

**Бердақ атындағы Қарақалпақ мәмлекетлик
университети**

Улыўма физика кафедрасы

ҚАТТЫ ДЕНЕЛЕР ФИЗИКАСА

пәни бойынша

**ОҚЫТЫҰ ТЕХНОЛОГИЯСЫ (ОҚЫҰ-МЕТОДИКАЛЫҚ
КОМПЛЕКС, 2011-2012 оқыў жылы ушын)**

**Физика қәнигелиги студентлери
ушын дүзилген, 3-курс, 5-семестр.**

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

Пәннің сабақларға мөлшерленген оқыў программасы Қарақалпақ мәмлекетлик университетиниң илимий-методикалық кеңесиниң 2011-жыл 29-июнь күнги мәжлисинде қарап шығылды ҳәм мақулланды. Протоколдың қатар саны 6.

Пәннің сабақларға мөлшерленген оқыў программасы улыўма физика кафедрасының илимий-методикалық семинарының 2011-жыл 23-июнь күнги мәжлисинде қарап шығылды ҳәм мақулланды. Протоколдың қатар саны 10.

Дүзиўши

профессор Б.Абдикамалов

“Тастыйықлайман”
Оқыу ислери бойынша проректор

М.Ибрагимов
2011-жыл 29-июнь

САБАҚЛАРҒА МӨЛШЕРЛЕНГЕН ОҚЫУ ПРОГРАММАСЫ

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

1. Шөлкемлестириў-методикалық бөлим

«Қатты денелер физикасы» курсының мақсети студентлерди механикалық, жыллылық, электрлик, магнитлик, оптикалық тәсирлер түсирилгенде қатты денелерде орын алатуғын физикалық процесслерди үйрениўден хәм сол процесслерди тәриплеў усыллары менен танысыўды басшылыққа алады. Бул мағлыўматларды билиў физика илимин тереңирек билиў ушын зәрүрли. Соның ушын «Қатты денелер физикасы» кусын өтиўде алда турған ўазыйпа студентлерге ҳазирги заман қатты денелериниң түсиниклери хәм тийкарларын үйретиўден ибарат.

Курс тәбийий хәм улыўмалық процессионаллық пәнлер блогына киреди, қатты денелер физикасы тараўы бойынша фундаменталлық билимлердиң тийкарын пайда етеди.

Курсты меңгериўге қойылатуғын талаплар мыналардан ибарат:

Студент мыналарды билиўи керек: қатты денелердеги физикалық кубылыслардың мәниси, материаллардың курылысы менен физикалық қәсийетлери арасындағы қатнасларды орнатыў.

Студент мыналарды ислей алыўи керек: хәр қыйлы қатты денелердиң физикалық параметрлерин анықлай алыўи, теориялық таллаўлар хәм алынған эксперименталлық мағлыўматлар тийкарында олардың сан мәнисин баҳалай алыўи.

2. Курстың мазмуны

1. Кирисиў. Физикалық қәсийетлери бойынша, соның ишинде электр өткизгишликтиң шамасы хәм характери бойынша қатты денелердиң классификациясы. Қатты денелер физикасының кристаллография, ярым өткизгишлер физикасы менен байланысы. Қатты денелердиң ҳазирги заман илими менен техникасындағы әҳмийети. Курстың предмети хәм мазмуны. Қатты денелердиң анықламасы. Кристаллық хәм аморфлық қатты денелер. Кристаллографиялық пәренже. Пәнжерениң түйинлери хәм векторлары. Сингониялар, кристаллографиялық категориялар. Бравэ пәнжерелери. Бравэ пәнжерелериниң типлери бойынша кристалларды классификациялаў. Элементар қутыша.

2. Кристаллардың симметриясы. Симметрияның ноқатлық хәм кеңисликтеги топарлары. Симметриясының типлери бойынша кристаллардың классификациялары.

Кристаллардың симметриясы менен олардың физикалық қасиетлерін тәріптейтуғын тензорлардың симметриялары арасындағы байланыс..

3. Кери пәнжерениң анықтамасы. Кери пәнжерениң векторларының қасиеттери. Пәнжерениң тегисликтери хәм Миллер индекстери. Кристаллардағы рентген нурларының дифракциясы. Рентген нурларының шашырауының атомлық хәм структуралық факторлары.

4. Кристаллардағы атомлар арасындағы байланыс күшлериниң тәбияты. Ионлық байланыс: байланыс энергиясы, Маделунг турақлысы. Ийтерилис күшлериниң тәбияты.

5. Ковалентлик байланыс: алмасыу тәсирлесии, байланыслардың бағытланғанлығы хәм тойыныушылығы. Ван-дер-Ваальс күштери хәм молекулалық байланыс. Металлық байланыс.

6. Қатты денелер пәнжересиндеги атомлардың тербелистери. Бир хәм еки атомлы пәнжерелердиң тербелистери спектри. Акустикалық хәм оптикалық модалар. Дисперсиялық қатнастар. Бриллюэн зоналары. Үш өлшемли жағдай ушын улыумаластыруу. Цикллық шегаралық шәртлер хәм толқын векторының руксат етилген мәнистери. Халлар тығызлығы.

7. Гармоникалық жақынласыудағы кристаллық пәнжере динамикасының теңлемелери. Қатты денелердиң жыллылық сыйымлығының классикалық теориясы.

8. Гармоникалық осциллятор хаққындағы элементар квантмеханикалық мәселе. Кристаллық пәнжерениң тербелисстериниң энергияларының квантланыуы. Планк тарқалыуы. Жыллылық сыйымлығының квант теориясы. Дебай модели.

9. Пәнжере атомларының тербелисстериндеги ангармонизм. Жыллылық кеңейиу. Фононлардың өз-ара тәсир етисии. Нормаль процесслер менен асырып өткизйу процесстери. Жыллылық өткизигишлик.

10. Қатты денелердеги фазалық өтиулер. Биринши хәм екнши әулад фазалық өтиулери. Екинши әулад фазалық өтиулериндеги кристаллық пәнжере симметриясының өзгеристери.

11. Кристаллардың серпимилик қасиеттери. Деформация хәм механикалық кернеулер тензорлары, олардың қасиеттери. Гук нызамы. Серпимилик модули тензоры.

12. Металлардағы электронлар. Қатты денелердиң зоналық структурасы. Электронлардың жалысқақлығы, Фермидиң кинетикалық энергиясы. Ферми қәдди. Электронлардың эффективлик массасы, халлардың тығызлығы. Зоналардың толтырылыуы. Ферми тарқалыуы, Ферми температурасы. Дәуирли өзгеретуғын майдандағы электронлар. Бриллюэнниң еки өлшемли зонасы, Бриллюэнниң үш өлшемли зонасы хәм Ферми бети. Зоналардың толтырылыуы.

13. Сегнето-, пиро- хәм пьезоэлектрлердиң физикалық қасиеттери. Пироэффекттиң жүзеге келиуиниң зәрүрли хәм жеткиликли шәртлери. Электрострикция.

14. Кристаллардағы микро - и макроскопиялық электр майданлары. Локаллық майдан. Қатты денелердиң поляризациясының механизмлери. Диэлектриклик синиргишлик.

15. Қатты денелердиң магнитлик қасиеттери. Алмасыу хәм релятивистлик тәсир етисиилер. парамагнетиклер, диамагнетиклер, ферромагнетиклер, антиферромагнетиклер, ферримагнетиклер. Кюри нызамы. Неель ноқаты. Магнитлик тәртиплеспеген кристаллардың энергиясы. Магнитлик резонанс.

3. Лабораториялық сабақлар. 24 саат.

«Қатты денелер физикасы» курсы бойынша лабораториялық жұмыстар студенттердиң алған теориялық билимлерин беккемлеу ушын орынланады. Соның менен бирге лабораториялық жұмыстар эксперимент өткерйу қәбилетликтерин пайда

етеди, өлшеу аппаратурасы менен дурыс ислеуге, алынған эксперименталлык нәтийжелерди саўатлы түрде қайта ислеуге үйретеди.

Лабораториялық жумысларды орындау барысында студентлер ҳәр қыйлы болған кристаллык материаллардың бир қатар физикалык параметрлерин анықлайды.

1. Қатты денелерди поляризациялык микроскоп пенен изертлеу.
2. Кублык пәнжерелер ушын (әпиұайы, қапталдан орайласқан хәм көлемде орайласқан) кери пәнжерени дүзиу хәм Бриллюэн зоналарын белгилеу
3. Квадрат пәнжере ушын Маделунг турақлысын есаплау.
4. Серпимли модуллери белгили болған кублык кристаллардағы белгили кристаллографиялык бағыт бойынша тарқалатуғын хәм берилген поляризациядағы серпимли толқынлардың тезликлерин табыу.
5. Кристалдың лаэграммасы хәм эпиграммасы тийкарында оның кристаллографиялык бағытларының ориентацияларын анықлау.
7. Тербелиу рентгенограммаларын түсириу жәрдеминде кристаллык пәнжере турақлыларын есаплау.

4. Курстың саатларының темалар хәм жумыслардың түрлери бойынша бөлистирилиуи

	Темалар атлары	Бар-лы-ғы	Лекция-лар	Лаборато-риялык сабақлар	Өз бетин-ше
1	Кирису. Физикалык қасиетлери бойынша, соның ишинде электр өткизгишликтің шамасы хәм характери бойынша қатты денелердин классификациясы. Қатты денелер физикасының кристаллография, ярым өткизгишлер физикасы менен байланысы. Қатты денелердин хәзирги заман илими менен техникасындағы әҳмийети. Курстың предмети хәм мазмуны. Қатты денелердин анықламасы. Кристаллык хәм аморфлык қатты денелер. Кристаллографиялык пәренже. Пәнжерениң түйинлери хәм векторлары. Сингониялар, кристаллографиялык категориялар. Бравэ пәнжерелери. Бравэ пәнжерелериниң типлери бойынша кристалларды классификациялау. Элементар қутыша.	10	2	6	4
2	Кристаллардың симметриясы. Симметрияның ноқатлык хәм кеңисликтеги топарлары. Симметриясының типлери бойынша кристаллардың классификациялары. Кристаллардың симметриясы менен олардың физикалык қасиетлерин тәриплейтуғын тензорлардың симметриялары арасындағы байланыс.	10	2	6	2

3	Кери пәнжерениң анықламасы. Кери пәнжерениң векторларының қәсийетлери. Пәнжерениң тегисликлери хәм Миллер индекслери. Кристаллардағы рентген нурларының дифракциясы. Рентген нурларының шашырауының атомлық хәм структуралық факторлары.	6	2		4
4	Кристаллардағы атомлар арасындағы байланыс күшлериниң тәбияты. Ионлық байланыс: байланыс энергиясы, Маделунг турақлысы. Ийтерилис күшлериниң тәбияты.	6	2		4
5	Ковалентлик байланыс: алмасыў тәсирлесийи, байланыслардың бағытланғанлығы хәм тойыныўшылығы. Ван-дер-Ваальс күшлери хәм молекулалық байланыс. Металлық байланыс.	4	2		2
6	Қатты денелер пәнжересиндеги атомлардың тербелислери. Бир хәм еки атомлы пәнжерелердиң тербелислери спектри. Акустикалық хәм оптикалық модалар. Дисперсиялық қатнастар. Бриллюэн зоналары. Үш өлшемлі жағдай ушын улыўмаластырыў. Цикллық шегаралық шәртлер хәм толқын векторының руқсат етилген мәнислери. Халлар тығызлығы.	6	2		4
7	Гармоникалық жақынласыўдағы кристаллық пәнжере динамикасының теңлемелери. Қатты денелердиң жыллылық сыйымлығының классикалық теориясы.	6	2		4
8	Гармоникалық осциллятор ҳаққындағы элементар квантмеханикалық мәселе. Кристаллық пәнжерениң тербелислериниң энергияларының квантланыўы. Планк тарқалыўы. Жыллылық сыйымлығының квант теориясы. Дебай модели.	8	2	2	4
9	Пәнжере атомларының тербелислериндеги ангармонизм. Жыллылық кеңейиўи. Фононлардың өз-ара тәсир етисийи. Нормаль процесслер менен асырып өткизий процесслери. Жыллылық өткизигишлик.	4	2		2
10	Қатты денелердеги фазалық өтийлер. Биринши хәм екинши әўлад фазалық өтийлери. Екинши әўлад	12	2	6	4

	фазалық өтиўлериндеги кристаллық пәнжере симметриясының өзгерислери.				
11	Кристаллардың серпимлилик қәсийетлери. Деформация хәм механикалық кернеўлер тензорлары, олардың қәсийетлери. Гук ызамы. Серпимлилик модули тензоры.	10	4	4	2
12	Қатты денелердің зоналық структурасы. Электронлардың жалысқақлығы, Фермидиң кинетикалық энергиясы. Ферми қәдди. Электронлардың эффективлик массасы, ҳаллардың тығызлығы. Зоналардың толтырылыўы. Ферми тарқалыўы, Ферми температурасы. Дәўирли өзгеретуғын майдандағы электронлар. Бриллюэнниң еки өлшемли зонасы, Бриллюэнниң үш өлшемли зонасы хәм Ферми бети. Зоналардың толтырылыўы.	6	2		4
13	Сегнето-, пиро- хәм пьезоэлектрлердің физикалық қәсийетлери. Пироэффекттиң жүзеге келиўиниң зәрүрли хәм жеткиликли шәртлери. Электрострикция.	4	2		2
14	Кристаллардағы микро - и макроскопиялық электр майданлары. Локаллық майдан. Қатты денелердің поляризациясының механизмлери. Диэлектриклик сиңиргишлик.	4	2		2
15	Қатты денелердің магнитлик қәсийетлери. Алмасыў хәм релятивистлик тәсир етисиўлер. парамагнетиклер, диамагнетиклер, ферромагнетиклер, антиферромагнетиклер, ферримагнетиклер. Кюри ызамы. Неель ноқаты. Магнитлик тәртиплеспеген кристаллардың энергиясы. Магнитлик резонанс.	10	2	2	6
	Жәми	106	32	24	50

Тийкарғы әдебият

1. Ч.Уэрт. Р.Томсон Физика твердого тела. Издательство «Мир». Москва. 1969. 568 с.
2. Ч.Киттель. Введение в физику твердого тела. М., Наука, 1978. 792 с.
3. Дж. Блейкмор. Физика твердого тела. Издательство «Мир». Москва. 1988. 608 с.
3. Н.Ашкрофт, Н.Мермин. Физика твердого тела, т.1. Москва. "Мир", 1979. 400 с.
4. Н.Ашкрофт, Н.Мермин. Физика твердого тела, т.2. Москва. "Мир", 1979. 422 с.
5. Дж.Займан. Принципы теории твердого тела. Москва. "Мир", 1966. 472 с.

6. М.П.Шаскольская. Кристаллография: Учебное пособие. 2-е издание, переработанное и дополненное. Москва. Издательство «Высшая школа». 1984. 376 с.

7. Физика твердого тела. Спецпрактикум (под редакцией А.А.Кацнельсона, Г.С.Гринчика). Издательство МГУ. Москва. 1982.

Қосымша әдебиет

1. Задачи по физике твердого тела. Под редакцией Г.Дж.Голдсмида. Издательство «Наука» Москва. 1976. 432 с.

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

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

4. О.Маделунг. Теория твердого тела. Издательство «Мир». Москва. 416 с.

5. К.В.Шалимова. Физика полупроводников. Москва. Издательство «Энергия». 1976. 416 с.

6. П.С.Киреев. Физика полупроводников. Издание второе, дополненное. Издательство «Высшая школа». Москва. 1975. 584 с.

Студентлердің билимин қадағалау баллары

Сабаклар түрлері	Саат көлемі (лек+әмел+лаб)	Өз бетінше	Ағымдағы бағалау	Шегаралық бағалау	Жуымақлаушы бағалау	Улыма балл
Лекция	32	22	13	15	30	45
Лаборатория	24	12	14	15		35

Рейтинг қадағалау түрлерінде ажыратылған қадағалау түрлері балларын анықлау усыллары

Қадағалау түрі	Қадағалау усылы	Саны	Ұақты	Максимал балл
Ағымдағы қадағалау	Аудиторияда хәм өз бетінше мәселелер шешиу	3	Кесте тийкарында	13-14
Жәми				40
Шегаралық қадағалау	Контрол жумысы	2	Кесте тийкарында	15
	Тест сораулары			
Жәми				30
Жуымақлаушы қадағалау	Жуымақлаушы жазба жумысы	1	Кесте тийкарында	30
Жәми		7		100

"Қатты денелер физикасы" бойынша жуымақлаушы қадағалау сораулары

1-вариант

1. Физикалық қасиетлері бойынша, соның ишинде электр өткізгішліктің шамасы хәм характери бойынша қатты денелердің классификациясы.

2. Қатты денелердің жыллылық қасиеттері. Қатты денелердің жыллылық сыйымдылығы. Дюлонг және Пти заңы.

3. Қатты денелердегі атомдар және молекулалар арасындағы байланыстар. Иондық байланыс.

4. Диаметрі 2 мм болған сымға массасы 1 кг жүк илдірілген. Сымда пайда болуының механикалық кернеуі анықталсын.

5. Қатты денелерді поляризациялық микроскоппен зерттеу.

2-вариант

1. Қатты денелер физикасының кристаллография, жарым өткізгіштер физикасы менен байланысы.

2. Кубтық пәндерлер үшін (әпіндей, қапталдан орайласқан және көлемде орайласқан) кері пәндеріне дүзіу және Бриллюэн зоналарын белгілеу.

3. Қатты денелердегі атомдар және молекулалар арасындағы байланыстар. Коваленттік байланыс (Гомеопольдік байланыс).

4. Диаметрі 2 см, ұзындығы 60 м болған қорғасын жоғарғы ұшынан қозғалмайтуындай қылып бекімленген. Төменгі ұшына 100 кг массалы жүк илдірілген. Сымның төменгі ұшындағы механикалық кернеуі табылсын.

5. Қатты денелердің атомдық-кристаллдық құрылысын зерттеу ұсыллары. Рентгенструктуралық анализ.

3-вариант

1. Кристаллдық және аморф қатты денелердің қазіргі заман әлімі менен техникасындағы әһміеті.

2. Қатты денелердегі атомдар және молекулалар арасындағы байланыстар. Иондық байланыс (Гетеропольдік байланыс).

3. Қатты денелердің механикалық қасиеттері. Серпимдік және эластик деформациялар.

4. Қатты денелердің атомдық-кристаллдық құрылысын зерттеу ұсыллары. Электрондық микроскопия және электронография.

5. Диаметрі 2 см, ұзындығы 60 м болған қорғасын жоғарғы ұшынан қозғалмайтуындай қылып бекімленген. Төменгі ұшына 100 кг массалы жүк илдірілген. Сымның жоғарғы ұшындағы механикалық кернеуі табылсын.

4-вариант

1. Кристаллдық және аморфтық қатты денелер. Кристаллдық және аморф денелердің бір-бірінен айырмашылығы. Кристаллдық құрылыс.

2. Кристалдың лаэграммасы және эпиграммасы тейкарында оның кристаллографиялық бағытларын анықлау.

3. Қатты денелердегі атомдар және молекулалар арасындағы байланыстар. Ван-Дер-Ваальс байланысы.

4. Қатты денелердің электрлік өткізгішлігі. Металдар және Жарым өткізгіштер.

5. Диаметрі 1 мм болған полат сымның бекімлік шегарасы 294 МПа дан артпастан көбі менен қанша мұғдардағы жүкке шыдауы мүмкін. Ұсы жүктің тәсірінде сымның созылыуы басланғыш ұзындығының қандай бөлімін құрайды.

5-вариант

1. Кристаллографиялық пәренже. Пәнжерениң түйинлери хәм векторлары. Сингониялар, кристаллографиялық категориялар. Структуралық кристаллографияның тийкарығы теңлемелери.

2. Қатты денелердеги атомлар хәм молекулалар арасындағы байланыслар. Металлық байланыс.

3. Металлық байланыс. Металлардың жыллылық хәм электр тоғын өткізгішлігі. Жыллылық өткізгішлік пенен электр өткізгішлік арасындағы байланыс.

4. Тербелиў рентгенограммаларын түсириў жәрдемінде кристаллық пәнжере турақлыларын есаплаў.

5. Қорғасын сым жоқары ушынан тик ҳалатта илдирилген. Аўырлық күшиниң тәсирінде үзилип кетпеўи ушын сым қандай ең үлкен узынлыққа ийе болыўы мүмкин. Қорғасынның бекемлик шегарасы 12,3 МПа.

6-вариант

1. Бравэ пәнжерелери. Бравэ пәнжерелериниң типлери бойынша кристалларды классификациялаў. Элементар қутыша.

2. Ярым өткізгішлердеги тоқты тасыўшылардың тең салмақлық қасиетлери. Электронлар хәм тесикшелер. Электронлық хәм тесикшелик өткізгішлік.

3. Металлардың электр өткізгішлігиниң тәбияты хәм оның температураға ғәрезлиги.

4. Қатты денелердеги фазалық өтиўлер. Биринши хәм екинши әўлад фазалық өтиўлери.

5. Сымға байланған 10 кг массалы тәрези тасы 2 л/с жийлик пенен горизонтал бете сүйкелиссиз айланады. Сымның узынлығы 1,2 м хәм көлденең кесе-кесими 2 мм². Сым материалының механикалық кернеўи табылсын.

7-вариант

1. Кристаллардың симметриясы. Симметрияның ноқатлық хәм кеңисликтеги топарлары.

2. Кристаллық денелердеги деформациялар менен кернеўлердиң екинши тәртіптеги симметриялы тензордың жәрдемінде тәриплиениўи.

3. Меншикли хәм қосымталы ярым өткізгішлер. Хәр қыйлы ярым өткізгішлердеги электронлар менен тесикшелердиң концентрациялары.

4. Қатты денелердиң магниттік қасиетлери. Парамагнетизм, диамагнетизм хәм ферромагнетизм.

5. Узынлығы 5 м хәм кесе-кесими 2 мм² болған сымға 5,1 кг массалы жүк илдирилген. Нәтийжеде сым 0,6 мм ге узарады. Сым материалы ушын Юнг модулиниң мәніси табылсын.

8-вариант

1. Симметриясының типлери бойынша кристалларды классификациялаў.

2. Қатты денелердиң жыллылық қасиетлериниң квантлық теориясы. Эйнштейн хәм де Бройль моделлери.

3. Қатты денелердиң энергиялық зоналық қурылысы. Бир өлшемлі моделлер. Дерлік еркин электронлар жақынласыўы.

4. Серпимли модуллері белгили болған кублық кристаллардағы белгили кристаллографиялық бағыт бойынша тарқалатуғын хәм берилген поляризациядағы серпимли толқынлардың тезликлерин табыў.

5. Ұзындығы 3 м және диаметрі 2 см болған полат стерженге массасы 2,5 т жүк илдирилген. Стержендегі механикалық кернеу, стерженнің салыстырмалы және абсолют ұзайыуы анықлансын.

9-вариант

1. Кристаллардың симметриясы менен олардың физикалық қасиеттерін тәріптейтуғын тензорлардың симметриялары арасындағы байланыс.

2. Екі атомлы сызықты шынжырдың киші тербелістері. Тербелістердің акустикалық және оптикалық тармақтары.

3. Кристаллық диэлектриктердің поляризациясы. Поляризация тензоры.

4. Қатты денелердің зоналық құрылысы. Валентті, қадаған етілген және өткізгішлік зоналары.

5. Ұзындығы 2 м және диаметрі 1 мм болған горизонтал жолда тартылған. Сымның ортасына массасы 1 кг жүк илдіргенде жүк илдирилген нүкте 4 см ге төмендейтуғын дәрежеде созылды. Сым материалының Юнг модулінің шамасы анықлансын.

10-вариант

1. Кери пәнжерінің анықтамасы. Тууы және кери пәнжерелер арасындағы байланыс. Кери пәнжере векторларының қасиеттері.

2. Қатты денелердегі фазалық өтулер. Екінші әулад фазалық өтулеріндегі кристалдың симметриясының өзгеріулері.

3. Әпидіуі екі өлшемді квадрат пәнжерінің киші тербелістері. Әпидіуі кубтық пәнжерінің киші тербелістері.

4. Қатты денелердің оптикалық қасиеттері. Оптикалық индикатриса. Қос нұр сындыруы.

5. Қаттылықтары 0,3 кН/м және 0,8 кН/м болған екі пружина ізбе-із жалғанды. Егер пружина 1,5 см ге деформацияланған болса, бірінші пружинаның абсолют деформациясын анықтаңыз.

11-вариант

1. Кристаллографиялық пәнжере тегісліктері және Миллер индекстері. Структуралық кристаллографияның тейқарғы теңдемелері.

2. Кристаллардағы рентген нұрларының дифракциясы және кери пәнжере.

3. Кристаллардың жыллылық сыйымлығы. Дебай температурасы. Кристаллар үшін $C_p - C_v$ айырмасын табыу.

4. Диэлектриктердің қасиеттері. Диэлектрик синергіштік және поляризацияланушылық. Электронлық поляризацияланушылық.

5. Қаттылықтары 2 кН/м және 6 кН/м болған пружиналардың ізбе-із және параллель жалғанғандағы қаттылықтары анықлансын.

12-вариант

1. Кристаллардағы рентген нұрларының дифракциясы. Рентген нұрларының шашырауының атомлық және структуралық факторлары.

2. Қатты денелердегі фонондар және пәнжерінің тербелістері. Пәнжере тербелістерінің кванттық қарактері. Фононның импульсі және энергиясы.

3. Сегнетоэлектрик кристаллар. Сегнетоэлектрик фазалық айланыстар. Пироэлектриктер.

4. Кристаллардағы байланыстар типтері. Инерт газлар кристаллары. Ван-дер-Ваальс-Лондон күштері.

5. Узынлығы 1 м хәм кесе-кесиминиң майданы 1 см^2 болған полат стерженди 1 мм ге созыў ушын қандай жұмыс атқарыў керек?

13-вариант

1. Кристаллардағы атомлар арасындағы байланыс күшлериниң тәбияты. Ионлық байланыс: байланыс энергиясы, Маделунг турақлысы. Ийтерилис күшлериниң тәбияты.

2. Кристаллардың серпимлик қасиеттері. Кристаллардығы кернеўлер менен деформациялар. Серпимли деформацияларды анализлеў.

3. Қатты денелердеги диамагнетизм менен парамагнетизм. Парамагнетизмниң квантлық теориясы.

4. Ярым өткізгіш кристаллар. Меншикли хәм қосымталы өткізгішлік. р хәм п типиндегі ярым өткізгішлер.

5. Пружинаны 1 см ге қысыў ушын 10 Н күш қосыў керек. Егер күш қысыўға пропорционал болса, пружинаны 10 см ге қысыў ушын қандай жұмыс атқарыў керек?

14-вариант

1. Ковалентлик байланыс: алмасыў тәсірлесіуі, байланыстардың бағытланғанлығы хәм тойыныўшылығы.

2. Төртінші рангалы серпимли берілгішлік хәм серпимли қаттылық тензорлары.

3. Қатты денелердің жыллылық өткізгішлигі. Пәнжерениң жыллылық қарсылығы. Нормал процесслер хәм алып өтиў процесслері.

4. Қатты денелердегі энергия зоналары (энергетикалық зоналар). Энергия зоналарының пайда болыуы.

5. Қаттылығы 10 кН/м болған пружина 200 Н күш пенен қысылған. Усы пружинаны және қосымша 1 см ге қысыўда сыртқы күшлер атқаратуғын жұмыс анықлансын.

15-вариант

1. Кристаллардағы байланыстар типтері. Инерт газлар кристаллары. Ван-дер-Ваальс-Лондон күштері. Молекулалық байланыс.

2. Ярым өткізгішлер. Меншикли өткізгішлік. Қадаған етилген зона.

3. Ферромагнитлердің магнитлик қурылысы.

4. Қатты денелердегі фотоөткізгішлік. Кеңісиклегі заряд ямаса поляризациялық эффектлер.

5. Қаттылығы 1 кН/м болған пружина 4 см ге қысылған. Пружинаның қысылыуын 18 см ге шекем арттырыў ушын қандай жұмыс атқарылыуы керек?

16-вариант

1. Қатты денелердегі металлық байланыс.

2. Сегнетоэлектриклердің, пироэлектриклердің хәм пьезоэлектриклердің физикалық қасиеттері.

3. Екі атомлы сызықлы шынжырдың киши тербеліслері. Тербеліслердің акустикалық хәм оптикалық тармақлары.

4. Қатты денелердің магнитлик қасиеттері. Алмасыў хәм релятивистлик тәсір етисіулер. Парамагнетиклер, диамагнетиклер, ферромагнетиклер, антиферромагнетиклер, ферримагнетиклер.

5. Пружинаның жоқарғы ушында тұрған кишкене тақта үстине қойылған тәрези тасы пружинаны 2 мм ге қысады. Пружинаның ушына 5 см бийикликтен түскен тәрези тасы пружинаны қаншаға қысады?

17-вариант

1. Қатты денелер пәнжересіндегі атомлардың тербеліслері.
2. Қатты денелердің атомлық-кристаллық структурасын изертлеу ұсыллары. Рентгенографиядығы полихроматикалық Лауэ ұсылы.
3. Қатты денелердегі екінші әулад фазалық өтиулеріндегі кристаллық пәнжере симметриясының өзгеріслері.
4. Пирозлектрик кристаллар хәм олардың кристаллық қурылысының өзгешеликлері. Орайға карата симметриялы кристалларда пирозлектрик қәсиеттің болмайтуғынылығын дәлиллеу.
5. Массасы 10 г болған оқ затворының массасы 200 г болған мылтықтың стволының аұзынан 300 м/с тезлик пенен ушып шығады. Мылтықтың затворы стволға қаттылығы 25 кН/м болған пружина менен қысылады. Атыудан кейин затвор қандай аралыққа жылжыйды?

18-вариант

1. Кюри хәм Нейман принциптері. Симметрияның шеклик топарлары. Кристаллардың физикалық қәсіеттерінің симметриясы менен ноқатлық симметриясы арасындағы байланыс.
2. Бир хәм еки атомлы пәнжерелердің тербеліслері спектрі. Акустикалық хәм оптикалық модалар.
3. Қатты денелердің электр өткізгішлігі. Металлар менен ярым өткізгішлердің электр өткізгішліктері арасындағы айырма.
4. Қатты денелердің оптикалық қәсіеттері. Оптикалық актив кристаллар.
5. Қаттылықтары 0,3 кН/м хәм 0,5 кН/м болған еки пружина избе-из жалғанған хәм екінші пружинаның абсолют деформациясы 3 см ге тең болатуғындай етип созылады. Пружиналарды созыуда атқарылған жұмыс есаплансын.

19-вариант

1. Кристаллық хәм аморф қатты денелердің хәзиргі заман илими менен техникасындағы әхмийеті.
2. Қатты денелердегі атомлар хәм молекулалар арасындағы байланыслар. Ионлы байланыс (Гетерополяр байланыс).
3. Кристалдың лаэграммасы хәм эпиграммасы тийкарында оның кристаллографиялық бағытларының ориентацияларын анықлау.
4. Қатты денелердің атомлық-кристаллық қурылысын изертлеу ұсыллары. Электронлық микроскопия хәм электронография.
5. Диаметрі 2 см, ұзынлығы 60 м болған қорғасын жоқарғы ушынан қозғалмайтуғындай қылып беккемленген. Төменгі ушына 100 кг массалы жүк илдирилген. Сымның жоқарғы ушындағы механикалық кернеу табылсын.

20-вариант

1. Кристаллардың структурасы. Тууры хәм кери пәнжерелер. Элементар қутыша. Миллер индекслері. жайластыруы тығызлығы.

2. Қатты денелердегі атомлар хәм молекулалар арасындағы байланыслар. Ковалентли байланыс (Гомеополяр байланыс).

3. Қатты денелердің механикалық қасиетлери. Серпимли хәм эластик деформациялар.

4. Диаметри 2 см, узынлығы 60 м болған қорғасын жоқарғы ушынан қозғалмайтуғындай қылып беккемленген. Төменги ушына 100 кг массалы жүк илдирилген. Сымның төменги ушындағы механикалық кернеу табылсын.

5. Қатты денелердің атомлық-кристалллық қурылысын изертлеу усыллары. Рентгенструктуралық анализ.

21-варинат

1. Қатты денелердің жыллылық қасиетлери. Қатты денелердің жыллылық сыйымлығы. Дюлонг хәм Пти нызамы.

2. Қатты денелер физикасының кристаллография, ярым өткізгішлер физикасы менен байланысы.

3. Қатты денелердегі атомлар хәм молекулалар арасындағы байланыслар. Ионлық байланыс.

4. Диаметри 2 мм болған сымға массасы 1 кг жүк илдирилген. Сымда пайда болатуғын механикалық кернеу анықлансын.

5. Қатты денелерди поляризациялық микроскоп пенен изертлеу.

22-вариант

1. Кристаллографиялық пәренже. Пәнжерениң түйинлери хәм векторлары. Сингониялар, кристаллографиялық категориялар.

2. Қатты денелер физикасының кристаллография, ярым өткізгішлер физикасы менен байланысы.

3. Қатты денелердің механикалық қасиетлери. Серпимли хәм эластик деформациялар.

4. Қатты денелердегі атомлар хәм молекулалар арасындағы байланыслар. Ван-Дер-Ваальс байланысы.

5. Тербелиу рентгенограммаларын хәм Лауэграммаларды түсириу жәрдемінде кристалллық пәнжере турақлыларын есаплау.

23-вариант

1. Физикалық қасиетлери бойынша, соның ишінде электр өткізгішліктің шамасы хәм характери бойынша қатты денелердің классификациясы.

2. Кублық пәнжерелер ушын (әпиуайы, қапталдан орайласқан хәм көлемде орайласқан) кери пәнжерени дүзиу хәм Бриллюэн зоналарын белгилеу.

3. Металллық байланыс. Металлардың жыллылық хәм электр тоғын өткізгішлігі. Жыллылық өткізгішлік пенен электр өткізгішлік арасындағы байланыс.

4. Қатты денелердің электрлік өткізгішлігі. Металлар хәм ярым өткізгішлер.

5. Қорғасын сым жоқары ушынан тик халатта илдирилген. Ауырлық күшинің тәсирінде үзілип кетпеуі ушын сым қандай ең үлкен узынлыққа ийе болыуы мүмкин. Қорғасынның беккемлік шегарасы 12,3 МПа.

24-вариант

1. Кристалллық хәм аморфлық қатты денелер. Кристалллық хәм аморф денелердің бир биринен айырмашылығы. Кристалллық қурылыс.

2. Қатты денелердегі атомлар хәм молекулалар арасындағы байланыслар. Ван-дер-Ваальс хәм коваленттік байланыслар.

3. Қатты денелердің механикалық қасиеттері. Серпимді хәм эластик деформациялар.

4. Кристаллардағы микро - и макроскопиялық электр майданлары. Локаллық майдан. Қатты денелердің поляризациясының механизмдері. Диэлектриктік сиңиргіштік.

5. Диаметрі 1 мм болған полат сымның беккемдік шегарасы 294 МПа дан артпастан көбі менен қанша мұғдардағы жүкке шыдауы мүмкін. Усы жүктің тәсирінде сымның созылуы басланғыш ұзындығының қандай бөлімін құрайды.

25-вариант

1. Металлардағы Бриллюэн зоналары. Үш өлшемді жағдай үшін ұлыұмаластыру.

2. Гармоникалық осциллятор жаққындағы элементар квантмеханикалық мәселе. Кристаллық пәнжеренің тербелістерінің энергияларының квантлануы. Планк тарқалуы.

3. Пәнжере атомларының тербелістеріндегі ангармонизм. Жыллылық кеңейіуі. Қатты денелердің жыллылық кеңейіуі коэффициенті.

4. Фонондардың өз-ара тәсір етисіуі. Нормаль процесслер менен асырып өткізіуі процессдері. Жыллылық өткізгіштік.

5. Массасы 3,9 кг полат стержень өзінің басланғыш ұзындығының 0,001 бөліміне созылған. Созылған стерженнің потенциал энергиясы табылсын.

26-вариант

1. Қатты денелердегі фазалық өтіулер. Бірінші хәм екінші әулад фазалық өтіулері.

2. Кристаллофизикадағы Кюри хәм Нейман принциптері. Бул принциптерді қолдануы.

3. Гармоникалық осциллятор жаққындағы элементар квантмеханикалық мәселе. Кристаллық пәнжеренің тербелістерінің энергияларының квантлануы. Планк тарқалуы.

4. Хәр қандай сингониялы кристаллардағы кристаллографиялық тегісліктер арасындағы қашықтықтар.

5. Ұзындығы 2 м хәм көлденең кесе-кесім майданы 2 см^2 болған темир стержень 10 кН күш пенен созылмақта. Созылған стерженнің потенциал энергиясы хәм энергияның көлемдік тығызлығы табылсын.

27-вариант

1. Гук ызамаы. Юнг модулі. Серпимділік модулі тензоры.

2. Қатты денелердегі байланыс энергиясы. Металлардағы байланыс энергиясы.

3. Металлардағы еркін электрондар. Қатты денелердің зоналық структурасы.

4. Пирозэффекттің тәбияты. Пирозэффекттің жүзеге келіуінің зәрүрлі хәм жеткілікті шәрттері. Электрострикция.

5. Ұзындығы 2 м хәм көлденең кесе-кесім майданы 2 см^2 болған темир стержень 10 кН күш пенен созылмақта. Созылған стерженнің потенциал энергиясы хәм энергияның көлемдік тығызлығы табылсын.

28-вариант

1. Кристаллардың серпимлилік қасиеттері. Деформация хәм механикалық кернеулер тензорлары, олардың қасиеттері.
2. Қатты денелердегі байланыс энергиясы. Молекулалар аралық кристаллардың байланыс энергиясы.
3. Қатты денелердегі байланыс энергиясы. Ионлық хәм коваленттік кристаллардағы байланыс энергиялары.
4. Кристаллардың структурасы хәм кристаллардағы рентген нурларының дифракциясы. Вульф-Брегг теңлемесі.
5. Қаттылықтары 1 кН/м хәм 3кН/м болған екі пружина параллел жалғанған. Усы системаның абсолют деформациясы 5 см болған қалдағы потенциал энергиясы анықлансын.

29-вариант

1. Симметрия қатты денелердегі түсінік. Симметрия элементтері. Кристаллардың трансляциялық симметриясы хәм Бриллюэн зоналары.
2. Жылшылық сыйымдылығының квант теориясы. Эйнштейн хәм Дебай моделлері.
3. Диэлектриктердің электрлік қасиеттері. Поляризация. Поляризация векторы.
4. Ярым өткізгіштердің зоналық структурасы. Ярым өткізгіштердегі меншіктік, электрондық хәм тесікшелік өткізгіштік.
5. Полат стержень созылғанда стержень материалындағы механикалық кернеу 300 МПа болған. Созылған стержень потенциал энергиясының көлемлік тығыздығы табылсын.

30-вариант

1. Коваленттік байланыс: алмасу тәсірлесуі, байланыстардың бағытланғанлығы хәм тойындылығы.
2. Төртінші рангалы серпимлі берілгіштік хәм серпимлі қаттылық тензорлары.
3. Кристалдық диэлектриктердің поляризациясы. Поляризация тензоры.
4. Қатты денелердің зоналық құрылысы. Валенттік, қадаған етілген хәм өткізгіштік зоналары.
5. Узындығы 5 м хәм кесе-кесімі 2 мм² болған сымға 5,1 кг массалы жүк илдирилген. Нәтижеде сым 0,6 мм ге узарады. Сым материалы үшін Юнг модулінің мәнісі табылсын.

31 вариант

1. Кери пәнжерінің анықтамасы. Тууы хәм кери пәнжерлер арасындағы байланыс. Кери пәнжере векторларының қасиеттері.
2. Қатты денелердегі фазалық өтулер. Екінші әулад фазалық өтулеріндегі кристалдың симметриясының өзгеріулері.
3. Әпіуайы екі өлшемлі квадрат пәнжерінің киші тербелістері. Әпіуайы кублық пәнжерінің киші тербелістері.
4. Қатты денелердің оптикалық қасиеттері. Оптикалық индикатриса. Қос нур сындыруы.
5. Қаттылықтары 0,3 кН/м хәм 0,8 кН/м болған екі пружина избе-из жалғанды. Егер пружина 1,5 см ге деформацияланған болса, бірінші пружинаның абсолют деформациясын анықлаң.

32 вариант

1. Кристаллографиялық пәнжере тегисликлери хәм Миллер индекслери.
2. Кристаллардағы рентген нурларының дифракциясы хәм кери пәнжере.
3. Кристаллардың жыллылық сыйымлығы. Дебай температурасы. Кристаллар ушын $C_p - C_v$ айырмасын табыў.
4. Диэлектриклердиң қасийетлери. Диэлектриклик синиргишлик хәм поляризацияланыўшылық. Электронлық поляризацияланыўшылық.
5. Қаттылықлары 2 кН/м хәм 6 кН/м болған пружиналардың избе-из хәм параллел жалғанғандағы қаттылықлары анықлансын.

33 вариант

1. Кристаллардағы рентген нурларының дифракциясы. Рентген нурларының шашыраўының атомлық хәм структуралық факторлары.
2. Қатты денелердеги фононлар хәм пәнжерениң тербелислери. Пәнжере тербелислериниң квантлық характери. Фононның импульси хәм энергиясы.
3. Сегнетоэлектриклик кристаллар. Сегнетоэлектриклик фазалық айланыслар. Пирозэлектриклер.
4. Кристаллардағы байланыслар типлери. Инерт газлер кристаллары. Ван-дер-Ваальс-Лондон күшлери.
5. Узынлығы 1 м хәм кесе-кесиминиң майданы 1 см^2 болған полат стерженди 1 мм ге созыў ушын қандай жумыс атқарыў керек?

34-вариант

1. Кристаллардағы атомлар арасындағы байланыс күшлериниң тәбияты. Ионлық байланыс: байланыс энергиясы, Маделунг турақлысы. Ийтерилис күшлериниң тәбияты.
2. Кристаллардың серпимлик қасийетлери. Кристаллардығы кернеўлер менен деформациялар. Серпимли деформацияларды анализлеў.
3. Қатты денелердеги диамагнетизм менен парамагнетизм. Парамагнетизмниң квантлық теориясы.
4. Ярым өткизгиш кристаллар. Меншикли хәм қосымталы өткизгишлик. р хәм п типиндеги ярым өткизгишлер.
5. Пружинаны 1 см ге қысыў ушын 10 Н күш қосыў керек. Егер күш қысыўға пропорционал болса, пружинаны 10 см ге қысыў ушын қандай жумыс атқарыў керек?

35-вариант

1. Ковалентлик байланыс: алмасыў тәсирлесиўи, байланыслардың бағытланғанлығы хәм тойыныўшылығы.
2. Төртинши рангалы серпимли берилгишлик хәм серпимли қаттылық тензорлары.
3. Қатты денелердиң жыллылық өткизгишлиги. Пәнжерениң жыллылық қарсылығы. Нормал процесслер хәм алып өтиў процесслери.
4. Қатты денелердеги энергия зоналары (энергетикалық зоналар). Энергия зоналарының пайда болыўы.
5. Қаттылығы 10 кН/м болған пружина 200 Н күш пенен қысылған. Усы пружинаны және қосымша 1 см ге қысыўда сыртқы күшлер атқаратуғын жумыс анықлансын.

36-вариант

1. Кристаллардағы байланыслар типлери. Инерт газлер кристаллары. Ван-дер-Ваальс-Лондон күшлери. Молекулалық байланыс.

2. Ярым өткізгіштер. Меншикли өткізгіштік. Қадаған етилген зона.
3. Ферромагниттердің магниттік құрылысы.
4. Қатты денелердегі фотоөткізгіштік. Кеңістіктегі заряд ямасы поляризациялық эффекттер.
5. Қаттылығы 1 кН/м болған пружина 4 см-ге қысылған. Пружинаның қысылуын 18 см-ге шекем арттыру үшін қандай жұмыс атқарылуы керек?

37-вариант

1. Қатты денелердегі металдық байланыс.
2. Сегнетоэлектриктердің, пьезоэлектриктердің және пьезоэлектриктердің физикалық қасиеттері.
3. Екі атомлы сызықты шынжырдың киші тербелістері. Тербелістердің акустикалық және оптикалық тармақтары.
4. Қатты денелердің магниттік қасиеттері. Алмасу және релятивистік әсер еткізгіштер. Парамагнетиктер, диамагнетиктер, ферромагнетиктер, антиферромагнетиктер, ферримагнетиктер.
5. Пружинаның жоғарғы ұшында тұрған тахташ үстіне қойылған тәрези тасы пружинаны 2 мм-ге қысады. Пружинаның ұшына 5 см биіктіктен түскен тәрези тасы пружинаны қаншаға қысады?

38-вариант

1. Қатты денелер пәنجересіндегі атомдардың тербелістері.
2. Қатты денелердің атомдық-кристаллдық құрылысын зерттеу ұсынысы. Рентгенографиядағы полихроматикалық Лауэ ұсынысы.
3. Қатты денелердегі екінші әулад фазалық өткізгіштеріндегі кристаллдық пәنجере симметриясының өзгерістері.
4. Пьезоэлектрик кристаллдар және олардың кристаллдық құрылысының өзгерістері. Орайға қарата симметриялы кристаллдарда пьезоэлектрик қасиеттің болмауының дәлелдеуі.
5. Массасы 10 г болған оқ затворының массасы 200 г болған мылтықтың стволының аузынан 300 м/с тезлікпен ұшып шығады. Мылтықтың затворы стволға қаттылығы 25 кН/м болған пружинамен қысылады. Атыудан кейін затвор қандай аралыққа жылжыды?

39-вариант

1. Кюри және Нейман принциптері. Симметрияның шектік топтары. Кристаллдардың физикалық қасиеттерінің симметриясымен нәтижелік симметриясы арасындағы байланыс.
2. Бір және екі атомлы пәнжелердің тербелістері спектрі. Акустикалық және оптикалық модальдар.
3. Қатты денелердің электр өткізгіштігі. Металлдармен ярым өткізгіштердің электр өткізгіштіктері арасындағы айырма.
4. Қатты денелердің оптикалық қасиеттері. Оптикалық актив кристаллдар.
5. Қаттылықтары 0,3 кН/м және 0,5 кН/м болған екі пружина ізбе-із жалғанған және екінші пружинаның абсолют деформациясы 3 см-ге тең болатындай етіп созылады. Пружиналарды созууда атқарылған жұмыс есептесін.

40-вариант

1. Кристаллық хәм аморф қатты денелердің хәзирги заман илими менен техникасындағы әхмийети.
2. Қатты денелердеги атомлар хәм молекулалар арасындағы байланыслар. Ионлы байланыс (Гетерополяр байланыс).
3. Кристалдың лаэграммасы хәм эпиграммасы тийкарында оның кристаллографиялық бағытларының ориентацияларын анықлау.
4. Қатты денелердің атомлық-кристаллық қурылысын изертлеу ұсыллары. Электронлық микроскопия хәм электронография.
5. Диаметри 2 см, ұзынлығы 60 м болған қорғасын жоқарғы ұшынан қозғалмайтуғындай қылып беккемленген. Төменги ұшына 100 кг массалы жүк илдирилген. Сымның жоқарғы ұшындағы механикалық кернеу табылсын.

41-вариант

1. Кристаллардың структурасы. Тууры хәм кери пәнжерелер. Элементар қутыша. Миллер индекслери. жайластыруу тығызлығы.
2. Қатты денелердеги атомлар хәм молекулалар арасындағы байланыслар. Ковалентли байланыс (Гомеополяр байланыс).
3. Қатты денелердің механикалық қәсийетлери. Серпимли хәм эластик деформациялар.
4. Диаметри 2 см, ұзынлығы 60 м болған қорғасын жоқарғы ұшынан қозғалмайтуғындай қылып беккемленген. Төменги ұшына 100 кг массалы жүк илдирилген. Сымның төменги ұшындағы механикалық кернеу табылсын.
5. Қатты денелердің атомлық-кристаллық қурылысын изертлеу ұсыллары. Рентгенструктуралық анализ.

42-варинат

1. Қатты денелердің жыллылық қәсийетлери. Қатты денелердің жыллылық сыйымлығы. Дюлонг хәм Пти нызамы.
2. Қатты денелер физикасының кристаллография, ярым өткізгішлер физикасы менен байланысы.
3. Қатты денелердеги атомлар хәм молекулалар арасындағы байланыслар. Ионлық байланыс.
4. Диаметри 2 мм болған сымға массасы 1 кг жүк илдирилген. Сымда пайда болатуғын механикалық кернеу анықлансын.
5. Қатты денелерди поляризациялық микроскоп пенен изертлеу.

43-вариант

1. Кристаллографиялық пәренже. Пәнжерениң түйинлери хәм векторлары. Кристаллографиялық системалар, категориялар, сингониялар.
2. Қатты денелер физикасының кристаллография, ярым өткізгішлер физикасы менен байланысы.
3. Қатты денелердің механикалық қәсийетлери. Серпимли хәм эластик деформациялар.
4. Қатты денелердеги атомлар хәм молекулалар арасындағы байланыслар. Ван-Дер-Ваальс байланысы.
5. Тербелиу рентгенограммаларын хәм лауэграммаларды түсириу жәрдемінде кристаллық пәнжере турақлыларын есаплау.

44-вариант

1. Физикалық қасиеттері бойынша, соның ишінде электр өткізгішліктің шамасы хәм характері бойынша қатты денелердің классификациясы.
2. Кублық пәнжерелер үшін (әпиұайы, қапталдан орайласқан хәм көлемде орайласқан) кери пәнжерени дүзиұ хәм Бриллюэн зоналарын белгилеұ.
3. Металлық байланыс. Металлардың жыллылық хәм электр тоғын өткізгішлігі. Жыллылық өткізгішлік пенен электр өткізгішлік арасындағы байланыс.
4. Қатты денелердің электрлік өткізгішлігі. Металлар хәм ярым өткізгішлер.
5. Қорғасын сым жоқары ушынан тик халда илдирилген. Аұырлық күшинин тәсиринде үзилип кетпеұи ушын сым қандай ең үлкен узынлыққа ийе болыұы мүмкин. Қорғасынның беккемлик шегарасы 12,3 МПа.

45-вариант

1. Кристаллық хәм аморфлық қатты денелер. Кристаллық хәм аморф денелердің бир биринен айырмашылығы. Кристаллық қурылыс.
2. Қатты денелердеги атомлар хәм молекулалар арасындағы байланыслар. Ван-дер-Ваальс хәм ковалентлик байланыслыр.
3. Қатты денелердің механикалық қасиеттері. Серпимли хәм эластик деформациялар.
4. Кристаллардағы микро - и макроскопиялық электр майданлары. Локаллық майдан. Қатты денелердің поляризациясының механизмлери. Диэлектриклик сиңиргішлік.
5. Диаметри 1 мм болған полат сымның беккемлик шегарасы 294 МПа дан артпастан көби менен қанша муғдардағы жүкке шыдаұы мүмкин. Усы жүктің тәсиринде сымның созылыұы басланғыш узынлығының қандай бөлимин қурайды.

46-вариант

1. Металлардағы Бриллюэн зоналары. Үш өлшемли жағдай ушын улыұмаластырыұ.
2. Гармоникалық осциллятор хәққындағы элементар квантмеханикалық мәселе. Кристаллық пәнжерениң тербелислерининң энергияларының квантланыұы. Планк тарқалыұы.
3. Пәнжере атомларының тербелислериндеги ангармонизм. Жыллылық кеңейиұи. Қатты денелердің жыллылық кеңейиұ коэффициенти.
4. Фононлардың өз-ара тәсир етисиұи. Нормаль процесслер менен асырып өткізиұ процесслери. Жыллылық өткізгішлік.
5. Массасы 3,9 кг полат стержень өзининң басланғыш ушынлығының 0,001 бөлиминен созылған. Созылған стерженнинң потенциал энергиясы табылсын.

47-вариант

1. Қатты денелердеги фазалық өтиұлер. Ериұ хәм қатыұ. Биринши хәм екинши әұлад фазалық өтиұлери.
2. Кристаллофизикадағы Кюри хәм Нейман принциплери. Бул принциплерди айқын мысаллар ушын колланыұ.
3. Гармоникалық осциллятор хәққындағы элементар квантмеханикалық мәселе. Кристаллық пәнжерениң тербелислери энергияларының квантланыұы. Планк тарқалыұы.
4. Хәр қандай сингониялы кристаллардағы кристаллографиялық тегисликлер арасындағы қашықлықлар. Структуралық кристаллографияның тийкарғы теңлемелери.
5. Узынлығы 2 м хәм көлденең кесе-кесим майданы 2 см^2 болған темир стержень 10 кН күш пенен созылмақта. Созылған стерженнинң потенциал энергиясы хәм энергияның көлемлик тығызлығы табылсын.

48-вариант

1. Гук нызамы. Юнг модули. Серпимлилик модули тензоры.
2. Қатты денелердегі байланыс энергиясы. Металлардағы байланыс энергиясы.
3. Металлардағы еркін электронлар. Қатты денелердің зоналық структурасы.
4. Пирозэффекттің тәбияты. Пирозэффекттің жүзеге келіуінің зәрүрлі хәм жеткіліклі шәртлери. Электрострикция.
5. Узынлығы 2 м хәм көлденең кесе-кесім майданы 2 см^2 болған темир стержень 10 кН күш пенен созылмақта. Созылған стерженнің потенциал энергиясы хәм энергияның көлемлік тығызлығы табылсын.

49-вариант

1. Кристаллардың серпимлилик қәсийетлери. Деформация хәм механикалық кернеулер тензорлары, олардың қәсийетлери.
2. Қатты денелердегі байланыс энергиясы. Молекулалар аралық кристаллардың байланыс энергиясы.
3. Қатты денелердегі байланыс энергиясы. Ионлық хәм ковалентлік кристаллардағы байланыс энергиялары.
4. Кристаллардың структурасы хәм кристаллардағы рентген нурларының дифракциясы. Вульф-Брегг теңлемеси.
5. Қаттылықлары 1 кН/м хәм 3кН/м болған еки пружина параллел жалғанған. Усы системаның абсолют деформациясы 5 см болған халдағы потенциал энергиясы анықлансын.

50-вариант

1. Симметрия хәкқындағы түсиник. Симметрия элементлери. Кристаллардың трансляциялық симметриясы хәм Бриллюэн зоналары.
2. Жыллылық сыйымлығының квант теориясы. Эйнштейн хәм Дебай моделлери.
3. Диэлектриклердің электрлік қәсийетлери. Поляризация. Поляризация векторы.
4. Ярым өткізгішлердің зоналық структурасы. Ярым өткізгішлердегі меншиклик, электронлық хәм тесікшелік өткізгішлік.
5. Полат стержень созылғанда стержень материалындағы механикалық кернеу 300 МПа болған. Созылған стержень потенциал энергиясының көлемлік тығызлығы табылсын.

«Қатты денелер физикасы» пәни бойынша лекциялар дизими

1-санлы лекция. Кирису. Физикалық қәсийетлери бойынша, соның ишинде электр өткізгішликтің шамасы хәм характери бойынша қатты денелердің классификациясы. Қатты денелер физикасының кристаллография, ярым өткізгішлер физикасы менен байланысы. Қатты денелердің хәзирги заман илими менен техникасындағы әхмийети. Курстың предмети хәм мазмуны. Қатты денелердің анықламасы. Кристаллық хәм аморфлық қатты денелер. Кристаллографиялық пәренже. Пәнжерениң түйинлери хәм векторлары. Сингониялар, кристаллографиялық категориялар. Бравэ пәнжерелери. Бравэ пәнжерелеринің типлери бойынша кристалларды классификациялау. Элементар қутыша.

2-санлы лекция. Кристаллардың симметриясы. Симметрияның ноқатлық хәм кеңісликтеги топарлары. Симметриясының типлери бойынша кристаллардың классификациялары. Кристаллардың симметриясы менен олардың физикалық қәсийетлерин тәріплейтуғын тензорлардың симметриялары арасындағы байланыс.

3-санлы лекция. Кери пәнжерениң анықламасы. Кери пәнжерениң векторларының қасиеттери. Пәнжерениң тегисликтери хәм Миллер индекстери. Кристаллардағы рентген нурларының дифракциясы. Рентген нурларының шашырауының атомлық хәм структуралық факторлары.

4-санлы лекция. Кристаллардағы атомлар арасындағы байланыс күштериниң тәбияты. Ионлық байланыс: байланыс энергиясы, Маделунг турақлысы. Ийтерилис күштериниң тәбияты.

5-санлы лекция. Ковалентлик байланыс: алмасыў тәсирлесиўи, байланыслардың бағытланғанлығы хәм тойыныўшылығы. Ван-дер-Ваальс күштери хәм молекулалық байланыс. Металлық байланыс.

6-санлы лекция. Қатты денелер пәнжересиндеги атомлардың тербелислери. Бир хәм еки атомлы пәнжерелердиң тербелислери спектри. Акустикалық хәм оптикалық модалар. Дисперсиялық қатнастар. Бриллюэн зоналары. Үш өлшемли жағдай ушын улыўмаластырыў. Цикллық шегаралық шәртлер хәм толқын векторының руксат етилген мәнислери. Ҳаллар тығызлығы.

7-санлы лекция. Гармоникалық жақынласыўдағы кристаллық пәнжере динамикасының теңлемелери. Қатты денелердиң жыллылық сыйымлығының классикалық теориясы.

8-санлы лекция. Гармоникалық осциллятор ҳақындағы элементар квантмеханикалық мәселе. Кристаллық пәнжерениң тербелислериң энергияларының квантланыўы. Планк тарқалыўы. Жыллылық сыйымлығының квант теориясы. Дебай модели.

9-санлы лекция. Пәнжере атомларының тербелислериндеги ангармонизм. Жыллылық кеңейиўи. Фононлардың өз-ара тәсир етисиўи. Нормаль процесслер менен асырып өткизиў процесслери. Жыллылық өткизигишлик.

10-санлы лекция. Қатты денелердеги фазалық өтиўлер. Биринши хәм екинши әўлад фазалық өтиўлери. Екинши әўлад фазалық өтиўлериндеги кристаллық пәнжере симметриясының өзгерислери.

11-санлы лекция. Кристаллардың серпимлилик қасиеттери. Деформация хәм механикалық кернеўлер тензорлары, олардың қасиеттери. Гук нызамы. Серпимлилик модули тензоры.

12-санлы лекция. Қатты денелердиң зоналық структурасы. Электронлардың жалысқақлығы, Фермидиң кинетикалық энергиясы. Ферми қәдди. Электронлардың эффективлик массасы, ҳаллардың тығызлығы. Зоналардың толтырылыўы. Ферми тарқалыўы, Ферми температурасы. Дәўирли өзгеретуғын майдандағы электронлар. Бриллюэнниң еки өлшемли зонасы, Бриллюэнниң үш өлшемли зонасы хәм Ферми бети. Зоналардың толтырылыўы.

13-санлы лекция. Сегнето-, пиро- хәм пьезоэлектрлердиң физикалық қасиеттери. Пироэффекттиң жүзеге келиўиниң зәрүрли хәм жеткиликли шәртлери. Электрострикция.

14-санлы лекция. Кристаллардағы микро - и макроскопиялық электр майданлары. Локаллық майдан. Қатты денелердиң поляризациясының механизмлери. Диэлектриклик синиргишлик.

15-санлы лекция. Қатты денелердиң магнитлик қасиеттери. Алмасыў хәм релятивистлик тәсир етисиўлер. парамагнетиклер, диамагнетиклер, ферромагнетиклер, антиферромагнетиклер, ферромагнетиклер. Кюри нызамы. Неель ноқаты. Магнитлик тәртиплеспеген кристаллардың энергиясы. Магнитлик резонанс.

Кристаллық пәнжере

Кристаллық қатты денелердиң ең баслы өзгешелиги оларды пайда етиўши атомлардың ямаса молекулалардың кеңисликтеги дәўирли түрде жайласыўы болып табылады. Сол атомлар менен молекулалар кеңисликлик үш өлшемли кристаллық

пәнжерени пайда етеди. Кристаллардың дурыс геометриялық формаларға ийе болыуы атомлардың дәуірлі жайласуларына байланысly. Кристаллық пәнжерередеги атомлардың анизотропиялық жайласулары қатты денелердің техникада кең түрде қолланылатуғын көп сандағы анизотропиялық қасиетлериниң пайда болыуын тәмийинлейди. Кристаллардың жыллылық қасиетлери оның кристаллық пәнжересиниң тербелислерин таллаудан келип шығады. Электронлардың кристаллық пәнжерениң дәуірлі потенциалындағы қозғалысларын қарау кристаллардың электрлик қасиетлерин түсиндиреди. Кристаллық пәнжерениң ишинде қозғалатуғын бөлекшелердің де, сырттан келип түсетуғын бөлекшелердің де (электронлардың, нейтронлардың, фотонлардың) дифракциясы бақланады. Кристалларда қозғалатуғын электронлардың дифракциясының жәрдемінде кристаллардағы электронлардың энергиялық қадилериниң жайласуларының өзгешеликлери анықланады. Кристаллық пәнжерередеги электронлардың, фотонлардың, нейтронлардың дифракциялары қатты денелердің қурылысын изертлеудің ең көп информацияға ийе усыллары болып табылады. Бузықлықлар, яғный кристаллық пәнжерениң дефектлери болса қатты денелердің барлық қасиетлерине жүдә күшли тәсир етеди.

Биз төменде кристаллық пәнжере түсинигиниң жәрдемінде кристалларды тәриплеудің усылларын, кристаллардың пайда болыуының физикалық себеплерин хәм бөлекшелердің кристаллардағы дифракциясының өзгешеликлерин қарап шығамыз. Буннан кейинги лекцияларда қарап шығылатуғын қатты денелердің хәр қыйлы қасиетлери усы лекциялардағы түсиниклер менен концепцияларға тийкарланады.

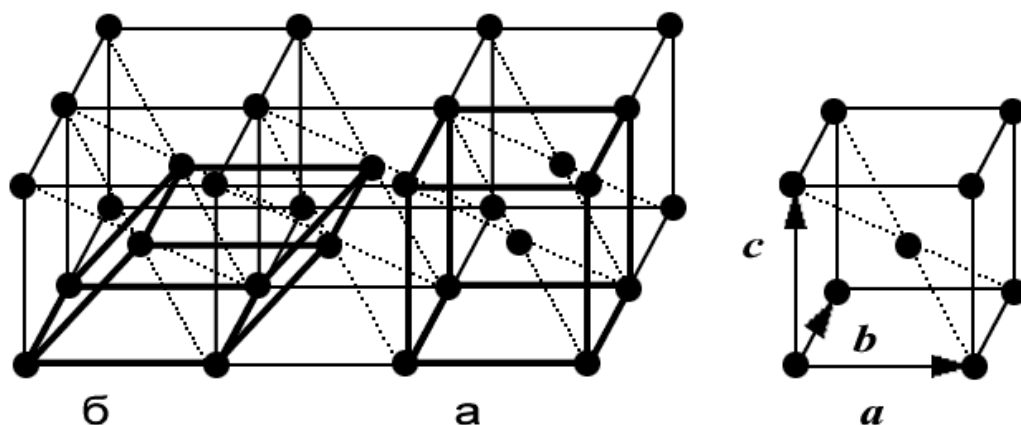
1.1. Кристаллардың қурылысын тәриплеу

Кристалды кеңисликте дәуірлі түрде қайталанатуғын бирдей структуралық бирлик болған кристалдың элементар қутышаларынан турады деп көз алдымызға келтириуимиз мүмкин. Элементар қутыша бир ямаса бир неше атомнан турыуы мүмкин.

Элементар қутыша улыума жағдайда қыя мүйешли паралелопипед формасына ийе болады. Бул қутышада жайласқан барлық атомларды кристалдың элементар қутышасының базиси деп атау қабыл етилген. Элементар қутышаның хәм базистің қурылысының нызамлықлары кристалдың көплеген қасиетлерин анықлайды. Мысалы қутышаның симметриялық дәрежеси кристалдың көплеген қасиетлерин, соның ишинде электрлик, магнитлик хәм механикалық қасиетлерин анықлайды. Элементар қутыша өз ишине бир ямаса бир неше атомды алыуы мүмкин. Темир, хром, мыс, гүмис сыяклы көпилик металларда элементар қутыша тек бир атомнан турады. Кристал бир неше химиялық элементлерден туратуғын болса элементар қутыша кемінде еки атомнан турады. Бундай кристалларға мысал ретінде хлорлы нартийди келтире аламыз. Гейпара кристаллардың элементар қутышаларында бир бирине илинискен молекулалық топарлар бар болады (муз кристаллар, көплеген магнитлик материаллардың кристаллары). Белоклардың элементар қутышалары болса өз ишине бир неше мың атомларды алады.

Элементар қутышаны сайлап алыу. Қөлеген кристалдың қурылысын тәриплеу ушын оның элементар қутышасын сайлап алыу керек болады. Бир кристалдың элементар қутышасын көп санлы усыллар менен сайлап алыудың мүмкин екенлиги өз-өзинен түсиникли. (1.1-сүүрет). Элементар қутышаны сайлап алғанда қутышаның формасының әпиұайылығына, туұры мүйешлердің мүмкин болғанынша көп болыуына хәм оның көлеминиң минимумға ийе болыуына тырысады. Ең киши көлемге ийе болған элементар қутышаны әпиұайы элементар қутыша (примитивная элементарная ячейка) деп атайды. Бирақ көпилик жағдайдарда элементар қутышаны көлемин үлкенлеу, сонлықтан оның ишинде бир неше атом болатуғын, бирақ оның формасын әпиұайы етип сайлап алады. Бундай элементар қутышаларда базисті бир неше атом қурайды. 1.1-сүүретте α -темирдің кристаллық пәнжереси келтирилген. Бул қурылысты кублар менен толтырылған кеңислик

түрінде сүзретлеген қолайлы. Кублардың мүйешлерінде (1) хәм орайында (2) темир атомлары жайласқан болады. Тап усындай, соның менен көп тарқалған пәнжерени көлемде орайласқан кублық (КОК) пәнжере деп атау қабыл етилген. Элементар қутышаны квадрат ултанға ийе қыя мүйешли параллелопипед (б) түрінде қабыл етиуге болады. Бирак элементар қутыша ретінде көлеми 2 есе үлкен хәм мүйешлериниң барлығы да туұры мүйешли болған (а) қутышаны сайлап алған қолайлы. Бундай элементар катыша атомлардың жайласуларындағы симметрияны жақсырақ сәулелендиреди хәм оны математикалық жақтан таллау үшін қолайлы.



1.1-сүзрет. Көлемде орайласқан элементар қутышаны сайлап алыу.

Сайлап алынған элементар қутышаны оның қабырғаларына сәйкес келиуши хәм бир ноқатта кесилесетуғын үш a , b , c трансляциялары менен тәриплейди. $r' = r + n_1 a + n_2 b + n_3 c$ қатнасы менен байланысқан (n_1, n_2, n_3 лер пүтин санлар) радиус-векторлары r' хәм r болған еки ноқат кристалдың хәр қыйлы элементар қутышалардағы базистиң бир ноқатын тәриплейди. Бундай жағдайда базистиң атомларының жайласуларын бир элементар қутышаның шеклерінде тәриплеген қолайлы болады. Ал кристалдың барлық қурылысы усы қутышаны «тиражлау» менен әмелге асырылады. «Тиражлау» ушын қутышаны трансляция векторлары деп аталатуғын $T = n_1 a + n_2 b + n_3 c$ векторы шамаларына жылыстырып шығыу керек болады. Солай етип кристалдың қурылысын толық тәриплеу ушын төмендегилерди беріу керек екен:

- 1) берілген ноқатты барлық T векторларына параллель көширіу жолы менен алынған кеңисликлик пәнжере,
- 2) базис.

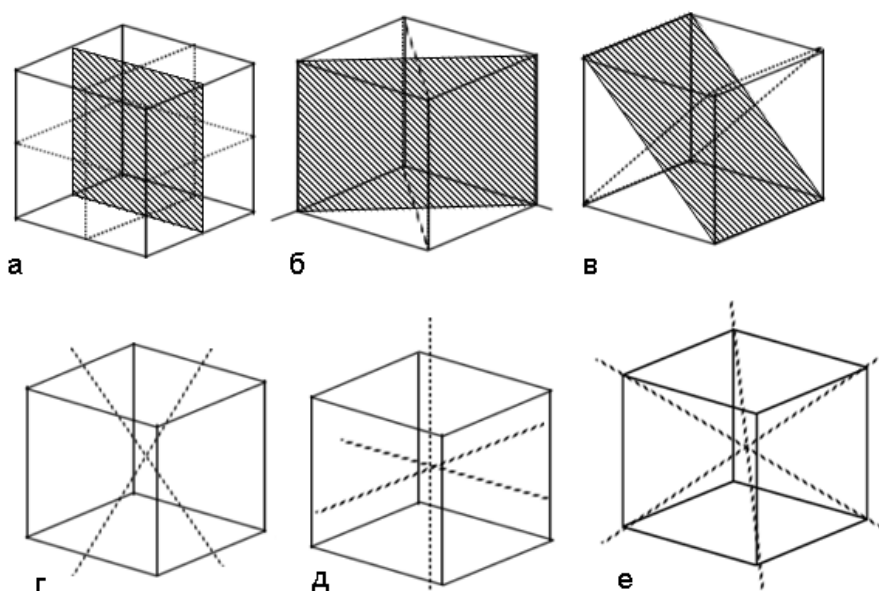
Кеңисликлик пәнжерени әдетте a , b , c векторлары жәрдемінде характерлейди. Буның ушын усы векторлардың узынлығы a , b , c шамаларын хәм олар арасындағы мүйешлер α , β , γ ларды беріу керек. a , b , c шамаларын кристаллық пәнжерениң дәуирлери деп атайды. Бул параметрлер затлардың қурылысы (структурасы) бойынша справочниклерде бериледи.

Базисти $r_i = x_i a + y_i b + z_i c$ радиус-векторларының жәрдемінде бир қутышада беріу арқалы аныклау қабыл етилген. x_i, y_i, z_i санлары атомлардың қайсы орынларда жайласқанлығын a , b , c векторлары үлеслерине сәйкес береді.

Базистеги атомлар санын қутышаның қаптал бетлери менен кесілген кеңисликтеги атомлардың санын есаплау менен әмелге асырылады. Элементар қутышаның ишиндеги атомлар санына қаптал бетлер тәрәпинен кесілген ярым, төрттен бир, сегизден бир атомлардың санлары қосылады. 1.1 (б) сүзретте келтирилген қутышада төбелерде жайласқан мүйешлик сегизден бирлик 8 атом жайласқан. усыған байланыссы бундай

базис координаталары 000 болған 1 атомнан тұрады деп есаплайды. Кристаллографияда атомлардың координаталарын әдеттегі () түріндегі қаўсырмаға алмайды. Себеби бундай қаўсырма жәрдеминде кристаллографиялық тегисликлер белгиленеди. КОК пәнжереде (1.1 (а) сүўретке қараңыз) кутышаның ишинде 1 атом хәм кутышаның төбелеринде сегизден бирлик 8 атом бар: бир атом 0,0,0 аўхалын, ал екінши атом $\frac{1}{2}$, $\frac{1}{2}$, $\frac{1}{2}$ аўхалын ийелейди.

Кристаллық пәнжерелердің симметриясы. Көпшилик затлардың кристаллық пәнжерелери бир неше симметрия элементлерине ийе болады. Симметрия элементлери менен симметриялық операциялар байланысқан. Симметриялық операциялар орынланғанда кеңисликлик пәнжере өзиниң дәслепки аўхалына қайтып келеди. $2\pi/2$, $2\pi/3$, $2\pi/4$, $2\pi/6$ мүйешлерине буратуғын көшерлер (бундай көшерлерди екінши, үшінши, төртінши хәм алтыншы тәртіпли симметрия көшерлери деп атайды) симметрия элементлери болып табылады. 1.1 (а) хәм 1.2-сүўретлерде келтирилген пәнжерелер көп симметрия көшерлерине ийе (мысалы төртінши, үшінши, екінши тәртіпли симметрия көшерлери). Басқа түрдеги симметрия элементлери қатарына симметрия тегислигин (бундай тегисликти айналық шашыратыў тегислиги деп те атайды) хәм симметрия орайын (бундай ноқатты инверсия орайы деп те атайды) киргизиўге болады.



1.2-сүўрет.

Кубтың базы бир симметрия элементлери: а) кубтың қабырғаларына перпендикуляр болған үш дана симметрия тегислиги; б, в) кубтың қапталларының диагонаалларына перпендикуляр болған 4 симметрия тегислиги (бундай тегисликлердің саны 6), г) кубтың қаптал диагонаалларына параллель болған 2-тәртіпли алты симметрия көшериниң екеўи (бул көшерлер қарама қарсы қабырғалардың орталары арқалы өтеди), д) кубтың қаптал бетлерине перпендикуляр хәм олардың орайлары арқалы өтиўши 4-тәртіпли симметрия көшериниң үшеўи, е) кубтың диагонаалларына параллель хәм оның төбелери арқалы өтиўши төрт дана 3-тәртіпли симметрия көшери.

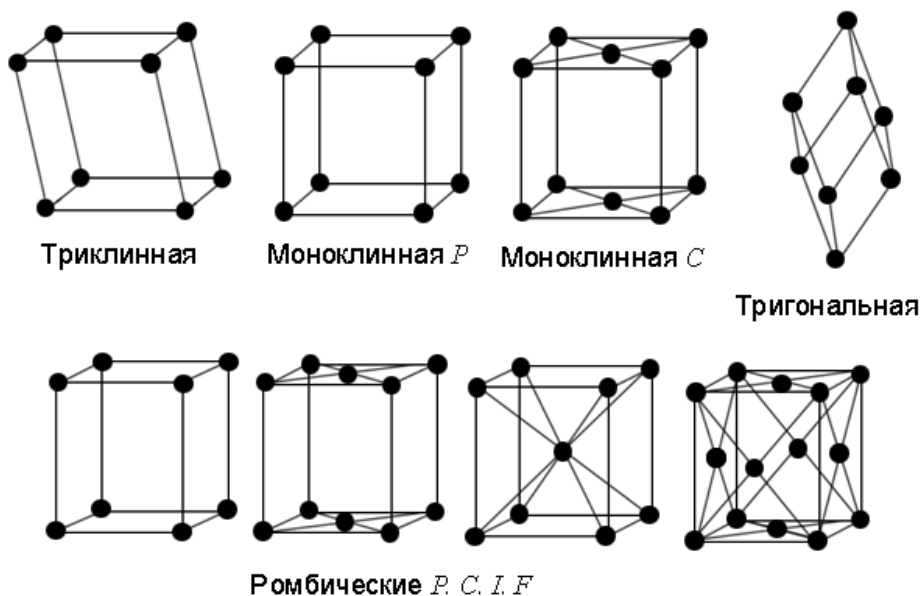
1.2-сүўреттеги кублық пәнжере қаптал бетлерине параллель болған үш симметрия тегислигине, қаптал бетлердің диагонаалларына перпендикуляр болған алты дана диагонааллық симметрия тегислигине, үш төртінши тәртіпли симметрия көшерине, алты дана екінши тәртіпли симметрия көшерине, төрт дана үшінши тәртіпли симметрия көшерине хәм кубтың орайында жайласқан симметрия орайына ийе. Кристаллық

пәнжерениң симметрия операцияларының мүмкин болған жыйнағын тәриплейтуғын математикалық топарлар теориясы (теория групп) бар.

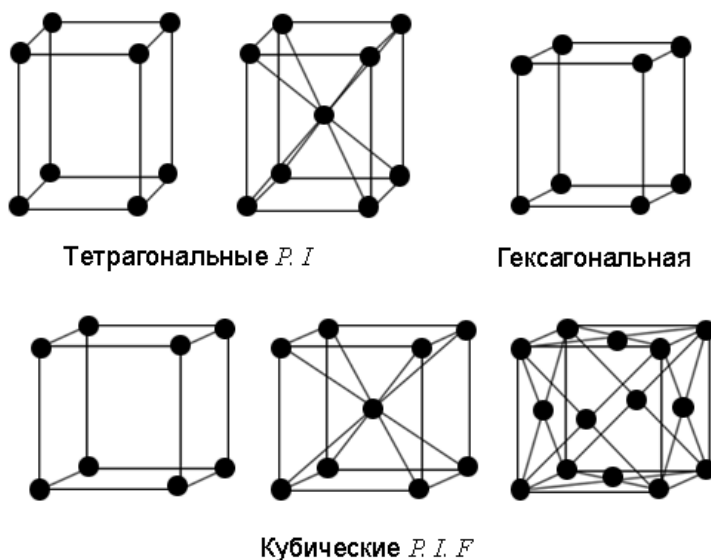
Кристаллық пәнжерелердин типлери. Топарлар теориясы жәрдемінде кристаллардың барлығын 14 дана кристаллық пәнжерениң жәрдемінде тәриплеудің мүмкин екенлигин көрсетти. Бундай пәнжерелерди Бравэ пәнжерелери деп атаймыз хәм олардың сүўретлери 1.3-сүўретте келтирилген. Оларды элементар кутышаларының түри бойынша айрылатуғын жети системаға бөлиў қабыл етилген:

триклинлик,
моноклинлик,
ромбалық,
тетрагоналлық,
тригоналлық,
гексагоналлық,
кублық.

Хәр бир система a, b, c хәм α, β, γ шамалары арасындағы белгили бир қатнас пенен айрылады (1-кестеде келтирилген). Бул пәнжерелердин айырымлары хәр қандай түрге ийе: примитивлик (эпиўайы) -P, көлемде орайласқан (КО) - I, қапталда орайласқан (ҚО) – F хәм бир бирине қарама-қарсы болған бир қапталы орайласқан – C.



1.3а сүўрет.
Бравэ пәнжерелери.



1.36 сүүрет.

Бравэ пәнжерелери.

1. Триклиник системада барлық мүйешлер де, барлық тәрептердің ұзындықтары да бір бирине тең емес. Бундай пәнжере элементар қутышаның орайында симметрия орайына ийе болыуы мүмкін.

2. Моноклинлик системада қутыша хәр қыйлы ұзындықтағы қабырғаларға ийе туұры призма түрінде болады. Қутыша туұры призманың ұлтанларында орайласқан болыуы мүмкін. Сонлықтан моноклинлик C пәнжере менен P пәнжере бар. Усындай пәнжереге симметрия элементлери қосылады: туұры призманың ұлтанына параллель симметрия тегислиги хәм ұлтанның орайы арқалы өтиуши 2-тәртіпли симметрия көшери.

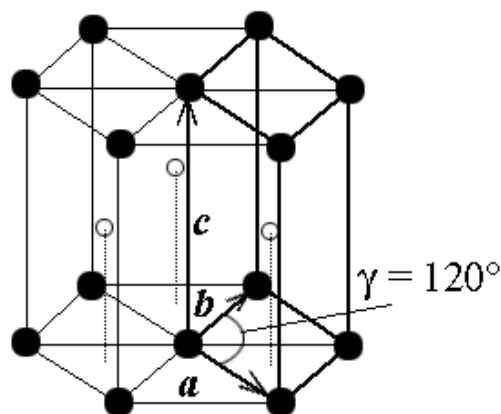
3. Ромбалық системада элементар қутыша туұры мүйешли хәм хәр қандай ұзындықтағы қабырғаларға ийе. Қутыша кристаллық пәнжерениң барлық 4 түрлерине ийе: P, I, F, A (B ямаса C). Бундай пәнжерде симметрия элементлериниң саны көп: қапталларға параллель болған үш симметрия тегислиги, бирдей болған қарама-қарсы қапталлардың орайы арқалы өтиуши үш 2-тәртіпли симметрия көшери.

4. Тетрагоналлық системада қутыша ұлтаны квадрат болған туұры мүйешли параллелепипед түріне ийе. Қутыша примитивлик (эпиұайы) P ямаса көлемде орайласқан I болыуы мүмкін. Ромбалық системаға кириуши қутыша менен салыстырғанда тетрагоналлық системада бир дана төртінши тәртіпли симметрия көшери хәм басқа да бир неше симметрия тегисликлери бар.

5. Кублық системада қутыша куб түріне ийе. Қутышаның қаптал бетлери орайласқан (қапталдан орайласқан куб ямаса ҚОК), қутышаның орайы орайласқан (көлемде орайласқан куб ямаса КОК) ямаса пүткиллей орайласпаған болыуы мүмкін (примитвлик ямаса P -пәнжере). Бул ең жоқары симметрияға ийе пәнжере болып табылады. Оның симметрия элементлерин биз жоқарыда көрдик (1.2-сүүрет).

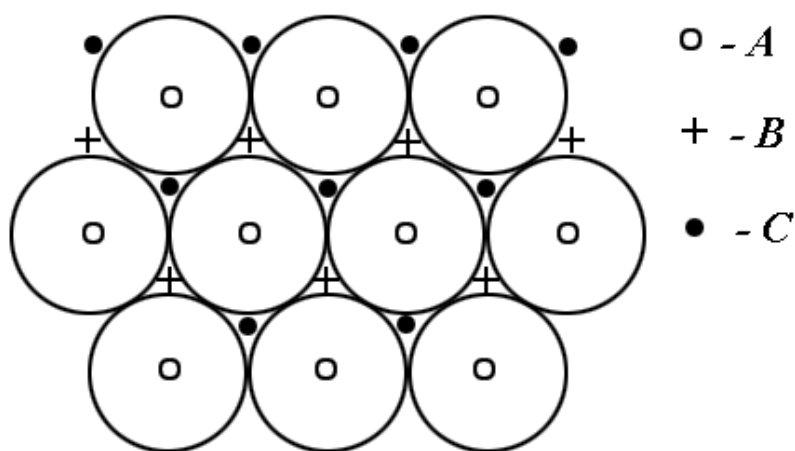
6. Гексагоналлық системада қутыша туұры призма формасына ийе. Оның ұлтаны ромб болып табылады хәм ромбадағы мүйеш 60 градусқа тең. Көбинесе элементар қутышадан үш есе үлкен қутышаны пайдаланады (1.4-сүүретте көрсетилген). Бундай қутыша дурыс алты мүйешлик призма формасына ийе хәм бундай призмадағы алтыншы тәртіпли симметрия көшери анық көринип турады.

7. Тригоналлық системада қутышаны ромбоэдр формасында көрсетиу қабыл етилген. Оның барлық қабырғаларының ұзындықтары бирдей. Оның төбесиндеги мүйешлердің мәниси 90 градусқа тең емес. КОК хәм ҚОК пәнжерелерде көлеми сайлап алынған кублық қутышадан 2 хәм 4 есе киши болған тригоналлық қутышаларды сайлап алыу мүмкін (1.1-мәселеге қараңыз).



1.4a сүўрет.

Гексагоналлық пәнжерениң элементар қутышалары.



1.4б сүўрет.

Тығыз жайластырылған қурылыстардағы (структуралардағы) атомлардың өз-ара жайласуы вариантлары.

Пәнжерелердің басқа барлық түрлері (типтері) a, b, c векторларын сайлап алыу жолы менен жоқарыда келтирилген типлердің біреуіне алып келинеді.

Пәнжерениң симметриясы физикалық қасиеттердің анизотропиясын анықлайды (хәр қыйлы бағытлар бойынша физикалық шамалардың хәр қыйлы болыуы). Базы бир физикалық қасиеттердің анизотропиясын элементар қутышаның түрі бойынша болжауға болады. Мысалы салыстырмалы аз сандағы симметрия элементтерине ийе ромбалық, моноклинлик хәм триклинлик пәнжерелер ушын көп характеристикалардың анизотропиясы белгили (мысалы салыстырмалы электр сиңиргишлик, жыллылық өткізгишлик коэффициенті хәм басқалар). Затлардың бундай характеристикаларын әдетте екінші тәртіпті тензорлардың жәрдеминде тәріплейди. Симметриялы кублық пәнжеререде бул шамалар скаляр шамаларға айланады. Тетрагоналлық хәм гексагоналлық пәнжере жағдайларында кристалдың қасиеттері с көшерине перпендикуляр болған қабырғаға перпендикуляр болған тегисликлерде бирдей болады.

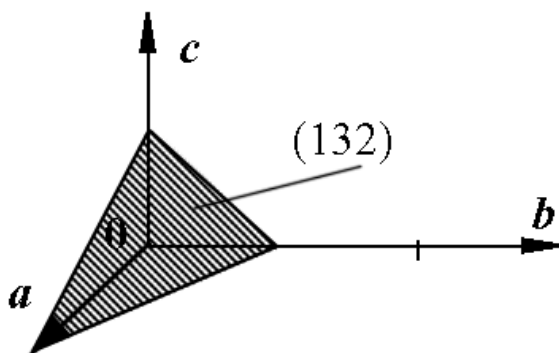
Вигнер-Зейц қутышасы. Вигнер-Зейц қутышасы деп аталатуғын элементар қутышаны сайлап алыудың усылы бар. Бул қутышаны келеси лекцияларда кристалдағы бөлекшелердің қозғалыстарын таллау ушын қолланамыз. Қутышаны сайлап алыу ушын кристаллық пәнжерениң берилген түйинине «ең жақын жайласқан» кеңісликтің областын айырып алады. Буның ушын сайлап алынған түйинди қонысылас түйин менен тутастырады хәм алынған сызықтың дәл ортасынан усы сызыққа перпендикуляр тегислик жүргізеді. Бул тегислик кеңісликти еки кеңісликке бөледі. Берилген түйинге ийе

кеңісликті айырып алады. Барлық айырып алынған ярым кеңісликтердің кесилмелері Вигнер-Зейц қутышасын береді. Эпиұайы кублық, тетрагоналық хәм ромбалық пәнжерелер ушын Вигнер-Зейц қутышасының формасы хәм өлшемлері бойынша орайы пәнжерениң түйинине сәйкес келиуши элементар қутышаға сәйкес келеді. КОК хәм ҚОК пәнжерелерінде Вигнер-Зейц қутышасы қурамалырақ формаға ийе.

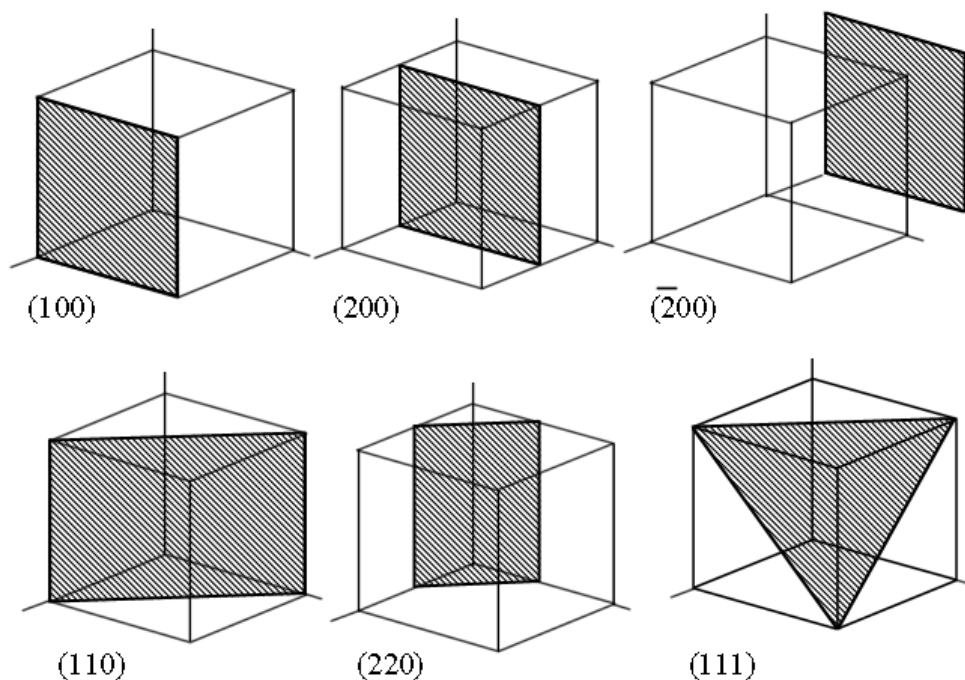
Кристаллық пәнжередегі бағыт. Кристаллық пәнжередегі бағытты a, b, c базислик векторындағы бағытлаушы вектордың координаталары менен береді. Бул координаталарды әдетте квадрат қаўсырмаларға алып жазады. Координатаның мәнісі теріс болғандағы минус белгисін санның үстине минус белгисін қойыу менен әмелге асырады. Ең әхмийетлирек болған бағытлар пүтин санлар менен бериледи. 1.2-сүўреттегі $[100]$ бағыты кубтың қабырғасына параллель. $[100]$ хәм $[110]$ бағытлары оның төменги ултанына параллель. Базы бир бағытлар пәнжерениң симметриялығына байланысly бирдей (мысалы кублық пәнжереде $[110]$, $[101]$, $[011]$ хәм $[110]$ бағытлары). Бағытлардың усындай семействосын тәриплеу ушын $\langle 110 \rangle$ белгилеуи қабыл етилген.

Кристаллографиялық тегисликлер. Кристалда кристаллық пәнжерениң түйинлері арқалы өтетуғын кристаллографиялық тегисликлер үлкен әхмийетке ийе болады. Кристаллық пәнжерениң түйинлериниң ең көпшилиги жайласқан кристаллографиялық тегисликлер кристаллардың қапталларын болжағанда да, усы тегисликлер бойынша бөлекшелердің қозғалысларын қарағанда да жүдә үлкен әхмийетке ийе.

Кристаллографиялық тегисликлерди Миллер индексleri менен белгилеу қабыл етилген. Бундай индексler үш саннан ибарат хәм эпиұайы қаўсырмаға алып жазылады: (hkl) . Кери индекстин теріс белгисін жоқарысына жазады. Бундай индексler эпиұайы геометриялық мағанаға ийе. Егер a, b, c векторлары жәрдемінде берилген үш координаталық көшери бойына сәйкес $\frac{a}{h}, \frac{b}{k}, \frac{c}{l}$ шамасындағы кесиндилерди жүргизсе (1.5-сүўретте қараңыз), онда алынатуғын үш нокат усы нокатлар арқалы өтетуғын (hkl) тегисликleri бир мәнисли анықлайды. 1.6-сүўретте (100) , (200) , (110) , (110) , (111) тегисликleri көрсетилген. 1.5-сүўреттегі тегисликке параллель етип кристаллық пәнжере түйинleri арқалы өтиуши хәм бир биринен na/h , nb/k , nc/l қашықлығында турған (n арқалы пүтин сан белгиленген) көп сандағы тегисликлерди сайлап алыу мүмкин екенлигин аңғарыуға болады. Сондай тегисликлер арасындағы қашықлықты d_{hkl} арқалы белгилейди хәм (hkl) тегисликлер семействосы ушын тегисликлер арасындағы қашықлық деп атайды. d_{hkl} шамасын (000) нокатынан оған ең жақын болған (hkl) тегислигине шекемги аралық түрінде есаплау қолайлы. (1.5-сүўретте көрсетилген). Кублық қутышадағы ийе кристалларда Миллер индексleriниң мәнисleri усы тегисликлерге түсирилген нормалдың бағытындағы вектордың индексleriне сәйкес келеді. Бирақ басқа түрдегі элементар қутышалар жағдайында бундай сәйкеслик орын алмайды.



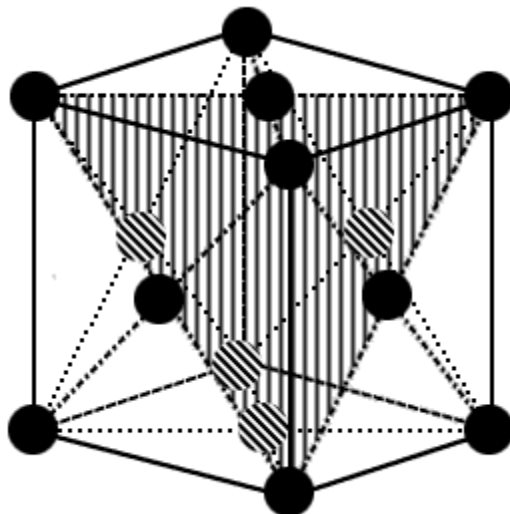
1.5-сүўрет.
Кристалдағы Миллер
индексiniң геометриялық мәниси.



1.6-сүрөт. Кублык пәнжерениң bazı бир кристаллографиялык тегисликлери.

Жийи ушырасатуғын структуралар менен танысамыз.

Қапталда орайласқан кублык пәнжере 1.7-сүрөтте келтирилген элементар қутышаға ийе болады. Түйинлер кубтың төбелеринде хәм қапталларының орайларында жайласқан. Қутышадағы түйинлердің саны 4 ке тең (8 дана сегизден бирге хәм 6 дана ярымға ийе). Хәр бир атомның $a/\sqrt{2}$ қашықлығында 12 қоңысыға ийе болатуғынлығы көринип тур. Көп металлар тап усындай пәнжереге ийе (темир, кобальт, мыс хәм басқалар) хәм олардың атомлары пәнжерениң түйинлеринде жайласқан.



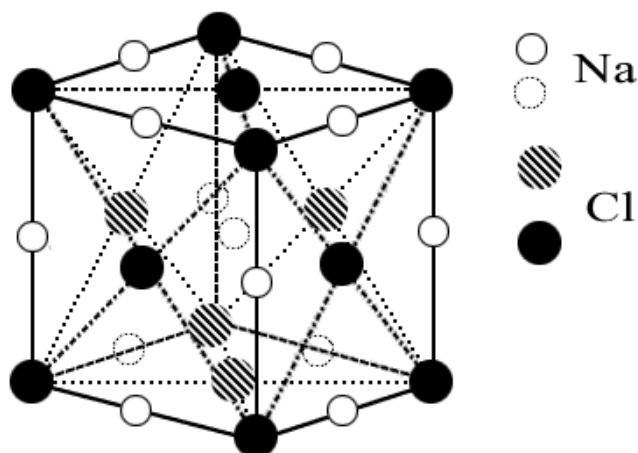
1.7-сүрөт.
ҚОК пәнжерениң
элементар қутышасы.

NaCl типиндеги қурылысты (1.8-сүрөт) ҚОК пәнжере түрінде көрсетиу мүмкин. Бундай пәнжерере натрий ионлары түйинлерге сәйкес келеди, ал хлор ионлары болса Na ионларына салыстырғанда кубтың көлемлик диагонали бойынша $a/2$ шамасына жылысқан. Бул жағдайда Бравэниң ҚОК пәнжересиниң базисин еки атом (еки ион) курайды: координаталары 0,0,0 болған натрий хәм координаталары $\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$. Бирақ көпшилик жағдайдарда элементар қутыша ретинде 8 атомнан ибарат куб қабыл етиледі. Олардың төртиуі натрий хәм төртеуі хлор. Олар төмендегидей координаталарға ийе:

Na: $0\ 0\ 0; \frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\ 0; \frac{1}{2}\ 0\ \frac{1}{2}; 0\ \frac{1}{2}\ \frac{1}{2};$

Cl: $0\ 0\ \frac{1}{2}; 0\ \frac{1}{2}\ 0; \frac{1}{2}\ 0\ 0; \frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\ \frac{1}{2}.$

Тап ұсындай қурылысқа (структураға) көп кристаллар ийе (KCl, KBr, PbS, MgO хәм басқалар). Олар бир биринен тек a шамаларының мәниси бойынша ғана парықланады.



1.8-сүўрет.
NaCl кристаллар пәнжересиниң
элементар қутышасы

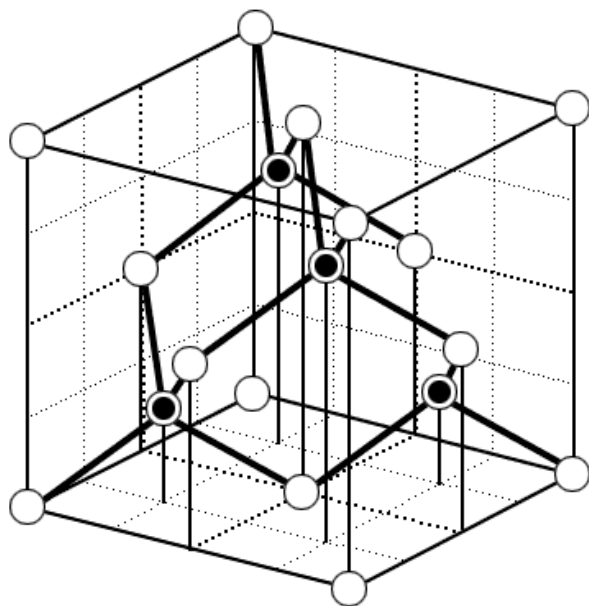
Алмаздың структурасы (1.9-сүўрет) ҚОК пәнжере сыпатында көрсетиўге болады. Бул жағдайда пәнжерени атомлары түйинлерде хәм көлемлик диагональ бойынша оларға салыстырғанда кеңисликлик диагональдың $\frac{1}{4}$ бөлегине жылыстырылған еки пәнжерениң қосындысы түринде көз алдыға елеслетемиз. Бундай ҚОК пәнжерениң базисин еки атом қурайды. Олардың координаталары $0,0,0$ хәм $\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4}$. Көпшилик жағдайдарда алмаздың элементар қутышасы ретинде базиси 8 атомға ийе кубты қабыл етеди. Олардың координаталары төмендегилерден ибарат:

Аўыспаған ҚОК пәнжерениң төрт атомы ушын:

$0\ 0\ 0; 0\ \frac{1}{2}\ \frac{1}{2}; \frac{1}{2}\ 0\ \frac{1}{2}; \frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\ 0$

Аўысқан ҚОК пәнжерениң төрт атомы ушын:

$\frac{1}{4}\ \frac{1}{4}\ \frac{1}{4}; \frac{1}{4}\ \frac{3}{4}\ \frac{3}{4}; \frac{3}{4}\ \frac{1}{4}\ \frac{3}{4}; \frac{3}{4}\ \frac{3}{4}\ \frac{1}{4}.$



1.9-сүўрет.
Алмаздың (ақ шариклер де, қара шариклер
де углерод атомлары) хәм цинк
сульфидиниң (қара шариклер күкирт
атомлары, ақ шариклер цинк атомлары)
элементар қутышасы.

Хәр бир углерод атомының кеңисликлик диаметрдің $\frac{1}{4}$ шамасына тендей қашықлықта жайласқан төрт ең жақын атом менен қоңсылас екенлигин көрсетиўге болады. Басқа сөз бенен айтқанда хәр бир углерод атомы тетраэдрдің орайында жайласқан болып, сол

тетраэдрдің төбелерінде де углерод атомлары орналасқан. Хәр бир атом өз қоңысылары менен ковалентли байлансқан хәм бир бири менен теңдей мүйешлерди пайда етеди (келеси бөлімди қараңыз). Углеродтан басқа тап усындай қурылысқа төрт валентли ярым өткізгішлер кремний менен германий ийе.

Цинк сульфиди типіндегі қурылысты алыу үшін жоқарыда келтірілген алмаздың қурылысынан пайдаланыу керек. Бул жерде цинк атомларын «ауыспаған пәнжереге», ал күкірт атомларын «ауысқан пәнжереге» орналастыруу керек болады. Бундай қурылыста бир сорттағы атомның хәр бири тетраэдрлердің төбелерінде жайласқан екінші сорттағы төрт қоңысыға ийе. Олар бир бири менен ковалентли байланысқа ийе. Бул байланыс бир бири менен теңдей мүйешлерди пайда етеди.

Гексагоналлық структура (қурылыс) 1.4-сұүретте келтірілген. Үш элементар қуышаның сұүретін пайдаланған қолайлы. Бундай жағдайда қурылыс қатламлардан туратуғын хәррениң уясын көз алдына елеслетеди. Көплеген затлар тап усындай қурылысқа ийе. Бундай жағдайда атомлар топары кеңіслікте дурыс алты мүйешліклерди пайда етеди. Бундай қурылыстың хәр қыйлы түрлери жийи ушырасады. Бундай қурылысты әдетте тығыз жайластырылған гексагоналлық (ТЖГ) қурылыс деп атайды хәм оны қатламлар менен сәулендириу мүмкін (1.4 б сұүрет): бирінші қатлам (А) – төмендегі тегісликтің түйінлерінде жайласқан атомлар – шарлар. Екінші қатламның атомлары (В) төменгі қатламдағы атомлардың арасындағы «ойықларда» төменгі қатламның атомлары менен тийісип жайласқан. Ал үшінші қатламдағы атомлар болса 1.4-сұүретте көрсетілгендей бирінші қатламдағы атомлардың дәл үстінде ямаса екінші қатламдағы атомлар арасындағы «ойықларда» жайласады. Нәтийжеде c векторының бағытында c дәуирине ийе қатламлардың жайласуларының дәуірлігі пайда болады. Бундай дәуірлі қурылысты былайынша жазамыз: $ABABAB \dots$ Усының салдарынан шарлардың тығыз жайластырылған қурылысы пайда болып, бунда хәр бир шар 12 жақын жайласқан қоңысыға ийе болады. Қоңысылар арасындағы қашықтық шарлардың еки радиусына тең. Бундай қурылыста $\frac{c}{a}$ қатнасының $\frac{c}{a} = 8/3^{1/2} = 1,633$ шамасын тең екенлігіне аңсат көз жеткеріуе болады. Көп металлар тап усындай қурылысқа ийе (тек ғана $\frac{c}{a}$ қатнасының мәнісі сәл басқашалау). Мысалы кобальтта $\frac{c}{a} = 1,622$, Магнийде $\frac{c}{a} = 1,623$, ал титанда $\frac{c}{a} = 1,586$.

Шарларды жайластыруудың және бир усылының бар екенлігін аңғарыуымыз керек: дәслепки еки қатлам жоқарыдағыдай болып жайластырылады, ал үшінші қатламдағы (бул қатламды С арқалы белгілейміз) атомлар 1.4-сұүретте атанақлар менен белгіленген орында жайласады. Төртінші қатлам бирінші қатламның үстінде, бесінші қатлам екінші қатламның үстінде, қалғанлары тап сондай тәртіпте жайластырылады. Бундай жағдайда c векторының бағытында $3c/2$ дәуирине ийе қатламлардың $ABCABCABC \dots$ избе-излігіндегі жайластырыулары жүзеге келеди. Бундай жағдайда да жақын қоңсы атомлардың саны 12 ге тең болады. Бундай қурылыстың қапталдан орайласқан кублық (ҚОК) қурылысқа сәйкес келетуғынлығын көрсетіуе болады (1.7-сұүрет). Бундай кублық қурылыста $[111]$ бағыты c векторы менен бағытлас (1.4-сұүрет).

Жоқарыда баян етілген тығыз жайластырылған гексагоналлық хәм қапталда орайласқан кублық қурылыстардың бир бирине жүдә ұқсас екенлігін аңсат аңғарыу мүмкін. Олар бир биринен тек тығыз жайластырылған атомлардың избе-излігі менен парықланады. Сонлықтан олардың пайда болуу энергиясы дерлік бирдей болууы керек хәм көплеген металлар шараятлар азмаз өзгергенде ТЖГ хәм ҚОК пәнжерелерге ийе бола алады. Мысалы неодим, ZnS , $ZnSe$ кристаллары төменгі температураларда ҚОК пәнжереге, ал жоқары температураларда ТЖГ пәнжереге ийе.

Гейпара металлар менен куймалар жоқарыда келтірілген атомлар қатламларының избе-излігіндегі дефектлерге ийе болады (1.4-сұүретті қараңыз). Бундай жағдайда қатламлардың избе-излігі бузылады. Нәтийжеде ТЖГ хәм ҚОК пәнжерелер хакқында кескін түрде анық айтыу мүмкіншилигі болмай қалады.

Көплеген затлар хәр қыйлы шараятларда (мысалы температура, басым) хәр қыйлы кристаллық пәнжерелерге ийе болады. Мысалы темир өжире температураларында көлемде орайласқан кублық (КОК), 910-1400 °С температураларында ҚОК, ал оннан да жоқары температураларда қайтадан КОК қурылысқа ийе. Заттың бір бөлегінде еки түрлі пәнжерениң бир ұақытта болыуы мүмкин: олардың бири тең салмақлық, ал екіншиси метастабилли (метаорнықты) болып, метаорнықты пәнжере тең салмақлық пәнжереге өтип үлгермеген халда сақланып қалады. Бундай ситуация шынықтырыудан (бирден салқынлатыудан) кейинги полатларда (Fe-C қуймаларында) орын алады. Шынықтырыудың ақыбетінде ҚОК хәм КОК пәнжерелерге ийе областлардың қурамалы системасы пайда болады. Хәр қыйлы пәнжерелерге ийе областлардың формалары менен жайласыулары материалдың көплеген қасийетлерин анықлайды.

