ҳәм серпимсиз болыўы мүмкин. Ал рентген ҳәм басқа да толқынлардың кристаллардағы шашыраўында тийкарғы орынды серпимли шашыраў қурайды. Сонлықтан шашыраған толқынлардың толқын узынлықлары кристалға келип түскен толқынлардың толқын узынлығына тең болады.

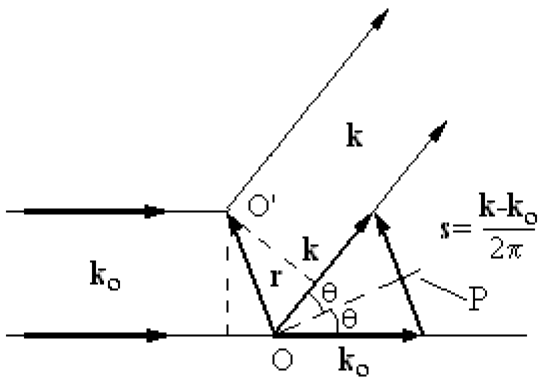
Кристаллардағы толқынлардың дифракциясын кристаллық пәнжерениң тегисликлериндеги ‘шағылысыў’ сыпатында қараўға болады. ‘Шағылысыў’ өз-ара параллел тегисликлер тәрепинен шағылысқан толқынлар бирдей фазада қосылатуғын жағдайларда орын алады. Бул жағдай сүўретте көрсетилген. 1’ ҳәм 2’ нурлары (толқынлары) арасындағы жүрислер айырмасы $\Delta = AO + OB$ ға тең. Өз гезегинде $AO = OB = OO'\sin\theta = d \sin\theta$. Демек $\Delta = 2d \sin\theta$. Еки толқынның бир бирин күшейтиўи ушын Δ пүтин сан еселенген толқын узынлығына ($n\lambda$) тең болыўы керек. Яғный

$$2d \sin\theta = n\lambda. \qquad \text{(V-42)}$$

Шашыраған толқынлардың бағытын (θ), тегисликлер арасындағы қашықлық d_{hk1} ди ҳәм толқын узынлығы λ ни байланыстыратуғын бул теңлемени Вульф-Брэгг теңлемеси деп атаймыз. n шағылысыў тәртиби деп аталады ($n = 1, 2, ...$).



53-сүўрет. Вульф-Брэгг теңлемесин келтирип шығарыўға



58V-сүўрет. Еки ноқатлық орайдағы шашыраў.

Енди объекттиң барлық ноқатларында шашырайтуғын екинши толқынларды қараймыз (демек усы ноқатларға келип түсиўши толқынларды биринши, ал шашыраған толқынларды екинши толқынлар деп атаймыз). Мейли O ҳәм O' болған еки шашыратыўшы орай бар болсын. Усы орайлардың биреўин ($\mathbf{r}$ = 0 болған) координата басы ретинде қабыл етемиз. Ал екиншисиниң орны $\mathbf{r}$ радиус-векторы жәрдеминде бериледи. Толқын келип түскенде бул орайлар қозады ҳәм екинши толқынлар дереклерине айланады. Дәслепки толқын улыўма жағдайларда еки орайға ҳәр қыйлы фазаларда келип жетеди. Сонлықтан шашыраған толқынлар да ҳәр қыйлы болған дәслепки фазаларға ийе болады. Шашыраған толқынлардың фазалары бир бирине сәйкес келетуғын бағытларда бул толқынлар бир бирин күшейтеди. Ал фазалар қарама-қарсы болып қосылатуғын бағытларда толқынлар бир бирин ҳәлсиретеди.

Егер орайлар арасындағы қашықлық $\mathbf{r}$ ден келип түсиўши толқынлардың толқын узынлығы λ әдеўир үлкен болса қәлеген бағытта қосымша фазалар айырмасы пайда болмайды. Сонлықтан шашыраў интенсивлилиги мүйешке ғәрезли болмайды. Кристаллардағы атомлар арасындағы қашықлық шама менен 1-4 $\overset{o}{A}$ болғанлықтан жақтылық (толқын узынлығы бир неше мың $\overset{o}{A}$) келип түскенде дифракцияның бақланыўы мүмкин емес.

Ал рентген нурлары, электронлар, нейтронлар толқын узынлықлары 1 $\overset{o}{A}$ ниң әтирапында. Сонлықтан олар атомлардың жыйнағында шашырағанда дифракциялық эффектлерди береди. Принципинде бундай нурлар атомлық қурылысты изертлеў ушын жарамлы болып табылады.

$\mathbf{r} = 0$ хәм $\mathbf{r}$ ноқатларында k бағытында шашыраған толқынларың жүрислер айырмасын анықлаймыз. Бул айырма $k\mathbf{r} - k_0\mathbf{r} = (k - k_0)\mathbf{r}$ ге тең. Солай етип егер түсиўши толқын бирлик амплитудаға ийе болса (A = 1), $\mathbf{r}$ де турған шашыратыўшы орай

$$f \exp i(k-k_0)f = f \exp 2\pi i\,(Sf) \qquad \text{(V-43)}$$

толқынын береди.

f коэффициенти орайдың шашыратыўшылық күшин береди. (V-43) P атомлық тегислигигине перпендикуляр S векторы қолланылған хәм бул вектор былай анықланады:

$$S = (k-k_0)/(2\pi); \qquad |S| = (2\sin\theta)/\lambda. \qquad \text{(V-44)}$$

Бул тегислик P ға салыстырып θ мүйеши өлшенеди.

Егер толқын n шашыратыўшы орайына ийе объектке келип түссе хәм хәр бир орайдың шашыратыўшылық қәбилетлилиги f_i, жайласқан орны f_i векторы менен анықланатуғын болса (V-43) тийкарында шашыраған толқынлар ушын төмендегидей амплитуда аламыз:

$$\sum_{j=1}^{n} f_j \exp 2\pi i\,(S\,f_j) = F(S). \qquad (6)$$

Ғ(S) берилген объекттиң ***шашыраў амплитудасы*** деп аталады. Ноқатлық шашыратыўшы орай ушын f_i турақлы хәм S ке ғәрезли емес. Шашыраў амплитудасы ушын жазылған (V-45)-аңлатпа универсаллық характерге ийе. Өйткени берилген орай ушын шашыратуў қәбилетлилиги f ти қурамаластырыў арқалы усы орай ретинде электронды, атомды, молекуланы ямаса молекулалардың жыйнағын қараўымыз мүмкин.

Рентген толқынлары (электромагнит толқынлар) объектке келип түскенде электронлар усы толқынларды шашырататуғын ‘физикалық’ ноқатлар болып табылады (Толқынлар келип түскенде атомлардың зарядланған ядролары да тербелиске келеди хәм екинши толқынларды нурландырады. Бирақ (V-46)-аңлатпаның бөлиминдеги m ядролардың электронларға қарағанда $m_Z/m_e \approx 10^4$ кем шашыратуғынлығын аңғартады. Сонлықтан әдетте ядролар тәрепинен шашыраған толқынлар есапқа алынбайды). Хәр бир электрон келип түскен толқынның жийилигиндей (толқын узынлығы келип түскен толқынның толқын узынлығындай) жийиликтеги екинши толқынның дерегине айланады. Электрон тәрепинен шашыратылған толқынның амплитудасы келип түсиўиши толқынның амплитудасына пропорционал ҳәм төмендегидей аңлатпа жәрдеминде анықланады:

$$f_e = \frac{1}{R}\frac{e^2}{mc^2}\sin\varphi. \qquad \text{(V-46)}$$

Бул жерде 4 - бақлаў ноқатын шекемги қашықлық, e, m электронның заряды менен массасы, c жақтылықтың тезлиги, sinφ толқынның поляризациясын есапқа алады.

Бир электронның шашыраў амплитудасын бирге тең деп қабыл етсек (V-45) ке муўапық қәлеген объект тәрепинен шашыраған толқын ‘электронлық} бирликлерде былай анықланады:

$$Ғ(S) = \sum_{j=1}^{n} \exp 2\pi i\,(Sf_j). \qquad \text{(V-47)}$$

Шашыраў амплитудасын абсолют бирликлерде аңлатыў ушын Ғ ти f_e ге көбейтиўимиз керек, яғный

$$Ғ_{абс}(S) = Ғ(S)\, f_5. \qquad \text{(V-48)}$$

Биз буннан былай шашыраған рентген нурларының амплитудасын есаплағанымызда (V-47) тийкарында электронлық бирликлерде есаплаўды қолланамыз. Интенсивлиликтиң абсолют мәнисин есаплағанымызда f_e шамасын да есапқа алыўымыз керек.

Электрон тығызлығы функциясы. Фурье интегралы. $\mathbf{r}_i$ ноқатларында жайласқан n ноқатттың дискрет жыйнағын қараўға қарағанда объекттиң үзликсиз тарқалған шашыратыў қәбилетлилигин қарап шығыў қолайлы болады. Себеби рентген нурлары электронларда шашырайды, ал олар ушын объекттиң ўақыт бойынша орташаланған электронның тығызлығы’ $\rho(\mathbf{r})$ ‘шашыратыўшы материя} болып табылады. Бул функцияның мәниси $\mathbf{r}$ ноқаты әтирапындағы Δv_f көлеми элементиндеги электронлардың орташа саны $n_e(\mathbf{r})$ ге тең:

$$\rho(\mathbf{r}) = n_e(\mathbf{r})/\Delta v_f. \qquad \text{(V-49)}$$

Бундай етип тәриплеў квант механикасында кеңнен қолланылады. Бул жерде ўақыт бойынша орташа электронлық тығызлық берилген объекттиң толқын функциясының квадраты менен бериледи:

$$\rho(f) = |\Psi(f)|^2. \qquad \text{(V-50)}$$

Усындай көз-қараста мәселе шешилетуғын болса дискрет шашыратыўшы орайлар бойынша алынған сумма $\rho(f)$ функциясының үзликсиз өзгеретуғын мәнислери бойынша интеграллаў менен алмастырылады:

$$Ғ(S) = \int \rho(f) \exp [2\pi i(Sf)]dv_f =$$

$$= \iiint\limits_{x,y,z=-\infty} f(x,y,z) \exp[2\pi i(xX + yY + zZ)dxdydz = \mathsf{F}[\rho]. \qquad (51)$$

dv_f шашыратыўшы көлем элементи, S векторының үш қураўшысы X, Y, Z арқалы белгиленген, F Фурье операторы. Бул аңлатпа S векторының функциясына амплитуданы береди, яғный $k = k_0 + 2\pi S$ тиң қәлеген бағытындағы шашыраўды анықлайды.

Дифракцияны тәриплейтуғын бул интеграл математикалық формасы бойынша Фурье интегралы болып табылады. Шашыратыўды тәриплейтуғын Ғ(S) функциясы кери кеңислик деп аталатуғын S векторының кеңислигинде берилген. $\rho(f)$ объекттиң реал кеңисликтеги қурылысын тәриплейди, ҳәм усы қурылыс пенен бир мәнисли байланысқан.

(V-51)-аңлатпаның жәрдеминде ҳәр қыйлы болған мәселелерди шешиў мүмкин: атомлардағы, молекулалардағы, ҳәр қандай формаға ийе ҳәм ишиндеги шашыратыўшы орайлар ҳәр қыйлы болып тарқалған тутас объектлердеги шашыраўды анақлаў мүмкиншилигин береди.

Объекттеги электронлардың терқалыўы $\rho(f)$ атомлардағы электронлардың тарқалыўы $\rho_j(f)$ ҳәм атомлардың өз-ара жайласыўлары бойынша анықланады. $\rho(f)$ функциясының максимумы атомлардың орайына, ал киши мәнислери атомлар арасындағы химиялық байланысларды әмелге асыратуғын сыртқы электронларға сәйкес келеди. Егер атомлардың орайлары f ноқатында жайласқан болса n атомнан туратуғын жыйындысының электронлық тығызлығы төмендегидей үзликсиз функция менен бериледи:

$$\rho(f) = \sum_{j=1}^{n} \rho_j(f - f_j). \qquad (V\text{-}52)$$

Кристал ямаса молекуланың электронлық тығызлығын [$\rho(f)$ ди] усындай жоллар менен айырым атомлардың электронлық тығызлықларының суперпозициясы сыпатында анықлаў арқалы электронлардың сыртқы электронлар қабықларындағы айқын түрдеги тарқалыўын есапқа алмаў мүмкиншилигине ийе боламыз. Электронлық тығызлық функциясы $\rho(f)$ барлық ўақытта да оң мәниске ийе.

(V-51)-Фурье интегралы бир тексизликлериниң өлшемлери түсиўши толқын узынлығы менен барабар болған жағдайлардағы дифракция қубылысын тәриплеў ушын жарамлы. Сонлықтан бул интеграл барлық дифракциялық методлар тийкарында жатады.

Атомлық ампилитуда изоляцияланған атом тәрепинен шашыраўды анықлайды ҳәм оны ***атомлық фактор*** деп те атайды. (V-51) ге атомның электронлық тығызлығы $\rho_a(f)$ ди қойыў арқалы атомлық амплитуданың мәнисин аламыз:

$$f(S) = \int \rho_a(f) \exp [2\pi i(Sf)]\, dv_{wf}. \qquad (V\text{-}53)$$

Атомлардың электронлық қабықлары сфералық симметрияға ийе деп есаплаў жеткиликли дәрежеде дурыс болып табылады. Усындай жақынласыў тийкарында (V-51) ни сфералық координаталарда былай жаза аламыз:

$$f(S) = \int_0^{\infty} 4\pi f^2 \rho_a(f) \frac{\sin sr}{sr} df. \qquad (V\text{-}54)$$

Бул жерде s = $2\pi|S| = 4\pi\frac{\sin\theta}{\lambda}$. Солай етип f функциясы s тиң модулинен ғана ғәрезли ҳәм кери кеңисликте сфералық-симметриялы болады. f(s) ти есаплаў ушын атомлардың электронлық тығызлығы $\rho_a(f)$ диң мәнислерин билиў керек. Ҳәзирги ўақытлары $\rho_a(f)$ тың мәнислери барлық атомлар ушын квант механикасы усыллары жәрдеминде үлкен дәлликте есапланған.

$$s \to 0 \text{ де } \frac{\sin sr}{sr} \to 1 \text{ ҳәм } f(0) = \int \rho_a(f)\, dv_f = Z. \qquad (V\text{-}55)$$

Демек шашыраў мүйешиниң ноллик мәнисинде атомлық амплитуда атомның көлеми бойынша алынған усы атомдағы электронлардың санына тең электронлық тығызлықтың интегралы болып табылады Шашыраў мүйешиниң үлкейиўи менен f тиң мәнислери киширейеди. f- иймекликлери деп аталатуғын бундай функциялар сүўретте берилген.

Температуралық фактор. Кристалларда атомлар жыллылық қозғалыслары ҳалында болады. Шашыраўды анықлайтуғын электронлық тығызлық функциясы $\rho(f)$ ўақыт бойынша орташаланған электронлық тығызлық болып табылады. Дифракциялық эксперименттиң узақлығы атомлардың жыллылық тербелислери дәўиринен әдеўир үлкен болады. жыллылық қозғалысларын есапқа алыў ушын атомлардың орайларының тең салмақлық ҳалы әтирапында тарқалыўының ўақыт бойынша орташасын беретуғын $W(f)$ функциясын билиўимиз керек. Бул функция тыныш турған атомның электронлық тығызлығы $\rho(f)$ ди ‘жаяды’ (электронлық тығызлық пенен бирге потенциалды ҳәм ядролық тығызлықты).

Усындай қозғалыўшы атомдағы электронлық тығызлықты анықлаймыз. Бул ушын атомның f' ноқатына жылжығандағы электронлық тығызлығы $\rho(f - f')$ ты усы ноқатта атомды табыўдың итималлылығы $W(f')$ ке көбейтемиз ҳәм барлық көлем бойынша тығызлықтың орташа мәнисин есаплаймыз:

$$\rho_{aT}(f) = \int \rho(f - f')W(f')dv_{f'}. \qquad \text{(V-56)}$$

Бул қурамалы системалар тәрепинен шашыраған толқынның базы бир шашыратыўшы бирликтиң амплитудасы менен бул бирликлердиң өз-ара жайласыўлары нызамы белгили болған жағдайлардағы амплитудасын табыўдың дара усылы болып табылады.

Улыўма жағдайларда бир $f_1(f)$ функциясы басқа бир $f_2(f)$ функциясы тәрепинен берилген нызам бойынша тарқалған болса, биргеликтеги тарқалыў

$$\int f_1(f - f')*f_2(f')dv_{f'} = f_1(f)*f_2(f) \qquad \text{(V-57)}$$

интегралы менен бериледи.

Бундай интеграл свертка интегралы ямаса f_1 ҳәм f_2 функцияларының сверткасы деп аталады. Ҳәр бир функцияның Фурье интегралы (V-51) белгили болса, онда сверткадан алынған Фурье интегралы функциялардың ҳәр бириниң Фурье интегралларының көбейтмеси болып табылады:

$$\Im[f_1(f)] = F_1(S),\ \Im[f_2(f)] = F_2(S),\ \Im[f_1(f)*f(f)] = F_1(S)*F_2(S). \quad \text{(V-58)}$$

Бул қатнаслар свертка теоремасы сыпатында белгили.