1-мәселе: КОК пәнжерениң примитивли элементар қутышасы ретінде $a = \frac{1}{2}; -\frac{1}{2}; \frac{1}{2}$; $b = -\frac{1}{2}; \frac{1}{2}; \frac{1}{2}$; $c = (\frac{1}{2}; \frac{1}{2}; -\frac{1}{2})$ векторларында қурылған тригоналлық қутышаны сайлап алыудың мүмкин екенлигин көрсетиңиз. Буның ушын оның қабырғаларының узынлықлары хәм қабырғалар арасындағы мүйешлерди есаплаңыз. Бул примитивлик қутышаның көлеминиң сәйкес КОК пәнжере қутышасының көлеминиң ярымына тең екенлигин көрсетиңиз.

Шешими: Координаталар көшерлериниң бағытларын кубтың қабырғаларының бағытында аламыз хәм көшерлер бойынша узынлық ретінде кубтың қабырғасының узынлығы a_c шамасын аламыз.

Бундай координаталар системасында вектордың узынлығын

$$|a| = a_c \sqrt{x^2 + y^2 + z^2} = a_c \sqrt{3/4}$$

формуласының жәрдемінде есаплаймыз. a хәм b векторлары арасындағы φ мүйешиниң косинусын

$$\cos(\varphi) = (\vec{b} \cdot \vec{a}) / (|a| \cdot |b|) = (-1/4) / (3/4) = -1/3; \quad \varphi \approx 110^\circ$$

формуласының жәрдемінде табамыз. Сайлап алынған элементар қутышаның көлемин төмендеги анықлаушының жәрдемінде есаплаймыз:

$$V_{a,b,c} = a^3 \begin{vmatrix} 1/2 & -1/2 & 1/2 \\ 1/2 & 1/2 & 1/2 \\ 1/2 & 1/2 & -1/2 \end{vmatrix} = a^3 1/2$$

Қутышаның көлеми еки атомға ийе КОК пәнжерениң элементар қутышасының көлеминиң ярымына тең. Сайлап алынған қутышаны примитивли деп атауға болады.

Аналитикалық геометрияның эпийайы формулаларын есаплаулар жүргизилип атырған координаталар системасы туұры мүйешли болғанда, ал оның ортлары бирдей узынлыққа ийе болғанда ғана пайдаланыу мүмкин. Мәселени шешіуде биз пайдаланған координаталар системасы тап усындай система болып табылады.

Тап сондай жоллар менен көлеми $a = \frac{1}{2}; \frac{1}{2}; 0$; $b = 0; \frac{1}{2}; \frac{1}{2}$; $c = (\frac{1}{2}; 0; \frac{1}{2})$ векторларында қурылған кублық қутышаның көлеминен 4 есе киши болған тригоналлық қутышаны қурыу мүмкин (8-сүүретти қараңыз).

2-мәселе. Алмаздың кристаллық пәнжересінде (9-сүүрет) координаталары $\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4}$ болған хәр бир атомның (қәлеген атомның екенлигин де көрсетиуге болады) төрт жақын жайласқан қоңысы атом менен қоршалғанлығын хәм сол атомлар менен болған ковалентлик байланыслардың бирдей мүйешлерди пайда ететуғынлығын көрсетиңиз.

Шешими. Сайлап алынған координаталары $\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4}$ болған атомның коңысыларының координаталарының $0\ 0\ 0; \frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\ 0; 0\ \frac{1}{2}\ \frac{1}{2}; \frac{1}{2}\ 0\ \frac{1}{2}$ екенлигін көрсетіуге болады (егер a, b, c векторларын ұзындығы a шамасына тең кубтың қабырғалары бойынша алсақ). Сайлап алынған атомнан ұсы атомларға шекемгі қашықтық аналитикалық геометрияның

$$\rho = a \sqrt{(x_2 - x_1)^2 + (y_2 - y_1)^2 + (z_2 - z_1)^2}$$

формуласының жәрдемінде есепланады хәм барлық жақын жайласқан коңысылар үшін $a \frac{\sqrt{3}}{4}$ шамасына тең болып шығады.

Ковалентлик байланыслар арасындағы мүйеш ϕ ди табыу үшін дәслеп басы сайлап алынған атомның орайында жайласқан, ал ұшы индекси i болған жақын коңысыларда болған b_i векторының координаталарын табамыз. Буннан кейин $\text{Cos}[\phi]$ шамасын

$$\text{Cos}[\phi] = b_i \cdot b_j / |b_i| \cdot |b_j|$$

формуласының жәрдемінде табамыз.

1.2. Кристаллардың пайда болыуының (өсиуінің) физикалық механизмдари

Хәзирги ўақытлары миллионлаған кристаллық затлар белгили. Олардың ишине салыстырмалы әпиўайы металлар хәм олардың қуымалары, жүдә курамалы курылысларға ийе кристаллар да киреди. Сол кристаллардың өзине тән қәсийетлери көп санлы атомлардың айрықша түрде жайласулары менен байланыслы. бирақ ұсы жағдайларға қарамастан бул кристаллардың барлығы да көп санлы емес, бирақ бир бирине салыстырғанда хәр қыйлы болып жайласқан атомлардан турады. Атомлар арасындағы электромагнитлик тәсирлесиўлер атомлардың бир бири менен байланысуын хәм кристаллық пәнжерелердің хәр қыйлы типлериниң пайда болыуын тәмийинлейди. Бул процессте зарядлардың тәсирлесиўиниң электростатикалық энергиясы тийкарғы орынды ийелейди. Айырым жағдайларда магнитлик тәсирлесиўдің де үлеси көринеди. Бирақ магнитлик тәсирлесиўдің үлеси электростатикалық тәсирлесиўдің үлесине салыстырғанда әдеўир киши болады. Жоқарыда атап өтилген тәсирлесиўлер атомлық электронлық қабықлар сыяқлы белгили бир симметрияға ийе болады. Сонлықтан атомлар да бир бири менен симметриялы болған курылысларды пайда етип кристаллық денелерди пайда етеди. Бундай симметриялық курылыслар ҳаққында жоқарыда гәп етилди. Тап ұсындай себеплерге байланыслы характеристикалары бойынша бир бирине жақын атомлар атомларының жайласуы бир бирине сәйкес келетуғын структураларды пайда етеди. Кристаллардың дүзилесиниң улыўмалық нызамлықларын биле отырып жаңа курылысларды болжаў, қолда бар кристаллық материаллардың физикалық хәм технологиялық қәсийетлерин жақсылаў мүмкин.

Хәзирги ўақытлары атомлардың бир бири менен байланысының характери бойынша кристалларды 5 типке айырады:

- 1) ионлық кристаллар,
- 2) ковалентлик кристаллар,
- 3) метал кристаллар,,
- 4) водородлық байланысқа ийе молекулалық кристаллар,
- 5) Ван-дер-Ваальс кристаллары.

Ван-дер-Ваальс кристалларынан басқаларының барлығы да тәбиятта хәм хәзирги заман техникасында әҳмийетли орынларды ийелейди.

Кристалларды жоқарыдағыдай тәртипте бөлиўдің қатаң түрдеги қағыйдасы жоқ. Себеби сондай типлердің арасындағы байланысқа ийе кристаллар да аз емес.

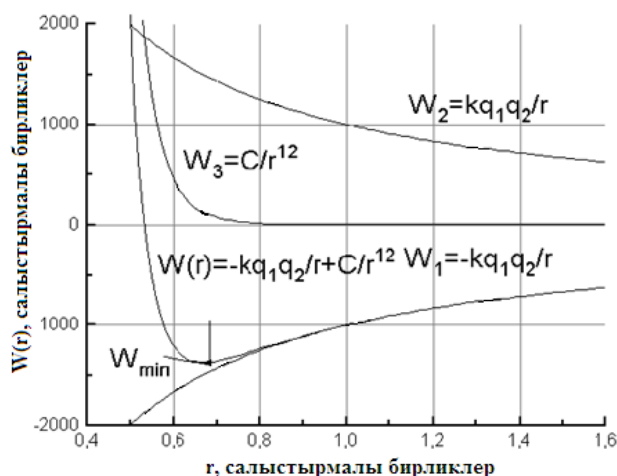
Байланыстың бір бөлеги ковалентлик, ал қалған бөлеги водородлық болған кристаллық затлар де бар. Енди кристалларды байланыстың типлери бойынша қарап шығамыз.

Ионлық кристаллар. Ионлық кристаллар бірдей беглиге ийе ионлардың ийтерисиуиниң хәм қарама-қарсы белгилерге ийе зарядларға ийе ионлардың бір бирине тартысыуының нәтийжесинде қәлиплеседи. Ең коп тарқалған мысал ретинде NaCl хәм CsCl кристалларын алып қарауға болады. Хәр бир оң зарядланған ион (мысалы Na, Cs) өзиниң әтирапына қарама-қарсы зарядқа ийе болған ионларды (Cl) жыйнауға тырысады. Ал терис зарядланған ионлар болса өзлерин оң зарядқа ийе ионлар менен қоршайды. Ионлар бир бирине олардың электронлық қабықлары тийискенше жақынласады. Буннан кейин олар арасында квантлық тәбиятқа ийе ийтерий күшлери пайда болады. Усының салдарынан 1- хәм 8-сүүретлерде келтирилген структуралардай структуралар жийи пайда болады. CsCl кристалларында хәр бир ион қарама-қарсы белгидеги зарядқа ийе сегиз ион менен қоршалған. Олар бир бирине салыстырғанда симметриялы болып ортадағы ионның орайынан $a \sqrt{3}/2$ қашықтықта жайласқан. Оннан арманырақ a қашықтығында тап сондай зарядқа ийе 6 ион жайласады. Қурылыс тап усындай избе-изликте дауам етеди. NaCl кристалларында хәр бир ионның $a/2$ қашықтықта жайласқан қарама-қарсы белгидеги зарядқа ийе алты жақын жайласқан қоңысысы бар, буннан кейин $a \sqrt{2}$ қашықтықта тап сондай белгидеги зарядқа ийе 12 ион жайласқан. Демек сайлап алынған ионды қарама қарсы зарядқа ийе ионлардың қоршап тұруы тенденциясы көринип тур деген сөз. Ионлардың усындай тәқлитте жайласыуларында электростатикалық энергиядан утыу орын алады.

Енди электростатикалық энергиядан қанша утыу орын алатуғынлығын есаплаймыз. Буннан кейин усындай есаплаулар нәтийжелери пайдаланып ионлардың кристаллардығы байланыс энергиясын табамыз. Есаплауды бир биринен r қашықтығында тұрған q_1 хәм q_2 зарядлы ионлар жұбы арасындағы потенциаллық энергияны қараймыз:

$$W(r) = q_1 q_2 / (4\pi\epsilon_0 r) + C / r^{12} \quad (1.1)$$

Биринши қосылыушы ионлар арасындағы тартылыс ямаса ийтерилис күшлерин тәриплейди. Екинши қосылыушы болса ионлардың электронлық қабықлары бир бирине тийе баслағанда пайда болатуғын ийтерилис күшлерин дәл анықлайды. C параметрин есаплау нәтийжелери менен эксперименталлық нәтийжелерди бир бирине сәйкеслендириу арқалы әмелге асырылады. $W(r)$ функциясының хәм оның еки қосылыушыларының түрлери 10-сүүретте келтирилген.



1.10-сүүрет.

Еки ионның тәсирлесий энергиясы $W(r)$ шамасының ионлар арасындағы қашықтық r ден ғәрезлиги.

Буннан кейин ионлардың биреуін сайлап алады хәм усы ионның этирапындағы жакын хәм узақлаў жайласқан ионлар менен жуп-жуптан тәсирлесіў энергияларын табады хәм оларды бир бири менен қосып шығады (суммалайды). Есаплаўларда кристалды жүдә үлкен деп есаплайды хәм бетлик эффектлерди есапка алмайды. Есапланған қосынды (сумма) кристалдағы сайлап алынған ионның энергиясын береді. Буннан кейин бул энергияны пәнжере турақлысы a ның функциясы деп есаппа энергия минимумға ийе болатуғын a шамасының тең салмақлық мәнисин анықлайды. Есапланған энергияның a бойынша екінши тәртіпли туўындысын да есаплаў мүмкин. Бундай жағдайда серпимликтің көлемлик модули болған $B = -V(dp/dV)$ шамасын есаплаў мүмкиншилигине ийе боламыз.

Егер C параметри дурыс сайлап алынған болса байланыс энергиясының, пәнжере турақлысы a ның хәм модуль B ниң дәл мәнислерин есаплаў мүмкиншилиги пайда болады.

Ионлық кристаллар әдетте салыстырмалы эпийаы, күшли тығыз жайластырылған хәм жоқары симметриялы кристаллық пәнжерге ийе (мысалы кублық). Бул кристаллардың көпшилиги морт келеді.

Ковалентлик кристаллар. Ковалентлик кристаллар атомлар арасындағы ковалентлик байланыслардың есабынан пайда болады. Ал ковалентлик байланыс электронлық бултлардың (қабықлардың) тийисийиниң нәтийжесинде бир бирине өтиўиниң салдарынан пайда болады. Усының ақыбетинен атомлар арасында еки атомды бир бирине тартатуғын терис зарядтың қойыўласыўы пайда болады. Атом валентлигине байланыслы бир бири менен хәр қыйлы мүйешлерди жасап орналасатуғын байланыслардың бир неше типин пайда етеді. Ковалентлик кристалдағы атомлар бир бири менен ковалентлик байланыслардың есабынан биригеді. Қала берсе байланыслар арасындағы мүйешлер хәм олардың арасындағы «узынлықлар» хәр қыйлы болған кристаллар ушын азмаз айрылады.

Белгили ковалентлик кристалға мысал ретинде алмазды көрсетиўге болады. Оның кристаллық қурылысы 9-сүүретте берилген. Алмаздың қурылысында (пәнжересинде) хәр бир атом тетрадрлик түрде жайласқан төрт атом менен қоршалған. Углерод атомының ковалентлик байланыслары көпшилик жағдайларда алмаздағыдай болып жайласады.

Ковалентлик кристаллар жағдайында байланыс энергиясын есаплаў процедурасы жеткиликли дәрежеде қурамалы. Сонлықтан бундай есаплаўлар жумысын келтирмеймиз.

Ковалент кристаллардың кристаллық пәнжерелери хәм олардың базислери жүдә қурамалы хәм төмен симметрияға ийе болады. Себеби кристал атомлар ямаса молекулалардың бөлимлериндеги ковалентлик байланыслардың бағытлары жүдә көп санлы. Ковалент кристалларды үйренгенде белгили бир сорттағы атомның «атомның ковалентлик радиусы», «ковалент байланыстың узынлығы», ковалент байланыслар арасындағы мүйешлер сыяқлы түсиниклерди жийи қолланады. Бундай шамалардың дерлик барлығы да кристалдағы бул атомлар басқа атомлар тәрәпинен хәр қыйлы болып қоршалғанда аз шамаға өзгереді.

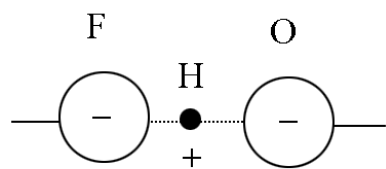
Ковалент хәм ионлық кристаллар арасында кристаллардың көп санлы аралықлық типлери бар. Бундай кристаллардағы байланыс ковалентлик хәм поляр. Бундай байланыста ковалентлик байланысқа жуўап беретуғын электронлық тығызлықтың үлкенірек мәниске ийе болған орынларда ионлардың бирине қарай аўысқан. Усының салдарынан азмаз зарядланған атомлар арасында қосымша кулонлық тәсирлесіў күши пайда болады. Ионлық байланыс әдетте электронлық қабықлары дерлик толған атомлар арасында пайда болады (силтили металлар, Менделеев кестесиндеги биринши хәм жетинши топар элементлери, екінши хәм алтыншы топар элементлери арасында кулонлық байланыс сийрегирек ушырасады). Үшинши-бесинши топар элементлери әдетте ковалентлик байланыс пайда етеді. Айырым жағдайларда экспериментлерде кристалдағы хәр бир атомға сәйкес келетуғын электронлардың орташа мәнисин анықлаў мүмкин (мысалы дифракциялық усыллардың жәрдемінде өткерилген экспериментлерде). Бул өз

гезегінде атомлардың заряды хаққында да, кристалдағы байланыстың характери хаққында да жуўмақлар шығарыўға мүмкиншилик береди.

Метал кристаллар. Метал кристалларда атомлардың сыртқы электронлары ионлардың тулғалары (ионные остовы) арасында еркин қозғалып жүре алады. Бул электронларды терис зарядланған буллы пайда етеди деп көз-алдыға келтириўге болады. Бул булт ишинде металдың ионлары жайласқан болады. Ионлардың бир бири хәм электронлар булты менен пенен тәсирлесиўи металдағы атомлардың жайласыўының тәртиплесиўине алып келеди. Өтиўши металларда (переходные металлы) олардың d қабықларының бир бирине өтиўи хәм соның ақыбетинде металдағы байланыс энергиясының үлкейиўине алып келетуғын ковалентлик байланысқа усаған байланыс та пайда болады. Металлардағы байланыс энергиясын есаплаў жүдә қыйын мәселелер қатарына киреди хәм сонлықтан бундай есаплаўларды келтирмеймиз.

Әдетте металлар тығыз жайластырылған кристаллық пәнжерелерди пайда етеди (тығыз етип жайластырылған гексагоналлық, ҚОК ямаса КОК).

Водородлық байланысқа ийе молекулалық кристаллар. Водородлық байланысқа ийе молекулалық кристалларда водородлық байланыс терис зарядланған F, O, N атомлары арасында пайда болады. Ал бул атомлардың өзлери басқа атомлар менен (егер ортасында водород болса) полярлық ковалентлик байланысқан болыўы керек. Жоқарыда формулалары келтирилген атомлардың бири өзине водород атомының электронын қабыл етеди. Усының салдарынан водород атомы шекли жағдайда протонға айланады. Бул протонға көпшилик жағдайларда еки терис зарядланған ион арасында орналасқан энергиялық жақтан утымлырақ болады (F, O, N атомлары менен байланысқанға салыстырғанда, 11-сүўретти қараңыз). Бундай жағдайда терис зарядланған ионлардың водород ионы менен тартасыўының салдарынан энергиясы шама менен 0,1 эВ болған беккем байланыс пайда болады. Водород ионының кишилигинен ол тек еки атомды бир бири менен байланыстырады.

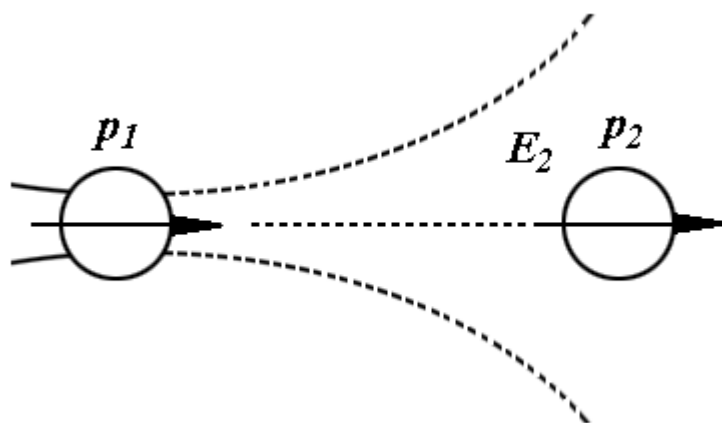


1.11-сүўрет.

Водородлық байланыстың пайда болыў схемасы.

Водородлық байланыс биологиялық молекулаларда хәм кристалларда әҳмийетли орынды ийелейди. Мысалы ДНК молекуласының еки спиралының бир бири менен байланысыўы водородлық байланыстың орын алыўының салдарынан жүзеге келеди. Айырым кристаллардың сегнетоэлектриклик (ферроэлектриклик) қәсийетлери хәм суў менен муздың молекулаларының 0°C температурадағы қәсийетлери оларда водородлық байланыслардың орын алатуғынлығын түсиндиреди.

Ван-дер-Ваальс кристаллары. Ван-дер-Ваальс кристаллары электрлик жақтан нейтрал болған атомлардан олар арасындағы диполь-диполлик байланыстың есабынан пайда болады. Бундай байланыслардың тәсиринде төменги температураларда инерт газлердің кристаллары пайда болады. Бундай кристаллар барлық ўақытларда да тығыз жайластырылған ҚОК қурылысқа ийе болады. Ван-дер-Ваальс байланысы жоқарыда қарап өтилген байланыслардың ишиндеги ең әззиси. Сонлықтан ионлық, ковалентлик хәм металлық байланыслардың пайда болыўы ушын шараятлар дәретилмеген жағдайларда айқын көринеди.



1.12-сүрөт.
Диполь-диполлик байланыстың
пайда болуу схемасы.

Ван-дер-Ваальс байланысының пайда болууын эпийайы классикалық моделден көриуге болады. Еки нейтрал болған атомның бир бири менен тәсирлесиўин қараймыз. Олардың орайлары арасындағы қашықлық r ге тең болсын (12-сүрөтти қараңыз). Ыақыттың ҳәр бир моментинде терис зарядтың орайы оң зарядланған атомның орайы менен сәйкес келмейди. Сонлықтан 1-атом ушын бир заматлық диполь моменти p_1 шамасының мәниси нолге тең болмайды. Бул диполь моменти 2-атом жайласқан орында E электр майданын пайда етеди. Бул шаманың модули

$$E_2 = \text{const} \cdot p_1 / r^3. \quad (1.2)$$

Бул майдан екінши атомды поляризациялайды ҳәм сонлықтан екінши атом да диполь моментине ийе болады:

$$p_2 = \beta \epsilon_0 E_2 = \beta \epsilon_0 \text{const} \cdot p_1 / r^3, \quad (1.3)$$

бул аңлатпада β аркалы атомның поляризациялыўшылығы белгиленген. Еки диполь арасындағы тәсирлесиў энергиясы $p_1 p_2 / r^3$ шамасына пропорционал. Сонлықтан еки атом арасындағы тәсирлесиў энергиясы $1/r^6$ шамасына пропорционал болып, мәниси жүде киши ҳәм қашықлықтың өсиўи менен тез кемейетуғын шама болады. Сонлықтан Ван-дер-Ваальс тәсирлесиўи тек киши қашықлықларда ғана сезилерликтей мәниске ийе болады. Ионлық кристалларды қарағандағы көз-қараслар бойынша тәсирлесиў энергиясы ушын аңлатпаны жазыў мүмкин. Бул жағдайда еки атом арасындағы $1/r^6$ шамасына пропорционал болған тәсирлесиў энергиясына $1/r^{12}$ шамасына пропорционал болған атомлар арасындағы ийтерилис энергиясын қосып кристаллық пәнжерениң пайда болуў энергиясын, пәнжере параметрин ҳәм серпимлилик модулин есаплаў мүмкин болады. Усындай избе-изликте өткерилген есаплаўлардың нәтижелери экспериментте алынған мағлыўматлар арасында жақсы сәйкеслик орын алған.

Моно- ҳәм поликристаллық затлар. Техникада қолланылатуғын материаллар менен олардың бөлеклери тек бир кристаллық пәнжереге ийе кристалдан сийрек жағдайларда ғана турады. Бундай затларды монокристаллық затлар (ямаса монокристаллар) деп атайды. Монокристаллар тутас бир кристалдан турады.

Техникада тийкарынан поликристаллар деп аталатуғын материаллар қолланылады. Поликристаллар бир биринен өсип шыққан оғада көп монокристаллық дәнешелерден турады. Бундай кристаллық қурылыстың пайда болуўының себеби мынадан ибарат: затлардың кристалланыўы бир ўақытта оғада көп санлы кристалланыў орайларында басланады. Нәтижеде поликристаллық зат қәлиплеседи. Егер арнаўлы иләжлар қолланылса еритпеден ямаса еритилген (балқытылған) заттан монокристал алынады.

Айырым жағдайларда монокристаллық затларды ямаса олардан соғылған бөлектерди пайдаланыу зәрүрли болады. Мысалы оптикалық нурлардың поляризаторларын, рентген нурларының монохроматорларын, электронлық саатлардағы резонаторларды тек монокристаллардан соғады. Айырым жағдайларда монокристалларды пайдаланыу олардан соғылған бөлектердің сапасын кескин түрде жоқарылатады. Усындай жағдайлар төменде айқын мысалларда көрсетиледи

Мәселе:

Егер 0°C температурада қоңсылас атомлары арасындағы тәсирлесіуіге сәйкес келиуіши потенциаллық энергия $W r = \frac{c}{r^{12}} - b/r^6$ болса аргон кристалларындағы Ван-дер-Ваальс байланысының хәм оның ериуі (балқыуі) температурасының мәнисин есаплаңыз. Есаплауларда тек ең жақын қоңсы атомлар арасындағы тәсирлесіуді хәм аргонның қурылысының ҚОК екенлигин есапқа алыңыз.

Шешими. ҚОК қурылыста атомның ең жақын жайласқан 12 қоңсысы менен тәсирлесіуі энергиясы $W r = 12 \frac{c}{r^{12}} - b/r^6$ формуласы менен бериледи. Буннан кейин дәстүрге айланған математикалық усыл менен бул аңлатпаның минимумын табыу керек болады. Оның ушын $W r$ функциясынан r бойынша тууынды алынады хәм оны нолге теңейди. Усындай жоллар менен $W r$ функциясынан минималлық мәниси есапланады. Бул мәнисти Больцман турақлысына бөлип ериуі (балқыуі) термпературасының мәнисин бахалау мүмкин.

Нурлар менен бөлекшелердің кристаллық пәнжередеги дифракциясы

Техниканың қанша дәрежеде рауажланғанлығы бәршеге мәлим. Бирақ усы жағдайға қарамастан кристаллық пәнжередеги ямаса молекулалардағы атомлардың қандай орынларда жайласқанлығы хаққында тиккелей мағлыұматларды беретугын исенимли хәм эффектив асбап-үскенелер елеге шекем дөретилген жоқ. Ең жетилистирилген электронлық микроскоптардың жәрдемінде тек ең ири болған атомларды (мысал ретінде уран менен алтынның атомларын) бақлау мүмкин. Ең көп тарқалған электронлық микроскоптардың жәрдемінде бир неше атомлардың өлшемлериндей болған бир текли емес орынларды бақлауға болады. Ионлық микроскоплар принципінде ири атомларды бақлау мүмкиншилигине ийе болса да оларды пайдаланыу оғада қыйын. Бундай асбап-үскенелердің жәрдемінде атомлар арасындағы қашықлықтарды анықлау мәселеси болса оғада қыйын шешилетугын мәселелер қатарына киреди.

Усы күнлери кристаллардағы атомлардың бир бирине салыстырғанда жайласыуларын үйрениудің ең эффективлик усылы микробөлекшелер: фотонлардың, электронлардың, нейтронлардың дифракциясы болып табылады. Кристаллар менен молекулалардың қурылысы хаққында справочниклерде келтирилген мағлыұматлардың барлығы да тап усы усылдың жәрдемінде алынған.

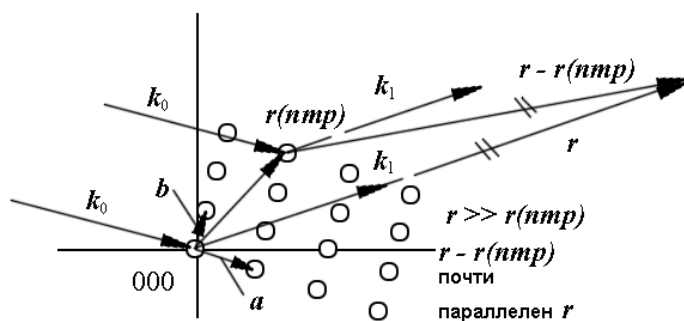
Кристалларды дифракциялық усыллар менен изертлегенде кристаллық үлгиге бөлекшелердің дерлик параллель дәстесин бағытлайды, усы бөлекшелердің дифракциясының хәр қыйлы бағытлар бойынша интенсивлигинің тарқалыуын үйренеди (гейпара жағдайларда кристалдың хәр қыйлы ориентировкаларында), ал буннан кейин дифракциялық сүүрет бойынша кристалдың элементар кутышасының типі хәм оның базисинің қурылысы хаққында жуұмақлар шығарады. Бул усыллардың (методлардың) жәрдемінде кристаллық пәнжеренің дәуирлерин 4-5 белгиге шекемги дәлликте хәм базистеги атомлардың жайласыуларын анықлайды.

Кристаллық денелердеги дифракция кубылысын бақлау ушын дифракцияға ушыраушы бөлекшелердің де-Бройль толқын узынлығы кристаллық пәнжеренің дәуиринен киши болыуы керек. Бундай шәртке энергиялары $E = 5-20$ кэВ шамасындағы фотонлар (рентген хәм гамма нурлары), энергиясы $E = 10-100$ эВ болған электронлар хәм

энергиясы $E = 0,01 - 0,1$ эВ болған нейтронлар ийе болады (бундай нейтронларды жыллылық нейтронлары деп атайды хәм оның энергиясының шамасы кТ ға барабар). Жоқарыда атлары атап өтилген үш түрлі бөлекшелер (фотонлар, электронлар хәм нейтронлар) кристалларды дифракциялық изертлеулерде қолланылады. Фотонлардың дифракциясын бақлау ең аңсат дифракциялық усыллардың бири болып табылады. Сонлықтан фотонлардың (рентген нурларының) дифракциясы электронлардың дифракциясын пайдаланыуға салыстырғанда жүдә көп қолланылады. Электронлардың дифракциясы бақлау ушын жоқары вакуум (бундай вакуум электрон микроскопының ишинде алынады), ал нейтронларды пайдаланыу ушын олардың дереги ретінде үлкен ядролық реактор талап етиледі. Нейтронлар менен электронлардың дифракциясы фотонлардың дифракциясына жүдә ұқсас. Сонлықтан биз төменде кристаллық пәнжерениң қурылысын үйрениу ушын фотонлардың дифракциясының қолланылыуы менен толығырақ танысамыз. Бул жууақларды кристаллардағы нейтронлар менен электронлардың дифракциясын таллау ушын да пайдаланыуға болады.

Кристаллық пәнжере кристалда қозғалыушы фотонлар, электронлар хәм нейтронлар ушын үш өлшемлі дифракциялық пәнжерениң орнын ийелейді. Электромагнит толқынларының квантлары болған фотонлардың үш өлшемлі пәнжередеги дифракциясының нызамлықтарын үйрениу ушын N дана саңлаққа ийе бир өлшемлі дифракциялық пәнжередеги дифракцияны еске түсириу керек. Ең дәслеп изертлеушилер ени шексиз киши саңлақлардағы дифракция кубылысын изертледі, кейинирек саңлақлардың ениниң шекли мәниске ийе болатуғынлығын есапқа алды. Усының нәтийжесинде айқын максимумлар сериясынан туратуғын сүүрет алынды. Ал интенсивликер болса бир саңлақтың шеклериндеги интенсивликтің тарқалыуының характерине байланысly болып шықты.

Дәслеп тууры мүйешлик емес примитивлик элементар қутышаға ийе кристаллық пәнжерени алып қараймыз. Оның тәреплериниң узынлығы a, b, c векторларының жәрдемінде берилген болсын. Мейли усы a, b, c векторларының бағытында сәйкес M, N, P түйин болсын (1.13-сүүрет).



1.13-сүүрет.
Электромагнит толқынларының кристаллық пәнжерениң түйинлери тәрепинен шашыратылыуы.

Мейли усындай пәнжереге толқын векторы k_0 , жийилиги ω_0 болған толқын келип түссин. Ал шашыраған толқынның толқын векторы k_1 ге тең болсын. Пәнжерениң түйинлеринде шашырағанда толқынның жийилиги өзгермейтуғын жағдайды қарайық, яғный $\omega_0 = \omega_1 = \omega$. Анықлама бойынша $\omega = kc$. Сонлықтан $k_0 = k_1 = k$. Кристалға келип түсиуши толқынның $r = (0,0,0)$ ноқатындағы кернеулиги $E_0(r, t)$ төмендегидей аңлатпаның жәрдемінде берилетуғын болсын:

$$\vec{E}_0(\vec{r}, t) = \vec{E}_0 \cdot \exp(i \alpha t). \quad (1.4)$$

Шашыраған толқында $0,0,0$ түйини тәрепинен берилетуғын үлес мына түрге ийе болады:

$$\vec{E}_{0,0,0}(\vec{r}, t) = \text{Const} \cdot \vec{E}_0 \cdot \exp(i\omega t) \cdot \exp(-i(\vec{k}_1 \cdot \vec{r})) / |\vec{r}|. \quad (1.5)$$

Номери m, n, p болған түйинде шашыраған толқын $0,0,0$ түйинінде шашыраған толқынға салыстырғанда басқа ұзындықтағы жолды өтеди (1.13-сүўрет). Кристалдың өлшемлериниң киши екенлигин есапқа аламыз. Бундай жағдайда $r(m, n, p)$ менен r модулли арасындағы айырма есапқа алынбайды хәм $r - r(m, n, p) = r$ шәрти орынланады. Кристалдағы толқынның жутылыўын да есапқа алмаймыз. Рентген нурлары ушын сыныў көрсеткишин 1 ге тең деп есаплаймыз (хақыйқатында да рентген нурлары ушын сыныў көрсеткиши жүдә үлкен дәлликте 1 ге тең). Бундай жағдайда $r(m, n, p)$ менен $r(0,0,0)$ ноқатларында шашыраған нурлар арасындағы оптикалық жүрислер айырмасын мына формуланың жәрдемінде есаплаў мүмкин:

$$\Delta_{nm} = |\vec{r}(n; m; p)| \cdot \cos(\vec{k}_0; \vec{r}(n; m; p)) - |\vec{r}(n; m; p)| \cdot \cos(\vec{k}_1; \vec{r}(n; m; p)). \quad (1.6)$$

Фазалар айырмасы төмендеги шамаға тең болып шығады:

$$\Delta\varphi = \Delta_{nm} \cdot (2\pi / \lambda) = (\vec{k}_0 \cdot \vec{r}(n; m; p)) - (\vec{k}_1 \cdot \vec{r}(n; m; p)). \quad (1.7)$$

E векторына m, n, p номерине ийе түйин тәрәпинен қосылатуғын үлес мына түрге ийе:

$$\begin{aligned} \vec{E}_{n,m,p}(\vec{r}, t) &= \vec{E}_{0,0,0}(\vec{r}, t) \cdot \exp(-i\Delta\varphi) = \\ &= \vec{E}_{0,0,0}(\vec{r}, t) \cdot \exp\{i[(\vec{k}_0 \cdot \vec{r}(n; m; p)) - (\vec{k}_1 \cdot \vec{r}(n; m; p))]\} = \\ &= \vec{E}_{0,0,0}(\vec{r}, t) \cdot \exp\{i[(\vec{G} \cdot \vec{r}(n; m; p))]\}, \end{aligned} \quad (1.8)$$

бул аңлатпада $G = k_1 - k_0$ аркалы шашыраў векторы белгиленген. Бул вектор дифракция теориясында жүдә үлкен әхмийетке ийе хәм шашыраўдың салдарынан толқын векторының қаншаға өзгергенлигин аңғартады.

Пәнжерениң барлық түйинлериниң E векторына үлеси мына аңлатпа жәрдемінде анықланады:

$$\begin{aligned} \vec{E}(\vec{r}, t) &= \text{const} \cdot \vec{E}_0(\vec{r}, t) \cdot \exp\{i[\omega t - (\vec{k}_0 - \vec{k}_1) \cdot \vec{r}]\} \times \\ &\times (1 / |\vec{r}|) \cdot \sum_{n,m,p} \exp\{i(\vec{G} \cdot \vec{r}(n; m; p))\}. \end{aligned} \quad (1.9)$$

Бул формула бойынша суммалаў пәнжерениң барлық түйинлери бойынша жүргизиледи.

$r, m, n, p = na + mb + pc$ екенлигин есапқа алып хәм $E_1 = \text{const} \cdot E_0(r \cdot t) \cdot \exp i \omega t - (k_0 - k_1) \cdot r \cdot \frac{1}{r}$ белгилеўин қабыл етип төмендегини аламыз:

$$\begin{aligned} \vec{E} &= \vec{E}_1 \sum_{n=0}^{N-1} \sum_{m=0}^{M-1} \sum_{p=0}^{P-1} \exp(i\vec{G}(n\vec{a} + m\vec{b} + p\vec{c})) = \\ &= \vec{E}_1 \sum_{n=0}^{N-1} \exp(i\vec{G}\vec{a}n) \sum_{m=0}^{M-1} \exp(i\vec{G}\vec{b}m) \sum_{p=0}^{P-1} \exp(i\vec{G}\vec{c}p). \end{aligned} \quad (1.10)$$

E_1 үшін жазылған аңлатпа үш сумманың көбеймесінен тұрады. Біріншісі бірінші ағзасы 1-ге тең және бөлімі $\exp i a G$ болған бірінші N ағзаның суммасы. Ол мынаған тең:

$$\sum_{n=0}^{N-1} \exp(i \vec{G} \vec{a} n) = \frac{1 - \exp(i \vec{G} \vec{a} N)}{1 - \exp(i \vec{G} \vec{a})}. \quad (1.11)$$

Тап ұсындай аңлатпаны басқа суммалар үшін де алыуға болады. Дифракцияға ушыраған толқынның интенсивлиги I шамасы үшін E ни оның комплексі түйінлеси E^* ге көбейтип бір қанша түрлендіріулерден кейін мына аңлатпаны аламыз:

$$I = \vec{E} \vec{E}^* = \frac{\sin^2((\vec{a} \vec{G} N)/2)}{\sin^2((\vec{a} \vec{G})/2)} \frac{\sin^2((\vec{b} \vec{G} M)/2)}{\sin^2((\vec{b} \vec{G})/2)} \frac{\sin^2((\vec{c} \vec{G} P)/2)}{\sin^2((\vec{c} \vec{G})/2)}. \quad (1.12)$$

Егер бір ұақытта

$$(\vec{G} \vec{a})/2 = \pi H; \quad (\vec{G} \vec{b})/2 = \pi K; \quad (\vec{G} \vec{c})/2 = \pi L; \quad (1.13)$$

шәртлери орынланатуғын болса, онда I диң мәнісі максималлық және NMP^2 шамасына тең болады. Бул аңлатпада H, K, L шамалары пүтин санлар. Егер $\frac{Ga}{2}, \frac{Gb}{2}$ және $\frac{Gc}{2}$ шамалары да пүтин санлардан сәйкес $\frac{\pi}{N}, \frac{\pi}{M}, \frac{\pi}{L}$ шамаларынан көп мәніске айырмаға ийе болмаса да интенсивлик нолге тең болмайды.

(1.134)-формула таллау үшін дым қолайсыз. Бирақ бул аңлатпаға әпиұайы түрдеги көргизбелі геометриялық мәніс беріу мүмкін. буның үшін кері пәнжере түсинигін көріп шығамыз.

Кері пәнжере. Кері пәнжерениң тийкарғы трансляциялары болған A, B, C векторлары былайынша анықланады:

$$\begin{aligned} \vec{A} &= 2\pi[\vec{b} \times \vec{c}]/(\vec{a}[\vec{b} \times \vec{c}]); \\ \vec{B} &= 2\pi[\vec{c} \times \vec{a}]/(\vec{a}[\vec{b} \times \vec{c}]); \\ \vec{C} &= 2\pi[\vec{a} \times \vec{b}]/(\vec{a}[\vec{b} \times \vec{c}]). \end{aligned} \quad (1.14)$$

Мына қатнастардың орынланатуғынлығын тексеріп көріу мүмкін:

$$\begin{aligned} (\vec{A} \cdot \vec{a}) &= 2\pi; \quad (\vec{B} \cdot \vec{a}) = 0; \quad (\vec{C} \cdot \vec{a}) = 0; \\ (\vec{A} \cdot \vec{b}) &= 0; \quad (\vec{B} \cdot \vec{b}) = 2\pi; \quad (\vec{C} \cdot \vec{b}) = 0; \\ (\vec{A} \cdot \vec{c}) &= 0; \quad (\vec{B} \cdot \vec{c}) = 0; \quad (\vec{C} \cdot \vec{c}) = 2\pi. \end{aligned} \quad (1.15)$$

A векторының c менен b ға перпендикуляр екенлигин, ал усы A векторының модулинің $2\pi/d$ ға тең екенлигин көрсетіуе болады. Бул аңлатпада d арқалы c менен b векторларында қурылған кристаллографиялық тегисликлер арасындағы қашықтық. Тап сол сыяқты қатнастар B және C векторлары үшін де орынлы.

Кристаллық пәнжередегідей мүмкін болған трансляциялар векторлары болған $T = hA + kB + lC$ векторларының ушлары кери пәнжере деп аталатуғын кеңістік пәнжерени пайда етеді.

Кери пәнжерени де кристаллық пәнжере сыяқлы таллау мүмкін. бунның ушын ондағы hkl түйінлерин, hkl координаталарына ийе векторларды, әхмийетли бағытларды, тегісліктерди, нокатлардың координаталарын хәм тағы басқаларды қарап шығыу керек болады. Мысалы hkl координаталарына ийе кери пәнжерениң векторының Мюллер индекслери hkl болған кристаллографиялық тегіслікке перпендикуляр екенлигин дәлиллейге болады. Ал оның узынлығы болса $2\pi/d$ шамасына тең (d аркалы тегісліктердің усы системасы ушын тегісліктер арасындағы қашықтық белгіленген).

Ескерту: Бир қанша жағдайларда, әсиресе теориялық физикада кери пәнжере хаққында гәп етилгенде 2π көбейтiушиси қатнасады (мысалы $2\pi/d$). Бирақ кристаллар рентгенографиясында, нейтронографияда хәм электрон микроскопиясында 2π көбейтiушиси пайдаланылмайды хәм $2\pi/d$ шамасының орнына $1/d$ шамасы пайдаланылады (демек масштаб 2π көбейтiушисине парық қылады деген сөз).

Ромбалық элементар қутышасы бар кери пәнжерени қараймыз. (1.14, 1.15) формулалары бойынша хәм a, b, c векторлары арасындағы мүйешлерди тууры деп есаппапына мыналарға ийе боламыз:

$$\vec{A} = 2\pi\vec{a} / |\vec{a}|^2; \vec{B} = 2\pi\vec{b} / |\vec{b}|^2; \vec{C} = 2\pi\vec{c} / |\vec{c}|^2. \quad (1.16)$$

Ромбалық қутышаның ең узын тәрәпине кери пәнжерениң қутышасының ең келте тәрәпинің сәйкес келетуғынлығы көринип тур. Тап усындай жоллар менен примитивлик кублық пәнжере ушын элементар қутышаның қабырғасының узынлығы $1/a$ шамасына тең куб болатуғынлығына аңсат көз жеткеріуіге болады.

Тетрагоналық хәм гексагоналық пәнжерелерде A, B, C векторларының кери кеңістікте сәйкес тетрагоналық хәм гексагоналық пәнжерелерди пайда ететуғынлығын да аңсат көрсетіуіге болады. Бул жағдайда a менен c арасындағы қатнастар ғана өзгереді. Триклинлик хәм моноклинлик қутышалар ушын кери пәнжерениң векторлары болған A, B, C шамаларын табыу бираз қурамалы. Бундай жағдайда (1.14)-формулань пайдаланыуға тууры келеді.

Дифракция шәрти (1.13) ти қанаатландыратуғын G векторларын излеуіге қайтып келеміз. Енди оларға әпиуайы геометриялық мәніс беріу мүмкін. Мейли G векторлары A, B, C векторлары бойынша жайылған болсын:

$$\vec{G} = h\vec{A} + k\vec{B} + l\vec{C}. \quad (1.17)$$

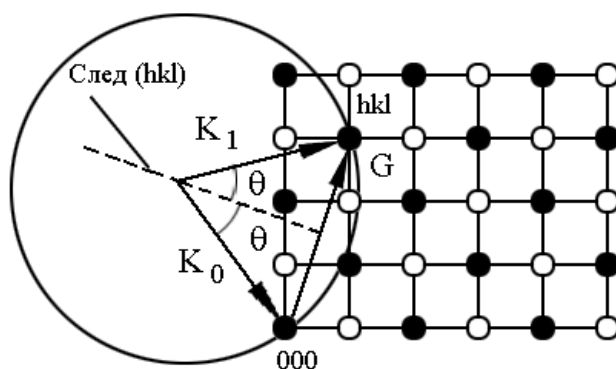
Бундай жағдайда (1.17)-аңлатпаны (1.13)-аңлатпаға қойып (1.15)-қатнасты есаппапына алып дифракция максимумлары шәртин аламыз: $h = H, k = K, l = L$. Бул аңлатпадағы H, K хәм L шамалары пүтин санлар. Демек h, k, l шамалары пүтин санға тең болғанда, яғный G векторлары кери пәнжерениң трансляция векторлары болған T^* векторына тең болғанда дифракцияның максимумы орын алады екен.

Кери пәнжерениң үш өлшемли пәнжереден алынатуғын дифракциялық сүүретти сәулелендіретуғынлығын көрсетіуіге болады. Оптика курсында Фраунгофердің дифракциялық сүүретинің нурланыу интенсивлигинің бир хәм еки өлшемли тарқалыуының Фурье-образы екенлигин тастыйықлайды. Тап сол сыяқлы үш өлшемли кери пәнжере шексиз үлкен кристалдың Фурье-образы, ал шекли өлшемли түйінлерге ийе кери пәнжере шекли өлшемлерге ийе кристалдың Фурье-образы болып табылады. Бундай кери пәнжерениң өлшемлери [яғный дифракцияның интенсивлиги (1.12)-формулаға

сәйкес нолге тең емес областлар] кристалдың сәйкес бағыттағы ұзындығына кери пропорционал. Сонлықтан дифракциялық сұреттің түрін кристаллық пәнжерениң Фурье түрлендириуін есаплау арқалы алдын-ала есаппа көрсетиуге болады. Буның кристалдағы электронлық тығызлықтың тарқалыуына байланысly екенлигин биз төменде көремиз

Кери пәнжере кристалдың кристаллық пәнжереси менен беккем байланысқан. Кристалды бурса оның кери пәнжереси де бурылады. Дифракцияны баклау ушын шашырау векторын кери пәнжерениң қандай да бир түйинине сәйкес келетуғындай етип қояды. Буны көрсетпели етип түсиндириу ушын Эвальд қурылмасын пайдаланыу керек.

Эвальд қурылмасы. Дифракция шәртиниң орынланыуын хәм дифракцияға ушыраған толқынлардың бағытын анықлау ушын Эвальд қурылмасынан пайдаланыу жүдә қолайлы (1.14-сұўрет).



1.14-сұўрет.
Эвальд қурылмасы.

Кристалға келип түсиуши толқынның k_0 векторының ушын кери пәнжерениң 000 түйининде жайластырамыз. Түсиуши хәм шашыраған толқынлардың тезликлери де, жийиликлери де бирдей болғанлықтан k_1 векторының да ұзындығы k_0 векторының ұзындығындай болады. Енди ўазыйпа усы k_1 векторының бағытын табыўдан ибарат. Радиусының шамасы k_1 векторының модулине тең сфера сызамыз (Эвальд сферасы). Оның орайы k_0 векторының басында орналастырылады. Шашырау векторының басы менен ушы k_0 менен k_1 векторларының ушларына сәйкес келеди. Енди G векторларының бириниң кери пәнжерениң түйинлериниң бирине сәйкес келетуғынлығын ямаса келмейтуғынлығын тексеремиз. Буның ушын кери пәнжерениң басланғыш түйинин шашырау векторы G векторларының басына жайластырамыз (бул нокат k_0 векторының ушы болып табылады) хәм Эвальд сферасына қандай да бир түйинниң тийетуғынлығын тексеремиз. Бирақ нокатлық түйинлердиң сфера бети менен тийисетуғынлығының итималлығының жүдә киши екенлиги белгили. Соның ушын (түйинди сфераның бетине тийдириу ушын) кристалды, оның менен байланысқан кери пәнжерени бурыу керек. Енди геометрияның жәрдеминде кери пәнжерени (кристалдың өзін) қанша мүйешке бурыўдың зәрүрлиги аңсат түрде анықланады.

Хәзирги ўақытлары дифракция қубылысын баклауға арналған дифрактометр деп аталатуғын әсбаплар компьютерлер менен толықтырылған. Олар кристалды, дифракцияға ушыраған толқынларды регистрациялаушы детекторды қанша шамаға бурыўды автомат түрде анықлай алады.

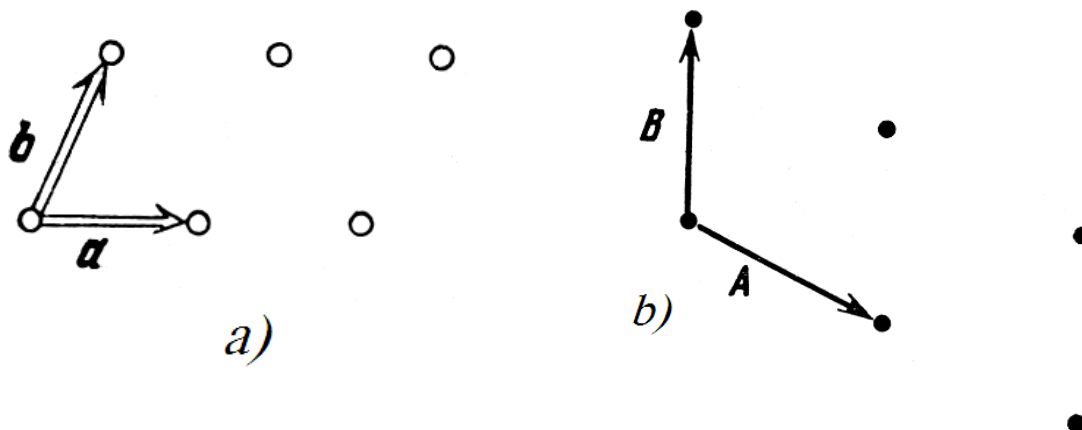
1.14-сұўретте k_0 менен G векторларының ұзындықлары арасында

$$|\vec{G}| = |\vec{k}_0| \cdot 2 \sin(\Theta) \quad (1.18)$$

аңлатпасы менен есапланатуғын байланыстың бар екенлиги көринип тур. Бул аңлатпада θ арқалы дифракциялық мүйеш деп аталатуғын мүйештің мәнісі белгіленген. $G = 2\pi/d_{hkl}$ екенлигин есапқа алып белгили Вульф-Брэгг теңлемесіне ийе боламыз:

$$2d_{hkl}\sin[\theta] = \lambda.$$

Бул теңлемеді d_{hkl} шамасы шашырау тәртібі n ди де өз ишіне алады. Себеби қандай да бір сен еселенген hkl шамалары шашырау тәртібі n ди өз ишіне алады (Вульф-Брэгг теңлемесінің әдетте $2d_{hkl}\sin[\theta] = n\lambda$ түрінде жазылатуғынлығын есапқа аламыз).



Кристаллық пәнжере (a) хәм оған сәйкес келетуғын кери пәнжере (b)

Поликристалдың кери пәнжереси. Жоқарыда гәп етилгендей, поликристаллық материал бир бирине салыстырғанда ықтыярлы түрде бағытланған оғада көп санлы майда кристаллық дәнешелерден турады. Усындай хәр бир дәнешеге кери пәнжере сәйкес келеди. Хәр қыйлы дәнешелерге жууап беретуғын кери пәнжерелер бирдей дәуірлерге, бирдей болып жайласқан түйинлерге ийе болады. Бирақ олардың барлығы да кери пәнжерениң 000 түйинине салыстырғанда ықтыярлы түрде бағытланған болады. Бундай жағдайда кери пәнжерениң hkl түйинине кери кеңісликтеги радиусы T_{hkl}^* ге тең болған бетте жайласқан көп санлы түйинлер сәйкес келеди. Ықтыярлы түрде бағытларға ийе дәнешелерге ийе идеал поликристалл жағдайында кери пәнжерениң түйинин сфераға айланады деп есаплауға болады. Кери пәнжерениң барлық түйинлериниң жыйнағына радиустары T_{hkl}^* шамасына тең болған, кристаллографиялық тегісликлердің мәнісіне байланыссыз ізбе-із жайласқан сфералар жыйнағы сәйкес келеди. Бундай жағдайда Эвальд қурылмасында Эвальд сферасын кери пәнжере түйинлериниң сфералар жыйнағы базы бир шеңберлер бойынша кесип өтеди (1.14-сүүрет). Сонлықтан усндай поликристалдан дифракция поликристалдың қәлеген бағытында хәм қәлеген толқын узынлығында алынады. Поликристаллардан дифракцияны бақлау ушын монохром рентген нурларын ямаса рентген спектриниң характеристикалық сызықларынан пайдаланады.

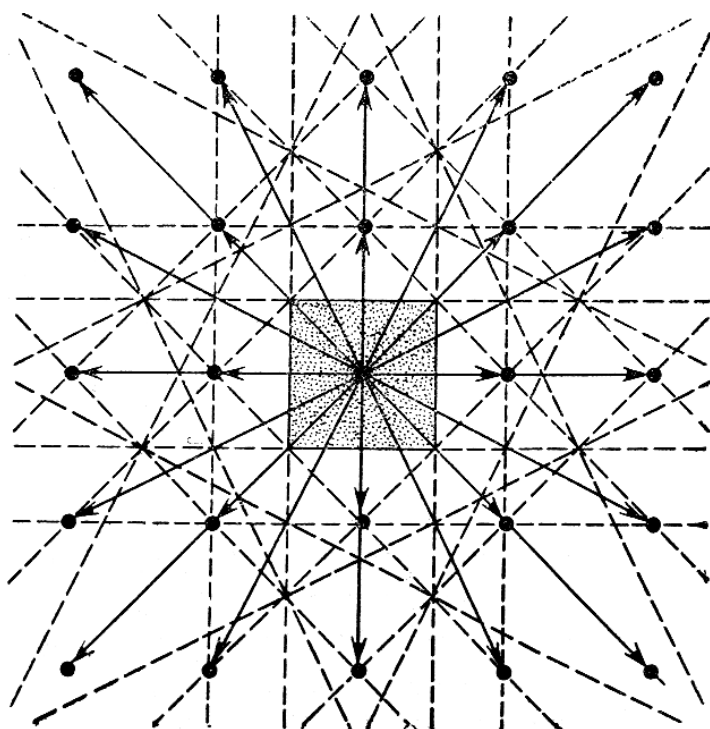
Бриллюэн зоналары. Кристалларда дифракция шәртин қанаатландыратуғын толқынлар менен бөлекшелердің толқын векторлары болған k_0 векторларының көплигин тапқан пайдалы болады. (1.18)-теңлемени былайынша жазыуға болады:

$$G = k_0 \cdot 2 \cdot \cos Gk_0 \quad \text{ямаса} \quad G^2 = 2 Gk_0 \quad (1.20)$$

Кейинги теңлеме G векторына перпендикуляр хәм координата басынан $G/2$ қашықтығында жайласқан тегіслик ушын жазылған теңлеме болып табылады. Соның менен бирге бул теңлемениң дифракция шәртин қанаатландыратуғын барлық k_0 векторлары ушын жазылған теңлеме екенлигин итибарға аламыз. Бундай жағдайда

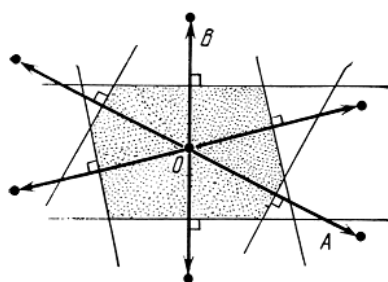
дифракция шәртине жуўап беретугын k_0 векторларының ушларының көплиги бир тегисликте жатады хәм бул тегислик кери пәнжерениң барлық векторларының ортасы арқалы өтеди хәм олардың барлығына да перпендикуляр бағытланған. Тап усындай жоллар менен жоқарыда Вигнер-Зейтц қутышасы соғылған (дүзилген) еди. Кери кеңисликте дүзилген Вигнер-Зейтц қутышасын Бриллюэнниң биринши зонасы деп атаў қабыл етилген. Бул зона әҳмийетли қасийетке ийе: толқын векторы оның шегарасына сәйкес келетуғын толқынлар менен бөлекшелер дифракция шәртин қанаатландырады. Бриллюэн зоналары электронлардың, фононлардың хәм басқа да бөлекшелердің кристалларда қозғалыўын, кристаллардағы энергиялық зоналардың қурылысын изертлегенде әҳмийетли орынды ийелейди. Бул ҳаққында кейинирек толық түрде гәп етиледи.

Бриллюэн зоналарын қурыў қыйын процедуралар қатарына кирмейди. Бул 1.14 b-f сүўретлерде демонстрацияланған.



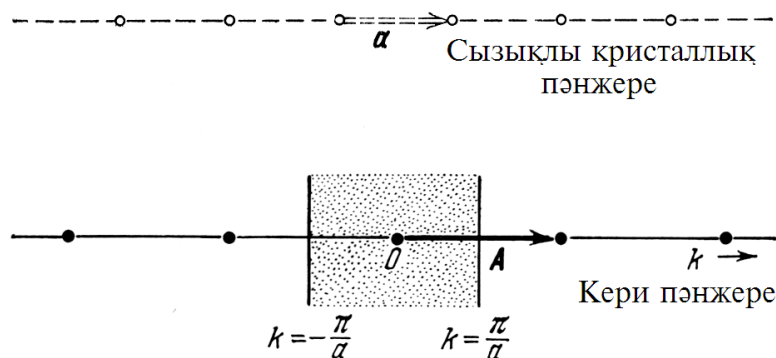
1.14 b сүўрет.

Квадрат кери пәнжере. Жиңишке тутас сызықлардың жәрдемінде кери пәнжерениң векторлары белгиленген. Усы векторларға перпендикуляр пунктир сызықлар оларды теңдей екиге бөледи. Сүўреттиң орайында жайласқан квадрат ең киши майданға ийе болады хәм пунктир сызықлар менен толық туйықланған. Бул квадраттың майданы координаталар басының этирапындағы барлық квадратлардың майданынан киши. Бул квадрат кери пәнжередеги Вигнер-Зейтцтиң примитивлик элементар қутышасы болып табылады.

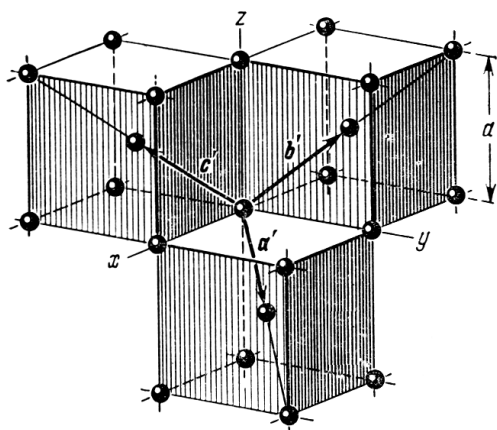


1.14 c сүўрет.

Еки өлшемли қыя мүйешли (туўры мүйешли емес) пәнжере ушын Бриллюэнниң биринши зонасын соғыў. Дәслеп О нокатын кери пәнжерениң жақын жайласқан түйинлери менен тутастыратуғын векторларды түсиремиз. Буннан кейин бул векторларға перпендикуляр хәм оларды теңдей екиге бөлетуғын сызықларды жүргиземиз. Майданы ең киши болған тап усындай жоллар менен алынған көп мүйешлик Бриллюэнниң биринши зонасы болып табылады.

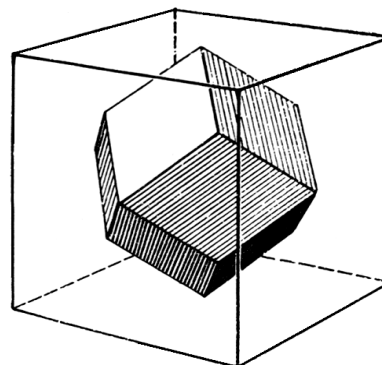


1.14 d сүрөт. Бир өлшемли кристаллык пәнжере менен кери пәнжере. Узунлыгы $2\pi/a$ болган $\mathbf{A}$ векторы кери пәнжерениң базислик векторы, ал $\mathbf{A}$ хэм $-\mathbf{A}$ векторлары координата басынан түсирилген ең қысқа векторлар болып табылады. Усы векторларға перпендикуляр хэм усы векторларды теңдей екиге бөлетуғын сызықлар Бриллюэнниң биринши зонасының шегаралары болып табылады. Бул шегараларда $k = \pm\pi/a$.



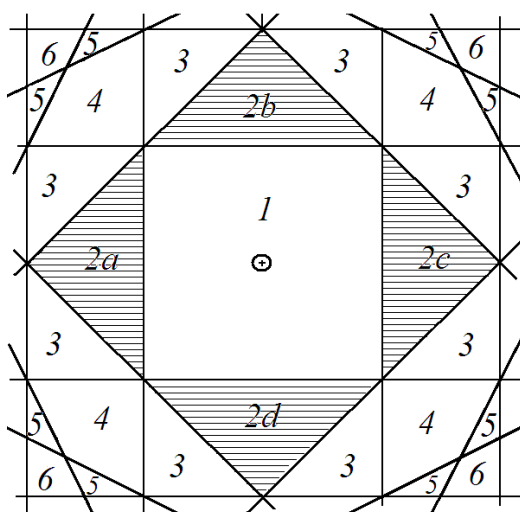
1.14 i сүрөт.

КОК кристалдың примитивлик базислик векторлары.



1.14 f сүрөт.

КОК кристаллардағы Бриллюэнниң биринши зонасы. Бул зона дурыс ромбододекаэдрдиң формасына ийе.



1.14 g сүрөт.

Өпиұайы кублық пәнжерениң Бриллюэн зоналары.

1 аркалы Бриллюэнниң биринши, 2 аркалы екинши, 3 аркалы үшінши зонасы көрсетилген. Баска санлар да сәйкес Бриллюэн зоналарын аңғартады.

Базистің структуралық факторы. Биз жоқарыда пәнжерениң хәр бир түйинин нокатлық шашыратыұшы орай деп есапладық. Ал әдетте хәр бир орай менен кристаллык пәнжерениң базиси деп аталатуғын бир неше бирдей болып жайласқан атом байланыслы. Базистің хәр қыйлы атомларында шашыраған толқынлар атомлардың бир бирине

салыстырғанда қалайынша жайласқанлығына байланысты хәр қыйлы фазаларда қосылады. Дифракцияға ушыраған $E_0(r, t)$ нур векторының амплитудасына қосылатуғын үлесті есаплау жоқарыда қарап өтилген үлеслерди қосыу менен бирдей түрде әмелге асырылады. Бул жағдайда суммалау кристаллық пәнжерениң барлық түйинлери бойынша емес, ал базистің барлық атомлары бойынша әмелге асырылады.

Мейли базис бир неше атомды өз ишине алсын. Сол атомлардың биреуінің номерин j арқалы белгилеймиз. Ал $r_j = x_j a + y_j b + z_j c$ арқалы оның элементар қутышаның басына салыстырғандағы радиус-векторын, f_i арқалы усы атомның шашыраған толқынның $E_0(r, t)$ амплитудаға қосатуғын үлесин белгилеймиз. Бундай жағдайда $G = hA + kB + lC$ шашырау векторы ушын дифракцияға ушыраған толқынға қосылатуғын үлес $\exp i r_j G$ көбеймесине ийе және f_i шамасына пропорционал болады:

$$E_j = f_i \cdot \exp i r_j G . \quad (1.21)$$

Базистің барлық атомларының үлесин табыу ушын j индекси бойынша суммалау керек болады:

$$F_{hkl} = \sum_j E_i = \sum_j f_i \cdot \exp i r_j G . \quad (1.22)$$

$G = hA + kB + lC$ хәм $r_j = x_j a + y_j b + z_j c$ екенлигин хәм (1.15)-аңлатпаны есапқа алып төмендеги аңлатпаға ийе боламыз:

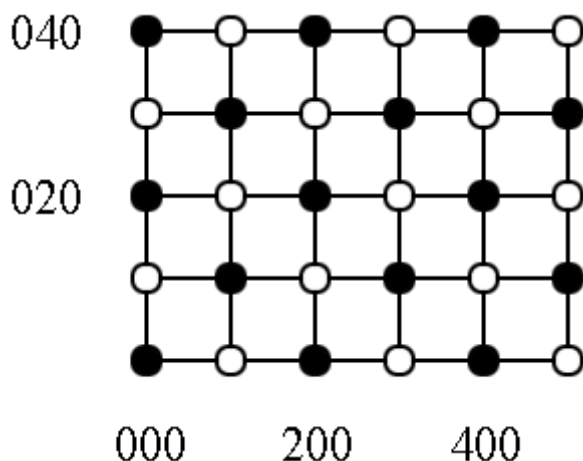
$$F_{hkl} = \sum_j f_i \cdot \exp 2\pi i (hx_j + ky_j + lz_j) . \quad (1.23)$$

F_{hkl} шамасын берілген кристалдың базисинің структуралық факторы ямаса заттың элементар қутышасының структуралық факторы деп атайды. Бул шама үш өлшемлі кристаллық пәнжере тәрәпинен берилетуғын дифракциялық максимумлардың салыстырмалы амплитудасын анықлайды. Берілген кристалл ушын F_{hkl} шашырау векторынан ғәрезли. Кери пәнжерениң базы бир түйини ушын бул шаманың мәніси нолге тең болыуы мүмкин. Бундай жағдайда базистің хәр қыйлы атомлары тәрәпинен дифракцияға ушыраған толқынлардың амплитудалары қосылады хәм нолге тең амплитуданы береді (яғный олар бир бирин сөндиреди). Бундай жағдайда «ноқатлық түйинлерден» туратуғын кристаллық пәнжере күшли дифракцияны беріуі керек (егер шашырау векторы оның кери пәнжересинің түйинлеринің бирине сәйкес келетуғын болса).

Енди КОК кристаллар ушын структуралық факторды есаплаймыз. Егер элементар қутыша ушын 1.1-сүўретте келтирилген куб қабыл етилетуғын болса, онда базис координаталары 0,0,0 хәм $\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$ болған еки атомнан турады. Бундай жағдайда кери пәнжерениң индекслери hkl болған түйини ушын (1.23)-формула жәрдемінде есапланады хәм төмендегидей түрге ийе болады:

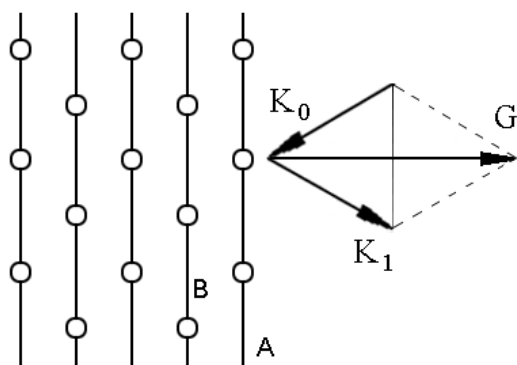
$$F_{hkl} = f [1 + \exp i\pi(h + k + l)] . \quad (1.24)$$

Бул формулада F_{hkl} шамасының индекслердің суммасы болған $h + k + l$ қосындысынан ғәрезли екенлиги көринип тур. Егер $h + k + l$ қосындысы жуп болса $F_{hkl} = 2$, ал тақ болса $F_{hkl} = 0$. Енди структуралық факторлары нолге тең емес түйинлерди дөңгелеклер менен белгилеп шықса, онда дөңгелеклер кери пәнжереди КОК пәнжерениң түйинлериндей болып жайласады (1.15-сүўрет).



1.15-сүрөт.
КОК кристаллардыгы хэм CsCl типиндеги
структуралар ушын кери пәнжерениң
түйинлериниң жайласыуы.

1.15-сүрөттө боялмаған дөңгелеклер менен белгиленген түйинлер ушын дифракция бақланбайды. Себеби кублық қутышаның орайында жайласқан атомларда шашыраған толқындар кубтың төбелеринде шашыраған толқындар менен қарама-қарсы фазада болады. Бул қубылысты 1.16-сүрөттің жәрдеминде аңсат түсиндириўге болады. 1.16-сүрөттө КОК қутышаның (100) тегислиги сәўлелендирилген. Бул тегислик А арқалы белгиленген. Бул тегисликке параллель етип (200) тегислигин жүргизиўге болады (оны В арқалы белгиледик). В тегислигиндеги атомлар саны А тегислигиндеги атомлар санына тең. Демек (100) тегислигиндей тегисликлер еки есе жийи жайласқан болып шығады. В типиндеги тегисликлер болмағанда А типиндеги тегисликлерде шашыраған толқындар бир бирин күшейткен болар еди. В типиндеги тегисликлеринде де толқындар шашырайды, олардың амплитудаларының қосындысы А типиндеги тегисликлерде шашыраған толқындардың амплитудаларының қосындысына тең. Бирақ В типиндеги шашыраған толқындардың фазасы менен А типиндеги тегисликлерде шашыраған толқындардың фазалары қарама-қарсы болады (фазалар айырмасы π ге тең). Сонлықтан А хэм В типиндеги тегисликлерде жайласқан атомларда шашыраған толқындар бир бирин толық сөндиреди. КОК пәнжереге ийе кристаллардың рентгенограммаларында (110), (200), (112), (220), (130), (222) сыяқлы индекслерге ийе рефлекслер орын алады. Демек рентгенограммада индекслердің суммасы жуп болатуғын болса, онда бул КОК пәнжерениң белгиси болып табылады.



1.16-сүрөт.

Толқындардың КОК пәнжерениң (100)
тегислиги тәрeпинен шағылыстырылыўы.

Енди хлорлы цезий типиндеги қурылысты қараймыз (1.1-сүрөт). Бул қурылыс кублық қутышаға ийе хэм еки базиси бар. Бириншисиниң координатасы 000 (Cs ушын), екіншисиники $\frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{2}$ (Cl ушын). (1.23)-формула жәрдеминде есапланған оның структуралық факторы мынаған тең:

$$F_{hkl} = f_{Cs} + f_{Cl} \exp i\pi(h + k + l). \quad (1.25)$$

Енди структуралық фактор F_{hkl} индекслердің қосындысы жуп болса да, тақ болса да нөлге тең болмайды. Хәкыйқатында да бул жағдайда элементар қутышаның орайында хәм мүйешлерінде жайласқан атомлар хәр қыйлы. Сонлықтан олар толқынларды хәр қыйлы етип шашыратады ($f_{Cs} \neq f_{Cl}$). Структуралық фактор f_{Cs} хәм f_{Cl} шамаларының қосындысына ямаса айырмасына тең болады. Егер мәселени ҚОК пәнжере ушын қарағанымыздай етип қарасақ (1.16-сүүрет), онда А хәм В типіндегі тегисликлер хәр қыйлы атомларға ийе болады. Олар шашыраған толқынлардың амплитудасына хәр қыйлы үлес косады. Олардың үлеслеринің қосындысы нөлге тең болмайды. Сонлықтан индекслердің суммасы жуп болғанда күшли дифракциялық максимумлар, ал тақ болғанда (хлор менен цезийдің берген үлеслеринің белгилери хәр қыйлы) эззи дифракциялық максимумлар пайда болады. Кери пәнжерередегі түйинлердің бир бирине салыстырғандағы жайласулары бойынша пәнжерениң дәуирин, ал күшли хәм хәлсиз максимумлардың избе-излиги бойынша пәнжерениң базислериндегі атомлардың ийелеген орынларын анықлайды.

Енди ҚОК пәнжерениң структуралық факторын есаплаймыз. Егер элементар қутыша сыпатында кубты қабыл етсек, онда базис 4 атомнан турады хәм кери пәнжерениң hkl түйини ушын мына формуланың жәрдеминде есапланады:

$$F(hkl) = f \{1 + \exp[i\pi(h+k)] + \exp[i\pi(h+l)] \exp[i\pi(k+l)]\} \quad (1.26)$$

Бул жағдайда

$F_{hkl} = 4f$, егер барлық индекслер жуп ямаса тақ болса,

$F_{hkl} = 0$, егер индекслердің ишинде тақ индекслер де, жуп индекслер де бар болса.

Солай етип бирдей жуплықтағы индекслер ушын ҚОК пәнжерениң структуралық факторы нөлге тең емес, ал хәр қыйлы жуплықтағы индекслер ушын структуралық фактор нөлге тең.

Қапталда орайласқан кублық кристалдың структуралық факторлары нөлге тең емес түйинлер көлемде орайласқан кублық пәнжерени пайда етеди (буны геометриялық жақтан көрсетиу қыйын емес). ҚОК пәнжерениң рентгенограммаларында (111), (200), (113), (220), (133), (222) хәм тап сондай индекслерге ийе кристаллографиялық тегисликлерде дифракцияға ушырыған толқынлардың рефлекслери болады. Рентгенограммада хәр қыйлы жуплыққа ийе индекслерге ийе шашыраулардың (рефлекслердің ямаса дифракциялық дақлардың) болмауы ҚОК пәнжерениң белгиси сыпатында қабыл етиледі.

Базислер қурамалырақ қурылысқа ийе болғанда структуралық фактордың комплекс шамаға айланыуы, кери пәнжерениң бир түйининен екінші түйинине өткенде базистегі атомлардың жайласуы нызамлары тийкарында өзгериуі мүмкин. Солай етип структуралық фактор хәр қыйлы кристаллографиялық тегисликлерде шашыраған толқынлардың салыстырмалы интенсивлигин анықлайды. Усыған байланысы кери мәселени де шешиу мүмкин, яғнай дифракцияға ушыраған толқынлардың интенсивлигин өлшеу арқалы базистегі атомлардың ийелеген орынларын анықлау. Бул кристалдың структурасын расшифровкалауға (анықлауға) мүмкиншилик береді. Хәзирги уақытларға шекем базислери жүзлеген, мыңлаған, оннан да көп атомларға ийе кристаллардың қурылысы анықланды

Шашыраудың атомлық факторы. Айырым атомларда шашыраған толқынлардың амплитудаларын биз хәзирше қарағанымыз жоқ. Айырым атомларда шашыраған толқынның амплитудасын беретугын f_j шамасын шашыраудың атомлық факторы деп атайды. Шашырау амплитудасының мәнисин экспериментте анықлайды ямаса теориялық жоллар менен есаплайды. Бундай есаплауларды жүргизиу ушын атомды зарядтың $\rho(r)$ түріндегі зарядлардың тарқалуы деп қарау керек. Оның ушын атомды ойымызда шексиз киши dV көлем элементлерине бөлеміз. Буннан кейин $\rho(r)$ шамасын хәм хәр қыйлы элементтерде шашыраған толқынлардың фазалар айырмасын есапқа алып барлық

элементлер бойынша төмендегі формуланың жәрдеминде сумманы есаплаймыз (биз жоқарыда базистің структуралық факторын есаплайдының схемасы бойынша):

$$f(\mathbf{G}) = \sum_j \rho(\mathbf{r}_j) \exp(i\mathbf{r}_j \mathbf{G}) dV_j = \iiint \rho(\mathbf{r}) \exp(i\mathbf{r} \mathbf{G}) dV. \quad (1.27)$$

f шамасы электронлар менен фотонлардың дифракциясында G векторының модулинен ғарезли. Әдетте G шамасы өссе f тиң мәнісі кемейеді. f шамасы үлкен номерге ийе атомларда үлкен. Қара берсе f шамасы G ның өсіуі менен үлкен өлшемлерге ийе атомларда тезирек кемейеді. Себеби G ның өсіуі менен атомның хәр қыйлы бөлімлері хәр қыйлы фазада шашыратады. Электронларының санлары бир бирине жақын атомлар үшін f шамаларының мәніслері бир бирине жақын. Атомлық фактор тек G дан ғарезли болса, онда ондай атом сфералық симметрияға ийе деген сөз. Дифракциялық экспериментлер өткерілгенде f функциясының шамасын справочниклерде келтирилген кестелерден алады.

Мәселелер:

1-мәселе. (1.14)-формула жәрдеминде анықланған кери пәнжере векторы A векторының c хәм b векторларына перпендикуляр екенлигин, ал усы A векторының модулинің $2\pi/d$ шамасына тең екенлигин көрсетіңіз. Бул жерде d арқалы c хәм b векторлары жататуғын кристаллографиялық тегисликлер үшін тегисликлер арасындағы қашықтық белгіленген.

Шешими. a , b хәм c векторларында соғылған параллелопипедтің көлемінің олардың аралас көбеймесіне, екіншіден параллелопипедтің ұлтанының (яғный c хәм b векторларының векторлық көбеймесінің модуліне) бийиклігіне (яғный биз ізлеп атырған тегисликлер арасындағы қашықтыққа) көбеймесіне тең екенлигин еске түсіремиз. Бул қатнастан d шамасының мәнісінің (1.14)-аңлатпа бойынша есапланған A векторының модуліне тең екенлігі келип шығады.

2-мәселе. Кублық пәнжерге ийе кристалларда $[hkl]$ бағытының Миллер индексleri (hkl) болған кристаллографиялық тегисликлерге перпендикуляр екенлигин хәм усы тегисликтен координаталар басына шекемгі қашықтықтың $d_{hkl} = \frac{a}{h^2 + k^2 + l^2}$ формуласының жәрдеминде есапланатуғынлығын көрсетіңіз. Басқа системаларға кириуші кристаллар үшін бул формуланың дурыс нәтижелерди бермейтуғынлығын аңғарамыз хәм d_{hkl} шамаларының мәніслерін есаплау үшін кери пәнжерінің векторының ұзынлығын есаплау зәрүрлігі пайда болады.

3-мәселе. Параметрleri a хәм c болған ($a < c$) тетрагоналлық пәнжере үшін кери пәнжерінің векторларын соғыңыз. Бриллюэннің биринші зонасының сүўретін салыңыз. Индексleri (hkl) болған кристаллографиялық тегисликлер семействосы үшін тегисликлер арасындағы қашықтық үшін $d_{hkl} = G(hkl) / 2\pi$ шамаларын анықлаңыз.

4-мәселе. Параметрleri a хәм c болған ($a < c$) гексагоналлық пәнжере үшін кери пәнжерінің векторларын соғыңыз. Бриллюэннің биринші зонасының сүўретін салыңыз. Индексleri (hkl) болған кристаллографиялық тегисликлер семействосы үшін тегисликлер арасындағы қашықтық үшін $d_{hkl} = G(hkl) / 2\pi$ шамаларын анықлаңыз.

5-мәселе. Кери пәнжерінің 000, 110, 200 түйінleri арқалы өтетуғын тегисликтегі КОК кристаллар үшін Бриллюэннің биринші зонасының кесе-кесімінің сүўретін салыңыз.

2-бап. Кристаллық пәнжерениң дефектлери

Атомлары қатаң түрде дәуірли жайласқан кристалларды идеал кристаллар деп атаймыз. Барлық идеал кристаллар идеаллық қурылысқа ийе болмайды. Қурылыстың идеаллықтан ауытқыуын қурылыс дефектлери деп атау қабыл етилген. Қурылыс дефектлерин динамикалық хәм статикалық деп айырады. Динамикалық дефектлерге жыллылық тербеліслериниң ақыбетинде ямаса кристаллар арқалы электромагнит толқындары өткенде пәнжерелердиң майысыуларын жатқарады. Бул дефектлер атомлардың тең салмақлық ауқалларынан ауысыуы менен байланысly. Сонлықтан бундай дефектлер хәтте идеал кристалларда да болады. Биз төменде қарайтуғын статикалық дефектлер кристаллық пәнжередеги атомлардың жайласыуларындағы бузылыулар менен байланысly. Мысалы пәнжерениң түйининде атомның болмауы ямаса басқа түрдеги атом менен алмасыуы орын алады. Соның менен бирге атомлар кристалда топарласып ирирек дефектти пайда етиуи мүмкин.

Статикалық дефектлерди сол дефектлердиң формалары тийкарында 4 топарға бөледі:

- 1). Ноқатлық дефектлер, мысалы пәнжерениң түйининде атомның болмауы;
- 2). Сызықлық дефектлер болған дислокациялар. Бундай дефектлерде дәуірликтің бузылыуы бир сызықтың бойында орын алады;
- 3). Бетлик дефектлер. Бундай дефектлерге кристалдың бети ямаса поликристалдың дәнешелериниң бетлери киреди;
- 4). Көлемлик дефектлер болған қуыслықлар, микрожарықлар, басқа фазаның кишкене қалдықтарының ямаса зародышларының болыуы хәм басқалар.

Кристаллардың көплеген физикалық қасиетлери хәр қыйлы топарлардағы дфектлерге байланысly күшли өзгереді. Мысалы материалдың беккемлиги менен пластиклиги сызықлы, бетлик хәм көлемлик дефектлерге байланысly. Электр қарсылығы тийкарынан ноқатлық дефектлерге байланысly. Диффузия коэффициенти, жыллылық өткізгішлік, кристаллардың рені сыяқлы қасиетлер де ноқатлық дефектлерге байланысly.

Ноқатлық дефектлер

Ноқатлық дефектлер ең майда дефектлер болып, олар әдетте бир атомның этирапында орын алған нормал емес ситуациялар менен байланысly (бир атомның орнында болмауы, бир атомның орнын екінши атомның ийелеуи ямаса «артық» атомның пайда болыуы). 2.1-сүўретте схема түринде көрсетілген хәр қыйлы ноқатлық дефектлерди қараймыз

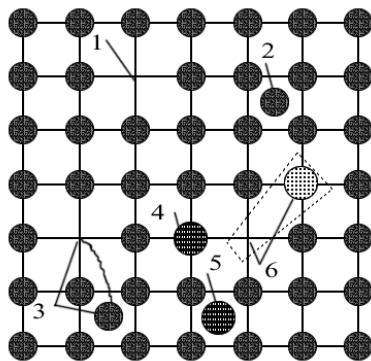
Вакансия. Атом кристаллық пәнжерениң базы бир түйининде болмауы мүмкин (2.1 (1)-сүўретти қараңыз). Усындай бос орын вакансия деп аталады. Вакансия кристаллизация процессинде жийирек пайда болады, бир түйин тосыннан бос қалады. Егер еритпедегі келеси атом басқа атом ушын жолды жабатуғын болса түйиннің бос қалыуы мүмкин. Вакансияларды Шотки дефекти деп те атайды.

Түйинлер арасындағы атом. Атом кристаллық пәнжерениң түйининде емес, ал атомлар арасында – түйинлер арасында жайласыуы мүмкин (2.1 (2)-сүўрет). Бундай дефектти түйинлер арасындағы атом деп атайды. Түйинлер арасындағы атом да тийкарынан вакансиялар сыяқлы кристаллизация процессинде пайда болады. Атомлардың бири тосыннан жыллылық қозғалысларының себебинен қоңсылас атомлардың ортасына түсип қалады. Егер түйинлердиң ортасына түсип қалған атомның орнын басқа атом ийелеп қойған болса, онда түйинлер арасындағы атом сол жағдайда ноқатлық дефект түринде қалып қояды.

Френкель бойынша дефект. Вакансия менен түйинлер арасындағы атом көпшилик жағдайларда жұбы менен пайда болады (2.1 (3)-сүўретти қараңыз). Бундай жағдайда түйинде турған атом түйиннің ортасына секирип өтеді. Салыстырмалы жоқары

температуралардағы жыллылық қозғалыстары бундай секирип өтиудің тийкарғы себеби болып табылады. Соның менен бирге бундай секирип өтиўлерди сырттан ушып келген бөлекшелер де әмелге асыра алады (радиациялық дефект). Дефектлердің усындай жубын Френкель бойынша дефектлер деп атайды.

Қосымта атом. Атомлардың бири қосымтаның (кристалға киргизилген қосымта) атомы менен алмасқан болыўы мүмкин (2.1 (4)-сүўретти қараңыз). Бундай жағдайда алмастырыўшы қосымта атом деп аталыўшы дефект пайда болады. Қосымта атом түйинлер арасына кирип жайласа алады (2.1 (5)-сүўрет). Бундай дефектти ендирилген қосымша атом деп атаймыз. Бундай ендирилген атомлар әдетте ендирилген заттың атомлары кристалдың атомларынан киши болған, түйинлер орталарында бундай атомлар ушын орынлар болған жағдайларда жүзеге келеди. Водород, бор, углерод атомлары көпшилик жағдайларда ендирилген қосымша атомлардың орынларын ийелейди. Егер қосымталардың атомларының өлшемлери кристалдың атомларының өлшемлеринен үлкен болса, ендирилген атомлар кристалдың атомларын алмастырады.



2.1-сүўрет.

Ноқатлық дефектлердің типлери: 1 - вакансия; 2 – түйинлер арасындағы атом; 3 – Френкель бойынша дефект; 4 – алмастырыўшы қосымта атомы; 5 – ендирилген қосымта атомы; 6 – үлкен валентликке ийе алмастырыўшы атом.

Көпшилик жағдайларда валентлиги менен айрылатуғын қосымта атомлары вакансиялардың пайда болыўына алып келеди. Бундай жағдай KCl кристалларына Ca атомларын киргизгенде орын алады. Бундай жағдайда кристал нейтраллығын сақлайды хәм еки валентли кальция атомы бир калий атомының орнын алмастырады, ал калий атомы туратуғын орын бос орынға айланады (2.1 (6)-сүўретти қараңыз).

Ноқатлық дефекттиң энергиясы хәм оның пайда болыў итималлығы. Ноқатлық дефекттиң пайда болыўы ушын E_V энергиясы талап етиледі: вакансия жағдайында атомды кристалдың бетине шығарыў ушын керек болатуғын энергия; ендирилген атомда кристалдың бетинен атомды түйинлер арасына жайластырыў ушын керек болатуғын энергия. Бул энергияның муғдары шама менен 1 эВ шамасын курайды.

Ноқатлық дефекттиң пайда болыў итималлығы Больцман формуласының жәрдеминде есапланады:

$$P = \frac{N_d}{N_{at}} = \exp -E_V/kT . \quad (2.1)$$

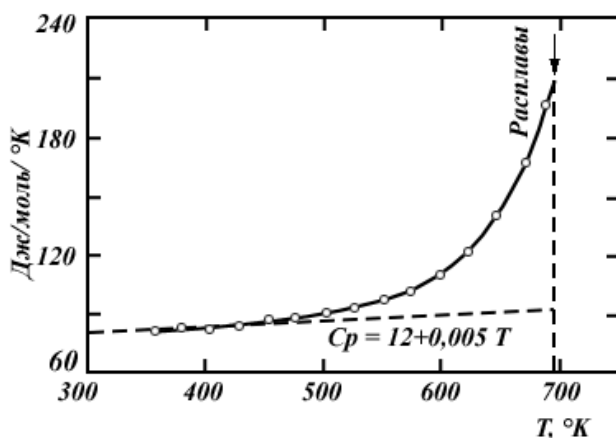
Бул формула бойынша есапланған итималлықтың мәнисиниң қандай болатуғынлығын анықлаймыз. Мейли $E_V = 1$ эВ, $T = 1000$ К болсын. Бундай жағдайда $P \approx 10^{-5}$. Төменирек температураларда дефектлердің тығызлығы экспоненциаллық нызам бойынша кемейеди хәм өжире температураларынан киши температураларда жүдә киши шамаға айланады. Бирақ төменги температураларда да ноқатлық дефектлердің концентрациясын жоқары етиўге болады. Оның ушын кристалды жоқары температураларға шекем қыздырамыз хәм буннан кейин кескин түрде салқынлатамыз (яғный кристалды шынықтырамыз, таплаймыз). Бундай жағдайда ноқатлық дефектлердің концентрациясы жоқары температуралардағы концентрацияға сәйкес келеди.

Френкель бойынша дефекттерде дефекттер жубын (вакансия менен түйинлер арасындағы атом) пайда етиү ушын зәрүрли болған энергияның мәнисин E_{Fr} арқалы белгилеймиз. Оның сан шамасы атомды кристалдың бетине шығарыу ушын керек болған энергия менен кристалдың бетинен түйинлер ортасына атомды жылыстырыу ушын керек болған энергияның қосындысынан турады. Усындай дефекттердің санының төмендегидей формуланың жәрдеминде анықланатуғынлығын көрсетиуге болады:

$$N_{Fr} = N_A N_M^2 \exp -E_{Fr}/2kT . \quad (2.2)$$

Бул аңлатпада N_A менен N_M арқалы кристалдағы түйинлер менен түйинлер арасындағы орынлар санлары белгиленген.

Температураның жоқарылауы менен дефекттердің тең салмақлық саны жоқарылайды хәм олардың жаңадан пайда болыуы ушын қосымша энергия талап етиледі. Сонлықтан айырым кристалларда балқыу (ериу) температурасына жақын температураларда қыздырыудың барысында дефекттердің саны азмаз көбейеді. Усының салдарынан жыллылық сыйымлығының кристаллық пәнжерениң тербелислерине байланысly болған моллик жыллылық сыйымлығының мәнисине шекемги өсиу эффекти бақланады. Бул жағдай 2.2-сүўретте келтирилген.



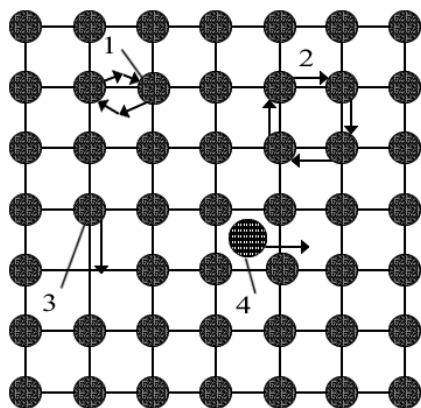
2.2-сүўрет.
Балқыу (ериу) температурасы жанында
ноқатлық дефекттердің пайда болыуының
жыллылық сыйымлығына қосатуғын
үлеси.

Ноқатлық дефекттердің диффузияға тәсири. Ноқатлық дефекттер кристаллардағы диффузияның тезлигине хәм диэлектрик кристаллардың электр өткизгишлигине ең үлкен тәсир етеді. Дәслеп кристаллардағы диффузияның мүмкин болған барлық механизмлерин көрип шығыуға тоқтаймыз.

Кристаллардың атомлар бир орыннан екінши орынға көшип өте алады (секирип өте алады, атлап өте алады). Усындай көшип өтиўлердің вариантлары 2.3-сүўретте келтирилген. Еки ямаса төрт атом бир бири менен орын алмастыра алады (2.3 (1, 2)-сүўретлер). Атомға ең аңсаты вакансияға көшип өтиў болып табылады (2.3 (3)-сүўрет). Түйинлер арасында турған атомға да (егер оның өлшемлери үлкен болмаса) бир орыннан екінши орынға көшип өтиў де қыйын емес (2.3 (4)-сүўрет). Сонлықтан қатты денелердеги диффузияның тийкарғы механизми мыналар болып табылады:

Вакансиялық механизм. Бул механизм вакансиялардың этирапында атомлардың қайтадан топарласыуы менен байланысly (2.3 (3)-сүўрет);

Түйинлер аралық механизм. Бул жағдай түйинлер арасында салыстырмалы майда атомлардың көшеўлері менен байланысly (2.3 (4)-сүўрет).



2.3-сүрөт.

Кристаллардагы диффузияның ең көп таркалган механизмдери: 1 – коңсылас атомлардың бир бири менен орын алмастырыуы; 2 – бир неше коңсылас атомлардың бир бири менен орын алмастырыуы; 3 – атомның вакансияға секирип өтүуі; 4 – түйинлер арасында турған атомлардың коңысы түйинлер арасына секирип өтүуі.

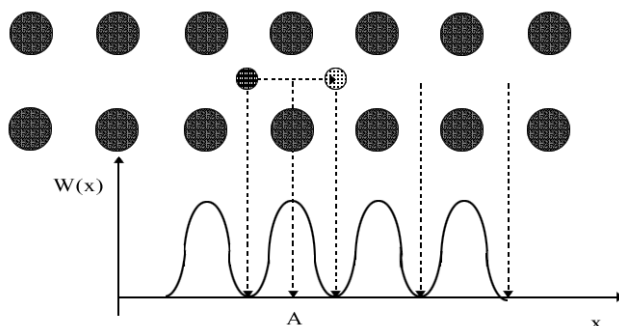
Барлык жағдайларда да атомлар потенциаллык барьер аркалы өтеди. Потенциаллык барьердин пайда болууы атомлар бир бирине жақынлағанда пайда болатуғын квантлык ийтерилис күшлери менен байланысly. Түйинлер арасында турған атомның коңсылас түйинлердин арасына көшип өтүин таллау ушын ең эпийайы жағдайды карап өтемиз. 2.4-сүрөтте түйинлер арасында турған атомның энергиясының x координатасынан ғарезлиги көрсетилген. Усындай көшиу ушын зәрүрли болған энергияның шамасы активация энергиясы деп аталады хәм E_a аркалы белгиленеди. Активация энергиясының мәниси әдетте жыллылык энергиясының ($\approx kT$) орташа мәнисинен әдеуір үлкен. Бундай уақыяның итималлығы жүдә киши хәм Больцман формуласы менен бериледи:

$$P = P_0 \exp(-E_a / kT) \quad (2.3)$$

Сонлықтан кристаллардагы атомлар узак уақытлар дауамында өзлериниң тең салмаклык ауҳаллары этирапында базы бир ν жийилиги менен тербеледи хәм жыллылык тербелислериниң энергиясы тосыннан активация энергиясынан үлкен болған жағдайларда жаңа орынларға секирип (көшип) өте алады. Усындай көшип өтүулердин жийилигин f аркалы белгилеймиз хәм бул шама былайынша анықланады:

$$f = \nu P. \quad (2.4)$$

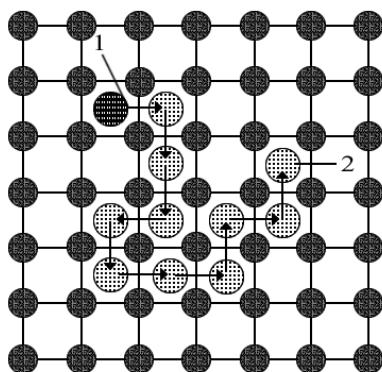
Солай етип қатты денелердеги атом сийрек болатуғын секириулер жолы менен бир орыннан a қашықлығындағы екінши орынға f жийилиги менен көшеди. Бул жағдай 2.5-сүрөтте келтирилген.



2.4-сүрөт.

Түйинлер арасында турған атомның энергиясының x координатасынан ғарезлиги. Атомның энергиясы түйинлер арасында минималлык мәнисине, ал A жағдайларында максималлык мәнисине ийе.

Жокарыда келтирилген моделдин жәрдеми менен параметри a болған эпийайы кублык пәнжере ушын түйинлер арасында турған атомлардың диффузия коэффициентин есаплаймыз. Мейли берилген түйинлер арасындағы орыннан коңсылас сондай орынға көшиудин жийилиги f шамасына тең болсын.



2.5-сүрөт.
Эпиўайы (примитивлик) кублық пәнжередеги
түйинлер арасында турған атомның
диффузиясының схема түріндегі сүўрети.

Фиктиң диффузия нызамын еске түсиремиз. Бул нызам S майданынан өтип атырған атомлар санының ағымы dN/dt шамасын хәм концентрациялар градиенти dC/dx шамасын бир бири менен байланыстырады:

$$\frac{dN}{dt} = -DS \frac{dC}{dx} . \quad (2.5)$$

D параметри диффузия коэффиценти деп аталады. Оның мәніси диффузияға ушырайтуғын атомға хәм усы атомлар диффузияға ушырайтуғын затқа байланысly. Кристалдағы $[100]$ бағытын, оған перпендикуляр хәм пәнжерениң түйинлери аркалы өтиўши S тегисликти (2.6 а сүўретте дөңгелеклер менен белгиленген), усы тегисликтиң оң хәм шеп тәреплеринде турған және 1 хәм 2 аркалы белгиленген, S тегислигине параллел болған ең жақын еки тегисликти қараймыз (квадратлар менен белгиленген). 1 хәм 2 тегисликлери арасындағы қашықлық (бул қашықлық қоңсылас түйинлер арасындағы орынлар арасындағы қашықлыққа тең) a шамасына тең («көшип өтиў узынлығы»). Мейли 1 тегислигиниң S түйинлер арасындағы N_1 атом болсын, 2 тегислигиниң тап сондай участкасында N_2 атом жайласқан деп есаплайық (2.6 а сүўретти қараңыз).

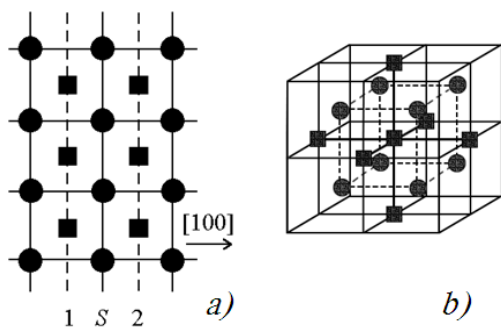


Рис. 2.6.
Кублық примитивлик пәнжередеги
түйинлер менен түйинлер арасындағы
орынлардың жайласыўлары (а). Усы
пәнжереге жақын жайласқан түйинлер
арасындағы орынлар (б).

Енди x ноқатларындағы диффузия нызамына кириўши түйинлер арасындағы атомлардың сәйкес концентрациялары болған C_1 хәм C_2 шамаларының мәніслерин де есаплаў мүмкин.

$$C_1 = N_1 / \Delta V = N_1 / (Sa); \quad C_2 = N_2 / \Delta V = N_2 / (Sa) . \quad (2.6)$$

теңликлериниң орынланатуғыны өз-өзинен түсиникли. Δt ўақыты ишинде S бети аркалы шеп тәрептен оң тәрепке қарай кесип өтетуғын атомлар саны ΔN_1 шамасын есаплаймыз. Биринши тегисликтеги хәр бир атом ең жақын жайласқан алты орынның биреўине көшип өте алады (2.6 б сүўретке қараңыз). Олардың тек биреўи ғана сайлап алынған орайлық тегисликти кесип өтеди. Бундай жағдайда

$$\Delta N_1 = (1/6) f N_1 \Delta t \quad (2.7)$$

Δt уақыты ишінде S беті арқалы өтетұғын ΔN_2 атомлар санын да тап сондай жоллар менен есаплаймыз:

$$\Delta N_2 = (1/6) f N_2 \Delta t \quad (2.8)$$

Тегислик арқалы өтетұғын атомлардың улығымалық саны мынаған тең болады:

$$\Delta N = \Delta N_1 - \Delta N_2 = (1/6) f (N_1 - N_2) \Delta t = (1/6) f \Delta t (C_1 - C_2) S a \quad (2.9)$$

$C_1 - C_2 = - dC/dx$ а екенлигин есапқа алсақ төмендегиге ийе боламыз:

$$\Delta N / \Delta t = -(1/6) f ((dC/dx) a) S a \quad (2.10)$$

(2.10) менен (2.5) ти салыстырып диффузия коэффициентин аламыз:

$$D = f a^2 / 6 \quad (2.11)$$

Тап усындай схема тийкарында 2.3-сүўретте келтирилген басқа да жағдайлар ушын диффузия коэффициентин есаплаў мүмкин. Сол сүўреттеги 1- хәм 2- жағдайлардағы активация энергиясының мәнислери 3- хәм 4-жағдайлардағы активация энергиясының мәнислеринен үлкен болады. Атомлар вакансияның этирапында орынларын алмастырған жағдайындағы активация энергиясының мәниси оннан да үлкен.

2.3-сүўретте келтирилген диффузиялардың барлығы ушын да диффузия коэффициенти менен температура арасында төмендегидей экспоненциаллық байланыс орын алады:

$$D = D_0 \exp(-E_a / kT) \quad (2.12)$$

D_0 менен E_a параметрлериниң мәнислери хәр бир жуп ушын (диффузияланыўшы элемент – диффузия кубылысы жүретуғын зат) ушын экспериментте өз алдына анықланады. Нәтийжелер 2.1-кестеде берилген.

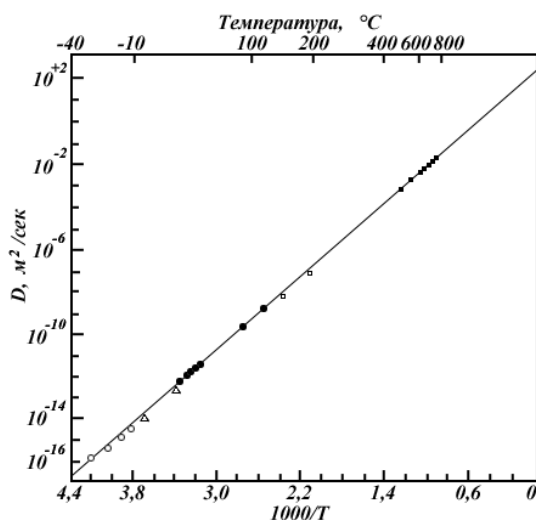
2.1-кесте.

Базы бир диффузияланыўшы элемент – диффузия кубылысы жүретуғын зат ушын D_0 хәм E_a параметрлери

Элементы	$D_0, \text{м}^2/\text{с}$	$E_a, \text{эВ}$
Ge ишиндеги Ge	$7,8 \cdot 10^{-4}$	3,0
Ge ишиндеги As	$6,0 \cdot 10^{-4}$	2,5
Ge ишиндеги P	$2,0 \cdot 10^{-4}$	2,5
Ge ишиндеги In	$6,0 \cdot 10^{-6}$	2,5
Ge ишиндеги B	$4,0 \cdot 10^{-4}$	4,5
Al ишиндеги Cu	$2,3 \cdot 10^{-4}$	1,45
Cu ишиндеги Cu	$2,0 \cdot 10^{-5}$	2,05
Cu ишиндеги Zn	$3,4 \cdot 10^{-5}$	1,98

Fe (КОК темир) ишиндеги С	$2,0 \cdot 10^{-5}$	0,9
U ишиндеги U	$1,8 \cdot 10^{-7}$	1,20

2.7-сүүретте углеродтың КОК темирдеги диффузиясы коэффициентинің температурадан ғәрезлиги келтирилген. Бул сүүретте 2.12-аңлатпаның дәл орынланатуғынлығы көринип тур.



2.7-сүүрет.

Углеродтың КОК темирдеги диффузиясы коэффициентинің температурадан ғәрезлиги.

Жоқарыда көріп өтилген моделдің жәрдемінде атомның $t = \frac{N}{t_1} = N/f$ ўақыты аралығында жүріп өтетуғын орташа жолы болған x^2 шамасының мәнісін есаплаў мүмкін. Бул жерде $t_1 = 1/f$ арқалы биринен соң бири болатуғын еки көшіў арасындағы орташа ўақыт белгиленген. Буның ушын x^2 шамасын бурынғы көшіўлерден пүткиллей ғәрезсиз деп есаплаймыз. Бундай жағдайда

$$\langle x^2 \rangle = a^2 N / 3 = a^2 f t / 3 = a D 2 t \quad (2.13)$$

формуласын аламыз. Бул формула D шамасын экспериментте анықлаў ушын пайдаланылады.

Қатты денелердеги диффузияны ҳәзирги ўақытлары «тамға салынған» атомлар усылын пайдаланып эффективли түрде үйренеди. Бундай изертлеўлерде затлардың бетине радиоактивли «тамға салынған» атомлар «отырғызылады». Буннан кейин алынған үлги берилген температурада «тамаға салынған» атомлардың 0,3-1 мм тереңликке өтетуғындай ўақыт ишинде услап турылады. Буннан кейин үлгиниң активлиги өлшенеди. Бул қатлам ысқылап тегислеў жолы менен жоқ етилгеннен кейин активлик қайтадан өлшенеди. Бундай операцияларды бир неше рет қайталайды. Усындай жоллар менен «тамға салынған» атомлардың өтиўиниң орташа тереңлиги хәм берилген температурадағы D диффузия коэффициентин есаплайды. Хәр қыйлы температураларда тәжирийбелер сериясын өткеріў жолы менен (2.12)-формуладағы D_0 менен E_a параметрлериниң мәніслери анықланады.