Солай етип (V-56) свертка болып табылады.

$$\rho_{aT}(f) = \rho_a(f)*W(f). \qquad \text{(V-59)}$$

Жыллылық қозғалысларын тәриплейтуғын $W(f)$ ден алынған (V-51) Фурье интегралы температуралық фактор болып табылады:

$$f_T(S) = \int W(f)\exp 2\pi i(fS)dv_f. \qquad \text{(V-60)}$$

Ал жыллылық тербелислериндеги атомлық-температуралық фактор деп аталатуғын атомнан шашыраў функциясы (V-59) ге ҳәм свертка теоремасы (V-58) ға муўапық

$$f_{aT}(\mathbf{S}) = f_a(\mathbf{S})*f_T(\mathbf{S}). \qquad \text{(V-61)}$$

$W(f)$ функциясының ‘жайылғанлығы’ көп факторларға байланыслы. Бирақ биз таллаўларымызда атомлардың жыллылық тербелислери сфералық симметрияға ийе деп есаплаймыз.

Сфералық жақтан симметриялық тербелислерди Гаусс бөлистирилиўи жәрдеминде тәриплейди. Бул жағдайда Гаусс бөлистирилиўи атомлардың тең салмақлық ҳалынан орташа квадратлық аўысыўы $\sqrt{\overline{u^2}}$ ты өз ишине алыўы керек:

$$W(f) = W(f) = \frac{1}{(2\pi\overline{u^2})^{3/2}}\exp(-f^2/2\overline{u^2}). \qquad \text{(V-62)}$$

Ал сәйкес температуралық фактор:

$$f_T(S) = \exp(-2\pi\overline{u^2}S^2) = \exp\left[-B\left(\frac{\sin\theta}{\lambda}\right)^2\right]. \quad B = 8\pi^2\overline{u^2}. \qquad \text{(V-63)}$$

(V-63)-аңлатпа (V-62) тен (V-54) ти есапқа алыў арқалы алынады. $\sqrt{\overline{u^2}}$ аўысыўы хәр қыйлы органикалық емес кристалларда шама менен 0.08V-0.1 $\mathring{A}$, ал органикалық кристалларда 0.5 $\mathring{A}$ шекем жетеди.

Атомлардың анизотроп тербелислеринде орташа квадратлық аўысыўлар бағытларға байланыслы болады. Гармоникалық тербелислер ушын сәйкес аңлатпа былай жазылады:

$$W(f) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}\sqrt{\overline{u_1^2}\,\overline{u_2^2}\,\overline{u_3^2}}}\exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{x_1^2}{\overline{u_1^2}} + \frac{x_2^2}{\overline{u_2^2}} + \frac{x_3^2}{\overline{u_3^2}}\right)\right]. \qquad \text{(V-64)}$$

Бул аңлатпада x_1, x_2, x_3 арқалы жыллылық тербелислерин тәриплейтуғын эллипсоидтың көшерлери бойынша f векторының аўысыўының координаталары белгиленген, $\sqrt{\overline{u_i^2}}$ усы көшерлер бағытындағы орташа квадратлық аўысыўлар. Улыўма жағдайларда бул эллипсоидлардың көшерлери кристалдың көшерлерине сәйкес келмейди. $f_T(S)$ функциясы мынадай түрге ийе болады:

$$f_T(S) = \exp[-2\pi^2(\overline{u_1^2}\,S_{x_1}^2 + \overline{u_2^2}\,S_{x_2}^2 + \overline{u_3^2}\,S_{x_3}^2)]. \qquad \text{(V-65)}$$

15-санлы лекция. Лауэ шәртлери. Шашыраў сферасы. Структуралық амплитуда. Шашыраўлар интенсивлиги. Дифракциялық сүўреттиң симметриясы хәм оның кристалл симметриясының ноқатлық топары менен байланысы

Дифракцияға ушыраған нурлардың бағытын математикалық формада анықлаў қыйын емес. Сүўреттеги A_1, A_2, A_3,... базы бир атомлар қатары, ал стрелкалар менен көрсетилген бағытлар дифракциялық толқынлар бағытлары болсын. Сонлықтан $M_1A_1N_1$ нуры жүрип өткен жолдың шамасы $M_2A_2N_2$ жолдың шамасынан пүтин сан еселенген толқын узынлығына үлкен болыўы керек. $M_1A_1 = M_2B_2$ ҳәм $C_1N_1 = A_2N_2$ болғанлықтан төменде-гидей шәрт жаза аламыз:

$$A_1C_1 - B_2A_2 = m\lambda. \qquad (V\text{-}66)$$

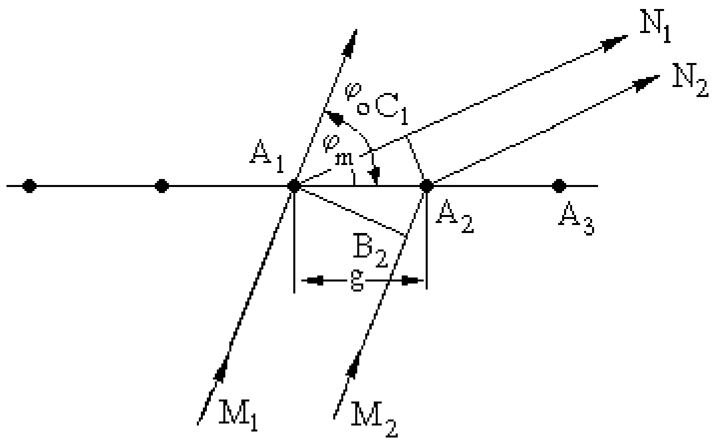
λ толқын узынлығы, m пүтин сан. Қоңысылас атомлар арасындағы қашықлықты g ҳәрипи менен белгилейик. Усы атомлар қатары менен қатарға келип түсиўши нурлар ҳәм қатарда дифракцияға ушыраған нурлар бағытларын сәйкес φ_0 ҳәм φ_m ҳәриплери менен белгилейик. Сонда $A_1C_1 = g \cos \varphi_m$ ҳәм $B_2A_2 = g \cos \varphi_0$ екенлиги түсиникли. Демек

$$g (\cos \varphi_m - \cos \varphi_0) = m\lambda \qquad (m = 0, 1, 2, ...) \quad (V\text{-}67)$$

Усындай шәртлер басқа бағытлардағы атомлық қатарлар ушын да жазылыўы мүмкин. Бундай жағдайларда

$$a(\cos \alpha_p - \cos \alpha_0) = p\lambda,$$
$$b(\cos \beta_q - \cos \beta_0) = q\lambda, \qquad (V\text{-}68)$$
$$c(\cos \gamma_f - \cos \gamma_0) = f\lambda$$

шәртлерин аламыз ҳәм бул шәртлерди Лауэ шәртлери деп атаймыз.



58V-сүўрет. Еки ноқатлық орайдағы шашыраў.

Кери пәнжере түйинлериниң өлшемлери. Фурье интегралы кери пәнжерениң ноқат-лық түйини түсинигиниң пайда болыўына алып келди. Ҳақыйқатында да бул функцияның мәниси h, k ҳәм 1 индекслерине ғәрезли болып, интегралға шексиз кеңликке ийе дәўирлик функцияны қойып, оның қайталыныў дәўири шеклери бойынша интеграллағанда ноқат-лық түйин алынады. Бирақ шарыратыўшы кристалл шекли өлшемлерге, соған сәйкес белгили V көлемине ҳәм шекли сандағы элементар қутышаларға ийе болады. Усының нәтийжесинде кери пәнжеренеиң түйини $\delta(S-g_{hk1})$ ноқатлары болып табылмай, белгили өлшемлерге ҳәм формаларға ийе болып келеди. Қала берсе кери пәнжере түйининиң формасы кристалдың өзиниң формасына байланыслы болады.

Кристалдың өлшемлериниң шеклилигин ҳәм оның формасын тәриплеў ушын форма функциясы деп аталатуғын функция киргиземиз:

$\Phi(f) = 1$ (кристалдың ишинде) хәм $\Phi(f) = 0$ (кристалдың сыртында)

Бундай жағдайда шексиз үлкен болған кристалл ушын жазылған $\rho_\infty(f)$ функциясы $\Phi(f)$ ге көбейтиў менен формасы $\Phi(f)$ болған кристалдың $\rho_к(f)$ функциясына айланады:

$$\rho_к = \rho_\infty(f)\Phi(f) = \{\rho_{яч}(\rho) * [\sum_{p_1,p_2,p_3=-\infty}^{\infty} \delta(f - t_{p_1p_2p_3})]\}\Phi(f). \qquad \text{(V-69)}$$

Шексиз үлкен кристал ушын шашыраў амплитудасы бизге мәлим. Кристалдың формасының Фурье трансформантасы (амплитуда)

$$F(\Phi) = D(S) = \int_V \Phi(f) \exp 2\pi i(Sf)dV_f \qquad \text{(V-70)}$$

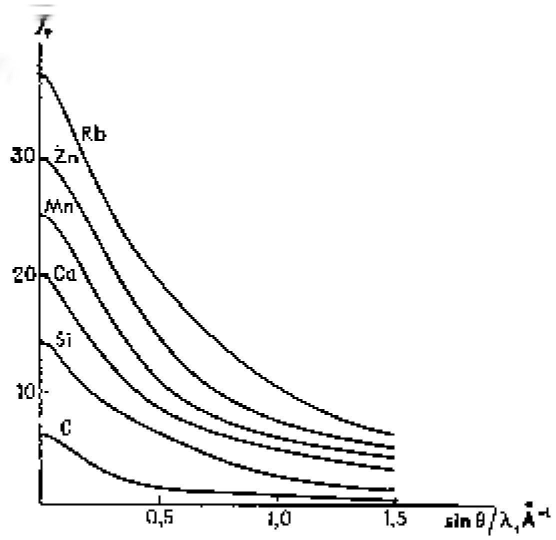
аңлатпасы менен бериледи.

Свертка теоремасы бойынша $\rho_\infty(f)\Phi(f)$ көбеймеси Фурье түрлендириўи нәтийжесинде хәр бир трансформанта сверткасына айланады (кейинги еки аңлатпа). Солай етип шекли кристал ушын

$$F_к(S) = [\sum_{hkl} \frac{F_{hkl}}{\Omega} \delta(S-g_{hk1})] * D(S). \qquad \text{(V-71)}$$

D(S) ке ийе кери пәнжерениң ноқатлық түйининиң δ-функциялары $\delta(S-g_{hk1})$ лердиң хәр бириниң сверткасы енди хәр бир түйинниң D формасына ийе болатуғынлығын аңлатады, яғный

$$\delta(S-g_{hk1}) * D(S) = D(S - g_{hk1}). \qquad \text{(V-72)}$$



56-сүўрет. Айырым элементлер ушын рентген нурларын шашыратыўдың атомлық амплитудалары иймекликлери.

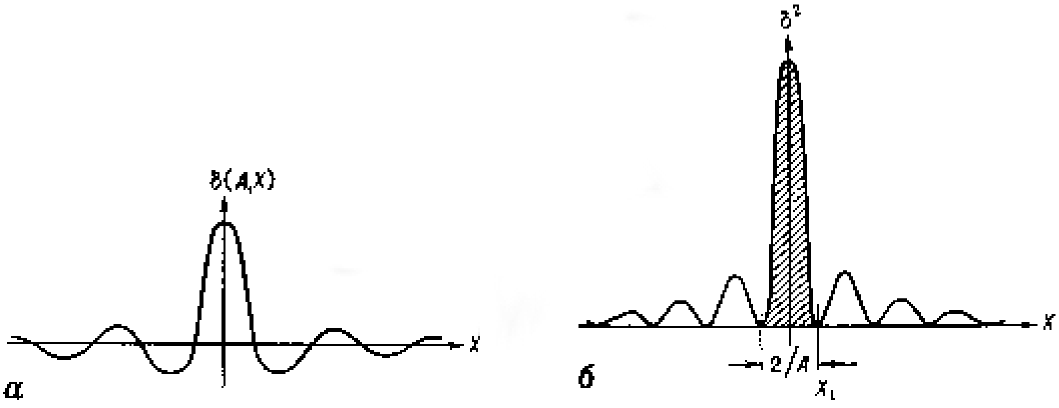
Демек реал шекли кристалдың кери пәнжересиниң түйини кристалдың формасына байланыслы болған D(S) тығызлық тарқалыўына ийе болады. Бул тарқалыў барлық түйинлер ушын бирдей (соның ишинде басланғыш 000 түйини ушын да). Нәтийжеде Φ(w) формасына ийе шекли кристалл тәрепинен шашыраған амплитудасы төмендегидей аңлатпа менен бериледи:

$$Ғ_к(S) = \frac{1}{\Omega}\sum_{hkl} F_{hkl}\, D(S - g_{hk1}). \qquad (V\text{-}73)$$

Егер кристалдың формасы тәреплери $A_1A_2A_3$ болған параллелопипед болған жағдайда

$$D(S) = \int\limits_{-A_1/2}^{+A_1/2}\int\limits_{-A_2/2}^{+A_2/2}\int\limits_{-A_3/2}^{+A_3/2} \exp\,[2\pi i(xX+yУ+zZ) = \frac{\sin\pi A_1 X}{\pi X}\,\frac{\sin\pi A_2 Y}{\pi Y}\,\frac{\sin\pi A_3 Z}{\pi Z} \qquad (V\text{-}74)$$

аңлатпасы аламыз. Бул аңлатпаның көбейтиўшилериниң бириниң ҳәм оның квадраты сүўретте көрсетилген. D(S) функциясының базы бир бағыттағы ярым кеңлиги усы бағыттағы кристалдың өлшеми A_i ге кери пропорционал. Демек реал дифракциялық экспериментте кери пәнжерениң түйини кери кеңисликтеги сызықлы өлшемлери A_i^{-1} ге пропорционал болған шекли аймақ болып табылады. Бул өз гезегинде дифракцияға ушыраған дәстениң шекли мүйешлик ярым кеңликке ийе болатуғынлығын ҳәм бул ярым кеңлик $\Delta\theta$ ның A_i^{-1} ке пропорционал екенлигин көремиз. Яғный $\Delta\theta \sim A_i^{-1}$ ҳәм кристал үлкен болған сайын дәсте жиңишке болады. Жоқарыдағы кейинги аңлатпадағы ҳәр бир көбейтиўши максимумында A_i ге тең. Сонлықтан D(S) максимумда $A_1A_2A_3$ = V кристалдың көлемине тең болады.



57-сүўрет. δ(A,x) функциясы (а) ҳәм оның квадраты (б)

Ҳәр бир көбейтиўшиниң квадраты бойынша сызылған иймеклик қоршаған майдан былай есапланады:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\sin^2 \pi A_i X}{(\pi X)^2} dX = A_i. \qquad \text{(V-75)}$$

Демек $|D|^2$ тың мәнислери бойынша алынған интеграл

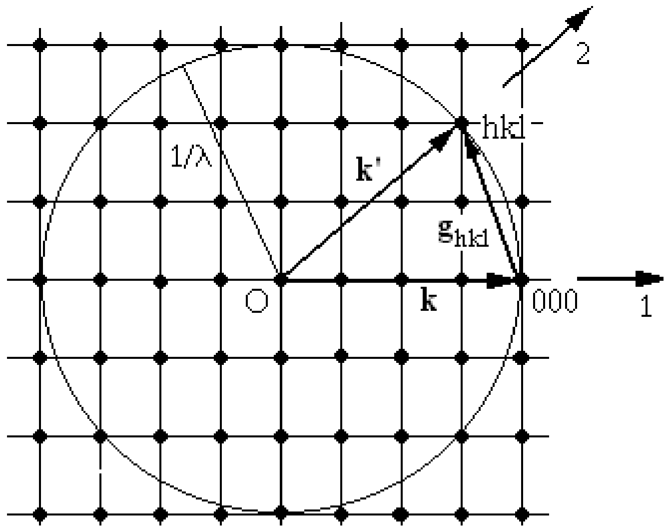
$$\int |D(S)|^2 dV_s = A_1A_2A_3 = V \qquad \text{(V-76)}$$

кристалдың көлемине тең.

Шашыраў сферасы. Енди дифракция шәртин талқылаўға қайтадан ораламыз. Монохроматик нурланыў жағдайында (турақлы λ де) бул шәртти ықшамлы геометриялық дүзилис - Эвальд сферасы жәрдеминде көргизбели түрде сәўлелендире аламыз.

Эвальд сферасын қолланыўды көрсететуғын сүўретте **k** = **k’** = 1/λ. $\mathbf{g}_{hk1}$ = 1/d_{hk1}. **k** кристалға келип түсиўши толқынның толқын векторы, ал k’ дифракцияға ушыраған толқынның толқын векторы. Усы еки вектордың айырмасының кери пәнжере векторы g_{hk1} тең болыўының кереклиги сүўретте көрсетилген. 1 саны менен кристалға келип түсиўши толқынның бағыты белгиленген, ал 2 саны менен көрсетилген стрелка дифракцияға ушыраған толқынның бағытын сәўлелендиреди.