(2.3)- хәм (2.4)-формулалар және 1.1-кестедеги мағлыўматлар жәрдемінде хәр қыйлы температуралардағы атомлардың көшіў жийиликлерин баҳалаў мүмкін. Мысалы альфа-темирде 1800 К температурада углерод атомы 1 секундта 10^{11} рет көшеди. Өжире температурасында болса онлаған секундта 1 рет көшеди. Солай етип диффузия сезилерликтей орынды балқыў температурасына жақын температураларда ийе бола алады екен. Никели ямаса храмные өжире температураларында темирде дерлик етпейтуғынлығын белгили. бирақ 1000-1300 К температураларда бул процесс әдеўир тезлениўди. Соның ушын темирде исленген буйымлардың бетине қозғаўшы никель ямаса

хром қатламы жоқары температураларда диффузияны жәрдемінде пайда етеди екен. Ярым өткізгішке хәр қандай араласпалары киргизиў (легирование полупроводника, ярым өткізгішти легируй) ушын қысқа ўақытлар ишинде қыздырыўлар интеграллық схемаларды алыў ушын қолланылады: шаңландырыў жолы менен ярым өткізгіштин бетиниң белгили бир участкаларына түсирилген араласпаларды (легируйши араласпаларды) бир неше жүз градусқа қыздырыў жолы менен диффузиялайды хәм оны легирулейди. Нәтийжеде кристалда p хәм n типиндеги ярым өткізгішлердин қурамалы областлары пайда болады.

Дефектлердин орын алмастырыўының есабынан жүретуғын диффузия затлардағы дефектлердин санының кем-кемнен өзгериўиниң баслы механизми болып. (2.1)-формула бойынша заттың балқыў температурасынан әдеўир төмен температураларда дефектлердин пайда болыў итималлығы жүдә киши. Бирақ дефектлердин саны әдетте көп есе үлкен болады. Себеби олар жоқары температураларда пайда болады: кристалдың өсиў барысында ямаса жоқары температурадан шынықтырыў барысында. Дефектлердин тығызлығы кем-кемнен киширейеди. Бул кубылыс түйинлер арасында турған атомлардың вакансияларға өтиўиниң (буны дефектлердин рекомбинациясы деп атайды) ямаса дефектлердин кристалдың бетине ямаса кристалдағы дәнешелер арасындағы шегараға өтиўиниң салдарынан жүзеге келеди. Айырым жағдайларда ноқатлық дефектлер болған қосымта топарласады хәм жаңа кристаллық фаза областларын пайда етеди. Бул процесслердин барлығы да дефектлердин емлениўи деп аталады.

Ноқатлық дефектлердин электр өткізгішликке тәсири. Егер зоналық теория тийкарында есаплаўлар өткерилсе ҳақыйкый кристаллардың электр өткізгішлиги идеал кристал-диэлектриктиң электр өткізгішлигинен әдеўир жоқары болып шығады. Бул жағдай төмендегидей еки себепке байланыслы:

Бириншиден донорлық хәм акцепторлық қосымталар диэлектриктиң электр өткізгішлигин жоқарылатады (тап ярым өткізгішлердеги сыяқлы).

Екиншиден ионлық кристаллардың вакансиялардың тусынан ионлардың зарядты алып жүриўиниң жеңиллениўи менен байланыслы. Бул жағдай схема түринде 2.3-сүўретте келтирилген. Егер 3 вакансияда оң зарядланған ионның турыўы керек болған болса хәм ол E электр майданында жайласқан болса, онда бул вакансияға оң зарядланған ионның E ниң бағытында секирип өтиўиниң итималлығы E ге қарама-қарсы бағытта секирип өтиўиниң итималлығынан жоқары болады. Оң зарядланған ионлар орташа сыртқы электр майданының бағытында қозғалады хәм электр өткізгішликке тәсир етеди. Тап сол сыяқлы терис зарядланған ионға E бағытында қозғалғанға қарағанда E ниң кери бағытында қозғалған утымлырақ. Соның ушын терис зарядланған ионлар E ниң бағытына қарама-қарсы бағытта қозғалады хәм электр өткізгішликке өзиниң үлесин қосады. Еки жағдайда да вакансия кристал бойынша орын алмастырып зарядтың көшиўин тамийинлейди. Бирақ ҳақыйқатында зарядты ионлар тасыйды хәм олар (оң хәм терис зарядланған ионлар) вакансиялардың этирапында хәр қыйлы болып топарласады. Бундай жағдайларда зарядты көшириўдин вакансиялық механизми ҳаққында гәп етеди (биз төменде ярым өткізгішлердин электр өткізгішлигиниң тесиклешик механизма ҳаққында гәп етемиз). Бундай механизм бойынша зарядларды көшириў ушын әдеўир киши потенциаллық барьерден өтиўди талап етеди. Ал электронды ионнан ионға өткерий ушын үлкен потенциаллық барьерден өтиў керек болады.

Түйинлер арасында турған ион да (4 арқалы белгиленген, 2.3-сүўретти қараңыз) көбинесе сырттан түсирилген электр майданы E ниң бағытында жылысады (бир орыннан екинши орынға секирип өтеди).

Ноқатлық дефектлердин кристаллардың реңине тәсири. Қосымта атомлар кристаллардың реңин өзгертеди. Мысалы алмастырыў қосымталары (примеси замещения) болған хром ионлары Al_2O_3 кристалларының қызыл реңин тәмийинлейди (рубин

кристаллы алынады), ал Al_2O_3 кристалларына киргизилген титан ионлары оларға көк рең береді (сапфир кристаллы алынады).

Ноқатлық дефектлерди үйрениу ұсыллары. Көлем бирлигиндеги вакансиялардың санын анықлау үшін әдетте төмендегидей екі нәтиже салыстырылып көриледі: бириншиси рентгенографиялық ұсыллардың жәрдемінде алынған пәнжере параметриниң дәл мәніси, екіншиси заттың тығызлығын дәл анықлау (кристалдың массасының көлемине қатнасының шамасын дәл анықлау). Вакансиялардың кристаллық пәнжерениң параметрин азмаз ғана, бирақ кристалдың көлемин сезилерликтей өзгертетуғынлығы белгили. Усындай жоллар менен жоқары емес дәлликте кристалдың көлем бирлигиндеги түйинлер арасындағы атомлардың санын анықлау мүмкин. Себеби түйинлер арасында жайласқан атомлар заттың тығызлығын әдеуір үлкейтеди, ал кристаллық пәнжерениң параметриниң шамасын аз шамаға өзгертеди. Егер кристалда вакансиялар да, түйинлер арасында жайласқан атомлар да бар болатуғын болса, онда жоқарыда баянланған ұсылдың жәрдемінде кристалдың көлем бирлигиндеги вакансиялар саны менен түйинлер арасындағы атомлар санының айырмасын бахалауға болады. Ал Френкель бойынша дефектлердиң тығызлығын қарап өтилген ұсылдың жәрдемінде анықлау мүмкин емес.

Жоқарыда қарап өтилген электр қарсылығы менен диффузияны өлшеу, соның менен бирге хәр қыйлы электромагнит нурларының жутылуы коэффициентлериниң мәнісин өлшеу кристаллардағы ноқатлық дефектлерди үйрениуге мүмкиншилик береді.

Мәселелер.

1-мәселе. Егер вакансияның пайда болыуы үшін зәрүрли болған энергияның шамасы 1 эВ қа тең болса 300 К хәм 900 К температураларындағы вакансиялардың тең салмақлық концентрацияларын табыңыз.

Көрсетпе. (2.1)-формуладан пайдаланыу керек.

2-мәселе. 3 саат дауамында 300 К хәм 1500 К температураларда темирдің бетлик қатламына углерод атомларының қандай тереңликке өте алатуғынлығын бахалаңыз. Углеродты өз ишине алатуғын орталықты темирдің бетине тийип тур деп есаплау керек. Диффузия коэффициентиниң мәнісин 2.1-кестеде келтирилген мағлыұматлар бойынша есаплау талап етиледі. Шынықтырыу менен жуу мақланатуғын тап усндай операция бети қатты, ал өзегі жумсақ деталларды алыу үшін қолланылады. КОК темирдің (көлемде орайласқан кублық темирдің) пәнжересиниң параметри 0,288 нм шамасына тең.

Көрсетпе. (2.12)- хәм (2.13)-формулардан пайдаланыу керек.

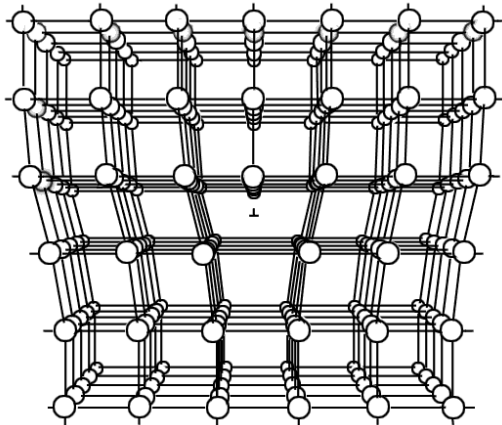
2.2. Дислокациялар

Дислокациялар деп аталатуғын кристаллық пәнжерениң сызықлы дефектлерин толығырақ үйрениу олардың барлық конструкциялық кристаллық материаллардың беккемлиги менен пластиклигине үлкен тәсир ететуғынлығына байланысly. Дефектлердиң усы типин есапқа алмаған кристаллардың беккемлиги теориялары хәтте монокристаллық хәм поликристаллық материаллардың әмелде бақланып жүрген механикалық қәсийетлерин түсиндирип бере алмады.

Дислокациялардың типлери. Дислокацияларды шетлик хәм винтлик деп екиге бөледі. Бирақ экспериментлерде бақланып жүрген дислокациялар тек айырым жағдайларда ғана сол дислокациялардың моделлик типлериниң екеуиниң бири болыуы мүмкин. Себеби әдетте дислокациялар еки типтиң де элементлерине ийе болады. Көргизбелилик үшін моделлик дислокацияларды үйрениуді баслаймыз. Эпиұайылық үшін эпиұайы кублық пәнжерени қараймыз. Алынған нәтижелер азмаз өзгерислер менен басқа типтеги пәнжерелер үшін да дурыс болады.

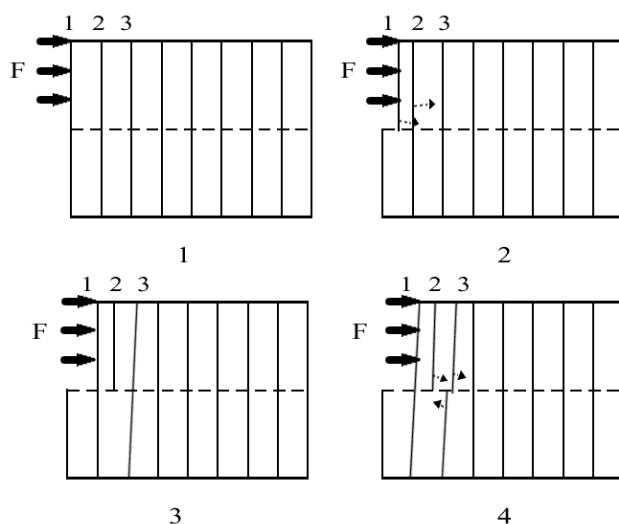
Шетлик дислокация хәм оның этирапында атомлардың жайласыу схемасы 2.8-сүүретте эпиұайы кублық пәнжере мысалында келтирилген. Бул сүүретте 100 типіндеги

қоңсылас толық тегисликлер арасындағы «ярым тегислик» көрсетілген. Бул пүтин тегисликлердің атомлары сүўреттің төменинде бир бири менен әдеттегидей болып байланысқан, бирақ ярым тегисликтің төменги шетинде жүдә күшли деформациялар пайда болған. Артық болған ярым тегисликтің төменги шетин шетлик дислокация сызығы, ал айырым жағдайдарда эпиўайы түрде шетлик дислокация деп атайды. Усы жағдайға байланыслы дислокацияларды сызықлы дефектлерге жатқарады. Бул сызық артық ярым тегисликтің шети бойынша жайласады. дислокациялардың этирапындағы күшли деформацияға ушыраған областтың өлшемлери шама менен кристаллық пәнжерениң 2-3 дәўирине тең болады. Үлкенирек қашықлықларда майысыўдың шамасы киши ҳәм оларды серпимлилик теориясы тийкарында тәриплеўге болады.

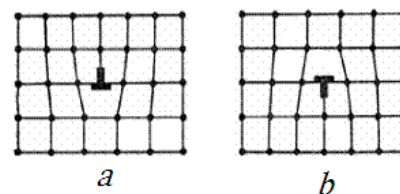


2.8-сүўрет.
Шетлик дислокация этирапындағы
атомлардың жайласыў схемасы.

Шетлик дислокациялар көбинесе кристалларды 2.9-сүўретте келтирилгендей етип деформацияғанда пайда болады. Дислокациялар көбинесе жылжыў деформацияларында жылжыў тегисликлери деп аталатуғын тығыз жайласқан атомларға ийе тегисликлерде пайда болады. Биз эпиўайы кублық пәнжерени ҳәм оның $\{100\}$ тегислигин қараймыз. КОК кристалларда $\{110\}$, $\{112\}$ ҳәм $\{123\}$ тегисликлериниң, ал ҚОК кристалларды $\{111\}$ тегисликлериниң жылжыў тегисликлери екенлигин атап өтемиз. Егер кристалға F күши менен тәсир етсек (2.9 (1)-сүўретке қараңыз), онда (100) тегислиги пунктир менен белгиленген орында «жыртылады» (2.9 (2)-сүўрет), буннан кейин 1 тегислигиниң жоқарғы ярымы 2 тегисликтің төменги ярымы менен тутасады (2.9 (3)-сүўрет). Ал 2 тегислигиниң жоқарғы ярымы «артық» тегислик болып қалады. Егер кристалға тәсир етиўди даўам етсек, онда келеси тегислик «жыртылады», буннан кейин 2 тегислигиниң жоқарғы ярымы 3 тегислигиниң төменги ярымына қосылады (2.9 (4)-сүўрет). Процесс тап усындай избе-изликте даўам етеди. Солай етип кристалда артық (100) ярым тегислиги пайда болады. Ол F күшиниң тәсиринде жылжыў тегислиги бойынша қоңсы тегисликлердің «жыртылыўының» есабынан қозғала алады. Жаңа тегисликтің жыртылыўы дислокация сызығының қасында болатуғынлығын аңғарыўымыз шәрт. Себеби кристаллық пәнжерениң майысыўы тап сол орында максималлық мәниске ийе (2.8-сүўрет).



2.9-сүрөт. Кристалдың жылжыу деформациясының барысында шетлик дислокацияның пайда болууының хэм қозғалуының схемасы.

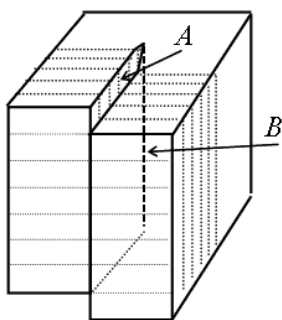


2.9- а хэм b сүрөтлер.
Оң хэм терис белгиге ийе дислокациялар
(оң хэм терис дислокациялар).

Шетлик дислокацияларды шәртли түрде оң хэм терис шетлик дислокациялар деп екиге бөледі. Оң белгиге ийе дислокацияда (2.9 а сүрөт) артық ярым тегислик жоқарыда жайласқан. Бундай жағдайда кристалдың жоқарғы бөлегінде қысыушы кернеу, ал төменинде созыушы кернеу орын алады. Терис дислокация (2.9 b сүрөт) жағдайында кристалдың жоқары бөлегінде созыушы кернеу, ал төменги бөлегінде қысыушы кернеу орын алады. Сүрөтте оң хэм терис дислокациялардың белгилениулері де келтирилген. Еки дислокацияның бир биринен тек 180° қа айырмасының бар екенлигин аңғару қыйын емес. Сонлықтан тек бир дислокация бар жағдайда оның белгиси хәкқында гәп етиудің кереги жоқ. Егер дислокацияның қасында басқа дислокация жайласқан болса, онда дислокациялардың белгисин айтыу зәрүрлиги пайда болады. Дислокациялар арасындағы серпимли тәсирлесіу күшлери дислокацияның белгисине байланысly: бирдей белгиге ийе дислокациялар бир бири менен ийтериседи, ал хәр қыйлы белгиге ийе бир бири менен тартысады.

Винтлик дислокация. Әпиуайы кублық кристал ушын винтлик дислокация схема түрінде 2.10-сүрөтте келтирилген. Бул сүрөтте А тегислигинің шеп тәрәпинде жайласқан атомлар өзлеринің орынларында қалған, ал оң тәрәпиндеги атомлар оң тәрәптегиге салыстырғанда төменге қарай бир тегисликлер арасындағы қашықлыққа жылжыған. Усының салдарынан В сызығының этирапында күшли деформация пайда болады. А ярым тегислигинің хэм қалған ярым тегисликтің шегарасы арқалы өтиуши В сызығын винтлик дислокация деп атайды. 2.10-сүрөтте көринип турғанындай горизонт бағытындағы деформацияланған (001) типіндеги тегислик бойынша В сызығын бир рет айланып шықса кристаллық пәнжерениң 1 дәуирине жоқарыға көтерілиуге, ал В сызығының дөгерегинде бир неше рет айланып шықса пәнжерениң бир неше дәуирине көтерілиуге болатығынлығын көремиз. Көтерілиу винтлик баспалдақ ямаса винтлик автожол менен көтерілиуге усайды. Усыннан винтлик дислокация атамасы келип шыққан. Винтлик дислокацияда барлық (010) тегисликлери бөлекленген болмай шығатуғынлығын аңғарамыз. Себеби олардың барлығы да көшери В болған бир қурамалы винтлик бетке айланған. 2.10-сүрөтте келтирилген бет В сызығының этирапында саат тилинің бағытына қарама-қарсы бағытта қозғалғанда көтерілиуді тәмийинлейди (егер жоқарыдан қарасақ). Егер В сызығының этирапында саат тилинің қозғалуы бағытында қозғалғанда да жоқарыға көтерілиуді тәмийинлейтуғын бетти қуруы мүмкин (буның ушын 2.10-сүрөтте келтирилген кристалдың оң тәрәпин төменге емес, ал жоқарыға қарай

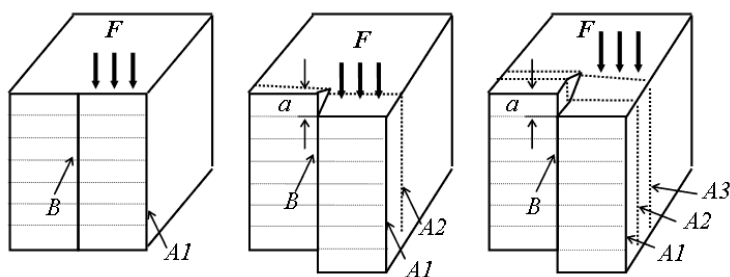
жылжытыу керек). Сонлықтан винтлик дислокациялар оң винтлик хәм терис винтлик бола алады.



2.10-сүүрет.

Винтлик дислокацияның этирапында атомлык тегисликлердин жайласыуының схемасы.

Винтлик дислокация кристалды 2.11-сүүретте көрсетилгендей етип деформациялағанда пайда болады. Эпиұайы кублық пәнжередеги $\{100\}$ типиндеги тегисликти қараймыз. Егер кристалға F күши менен тәсир жасасақ (2.11 а сүүрет), онда $A1$ тегислиги стрелка менен белгиленген орында B сызығы бойынша «жыртылады». Буннан кейин $A1$ диң төменги хәм жоқарғы ярымлары пәнжерениң 1 дәуирине жылжыу менен биригеди (2.11 б сүүрет). Егер кристалға тәсир етиўди даўам ете берсек, онда келеси тегислик «жыртылады», буннан кейин $A2$ тегислигиниң төменги хәм жоқарғы бөлимлери жылжыу менен байланысады (2.11 в сүүрет). Процесс тап усындай избе-изликте даўам етеди. Солай етип кристалда винтлик дислокация пайда болып, ол кристалға тәсир етиўдиң ақыбетинде тегисликлердин қоңсы ярымларының «жыртылыуы» хәм «биригиўлериниң» себебинен жылжыу тегислиги бойынша қозғалады. Жаңа тегисликтиң «жыртылыуы» тек дислокация сызығының қасында жүзеге келетуғынлығын аңғарамыз. Себеби сол орында кристаллық пәнжерениң майысыуы ең үлкен мәниске ийе болады (2.11-сүүретке қараңыз).



2.11-сүүрет.

Кристалдың жылжыу деформациясындағы винтлик дислокацияның пайда болыуы хәм жылжыуы.

Бюргерс векторы. Винтлик дислокацияны алыу ушын кристалдың үстинен төмендегидей моделлик операция жүргиземиз (2.12 а сүүретти қараңыз). Кристалда пәнжерениң түйинлери арасынан өтетуғын (100) тегислигинде A ярым тегислиги бойынша қыялымызда кесим кесемиз. Буннан кейин кесимниң оң тәрепиндеги атомларды бир тегисликлер арасындағы қашықлыққа төменге қарай жылжытамыз хәм A арқалы өтиўши байланыслар менен байланыстырамыз. Кристалдың «шеп» тәрепине салыстырғанда «оң» тәрепиниң аўысыу векторы B винтлик дислокацияның Бюргерс векторы болып табылады. Оны b арқалы белгилеймиз. Винтлик дислокацияның Бюргерс векторының усы дислокацияның өзине параллел екенлиги көринип тур.

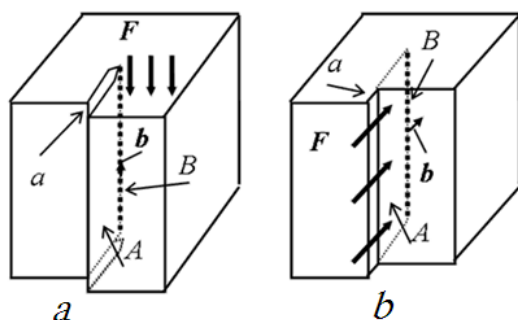


Рис. 2.12.

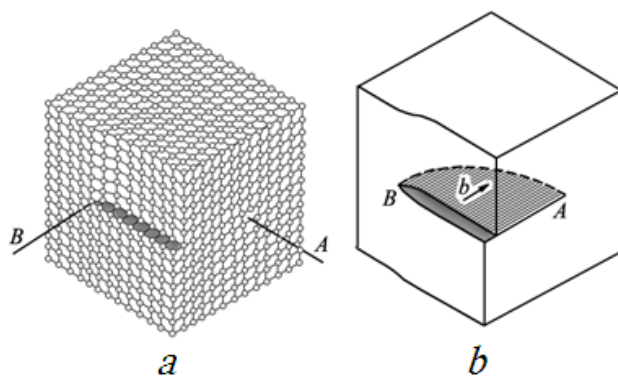
Винтлик хэм шетлик дислокациялардағы кристалдың атомларының аўысыуының схемасы.

b арқалы Бюргерс векторы белгиленген.

Тап сондай жоллар менен шетлик дислокацияны да алыуға болады. Буның ушын кристалдың «оң» тәрепин А бети бойынша «бизден арман қарай» жылжыту керек хэм В дислокациясы сызығынан басқа орынлардағы байланыстарды бириктириу керек болады (2.12 а сүүрет). Кристалдың бул бөлиминің аўысыу векторы Бюргерс векторы болып табылады. Шетлик дислокацияның Бюргерс векторының дислокацияның өзине перпендикуляр екенлиги көринип тур.

Аралас типтеги дислокациялар. 2.13-сүүретте А хэм В нокатларын тутастырыушы аралас типтеги қыйсық сызықлы дислокацияға мысал келтирилген. А нокатында атомлардың жайласуы шетлик, ал В нокатында винтлик дислокацияға сәйкес келеди. Бундай дислокация b бағытында тәсир ететуғын F күшінің тәсирінде жүретуғын бир текли емес жылжыу деформациясының ақыбетінде пайда болады (2.13-сүүретти қараңыз). Тәсир етиуди даўам етсек А - В дислокациясы жылжыйды хэм штрихланған областтың майданы үлкейеди. Тап усындай аралас типтеги курамалы дислокациялар кристалларда жийи ушырасады.

Дислокациялардың тығызлығы. Дислокацияларды бақлау усыллары. Дислокациялардың тығызлығы кристалдың ишинде алынған майданы бир бирлик болған бетти кесип өтетуғын дислокациялардың санына тең. Бул шама кристалдың көлеминің бир бирлигиндеги барлық дислокациялардың узынлығына тең. Дислокациялардың тығызлықтарының жийи ушырасатуғын мәнислери хэм дислокациялардың усындай тығызлықтарын үйрениу ушын қолланылатуғын усыллар 2.2-кестеде берилген.



2.13-сүүрет.

Аралас типтеги қыйсық сызықлы дислокация.

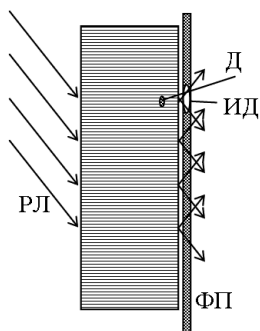
2.2-кесте.

Дислокациялардың тығызлықтарының мәнислери хэм оларды бақлау усыллары

Дислокацияларды үйрениу усылы	Үлгинің қалыңлығы, мкм	Дислокациялардың сүүретинің кеңлиги, мкм	Дислокациялардың максималлық тығызлығы (1 см ² майдандағы)
Электрон	10^0 - 10^{-1}	10^{-2}	10^{11} - 10^{12}

микроскопиясы			
Рентген топографиясы (кристалл арқалы өтіуші толқынлардағы)	10^2-10^3	5	10^4-10^5
Рентген топографиясы (кристалдың бетинен шашыраған толқынлардағы)	2-50	2	10^6-10^7
Оптикалық микроскопия (ойып нағыслау ойықтары бойынша)	кәлеген қалыңлықтағы үлгі	0,3-0,5	$10^{-6}-10^{-7}$

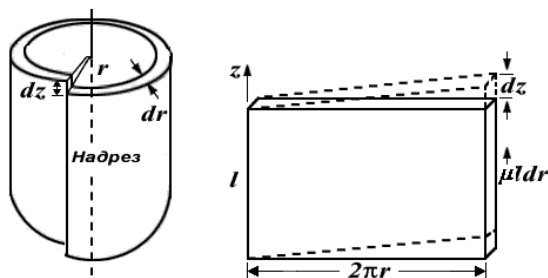
Электрон микроскоптарының жәрдеминде кәлеген тығызлықтағы дислокацияларды бақлау мүмкін. Қурылысы жеткиликли дәрежеде жетилискен кристаллардағы дислокацияларды рентген топографиясының жәрдеминде бақлайды. Дислокацияларды бақлайтуғын усыллардың барлығы да дислокациялардың өзлерин «көрмейди», ал дислокация этирапындағы кристаллық пәнжерениң майысыуын «көреді».



2.14-сүүрет.

Рентген топографиясы жәрдеминде монокристалдағы дислокацияның сүүретин пайда этиу схемасы (кристалл арқалы өтіуші толқынлардағы рентген топографиясы).

Дислокациялардың энергиясы. Дислокацияға усы дислокация пайда еткен кристаллық пәнжересиниң майысыу энергиясы байланысly. Бул энергияның шамасын дислокациядан қашықласқан тутас орталық жақынласыуын (приближение) хәм дислокацияларға жақын қашықлықлардағы бир бири менен тәсирлесіуші атомлар моделин қолланып есаплауға болады.



2.15-сүүрет.

Винтлик дислокация жанындағы кристалдың деформациялыныуы.

Бундай есаплауды винтлик дислокациялар ушын орынлаған аңсат. Кристалды тутас изотроп орталық деп есаплаймыз. 2.15-сүүретте винтлик дислокация жанындағы серпимли деформациялар картинасы көрсетилген. Бундай жағдайда дислокацияның этирапындағы кеңісликти ишки радиусы r хәм сыртқы радиусы $r + dr$ болған жуқа

цилиндрлік қатламларға бөлеміз. Ярым тегіслікте хәр бір қатлам кесілген хәм Бюргерс векторы b шамасына жылжыу менен байланысқан. Бундай жағдайда хәр бір қатлам $\varepsilon = b/2\pi r$ шамасына жылжыу менен деформацияланған деп есаплай аламыз (көрсетпелилік ушын 2.15-сүүретте хәр бір цилиндрди бурауға хәм пайда болған жылжыу деформациясының шамасын анықлауға болады). Жылжыу деформациясының энергиясының тығызлығын салыстырмалы деформация ε хәм жылжыу модули μ арқалы төмендеги формуланың жәрдемінде табыуға болады:

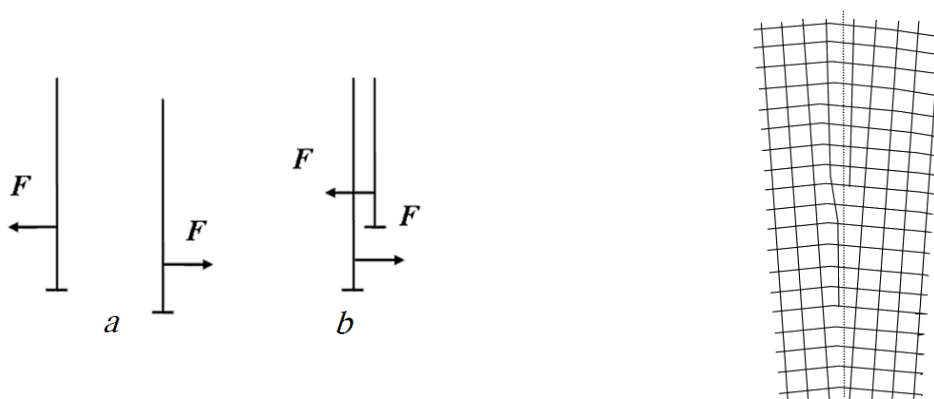
$$w = \mu \varepsilon^2 / 2 = (\mu/2)(b/2\pi r)^2 \quad (2.14)$$

Егер бул формуланы хәр бір цилиндрдин көлемине көбейтсек хәм r диң мүмкин болған мәнислери бойынша интегралласак, онда узынлығы l ге тең винтлик дислокацияның энергиясын бахалау мүмкин.

$$U = (b^2 l \mu / 4\pi) \ln(R_0 / r_0) \quad (2.15)$$

Бул формулада r_0 ди шама менен пәнжерениң дәуирине тең деп есаплауға болады. R_0 болса дислокациялар арасындағы орташа қашықлық. Оның мәниси пәнжере дәуириниң мәнисинен шама менен 100-200 есе үлкен. (2.15)-формулада үлкен дәллик талап етилмейди. Себеби R_0/r_0 қатнасы логарифм ишинде тур хәм биз нәтийжени тек энергияның мәнисин бахалау ушын иследик. Жоқарыдағы (2.15)-формулада дислокацияның «ядросының» энергиясы есапқа алынбаған. «Ядро» да болса кристаллық пәнжере күшли майысқан. Оның энергиясын есаплау ушын санлы усыллар талап етиледі. (2.14)-формулаға әмелде жийи ушырасатуғын $b = 2,5 \cdot 10^{-10}$ м; $\mu = 10^{11}$ Н/м²; $r_0 = 5 \cdot 10^{-10}$ м хәм $R_0 = 200 \cdot 10^{-10}$ м мәнислерин қойып узынлық бирлигине сәйкес келетуғын винтлик дислокацияның энергиясының $\frac{U}{l} = 4 \cdot 10^{-9}$ Дж/м, ал хәр бір атом арасындағы қашықлық ушын (яғный хәр бір атом ушын) $\frac{U}{b} = 10^{-18}$ Дж/атом шамасына тең болатуғынлығын көремиз. Бул үлкен шама хәм атомлардың жыллылық тербелислериниң энергиясынан әдеуір үлкен. Сонлықтан дислокация жыллылық қозғалысларының тәсиринде пайда бола алмайды. Дислокацияларды пайда етиу ушын тең салмақлы емес процесслер (мысалы кристалларды деформациялау) керек.

Дислокациялардың бир бири менен тәсирлесіуі. Дислокация деформациялар майданын пайда етеди хәм усы майдан арқалы басқа дислокацияларға тәсир етеди. Мысалы 2.16 (а) сүүретте көрсетилген дислокациялар бир бирин ийтериуі, ал 2.16 (б) сүүреттеги бир бири менен тартысыуы керек. Дислокациялардың узынлық бирлигиниң механикалық кернеулер майданы, басқа дислокациялар менен тәсир етисиу күшиниң мәнисин есаплау мүмкин. Бирақ бул есаплаулар әдеуір қурамалы. Сонлықтан биз оларды талламаймыз.



2.16-сүрөт.

Бир бири менен ийтерисетуугун (а) хэм тартысатуугун (б) жағдайлардағы еки шетлик дислокацияның жайласуы.

2.17-сүрөт.

Кристаллық пәнжерелери азмаз бурылған еки монокристал арасындағы бөлип туруышы беттеги (пунктир сызык) дислокациялар.

2.16 (б) хэм 2.17-сүрөтлерде келтирилген дислокациялар монокристаллардың өсиу процессинде пайда болатуугун кристаллық пәнжерелери бир биринен азмаз бурылған еки монокристалды бир биринен айырып туратуугун бетлерде пайда болады. Есаплаулар дислокациялар тап усындай болып жайласқанда еки кристаллик арасындағы беттиң бир бирлигине сәйкес келетуугун энергияның минимум мәнисине тең болатуғынлығын көрсетеди.

Дислокациялар менен ноқатлық дефектлердің бир бири менен тәсирлесіуі. Дислокация, әсиресе шетлик дислокация кристаллық пәнжерениң күшли қысылған хэм созылған участкаларын пайда етеди. (2.18-сүрөтти қараңыз). Созылған орынларда алмастырыушы ири қосымта атомлардың, ал қысылған орынларда алмастырыушы майда атомлардың жайласуы энергиялық жақтан утымлы. Түйинлер арасына ендирилген ири атомлардың созылған орынларда, ал қысылған орынларда түйинлер арасына ендирилген майда атомлардың жайласуы утымлы. усындай жағдайда дислокациялардың этирапында қосымта атомлардың жыйнағы пайда болып, оны «дислокацияның постыны» деп атайды. Бул дислокациялар этирапындағы локаллық деформацияларды хэм дислокацияның энергиясын кемейтеди. Пластикалық деформацияда «постыны» бар дислокацияларды жылыстырыу «постыны» жоқ дислокацияларды жылыстырғаннан қыйынырақ болады. Себеби биринши дислокация энергиясы жоқарырақ болған орынға көшеди. Айырым ноқатлық дефектлери ямаса олардың жыйнақлары дислокацияларды турған орнына бекитеди деп есаплайды. Электро микроскопында дислокациялардың этирапындағы ири жыйнақлар бақланады. Төменде келтирилген мысалда беккемлик теориясындағы «ағыу тиси» («зуб текучести») биз айтқан жағдайды анық түсіндиреди.

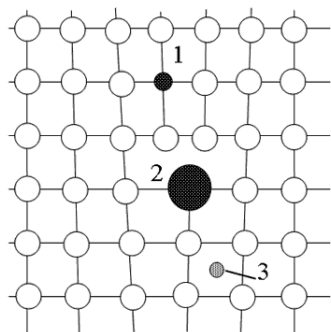


Рис. 2.18.

Ноқатлық дефектлердің дислокациялардың жанында жайласуы энергиялық жақтан утымлы: алмастырыу қосымтасы болған киширек атом (1), амластырыу қосымтасы болған ирирек атом (2), ендирилген атом (3).

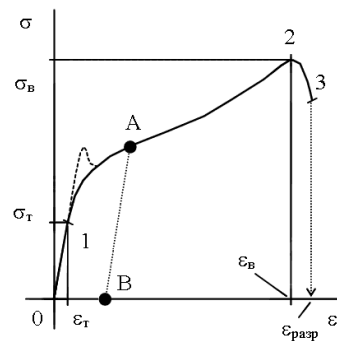


Рис. 2.19.

Үлгини созғанда σ кернеуінің салыстырмалы узаруы ϵ шамасынан ғәрезлиги.

Дислокациялардың қасындағы созылған кристаллық пәнжереге ийе участкалар диффузияның өтиуі ушын жеңиллестирілген каналлар болып табылады. Дислокациялардың тығызлығы жоқары болған деформацияланған материалларда деформацияланбаған материалларға салыстырғанда диффузияның тезирек жүретуғынлығы белгили.

Ноқатлық дефектлер «артық» ярым тегисликтің шегарасына жетип көп жағдайларда жоғалады (2.18-сүрөтти қараңыз). Усының салдарынан бул «ярым тегисликтің» шетиниң

формалары өзгереді. Дислокациялар қозғалғанда ноқатлық дефекттерді, соның ишінде вакансияларды пайда етеді деп есептейді. Бул вакансиялар артық тегисліктің шеттерінде пайда болады. Бундай процессерде дислокация сызығы жаңа орынға жылысады («еңбеклейді»). Дислокациялардың «еңбеклейі» (переползание) деп аталатынын бундай процесс жийі ушырасады.

Кристаллардың пластиклік (эластик) деформациясы хәм дислокациялар. Деталға берілген өлшемлерді хәм форманы бериу үшін көп материалларды технологиялық қайта іслеу процессінде қайтымсыз түрде деформациялайды. Қайтымсыз деформациялар Гук нызамы орынланбайтуғын жағдайларда бақланады. Бул жағдайларда деталлардағы кернеулердің мәніслери салыстырмалы деформациядан қурамалы түрдегі сызықты емес фәрезлікке ийе.

Поликристаллық үлгини созыу процессін қараймыз. Үлгилер әдетте ұзын цилиндр формасына ийе болады. Оларды бекитиу үшін ушларын жуқартады. Бул процесс төмендегідей түрде характерленеді:

а) механикалық кернеу σ менен (тәсир ететугын күштің үлгинің кесе-кесиминің майданына қатнасы), а,

б) үлгинің салыстырмалы узайыуы ε менен:

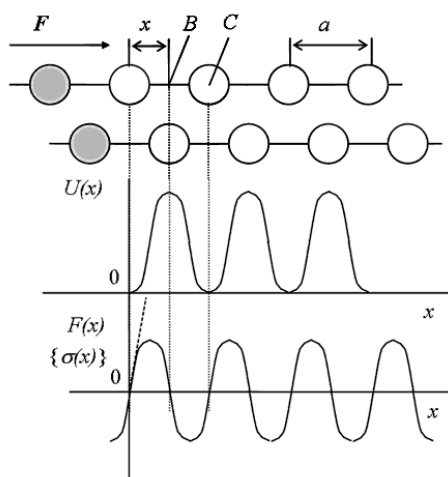
$$\varepsilon = \frac{\Delta l}{l} = \frac{l - l_0}{l_0}. \quad (2.16)$$

Бул аңлатпада l арқалы σ кернеуі тәсир еткендегі үлгинің ұзынлығы, l_0 арқалы үлгинің дәслепкі ұзынлығы белгіленген. 2.19-сүүретте үлгини созғанда механикалық кернеу σ менен салыстырмалы узайыу ε шамасы арасындағы байланыс көрсетілген. Иймеклик өзине тән үш участкаға ийе. 0-1 участкасы серпимли қайтымлы деформацияға сәйкес келеді. Бул участкада Гук нызамы орынланады. 1-2 участкасы қайтымлы емес пластикалық деформацияға тийисли; егер А ноқатында деформациялауды тоқтатса (буның ушын $\sigma = 0$ етиу керек), онда үлгинің халы В ноқатына сәйкес келеді. 2-3 участкасы үлгинің қыйрауына сәйкес келеді. 1 ноқатының жанында иймеклик көп жағдайларда «ағыу тиси» не ийе болады (2.19-сүүреттегі пунктир сызық). Оның пайда болыуы дислокациялардың этирапында топарласқан ноқатлық дефектлер менен байланысly. Бундай орынларда дислокацияларды орнынан жылжытыу қыйынырақ. Себеби жаңа орында оның энергиясының жоқарылауы керек.

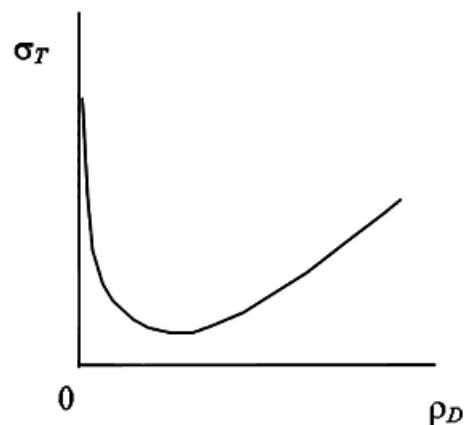
1 ноқатына сәйкес келиуши σ шамасын аққышлық шегі σ_t деп атайды, ал 2 ноқатына сәйкес келиуши кернеуді беккемлик шегі деп атап, оны σ_B арқалы белгилейді.

Дислокацияларды есапқа алмай кристаллық денелердің беккемлик шегін есапласа (беккемліктің теориялық шегі) хақыйқый мәніслеринен 100-1000 есе үлкен болған шамалар алынады. Биз моделлик кристаллық пәнжере ушын жылжыу деформациясындағы аққышлық шегін есаплауға тырысамыз.

Экспериментлер пластикалық деформацияның жылжыу тегисликлери деп аталатынын тегисликлер бойынша жүретугынлығын көрсетеді. Бундай тегисликлер атомлар тығыз жайласқан тегисликлер болып табылады. Бундай тегисликке мысал 2.20-сүүретте келтирилген. Егер жоқарыдағы тегисликке тангенциаллық күш түсірилсе атомлар орынларынан жылжыйды хәм шамасы түсірилген күштің шамасына тең серпимлилик күші пайда болады. Деформация энергиясының мәніси усы күштің мәніси менен байланысly. Деформацияның энергиясы жоқарыдағы тегисликтегі атомлары төменгі тегисликтегі атомлардың үстінде жайласқанға шекем (яғный 2.20-сүүреттегі В ноқатында) жоқарылайды. Буннан кейингі жылысуларда атомларға С аұхалына «түсіу» утымлы болады. Солай етип жоқарыда жайласқан тегислик жаңа орынға жылысып өте алады. Егер пластикалық деформациядан кейін монокристаллардың бетін абайлап тегислесе сондай жылысулардың излерін «баспалдақлар» түрінде көриуге болады.



2.20-сүрөт. Атомлардың жокарыда жайласқан тегислигинин төменде жайласқан тегислигине салыстырғандағы жылжыуының есабынан жүретуғын деформацияның схемасы.



2.21-сүрөт. Аққышлық шегиниң дислокациялардың тығызлығынан схема түріндеги ғәрезлиги.

Жокары тегисликти төменги тегисликке салыстырғанда жылыстырыу ушын зәрүрли болған күштиң мәнисин бахалауға болады. (2.20-сүрөтти қараңыз). Буның ушын механикалық кернеу хәм оның менен байланысly болған потенциал энергиядан пайдаланамыз. 2.20-сүрөтте усы күш хәм оның менен байланысly потенциаллық энергияның x координатасынан ғәрезлиги келтирилген. $\sigma_c(x)$ ғәрезлигин дәуири a ға хәм амплитудасы $\mu a / (2\pi d)$ болған синусоида менен тәриплеуге болады. Бул аңлатпада d арқалы тегисликлер арасындағы қашықлық белгиленген. Бул синусоиданың амплитудасының мәнисин биз есапладық. Буның ушын x тың киши мәнислеринде синусоиданың қыялығының тангенс $\mu \varepsilon = \mu \left(\frac{x}{a} \right)$ шамасына тең болыуы кереклигин пайдаландық (2.20-сүрөтти қараңыз). Бундай жағдайда $\sigma_c(x)$ ушын төмендегидей формула алынады:

$$\sigma_c(x) = \{ \mu a / (2\pi d) \} \sin(2\pi x / a) \quad (2.17)$$

$x = a/4$ болған жағдайда $\sigma_c(x)$ шамасы өзиниң максималлық мәнисине ийе болады. (2.17)-формула жәрдемінде орынланған есаплау $\sigma_c(x)$ ушын тәжирийбеде алынған мәнисинен жүзлеген - он мындай есе үлкен мәнис береді. Бундай күшли айырманың себеби мынадан ибарат: жокарыдағы тегисликте жайласқан атомлардың барлығының төменги тегисликте жайласқан атомларға салыстырғанда бир уақытта жылысады деп есапладық. Бул дурыс емес. Себеби жокарыдағы ярым тегисликтиң 1 атомлар арасындағы қашықлыққа жылжыуы дислокацияның жылжыуы менен де әмелге асады (бул 2.9-сүрөтте көрсетилген). Бундай жылжыу ушын әдеуір киши күш керек болады. Себеби енди жылжыуда барлық атомлық байланыслардың бир уақыттағы үзилиуи орын алмайды, ал дислокацияның қасындағы байланыслар ғана үзиледи.

Пластикалық деформацияның дислокациялық механизми тәжирийбелерде бақланатуғын ағыу шегиниң мәнислерин (σ_T хәм σ_B шамаларын), 2.19-сүрөттеги 1-2 участкасындағы $\sigma(\varepsilon)$ ғәрезлигиниң өсиуін де түсіндире алады. Деформацияда дәслеп әззи беркиген дислокациялар, ал кейин күшлирек беркиген дислокациялар қозғала баслайды. Соның менен бирге деформацияның барысында дислокациялардың саны хәм басқа да дефектлер көбейеди.

Материалдың ағыу шегі усы материалдағы дислокациялардың тығызлығынан жүде күшли ғәрезли. 2.21-сүрөтте усындай ғәрезлик көрсетилген. Дислокациялардың

тығызлығы (ρ_D) киши болғанда ағыу шеги σ_T шамасының үлкен болатуғынлығы, ал ρ_D ның шамасы үлкен болғанда ағыу шегинің киши болатуғынлығы көринип тур. Үлкен ρ_D шамасында σ_T тың үлкейіуін дислокациялардың бир бири менен хэм кристаллык пәнжерениң басқа да дефектлери менен тәсир етисіуінің нәтийжеси болып табылады.

Материаллардың беккемлигин жоқарылатыу жоллары. Хәзирги ўақытлары беккемлик шегин $0,01\mu$ ге шекем жеткеріуіге мүмкиншилик беретуғын материаллардың беккемлигин жоқарылататуғын көп санлы усыллар бар. Олардың көпшилиги дислокациялардың қозғалыуына мүмкиншилик бермейтуғын қосымша тосқынлықларды киргизіу менен байланысly. Усындай тосқынлықларға мысал ретинде кристаллык пәнжерениң төмендегидей дефектлерин көрсетемиз:

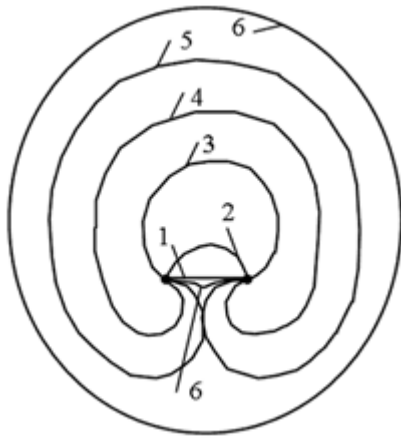
- 1) басқа фазаның айрылып шығыуы (бул ҳаққында төмениректе гәп етиледі);
- 2) ноқатлык дефектлер хэм олардың топарлары (дара жағдайда жоқарыда гәп етилген «дислокациялар постыны»);
- 3) дислокациялардың қозғалыуын қыйынластыратуғын дислокациялардың өзлериниң көп болыуы (дислокациялардың бир бири менен тәсирлесіулері олардың қозғалыуына кесент береді);
- 4) атомлардың орналасыуындағы жақыннан тәртиптің орын алыуы (бул ҳаққында төменде кеңрек гәп етеміз).

Қөпшилик қуымаларда жақыннан тәртип деп аталатуғын қубылыс бақланады. Бундай тәртипте бир сорттағы атом өзін басқа сорттағы атомлардың қоршап турыуына тырысады. Усындай жоллар менен қуыманың киши энергияға ийе болыуы тәмийинленеди. дислокациялардың қозғалыу барысында атомлар арасындағы энергиялык жақтан утымлы байланыслар үзиледи хэм энергиялык жақтан утымлы емес байланыслар қәлиплеседи. Буның ушын үлкен энергия талап етиледі, ал бул өз гезегинде дислокацияларды жылжытыу ушын зәрүрли болған күшлердің өсіуіне, ақырғы есапта кристаллык материалдың беккемлигиниң артыуына алып келеді.

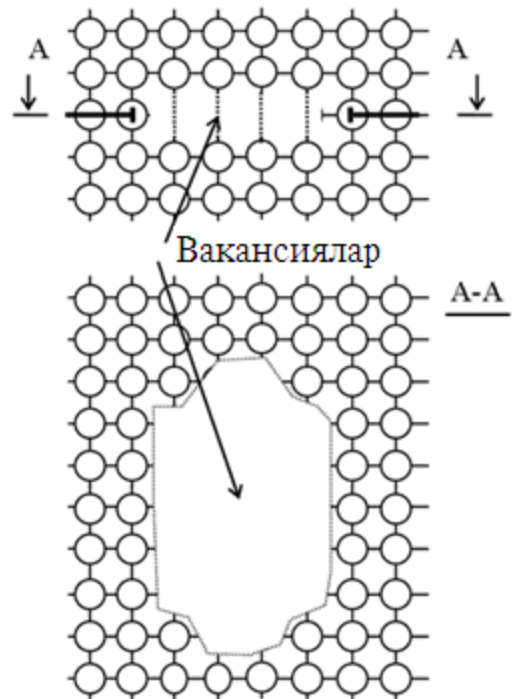
Жоқарыда келтирилген усыллар беккемликте әдеуір жоқарылататуғын болса да, әдетте материалдың пластиклигин күшли төменлетеди.

Кристалдың беккемлиги дислокациялардың тығызлығы киши болған жағдайларда да орын алады. Бундай жағдайдарда кристаллардың дислокациялык механизм менен деформацияланыуы қыйыншылық пенен жүзеге келеді (дислокациялар аз болғанлықтан).

Дислокациялардың пайда болыуы. Жоқарыда айтылып өтилгениңдей, дислокациялар тийкарынан кристаллардың пластиклик деформациясының нәтийжесинде пайда болады. Пластикалык деформациядағы дислокациялардың пайда болыу источниклериниң бирин Франк-Рид источниги (дереги) деп атайды. Ол 2.22-сүўретте көрсетилген. Мейли дислокация 1 А хэм В ноқатларында бекитилген болсын. Бундай ноқатлардың орнын басқа өлшемлерге ийе атомлардың жыйнақлары, басқа фаза областлары хэм басқалар болыуы мүмкин. Сырттан механикалык кернеу түсірилгенде дислокация жылжыйды хэм 2, 3, 4 аўхалларынан избе-из өтеди. Ең ақырында 5-аўхалда дислокацияның шеп хэм оң тәреплердеги ярым илмеклери бир бири менен тийиседи, дөңгелек формаға ийе (6) дислокациялык илмекте пайда етеди. Бул илмек болса механикалык кернеудің тәсиринде 1 формасына келеді. Буннан кейин процесс қайталанады хэм келеси дислокация пайда болады.



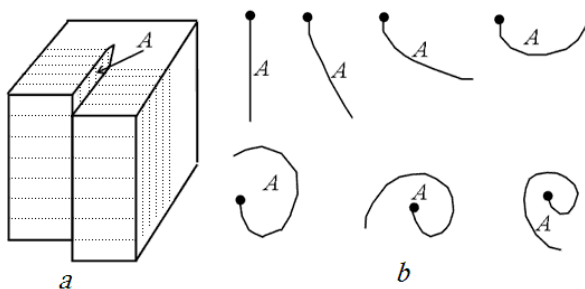
2.22-сүүрет.
Дислокациялардың Франк-Рид источниги
(дереги)



2.23-сүүрет. Аралас типтеги
дислокацияларға эквивалент болған туйық
сызық түріндегі вакансиялардың диск
тәрізли жыйнағы (топарласыуы).

Кристалларды салқынлатқанда вакансиялардың диск тәрізли жыйнақтары пайда болғанда да туйықланған дислокациялар пайда болады. Бул жағдай 2.23-сүүретте келтирилген.

Дислокациялар хәм кристаллардың өсиуі. Винтлик дислокациялары кристаллардың (балқыған суйық фазадан, еритпеден хәм пуўлардан) өсиўин жеңиллестиреди. Себеби винтлик дислокацияға байланысly кристалдың бетинде пайда болған текше 2.24-сүүретте А арқалы көрсетилген кристалдың бетине атомлардың келип отырыуын жеңиллестиреди. Текшениң астында көп санлы байланыслар бар. Сонлықтан атомлардың текшениң астына келип кристалға биригиуі тегис бетке келип кристал менен биригиуіне қарағанда әдеуір утымлы.



2.24-сүүрет.
Винтлик дислокацияның кристалдың
өсиўин жеңиллестиреуі (а) хәм А
текшесиниң астындағы областқа атомлар
келип кристалға қосылғанда
дислокацияның формасының өзгериуінің
избе-излиги (b).

Жеткиликли дәрежеде жетилискен кристаллардың бетинде сондай текшелер жийи бақланады.

Мәселе.

Вакансиялардың туўры сызығына хәм вакансиялардың бир қатламдағы диск тәрізли топарына сәйкес келетуғын дислокациялар жубының сүүретин салыңыз.

Бетлик хәм көлемлик дефектлер

Бетлик хәм көлемлик дефектлер көп санлы атомлардан туратуғын салыстырмалы ири дефектлер болып табылады. Бетлик дефектлер жағдайында атомлардың дәуірли жайласыулары күшли бузылған областлар (яғный бетлик дефектлер) қалыңлығы 1-2 атомлық тегисликлер арасындағы қашықлыққа тең кристалдың бетине түсірилген нормалға перпендикуляр бағытланған базы бир бет формасына ийе болады. Көлемлик дефектлер жағдайында атомлардың жайласыуындағы дәуірлилик бузылған областлар базы бир денениң (мысалы эллипсоидтың) формасына ийе болады. Оның барлық өлшемлери атомлар арасындағы қашықтан бир неше есе үлкен.

Бетлик дефектлер. Кристалдың бетиниң өзи бетлик дефектке мысал бола алады. Кристалдың бетиниң қасында атомлардың дәуірли жайласыуы белгили бир дәрежеде бузылатуғынлығы белгили. Усының салдарынан бетлик қатлам кернеулик халда турады, нәтийжеде бет базы бир энергияға ийе болады (суйықтықтың бетиниң бет керими энергиясына ийе болатуғынлығындай). Қөлеген система сыяқлы кристалдың да энергияның минимумына қарай умтылыуы кристалдың бетиниң минималласыуына алып келеди. Тап сол себеплерге байланыслы көпшилик жағдайларда кристаллар дөңес көп мүйешликлер формасына ийе болады.

Бирақ бетлик дефектлер кристаллардың ишинде де болады. Кристаллардың көпшилиги бир бири менен байланыспаған бир неше кристаллизацияланыу орайында өсе баслайды. Сонлықтан олар кристаллық пәнжерелериниң ориентациялары бир бирине жақын дәнешелерден турады. Бул дәнешелердің арасындағы шегарада атомлардың жайласыуларындағы дәуірлилик сөзсиз бузылады (2.17-сүүрет). Бундай шегараларды киши мүйешли шегаралар деп атайды.

Шегаралардың басқа да типі бар. Бул поликристаллық материаллардағы дәнешелер арасындағы шегаралар болып табылады. Бул жағдайда қоңсылас дәнешелердің кристаллық пәнжерелери арасындағы разориентировка ықтыярлы мәнислерди қабыл етеди.

Майысқан кристаллық пәнжереге ийе дәнешелер арасындағы шегарада механикалық кернеулер топланған болады. Сонлықтан қосымша механикалық кернеулер түсірилгенде сол областларда кристаллардың бөлиниуі, сыныуы ямаса қыйрауы бақланады.

Дәнешелер арасындағы шегаралар бойынша атомлардың диффузиясы тезирек өтеди (бундай диффузияны дәнешелер аралық диффузия деп атайды). Мысал ретинде кристалдың атомлары менен унамлы ақыбетлерге алып келмейтуғын реакцияға кирисетуғын газ атомларының диффузиясын көрсетиуге болады. Усының салдарынан кристаллардан соғылған буйымлардың коррозияға шыдамлығы төменлейди. Реакциялардың өнімлери (мысалы оксидлер, нитридлер хәм тағы басқалар) дәнешелер арасындағы шегараларда кристаллық пәнжерени және де майыстырады. Сонлықтан дәнешелер арасындағы шегаралар бойлап кристалдың сыныу итималлығы хәм оның мортлығы жоқарылайды.

Жоқарыда көріп өтилген бетлик дефектлердің кристаллардың механикалық хәм коррозиялық қасиетине унамсыз тәсирлерин кемейтиудің көп санлы усыллары бар.

Биринши усыл ең көп тарқалған усыллардың қатарына киреди. Бул кристалларды балқыу температурасынан шама менен 2 есе төмен температурада услап турыу. Бундай жағдайда атомлардың миграциясы орын алады хәм дәнешелер арасындағы шегаралардағы кернеулердің мәниси кемейеди. Усының ақыбетинде шегара бойлап диффузияның өтиуі қыйынласады хәм кристалдың коррозиялық бекемлиги артады.

Екинши усыл сийрек пайдаланылады хәм қымбат турады. Бул жағдайда қоңсылас дәнешелер арасындағы разориентация мүйешлери киши болған монокристаллар пайдаланылады. Мысалы бундай монокристалларды газ турбиналарының пәригин соғыу ушын пайдаланады. Бундай пәрик жоқары температураларда поликристаллардан соғылған пәриклерге салыстырғанда шыдамлығы әдеуір жоқары болады.

Дәнешелер арасындағы шегаралар хәм басқа да дефектлер кристаллық денелердің жыллылық өткізгигишлугине хәм электр қарсылығына тәсир етеди. Себеби бундай

дефекттерде жыллылық энергиясын тасыушы фононлардың, энергия менен заряд тасыушы электронлардың қосымша шашырауы орын алады. Бетлик дефекттер әсіресе төменги температураларда жыллылық өткізгішлік пенен электр өткізгішлікке үлкен тәсир көрсетеді. Бундай температураларда фотонлар менен электронлардың еркін жүріу жолының ұзындығы кристаллық дәнешелердің өлшемлери менен барабар болады. Бул хаққында төменде толығырақ гәп етиледі.

Көлемлик дефекттер. Көлемлик дефекттерге киши (микро) көлемди ийелейтуғын басқа кристаллық фазалар, геуеклер хәм жарықлар (саңлақлар) киреди. Геуеклер менен жарықлардың болыуы материалларға күшли түрде унамсыз тәсирин тийгизеді. Себеби олар кристалдың барлық физикалық қәсийетлерин өзгертеді (майыстырады), буйымлардың бекемлиги менен пластиклигин әдеуір төменлетеді.

Киши (микро) көлемди ийелейтуғын басқа кристаллық фазалар материаллардың бекемлигин жоқарылатыу ушын кең түрде қолланылады.

Кристаллардың жыллылық қәсийетлери

Кристалл белгили бир массаға ийе тәртіпли түрде жайласқан атомлардың системасы болып табылады. Атомлар арасында белгили бир қашықлықтарда бир бирин теңгерип туратуғын тартысу хәм ийтерисиу күшлери орын алады. Атом тең салмақлық халынан аұйсса оны өзиниң тең салмақлық халына қайтарып алып келетуғын күш пайда болады. Бул күштиң шамасы атомның типинен, оның этирапындағы атомлардан хәм кристалдағы атомның аұйсуы бағыты менен қанша шамаға аұйсқанлығынан ғәрезли. Тербелислердің классикалық теориясына сәйкес N атомнан туратуғын «серпимли байланысқан массалар» системасында меншикли жийиликлери ω_i ($i = 1, 2, 3, \dots, N-3, N-4$) болған нормал тербелислер болады. ω_i жийиликлерине ийе тербелислер бир бири менен байланыссы емес. Атомлардың қозғалыслары усы нормал тербелислердің суперпозициясы сыпатында табылады.

Кристаллардың хәм молекулалардың жыллылық қәсийетлериниң классикалық теориясында да, квант теориясында да кристалды ω_i индивидуаллық меншикли жийилигине ийе бир биринен ғәрезсиз осцилляторлардың жыйнағы деп қарайды.

Классикалық теория бойынша T температурасында хәр бир осциллятор орташа kT энергиясына ийе болады. Барлық осцилляторлардың саны $3N - 3 \approx 3N$. Сонлықтан кристал $U = 3NkT$ энергиясына ийе болыуы керек. Кристалдың моллик жыллылық сыйымлығы $C_V = \frac{\partial U}{\partial T}_V = N_A 3k = 3R$ шамасына тең болады. Бул Дюлонг хәм Пти нызамы болып табылады. Бул нызам бойынша қәлеген барлық кристаллық затлардың моллик жыллылық сыйымлығы бирдей хәм $3R$ шамасына тең. Бул нызам салыстырмалы жоқары температураларда (700-2000 K) ғана жақсы орынланады. Бирақ төменги температураларда жууық түрдеги нызамға айланады.

Кристаллардың жыллылық қәсийетлерин Эйнштейн хәм Дебай тәрепинен ислеп шығылған кристаллардың жыллылық сыйымлығының квант теориясы әдеуір жоқары дәлликте тәриплейди. Бул квантлық теорияның тийкарында жыллылық нурланыуы теориясындағы электромагнит тербелислердің энергиясының квантланғанлығы сыяқлы атомлардың тербелис энергиясының квантланыуы хаққындағы болжау жатады.

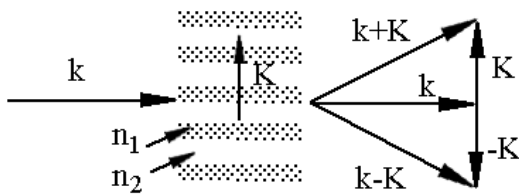
Квант теориясына сәйкес хәр бир нормал тербелистиң энергиясы жеке осциллятордың энергиясы сыяқлы квантланады. $\hbar\omega$ энергиясын осциллятордың тербелислериниң энергиясының кванты (порциясы) деп есаплайды. Ал кванттың өзін фонон деп атау, оны энергиясы $E = \hbar\omega$, импульси $p = \hbar K$ шамасына тең бөлекше деп қарау қабыл етилген. Нормал тербелислердің бир биринен ғәрезсизлигин пайдаланып оны Бозе газы теориясын тәриплеу ушын қолланады. Ал Бозе газы теориясы фононларды Бозе бөлекшелери деп қарайды. Биз төменде кристалдың тербелислериниң квант теориясының тәжирийбелерде бақланып жүрген көплеген кубылысларды хәм нызамлықтарды, солардың ишинде

жыллылық сыйымлығы менен жыллылық өткізгішліктің температурадан ғарезлигин дурыс түсіндеретуғынлығын көреміз. Бул теория фононлық теория деп те аталады хәм ол затлар тәрәпинен нурлар менен бөлекшелердің шашыратылыуын, энергия менен зарядтың алып берилиуіне байланыслы процесслерди жақсы түсіндире алады. Көпшилик мәселелерди шешиуде фотонлардың характеристикалары билиу жүдә әхмийетли. Ал фотонлардың характеристикаларын экспериментлерде үйрениуге болады.

Фононларды экспериментте үйрениу усыллары

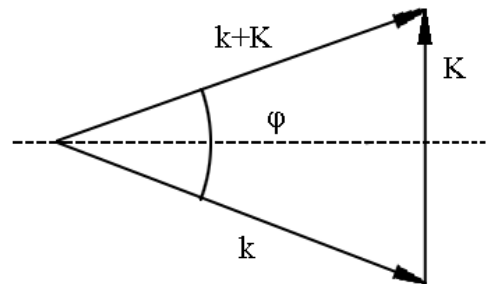
Бир фононның энергиясы менен импульсин анықлауға мүмкиншилик беретуғын фононларды үйрениу усылларын қарап өтемиз. Бул усыллар фононның кристалға келип түсиуши бөлекшелер менен (нейтронлар, электронлар, фононлар ямаса фотонлар) тәсир етисиуіне тийкарланған. Бундай тәжірийбелерде кристалға келип түсиуши хәм кристалда шашыраған бөлекшелердің энергиялары менен импульслары өлшенеди. Буннан кейин сақланыу ыңзамлары тийкарында (энергия менен импульстың сақланыу ыңзамлары тийкарында) фононлардың энергиялары менен импульслары бир биринен ғарезсиз анықланады. Фононның фотон менен тәсирлесіуін қарап өткен аңсатырақ.

Фотонның деформацияланған кристаллық пәнжере менен тәсир етисиуі. Мейли энергиясы $E = \hbar\omega$ болған фотон сыныу көрсеткіши n болған кристал менен тәсир етисетуғын болсын. Егер кристалда энергиясы $E = \hbar\Omega$, импульси $p = \hbar K$ болған фонон болатуғын болса, онда фонон менен байланыслы болған серпимли толқын кристалдың бир областын қысады, ал екинши областын созады. Бул өз гезегинде кристалдың хәр қыйлы областларында сыныу көрсеткіши n ниң өзгериуіне алып келеди. Нәтийжеде дифракциялық пәнжерге усаған жағдай пайда болады (3.1-сүүретти қараңыз). Бул дифракциялық пәнжерге келип түскен фотонлар дифракцияға ушырайды. 3.1-сүүретте фотонлардың тийкарғы шашырамаған толқыны менен бир қатарда минимум еки дифракциялық толқынның пайда болатуғынлығы көринип тур. Фотонның қозғалыс бағытының өзгериуі кристалдың тербелиуіне сәйкес келетуғын фононның жутылыуы ямаса пайда етилиуі (тууылыуы) менен байланыслы деп есаплау қабыл етилген. Ал фононлар болса кристалдың сыныу көрсеткіши n ниң модуляциясын жүзеге келтиреді деп есаплаймыз



3.1-сүүрет.

Фотонның дәуірли түрде деформацияланған кристаллық пәнжере менен тәсир етисиуінің схемасы.



3.2-сүүрет.

Фотонлар менен фононлардың бир бири менен тәсирлескендеги векторлары арасындағы қатнастар.

Фотон менен фононның тәсирлесіуін векторлардың жәрдемінде көрсеткен қолайлы (3.2-сүүретти қараңыз). Энергиясы $E = \hbar\omega$ хәм импульси $p = \hbar k$ болған фотон энергиясы $E = \hbar\Omega$ хәм импульси $p = \hbar K$ шамаларына тең фононды пайда еткенде оның энергиясы

менен импульси басқа мәніслерге ийе болады. Оларды сәйкес $E' = \hbar\omega'$ хәм $p' = \hbar K'$ арқалы белгилеймиз. Бул шамалар төмендегі қатнастар менен байланысқан:

$$\hbar\omega' = \hbar\omega + \hbar\Omega \text{ хәм } \hbar k' = \hbar k + \hbar K. \quad (3.1)$$

Бул аңлатпа энергия менен импульстің сақланыуы ызыамларын аңлатады.

Фононлардың хәм фотонлардың тезліктері хәр қыйлы болғанлықтан бирдей $k = K$ ушын олардың энергиялары менен импульстері де хәр қыйлы болады. Фононлардың тезлігін v , ал фотонлардың тезлігін c арқалы белгилеймиз. Хақыйкатында да $\omega = ck$ хәм $\Omega = vK$. $c \gg v$ болғанлықтан (3.1) ге сәйкес $\omega = \omega'$ хәм $k = k'$. Бул фотон менен фонон тәсір етискенде фотонның жийилигі менен импульсинің сезилерліктей өзгермейтуғынлығын билдиреди. 3.2-сүўретке сәйкес

$$K \approx 2k \sin \frac{\varphi}{2}. \quad (3.2)$$

Енди φ мүйеши менен жутылған (туўылған) фононның жийилигі менен фотонның жийилигін байланыстыратуғын формуланы алыу мүмкін (бул формула Комптон формуласына сәйкес келеді).

$$\Omega = vK \approx (2v \sin \varphi / 2). \quad (3.3)$$

v/c шамасының киши екенлігі Ω/ω шамасының киши болатуғынлығына алып келеді. Нәтийжеде фотонлар фононларда шашырағанда фотонның жийилигінің салыстырмалы өзгеріуі болған $\Delta\omega/\omega$ шамасы да жүдә киши болып, оны экспериментте бақлаудың мүмкіншилигі болмайды.

Жақтылықтың фононлардағы шашырауы. Жақтылықтың фононлардағы шашырауын изертлеу ушын жоқары монохромат нурлардың жиілікке дәстеси қолланылады. Әдетте хәр қыйлы мүйешлерде шашыраған жақтылықтың спектри регистрацияланады. Усындай жоллар менен k хәм k' векторларының бағыттары анықланады. Шашыраған жақтылық нурларының спектрінде жийилигі ω шамасына тең жоқары интенсивлікке ийе бас сызық пенен бир қатарда жийилик бойынша $\pm \Omega$ шамасына жылысқан фононның жутылуына хәм тууылуына сәйкес келетуғын сызықтар да орын алады. Солай етип бир биринен ғәрезсиз k хәм k' , ω хәм ω' шамалары арасындағы байланыстар орнатылады, нәтийжеде K және Ω векторлары, олар арасындағы байланыс анықланады. Жақтылық толқынлары ушын k хәм k' шамалары киши болғанлықтан усындай усылдың жәрдемінде киши K ға тең (узын толқын узынлығына ийе) фононларды изертлеу мүмкіншилигі тууылады.

Рентген нурларының фононлардағы шашырауы. Бул усыл менен тек киши толқын узынлығына ийе фононларды үйрениуге болады. Себеби рентген нурлары ушын k ның шамасы Бриллюэн зонасының шамасына барабар. Тәжірийбенің схемасы жақтылық толқынларының фононларда шашырауын изертлеудің схемасындай. Монохромат рентген нурларының жиілікке дәстеси пайдаланылады. Белгили бир мүйешке (мысалы φ мүйешине) шашыраған рентген толқынларының спектри регистрацияланады. Усындай жоллар менен k хәм k' векторларының бағыттары анықланады. Шашыраған рентген нурларының спектрінде жийилигі ω шамасына тең жоқары интенсивлікке ийе бас сызық пенен бир қатарда жийилик бойынша $\pm \Omega$ шамасына жылысқан фононның жутылуына хәм тууылуына сәйкес келетуғын тийкарғы сызыққа дым жақын жайласқан эззи сызықтар пайда болады. Көпшилик жағдайларда спектрдегі қосымша сызықтар тийкарғы сызықтар менен биригип кеткен болады. Усыған байланыссыз сызықтардың жийилик бойынша ауысуы киши болғанлықтан шашыраған рентген толқынларының

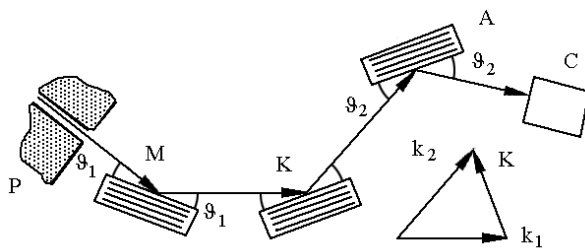
жийилигинин өзгеришін өлшеу оғада қыйын болған эксперименталлық мәселелер қатарына киреди хәм Ω шамасын анықлау дәллігі жүдә төмен болады.

Нейтронлардың фононлардағы шашырауы. Нейтронлардың фононлардағы шашырауы усылы хәзирги ўақытлардағы фононларды үйрениўдин ең көп мағлыўматларды беретугын усылы болып табылады. Бундай жағдайда нейтронның толқын векторы менен энергиясының өзгерислерин дәл өлшеу мүмкиншилиги пайда болады. Нейтронлар шашырағанда төмендегидей қатнастар орынлы болады:

$$k' = k + G + K \quad \text{хәм} \quad \frac{\hbar k'^2}{2M_n} = \frac{\hbar k^2}{2M_n} \pm \hbar\Omega. \quad (3.4)$$

Бул қатнастар энергия менен импульстин сақланыў нызамлары болып табылады. (3.4)-формулада M_n арқалы нейтронның массасы, G арқалы кери пәнжере векторы белгиленген.

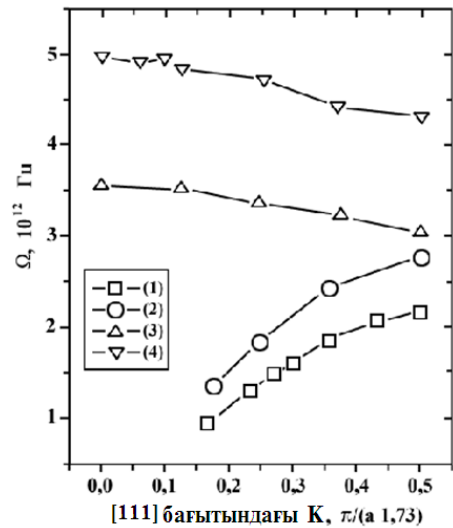
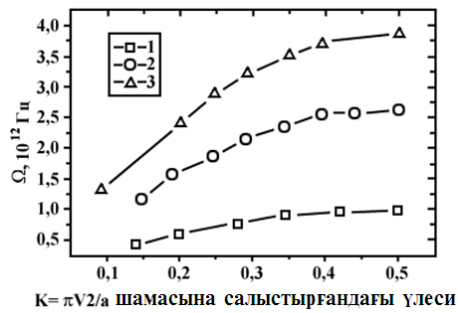
Эксперимент схемасы 3.3-сүўретте келтирилген. Р ядролық реактордан шыққан жыллылық нейтронларының дәстеси М монохроматорына келип түседи (монохроматор жетилискен, яғный дефектлери жоқ монокристалдан соғылады). Кристалдан Вульф-Брэгг шәртин сәйкес белгили бир толқын узынлығына ийе нейтронлар интенсивли түрде шашырайды (яғный дифракцияға ушырайды). Усындай жоллар менен нейтронлар дәстесин монохроматластырыў хәм k' векторының бағытын бериў әмелге асырылады. Монохромат нейтронлар дәстеси изертленип атырған К үлгисине келип түседи. Бул үлгиде шашыраған нейтронлар монокристалл-анализатор А ға келип түседи. Кристалл-анализатор болса нейтронларды Вульф-Брэгг шәрти бойынша С есаплағышына қарай шағылыстырады. Анализаторды пайдаланыў шашыраған нейтронлардың k' векторының модули бойынша (энергиясы бойынша да) спектрин алыўға мүмкиншилик береди хәм усындай жоллар менен шашыраған нейтронлардың энергиялары өлшенеди. Буннан кейин (3.4)-аңдатпа бойынша фононның энергиясы Ω менен импульси K бир биринен ғәрезсиз түрде анықланады. Фононның энергиясы Ω шамасының импульси K арасындағы ғәрезликти фононның дисперсиялық ғәрезлиги деп атайды.



3.3-сүўрет.

Нейтронлар менен тәсир етисиўди пайдаланып фононның энергиясы менен импульсин эксперименталлық анықлаўдың схемасы.

Нейтронларды пайдаланғанда көп информация алынатугын болса да жүдә көп ўақыт хәм қуўатлы ядролық реактордың пайдаланылыўы талап етиледи. Сонлықтан нейтронлардың фононлардағы шашырауы қуўатлы ядролық реакторы бар илимий орайлар да ғана изертлениледи. Усындай усулдың жәрдемінде алынған жийи ушырасатуғын дисперсиялық ғәрезлик 3.4-сүўретте келтирилген.



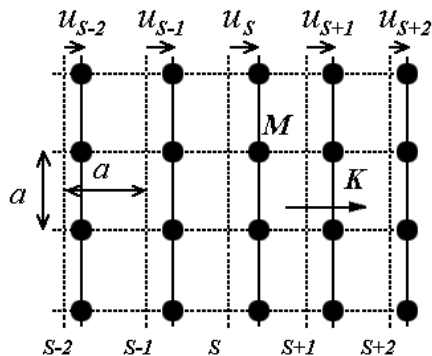
3.4-сүрет. Нейтронлардың фононларда шашырауын үйретиуде алынған фотонлардың дисперсиялық ғәрезлиги.

Фононлық спектрди үйрениу үшін басқа да бөлекшелерди (мысалы электронларды) пайдаланыу мүмкин. Бирақ бундай экспериментлерди өткеріу қурамалы хәм үлкен ғәрежетлерди талап етеди. Мысалы электронларды пайдаланыу үшін үлкен камералардың ишинде жүдә жоқары вакуумды пайда етиу керек болады. Фононлық спектрлерди басқа фононларды (мысалы ультрасести) пайдаланып үйрениу мүмкин. Бирақ бул усыллардың дәллігиниң оғада төмен екенлиги белгили.

Кристаллардағы атомлардың тербелислери

Енди бизлер фононлар үшін дисперсиялық ғәрезликти теориялық жоллар менен анықлау мәселеси менен шуғылланамыз. Фононлар үшін дисперсиялық ғәрезлик деп олардың жийиликлериниң толқын векторларына ғәрезлигин айтамыз. Улыўма жағдайлар үшін бул мәселени шешиу жүдә қыйын. Сонлықтан мәселени әдетте санлы усыллар жәрдемінде шешеди.

Бир өлшемли жағдай. Әпиұайылық үшін дәуири a шамасына тең примитивлик элементар кутышаға ийе кублық кристалдағы атомлардың тербелислерин үйренемиз. Усындай кристалдағы [100] бағытын хәм усы бағытта тарқалатуғын тегис бойлық толқынды қарап шығамыз. Көлденең толқынлардың да тап усндай жоллар менен үйренилетуғынлығын атап өтемиз. (3.5-сүретти қараңыз).



3.5-сүрет.

[100] бағытында тарқалатуғын тегис бойлық толқындағы бир атомлы кублық пәнжерениң атомларының тербелислери.

Бундай жағдайда номери s болған (100) тегислигиниң биринде жайласқан атомлар бирдей фазада усы тегисликке түсірилген нормал бағытында (яғный [100] бағытында) u_s

шамасына аўысады. Тегисликте жайласқан атомлардың барлығы да бирдей болып тербеледі. Усы тегисликтеги номери s болған атомға номери $s + p$ болған тегислик F_{sp} күші менен тәсир етеді. Киші аўысыулар орын алғанда (яғный u_s шамасы киші болғанда) бул күштің шамасы тегисликлердің тең салмақтық орнынан аўысыулар айырмасы болған $u_{s+p} - u_s$ шамасына пропорционал. Қосынды күш F_s шамасы F_{sp} күшлерінің қосындысына тең:

$$F_s = \sum_{p \neq 0} F_{sp} = \sum_{p \neq 0} C_p (u_{s+p} - u_s) \quad (3.5)$$

Массасы M болған s -номерлі тегисликте жайласқан атом үшін Ньютонның екінші нызамын жазамыз:

$$M \frac{d^2 u_s}{dt^2} = \sum_{p \neq 0} C_p (u_{s+p} - u_s) \quad (3.6)$$

u_s функциясын бойлық тегис толқын түрінде ізлейміз:

$$u_{s+p} = u_0 \exp(-i\omega t + iKx) = u_0 \exp(-i\omega t) \exp(iKa(s+p)) \quad (3.7)$$

(3.7) ни (3.6) ға қойғаннан хәм улыўмалық көбейтиўшилерди қысқартқаннан кейин ω^2 ушын төмендегидей аңлатпаны аламыз:

$$M\omega^2 = -\sum_{p \neq 0} C_p (\exp(ipKa) - 1) \quad (3.8)$$

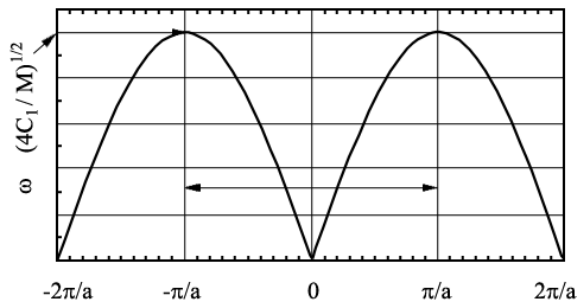
Егер қарап атырған пәнжеремиздегі хәм $\cos(a) = [\exp(ia) + \exp(-ia)]/2$ аңлатпасындағы симметрияны, онда $C_p = C_{-p}$ екенлигине ийе боламыз хәм төмендегидей аңлатпа аламыз:

$$\begin{aligned} \omega^2 M &= -\sum_{p > 0} C_p (\exp(ipKa) + \exp(-ipKa) - 2) = \\ &= 2 \sum_{p > 0} C_p (1 - \cos(pKa)). \end{aligned} \quad (3.9)$$

Әдетте сайлап алынған атом менен тек ең жақын жайласқан тегисликлер арасындағы тәсир етисіулерди қарап шығыў менен шекленеді. Бундай жағдайда $p = \pm 1$ болғанда ω^2 ушын жазылған аңлатпа эпиўайыласады:

$$\omega^2 = (2/M)C_1(1 - \cos(pKa)) = (4C_1/M)(\sin(Ka/2))^2 \quad (3.10)$$

$\omega(K)$ ғәрезлигинің графиги 3.6-сүўретте келтирилген. $K = \pi/a$ нокатында (бул нокат Бриллюэннің биринши зонасының шегарасында жайласқан екенлигин еске түсиреміз) $\omega(K)$ дан K бойынша алынған туўынды нолге тең екенлиги көринип тур. Бул фононның топарлық тезлигинің (групповая скорость) нолге тең екенлигине сәйкес келеді.



3.6-сүрөт.

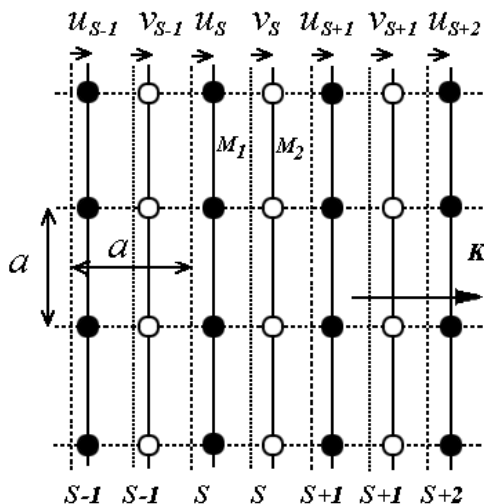
Примитивлик кублык пәнжередеги [100] бағытында тарқалатуғын тегис бойлық толқынның жийилигі ω ның толқын векторы K дан ғәрезлиги.

$\omega(K)$ ғәрезлигиниң тап усындай өзгешелиги сайлап алынған атомның тек жақын тегисликлер менен тәсирлесиўин есапқа алатуғын (3.9)-аңлатпадан да келип шығады. $K = \pi/a$ болған жағдайда (3.7)-аңлатпаға сәйкес қоңсылас атомлар қарама-қарсы фазада тербеледи. Бул жағдай турғын толқынға сәйкес келеди. Қызығы соннан ибарат, турғын толқынның тербеліс амплитудасы ең үлкен мәниске жететуғын орын атомлар жайласқан орынларға сәйкес келеди. Бул жағдайда турғын толқынның пайда болыўы толқынның хәр бир атомнан шағылысыўы хәм шағылысқан толқынның интерференциялық күшейиўи менен байланысly. Хәқыйкатында да a қашықлығында жайласқан атомлардан шағылысқан атомлардың бир бирин күшейтиў шәрти $\Delta_{opt} = 2a = \lambda n = \frac{2\pi}{K} (n = 1)$. Буннан $K = \frac{\pi}{a}$.

Үш өлшемли пәнжереде фононлар рентген нурлары сыяқлы атомлық тегисликлерде де шағылыса алады. Интерференциялық күшейиў шәрти Вульф-Брэгг теңлемеси болып табылады. Бул шәрт фононның толқын векторының Бриллюэн зонасының шегарасына түсиўине сәйкес келеди.

(3.7)-формула бойынша атомлардың тербелісин үйренгенде K шамасына кері пәнжерениң векторына тең $2\pi n/a$ шамасын қосқанда да атомлардың қозғалыс нызамының өзгермейтуғынлығының келип шығатуғынлығын аңсат аңғарыўға болады. Сонлықтан бир қарап атырған әпиўайы жағдайда атомлардың қозғалысларын үйрениў ушын $K \leq \pi/a$ шәртин қанаатландыратуғын K ның мәнислерин алыў жеткиликли. Үш өлшемли кеңісликте бул шәртке Бриллюэнниң биринши зонасының ишинде жайласқан K векторларының мәнислери қанаатландырады.

Базиси еки атомнан туратуғын қутышаның атомларының тербеліси. Түсиндириўди әпиўайыластырыў ушын дәўири a ға тең примитив элементар қутышаға ийе кублық кристалды қараймыз (3.7-сүрөт). Мейли атомлардың массалары M_1 хәм M_2 шамаларына тең болсын.



3.7-сүрөт.

Базиси еки атомнан туратуғын кублық пәнжередеги атомлардың [100] бағытында тербеліўи.

Бул кристалдағы [100] бағытын хәм усы бағытта тарқалатуғын тегис бойлық толқынды қараймыз (көлденең толқынлар да тап сондай тәклетте үйрениледі). Бундай жағдайда 3.7-сүўретте кара рең менен боялған номери s болған (100) тегислигинде жайласқан массасы M_1 болған барлық атомлар бирдей фазада [100] бағытында [яғный (100) тегислигине перпендикуляр бағытта] u_s шамасына аўысады. Яғный тегислик бир пүтин тутас тегислик сыяқлы болып тербеледі (себеби тегис толқынды қарап атырмыз). Тап сол сыяқлы массасы M_2 ге тең номери s болған бир тегисликте жайласқан боялмаған атомлар да (3.7-сүўрет) бир фазада усы тегисликке перпендикуляр бағытта тутасы менен тербеледі. Қосымша және бир әпиұайыластырыўды қабыл етемиз: номери s болған тегисликтеги сайлап алынған атомға тек еки жақын жайласқан тегисликлердеги атомлар ғана тәсир етеді деп болжаймыз.

Атомлар жайласқан тегисликлердің аўысыўларын u_s хәм v_s арқалы белгилеймиз. Аўысыўларды киши деп есаплаймыз хәм сонлықтан жақын қоңсы атомлар тегисликлери тәрәпинен тәсир етиўши күштиң шамасын боялмаған атомлар ушын $u_{s+1} - v_s$ хәм $v_s - u_s$, ал боялған атомлар ушын $u_s - v_{s-1}$ хәм $v_s - u_s$ айырмаларына пропорционал деп есаплай аламыз.

Номери s болған тегисликте жайласқан «боялған» хәм «боялмаған» атомлар ушын Ньютонның екінши нызамын былайынша жазамыз:

$$\begin{aligned} M_1 \frac{d^2 u_s}{dt^2} &= C((v_{s-1} - u_s) + (v_s - u_s)); \\ M_2 \frac{d^2 v_s}{dt^2} &= C((u_{s+1} - v_s) + (u_s - v_s)). \end{aligned} \quad (3.11)$$

u_s хәм v_s шамаларын тегис бойлық толқынлар түринде излеймиз:

$$u_s = u_0 \exp(-i\omega t) \exp(iKas); \quad v_s = v_0 \exp(-i\omega t) \exp(iKas) \quad (3.12)$$

(3.12) ни (3.11) ге қойғаннан кейин u хәм v шамалары ушын бир текли сызықлы еки теңлемеден ибарат системаны аламыз:

$$\begin{aligned} -\omega^2 M_1 u &= Cv(1 + \exp(-iKa)) - 2Cu, \\ -\omega^2 M_2 v &= Cu(1 + \exp(iKa)) - 2Cv, \end{aligned} \quad (3.13)$$

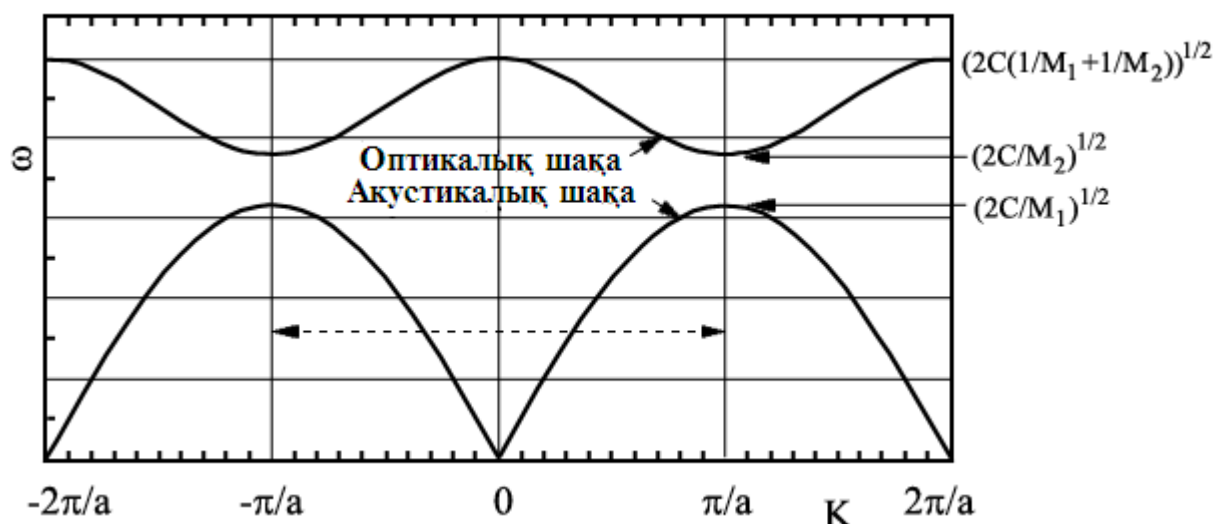
Егер бул теңлемелердің анықлаўшысы (определители) нолге тең болса, онда олар ноллик емес шешимлерге ийе болады.

$$\begin{vmatrix} 2C - \omega^2 M_1 & -C(1 + \exp(-iKa)) \\ -C(1 + \exp(iKa)) & 2C - \omega^2 M_2 \end{vmatrix} = 0, \quad (3.14)$$

Хәзир ғана алынған (3.14)-теңлемени былайынша жаза аламыз:

$$M_1 M_2 \omega^4 - 2C(M_1 + M_2) \omega^2 + 2C^2(1 - \cos(Ka)) = 0. \quad (3.15)$$

Ықтыярлы K лар ушын (3.15)-теңлемени шешіўдің нәтийжелери 3.8-сүўретте келтирилген.



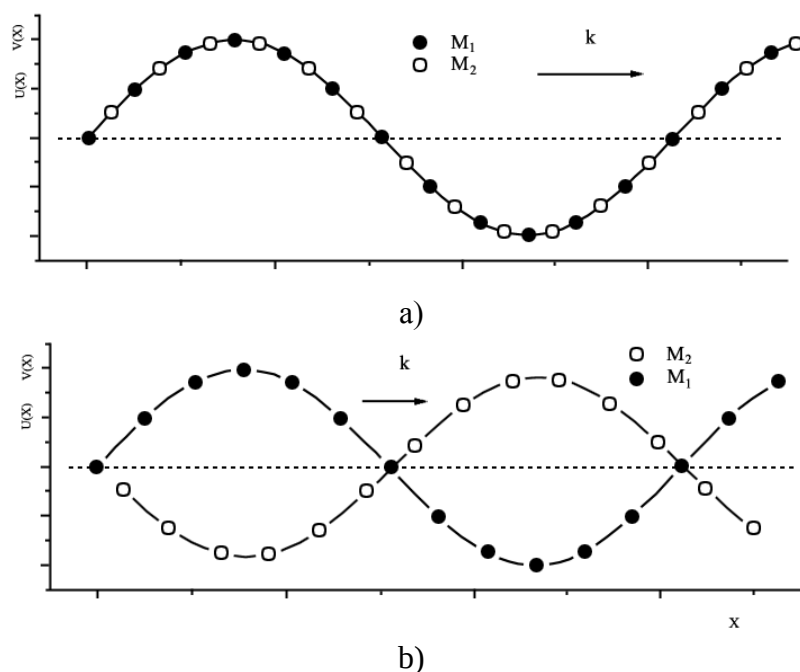
3.8-сүрөт. Базиси еки атомнан туратуғын кублық пәнжереде $[100]$ бағытында тарқалатуғын тегис бойлық толқынның жийилиги ω шамасының толқын векторы K дан ғәрезлиги.

Бул теңлемениң 1) киши K лардағы хәм 2) $K = \pm\pi/a$ болған жағдайлардағы шешимлери үлкен «матодикалық» қызығыўшылықларды пайда етеди.

Киши K ларда $\cos(Ka) \approx 1 - (1/2)K^2a^2$. Бундай жағдайда (3.15)-теңлеме еки түбирге ийе болады:

$$\omega^2 \approx 2C / (1/M_1 + 1/M_2); \quad \omega^2 \approx CK^2a^2 / 2(M_1 + M_2). \quad (3.16)$$

Биринши түбир фононның дисперсиялық ғәрезлигиниң $[\omega(K)]$ оптикалық шақасына, ал еквинши түбир фононның дисперсиялық ғәрезлигиниң $[\omega(K)]$ акустикалық шақасына сәйкес келеди.



3.9-сүрөт.
Атомлардың көлденең тербелислериндеги атомлардың аўысыўының акустикалық (а) хәм оптикалық типлери (б).

Оптикалық шақа ушын (3.13) тен атомлардың шама менен қарама-қарсы фазада тербелетуғынлығы келип шығады. Атап айтқанда $K \approx 0$ шәрти орынланғанда $\frac{u}{v} = -M_1/M_2$

шәрти орынланады. Тербеліслердің усындай түрін (3.9 б сүзретке қараңыз) егер 1 хәм 2 атомлары хәр қыйлы электр зарядына ийе болғанда өзгермели электр майданының тәсирінде қоздырыу мүмкін. Усы себепке байланысly «оптикалық фонон» түсиниги пайда болған. Биз қарап атырған жағдайларда магнит майданының тәсирин үйренбейди. Себеби электродинамика нызамларына сәйкес киши тезликлерде толқынның магнит майданы зарядларға әззирек тәсир етеди.

(3.13)-аңлатпадан акустикалық шақа ушын атомлардың шама менен бирдей фазада тербелетуғынлығы келип шығады. Атап айтқанда $K \approx 1$ ушын $\frac{u}{n} = 1$ қатнасы орынланады. Тербеліслердің усындай түрін кристалға өзгермели серпимли тәсир етиу арқалы пайда етиуге болады (3.9 а сүзрет). Бул тутас орталықтың узын толқынлы жақынласыуындағы атомлардың акустикалық тербеліслерине сәйкес келеди. Бундай жағдайда атомлар бир бири менен келискен халда шама менен бирдей фазада тербеледи. Усыннан «акустикалық фонон» түсиниги пайда болған.

$K = \pm\pi/a$ болған жағдай әдеуір қызықлы. Бундай жағдайда (3.15)-аңлатпа күшли әпиуайыласады хәм ω^2 шамасы ушын $\omega^2 = 2C/M_1$ хәм $\omega^2 = 2C/M_2$ түбирлери алынады. 3.8-сүзретте $K = \pm\pi/a$ шәрти орынланғанда үлкен түбирдің оптикалық шақаға, ал киши түбирдің акустикалық шақаға тийисли болатуғынлығы көринип тур.

(3.14)-теңлемениң шешимлеринің болмайтуғын ω^2 шамасының областының бар екенлиги көринип тур. Демек бундай область ушын еки атомлы элементар қутышасы бар кристалда толқын тарқала алмайды деген сөз. Тереңирек таллаулар жүргизилгенде бундай жийиликлер областларына K ның комплексли мәнислеринің сәйкес келетуғынлығын көрсетеди. Бул орталықта толқынның амплитудасының тез кемейиуине сәйкес келеди.

Көп атомлы пәнжерениң атомларының тербеліслерин еки атомлы жағдай ушын жоқарыда келтирилген схема бойынша үйрениуге болады. Бирақ бундай етип мәселени шешиу математикалық жақтан қыйынырақ. Себеби көп санлы теңлемелерден туратуғын системаны шешиуге тууры келеди. Элементар қутышасы r атомға ийе кристал ушын (3.14)-теңлемениң бойлық хәм көлденең толқынлар ушын r дана түбири алынады; олардың бир нешелерин $\omega(K)$ ғәрезлигинің акустикалық шақасына жууап береді, ал калғанлары оптикалық шақасына жууап береді деп есаплау қабыл етилген. $\omega(K)$ ғәрезлигинің үш акустикалық шақасы хәм $3r - 3$ оптикалық шақасы, жәми болып фононлық спектрдің $3r$ дана шақасы алынады.

Мәселелер:

1. Киши $K \ll 1/a$ (үлкен толқын узынлықлары) хәм атомлардың тек жақын тегисликлер менен тәсир етисетуғын жағдайындағы (3.6)-теңлемениң тутас орталықлардың толқын теңлемесине айланатуғынлығын көрсетиңіз.

Көрсетпе: (3.6)-теңлемедегі екінши тәртипли тууынды ушын шекли айырмалар формуласын пайдаланыңыз.

2. $K = \pi/a$ болғанда базиси еки атомнан туратуғын кристалдың подрешеткаларының бир биринен ғәрезсиз қозғалатуғынлығын көрсетиңіз.

Көрсетпе: Буның ушын $K = \pi/a$ болған жағдайдағы акустикалық хәм оптикалық шақалар ушын u менен v дың қатнастарын есаплау керек болады.

Кристаллардың жыллылық сыйымлығы

Кристалдың ишки энергиясын есаплау, буннан кейин оның жыллылық сыйымлығын кристалдың анықлау ушын нормал тербеліслерин хәм Бозе-Эйнштейн тарқалыуын пайдалану жолы менен барлық осцилляторлардың энергиясын билиу менен әмелге асырылатуғынлығы тууралы жоқарыда атап өтилген еді. Мәселениң екінши бөлими айрықша қыйыншылықты пайда етпейтуғын болса да, мәселениң биринши бөлими

математикалық көз-қарастан жүдә қурамалы. Усы күнлери бундай мәселелер эпиұайы молекулалар ушын ғана шешилмекте. Сонлықтан осцилляторлардың меншикли жийиликлерин есаплаудың эпиұайыластырылған усыллары қолланылады. Бул усыллардың айырымларын биз төменде қарап шығамыз.

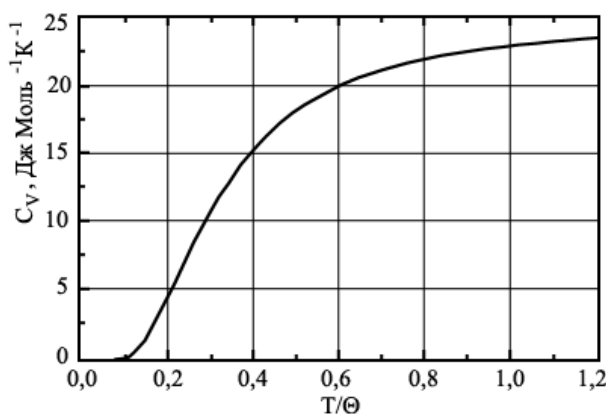
Эйнштейн модели. Эйнштейн моделинде барлық атомлар бир биринен ғәрезсиз тербеледи хәм барлық атомлардың тербелис жийиликлери бирдей. Бундай жағдайда N дана атомға ийе кристалдың ишки энергиясын есаплау ушын тек бир осциллятор керек болады. Буннан кейин нәтийжени осцилляторлардың саны болған $3N$ санына көбейтиу керек. Мейли хәр бир осциллятор ω жийилиги менен тербелсин. Бундай осциллятордың орташа энергиясын Бозе-Эйнштейн тарқалыу функциясын пайдаланыудың жәрдемінде есаплаймыз:

$$\langle E \rangle = \langle n \rangle \hbar \omega = \hbar \omega / (\exp(\hbar \omega / kT) - 1). \quad (3.17)$$

Бул формулада $n = \frac{1}{\exp[\frac{\hbar \omega}{kT}] - 1}$ арқалы осциллятордағы «топланған» энергия квантларының орташа саны белгиленген. N_A дана атомға ийе кристалдың энергиясы $E_{mol} = 3N_A E = 3N_A n \hbar \omega$ түрінде есапланады. Ал тураклы көлемдеги жыллылық сыйымлығы энергияны температура бойынша дифференциаллау арқалы есапланады:

$$C_V = (\partial E / \partial T)_V = 3N_A k (\hbar \omega / kT)^2 \exp(\hbar \omega / kT) / (\exp(\hbar \omega / kT) - 1)^2. \quad (3.18)$$

Модель 20-100 К температурасынан жоқары температураларда (яғный абсолют ноль температураға жүдә жақын болмағанда) эксперимент пенен жақсы сәйкеслик көрсетеди. $C_V(T)$ ғәрезлигиниң температурадан ғәрезлиги 3.10-сүўретте келтирилген.



3.10-сүўрет.
Осциллятордың жийилиги $\omega = k\Theta/\hbar$ болған жағдай ушын Эйнштейн модели тийкарында есапланған жыллылық сыйымлығы C_V ның температурадан ғәрезлиги.

$\hbar \omega \ll kT$ болғанда (бул шәрт жоқары температураларда орын алады) $C_V \approx 3N_A k = 3R$. Бул Дюлонг хәм Пти нызамына сәйкес келеди. $\hbar \omega \gg kT$ болғанда (бул шәрт төменги температураларда орын алады) хәм $T \rightarrow 0$ шегинде $C_V \approx 3N_A k \frac{\hbar \omega}{kT}^2 \exp \frac{\hbar \omega}{kT} \rightarrow 0$. Абсолют нолде жыллылық сыйымлығының нолге умтылыуын термодинамиканың үшінши нызамы талап етеди. Бирақ $C_V(T)$ функциясының киширейиуи экспериментте бақланған жағдайға қарағанда әстерек жүреди (экспериментте $C_V \sim T^3$ нызамы бақланады). Бул атомлардың тербелислериниң бир биринен ғәрезсизлиги хаққындағы гипотезаның дурыс емес екенлигине байланысly. Кристалды қураушы атомлар бир бири менен тәсирлеседи, усының нәтийжесинде кристалларда хәр қыйлы узынлықтағы серпимли толқынлар пайда болады. Бул толқынлар атомлардың бир бирине байланысly болған коллективлик тербелислерине сәйкес келеди.

Бирақ усындай кемшилигине қарамастан Эйнштейн модели өжире хәм жоқары температуралардағы кристаллардың жыллылық сыйымлығын дурыс тәриплейди. Бул модель айырым молекулалардың жыллылық сыйымлығын тәриплейге, оптикалық фононлардың (олардың жийилиги толқын векторының мәнисинен дерлик ғәрезли емес) кристаллардың жыллылық сыйымлығына беретугын үлесин жақсы түсіндире алады.

Атомлардың коллективлик нормал тербелислерин есапка алыў төменги температуралардағы кристаллардың жыллылық сыйымлығы ушын алынған аңлатпаның дәллігин әдеўир жоқарылатады. Мәселе соннан ибарат, акустикалық коллективлик тербелислердің жийилиги киши. kT шамасындағы жыллылық тербелислериниң энергиясы оларды қоздырыў ушын жетеди. Бундай тербелислер киши температуралардағы жыллылық сыйымлығына өзлериниң үлеслерин қоса алады. Ал Эйнштейн модели бойынша барлық осцилляторлар салыстырмалы үлкен жийилик пенен тербеледи хәм қоңсылас энергиялық қәддилер арасындағы айырманың шамасы $\hbar\omega$ шамасына тең. Сонлықтан төменги температураларда $\hbar\omega \gg kT$ шәрти орынланатуғын болғанлықтан осциллятордың бир қәддинен екінши қәддиге өтиў итималлығы жүдә киши шамаға тең болады. Сонлықтан олардың ишки энергияға хәм жыллылық сыйымлығына қосатуғын үлесиниң шамасы жүдә кем болады.