Сүўретте көрсетилгениндей, Эвальд сферасының радиусы $R_Э$ = 1/λ ге тең. Усы тийкарда ZnS кристалларын изертлегенде бундай қурылысты дүзиўдиң тәртиби менен танысамыз. Мейли рентген нуры кристалға [100] бағытында келип түсетуғын болсын. Сонлықтан $\mathbf{g}_{(100)}$ ҳәм $\mathbf{g}_{(010)}$ векторлары жататуғын кери пәнжере торын дүзиўимиз керек. Мыс анодында қозған K_α рентген толқынын аламыз Бундай толқын ушын толқын узынлығы $\lambda = 1.5418$ Å. Демек $R_Э = 1/\lambda = 1/1.5418$ Å^{-1}. Қағаз бетинде бул шама әдетте 100 мм (10 см) ге тең етип алынады. Усындай масштабларда $\mathbf{g}_{(100)}$ ҳәм $\mathbf{g}_{(010)}$ векторларының модуллери былай есапланады: ZnS кристаллары ушын a = 5.409 Å. Ал $|\mathbf{g}_{(100)}| = |\mathbf{g}_{(010)}| = 1/d_{(100)} = 1/a = 1/5.409$ Å^{-1}. 1/1.5418 Å^{-1} = 100 мм болғанлықтан 1/5.409 Å^{-1} = 28.5 мм болыўы керек. Солай етип биз қарап атырған жағдайда тәреплериниң узынлығы 28.5 мм болған тор соғыўымыз керек екен. **k** векторының ушын 000 түйинине барып тиреледи, ал усы вектордың басында Эвальд сферасының орайы жайласады. Эвальд сферасы менен кесилискен кери пәнжерениң барлық түйинлери ушын дифракция шәрти орынланады. Бирақ барлық түйинлердиң ‘салмағы’ бирдей емес. Ал бул ‘салмақ’ болса структуралық амплитуда F_{hkl} жәрдеминде бериледи.



58-сүўрет. Дифракция шәртин Эвальд сферасы жәрдеминде көрсетиў. Бул сүўретте кристалдың кери пәнжереси тегислиги менен Эвальд сферасының кесилисиўи сәўлелендирилген.

Структуралық амплитуда. Структуралық амплитуда (структуралық фактор деп те атаймыз) элементар қутышадағы $\rho(f)$ электронлық тығызлықтың тарқалыўы бойынша анықланып, қутышадағы электронлық тығызлықтың Фурье интегралы (коэффициентлери) болып табылады. Демек структуралық амплитуда F_{hkl} элементар қутышадағы электронлардың координаталарына ғәрезли болады деген сөз.

Әдетте структуралық амплитуданың модули шексиз үлкен, жутпайтуғын идеал мозаикалық кристал тәрепинен шашыраған нурдың амплитудасын (бир элементар қутышаға сәйкес келиўши электронлық бирликлерде берилген) айтамыз.

Элементар қутышадағы j-атомның координатасын f_j арқалы белгилейик. Бундай жағдайда ҳәр бир атомның электронлық тығызлықларының қосындысы былай анықланады $\rho_{(ат)j} = \rho_j$, $\rho = \Sigma\rho_j(f - f_j)$. Бул аңлатпаны Фурье интегралы аңлатпасына қоямыз. ҳәр бир ρ_j қа кутьшадағы атомлардың координаталарын есапқа алатуғын $\exp 2\pi i(f_j g)$ фазалық көбейтиўшиге ийе f_{jT} атомлық-температуралық факторды есапқа аламыз. Сонлықтан

$$Ғ_{hk1} = \sum_{j=1}^{n} f_{jT} \frac{\sin\theta}{\lambda} \exp 2\pi i(f_j \mathbf{g}) = \sum_{j=1}^{n} f_{jT} \exp 2\pi i\,(hx_j + ky_j + 1z_j). \quad \text{(V-77)}$$

Бул аңлатпа бир элементар қутыша тәрепинен шашыраған толқынның амплитудасын береди ҳәм структуралық амплитуда ямаса структуралық фактор деп аталады. Аңлатпада координаталар периодтың үлесинде берилген: $x_i = x_{iабс}/a_i$.

$Ғ_{hk1}$ комплекс шама болып табылады.

$$Ғ = A + iB.$$

$$A = \Sigma f_i \cos 2\pi(hx_j + ky_j + 1z_j), \qquad \text{(V-78)}$$

$$B = \Sigma f_i \sin 2\pi(hx_j + ky_j + 1z_j).$$

Ғ ти модули $|Ғ|$ ҳәм фазасы α арқалы жазыў мүмкин:

$$\mathrm{tg}\alpha = B/A, \; |Ғ| = (A^2 + B^2)^{1/2},$$

$$A = |Ғ|\cos\alpha, \; B = |Ғ|\sin\alpha, \; Ғ = |Ғ|\exp i\alpha. \qquad \text{(V-79)}$$

Жоқарыда келтирилген формулалар бирқанша жағдайларда басқаша да жазылыўы мүмкин. Мысалы

$$F\;hkl \;= \sum_{j=1}^{n} f_j A_j + i \sum_{j=1}^{i} f_j B_j$$

Бул жерде

$$A_j = \cos 2\pi\; hx_j + ky_j + lz_j \;,$$

$$B_j = \sin 2\pi\; hx_j + ky_j + lz_j \;.$$

Шашыраўлар интенсивлилиги. Биз жоқарыда **S** векторы ямаса кери пәнжере векторы **g** бағытлары бойынша анықланатуғын шашыраў амплитудасы ҳаққында гәп еттик. Экспериментте шашыраған толқынлар анаў ямаса мынаў детектордың жәрдеминде есапқа алынатуғын жағдайда ўақыт бойынша орташа, амплитуданың модулиниң квадратына пропорционал болған шашыраў интенсивлилиги анықланады:

$$I_{hk1} \ |F_{hk1}| = F_g F_g^* = A^2 + B^2. \qquad (V\text{-}80)$$

(V-80) нен дифракциялық экспериментте тек ғана шашыраў амплитудасы модулиниң өлшенетуғынлығы көринип тур. Ал шашыраған толқынлардың фазалары ҳаққындағы информациялар толығы менен жоғалады. Бул жағдай структуралық анализди, яғный дифракциялық нәтийжелер бойынша структураны анықлаўды қурамаластырады. Бул жағдайды айрықша атап өтиў керек.

Структуралық амплитуда ушын жазылған (V-78) пенен (V-79)-аңлатпаларға кристалдағы барлық атомлар ушын атомлық-температуралық факторлар, ҳәм олардың ҳәр бири ушын тригониметриялық көбейме киреди. Бул көбейме -1 ден +1 ге шекемги мәнисти қабыл етеди. Соның менен бирге f_{jT} ниң мәниси $\sin\theta/\lambda$ ниң өсиўи менен монотонлы кемейеди. $[\exp 2\pi i(f g)]^2$ тың орташа мәниси $[\overline{\exp 2\pi i(\mathbf{rg})}]^2 = 1$. Сонлықтан (V-74) пенен (V-80) ден $\sin\theta/\lambda$ ниң өсиўи менен интенсивлиликтиң кемейиўи төмендеги формула жәрдеминде анықланады:

$$I_{hk1}(\sin\theta/\lambda) = \overline{|F_{hkl}|^2} = \sum_{j=1}^{N} f_{jT}^2(\sin\theta/\lambda). \qquad (V\text{-}81)$$

Солай етип I_{hk1} интенсивлиликлери ҳәр қыйлы болса да, олар $\sin\theta/\lambda$ ге байланыслы орташа бирдей болып киширейеди. Олардың бақланыў ‘шегарасы’ әдетте $|g_{hk1}| = 1/d_{min} =$ 1 - 2 Å шамасында жатады.

Интенсивлилик пенен f_{aT}^2 арасында интенсивлиликтиң сақланыў нызамы деп аталатуғын және бир қатнас бар. Фурье қатарлары теориясынан төмендегидей теңликке ийе боламыз:

$$\sum_{\mathbf{g}} |F_{\mathbf{g}}|^2 = \frac{1}{\Omega} \int \rho^2(\mathbf{r}) dv_r \, . \qquad (V\text{-}82)$$

Басқа тәрептен (V-52) бойынша ρ ны айырым атомлардың электронлық тығызлығы ρ_j пенен де аңлатыўға болады. Ал ρ_j ларды (V-54)-түрдеги Фурье интегралы тийкарында атомлық-температуралық факторлар арқалы аңлатыўға болады:

$$\sum_{\mathbf{g}} 8_{\mathbf{g}} = \frac{1}{\Omega} \int f_{jT}^{2}(S) 4\pi S^2 dS. \qquad \text{(V-83)}$$

Солай етип кери пәнжерениң барлық $\mathbf{g}_{hk1}$ түйинлери бойынша алынған интенсивлиликлердиң суммасы турақлы шама. Бул шама кристалл ушын (V-83) тиң оң тәрепине сәйкес атомлық-температуралық фактордың тийкарында есапланыўы мүмкин.

Дифракциялық сүўреттиң симметриясы ҳәм оның кристаллдың симметриясының ноқатлық топары менен байланысы. Егер ҳәр бир түйининиң ‘салмағын’ есапқа алмасақ кери пәнжерениң дәўирли екенлигин аңсат аңғарыўға болады. Ал ‘салмақ’ есапқа алынған жағдайда кери пәнжере дәўирли болмай шығады ҳәм оның симметриясы кристаллографиялық ноқатлық топарлардың бири менен тәриплениўи мүмкин. (V-78) пенен (V-79) дан 000 түйинине салыстырғанда симметриялы жайласқан hk1 ҳәм $\overline{h}\overline{k}\overline{l}$ шашыраўларының структуралық амплитудалары (яғный $\mathbf{g}$ ҳәм $\overline{\mathbf{g}}$ ларға сәйкес келиўши шашыраўлардың структуралық амплитудалары) комплексли-түйинлес шамалар болып табылады:

$$Ғ_{\mathbf{g}} = Ғ_{hk1} = Ғ^{*}_{\overline{h}\overline{k}\overline{l}} = \mathbf{F}^{*}_{\overline{\mathbf{g}}}. \qquad \text{(V-84)}$$

Демек Ғ тиң модуллери $|Ғ|$ ҳәм бақланатуғын интенсивлиликлери бирдей болады деген сөз:

$$I_g = I^{*}_{\overline{\mathbf{g}}}. \qquad \text{(V-85)}$$

Бул қатнас Фридель нызамы түринде белгили. Бул нызам бойынша кери пәнжере орайға қарата симметриялы, оның $\mathbf{g}$ ҳәм $\overline{\mathbf{g}}$ түйинлери бирдей салмаққа ийе болады.

16-санлы лекция. Дифракциялық сүўретте кристаллдың кеңисликтеги симметриясының көриниўи. Өшиўлер

Структуралық фактор ушын жазылған (V-77)-аңлатпағы атомлардың элементар қутышадағы координаталары x_i лер де киреди. Егер кристалдың кеңисликтеги топары симметриялы болмаса (P1 болса), онда (V-77)-аңлатпа өзгериске ушырамайды. Басқа барлық топарларда ноқатлар координаталары арасында симметриялық байланыслар бар [яғный ноқатлардың дурыс системасы (НДС) бар]. Қутышадағы атомлар усындай бир ямаса бир неше НДС ны ийелеўи мүмкин. Сонлықтан структуралық фактор ушын дүзилген аңлатпаларды адеўир әпиўайыластырыў мүмкин. Берилген НДС на кириўши координаталары xyz болған барлық n дана атомның координаталары қутышаның ғәрезсиз областындағы бир атомның xyz координаталары бойынша анықланатуғын болғанлықтан n атомның ҳәр бир НДС (n бул жерде позицияның ретлилигин аңлатады) ушын структуралық фактор бир аңлатпа менен аңлатылады. Сонлықтан структуралық фактор k дана қосындыға бөлинеди. Солардың ҳәр бири бир НДС ын ийелеўши атомлардың жыйнағына сәйкес келеди. Солай етип $k_1n_1 + k_2n_2 + ... + k_in_i = N$ - элементар қутышадағы барлық атомлардың санына тең.

Симметрияның ең әпиўайы мысал ретинде симметрия орайының бар болыўын көремиз. Координата орайы симметрия орайында жайласқан болсын. Бундай жағдайда егер координаталары xyz болған атом болса, онда ол атомға симметриялы координаталары $\bar{x}\bar{y}\bar{z}$ болған да атом болады. Сонлықтан (V-77) теги exp косинусқа алмастырылады, Ғ белгиси оң ямаса терис болған ҳақыйқый шамаға айланады, В = 0, $\alpha = 0$.

Онда

$$Ғ_{hk1} = 2\sum_{j=1}^{N/2} f_j \cos 2\pi(hx+ky+1z). \qquad \text{(V-86)}$$

Суммалаў тек ғана симметриялық жақтан ғәрезсиз атомлар бойынша жүргизиледи.

Бирқанша мысаллар келтиремиз.

1-мысал. Алмаздың қурылысы кублық қутыша менен тәрипленеди. Элементар қутышадағы атомлардың координаталары (базиси): 000; 1/2 1/2 0; 1/2 0 1/2; 0 1/2 1/2; 1/4 1/4 1/4; 3/4 3/4 1/4; 3/4 1/4 3/4; 1/4 3/4 3/4 (элементар қутышаға сегиз атом сәйкес келетуғынлығы көринип тур). $Ғ^2$ тың мәнислери менен өшиў нызамын анықлайық.

Бул жағдайда структуралық амплитуда ушын аңлатпа $Ғ = \sum_j f_j \exp 2\pi i(hx_j+ky_j+1z_j)$ сегиз ағзадан турады ҳәм төмендегидей түрге аңсат алып келинеди:

$Ғ(hk1) = f_C Ғ_1 Ғ_2$.

Бул жерде $Ғ_1 = 1 + \exp i\frac{\pi}{2}(h+k+1)$ ҳәм

$Ғ_2 = 1 + \exp i\pi(h+k) + \exp i\pi(h+1) + \exp i\pi(k+1)$.

Енди hk1 лердиң қандай мәнислеринде $Ғ^2$ тың мәнислериниң нолден өзгеше болатуғынлығын қараймыз.

Егер h, k, 1 лер бирдей жуплылыққа ийе болса (үшеўи де жуп ямаса үшеўи де тақ) $Ғ_2 = 4$. h+k+1=4n болған жағдайда $Ғ^2 = 64f_C^2$; h+k+1=2n+1 де (үшеўиниң қосындысы тақ шама) $Ғ^2 = 32f_C^2$; h+k+1=4n+2 де $Ғ_1 = 0$ ҳәм, сәйкес, $Ғ^2=0$.

Егер h, k, 1 лер ҳәр қыйлы жуплылыққа ийе болса (жуп санлар менен тақ санлардың араласы) $Ғ_2=0$ ҳәм $Ғ^2=0$.

Солай етип өшиў төмендегидей жағдайларда бақланады (бундай жағдайда төмендегидей шәртлер орынланғанда шашыраў орын алмайды):

1) h, k, 1 лер ҳәр қандай жуплылыққа ийе болғанда;

2) h+k+1=4n+2 болғанда.

Екинши мысал ретинде ZnS кристаллының еки модификациясын аламыз.

Кублық қурылысқа ийе сфалерит төмендегидей базиске ийе:

Zn - 000; 1/2 1/2 0; 1/2 0 1/2; 0 1/2 1/2.

S - 1/4 1/4 1/4; 3/4 3/4 1/4; 3/4 1/4 3/4; 1/4 3/4 3/4.

Гексагоналлық қурылысқа ийе вюрцит төмендегидей базиске ийе:

Zn - 1/3 2/3 0; 2/3 1/3 1/2.

S - 1/3 2/3 z; 2/3 1/3 1/2 + z (z = 0.375 ≈ 3/8).

8. Сфалерит ушын мәселени былай шешемиз:

$$Ғ(hk1) = Ғ_2[f_{Zn} + f_S \exp i\frac{\pi}{2}(h+k+1)].$$

Бул жерде $Ғ_2 = 1 + \exp i\pi(h+k) + \exp i\pi(h+1) + \exp i\pi(k+1)$.

1. Егер h, k ҳәм 1 лер бирдей жуплылыққа ийе болса $Ғ_2 = 4$. Усының менен бирге

а) $h+k+1 = 4n$ де $Ғ^2 = 16(f_{Zn} + f_S)^2$;

б) $h+k+1 = 4n \pm 2$ де $Ғ^2 = 16(f_{Zn} - f_S)^2$;

в) $h+k+1 = 2n \pm 1$ де $Ғ^2 = 16(f_{Zn} + f_S)^2$;

2. Егер h, k ҳәм 1 лер ҳәр қыйлы жуплылыққа ийе болса $Ғ_2 = 0$ ҳәм соған сәйкес $Ғ^2 = 0$.

II. Вюрцит ушын мәселе былай есапланады:

$$Ғ(hk1) = f_{Zn}\exp i2\pi\frac{h+2k}{3} + f_{Zn}\exp i2\pi\left(\frac{2h+k}{3} + \frac{l}{2}\right) +$$

$$f_S\exp i2\pi\left(\frac{h+2k}{3} + 1z\right) + f_S\exp i2\pi\left(\frac{2h+k}{3} + \frac{l}{2} + 1z\right) =$$

$$[f_{Zn} + f_S]*[\exp i2\pi\frac{h+2k}{3} + \exp i2\pi 1*\exp\frac{h+2k}{3}].$$

$A_1 = (f_{Zn} + f_S)^2$ ҳәм $A_2 = (\exp i2\pi\frac{h+2k}{3} + \exp i2\pi 1*\exp\frac{h+2k}{3})^2$ деп белгилеп аламыз. Сонда

$$Ғ^2(hk1) = A_1*A_2.$$

h+2k ның ҳәр қандай мәнислериндеги $Ғ^2(hk1)$ диң мәнислеринниң еки топарын қараймыз.