Кристалдың тербелислери энергиясын есаплаў. Жоқарыда атап өтилгениндей, нормал тербелислердің жийиликлериниң спектрин есаплаў жүдә қыйын мәселелер қатарына киреди. Сонлықтан кристаллардағы атомлардың тербелислериниң энергиясын есаптағанда хәр қыйлы әпиўайыластырыўларды қолланады. Фононлардың руқсат етилген толқын векторларының мәнислерин көбинесе Ферми-газ теориясында Планк тарқалыўын келтирип шығарыў схемасы бойынша әмелге асырады. Атап айтқанда өлшеми L ге тең кублық кристалды алады. Буннан кейин кристалдың серпимли тербелислерин тәриплейтуғын толқын функцияларын комплексли түрде излейди:

$$f(x, y, z, t) = \exp(i\vec{r}\vec{K} - i\alpha t). \quad (3.19)$$

Буннан кейин кристалдың серпимли тербелислерин тәриплейтуғын $f(x, y, z, t)$ функциясының түрине дәўирли шегаралық шәртлерди қояды:

$$\begin{aligned} f(x + L, y, z, t) &= f(x, y, z, t); \\ f(x, y + L, z, t) &= f(x, y, z, t); \\ f(x, y, z + L, t) &= f(x, y, z, t), \end{aligned} \quad (3.20)$$

Бул шәртлер

$$\exp(iLK_x) = 1; \quad \exp(iLK_y) = 1; \quad \exp(iLK_z) = 1; \quad (3.21)$$

шәртлери орынланғанда ғана орынланады. Бундай жағдайда толқын векторы K төмендегидей дискрет мәнислерге ийе болады:

$$K = (2\pi n_1 / L; \quad 2\pi n_2 / L; \quad 2\pi n_3 / L); \quad (3.22)$$

Бул аңлатпаларда n_1, n_2 хәм n_3 арқалы пүтин санлар белгиленген.

Бундай жағдайда K векторының хәр бир руқсат етилген мәнисине K кеңислигинде $V_K = \frac{2\pi}{L}^3 = \frac{(2\pi)^3}{V}$ көлеми сәйкес келеди. Бул аңлатпада $V = L^3$ арқалы кристалдың көлеми белгиленген. Буннан кейин жийиликтің толқын векторы K шамасынан ғәрезлиги болжап табылады. Әдетте көпшилик жағдайларда ω K ғәрезлигин экспериментте алынған ғәрезлик тийкарында теориялық жоллар менен есаплайды. Буннан кейин K

векторының рұқсат етилген мәніслери областын шеклери ишінде ω K шамасы аз өзгеретуғын участкаларға бөледі. Бул процедура Эйнштейн моделинде пайдаланылған формулаларды пайдаланыудың мүмкін болыуы үшін исленеді. Буннан кейін санлы усыллар жәрдемінде есапланып атырған физикалық шамаға (мысалы ишки энергияға) барлық участкалардың үлеслери қосып шығылады (суммаланады).

Сфералық симметрия орын алатуғын жағдайдарда (бундай жағдайларда ω шамасы K векторының модулинен ғана ғәрезли болады) нормал тербеліслердің жийиликлер бойынша тарқалыуын пайдаланған қолайлы (бул тарқалыу ω шамасының қасында $d\omega$ интервалында неше нормал тербелістің болатуғынлығын көрсетеді). $d\omega$ интервалындағы нормал тербеліслердің санын dN арқалы белгилесек:

$$dN(\omega) = D(\omega)d\omega. \quad (3.23)$$

$D(\omega)$ ның жәрдемінде көп физикалық шамалардың орташа мәніслерін табыу мүмкін. Мысалы:

$$\langle E \rangle = \int E(\omega) D(\omega) d\omega = \int \hbar \omega \langle n(\omega) \rangle D(\omega) d\omega. \quad (3.24)$$

$D(\omega)$ функциясы нормировка шәртин қанаатландырыуы керек:

$$3N = \int D \omega d\omega. \quad (3.25)$$

Бул нормировка шәрти нормал тербеліслерінің улыұмалық санының $3N$ ге тең болыуының керек екенлигин талап етеді.

Бундай жоллар менен мәселени шешиуді Дебай модели мысалында қарап шығамыз.

Дебай модели. Дебай модели шеклерінде $\omega = Kv$ формуласы қабыл етиледі (v арқалы сес толқынларының тезлиги белгиленген). Усындай жақынласыуды тутас орталық жақынласыуы деп атайды. Бундай жақын келиуде фононлардың дисперсиясы менен дисперсиялық ғәрезликтің оптикалық шақасын есапқа алыудың мүмкіншилигинің болмайтуғынлығы түсиникли. Соның менен бир қатарда қосымша түрде v тезлигинің мәніси ретінде көлденең хәм бойлық толқынлардың тезликлери арасындағы орташа мәніс алынады (көлденең хәм бойлық толқынлардың тезликлери арасындағы айырманың үлкен шама екенлигин атап өтеміз). ω K ғәрезлигинің сфералық симметрияға ийе екенлиги мәселени шешиуді әдеуір аңсатластырады. Шамасы белгиленген шамадан киши болған рұқсат етилген K векторларының санын K кеңісликтеги радиусы K болған сфераны K векторларының рұқсат етилген бир мәнісине сәйкес келетуғын көлемине бөлиу арқалы анықланады:

$$N_K = (4\pi K^3 / 3) / (2\pi / L)^3 = (L / 2\pi)^3 (4\pi \omega^3 / 3v^3) = V\omega^3 / (6v^3\pi^2) \quad (3.26)$$

$D \omega$ функциясын $dN_K = D \omega d\omega$ аңлатпасынан табыуға болады. dN_K шамасын да тап сол сыяқлы жоллар менен табады. Буның үшін K кеңіслигинде K шамасы $K, K + dK$ аралығында қатламның көлемін $\frac{2\pi}{L}^3$ шамасына бөледі. Бундай жағдайда $V = L^3$ екенлигин есапқа алсақ $D \omega$ функциясы үшін төмендегидей аңлатпаны аламыз:

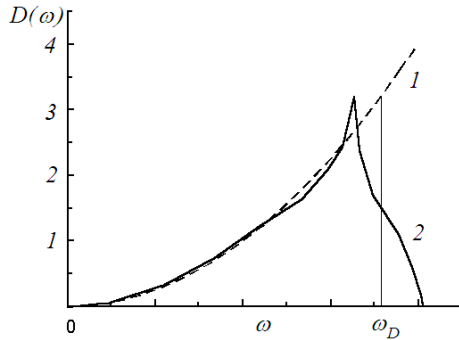
$$D(\omega) = dN_K / d\omega = (4\pi K^2 dK) / ((2\pi / L)^3 d\omega) = V\omega^2 / (2v^3\pi^2) \quad (3.27)$$

Нормировка шәртин умытпауымыз зәрүр. Бул шәрт осциллятордың санының $3N$ ге тең болыуын талап етеді. Дебай моделинде болса K векторының модулине шек қояды.

Оның максималлық мәнісін K_D арқалы белгилейміз. Бұнан кейін бұл шаманы (3.26)-аңдатпаға қойсақ шеп тәрепінде осцилляторлардың ұлыұмалық саны болған поляризацияның берілген типіне сәйкес келіуіші N алыу мүмкіншілігіне ийе боламыз. (3.26)-аңдатпаға K_D хәм $\omega_D = vK_D$ шамаларын киргизіу арқалы төмендегини аламыз:

$$\begin{aligned}\omega_D &= ((6N^3\pi^2)/V)^{1/3}; \\ K_D &= ((6N\pi^2)/V)^{1/3}.\end{aligned}\quad (3.28)$$

D ω функциясының түрі 3.11-сүүретте келтирилген (1-иймеклик).



3.11-сүүрет.
Дебай моделиндегі халлар тығызлығы
функциясы болған D ω функциясы.

Есаплаулар K_D шамасының мәнісіннің π/a шамасына жүдә жақын екенлігін көрсетеді, ал π/a шамасының Бриллюэннің биринши зонасының шегарасына сәйкес келетуғынлығын билесіз. көреміз. Бірақ Дебай модели шеклерінде Бриллюэннің биринши зонасына сәйкес келіуіші K векторының мүмкін болған мәніслеринің хақыйқый областы оған сәйкес келмейтуғын сфера менен алмастырылады.

Осцилляторлардың поляризациясының үш типіне сәйкес келіуіші ишки энергияның мәніси Дебай теориясында төмендегі интеграл түрінде есапланады:

$$\begin{aligned}E &= 3 \int \hbar \omega n(\omega, T) D(\omega) d\omega = 3 \int_0^{\omega_D} \frac{\hbar \omega}{\exp(\hbar \omega / kT) - 1} \left(\frac{V \omega^2}{2\pi^2 v^3} \right) d\omega = \\ &= \frac{3Vk^4 T^4}{2\pi^2 v^3 \hbar^3} \int_0^{x_D} \frac{x^3 dx}{\exp(x) - 1}.\end{aligned}\quad (3.29)$$

Бұл жерде $x = \frac{\hbar \omega}{kT}$ хәм $x_D = \frac{\hbar \omega_D}{kT} = \frac{\Theta}{T}$. Бұл жерде Θ арқалы Дебай температурасы белгиленген. Оның шамасы мынаған тең:

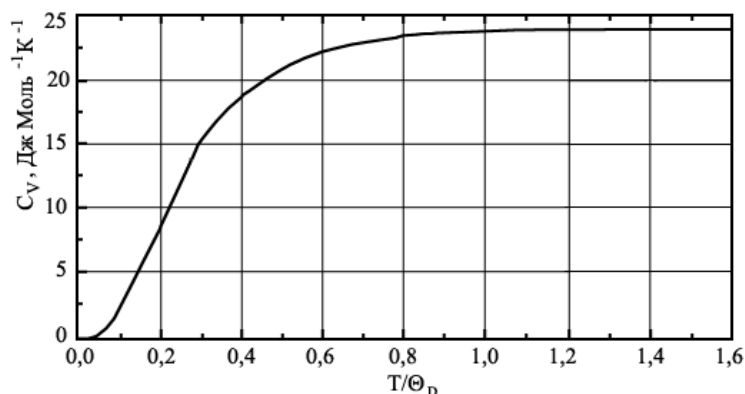
$$\Theta = \omega_D \hbar / k = (v \hbar / k) ((6N^3\pi^2)/V)^{1/3}.\quad (3.30)$$

(3.29)-интегралдың тек санлы усыллар менен есапланатуғынлығын атап өтеміз.

C_V жыллылық сыйымлығын табыу үшін (3.29) ды температура T бойынша дифференциаллау керек:

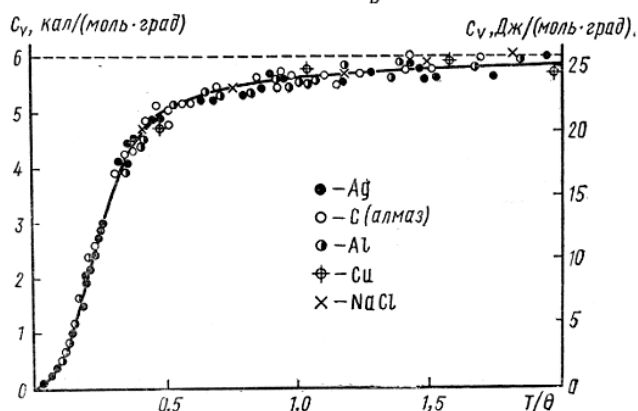
$$\begin{aligned}C_V &= \left(\frac{3V\hbar^2}{2\pi^2 v^3 k T^2} \right) \int_0^{\omega_D} \frac{\omega^4 \exp(\hbar \omega / kT)}{(\exp(\hbar \omega / kT) - 1)^2} d\omega = \\ &= \frac{9Nk^3 T^3}{\Theta^3} \int_0^{x_D} \frac{\exp(x) x^4 dx}{(\exp(x) - 1)^2}.\end{aligned}\quad (3.31)$$

(3.31)-аңлатпадағы интегралды (3.29)-аңлатпа сыяқлы тек санлы усыллардың жәрдемінде есаплау мүмкін. $C_V(T)$ ғәрезлиги 3.12-сүўретте келтирилген.



3.12-сүўрет.

Дебай модели бойынша есапланған $C_V(T)$ ғәрезлиги. Абсцисса көшери бойынша келтирилген температура $\frac{T}{\Theta}$ қойылған.



3.12-а сүўрет.

Айырым затлардың экспериментте алынған жыллылық сыйымлықтарының температурадан ғәрезлиги. Тутас сызық пенен Дебай модели тийкарында сызылған теориялық иймеклик белгиленген.

Жокары температураларда $C_V(T)$ классикалық $3R$ мәнисине умтылады (4-мәселеге қараңыз).

Төменги температураларда $C_V T \approx \text{const} \cdot T^3$. Усы теңликтің дурыслығын көрсетеміз. (3.31)-аңлатпада $T \rightarrow 0$ шегінде $x \rightarrow \infty$ хәм $x_D \rightarrow \infty$ екенлигин итибарға аламыз. Бундай жағдайда (3.31)-интегралының шегараларын нол менен шексизлик деп есаплаймыз. Интегралдың өзи базы бир константаға тең болып шығады. Солай етип $C_V T \approx \text{const} \cdot T^3$ ғәрезлигинің орын алатуғынлығы дәлилленеди.

$C_V T \approx \text{const} \cdot T^3$ ғәрезлигин (нызамын) төмендегидей түрде көрсетпелирек етип алыу мүмкін. Температура нолге умтылғанда (яғный $T \rightarrow 0$ шәрти орынланғанда) C_V жыллылық сыйымлығына тийкаргы үлести киши жийиликке ийе акустикалық тербеліслер береді. Ал Дебай модели болса киши жийиликке ийе акустикалық тербеліслерди тәриплейді. Сонлықтан $kT > \hbar\omega = \nu\hbar K$. K кеңислигинде усындай векторлардың областы болып көлеми $(kT)^3$ шамасына пропорционал болған сфера хызмет етеді. Хәр бир фонон орташа $(kT)^1$ шамасына барабар энергияға ийе болады. Сонлықтан энергияның қоры (запасы) нормал тербеліслердің санына пропорционал хәм олардың хәр қайсысының орташа энергиясы $(kT)^4$ шамасына тең болып шығады. C_V жыллылық сыйымлығын энергияның температура бойынша алынған туындисына тең:

$$C_V(T) = (\partial E / \partial T)_V \approx \text{const} \cdot T^3. \quad (3.32)$$

Солай етип Дебай модели төменги температураларда жыллылық сыйымлығы болған $C_V T$ шамасын жеткиликли дәрежеде дурыс тәриплейді. Сонлықтан оны фононлардың дисперсиялық ғәрезлигинің акустикалық шақаларының төменги температуралардағы жыллылық сыйымлығына қосатуғын үлесин есаплау ушын жийи қолланады. Соның менен бирге Дебай моделин нурлардың затлардағы шашырауын болжау, нейтронлар менен фотонлардың фононлар менен тәсир етисіуін изертлеулерде де көп қолланады.

Эксперименталлық нәтижелер тийкарында хәр бир зат ушын жыллылық сыйымлығының мәніси де, Дебай температурасының мәніси де анықланған хәм олар хәр қыйлы справочниклерде берилген.

Биз де төменде хәр қыйлы химиялық элементлер хәм базы бир бирикпелер ушын Дебай температурасының мәніслерин кесте түрінде беремиз.

Элемент	θ , К	Элемент	θ , К	Элемент	θ , К
Be	1160	Fe	467	Al	418
Mg	406	Co	445	In	109
Ca	219	Ni	456	Tl	89
La	132	Pd	275	C (алмаз)	1910
Ti	278	NaCl	320	Si	658
Pt	229	KCl	227	Ge	366
V	273	Cu	339	Sn (серое)	212
Nb	252	Ag	225	Sn (белое)	189
Ta	231	Au	165	Pb	94,5
Cr	402	Zn	308	Bi	117
Mo	425	Cd	300	KBr	174
W	(379)	Hg	(60—90)	CaF ₂	474

Фононлардың дисперсиялық ғәрезлигинің оптикалық шақаларын жууық түрде аппроксимациялау ушын Эйнштейннің моделин жийирек қолланады ямаса Дебай моделине уқсас болған моделлерден пайдаланады. Бул моделлерде тийкарынан ω К функциясының түрін өзгертиу менен шекленеди.

Биз энди фононлар хаққында толығырақ гәп етемиз.

Биз жоқарыда пәнжерениң нормал тербелисинің энергиясының массасы тербеліуши атомлардың массасына тең, нормал тербелислердің жийилигине тең жийилик пенен тербелетуғын осциллятордың энергиясына тең екенлигин атап өткен едик. i -номерли нормал тербелистің жийилигин ω_i , ал энергиясын E_i арқалы белгилейик. $3N$ нормал тербелистің барлығы да қозған кристалдың толық энергиясы $E = \sum_{i=1}^{3N} E_i$ шамасына тең. Солай етип бир бири менен байланыслы тербелетуғын N атомнан туратуғын кристалдың толық энергиясы (гәптиң жыллылық энергиясы хаққында жүрип атырғанлығын умытпаймыз) $3N$ дана бир биринен ғәрезсиз тербелетуғын нормал сызықлы гармоникалық осциллятордың энергиясына тең. Бундай мағанада N дана тербеліуши атомнан туратуғын система $3N$ дана нормал осцилляторға эквивалент. Сонлықтан бундай системаның орташа энергиясын анықлау мәселесин нормал осцилляторлардың орташа энергиясын есаплау мәселеси менен алмастырыу мүмкин.

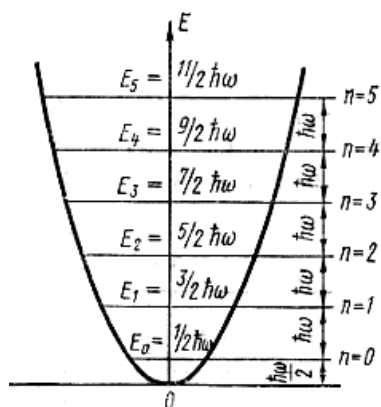
Нормал осцилляторлардың хақыйқый атомлар менен массасынан басқа хеш қандай қатнасының жоқ екенлигин атап өтемиз. Хәр бир осциллятор пәнжерениң бир нормал тербелисине сәйкес келеди, ал сондай бир нормал тербелиске кристалдағы барлық атомлардың тап сондай жийиликтеги тербелиси сәйкес келеди.

Квант осцилляторының энергиясы төмендеги формуланың жәрдемінде есапланады:

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega, \quad (n = 1, 2, 3, \dots). \quad (3.33)$$

Бул формулада ω арқалы осциллятордың тербелис жийилиги, ал n арқалы квант саны белгиленген.

Төменде келтирилген сүўретте сызықлы гармоникалық осциллятордың энергиялық спектри келтирилген (3.12-б сүўрет). Бул спектр бир биринен $\hbar \omega$ қашықлығында турған дискрет кәддилердің жыйнағынан турады.



3.12-б сүзрет.

Сызыклы гармоникалык осциллятордың энергиялык спектри. Бул спектр бир биринен $\hbar\omega$ қашықлығында турған дискрет қаддилердің жыйнағынан турады.

Нормал тербелістердің энергиясы нормал осциллятордың (гармоникалык осциллятордың) энергиясына тең болғанлықтан кристаллык пәнжерениң нормал тербелістерінің энергиясы (3.33)-аңлатпаның жәрдемінде анықланыуы керек. Ал оның энергиялык спектри 3.12 б сүзретте келтирилген спектрге сәйкес келиуі шәрт.

Жыллылык тербелістерінде кристаллык пәнжере тәрпіннен жутылуы ямаса шығарылуы мүмкін болған минималлык энергияның мәнісі (демек нормал тербелістің энергияның бир қаддинен екінші қаддине өтуі ушын керек болатуғын минималлык энергияның мәнісі) $\hbar\omega$ шамасына тең екен. Пәнжерениң жыллылык тербелістерінің энергиясының бул порциясына ямаса энергиясының квантына фонон деген атама берілген.

Жокарыда айтылған жағдайларды айқынластыруы ушын әпиұайы салыстыруы (аналогия) келтиремиз. Мейли абсолют қара денениң ишіндегі куұыслык тең салмаклы жыллылык нурланыуы менен толтырылған болсын. Квантлык көз-қарастан бул нурланыу жақтылыктың квантлары болған фотонлар газы түрінде қабыл етиледі. Фотонлардың энергиясы $\varepsilon = \hbar\omega = h\nu$, импульси $p = \hbar\omega/c = h/\lambda$ шамаларына тең. Бул формулаларда c арқалы жақтылыктың вакуумдағы тезлиги, λ арқалы жақтылык толқынының толқын узынлығы, ν арқалы жақтылыктың жийилиги белгиленген. Тап сол сыяклы кристалды толтырып туратуғын серпимли толқынларды да пәнжерениң нормал тербелістері болған фононлардан туратуғын газ сыпатында көз алдымызға келтириуимізге болады. Бир фононның энергиясы $\varepsilon_{\text{фонон}} = \hbar\omega = h\nu$, ал импульси болса $p_{\text{фонон}} = \hbar\omega/\nu = h/\lambda$ шамаларына тең.

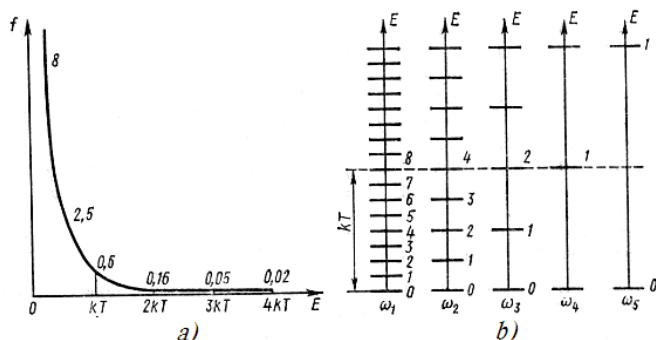
Усындай көз-қараслар бойынша қыздырылған кристал фонон газы менен толтырылған кутыға мегзес.

Фононлар да фотонлар сыяклы Бозе-Эйнштейн тарқалыу функциясы менен тәрпленеді:

$$f E = \frac{1}{\exp \frac{\varepsilon_{\text{фонон}}}{kT} - 1} = \frac{1}{\exp \frac{\hbar\omega}{kT} - 1}.$$

Қозыу дәрежесине байланыслы нормал тербелістер бирдей болған бир неше фононды нурландыра алады. Мысалы, егер нормал тербеліс 3-қаддиге шекем қозған болса (3.12-б сүзретте қараңыз), онда оның энергиясы $E_n = 3 + \frac{1}{2} \hbar\omega$ шамасына тең болады. Демек ол берілген нормал тербеліс қайсысының энергиясы $\hbar\omega$ ға тең болған үш фононды пайда етті деп есаплаймыз. Ал төмендегі 3.13 –с сүзретте фононлар ушын $f E$ тарқалыу функциясының графиги келтирилген. Бул графикте берілген T температурада энергиясы $\hbar\omega \approx kT$ ға тең болған барлық нормал тербелістердің қозатуғынлығы көринип тур. Ал энергиясы $\hbar\omega > kT$ шәртин қанаатландыратуғын нормал тербелістер бундай температураларда дерлик қозбайды. 3.13–с сүзретте берілген T температурада жийилиги ω_1 болған тербелістер 8-қаддиге шекем қозған. Демек бул нормал тербеліс орташа хәр қайсысының энергиясы $\hbar\omega_1 = kT/8$ ге тең сегіз бирдей фононды пайда етеді екен.

Жийилиги ω_2 ге тең болған нормал тербеліс шама менен 4-қәддиге шекем, ал жийилиги ω_3 тең болған нормал тербеліс 2-қәддиге шекем қозған. Ал жийилиги ω_4 болған нормал тербеліс 1-қәддиге шекем қоза алады.



33.13 –с сүрөт.
фононлар ушын $f(E)$ тарқалыу
функциясының графиги келтирилген.
Бул графикте берілген T
температурада энергиясы $\hbar\omega \approx kT$ ға
тең болған барлық нормал
тербелістердің қозатуғынлығы
көрініп тұр.

Мәселелер:

5. (3.31)-аңлатпа тийкарында Дюлонг хәм Пти нызамын хәм жоқары температуралар ушын ($T \gg \theta$ болған температуралар ушын) Дюлонг хәм Пти нызамына қосымшалар (дүзетиулер) киргизиңиз.

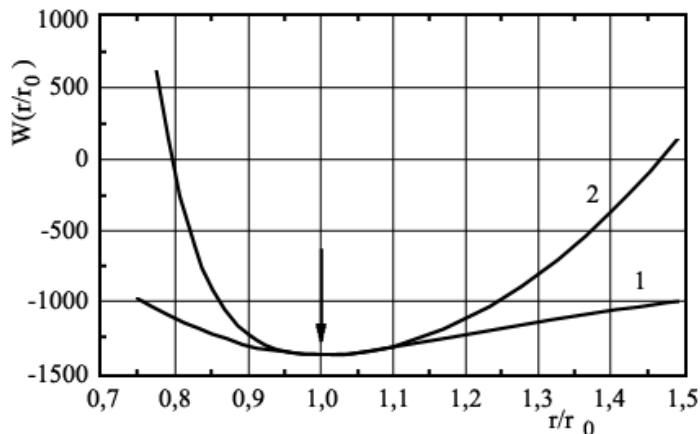
Көрсетпе. (3.31)-формуладағы интеграл астындағы аңлатпаны $\hbar\omega/kT$ киши параметри бойынша қатарға жайып оның жууық мәнисин есаплау керек.

Ангармоникалық жақынласыу

Биз жоқарыда кристалды бир бири менен тәсир етиспейтуғын осцилляторлардың жыйнағы деп қарадық. Бундай жағдайда потенциаллық энергия осциллятордың тең салмақтықтан ауысыуының квадратына пропорционал өседі, ал пәнжерениң қаттылығын тәриплейтуғын параметрлер болса осцилляторлардың тең салмақтық халдан ауысыуының өсиуіне байланыссыз өзгермей қалады. Мәселени бундай етип қарауды гармоникалық жақынласыу деп атаймыз. Бундай моделлер кристалдың жыллылық сыйымлығын дурыс есаплауға мүмкиншилик береді, бірақ фононлардың бир бири менен тәсирлесіулерине байланыссыз болған кристалдың көплеген параметрлерин (мысалы жыллылық өткізгішлікті) есаплауға мүмкиншилик бермейді. Гармоникалық моделлердің фононлардың фононлар менен тәсирлесіулерин есапқа алмайтуғынлығын аңғарыуымыз керек. Биз төменде кристалдың серпимлик модуллеринің термператураға ғәрезлигинің, жыллылық кеңейіуінің ангармоникалық қосымталарды кргизиуді талап ететуғынлығын көреміз. Бул қосымталар осцилляторлардың энергиясының олардың тең салмақтық аўхалдан ауысыуларының квадратынан ғәрезли емес екенлигинен дерек береді..

Кристаллардың жыллылық кеңейіуі. Дерлик барлық кристаллар (тап сол сыяқлы суйықлықтардың басым көпшилиги) температураның жоқарылауы менен кеңейеді. Егер бул кубысларды терең түрде қарайтуғын болсақ, олардың тәбиятының жүдә курамалы екенлигине исениуге болады. Жыллылық кеңейіуін кристалдың атомлары арасындағы орташа қашықтықтың үлкейіуі менен байланыссыз деп есаплайды. Бірақ жыллылық сыйымлығының себеби жүдә көп болыуы мүмкін. Соның ишинде потенциал энергияның атомлардың ауысыуының асимметриялық (яғный симметрияның болмауынан) ғәрезлигинен орын алыуы мүмкін. Бірақ соның менен бир қатарда жыллылық кеңейіуі температура жоқарылағанда атомлар арасындағы тәсир етиу күшинің өзгериуінің, хәр қыйлы атомлардың қайтадан топарласыуының, олардың электронлық бултарының ориентацияларының өзгерістерге ушырауына да, басқа да себептерге байланыссыз болыуы итимал. Төменде биз тийкарынан биринши себепти қарап шығамыз. Оны әдетте тийкаргы себептердің қатарына киргизеді. Ал басқа себептерди таллау курамалы математикалық процедураларды талап етеді.

Ең дәслеп жыллылық кеңейіуін жоқарыда атап өтилген гармоникалық жақынласыулардың жәрдемінде тәрипплеудің мүмкин емес екенлигин атап өтеміз. Бул жағдайда атомларды тең салмақлық орнына қайтарыушы күштің шамасы ауысыудың өзине, ал потенциал энергия болса атомлардың ауысыуының квадратына пропорционал еди.



3.13-сүүрет.
Хәр қандай жақынласыулардағы еки атом арасындағы тәсирлесиўге сәйкес келиўши потенциал энергия $U(r)$ дің атомлар арасындағы қашықлық r ге ғәрезлиги

Еки атом арасындағы тәсирлесиўге сәйкес келиўши потенциал энергия $U(r)$ шамасының олар арасындағы қашықлық r ден ғәрезлигин ҳақыйқый жағдайлар ушын (3.13-сүүреттеги 1-сызық) хәм гармоникалық жақынласыу жағдайы ушын қарайық (3.13-сүүреттеги 2-сызық). Кейинги (гармоникалық жақынласыуда) жағдайда атомлардың тербеліс амплитудаларының өсиўи менен олардың потенциал энергияларының минимумына сәйкес келиўши тең салмақлық орынлары (яғный олар арасындағы қашықлықтың орташа мәниси) өзгермейди. Демек бундай жағдайларда жыллылық кеңейіуи орын алмайды деген сөз. Ал егер ҳақыйқатта орын алатуғын $U(r)$ ғәрезлигиниң температураның жоқарылауы менен өзгерисин қарайтуғын болсақ, онда энергияның өсиўи менен бақланатуғын оның асимметриялығынан атомлар арасындағы орташа қашықлық өзгериске ушырайды. Атомлар арасындағы қашықлықтың өсиў дәрежеси $U(r)$ ғәрезлигиниң симметриялықтан ауысыу (шетке кетиу) дәрежесине байланыслы. Усындай асимметриялықты есапқа алыу ушын $U(r)$ функциясын $r - r_0$ бойынша $r - r_0^2$ шамасына салыстырғанда жоқарырақ дәрежеге ийе қатарға жайыу керек болады. Асимметриялық әдетте $r - r_0^3$ ағзасы тәрепинен тәриппленеди.

$$U(r) = U(r_0) + c(r - r_0)^2 + g(r - r_0)^3 + \dots \quad (3.33)$$

Больцман тарқалыуы орын алатуғын Жеткиликли дәрежедеги жоқары температураларда (3.33)-аңлатпаны есапқа алыу төмендегидей аңлатпаның алыныуына алып келеди:

$$\langle r \rangle \approx r_0 + [3gk / (3c^2)]T \quad (3.34)$$

Бул нәтийже өжире температураларына жақын температуралардағы жыллылық кеңейіуиниң эмперикалық нызамларын есаплауға мүмкиншилик береді:

$$l(T) = l_0(1 + \alpha(T - T_0)), \quad (3.35)$$

Бул формулада l_0 аркалы денениң $T = T_0$ температурадағы узынлығы белгиленген, ал $l(T)$ болса денениң берилген T температурасындағы узынлығы. α параметрин денениң

сызықты жыллылық кеңейіуі коэффициенті ямаса жыллылық кеңейіу коэффициенті деп аталады. Бул коэффициенттің мәнісі физикада былайынша анықланады:

$$\alpha = (1/l)(dl/dT), \quad (3.36)$$

α шамасының (коэффициентінің) мәнісін өлшеу үшін бір неше әпіуайы хәм дәл усыллар ислеп шығылған. Олардың ишиндегі ең көп тарқалғаны дилатометрия болып табылады. Бул усылда үлгинің узынлығы хәр қыйлы температураларда дәл анықланады. Усы мағлыұматлар тийкарында жыллылық кеңейіу коэффициентінің мәнісі есапланады. Ал рентгенографияда (рентгенографиялық дилатометрия) болса хәр қыйлы температуралардағы кристаллографиялық тегисликлер арасында қашықтықлардың мәнісі аңсат өлшенеди. Нәтийжеде $d(T)$ ғарезлигі анықланады. Ал рентгенографиялық экспериментлердің оптикалық схемасына байланысly үлгинің узынлығын $dT = \text{const} \cdot l(T)$ формуласына сәйкес анықлайды. Өлшеулерде анықланған $d(T)$ ямаса $l(T)$ ғарезликлері бойынша (3.36)-формуланың жәрдеминде α есапланады.

Значения α дают информацию о точности гармонического приближения для описания процессов колебаний атомов в данном веществе при разных температурах и о параметрах C и ξ , что важно для развития теории твердых тел. Кроме того, любая перестройка структуры вещества, любое изменение сил взаимодействия в веществе изменяют α . Поэтому точное измерение $\alpha(T)$ широко используется в физике и технике как простой метод определения температур фазовых переходов, подбора оптимальных термообработок, контроля состава и качества материалов и т.д. Такие исследования показывают, что можно считать α независимым от температуры только в сравнительно небольших (порядка 100-200 К) диапазонах температур, в которых не происходит фазовых превращений. Заметим, что α заметно изменяется в области низких температур (1-100 К) [6-8].

Көпшилик затлар үшін $T = 200 - 500$ К температураларда α ның мәнісі $10^{-5} \cdot 1/T$ этирапында болады. Айырым затлар үшін (темир-никель куймаларында, инварлық деп аталатуғын куймаларда) α шамасының мәнісі жүдә киши болады. Олар $T = 200 - 500$ К температураларда температураның өзгеріуі менен геометриялық параметрлерін жүдә киши шамаларға өзгертетуғын (мысалы саатлардың маятниклерін соғыу үшін) затлар сыпатында техникада кеңнен қолланылады. Айырым затлардың (тийкарынан металлардың) сызықты жыллылық кеңейіу коэффициенттері төмендегі кестеде берілген.

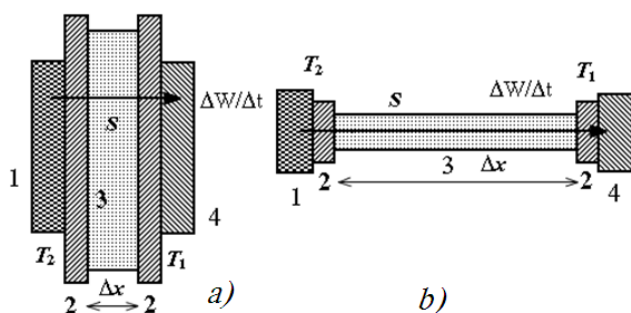
Өжире температураларына жақын температуралардағы сызықты жыллылық кеңейіу коэффициенттері

Затлар	$\alpha \cdot 10^{-6}, \text{град}^{-1}$	Затлар	$\alpha \cdot 10^{-6}, \text{град}^{-1}$
Li	45	Fe	11,7
Na	71	Ni	12,5
K	83	Cr	7,5
Cs	97	Mo	5,2
Cu	17,0	Ta	6,6
Ag	18,9	W	4,6
Au	13,9	Ir	6,5
Ca	22,5	Pd	11,6
Al	23,6	Pt	8,9
Pb	28,8	Cd	32,5
Ge	5,8	B	2

Кристаллардың жыллылық өткізгішлігі. Дененің жыллылық өткізгішлік коэффициенті деп дененің бетинің майданының бір бірлігі арқалы бір ұақыт бірлігінде хәм температураның градиенті бір бірлікке тең болғанда өтеуғын жыллылық энергиясының муғдарына айтады. Жыллылық өткізгішлік коэффициентін K арқалы, бір бірлік бет арқалы өткен жыллылық энергиясын ΔW арқалы, температура градиентін dT/dx арқалы белгілейміз (3.14-сүүрет). Нәтийжеде төмендегі формуланы жазамыз (анықлама тийкарында):

$$\Delta W = \Delta S \Delta t \frac{dT}{dx} K. \quad (3.37)$$

Бул формула денелердің жыллылық өткізгішлігін экспериментте анықлағанда да пайдаланылады. Буның ушын K ны есаплау ушын керек болатуғын барлық шамалар өлшенеди. Жыллылық сыйымлығын өлшейтуғын дүзилістердің схемалары 3.14-сүүретте келтирилген.



3.14-сүүрет.

Жыллылық өткізгішлікті өлшейтуғын дүзилістің схемасы.

а) киши жыллылық өткізгішлікке ийе үлгілер хәм б) үлкен жыллылық өткізгішлікке ийе затлар ушын.

Диэлектриклерді изертлегенде алынған эксперименталлық мағлыұматлар температура абсолют нолден үлкейгенде K шамасының үлкейетуғынлығын көрсетеди.; 3-50 К температурада K созылған түрдегі максимумға ийе, ал температураның буннан кейінгі жоқарылауы менен K ның шамасы кемейеди. Салыстырмалы жоқары температураларда (шама менен Дебай температураларында) жыллылық өткізгішлік коэффициентінің мәнісі $1/T$ ға пропорционал кемейеди.

Бундай ғәрезлікті теориялық түсіндириу төмендегі жағдайға тийкарланған: диэлектриклерде жыллылықты фононлар алып жүреди, олар серпимли толқынлар сыпатында идеал пәнжереде еркін қозғалады хәм кристаллық пәнжеренің дефектлері менен тәсир етискенде ғана өзлеринің қозғалыс бағытларын өзгертеди. Бундай дефектлер қатарына дәнешелер менен кристаллық блоklar арасындағы шегаралар, кристаллық пәнжеренің басқа да дефектлерін киргизиуға болады. Соның менен бирге кристаллық пәнжеренің модуляциясына алып келетуғын кристаллық пәнжеренің бир текли емес деформациялары да фононлардың кристал бойынша тарқалыуына тәсирін тийгизеди. Бундай модуляциялардың тутқан орнын айрықша түрде айтап өтиуға туұры келеди. Себеби сол модуляциялардың жәрдемінде фононлардың бир бири менен тәсирлесіу механизмлері түсіндириледі.

Биз жоқарыда кристалды бир бири менен тәсирлеспейтуғын осцилляторлардың жыйнағы сыпатында қарап өттік. Бул жағдай кристалдың жыллылық қасиетлерін түсіндириу ушын Бозе-газ теориясын пайдаланыуға мүмкіншілік берди. Егер тең салмақлық орнынан ауысқан атомларды кейінге қайтарыушы күшлердің шамасы ауысуы менен сызықлы түрде байланысқан болса (яғнай кристалдың серпимли константалары атомлардың ауысуына байланыссы емес болған жағдай) тап сондай жақынласыуды пайдаланыу мүмкін. Бирақ бундай жақынласыу (бундай жақынласыуды гармоникалық жақынласыу деп атайды) жууық түрде орынланады. Гармоникалық жақынласыу жууық түрде орынланғанда ғана еки фонон арасындағы тәсирлесіудің физикалық механизмлерін түсіндириу мүмкін. Сызықлы бир текли орталықларда серпимли

толқынлардың тарқалыу теориясы бойынша фононлардың бір бири менен тәсир етиспеуі керек.

Еки фононның бір бири менен тәсир етисіуінің мүмкіншилиги төмендегіше түсіндириледі. Мейли кристал бойынша фонон тарқалатуғын болсын. Ол кристалды өзінің толқын ұзындығы λ шамасына тең дәуір менен деформациялайды. Бундай жағдайда жоқарыда атап өтилгендей кристалда серпимли турқлылардың модуляциясы пайда болады. Бул модуляция «дифракциялық пәнжере» ни еске түсиреди. (бундай жағдай 3.1-сүүретте келтирилген). Екинши фонон ұсындай «дифракциялық пәнжере» де қозғалып дифракцияға ушырауы мүмкіншилигине ийе болады. Нәтийжеде ол өзінің қозғалыс бағытын өзгертеді. Буның себеби өзіне тән дифракциялық пәнжерени пайда еткен биринши фонон болып табылады. Бундай жағдайда еки фононның тәсир етисіуі, соқлығысыуы ҳаққында гәп етеді. Ұсындай соқлығысыудың зәрүрли шәрти «сызықлы емес эффект» - фонон өткенде кристаллық пәнжерениң серпимли қәсийетлериниң өзгеріуі болып табылады. Сонлықтан фононлардың соқлығысыу процесслери кристаллардағы тәсир етисіулердиң «ангармоникалық, сызықлы емес» қәсийетлериниң көриніуі болып табылады.

Фононларды бір бири менен сийрек тәсир етисетуғын дерлик идеал Бозе-газ деп қарау жәрдемінде жыллылық өткізгішлік коэффицентин есаплағанда идеал газ ұшын алынған формуланы пайдаланыуға имканият береді:

$$K = C_V v l_{eff}. \quad (3.38)$$

Бул формулада C_V арқалы турақлы көлемдеги газдиң бір бирлик көлеминиң жыллылық сыймлығы (биз қарап атырған жағдайда Бозе - газдиң), v арқалы газ молекулаларының орташа тезлиги, l_{eff} арқалы газ молекуласының (биз қарап атырған жағдайда бозонлардың) еркин жүріу жолының эффективлик ұзындығы белгиленген.

l_{eff} шамасы жыллылықты алып жүріушілердиң бір бири менен соқлығысыу жийилигинен хәм ең баслысы сол соқлығысыулардың берилген түриниң жыллылық «алып жүріушілериниң» энергияны алып жүріу картинасына қалайынша тәсир ететуғынлығына байланысы. Энергия тасыушы бөлекшелердиң қозғалыс бағытын киши шамаларға өзгертетуғын соқлығысыулар энергияның алып жүрилиуіне хәм l_{eff} шамасына эззи тәсир ететуғынлығы өз-өзинен түсиникли (3.15 а сүүрет). Ал жыллылық алып жүріушілериниң бағытларының күшли өзгериси энергияның алып жүрилиуіне хәм l_{eff} шамасына үлкен тәсир жасайды (3.15 б сүүрет).

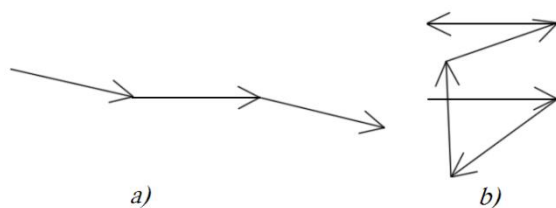
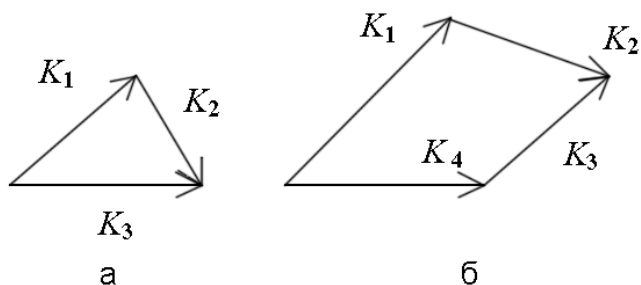


Рис. 3.15.
Соқлығысыулардың ақыбетінде қозғалыс бағыты киши мүйешлерге (а) хәм үлкен мүйешлерге (б) өзгертетуғын бөлекшениң қозғалысының схемасы.

Энергия менен импульстиң сақланыу ызамалары орынланатуғын фононлардың $k_1 + k_2 \rightarrow k_3$ хәм $k_1 + k_2 \rightarrow k_3 + k_4$ түриндеги соқлығысыулар да жыллылық өткізгішлік коэффицентин K ның жүдә аз өзгеріуіне алып келеді (3.16-сүүретте де қараңыз). Бундай процесслерди нормал процесслер (ямаса N-процесслер) деп атайды.



3.16-сүрөт.

Энергия менен импульстин сақланыуы
нызамлары орынланатуғын
фононлардың $k_1 + k_2 \rightarrow k_3$ хәм $k_1 +$
 $k_2 \rightarrow k_3 + k_4$ түріндегі
соқлығысыуларының схемасы.

Фононлардың соқлығысыуының нормал процесси деген атама фононлардың импульстарының қосындысы болған $k_1 + k_2$ шамасының өзгермей қалыуы менен байланысly. Бундай процессте соқлығысатуғын фононлар коллективиниң қозғалыс бағыты да, усы процесс пенен байланысly болған жыллылықтың көшіу бағыты да сақланады.

Кристалларда $k_1 + k_2 \rightarrow k_3 + G$ түріндегі соқлығысыулардың да орын алыуы мүмкін (3.17-сүрөтте келтирилген). Бул аңлатпада G арқалы кері пәнжере векторы белгиленген. Демек $k_1 + k_2 \rightarrow k_3 + G$ түріндегі соқлығысыуда кері пәнжере векторы G есапқа алынбайтуғын болса әдеттегі түрдегі жазыуларда импульстин сақланыуы нызамы орынланбайды..

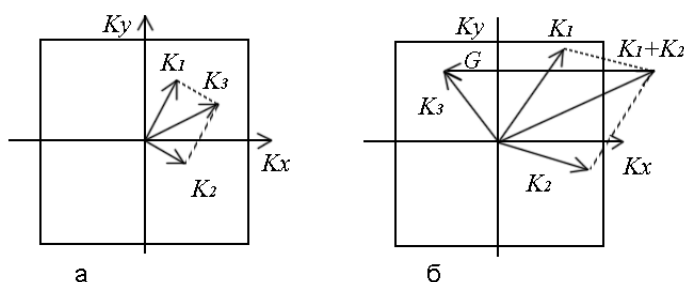


Рис. 3.17.

Схема процесса переброса

Бундай соқлығысыуларда фононлардың қосынды импульси болған $k_1 + k_2$ шамасының мәніси Бриллюэнниң биринши зонасының шегарасының арғы таманында жайласқан болыуы керек хәм фононлар системасының импульсине кристаллық пәнжерен алынған G импульси қосылады. Усының нәтийжесинде пайда болған фононның импульси k_3 тиң бағыты фононлардың қосынды импульси болған $k_1 + k_2$ векторының бағытынан үлкен айырмаға ийе болады. Бир соқлығысыудың салдарынан фононлар системасының қозғалыс бағыты күшли өзгертетуғын тап усындай процесслер хәм усы процесслер менен байланысly болған жыллылық энергиясының көшіуінің бағытының өзгеріуі жыллылық өткізгішлікке үлкен тәсирин тийгизеди. Бундай процесслерди ылақтырыу процесслери (орыс тилинде процессы переноса) ямаса U-процесслери деп атайды.

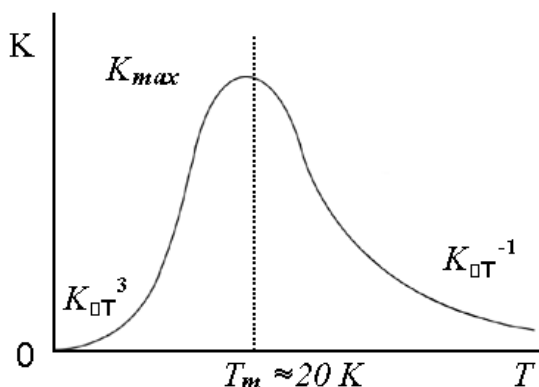
Ылақтырыу процесслериниң жүзеге келиуі ушын k_1 хәм k_2 шамаларының үлкен, олардың сан шамасының $G/4$ шамасына барабар ямаса оннан үлкен болыуы тийис. Бундай процесслер жеткиликли дәрежедегі жоқары температураларда орын алады. Бундай температураларда энергиясы да, толқын векторы да үлкен болған фононды ушыратыудың итималлығы жоқары.

Жыллылық өткізгішлік коэффициентиниң жоқары температуралардағы термпературадан ғәрезлигиниң шамасын бахалаймыз. Бундай жағдайда C_V шама менен турақлы мәніске ийе хәм $k > G/4$ шәрти орынланатуғын фононлардың саны жеткиликли дәрежеде үлкен. Бундай жағдайда еркин жүріу жолының узынлығы жоқарыда айтылған фононлар менен соқлығысыудың итималлығына кері пропорционал. Усындай итималлық болса олардың санына ямаса температура T ға пропорционал

(жоқарыда биз фононлардың санының температураға пропорционал екенлигі хакқында гәп еткен едик). Нәтийжеде $K T = \text{const}/T$ ғәрезлигине ийе боламыз. Бундай ғәрезлик экспериментте бақланады.

Жыллылық өткізгішлік коэффициентинің төменгі температуралардағы температуралық ғәрезлигинің шамасын бақалаймыз. Бул жағдайда C_V ның шамасы T^3 ке пропорционал, ал $k > G/4$ шәрти орынланатуғын фононлардың саны жүдә аз, бул санның мәниси $\exp - G \hbar \nu / 4kT$ шамасына пропорционал хәм $T \rightarrow 0$ шегинде нолге умтылады. Бундай жағдайда l_{eff} шамасының мәниси шексизликке умтылыуы керек. Бирақ l_{eff} шамасының шексизликке умтылыуы орын алмайды. Себеби фононлардың хәр қыйлы структуралық дефектлерде шашырауы өзинің тәсирин тийгизеди. Бундай жағдайда l_{eff} ның шамасы температурадан ғәрезсиз болған дефектлердің концентрациясы бойынша анықланады. Усы жағдайларға байланыслы l_{eff} шамасын температурадан ғәрезли емес, ал C_V ның шамасы T^3 ке пропорционал деп есаплай аламыз. Демек жыллылық өткізгішлік коэффициенті $K T$ температураның кубына пропорционал деп жуўмақ шығарамыз. Бул жағдайдың дурыслығы экспериментлерде анық тастыйықланады.

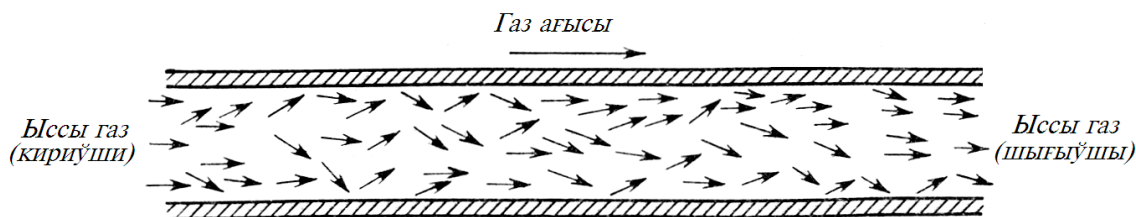
Солай етип жыллылық өткізгішлік коэффициенті $K T$ ның температурадан ғәрезлигин теориялық жоллар менен түсиндириў мүмкин. Бул ғәрезлик 3.18-сүўретте келтирилген. Бул сүўретте $K T$ ның 20-50 К температурада максимумға ийе болатуғынлығы хәм төменгі температураларда да, жоқары температураларда да кемейетуғынлығы көринип тур.



3.18-сүўрет.
Кристаллық диэлектриклер ушын
жыллылық өткізгішлік коэффициентинің
температурадан ғәрезлигинің схема
түринде көрсетилюй.

Биз жоқарыда фононлардың жыллылық өткізгішлік процессине қосатуғын үлесин карап өттік. Ал жыллылық энергиясын өткізгішлер деп аталатуғын затлардағы еркин электронлар да алып жүре алады. Әдетте еркин электронлар өткізгішлерде жыллылық өткізгішликке фононларға салыстырғанда әдеўир үлкен үлес қосады.

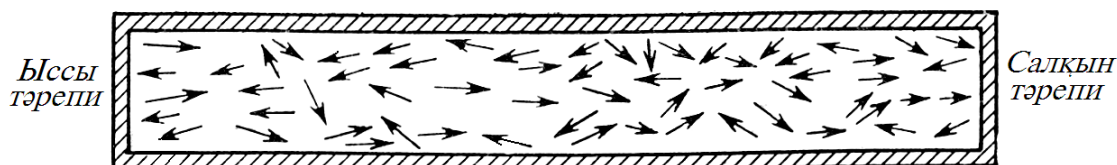
Биз төменде көргізбелилик мақсетинде фононлар тәрепинен жыллылықтың алып жүрилиуі бойынша бир неше сүўретлерди келтиремиз (Фн-1 - Фн-4 сүўретлер).



Фн-1 сүўрет.

Газ молекулаларының узын хәм ушлары ашық най аркалы ағыуы (най дийуалларында сүйкеліс болмайды деп есаплаймыз). Газ молекулаларының бир бири менен серпимли соқлығысулары толық импульсти хәм ағыстың энергиясын өзгертпейди. Себеби хәр бир

соқлығысыұда соқлығысыұшы бөлекшелердің массалар орайының тезлиги хәм олардың толық энергиясы өзгериссиз қалады. Сонлықтан температураның градиенти болмаған жағдайда да найдың шеп тәрәпинен оң тәрәпине энергияның ағысы орын алады. Демек жыллылық қарсылығы нолге тең, ал жыллылық өткізгішліктің шамасы шексиз үлкен.



Фн-2 сүўрет.

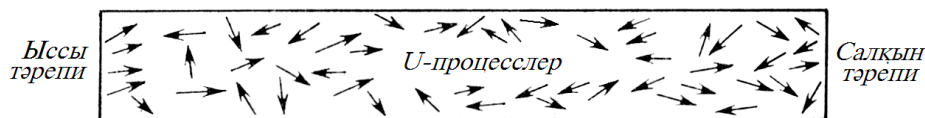
Массаның көшіюі орын алмайтуғын жағдайдағы газдың жыллылық өткізгішлігін әдеттегідей етип анықлауды иллюстрациялаушы схема. Бул жерде найдың еки ушын да жабық: молекулалар сырттан келип қосылмайды хәм шығып та кетпейди.

Соқлығысыұшы молекулалардың температуралар градиенти бар болған жағдайда массалар орайының тезлиги орташа тезликтен жоқары болған молекулалар шеп тәрәпке, ал массалар орайының тезлиги орташа тезликтен төмен болған молекулалар шеп тәрәпке қарай қозғалыу тенденциясына ийе болады. Оң тәрәпте үлкен болған концентрацияның үлкен емес градиенти массаның қосынды көшіюінің нолге шеккем кемейіуін, ал найдың ыссы тәрәпинен салқын тәрәпине қарай энергияның көшіюін тәмийинлейди.



Фн-3 сүўрет.

Фононларды узын кристалдың бир ушында пайда етиу мүмкин (мысалы шеп тәрәптеги ушын «фононлық» лампа менен жақтыландырсақ). Усының нәтийжесинде кристалдың шеп тәрәпинен оң тәрәпине қарай фононлар аға баслайды. Егер кристалда шашыраудың тек әдеттеги (нормал) процесси (яғный N-процесс) орын алса (бундай процессте $k_1 + k_2 \rightarrow k_3$ ямаса $k_1 + k_2 \rightarrow k_3 + k_4$ теңликтери орынланады) соқлығысыұларда фононлар ағысы толық импульсин сақлайды хәм фононлардың бир бөлеги кристалдың барлық узынлығы бойынша ағып өтеди. Шеп тәрәптеги кристалдың ушына келип жеткен фононлардың (принципинде) нурларға айландырыу мүмкин. Усының нәтийжесинде фононлардың ағысы тамам болады (орысшасы «сток фононов»). Бул жағдайда да Фн-1 сүўреттеги жағдай орын алады хәм жыллылық қарсылығы нолге тең.



Фн-3 сүўрет.

$k_1 + k_2 \rightarrow k_3 + G$ теңлиги орын алатуғын ылақтырыу процесси (U-процесслер) орын алатуғын болса хәр бир шашырау актинде фононлардың импульси күшли өзгереди. Оң тәрәпке қарай қозғалыушы фононлар дәстеси тез ыдырайды. Кристалдың ушлары «дереклер» болып та, фононлардың ағысы «жоғалатуғын» (сток) орын болып та хызмет етеди. Температуралар градиенти болған жағдайда энергияның көшіюі Фн-2 сүўретте көрсетілген жағдайдағыдай болады.

Кристаллардың электрлік қасиеттери

Кристаллық денелер бір биринен электрлік қасиеттері бойынша күшті айырылады. Мысалы металлар электр тоғын жақсы өткереді. Сондықтан оларды өткізгіштер деп атайды. Ал айырым кристаллар электр тоғын пүткіллей өткермейді. Оларды изоляторлар деп атайды. Қатты денелер арасында ярым өткізгіштер деп аталатынын заттар да бар. Олар электр өткізгішлігі бойынша көпшілік жағдайларда металлар менен ярым өткізгіштердің арасын ийелейді. Электр өткізгіштіктің бұндай үлкен айырмасы кристалды пайда етіуші атомдардың электронларының энергиялық кәдділер бойынша тарқалыуына байланысты. Бұндай тарқалыудың түріне затты құраушы атомдардың кеңістіктегі дәуірлі жайласыулары күшті тәсір жасайды. Бұл атомдар кеңістікте үш өлшемлі дәуірлі потенциал пайда етеді, ал бұл потенциалдың майданында электронлар қозғалады. Электрондардың қозғалысына кристаллық пәнжердегі олардың дифракциясы күшті тәсір етеді. Бұндай дифракцияның нызамлықтары хәққында жоқарыда толық айтылып өтілді.

Енді биз электрондардың кристаллық пәнжерінің дәуірлі потенциалындағы қозғалысын үйрениуге өтеміз. Бұл қозғалыс кристаллардың электрлік қасиеттерін түсіндіреді алады. Айрықша дыққат ярым өткізгіштердегі процессерді көріп шығыуға арналған. Соның менен бірге ярым өткізгіштер техникасы үшін әхміетлі болған дүзилістердің іслеу принциптері қарап өтіледі.

Қатты денелердегі электронлық халлар

Қатты денелердегі электронлық халларды қалай есаплайды? Кристадағы хәр бір электрон атом ядролары хәм басқа электронлар тәрәпинен дәретілген құрамалы майданда қозғалады. Бұндай жағдайда кристал ішіндегі электрон үшін Шредингер теңлемесін шешиу хәм усының нәтижесінде электронның энергиялық халларының системасын табыу шешилиуі қыйын болған мәселелердің бири болып табылады. Бұндай теңлемени хәзіргі уақытларға шекем шешиудің мүмкіншілігі жоқ. Сондықтан усындай мәселени шешиу үшін әпиуайыластыратуын хәр қыйлы жақынласыулардан пайдаланады.

Бириншіден, атомдардың ядросы хәм ішкі қабықларда жайласқан электронлар қабықтарын өз ішіне алатуын иондардың тулғалары потенциалындағы сыртқы электрондардың қозғалысын ғана қарайды. Бұндай жағдайда иондардың тулғаларының әдеуір эззи потенциалындағы электронлар үшін Шредингер теңлемесі шешиледі. Мәселе әдеуір әпиуайыласады. Бирақ усы усылдың жәрдемінде де электронның сондай қозғалыстары үшін жүдә әпиуайыластырылған (тийкарынан үш өлшемлі емес, ал бір өлшемлі) мәселелерді шешиудің сәті түсті. Төменде дәуірлі потенциалдағы электронның бір өлшемлі қозғалысы хәққындағы шешімнің (Крониг-Пенни модели) нәтижелерін қарап шығамыз.

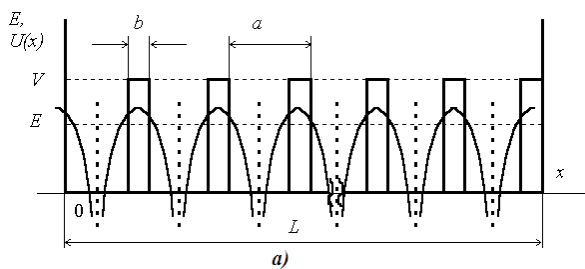
Екиншіден, дара жағдайдардың кең тарқалған төмендегідей екі түрін қарайды: 1) күшті байланыс жақынласыуы хәм 2) дерлік еркін электронлар жақынласыуы.

Күшті байланыс жақынласыуында электронның өзіннің атомы менен тәсір етисіу энергиясы басқа атомдар менен тәсір етисіу энергиясынан көп есе үлкен деп есапланады. Басқа сөз бенен айтқанда электронлар өзлерінің атомдары менен күшті байланысқан, ал сол өзлерінің атомдарына басқа атомдар электромагнит майданлары менен эззи тәсір етеді. Бирақ сол электромагнит майданлары атомның энергиялық кәдділерін бір неше кәдділерге ажыратады. Усындай жоллар менен атомның энергия кәдділері сырттан түсірілген магнит майданының тәсірінде де бір неше кәдділерге ажырайды. Бұндай құбылысты Зеeman эффекті деп атаймыз. Бұндай жағдайда атомдардың бір бири менен тәсірлесіуі изоляцияланған атомның энергиялық кәдділерінің сүүретін шамалы ғана өзгертеді.

Дерлик еркин электронлар жақынласыуында электронларды ион тулғаларының эззи потенциалында дерлик еркин қозғалады деп есаплайды. Ал ионлардың тулғаларының эззи потенциалын киши түртки (возмущение) деп қарау қабыл етилген. Бундай жағдайда электронның кинетикалық энергиясының мәніси ион менен тәсирлесіу энергиясының мәнісінен үлкен болады. Бул илимий көз-қарастан да, методикалық көз-қарастан да ең сәтти болып шыққан усыл хәзирги уақытлары тәжірийбелерде бақланып жүрген дерлик барлық ызыамлықлар менен эффектлерди көрсетпели етип түсіндірмекте.

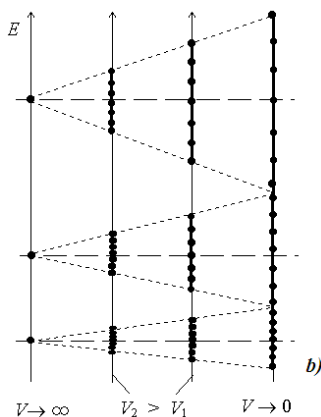
Биз төменде күшли байланыс жақынласыуына да, Крониг-Пенни усылына да итибар беремиз. Бирақ ең баслы дыққатты дерлик еркин электронлар жақынласыуына аударамыз.

Крониг-Пенни усылы. Крониг-Пенни усылында эпиуайы формаға ийе дәуірли потенциалдағы электронның бир өлшемли қозғалысы үйрениледі: кеңлиги L ге тең, бир биринен a қашықтығында жайласқан бир өлшемли потенциал шуқырлар арасында тууры мүйешли барьерлер жайласқан. Олардың хәр қайсысының бийиклиги V шамасына, ал кеңлиги b шамасына тең (4.1-сүүретке қараңыз). 4.1-сүүретте тутас жиңишке сызықлар менен белгиленген ионлық тулғалардың хақыйкый потенциалы менен тууры мүйешли потенциаллық барьерлер арасында үлкен айырманың бар екенлигин өз-өзинен түсиникли. Бирақ усындай турпайы модель кристалда қозғалатуғын электронлардың энергиялық спектриндеги ызыамлықларды түсіндирип бере алады.



4.1-а сүүрет.

Крониг-Пенни моделиндеги потенциал энергияның түри (а) хәм энергия шкаласындағы энергия E ниң потенциал $U(x)$ тың бирликлериндеги руқсат етилген мәніслериниң тарқалыуының схемасы (b).



4.1-б сүүрет.

Крониг-Пенни моделиндеги потенциал энергияның түри (а) хәм энергия шкаласындағы руқсат етилген энергия E ниң тарқалыуының схемасы (b).

Жоқарыда көрсетилгендей потенциал шуқырдағы Шредингер теңлемесин жууық түрде шешиу методлары көпшиликке белгили. Теңлемени шешиудің нәтийжесинде электронның энергиясы E ниң қәлеген мәніске емес, ал айырым руқсат етилген хәм қадаған етилген мәніслериниң бар болатуғынлығын көриуге болады (4.1-сүүретке қараңыз). E шкаласындағы усы E шамасының руқсат етилген мәніслериниң болмайтұғын участкасын қадаған етилген энергиялық зона деп атайды (гейде қадаған етилген энергиялық жолақ деп те атайды). Ал E ниң руқсат етилген мәніслери жайласқан зонаны руқсат етилген энергиялық зона деп атайды (ямаса руқсат етилген энергиялық жолақ деп атайды).

4.1-(а) сүүретте келтирилген потенциаллық барьерлердің бийиклиги менен кеңлиги өзгергенде электронлардың қәдилер бойынша тарқалыуының өзгерислерин анықлау қызықлы мәселелердің бири болып табылады.

Барьерлер болмағанда мәселе кеңлиги L болған бір өлшемлі потенциал шуқырдағы электронның қозғалысы хаққындағы мәселеге айналады. Бундай жағдайда толқын функциясы Ψ ушын дәуирли шегаралық шәрт сайлап алынады. Электронның энергиясының мәнислери 4.1 (b) сүүретте келтирилген. Энергияның руқсат етилген мәнислери шкала бойынша толтырылмаған айтарлықтай үлкен орынларға ийе емес.

Егер барьерлер бийик хәм кең болса олар арқалы электронлардың туннеллениўин есапқа алмаў мүмкин. Бундай жағдайда мәселе электронның кеңлиги $a - b$ болған бір өлшемлі потенциал шуқырдағы қозғалысы хаққындағы мәселедей мәселеге ийе боламыз. Электрон бул киши потенциал шуқырда локалланған болады (тап «өзинин» атомында локалланған сыяқлы). E шкаласындағы электронның энергиясының мәнислеринин тарқалыўы 4.1-b сүүретте келтирилген. Энергияның руқсат етилген мәнислери бир биринен изоляцияланған.

Барьерлердин бийиклиги менен кеңликлери аралықлық мәнислерге ийе болса (яғный жүдә үлкен де, жүдә киши де болмаса) энергия E ниң мәнислерин жуўық усыллардың жәрдемінде есаплайды. Бул жағдайдағы энергияның руқсат етилген мәнислери 4.1 b сүүретте көрсетилген жағдайдағыдай болады. Бул сүүретте барьерлердин бийиклиги үлкейгенде руқсат етилген хәм қадаған етилген энергия зоналарының шегаралары орналасқан орынлар өзгериске ушырайды. Атап айтқанда қадаған етилген зоналар руқсат етилген зоналардың есабынан кеңейеди. Потенциал барьерлер арқалы өтиў дерлик мүмкин болмай қалған жағдайларда зонаның кеңлиги бир қәддиниң кеңлигине (бир сызықтың кеңлигине) шекем киширейеди. Бундай ситуация изоляцияланған атомлар ушын тән, электрон өз атомының дөгерегінде локализацияланған. Бул күшли байланыс жақынласыўына сәйкес келеди.

Күшли байланыс жақынласыўы. Бул жақынласыўда берилген атомдағы электронның байланыс энергиясы бул электронның басқа атомлар тәрәпинен пайда етилген майданлар менен тәсир етисиў энергиясынан жоқары деп есапланады. Бундай жағдайда конденсацияланған заттағы (кристаллардағы хәм суйықлықлардағы) электронлық халлар изоляцияланған атомлардағы электронлық халларға уқсас болады. Себеби бундай жағдайларда атомлардың бир бири менен тәсирлесиўлери атомның электронлық халларын өзгерте алмайды.

Күшли байланыс жақынласыўы өзлериниң электронларын беккем услап турыўшы атомлардағы (ионлық хәм ковалентли кристаллардағы атомлар) электронлардың энергия қәдилериниң системасын жақсы тәриплейди. Қәдилер системасының түрин былайынша анықлаймыз: атомлар өзлери пайда еткен электр хәм магнит майданлары арқалы басқа атомларға тәсир етеди, бул майданлар басқа атомдағы энергияның бир қәдин бир неше қәдилерге ажыралыўын болдырады. Демек биз қарап атырған жағдайда конденсацияланған заттағы изоляцияланған атомлардағы энергияның бир қәди орнына энергияның базы бир диапазонында жайласқан көп санлы қәдилер жыйнағы пайда болады. Бундай жыйнақты энергиялық жолақ ямаса руқсат етилген энергиялық зона деп атайды.

Дәслепп бир биринен үлкен қашықлықларда жайласқан N дана атомларды қараймыз. Бундай жағдайда атомлар арасындағы тәсирлесиўди есапқа алмаўға болады хәм олардың хәр қайсысын өз алдына алып қараў керек. Атомлардың барлығы да бирдей энергиялар қәдилерге ийе. N дана атомнан туратуғын системаның қәдилери $2N$ есе айныған болып шығады. Бул жерде 2 саны спинди есапқа алғанда пайда болады. Атомлар бир бирине жақынласқанда тартысыўдың салдарынан атомлардың энергиясының төменлеўиниң ақыбетинде энергия қәдилери төменлейди. Усының менен бир қатарда атомлар бир бири менен қанша жақын жайласса энергия қәдилериниң де соншама бөлеклерге бөлиниўи күшейеди (расщепление). Себеби атомлар бир бирине жақын келгенде олар пайда еткен майданлар үлкейеди. Атомлар кристаллық пәнжерениң дәуириндей аралыққа шекем жақынласқанда қәдилер энергиясының минимумының орын алыўы керек. Себеби бир бирине буннан былай жақынласқанда атомлар бир бири менен ийтерисе баслайды хәм

тәсирлесіу энергиясының мәнісі кескин түрде өседі. Бундай жағдайда атомлардың қаддилеринің энергиясының атомлар арасындағы қашықлыққа қатнасы 4.2-сүўретте схема түрінде көрсетілгендей болады. Әлбетте сыртқы валентлик электронлар турған қаддилер ең көп санлы бөлеклерге бөлинеді.



4.2-сүўрет.

Атомлар қаддилеринің энергиясының олар арасындағы қашықлық d ға байланысы.

4.2-сүўретте айнымаған қаддиге жуўап беретугын хәм N дана изоляцияланған да, кристалды пайда еткен де атомларға тийисли болған электронлардың халларының улыўмалық санларының $2N$ ге тең болатуғынлығын көрсетеді (2 саны электронның спинин есапқа алыўдың нәтийжесинде пайда болады, хәр бир айнымаған қаддиге электронның спининің хәр қыйлы бағытларына сәйкес келетуғын еки хал туўры келеді). Солай етип бир зонадағы халлардың саны $2N$ ге тең болады деген сөз.

Изоляцияланған атомның бир қаддине жуўап беретугын халлардың саны тек екиге тең емес, ал бул қадди айныған болса халлардың санының көп болыўы мүмкин (бундай жағдай водород атомының p халы ушын орын алады). Бундай жағдайда халлардың улыўмалық санын $2N$ ге изоляцияланған атомның бул қадди ушын айныўдың ретлигине (кратность) көбейтйў жолы менен табамыз.

Егер атомлар арасындағы тәсирлесіулер күшли болса айырым зоналардың бир бири менен байланысып кетиўи мүмкин. Бундай жағдайда улыўмалық бир зона алынып, бул зонадағы электронлық халлардың саны бир бирине қосылған еки зонадағы халлар санларының қосындысына тең болады. Демек бундай жағдайда да электронлық халлардың улыўмалық саны $2N$ еселенген сан болады.

Дерлик еркин электронлар модели. Атомларының сыртқы электронлары орталыққа берилетуғын хәм усының нәтийжесинде олардың кристал бойлап еркин қозғалыў мүмкиншилигине ийе кристаллық затлардың үлкен топары белгили. Бундай топарға биринши гезекте металлар киреди. Бундай затлар ушын дерлик еркин электронлар модели сәтти түрде ислеп шығылған моделлердің бири болып табылады. Бул модель шеклеринде электронлар кристалларда өлшемлери кристалдың өлшеми менен бирдей болған потенциал шуқырда дәўирли түрде жайласқан ионлық тулғалардың эззи майданында қозғалады. Бул эззи майдан киши козғалаң (малое возмущение) түрінде есапқа алынады.

Ең биринши жақынласыў сыпатында кристаллардағы электронлардың қандай қәсийетлерди көрсететуғынлығын тәриплеў ушын электронлық Ферми-газ моделинен пайдаланады. Бул моделдің айрықша әхмийетине байланыслы бул теорияның тийкарғы нәтийжелерин қарап шығамыз. Оларды қысқаша еркин электронлар жақынласыўы деп те атайды.

Электронлардың толқын векторлары кеңислигиндеги электронлық халлар системасын қабырғасының узынлығы L ге тең куб формасына ийе үш өлшемли кублық потенциал куты ушын Шредингер теңлемесин шешиў жолы менен алады. Ψ толқын функциясы ушын дәўирли шегаралық шәртлер берилгенде электронлық халлар системасы $k = (k_x, k_y, k_z)$ толқын векторларының төмендегидей мүмкин болған мәніслери алынады:

$$k_x = 2\pi n_1 / L; \quad k_y = 2\pi n_2 / L; \quad k_z = 2\pi n_3 / L; \quad (4.1)$$

Бул аңлатпаларда n_1, n_2, n_3 аркалы пүтин санлар белгиленген. L шамасының үлкен екенлигине байланысly k_x, k_y, k_z шамаларының өзгеріу адымларының киши болатуғынлығын аңғарамыз. Сонлықтан $k = (k_x, k_y, k_z)$ шамасына ғәрезли болған функцияларды k векторының үзликсиз функциялары сыпатында қаралады.

Электронлардың толқын функциясы мынадай түрге ийе болады:

$$\Psi = A \exp(i\vec{k} \vec{r}). \quad (4.2)$$

Бул формулада $A = \sqrt{\frac{2\pi}{L}^3}$.

Электронлардың кинетикалық энергиясы төмендеги формуланың жәрдемінде есапланады (олардың потенциаллық энергиясы нолге тең):

$$E = p^2 / 2m = (\hbar k)^2 / 2m = (\hbar^2 / 2m)(k_x^2 + k_y^2 + k_z^2) \quad (4.3)$$

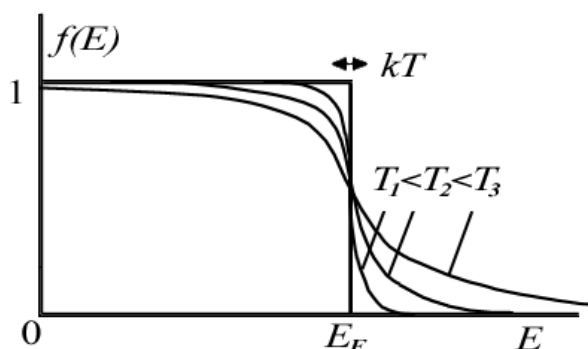
$T = 0$ температурада барлық N электрон Паули принципине бағынған халда (хәр бир халда 1 ден артық емес электрон) E ниң ең киши мәнислерине ийе болған халларды ийелейди. Бундай жағдайда k -кеңисликте барлық ийеленген халлар радиусы k_F болған сфераның (шардың) ишинде болады. Бундай шардың бетин Ферми бети, ал Ферми бетинде жайласқан электронлардың энергиясының мәнисин Ферми энергиясы деп атайды. Ферми энергиясының мәниси еркин электронлардың концентрациясы n шамасынан ғәрезли хәм төмендеги формуланың жәрдемінде есапланады:

$$E_F = (\hbar^2 / 2m)(3\pi^2 n)^{2/3} \quad (4.4)$$

Температура жоқарылағанда халлардың электронлар менен толық итималлығы төмендегидей түрге ийе болған халлардың толтырылу функциясы аркалы есапланады:

$$f(E) = 1 / \{ \exp((E - E_F) / kT) + 1 \} \quad (4.5)$$

Бул функцияның хәр қыйлы температуралардағы графиклери 4.3-сүүретте келтирилген.



4.3-сүүрет.

Ферми-газ электронларының хәр қыйлы температуралардағы халларды толтыру функциясы.

Барлық металлар ушын хәм барлық температураларда Ферми энергиясының мәниси kT шамасынан 50 – 200 есе үлкен. Сонлықтан металлардағы электронлар газин күшли айныған электронлық Ферми-газ сыпатында қарайды. Температура жоқарылағанда Ферми энергиясының шамасы да азмаз үлкейеди хәм бул байланыс мына формуланың жәрдемінде бериледи:

$$E_F(T) = E_F(0) \{1 - (\pi^2/12)(kT/E_F(0))^2\} \quad (4.6)$$

Солай етип температураның жоқарылауы k -кеңістіктегі Ферми бетинің азмаз жайылыуына алып келеді екен.

Дерлік еркін электронлар моделиндегі ионлық тулғалар потенциаллары дәуірі кристаллық пәнжеренің параметрлеріне сәйкес келетуғын дәуірлі функция түрінде қабыл етіледі. Бундай дәуірлі функция үшін төмендегідей қатнас орынланады:

$$U(x + an_1, y + bn_2, z + cn_3) = U(x, y, z) \quad (4.7)$$

Ионлық тулғалардың потенциалын тек ионның ортасы қасындағы киші областта ғана үлкен мәніске ийе болады деп есаплаймыз. Бұл ядролардың зарядын ионлық тулғалардың электронлары тәрәпинен экранлаудың ақыбетінде жүзеге келеді. Сонлықтан ионлық тулғалардың потенциалларын киші қозғалаң сыпатында есапқа аламыз.

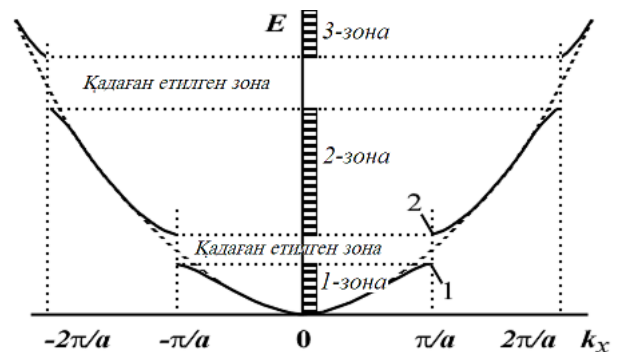
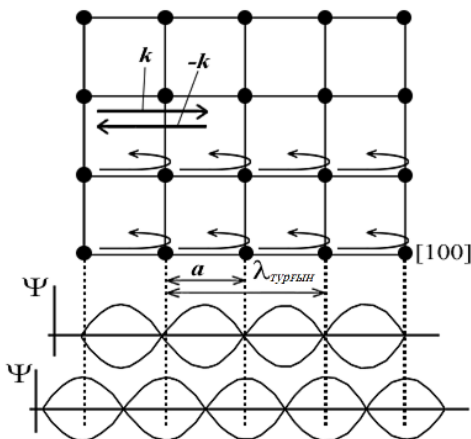
Блох теоремасын пайдаланамыз. Бұл теорема бойынша потенциал энергиясы (4.7) түріне ийе болған дәуірлі майдан болған жағдайда (4.2)-толқын функциясының түрі мына формулаға сәйкес өзгереді:

$$\Psi = u_k(\vec{r}) \exp(ikr) \quad (4.8)$$

Бұл аңлатпада $u_k(r)$ арқалы k хәм r шамаларынан ғәрезлі болған дәуірлі функция белгіленген. Оның дәуірі ионлық тулғалардың потенциалы болған $U(r)$ потенциалының дәуіріне тең. Дерлік еркін электронлар жақынласыуында кристалдың ишіндегі барлық кеңістікте $u_k(r)$ шамасының мәнісін бирге жақын деп есаплайды. Тек ионлық тулғалардың ишіндегі «киші» областларда ғана оның мәнісі бирден азмаз парық қылады.

Дерлік еркін электронлар моделинде ионлық тулғалардың дәуірлі майдынын есапқа алыу электронның энергиясының толқын векторынан ғәрезлігіне (мысалы оның кристалдағы бағытынан) алып келеді. Усының салдарынан Ферми бети сфералық бет болып қалмай, ол қурамалы формаға ийе болады. Бірақ Ферми бети сфералық симметрияға ийе болып қала береді. Себеби кристалда электронның энергиясының k векторынан ғәрезлігінде $E k = -E k$ теңлігі орынланады.

$E k$ функциясының Бриллюэн зонасы қасындағы ең әхмийетлі өзгешеликлерін көрсетеміз. Көрсетпелилік үшін дәуірі a ға тең болған әпиұайы кублық пәнжерени қараймыз. Мейли электрон $[100]$ бағытында қозғалсын хәм $k = (k, 0, 0)$ толқын векторына ийе болсын. (4.4 а сүүрет). Егер биз ионлық тулғалардың майданларын есапқа алмасак энергияның толқын векторынан квадратлық ғәрезлігін алған болар едик. Бұл жағдай 4.4 (b) сүүретте келтирилген.



a)

b)

4.4-сүүрет. Дәуири a болған кристаллық кублық пәнжерде электронлық толқынлардың тарқалыуының хәм усы пәнжерде турғын толқынлардың пайда болыуының схемасы (а).

Еркин электронлар хәм дерлик еркин электронлар моделлериндеги электронның энергиясының оның толқынлық векторынан ғәрезлиги (б)

Электронның толқынлық қәсийетке ийе екенлиги белгили. Оның толқын узынлығы де-Бройль толқынының узынлығына, яғный $\lambda_B = \frac{2\pi\hbar}{p} = \frac{2\pi}{k}$ шамасына тең. $\lambda_B = 2a$ шәрти орынланғанда (яғный $k = \pi/a$ теңлиги орын алған жағдайда) Ох көшери бағытына қарама-қарсы бағытта ионларда шашыраған электронлардың интерференциялық күшейиуи орын алады. Хәқыйқатында да қоңсылас атомлар (ионлар) тәрәпинен шашыраған толқынлар ушын оптикалық жүрислер айырмасы $2a$ ға тең, $k = \pi/a$ шәрти орынланғанда усындай узынлықтың үстине пүтин сан еселенген электронның де-Бройль толқынының узынлығы жайласады. Бундай жағдайда жоқары интенсивли шағылысқан толқын пайда болады хәм бул шашыраған толқын түсиуи толқын менен интерференцияланып турғын толқынның пайда болыуын жүзеге келтиреді.

Турғын толқынлар кублық пәнжерениң түйинлеринде ямаса түйинлердің дәл орталарында «дөңесликлерге» ийе болады (4.4 а сүүретте көрсетилген). Усындай дөңесликлердің басқа орынларында пайда болыуының мүмкин емес екенлигин аңсат аңғарыуға болады. Себеби егер бундай болмағанда кристаллық пәнжереге салыстырғанда электронлық бултлардың дөңесликлериниң жайласыуларындағы симметрия бузылған болар еди.

Толқын функциясының модулиниң квадраты менен электронды табыудың итималлығының тығызлығы менен кристалдағы орташа электронлық тығызлықтың байланыслы екенлиги мәлим. Турғын толқынның кеңейген орынлары (бул орынларда электронның толқын функциясы да, электронлық тығызлықтың максимумы да үлкен мәнислерге ийе) кристаллық пәнжерениң ионларына сәйкес келсе терис зарядланған электронлық булт пенен оң зарядлы ионлар арасындағы тәсир етисиуіге жууап беретуғын Кулон энергиясының мәнисиниң киши болатуғынлығы түсиникли. Солай етип $k = \pi/a$ шәрти орынланғанда E k ның бир емес, ал еки хәр қыйлы болған мәниси болады. $E(k)$ шамасының k ның басқа мәнислеринде үзликсизлигин есапқа алып $E(k)$ ның ғәрезлигин 4.4b сүүреттегидей етип көрсетиу мүмкин.

Бул нәтийжени толқын векторы $[100]$ бағытына параллель емес болған жағдайлар ушын да улыұмаластырыу мүмкин (4.4 а сүүрет). k векторының ушы Бриллюэн зонасының шегарасына түскен жағдайда (1.20)-аңлатпаға сәйкес Вульф-Брэгг шәрти орынланады хәм интенсивли шағылысқан толқын пайда болады. Бул жағдайда да жоқарыда қарап өтилген жағдайдағыдай турғын толқынлардың пайда болыуы жүзеге келеді. Бул жағдай болса өз гезегинде $E(k)$ шамасының үзилиске түсиуин тәмийинлейди. Солай етип Бриллюэн зоналарының шегараларында $E(k)$ ғәрезлигинде үзилис орын алады.

Электронның спини есапқа алынған жағдайда Бриллюэн зонасындағы халлардың санының $2N$ ге тең екенлиги белгили. Бул сан энергиялық зонадағы халлардың санына тең болады.

4.4 b сүүреттеги 1 ноқатына ионлық тулға қасында электронлық тығызлығы ең жоқары болған электронлардың халы, ал усындай формаға жақын формаға изоляцияланған атомлардың s электронларының халы сәйкес келеді. N дана изоляциялық атомлардың коллективи ушын бундай халлардың саны $2N$ ге тең. Ал бул сан Бриллюэн зонасындағы халлардың санына тең. 4.4 b сүүреттеги 2 ноқатына ионлық тулғаның қасында ең киши электронлық тығызлыққа ийе электронның халы, ал усындай формаға жақын формаға изоляцияланған атомлардың p -электронларының халлары жақын. $E(k)$

функциясының үзіліске түсіуі нокатына s халларды еске түсіретуғын халлардың толтырылыуының тамам болыуы хәм p халларына сәйкес келетуғын халлардың толтырылыуы басланады деп есаплайды. Бул халлардың энергиялары бир биринен сезилерліктей айырмаға ийе болыуы керек.

Солай етип күшлі байланыс моделиндегідей, дерлік еркин электронлар моделинде де электронлардың энергияларының шкаласында энергияның руқсат етилген хәм қадаған етилген участкалары бар болады екен. Бундай участкаларды руқсат етилген хәм қадаған етилген зоналар деп атаймыз. Хәр бир руқсат етилген зонадағы халлардың саны кристалдағы атомлардың санына еки есе көп. Толқын векторлары кеңислигинде k векторының руқсат етилген бир мәнисине нокатлар сәйкес келеди, ал (4.3) ке сәйкес сол нокатлар қабырғаларының узынлығы $2\pi/L$ болған кублық қутышаларды толтырады. Кристалдың өлшемлери үлкен болғанда бул нокатлар жүдә тығыз жайласқан болады. Сонлықтан электронлық халларды қарағанда бундай дискретликти есапқа алмайды: Ферми бетин тегис бет, ал халлар тығызлығы функциясын тегис (басқышларға ийе емес) деп есаплайды.

Кристаллық пәнжередегі электронлардың динамикасы. Кристаллық пәнжерениң дәуірли потенциалы есапқа алынғанда да электронның кристаллық пәнжере бойынша қозғалысы менен электронның еркин кеңисликтегі қозғалысы арасында айтарлықтай айырманың болмайтұғынлығы келип шығады. Бул квант теориясының әхмийетли хәм күтилмеген нәтийжелериниң бири болып табылады. Бул жағдайды қарап өтеміз.

Электронның кристалдағы қозғалысын үйренгенде анықсызлық қатнасын пайдаланыу керек болады. Бул анықсызлық қатнасын биз қарап атырған жағдай ушын былайынша жазамыз:

$$\delta x \delta p_x \geq \hbar / 2. \quad (4.9)$$

Бул жағдайда электронды тезлигиниң шамасы $\hbar/2m\delta x$ диапазонына кириуши электронды кеңисликтің δx областында табыудың итималлығы хәккында гәп етиледі. Импульс пенен байланысly болған электронның толқын векторы да $\delta k \approx 1/(2\delta x)$ шамасындай анықсызлыққа ийе болады.

$$\Psi = A \exp(ikr), \quad (4.10)$$

түриндегі теңлеме еркин электронның толқын функциясы болғанлықтан базы бир диапазонда δk мәнисине ийе электронға толқын пакети сәйкес келеди. Толқын пакетиниң амплитудасының максимумының тезлигин группалық тезлик деп атайды. Группалық тезлик былайынша анықланады:

$$v_g = (\partial \omega / \partial k) = (\partial E / \partial p) = (1 / \hbar) (\partial E / \partial k) \quad (4.11)$$

Бул тезлик толқын пакетиниң хәм усы пакет пенен байланысly болған областтың кеңисликтегі орын алмастыруу тезлигин тәриплейди. Кеңисликтің бул областында электронды ушыратыудың итималлығы үлкен болады. 4.4-сүўретте группалық тезлик $E(k)$ ғәрезлигине түсирилген урынбаның қыялығының тангенсине тең (тезликті табыу ушын оны $\hbar$ қа көбейтиу керек). Бриллюэн зонасының шегарасында турғын толқын пайда болады хәм энергияның көшиуі орын алмайды, группалық тезлик нолге тең. Сонлықтан $k = \pi/a$ нокатында $E(k)$ функциясы горизонт бағытындағы урынбаға ийе. Бундай жағдайда $E(k)$ функциясы кеминде бир пергиб нокатына ийе болыуы керек (4.4 б сүўрет).

Топарлық тезлик түсиниги халлардың үш өлшемли тарқалыуы ушын да улыўмаластырылады: үш өлшемли k кеңислигинде группалық тезлик векторы $E(k)/\hbar$ функциясының градиенти түринде бериледи. Оның бағыты Ферми бетине перпендикуляр.

Электронды классикалық бөлекше деп қараймыз хәм оның F күшиниң тәсириндеги қозғалысын қараймыз. Группалық тезлик v_g шамасының қалай өзгеретуғынлығын үйренемиз. Буның ушын v_g шамасынан ўақыт бойынша туўынды аламыз (классикалық механикадағы тезлениўдиң аналогы). F күши менен группалық тезлик v_g векторлары өз-ара параллель деп есаплаймыз (яғный бир туўрының бойында бир көшер бағытында жайласқан). Бундай жағдайда F пенен v_g шамаларының усы көшерге түсирилген проекциялары ушын төмендегидей аңлатпаларды аламыз:

$$\begin{aligned}\frac{\partial v_g}{\partial t} &= \frac{\partial}{\partial t} \left((1/\hbar) \frac{\partial E}{\partial k} \right) = (1/\hbar) \left(\frac{\partial^2 E}{\partial k^2} \right) \frac{\partial k}{\partial t} = \\ &= (1/\hbar^2) \left(\frac{\partial^2 E}{\partial k^2} \right) \frac{\partial p}{\partial t} = (1/\hbar^2) \left(\frac{\partial^2 E}{\partial k^2} \right) F\end{aligned}\quad (4.12)$$

Бул формуланы мына түрде көширип жазыў мүмкин:

$$\frac{\partial v_g}{\partial t} m_* = F \quad (4.13)$$

Егер

$$m_* = \hbar^2 / \left(\frac{\partial^2 E}{\partial k^2} \right) \quad (4.14)$$

деп есапласақ биз Ньютонның екінши нызамына уқсас формуланы аламыз:

$$\frac{\partial v}{\partial t} m_* = F \quad (4.15)$$

m_* шамасын электронның эффективлик массасы деп атайды. Эффективлик массаның мәнисинде $E(k)$ функциясына кристалдың дәуірли потенциалының тәсири жанапай түрде есапқа алынған. Демек күтилмеген нәтийжеге ийе болдық: кристаллық дәуірли майдан вакуумге салыстырғанда электронның қозғалыс картинасына өзиниң күшли тәсирин тийгизбейди, ал электронның тек эффективли массасын өзгертеди екен.

Электронның эффективлик массасы электронның кестелерде берилген массасынан әдеўир айырмаға ийе. (4.14)-формула бойынша эффективлик масса электронның хәр қыйлы толқын векторы ушын хәр қыйлы мәнислерге ийе болады. $E(k)$ функциясының екінши тәртипли туўындысы жәрдемінде есапланатуғын эффективлик масса k векторының киши мәнислеринде оң мәниске ийе болады. Ал k векторының мәниси Бриллюэн зонасының шегарасына жақын мәнислерге ийе болғанда эффективлик массаның шамасы терис. Бундай жағдайда сырттан түсирилген күш электронды тезлендирмейди, ал тормозлайды. Бундай тормозланыў электронның қозғалысына кристалдың дәуірли потенциалының тәсири менен байланысly. Бундай электронлар сырттан түсирилген электромагнит майданында массасы терис, ал заряды оң болған бөлекшелердиң қасийетлериндей қасийетлерге ийе болады. Бундай бөлекшени массасы терис мәниске ийе ямаса заряды оң мәниске ийе бөлекше деп қараў мүмкин. Себеби сырттан түсирилген электромагнит майданда бөлекшениң тезлениўи өзиниң белгисин массасының белгиси өзгергенде ямаса зарядының белгиси өзгергенде өзгертеди. Бундай

оң зарядланған бөлекшелерди тесикшелер (дыркалар) деп атау қабыл етилген. Тесикшелердің қозғалысы хақында төменде гәп етиледі.

4.4 (b) сүүреттеги перегиб ноқаты (4.14)-аңлатпаға сәйкес шексиз үлкен (ямаса оғада үлкен) эффектив массаға сәйкес келеді. Бундай электрон өзінің тезлигин сырттан тусирилген күшлердің тәсирінде өзгерте алмайды.

Электронлардың көпшилиги ушын эффектив массаның мәніси оң. Мысалы ярымы ямаса оннан да кеми толтырылған зоналардағы электронлар оң мәнісли эффектив массаға ийе (4.4 b сүүретте келтирилген). Терис мәнісли эффектив массаға Бриллюэннің биринши зонасының шегарасы қасындағы халларда тұрған электронлар ийе.

Мәселе. Эпиұайы кублық кристаллық пәнжерге ийе, пәнжере турақлысы a ға тең болған бир валентли метал ушын Ферми энергиясын есаплаңыз. Электронлардың энергиялар бойынша тарқалыу функциясын табыңыз. Электронлардың де-Бройль толқын узынлығы бойынша тарқалыу функциясын табыңыз. Де-Бройль толқынының ең минималлық узынлығын пәнжере турақлысы a менен салыстырыңыз.

Шешими. Ферми энергиясын есаплау ушын (4.4)-аңлатпаны пайдаланамыз. n шамасын $n = 1/a^3$ сыпатында есаплаймыз. Себеби 1 еркин электронға (атомның валентлиги 1 ге тең) кублық элементар қутышаның көлеми сәйкес келеді. Де-Бройль толқынының минималлық узынлығына ($\lambda_{B/min}$ шамасына) электронның максималлық импульси сәйкес келеді хәм электронның максималлық энергиясы Ферми энергиясы болып табылады. Буннан (4.3)-аңлатпа тийкарында мына шамаларды анықлау мүмкин: $\lambda_{B/min} = \frac{2\pi\hbar}{p_F} = 2\pi\hbar / \sqrt{2mE_F}$. a менен $\lambda_{B/min}$ шамалары бир бирине барабар болып шығады. Ферми-газ теориясына сәйкес Ферми-газ электронлары ушын халлардың тығызлығы функциясы мына түрге ийе болады:

$$g(E) = V(\sqrt{2m^{23}} / \hbar^3 \pi^2) E^{1/2} = Const \cdot E^{1/2}$$

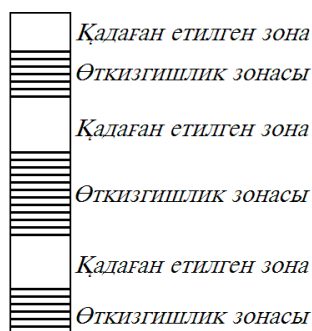
$$dN = g(E)dE = g(\lambda)d\lambda$$

аңлатпасын хәм $\lambda = 2\pi\hbar / \sqrt{2mE}$ формуласын пайдаланып электронлардың де-Бройль толқыны узынлықлары бойынша тарқалыу функциясын алыу мүмкин. Соңғы формуланың жәрдемінде E, g, dE шамаларын λ арқалы аңлатып, буннан кейин барлық аңлатпаларды dN ушын жазылған аңлатпаға қойып $g(\lambda)$ функциясын алыу мүмкин.

Диэлектриклер ярым өткізгішлер хәм өткізгішлер

Зоналардың электронлар менен толтырылыу характери затлардың электр өткізгішлік механизмлерин анықлайды хәм затлардың диэлектриклерге, ярым өткізгішлерге хәм өткізгішлерге бөлинуін түсіндиреди.

Ең дәслеппен ең киши энергиялы зоналардың толтырылатуғынлығына итибар береміз. Олар электронларға толығы менен толтырылады. Толық толтырылған, бірақ ең үлкен энергияға ийе зонаны валентли зона деп атайды. Буннан кейинги өткізгішлік зонасы деп аталатуғын зона толтырылмаған болыуы да, шала толтырылған болыуы да мүмкин (4.5-сүүрет). Толтырылмаған зона ярым өткізгішлерде хәм диэлектриклерде, ал толық толтырылмаған (биз оны шала толтырылған деп атадық) зоналар өткізгішлерде болады. Бул еки жағдайды толық түрде қарап шығамыз.



4.5-сүрет.
Затлардағы энергиялық зоналардың
толтырылыу схемасы

Өткізгішлер. Егер өткізгішлік зонасы толық емес толтырылған болса, онда электронлар менен ийеленген халлар Ферми бетинің төменінде жайласады, ал Ферми бети болса симметрия орайына ийе. Бундай жағдайда қалеген k толқын векторына ийе электронға толқын векторы $-k$ болған электрон сәйкес келеди. Бул еки электронның импульслеринің қосындысы нолге тең (яғный тезликлеринің қосындысы да нолге тең). Сонлықтан олар зарядтың көшіуіне (перенос заряда) хәм электр тоғының пайда болыуына үлес қоспайды (4.6-сүрет). Егер сырттан электр майданын хәм оған байланыслы болған F күшин түсирсек, онда ситуация өзгередиди (4.6-сүрет): толқын векторы k шамасының F векторының бағыты менен бағытлас болған 1 электронының халы толқын векторы k шамасының F векторының бағытына қарма-қарсы болған 2 электронның халына қарағанда энергиялық жақтан утымлы болмайды. Бундай жағдайда электронлар ушын қайтадан топар дүзиу утымлы болады хәм Ферми бетинің астындағы А халын босатады хәм Ферми бетинің үстиндеги В халын ийелейди (4.6-сүрет). Электронлардың бундай тарқалыуында қосынды (суммалық) тезлик нолге тең болмайды хәм электр тоғына үлес қосады. Өткізгіш деп аталатуғын бундай зат электр тоғын жақсы өткізедиди. Бул жағдай сыртқы электр майданында электронлардың халлар бойынша қайтадан бөлистирилиу (тарқалыу) мүмкиншилигинің бар екенлигинің салдарынан жүзеге келеди.

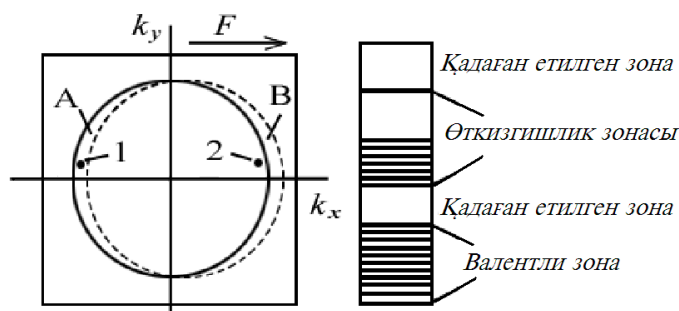


Рис. 4.6.
Сырттан түсирілген электр
майданының тәсиринде
электронлардың халлар бойынша
қайтадан бөлистирилиуі
(тарқалыуы).

Диэлектриклер. Егер өткізгішлік зонасы толық толтырылған болса, онда зонадағы ийеленген халлардың барлығы Бриллюэн зонасын толтырады. Бул зона симметрия орайына ийе. Ең жақын жайласқан ийеленбеген халлар енди келеси зонада жайласқан хәм бул зона толық толтырылған зонадан E_g кашықлықта жайласқан болады (4.7-сүрет). Бундай жағдайда да (өткізгішлердеги жағдайдай) қалеген k толқын векторына ийе электронға толқын векторы $-k$ болған электрон сәйкес келеди. Бул еки электронның импульсларының қосындысы нолге тең хәм сонлықтан олар зарядтың көшіуіне хәм электр тоғының пайда болыуына үлес қоспайды (4.7-сүрет).

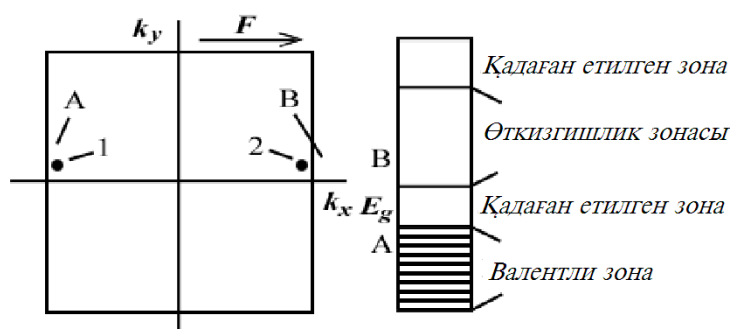


Рис. 4.7.

Толық толтырылған зона жағдайында сырттан түсірілген электр майданының тәсирінде электронның қайтадан бөлістирилиуінің мүмкін емес екенлігі (диэлектрикте орын алатуғын ситуация)

Егер сырттан электр майданы хәм оның менен байланысly болған F күши түскен жағдайда да ситуация өзгермейди (4.7-сүүрет). 4.6-сүүретте келтирилген жағдайдағыдай электронлар қайтадан топарласа алмайды. Буның ушын А халын таслап кетип энергиясы E_g шамасына үлкен болған В халына өтиуі керек. Жыллылық қозғалысларының энергиясы kT буның ушын (электронлардың қайтадан топарласыуы, яғный перегруппировкасы ушын) жетпейди. Сонлықтан электр тоғының пайда етиуін тәмийинлейтуғындай электронлардың қайтадан топарласыуы орын алмайды хәм соған сәйкес толтырылған зона заттың электр өткізгішлігине үлесин қоса алмайды. Диэлектриклер деп аталатуғын бундай затлар электр тоғын жүдә жаман өткізеди

Ярым өткізгішлер. Егер диэлектриклерде қадаған етилген зонаның кеңлігі онша үлкен болмаса (мысалы шама менен $10kT$ ға тең болса), онда айырым электронлардың толық толтырылған зонадан өткізгішлік зонасына өтиуі мүмкін. Бундай жағдайда валентли зонада бос халлар (тесикшелер), ал өткізгішлік зонасында электронлар менен ийеленген халлар пайда болады. Сырттан электр майданы түсірилгенде бундай электронлар өткізгішлік зонасында да, валентли зонада да жаңадан топарласа алады (бундай жағдайды 4.6-сүүретте көрдик). Бирақ өткізгішлік зонасында электронлар, ал валентли зонада тесикшелер аз болғанлықтан бундай затлар электр тоғын салыстырмалы жаман өткізеди. Бундай затларды ярым өткізгішлер деп атайды.

4.8-сүүретте өткізгішлердегі, диэлектриклердегі хәм ярым өткізгішлердегі энергиялық зоналардың электронлар менен толтырылыуының схемасы келтирилген.

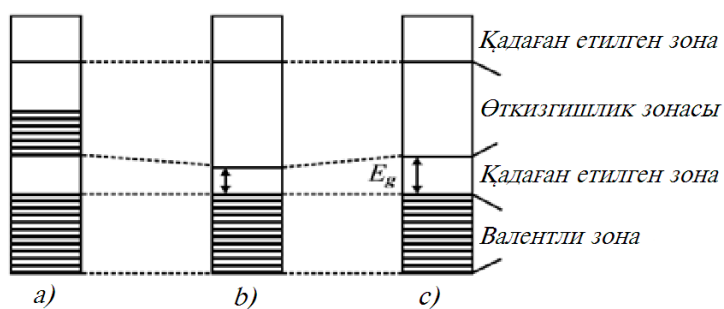


Рис. 4.8.

Өткізгішлердегі (а), диэлектриклердегі (с) хәм ярым өткізгішлердегі (b) энергиялық зоналардың электронлар менен толтырылыуы

Енди қандай затлардың өткізгіш, ярым өткізгіш хәм диэлектрик бола алатуғынлығын қарап өтемиз.

Силтили хәм қымбат бахалы (благородные) металлардың атомлары бир валентли электронға ийе. Оларда ең үлкен энергияға ийе зонаның ярымы толтырылған. Бул 4.6- хәм 4.8 а сүүретлердегі схемаларға сәйкес келеди. Бундай металлар электр тоғын жақсы өткереди.

Төрт валентли углерод (алмаз) толық толтырылған валентли зонаға ийе. Бул зона менен өткізгішлік зонасы арасындағы қашықлық жууық түрде 5 эВ шамасын қурайды. Сонлықтан алмаз жақсы изоляторлар қатарына киреди. Диэлектриклер болып табылатуғын ионлық кристаллар валентли зоналары толық толтырылған атомлардан тұрады.

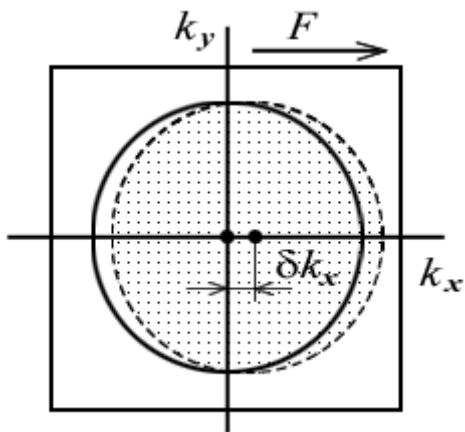
Төрт валентли кремний менен германий толық толтырылған валентли зонаға ийе. Бул валентли зона менен өткізгішлік зонасы арасындағы қашықтық сәйкес 1,2 и 0,7 эВ шамаларына тең (яғный өжире температураларында шама менен $10kT$ ны курайды). Бундай жағдайда электронлар валентли зонадан өткізгішлік зонасына өте алады. Усының салдарынан кремний менен германий ең көп тарқалған ярым өткізгішлер болып табылады. Температура жоқарылағанда германийдің электр өткізгішлігі кремнийдің электр өткізгішлігіне салыстырғанда тезирек үлкейеди. Себеби германийдің қадаған етилген зонасының кеңлігі кремнийдің қадаған етилген зонасының кеңлігінен киши.

Силтили жер элементлери еки валентли электронға ийе. Усыған байланысly оның зоналары толығы менен толтырылған болыуы керек. Бирақ бундай металларда зоналар биринің үстине бири түседі хәм нәтийжеде «көп санлы электронлар сыятуғын улыұмалық» зона пайда болады. Сонлықтан ең үлкен энергияға ийе зона толығы менен толтырылмаған, ал силтили жер элементлери өткізгішлер болып табылады.

Өткізгішлердің электр өткізгішлігі

Өткізгішлердің электр өткізгішлігін квант механикасы позицияларында турып қараған макул болған болар еди. Бирақ бул әдеуір курамалы мәселе. Сонлықтан өткізгішлердің электр өткізгішлігін есаплау ушын ярым классикалық көз-қарастан хәрекет етемиз

Сырттан электр майданы түсірилмегенде k кеңістіктегі электронлар менен толтырылған халлар Ферми бети менен шекленген өткізгішті қараймыз. Әпиұайылық ушын Ферми бетін сфера және бул бетті Бриллюэннің биринші зонасының шегарасы менен кесилиспейди деп есаплаймыз (4.9-сүұрет).



4.9-сүұрет.

Электр майданы тәрепинен сырттан күш тәсир еткенде электронлардың халлар бойынша бөлистирилиуінің (таркалыуының) өзгеріуі.

Сыртқы E электр майданы пайда болғанда электронларға $F = eE$ күші тәсир етеди. Нәтийжеде Ньютонның екінші нызамына сәйкес электронлар тезлене баслайды:

$$\frac{dv}{dt} = F = eE. \quad (4.16)$$

Базы бир τ ўақыты өткеннен кейин электронлар:

$$v = \frac{eE\tau}{m}. \quad (4.17)$$

тезлігіне ийе болады. Бул аңлатпада m арқалы электронның массасы белгиленген.

4.9-сүретте келтирилген электронлардың халлар бойынша бөлістирилиуі базы бір қашықтыққа жылысады деп есеплеуға болады. Жеткілікті дәрежедегі үлкен уақыттан кейін электронлардың тезлігі менен электронлардың тарқалуының жылжуы (ауысуы) үлкен мәнілерге ие болады (бұл өз-өзінен түсінікті). Бірақ электронлардың бір бири менен, басқа да тосқындықтар менен соқтығысуларын есепке алу зәрүр.

Жетіліскен кристаллық пәнжеренің (яғни дефекттері жоқ кристаллық пәнжеренің) Бриллюэн зонасының шегарасына түсетуғын толқын векторы жоқ электронлардың қозғалуына кесент жасамайтуғынлығын биз жоқарыда көрген едік. Электрон тек басқа электрон ямаса кристаллық пәнжеренің дефекттері менен соқтығыса алады. Жоқарыда есептеп өткеніміздей, кристаллық пәнжеренің дефекттерін динамикалық хәм статикалық деп екіге бөлеміз.

Динамикалық дефекттерге мысал ретінде фононларды хәм магнонларды келтіре аламыз. Олар менен электронның тәсір етисіуі қозғалушы бөлекше менен соқтығысуларды еске түсіреді. Ал хақықатында фонон кристаллық пәнжерені майыстырады, ал электрон болса майысқан участкада қозғалыс бағытын өзгертеді.

Статикалық дефекттерді биз жоқарыда көріп өттік. Электронлардың сондай дефекттер менен тәсір етисіуі электронлардың тыныш тұрған (статикалық) бөлекше менен соқтығысуын еске түсіреді. Динамикалық дефекттердің концентрациялары температураның жоқарылауы менен жоқарылайды, ал статикалық дефекттердің концентрациялары шама менен тұрақты болып қалады (биз бұл жерде нәтижелік дефекттерді нәзірде тұтып атырғанымыз жоқ).

Соқтығысулар орын алғанда электронлар орташа τ уақыты ишінде тезленіу менен қозғалады. Бұндай уақытты релаксация уақыты деп атаймыз. Релаксация уақыты өткеннен кейін электронның дефект пенен соқтығысуы орын алады. Нәтижеде электронның тезлігі тосыннан өзгеріске ұшырайды хәм орташа нөлге тең болады. Соқтығысуға шекем электрон базы бір орташа тезлікке ие болады. Бұндай орташа тезлікті дрейфлік тезлік деп атаймыз хәм оның шамасы мынаған тең:

$$v = \frac{Ee\tau}{2m}. \quad (4.18)$$

Бұл тоқтың төмендегідей тығызлығының пайда болуына алып келеді:

$$j = n v e = \frac{Ee^2n\tau}{2m}. \quad (4.19)$$

Ом нызамын еске түсіреміз. Ол $j = \sigma E$ түрінде жазылады. Сонлықтан σ электр өткізгішлік коэффициенті үшін мынадай аңдатпа аламыз:

$$\sigma = \frac{e^2n\tau}{2m}. \quad (4.20)$$

Ал салыстырмалы қарсылық үшін

$$\rho = \frac{1}{\sigma} = \frac{2m}{e^2n\tau} = \frac{2m\nu}{e^2n} \quad (4.21)$$

аңдатпасын аламыз. $\nu = 1/\tau$ арқалы электронның соқтығысуларының орташа жиілігі белгіленген.

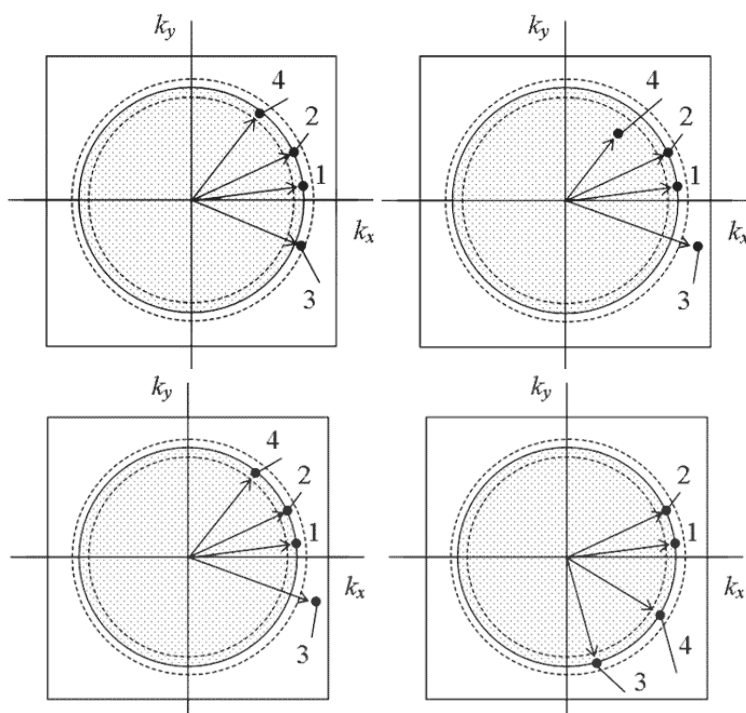
$\rho(T)$ ғәрезлігін таллау үшін $\nu = 1/\tau$ шамасының температура менен дефекттердің концентрациясынан ғәрезлігін таллауымыз керек.

Концентрациялары онша үлкен болмағанда динамикалық дефекттер де, статикалық дефекттер де қозғалушы электронларға бір биринен ғәрезсіз тәсір етеді деп есеплеуға

болады. Бундай жағдайда электронның дефектлер менен соқлығысыу жийилигин есаплау мүмкіншилигине ийе боламыз хәм бул жийилик төмендегидей еки жийиликтің қосындысынан турады:

$$v = v_{stat} + v_{dinam}. \quad (4.22)$$

Биринши қосылыушы температурадан ғәрезли емес. Екинши қосылыушы бириншиден фононлардың концентрациясынан хәм электронлардың фононлар менен соқлығысыу механизмлеринен;
екиншиден электронлардың бир бири менен соқлығысыуларынан ғәрезли.



4.10 а сүүрет.

Еки электронның бир бири менен соқлығысыуының схемасы. Стрелкалардың жәрдеминде еки электронның 1 хәм 2 соқлығысқанға шекемги, 3 хәм 4 соқлығысқаннан кейинги толқын векторлары белгиленген.

4.10 б сүүрет.

Еки электронның бир бири менен соқлығысыуының схемасы. Стрелкалардың жәрдеминде еки электронның 1 хәм 2 соқлығысқанға шекемги, 3 хәм 4 соқлығысқаннан кейинги толқын векторлары белгиленген.

Электронлар бир бири менен соқлығысқанда энергия менен импульстың сақланыуы нызамларын хәм Паули принципін есапқа алыу керек. Паули принципі электронлардың соқлығысқаннан кейинги толқын векторларына қосымша шеклерди қояды: электрон басқа электронлар менен ийеленбеген халды ийелеуі керек. Жоқарыда атап өтилгеніндей, өткізгішлерде балқыу температурасына шекемги барлық температураларда Ферми энергиясынан төменинде kT қашықтығында жайласқан дерлик барлық халлар ийеленген. 4.10-сүүретте келтирилген ең киши сфераның ишінде жайласқан усындай ийеленген халлардың саны жүдә көп хәм тап усы халларда электрон соқлығысқаннан кейин жайласа алмайды (хәтте энергия менен импульстың сақланыуы нызамына қайшы келмесе де).

4.10-а сүүреттеги шеп тәрәпте келтирилген процесслердің жүріуі мүмкін. Себеби олар ушын энергия менен импульстың сақланыуы нызамлары хәм Паули принципінің талаптары орынланады. 4.10-а сүүреттеги оң тәрәптеги процесстің жүріуі мүмкін емес. Себеби 4 халы ийеленген хәм электрон соқлығысқаннан кейин ол халда тура алмайды. 4.10 –б сүүреттің шеп тәрәпинде келтирилген процесслер де 3 хәм 4 халлары бос болса да жүдә киши итималлыққа ийе. Бундай процесстің жүзеге келиуі ушын kT шамасынан әдеуір үлкен энергия талап етиледі (3 хәм 4 халларында жайласқан электронлардың энергияларының қосындысы 1 хәм 2 халларындағы электронлардың энергияларының қосындысынан үлкен). Сонлықтан соқлығысыу процесслерине толқын векторлары Ферми бетинің қасындағы жуқа қатламның ишінде жайласқан электронлар ғана қатнаса алады (4.10-а шептеги сүүрет). Ал импульстың сақланыуы нызамы усы көп емес санлы электронлардың барлығының соқлығысыуға қатнасыуына шек қояды. Мысалы 4.10 б

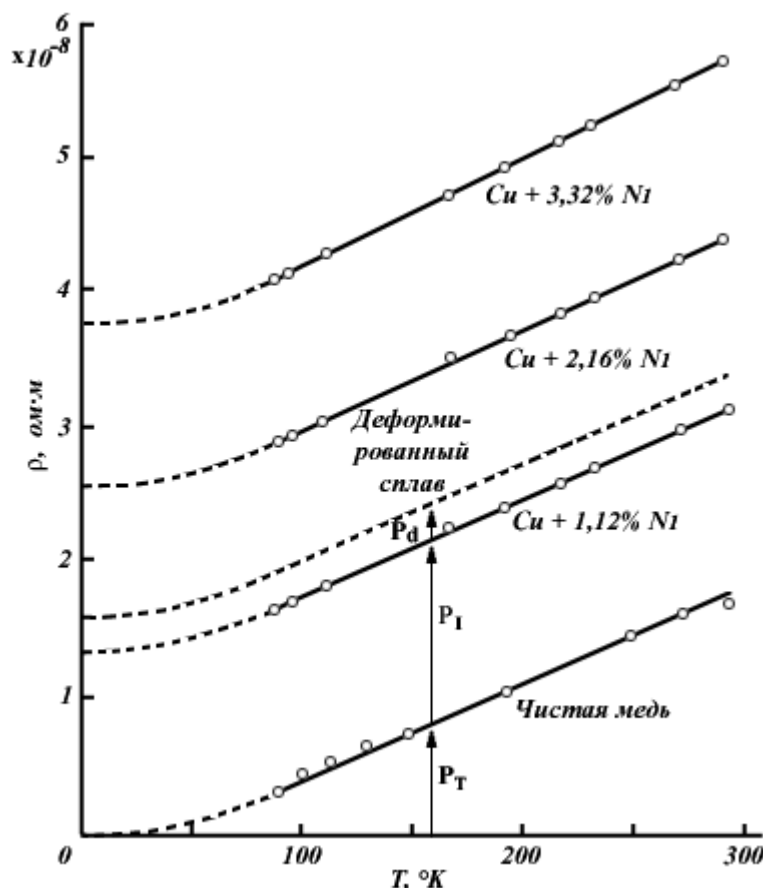
сұйреттің оң тәрепінде белгиленгеніп өтилген толқын векторына ийе электронлардың соқлығысыұын импульстың сақланыұ нызамы қадаған етеди. Усындай себеплерге байланыслы бир бирине атомлар арасындай аралыққа қашықласқан хәм үлкен тезликлер менен қозғалатуғын электронлар бир бири менен жүдә сийрек соқлығысады. Усының нәтийжесінде электронлардың өткизгишлердеги еркин жүриұ жолының узынлығы онлаған хәм жүзлеген мың атомлар арасындағы қашықлыққа жетеди. Есаплаұлар хәм тәжирийбелерде алынған мағлыұматларды таллаұ электронлар менен электронлардың соқлығысыұы электронлардың фононлар менен соқлығысыұына салыстырғанда жүдә сийрек болатуғынлығын көрсетеди.

Жоқарыда айтып өтилген жағдайларға байланыслы электронлардың фононлар менен соқлығысыұын карап шығамыз. Бундай соқлығысыұлар өткизгишлердің электр өткизгишлигине тийкарғы үлести қосыұы керек. Өжире температураларына жақын температураларда фононлардың саны температураға туұры пропорционал. Сонлықтан электронның фононлар менен соқлығысыұының жийилиги де температураға туұры пропорционал болыұы керек. (4.22)-аңлатпаға сәйкес динамикалық дефектлердің электр қарсылығына қосатуғын үлеси де температураға пропорционал болып шығады. Эксперименталлық мағлыұматлар бул жуұмақты тастыйықлайды (4.11-сұйретти қараңыз).

Салыстырмалы қарсылықтың температурадан ғәрезлигин қарсылықтың температуралық коэффициентиниң шамасы менен характерлейди. Бул коэффициент

$$\alpha = \frac{1}{\rho(T)} \cdot \frac{\partial \rho(T)}{\partial T}$$

түрінде жазылады. 3.11-сұйреттен температураның бирдей мәнисінде хәр қыйлы курамдағы куймалар ушын α ның мәниси хәр қыйлы болып шығатуғынлығын аңғарыұымыз керек. Себеби 4.11-сұйреттеги мағлыұматлар тийкарында есапланған α ның мәниси $\rho(T)$ иймеклигиниң қыялығының (қыялық барлық куймалар ушын дерлик бирдей) тангенсиниң $\rho(T)$ шамасына қатнасына тең. Усы себеплерге байланыслы салыстырмалы қарсылыққа статикалық дефектлердің үлеси үлкен болған куймаларда α ның шамасы жүдә киши болады.



4.11-сүўрет.
Мыс пенен мыс-никель
қуймаларының салыстырмалы
қарсылығының температурадан
ғәрезлиги.

4.11-сүўретте сәўлелендирилген иймекликлер бойынша динамикалық хәм статикалық дефектлердің өткізгіштің салыстырмалы қарсылығына үлеслерін аддитив шамалар деп қараўға болады. Статикалық дефектлердің концентрациясы хәм оған байланысly болған салыстырмалы қарсылықтың шамасы абсолют нол температураға жақын температураларда қосымта атомлардың концентрациясына пропорционал.

Техникада салыстырмалы қарсылығы жүдә үлкен хәм жүдә киши болған материаллар кең түрде қолланылады. Салыстырмалы қарсылығы жүдә киши болған материаллар компактлы хәм экономиялы сымларды соғыў ушын, ал салыстырмалы қарсылығы үлкен болған материаллар хәр қыйлы қыздырғышларды соғыў ушын пайдаланылады.

Мәселелер:

1. 4.11-сүўретте берілген мағлыўматлар тийкарында қурамындағы никель 0 хәм 3 процент болған мыс-никель қуймасының 100 хәм 400 К температуралардағы қарсылығының температуралық коэффициентин анықлаңыз.

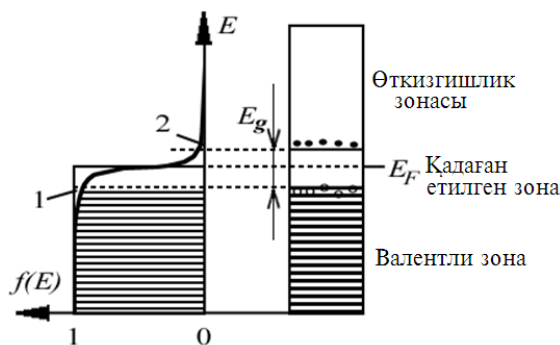
Көрсетпе: Қарсылықтың температуралық коэффициентинің мәнислерін есаплағанда $\alpha = \frac{1}{\rho(T)} \cdot \frac{\partial \rho(T)}{\partial T}$ формуласынан пайдаланыңыз.

2. Мыстың 20 К температурадағы салыстырмалы қарсылығы ρ болса ондағы электронның еркин жүріў жолының узынлығын баҳалаңыз. Валентли электронлардың саны берілген хәм n ге тең деп есаплаңыз. Мыста валентли электронлар Ферми энергиясы E_F ке тең болған электронлық Ферми-газ модели тийкарында тәриплениди

Шешими. Еркин жүріў жолының узынлығы $l = v_F \cdot \tau$ формуласының жәрдемінде есапланады. τ дың мәнисин (4.21)-формула, ал v_F тиң мәнисин $E_F = \frac{mv_F^2}{2}$ формуласының жәрдемінде есаплайды.

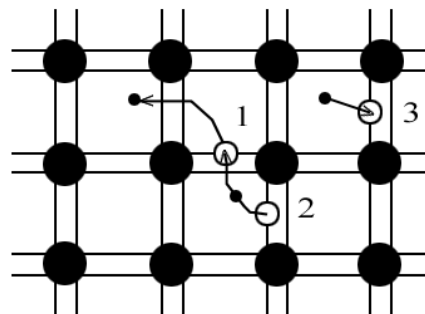
Ярым өткізгішлердің электр өткізгішлігі

Ярым өткізгішлердің электр өткізгішлігін классикалық механика көз-қараслары менен қарап шығуы мүмкін. Бұндай жағдайда электронлардың да, тесікшелердің де координаталары да, импульстері де бір уақытта өлшенеді, хәр бір электрон менен тесікшенің қозғалысын бақылап баруы мүмкін. Бұны (4.5)-аңдатпадағы халлардың толтырылуы функциясын салыстырмалы еңсіз қадаған етілген зона жағдайында қарап шығуы арқалы амелге асыруы мүмкін (4.12-сұррет). Бұл сұрретте штриховка жәрдемінде электронлар менен толған халлар белгіленген. 4.12-сұрретте келтірілген екі ғәрезлікті таллап екі жуымақ шығаруы мүмкін.



4.12-сұррет.

Ярым өткізгішлердегі электронлардың халлар бойынша тарқалуы.



4.13-сұррет. Ярым өткізгішлердегі

электронлар менен тесікшелердің пайда болуы хәм қозғалысы.

Бириншиси. Өткізгішлік зонасындағы электронлардың саны менен валентли зонадағы тесікшелердің саны бір бирине тең болуының кереклігінен 1 хәм 2 арқалы белгіленген майданлар шама менен өз-ара тең болуы керек (бұл жерде электронлар менен тесікшелердің эффективлік массасына берилетуғын дүзетіулерді хәм толқын векторлары кеңіслігіндегі халлардың үш өлшемлі тарқалуын есапқа алғанда). Бұл жағдай Ферми қәдді қадаған етілген зонаның дәл ортасында жайласқан жағдайда орын алады. Бұл тастыйықлауды математикалық жақтан келтіріп шығаруы да мүмкін.

Екиншиси. $E - E_F \gg kT$ болғанлықтан электронды өткізгішлік зонасында ушыратуыды итималлығын беретуғын (4.5)-формула Больцман тарқалуы функциясына айланады:

$$f(E) = 1 / \{ \exp((E - E_F) / kT) + 1 \} \approx \text{Const} \cdot \exp(-(E - E_F) / kT). \quad (4.23)$$

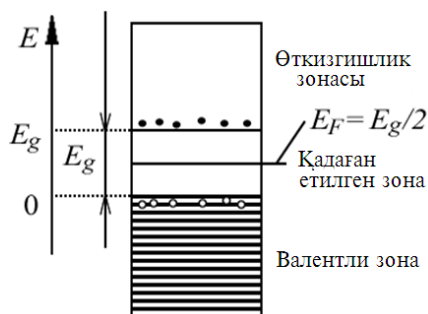
Бұл электронлар менен тесікшелердің ярым өткізгішлердегі қасиеттерін тәріптеу үшін классикалық ұсылларды пайдалануыдың мүмкін екенлігін көрсетеді. E шамасын валентли зонаның ең үстингі шетінен баслап есаплаған қолайлы. Бұннан кейінгі таллауларымызда биз тап ұсындай жоллар менен жүремиз.

Қосымталары жоқ ярым өткізгішлер. Ярым өткізгіш болған кремнийди қараймыз. Ол алмаз типіндегі кристаллық пәнжерге ийе. Бұндай пәнжерде хәр бір атом қоңсылас атомлар менен төрт валентли байланыс арқалы байланысқан. $T = 0$ К температурада барлық байланыслы электронлар менен толтырылған. Сонлықтан валентли зона толығы менен толтырылған, ал бұл зонадан 1,1 эВ қашықтықта жайласқан өткізгішлік зонасы пүткіллей бос. Температураны шама менен 200-300 К ге көтерсек базы бір электронлар валентли зонадан өткізгішлік зонасына өте алады. Бұл электронның ковалентлик байланыстан кетіуіне хәм электронның «кристал бойынша еркин қозғалып жүре алатуғын» электронға айланыуына сәйкес келеді (4.13-сұррет).

Бос қалған коваленттік байланыс орнында тесікше қалады. Тесікше электрон таслап кеткен «үзілген» коваленттік байланыс болып табылады. Қоңсылас байланыстағы электрон сол «тесікше»-ге «секиріп» өтуі мүмкін. Усының салдарынан тесікше жаңа орынға көшеді (4.13-сұретте жаңа орын 2 арқалы белгіленген). Электрондар менен тесікшелер жұбы менен пайда болғанлықтан биз карап откен жағдайдағы тесікшелер саны электронлар санына тең.

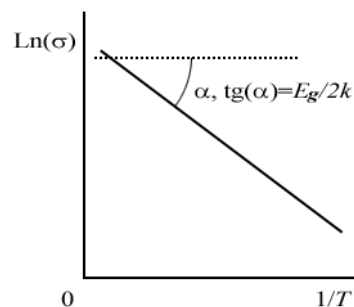
Еркін электронлардың бири тесікшелердің биреуін ийелеуі мүмкін. Усының салдарынан олардың екеуі де жоғалады. Бундай процессти тесікше менен электронның рекомбинациясы деп атаймыз (4.13 (3) сұрет). Рекомбинацияның итималлығы электронлар менен тесікшелердің концентрацияларына тууры пропорционал. Электрон-тесікше жұбының пайда болуы итималлығы ярым өткізгіштің температурасына ғәрезли. Вероятность зарождения пары электрон - дырка зависит от температуры полупроводника. Соның менен бирге ярым өткізгішті нурландырғанда да электрон-тесікше жұптарының пайда болуы итималлығы жоқарылайды. Ал бул итималлықтың мәніси ярым өткізгішке келип түсіуші толқынның интенсивлигине пропорционал.

Ярым өткізгіштің өткізгішлігінің температурадан ғәрезлигін алыуға болады. Минималлық энергияға ийе электрон-тесікше жұбының пайда болуының итималлығы (4.23)-аңлатпаға сәйкес максималлық мәніске ийе болады (егер өткізгішлік электроны ең киши энергияға, ал тесікше ең үлкен энергияға ийе болса усындай жұп алынады). Тап усындай жұплар шама менен $10kT$ шамасына тең температурада пайда болады хәм еркін заряд тасушылардың концентрациясы n ге тийкарғы үлес қосады.



4.14-сұрет.

Қосымталары жоқ ярым өткізгіштегі энергия кәддилери.



4.15-сұрет.

Қосымтасы жоқ ярым өткізгіштің өткізгішлігінің логарифмінің температурадан ғәрезлигі.

Бундай жағдайда жууық түрде мына аңлатпаны жаза аламыз:

$$n(T) = n_0 \exp((E_g / 2 - E) / kT) = n_0 \exp(-E_g / 2kT) \quad (4.24)$$

Электр өткізгішлік еркін заряд тасушылардың концентрациясына пропорционал болғанлықтан, тап сондай формуланы ярым өткізгіштің өткізгішлігі ушын да жаза аламыз:

$$\sigma(T) = \sigma_0 \exp(-E_g / 2kT) \quad (4.25)$$

Бул нызам экспериментте тастыйықланады (4.15-сұрет). Усы сұреттегі тууры сызықтың қиялығының тангенс араласпасы жоқ ярым өткізгіштің қадаған етилген зонасының кеңлігі менен байланысқан.

Электр тоғын алып жүріушінің жылжығышлығы. Солай етип ярым өткізгіштерде электронлар менен тесікшелер электр тоғын тасушылар болып табылады екен. Олардың концентрацияларын сәйкес n_e хәм n_h арқалы белгілеймиз. Бундай

жағдайда E электр майданына жайластырылған ярым өткізгіштегі тоқтың тығызлығы былайынша жазылады:

$$\vec{j} = n_e \vec{v}_e e + n_h \vec{v}_h e. \quad (4.26)$$

Бул формулада v_e менен v_h арқалы электронлар менен тесікшелердің дрейфлік тезліктері белгіленген. Дифференциал формада жазылған Ом нызамын ($j = \sigma E$) (4.26)-хәм (4.19)-формулар менен салыстырып v_e менен v_h шамаларының электр майданының кернеулігі E ге пропорционал екенлігіне ийе боламыз. Электр тоғын тасыушысының жылжығышлығы деп аталатуғын хәм μ арқалы белгіленетуғын жаңа шаманы киргизген қолайлы:

$$v = \mu E. \quad (4.27)$$

Бул аңлатпадан жылжығышлықтың электр майданының кернеулігі E ниң шамасы бирге тең болғандағы тоқ тасыушының дрейфлік тезлігіне тең екенлігін көреміз.

Тоқ тасыушылардың жылжығышлығы түсиниги ярым өткізгішлер физикасындағы ең әхмийетли түсиниклердің бири болып табылады. Жылжығышлық түсинигиниң жәрдемінде ярым өткізгішлер физикасының көп курамалы аңлатпалары әпиұайыласады (биз төменде Холл эффектін үйренгенімізде бул сөзлердің дурыслығына исенеміз). Мысал ретінде (4.26)-аңлатпаны былайынша көширіп жазыуға болады:

$$\vec{j} = (n_e \mu_e + n_h \mu_h) e \vec{E}. \quad (4.28)$$

Әдетте электронлардың жылжығышлығы тесікшелердің жылжығышлығынан әдеуір үлкен болады. Себеби тесікшенің жылжыуы курамалы процесс болып, ол көп сандағы электронлардың секиріп өтиулері менен байланысly.

Ярым өткізгішлердің қосымталы өткізгішлігі. Айырым қосымталарды ярым өткізгішке жүдә аз муғдарда қосса да оның өткізгішлігін күшли өзгертеди. Бундай қосымталар артық еркин электронлардың ямаса тесікшелердің пайда болыуына алып келеди. Оларды донорлық қосымталар (электронларын береді) ямаса акцепторлық қосымталар (электронларын өзине бириктиріп алады) деп атайды.

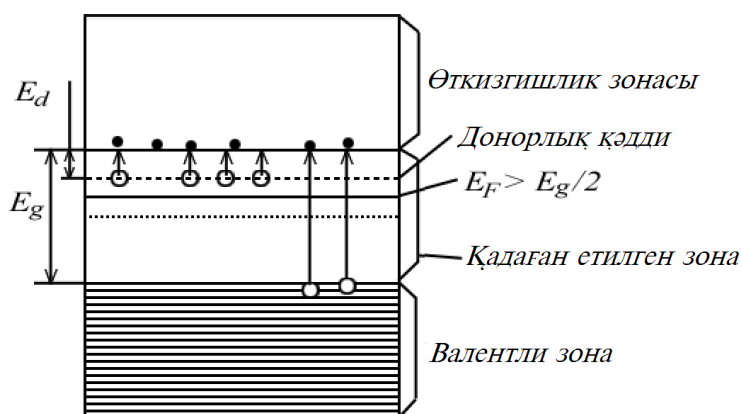
Донорлық қосымталар киргизілген ярым өткізгішлерди донорлық ярым өткізгіш деп атаймыз. Бундай ярым өткізгішти электронлық өткізгіш (себеби оларда артық электронлар көп) ямаса n типіндеги ярым өткізгіш деп атайды. n белгисиниң пайда болыуы *negative* сөзинен келип шыққан болып, ол еркин заряд тасыушылардың атрықмашлығын билдиреди.

Акцепторлық қосымталарды киргизгеннен кейин ярым өткізгішти акцепторлық ярым өткізгіш деп атайды. Оны тесікшелік ярым өткізгіш (себеби ондағы артық тесікшелердің саны көп) ямаса p типіндеги ярым өткізгіш деп те атайды (бул аңлатпа *positive* – оң деген сөзден келип шыққан, себеби бундай ярым өткізгіште оң зарядлы тоқты тасыушылардың саны артық).

Егер ярым өткізгішке электроны жеңил «ажыратып алынатуғын» қосымта атомлар киргизілсе оны донорлық ярым өткізгіш деп атаймыз. Мысалы, егер төрт валентли кремнийге (ямаса германийге) бес валентли мышьяк ямаса фосфор атомлары киргизілсе, олар өзлериниң 4 валентли электронларын кристаллық пәнжерередеги 4 валентли байланыс дүзиу ушын жумсайды, ал бесінши валентли электрон артық (ауысық) болып қалады. Бундай электрон атомнан аңсат ажыралып шығып кетеди хәм ол кристал бойынша еркин қозғалып жүриу мүмкиншилигін алады. Нәтийжеде кристалда артық еркин электронлар пайда болады. Әлбетте қосымталар киргизілген ярым өткізгіште де электрон-тесікше жубының пайда болатуғынлығын умытпауымыз керек. бирақ буның ушын әдеуір үлкен болған энергия талап етиледі хәм сонлықтан өжире температураларында бундай

процестің жүріуінің итималлығы (4.23)-аңлатпаға сәйкес жүдә аз. Донорлық ярым өткізгіштегі электронларды тийкарғы заряд тасыушылар, ал тесикшелерди тийкарғы емес заряд тасыушылар деп атайды.

Зоналық теорияның тилинде «жеңил бөлинип шығатуғын» электронлардың пайда болыуы қадаған етилген зонада донорлық қәддинің пайда болыуына сәйкес келеди. (4.16-сүўрет). Бундай қәддиден өткізгішлик зонасына өтиў ушын электронға валентли зонадан өткізгішлик зонасына өтиў ушын талап етилетуғын энергияға салыстырғанда әдеўир кем энергия талап етиледі. Бул электронның әдеттеги ковалентли байланыстан кетиўине сәйкес келеди.



4.16-сүўрет.
Донорлық ярым өткізгішлердегі электронлық ҳаллардың схемасы.

Өжире температураларына жақын температураларда ярым өткізгіштің өткізгішлигине тийкарғы үлести донорлық қәддиден өткізгішлик зонасына өткен электронлар косады. Ал бундай температураларда валентли зонадан өткізгішлик зонасына электронлардың өтиўінің итималлығы жүдә аз болады.

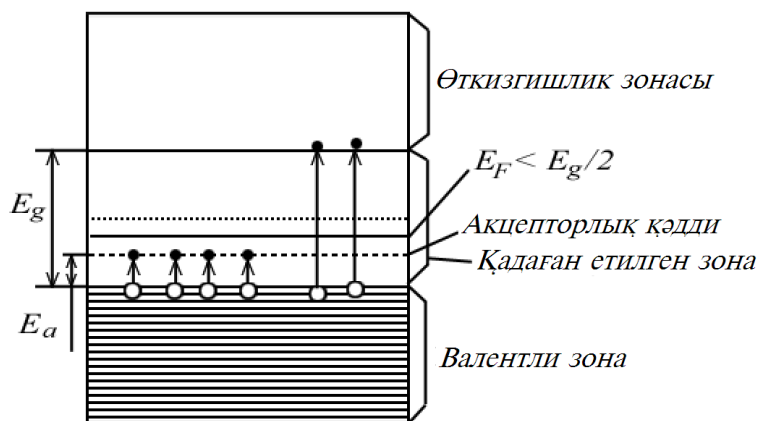
Температура жоқарылағанда электронлардың бир бөлими аз санлы донорлық қәддилерден өткізгішлик зонасына өтеди. Усының менен бир қатарда валентли зонадан өткізгішлик зонасына электронлардың өтиўінің итималлығы әдеўир үлкейеди. Валентлик зонадағы қәддилердің саны қосымта атомлар пайда еткен қәддилердің санының көп есе артық болғанлықтан температураның жоқарылауы менен электронлар менен тесикшелердің концентрациялары арасындағы үлкен айырма дерлик пүткиллей жоғалады. Айырманың шамасы донорлық қәддилердің концентрациясына тең. Ярым өткізгіштің өткізгішлигінің донорлық характери кем-кемнен жоғала баслайды. Ең ақырында температура және де жоқарылағанда ярым өткізгіштегі заряд тасыушылардың концентрациялары үлкен болып, донорлық ярым өткізгіш дәслепп қәсийетлери бойынша қосымтасыз ярым өткізгіш пенен дерлик бирдей болып қалады, ал буннан кейин ол өткізгішлик зонасында көп электронларға ийе өткізгіштің қәсийетлериндей қәсийетлерге ийе болады.

Донорлық ярым өткізгіштегі Ферми қәдди энергия шкаласында жоқарыға карай жылжыйды. Жылжыудың шамасы төменги температураларда үлкенирек (бундай температураларда еркин электронлардың концентрациясы тесикшелердің концентрациясынан әдеўир үлкен). Температура жоқарылағанда ярым өткізгіштің донорлық характеринің сезилиўи кем-кемнен төменлейди, ал Ферми қәдди қадаған етилген зонаның ортасына жылжыйды (қосымтасыз ярым өткізгіштегидей).

Акцепторлық ярым өткізгішти алыў ушын ярым өткізгішке усы ярым өткізгіштің атомларының электронлары аңсат түрде өзине ала алатуғын атомларды киргизеди. Мысалы, егер төрт валентли кремнийге (ямаса германийге) үш валентли индийди қосса, онда индий атомлары өзіннің үш валентли электронын кристаллық пәнжередеги үш валентли байланыс дүзиў ушын жумсайды, ал төртінши байланыс болса электронсыз қалады. Қоңсылас байланыслардан электрон бул бос орынға келе алады хәм усының

нәтижесінде кристалда тесикше пайда болады (4.13-сұйрет). Бул жағдайда кристалда аұысық тесикшелер пайда болады. Акцепторлық ярым өткізгіштеги тесикшелер тийкарғы заряд тасыұшылар, ал электронлар тийкарғы емес заряд тасыұшылар болып табылады.

Зоналық теория тилинде электронның толық ковалентлик байланыстан электрон жетпейтуғын байланысқа өтиұи қадаған етилген зонада өткізгішлик зонасының төменги шетиниң төменинде акцепторлық қәддилердиң пайда болыұына сәйкес келеди (4.17-сұйрет). Электрон ушын валентли зонада акцепторлық қәддиге бундай өтиұ ушын валентли зонада өткізгішлик зонасына өтиұдегиге салыстырғанда әдеұир кем энергия талап етиледи (бундай жағдайда электрон бир ковалентлик байланыстан дерлик сондай байланысқа өтеди).



4.17-сұйрет.
Акцепторлық ярым
өткізгіштеги электронлық
қаллардың схемасы.

Өжире температураларына жақын температураларда ярым өткізгіштин электр өткізгішлигине тийкарғы үлести валентлик зонадағы тесикшелер береди (бул тесикшелердиң электронлар акцепторлық қәддиге өткенде пайда болғанлығын умытпаймыз). Ал электронлардың валентли зонадан өткізгішлик зонасына өтиұи итималлығы жүдә аз.

Температура жоқарылағанда аз сандағы акцепторлық қәддилердиң басым көпшилиги электронлар менен толады. Соның менен бир қатарда электронлардың валентлик зонадан өткізгішлик зонасына өтиұиниң итималлығы жоқарылайды. Қосымталар пайда еткен қәддилердиң санынан валентлик зонадағы қәддилердиң саны көп есе үлкен болғанлықтан температураның жоқарылаұы менен электронлар менен тесикшелердиң үлкейип атырған концентрациялары арасындағы айырма жоғала баслайды. Себеби олар бир биринен аз шамаға — акцепторлық қәддилердиң концентрациясына айрылады. Температура жоқарылаған сайын ярым өткізгіштин акцепторлық екенлиги дерлик сезилмейди. Температура және де жоқарылағанда ярым өткізгіштеги заряд тасыұшылардың концентрациялары жүдә жоқары болады хәм акцепторлық ярым өткізгіш пенен қосымтасыз ярым өткізгіш арасындағы айырма жоғалады, ал температура және де жоқарыласа ярым өткізгіш өткізгішке айланады.

Акцепторлық ярым өткізгіштеги Ферми қәддиниң энергия шкаласы бойынша төменге карай жылжытуғынлығын көрсетиұге болады. Бул аұысыұ төменги температураларда көбирек мәниске ийе (бундай температураларда тесикшелердиң концентрациясы еркин электронлардың концентрациясынан әдеұир үлкен). Температура жоқарылағанда ярым өткізгіштин акцепторлық екенлиги дерлик сезилмейди хәм Ферми қәдди араласпасыз (қосымтасыз) ярым өткізгіштеги сыяқлы қадаған етилген зонаның дәл ортасына карай жылжыйды.

Солай етип температура әсте-ақырын жоқарылағанда донорлық хәм акцепторлық ярым өткізгішлердиң араласпасыз сыяқлы ярым өткізгішке, буннан кейин әдеттеги өткізгіштин өткізгішлигиндей өткізгішликке ийе ярым өткізгішке айланады.

Сонлықтан хәр қыйлы типтеги ярым өткізгішлерден соғылған дүзилислердің қызып кетиуінен сақлау лазым. Температураның жоқарылауы менен хәр қыйлы областлар арасындағы айырма жоғалады хәм көп санлы ярым өткізгішлерден соғылған дүзилис тоқты жақсы өткеретуғын монолит (бир пүтин) ярым өткізгішке айланады.

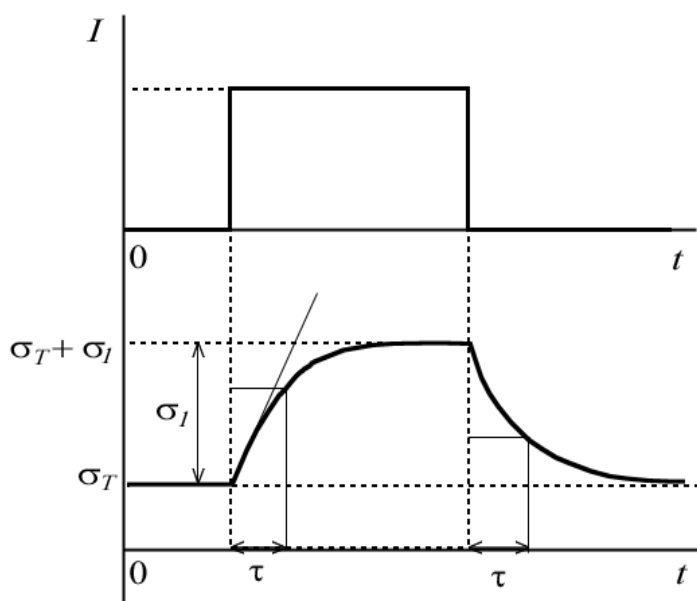
Ярым өткізгішлердің фото өткізгішлігі. Егер ярым өткізгішке электромагнит нурланыуының ағысы келип түссе хәм бул нурланыудың квантларының энергиясы $\hbar\omega$ қадаған етилген зонаның кеңлігі E_g шамасынан үлкен болса ярым өткізгіште ишки фотоэффект кубылысының бақланыуы мүмкін. Ишки фотоэффект кубылысы деп нурланыу квантын жутқан электронның валентли зонадан өткізгішлик зонасына өтиуін айтамыз. Усының салдарынан өткізгішлик зонасындағы электронлардың, валентли зонадағы тесикшелердің саны артады хәм ярым өткізгіштің өткізгішлігі жоқарылайды. Ярым өткізгішлердің сырттан түсірилген нурлардың тәсирінде өткізгішлігінің жоқарылауы кубылысын ярым өткізгішлердің фотоөткізгішлігі деп атайды.

Бул кубылыс физика ушын жүдә әхмийетли. Себеби фотоөткізгішликтің жәрдемінде ярым өткізгішлердегі қадаған етилген зонаның кеңлігін хәм заряд тасыушылардың (тоқ тасыушылардың) орташа жасау уақытын анықлау мүмкін.

Қадаған етилген зонаның кеңлігін ишки фотоэффекттиң қызыл шегарасы бойынша анықлайды. Фотоэффекттиң қызыл шегарасына фотоэффектти бақлау мүмкін болған максималлық толқын узынлығы λ_K сәйкес келеді. Оны былайынша табамыз:

$$E_g = \hbar\omega_K = \frac{2\pi\hbar c}{\lambda_K}.$$

Ярым өткізгішлердегі тоқ тасыушылардың орташа жасау уақытын табыу ушын жақтылық пенен нурландырғанда ярым өткізгіштің өткізгішлігінің өзгеріслерінің эксперименттерде алынған нәтижелерін пайдаланады. (4.18-сұрөт). Өжире температураларындағы араласпасы (қосымталары) жоқ ярым өткізгішти қараймыз. Жақтылық нурлары түсірилмегенде заряд тасыушылардың тең салмақлық концентрациясы n_T , ал усы заряд тасыушылар менен байланысly болған өткізгішлик σ_T шамасына тең болады (4.18-сұрөт).



4.18-сұрөт.

Заряд тасыушылардың тең салмақлық концентрациясы $n = n_T + n_I$ менен сол заряд тасыушылар менен байланысly болған өткізгішлик $\sigma = \sigma_T + \sigma_I$ шамаларының ярым өткізгішти жақтыландырудан ғәрезлигі.

Ярым өткізгішти жақтыландырғанда электрон-тесикше жубы пайда болады. Бул процесс электронлар менен тесикшелердің рекомбинациясы менен тез уақыттың ишінде теңлеседі. Ал рекомбинацияның итималлығы электронлар менен тесикшелердің концентрацияларының артыуы менен артады. Базы бир уақыттан кейин рекомбинацияның

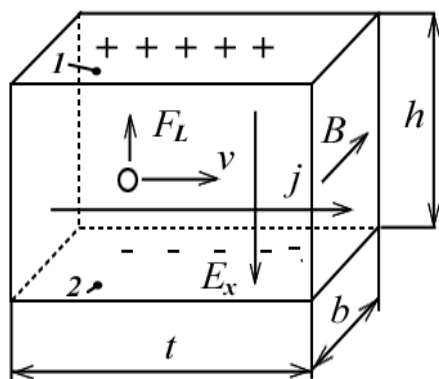
тезлігі электронлар менен тесикшелердің туўылыў тезлігі менен теңлеседи. Нәтийжеде ярым өткізгіште электронлар менен тесикшелердің концентрацияларының жаңа мәніси орнайды. Оны $n = n_T + n_I$ арқалы белгілейміз (4.18-сүўрет)). Егер жақтылықты өширсек электронлар менен тесикшелердің концентрациялары рекомбинацияның ақыбетінде ярым өткізгішке жақтылық түсірилместен бурын алынған n_T шамасына шекем төменлейди. Тап сол сыяқлы болып ярым өткізгіштің электр өткізгішлигі де өзгереді. Ярым өткізгіштің жақтылық түсірилгенде пайда болған өткізгішлигінің 2,7 есе (е есе) кемейетуғын ўақыт ярым өткізгіштегі электронлар менен тесикшелердің орташа жасаў ўақыты деп аталады. Ярым өткізгішлердің өткізгішлигінің тез өзгерисин осциллографтың экранында бақлаў мүмкін.

Ярым өткізгішлердің фотоөткізгішлигі қубылысы техника ушын оғада әҳмийетли. Себеби фотоөткізгішлик қубылысы тийкарында ислейтуғын жақтылықтың, электромагнит толқынларының басқа да түрлеринің ярым өткізгішли датчиклерин (көрсеткішлерин) соғыў мүмкін.

Хәзирги ўақытлары ярым өткізгішли датчиклер (көрсеткішлер) жақтыландырылғанлық (освещенность) өлшеў ушын да, жақтылық ағымының импульслеринің санын анықлаў ушын да қолланылады. Мысалы датчиклер машиналардың валларының айланыў тезлігін, станоклардың бөлімлеринің қанша шамаға қозғалғанлығын (орын алмастырғанлығын), компакт дисклердегі (CD ямаса DVD дисклердегі) информацияларды оқыў ушын кеңнен қолланылмақта. Биз хәзир компакт дисклердегі информацияларды оқыў мәселесінде тоқтап өтеміз.

Компакт дисклерди оқытуғын дүзиліс ярым өткізгішли жақтылық датчигинің жәрдемінде айланып турған компакт дисктің бетине фокусланған лазер нурының интенсивлігінің өзгерислерин өлшейди. Бул датчик информацияны оқыўдың жүдә жоқары тезлігін тәмийинлейди (секундына шама менен 10^8 импульс). Бундай жоқары тезліктерде информацияларды оқыў ушын датчиктегі ярым өткізгіштегі электронлар менен тесикшелердің жасаў ўақыты жүдә киши болыўы шәрт (шама менен 10^8 секунд).

Ярым өткізгішлердегі Холл эффекти. Туўры мүйешли параллелолипед формасындағы ярым өткізгіш үлгини қараймыз. Оның l қапталы бойынша j тығызлығында тоқ өтип турған болсын (4.19-сүўрет). Үлгинің b тәрәпи бағытында B магнит индукциясы түсірилген болсын. Холл эффекти үлгинің жоқары хәм төменгі ноқатлары арасында биринің үстінде бири турған еки ноқат арасында Холл потенциаллар айырмасы деп аталатуғын потенциаллар айырмасының пайда болыўынан ибарат (4.19-сүўреттегі 1 хәм 2 арқалы белгиленген ноқатлар арасында). Төменде Холл эффектинің жүзеге келиўин қарап өтеміз.



4.19-сүўрет.

Акцепторлық ярым өткізгіштегі бетлик зарядлардың хәм электро майданының Холл кернеўлігінің пайда болыўы.

Дәслеп акцепторлық ярым өткізгішти қарап өтеміз. Тоқтың тығызлығы j шамасы менен заряд тасыўшылар болған тесикшелердің дрейфлик тезлігі v_h байланысly. Ал магнит майданында қозғалыўшы e зарядына электродинамикадан белгили болған Лоренц күши F_L тәсир етеди. 4.19-сүўретте бул күштің бағыты жоқары қарай бағытланған:

$$\vec{F}_L = e[\vec{v}_h \times \vec{B}] \quad (4.29)$$

F_L күшинің тәсирінде тесикшелер жоқары қарай қозғалады хәм үлгинің жоқарғы бетінде топланады. Ал үлгинің төменгі қапталында тесикшелердің саны азаяды. Бул зарядлар E_x электр майданын пайда етеди. Бул майдан тесикшелерге eE_x . Зарядлардың топланыуы менен eE_x күши үлкейеди хәм оның мәніси Лоренц күшине тең болғанда зарядлардың жыйналыу процесси тоқтайды хәм v_h пенен B шамаларына жууап беретуғын E_x шамасы орнайды. Тең салмақлық шәрти $F_L = eE_x = e v_h \times B$. Бул аңлатпадағы v_h шамасын (4.28)-аңлатпа жәрдемінде j ға алмастырып экспериментлер өткеріу ушын қолайлы болған

$$\vec{E}_x = \frac{[\vec{j} \times \vec{B}]}{en_k} = R[\vec{j} \times \vec{B}] \quad (4.30)$$

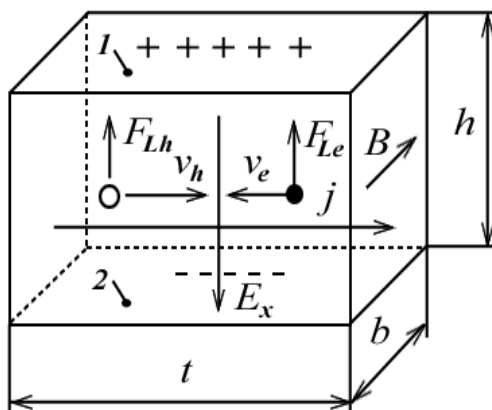
аңлатпасын аламыз.

Бул формулаға кириуши барлық шамалардың өлшениуі мүмкин. R шамасын Холл турақлысы деп атаймыз. Тап сол сыяқлы формуланы донорлық ярым өткізгіш ушын да аламыз хәм R шамасының белгисинің заряд тасыушылардың белгиси менен сәйкес келетуғынлығына көз жеткереміз.

(4.30)-аңлатпаны пайдаланыу менен заряд тасыушылардың концентрациясын хәм олардың белгисин анықлау мүмкин.

Техникада Холл эффектін магнит индукциясы B ның шамасын өлшеу ушын қолланады. буның ушын 4.19-сүүретте көрсетілгендей датчик - ярым өткізгіш үлги қолланылады. E_x хәм j шамалары өлшенеди хәм буннан кейін Холл турақлысының белгилі мәнісін пайдаланып B ның шамасын есаплайды. Өлшеу процесслерін аңсат түрде автоматластыруға болады. Бундай жағдайда әсбап B ның мәнісін бірден береді.

Енді ярым өткізгіште электронлар менен тесикшелердің концентрациялары шама менен бірдей болған жағдайды қараймыз. Мейли тууры мүйешлі параллелипед формасындағы ярым өткізгіш үлгіндегі электронлар менен тесикшелердің концентрациялары сәйкес n_e хәм n_h шамаларына, ал олардың жылжығышылығы сәйкес μ_e хәм μ_h шамаларына тең болсын (4.20-сүүрет).



4.20-сүүрет.

Электронлар менен тесикшелердің концентрациялары бір бири менен барабар болған ярым өткізгіштегі беттік зарядлардың хәм электро майданының Холл кернеуілігінің пайда болыуы.

E_L электр майданының тәсирінде электронлар хәм тесикшелер тәрәпинен j тоқтың тығызлығы пайда болады. Мейли бул ток l бағытында бағытланған болып (4.28)-аңлатпаның жәрдемінде берілсин:

$$\vec{j} = (n_e \mu_e + n_h \mu_h) e \vec{E}_l \quad (4.31)$$

б бағытында бизден арман қарай B магнит индукциясы түсірілген болсын. Бул майдан тәрәпинен электронға да, тесикшеге де жоқары қарай бағытланған Лоренц күши түседі. Бул күштің тәсирінде электронлар менен тесикшелер жоқарыға қарай қозғала баслайды хәм жоқарғы қапталда топланады. Бул жерде олар рекомбинацияға ушырайды. Мейли анықлық ушын жоқарғы қаптал бетке тесикшелер электронларға салыстырғанда көбирек топланатуғын болсын. Бундай жағдайда жоқарғы бетте электронға салыстырғанда тесикшелер, ал төменги бетте тесикшелерге салыстырғанда электронлар көплеу болады. Бундай жағдайда төменге қарай бағытланған электр майданының Холл кернеулиги E_x пайда болады. Бул майдан тесикшелердің қозғалысына тосқынлық қылады, ал электронлардың жоқары қарай қозғалысына жәрдем береді. Базы бир ўақыттан кейин сондай E_x майданы пайда болады, бундай майданда жоқарыға қарай бағытланған электронлар тоғының тығызлығы $J_{e\uparrow}$ менен тесикшелер тоғының тығызлығы $J_{h\uparrow}$ бир бири менен теңлеседі, жоқарғы қаптал бетте зарядлардың топланыуы хәм E_x шамасының өсиуі тоқтайды. Тең салмақлық шәртин вертикаллық бағытқа түсірилген проекцияларда былайынша жазамыз:

$$n_h \mu_h F_L - n_h \mu_h E_x = n_e \mu_e F_L + n_e \mu_e E_x. \quad (4.32)$$

(4.27) менен (4.28) ди есапқа алып векторлардың модуллери ушын төмендегидей аңлатпа жазамыз:

$$n_h \mu_h (E_l \mu_h) Be - n_h \mu_h E_x e = n_e \mu_e (E_l \mu_e) Be + n_e \mu_e E_x e. \quad (4.33)$$

Бул аңлатпадан E_x/E_l қатнасы ушын

$$E_x / E_l = B(n_h \mu_h^2 - n_e \mu_e^2) / (n_h \mu_h + n_e \mu_e). \quad (4.34)$$

аңлатпасын аламыз. Бул аңлатпада (4.29)- хәм (4.30) аңлатпалардан $R = E_x/jB$ шамасы ушын төмендегидей формула аламыз:

$$R = (n_h \mu_h^2 - n_e \mu_e^2) / \{(n_h \mu_h + n_e \mu_e)^2 e\}. \quad (4.35)$$

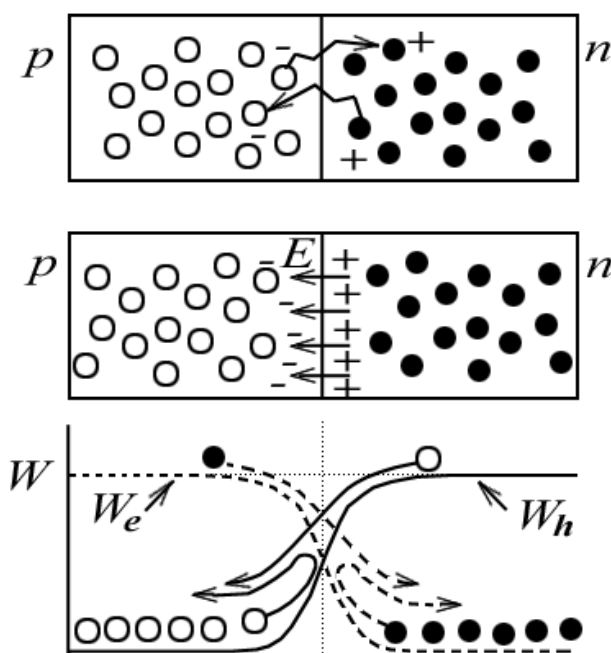
Ярым өткізгіште қосымталар болмаса (4.34)- хәм (4.35)-аңлатпалар әпиұайыласады. Бундай ярым өткізгіш ушын $n_h = n_e$:

$$E_x / E_l = B(\mu_h - \mu_e) \quad (4.36)$$

Нәтижеде араласпасы жоқ ярым өткізгіш ушын (4.36)-аңлатпа тийкарында электронлар менен тесикшелердің жылжығышлықтарының айырмасын табыу мүмкін.

Ярым өткізгішли р-п- өтиўи

Ярым өткізгішли р-п- өтиўи деп акцепторлық хәм донорлық типтеги еки ярым өткізгіштің контакты областындағы жуқа қатламға айтамыз (4.21-сүўрет). Ярым өткізгіштің сүўретте көрсетілген еки областы да электрлик жақтан нейтрал. Себеби ярым өткізгіш материалдың өзи де, қосымталар да зарядланған емес. Олар арасындағы айырма соннан ибарат, оның шеп тәрәпинде еркин қозғалатуғын тесикшелер, ал оң тәрәпинде еркин қозғалатуғын электронлар бар.



4.21-сүрөт.
p-n өтүу областындагы электр
зарядларының таркалыуы.

Хаотикалык жыллылык қозғалыстардың салдарынан р областындағы тесикшелердің бири оң тәрәптегі п типтегі областқа өте алады. Нәтийжеде ол электронлардың бири менен дәрхәл рекомбинацияға ушырайды. Усының салдарынан оң тәрәпте аўысық оң заряд, ал шеп тәрәпте аўысық терис заряд пайда болады (4.21-сүрөт). Тап сол сыяқлы жыллылык қозғалыстарының салдарынан электрон шеп тәрәптегі областтан оң тәрәптегі областқа өтип дәрхәл тесикше менен рекомбинацияға ушырайды. Нәтийжеде бул жағдайда да оң тәрәпте артық оң заряд, ал шеп тәрәпте артық терис заряд пайда болады.

Бул зарядлардың пайда болыуы ярым өткізгішлердің шегаралық областында E электр майданының пайда болады. Бул майдан р типтегі областтан тесикшелерди ярым өткізгішлерди айырып турған шегарадан шеп тәрәпке, ал п типтегі областтан электронларды усы шегарадан оң тәрәпке қарай ийтереди. E электр майданы менен областлардағы электронлар менен тесикшелердің потенциал энергиясын байланыстырыу мүмкин (4.21-сүрөт). р областтан п областқа өтиу ушын тесикшеге бийиклиги W шамасына тең потенциал табалдырықтан атлап өтиу керек болады. Ал электрон ушын п областтан р областқа өтиу ушын тап сондай табалдырықтан өтиуге тууры келеди. Усындай өтиудің итималлығы Больцман көбейтиушисине пропорционал:

$$P = P_0 \exp(-W / kT) \quad (4.37)$$

Жоқарыда қарап өтилген тийкарғы заряд тасыушылардың өтиулері р-п өткели аркалы тийкарғы ток тасыушылардың тоғының тығызлығын пайда етеди:

$$j_{\text{оак}} = j_0 \exp(-W / kT) \quad (4.38)$$

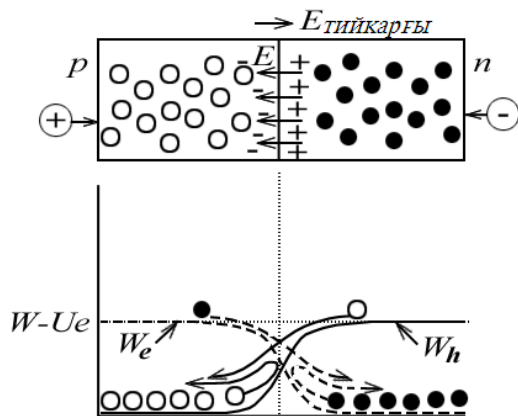
Тең салмақлық ҳалында бул ток тийкарғы емес тасыушылар пайда еткен ток тәрәпинен компенсацияланады (тийкарғы емес тасыушыларға р областтағы электронлар менен п областтағы тесикшелер киреди). Бирақ тийкарғы емес тасыушылардың саны оғада аз, сонлықтан олар пайда еткен токтың шамасына шек қойылады (E майданы бул токтың өтиуине «жәрдем берсе» де).

Егер р-п өткелине сырттан 4.22 (а) сүрөттегидей U потенциаллар айырмасы түсірилсе (буны р-п өткелди тууры тутастырыу деп атайды), онда сырттан түсірилген E

майданы кристалда бар болған E майданын хэлсиретеди, 4.22-сүүретте келтирилген табалдырықтың бийиклиги киширейеди хэм тийкарғы тасыўшылардың тоғы

$$j_{\text{отн}} = j_0 \exp(-(W - U_e) / kT). \quad (4.39)$$

формуласына сәйкес өседи. Тийкарғы емес тасыўшылар тоғы дерлик өзгермей қалады, себеби оның шамасы аз сандағы тийкарғы емес тасыўшылар тәрепинен шекленген. 4.23-сүүретте сырттан түсирилген кернеў U дың шамасына тийкарғы хэм тийкарғы емес тасыўшылар тоғының ғәрезлиги және вольтамперлик характеристиканың (вольтамперлик характеристика сөзин кысқартып көбинесе ВАХ деп жазады) бир участкасы келтирилген ($U \geq 0$ ушын).



4.22-а сүүрет.

Сыртқы кернеўди туўры хэм кери бағытларда түсиргендеги p-n өткели жанындағы потенциал табалдырықлар.

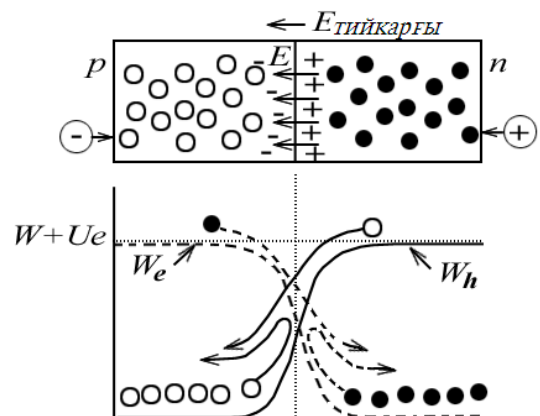
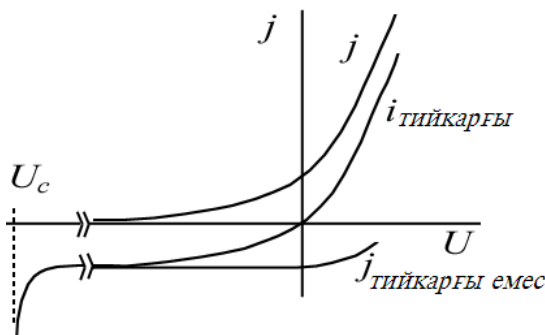


Рис. 4.22b.

Сыртқы кернеўди туўры хэм кери бағытларда түсиргендеги p-n өткели жанындағы потенциал табалдырықлар.

Егер p-n өткелге түсирилген сыртқы потенциаллар айырмасының бағытын өзгертсек (бул жағдай 4.22 b сүүретте келтирилген, бул жағдайды p-n өткелди кери жалғаў деп атайды), онда сыртқы E майданы шегарадағы E майданын күшейтеди хэм 4.21-сүүреттеги табалдырықтың бийиклиги өседи. Усының салдарынан тийкарғы тасыўшылар тоғының шамасы (4.38)-формулаға сәйкес кемейеди. Ал тийкарғы емес тасыўшылар тоғының шамасы өзгериссиз дерлик қалады. 4.23-сүүретте сыртқы U кернеўди «кери» бағытта түсирген жағдайдағы тийкарғы хэм тийкарғы емес тасыўшылар тоқларының кернеўден ғәрезлиги хэм $U \geq 0$ болған жағдайдағы вольт-амперлик характеристиканың участкасы келтирилген.



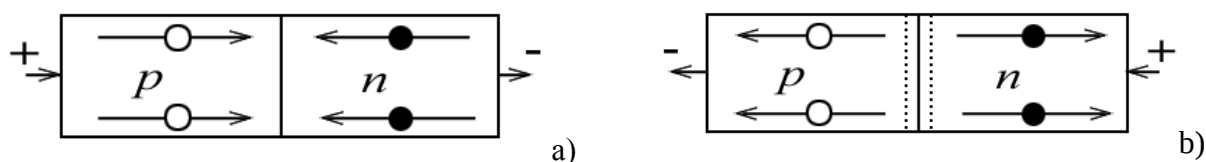
4.23-сүүрет.

p-n өткели арқалы өтип атырған тийкарғы хэм тийкарғы емес тасыўшылар тоқларының усы өткелге түсирилген кернеўден ғәрезлиги, p-n өткелинің вольт-амперлик характеристикасы (ВАХ).

р-п өткеліндегі пробой (ескерту: орыс тилиндегі пробой сөзі қарақалпақ тилинде әдетте «тесик» деген мәнисти аңғартады). Кери полярлыққа ийе кернеуді үлкейте берсек, онда базы бир U_c кернеуінде (кернеудің бундай мәнисин пробой кернеуі деп атаймыз) р-п өткелінде пробой орын алады. Бул жабық халда р-п өткеліне түсірілген кернеудің тек жуқа шегаралық қатламға түсетуғынлығына байланысly. Сонлықтан бундай жуқа қатламда электр майданының үлкен кернеулиги пайда болады. Ал бул кернеу электронды киши аралық ишинде оның энергиясы ковалентлик байланыста бир электронды урып шығара алатуғындай етип тезлендиреди. Буннан кейин сол еки электрон да тезленеди хәм олар да өз гезегинде ковалентлик байланыстағы электронларды ушып шығарады. Процесс усындай избе-изликте дауам етеди. Электронлық лавинаны көз алдыға елеслететуғындай жағдай жүз береді. Пробойға ВАХ тағы U_c участкасы сәйкес келеди (4.23-үүретке қараңыз). $U < U_c$ шәрти орынланғанда бул участкада тоқтың әстелик пенен өсиуі орын алады. Ал бундай жағдайды пробой кубылысын кернеуді стабилизациялау ушын қолланыуға мүмкиншилик береді (бул хәққинда төменде толығырақ гәп етемиз).

р-п өткелдің вольт-амперлик характеристикасы сызықлы емес, ал ең баслысы симметриялы емес: р-п өткел бир тәрәпке қарай тоқты жақсы өткізеди, ал екінши тәрәпке қарай тоқты жаман өткізеди.

р-п өткелінің хәр қыйлы бағытларда тоқты хәр қыйлы етип өткеріуінің себебин әпиуайы хәм көргізбелі етип түсіндириу мүмкин. 4.24-сүүретке итибар беремиз.



4.24-а сүүрет. р-п өткелді туұры (а) хәм кери (b) бағытта тутастырғандағы электронлар менен тесикшелердің қозғалыс схемасы

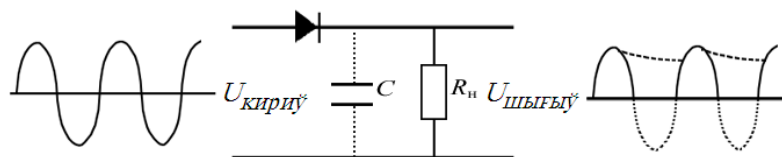
р-п өткелді шынжырға туұры бағытта тутастырса (4.24-а сүүрет) шеп тәрәптеги областтағы тесикшелер еки типтеги ярым өткізгішлердің шагарасына қарай, ал оң тәрәптеги областтағы электронлар да сол шегара бағытта қозғалады. Шегарада олар рекомбинацияланады. Шынжырдың барлық участкаларында тоқ тийқарғы тасыушылар менен тәмийинленеди, ал р-п өткелдің өзи тоқ тасыушылар менен тойынған. Сонлықтан р-п өткелінің өткізгішлиги жүдә үлкен болады.

р-п өткелді шынжырға кери бағытта тутастырса (4.24-б сүүрет) шеп тәрәптеги областтағы тесикшелер шегарадан кери бағытта, ал оң тәрәптеги участкадағы электронлар да шегарадан кери тәрәпке қарай қозғалады. Бөлип турған шегарада тоқты тийқарғы тасыушылар қалмайды. Бул шегарадағы тоқты жуқа р-п өткелдегі аз сандағы тийқарғы емес тоқ тасыушылар тасыйды. Нәтийжеде р-п өткелінің өткізгішлиги аз болады хәм вольт-амперлик характеристика 4.23-сүүреттегідей симметриялы емес характерге ийе болады.

Техникада р-п өткелді жийи қолланады. Олардың айырымлары хәққинда айтып өтемиз.

Тоқты туұрылау хәм сигналларды детекторлау. Бундай мақсетлерде ең бас бөлими р-п өткел болған ярым өткізгішли диодларды пайдаланады. Диодты шынжырға тутастырудың схемасы 4.25-сүүретте келтирилген. Егерде шынжырдың кириу бөлиминде синусоида тәризли сигнал берилсе, онда диод өзи арқалы синусоиданың тек оң мәнисли ярым толқынларын ғана өткереді. 4.25-сүүретте диод арқалы өткен тоқ өтетуғын қарсылықтың ушындағы сигналдың түри келтирилген. Синусоиданы «тегислеу» мақсетинде қосымша С конденсаторы пайдаланылады. Бул конденсатор зарядланыу хәм разрядланыу арқалы «сүйир» ярым толқынларды тегислейди. Усындай схема тийқарында кернеудің ең әпиуайы туұрылаушылары ислейди. Бул туұрылаушылар өзгермелі тоқты

турақты токқа айландырады. Тап усындай схема бойынша ислейтуғын сигналлар детекторлары болса жоқарғы жийиликли сигналлардың пайдалы информацияларды алып жүретуғын керекли бөлимин кесип алыуға мүмкиншилик береді.



4.25-сүүрет.

р-п өткелди токларды туўрылаў хэм сигналларды детекторлаў ушын жалғаўдың схемасы.

Кернеў стабилизаторлары. р-п өткелдиң пробойы кубылысын кернеўди стабилизациялаў ушын пайдаланады. Буның ушын орнықлы емес (стабильный емес) $U_{кiриу}$ кернеў дерегине резистор менен стабилитроннан туратуғын шынжыр тутастырады. Стабилитрон болса р-п өткелинен турады. Стабилитрон кери бағытта тутастырылады хэм берилген кернеўге есапланған болады (4.26-сүүрет). Егер стабилитрондағы кернеўдин мәниси критикалық мәнистен үлкен бола басласа ол хэм R резисторы арқалы өтиўши токтың шамасы үлкейеди хэм резисторға түскен кернеў де үлкейеди. Усының салдарынан стабилитронға түскен кернеў пробой кубылысы басланатуғын критикалық мәнистен үлкен бола алмайды. Бундай жағдайда стабилли емес кернеў еки кернеўдин қосындысынан турады: резистордағы стабилли емес кернеў хэм стабилитрон менен нагрузкадағы стабилли кернеў (4.26-сүүрет).

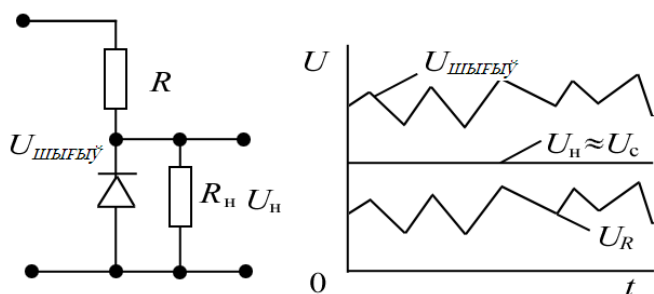
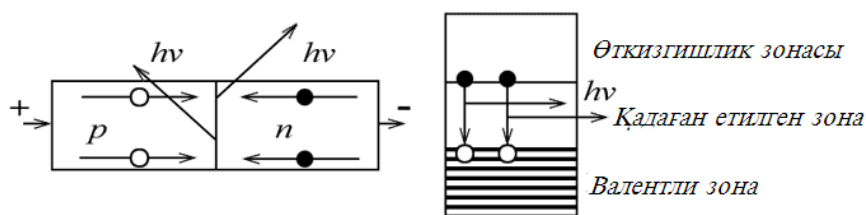


Рис. 4.26.

р-п өткелди кернеўди стабилизациялаў ушын тутастырыў схемасы.

р-п өткели тийкарында ислейтуғын стабилитронларды хәр қыйлы кернеўлер ушын арналған етип сәйкес санаат тараўлары көп санда ислеп шығарады. Олар үш вольттан жүзлеген вольтлардағы диапазонларда ислейди.

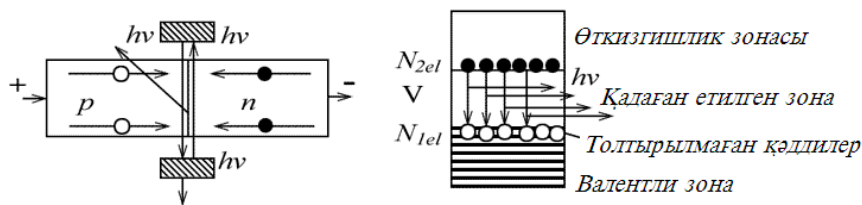
Жақтылық шығарыўшы диодлар. Жақтылық шығарыўшы диодлар электр тоғының энергиясын жақтылық энергиясына айландырады. Оның ислеў принципін 4.24- хэм 4.27-сүүретлерде келтирилген схемалар тийкарында түсиниў мүмкин. Бул схемаларда р-п диодлар туўры бағытта жалғанған. Шегарада р областтан келген тесикше п областтан келген электрон менен рекомбинацияға ушырайды. Бул электронның өткизгишлик зонасынан валентлик зонаға өтиўине эквивалент. Сонлықтан бундай өтиў электромагнит нурлардың квантын шығарыў менен жүриўи керек. Ал ярым өткизгигште болса қадаған етилген зонаның кеңлигин инфрақызыл областтан ультрафиолет областқа шекемги квантлар шығатуғындай етип сайлап алыуға болады.



4.27-сүүрет.

Жақтылық

а) шығаратуғын (а) хэм



лазерлик диодтың (b)
жұмыс іслеу схемасы

b)

Жақтылық шығаратуғын диодлардың пайдалы тәсир коэффициенті жүде жоқары болып, оның мәнісі 80 процентке шекем жетеді. Ал ең жақсы қыздырыу лампаларының пайдалы тәсир коэффициенті оннан он еседей киші. Жақыйқатында да сәтлі түрде соғылған жақтылық шығарыушы диодта сол диод арқалы өтиуші тоқты пайда етеуғын хәр бир электронның тесикше менен рекомбинацияға ушырап нурланыу квантын шығарыуы керек. Бундай жағдайда энергияның аз мұғдардағы жоғалыуы нурландырылған кванттың диодтың материалы тәрепинен жутылып, оның жыллылық энергиясына айланыуына байланысly. Жақтылық шығаратуғын диодлардың өмири жүде узақ. Себеби бундай диодларда тез арада истен шығатуғын қызыушы сымлар, катодлар хәм сол сыяқлы бөлімлер болмайды.

Жақтылық шығарыушы диодлар экономлы миниатюралық жақтылық дереклери сыпатында кең түрде қолланылады. Олар берілген жиийлик диапазонында жақтылық шығарады. Сонлықтан бундай диодлар әдеттегидей электр лампаларын алмастыра алады, жақтыландырыу дүзиліслерінде жақтылық дереги сыпатында пайдаланылады.

Лазерлик жақтылық шығарыушы диодлар. Лазерлик жақтылық шығарыушы диодлардың іслеу принципі жақтылық шығарыушы диодлардың іслеу принципі менен дерлик бирдей. Бирақ бир қатар шеклерди есапқа алыуымыз шәрт. Бул диодларда халлардың инверсиялық толтырылыуын жүзеге келтириуіміз керек (яғный қозған халда электронлар көп, ал тийкарғы халда электронлар аз). Бундай жағдайда р-п өткели областында жүзеге келтириу мүмкин. Өткізгішлік электронларының үлкен концентрациясы (олар лазердің қозған халына сәйкес келеді) п областтан келген электронлар тәрепинен тәмийин етиледі (4.27-б сүүрет). р областтан келиуші тесикшелердің үлкен концентрациясы өткелдеги тийкарғы халда турған электронлардың аз (N_1) санына сәйкес. Бундай жағдайда халлардың толтырылыуының инверсиясын пайда етиу мүмкин (р-п өткели областында қозған халдағы электронлардың концентрациясы N_2 , тийкарғы халдағы электронлардың концентрациясы N_2 ден үлкен). Лазерлик резонатордың айналары сыпатында ярым өткізгіш материалдың тегісденген қапталлары хызмет етеді (4.27-сүүретте келтирилген). Бул тегісденген қапталлардың бирин ярым мөлдир етип істейді хәм бул бет арқалы лазер нуры шығады (4.27-б сүүрет).

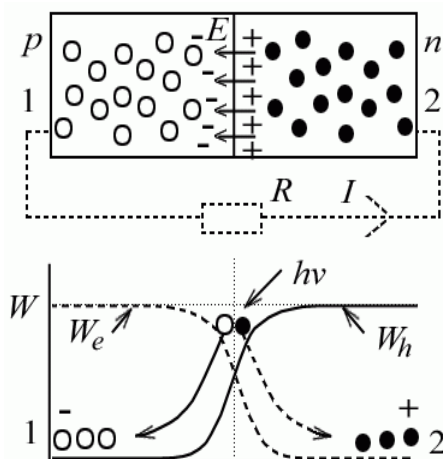
Лазерлик диодлар миниатюралық, экономлы диодлар болып, оның узынлығының шамасы 1 см ден көп емес. Бундай диодлар жүде күшли жақтылық дәстесин бере алады хәм сонлықтан оларды информацияларды жазыу үшін полимер пленкалардың зәрүрли болған орынларын күйдириу үшін жиий пайдаланады. Лазерлик диодларды информацияны жазыу хәм оқыу үшін соғылған оптикалық дүзиліслерде, лазерлик принтерлерде, информацияларды шийше талшықлы кабеллер арқалы жеткерип беріуші системаларда кең түрде қолланады.

р-п өткелиндеги ток дереклери. Хәзирги уақытлары электр тоғының генераторлары сыпатында р-п өткелиндеги ток дереклери кеңнен қолланылады. Бундай өткеллердеги ток дереги болып төмендегилер хызмет етеді:

- 1) р-п өткелине түсіуші электромагнит нурланыуы энергиясы. Бундай дүзиліслерди ярым өткізгішли Қуяш элементлери деп атайды;
- 2) р-п өткелине алып келинетуғын жыллылық энергиясы. Бундай дүзиліслерди ярым өткізгішли жыллылық элементлери деп атайды.

Ярым өткізгішли Қуяш элементлери. Ярым өткізгішли Қуяш элементлеринин іслеу принципі 4.28-сүүретте келтирилген схемада көрсетілген. Бул схемадағы р-п

өтиуінде жоқарыда атап өтилген процесслердің нәтижесінде электр майданы пайда болады хәм электронлар менен тесикшелердің энергияларының тарқалыуы тоқты пайда етиу ушын жумсалады. р-п өткели областында жутылған квант тесикше-электрон жұбын пайда етеди, электр майданы тесикшени р областқа, ал электронды п областқа ысырады. Бундай жағдайда жақтылық нурларының тәсирінде тесикшелер р, ал электронлар п областқа жыйналады. Усының нәтижесінде 1 хәм 2 ноқатларын бир бири менен тутастырсақ тоқ өтеди хәм бул тоқты пайдаланыу мүмкиншилигине ийе боламыз.



4.28-сүүрет.

Ярым өткізгішли Қуяш элементінің конструкциясы хәм жұмыс іслеуінің принципі.

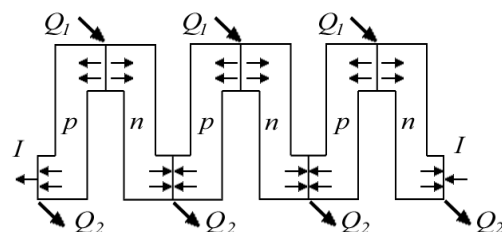


Рис. 4.29.

Ярым өткізгішли областларды жыллылық элементлери батареясына тутастырыу. Электрон-тесикше жұбының тууылыуы жыллылықтың жутылуының салдарынан жүзеге келеди. Сонлықтан сүүреттің жоқарысындағы р-п областты қыздырыу керек болады. Электрон-тесикше жұбының рекомбинациясының салдарынан жыллылық бөлиніп шығады, сонлықтан сүүреттің төменінен жыллылықты алып кетиу керек болады.

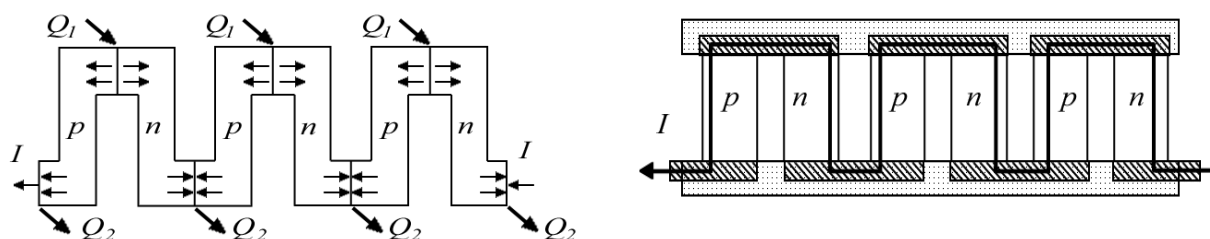
Ярым өткізгішли Қуяш элементтерін р типіндегі ярым өткізгіштің пластинкасы түрінде алады. Бул пластинкаға металдың жуқа мөлдир қатламын отырғызады, ал бул өткізгішті п типіндегі ярым өткізгіш сыпатында қарау мүмкін. Буннан кейін металл қатламды қорғап туруышы мөлдир материал менен жабады. Бул қатлам арқалы өткен жақтылық квантлары металдың жуқа қатламынан өтип р-п областында жутылады. Тоқты ярым өткізгішли пластинкадан хәм жуқа қорғап туруышы қатламнан «алып кетеді». Бундай элементтің ушларында пайда болған потенциаллар айырмасы вольттен әдеуір киши, ал тоқтың шамасы бир неше миллиамперди курайды. Әдетте элементтерди батареяға тутастырады (буны Қуяш батареясы). Ал элементтерди бир бири менен ізбе-із де параллел де тутастырыуға болады.

Ярым өткізгішли жыллылық элементлери. Ярым өткізгішли жыллылық элементтерінің жұмыс іслеу принципі Қуяш элементтерінің жұмыс іслеу принципіне ұқсас. Тийкарғы айырма соннан ибарат, р-п областында электрон-тесикше жұбы бул жағдайда жыллылықтың тәсирінде пайда болады.

Ярым өткізгішли жыллылық элементтерін әдетте 4.29-сүүретте көрсетілгендей етип батареяға тутастырады. Бундай жағдайда қандай да бир жыллылық дерегі тәрөпинен қыздырылатуғын р-п өткеллери конструкцияның бир тәрөпин, ал әдетте суу ямаса хауа ағысы менен қыздырылатуғын р-п өткели конструкцияның екінші бөлегін курайды.

Ярым өткізгішли салқынлатқышлар. Ярым өткізгішли салқынлатқышлар сондай дүзиліс болып табылады, электр тоғы өткерілгенде бундай дүзилістің бир тәрөпи салқынлайды, ал екінші тәрөпи қызады. Оның схемасы 4.30-сүүретте келтирилген. р хәм п областларын шынжыр тәрізлі етип тутастырады хәм бул шынжыр арқалы тоқ өтеди. Жуп номерлерге ийе областларда электронлар менен тесикшелердің рекомбинациясы орын алады хәм бул областлардан жыллылық бөлиніп шығады. Ал тақ номерлі областларда электрон-тесикше жуплары пайда болады хәм сонлықтан бундай областларда

энергия жутылады. Ярым өткізгіштердің қадаған етилген зоналарының кеңдігін хәм басқа да характеристикаларын таңлап алыў арқалы жыллылық энергиясының жутылыўы менен шығарылыўының жүзеге келиўин әмелге асырыў мүмкин. Егер тутастырылған орынлардан жыллылық алып кетилетуғын болса салқынлатқыш машина (салқынлатқыш машина жыллылықты салқын денеден температурасы жоқары болған денеге алып береді) алынады. Әдетте хәр қыйлы типтеги ярым өткізгіштерди 4.30-в сүүретте келтирилген схема бойынша жалғастырады. Бундай жалғастырыўда «салқын» жағы бир тәрәпте, ал ыссы жағы екінши тәрәпте жайласады. Усындай дүзилистің жәрдеминде 30-50 градуслық температуралар айырмасын алады.

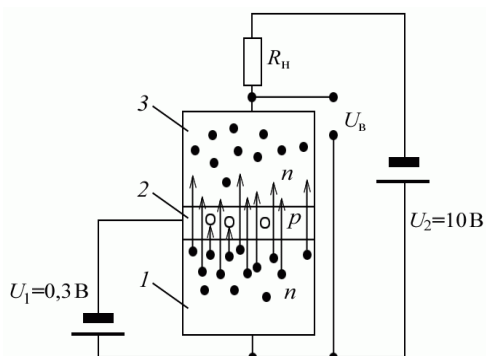


4.30-а хәм b сүүретлер.

Салқынлатқыштағы ярым өткізгіш областлардың бир бири менен жалғаныўы. Электрон-тесикше жұбының пайда болыўы жыллылықтың жутылыўы менен жүреді. Сонлықтан р-п өткелдің жоқарыдағы областлары менен олар менен тутасқан диэлектрик пластинка салқынлайды. Электрон-тесикше жұбының рекомбинациясы жыллылықтың шығарылыўы менен жүреді, бул жыллылық р-п өткелдің төменги тәрәпиндеги областлардан диэлектрик пластинкалардың жәрдеминде алып кетиледи.

Ярым өткізгішли салқынлатқышлар миниатюралық жеңил салқынлатқышлар талап етилетуғын техниканың тараўларында кең түрде қолланылады. Бундай салқынлатқышлардың жәрдеминде инфрақызыл нурланыўының датчиклерин, ярым өткізгішли лазерлерди хәм тағы басқалар салқынлатылады.

Ярым өткізгішли транзистор. Егер ярым өткізгіштің үш областын 4.31-сүүретте көрсетилгендей етип тутастырса ярым өткізгіш транзистор деп аталатуғын әсбап алынады. Бундай транзистордың жәрдеминде сигналларды, тоқларды, кернеўлерди күшейтиў мүмкин. Ярым өткізгіштің хәр қыйлы типлериниң избе-излигине байланыслы транзисторлар р-п-р хәм п-р-п типинде болады (транзисторлардың тек еки типі бар).



4.31-сүүрет.

п-р-п типиндеги транзисторды тутастырыў схемасы.

п-р-п транзистордың жұмыс ислеў принципін қарап өтеміз. 2 арқалы белгиленген ортадағы областтың жүдә жуқа болыўы әхмийетке ийе. Себеби 1 хәм 2 областларынан келген электронлардың көпшилигиниң тесикшелер менен 2 областында рекомбинацияға ушырамай жоқарыдағы 3 областына келип жетиўи талап етиледі. Бул принципаллық талап. 1, 2 хәм 3 областлары транзистордың сәйкес эмиттери, базасы хәм коллекторы деп аталады. Оларға өткізгіштер жалғанады. Бул өткізгіштерди де радиотехникада транзистордың эмиттери, базасы хәм коллекторы деп аталады.

Эмиттер менен базаға жалғанған өткізгішлерге шама менен 0,3 вольт кернеу түсіріледі. Демек эмиттер-база өткелі азмаз ашылған деген сөз. Коллектор хэм эмиттерге шама менен 3 – 30 вольт кернеу түсіріледі. Демек коллектор-база өткелі жабық деген сөз. Бірақ эмиттер областынан келген электронлардың айырымдары ғана база областында тесікшелер менен рекомбинацияға ушырайды (шама менен 20-100 электронның біреуі). Қалған электронлардың барлығы да рекомбинацияға ушырауға «үлгермей» коллектор областына «секиріп» өте алады..

Эмиттер-базадағы кернеудің киші өзгерісі эмиттер-база арасындағы р-п өткелі арқалы өтетугын тоқтың үлкен шамаларға өсіуін, ал бул өз гезегінде коллектор областындағы тоқтың өсіуін тәмийінлейді. Бундай жағдайда нағрузка қарсылығында кернеудің күшлі өзгерісі жүзеге келеді. Солай етип эмиттер менен база арасындағы кернеу менен тоқтың киші өзгеріслері транзистордың база менен коллекторы арасындағы кернеудің үлкен шамаларға өзгерісін болдырады. Транзистор тоқ пенен кернеуді күшейтетугын компактлы эсбап болып табылады. Оның жұмыс іслеуі үш электродлы вакуумлы радиолампадың жұмыс іслеуіне ұқсас.

Радиолампаарға салыстырғанда транзисторлар компактлы (хәзіргі уақытлары микросхемалардың қурамына кириуші транзисторлардың өлшемлері бір микрометрден аспайды, ал бір микросхема өз ишіне 10^6 - 10^8 шамасына шекем транзисторларды ала алады). Транзисторлар бекемлігі жақтан радиолампаарға салыстырғанда әдеуір жоқары (себеби транзисторларда торлар, шийше бөлімлер, қызатуғын катод болмайды), радиолампаарға салыстырғанда әдеуір ұзақ уақыт істейді (себеби күшлі қызатуғын деталлары жоқ) хэм технологиялық жақтан жүдә жоқары әхмийетке ийе [шаңландырыу (напыление) хэм қыздырыу (отжиг) жолы менен бір кристалда дөретілген микросхемалардың қурамына кириуші транзисторлардың бірден 10^5 - 10^8 данасын алады].

Ярым өткізгішлерден соғылған транзисторлардың хэм басқа да ярым өткізгішлі эсбаптардың кемшилигі сыпатында бирінші гезекте олардың қызыуға, радиацияға айрықша сезгірлігін атап өтиу керек. Сонлықтан күшлі радиация бар орындарда ярым өткізгішлі эсбаптарды табыссыз түрде пайдаланыу мүмкін емес хэм сонлықтан сондай орындарда усы күндерге шекем радиолампаары бар эсбап-үскенелер пайдаланылады.

1956-жылы Уильям Брэдфор Шокли, Джон Бардин хэм Уолтер Хаузер Браттейнлер ярым өткізгішлерді изертлеу бойынша жұмыстары хэм транзисторлық эффектти ашқанлығы үшін Халық аралық Нобель сыйлығын алыуға миясар болды.

Ярым өткізгішлі транзисторлардың пайда болыуы XX әсирдегі ең үлкен техникалық революцияны болдырды. Компьютерлік, басқа да электронлық техниканың компактлы хэм исенімлі элементлерін дөретиу мүмкіншилигі жүзеге келді.

Қатты денелердің магнитлік қасиеттері

Белгілі болған барлық затлар өзлерінің магнитлік қабыллағышылығының белгісі бойынша диамагнетиклер хэм парамагнетиклер болып екі үлкен топарға бөлінеді. Парамагнитлік затлардың арасындағы магнитлік жақтан тәртіплескен затларды айырып көрсетеді. Бундай затларда қоңсылас атомлардың магнит моменттері бағыттары бойынша тәртіплескен. Мысалы ең әпиуайы жағдай ретінде ферромагнетиклерді алып көрсету мүмкін. Оларда барлық атомлардың магнит моменттері бір бири менен параллель. Магнит моменттерінің тап усындай болып тәртіплесиуі затлардың тек магнитлік қасиеттерінің емес, ал басқа да көплеген физикалық қасиеттерінің (мысалы жыллылық сыйымлығын) қәліплесиуіне тәсір жасайды. Биз төменде магнитлік жақтан тәртіплескен затлардың физикалық қасиеттерін қарап өтеміз.

Магнитлік тәртіплесиудің тәбияты

Атомлардың магнит моментлерінің тәртіплескен түрде жайласулары электростатикалық тәбиғатқа ийе хәм электронлардың толқын функцияларына Паули принципі тәрәпинен қойылатуғын шеклер менен байланысly. Буны төменде келтирилген еки электронның толқын функциясының түрі хаққындағы таллаудың жәрдемінде көрсетиу мүмкін. Бул таллауды көп санлы электронлар ушын да улыұмаластыруу мүмкін.

Еки электронның толқын функциясы $\Psi_{r_1, r_2, S_1, S_2}$ арқалы белгилеймиз. Егер бул толқын функциясының спинлік бөлими S_1, S_2 оның координаталық бөлими r_1, r_2 ден ғәрезсиз деп есапласақ, онда $\Psi_{r_1, r_2, S_1, S_2}$ функциясын Ψ_{S_1, S_2} хәм Ψ_{r_1, r_2} функцияларының көбеймеси түрінде көрсетиу мүмкін. Квант механикасында спин-орбиталық тәсирлесіу киши болған жағдайда бундай жақынласуу дурыс нәтижелерди береді деп есаплайды. Электронлардың толқын функциясының антисимметриялығы еки жағдайда жүзеге келеді:

1) толқын функциясының спинлік бөлими антисимметриялы (бул спинлердің қарама-қарсы бағыттарына сәйкес келеді), ал оның координаталық бөлими симметриялы ямаса симметриялы емес,

2) толқын функциясының спинлік бөлими симметриялы (бул спинлердің бағытлас болуына сәйкес келеді), координаталық бөлими болса антисимметриялы.

Симметриялық толқын функциясының координаталық бөлими мынадай түрге ийе:

$$\Psi_r(\vec{r}_1; \vec{r}_2) = \Psi_{r_1}(\vec{r}_1) \cdot \Psi_{r_2}(\vec{r}_2) + \Psi_{r_1}(\vec{r}_2) \cdot \Psi_{r_2}(\vec{r}_1),$$

Ал антисимметриялық толқын функциясының координаталық бөлими мынадай түрге ийе:

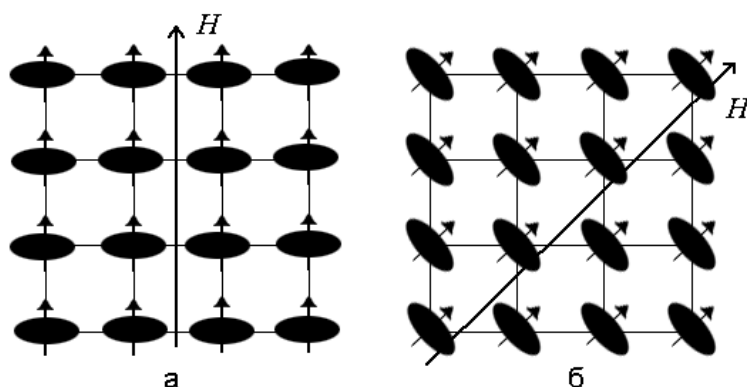
$$\Psi_r(\vec{r}_1; \vec{r}_2) = \Psi_{r_1}(\vec{r}_1) \cdot \Psi_{r_2}(\vec{r}_2) - \Psi_{r_1}(\vec{r}_2) \cdot \Psi_{r_2}(\vec{r}_1).$$

Солай етип спинлердің бир бирине салыстырғандағы бағытлары (ориентациялары) электронлардың толқын функцияларының түрін өзгертеді екен. Бул жағдай электронлар қабықларының хәр қыйлы формалары хәм электростатикалық энергияның хәр қыйлы мәнислери менен байланысly. Спинлердің антипараллель хәм параллель болған жағдайларына сәйкес келиуши (ямаса толқын функциясының координаталық бөлимінің симметриялық хәм антисимметриялылығына сәйкес келиуши) энергияның мәнислерінің айырмасы алмасыу энергиясы деп аталады хәм U_{alm} арқалы белгиленеді. Квант механикасында U_{alm} шамасының $2J S_1, S_2$ шамасына тең екенлиги дәлилленеді, яғный $U_{alm} = 2J S_1, S_2 \cdot J$ шамасы алмасыу интегралы деп аталады хәм оның мәниси электронлар бултының формасына, ең баслысы олардың бир бири менен қалайынша қосылысатуғынлығына байланысly.

J шамасының ең үлкен мәниси толтырылмаған ишки электронлық қабықларға ийе атомларда бақланады. Мысал ретінде темирди, хромды, марганецти, кобальтты, никельди, жерде сийрек ушырасатуғын хәм трансурани элементлерін көрсетиу мүмкін. Алмасыу интегралының белгиси де, мәниси де атомлар арасындағы қашықтықтан ғәрезли. Сонлықтан J шамасының мәниси хәр қыйлы химиялық бирикпелерге кириуши атомлардың бирдей жубы ушын хәр қыйлы мәнислерге ийе бола алады. Бул жағдай өз гезегінде магниттік тәртіплесіудің көп санлы типлерін пайда етеді.

Атомлардың магнит моментлери тәртіплескенде энергиялық жақтан бир қанша утады. Бул утыстың шамасы атомлар қайтадан тәртіплескендеги химиялық байланыстағы энергияның утысындай мәниске ийе. Усындай себеплерге байланысly атомлардың магнит моментлерінің тәртіплесіуи куймадағы атомлардың қайтадан топарларға бөлинуін, хәтте курамы бир текли болған куйманың бир неше фазаларға ажыралыуын болдыра алады (бир фаза магнит моментлери күшли түрде тәртіплескен элемент пенен бай, екіншиси «қалған» элементлерге бай фазалар).

Магнитлик анизотропия. Кристалда магнитлик тәртиплесіу энергиясы кристаллографиялық көшерлерге салыстырғандағы атомлардың магнит моментлеринің хәм усыған байланыслы электронлық қабықлардың бағыты менен байланыслы. 5.1-сүўретте магнит моментлеринің бағытларының, оның менен байланыслы болған атомлардың электронлық қабықларының кристаллографиялық көшерлерге салыстырғандағы еки түрли болып бағытланыуы келтирилген. Электронлық қабықлардың бир бири менен бетлесіуі хәр қыйлы болғанлықтан сүўретте келтирилген қабықлар ушын өз-ара тәсирлесіудің хәр қыйлы энергиясы сәйкес келеди. Бундай жағдайларда магнит моментлеринің берілген H майданында $[100]$ ямаса $[110]$ бағытларындағы энергиялары хәр қыйлы мәнислерге ийе болады. Бул энергияны магнит анизотропиясы энергиясы деп атайды. Бундай энергияның көлемлик тығызлығы ω_m шамасын ярым феноменологиялық формулалар жәрдеминде есаплайды.



5.1-сүўрет.
Атомлардың магнит моментлеринің хәм H майданының хәр қыйлы ориентацияларындағы атомлардың электронлық қабықларының бир бирин жабыуы.

Мысал келтиремиз. кублық пәнжерге ийе кристалдағы ω_m шамасын кристалдың $[100]$ типіндеги бағытына салыстырғандағы магнитлениу векторының бағытлаушы косинуслары (α, β, γ) лардың функциясы деп есаплайды. Бул функцияның мәниси косинуслардың белгисинен ғәрезли болмауы хәм косинуслардың орынларын алмастырыуға қарата симметриялы болыуы шәрт. Себеби кублық пәнжерде берілген вектордың бағыты менен оған қарама-қарсы бағыт, соның менен бирге барлық үш дана $[100]$ типіндеги көшерлер эквивалент. Усындай көз-қараслар тийкарында ω_m шамасын мына түрде жазамыз:

$$\omega_m = K_1(\alpha^2\beta^2 + \alpha^2\gamma^2 + \beta^2\gamma^2) + K_2\alpha^2\beta^2\gamma^2 \quad (5.1)$$

Қәлеген кристал ушын ω_m шамасы киши болатуғын бағыт бар болады. Бундай бағытты жеңил магнитлениу бағыты деп атайды. Мысалы КОК структураға ийе темир ушын $[100]$ типіндеги, ҚОК структураға ийе никель ушын $[111]$ типіндеги, гексагоналлық пәнжерге ийе кобальт ушын $[0001]$ бағыты жеңил магнитлениу бағыты болып табылады. Жаңа магнитлик материалларды дөреткенде хәм оларды техникада пайдаланғанда магнитлик анизотропияны есапқа алыу зәрүр. Магнитлик анизотропия турақлы магнитлер соғыу ушын пайдаланылатуғын көплеген материаллардың ең жоқары характеристикалары болып табылады.

Магнитострикция. Атомлардың магнит моментлери менен олардың электронлық қабықларының бағытлары бир бағытқа қарай өзгергенде (5.1-сүўрет) хәр қыйлы бағытлардағы атомлардың тең салмақлық халларының өзгериуі керек. Себеби асимметриялық электронлық қабықлар хәр қыйлы бағытларда бир бири менен хәр қыйлы болып тәсирлеседи. Усының салдарынан кристалдың геометриялық өлшемлери өзгерислерге ушырайды: айырым бағытлар бойынша қысқарады, ал айырым бағытлар бойынша үлкейеди. Бул кубылыс магнитострикция деп аталады.

Магнитострикцияны тойыныу магнитострикциясы константасы менен характерлейди. Бул константаның мәніси барлық моментлерди толық бура алатуғын күшли H магнит майданындағы кристалдың узынлығының салыстырмалы өзгерисине тең. Көпшилик затлар ушын бул константаның мәніси 10^{-4} - 10^{-5} шамасында. Бирақ константасының шамасы 10^{-3} ке шамалас гигант магнитострикцияға ийе сийрек жер элементлериниң бирикпелери де бар.

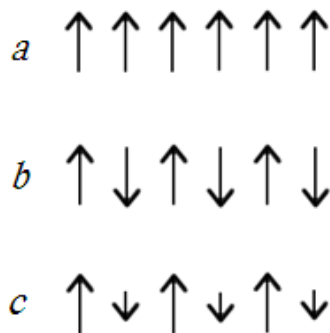
Магнитострикцияны сести хәм ультрасести генерациялаушы дүзиліслерде кең түрде қолланады. Магнитострикция коэффициенті үлкен болған материалдан соғылған сердечникти жийилиги ω болған өзгермели синусоидалық тоқ пенен магнитлейди. Усының салдарынан сердечниктиң узынлығы 2ω жийилиги менен өзгереді. Ал усундай сердечник мембранаға тутастырылған болса ол этираптағы орталықты тербелтиу мүмкиншилигине ийе болады.

Магнитострикцияға кери болған кубылыс та бар. Бундай жағдайда кристалдың деформациясы электронлық қабықлардың бағытларының, солар менен бирге атомлардың магнит моментлериниң анизотропиялық бағытланыуына алып келеді (5.1-сүўретте келтирилген). Демек кристалды деформациялау оның магнитлениуине алып келеді деген сөз. Бул кубылысты да техникада тербеліслер менен вибрацияларды өширетуғын дүзиліслердеги материалларда кең түрде қолланады (мысалы $Fe - Cl$ ямаса $Fe - Al$ куймаларында). Бундай конструкциялардағы серпимли тербеліслер магнит материал кристаллын (көпшилик жағдайларда поликристалын) деформациялайды. Усының салдарынан бундай материал қайтадан магнитленеді хәм буның ушын қосымша энергия талап етиледі. Бул қосымша энергия тербелмели процесслерден алынады хәм нәтийжеде тербеліс амплитудасы кемейеді. Вибрацияның бир неше есе кемейиуі ушын буйымның тек айырым деталларын усундай материалдан соғыу жеткиликлі.

Магнитлик тәртиплесіудің типлери

Қатты денелердегі атомлардың магнит моментлериниң бағытлары бойынша тәртиплесип жайласыуларының көплеген типлери бар. Бул жағдай алмасыу интегралының бир бири менен тәсирлесіуші атомлардың қурылысынан, олар арасындағы қашықлықлардан, үш өлшемлі кристаллық пәнжередегі олардың бир бирине салыстырғандағы жайласыуларынан ғәрезлигиниң ақыбети болып табылады. Биз дәслеп бирдей типтегі атомлардан туратуғын кристаллық денелерди қарап шығамыз.

Жақын қоңсылас атомлар ушын алмасыу интегралының мәніси оң шама бола алады. Бундай жағдайда спинлер бир бирине параллель жайласады хәм ферромагнетизмге сәйкес келеді (5.2-а сүўрет). Егер алмасыу интегралының мәніси нолден киши болса спинлер антипараллель жайласады. Бул жағдай антиферромагнетизмге сәйкес келеді (5.2-б сүўрет). Ферромагнетиклер менен антиферромагнетиклер магнитлик жақтан тәртиплескен затлардың ең әпиуайылары болып табылады. Ең белгили ферромагнетиклер қатарына КОК пәнжереге ийе темир менен ҚОК пәнжереге ийе никель, ал ең белгили антиферромагнетиклер қатарына хром менен марганец киреді. 5.2- (а, б) сүўретлерде ферромагнетиктиң магнитленгенлиги жүдә үлкен, ал антиферромагнетиктиң магнитлениуі нолге жақын шама екенлиги көринип тур.



5.2-сүрөт.

Спинлердин тәртиплесиүиниң типлери:

- а) ферромагнетик ушын,
- б) антиферромагнетик ушын,
- с) ферримагнетик ушын.