1. h+2k = 3n. Онда $A_2 = (1+1^{i\pi 1})^2$.

Бундай жағдайда 1 = 2m+1 болғанда $A_2=0$; $Ғ^2=0$.

1=8m де $A_2=4$; $A_1=(f_{Zn} + f_S)^2$; $Ғ^2 =4(f_{Zn} + f_S)^2$.

1=4(2m+1) де $A_2=4$; $A_1=(f_{Zn} - f_S)^2$; $Ғ^2= 4(f_{Zn} - f_S)^2$

1=2(2m+1) де $A_2=4$; $A_1 = f_{Zn}^2 + f_S^2$; $Ғ^2 = 4(f_{Zn}^2 + f_S^2)$.

2. h+2k=3n±1. $A_2 = [\exp\frac{i2\pi}{3} + ex(pi\pi 1)*\exp(-\frac{i2\pi}{3})]$.

1=8m де $A_1 = (f_{Zn} + f_S)^2$; $A_2 = 1$; $Ғ^2 =(f_{Zn} + f_S)^2$.

1=4(2n+1) де $A_1 = (f_{Zn} - f_S)^2$; $A_2 = 1$; $Ғ^2 =(f_{Zn} - f_S)^2$.

1=2(2m+1) де $A_1 = f_{Zn}^2 + f_S^2$; $A_2=1$; $Ғ^2 = f_{Zn}^2 + f_S^2$.

1=8m±1 де $A_1 = f_{Zn}^2 + f_S^2 - \sqrt{2}\, f_{Zn}*f_S$; $A_2=3$;

$Ғ^2 = 3(f_{Zn}^2 + f_S^2 - \sqrt{2}\, f_{Zn}*f_S)$.

1=4(2m+1) ±1 де $A_1 = f_{Zn}^2 + f_S^2 + \sqrt{2}\, f_{Zn}*f_S$; $A_2=3$;

$Ғ^2 = 3(f_{Zn}^2 + f_S^2 + \sqrt{2}\, f_{Zn}*f_S)$.

Енди структурада бир сорттағы атомлар ҳәм симметрия орайы бар болған жағдайларды қараймыз.

Әпиўайы кублық пәнжере жағдайында төмендегилерге ийе боламыз:

Элементар қутышаға тек бир түйин сәйкес келеди. Оның базиси 000.

Демек $Ғ^2 = f^2$ ҳәм бундай кристаллар ушын өшиў қағыйдасы орын алмайды.

Көлемде орайласқан қутышада базис 000; 1/2 1/2 1/2.

Демек

$$Ғ = f*[1 + \cos 2\pi\ \frac{1}{2}(h+k+1)] = f*\cos\pi\,(h+k+1).$$

Бундай жағдайда $\cos\pi\,(h+k+1)$ тек ғана еки мәниске (±1) ийе болады.

Егер h,k ҳәм 1 лер ҳәр қыйлы жуплылыққа ийе болса $\cos\pi\,(h+k+1) =-1$ ҳәм Ғ = 0.

Егер h,k ҳәм 1 лер бирдей жуплылыққа ийе болса $\cos\pi\,(h+k+1) =1$ ҳәм Ғ = f.

Демек көлемде орайласқан кристалларда h+k+1 қосындысы жуп сан болғанда ғана дифракциялық сүўрет бақланады.

Енди қапталда орайласқан кублық кристалларды қараймыз. Базис - 000, 0 1/2 1/2; 1/2 0 1/2; 1/2 1/2 0.

Демек

$Ғ = f*[1 + \cos\pi(h+k)+ \cos\pi(h+1)+ \cos\pi(k+1)]$.

Бунда еки жағдайдың болыўы мүмкин:

h, k ҳәм 1 лердиң жуплылығы бирдей. Онда Ғ = 4f.

Н, k ҳәм 1 лер ҳәр қыйлы жуплылыққа ийе. Онда Ғ = 0.

Демек биз кери пәнжерелердиң элементар қутышалары ҳаққында төмендегидей жуўмақларға келемиз.

Егер туўра пәнжере әпиўайы Р қурылысқа ийе болса (элементар қутыша орайласпаған) кери пәнжере де әпиўайы қурылысқа ийе болады (элементар қутышасы орайласпаған). Ал көлемде орайласқан туўры элементар қутышаға кери кеңисликте қапталда орайласқан элементар қутышасы бар пәнжере, қапталда орайласқан туўры пәнжереге кери кеңисликте көлемде орайласқан пәнжере сәйкес келеди. Бул жағдайлар сүўретлерде келтирилиген.

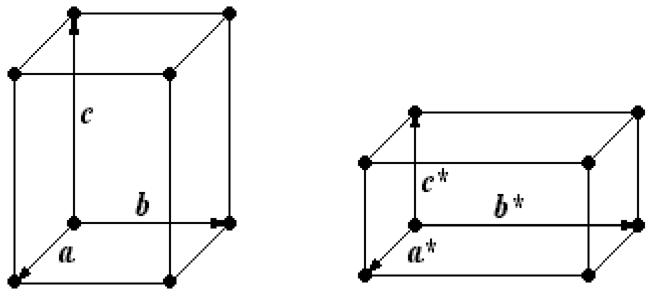
Екинши тәрептен кристаллық пәнжерениң орайласыўы бойынша алынған дифракциялық сүўретлердеги дифракциялық дақлардың орналасыўы да белгили бир нызамлықларға ийе болады. Бундай нызамлылықлар кублық қурылысқа ийе унталған кристаллардан ямаса поликристаллардан алынған сүўретлерде анық көринеди ҳәм төмендегилерден ибарат:

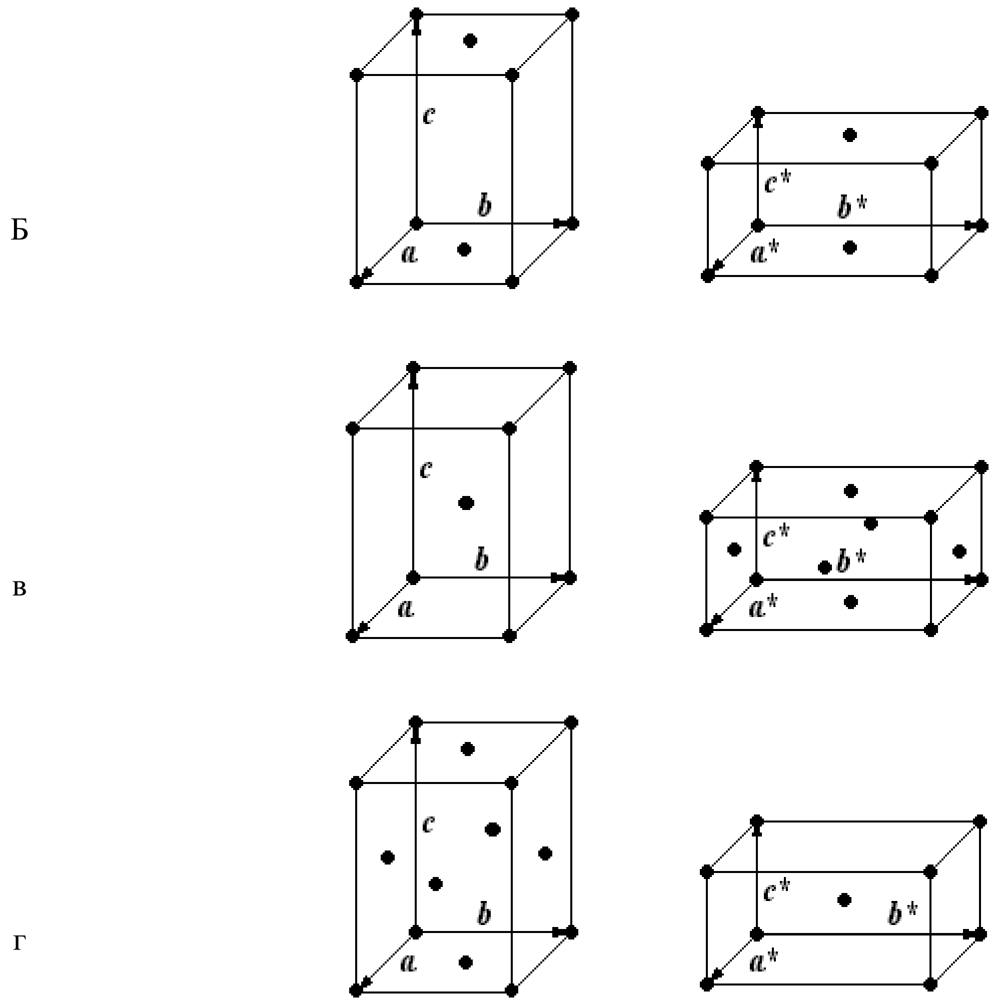
Орайласпаған кристаллар ушын (әпиўайы Р-пәнжере) өшиў шәртлери жоқ, сонлықтан барлық {hk1} кристаллографиялық тегисликлер семействолары өзиниң дифракциялық сызықларын береди ҳәм олар d_{hk1} лердиң кемейиў бағытында жайласады.