Егер атомлар ҳәр қыйлы магнит моментлерине ийе болса, онда айырым атомлардың магнит моментлери антипараллель бағытланыўы мүмкин (5.2-с сүрөт). Бул жағдай ферримагнетизмге сәйкес келеди. Феррит деп аталатуғын ферримагнетиктиң магнитленгенлиги әдеттеги ферромагнетиклердеги жағдайға салыстырғанда киши, бирак әдеўир үлкен шаманы курайды.

Айырым химиялық бирикпелерде атомлардың магнит моментлериниң курамалы түрде жайласыўы да бақланады. Мысалы магнит моментлериниң спираль тәризли болып тәртиплесиўи мүмкин.

Қуымаларда ҳәр қыйлы магнит моментлерине ийе атомлар тәртипсиз түрде араласқан. Соның ушын бундай материалларда магнитлик тәртиплесиўдиң типі қуыманың химиялық курамы өзгергенде өзгереді. Себеби бул жағдайда бирдей типтеги атомлар арасындағы орташа қашықлық ҳәм усы қашықлық пенен байланыслы болған алмасыў интегралының мәниси өзгереді. Мысал ретинде $Mn - Al$ қуымасын көрсетиў мүмкин. Таза марганецтеги Mn атомлары арасындағы орын алатуғын қашықлықлар ушын алмасыў интегралының мәниси нолден киши (яғный терис шама). Сонлықтан ол антиферромагнетик болып табылады. Марганецке алюминийди қосқанда Mn атомлары арасындағы қашықлық үлкейеди. Усының салдарынан Mn атомлары арасындағы қашықлық белгили бир мәниске жеткенде (яғный Al атомларының белгили бир концентрациясында) алмасыў интегралының мәниси нолден үлкен болады. Бундай жағдайда Mn атомларының магнит моментлери ферромагнитлик типте тәртиплеседи.

Магнитлик тәртиплесиўди изертлеў усыллары. Кристаллардағы спинлердиң бағытларын (ориентацияларын) үйрениўдиң ең исенимли усылы нейтронлардың шашыраўы болып табылады. Нейтрон магнит моментине ийе. Оның мәниси $\mu_n = 0,966237 \cdot 10^{-29}$ Дж/Тл. Сонлықтан ол атомлардың магнит моментлери менен тәсирлесе алады. Соның менен бирге нейтронлар ядроларда өзлериниң энергияларын өзгертпей шашырай алады. Усы жағдайларға байланыслы нейтронлардың дифракциясын спинлердиң бағытларын үйрениў ушын пайдаланады.

Ҳәр бир атомның нейтронларды шашыратыў амплитудасы еки қосылыўшыдан турады: ядролық ҳәм магнитлик.

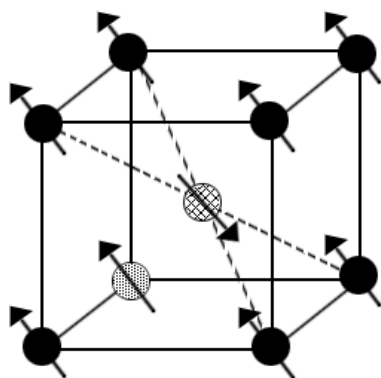
Бириншиси ҳәр бир изотоптың қурылысынан ғәрезли ҳәм ҳәр қандай изотоплар ушын ҳәр қыйлы мәнислерге ийе.

Екиншиси болса атомның магнит моменти μ диң шамасынан ҳәм бағытынан ғәрезли. Егер шашыраў векторы G менен μ өз-ара перпендикуляр болса шашыраў максималлық мәнисике, ал параллель болғанда нолге тең. Солай етип кристалды G бағытында магнитлеп магнитлик шашыраўды «жок» етиўге болады деген сөз. G менен μ векторлары арасындағы мүйешлер ҳәр қыйлы мәнислерге ийе болған жағдайлар ушын дифракциялық картиналардың сериясы алынады. Бул картиналардың жәрдеминде «магнитлик» ҳәм «ядролық» системалардың үлеслери анықланады.

Ферромагнитлик тәртиплесіу жағдайында барлық атомлар бірдей шашырау амплитудасына ийе хәм сонлықтан нейтронлар менен рентген нурларының шашырау картинасы бірдей болады.

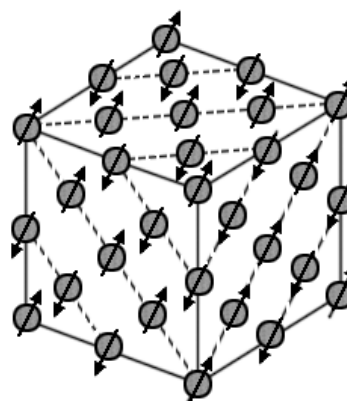
Антиферромагнитлик тәртиплесіуде қоңсылас атомлардың магнит моментлери бир бирине қарама-қарсы бағытқа ийе, ал шашыраған толқынның амплитудасына магнитлик үлестің белгилери хәр қыйлы болып қоңсылас атомлардың шашырау амплитудалары хәр қыйлы мәнислерге ийе. Нәтийжеде қонымша «магнитлик» шашыраулар пайда болады (атомлардың жайласыуларының тәртиплесіуи де тап усындай «қонымша» шашырауларды пайда етеуғынлығын еске түсиреміз).

Енди қыялымызда базы бир гипотезалық структураларды аламыз хәм оларда нейтронлар шашырағанда қандай «магнитлик» шашыраулардың пайда болатуғынлығын қарап өтемиз. Бундай гипотезалық структуралар (қурылыслар) хәм олардағы атомлардың магнит моментлериниң бағытлары 5.3-сүүретте келтирилген. Сүүретте келтирилген элементар қутыша көлемде орайласқан кублық (КОК). Бундай қутышада индекслердиң қосындысы тақ болғанда шашырау орын алмайды (биз буны жоқарыда көргенбиз). Бирақ магнитлик көз-қарастан 1 хәм 2 атомлары хәр қыйлы, олардың шашыратыу амплитудаларының мәнислери де хәр қыйлы. Демек бундай жағдайда индекслериниң қосындысы тақ болған структурадан тыс (сверхструктурные) шашыраулардың пайда болыуы шәрт.



5.3-сүүрет.

Көлемде орайласқан кублық структураға ийе гипотезалық антиферромагнитлик кристалдағы атомлардың магнит моментлериниң өз-ара жайласыулары.



5.4-сүүрет. Антиферромагнитлик тәртиплесіуге ийе марганец окиси MnO кристаллындағы Mn атомларының магнит моментлериниң жайласыулары.

Mn атомларының спинлери (111) типиндеги тегисликлердиң биринде бірдей бағытқа ийе болады.

Ал қоңсылас тегисликтеги спинлер қарама-қарсы бағытланған. Бундай жағдайда жақын қоңсылас атомлардың спинлери қарама-қарсы бағытланған.

Кюри температурасы. Орташа майдан теориясы

Биз жоқарыда көріп өткен магнит моментлериниң тәртиплескен жайласыуы идеалластырылған жағдайлар болып табылады. Себеби биз атомлардың жыллылық қозғалыстарын есапқа алғанымыз жоқ, ал жыллылық қозғалыстары болса магнит моментлериниң тәртиплескен жайласыуларындағы бузылыулардың орын алыуына алып келеди. Салыстырмалы төменги температураларда жыллылық қозғалыстарының тәсири күшли емес, бирақ температура жоқарылаған сайын жыллылық қозғалыстарының тәсири де күшейеди. Ең ақырында Кюри температурасы деп аталатуғын базы бир температурада (Кюри температурасын T_c арқалы белгилеймиз) атомлардың жыллылық қозғалыстары

магнит моментлериниң тәртиплесип жайласыўларын буза алады. Бундай жағдайда ферромагнетик парамагнетикке айланады. T_C шамасының мәніси атомлардың магнит моментлериниң бир бири менен байланысының беккемлигинен ғарезли. Егер ҳақыйқатында да беккем байланыс орын алса, онда T_C температурасының шамасы темир ушын 770^0C , ал темир-кобальт куймалары ушын 1000^0C дан жоқары. Көпшилик затлар ушын Кюри температурасының мәніси жоқары емес ҳәм шама менен өжире температураларын курайды.

T_C ның экспериментте алынған мәнислери бойынша магнит моментлериниң бир бири менен тәсирлесіў энергиясы ω ны анықлаў мүмкин. Тәртиплескен магнит моментлерин бузыў (қыйратыў) ушын шама менен $kT_C \approx \omega \approx 0,1$ эВ жыллылық энергиясы керек. Бул үлкен шама. Оның мәніси диполлердиң бир бири менен тәсирлесіў энергиясы менен магнит диполиниң B магнит майданындағы потенциал энергиясынан үлкен. Ҳақыйқатында да B магнит майданында турған дипольдиң энергиясы $\omega_d \approx \mu B \approx 0,001$ эВ шамасына тең. Бул шама kT_C шамасынан әдеўир киши (жүз еседей киши). Демек ω_d ның шамасы T_C температураларында магнит моментлерин тәртиплескен ҳалда ушлап турыўға жетпейди. Сонлықтан электронлық қабықлардың электростатикалық тәсирлесіўи менен байланыслы болған магнит тәртиплесіўиниң квантлық түсиндирилиўи бирден бир қанаатландырырлық ҳәм бәрше тәрептен мойынланған түсиндириў болып табылады. Бирақ усы жағдайға қарамастан классикалық моделлер де бар болып, олардың тийкарында магнитлик тәртиплесіўдиң «таза магнитлик» тәбияты жатады. Бул моделлер толық корректли (қатаң түрде тийкарланған) болжаўларға тийкарланған болса да магнетиктиң T_C температурасы этирапындағы қәсийетлерин сәтли түрде болжай алады. Сонлай классикалық моделлердиң ең сәтлилерин қарап өтемиз.

Орташа майдан модели. Ферромагнетиклердиң көп қәсийетлерин сәтли түрде тәриплеитиўын базы бир моделлер электронлық қабықлардың электростатикалық тәсир етисіўиниң ҳәм оның менен байланыслы болған алмасыў интегралынан есапқа алыўдың орнына көпшилик жағдайларда молекулалық майдан B_E деп аталатуғын алмасыў магнит майданды (бул майданды Вейсс майданы деп те атайды) пайдаланады. B_E алмасыў магнит майданы магнит моментлериниң тәртиплесип жайласыўларын тәмийинлеўи тийис ҳәм оның шамасын баҳалаў мүмкин. Бул моделлер бойынша алмасыў магнит майданы тәртиплесип жайласқан магнит моментлери тәрепинен пайда етиледі ҳәм усы магнит майданының өзи моментлердиң тәртиплесип жайласыўын тәмийинлейди. Тап усындай етип сайлап алынған Вейс майданы экспериментлерде бақланып жүрген макроскопиялық майданлардан 10 – 100 еседей үлкен. Бундай жағдайдың принципінде кристаллардың айырым нокатларында орын алатуғынлығын атап өтемиз.

Жоқарыда атлары аталған ферромагнитлерди тәриплеитиўын моделлердиң ишиндеги ең әпиўайысы **орташа майдан модели** болып табылады. Бул моделде ҳәр бир магнит моментине заттың магнитленгенлиги J шамасына туўры пропорционал болған B_E магнит майданы тәсир етеди:

$$\vec{B}_E = \mu_0 \lambda \vec{J}. \quad (5.2)$$

Бул аңлатпада μ_0 арқалы вакуумның магнит сиңиргишлиги, ал λ арқалы пропорционаллық коэффициент белгиленген.

T_C менен λ арасындағы байланысты анықлаў мүмкин. Буның ушын сыртқы майдан B_0 , салыстырмалы магнит сиңиргишлиги χ_p , J ҳәм B_E шамалары арасындағы электродинамикадан белгили болған байланысты табамыз:

$$\mu_0 \vec{J} = \chi_p (\vec{B}_0 + \vec{B}_E). \quad (5.3)$$

Парамагнетизм теориясында Кюри нызамы деп аталатуғын нызам бар. Усы нызамды температура T_C дан әдеуір үлкен болған жағдайлар ушын пайдаланамыз:

$$\chi_p = \frac{C}{T}. \quad (5.4)$$

(5.2)- хәм (5.4)-аңлатпаларды (5.3) ке қоямыз хәм $\chi = \mu_0 J / B_0$ деп белгилеп төмендеги аңлатпаны аламыз:

$$\chi = \frac{\mu_0 J}{B_0} = \frac{C}{T - C\lambda}. \quad (5.5)$$

Бул формулада $T \rightarrow C\lambda$ шегинде $\chi \rightarrow \infty$ екенлиги көринип тур. Бул сыртқы майдан $B_0 = 0$ болғандағы шекли магнитленгенлик J ге сәйкес келеди. Ал ферромагнетиклерде болса $T < T_C$ температураларда тап сондай ғәрезлик бақланады. Тап усы жағдайды пайдаланып $C\lambda = T_C$ деп жазады (C арқалы Кюри турақлысы деп аталатуғын турақлы шама белгиленген). Сонлықтан $\chi(T)$ ғәрезлиги мынадай түрге ийе болады:

$$\chi = \frac{C}{T - T_C}. \quad (5.6)$$

Бул формула экспериментте жақсы тастыйықланатуғын Кюри-Вейс нызамы болып табылады. Тәжірийбелерде бул нызамнан үлкен емес айырмалар бақланады. Мысалы (5.6) бойынша есапланған T_C ның мәніси тәжірийбелердеги ферромагнетиктеги спонтан магнитлениўдің жоғалыў ноқатынан бир неше градусқа жоқары болып шығады. Буның себебин түсиндириў мүмкин. Хәқыйкатында да $T > T_C$ температураларда магнит моментлериниң жайласыўында бир неше тегисликлер аралық қашықлықларға тең болған базы бир жақыннан тәртип орын алады. Бундай жағдайда T_C ноқаты жанында заттың парамагнитлик ҳалын магнит моментлери тек киши аралықларда тәртиплескен хәм үлкен χ ға ийе ферромагнитлик ҳал деп есаплаў мүмкин.

Егер парамагнетизм теориясындағы Кюри турақлысы C ушын белгили болған аңлатпаны пайдалансақ, онда λ ушын төмендегидей аңлатпа алынады:

$$\lambda = T_C / C = 3k / (ng^2 S(S+1)(\mu_B)^2) \quad (5.7)$$

Темир ушын $T_C \approx 1043 \text{ K}$. $B_E = \lambda \mu_0 J$. Линде факторы $g \approx 2$; $S = 1$; $\mu_0 J \approx 2Tn$. Буннан $\lambda \approx 500$ хәм $B_E \approx 1000 \text{ Тл}$ екенлигине ийе боламыз. B_E ниң шамасы жүдә үлкен болып шықты (1000 Тл майдан кристалларда бақланатуғын майданнан жүзлеген есе үлкен). Бул нәтийже орташа майдан моделиниң хәқыйқатлыққа сәйкес келмейтуғынлығын билдиреди (хәқыйқатлыққа магнитлик тәсирлесиўдің атомлардың бир бири менен магнитлик тәсирлесиўиниң нәтийжеси деп есаплаў сәйкес келмейди). Бирақ усындай жағдайларға қарамастан орташа майдан модели ферромагнетизм теориясында магнитленгенликтің температуралық ғәрезлигин есаптағанда жийи пайдаланылады.

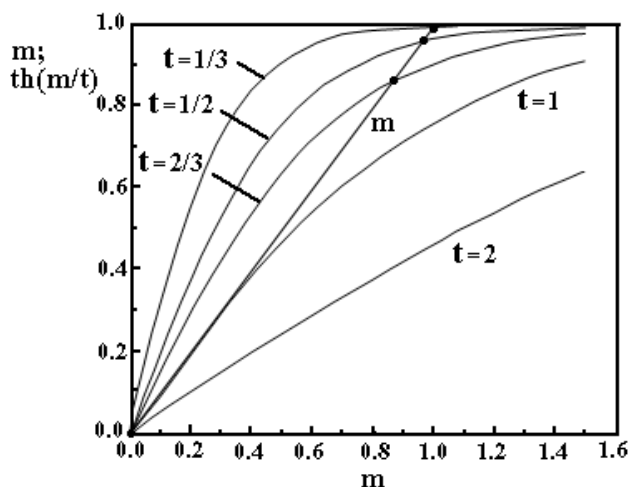
T_C температурасынан төменги температуралардағы магнитленгенлик. $T < T_C$ температуралардағы спонтан магнитленгенликтің температурадан ғәрезлигин есаплаймыз. Әпиўайылық ушын $S = 1/2$ болған жағдайды қараймыз. Бундай жағдайда парамагнетизм теориясына муўапық магнитленгенлик J шамасының B менен T дан ғәрезлиги былайынша жазылады:

$$J = n\mu_B \cdot th(\mu_B B / kT) \quad (5.8)$$

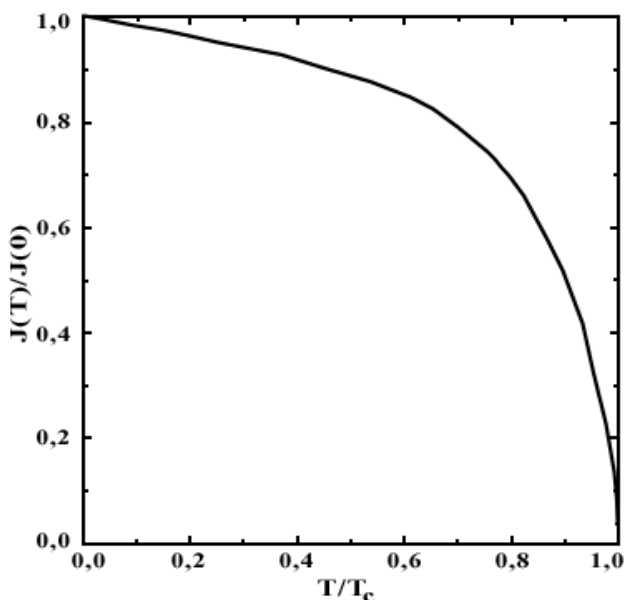
Егер $B_E \gg B_0$ шәрті орынланатуғын болса, онда $B \approx B_E = \mu_S \lambda J$ хәм J ушын жазылған аңлатпа төмендегидей түрге ийе болады:

$$J = n \mu_S \cdot th(\mu_S \mu_0 \lambda J / kT) \quad (5.9)$$

Бул теңлемени J шамасына қарата аналитикалық шешиў қыйын математикалық мәселелер қатарына киреди (мысалы Mathematica 8.0 универсаллық математикалық программалаў тилинің жәрдемінде де теңлемени аналитикалық шешиў мүмкиншилиги болмады). Соның ушын (5.9)-теңлемени $\frac{1}{t} = \frac{\mu_S^2 \mu_0 n}{kT}$ хәм $m = \frac{J}{n \mu_S}$ белгилеўлерин қабыл етип санлы ямаса графикалық жоллар менен ғана шешеди (5.5-сүўртке қараңыз). Теңлеме $T < T_C$ шәрті орынланғанда ноллик емес шешимге ийе болады. Нәтийжелери 5.6-сүўретте келтирилген.



5.5-сүўрет.
(5.9)-теңлемени графикалық жоллар менен шешиў нәтийжелери. 1 хәм 2 иймекликлери (0,0) нокатында кесилеседи, ал $T < T_C$ шәрті орынланғанда сүўреттиң жоқарысындағы қара нокатта да кесилеседи. Бул сыртқы майдан B_0 жоқ болған жағдайдағы ноллик емес магнитленгенликке сәйкес келеди.



5.6-сүўрет.
(5.9)-теңлемени графикалық жоллар менен шешкендеги алынатуғын $J(T)$ ғәрезлиги.

Температура Кюри температурасынан киши болғанда (яғный $T < T_C$ шәрті орынланғанда) T_C температурасы этирапында $J(T)$ ғәрезлигиниң төмендегидей түрге ийе болатуғынлығын көрсетиў мүмкин:

$$J(T) \approx J_0 (1 - T / T_C)^{1/2} \quad (5.10)$$

Шама менен усындай $J(T)$ ғәрезлиги (дәрежеде $\frac{1}{2}$ емес, ал 0,33 болған ғәрезлик) көпшилик ферромагнетиклер ушын тәжирийбелерде де бакланады. $J(T)$ ғәрезлигиниң T_c этирапында кескин өзгерисиниң орын алмауы ферромагнетиктиң парамагнетикке өтиўин екинши әўлад фазалық өтиўлерине жатқарыўға тийкар береді.

$J(T) = J_0 - \Delta J(T)$ ғәрезлигиниң абсолют нолдиң жанындағы өзгерислерин баҳалаймыз. Буның ушын $\ln a \approx 1 - 2 \exp(-2a)$ асимптоталық формуласынан пайдаланып (5.8)-аңлатпаны түрлендиремиз:

$$\Delta J(T) \approx 2J_0 \exp(-2(\mu\mu_0 \lambda J / kT)) = 2J_0 \exp(-2T_c / T) \quad (5.11)$$

Экспериментлер болса $T \rightarrow 0$ шегинде $\Delta J(T)$ шамасының басқаша болған төмендегидей өзгерисин береді:

$$\Delta J(T) \approx J_0 C_{3/2} T^{3/2} \quad (5.12)$$

J_0 хәм $C_{3/2}$ турақлылары хәр қыйлы ферромагнетиклер ушын хәр қыйлы болып шығады.

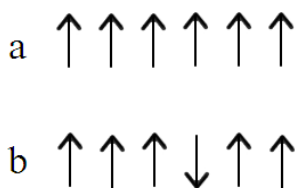
Солай етип орташа майдан теориясы Кюри температурасы этирапындағы ферромагнетиклердиң магнитленгенлигин қанаатландыарлық дәрежеде, бирак $\Delta J(T)$ шамасының $T \rightarrow 0$ шегиндеги өзгерислерин турпайы түрде тәриплейди. Спин толқынлары теориясы (5.12)-аңлатпадағы ғәрезликти түсиндириўге мүмкиншилик береді. Бул жүдә қурамалы болған теорияның ферромагнетиклер ушын алынған тийкарғы нәтийжелерин төменде қарап өтемиз.

Спин толқынлары хәм жыллылық сыйымлығына магнитлик үлес

Спин толқынлары. Спин толқынлары теориясы ферромагнетиклер тийкарғы ҳалда туратуғын төменги температуралардағы атомлардың магнит моментлериниң қәсийетлерин үйренеди. Бундай температураларда спинлер бир бирине параллель жайласады. Биз ферромагнетиктиң магнитлик қәсийетлерине электронлардың орбиталық қозғалысларының айтарлықтай үлес қоспайтуғынлығын, ал сол магнитлик қәсийетлердиң тийкарынан спин моментлери (спинлер) тәрепинен анықланатуғынлығын атап өтемиз. Әпиұайылық ушын N дана спиннен туратуғын сызықлы шынжырды қараймыз (5.7-а сүүрет). Хәр бир спин $\hbar S$ шамасына тең спин моментине ийе. Шынжырда тек жақын қонсылар бир бири менен тәсирлеседи деп есаплайды. Бундай шынжырдағы спинлердиң тәсирлесийү энергиясын былайынша жазыўға болады:

$$U = -2J \sum_{p=1}^N \vec{S}_{p+1} \vec{S}_p \quad (5.13)$$

Бул аңлатпадағы J арқалы алмасыў интегралы белгиленген (алмасыў интегралын J арқалы белгилеў дәстүрге айланған). Төменги температуралардағы жыллылық қозғалыслары бул системаға «қозыўларды» енгизе алады. Мысалы спинлердиң бири бағытын қарама-қарсы бағытқа өзгерте алады (5.7-б сүүрет).



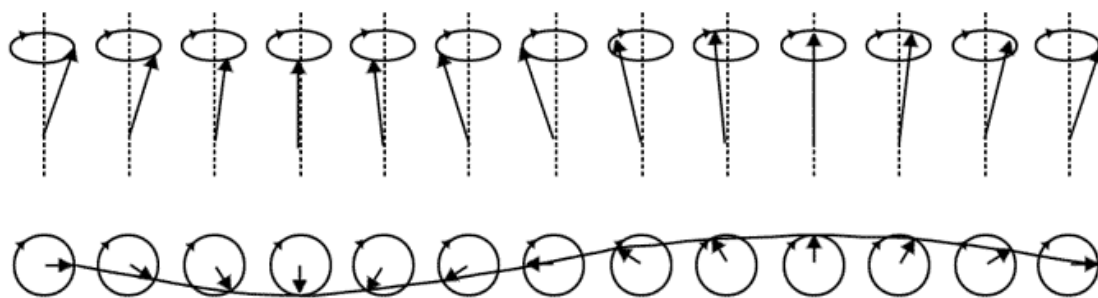
5.7-сүүрет.

Атомлардың сызықлы шынжырындағы спинлердиң ориентациясы (бағыты): барлық спинлердиң бағытлары бирдей (а), жыллылық қозғалысларының тәсиринде спинлердиң бири бағытын қарама-қарсы тәрепке қарай бурған (б).

Бир спин өзинің бағытын қарама-қарсы тәрепке бурса, онда еки жуп спинлер қарама-қарсы бағытланған болады хәм система қосымша энергияға ийе болады:

$$\Delta U = 8JS^2 \quad (5.14)$$

Бул энергияның шамасы салыстырмалы үлкен, 5.8-сүўретте схема түрінде көрсетилген спинлер системасының энергиясы киширек мәниске ийе. Бул жағдайда бир спиннен екінши спинге өткенде хәр бир спиннің бағыты жүдә киши шамаға өзгереді. Ал бағытлардың тарқалыуының өзи толқынды еске түсиреди. Сонлықтан спин системасының тап усындай қозыуларын спин толқындары деп атау қабыл етилген. Бундай қозыулар квантланады. Сәйкес квантты магنون деп атаймыз. Магنونлар да фотонлар менен фононлар сыяқлы квазибөлекшелер болып табылады. Хәр бир магнонның улыұмалық спиннің S_z кураушысын бирге (1 шамасына) өзгертетуғынлығын көрсетиўге болады.



5.8-сүўрет. Спин толқыны жағдайындағы атомлардың сызықлы шынжырындағы спинлердің бағытлары: барлық спинлер бир бири менен дерлик параллель. Спинлердің бағытларының тарқалыуы толқынды еске түсиреди.

Жоқарыда қарап өтилген шынжырдағы ямаса ҳақыйқый кристалдағы магنونлар ушын дисперсия назамын [бул ғәрезликти $\omega(K)$ арқалы белгилеймиз] келтирип шығару мүмкин. Мысалы сызықлы шынжыр ушын (5.7-сүўрет) төмендегидей дисперсия нызамы алынады:

$$\hbar\omega = 4JS (1 - \cos Ka) \quad (5.15)$$

Кублық пәнжерелер ушын тап усындай жоллар менен дисперсия нызамын алыу мүмкин:

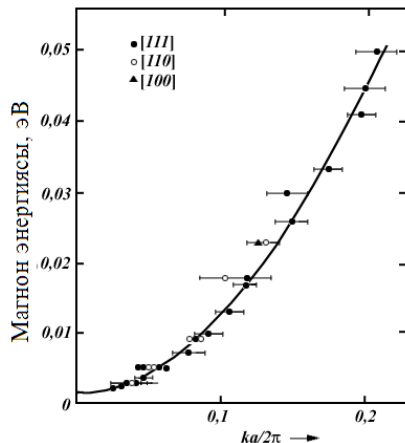
$$\hbar\omega = 2JS \sum_{\delta} (1 - \cos(K\delta)) \quad (5.16)$$

(5.6)-аңлатпа бойынша суммалауды пәнжерениң сайлап алынған түйинин барлық жақын қоңсылар бойынша орынлайды.

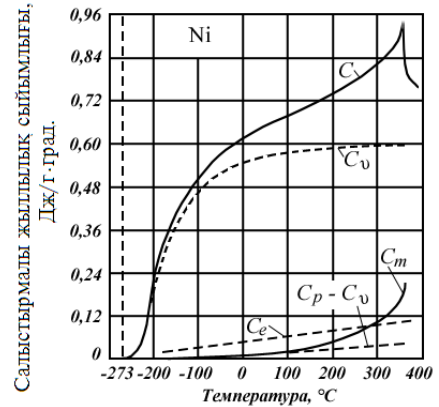
Киши K лар ушын барлық жағдайлар ушын $\omega(K)$ ғәрезлиги улыұмалық түрге ийе:

$$\hbar\omega = 4JS (1 - \cos Ka) = 8JS \sin^2 Ka/2 \approx 2JS Ka^2 \quad (5.17)$$

Магнонның энергиясының (ямаса жийилиги $\omega(K)$ ның) толқын векторы K дан ғәрезлиги фононлар ушын пайдаланылған схемадай схема тийкарында анықланады. 5.9-сүўретте кобальт ушын $\omega(K)$ ғәрезлиги хәм салыстырыу мақсетинде (5.17)-аңлатпа тийкарында есапланған нәтийжелер келтирилген. Киши K ларда магнонның энергиясының K векторының бағытынан дерлик ғәрезли емес екенлиги көринип тур (бул спин толқыны теориясына толық сәйкес келеди).



5.9-сүрөт. Кобальт ушын K векторынын $[100]$, $[110]$ хэм $[111]$ бағытларына сәйкес келиуши $\omega(K)$ ғәрезлиги.



5.10-сүрөт. Никельдин хәр қыйлы температуралардағы моллик жыллылық сыйымлығына хәр қыйлы үлеслердин температуралық ғәрезлиги.

Магنونлардың энергиясы $E(K)$ шамасын фононлар ушын пайдаланылған формулалар бойынша есаплау мүмкин. Себеби $E(K) = \hbar\omega(K)$. Магنونлар да бозонлар болып табылады хэм сонлықтан олар ушын Бозе-Эйнштейн статистикасы формулаларын қолланады. Бирақ бул жерде биз дисперсия нызамының (3.10)-формула менен емес, ал (5.15-5.17) формулалар менен берилетуғынлығын еске алыуымыз керек. Соның менен бирге магنونлардың бир поляризацияға ийе болатуғынлығы атап өтемиз (фононлар үш поляризацияға, ал вакуумдағы фотонлар еки поляризацияға ийе болатуғын еди).

Тап сондай схемалар тийкарында магنونлардың кристаллардың ишки энергиясына хэм ферромагнетиктиң жыллылық сыйымлығына қосатуғын үлесин де есаплай аламыз. Бундай есаплаулар төменги температураларда қатты денелердин жыллылық сыйымлығына магнитлик үлестин температура T ның $3/2$ -дәрежесине (яғный $T^{3/2}$ ге) пропорционал болатуғынлығын көрсетеди. Бул экспериментте алынған нәтижелерге толық сәйкес келеди.

Шама менен тап усындай схема тийкарында төменги температуралардағы $J(T)$ хэм $\Delta J(T)$ шамаларын да есаплау мүмкин. Бундай жағдайларда хәр бир магнонның ферромагнетиктиң магнит моментин бирдей шамаға киширейтетуғынлығын есапқа алады. Нәтижеде $\Delta J(T)$ шамасы берилген температурада ферромагнетиктиң бир бирлик көлеминдеги магنونлардың улыұмалық санына пропорционал болады. Ал бул санды Бозе-Эйнштейн тарқалыуының жәрдемінде аңсат есаплауға болады. Соның менен бирге $\Delta J(T) \approx J_0 C_{3/2} T^{3/2}$ екенлигин де аңсат көрсетиуге болады. Бул аңлатпада $C_{3/2}$ арқалы ферромагнетиктиң структурасына байланысly болған константа белгиленген.

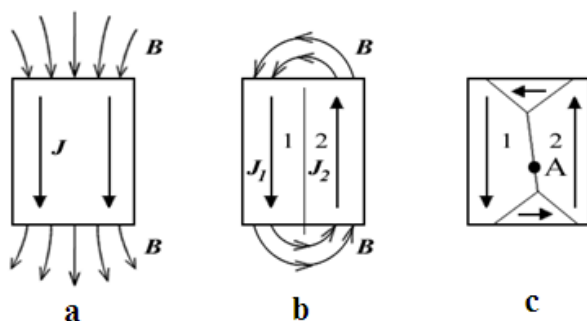
T_c температурасы этирапындағы ферромагнетиклердин жыллылық сыйымлығына қосылатуғын үлес. Көплеген ферромагнетиклерде жыллылық сыйымлығына қосылатуғын магнитлик үлестин шамасы кристаллық пәнжерениң тербелислери тәрәпинен қосылатуғын үлестен де үлкен. Ал T_c температурасының этирапында болса жыллылық сыйымлығына магнитлик үлестин шамасы жыллылық тербелислери беретуғын үлестин шамасынан әдеуір үлкен. 5.10-сүрөтте никелдин хәр қыйлы температуралардағы моллик жыллылық сыйымлығына қосылатуғын хәр қыйлы үлеслердин температурадан ғәрезлиги келтирилген.

Кюри температурасы жанында $C_V(T)$ шамасының температурадан ғәрезлиги T_c температурасының жанында «тиске» ийе екенлиги көринип тур. Усындай ғәрезлик тийкарында экспериментте T_c ның мәниси анықланады. Фазалық курамы белгисиз болған көп фазалардан туратуғын системаларды изертлегенде бул усыл жүдә пайдалы. Себеби экспериментте анықланған T_c ның мәниси бойынша куймалардың фазалық курамы

хаққындағы мағлыұматларды алыұға болады. Соның менен бирге бул усылды антиферромагнетиклерди изертлеұ ушын да пайдаланыұ мүмкин.

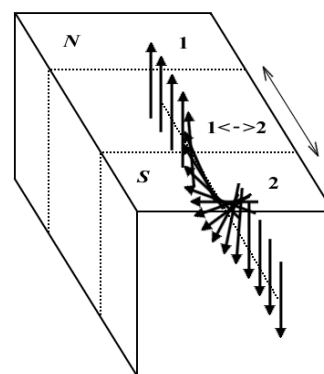
Доменлер, қайта магнитлениұ механизмлери хэм магнитлик қәсийетлер

Жокарыда қарап өтилген магнит моментлериниң жайласыұларының пүтин кристал бойынша толық тарқалыұы жүдә сийрек ушырасады. Кристалларда көпшилик жағдайларда доменлер деп аталатуғын областлардың ишинде бирдей бағытқа ийе болған магнит моментлери жайласады. Доменлердиң сызықлы өлшемлери микрометрлерден артпайды. Кристалдың өзи көп сандағы доменлерден турады. Ал қоңсылас доменлердеги J векторының бағытларының бирдей болыұы шәрт емес. Доменлердиң пайда болыұы кристалдың мүмкин болғанынша киши еркин энергияға ийе болыұға умтылыұының нәтийжеси болып табылады. Егер кристал тек бир доменнен туратуғын болса, онда кристалдың сыртында әдеұир күшли магнит майданы пайда болған болар еди (5.11-а сұұрет). Усы майдан менен шамасы $B^2/2\mu_0$ ге тең магнит майданының энергиясының тығызлығы хэм әдеұир үлкен мәниске ийе магнит майданының энергиясы пайда болған болар еди. Егер кристал шама менен бирдей еки доменге ийе болса хэм бул доменлердеги J шамаларының бағыты қарама-қарсы болса, онда энергияның мәниси әдеұир кемейеди (5.11-b сұұрет). Төрт домен бар болған жағдайда энергияның мәниси оннан да киширейеди (5.11-сұұрет). Солай етип магнит майданының энергиясын киширейтиұ көз-қарасында кристалдың доменлерге бөлиниұи утымлы процесс болып табылады. Нәтийжеде B векторының күш сызықлары кристалдың ишинде «туйықланады».



5.11-сұұрет.

Ферромагнетиктиң доменлерге бөлиниұиниң схемасы.



5.12-сұұрет. Доменлер арасындағы дийұал жанындағы магнит моментлериниң тарқалыұының схемасы.

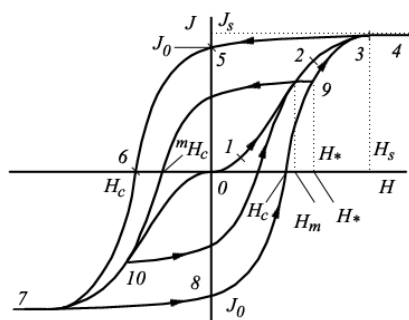
Қоңсылас доменлер арасындағы шегара доменлик дийұалды пайда етеди. Оның қалыңлығы бир неше атомлар арасындағы қашықлыққа тең. Усындай аралықтың ишинде магнит моментиниң бағыты толығы менен өзгереди (5.12-сұұрет). Магнит моментиниң бағытының усындай болып өзгериұиниң қосымша энергия менен байланыслы болатуғынлығы анық. Бундай энергия магнитлик анизотропия энергиясы менен де, доменлик дийұал жанындағы дәл параллель емес магнит моментлериниң тәсирлесиұлери менен де байланыслы. Магнит анизотропиясы энергиясын минимумға алып келиұге тырысыұ доменлик дийұалдың қалыңлығының шамасын минимумға (1 атомлар арасындағы қашықлыққа) алып келиұди талап етеди. Себеби оның қалыңлығы үлкейгенде жеңил магнитлениұ бағытында бағытланбаған магнит моментлериниң саны да өседи. Бирақ усының менен бирге алмасыұ тәсирлесиұ энергиясының мәниси де үлкейеди. Оның ушын магнит моментлериниң бағытларының 5.12-сұұретте көрсетилгендей болып

өзгеріуі оптималлық характерге иіе. Усы еки үлестің минимумы шәртинен доменлик дийұалдың қалыңлығын есаплау мүмкин. [5-7].

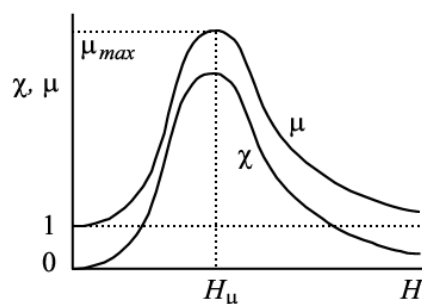
Жүдә майда доменлерге бөлинуі де энергиялық көз-қарастан утымлы емес. Себеби доменлер қаншама майда болған сайын доменлик дийұаллардың «бетлик» энергиясы да артады. Бетлик энергия менен макроскопиялық магнит майданы энергиясы арасындағы «конкуренция» доменлердің оптималлық өлшемлерин анықлайды. Көпшилик ферромагнитлик кристаллардың доменлердің оптималлық өлшемлерінің 1 мкм шамасында екенлігін жоқарыда айтып өткен едик. Соның менен бирге жүдә майда доменлердің пайда болуына кристаллық қурылыстың дефектлерінің де тәсір ететугынлығын атап өтеміз.

Көп ферромагнетиклердің киши магнит майданларындағы қайтадан магнитлениуі доменлердің бар екенлігі менен түсіндириледі. H майданы менен магнитленген, J векторларының бағытлары хәр қыйлы болған бир неше доменлерден туратуғын ферромагнетиктің участкасын қараймыз (5.11-сүұрет). Эпиұайылық ушын доменлик дийұалдың қалыңлығын киши хәм атомлар арасындағы қашықлықтай шамаға тең деп есаплаймыз. 1 домени болса J бағыты бойынша утымлы бағытқа иіе (яғный H қа параллель), ал 2 домени болса утымлы емес бағытланған болсын. 2 доменинің 1 домениңдей бағытқа иіе болуы утымлы. Бирақ киши H тың мәнісінде магнит моментлерінің барлығының бирден бағытларын өзгертиуі энергиялық жақтан қыйын хәм статистикалық жақтан киши итималлыққа иіе. 2 доменинің хәр бир атомының H бағытында бағытын өзгертиуі ушын қонсылас атомлар мүмкиншилик бермейди. Олар бурылуыға кесент жасайды. Бирақ 1 хәм 2 доменлер арасындағы шегараға жақын 2 доменидеги А атом айрықша жағдайда турыпты. Оның утымлы да, утымлы емес те бағытларға иіе еки жақын қонсысы бар. Сонлықтан усы атомның магнит моменти өзіннің бағытын утымлы емес бағыттан утымлы бағытқа салыстырмалы жеңіл өзгерте алады хәм 1 доменине қосылады. Усының менен 1 домени үлкейеди, ал 2 домени киширейеди. Бундай өзгеріслер доменлик дийұалдың атомлық аралыққа тең шамаға жылысқанлығы менен барабар. Егер доменлик дийұалдың қалыңлығының шеклі екенлігін есапқа алатуғын болсақ та бизің таллауларымыз өзіннің дурыс екенлігін сақлайды: атомлардың магнит моментлерінің ізбе-із бағытларын өзгертиуі хәм доменлик дийұалдың жылысуы эффекти жүзеге келеди. Қайтадан магнитлениудің усындай механизмин доменлик дийұаллардың жылжуы менен жүретуғын қайта магнитлениу деп атайды. Бундай қайтадан магнитлениу киши магнит майданларында жүреді.

Хәр қыйлы болып бағытланған доменлердің доменлик дийұаллары шамалары хәр қыйлы болған майданларда жүзеге келеди. Кристаллық қурылыстың хәр қыйлы дефектлері де доменлик дийұаллардың қозғалысларына хәр қыйлы иркиниш жасайды. Сонлықтан ферромагнетиктің хәр қыйлы областлары хәр қыйлы H майданларында қайтадан магнитленеди хәм ферромагнетиктің тутасы менен алғанда J векторының хәр қыйлы болып өзгерісі орын алады. Усының салдарынан J H ғәрезлігі (бундай ғәрезлікті магнитлениу іймеклігі деп атаймыз) қурамалы түрге иіе болады (5.13-сүұрет). Салыстырмалы магнитлик қабыллағышлық $\chi = J/H$ пенен салыстырмалы сиңиргишлик $\mu = B/\mu_0 H$ шамаларының да H майданы арасында қурамалы түрдегі байланыс орын алған (5.14-сүұрет).



5.13-сүүрет. Ферромагнетиктиң магнитлениў ийемклиги хәм гистерезис илмеги (толық хәм толық емес).



5.14-сүүрет. Салыстырмалы магнитлик қабыллағышлықтың ($\chi = J/H$) хәм салыстырмалы сиңиргишлик $\mu = B/\mu_0 H$ шамасының H тан ғәрезлиги.

Магнитлениў ийемклиги 4 түрли характерли участкаға ийе болады. 0-1 участкасы айырым орынларда дефектлерге бекитилген доменлик дийўаллардың қайтымлы қозғалыўы участкасы деп аталады. Бундай қозғалысларда доменлик дийўаллардың майданы менен энергиясы артады. H векторы киширейгенде дийўаллар өзлериниң энергиясының бетлик тығызлығын киширейтүүге тырысып өзлериниң дәслепки орынларына қайтып келеди (созылған пружина ямаса мембрана сыяқлы). 1-2 участкасы доменлик дийўаллардың қайтымлы емес қозғалысларына сәйкес келеди. Бундай қозғалыслардың барысында доменлик дийўаллар қозғалысына тосқынлық жасайтуғын иркинишлер арқалы өтеди хәм сонлықтан H майданының киширейиўи олардың дәслепки орынларына қайтып келиўине алып келмейди. Себеби бул жағдайда да доменлик дийўаллардың кери бағыттағы қозғалысына тосқынлық жасайтуғын иркинишлер арқалы екінши рет өтиўине туўры келеди. 2-3 участкасы сәтти емес бағытланған доменлердиң J векторларының бағытларын өзгертиўиниң (айланыўының) есабынан қайтадан магнитлениў механизминиң жүзеге келиўине сәйкес келеди. Бундай айланыўлар салыстырмалы күшли H майданларында бақланады. Бул жағдайда магнитлениў векторының айланыўы механизми бойынша магнитлениў жүреди деп есаплайды. 3-4 участкасы ферромагнетиктиң барлық магнит моментлериниң H векторы бағытындағы бурылыўына сәйкес келеди. Оған сәйкес келиўши J шамасы тойыныў магнитленгенлиги $J = J_s$, ал сол тойыныў магнитленгенликке сәйкес келиўши H майданының модулин тойыныў майданы H_s деп атайды. J_s шамасының мәниси ферромагнетиктиң көлем бирлигиниң магнит моментиниң ең максималлық мәнисине тең.

Енди H ты H_s ден нолге шекем киширейтемиз. Бундай жағдайда тойыныў картинасына сәйкес келиўши магнит моментлериниң жайласыўлары биринши жақынласыўды сақланады: ал ис жүзинде енди доменлердеги атомлардың магнит моментлери бир бири менен тәсирлесиўдиң салдарынан сақлап турады. Сонлықтан $H = 0$ болған жағдайда J базы бир шекли мәниске ийе болады. Бундай шекли мәнисти J_r қалдық магнитлениў деп аталады. Егер H шамасы H_s тен нолге шекем кемейсе ферромагнетиктиң ҳалы 5.13-сүүреттеги 5 ноқатына сәйкес келеди.

Енди H ты J_s ке қарама-қарсы бағытта үлкейтсек қайтадан магнитлениў процесси басланады. Майдан $H = H_s$ мәнисине жеткенде J_s диң шамасы нолге тең болады. H_s майданын магнитсизлендириў майданы ямаса көпшилик жағдайларда коэрцитивлик күш деп атайды. (5.13-сүүреттеги 6 ноқаты). Бундай жағдайда ферромагнетик үлги магнитсизленеди: егер дәлирек айтқанда ферромагнетиктиң көлеминде J векторлары хәр қыйлы болып бағытланған доменлер болады, бирақ ферромагнетиктиң барлық магнит моментлериниң векторлық қосындысы нолге тең болады. H ты буннан кейин үлкейтсек

үлгі қарма-қарсы бағытта қайтадан магнитленеді. $H = -H_S$ болғанда $J = J_S$ тойыныуы орын алады (5.13-сұреттегі 7 ноқаты).

Егер H шамасын $-H_S$ тен $-H_S$ ке шекем үлкейтсек, онда $J(H)$ ғәрезлигинің 7-8-4 участкалары алынады. Нәтижеде илмекти еске түсіретуғын ғәрезлик алынады хәм бул ғәрезликти гистерезис илмеги деп атайды.

8-4 участка бойынша 4 ноқатына жетпей 9 ноқатына шекем қозғалыу мүмкин. 9 ноқатындағы майданды H_m арқалы белгилеймиз. 9 ноқатынан H майданды H_m шамасынан $-H_m$ шамасына шекем киширейтеміз. Бундай жағдайда магнетиктің халын беретуғын 9 ноқаты 10 ноқатына өтеді. H шамасын белгилі түрде өзгертиу арқалы принципінде гистерезис илмегинің ишіндегі қәлеген ноқатқа барыу мүмкин. H шамасын H_m шамасынан $-H_m$ шамасына шекем цикллық түрде өзгертсек дара жағдайдағы гистерезис илмеги деп аталатуғын гистерезис илмеги алынады. Бул илмектегі максималлық майдан H_m болып табылады. Дара жағдайдағы гистерезис илмегинің ушлары магнитлениу иймеклигинің бойында жайласады.

Хәр қыйлы дүзиліслерде $H_m = H_\mu$ теңлигі орынланатуғын қайта магнитлениудің дара циклери қолланылады. Бул теңлікте H_μ арқалы максималлық сиңиргишлик μ майданы белгиленген. μ диң шамасы максималлық болғанда B майданын күшейтиуде ферромагнетик эффективли түрде пайдаланылады.

$H - B$ координаталарында сызылған гистерезис илмегинің майданының ферромагнетиктің көлем бирлигин цикллық қайта магнитлеу ушын жумсалған энергияға тең екенлигин көрсетиуге болады.

Магнит материаллар. Хәр қандай техникалық мақсетлер ушын гистерезис илмеги хәр қыйлы болған ферромагнит материаллар зәрүрлі. Солардың ишіндегі ең әхмийетлилері коэрцитивлик күшинің шамасы 10^{-1} А/м шамасынан 10^6 А/м шамасына шекемгі материаллар болып табылады. Әмелде H_C ның мәніси жүдә киши болған (магнитлик жақтан жумсақ материаллар) хәм айрықша үлкен болған (магнитлик жақтан қатты материаллар) қолланылады.

Магнитлик жақтан жумсақ материаллар киши магнит майданларында қайтадан магнитленетуғын дүзиліслерде қолланылады. Олар: магнит жазыуларды оқыйтуғын магнит майданының датчиклери, трансформаторлардың сердечниклери хәм басқалар. Бундай мақсетлерде μ шамасы үлкен, ал H_C тиң шамасы және гистерезис илмегинің майданы киши материаллар керек. Бундай материаллар ушын қайтадан магнитлегенде доменлик дийуаллардың қозғалыуын максимал түрде жеңиллестиріу, магнитлик анизотропия менен магнитострикцияның тәсирин киширейтиу талап етиледі. Буның ушын қуймалардағы доменлик дийуаллардың қозғалысына кесент жасайтуғын дефектлердің санын азайтыу, магнитлик анизотропиясы менен магнитострикциясы әззи қуймаларды пайдаланыу керек. Өзгермели магнит майданларында магнитлик жақтан жумсақ материалларды қолланғанда магнетиктің электр тоғына қарсылығының үлкен болыуын тәмийинлеу лазым. Тап усындай талаптарға хәзиргі заманда кең түрде пайдаланып атырған материаллар жууап береді. Олар хәққындағы мағлыұматлар төмендегі кестеде берілген:

Магнитлик жумсақ материаллар хәм олардың магнитлик қәсийетлери

Материаллар топары	H_C , А/м	B_S , Тл	$\mu_{max} \cdot 10^3$
Таза темир	6-70	2,15	7-60
$Fe - Si$	30-50	1,9-2,1	3-7
$Fe - Ni$	0,2-4	0,5-0,8	100-1000
Аморф қуймалар	0,2-0,4	0,9-1,2	400-600
Магнитлик жумсақ ферритлер	15-180	0,4	0,3-4

Дәслепки ўақытлары магнитлик жақтан жумсақ материал ретинде мүмкиншилиги болғанынша жақсы тазаланған темирди пайдаланды. Темирдің тазалығы дефектлердің концентрациясының кемейиўине алып келди. Буннан кейин кристаллитлердің өлшемлерин үлкейтиўге алып келетуғын қосымталарды тапты (кристаллитлердің үлкейиўи дефектлердің концентрацияларының әдеўир киширейиўине алып келеди). Кристаллитлердің үлкейиўининң барысында буйымның берилген бағытларында кристалдың жеңил магнитлениў бағытын қойыў мүмкиншилигин берди. Усындай жоллар менен трансформаторлық полат деп аталатуғын полатларды алады. Оның курамы тийкарынан $Fe - Si$ қуымасынан турады. Кейинирек $Fe - Ti$ тийкарындағы курамалы курамдағы магнитлик анизотропия менен магнитострикцияның мүмкин болған минималлық параметрлерине ийе қуымаларды сайлап алды. Бул μ шамасының буннан да былай үлкейиўине алып келди (10^6 хэм оннан да көп есе). Келеси қәдем аморф хэм нанокристаллық (кристаллық дәнешелерининң өлшемлери бир неше атомлық тегисликлер арасындағы қашықлыққа тең поликристаллар) материалларды пайдаланыў болып табылды. Бундай материалларда магнитлик анизотропия жоқарыда атлары аталған материаллардың магнитлик анизотропиясынан да киши. Усының менен бир қатарда бундай материаллардың салыстырмалы қарсылығы әдеўир үлкен. Себеби бундай материаллардағы атомлардың тәртипсиз жайласыўлары электронлардың бағытланған қозғалысларына кесент жасайды.

Жоқарыда атап өтилген магнитлик жақтан жумсақ материаллардың барлығы да салыстырмалы киши магнитлик қарсылыққа ийе. Бул жағдай қайта магнитлениў процесслеринде паразитлик үлкен Фуко тоқларының пайда болыўына алып келеди. Сонлықтан тез-тезден қайтадан магнитленетуғын буйымлардағы магнитлик жақтан жумсақ болған материалларды жуқа бир биринен изоляцияланған пластинка түринде соғады. Магнитлик жақтан жумсақ ферритлер болса жүдә үлкен салыстырмалы қарсылыққа ийе хэм сонлықтан оларды монолит прессленген деталлар алыў ушын зәрүрли болған магнитлик жақтан жумсақ материаллар сыпатында техникада кеңнен пайдаланады. Олардың ең баслы кемшиликлерин: μ , B_r , B_s шамалары киши, магнитлик жақтан жумсақ метал материалларға салыстырғанда әдеўир морт.

Магнитлик жақтан қатты материаллар үлкен H_c шамасына ийе болыў менен бир қатарда төмендегидей үлкен шамаларға ийе болыў өзгешеликлерине ийе: 1) берилген магниттиң B векторының ағысын анықлайтуғын B_r хэм 2) $(BH)_m$ көбеймесининң максималлығы. Бундай шама H майданында жайласқан бир бирлик көлемге ийе магниттиң максималлық айланбалы моментин жуўық түрде анықлайды. Жоқарыда атлары аталған параметрлердің стабиллиги менен олардың қанаатландырырлықтай бекемлиги менен пластиклигине ийе болыў мақсетке муўапық келеди.

Кең тарқалған магнитлик жақтан қатты материаллар хэм олардың магнитлик қәсийетлери төмендеги кестеде берилген:

Материаллар	H_c , кА/м	B_r , Тл	$(BH)_m$, кДж/м ³
$Fe - Nd - B$	1000-1200	1,2-1,4	600-800
$Sm - Co$	1200-1500	1,0-1,1	400-600
$Fe - Co - Ni - Al$	50-120	1,0-1,2	40-60
$Fe - Cr - Co$	40-70	1,3-1,6	40-60
Ферритлер	30-100	0,3-0,5	10-15

Пайдаланылған әдебиетлар дизими

1. Киттель Ч. Введение в физику твердого тела. - М.: Наука, 1978, 790 с.
2. Каганов М.И. Электроны, фононы, магноны. - М.: Наука.- 1979. - 192 с.
3. Уэрт Ч., Томсон Р. Физика твердого тела. - М.: Мир. - 1966. - 568 с.
4. Нозик Ю.З., Озеров Р.П., Хеннинг К. Нейтронная спектроскопия. М.: Атомиздат, 1979. 344 с.
5. Физические величины. Справочник. Под ред. Григорьева И.С. и Мейлихова Е.З.. - М.: Энергоатомиздат.- 1991.- 1232 с.
6. Прецизионные сплавы. Справочник. Под ред. Молотилова Б.М. . - М.: Металлургия.- 1983.- 440 с.
7. Материаловедение. Под ред. Арзамасова. - М.: Машиностроение.- 1986.- 384 с.
8. Захаров А.И. Физика прецизионных сплавов с особыми тепловыми свойствами. - М.: Металлургия.- 1986.- 240 с.
9. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Курс теоретической физики. Том. 3. Квантовая механика. - М.: Наука.- 1963. - 832 с.
10. Давыдов А.С. Квантовая механика. М.: Физматгиз. 1962. 768 с.
11. Физические величины. Справочник п.ред. Григорьева И.С., Мейлихова Е.З. М.: Энергоатомиздат. 1991. 1232 с.
12. Бозорт Р. Ферромагнетизм. - М.: Изд-во иностранной литературы.- 1956. - 784 с.
13. Вонсовский С.В. Магнетизм. - М.: Наука.- 1971. - 1032 с.
14. Изюмов Ю.А., Найш В.Е. Озеров Р.П. Нейтронография магнетиков. М.: Атомиздат, 1981. 312 с.
15. Кекало И.Б., Самарин Б.А. Физическое металловедение прецизионных сплавов. Сплавы с особыми магнитными свойствами. - М.: Металлургия.- 1989.- 496 с.

Студентлердің лабораториялық жұмыстарды орындауы үшін арналған материаллар

1. Рентген хәм электронлар толқынларының дифракциясының динамикалық теориясының айырым мәселелери

1-§. Кирисиў хәм мәселениң қойылыўы

Қатты денелер физикасы менен физикалық материалтануының раўажланыўында рентгенструктуралық анализ бенен электронлық микроскопияның тутқан орны оғада уллы. 1912-жылы ашылған рентген нурларының кристаллардағы дифракциясы [М. фон Лауэ (M. von Laue), В.Фридрих (W.Friedrich) хәм П.Книппинг (P.Knipping)] бундай объектлердеги атомлар менен молекулалардың белгили ызамалар бойынша тәртіпли жайласқанлығы ҳаққындағы биринши эксперименталлық мағлыўматларды берди (Яғный кристаллық денелер рентген нурлары ушын кристаллық пәнжерениң (решетканың) орнын ийелейди деген сөз.). Рентген нурлары дифракциясының биринши ең әпиўайы теориясы (бул теорияны кинематикалық теория деп атайды) 1913-жылы Лауэ тәрәпинен берилди. Усы жылы У.Л.Брэгг (W.L.Bragg) хәм Г.В.Вульф рентген нурларының дифракциясын кристалдаға бир бирине параллель болған атомлық тегисликлер системасындағы шашыраўы деп интерпретациялады хәм Вульф-Брэгг шәрти деп аталатуғын рентгенографиядағы ең көп қолланылатуғын

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

формуласын келтирип шығарды. Бул аңдатпада d арқалы атомлық тегисликлер арасындағы қашықтық, ϑ арқалы дифракциялық мүйеш хәм λ арқалы рентген нурларының толқын ұзынлығы белгиленген. $n = 1, 2 \dots$ (пүтин санлар). (1)-теңлемени Вульф-Брэгг шәрти деп атайды (Көпшилик жағдайларда Вульф-Брэгг теңлемесинде дифракциялық мүйешти θ хәрипи арқалы белгилейди. Биз бул жумысымызда дифракциялық мүйешти ϑ арқалы белгилеймиз.).

1914-жылы Ч.Дарвин (Ch.Darvin) рентген нурларының дифракциясының динамикалық теориясының тийкарын дәретти. Буннан кейин 1917-жылы П.Эвальд (P.Ewald) орталықтың ноқатлық диполлери менен нурланыў майданы арасындағы бир бири менен келисилген теориясын ислеп шықты (теория самосогласованного взаимодействия точечных диполей среды и поля излучения). 1931-жылы М.Лауэ рентген нурларының дифракциясын нурланыўдың поляризацияланыўшылығы үш өлшемли дәўирли χ, r, ω болған орталықта тарқалыўының электродинамикалық мәселеси сыпатында шешиў менен шуғылланды.

Нәтийжеде XIX әсирдин екнши ярымында раўажланған физикалық кристаллография эксперименталлық тастыйықланыўға ийе болды. Дәрхәл рентген дифрактометриясы, кейинирек рентген топографиясы қәлиплести хәм тез пәтлер менен раўажлана баслады. Илимпазлар кристаллық денелердеги дифракцияға ушыраған нурлардың интенсивлигин үйрениў менен сол денелердин атомлардың қандай нызамлықлар менен жайласқанлығын анықлаў усылларын ислеп шықты. Дәслепки дәўирлерде кристаллық пәнжерениң орайласыўлары (көлемде, қатпалда, базада орайласқан кристаллық қурылыслар, кристалдық пәнжерелер), кейинирек қурамалы органикалық химиялық бирикпелердеги атомлардың элементар қутышалардығы координаталары анықлана баслады. Соңғы 10 жыл ишиндеги ДНК молекулаларының қурылысын анықлаў бойынша орынланған жумыслар бул бағдардағы исленген жумыслардың ең жоқарғы шыңы болып табылады деп есапланады.

Рентген нурларының дифракциясы тийкарында дәретилген барлық усыллардың жыйнағын (рентген пленкасында дифракциялық сүўретлердин алыныўы, рентген топографиясының көп санлы схемалары, рентген дифрактометриясы, параллель дәстелердеги хәм тарқалыўшы дәстелердеги рентген нурларының дифракциясы, кристаллардың электронлық тығызлықтардың изертлениўи, рентген нурларының дифракциясының кинематикалық хәм динамикалық теориялары хәм усыған сәйкес усыллар) биз бир сөз бенен кристаллар рентгенографиясы деп атаймыз.

Квант механикасының раўажланыўы, әсиресе корпускулалық дуализм менен Де Бройль гипотезасы электронлардың кристаллық денелердеги дифракциясын әмелге асырыўға алып келди. Нәтийжеде 1930-жыллардан кейин электрон микроскоплары, кейинирек олардың жаңа модификациялары болған электронлық хәм ионлық проекторлар, растрлық электронлық микроскоплар дәретилди. Нәтийжеде адамзат айырым атомлардың сүўретлерин көриў мүмкиншилигине ийе болды.

Рентгенография хәм электронлық микроскопияның және бир әхмийети хәр қыйлы сыртқы тәсирлердин тәсиринде (механикалық деформация, қыздырыў хәм салқынлатыў, электр хәм магнит майданларының, жақтылықтың, радиоактивли нурлардың) кристалларда болып өтетугын структуралық айланысларды изертлеў менен байланыслы. Усының нәтийжесинде кристаллық денелердин физика-химиялық хәм технологиялық қәсийетлериниң олардың айқын атомлық-кристаллық және субструктуралық қәдидеги қурылысынан ғарезли екенлигин көрсетти. Нәтийжеде берилген атомлық-кристаллық қурылысқа хәм субструктураға, усыған сәйкес физикалық хәм технологиялық қәсийетлерге ийе кристаллық денелер алыў проблемасы қәлиплести. Бул бағдарда Жер жүзиндеги ең раўажланған еллериниң (АҚШ, Англия, Франция, Германия, Россия, Япония хәм басқа да еллер) илимпазларының бирлесип бир бағдардағы тырысыўларының

нәтижесінде (физикалық материалтаныу, қатты денелер физикасы, ярым өткізгіштер физикасы хәм тағы басқалар) үлкен жетіскенліклерге ерисилди. Усының нәтижесінде хәзирги ўақытларда космос техникасында, компьютерлер хәм басқа да электронлық абап-үскенелр соғыўды кеңнен пайдаланып атырған жаңа материаллар дөретилди.

2-§. Дифракцияға ушыраған рентген нурларының интенсивлиги (кинематикалық хәм динамикалық мәселелер)

Кристаллық денелерге толқын узынлығы 0,1-10 ангстрем болған электромагнит толқынлар (рентген толқынлары) ямаса электронлар толқынлары келип түскенде жоқарыда келтирилип өтилген (1)-Вульф-Брэгг шәрти бойынша дифракцияға ушырайды. Дифракцияға ушыраған нурларды (басқа сөз бенен айтқанда дифракциялық максимумлар) кристалдағы атомларда шашыраған нурлар бирдей фазада тарқалатуғын бағытларда пайда болады. Кристалларда фазировканың бундай шәрти бир өлшемли дифракциялық пәнжерередеги үш шәртийн бир ўақытта орынланыўын талап етеди:

$$\begin{aligned} a(\cos \alpha - \cos \alpha_0) &= H\lambda; & b(\cos \beta - \cos \beta_0) &= K\lambda; \\ c(\cos \gamma - \cos \gamma_0) &= L\lambda. \end{aligned} \quad (2)$$

Бул аңлатпадағы a , b хәм c лар кристалдың пәнжересиниң үш көшер бойынша дәўирлери, α_0 , β_0 хәм γ_0 арқалы кристалға келип түскен нурдың, ал α , β хәм γ лер арқалы дифракцияғы ушыраған нурдың кристалдың пәнжересиниң көшерлери арасындағы мүйеш белгиленген. H , K хәм L арқалы атомлық тегисликлердиң кристаллографиялық системаларының индекслерине пропорционал болған пүтин санлар белгиленген. (2)-теңлемелерди Вульф-Брэгг шәрти түринде де жазыў мүмкин. α_0 , β_0 хәм γ_0 мүйешлери анық мәнислерге ийе болғанлықтан, ал α , β хәм γ шамалары бир биринен ғәрезсиз болғанлықтан (2)-система жүдә аз пүтин санлық шешимлерге ийе болады. Басқа сөз бенен айтқанда қозғалмайтуғын кристалларға монохроматик нурлар түскенде дифракциялық максимумлардың саны жүдә аз болады.

Кристалдың шашыратыў қәбилетлиги оның өлшемлеринен хәм қурылысынан ғәрезли болады. Фрагментлериниң өлшемлери $l \leq 10^{-5}$ см болған идеал мозайкалық кристаллар хәм поликристалларда шашыраған нурланыўлар рентген нурларының дифракциясының кинематикалық жақынласыў (кинематическое приближение) жәрдемінде тәриплениди. Бундай шашыраўды үйрениа ислери тийкарынан 1950-жылларға шекем питкен хәм олар хәзирги ўақытлары оғада сийрек ушырасатуғын китапларда толық баян етилген [1-3]. Рентген нурларының дифракциясының кинематикалық теориясында кристалда шашыраған толқынның интенсивлиги кристалға келип түсиўши нурдың интенсивлигинен киши деп есапланады. Бундай жақынласыўдың көпшилик кристаллар ушын дурыс екенлиги бәршеге анық. Классикалық электродинамикаға сәйкес нурдың электр майданы E_0 , жийилиги ω хәм толқын векторы k_0 болған кристалға келип түсиўши толқын атомлардың өзгермели диполлик моментин пайда етеди. Усының нәтижесінде хәр бир атом екинши (шашыраған) сфералық толқынның дерегине айланады. Бундай шашыраған сфералық толқынның амплитудасы атомның шашыратыўшылық қәсийети арқалы, ал фазасы сол атомның кристалдағы ийелеген орны менен анықланады. бир атом тәрәпинен шашыратылған майданның электр майданының кернеўилик векторы

$$E_j = \frac{1}{R} k_s k_s, k_0 \frac{e^2}{m\omega^2} f(s) \exp i(s \cdot r_j) \quad (3)$$

аңлатпасының жәрдемінде анықланады. Бул аңлатпада $f(s)$ арқалы атомлық фактор (бул фактор өз ишине кристалдың температурасына байланыслы болған Дебай-Уоллер

факторын да алады деп есапланған), $\mathbf{r}_j = m\mathbf{a} + n\mathbf{b} + p\mathbf{c}$ арқалы j – атомның радиус-векторы, m , n және p арқалы пүтин санлар, $\mathbf{s} = \mathbf{k}_s - \mathbf{k}_0$ арқалы шашырау векторы белгиленген. $s = \frac{4\pi \cos \vartheta}{\lambda}$, 2ϑ арқалы $\mathbf{k}_0$ және $\mathbf{k}_s$ векторлар арасындағы мүйеш, R арқалы шашырау нокатынан бақлау нокатына шекемги аралық белгиленген. ϑ мүйешин шашырау мүйеши ямаса Брэгг мүйеши деп атайды. Қос векторлық көбейме поляризациялық ғәрезлилик $\mathbf{E}_j \mathbf{s}$ ти анықлайды. Шашырағын толқынның толық амплитудасы $\mathbf{E} \mathbf{s}$ кристалдағы барлық N дана атомдағы шашыраған толқынлардың амплитудаларының қосындысына тең: $\mathbf{E} \mathbf{s} = \sum_{j=1}^N \mathbf{E}_j \mathbf{s}$.

Бир бирлік денелик мүйеш ишиндеги шашыраған толқынлардың салыстырмалы интенсивлиги

$$\frac{I_s}{I_0} = \left(\sum_{j=1}^N \mathbf{E}_j \mathbf{s} \right)^2 R^2 d\Omega = \sigma_e P(\vartheta) f s^2 \exp i(\mathbf{s}, \mathbf{r}_j - \mathbf{r}_k) \quad (4)$$

аңлатпасы жәрдемінде есапланылады. Бул аңлатпада I_0 арқалы кристалға келип түскен рентген нурының интенсивлиги, $\sigma_e = \frac{e^2}{mc^2}$ арқалы электрон тәрәпинен шашырау кесе-кесими (m арқалы электронның массасы, e арқалы заряды, c арқалы жақтылықтың тезлиги белгиленген), ал $P(\vartheta)$ арқалы поляризациялық еөбейтиуши аңлатылған. Поляризацияланған нурланыу үшін $P \vartheta = 1 + \cos^2 2\vartheta / 2$. $\sigma_e P(\vartheta) f s^2$ көбейтиушиси атом тәрәпинен шашырау кесе-кесимине тең. (4)-аңлатпадағы экспоненталар j - және k -атомларда шашыраған толқынлар арасындағы фазалардың жылжыуын есапқа алады. Элементар қутышасында бир неше атомлар бар кристаллар үшін (4)-аңлатпадағы $f s$ ти страутуралық фактор $F s$ пенен алмастыру керек. Бундай жағдайда $\mathbf{r}_j$ шамасы j – элементар қутышаның радиус-векторы болып табылады. Идеал кристаллар үшін (4)-аңлатпадағы суммалар геометриялық прогрессиялар болып табылады. Егер кристалл параллелепипед формасына ийе болса, онда $N = N_a N_b N_c$ элементар қутышаға ийе болады (демек a көшери бағытында N_a элементар қутыша болады деген сөз). Бундай жағдайда (4)-аңлатпадағы суммалау Лауэ интерференциялық функцияларына алып келеди:

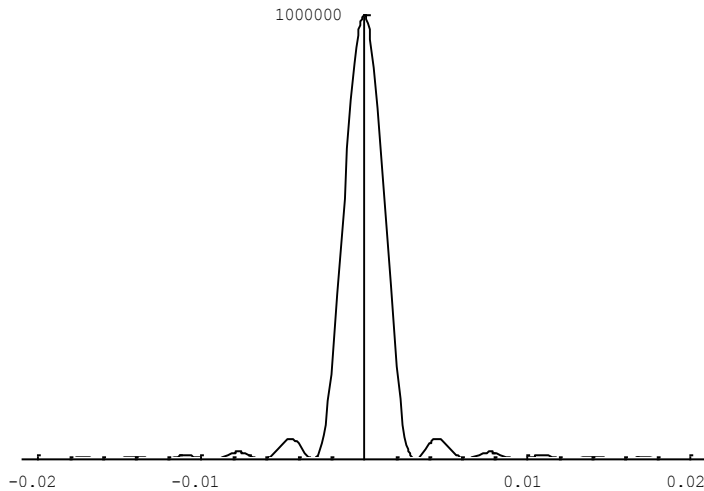
$$\frac{\sin^2 N_a \frac{sa}{2}}{\sin^2 \frac{sa}{2}} \cdot \frac{\sin^2 N_b \frac{sb}{2}}{\sin^2 \frac{sb}{2}} \cdot \frac{\sin^2 N_c \frac{sc}{2}}{\sin^2 \frac{sc}{2}} \quad (5)$$

Бул функцияның максималлық мәніси (дифракциялық максимумы) s, a, b, c лардың (2)-Лауэ шәртлерине эквивалент болған мәніслерінде: $sa = 2\pi H$, $sb = 2\pi K$ және $sc = 2\pi L$ болғанда $N_a N_b N_c$ шамасына, яғный кристалдың көлеми V^2 қа тең. Бұл шәртлер $\mathbf{s}$ шашырау векторының мәнісинің кери пәнжере векторы $\mathbf{g}$ ға тең екенлигин билдиреди, яғный $\mathbf{k}_g = \mathbf{k}_0 + \mathbf{g}$. Түсіу тегислигиндеги дифракциялық максимумның мүйешлик кеңлиги $\frac{2\pi}{N_g}$ ға тең. Бул жерде N_g арқалы $\mathbf{g}$ векторының бағытындағы кристалдың дәуірлеринің саны. Мысалы $N_g \sim 10^4$ болса, онда максимумның мүйешлик кеңлиги $\sim 10^{-4}$ радианға тең болады. Кристалдың көлеми үлкейгенде бас дифракциялық максимумның интенсивлиги $\sim V^2$ шамасына тууры пропорционал өседі, ал олардың кеңлиги $\sim V^{-\frac{2}{3}}$ шамасына пропорционал өзгереді (1-сүүрет).

Кристалдың мүйешлер бойынша интеграллық шашыратыушылық қәбилетлиги оннан өтиуши нурлары үшін кристалдың көлеми V ға пропорционал, яғный салыстырмалы интеграллық интенсивлиги

$$I_i^g = Q g V \quad (6)$$

шамасына тең. Бул аңлатпадағы $Q g = K \sigma_e P \vartheta L \vartheta F g^2 \lambda^3 / V_{el}^2$ шамасы кристалдың салыстырмалы шашыратыушылық қәлибетлиги деп аталады, λ арқалы нурланыудың толқын ұзындығы, V_{el} арқалы элементар кутышаның көлеми белгиленген. K константасының мәніси интеграллық фактор $L \vartheta$ дифракцияның схемасы тийкарында анықланады. Мозайикалық кристаллардағы рентген нурларының дифракциясында екилеменши (вторичная) экстинкция кубылысы орын алады.



1-а сүүрет.

$\frac{\sin^2 N_a \frac{sa}{2}}{\sin^2 \frac{sa}{2}}$ функциясының графиги.

Әпиұайылық ушын $\frac{[\sin(kx)]^2}{[\sin(x)]^2}$ функциясы алынып, $k = 1000$, x тың шамасы $-0,02$ ден $+0,02$ ге шекем өзгертилген. Mathematica 5 тилинде график дүзилген.

Дәуірлик қурылысында бузықлықларға ийе, сондай-ақ аморф денелерде, шийшелерде хәм суйықлықларда Рентген нурларының кинематикалық дифракциясында интенсивликти атомлардың кеңисликтеги мүмкин болған барлық конфигурациялары бойынша (4)-аңлатпа бойынша орташалап табады. Ал атомлардың кеңисликтеги мүмкин болған барлық конфигурациялары ωr_{jk} корреляция функциясы арқалы

$$\begin{aligned} & \frac{I_s}{I_0 \sigma_e P \vartheta f s^2} = \\ & = N + N(N-1) \exp i \mathbf{s}, \mathbf{r}_j - \mathbf{r}_k \frac{dv_j}{V} \frac{dv_k}{V} - \\ & \quad \omega r_{jk} \exp[i \mathbf{s}, \mathbf{r}_j - \mathbf{r}_k] \frac{dv_j}{V} \frac{dv_k}{V} \end{aligned} \quad (7)$$

аңлатпасы түринден есапланады. N ге пропорционал ағза N атомнан туратуғын тәрпитке салынбаған жыйнақтан нурланыудың шашырауын тәриплейди. Екинши ағза – кристалдың формасының фурье-образының модулинің квадраты Фраунгофер дифракциясына сәйкес келеди (Фраунгофер дифракциясы – параллель нурлардың дифракциясы.).

Поликристаллық объектлер ушын ωr_{jk} функциясы әдетте изотроп болып, сонлықтан дифракцияға ушыраған нурдың интенсивлиги объектке келип түсийұши нурға салыстырғанда аксиаллық симметрияға ийе. Дифракциялық максимумлар сақыйналар түрине ийе болады, олардың интенсивлиги ϑ мүйешиниң үлкейиуі менен $f[\sin \frac{\vartheta}{\lambda}]^2$ шамасына пропорционал тез кемейеди.

Рентген нурларының дифракциясының кинематикалық жақынласыуы төменде келтирилген (9)-теңлемениң шешиминиң Борнлық жақынласыуы болып табылады.

Кристалдың нурланыу менен тәсірлесіуінің дискрет (атомлық фактор $f(g)$ тийкарындағы) хәм континуаллық (поляризация $\chi(r, \omega)$ тийкарындағы) тәріпленіуі $\chi_g = -4\pi \frac{e^2}{m\omega^2} \frac{1}{v_{el}} F(g)$ аңлатпасы менен көрсетиледи. Бул аңлатпадағы χ_g шамасы $\chi(r, \omega)$ функциясын кери пәнжере векторы g бойынша қатарға жайғандағы фурье-кураушы (фурье-компонента). Бул қатнасты қолланып (6)-интеграллық шашыратыушылық қабилетликти мына түрде көрсетиуге болады:

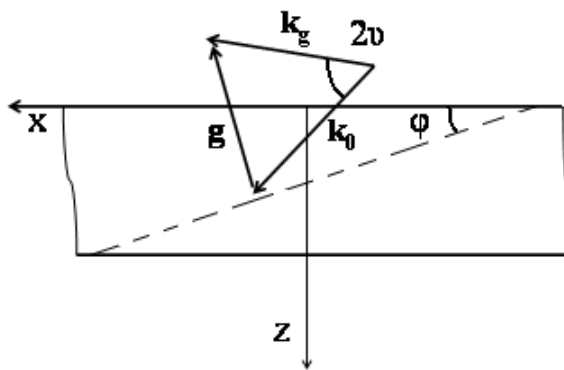
$$\frac{I_g}{I_0} = \pi^2 \frac{1 + \cos^2 2\vartheta}{2 \sin 2\vartheta} \chi_g^2 \frac{V}{\lambda}. \quad (8)$$

Егер идеал кристалдың сызықлы өлшемлери $l > 10^{-5}$ см болса, онда кинематикалық жақынласыуды қолланыуға болмайды. Рентген нурларының дифракциясы бундай жағдайларда динамикалық теория жәрдеминде тәріпленеди. Бул теория бойынша идеал кристалдың салыстырмалы хәм интеграл шашыратыушылық қабилетлиги хәм оның көлеміндеги майданның қурылысы рентген нурларының дифракциясының кинематикалық теориясынан пүткиллей басқаша түрге ийе болады.

Рентген нурларының дифракциясының динамикалық теориясы дифракцияға ушыраған нурдың кристалға келип түсіуші нурға кери тәсірин есапқа алған халда толқын теңлемесин электр ауысыуы $D(r, \omega)$ векторы ушын толығырақ шешиуге тийкарланған [4-5].

$$\Delta D + k^2 D \approx -\text{rot rot } \chi D. \quad (9)$$

Бул аңлатпаның оң тәрепи кристалда сыртқы тәсірде (рентген нурларының келип түсіуінің тәсірінде) қоздырылған екінши майдан болып табылады (Биз орыс терминологиясында қәлиплескен «вторичное поле» сөзин «екінши майдан» деп аударамыз.). (9) ды шешиудің тийкаргы усылы Фурье усылы болып табылады. Бул усыл «дисперсиялық бет» түсинигине алып келеди [1, 3]. (9) ды шешиу ушын әстелик пенен өзгериуші амплитудалар усылы да қолланылады («Метод медленно меняющихся амплитуд» нәзерде тутылмақта.).



1-б сүүрет.

Кристаллық пластинкадағы еки нурлы дифракция. 2ϑ арқалы кристалдан өтиуші k_g хәм кристалға тууры келип түсіуші вектор k_0 арасындағы мүйеш, φ арқалы x хәм шашыратыушы атомлық тегислик (пунктир менен көрсетилген) арасындағы мүйеш белгиленген. g болса дифракция векторы (кери пәнжере векторы).

Рентген нурларының дифракциясының динамикалық теориясының өзине тән өзгешеликлери еки толқын есапқа алынатугын әпиуайы жағдайда айқын көринеди. Бул еки толқынның бириншиси тууры өткен толқын (0), ал екіншиси дифракцияға ушыраған толқын (g) болып табылады. Ең әхмийетли жағдайлардың бири кристаллық пластинкадағы тегис толқынның дифракциясы болып табылады (1-б сүүрет).

(9)-теңлемениң шешими кристалларда шашыраған толқынлар (Брэг шашырауы, Бул жағдайда дифракциялық сүүрет рентген нурларының дереги менен кристалдың аралығына қойылған фото пленкада алынады.) ушын бир түрли, ал кристалл арқалы өткен дифракцияға ушыраған толқынлар (Лауэ өтиуі) ушын пүткиллей басқа түрге ийе болады

(Бул жағдайда кристалл дифракциялық сұұрет алынатуғын фотопенка менен рентген нурларының дереги арасына қойылады.). Биз бул жағдайларды қарап қарап шығыу менен шуғылланбаймыз.

Брэг шашырауы менен Лауэ өткеріуі монокроматик хэм тегис параллель рентген нурларын алыу ушын кеңнен қолланылады.

Гамма нурларының нейтронлардың хэм электронлардың дифракциясы өзлерине тән өзгешеликлерге ийе болады. Бул өзгешеликлер тәсирлесіу шамасы хэм толқын ұзындықтары менен байланысly. Динамикалық дифракция оптикалық диапазонда да холиристикалық хэм коллоидлық суйық кристалларды изертлеу процессинде бақланады. Ендиги параграфта биз электронлардың дифракциясын қарап өтеміз.

3-§. Дифракцияға ушыраған электронлардың интенсивлиги

Электронлардың дифракциясы деп әдетте олардың кристаллардағы ямаса суйықлықлар менен газлердің молекулаларындағы серпимли шашырауының келип түскен дәстеден базы бир мүйешке бурылған басқа дәстениң пайда болыуына айтады. Бул дәстениң келип түскен дәстеге салыстырғандағы бағыты, интенсивлиги шашыратыушы объекттің қурылысынан ғәрезли. 1927-жыды К.Дэвиссон (C.Davisson) хэм Л.Джермер (L.Garmer) тәрепинен ашылған электронлардың дифракциясы Л. де Бройлдің (L. de Broglie) бөлекшелердің толқынлық қәсийетлери хәққындағы гипотезасын толық дәлилледі.

Биз дәслепп электронлар толқынларының ұзындығын есаплау менен шуғылланамыз хэм усы жерде белгили болған илимий әдебиятта усындай есаплаулар жүргизгенде методикалық жақтан үлкен қәтеликлерге жол қойылып атырғанлығын атап өтеміз. Дерлик барлық әдебиятларда (мысалы электролық микроскопия бойынша көпшиликке белгили П.Хирштың, А.Ховидиң хэм басқалардың «Электронная микроскопия тонких кристаллов» китабы [6], Физикалық энциклопедияның 1-томындағы «Дифракция электронов» атлы мақала [7]) массаның тезликке байланысly деп есаппа аты шыққан (шауқымы жер жарған) $m = m_0 / \sqrt{1 - v^2/c^2}$ формуласынан пайдаланады. Бул формуланы тек есаплауларды жеңиллестіриу ушын ғана пайдаланыу мүмкин. Ал хәқыйқатында масса релятивистлик инвариант болып, оның мәніси тезликтен ғәрезли емес [8]. Де Бройлдың формуласы

$$\lambda = \frac{h}{p}. \quad (10)$$

Бул аңлатпада $h = 6,6260755 \cdot 10^{-27}$ эрг·с, ал импульс $p = \frac{mv}{\sqrt{1 - v^2/c^2}}$ формуласы жәрдемінде есапланылады. Демек тезликтің қәлеген мәніси ушын (10)-аңлатпаны былайынша жазыуымыз керек:

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{mv} \sqrt{1 - v^2/c^2} \quad (11)$$

түрінде жазыуымыз керек.

Катод пенен анод арасында электрон электр майданының тәсирінде $E = eU$ энергиясына ийе болады. Бул аңлатпада U арқалы анод пенен катод арасындағы кернеу (анодлық кернеу), ал e арқалы электронның заряды белгиленген. E энергиясы ушын $E = \frac{mc^2}{\sqrt{1 - v^2/c^2}}$ формуласы орын алады [8]. Бул массасы m хэм тезлиги v болған электронның толық энергиясы болып табылады. Бизге кинетикалық энергия E_{kin} керек, ал $E_{kin} = \frac{mc^2}{\sqrt{1 - v^2/c^2}} -$

$mc^2 = eU$ шамасына тең (кинетикалық энергия = толық энергия – тынышлықтағы энергия). Буннан

$$v = c \sqrt{1 - \frac{m^2 c^2}{(eU + mc^2)^2}} \quad (11)$$

аңлатпасын аламыз. (11)-аңлатпадағы тезликтің мәнісін (11)-аңлатпаға қойыуымыз керек. Бундай жағдайда бір қанша эпийұйластырыулардан кейін мынадай аңлатпаларға ийе боламыз:

$$\lambda = \frac{h}{mc \sqrt{1 - \frac{m^2 c^2}{(eU + mc^2)^2}}} = \frac{hmc^2}{mc \sqrt{e^2 U^2 + 2eUmc^2}} \quad (12)$$

Егер электронның массасының, зарядының, Планк тұрақтысының, жақтылықтың вакуумдегі тезлигинің СГС системасындағы мәнісін, сондай-ақ $1 \text{ см} = 10^{-8} \text{ ангстрем}$ екенлігін (12)-формулаға қоятуғын болсақ, онда

$$\frac{1.98645 \cdot 10^{-8}}{2.62344 \cdot 10^{-18} U + 2.56697 \cdot 10^{-24} U^2}} \text{ ангстрем} \quad (13)$$

формуласына ийе боламыз. Бул формула бойынша U дың мәнісін вольттерде берилиуі керек, ал нәтиже (көриніп тұрғанындай) ангстремлерде алынады.

Егер биз (12)- хәм (13)-формулаларға $U = 100000$ вольт мәнісін қойсақ, онда $\lambda = 0.0370444 \text{ Å}$ толқын ұзынлығын аламыз. Бул арнаулы кестелерде берілген толқын ұзынлығының мәнісіне дәл сәйкес келеді.

Егер биз Интернационаллық бірліклер системасынан (СИ) пайдаланатуғын болсақ, онда $m_e = 9.10938188 \cdot 10^{-31} \text{ г}$; $c = 2.99792458 \cdot 10^8 \text{ см/с}$; $e = 1.602176462 \cdot 10^{-19} \text{ Кл}$; $h = 6.62606876 \cdot 10^{-34} \text{ Дж·с}$ [9] хәм (13) тиң орнына

$$\frac{1.98645 \cdot 10^{-15}}{2.62344 \cdot 10^{-32} U + 2.56697 \cdot 10^{-38} U^2}} \text{ ангстрем} \quad (14)$$

аңлатпасын аламыз. Бул аңлатпалардың барлығы да дәл аңлатпалар болып табылады хәм үтирден кейінгі 7-белгиге шекем дурыс нәтиже береді. Биз электрон микроскоптарында көп қолланылатуғын кернеулер үшін ангстремлердегі электронлар толқынларының ұзындықтарын береміз:

Анодлық кернеу, вольттерде	Электронлардың толқын ұзындығы, Å.
50 000	0,0535531
75 000	0,0432248
100 000	0,0370144
125 000	0,0327439
150 000	0,0295704

Солай етип биз дурыс физикалық талқылаулар тийкарында электрон микроскопындағы электронлар толқынларының ұзындығын дәл мәнісін есаплайтуғын формулаларды келтиріп шығардық.

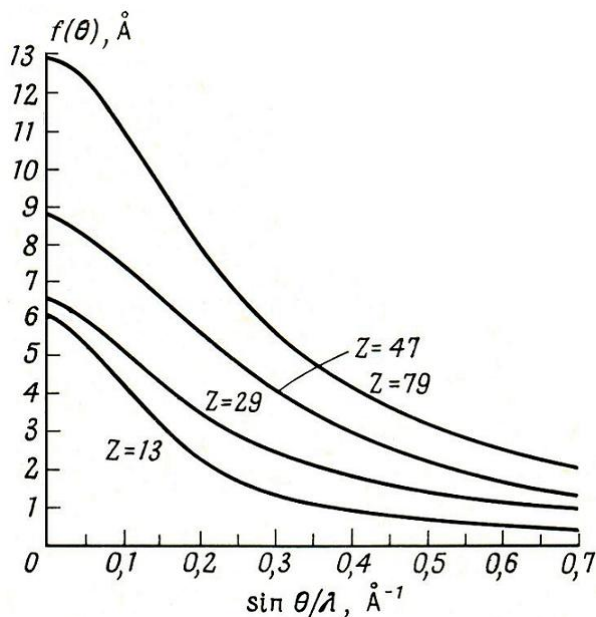
Енді электронлар дифракциясының теориясы менен шуғылланамыз.

Электронлардың кристаллық денелердегі дифракциясының теориясы рентген нурларының дифракциясы теориясына сәйкес дөретилді. Бирақ бул еки кубылыстың тәбиятлары пүткіллей басқаша. Рентген нурлары атомлардың электронлық тығызлықтарында шашырайды. Ал зарядлары бар болғанлықтан электронлар оң зарядларға ийе атом ядролары хәм атомлардағы электронлар пайда еткен электростатикалық майдан менен тәсірлеседі. Солай етип атомның шашыратушылық қасиетилери атомлардың қурылысына байланысly хәм сонлықтан хәр қыйлы химиялық

элементлердің электронларды шашыратыушылық қасиеттері хәр қыйлы. Санлық жақтан атомның электронларды шашыратыушылық қасиеті $f_e(\theta)$ атомлардың номері Z тен ғәрезли болып мына аңлатпаның жәрдеминде бериледи:

$$f_e \theta = \frac{me^2}{2h^2} \frac{\lambda^2}{\sin \theta} (Z - f_p) \quad (14)$$

Бул аңлатпадағы $\frac{me^2}{2h^2} = 2,38 \cdot 10^6 \text{ см}^{-1}$, f_p аркалы рентген нурлары ушын атомлық амплитуда белгиленген. θ ның мәнисиниң өсиуі менен f_e ниң мәниси тез кемейеди. $f_e \sim (\sin \theta)^{-2}$ (бул жағдай 2-сүүретте келтирилген). Шашыраудың атомлық амплитудасы шашыраған нурдың интенсивлигин характерлейди, ал бул интенсивликтің мәниси f_e^2 қа тууры пропорционал.



2-сүүрет.

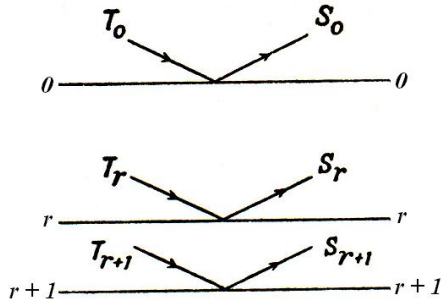
Электронлардың шашырауының $f_e \theta$ атомлық амплитудалары [6]:

Al ($Z = 13$), Cu ($Z = 29$), Ag ($Z = 47$)
хәм Au ($Z = 79$) ушын берилген.

Электронлар атомлар менен рентген нурларына салыстырғанда миллионлаған есе күшлерек тәсирлеседи. Усыған байланысly электронлардың шашырау амплитудасы рентген нурларының шашырау амплитудасынан мыңлаған есе, ал электронлардың шашыраған дәстесиниң интенсивлиги рентген нурларының интенсивлигинен 1000 000 - 10 000 000 (миллион – он миллион) есе үлкен. Электронлар атомлар менен күшли тәсирлесетуғын болғанлықтан экспериментлерди жоқары вакуумде өткереди, ал изертленетуғын объектлерден өтиуши электронлар дәстеси пайдаланылатуғын жағдайда (просвечивающая электронная микроскопия жағдайдарында) изертленетуғын объектлер сыпатында қалыңлығы шама менен 10 – 50 нм (100 – 500 Å) фольгалар (пластинкалар) қолланылады. Жуқа кристаллық объектлер алыу проблемесынан қутылыу ушын изертлеушилер гейпара жағдайда объектлердің бетинен шашыраған электрон нурларын да пайдаланады. Бирақ бундай жағдайдарда алынған дифракциялық сүүрет изертленилип атырған денениң қалыңлығы 1 - 10 нм болған бетинен ғана информацияларды ала алады (себеби 1 – 10 нм ден артығырақ тереңликте жайласқан областлардан дифракцияға ушыраған электронлар толқынлары сезилерликтей интенсивликте бақланбайды).

4-§. Рентген нурларының шашырауының Дарвин бойынша теориясы

1914-жылы Ч.Дарвин (Ch.Darvin) шашыратыушы кристаллографиялық тегисликлери кристаллық үлгиниң (образецтин) бетине параллель болған идеал кристаллардағы рентген нурларының шашырауын изертледи [10]. Усындай схемада бақланатуғын рентген нурларының дифракциясын Брэгг дифракциясы (Брэгг бойынша дифракция) деп атаймыз (1-параграфты қараңыз).



3-сүрөт.

ху тегислиги менен шекленген,
кеңисликтин ярымын толтырып туратуғын
идеал кристалдың рентген нурларын
шашыратыуы.

ху тегислиги менен шекленген, кеңисликтин ярымын толтырып туратуғын идеал кристалдың рентген нурларын шашыратыуын қараймыз (3-сүрөт). Сүрөттеги туўры сызықлар шашыратыушы тегисликтердин излери́не сәйкес келеди. Бул тегисликтер 0, 1, 2, ..., r санлары жәрдеминде номерленген. Мейли кристалға алмплитудасы T_0 болған тегис толқын ϑ мүйеши менен келип түсетуғын болсын. Базы бир r тегислигине түсиўши толқынның амплитудасының усы тегисликтин тиккелей үстиндеги мәнисин T_r арқалы белгилеймиз. Усыған сәйкес шашыраған толқынлардың амплитудаларын S_0 , S_r арқалы белгилеймиз

Бир атомлық тегислик тәрәпинен шашыраў бағытындағы шашыратылған толқынның амплитудасының түсиўши толқынның амплитудасына қатнасы $\frac{A_p}{A_0} = -iq$ шамасына тең екенлиги белгили. Бул жерде

$$q = -\frac{Nd\lambda}{\sin \vartheta} F \ 2\vartheta \ \frac{e^2}{mc^2}. \quad (15)$$

Сол тегислик тәрәпинен өткен нур бағытындағы толқын ушын $\frac{A_p}{A_0}$ қатнасының мәнисиниң $-iq_0$ екенлиги анық. Бул жерде

$$q_0 = -\frac{Nd\lambda}{\sin \vartheta} F \ 0 \ \frac{e^2}{mc^2}. \quad (15)$$

Бундай жағдайда r-номерли тегислик арқалы өткен толқынның амплитудасын $T_r(1 - iq_0 - \delta)$ түринде жаза аламыз. Бул аңлатпада δ арқалы жутылыўдың салдарынан тегисликтен өтип атырған нурдың амплитудасының жоғалыуының үлеси.

r тегислигинде шашыраған толқынның амплитудасын $-iqT_r$ түринде жазыў мүмкин. Бундай жағдайда толқын атомлық тегисликтер арқалы өткендеги фазаның өзгерисин ϕ арқалы белгилеп T_{r-1} , T_{r+1} , S_r хәм S_{r+1} лерди байланыстыратуғын теңлемелерди жазыўға болады. Хәқыйқатында да T_{r+1} шамасы r тегислиги арқалы өтиўши T_r толқынынан, r менен r + 1 тегисликтери арасындағы жолдан, r тегислиги арқалы кери бағытта шашыраған S_{r+1} толқынынан қосылады. Бул толқын фазалар айырмасы 2ϕ шамасына өзгеретуғын қос жолды өтеди. Бундай жағдайда

$$T_{r+1} = T_r (1 - iq_0 - \delta) e^{-i\phi} - iqS_{r+1}e^{-2i\phi}. \quad (16)$$

T_r менен S_r лер ушын мынаны жазыўға болады:

$$T_r = T_{r-1} (1 - iq_0 - \delta) e^{-i\phi} - iqS_re^{-2i\phi}, \quad (17)$$

$$S_r = -iqT_r + S_{r+1} (1 - iq_0 - \delta) e^{-i\phi}. \quad (18)$$

Енди

$$e^{-i\phi} = b, \quad 1 - iq_0 - \delta = a \quad (19)$$

белгилеўлерин киргиземиз. Бундай жағдайда (16)-(18) теңлемелер системасын мына түрде көширип жазамыз:

$$T_{r+1} = T_r ab - iqS_{r+1}b^2, \quad (20)$$

$$T_r = T_{r-1} ab - iqS_rb^2, \quad (21)$$

$$S_r = -iqT_r + S_{r+1} ab. \quad (22)$$

(20)-(22) теңлемелер системасынан S_r менен S_{r+1} шамаларын жоқ етемиз. Буның ушын үшінши теңлемени $b^2 - iq$ ға, ал екіншисин $-ab$ ға көбейтемиз хәм буннан кейин

оларды бір бирине қосамыз. Нәтижесінде T_r үшін мына түрдегі рекуррент теңлемесін аламыз:

$$T_{r+1} - T_{r-1} ab = T_r (1 + a^2 b^2 + b^2 q^2). \quad (23)$$

T_r шамасы r диң өсіуі менен әсте-ақырын кемейеді. Сондықтан шешімді $T_{r+1} = xT_r$ түрінде ізлейміз. Бұл аңдатпадағы $x < 1$. x аркалы аңлатылған T_{r+1} менен T_{r-1} шамаларын (23)-аңдатпаға қойып

$$x^2 - \frac{1 + a^2 b^2 + b^2 q^2}{ab} x + 1 = 0 \quad (24)$$

теңлемесін аламыз. Бұндай теңлемесінің түбірлерінің (коренлерінің) $x_1 x_2 = 1$ қанаатландыратуғынлығын билеміз. демек теңлемесінің түбірлерінің бири 1 ден үлкен, ал екіншиси 1 ден киши. Түбірлердің 1 ден киши болғаны ғана физикалық мәніске ийе болады.

(20)- хәм (21)-аңдатпаларға $T_{r-1} = \frac{T_r}{x}$ хәм $T_{r+1} = xT_r$ шамаларын қойып $S_{r+1} = xS_r$ екенлігін дәрхәл билиүге болады. Бұндай жағдайда (22)-теңлемеден мынаны аламыз:

$$\frac{S_r}{T_r} = \frac{-iq}{1 - abx} = \frac{S_0}{T_0}. \quad (25)$$

x тың мәнісін (24)-аңдатпадан, ал a менен b ның мәніслерін (19)-аңдатпадан алып $\frac{S_0}{T_0}$ диң шамасын есаплаймыз. Усының менен мәселе шешилди деп есаплауға болады. Бірақ бұннан кейінги есаплаулардың қолайлы болыуы үшін биз базы бир әпиұайыластырыулар менен шуғылланамыз.

Бир тегисликтен екінши тегисликке өткенде орын алатуғын фазалар айырмасы $\frac{2d}{\lambda} d \sin \vartheta = m\pi + v$ шамасына тең. Бұл аңдатпадағы v киши шама, себеби ϑ мүйешінің мәніси Брэггтің шашырау мүйешінен аз шамаға айралады. Рентген нурлары жутылмайды деп есаплаймыз, яғный $\delta = 0$. x тың орнына $x = (1 - \xi)e^{i\pi}$ теңлігі орынланатұғындай етип жаңа ξ өзгеріушісін киргиземіз (бұл өзгеріушінің комплекс шама болыуы мүмкін). ξ, q, q_0 хәм v сыяқлы квадратлары киши болған шамаларды сақлап қаламыз. Бұндай жағдайда (24)-аңдатпа мына түске енеди:

$$\xi^2 = q^2 - (q_0 + v)^2 \quad (26)$$

Бөліміндегі киши ағзалардың квадратларын есапқа алмай (25)-теңлемеден

$$\frac{S_0}{T_0} = \frac{-q}{q_0 + v \pm \sqrt{(q_0 + v)^2 - q^2}}$$

аңдатпасын аламыз. $q_0 + v = \varepsilon$ деп белгилесек, онда

$$\frac{S_0}{T_0} = \frac{-q}{\varepsilon \pm \sqrt{\varepsilon^2 - q^2}} \quad (27)$$

теңлемесіне ийе боламыз.

(27)-теңлеме ε ниң киши болған $-q < \varepsilon < +q$ мәніслерінде $\frac{S_0}{T_0}$ қатнасының бирге тең екенлігін, яғный толық шағылысыудың орын алатуғынлығын көрсетеді. Хәқыйқатында да (27)-формуланың бөліми комплексли шама хәм өзіннің түйінлесіне көбейтилсе q ға айланады. ε ниң бұл интервалдың еки тәрәпинен де үлкейіуі менен шашырау амплитудасы хәм оған сәйкес шашырау интенсивлігі тез кемейеді. Егер $\varepsilon > +q$ болса, онда (27)-формулада плюс белгисін, ал $\varepsilon < -q$ да минус белгисін пайдаланыу керек.

Биз белгілеулерде бир қанша анықлықтар киргиземіз. q аркалы биз шексіз үлкен атомлық тегислик тәрәпинен усы тегисликке келип түсетуғын толқынның амплитудасы бирге тең, бұл толқындағы $\mathbf{E}$ векторы толқынның түсіу тегислігіне перпендикуляр болған жағдайдағы шашыраған толқынның амплитудасы. Егер (1)-теңлемедегі (Вульф-Брэгг теңлемесі) дифракциялық мүйешті ϑ_0 аркалы белгилесек, онда $\vartheta = \vartheta_0 + \varepsilon$ болып, қосымша жазылған киши мүйеш ε қосымша фазалар айырмасының пайда болыуына алып келеді. Басқа сөз бенен айтқанда

$$\frac{4\pi}{\lambda} d \sin \vartheta_0 + \varepsilon - \sin \vartheta_0 = \frac{4\pi d \varepsilon}{\lambda} \cos \vartheta_0 = \delta.$$

Кристалға келип түсіуіші толқынның амплитудасын 1 (бир) ге тең деп есапласақ, онда бир бирине параллель, ал ара қашықтығы d болған N дана тегіслік тәрәпинен шашыратылған толқынның амплитудасы

$$A = q \left(1 + e^{-i\delta} + e^{-2i\delta} + \dots + e^{-(N-1)i\delta} \right) = q \frac{1 - e^{-Ni\delta}}{1 - e^{-i\delta}}$$

формуласы менен анықланатуғынлығын көреміз. Ал амплитуданың квадраты болса

$$A^2 = q^2 \frac{\sin^2 N \frac{2\pi d \varepsilon}{\lambda} \cos \vartheta_0}{\sin^2 \frac{2\pi d \varepsilon}{\lambda} \cos \vartheta_0} \quad (28)$$

формуласының жәрдеминде есапланады (бул функцияға ұқсас функцияның графиги 1-сүўретте келтирилген).

Егер усындай пластинка ушын интеграллық шашырау коэффициенті болған ρ шамасын есаплайтуғын болсақ, онда

$$\rho = \frac{E\omega}{I_0} = \frac{n^2 \lambda^2}{\sin 2\vartheta} F^2 \frac{e^2}{mc^2} \frac{1 + \cos^2 2\vartheta}{2} U \quad (29)$$

аңлатпасын аламыз. Бул аңлатпада n арқалы кристалдың көлем бирлигиндеги элементар қутышалар саны, F арқалы структуралық фактор, ал U арқалы кристалдың толық көлеми белгиленген.

(29)-аңлатпа идеал-мозайкалық кристаллар ушын кинематикалық теория тийкарында келтирилип шығарылған аңлатпа болып табылады. Бун аңлатпа төменде динамикалық теория тийкарында алынған аңлатпа менен салыстыруу ушын керек болады [(30)-формула].

Биз енди есаплауларымызды дауам ете аламыз.

Рентген нурларының кристалдың шегарасындағы сыныуын есапқа алмасақ хәм ϑ диң мәніси ϑ_0 ге тең болатуғын болса, онда онда анықлама бойынша ϑ нолге тең

$$\frac{2\pi}{\lambda} d \sin \vartheta = m\pi + \vartheta \text{ шәртинен}$$

$$\vartheta = \frac{2\pi}{\lambda} d \cos \vartheta (\vartheta - \vartheta_0)$$

екенлиги көринип тур. Егер биз ϑ ның киши екенлигин есапқа алсақ, онда $\cos \vartheta$ ди шама менен $\cos \vartheta_0$ шамасына тең деп алыуға болады. Буннан

$$\vartheta - \vartheta_0 = \frac{\lambda}{2\pi d \cos \vartheta} \vartheta = \frac{\lambda}{2\pi d \cos \vartheta_0} \vartheta$$

аңлатпасын аламыз.

Интегралдың шағылысуу ρ шағылысуу иймеклиги астындағы майданға тең:

$$\rho = \int_{-\infty}^{+\infty} \mathcal{R} \vartheta d\vartheta = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{S_0^2}{T_0} d\vartheta = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{S_0^2}{T_0} d\varepsilon \frac{d\vartheta}{d\varepsilon}.$$

$\vartheta - \vartheta_1 = \Delta\vartheta = \frac{\lambda\varepsilon}{2\pi d \cos \vartheta_0}$ формуласынан $\frac{d\vartheta}{d\varepsilon} = \frac{\lambda}{2\pi d \cos \vartheta_0}$ екенлигине ийе боламыз. Интеграл

үш областқа бөлинеди:

бириншиси $\varepsilon < -q$;

екіншиси $-q < \varepsilon < +q$;

үшіншиси $\varepsilon > +q$.

Бундай жағдайда

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{S_0^2}{T_0} d\varepsilon = 2q + 2 \int_q^\infty \frac{q^2}{\varepsilon^2 - q^2} d\varepsilon \text{ хәм}$$

$$\int_q^{\infty} \frac{q^2}{\varepsilon + \frac{q^2}{\varepsilon^2 - q^2}} d\varepsilon = \frac{1}{q^2} \int_q^{\infty} (2\varepsilon^2 - 2\varepsilon \frac{q^2}{\varepsilon^2 - q^2} - q^2) d\varepsilon =$$

$$= \frac{1}{q^2} \left(\frac{2}{3} \varepsilon^3 - \frac{2}{3} \varepsilon^2 - q^2 \ln |\varepsilon^2 - q^2| \right) \Big|_q^{\infty} = \frac{1}{3} q.$$

Буннан түсіу тегислигине перпендикуляр бағытта поляриланған нурланыу ушын мына аңлатпаны аламыз:

$$\rho = \frac{8}{3} q \frac{\lambda}{2\pi d \cos \vartheta} = \frac{8}{3\pi} \cdot \frac{N\lambda^2}{\sin 2\vartheta} \frac{e^2}{mc^2} F(2\vartheta) \quad (30)$$

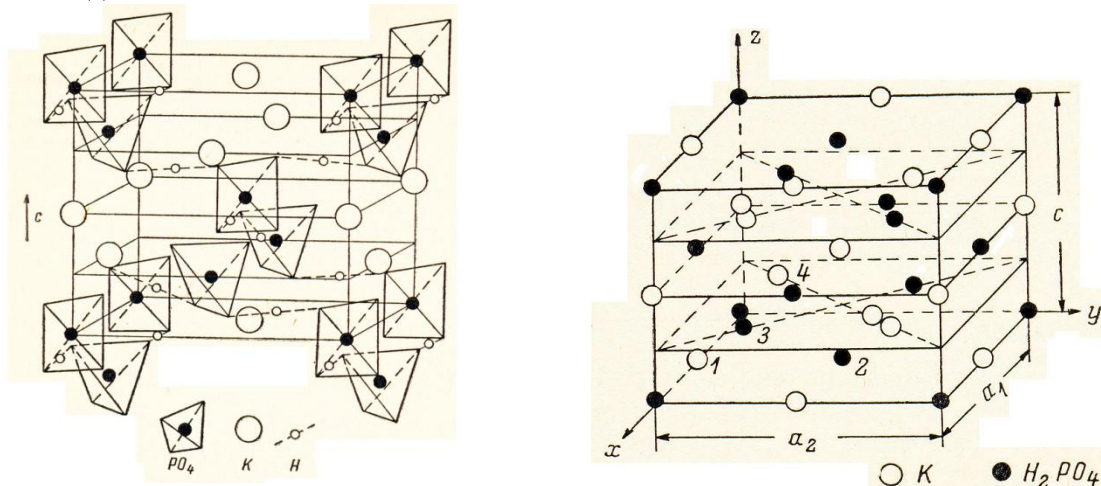
Егер кристалларға келип түсіуші нурдың поляризацияланбағанлығын есапқа алатуғын болсақ хәм оны поляризацияның еки кураушыларына жайсақ, онда шашыраудың интеграллық интенсивлиги ушын мына формуланы аламыз:

$$\rho = \frac{8}{3\pi} \cdot \frac{e^2}{mc^2} \cdot \frac{1 + \cos 2\vartheta}{2 \sin 2\vartheta} N\lambda^2 F(2\vartheta). \quad (31)$$

Бул формула Лауэның кинематикалық теориясында идеал-мозайкалық кристалл ушын алынған (29)-формуладан үлкен айырмаға ийе. Идеал кристалл жағдайында ρ структуралық фактор $F(2\vartheta)$ тиң биринши дәрежесине тууры пропорционал, ал кинематикалық теорияда болса структуралық фактордың квадратына пропорционал.

Мүйешлик көбейтүшілер де, толқын узынлығына ғәрезлилик те хәм $\frac{e^2}{mc^2}$ көбейтүшисиниң дәрежеси де бирдей емес.

Енди $\frac{e^2}{mc^2} = 2,8132 \cdot 10^{-13}$ см көбейтүшиси хәкқында мағлыұмат бери өтемиз. Бул шаманы электронның классикалық радиусы деп атаймыз. Бул шама $\frac{e^2}{R}$ шамасын (потенциал энергия) электронның тынышлықтағы mc^2 энергиясына теңлестиріу жолы менен алынады.



4-сүүрет. KH_2PO_4 калий дигидрофосфаты кристалларының элементар қутышалары. (а) Кюри нокатынан жоқары температураларда (тетрагоналық парафазада, курамалы модель) хәм (б) Кюри нокатынан төменги температураларда (ферроэлектриклик орторомбалық фазада, әпиұайыластырылған модель). 1 – 4 цифралары менен бир бирине эквивалент емес структуралық бирліклер белгиленген.

Енди айқын есаплауларға өтемиз. Көпшиликке белгили ферроэлектриклик калий дигидрофосфаты KH_2PO_4 кристаллары ушын алынған нәтижелерди көремиз. Бул кристалл өжире температураларында параэлектрик (әдеттегидей сызықлы диэлектрик) болып тетрагоналық курылыска ийе: $a = 7,45236 \text{ Å}$, $c = 6,97298 \text{ Å}$ (симметрияның кеңісликтеги топары $I42d$). 121,3 – 122 К температураларда KH_2PO_4 кристалларында

фероэлектрик фазалық өтіу орын алып, усының салдарынан кристалл орторомбалық кристалға айналады. 105 К температурадағы кристаллық пәнжерениң турақлылары: $a = 10,54581 \text{ \AA}$, $b = 10,46634 \text{ \AA}$ хәм $c = 6,92241 \text{ \AA}$ (симметрияның кеңістіктегі топары $Fdd2$). Ферроэлектрик фазалық өтіудің салдарынан кристалдың элементар қутышасының көлемі сезилерліктей өзгермейді $[(6 - 10) \cdot 10^{-3} \text{ процент ғана}]$.

Ферроэлектрик фазалық өтіуде кристалда полидоменлік қурылыс пайда болады. Нәтийжеде атомлық-кристаллық қурылысы жетиліскен үлгілер полидоменлік кристалларға айналады. Усыған байланыссы параэлектрик халдағы KH_2PO_4 кристалларын жетиліскен атомлық-кристаллық қурылысқа ийе, сонлықтан олар ушын рентген нурларының дифракциясының динамикалық теориясын пайдаланыуға болады, ал ферроэлектрик халға өткен кристаллардың қурылысы дефектлі, сонлықтан оларды идеал-мозайкалық кристалл деп қарауымызға болады хәм сонлықтан рентген нурларының дифракциясының кинематикалық теориясын пайдаланыуға болады деп болжаймыз. Усы болжаудың дурыс ямаса дурыс емес екенлігін санлы бақалау ушын KH_2PO_4 кристалларының екі модификациясы ушын структуралық фактордың мәнісін есаплаймыз.

Структуралық фактордың

$$F_{hkl} = \sum_{k=1}^N f_k e^{i2\pi(hx_k + ky_k + lz_k)} \quad (32)$$

формуласы жәрдемінде есапланатуғынлығы кеңнен мәлім. Егер кристалл симметрия орайына ийе болатуғын болса (32)-аңлатпа әпиұайыласады хәм

$$F_{hkl} = 2 \sum_{k=1}^{N/2} f_k \cos 2\pi(hx_k + ky_k + lz_k) \quad (33)$$

түрине енеді. Солай етип калий дигидрофосфаты кристалдың тетрагоналық параэлектрик фазасы ушын структуралық фактор (33)-формула менен, ал ферроэлектрик орторомбалы фазасы ушын (32)-формула тийкарында есапланыуы керек. Бул формуланы былайынша да жаза аламыз:

$$F(h, k, l)^2 = \sum_{j=1}^N f_j^2 \cos^2 2\pi(hx_j + ky_j + lz_j) + \sum_{j=1}^N f_j^2 \sin^2 2\pi(hx_j + ky_j + lz_j) \quad (34)$$

Бул хақыйқый функция болып табылады (квадратқа көтеріу менен комплекслі структуралық фактордан қутылдық).

Структуралық факторды есапқа алыу менен (яғный элементар қутышадағы атомлардың координаталарын есапқа алыу менен) биз қәлеген hkl шашырауының (шағылысуының, hkl индексли дифракцияға ушыраған нурдың) салыстырмалы интенсивлігін анық айта алады екенбіз. Бул жуўмақ электронлар толқынларының кристаллық денелердегі дифракциясы ушын да дурыс.

Калий дигидрофосфаты ушын структуралық амплитуда былайынша есапланады (төрт түрлі атомлардың структуралық амплитудаларының амплитудаларының қосындысы):

$$F = F_K + F_P + F_O + F_H. \quad (35)$$

Бул аңлатпаларда K калий бойынша, P фосфор бойынша, O кислород бойынша хәм H водород бойынша структуралық амплитуда.

Фосфор бойынша структуралық амплитуда былайынша есапланады:

$F_P = \frac{1}{4} f_P \sum_{j \in I} \exp(i2\pi(hx_j + ky_j + lz_j))$ хәм тағы басқалар. Бул аңлатпада f_P арқалы фосфор ушын атомлық фактор белгіленген.

Фосфор атомларының элементар қутышалардағы координаталарын есапқа аламыз. Олар мыналар: (000), (0,1/2,1/4), (1/2,1/2,1/2). Усы шамаларды есапқа алып биз мынаған ийе боламыз:

$$j \in I \exp(hx_j + ky_j + lz_j) = 1 + e^{i\pi(h+k+l)} 1 + e^{i\pi(k+l/2)}.$$

Усы аңлатпаларды есапқа алған халда сөниўлерди табамыз:

(h,0,0) дифракциялық максимумлары арасында $h = 2n$ хәм $p = f_p$.

(h,h,0) дифракциялық максимумлары арасында $h = 2n$ хәм $p = f_p$.

(0,0,l) дифракциялық максимумлары арасында $l = 4n$ хәм $p = f_p$.

Калий атомлары ушын сәйкес мына байланысларды аламыз:

(h,0,0) дифракциялық максимумлары арасында $h = 2n$ хәм $k = f_k$.

(h,h,0) дифракциялық максимумлары арасында $h = 2n$ хәм $k = f_k$.

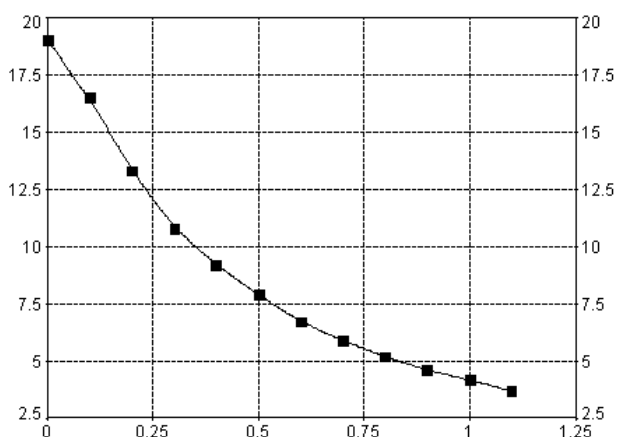
(0,0,l) дифракциялық максимумлары арасында $l = 4n$ хәм $k = f_k$.

Калий, фосфор, водород хәм кислород атомлары ушын рентген толқынларының атомлық шашыраўының $\sin\theta/\lambda$ ден ғәрезлигин табыў қыйынлық пайда етпейди. Ҳақыйқатында да қолда бар әдебиетларда бул атомлар ушын мынадай атомлық факторлардың мәнислерин береді:

$\sin\theta/\lambda$	0	0.1	0.2	0.3	0.4	0.5	0.6	0.7	0.8	0.9	1.0	1.1
$\frac{\lambda}{2\sin\theta}$		5	2.5	1.667	1.25	1	0.833	0.714	0.625	0.556	0.5	0.455
H	1.0	0.81	0.48	0.25	0.13	0.07	0.04	0.03	0.02	0.01	0.00	0.00
O	8.0	7.1	5.3	3.9	2.9	2.2	1.8	1.6	1.5	1.4	1.35	1.26
P	15.0	12.4	10.0	8.45	7.45	6.5	5.65	4.8	4.05	3.4	3.0	2.6
K	19.0	16.5	13.3	10.8	9.2	7.9	6.7	5.9	5.2	4.6	4.2	3.7

Ендиги мәселе бул кестелик мағлыўматларды аналитикалық аңлатпаға айландырыў болып табылады (математикалық тил менен айтқанда аппроксимация менен шуғылланыўымыз керек).

Мәселени шешиў ушын биз SYSTAT TableCurve 2D 5.01 программасынан пайдаланамыз. Бул математика илиминин хәр қыйлы тараўларынан алынған 3665 функцияның жәрдеминде экспериментте алынған нәтижелерди автоматластырыўға мүмкиншилик береді. Келеси сүүретте усы программа жәрдеминде калий ушын жоқарыдағы кестеде берілген мағлыўматлар хәм қайта ислеўдин нәтижесинде алынған аппроксимациялық иймеклик берілген.



Шашыраўдың атомлық факторының калий ушын алынған аппроксимациялық иймеклиги. Абсциссада $\sin\theta/\lambda$ ның, ал ординатада шашыраўдың атомлық факторының мәниси берілген. Төрт мүйешликлер жоқарыда келтирилген кестедегі мағлыўматларға сәйкес келеді.

Биз структуралық факторды «Mathematica 7» программалаў тилинде есаплаўды әмелге асырдық хәм усыған байланыслы есаплаўлар алгоритмин бере аламыз. Есаплаў схемасы төмендегилерден ибарат:

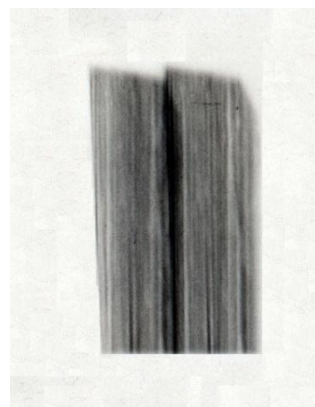
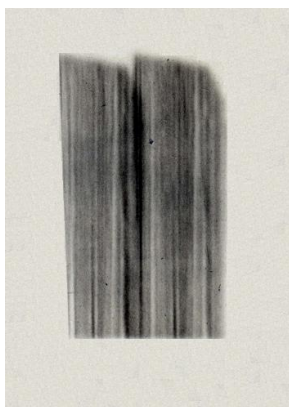
1. Изертленип атырған кристаллық объектке кириўши химиялық элементлердин атомлық факторының дифракциялық мүйешке ғәрезлигинин жуўық түрдеги аналитикалық аңлатпасын алыў (бизин жағдайымызда калий, фосфор, водород хәм кислород ушын). Бул кейинирек электронлар толқынлары ушын көрсетиледи.
2. Элементар қутышалардағы атомлар ийетеп турған нокатлардың дәл

координаталарын билиў.
3. Структуралық фактор ушын (35)-формулаға сәйкес келиўши толық аңлатпа жазыў.
4. Рентген нурларының өшиў нызамлықларын (условия или законы погасания) билиў хәм булл нызамлықлар орынланатуғын кери пәнжере түйинлерин есаплаўлардан алып таслаў.
5. Пайдаланылатуғын рентген толқынларының толқын узынлықларына сәйкес поляризацияланбаған нурлар ушын структуралық фактордың өзиниң дәл мәнислерин есаплаў хәм алынған нәтийжелерди эксперименте өлшеген нәтийжелер менен салыстырыў.

Водород хәм кислород бойынша бир қанша қурамалырақ болған нәтийжелер алынады. Есаплаўлар

$$\frac{F_{hkl \text{ kin}}}{F_{hkl \text{ din}}} \approx 4 \quad (34)$$

екенлигин көрсетти. Бул экспериментлерде алынған нәтийжелерге толық сәйкес келди. KH_2PO_4 кристалларының ферроэлектриклик фазаларын рентгенопогрфиялық изертлеўлер барысында рентген толқынларының дифракциясының динамикалық хәм кинематикалық теорияларын бир бири менен салыстырып көриў мүмкиншилиги туўылады.



5-сүүрет. Ферроэлектриклик KH_2PO_4 кристаллынан алынған рентгенопографиялық сүүретлер [кристаллық үлгиниң бети тетрагоналлық фазалағы (110) кристаллографиялық бетке параллель, c көшери вертикал бағытта бағытланған, рентгенопографиялық мүйешлик сканнерлеў методы (усылы)].

KH_2PO_4 кристалларында ферроэлектриклик фазалық өтиўлерде полидоменлик қурылыс пайда болып, бул қурылыс еки доменлер системасынан турады. Структуралық доменлердиң пайда болыўы кристалдың сезилерликтей майысыўына алып келмейди. Бирақ полидоменлик комплекслер арасында кристалл күшли майысады хәм идел-мозаикалық кристаллардың моделин береді. Солай етип полидоменлик комплекслер арасындағы өтиў областында рентген нурларының шашыраў рентген нурларының дифракциясының кинематикалық теориясы, ал айырым доменлерде ямаса полидоменлик комплекслерде шашыраў динамикалық теория жәрдеминде тәриплениди деп болжаўға болады.

5-сүүретте ферроэлектриклик KH_2PO_4 кристаллынан алынған рентгенопографиялық сүүрет келтирилген [кристаллық үлгиниң бети тетрагоналлық фазалағы (110) кристаллографиялық бетке параллель, c көшери вертикал бағытта бағытланған, рентгенопографиялық мүйешлик сканнерлеў усылы]. Сүүреттеги [001] көшерине параллель болған жолақлар полидоменлик комплекслердиң излери болып табылады. Бизиң мәселемиз [001] көшерине перпендикуляр бағытта (яғный [110] көшери бағытында) фотопленканы фотометрлеў (яғный дифракцияға ушыраған рентген нурларының

интенсивліктерін өлшеу) болып табылады. Бұл жағдайда да шама менен $\frac{F_{hkl\ kin}}{F_{hkl\ din}} \approx 4$ мәнісі алынды.

Солай етип биз рентген толқынларының дифракциясының кинематикалық хәм кинематикалық теорияларын бир объектке қолланыу мәселесін бир объектти изертлеу барысында шеше алады екенбиз. Биз алған нәтижелер KH_2PO_4 кристалларының идеал-мозаикалық та емес, идеал да емес екенлігін көрсетеді.

Енді ρ ның жоқарыдағы (29)- және (31)- еки формула менен есапланған хәм экспериментте алынған мәністерін салыстырып көріу үшін береміз.

Кристаллық зат	hkl	ρ_{Din}	ρ_{Kin}	ρ_{eksper}
Al	111	19,6	818,3	580
	222	6,3	157,9	144,1
	333	0,37	1,39	1,43
CaCO ₃	$\sin \vartheta$	ρ_{Din}	ρ_{Kin}	ρ_{eksper}
	0,1	30,9	1220	240
	0,5	1,7	12,5	2,4

Жоқарыда келтирилген кестелердегі мағлұматтар Al менен CaCO₃ кристалларының да идеаллық-мозаикалық ямаса идеал емес екенлігін көрсетеді.

5-§. Рентген нурларының шашырауының Эвальд бойынша теориясының элементтері

Рентген нурларының дифракциясының Эвальд бойынша (динамикалық) теориясында кристаллық кеңістіктегі электромагниттік толқынның тарқалыуы қарап шығылады хәм электромагнит толқынлардың орталық пенен динамикалық тәсірлесіуі есапқа алынады. Пәнжерде оң заряд кеңістіктің хәр бир нокатындағы электронлық тығызлығына теңдей тығызлық пенен тарқалған хәм олар қозғалмайды деп есапланады. Бундай жағдайда орталық еркін зарядқа ийе емес система деп қабыл етіледі. Бірақ бұл заряд пәнжерде дәуірлік түрде өзгереді (өзгеріу дәуірі кристаллық пәнжерінің дәуіріне тең).

Бундай орталықтардағы электромагниттік толқынлардың тарқалыуы хақындағы мәселені шешкенде индукция векторы $\mathbf{D}||\mathbf{E}$ деп есапланады (яғный кристаллардағы анизотропия есапқа алынбайды). Бундай болжау рентген нурлары үшін сыныу көрсеткіші $n = \bar{\epsilon}$ шамасының шама менен бірге теңлігінде (бірден 10^{-6} - 10^{-7} шамасына айрылады).

Усындай болжаулар тийкарында

$$\mathbf{D} \mathbf{r} = \mathbf{A} \mathbf{r} e^{2\pi i(\mathbf{v}t - \mathbf{K}_0 \mathbf{r})} \quad (35)$$

аңлатпасы менен тәріпленетуғын тегіс толқынлар түріндегі стабиллі (ұақытқа ғәрезлі емес) шешімдер ізленеді. Толқынның амплитудасы $\mathbf{A}$ ұақыттан ғәрезлі емес, ал координатадан ғәрезлі болыуы мүмкін. Себебі электронлар тарқалыушы толқынлардың тәсірінде тербеледі хәм сонлықтан олар (электронлар) тәрәпинен тарқалатуғын толқынлар бир бири хәм келип түсіуші толқын менен интерференцияға ушырайды. Нәтижеде амплитудасы кеңістікте дәуірлі түрде өзгертетуғын базы бир турақлы электромагнит толқын пайда болады. Бұл дәуірлік пәнжерінің дәуіріндей болыуы керек, яғный $\mathbf{A} \mathbf{r}$ үш бағыт бойынша дәуірлікке ийе функция болып табылады. Бұл функцияны пәнжерілік сумма (қосынды) түрінде көрсетуі мүмкін:

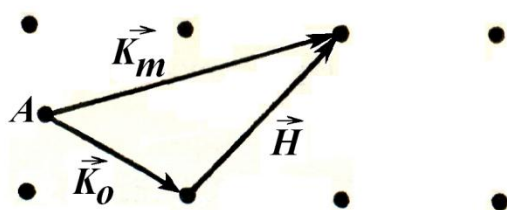
$$\mathbf{A} \mathbf{r} = \sum_m \mathbf{D}_m e^{-2\pi i(\mathbf{r}, \mathbf{H}_m)} \quad (36)$$

Бұл аңлатпадағы $\mathbf{H}_m$ кери пәнжерінің векторы. Бундай жағдайда шешім бир қатар тегіс толқынлардың суммасы сыпатындағы шешімге ийе болады:

$$\mathbf{D} = \sum_m \mathbf{D}_m e^{-2\pi i[\mathbf{v}t - \mathbf{K}_0 + \mathbf{H}_m \mathbf{r}]} = \sum_m \mathbf{D}_m e^{-2\pi i[\mathbf{v}t - \mathbf{K}_m \mathbf{r}]} \quad (37)$$

(37)-аңлатпада $\mathbf{K}_m = \mathbf{K}_0 + \mathbf{H}_m$.

Егер мәселени эпийайыластырсақ хәм зарядларды пәнжерениң түйинлеринде жайласқан деп есапласақ, онда шешимниң түриниң қандай болатуғынлығын анық болады. Ҳақыйқатында да, егер зарядлар координаталары $\mathbf{r} = m\mathbf{a} + n\mathbf{b} + p\mathbf{c}$ болған пәнжерениң түйинлеринде жайласқан болса, онда $\mathbf{r}, \mathbf{H} = h\mathbf{m} + k\mathbf{n} + l\mathbf{p}$ шамасына тең болып, барлық ўақытта да пүтин мәниске ийе болады. Бундай жағдайда (35)-теңлемедегі $\mathbf{K}_0$ ди $\mathbf{K}_0 + \mathbf{H}$ ка алмастырыў мүмкин хәм $\mathbf{H}$ қа парық кылатуғын барлық толқын векторларын бир бирине эквивалент деп есаплаўға болады. 6-сүўретте кери пәнжере көрсетилген. $\mathbf{K}_0$ векторы (000) түйинине қарай бағытланған. А ноқатынан кери пәнжерениң қәлеген түйинине қарай бағытланған қәлеген векторды Максвелл теңлемелериниң шешимине кириўши қәлеген вектор деп қараўға болады.



6-сүўрет.

Кери пәнжерениң бир тегислигиниң фрагменти. $\mathbf{K}_0$ векторы (000) түйинине қарай бағытланған.

Орталықта тарқалыўшы электромагнит майданы ушын Максвелл теңлемелерин жазамыз:

$$\frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t} = c \operatorname{rot} \mathbf{H}; \quad \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} = c \operatorname{rot} \mathbf{E} = c \operatorname{rot} \frac{\mathbf{D}}{\varepsilon}. \quad (38)$$

Буннан

$$\frac{\partial^2 \mathbf{D}}{\partial t^2} = -c^2 \operatorname{rot} \operatorname{rot} \frac{\mathbf{D}}{\varepsilon}. \quad (39)$$

теңлемесине ийе боламыз.

Диэлектриклик сиңиргишлиги ε болған орталықта $\mathbf{D}$, $\mathbf{E}$ хәм $\mathbf{P}$ векторлары былайынша байланысқан:

$$\mathbf{D} = \mathbf{E} + 4\pi\mathbf{P} = \varepsilon\mathbf{E}. \quad (40)$$

Буннан

$$4\pi\mathbf{P} = \mathbf{D} - \mathbf{E} = \varepsilon - 1 \mathbf{E} = \chi\mathbf{E}$$

теңлемесине ийе боламыз. Бул теңлемедә χ арқалы орталықтың поляризацияланыўшылығы белгиленген.

Диэлектриклик сиңиргишлик ε үш бағыт бойынша дәўирли түрде өзгеретуғын болғанлықтан (дәўирлери a, b хәм c , элементар қутышалардың дәўирлери) χ да үш бағыт бойынша дәўирли өзгереді. Оны қатарға жайып мына түрде көрсетиўге болады:

$$\chi = \chi_h e^{2\pi i(\mathbf{H}_h, \mathbf{r})}$$

Қатарға жайыўдың χ_h коэффициентлери бойынша аңлатпаны жеңил түрде табыўға болады. Ҳааыйқатында да, егер электрон базы бир ноқатта жайласқан болса, онда электромагнит толқынының тәсириндегі қозғалыс теңлемеси мына түрде жазылады:

$$x + kx + \omega_0^2 x = \frac{e}{m} E_0 e^{i\omega t}.$$

Бул аңлатпа электр зарядының аўысыўын табыўға мүмкиншилик береді:

$$x = \frac{e}{m} \frac{E_0 e^{i\omega t}}{\omega_0^2 - \omega^2 + i\omega t}.$$

Кеңисликтің берілген ноқатындағы көлем бирлигиндегі поляризация $\mathbf{P}$ ның мәниси $\mathbf{P} = \frac{e\chi}{\Delta v}$ шәртинен анықланады. Суммалаў базы бир Δv көлеминдегі барлық зарядлар бойынша жүргизиледи.

Рентген нурлары ушын әдетте $\omega^2 \gg \omega_0^2$. Сонлықтан $\mathbf{P}$ ны былайынша жазамыз:

$$4\pi\mathbf{P} = -\frac{4\pi e^2}{m\omega^2} \frac{\Delta N}{\Delta v} E_0 e^{i\omega t} = -\frac{e^2}{m\pi v^2} \rho E_0 e^{i\omega t}.$$

Демек

$$\chi = -\frac{e^2}{m\pi v^2} \rho = -\frac{e^2 \lambda^2}{m\pi c^2} \rho = -\frac{e^2 \lambda^2}{m\pi c^2} \frac{1}{v} F_{hkl} e^{2\pi i(H_{hkl}, r)}. \quad (41)$$

Усыған байлансly

$$\chi = -\frac{e^2 \lambda^2}{m\pi c^2} \frac{F_h}{v}. \quad (42)$$

Бул аңлатпада v арқалы элементар қутышаның көлеми белгиленген.

Структуралық амплитудадағы дисперсиялық дүзетиўлерди ($ik\omega$ ны) есапқа алғанда атомлық фактордың жормал ағзасы $i\Delta f''$ пайда болады. Бундай жағдайда χ_h пенен χ_h шамалары комплексли түйинлес шамалар болыўдан қалады хәм χ шамасы комплекс шамаға айланады. Соның менен бирге ε ниң шамасы 1 (бир) ден аз шамаға айрылатугын болғанлықтан, онды мына аңлатпаны жазыў мүмкиншилилине ийе боламыз:

$$\chi = \varepsilon - 1 \approx \frac{\varepsilon - 1}{\varepsilon} = 1 - \frac{1}{\varepsilon}.$$

Усы жағдайларға байланысly (39)-теңлемени былайынша көширип жазамыз:

$$\frac{\partial^2 \mathbf{D}}{\partial t^2} = -c^2 \operatorname{rot} \operatorname{rot} \mathbf{D} + c^2 \operatorname{rot} \operatorname{rot} \chi \mathbf{D}.$$

Буннан хәм $\operatorname{rot} \operatorname{rot} \mathbf{D} = \operatorname{grad} \operatorname{div} \mathbf{D} - \nabla^2 \mathbf{D}$ болғанлықтан хәм еркин зарядлардың жоқ екенлиги шәртинен $\operatorname{div} \mathbf{D} = 0$ (39)-теңлемениң ең ақырғы түрин аламыз

$$\nabla^2 \mathbf{D} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \mathbf{D}}{\partial t^2} = -c^2 \operatorname{rot} \operatorname{rot} (\chi \mathbf{D}). \quad (43)$$

(37)- хәм (41)-формадағы $\mathbf{D}$ менен χ ның мәнислерин есапқа алып $\chi \mathbf{D}$ көбеймесин мына түрде есаплап шығарыўға болады:

$$\begin{aligned} \chi \mathbf{D} &= \psi_h D_n \exp[2\pi i(vt - K_n + H_k, r)] = \\ &= (\chi \mathbf{D})_m \exp[2\pi i(vt - K_n + H_k, r)]. \end{aligned} \quad (44)$$

Бул жерде

$$(\chi \mathbf{D})_m = \chi_{m-n} \mathbf{D}_n.$$

(43)-теңлемеге (40)-аңлатпадан $\mathbf{D}$ ны, ал (44)-аңлатпадан $\chi \mathbf{D}$ ны қойсақ хәм алынған теңлемени шешемиз. Буның ушын егер вектор $\mathbf{u} = \mathbf{u}(r, t) = \mathbf{A} e^{2\pi i(vt - \mathbf{K}r)}$ берилген болса, онда

$$\begin{aligned} \operatorname{div} \mathbf{u} &= -2\pi i \mathbf{K}, \mathbf{u}, \\ \nabla^2 \mathbf{u} &= -4\pi^2 K^2 \mathbf{u}, \\ \frac{\partial^2 \mathbf{u}}{\partial t^2} &= -4\pi^2 v^2 \mathbf{u}, \\ \operatorname{rot} \mathbf{u} &= -2\pi i \mathbf{K} \times \mathbf{u}, \\ \operatorname{rot} \operatorname{rot} \mathbf{u} &= 4\pi^2 K^2 \mathbf{u} - \mathbf{K}(\mathbf{K}, \mathbf{u}) = 4\pi^2 K^2 (\mathbf{u})_K \end{aligned}$$

екенлигин еске аламыз. Бул теңлемедегі $(\mathbf{u})_K$ арқалы $\mathbf{K}$ векторына перпендикуляр болған $\mathbf{u}$ дың қураўшысы белгиленген (теңлемени толық шешиўди биз бул текстке киргизбеймиз) Бундай жағдайда (43)-теңлемениң шешимин

$$\frac{K_m^2 - K^2}{K_m^2} \mathbf{D}_m = \chi_{m-n} (\mathbf{D}_n)_m \quad (45)$$

теңлемелер системасы түринде аламыз. Бул аңлатпада $(\mathbf{D}_n)_m$ арқалы $\mathbf{D}_n$ векторының $\mathbf{K}_m$ векторының бағытындағы проекциясы болып табылады. $\mathbf{K}$ болса толқын векторының бослықтағы мәнисі.

(45)-теңлемелер сызыклы теңлемелер системасы болып табылады. Бул теңлемелердин саны индукциясы D_m болған толқынлар санына тең. Поляризацияланбаған толқын үшін поляризацияның еки халы бир биринен ғәрезсиз болғанлықтан D_m ниң n мәниси үшін $2n$ теңлемеге ийе боламыз.

(45)-теңлемелер системасы принципінде шексиз көп теңлемелер системасынан турыўы мүмкин. Бирақ булл теңлемелер системасын дыққат пенен үйрениў $K_m^2 - K^2$ айырмасының өсиўи менен D_m шамаларының санының жүдә кемейип кететуғынлығын көрсетеди. Хакыйқатында да (45)-системаның оң тәрәпи булл системадағы бир теңлемеден екінши теңлемеге өткенде үлкен шамаға өзгере алмайды, яғный $K_m^2 - K^2$ айырмасының мәниси киши болса D_m ниң мәниси үлкен болады. Бундай жағдайда теңлемелер системасындағы теңлемелер саны кемейеди.

$K_m^2 - K^2$ айырмасы киши болғанлықтан (45)-теңлемени былайынша көширип жаза аламыз:

$$2\varepsilon_m D_m = \chi_{m-n}^{(n)} (D_n)_m \quad (46)$$

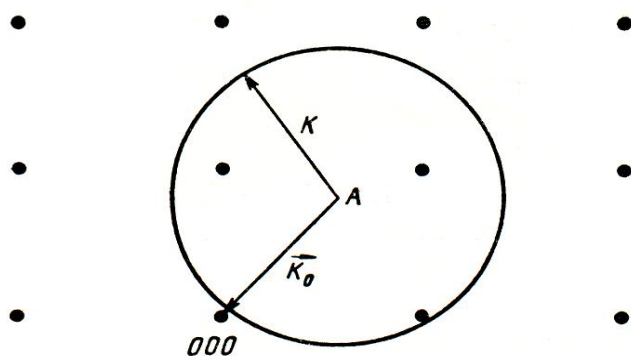
Бул аңлатпада $\varepsilon_m = \frac{|K_m| - |K|}{|K|}$ жүдә киши шама болады (Толқын векторы $K = \frac{1}{\lambda}$ болғанлықтан биз $|K_m| - |K|$ айырмасын нолге тең деп ойлаўымыз мүмкин.). Бирақ (45)-теңleme жоқарыда айтылғанларға қосымша $|K_m|$ ниң $|K|$ ға тең бола алмайтуғынлығын да көрсетеди. Демек кристалл ишиндеги толқынның тарқалыў тезлиги бослықтағы толқынның тарқалыў тезлигине тең болмайды деп жуўмақ шығарамыз. Хакыйқатында да ε шамасының нолге тең болыўы D_m шамасы үшін шексизликти береді. Ал бундай жағдай физикалық мәниске ийе бола алмайды. Бул ε шамасы резонанслық қәтелик атамасына ийе болды.

Жоқарыда айтылып өтилгениндей K_m ниң бир неше мәниси үшін ε_m лердин мәнислери киши болса (ε_m ниң мәнислери хакыйқатында да киши шама хәм 10^{-5} тен аспайды), онда сәйкес D_m лер үлкен мәниске ийе болады. Бундай жағдайда (46)-системаны шешкенде басқа барлық ағзаларды есапқа алмаўға болады. Бул әпиўайы усыл Эвальд сферасын пайдаланып күшли D_m лерди сайлап алыў мүмкиншилигин береді. Тап усындай әпиўайы жоллар менен кинематикалық теорияда дифракцияға ушыраған нурлардың бағытын анықлайды.

Мейли кери пәнжереде толқын векторы K_0 болған толқын тарқалатуғын болсын (демек бул вектордың узынлығы да, бағыты да белгили деген сөз, 6-сүўрет). Дифракцияға ушыраған толқынлардың шашыраў орайын А арқалы белгилеймиз хәм усы нокаттан (000) түйинине K_0 векторын жүргиземиз [А нокаты менен (000) түйинине шекемги кашықлық K_0 векторының узынлығына тең деген сөз]. А нокаты орайы хәм радиусы K болған сфера жүргиземиз (Рентгенографияда бул сфераның атын Эвальд сферасы деп атайды.). Бул сфера (000) түйини арқалы өтпейди. Себеби $|K_m| \neq |K|$. Бирақ (000) нокаты сфераға жүдә жақын жайласқан болады. Себеби $\Delta K = K\varepsilon_0 = K(n-1) \approx K \cdot 10^{-5}$. Егер кери пәнжерениң қандай да бир басқа түйини Эвальд сферасына жақын жайласқан болса, онда оның үшін ε_m шамасы киши, бирақ D_m ниң шамасы үлкен болады.

7-сүўрет.

Динамикалық теория бойынша Эвальд сферасы менен кери пәнжере векторының өз-ара жайласыўлары.



7-сүретте келтирилген жағдай рентген нурларының дифракциясының динамикалық теориясында орын алған жағдайдың рентген нурларының дифракциясының кинематикалық теориясында да орын алатуғынлығын айқын көрсетеді. Айырма соннан ибарат, кинематикалық теорияда (000) нокатынан K_0 векторы емес, ал K векторы жүргизіледі.

6-§. Электронлар толқынлары үшін динамикалық теорияның қолланылыуы

Электронлардың дифракциясының кинематикалық теориясы электронлық-микроскопиялық сүреттерді интерпретациялау үшін сапалық жақтан пайдалы теория болып табылса да, бұл теорияны дифракцияға ушыраған толқынның амплитудасы q_g кристалға келип түсіуші толқынның амплитудасы q_0 дан киши болған жағдайда ғана табыссыз түрде пайдаланыу мүмкін. Қалыңдығы t болған жетилиспеген кристалдағы z тереңлігіндегі атомлардың ауысуылары $R(z)$ болсын. Бундай жағдайда изертлениуші кристаллық фольганың төменгі бетіндегі дифракцияға ушыраған толқынның амплитудасы q_g мына шамаға тең:

$$q_g = \frac{\pi i}{\xi_g} q_0 \int_0^t e^{-2\pi i s z - 2\pi i \mathbf{g} \cdot \mathbf{R} z} dz. \quad (47)$$

Бұл аңлатпада ξ_g арқалы экстинкциялық ұзындық, ал s арқалы дәл Брэгг ауқалынан ауысуы белгиленген. $\mathbf{g}$ болса кери пәнжерениң векторы. Бұл теңдеме айырым атомлар тәрепинен шашыратылған толқынлардың амплитудаларын фазаны есапқа алған қалда қосыудың жәрдемінде алынған. Бирақ, егер дифракцияға ушыраған толқынның амплитудасы ξ_g үлкен мәниске ийе болса, онда дифракцияға ушыраған толқынлардың өзлеринің атомлардағы шашырауын есапқа алыуымыз керек болады. Кинематикалық теорияның бұл шекленгенлігі әсиресе s тиң мәниси жүдә киши болғанда (Брэгг шәрті дәл орынланғанда) айқын көринеді. Бұл жағдай (47)-аңлатпада келип түсіуші толқынның амплитудасы $q_0 = 1$ болғанда анық көринеді:

$$q_g^2 = \frac{\pi^2}{\xi_g^2} \frac{\sin^2 \pi t s}{(\pi s)^2}. \quad (48)$$

Бұл аңлатпа $s = 0$ шәрті орынланғанда

$$q_g^2 = \frac{\pi t}{\xi_g}.$$

Бұл аңлатпадан дифракцияға ушыраған толқынның интенсивлігінің кристалға келип түсіуші толқынның интенсивлігінен үлкен болып шығуы мүмкіншилигі пайда болады. Ғақыйқатында да t ның мәниси $\frac{\xi_g}{\pi}$ ден үлкен болса $q_g > q_0$ болып шығады. Электрон микроскоптарында изертленетуғын кристаллық денелердің қалыңдығы әдетте $10\xi_g$ ден үлкен болмайды. Демек бундай жағдайдарда кинематикалық теория дурыс нәтижелерді бермейді. Сонлықтан кристалдағы атомларда шашыраған барлық толқынлардың (изертленетуғын кристаллық денеге конденсорлық линзадан келип түсіуші, дифракцияға ушыраған толқынлардың) фазаларын есапқа алыу менен қосыу зәрүрлігі пайда болады. Усындай жағдайдарды есапқа алып кристалларда дифракцияға ушыраған толқынлардың интенсивлігін есаплайтуғын теорияны динамикалық теория деп атайды.

Динамикалық теория электронлар толқынларының кристаллық денелердегі дифракциясын изертлеу барысында пүткіллей күтилмеген жаңа кубылыстардың орын алатуғынлығын да көрсетеді. Бундай кубылыстар қатарына адсорбциялық деп аталатуғын физикалық эффектлер киреді. Сонлықтан биз кинематикалық теорияның әпиуайылығы оның ең үлкен артықмашлығы болып есапланса да, оның кемшиликлери рентген

нурларының кристаллық денелердеги кинематикалық дифракциясынан әдеуір үлкен орны ийелейди хәм электронлардың дифракциясында динамикалық теория тийкарғы орынды ийелейди.

Биз жоқарыда электронлар толқынларының толқын ұзынлығының рентген толқынларының толқын ұзынлығынан әдеуір киши болатуғынлығын көрген едик. Олардың толқын ұзынлықтарын хәм ZnS кристалларындағы (220) тегисликлер семействосында $d_{220} = \frac{a}{8} = \frac{5,4145}{8} = 1,91431$ қандай дифракциялық мүйешке бурылатуғынлығын мына кесте жәрдемінде береміз:

Толқын	d, Å	$2\theta = \arcsin \frac{\lambda}{2d}$, мүйешлик градус
Рентген толқыны (Cu анодының α -спектри).	1.5418	49,5
Электронлар толқыны, анодлық кернеу 100 кВ болғанда.	0,0370144	1,10787

Солай етип әдеттеги рентгенографиядағы 50 градуслық дифракциялық мүйештин орнына электрон микроскопиясында шама менен 1 градуслық мүйеш сәйкес келеди. Сонлықтан электронлар кристалдың бетине дерлик перпендикуляр жайласқан атомлық тегисликлерде дифракцияға ушырайды хәм дифракцияға ушыраған толқынларды кристалдың ишинде оның бетине перпендикуляр етип алынған жиңишке колонка арқалы тарқалады деп есаплауға болады (8-сүүрет).

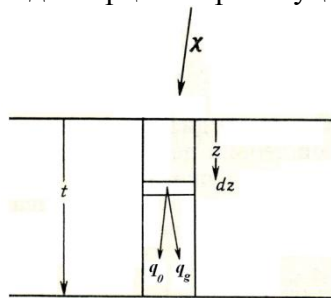
Биз кристалда тарқалатуғын еки толқынды есапқа аламыз. Олардың бириншиси кристалға келип түсетуғын толқын [амплитудасы $q_g(z)$], екіншиси кристалда дифракцияға ушыраған толқын [амплитудасы $q_0(z)$], z арқалы кристалдың бетине перпендикуляр бағыттағы координата белгиленген. Бундай жағдайда электронлар

$$\psi z = q_0 z \exp 2\pi i \chi \cdot r + q_g(z) \exp 2\pi i \chi' \cdot r \quad (49)$$

Бул аңлатпада χ арқалы энергиясы eU болған электронлардың толқын векторы белгиленген (яғный $\frac{h^2 \chi^2}{2} = eU$). χ' болса ұзынлығы χ ның ұзынлығындай болған шашыраған (дифракцияға ушыраған) толқынның толқын векторы. Кинематикалық теориядағыдай мына аңлатпаны жазамыз:

$$\chi' = \chi + g + s. \quad (50)$$

Бул аңлатпада s арқалы Брэгг аўхалынан аўысуўды анықлайтуғын киши вектор.



8-сүүрет.

Кристалдағы колонка ишинде тарқалыушы туўры түсиўши q_0 хәм дифракцияға ушыраған q_g толқынлары

Электронлардың дифракциясының кинематикалық теориясында түсиўши нурдың амплитудасы q_0 турақлы шама деп есапланады. Бирақ кристалдың ишинде бул толқынның атомларда (атомлық тегисликлерде) көп қайтара шашырағаны себепли бул шаманы да, диракцияға ушыраған толқынның амплитудасы болған q_g шамасын да турақлы деп есаплай алмаймыз. Олар кристалдың тереңлиги z ке байланысly өзгереди (кемейеди, 8-сүүретти қараңыз).

Әлбетте фольгадағы (изертленетуғын жуқа кристаллық денедеги) атомлар түсиўши толкында да, дифракцияға ушыраған толқынды да барлық бағытларда шашыратады.

Бирақ биз көпшилик бағытларда шашыраған толқынлардың интерференцияның салдарынан бір бирін сөндиретуғынлығын есапқа аламыз (Френельдің ярым дәуірлік зоналарын еске түсіреміз.). Биз екі бағыттың бар екенлігін хәм усы бағытларда толқынлардың бір бирін күшейтетуғынлығын билеміз. Олардың бириншиси туұры бағытта тарқалатуғын нурлар, бул нурлар $\chi \rightarrow \chi, \chi' \rightarrow \chi'$ бағытларда фазалас (бирдей фазада) тарқалады. Екиншиси Брэгг мүйешинде тарқалатуғын нурлар, яғный $\chi \rightarrow \chi', \chi' \rightarrow \chi$ нурлары бір бири менен s шамасының мәнісли байланыссы фазада болады. Сонлықтан дифракцияға ушыраған толқынның қалыңлығы dz болған кристалл арқалы өткендегі өсими dq_g мынаған тең болады:

$$dq_g = \frac{\pi i}{\xi_0} q_g z + \frac{\pi i}{\xi_g} q_0 z \exp 2\pi i(\chi - \chi') \cdot r \, dz. \quad (51)$$

Бул аңлатпадағы $q_g z$ ке пропорционал болған биринши ағза туұры бағыттағы шашырауға үлес, ал екинши $q_0 z$ ке пропорционал хәм әдеттегідей фазалық көбейтүүшіге ийе хәм кинематикалық теорияда қолланылатуғын ағза Брэгг шашырауының қосқан үлесі болып табылады. Екі ағза да пластинканың қалыңлығы dz ке пропорционал хәм екі ағза да i көбейтүүшісіне ийе. Бул жағдай шашыраған толқынлардың амплитудасының пластинканың төменгі бетіндегі мәнісін алғанымызды, бул жерде олардың фазасының туұры түскен толқынның фазасынан 90° қа ажыралатуғынлығын билдиреди. (51)-теңлемедегі ξ_0 хәм ξ_g шамалары $f(0)$ хәм $f(2\theta)$ шамаларына кері пропорционал (бул шамалар атомлық шашырау амплитудалары болып табылады). Хәкыйкытында ξ_g шамасы экстинкциялық ұзынлық болып табылады. Бирақ биз хәзир ол шамаларды фундаменталлық физикалық турақлылар арқалы аңлатпаймыз. Енди туұры түсіуші толқын ушын (51)-аңлатпаға сәйкес аңлатпаны жазамыз:

$$dq_0 = \frac{\pi i}{\xi_0} q_0 z + \frac{\pi i}{\xi_g} q_g z \exp 2\pi i(\chi' - \chi) \cdot r \, dz. \quad (52)$$

(50)-аңлатпаны пайдаланып хәм s векторының z көшери бағытындағы вектор екенлігін есапқа алып биз (51)- хәм (52)- теңлемелерди

$$\begin{aligned} \frac{dq_0}{dz} &= \frac{\pi i}{\xi_0} q_0 + \frac{\pi i}{\xi_g} q_g \exp 2\pi i s z, \\ \frac{dq_g}{dz} &= \frac{\pi i}{\xi_0} q_g + \frac{\pi i}{\xi_g} q_0 \exp -2\pi i s z \end{aligned} \quad (53)$$

түрине алып келеміз.

q_0 хәм q_g амплитудаларын бір бири менен байланыстыратуғын бул биринши тәртіпті дифференциал теңлемелер жубы динамикалық теориядағы тийкарғы теңлемелер системасы деп есапланады.

(53)-теңлемелерди қурылысында бызықлықтар (дефектлер) болған (қурылысы жетілспеген) кристаллар ушын жеңіл түрде ұлыұмаластыруы мүмкін. Биз бул жерде кристаллардың қурылысындағы бузықлықтардың атомлардың дұрыс орынларынан R ауысуына алып келетуғынлығын еске түсіреміз (Басқа сөз бенен айтқанда кристалдағы бузықлықтар (структуралық дефектлер) кристалдың айырым областларының майысуына, яғный атомлардың ауысуына алып келеді). Усы жағдайды есапқа алсақ биз дефектлери бар кристаллар ушын толқынлар амплитудасы ушын мына теңлемелер системасын аламыз:

$$\begin{aligned} \frac{dq_0}{dz} &= \frac{\pi i}{\xi_0} q_0 + \frac{\pi i}{\xi_g} q_g \exp 2\pi i s z + 2\pi i g \cdot R, \\ \frac{dq_g}{dz} &= \frac{\pi i}{\xi_0} q_g + \frac{\pi i}{\xi_g} q_0 \exp -2\pi i s z - 2\pi i g \cdot R \end{aligned} \quad (54)$$

Биз жоқарыда келтирген жағдайлар кристал арқалы туұры өтүүші хәм кристалда шашыраған (дифракцияға ушыраған) толқынлардың амплитудаларының қандай жоллар менен есапланатуғынлығын көрсетеді. Соның менен бирге кристалдағы дефектлердің

электронлар толқынларының дифракциясы үшін тек атомлардың өз орнынан ауысыяы **R** менен ғана көринетуғынлығын аңғардық.

Айқын кристаллар үшін (53)- хәм (54)-теңлемлер системасын дәл шешиў хәзирги ўақытлары хеш кандай қыйыншылықты пайда етпейди. Себеби бизиң күнделикли турмысымызда кеңнен қолланылып жүрген «Mathematica 5» сыяқлы программалаў тиллери дифференциаллар теңлемелерин санлы түрде шешиўде бизге оғада жақсы имканиятларды жаратып береді.

Пайдаланылған әдебиятлар дизими

1. Р.Джеймс. Оптические принципы дифракции рентгеновских лучей. Перевод с англайского Г.А.Гольдера и М.П.Шаскольской. Под редакцией В.И.Ивероновой. Издательство Иностранной литературы. Москва. 1950. 572 с.
2. А.И.Китайгородский. Рентгеноструктурный анализ. Государственное издательство технико-теоретической литературы. Москва, Ленинград. 1950. 650 с.
3. В.И.Иверонова, Г.П.Ревкевич. Теория рассеяния рентгеновских лучей. Издательство Московского университета. Москва. 1972. 246 с.
4. З.Г.Пинскер. Рентгеновская кристаллооптика. Издательство «Наука». Москва. 1982. 392 с.
5. Рентгендифракционные и электронно-микроскопические методы анализа атомно-кристаллической структуры материалов. Методическое пособие. Под редакцией Шехтмана В.Ш. и Суворова Э.В.. Институт физики твердого тела РАН. Черноголовка 2000. 138 с.
6. П.Хирш, А.Хови, Р.Никелсон, Д.Пэшли, М.Уэлан. Электронная микроскопия тонких кристаллов. Издательство «Мир». Москва. 1968. 574 с.
7. Физическая энциклопедия. Том 1. Москва. «Советская энциклопедия». 1988. 704 с.
8. Л.Д.Ландау, Е.М.Лифшиц. Теоретическая физики. Том II.Теория поля. 8-издание. Издательство «Наука». Москва. 2001. 534 с.
9. Фундаментальные физические постоянные (1998). Успехи физических наук. Том 173. № 3. 2003.339-344.
10. C.G.Darvin. Phil. Mag. V. 27. P. 315, 675. 1914.
- 11.М.А.Кривоглаз. Дифракция рентгеновских лучей и нейтронов в неидеальных кристаллах. Издательство «Наукова думка». Киев. 1983. 408 с.
- 12.А.Гинье. Рентгенография кристаллов. Государственное издательство физико-математической литературы. Москва. 1961. 604 с.

2. Рентгенография, оның физикалық тийкарлары хәм айырым мәселелерди шешиў үшін қолланыў

Кирисиў

Кристаллар (металлар ямаса қатты денелер) рентгенографияның тийкарғы мәселеси рентген нурларының кристаллық денелердеги дифракциясының жәрдемінде структуралық анализдиң (таллаўдың) тийкарғы мәселесин шешиў болып табылады. Рентгенографиялық усыллар менен кристаллардың атомлық-кристаллық, субструктурасын анықлаў мәселеси менен рентгенструктуралық анализ (рентгендифракциялық анализ) шуғылланады. Ал структуралық анализдиң физикалық тийкары болса кристалдың, аморф денениң, суйықлықтың, хәм заттың басқа да

конденсацияланған халларындағы затлық объектінің (атомлар менен молекулалардың) микробөлистирилиуінің белгисіз болған функциясын, олардың жайласуындағы симметрияны, кристаллық пәнжеренің параметрлерін, фазалық құрамды хәм соған усаған жағдайларды эксперименталлық жоллар менен анықлау болып табылады. Кристаллардағы рентген нурларының шашырауы микротарқалыудың Фурье-анализинің дүзилиуіне алып келеди. Кери математикалық операция болған Фурье-синтездің жәрдемінде изленип атырған микротарқалыу функциясын табыу мүмкин.

Рентгенструктуралық анализдің жәрдемінде төмендегилерди анықлау мүмкин:

а) кристалдың атомлық-молекулалық құрылысының дәуірли системасын, оның ноқатлық хәм трансляциялық симметриясын, элементар қутышадағы атомлар менен молекулалардың координаталарын;

б) кристаллардағы дефектлерди - нол өлшемлі – ноқатлық дефектлер хәм олардың концентрациясы, бир өлшемлі дислокациялар (сүүрети хәм концентрациясы), дислокациялар этирапындағы кернеулер майданы дефекты (динамикалық хәм статикалық), еки өлшемлі дефектлер - жайласулар дефектлери менен кристаллық блоklar, егизлер арасындағы шегаралар, жайластыруу дефектлеринің концентрациялары), үш өлшемлі дефектлерди (поликристаллық денелердеги дәнешелер арасындағы шегаралар, бул шегаралардың сыртқы механикалық тәсирлердеги жылысулары хәм басқалар);

в) аморф денелер менен суйықлықлардағы жақын аралықларда орын алатуғын тәртиплер;

г) газ молекулаларының құрылысы;

д) затлардың фазалық құрамы.

Интернет тармағындағы Википедия универсаллық энциклопедиясында рентгенструктуралық анализ хаққында төмендегидей мағлыұматлар келтирилген:

Рентгенструктуралық анализ (рентгендифракциялық анализ) – затлардың құрылысын изертлеудің дифракциялық усулларының бири. Бул усулдың тийкарында рентген нурларының үш өлшемлі кристаллық пәнжерередеги дифракция қубылысы жатады.

Кристаллардағы рентген нурларының дифракциясы қубылысы Лауэ тәрәпинен ашылды, бул қубылысқа теориялық тийкарды Вульф-Брегглер берди (Вульф-Брегг шәрти). Затлардың құрылысын изертлеу усулы сыпатында рентгенструктуралық анализ Дебай (Peter Debye) хәм Шерер (Paul Scherrer) тәрәпинен ислеп шығылды.

Усул затлардың атомлық құрылысын анықлауға мүмкиншилик береди хәм ол өз ишине элементар қутышаның симметриясының кеңисликтеги топарын, оның өлшемлери менен формасын, соның менен бирге кристалдың симметриясының топарын анықлайды.

Рентгенструктуралық анализ эпийайылығы хәм салыстырмалы арзанға түсетуғынлығына байланысly усы күнлерге шекем затлардың құрылысын анықлайтуғын ең көп тарқалған усул болып табылады.

Усулдың (рентгенструктуралық анализдің) түрлери:

Лауэ усулы монокристаллар ушын қолланылады. Изертленетуғын кристаллық үлги рентген нурларының үзликсиз спектринің жиңишке дәстеси менен нурландырылады, дәсте менен кристалл арасындағы бағыт өзгермейди. Дифракцияға ушыраған нурланыудың мүйешлик тарқалыуы айырым дифракциялық дақлар түрине ийе (лауэграмма).

Рентгенгонометрия (рентген нурларының жәрдемінде кристаллардың құрылысына байланысly болған мүйешлердің мәнислерін өлшеу).

Дебай-Шеррер усулы поликристалларды хәм олардың араласпаларын изертлеу ушын қолланылады. Кристалға келип түсиуши монохромат рентген нурларының бағытына салыстырғанда үлгидеги кристаллардың тәртипсиз (хаотикалық) жайласулары дифракцияға ушыраған нурларды көшери үлгиге келип түсиуши рентген нурлары дәстеси болған каоссиаллық конуслардың семействосына айландырады. Олардың рентгенограмалардағы (фотопенкадағы ямаса дебаеграммадағы) сүүрети концентрлик

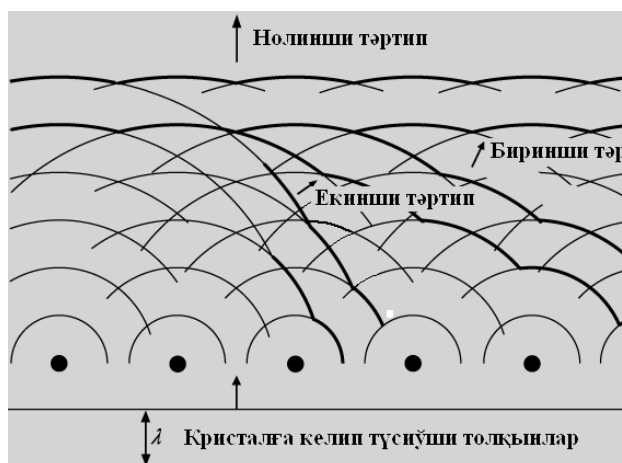
сақыйналар түрінде пайда болып, олардың интенсивліктері изертленип атырған заттың курамы хақында мағлыұматларды береді.

Кристаллар рентгенографиясының анализдің физикалық тийкарлары

1-§. Рентгенструктуралық анализ

Рентгеноструктуралық анализ затлардың атомлық-молекулалық курылысын изертлеу ұсылы болып табылады. Бул ұсылда кристаллық денелердің атомлық-кристаллық курылысын изертлеу тийкарынан рентген нурларының ұсындай кристалларда дифракцияға ұшырауы пайдаланылады. Солай етип рентгенструктуралық анализ кристаллық, аморф, сұйық хәм газ тәрезли денелердегі рентген толқынларының дифракциясын пайдаланады екен.

Рентген нурлары 1995-жылы немис физиги Рентген (немисше Wilhelm Conrad Röntgen) тәрепинен ашылды. Бул нурлардың тәбияты белгисиз болғанлықтан оларды дәслең X нурлары деп атады (раұажланған шет ел илимий әдебиятында бул термин хәзирге шекем пайдаланылады). Рентген нурларының электромагнит толқынларының бир түри екенлигин тексерип көриу ұшын М.Лауэ (von Laue M.) 1912-жылы өзиниң қараұында ислеуши илимий хызметкерлер Фридрих (Friedrich W.) хәм Книппингке (Knipping P.) сол нурларды кристаллар арқалы өткерип, алынған нәтижелердің қандай болатуғынлығын тексерип көриуди ұсынды [1]. Тәжирийбе күтилгендей нәтижелерди берди. Бул тәжирийбенің тийкарында әдеттеги оптика курсынан белгили болған дифракция кубылысы менен аналогия жатқан еди. Егер жақтылық дәстеси бир биринен жақтылық толқынларының ұзынлығындай қашықлықларда жайласқан саңлақлар арқалы өтсе экранда жақтылы хәм қараңғы областлардың избе-излигинен ибарат болған интерференциялық (биз «интерференциялық» хәм «дифракциялық» сөзлерин бир мәнисте қолланамыз) сүұрет алынады. Рентген нурлары жағдайында олардың толқын ұзынлықлары кристалдағы атомлар арасындағы қашықлықлар менен бирдей. Сонлықтан кристаллық денелерге рентген толқынлары келип түскенде фотопластинкада дифракциялық сүұрет пайда болады.

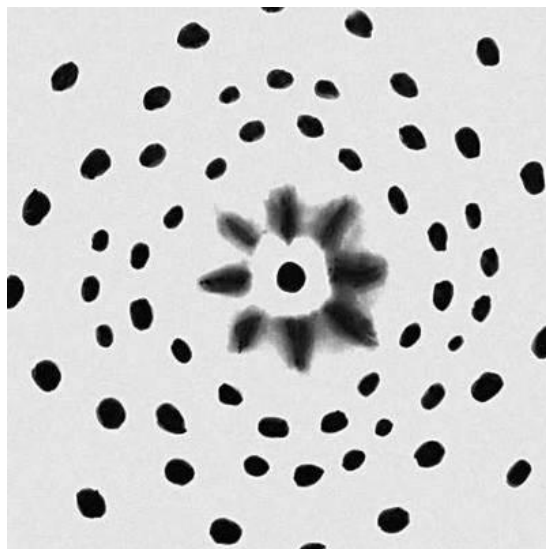


1-сүұрет.

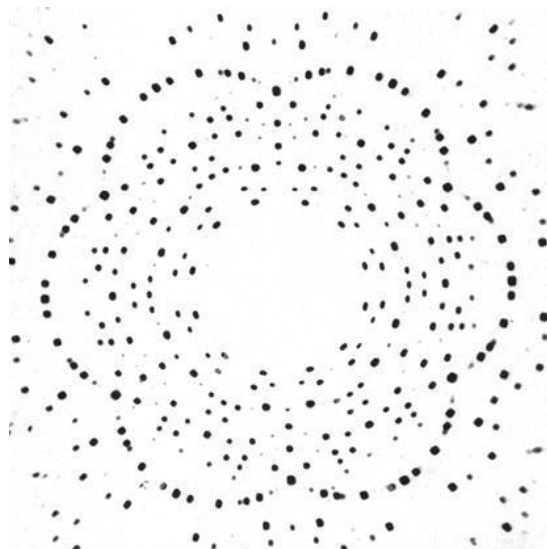
Рентген нурларының кристаллық денелердегі дифракциясы кубылысының мәнисин түсиндириуға арналған схема.

Дифракция кубылысының физикалық мәниси 1-сүұретте берилген. Бул жерде шашыратушы орайлар қатарына келип түсиуши тегис толқынлар сәўленген. Келип түсиуши толқынлардың тәсиринде ұсындай хәр бир орай өзинен сфералық толқынларды нурландырады, бул нурлар бир бири менен интерференцияланады, нәтижеде тек келип түсиуши толқынның бағытында емес, ал басқа бағытларда да тарқалатуғын толқын фронтлары пайда болады. Лауэ дифракциясы (лауэграмма) деп аталатуғын дифракциялық

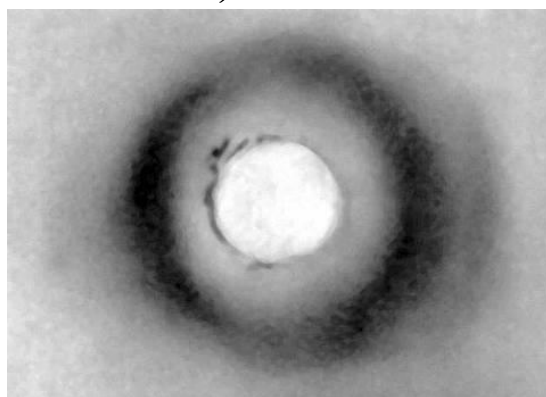
сүўрет жуқа кристаллық пластинка арқалы рентген нурлары өткенде пайда болады. Лауэграммаларға мысаллар 2-сүўретте берилген.



a)



b)



c)

2-сүўрет.

NaCl хәм берил кристалларының (a хәм b), суўдың лауэграммалары.

Берилл кристаллынан алынған [берилл кристаллының химиялық формуласы $Al_2Be_3Si_{16}O_{18}$ гексагоналлық кристаллар қатарына киреди, симметриясының ноқатлық топары 6/mmm (6/m 2/m 2/m), симметриясының кеңісліктегі топары P6/mcc (P6/m 2/c 2/c), кристаллық пәнжерениң турақлылары $a = 9.21\text{\AA}$ хәм $c = 9.19\text{\AA}$] лауэграммада алтыншы тәртіптеги симметрия көшери анық көринеди. Усы тийкарда рентгендифракциялық сүўрет кристалдың қурылысы ҳаққында әҳмийетли мағлыұматларға ийе болады деп айта аламыз. Бул қубылыс 1912-1913 жыллары әкели-балалы У. Брэгг хәм У. Брэгглер (баласы William Lawrence Bragg, әкеси William Henry Bragg) тәрәпинен муқиятлы түрде изертленди [2]. Усының нәтийжесинде олар кристаллардың рентгенструктуралық анализиниң бақалы эксперименталлық методын ислеп шықты. Олардың жұмыслары ҳәзирги заман рентгенструктуралық анализиниң раўажланыўының басламасы болып табылады. Компьютерлер менен биргеликте ислейтуғын жана рентген әсбап-үскенелери ушын қурамалы кристаллардағы атомлардың координаталарын анықлаў жұмыслары әдеттеги жұмысларға айланды.

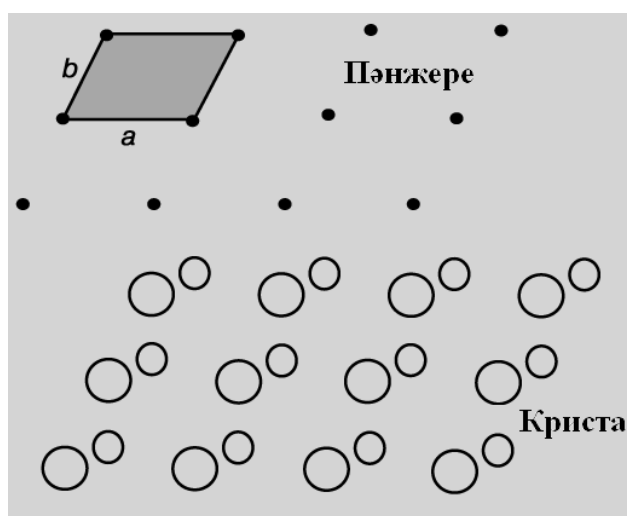
Рентгенструктуралық анализдиң жәрдеминде кристаллардың қурылысы ҳаққында қандай информацияларды алыў мүмкин деген сораў бериледи. Рентген нурлары электромагнит нурлары болып, бул нурлардың электр майданлары денелердеги атомлар хәм электронлар менен тәсирлесиўди. Электронлардың массалары атомлардың массаларынан әдеўир киши болғанлықтан рентген нурлары электронларда эффективли түрде шашырайды. Солай етип рентгенограмма электронлардың тарқалыўы ҳаққында мағлыұматларды береді. Нурланыў дифракцияға ушыраған бағытлары билип кристалдың

симметриясының типін немесе кристаллық классы, соның менен бірге кристаллық пәнжере тұрақтыларының мәнісін өлшеу мүмкін. Дифракциялық максимумдардың салыстырмалы интенсивліктері бойынша элементар қуыштардағы атомдардың координаталарын (иеленген орындарын) анықтау мүмкін.

Өзінің физикалық маңнасы бойынша дифракциялық сұрет кристалдағы электрондардың тарқалуының математикалық жақтан қайтадан түрлендірілген сұрети, яғни фурье-образы болып табылады. Демек дифракциялық сұрет атомдар арасындағы химиялық байланыстардың құрылысы жаққында да мағылұматларға ие деген сөз. Соның менен бірге бір дифракциялық максимумдағы интенсивліктің тарқалуы кристаллитлердің өлшемлері, пәнжеренің дефекттері, механикалық кернеулер хәм кристаллық құрылыстың басқа да өзгешеліктері жаққында мағылұматларға ие болады.

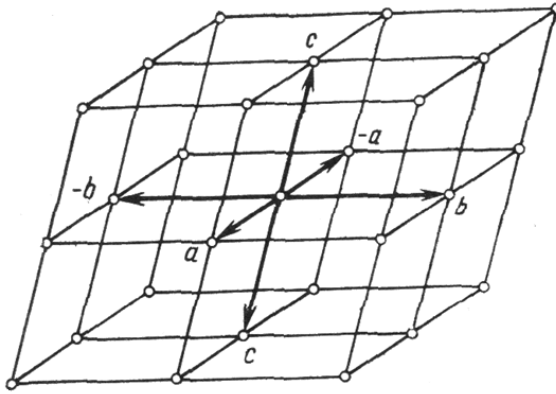
2-§. Кристаллық құрылыс хәм дифракция

Кристал бөлекшелердің үш өлшемлі дискрет дәуірлі көлемлік системасы болып табылады. Макроскопиялық жақтан бұл жағдай кристалдың бір текілігінде, олардың қаптал тәрептері арасындағы мүйешлердің ұсы кристал ұшын тән екенлігінде, соның менен бірге көпшілік жағдайларда кристаллық денелердің белгілі бір тегіслік бойынша сынатуғынлығында көрінеді. Микроскопиялық жақтан кристалды кристаллық пәнжере сыпатында тәріптей аламыз. Кристаллық пәнжерде нәкатлар (кристалды пайда етіуші бөлекшелердің салмақ орайлары) системасы дәуірлі түрде қайталаңды. Бұл дәуірліліккомпланар емес үш көшерлі трансляция хәм олар арасындағы үш мүйешпенен характерленеді. Кристал менен кристаллық пәнжере схема түрінде 3-сұретте келтірілген.



3-сұрет.
Кристал (төменде) хәм кристаллық пәнжере (жоқарыда).
Кристал айқын атомдардан немесе молекулалардан, ал пәнжере болса нәкатлардан (пәнжере түйінлерінен) тұрады.

Кристаллық пәнжерде алынған трансляциялық қуыша хәм трансляциялар дәстесі 4-сұретте келтірілген.

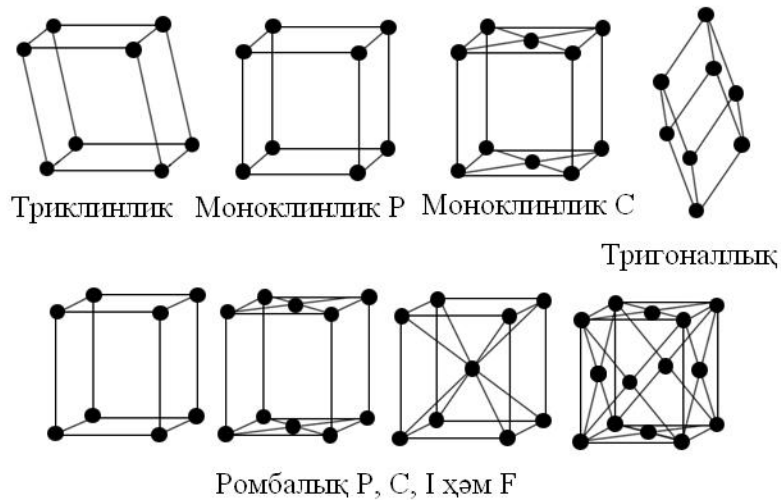


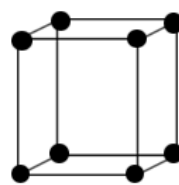
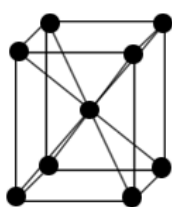
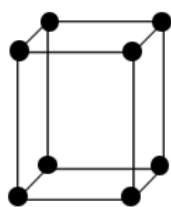
4-сүүрет.
Трансляциялык кутыша хэм трансляциялар дэстеси.

Шамасы бойынша бир бирине тең хэм бир бирине тең эмес трансляцияларды, бир бирине тең хэм тең эмес олар арасындагы мүйешлерди айырып барлық кристаллык пәнжерелерди жети сингонияға төмендегише бөлиў мүмкин:

Триклинлик	$a \neq b \neq c, \alpha \neq \beta \neq \gamma, \alpha \neq \gamma$
Моноклинлик	$a \neq b \neq c, \alpha = \gamma = 90^\circ, \beta \neq 90^\circ$
Ромбалық	$a \neq b \neq c, \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
Тригоналлык	$a = b = c, \alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$
Татрагоналлык	$a = b \neq c, \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
Гексагоналлык	$a = b \neq c, \alpha = \beta = 90^\circ, \gamma = 120^\circ$
Кублык	$a = b = c, \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$

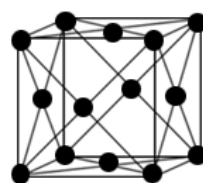
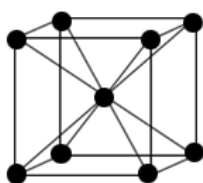
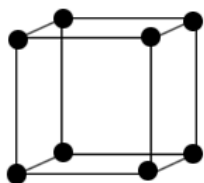
Егер трансляциялык симметрияны есапка алатуғын болсак, онда 14 трансляциялык топар пайда болады хэм олардың хэр бири Браве пәнжересин пайда етеди (5-сүүрет)[4].





Тетрагональдық Р хәм І

Гексагональдық



Кублық Р, І хәм F

5-сүүрет. Браве пәнжерелери.

Браве пәнжерелери бир ноқатты трансляциялық қайталау жолы менен алынатуғын ноқатлардың шексиз системасы болып табылады. Кристалдың қалеген қурылысы Бравениң 14 пәнжересиниң бириниң жәрдеминде көрсетилиуі мүмкин. Кристаллық денелер киши тезликлер менен пайда болғанда хәм өскенде ири монокристаллар пайда болады. Бундай монокристаллар сыпатында минералларды келтириуге болады. Кристаллар үлкенирек тезликлер менен өскенде поликристаллық конгломерат пайда болады. Бундай поликристаллық конгломератларға металлар менен қуймалар киреди. Кристалларға тән болған узақтан тәсирлесіу (узақтан тәртіплесіу) аморф денелер менен суйықлықларға өткенде жоғалады. Бундай денелерде (материалларда) атомлар менен молекулалардың жайласыуында тез жақыннан тәртіплесіу орын алады.

Браве пәнжересиндеги элементар қутышалардың радиусы векторын былайынша жазыуымыз мүмкин:

$$R = n_1 a_1 + n_2 a_2 + n_3 a_3.$$

Бул формулада a_1 , a_2 хәм a_3 аркалы кристаллық пәнжерередеги трансляциялыр, ал n_1 , n_2 хәм n_3 аркалы пүтин санлар белгиленген. Бул пүтин санлардың мәниси ушын шек қойылмағын. Сонлықтан биз элементар қутышалардың санының шексиз көп болатуғынлығын атап өтеміз.

Рентгенструктуралық анализдің артықмашлығы оның жоқары сайлап алыушылығында. Егер монохромат рентген нурларының дәстеси монокристалға қалеген бағытта түсетуғын болса, онда тап сол бағыттағы кристалдан шығыушы дәстени де бақлауға болады. Бул дәсте дифракцияға ушыраған дәсте емес. Дифракцияға ушыраған дәстелер кристаллографиялық көшерлерге хәм келип түсіуши рентген нурлары дәстесиниң бағытына салыстырғанда дискрет мәнистеги белгилі бир мүйешлерге бурылған болады. Бул шәрт кристаллар рентгенографиясындағы айланыу усылының тийкарында жатады. Бул усылда кристал белгилі бир көшердің дөгерегинде айланыста болады хәм дифракция қубылысы бақланатуғын бағытлар дәл анықланады.

Басқа рентгенографиялық эксперименттерде унталған кристаллар ямаса поликристаллар пайдаланылады. Бул усыл Дебай-Шерер усылы деп аталады (бир катар жағдайларда Дебай усылы деп те аталады). Бундай эксперименттерде айырым кристаллиттердің ориентацияларының үзликсиз спектрине ийе боламыз. Бирақ бақланыуы мүмкин болған интенсивлі дифракциялық дәстелерді белгилі бағытларға ийе кристаллиттер береді. Унталған кристаллар (поликристаллар) усылы ири монокристалларды өсириуді талап етпейді хәм сонлықтан Лауэ хәм айланыу усылларының алдында гейпара артықмашлықларға ийе болады. Лауэ усылында монокристал хәм рентген нурларының үзликсиз спектри қолланылады. Усының

салдарынан кристалдың өзі дифракциялық сұйреттің пайда болыуы үшін зәрүрли болған толқын ұзынлықларын сайлап алады.

Солай етип рентгенструктуралық анализдің тийкарғы формуласы Вульф-Брэгг теңлемеси болып табылады [5]:

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

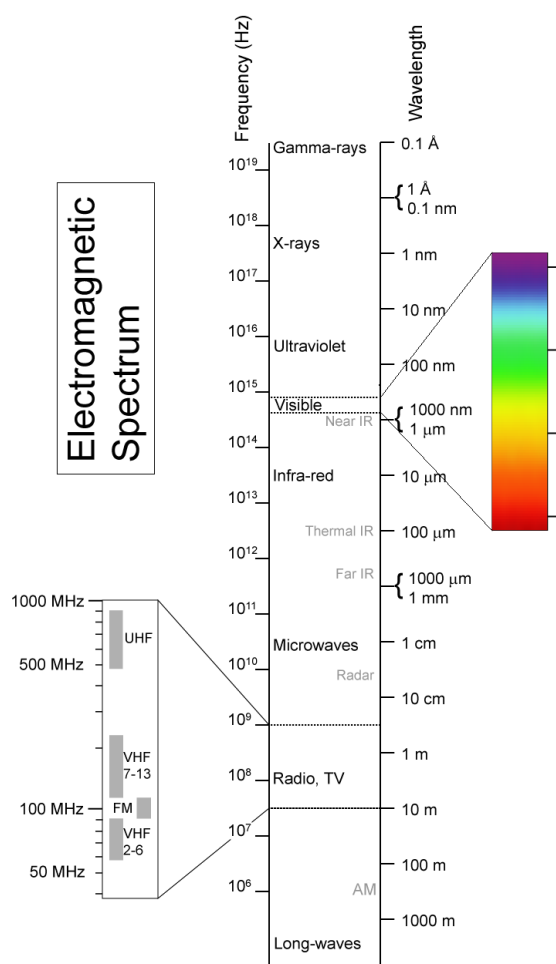
Бул формулада d аркалы кристаллографиялық тегисликлер арасындағы қашықлық, θ аркалы дифракциялық мүйеш, ал λ аркалы рентген толқынлары үшін толқын ұзынлығы белгиленген. Рентгенографиялық усылларда сол үш физикалық шамалардың биреуі турақлы етип алынады.

1-кесте.

Турақлы шама	Өзгермели шамалар	Рентгенографиялық усыл
θ	d хәм λ (d шамасының ҳар бир мәнисине анық λ сәйкес келеди)	Лауэ усылы
d	θ хәм λ	Дебай-Шерер усылы.
λ	θ хәм d	Айланыў (тербелиў) усылы.

Полихромат рентген нурланыуы Лауэ усылында дифракциялық сұйретти береді (λ шамасы өзгермели). Дебай-Шерер усылында үзликсиз полихромат нурланыў рентгенограммада фон пайда етеди, ал айланыў (тербелиў) усылында болса θ дифракциялық мүйешиниң өзгериў бағытында рефлекслерди созады. Сонлықтан Дебай-Шерер хәм айланыў (тербелиў) усылларында монохромат рентген нурларын пайдаланыў мақсетке сәйкес келеди.

Рентгенструктуралық анализ қатты денелерди атомлар кәдинде үйрениўдің ески усылларының бири болса да (рентгенструктуралық анализдің пайда болғанына дерлик 100 жыл болғанлығын еске алып өтеміз) оның усыллары раўажланып хәм жетилисип атыр. Мысалы ҳәзирги ўақытлары рентгенструктуралық анализ рентген нурларының қуўатлы дереклериниң бири болған синхротронлық нурланыўды пайдаланбақта. Синхротрон болса электронларды жүдә үлкен тезликлерге шекем тезлетиўши тезлеткиш болып табылады. Бундай үскене әдетте ядролық физикада қолланылады. Электронлар ультрафиолеттен рентген нурларына шекемги диапазонда электромагнит нурланыў пайда етеди. Бул қуўатлы (үлкен интенсивликке ийе) нурланыўдың жәрдемінде қатты денелердің қурылысы бойынша көп санлы мағлыўматларды алыў мүмкин [6].



6-сүрөт.
Рентген нурларының электромагнит толкынлары спектринде ийелеген орны (Internet тармағындагы Википедия универсаллык энциклопедиясынан алынган сүрөт).

Рентген нурларының электромагнит толкынлар спектриндеги ийелеген орны 6-сүрөттө келтирилген.

3-§. Рентген нурларының затлар менен тәсирлесиүйи

Затлар аркалы өткенде рентген нурларының бир бөлими кандай да бир дәрежеде затларда жутылады. Екинши бөлими затлар аркалы өтеди. Жутылган рентген нурларының муғдары затлардың қалыңлығына, рентген нурларының толқын узынлығына хәм затлардың жутыушылық қәсийетлерине байланысly. Рентген нурлары затлар аркалы өткенде төмендегидей еки процесске байланысly өзиниң энергиясын жоғалтады (хәлсирейди ямаса интенсивлиги кемейеди):

1. Хәкыйқый жутылуы. Бундай жағдайда рентген нурлары фотонларының энергиялары энергияның басқа түрлерине айланады;
2. Рентген нурларының затлардағы шашырауы. Бундай жағдайда затқа келип түсиуши рентген нурларының таркалыуы бағыты өзгереди.

Нурларды жутыушы затлардағы бир текли нурлардың хәлсиреуин санлы түрде аныклайтуғны нызамды былайынша келтирип шығаруы мүмкин: бир текли заттың бирдей қалыңлықларында нурланыудың бирдей муғдардағы энергиялары жутылады. Егер затқа келип түсиуши нурлардың интенсивлигин I_0 аркалы белгилесек, ал қалыңлығы t болған пластинка (қалыңдық) аркалы өткен нурдың интенсивлигин I_t аркалы белгилесек, онда биз излеп атырған нызамды былайынша жаза аламыз:

$$dI \sim -I_0 dx,$$

$$dI = -\mu I_0 dx,$$

$$\frac{dI}{I_0} = -\mu dx,$$

$$-\int_{I_0}^{I_t} \frac{dI}{I} = \mu \int_0^t dx, I_t = I_0 e^{-\mu t}$$

Бул аңлатпаларда μ арқалы жутыушы денениң физикалық қасиетлеринен ғәрезли болған пропорционаллық коэффициент белгиленген. Оның санлық мәнісi $\mu = \ln \frac{I_0}{I_{t=1}}$ шамасына (нурлар бир бирлик қалыңлық арқалы өткенде интенсивлигиниң салыстырмалы өзгерисиниң логарифмине) тең. Рентгенографияда μ коэффициентин хәлсиреудиң нурларды жутыудың толық сызықлық коэффициентини ямаса заттың массалық жутыу коэффициентини деп атайды [7]. Сызықлы жутылу коэффициентини μ ρ шамасына тең (ρ арқалы заттың тығызлығы белгиленген).

Айырым затлардың массалық жутылу коэффициентлериниң мәніслери төмендеги кестеде берилген.

Кесте. Айырым массалық жутылу коэффициентлериниң мәніслери $\frac{\mu}{\rho}$

(Комптон хәм Аллисонлар бойынша [8])

Элемент	Толқын ұзындығы, Å						
	0,200	0,498	0,632 <i>Mo Kβ</i>	0,711 <i>Mo Kα</i>	1,542 <i>Cu Kα</i>	1,948 <i>Fe Kα</i>	2,500
Na	0,225	1,18	2,30	3,30	32,1	61,3	128
Al	0,270	1,90	3,73	5,22	49,0	93,5	193
Fe	1,10	14,0	27,5	38,5	328	71,2	147
Cu	1,59	18,9	37,2	51,0	50,9	96,3	197
Ag	5,40	10,5	19,6	27,5	217	405	710
Au	4,40	48,5	87	120	213	385	

Биз жоқарыда рентген нурларының затлар менен тәсирлесіуін, кристаллық денелердеги олардың дифракциясының орын алатуғынлығын айтып өттік. Рентген нурларының кристаллық денелердеги дифракциясының тийкарында электромагнит толқынларының зарядланған бөлекшелердеги шашырауы кубылысы жатады. Электронлардың массасының атом ядролары массасына салыстырғанда онлаған мың есе киши болғанлықтан рентген нурлары тийкарынан атомлардағы электронларда шашырайды. Бундай шашырауларда атомлардағы электронлар еркин бөлекшелер сыпатында қатнасады. Усы жағдайларға байланысly рентген нурлары қатты денелердиң атомлық-кристаллық қурылысын изертлеудеги ең тийкаргы изертлеу қуралы болып табылады.

Рентген нурларының толқын ұзындықларының атомлардың сызықлық өлшемлери менен барабар болғанлықтан бул нурлардың кристаллардағы дифракциясы орын алады. Әлбетте кристаллық денелерде электронлардың да, нейтронлардың да дифракцияға ушырауы мүмкин. Бул кубылысларға тийкарланған затлардың атомлық-кристаллық қурылысын изертлеуши усылларды сәйкес электронография менен электронлық микроскопия хәм нейтронография деп атаймыз. Биринши жағдайда затлардың қурылысы электронлық микроскоптың жәрдемінде (электронлық микроскопта электронограммалар да, электронлық микроскопиялық сүүретлер де түсириледи) изертлениледи. Электронлар зарядланған бөлекшелер болғанлықтан электромагнит майданларында қозғалыс бағытын өзгертеди, яғный электрон дәстелери сынады. Ал рентген толқынлары болса фотонлардың ағымы сыпатында жүдә киши сыныу көрсеткішине ийе болады. Сонлықтан кристаллық денелердиң сүүретлерин онлаған-жүзлеген есе үлкейтетуғын рентген микроскопы болмайды. Бирақ бул жағдай рентгенографияның қатты денелер физикасында хәм физикалық материалтаныудағы тутқан орнының әхмийетин төменлетпейди.

Рентгенструктуралық анализ ең кең таркалған хәм терең изертленген атомлық-кристаллық қурылысты изертлеуі ұсылларының бири болып табылады.

Соңғы жигирма-отыз жыл ишинде рентгеноструктуралық анализге персоналлық компьютерлердің терең түрде кирип келиуі ыызамлы процесс болып табылады. Хәзирги ұақытлары компьютерлердің жәрдемінде рентгендифракциялық сүўретлер расшифровкаланады, көплеген рентгендифракциялық экспериментлер компьютерлердің жәрдемінде басқарылады (мысалы автомат дифрактометрлерде), есаплау жолы менен теориялық рентгендифракциялық сүўретлер, иймекликлер, рефлекслер алынады. Бул жағдайлардың барлығы да компьютерлерди рентгендифракциялық экспериментлерде кең түрде қолланыу мәселесин бизиң алдымызға қояды. Сонлықтан бул питкеріу қәнигелик жумысы биринши гезекте хәзирги заман рентгенографиясының тийкарғы ұсылларының (Лауэ, айланыу ямаса тербелиу, унталған кристаллар ямаса поликристаллар ұсылларының физикалық тийкарларын терең түрде үйрениу, хәзирги заман математикалық программалау тиллери болған Delphi 7.0 хәм Mathematica 7.0 тиллериниң жәрдемінде рентгенструктуралық анализдің әпиұайы мәселелерди шешиу, компьютерлик программа болған PowderCell 2.4 программасын дәслең атомлық-кристаллық қурылысы белгили болған кристаллар ұшын сынап көриу хәм алынған нәтижелер тийкарында $Gd_xBi_{1-x}FeO_3$ бирикпелериниң $x = 0,05; 0,1; 0,15; 0,2$ болған a хәм c шамаларының мәнислерин жокары дәлликте аныклау мақсетинде орынланды.

Кристалларды изертлеуде қолланылатуғын рентгенографиялық ұсыллар хәм компьютерлик программалар

5-§. Рентгенструктуралық анализ ұсыллары

Рентгенструктуралық анализде тийкарынан төмендеги ұсыллар қолланылады:

1. Лауэ ұсылы. Бул ұсылда полихромат рентген нурлары дәстеси қозғалмайтуғын монокристал үлгиге келип түседи. Үлгиниң өлшемлери әдетте 1-2 мм ден үлкен болмауы керек. Дифракциялық сүўрет қозғалмайтуғын фотопенкада түсириледи. Лауэ камерасы 7- a сүўретте келтирилген.

2. Айланыу (тербелиу) ұсылы. Монохромат рентген нурлары дәстеси базы бир кристаллографиялық көшер дөгерегинде айланыушы (ямаса тербелиушы) кристалға келип түседи. Сол кристаллографиялық бағыт камераның айланыу (тербелиу) бағытына дәл параллель етип алынады. Дифракциялық сүўрет цилиндр тәризли қозғалмайтуғын фотопенкада алынады. Айырым жағдайларда фотопенка үлги менен синхронлы рәуиште айланыс жасайды; айланыу ұсылының бундай түрин қатламлық сызықларды түсирип алыу ұсылы деп атайды (7- b сүўрет).

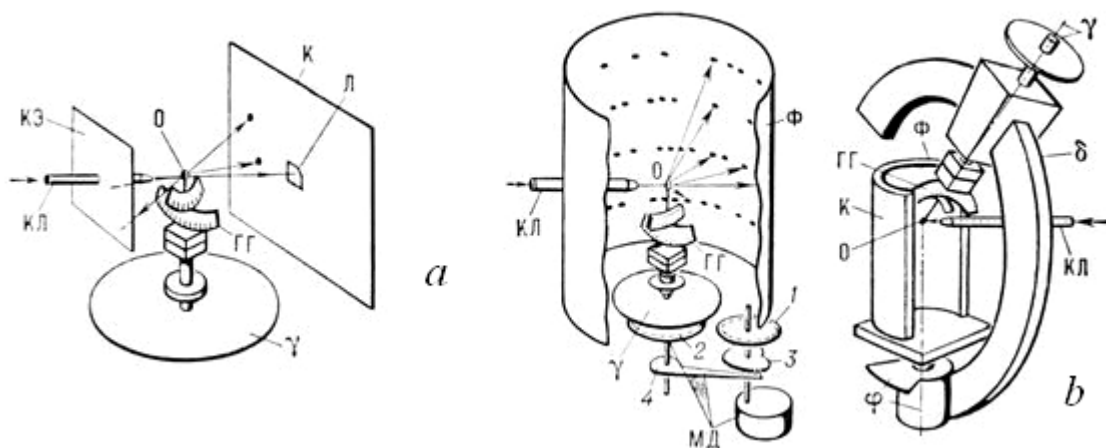
Айланыу ұсылында монохромат рентген нурлары емес, ал әдетте полихромат рентген нурлары пайдаланылады (себеби интенсивли монохромат рентген нурларын алыу аңсат емес). Фотопенкадағы дифракциялық сүўрет болса тийкарынан характеристикалық нурланыудың есабынан қәлиплеседи. Ал үзликсиз спектр болса рентген рефлекслериниң әтирапында белгили бир бағытлардағы фонды пайда етеди.

3. Унталған кристаллар (ямаса поликристаллар) ұсылы (Дебай-Шерер ұсылы). Бул ұсылда да монохромат рентген нурларын пайдаланыу керек. Изертленетуғын үлги поликристал ямаса унталған кристал болып табылады. Унталған кристалды шийше ийнеге рентген нурларын кем шашырататуғын желимниң жәрдемінде жабыстырады.

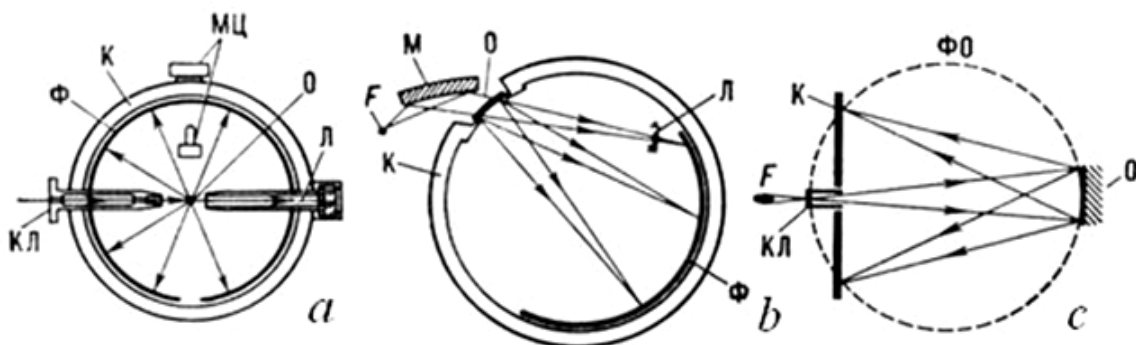
Лауэ ұсылы. Бул ұсыл кристаллардың атомлық-кристаллық қурылысын изертлеудиң ең басланғыш әтапында қолланылады. Лауэ ұсылының жәрдемінде кристаллардың сингониясы хәм Лауэ классы анықланады. Фридель ыызамы (Friedel and Bijvoet mates, қараңыз http://en.wikipedia.org/wiki/Laue_diffraction#Friedel_and_Bijvoet_mates) бойынша

лауэграмма (барлық рентгенограмма) жәрдеминде кристаллардағы симметрия орайының жоқ екенлигин анықлауға болмайды (барлық рентгенограммаларда симметрия орайы орын алады). Сонлықтан 32 нөқатлық топарға симметрия орайын қосыу олардың санын 11 ге шекем кемейтеди. Сонлықтан 11 Лауэ классы бар деп есаплайды.

Лауэ усылы монокристалларды, полидоменли кристалларды хәм ири кристаллитликүлгилерди изертлеу үшін қолланылады. Жоқарыда айтылып өтилгениндей бул усылда қозғалмайтуғын кристаллық үлгиге диаметри 1-2 мм болған үзликсиз спектрге ийе полихромат рентген нуры келип түседи.



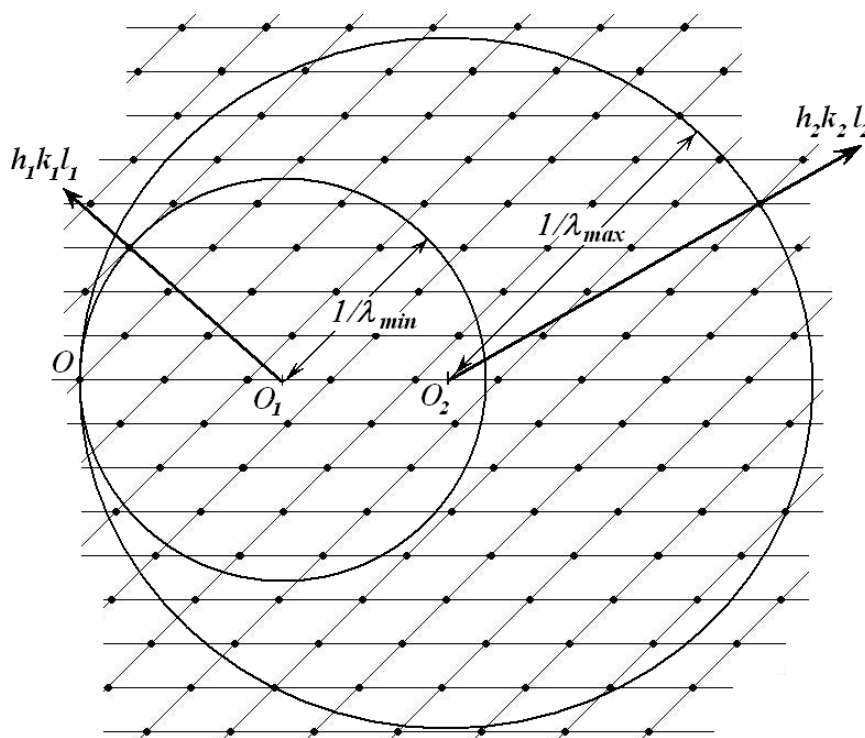
7-сүүрет. Монокристалларды изертлеу үшін арналған рентген камераларының тийкарғы схемалары: *a* — Лауэ усылы менен қозғалмайтуғын кристалларды изертлеу камерасы; *b* — айланыу (тербелиу) камерасы. Фотопенкада қатламлық сызықлардың бойында жайласқан дифракциялық максимумлар көринип тур; егер толық айланыуды белгили бир мүйешлик интервалдағы тербелиу менен алмастырсак (айланыу усылында изертленетуғын кристал камера көшери дөгерегинде айланыста болады хәм экспозиция барысында бир неше рет айланып шығады, ал тербелиу усылында кристал экспозиция барысында камера көшери дөгерегинде белгили бир мүйешлик интервалда ғана алдыға хәм кейинге бир неше рет бурылады), онда тербелиу интервалының мәнисине байланысly қатламлық сызықлардағы рефлекслер саны кемейеди. Үлгиниң айланыуы 1- хәм 2- тислердиң жәрдеминде әмелге асырылады, тербелис болса 3 пенен 4-рычаг жәрдеминде жүзеге келеди. *c* — элементар қутышаның формаларын хәм өлшемлерин анықлау камерасы. О — үлги; ГГ — үлги орналастырылатуғын гониометрлик дүзилес; γ — лимб хәм үлги орналастырылатуғын гониометрлик дүзилистиң бурылыу көшери; КЛ — коллиматор; К болса Ф фотопенкасы бар кассета; КЭ арқалы эпиграмма түсириу үшін арналған фотокассета көрсетилген (кери бағытта сүүретке алыу); МД арқалы үлгини айландыратуғын ямаса тербелетуғын механизм көрсетилген.; ϕ — лимб хәм үлгиниң тербелис көшери; δ — гониометрлик дүзилистиң көшерин доға түриндеги бағытлағыш.



8-сүрөт. Поликристалларды (ямаса унталган кристалларды) изертлеу ушын арналган рентген камераларының тийкарғы схемалары: a — Дебай камерасы; b — иймейтилген кристалл-монокроматорга ийе фокуслаушы камера, бул камера изертленетуғын үлги аркалы өтиуши нурларда, яғный киши дифракциялық мүйешлерде ислеиди; c — кери бағытта (үлкен дифракциялық мүйешлер) тегис кассетада сүрөт алатуғын фокуслаушы камера. Стрелкалар жәрдемінде үлгиге тууры келип түсетуғын хәм дифракцияға ушыраған нурлардың бағытлары көрсетилген. O — үлги; E — рентген трубкасының фокусы; M — кристалл-монокроматор; K — фотоленкасы бар кассета; L — пайдаланылмаған рентген нурын услап қалыушы; FO — фокусланыу шеңбери (дифракциялық максимумлар жайласатуғын шеңбер); KL — коллиматор; MC — үлгини орайға алып келиуге жәрдем беретуғын механизм.

Рентген трубкасынан шыққан ең киши толқын узынлығы трубкадағы анод пенен катод арасына түскен кернеудің мәнисинен ғәрезли. Хақыйқатында да $eU = h\nu = \hbar\omega = 2\pi\hbar\frac{c}{\lambda}$. Бул формулада e аркалы электронның заряды, U аркалы анодлық кернеудің мәниси, h аркалы Планк тураклысы ($h = 2\pi\hbar$), ν аркалы рентген толқынының жийилиги, ω аркалы толқынның циклик жийилиги, сарқалы жақтылықтың вакуумдеги тезлиги, ал λ аркалы рентген толқынының толқын узынлығы белгиленген. Буннан λ менен U арасындағы байланысты аңсат табамыз: $\lambda = \frac{2\pi\hbar c}{eU}$. Егер биз анодлық кернеуді киловольтлерде беретуғын, ал толқын узынлығын ангстремлерде есаплайтуғын болсақ, онда кеңнен мәлим болған $\lambda_{min} = \frac{12,3}{U}$ формуласына ийе боламыз. Бундай жағдайда анод кернеуиниң мәниси 36 киловольт болғанда (мыс аноды бар рентген трубкасында усындай кернеуде ислеу усынылады) $\lambda_{min} = 0,344 \text{ \AA}$ шамасына ийе боламыз. Дифракциялық сүрөтти пайда етиуге қатнасатуғын рентген толқынының максималлық узынлығын табыу ушын қәдди фонның қәдинен кемінде 5-10 % жоқары болған толқынның узынлығын аламыз. Мыс аноды (антикатоды) ушын бул толқынның узынлығы шама менен 3 ангстремнен үлкен емес. Усыған байланысly мыс анодында пайда болған (қозған) үзликсиз рентген спектрінде лауэграммаларды пайда етиу ушын узынлығы шама менен 0,3 ангстремнен 3 ангстремге шекемги узынлықтағы рентген толқынлары қатнасады деп есаплаймыз. $\lambda_{max} - \lambda_{min}$ спектрине радиуслары $\frac{1}{\lambda_{min}}$ шамасынан $\frac{1}{\lambda_{max}}$ шамасына шекемги Эвальд сфералары (Ewald's sphere, қараңыз http://en.wikipedia.org/wiki/Ewald%27s_sphere) арасында жайласқан кери пәнжере түйинлери қатнасады. Бул жағдай 8-сүрөтте келтирилген.

Қызығы соннан ибарат, лауэграммада пайда болған рефлекслердің саны $\lambda_{max} - \lambda_{min}$ айырмасынан ғәрезли. Усы ғәрезлиликти айкынластырыу ушын компьютердің жәрдемінде Delphi программалық тилинде теориялық лауэграммалар сериясы дүзилди. 10-асүрөтте $\lambda_{min} = 0,36 \text{ \AA}$ хәм $\lambda_{max} = 3 \text{ \AA}$. 10- b сүрөтте болса $\lambda_{min} = 0,036 \text{ \AA}$ хәм $\lambda_{max} = 30 \text{ \AA}$. Бул сүрөтлерде $\lambda_{max} - \lambda_{min}$ айырмасының лауэграммалардың рефлекслериниң пайда болыуына қандай тәсири тийгизетуғынлығы анық көринип тур.

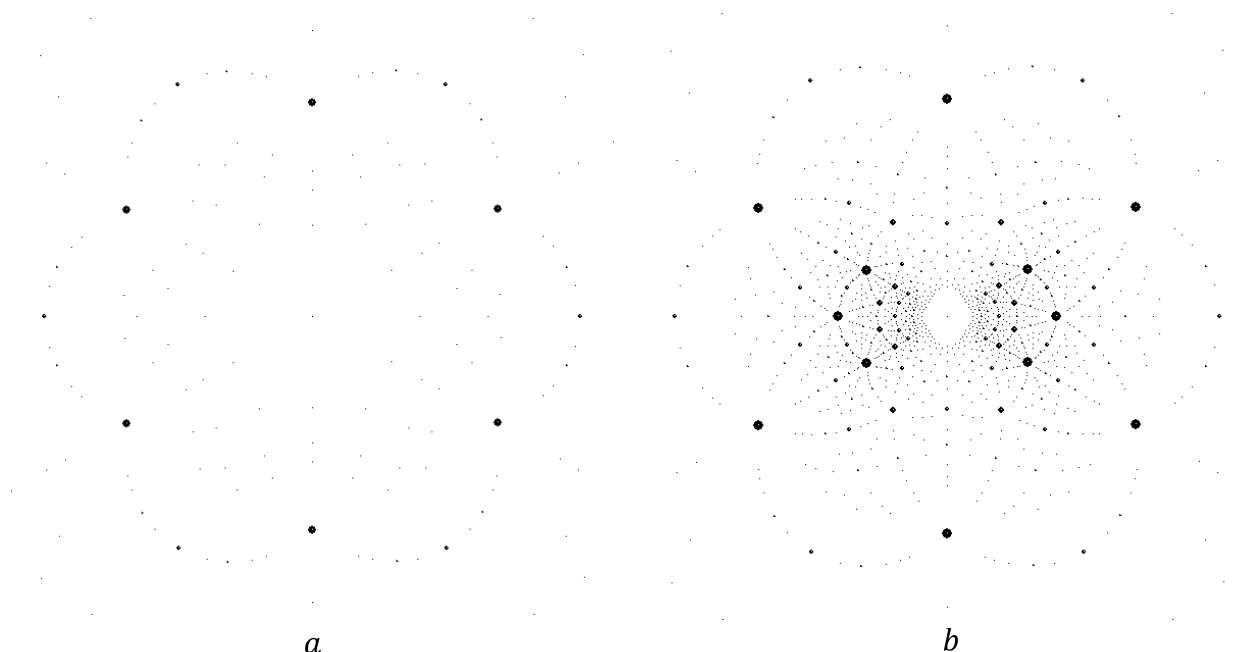


9-сүрөт.

Лауэграмманың пайда болууын сәулелендиретүгүн схема. Фотоленкадағы дифракциялық дақтарды радиустары $1/\lambda_{\min}$ хәм $1/\lambda_{\max}$ болған Эвальд сфералары арасында жайласқан кери пәнжерениң түйинлери береді. Вульф-Брэгг шәртиниң орынланыуы ушын кери пәнжерениң түйининиң Эвальд сферасының бети менен кесилисиуи керек. Сонлықтан хәр бир түйин ушын белгили бир радиуска ийе (яғный белгили бир тоқын узынлығына сәйкес келиуши) Эвальд сферасы сәйкес келеди. Демек хәм бир d (кристаллографиялық тегисликлер арасындағы кашықлық) өзине сәйкес толқын узынлығын сайлап алады деген сөз (1-кестени қараңыз). Соның менен бирге индекслери hkl , $2h2k2l$, $3h3k3l$, ... болған бир түйинлер туұрысының бойынша жайласқан түйинлер ушын дифракциялық мүйеш θ ның мәнислери бирдей болады хәм олардың барлығы да фотоленканың бир ноқатында дифракциялық дақ пайда етеди. Сонлықтан лауэграммалардағы рентген рефлекслери «реңли» болуы керек (яғный бир рефлексти пайда етиу ушын хәрқыйлы узынлықтағы толқынлар қатнасады).