Көлемде орайласқан кристаллар (J-пәнжере) ушын дифракциялық сүўреттиң аланыўы ушын h+k+1 қосындысы жуп мәнислерге ийе болғанлығы себепли бир қанша рефлекслер рентгенограммада алынбайды (111, 001, 331 ҳ.т.б.).

Қапталда орайласқан кристаллар (Ғ-пәнжере) ушын h, k ҳәм 1 лердиң барлығы да бир ўақытта я жуп, я тақ болыўы керек ҳәм усыған байланыслы бир қанша рефлекслер сөнеди (мысалы 100, 110, 221, 211 ҳ.т.б.).

А





59-сүўрет. Атомлық ҳәм оларға сәйкес келиўши кери пәнжерелер.
а - әпиўайы, б - базада орайласқан, в - көлемде орайласқан,
г - қапталда орайласқан.

Жоқарыда келтирилген жағдайларды есапқа алсақ дебаеграммадағы кублық кристаллар беретуғын дифракциялық рефлеслердиң жайласыў избе-излиги ушын төмендегидей кестени дүзе аламыз:

Эквивалент тегисликлер саны	Р-пәнжере	I-пәнжере	F-пәнжере	Алмаз
6	100			
12	110	110		
8	111		111	111
6	200	200	200	
24	210			

24	211	211		
12	220	220	220	220
24+6	221, 300			
24	310			
24	311		311	311
8	222		222	
24	320			
48	321	321		
Y	400	400	400	
24+24	322, 410			
12+24	330, 411	330, 411		
24	331		331	
24	420	420	420	
48	421			
24	332	332		
24	422	422	422	422
24+6	430, 500			
48+24	431, 510	431, 510		
8+24	333, 511		333, 511	333,511
48+24	432, 520			
48	521	521		
12	440	440	440 (12)	440
24+24	441, 522			
24+24	433, 530	433, 530		
48	531		531 (48)	531

Атомлық шашыраў факторлары

$s/2=\sin\theta/\lambda$	0	0.1	0.2	0.3	0.4	0.5	0.6	0.7	0.8	0.9	1.0	1.1
$d=1/s=\lambda/2\sin\theta$ (Å)		5	2.5	1.667	1.25	1	0.833	0.714	0.625	0.556	0.5	0.455
1. H	1.0	0.81	0.48	0.25	0.13	0.07	0.04	0.03	0.02	0.01	0.00	0.00
2. He	2.0	1.88	1.46	1.05	0.75	0.52	0.35	0.24	0.18	0.14	0.11	0.09
3. $1i8^{+}$	2.0	1.96	1.8	1.5	1.3	1.0	0.8	0.6	0.5	0.4	0.3	0.3
3. 1i8	3.0	2.2	1.8	1.5	1.3	1.0	0.8	0.6	0.5	0.4	0.3	0.3
4. Be^{+2}	4.0	2.9	1.9	1.7	1.6	1.4	1.2	1.0	0.9	0.7	0.6	0.5
5. Be^{+3}	5.0	3.5	2.4	1.9	1.7	1.5	1.4	1.2	1.2	1.0	0.9	0.7
6. C	6.0	4.6	3.0	2.2	1.9	1.7	1.6	1.4	1.3	1.2	1.0	0.9
7. N^{+5}	2.0	2.0	2.0	1.9	1.9	1.8	1.7	1.6	1.5	1.4	1.3	1.16
7. N^{+3}	4.0	3.7	3.0	2.4	2.0	1.8	1.66	1.56	1.49	1.39	1.28	1.17
7. N	7.0	5.8	4.2	3.0	2.3	1.9	1.65	1.54	1.49	1.39	1.29	1.17
8. O^{-2}	10.0	8.0	5.5	3.8	2.7	2.1	1.8	1.5	1.5	1.4	1.35	1.26
8. O	8.0	7.1	5.3	3.9	2.9	2.2	1.8	1.6	1.5	1.4	1.35	1.26
9. F^{-}	9.0	7.8	6.2	4.45	3.35	2.65	2.15	1.9	1.7	1.6	1.5	1.35
11. Na^{+}	10.0	9.5	8.2	6.7	5.25	4.05	3.2	2.65	2.25	1.95	1.75	1.6
12. Mg^{+2}	10.0	9.75	8.6	7.25	6.05	4.8	3.85	3.15	2.55	2.2	2.0	1.8
12. Mg	12.0	10.5	8.6	7.22	6.05	4.8	3.85	3.15	2.55	2.2	2.0	1.8
13. $A1^{+3}$	10.0	9.7	8.9	7.8	6.65	5.5	4.45	3.65	3.1	2.65	2.3	2.0
13. A1	13.0	11.0	8.95	7.75	6.6	5.5	4.5	3.7	3.1	2.65	2.3	2.0
14. Si^{+4}	10.0	9.75	9.15	8.25	7.15	6.05	5.05	4.2	3.4	2.95	2.6	2.3
14. Si	14.0	11.3	9.4	8.2	7.15	6.1	5.1	4.2	3.4	2.95	2.6	2.3
15. P^{+5}	10.0	9.8	9.25	8.45	7.5	6.55	5.65	4.8	4.05	3.4	3.0	2.6

15. P	15.0	12.4	10.0	8.45	7.45	6.5	5.65	4.8	4.05	3.4	3.0	2.6
15. P^{-3}	18.0	12.7	9.8	8.4	7.45	6.5	5.65	4.85	4.05	3.4	3.0	2.6
16. S^{+6}	16.0	13.6	10.7	8.95	7.85	6.85	6.0	5.25	4.5	3.9	3.35	2.9
17. C1	17.0	14.6	11.3	9.25	8.05	7.25	6.5	5.75	5.05	4.4	3.85	3.35
17. $C1^{-}$	18.0	15.2	11.5	9.3	8.05	7.25	6.5	5.75	5.05	4.4	3.85	3.35
19. K^{+}	18.0	16.5	13.3	10.8	8.85	7.75	7.05	6.44	5.9	5.3	4.8	4.2
19. K	19.0	16.5	13.3	10.8	9.2	7.9	6.7	5.9	5.2	4.6	4.2	3.7
20. Ca^{+2}	18.0	16.8	14.0	11.5	9.3	8.1	7.35	6.7	6.2	5.7	5.1	4.6
20. Ca	20.0	17.5	14.1	11.4	9.7	8.4	7.3	6.3	5.6	4.9	4.5	4.0
21. Sc^{+3}	18.0	16.7	14.0	11.4	9.4	8.3	7.6	6.9	6.4	5.8	5.35	4.85
21. Sc	21.0	18.4	14.9	12.1	10.3	8.9	7.7	6.7	5.9	5.3	4.7	4.3
22. Ti^{+4}	18.0	17.0	14.4	11.9	9.9	8.5	7.85	7.3	6.7	6.15	5.65	5.05
22. Ti	22.0	19.3	15.7	12.8	10.9	9.5	8.2	7.2	6.3	5.6	5.0	4.6
23. V	23.0	20.2	16.6	13.5	11.5	10.1	8.7	7.6	6.7	5.9	5.3	4.9
24. Cr	24.0	21.1	17.4	14.2	12.1	10.6	9.2	8.0	7.1	6.3	5.7	5.1
25. Mn	25.0	22.1	18.2	14.9	12.7	11.1	9.7	8.4	7.5	6.6	6.0	5.4
26. Fe	26.0	23.1	18.9	15.6	13.3	11.6	10.2	8.9	7.9	7.0	6.3	5.7
27. Co	27.0	24.1	19.8	16.4	14.0	12.1	10.7	9.3	8.3	7.3	6.7	6.0
28. Ni	28.0	25.0	20.7	17.2	14.6	12.7	11.2	9.8	8.7	7.7	7.0	6.3
29. Cu	29.0	25.9	21.6	17.9	15.2	13.3	11.7	10.2	9.1	8.1	7.3	6.6
30. Zn	30.0	26.8	22.4	18.6	15.8	13.9	12.2	10.7	9.6	8.5	7.6	6.9
37. Rb^{+}	36.0	33.6	28.7	24.6	21.4	18.9	16.7	14.6	12.8	11.2	9.9	8.9
37. Rb	37.0	33.5	28.2	23.8	20.2	17.9	15.9	14.1	12.5	11.2	10.2	9.2
55. Cs	55.0	50.7	43.8	37.6	32.4	28.7	25.8	23.2	20.8	18.8	17.0	15.6
74. W	74	69	60	53	46	41	37	33	30	28	25	23