Лауэграммалар түсириу ушын Лауэ камерасы (РКСО камерасы) пайдаланылады. РКСО камерасының фотосүүрети 7-сүүретте келтирилген.

Айланыу (тербелиу) усылы. Бул усыл кристаллардың атомлық-кристаллық қурылысын анықлаудағы тийкарғы усыллардың бири болып табылады. Айланыу (тербелиу) усылының жәрдемінде элементар қутышаның өлшемлерин, бир қутышаға сәйкес келиуши атомлардың ямаса молекулалардың санын, рентген нурларының өшиу нызамларын анықлап, кристаллардың симметриясының кеңисликтеги топарын анықлауға шекемги мәселелер шешиледи. Соның менен бир қатарда бул усылдың жәрдемінде кристаллардағы структуралық доменлердің қурылысы, структуралық доменлер арасындағы ориентациялық қатнастар, қатты денелердеги фазалық өтиулерди изертлеу мүмкин [9-12].



10-сүүрет. Лауэграммадағы рефлекслер санының хәм олардың интенсивлигинин $\lambda_{max} - \lambda_{min}$ айырмасынан ғәрезли екенлигин иллюстрациялаўшы есаплаў жолы менен алынған сүүретлер. *a* сүүретте $\lambda_{min} = 0,36 \text{ \AA}$ хәм $\lambda_{max} = 3 \text{ \AA}$. *b* сүүретте $\lambda_{min} = 0,036 \text{ \AA}$ хәм $\lambda_{max} = 30 \text{ \AA}$. Оң тәрәптеги

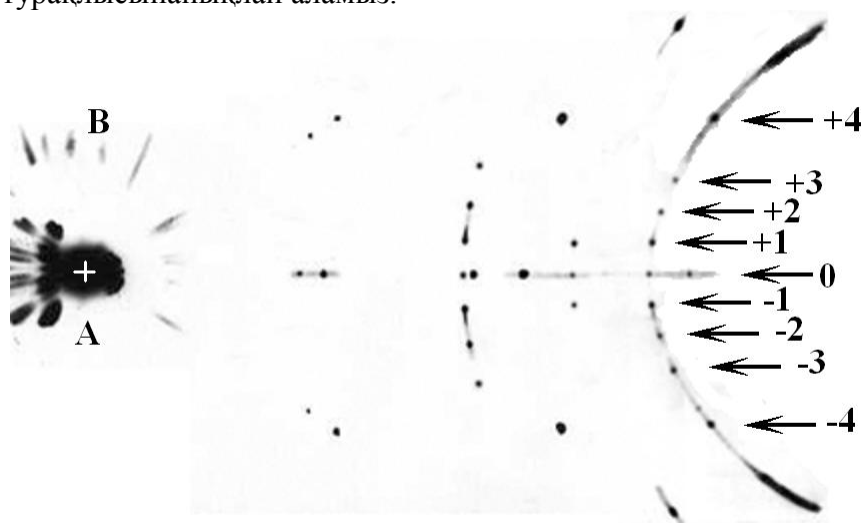
Рентгенограммаларды айланыў (тербелис) усылы менен түсиргенде кристал белгили бир кристаллографиялық бағыт этирапында айландырылады ямаса белгили бир мүйеш интервалында мүйешлик сканнерленеди (мысалы рентген камерасында 210 градустан 225 градус аралығында арман-берман бурылады). Кристалға монохромат рентген нурлары ямаса полихромат рентген нурлары түсириледі. Рентгенограммалардағы дифракциялық рефлекслер (дақлар) характеристикалық рентген нурларының дифракциясының салдарынан алынады.

Рентген трубкасынан шыққан (трубканың фокусының нокатлық болғаны мақсетке муўапық келеди) рентген нурлары узын коллиматор арқалы изертленетуғын кристалға келип түседі. Коллиматордың еки ушында диаметри $0,5\text{--}22$ миллиметрлик дөңгелек тесиклер болып, бул тесиклер кристаллық үлгиге дөңгелек формадағы рентген нурының түсиўинтәмийнилейди. Айланыў (тербелиў) рентгенограммаларын алмастан бурын гониометрликдүзилiske орналастырылған үлги Лауэ усылының жәрдеминде қатаң түрде бағытланады. Усындай алдын-ала өткерилген операциялар кристалдың $[100]$, $[010]$, $[001]$ ямаса басқа да бизиң ушын мақсетке муўапық болған бағытларын рентген камерасының айланыў (тербелиў) көшерине дәл параллель етип қойыўға мүмкиншилик береді. Айланыў рентгенограммалары әдетте диаметри $86,6$ мм болған цилиндр формасына ийе фотокассета ишиндеги фото пленкада пайда болады.

Жоқарыда айтылып өтилгениндей, айланыў рентгенограммасында рефлекслер қатламлық сызықлар деп аталатуғын сызықлар бойлап жайласады (11-сүүрет).

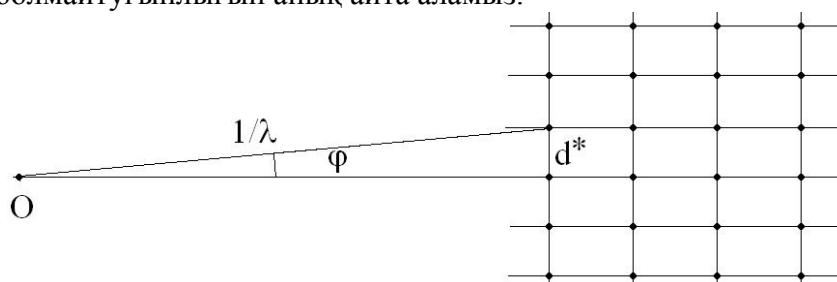
Нолинши қатламлықсызықтан биринши (ямаса минус биринши) катламлықсызыққа шекемги аралықты l арқалы белгилейик. Бундай жағдайда l аралығына кери пәнжеререде d^* сәйкес келеди (12-сүүрет). Анықлама бойынша туўры пәнжерередеги тегисликлер семействосы арасындағы қашықтық болған d шамасы $1/d^*$ шамасына тең. Олай болса $\frac{l}{R} = \tan \varphi$. Бул аңлатпада R арқалы цилиндр тәрзели рентген пленкасының радиусы белгиленген. Екинши тәрәптен $\frac{d^*}{R_E} = \tan \varphi = \frac{l}{R}$. Бул аңлатпада $R_E = \frac{1}{\lambda}$ арқалы Эвальд сферасының радиусы белгиленген. Бул аңлатпалардан $d = \frac{R}{l} \lambda$ формуласына ийе боламыз.

Солай етип айланыў (тербелис) рентгенограммалары жәрдемінде биз айланыў көшери бағытындағы кристаллық пәнжерениң трансляция векторының узынлығын – кристаллық пәнжерениң турақлысынаныққлай аламыз.



11-сүўрет. ZnS кристалларының 6Н политипинен алынған тербелис рентгенограммасының фотосүўрети. Стрелкалар менен қатламлық сызықлар, ал санлар менен олардың қатар саны белгиленген. А аркалы үлгиге туўры келип түскен рентген нурының изи, ал В аркалы рентген спектриниң полихромат бөлегиниң рентген пленкасында пайда еткен дақлары көрсетилген. Айланыў (тербелиў) көшери [0001] бағытына сәйкес келеди хәм ол вертикал бағытта. Сонлықтан сүўреттеги рентгенограмма кристалдың [0001] бағыттағы турақлысын анықлаўға мүмкиншилик береди.

Тербелис рентгенограммаларын индекслеў (яғный хәр бир рефлекске сәйкес келиўши кристаллографиялық тегисликлер семействосының кристаллографиялық индекслерин анықлаў) аркалы изертленип атырған кристаллық үлгиниң симметриясының кеңисликтеги топарын анықлаў мүмкин. Биз усы жерде рентгенограммаларда бәрқулла симметрия орайыныңқатнасуғынлығын еслетип өтемиз (Фридель нызамы). Сонлықтан рентгенографияда биз кристалда симметрия орайының бар ямаса жоқ екенлигин анықлай алмаймыз. Бундай жағдайда мәселениң бир мәнисли шешилиўи ушын кристалдың басқа да физикалық қасийетлери ҳаққындағы мағлыўматлардың зәрүрлиги пайда болады. Мысалы кристал пироэлектриклик қасийетке ийе болса симметрия орайының бундай кристалларда болмайтұғынлығын анық айта аламыз.



12-сүўрет. Айланыў (тербелиў) рентгенограммалары жәрдемінде айланыў (тербелиў) көшери бағытында кристаллық пәнжерениң трансляция векторының узынлығын анықлаў ушын сызылған схема.

Кристаллардың симметриясының кеңисликтеги топарын анықлаў кристаллардағы рентген нурларының өшиў нызамын тексерип көриў менен әмелге асырылады. Кеңисликтеги хәр бир топар белгили бир өшиў нызамы менен тәриплениди. Өшиў нызамы кристаллографиялық индекслердиң белгили бир топары ушын структуралық фактордың нолге тең екенлиги менен байланысly. Өшиў нызамы 230 топардың хәр бир ушын тән

хәм бул жағдай «Рентген кристаллографиясының халық аралық кестелерінде» толық түрде берілген[13].

Айланыў ямаса тербелиў усылы тийкарында алынған рентгенограммаларды индекслеў процессинде Бернал сеткасы кеңнен пайдаланылады [13-14]. Бернал сеткасын ислең шығыў бойынша рентгенструктуралық анализде мәселе де бар (81-санлы мәселе) [15]. Бирақ ҳазирги ўақытлары персоналлық компьютерлер жақсы раўажланған дәўирлерде Бернал сеткасын жаңаша қурыў мәселеси пүткиллей жаңа мәселелердиң бири болады. Бул мәселени шешиў менен шуғылланамыз.

Биринши гезекте кери пәнжере координаталарынан цилиндр тәризли фотопенкадағы (Бернал сеткасындағы) рефлекслердиң координаталары арасындағы байланысты қарап шығамыз. Кери пәнжерениң түйинлериниң координаталарын ζ хәм ξ аркалы белгилеймиз. Ал фотопенкадағы (Бернал сеткасындағы) сәйкес координаталарды x хәм y аркалы белгилейик. Бундай жағдайда төмендегидей формулаларға ийе боламыз:

$$y = R \frac{\zeta}{1 - \zeta^2},$$

$$x = R \cdot \text{ArcCos} \frac{2 - \zeta^2 - \xi^2}{2 \sqrt{1 - \zeta^2}}.$$

Бул аңлатпаларда R аркалы рентген камерасының радиусы белгиленген.

Тегис рентген пленкасы ушын жоқарыдағы формулалар

$$y = D \frac{2\zeta}{2 - \zeta^2 - \xi^2},$$

$$x = D \tan \text{ArcCos} \frac{2 - \zeta^2 - \xi^2}{2 \sqrt{1 - \zeta^2}}$$

түрине ийе болады.

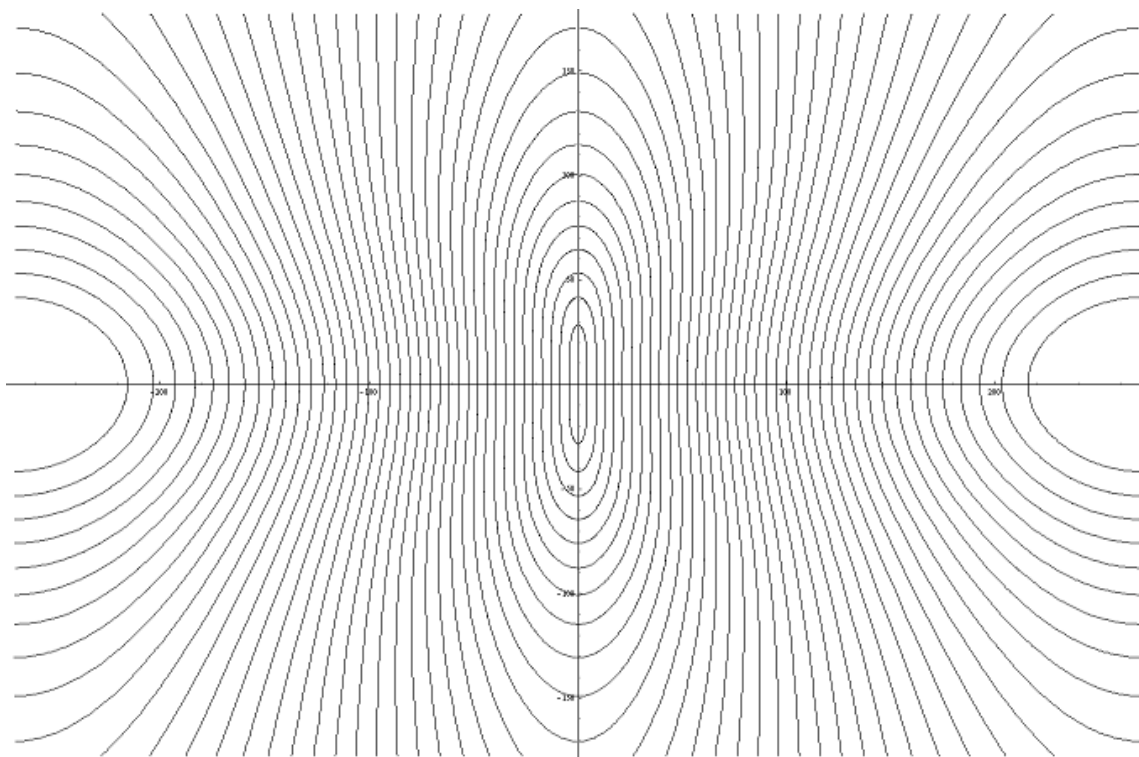
Жоқарыда келтирилген формулалар бойынша есаплаўлар хәм сәйкес графикти сызыў Mathematica 6 программалаў тили жәрдеминде орынланды. Цилиндр түриндеги фотопенка ушын алынған Бернал сеткасы 13-сүўретте, ал тегис фотопенкада ушын қурылған Бернал сеткасы 14-сүўретте келтирилген ($R = 86,6$ мм деп есапланды). Сетканың бир сызығын сызыў ушын арналған сәйкес математикалық программа

$R=86$; $x=0.05$; $\text{ParametricPlot}[\{ \{R \cdot \text{ArcCos}[(2-y^2-x^2)/2 \sqrt{1-y^2}] , R y/2 \sqrt{1-y^2} \}, \{y, -0.7, 0.7\}, \text{PlotStyle} \rightarrow \text{Directive}[\text{Opacity}[3], \text{Black}], \text{ImageSize} \rightarrow 1400]$

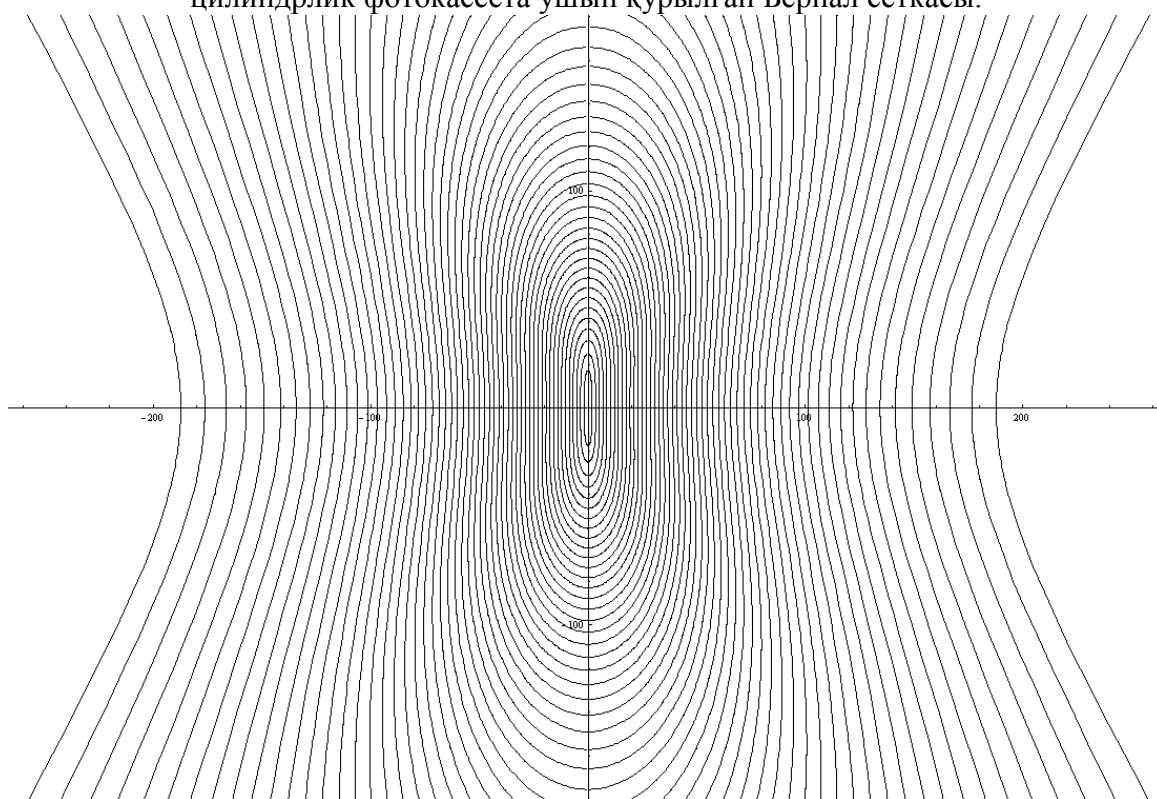
(цилиндрилик фотопенка ушын) хәм

$R=86$; $x=0.05$; $\text{ParametricPlot}[\{ \{R \cdot \tan[\text{ArcCos}[(2-y^2-(x)^2)/(2 \sqrt{1-y^2})]] , R (2 y)/(2-y^2-(x1)^2) \}, \{y, -0.9, 0.9\}, \text{PlotStyle} \rightarrow \text{Directive}[\text{Opacity}[3], \text{Black}], \text{ImageSize} \rightarrow 1600]$

(тегис фотопенка ушын) түрине ийе болады. x бойынша адым 0,05 ке тең етип алынды.



13-сүрет. Персоналлық компьютерде Mathematica 6 программалау тили жәрдеминде цилиндрлік фотокассета үшін қурылған Бернал сеткасы.



14-сүрет. Персоналлық компьютерде Mathematica 6 программалау тили жәрдеминде тегис фотокассета үшін қурылған Бернал сеткасы.

Унталған кристаллар усылы (порошок усылы). Поликристаллық материалдарды ямаса унталған кристаллық затларды изертлейтуғын әдеттегі әпиұайы усылда үлгі рентген нурларының жиңишке дәстеси менен нурландырылады. Монохромат рентген нурларын алыу үлкен машқалаларды пайда ететуғын болғанлықтан басым көпшилик жағдайларда рентген трубкасынан шыққан полихромат рентген нурлары қолланылады.

Рентгенограммалардағы рефлекслер спектрдің характеристикалық нурларының дифракциясының есабынан қәлиплеседи, ал үзликсиз спектр рентген пленкасында тутас фон пайда етеди.

Поликристаллық материалларды ямаса унталған кристаллық затларды изертлейтуғын рентгенографиялық усылды Дебай-Шерер усылы деп атайды (рентгенографияның ең бириншилер қатарында пайда болған усылларының бири).

Дифракциялық сүүрет әдетте цилиндрлик бетке орнатылған ени киши болған рентген пленкасынатүсириледи хәм оны дебаеграмма деп атайды. Цилиндрдің орайында изертлениўшиүлги жайластырылады (8-сүүрет). Гейпара жағдайларда дебаеграмма тегис фотопленкаға да түсириледи.

Полликристаллардағы кристаллитлердің бағытлары, соның менен бирге унталған кристаллардағы майда кристаллардың бағытлары кеңисликте теңдей итималлық пенен тарқалған. Сонлықтан бундай үлгиге рентген нуры келип түскенде Вульф-Брэгг шәртин (дифракция шәртин) канаатландыратуғын жағдайда көплеген кристаллитлердің ямаса майда кристаллардың турыўы мүмкин. Бундай кристаллитлер өзине келип түскен нурларды конуслық бетте жайласқан бағытлар бойынша дифракцияға ушыратады хәм тегис фотопленкада бир дақ емес, ал дөңгелек дифракциялық рефлекс пайда болады. Бул дөңгелек рефлекснің радиусын r арқалы белгилейик. Үлги менен фотопленка арасындағы қашықлық R шамасына тең болсын. Бундай жағдайда $\frac{r}{R} = \tan 2\theta$ шамасына тең болады (θ арқалы дифракциялық мүйешнің мәниси белгиленген). Ал дифракциялық мүйеш θ болсын Вульф-Брэгг теңлемеси бойынша кристаллографиялық семействодағы тегисликлер арасындағы қашықлық d_{hkl} шамаларын анықлаўға мүмкиншилик береді.

Солай етип Дебай-Шерер усылында кристаллографиялық тегисликлер арасындағы қашықлықтар тиккелей анықланады екен. Егер бир сол тегисликлер арасындағы қашықлықтардың дизимин дүзетуғын болсақ хәм бул тегисликлер ушын кристаллографиялық индекслерди анықласақ, онда биз кристалдың симметриясының кеңисликтеги топары ҳаққында тиккелей гәп ете аламыз.

Дебай-Шерер усылының жәрдеимнде кристаллық пәнжере турақлыларының мәнисин дәл анықлаў мүмкиншилигине ийе боламыз. Ҳақыйқатында да Вульф-Брэгг теңлемесинен салыстырмалы қәтелик ушын

$$\frac{\Delta d}{d} = -\operatorname{ctg} \theta \cdot \Delta \theta + \frac{\Delta \lambda}{\lambda}$$

аңлатпасын аламыз. Әдетте $\Delta \lambda = 0$ деп қабыл етиледі. Дифракциялық мүйеш θ ның мәниси 90° қаумтылғанда бул салыстырмалы қәтеликтің мәниси нолге умтылады. Бирақ бундай үлкен дифракциялық мүйешлерде дифракциялық максимумларды алыў үлкен кыйыншылықтарды пайда етеди. Соның менен бирге бундай үлкен мүйешлерде Дебай сақыйналарының (рефлекслеринің) ени әдеуір үлкейеді. Сонлықтан Дебай-Шерер усылында кристаллық пәнжерениң турақлыларының мәнислерин дәл есаплаў ушын $\theta \rightarrow 90^\circ$ қа карай экстрополяциялайды.

Әмелде көпшилик жағдайларда Нельсон-Райл экстрополяциялық функциясы қолланылады:

$$F \theta = \frac{1}{2} \frac{\operatorname{Cos}^2 \theta}{\operatorname{Sin} \theta} + \frac{\operatorname{Cos}^2 \theta}{\theta}$$

Бул функция экстропляциядағыең жақсы сызықлылықты тәмийинлейди.

Биз төменде дебаеграммалардан емес, ал сәйкес дифрактограммалардан пайдаланамыз.

6-§. Элементар қутышалардың параметрлерин анықлаўға арналған компьютерлик программалар

Элементар қутышалардың параметрлері (турақлыларын) дәл анықлауға жәрдем беретұғын компьютерлік программалардың санын жүзден асрам деп айтыу мүмкін. Бул питкеріу жұмысында сол көп санлы компьютерлік программалар ишинде жұмыс ислеуге қолайлы хәм көп санлы әмелий функцияларға ийе PowderCell компьютерлік программасының 2.4 версиясын қараймыз. Бул программа Материалларды изертлеу хәм тексеріудің Федераллық Институты (Берлин қаласы) хызметкерлері докторлар Герт Нольце (Gert Nolze) хәм Вернер Краус (Werner Kraus) тәрәпинен ислеп шығылған. Бул программа кристаллық қурылыстар менен ислеуге арналған болып, поликристаллық үлгілер ушын сәйкес рентгенограммаларды хәм нейтронограммаларды есаплауға мүмкіншилик береді.

Кристалдың қабыл етилген моделинің хәм усы модель тийкарында өткерілген есаплаулардың дурыслығының критерийи экспериментте алынған рентгенограммаларға сәйкес келиуінде. Бул жағдай рентген нурларының кристаллардағы дифракциясын дәл өлшеуді (прецизиялық өлшеулерді) талап етеді. Эксперименталлық дифрактограмма менен теориялық рентгенограмма арасындағы айырма қабыл етилген хақыйқый структураның моделинің жарамсыз екенлигин көрсететуғын тийкарғы себеп болып табылады. Программа эксперименттің параметрлері болған пайдаланылған нурланыу, эксперименттің геометриясы, рентген нурларының аномаллық дисперсиясы, өзгермейтуғын хәм өзгертилетуғын саңлақлардың өлшемлері, рентген нурларының интенсивликлерінің хәр қыйлы коррекциялары, фонды есапқа алыу, нурланыу сызығының дублетлигин есапқа алыу хәм басқа да параметрлерді есапқа алыуға мүмкіншилик береді [14-15]

PowderCell программасының жәрдемінде төмендегидей мәселелерді шешиу мүмкін:

Структуралық мағлыұматлардың хәр қыйлы форматларын пайдаланыу мүмкін (ICSD, SHELX, POWDER CELL);

Симметрияның кеңисликтегі топарының 750 ден асрам болған дүзиліслерін пайдаланып кристаллық структураларды визуал түрде көрсетиу мүмкін;

Структураның (кеңисликтегі топардың) хәр қыйлы дүзиліслерін моноклинлик, орторомбалы хәм ромбоэдрлик сингониялар ушын бир түрден екінші түрге трансформациялау мүмкін;

Лауэ классларын хәм трансляциялық подгруппаларды генерациялауға мүмкіншилик береді. Бул симметрияның төменлеуі менен жүретугын фазалық өтиулерді, басқа да структуралық эффектлерді таллау ушын зор курал болып табылады;

Кристаллық қурылыстағы сайлап алынған атомның ямаса молекуланың айланыуы менен трансляциясын пайдаланып элементар қутышаның ишиндегі структураның вариациясын әмелге асыруу көзде тутылады;

Жоқарыдаға мәселелерді шешиу менен бир ўақытта сәйкес дифрактограмманы (унталған кристаллар ямаса поликристаллар дифрактограммасын) хәм нейтронограмманы показывать көрсетеді%

Дифракцияның хәр қыйлы шәртлері имитация қыла алады. Мысалы: нурланыу ушын толқын узынлығы, эксперименттің геометриясын, пайдаланылған саңлақлардың (диафрагмалардың) өлшемлерін, аномаллық шашырауды хәм басқа да параметрлерді өзгертиу мүмкін;

Хәр қыйлы свертка функциясын (дифракциялық максимумлардың хәр қыйлы болған профиллері) пайдаланыуға мүмкіншилик береді;

Теориялық (есаплау жоллары) жоллар менен алынған хәм экспериментте алынған рентгенограммаларды салыстырууға мүмкіншилик береді;

Кристаллық қурылыс пенен есапланған дифрактограммаларды хәр қыйлы графикалық форматларға экспортлай алады (мысалы WindowsMetafile, PostScript, POVRay),

Структураның манипуляциясы менен сәйкес дифрактограмма арасындағы өз-ара байланысты көрсетеді. Анимация ушын POV Ray программасын пайдаланыу мүмкін.

Басқа да Windows программаларға графика менен кестелерди өткеріу (экспортлау) үшін clip board тан пайдаланыуға мүмкіншілік береді;

PowderCell программасының толық тәріплемесі төменде берілген.

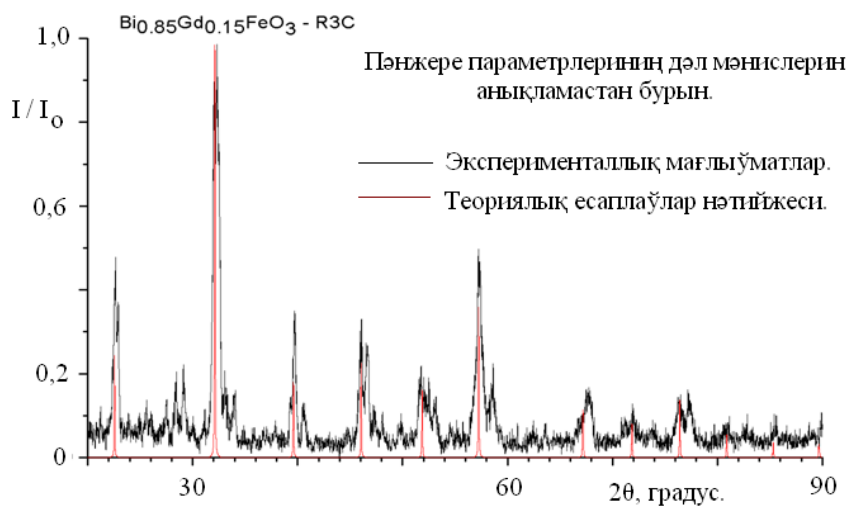
7-§. $Gd_xBi_{1-x}FeO_3$ бирикпесінің элементар қутышасының структуралық характеристикалары

Рентгенографияда элементар қутышаның параметрлерінің дәл мәнісін билиу әхмийетли орынды ийелейді. Себеби бул параметрлер хәр қыйлы затлардың дәл зоналық қурылысын, диэлектриклик параметрлерін есаплау үшін керекли болады.

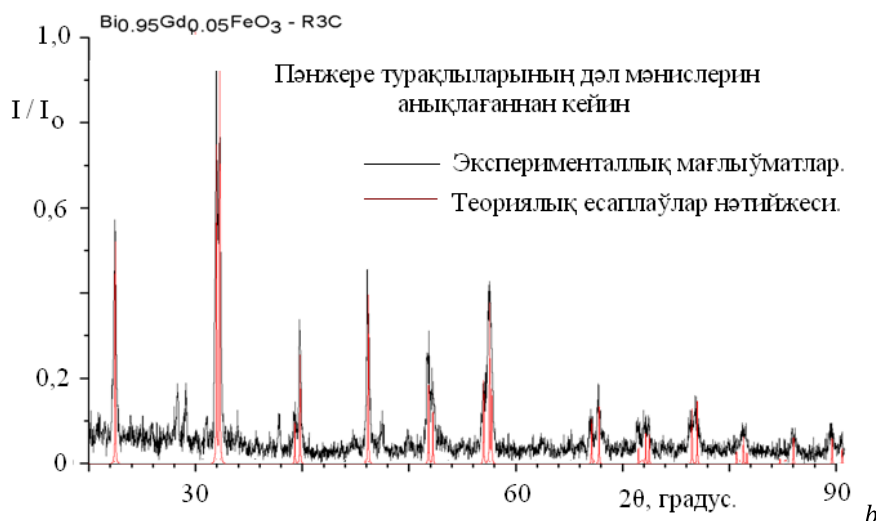
Дәслепп сынап көріу мақсетінде PowderCell программасын $NaCl$, ZnS хәм $ZnSe$ сыяқлы кристаллық пәнжерелерінің турақлылары дәл белгили болған кристаллар мысалында тексерип көрилди хәм эксперименталлық мағлыұматлар менен теориялық есаплаулар арасында толық сәйкесликтің бар екенлиги анықланды. Буннан кейин PowderCell қурылысы еле изертленбеген кристаллар, атап айтқанда $Gd_xBi_{1-x}FeO_3$ (концентрациялардың муғдарлары $x = 0.05, 0.1, 0.15, 0.2$ болған жағдайлар үшін) кристалларының атомлық-кристаллық қурылысын дәл анықлау мақсетінде пайдаланылды.

$Gd_xBi_{1-x}FeO_3$ кристаллары үшін 161-санлы симметрияның кеңісликтеги топарына сәйкес ($R3c$) рентгенограммалар есапланды. Бул кристаллық заттың синтезине байланыслы хәр қыйлы кеңісликтеги топарларға кириуі мүмкин.

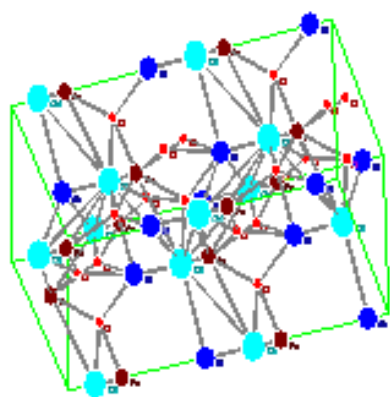
$Bi_{0.85}Gd_{0.15}FeO_3$ бирикпесі ($x = 0.15$) үшін дүзилген алынған теориялық дифрактограмманы хәм экспериментте алынған дифрактограмманы салыстыруу төмендеги нәтижелерди берди:



15-сүүрет.
 $Bi_{0.85}Gd_{0.15}FeO_3$
($x = 0.15$)
кристаллары үшін
пәнжере
параметрлерінің дәл
мәніслерін
анықламастан бұрынғы
(a) хәм дәл
анықлағаннан кейинги
нәтижелер (b).
төменги сүүрет

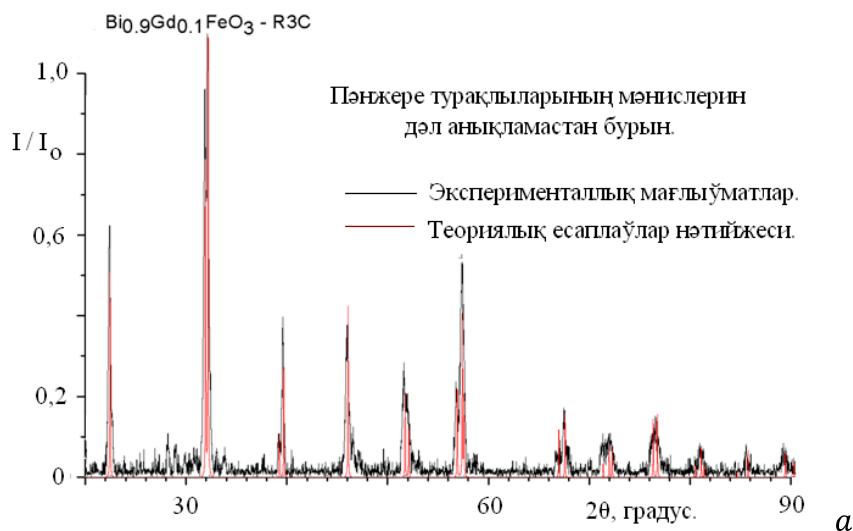


Есапланған хәм эксперименталлық дифрактограммалардың тийкарында алынған мағлыұматлар бойынша PowderCell 2.4 программасы жәрдеминде $Bi_{0.85}Gd_{0.15}FeO_3$ бирикпесиниң $x = 0.10$ концентрациясына сәйкес келиўши элементар қутышасының сүүрети алынды. Ол төмендеги 16-сүүретте берилген.

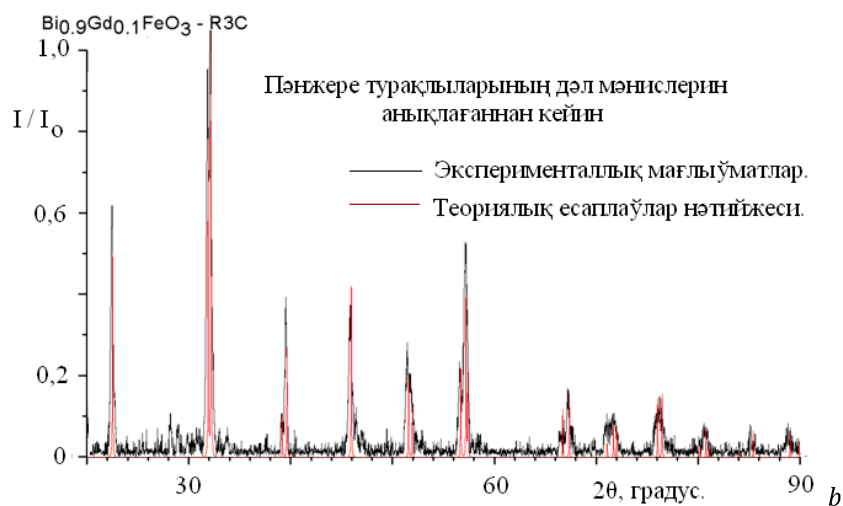


16-сүүрет.
 $Bi_{0.85}Gd_{0.15}FeO_3$
($x=0.15$) бирикпесиниң элементар қутышасы.

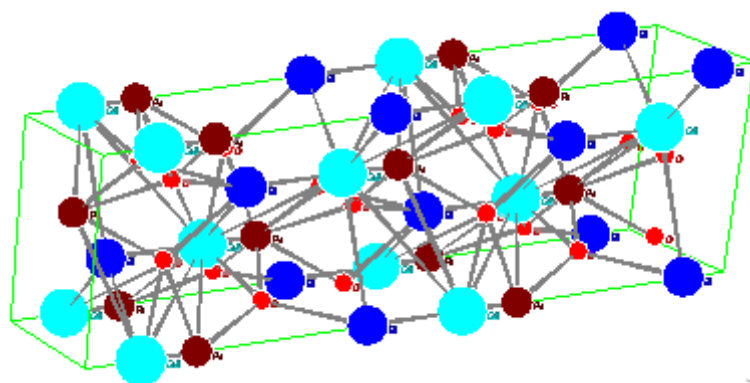
Енди $Bi_{0.9}Gd_{0.1}FeO_3$ бирикпесиниң $x = 0.10$ болған концентрациясы ушын алынған дифрактограммаларды салыстырў бойынша исленген жұмыслардың нәтижелерин көрсетеміз (18-сүүрет):



17-сүүрет.
 $Bi_{0.9}Gd_{0.1}FeO_3$
($x = 0.10$)
кристаллары ушын
пәнжере
параметрлериниң дәл
мәнісін
анықтамастан бұрынғы
(a) хәм дәл
анықтағаннан кейинги
нәтижелер (b).

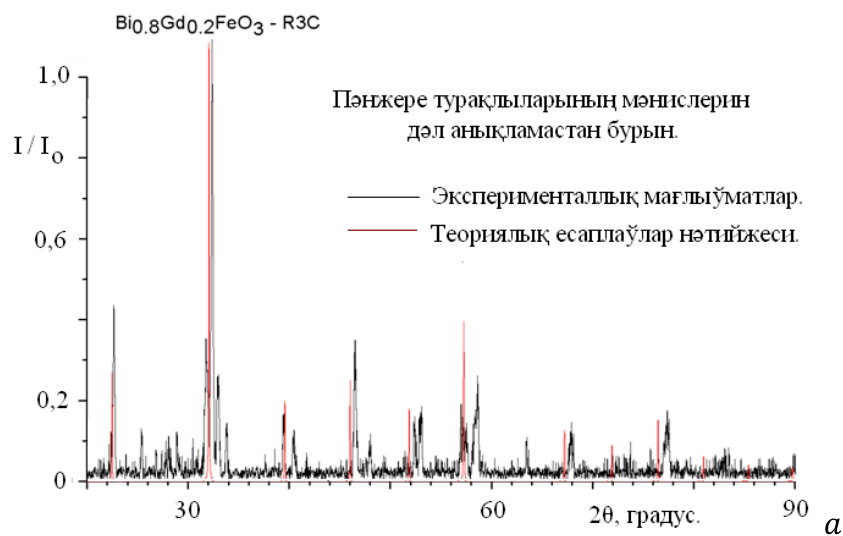


Сәйкес элементар қутыша 18-сұүретте берілген.

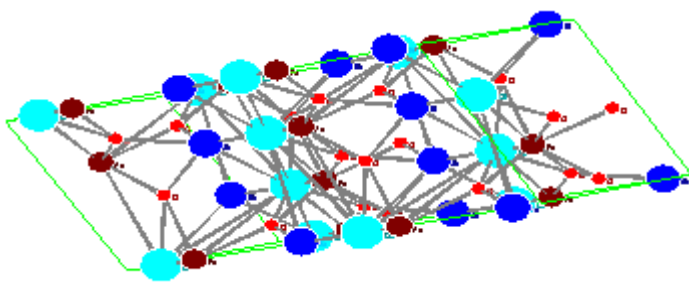


18-сұүрет.
 $Bi_{0,9}Gd_{0,1}FeO_3$
($x = 0.10$)
бирикпесинің элементар қутышасы.

Енді $x = 0,20$ болған концентрацияға ийе $Bi_{0,80}Gd_{0,20}FeO_3$ кристалларын изертлеудің барысында алынған нәтійжелерді келтіреміз (19-сұүрет):



Бұл нәтійжелер тийкарында $Bi_{0,80}Gd_{0,20}FeO_3$ бирикпесинің кристаллық пәнжересинің элементар қутышасының сұүрети салынды. Бұл 20-сұүретте келтірилген.



20-сүүрет.
 $Bi_{0,80}Gd_{0,20}FeO_3$
 (x=0.2) бирикпесиниң элементар
 қутышасы

$x = 0,05; 0,1; 0,15; 0,2$ концентрациялары ушын $Gd_xBi_{1-x}FeO_3$ бирикпесиниң кристаллық пәнжерениң тураклыларының PowderCell 2.4 программасының жәрдемінде алынған дәл мәнислерин төмендеги кесте түрінде беремиз:

$Gd_xBi_{1-x}FeO_3$	Әдебияттан алынған мағлыұматлар, пәнжере параметрлери, Å	Есаплаўлардың жәрдемінде дәллиги жоқарылатылған параметрлер, Å
$x = 0.05;$	$a = 5.56346; c = 13.81309;$	$a = 5.56345; c = 13.813;$
$x = 0.1;$	$a = 5.5600; c = 13.7827;$	$a = 5.5559; c = 13.7839;$
$x = 0.15;$	$a = 5.5676; c = 13.6512;$	$a = 5.5659; c = 13.6748;$
$x = 0.2;$	$a = 5.6160; c = 13.4543;$	$a = 5.5405; c = 13.4254;$

Пайдаланылған әдебиятлардың дизими

1. Friedrich W, Knipping P, von Laue M (1912). "Interferenz-Erscheinungen bei Röntgenstrahlen". *Sitzungsberichte der Mathematisch-Physikalischen Classe der Königlich-Bayerischen Akademie der Wissenschaften zu München* **1912**: 303.
2. Bragg WL (1912). "The Specular Reflexion of X-rays". *Nature* **90**: 410; Bragg WL (1913). "The Diffraction of Short Electromagnetic Waves by a Crystal". *Proceedings of the Cambridge Philosophical Society* **17**: 43; Bragg (1914). "Die Reflexion der Röntgenstrahlen". *Jahrbuch der Radioaktivität und Elektronik* **11**: 350.
3. Уманский Я.С., Скаков Ю.А., Иванов А.Н., Расторгуев Л.Н. Кристаллография, рентгенография и электронная микроскопия. М.: Металлургия, 1982, 632 с.
4. Bravais, A. (1850). "Mémoire sur les systèmes formés par les points distribués régulièrement sur un plan ou dans l'espace". *J. Ecole Polytech.* **19**: 1–128 (English: Memoir 1, Crystallographic Society of America, 1949.)
5. W.L. Bragg, "The Diffraction of Short Electromagnetic Waves by a Crystal", *Proceedings of the Cambridge Philosophical Society*, 17 (1913), 43–57.
6. Л.И. Миркин. Справочник по рентгеноструктурному анализу поликристаллов. Москва, Физматгиз, 1961. 863 с.
7. А. Гинье. Рентгенография кристаллов. Теория и практика. Перевод с французского. Государственное издательство физико-математической литературы. Москва. 1961. 604 с.
8. А. Комптон, С. Аллисон. Рентгеновские лучи. Теория и эксперимент. Перевод с английского. Ленинград-Москва. Гостехиздат. 1941. 672 с. (Compton A. H., Allison S. K. X-Rays in Theory and Experiment. D. Van Nostrand Company, Inc. 1967. 828 p.)
9. Б.А. Абдикамалов, М.П. Кулаков, В.Ш. Шехтман, С.З. Шмурак, С.И. Бредихин. Фазовый переход при пластической деформации кристаллов сернистого цинка. Физика твердого тела. Т. 18. № 11. 1976. С. 2468–2470.
10. В.Ш. Шехтман, И.М. Шмытько, В.В. Аристов, Б.А. Абдикамалов. Структурные изменения при одноосном сжатии полисинтетических кристаллов ZnS. Физика твердого тела. Т. 18. № 5. 1976. С. 1358–1361.

11. Б.А.Абдикамалов, В.Ф.Дегтярева, В.Ш.Шехтман. Структурные изменения в кристаллах ZnS и металлического тербия при воздействии механических напряжений и высоких давлений. Тезисы докладов XI Всесоюзного совещания по применению рентгеновских лучей для исследования материалов. М. «Наука». 1976. С. 102.
12. B.A.Abdikamalov. Thememoryeffectin Lead Ortovanadate Crystals (Эффект структурной памяти в кристаллах ортованадата свинца).Uzbek J. Phys2, 469-470 (2000).
13. International tables for X-ray crystallography.Volume A: Space-group symmetry. <http://it.iucr.org/services/purchase/>. International Tables for X-ray Crystallography: Symmetry Groups, Vol. I. Norman F. M. Henry and Kathleen Lonsdale, Eds. Birmingham, Eng.: Kynoch Press, 1952. (For the International Union of Crystallography.) 558 pp.
14. М.Бургер. Рентгеновская кристаллография. Перевод с английского В.П.Тарасовой и М.П.Шаскольской. Под редакцией М.М.Уманского. Государственное издательство иностранной литературы. Москва. 1948. 484 с.
15. М.М.Уманский, З.К.Золина. Сборник задач по рентгеноструктурному анализу. Издательство Московского университета. 1975. 232 с.
16. "POWDERCELL – a Programforthe Representationand Manipulationof Crystal Structuresand Calculationof the Resulting X-ray Powder Patterns" Kraus, W.; Nolze, G. J. Appl. Cryst.(1996).29, pp.301-303
17. Л.В. Мисак, А.С. Потужный Применение программы "Powder Cell " в физике твердого тела. Тезисы докладов VII-ой Республиканской научной конференции студентов и аспирантов "Новые математические методы и компьютерные технологии в проектировании, производстве и научных исследованиях". Гомель. 22-24 марта 2004. 110-112.

3. Мўйешлик сканнерлеў усылында жуқа монокристалл аркалы өтиўши рентген нурларының топографиялық сўўретиниң қәлиплесиўи

Кирисиў

Бизиң күнлеримиздеги қатты денелер физикасы менен физикалық материалтаныўдағы ең көзге түсерлик жағдай кристаллық денелердиң ҳақыйқый қурылысын тереңирек изертлеў болып табылады. Кристаллардың ҳақыйқый структурасы олардың тийкарғы физикалық ҳәм физикалық-технологиялық қәсийетлерин толығы менен анықлайды. Рентген нурларының ашылыўы, Жер жүзиндеги көп санлы мәмлекетлерди жемисли түрде жумыс ислеп атырған илимпазлардың мийнетлериниң нәтийжесинде кристаллық денелердиң қурылысын изертлеўдиң көп санлы усыллары ашылды. Бул усыллар дифракциялық сўўретлердиң қәлиплесиўиниң геометриясы, пайдаланылатуғын нурланыўдың спектрлери ҳәм пайдаланылыўы бойынша бир биринен айрылады.

Хәзирги заман рентгенографиясы қатты денелер физикасы менен физикалық материалтаныўдың ең зор куралларының бири болып табылады. Көплеген жулар даўамында кристаллық қурылыстың ҳәр қыйлы дефектлери болған дислокацияларды, суб дәнешелер арасындағы шегараларды, жайластырыў дефектлерин, ноқатлық дефектлерди үйрениў бойынша кең түрде жумыслар алып барылмақта. бирақ усы жағдайларға қарамастан рентгенографияны тереңирек изертлеў, жаңа әсбап үскенелердиң, солардың ишинде рентген нурларының ноқатлық дереклериниң пайда болыўы пайдаланылып жүрген рентгенографиялық усылларды жетилистириўдиң мүмкиншиликлериниң бар екенлигин көрсетеди. Усындай талқылаўлар кристаллық денелердеги рентген нурларының дифракциясының жаңа схемаларын усыныў мүмкиншиликлерин береді. Усы айтылғанларға байланысly бул питкеріў қәнигелик жумысы мўйешлик сканнерлеў, Фудживара (Takeo Fujiwara), Ланг (A.R.Lang) усылларына тийкарланған жаңа экспресс

(нәтижени тез уақытлар ишінде беретугын) рентгенопографиялық усылды усыныўға байланыслы орынланды. Бул топографиялық экспресс усылды кристалл арқалы өтиўге тийкарланған рентгенопографиялық мүйешлик сканнерлеў усылы деп атаймыз (зәрүрлиги болмаған жағдайларда биз текстти қурамаластырыў мақсетинде тек мүйешлик сканнерлеў усылы деп те атаймыз). Жумыстың әхмийети соннан ибарат, усы уақытларға шекем жаңа рентгенографиялық экспресс усыллар кристаллардың атомлық-кристаллық қураласын үйрениўде, қадағалаўа хәм оның өзгерислерин бақлаўда тийкарғы орынды ийелейди.

КРИСТАЛЛАР РЕНТГЕНОГРАФИЯСЫНДАҒЫ РЕНТГЕНОПОГРАФИЯЛЫҚ УСЫЛЛАР

1-§. Шульц хәм Фудживара усыллары

Полихроматлық Шульц (L.G.Schulz) усылы монокристаллық денелердің қурылысын изертлеў ушын қолланылады [1]. Бул усылды қолланғанда оның жақсы мүйешлик айыра алыўшылық қәбилетлиги айрықша орынды ийелейди. Бул усылда сүүреттің қәлиплесиўи толық түрде талланған. Топограммадағы кристаллық блоклар арасындағы шегараның кеңлигиниң усы блоклар арасындағы мүйеш пенен блоклар бағытлары арасындағы байланыс табылған [2].

1-сүүретте Шульц усылының схемасы келтирилген. Полихромат рентген нурларының ноқатлық дереги S кристалдың бетинен D қашықлықта жайласқан. Кристалдың бетине келип түскен рентген нурлары Вульф-Брегг шәрти деп аталатуғын

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

көпшиликке белгили шәрти тийкарында дифракцияға ушырайды. Бул формулада d арқалы кристаллографиялық тегисликлер арасындағы қашықлық, θ арқалы дифракциялық мүйеш, λ арқалы рентген нурларының толқын узынлығы, ал n арқалы 1, 2, ... мәнислерин қабыл етиўши пүтин сан белгиленген.

(1-1)-формула бойынша хәр бир λ толқын узынлығына кристалдың бетиндеги бир сызық бойынша шағылысыў (дифракция) сәйкес келеди. Фотопенка бетиндеги сүүрет усындай сызықлар кесиндилеринен турып, сол кесиндилер бойында толқын узынлығы турақлы мәниске ийе болады. Усындай сызықлардың теңлемеси [3] жумыста кеңнен тарқалыўшы рентген нурлары усылы ушын келтирилип шығарылған еди. Бул усылда фотопенка кристалдың бетине параллель рәўиште кристалдың бетинен A аралығында жайластырылады. Теңлеме мына түрге ийе:

$$R_{\theta, \varphi} = \frac{\cos \theta}{\cos \alpha} \frac{D}{\sin(\theta - \theta_1)} + \frac{A}{\sin(\theta + \theta_1)}. \quad (1-2)$$

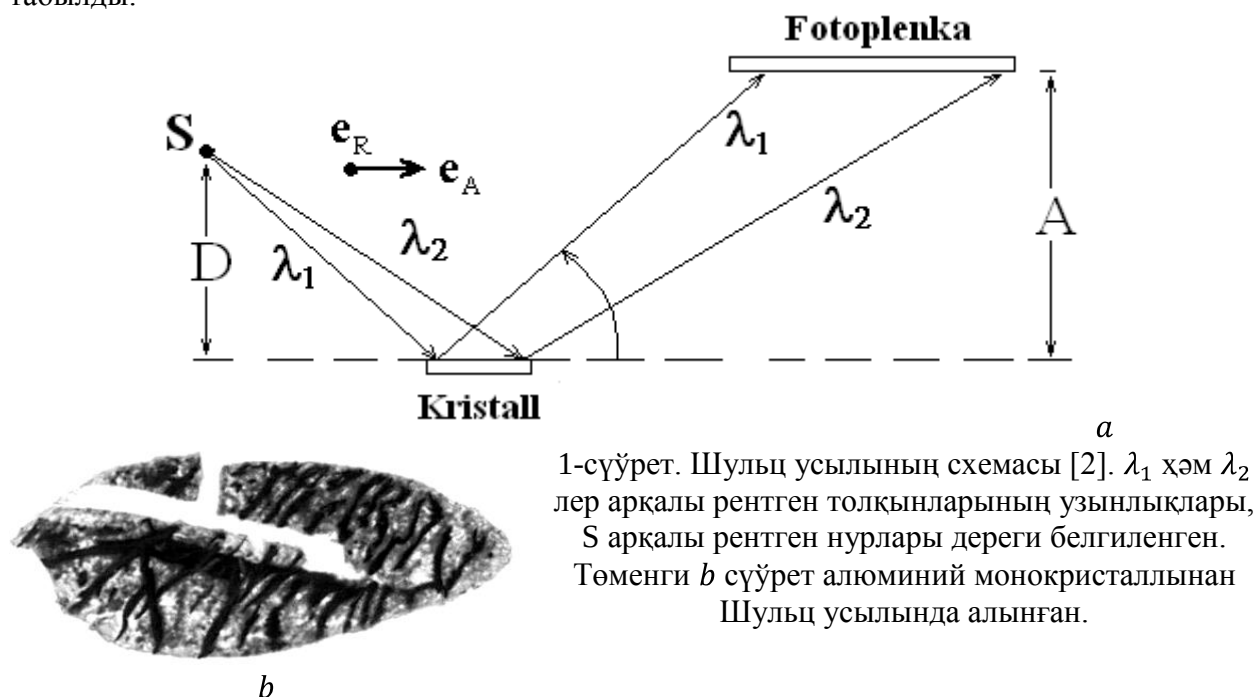
Бул теңлемедә $\theta_1 = \arcsin(\sin \alpha \cos \varphi)$, α арқалы шашыратыўшы тегисликлер менен кристалдың бети арасындағы мүйеш, $R_{\theta, \varphi}$ хәм φ арқалы фотопенка бетиндеги дифракциялық сызықтың поляр координаталары белгиленген. Координата басы болған O ноқаты пленка тегислиги менен шашыратыўшы тегисликлерге түсирилген нормалдың кесилисиў ноқатында жайласқан. φ мүйешиниң мәниси бул нормалдың пленкаға түсирилген проекциясынан баслап есапланады.

Шульц усылында кристалды зонасының көшери азимуталлық бағытта жайласқан тегисликлерден шашыраў алынатуғындай етип жайластырады.

Биз бул жерде азимуталлык хэм радиаллык бағытлар тууралы мыналарды атап өтөміз: фотоленкадагы радиаллык бағыт (e_R) деп кристалға келип түсүүши хэм кристалда шағылысқан бағытлар жататуғын тегисликтеги бағытты, ал азимуталлык (e_A) бағыт деп оған перпендикуляр болған бағытты түсінөміз. Фотоленкадагы радиаллык бағыт О координата басынан басланатуғын R θ, φ бағытына сәйкес келеди.

Әдетте кристалдың өлшемлери R θ, φ қашықтығына салыстырғанда киши. Егер кристалдың ориентациясын есапка алсақ хэм кишилиги бойынша екінши тәртіпли ағзаларды есапка алмасақ, онда (10-1)-формула тийкарында R θ, φ шамасын φ мүйешинен ғәрезсиз деп есаплай аламыз (әдетте $\varphi \ll 1$ хэм $\theta_1 = \alpha$), ал φ турақлы болып қалатуғын жағдайлардағы сызықлардың кесиндилери α мүйешиниң қәлеген мәнисиндеги шеңберлердиң кесиндилери болып табылады.

Усындай болжаулар орын алған жағдайлар ушын [2] ниң авторлары тәрөпинен кристалдың бетиниң элементлери менен фотоленкадағы сүүрети арасындағы байланыс табылды.



(1-2)-формуласын пайдаланып радиал хэм азимутал бағытлардағы усылдың үлкейтиү коэффицентери P_R хэм P_A шамаларын есаплаймыз. Усындай максетте сүүреттеги кесиндиниң кристалдағы сәйкес кесиндиниң узынлықларының қатнасын пайдаланамыз:

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

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

Бул формулаларда $R'_1 = \frac{D}{\sin \theta - \alpha}$, $R'_2 = \frac{A}{\sin \theta + \alpha}$, α арқалы шашыратыўшы тегисликлер менен үлгиниң бети арасындағы мүйеш белгиленген. $\alpha \neq 0$ болған жағдайларда P_R хэм P_A коэффицентлери хәр қыйлы хэм θ мүйешиниң үлкейиүи менен радиаллык бағытта өседи. Усының нәтийжесинде топограммадағы кристалдың сүүрети кристалдың өзиниң формасына усамайды (яғный рентгентопографиялык сүүрет майысқан болып шығады).

Солай етип Шульц усылында турақлы λ ге ийе шеңбердиң кесиндилери тәрөпинен қәлиплеседи екен. $\alpha \neq 0$ болған жағдайларда кристалдың бетиниң элементлериниң

формасы сүўретте майысқан. Сүўретте кристалдағы бағытлар арасындағы мүйешлер сақланбайды.

Шульц усылында кристаллық үлгиниң бир бирине салыстырғанда бурылған бөлеклери айырым сүўретлерди пайда етеди. Кристаллық блоklar арасындағы шегаралар жақтылы (егер қоңысылас блоklarдың сүўретлери бир бириниң үстине түсетуғын болса) ямаса қараңғы (егер қоңсылас блоklarдың сүўретлери бир биринен базы бир қашықлықта пайда болса) жолақлар түрінде пайда болады. [2] де келтирилген сүўреттиң пайда болыуын таллау усындай сүўретлер арасындағы қашықлықлар төмендегидей формулалар менен есапланатуғынлығын көрсетеди:

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

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

Бул аңлатпаларда b_R хәм b_A арқалы радиаллық хәм азимуталлық бағытлардағы сүўретлер арасындағы қашықлық, δ_R менен δ_A арқалы радиаллық хәм азимуталлық бағытлардағы кристаллық блоklar арасындағы мүйешлер белгиленген.

[2] ниң авторлары тәрәпинен Шульц усылында топографиялық сүўреттиң пайда болыуы толық талланған. Бул жумыста топограммадағы кристалдың бетиниң сүўрети бойынша кристаллық блоklarдың формаларын, өлшемлерин хәм бир бирине салыстырғанда қандай мүйешлерге бурылғанлығын анықлаудың мүмкин екенлиги көрсетилген. Субдәнешелер арасындағы мүйешлерди анықлау усылы усынылған. Басқа топографиятық усыллар Шульц усылынан топограмма алыудың геометриясы менен анықланатуғынлығы, усыған байланыслы кристалдың сызықлы хәм мүйешлик өлшемлерин анықлайтуғын формулалардың басқа түрге ийе болатуғынлығы атап өтилген. Фудживара, Берг-Барретт (W.Berg - C.S.Barrett [4]) хәм басқа да усылларды пайдаланғанда алынатуғын нәтижелерди жоқарыда келтирилген таллаулар тийкарында қайта көрип шығыудың зәрүрлиги дәлиленген.

Япониялы физик Т.Фудживара (T.Fujiwara) тәрәпинен усынылған рентгенопографиялық усылда жуқа монокристаллық үлги арқалы өтиуши рентген толқынларының дифракциясы пайдаланылады [5]. Бул усылда рентген нурларының ноқатлық дерегинен шыққан кең тарқалыушы нурлардың көшерине изертленилетуғын монокристаллық үлгини де, фотопенканы да перпендикуляр етип жайластырады. Бул жағдай 2-сүўретте келтирилген. Әлбетте кең тарқалыушы дәстениң көшериниң фотопенканы кесип өтиуи мүмкин емес. Себеби туўры түскен рентген нурлары фотопенкада қара дақты пайда етеди. Бул усыл рентгенографиядағы Лауэ усылын еске түсиреди. Айырма соннан ибарат, Лауэ усылында полихроматик рентген нурларының диаметри 1-2 мм болған тегис-параллель дәстеси пайдаланылады. Ал Фудживара усылында болса ноқатлық деректен барлық тәрәплерге тарқалыушы полихроматик рентген нурлары қолланылады. Сонлықтан фотопенкада ноқатлық емес Лауэ дақларынан туратуғын сүўрет пайда болады. Айырым дақларда характеристикалық рентген нурларының излериниң де көриниуи мүмкин (биз усынайын деп атырған усылда сол излер пайдаланылады). Хәр бир рефлекс (дақ) шашыратыушы тегисликлердиң бағытына сәйкес келиуши кристалдың қурылысының топографиялық сүўретин сәулелендиреди. Егер изертленип атырған монокристаллық үлги бир бирине салыстырғанда базы бир мүйешлерге бурылған субдәнешелерден (ямаса кристаллық блоklarдан) туратуғын болса, онда топограммадағы рефлекс (сүўрет) курамалы қурылысқа ийе болады хәм хәр бир блоктың сүўретлериниң қосындысынан турады. Бул дақлардың қурылысы бойынша субструктураның элементлериниң сызықлық өлшемлери хәм олар арасындағы бир бирине салыстырғандағы бурылыу мүйешлери анықланады. Егер бир уақытта бир неше

тегисликлерден топографиялық сүрөт алынууын болса, онда изертленип артырған кристалдағы субструктура элементеринин үш өлшемли кеңисликтеги жайласууы хақындағы толық информацияларға ийе болуу мүмкин.

Фудживара усылында азимуталлық бағыттағы блоklar арасындағы мүйешти аныклау ушын

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

формуласы қолланылады [6]. Ал радиаллық бағыт ушын мынадай аңлатпаға ийе боламыз:

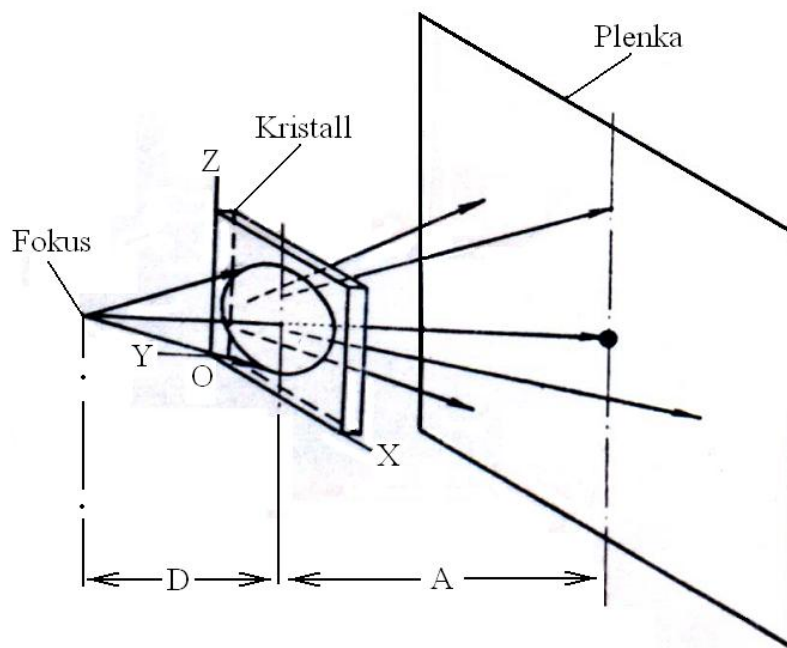
$$\delta_R = \frac{m_R (\cos 2\theta)^2}{A + D}. \quad (1-8)$$

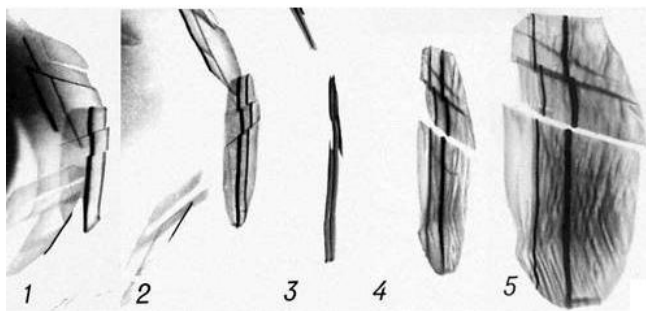
Бул аңлатпаларда m_A менен m_R арқалы хәр қыйлы субдәнешелерде шашыраған характеристикалық рентген нурларының бир биринен сәйкес азимуталлық хәм радиаллық бағытлардағы ауысуы белгиленген (3-сүрөтти қараңыз). γ_A хәм γ_R арқалы түсіуші дәстениң жыйнақлылық мүйеши. Бул белгилеуді түсиниу ушын $\gamma = \frac{f}{D}$ екенлигин атап өтеміз. Бул жерде f арқалы рентген трубкасының фокаллық дагының сызықлы өлшеми, ал D арқалы кристаллық үлги – фокус арасындағы қашықлық белгиленген.

Фудживара усылының жәрдемінде субструктура элементлеринин бир бирине салыстырғанда перпендикуляр болған үш көшер менен жасайтуғын мүйешлерин аныклауға мүмкиншилик береді. OZ көшери дөгерегіндеги субдәнешениң бурылуы мүйеши фотопенкадағы сәйкес сүрөтлер арасындағы шегаралық жолақтың радиаллық бағыттағы кеңлиги менен төмендеги формуланың жәрдемінде анықланады (3-сүрөтти қараңыз).

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

Бул мүйешлердин мәнислерин усы дифракциялық дақтағы характеристикалық рентген нурлары берген сызықлардың ауысуы бойынша да аныклауға болады [(1-8)-формула].





2-сүрөт. Фудживара усылы бойынша сүрөткө түсириү схемасы [6] (бул сүрөт <http://vslova.com.ua/word> сайтында берилген). Алюминий монокристаллының сүрөти төмөндө келтирилген.

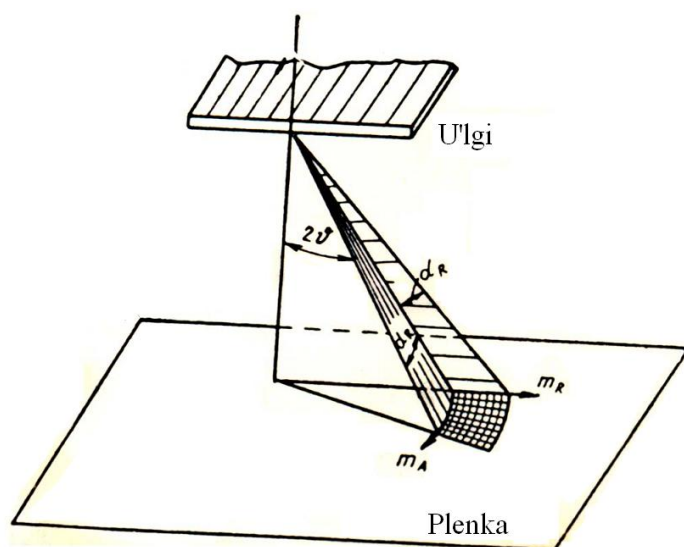
ОХ көшери дөгерегиндеги субдөнөшөлөрдүн бир биринен бурылыу мүйөши характеристикалык сызыктын аүйсүйүна ямаса пленканың вертикаллык диаметриндеги интерференциялык дактағы горизонт бағытындағы шегаралык жолақлардың пайда болууына алып келеди. Бул аүйсүйүдың шамасы бойынша ямаса сәйкес шегаралык областтын кеңлиги бойынша бурылыу мүйөшинин мәниси есапланады [(1-8)- хәм (1-9)-формулар].

Субдөнөшөлөрдүн ОУ көшери дөгерегиндеги бурылыулары фотопленкада радиал бағыттағы шегаралык жолақты пайда етеди. Бул жолақлардың кеңлиги бойынша бурылыу мүйөши анықланады [(1-7)-формула]. (1-7)-формула жәрдемінде алынған бурылыу мүйөшинин мәнисинен шашыратуышы тегисликтин ОZ (вертикал бағыттағы диаметрде жайласқан рефлекслер ушын) ямаса ОХ (горизонт бағытында жайласқан рефлекслер ушын) көшөринө перпендикуляр емес екенлигинен келип шығатуғын шаманы (дүзетиүди) алып таслау зәрүрлиги пайда болады.

Вертикаллык диаметрде жайласқан рефлекслер ушын бундай дүзетиүдин шамасы $\delta_z \sin \varphi$, ал горизонт бағытындағы диаметрде жайласқан дақлар ушын $\delta_x \sin \psi$. Бул дүзетиүлерде φ менен ψ аркалы шашыратуышы тегисликтердин ХОУ хәм ZOУ тегисликлеринө салыстырғандағы бурылған мүйөшлери белгиленген. δ_z пенен δ_x болса субдөнөшөлөрдүн сәйкес ОZ хәм ОХ көшөрлери дөгерегиндеги бурылыу мүйөшлери.

Солай етип Фудживара усылында кристаллык үлгинин бир ўақытта көп санлы топографиялык сүрөтлери алынады. Кристалдың сүрөтлерин таллаудын барысында субдөнөшөлөр арасындағы мүйөшлөр хәм сол дөнөшөлөрдүн өлшемлери анықланады.

Бул айтылғанлардың барлығы да субдөнөшөлөрдүн өлшемлери рентген трубкасының фокусының өлшеми болған f шамасынан үлкен болған жағдайларда ғана орынланады.



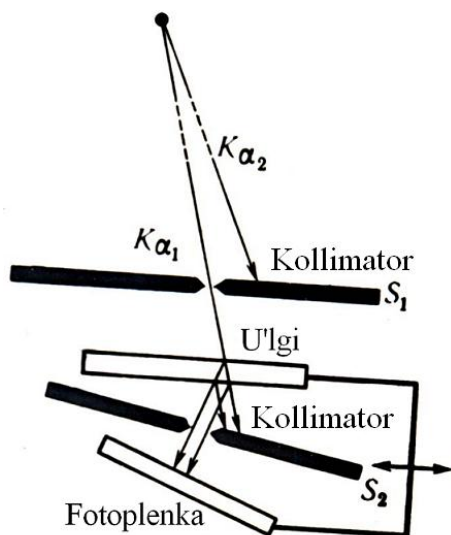
3-сүрөт.

Фудживара усылы менен сүрөткө түсириүдө кристаллык блоklar арасындағы бурылыу мүйөшин аныклау ушын арналған схема [6] (бул сүрөт

<http://vslova.com.ua/word> сайтында да берилген).

2-§. Ланг усылы

Кристаллар рентгенографиясында кең тарқалған хәм монохромат рентген нурлары пайдаланылатуғын Ланг усылы салыстырмалы жуқа кристаллардағы кристаллык курылыслардың дефектлерин үйрениу ушын қолланылады [7-8]. Бундай жуқа кристаллар ушын $\mu t < 1$ шәртиниң орынланыуы лазым. Бул теңсизликте μ арқалы кристалдың сызыклы жутуу коэффициенти, ал t арқалы оның қалыңлығы белгиленген. Бул усылда рентгенопографиялык сүүретке түсируу схемасы 4-сүүретте берилген. Сызыклы рентген нурлары дерегинен (4-сүүретте бул сызык схема тегислигине перпендикуляр) шыққан рентген нурлары шашыратуу аўхалына қойылған кристалға келип түседи. Брэгг (Брег) бағытында үлкен айыра алыушылыққа жетиу ушын нурланыудың тек $K\alpha_1$ кураушысы ғана пайдаланылады. Бул $K\alpha_1$ кураушысын спектрдиң басқа бөлимлеринен айырып алыу ушын рентген трубкасынан келиуши нурлар алдына S_1 саңлағын қояды. Бул саңлақтың кеңлигин сайлап алғанда рентген нурларының дәстесиниң жайылыу мүйеши $K\alpha_1$ менен $K\alpha_2$ дублетлери арасындағы қашықлықтан киши болыуы керек. Фотопенка алдындағы S_2 саңлағы болса тек дифракцияға ушыраған нурды ғанан өткереди хәм пленканы трубкадан тууры келип түсиуши рентген нурынан қорғайды. Кристалдың үлкен областынан топографиялык сүүрет алыу ушын үлги менен пленкаға усы пленканың бетине параллель бағытта қайталанбалы-илгерилемели қозғалыс (сканнерлеу) бериледи. Усының салдарынан кристалдың бетиниң үлкен бөлиминиң ямаса беттиң барлык бөлиминиң үзликсиз сүүрети алынады.



4-сүүрет.
Ланг усылы бойынша
рентгенопографиялык сүүрет алыудың
схемасы [9] (бул сүүрет
<http://vsleslova.com.ua/word> сайтында да
берилген).

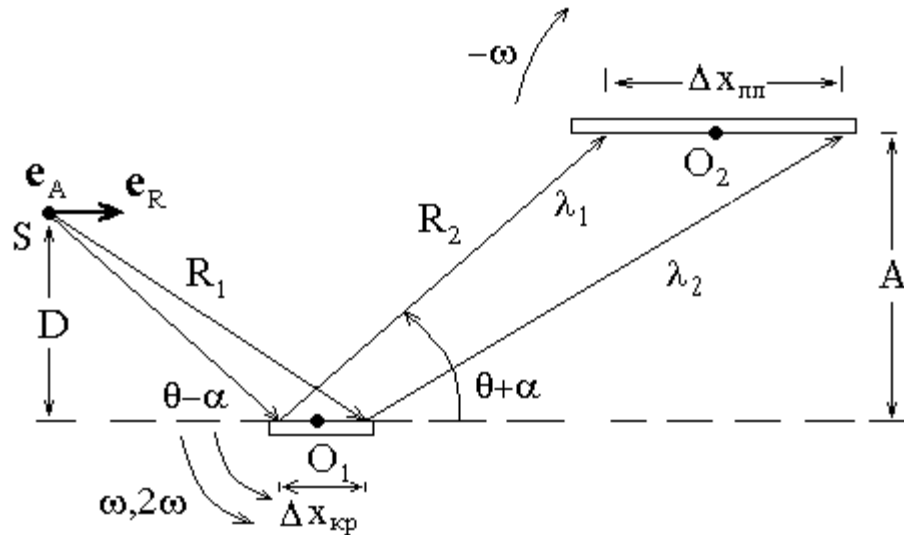
Алынған топограммаларда үлгидеги структуралық дефектлерди (мысалы дислокацияларды) қоршап тұрған орталықтың сүүрети жоқарырақ интенсивликке ийе участкалар түрінде қәлиплеседи. Дислокациялардағы контрасттың пайда болыуының теориясы [10-13] жумысларда раўажландырылған. Бул жумысларда дислокация сызықлары этирапындағы кристалды мозайкалык кристалл сыпатында қарайды. Ал мозайкалык кристалларда болса рентген нурларының шашырауының кинематикалык теориясы орынлы болады хәм бундай үлгилерде биринши экстинкция бақланбайды [14-15]. Сонлықтан бундай участкаларда шашыраған рентген нурлары дислокациялар жоқ орынлардағы шашыраған нурларға салыстырғанда үлкенирек интенсивликке ийе болады. Сонлықтан дифракциялык сүүреттеги бундай контрасты әдетте экстинкциялык контраст деп атайды.

Ланг усылында айырым дислокацияларды бақлау мүмкин. Бирақ бундай бақлаулар жүргизилетуғын кристаллык денелерде дислокациялардың тығызлығы 10^6 см^{-2} шамасынан үлкен болмауы керек [6].

3-§. Мүйешлик сканнерлеу усылы

Ноқатлық деректен шыққан полихроматик рентген нурлары қолланылатуғын Шульц, Фудживара хәм монохромат рентген нурлары қолланылатуғын Ланг усылларының ең көзге түсетуғын кемшиликлериниң бири үлкен экспозиция ўақыты болып табылады. Бул усыллар менен бир топографиялық сўўрет онлаған саат ўақыт керек болады.

Рентгентопографиялық усыллардың экспресслигин (киши ўақытлар ишинде топографиялық сўўретлер алыў) арттырыў мақсетинде кристаллардың топографиялық сўўретин алыўды нурланыўдың характеристикалық спектрин қосымша түрде пайдаланыў усынылды [16-18]. Бундай усылдың оптикалық схемасы 5-сўўретте берилген.



5-сўўрет. Мўйешлик сканнерлеў усылының схемасы [16].

S арқалы рентген нурлары дереги, e_R хәм e_A арқалы сәйкес радиаллық хәм азимуталлық бағатылар (кейингиси сўўрет тегислигине перпендикуляр), R_1 хәм R_2 арқалы сәйкес дерек-үлги хәм үлги-фотопенка қашықлықлары белгиленген.

S арқалы белгиленген ноқатлық рентген нурлары дерегинен рентген гониометрии көшерине орнатылған үлгиги келип түседи. Кристаллық үлгиден A қашықлығына жайластырылған фотопенкада Шульц усылындағы жағдайдағыдай хәр бир ўақыт моментинде кристалдың бетиниң топографиялық сўўрети қәлиплеседи. Экспозиция барысында кристалл O_1 көшериниң дөгерегинде $\Delta\varphi$ мўйешлик интервалында ω мўйешлик тезлиги менен сканнерленеди (буны мўйешлик сканнерлеў деп атаймыз). Ал пленка болса курамалы түрде қозғалыўы керек. Ол O_1 көшери дөгерегинде 2ω мўйешлик тезлиги, ал O_2 көшери дөгерегинде $-\omega$ тезлиги менен қозғалады. Бундай қозғалыста фотопенканың бети кристалдың бетине параллель болып қалады, ал O_1 ноқатында дифракцияға ушыраған нур O_2 ноқатына келип түседи. Кристалдың хәр бир учаскасының топографиялық сўўрети хәр қыйлы ўақыт моментинде хәр қыйлы узынлықтағы толқынлар тәрепинен пайда етиледи. Бундай геометрияда сўўретке түсиргенде бир биринен үстине түседи. Сонлықтан сўўретти пайда етиўши толқын узынлықлары интервалына характеристикалық спектр сызығы киретуғын болса топограмма алыў ушын кететуғын ўақыт Шульц усылында топограмма алыў ушын керек болған ўақытқа салыстырғанда әдеўир кемейеди.

Кристалдың фрагментлериниң сўўреттеги үлкейиў коэффициентлери (1-3) хәм (1-4) формулалар жәрдемінде есапланады [18].

Егер дерек-үлги хәм үлги фотопенка қашықлықлары R_1 хәм R_2 (ямаса A хәм D) изертленетуғын кристаллық үлгиниң сызықлы өлшемлерине салыстырғанда әдеўир үлкен болса, онда кристалдың хәр қыйлы ноқатлары арасындағы қашықлықлар R_1' хәм R_2' шамаларының өзгерисин аз деп есаплайға, соның менен бирге бул қашықлықларды R_1 хәм

R_2 қашықтықтарына тең деп қабыл етіу мүмкін. Бул усылда R_1 хәм R_2 шамалары өзгериссиз қалады, ал кристалдың сүүретин пайда етіуге қатнасуатын толқын узынлықтары ушын θ мүйеши хәр қыйлы мәнислерге ийе болады. $\alpha \neq 0$ хәм $\alpha \neq \frac{\pi}{2}$ болған жағдайларда $P_R = P_R(\theta)$ хәм усыған сәйкес кристалдың сүүрети хәр бир толқын узынлығында өзіне сәйкес P_R үлкейтиу коэффициенті менен бериледи. Усындай аўхалдың кесиринен мүйешлику сканнерлеу усылының сызықлы хәм мүйешлик ажырата алыўшылық қәбилетликлери Шульц усылының айыра алыу қәбилетликлеринен төмен болады.

Солай етип мүйешлик сканнерлеу усылы Шульц усылының дәл аналогы болып табылмайды. Бул усылдың ажырата алыу қәбилетлиги үлгини сканнерлеу интервалы $\Delta\varphi$, θ , α мүйешлериниң функциялары болып табылады.

[18]-жумыста $\Delta\varphi \leq 2 - 3^\circ$ болған жағдайларда экспозиция ўақтының (топограмманы алыу ушын кететуғын ўақыт) Шульц усылындағы экспозиция ўақытына салыстырғанда 5-10 есе кем болатуғынлығы көрсетилди.

Мүйешлик сканнерлеу камерасын изертленетуғын кристаллық үлги менен есаплағыштың тезликлери сәйкес ω хәм 2ω болған қәлеген рентген гониометрии тийкарында соғыу мүмкін. Бул питкериу қәнигелик жумысын орынлау ушын ГУР-4 (УРС-50 аппараты), ГУР-5 (ДРОН-2 аппараты) хәм ГУР-8 (ДРОН-2 аппараты) рентген гониометрлери қолланылды.

4-§. Гейпара жуўмақлар

Биз жоқарыда рентген топографиясы усыллары болған Шульц, Фудживара, Ланг хәм мүйешлик сканнерлеу усылларының оптикалық өзгешеликлерин, өзлерине тән мүмкиншиликлерин көрип өттік. Шульц хәм Фудживара усыллары полихроматлық, Ланг усылы болса монохроматлық усыллар болып табылады. Мүйешлик сканнерлеу усылында кристаллық үлгиниң бетиниң топографиялық сүүретин алыу ушын характеристикалық рентген нурлары қолланылатуғын болса да сүүретти пайда етіу ушын көп сандағы толқын узынлықтары қатнасады.

Жоқарыд келтирилген рентгентопографиялық усыллардың жәрдемінде төмендегидей монокристаллардың қурылысының төмендегидей структуралық дефектлерин, атап айтқанда кристалдың субструктурасының элементлериниң (кристаллық блоklar, олар арасындағы шегаралар жайластырыу дефектлери, дислокациялар хәм басқалар) формасы, өлшемлери, бир бирине салыстырғанда қандай мүйешлерге бурылғанлығын изертлеу мүмкін. Себеби рентгентопографиялық сүүретти кристаллық областтың фотопленка ямаса фотопластинкадағы сәулелениуи деп қарау мүмкін [20]. Кристалдың топографиялық сүүрети майысқан болса, онда бундай унамсыз жағдайларды дифференциал геометрия принципери тийкарында жоқ етіу мүмкін.

Шульц схемасы тийкарында топографиялық сүүретлер пайда ететуғын сыллардың тийкарында экспресс болған мүйешлик сканнерлеу усылы ислеп шығылды. Мүйешлик сканнерлеу усылы Шульц усылының аналогы деп есаплауымыздың себеби мүйешлик сканнерлеу усылында алынған топограммаларды Шульц бойынша алынған алынған топограммалардай етип интерпретациялаудың мүмкинлигинде. Жоқарыда айтылғанындай, соның менен бирге [20]-жумыстың авторларының көрсеткениндей, мүйешлик сканнерлеу усылында полихроматлық усылларға қарағанда экспозиция ўақыты әдеуір кем, топограммалар бир текли хәм олар жоқары контарстлыққа ийе болады.

Жоқарыда келтирилген таллаўлар тийкарында төмендегидей жаңа мәселениң қойылыуы мүмкін: Фудживара хәм мүйешлик сканнерлеу усыллары тийкарында жаңа рентгентопографиялық усылды ислеп шығыу мүмкін емес пе екен? Бундай жағдайда Ланг усылындағыдай қурамалы аппаратура жәрдемінде алынатуғын топограммаларды әпиўайы жоллар менен алыу мүмкін болар еди 1-, 4-5 сүүретлерди салыстырып көриу

керек). Бундай усылда кристаллық үлги, фотопенка мүйешлик сканнерленеди (Ланг усылында мүйешлик сканнерлеу жоқ), ал топографиялық сүүретлер болса үлги арқалы өткен дифракцияға ушыраған нурлар тәрепинен алынады.

Мүйешлик сканнерлеу усылында кристалдан өтиуши рентген нурлары тәрепинен топографиялық сүүреттің қәлиплесіуі

5-§. Пайдаланылған эксперименталлық әсбап-үскенелер

Оабораториялық жұмысты орынлауда пайдаланылған рентген нурларының дереклери. Экспериментлерди өткеріу барысында өткир фокуслы БСВ-5 ямаса БСМ-1 рентген трубкасына ийе УРС-0,02 аппараты пайдаланылды. Бул аппарат еки блоктан турады: тураклы жоқары кернеули дерек пенен басқарыу пульти хәм қорғаушы қапка ийе штатив. Блоклар бир бири менен узынлығы 2 м болған жоқары кернеули кабель менен тутастырылған. Қорғаушы қап рентген трубкасын салқынлатыушы май орталығында орналастырыу ушын пайдаланылады.

Рентген трубкасы орнатылған қорғаушы қап арнаулы бағанаға (стойкаға) бекитиледи. Бул бағана рентген нурлары дегеринің жоқары көтерілиуин ямаса төмен түсирилиуин, сондай-ақ оның оң хәм шеп тәреплерге еркин түрде бырылыуын тәмийинлейди. Қорғаушы қапты бағананың дөгерегинде хәм өзинің көшеринің дөгерегинде қәлеген мүйешке бурыу мүмкин.

Электр энергиясын жеткерип беріу хәм басқарыу блогы жоқары вольтли трансформатордан, кернеу стабилизаторынан хәм басқарыу панелинен турады.

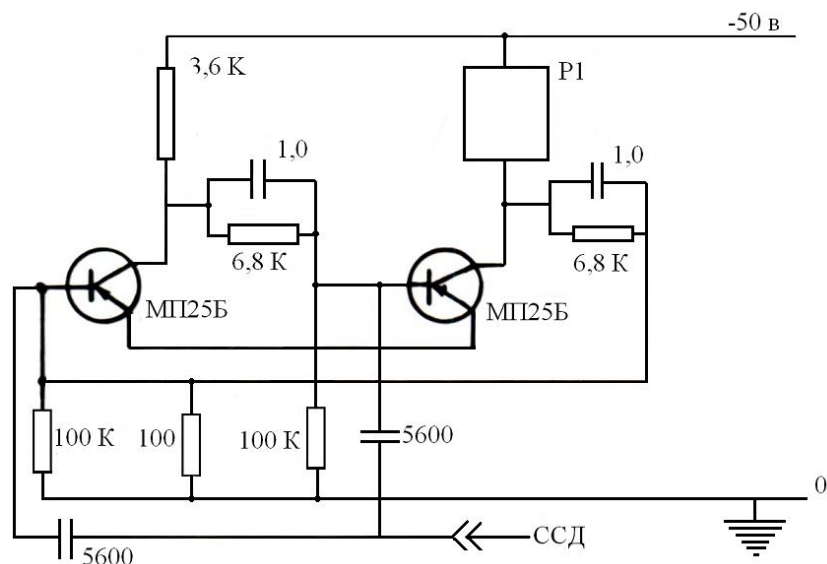
Рентген трубкаының анодындағы кернеудің максималлық мәніси 45 кв шамасына тең, ал анаод тоғының максималлық мәніси 450 микроампер (мк). Пайдаланыу қууатлығы 140 вт шамасынан көп емес.

МАРС-2 аппараты (оны УРС-0,1 деп те атайды) рентгеноструктуралық анализ ушын арналған болып, қууатлығы 0,1 кват, микрофокуслы рентген трубкасына (БСВ-7 типіндеги) ийе. Оның анодының өлшемлери 0,1х0,1 мм. Максималлық анод кернеуи 50 кв, анод тоғының шамасы 4,5 ма ға шекем.

Гониометрлик дүзиліс. Жоқарыда гәп етилгениндей питкеріу қәнигелик жұмысын орынлау ушын ушын ГУР-4 (УРС-50 аппараты), ГУР-5 (ДРОН-2 аппараты) хәм ГУР-8 (ДРОН-2 аппараты) рентген гониометрлери қолланылды. Бул рентген гониометрлери (ГУР-5 хәм ГУР-8) жаңа типтеги рентген гониометрлери болып, кең мүйешлик интервалында (-90^0 тан 170^0 қа шекем) рентген дифракциялық сүүретке алыуды, рентгендифрактометриялық изертлеулер жүргизиуге мүмкиншилик береді. Дифракциялық мүйештиң мәнісин $\pm 0,1^0$ дәллігинде анықлауға мүмкиншилик береді.

Экспериментлерди орынлау барысында ГУР-4 гониометри (басқа гониометрлер де) мүйешлик сканнерлеу усылында рентген топограммаларын түсириу ушын қолланылды.

ГУР-4 гониометринде цикллық мүйешлик сканнерлеуді әмелге асырыу. Ең әпиуайы ГУР-4 рентген гониометринде цикллық сканнерлеуді әмелге асырыу ушын 6-сүүретте көрсетілген электрлик схемасы тийкарында ислеуши электр әсбапы пайдаланылды. Бул схема еки ярым өткізгішли МП 25 Б триггеринен хәм Р₁ релесинен турады. Әсбаптың кириу каналынан ССВ регистрациялаушы аппаратынан белгили бир ўақыт аралықларынан сына сыяқлы сигнал берилди. усының салдарынан Р₁ релеси иске түсирилди хәм ГУР-4 гониометринің айландырыушы магнит майданының бағыты өзгертилди. Усының нәтийжесинде изертлениуши кристаллық үлгинің хәм фотопенканың айланыу бағыты өзгертилди.



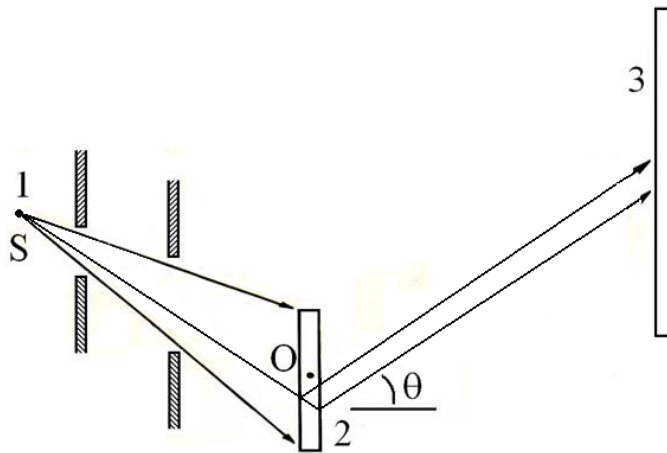
6-сүрөт. ГУР-4 рентген гониометринде пайдаланылган циклык мүйешлик сканнерлеўди әмелге асыруў ушын пайдаланылган электрлик схема.

Блок 50 вольтлик туўрылагыштан электр энергиясы менен тәмийинленди.

6-§. Мүйешлік сканнелеу усылында кристалдан өтиуши рентген нурлары тәрәпинен топографиялық сүүреттиң алыныуы

4-параграфта айтылып өтилгениндей мүйешлік сканнерлеу ұсылы бойынша рентгенографиялық топографиялық сұұретлер алыу ұшын изертленетуғын ұлгиниң ортасы аркалы өтиуши көшер дөгерегинде кристалдың ω мүйешлік тезлиги, ал фотопленканың сол көшердиң дөгерегинде 2ω мүйешлік тезлиги менен айланыуын тәмийинлеуимиз керек. Усыған байланысly экспериментлерди өткериу ұшын улыума мақсетлер ұшын арналған УРС-50ИМ рентген дифрактометриниң курамына кириуши ГУР-4 рентген гониометринен пайдаланылды.

7-сүүретте топограммаларды алыўдың схемасы көрсетилген. Рентген гониометринин көшерине жайластырылған кристалл 2 ге 1 аркалы белгиленген рентген нурларының нокатлық дерегинен таркалыўшы толқын келип түседи. Дифракцияға ушыраған нурлар нурлардың таркалыў бағытына перпендикуляр қойылған 3 фотоластинкада кристалдың сүүретин қәлиплестириўши дифракциялық дақ пайда етеди. Экспозиция ўақытында кристалл О көшерининң дөгерегинде $\omega \pm \Delta\theta/2$ интервалында ω мүешлик тезлиги менен сканнерлениўи керек. Кристалдың айланыў барысында фотопенканы қозғалыссыз калдырыўға да, гониометр көшери дөгерегинде белгили бир мүешлик тезлик пенен сканнерлеў де мүмкин. Бул қолланылған усылдың радиал бағыттағы үлкейтиў қәбилетлигининң өзгерисине алып келеди. Соның менен бирге пленканың бетин үлгининң бетине параллель етип те қойыў мүмкин. Бирақ бундай өзгерислердин ақыбетинде алынған нәтийжелерде принципиаллық өзгерислер жүз бермейди. Бул жағдайда усылдың радиал бағыттағы үлкейтиў коэффициентининң мәниси өзгереди.



7-сүўрет. Мүйешлик сканнерлеў усылында рентгенопографиялық сүўретке түсириўдиң оптикалық схемасы.

1 – рентген нурларының ноқатлық дереги, 2 – изертленетуғын үлги, 3 – фотопленка, О – үлги менен фотопленканың айланыў көшери, θ арқалы дифракциялық мүйештиң мәніси белгиленген.

Биз усынып атырған усылда кристаллық үлгиниң хәр бир участкасының сүўрети хәр қыйлы толқын узынлықлары тәрәпинен пайда болады. Таллаўлар сүўретке түсириўдиң усындай геометриясында бир бириниң үстине түспейтуғынлығын көрсетеди. Сонлықтан топограммада айланбалы қозғалыстың ақыбетинен рентген трубкаларының полихромат тормозлық нурланыўына белгили бир фон сәйкес келеди. Егер $2d \sin \theta = n\lambda$ Вульф-Брэгг шәрти қанаатландырылатуғын толқын узынлықраы интервалына характеристикалық рентген нурлары киретуғын болса (мысалы КВ – спектраллық сызығы), онда полихроматлық нурлардың фонында кристалдың топографиялық сүўрети пайда болады. Усының менен бирге топограмманы алыў ушын зәрүрли болған ўақыттың шамасы айтарлықтай кемейеди.

8-сүўретте өтиўге тийкарланған мүйешлик сканнерлеў усылың оптикалық схемасы келтирилген. Шашыратыўшы атомлық тегисликлер үлгиниң бетине перпендикуляр жайласқан. Сүўреттеги аўхал $2d \sin \theta = n\lambda$ Вульф-Брэгг шәрти кристалдың дәл ортасында орынланатуғын жағдайға сәйкес келеди. Усы моментте фотопленкада гониометрдиң көшерине параллель болған дифракциялық дақ пайда болады. 8-сүўреттен усы сызықтың кеңлигиниң үлгиниң қалыңлығына байланысly болатуғынлығы көринип тур. Үлгиниң толық сүўретин алыў ушын кристалды O_1 көшериниң дөгерегинде $\pm \Delta\varphi/2$ мүйешине сканнерлеў керек (яғный үлгиниң толық бурылыў мүйеши $\Delta\varphi$ шамасына тең).

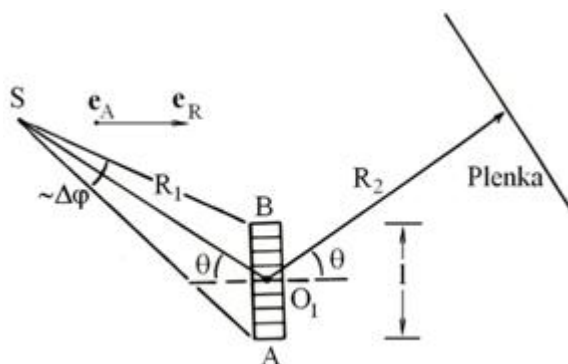
$\Delta\varphi$ мүйешиниң шамасы үлгиниң өлшемлерине хәм рентген нурлары дереги менен изертленетуғын үлгиге шекемги аралыққа байланысly. – сүўретте көринип турғанындай, егер кристалдың бети келип түсиўши рентген нурларының тарқалыў бағытына перпендикуляр болса, онда $\Delta\varphi$ ушын мынадай аңлатпаны аламыз:

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

Бул аңлатпада l арқалы сызылма тегислиги бағдарындағы үлгиниң узынлығы, R_1 арқалы рентген трубкасының фокусынан O_1 ноқатына шекемги қашықлық белгиленген. Улыўма жағдайда $\alpha \neq 90^\circ$ мәнісине ийе боламыз хәм мынаған ийе боламыз:

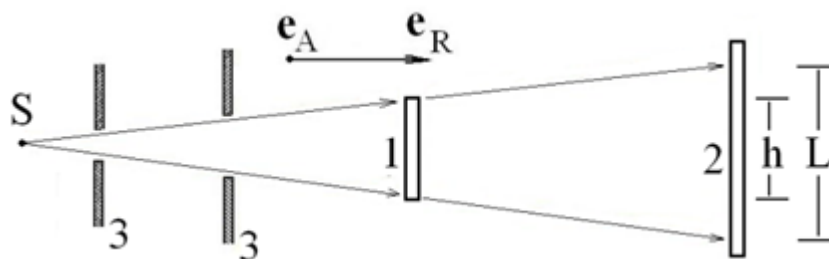
$$\Delta\varphi = \arctg \frac{l \cos \theta}{2R_1}. \quad (2-2)$$

Биз бул жерде хәм буннан кейин де изертленетуғын үлги менен рентген нурларын шағылыстыратуғын тегисликлер арасындағы мүйеш 90° қа тең болған жағдайларды қараймыз, яғный енди $\alpha = 90^\circ$ деп есаплаймыз.



8- сүрөт. Мүйешлик сканнерлеу усылының оптикалык схемасы.

S аркалы рентген нурларының дереги, e_R аркалы радиал багыт, e_A аркалы азимутал багыт (сызылма тегислигине перпендикуляр), R_1 хэм R_2 аркалы дерек-үлги хэм үлги-фотоплёнка қашықлықтары, AB аркалы изертленетүгүн кристалл (үлги). Фотоплёнка Plenka деп белгиленген.



9- сүрөт. Азимутал багытта үлкейтиу коэффициентин аныклайу ушын зеруури болган сүрөт. S аркалы рентген нурларының дереги, 1 аркалы кристаллык үлги, 2 аркалы фотоплёнка, e_R аркалы радиал багыт, e_A аркалы азимутал багыт (сызылма тегислигине перпендикуляр), 3 аркалы саңлақлар (коллиматорлар) белгиленген.

Мүйешлик сканнерлеу усылының азимутал багыттағы үлкейтиу коэффициенти 9- сүрөт жәрдемінде анықланады. Бул сүрөттө $\frac{L}{R_1+R_2} = \frac{h}{R_1}$ теңлигинин орынланатуғынлығы көринип тур. Бул аңлатпада L аркалы сүрөттиң бийиклиги, ал h аркалы изертленип атырған үлгиниң бийиклиги белгиленген. R_1 хэм R_2 шамалары сәйкес анод-үлги хэм үлги-фотоплёнка қашықлықтары. Демек

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

аңлатпасына ийе боламыз. Радиал багыт хэм фотоплёнка қозғалмай туратуғын болған жағдай ушын (бул ҳаққында келеси параграфта толығырақ гәп етиледі)

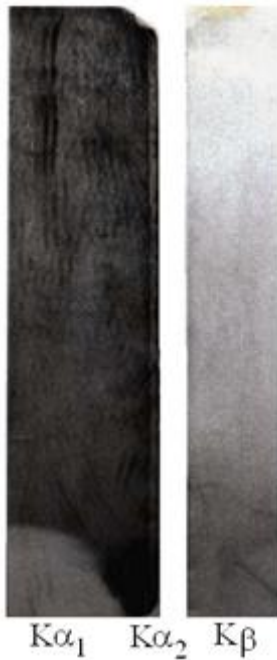
$$P_R = \frac{R_2}{R_1} - 1 \cos \theta \quad (2-4)$$

аңлатпасына ийе боламыз. Сонлықтан

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

хәм улыўма жағдайда кристалдың фотопенкадағы сүүрети конформлық бола алмайды хәм кристалдың фрагментлериниң сүүреттеги формалары майысқан болып шығады.

Биз бул жерде биз қарап атырған рентгенопографиялық усылда да, кристаллық үлгиниң бетиниң сүүретин түсириўши мүйешлик сканнерлеў усылында да $P_R = P_R(\theta)$ байланысының орын алатуғынлығына итибар беремиз. Бул жағдай мыналарға байланысly: кристалдың сүүрети хәр қандай толқын узынлығына ийе рентген толқынлары тәрeпинен хәр қыйлы P_R коэффициентлери менен пайда етиледи. Бул унамсыз жағдай усылдың сызықлы айыра алыўшылық уқыбын да, мүйешлик айыра алыўшылық уқыбын да басқа рентгенопографиялық усылларға (мысалы Шульц хәм Ланг усыллары) салыстырғанда төменлетеди.



10-сүүрет.

Мүйешлик сканнерлеў усылы бойынша алынған кварц кристаллының АТ-кесиминиң топографиялық сүүрети. $K\alpha_1$ менен $K\alpha_2$ спектраллық нурланыўы тәрeпинен пайда етилген топографиялық сүүретлер бир бири менен қабатласады (биринши сүүреттиң оң тәрeпинде еки сүүреттиң қабатласқанлығы көринип тур). Ал $K\beta$ нурланыўы болса өз алдына сүүрет береди.

10-сүүретте кварц кристаллының топограммасы көрсетилген. Бул топограмма үш сүүреттиң қосындысынан турады. Бир бириниң үстине түскен еки сүүрет рентген трубкасының мыс анодының $K\alpha_1$ хәм $K\alpha_2$ спектраллық нурланыўы тәрeпинен пайда етилген. Ал оң тәрeптеги әззирек сүүретти $K\beta$ нурланыўы пайда еткен (мыс аноды тәрeпинен қоздырылған рентген нурлары ушын $\lambda_{K\alpha_1} = 1,5442740$, $\lambda_{K\alpha_2} = 1,5409290$ хәм $\lambda_{K\beta} = 1,3922320$ ангстрем).

Тилекке қарсы мыс анодына нурланатуғын $K\beta$ рентген нуры бир сызықтан ибарат емес. Егер биз "Рентген нурлары ушын халық аралық кристаллографиялық кестениң" (International Tables for X-Ray Crystallography. Volume C. Mathematical, Physical and Chemical Tables) 3-томының 203-бетинде [21] мынадай мағлыўматларды көремиз:

4.2. X-RAYS

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

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

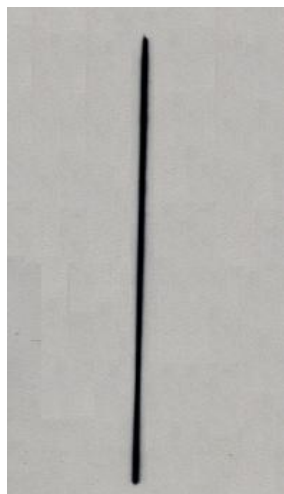
Z	Symbol	λ	$K\alpha_2$	$K\alpha_1$	$K\beta_3$	$K\beta_1$	References
12	Mg		9.89153 (10)	9.889554 (88)			(a)
13	Al		8.341831 (58)	8.339514 (58)			(a)
14	Si		7.12801 (14)	7.125588 (78)			(b)
16	S		5.374960 (89)	5.372200 (78)			(b)
17	Cl		4.730693 (71)	4.727818 (71)			(b)
18	Ar		4.194939 (23)	4.191938 (23)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

Әлбетте $\lambda_{K\beta_1}$ диң қасында $\lambda_{K\beta_2}$ спектраллық сызықтың бар екенлиги биз усынып атырған усылдың әхмийетин төменлетеди.

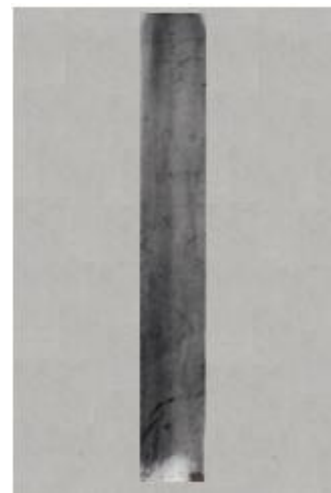
Изертленетуғын кристаллық үлгилердің сызықлы өлшемлери киши (1 см^2 шамасынан үлкен емес) хәм киши дифракциялық мүйешлерде (дифракциялық мүйештиң мәниси $\theta < 15^\circ$) $K\alpha$ хәм $K\beta$ нурлары тәрәпинен пайда етилген сүүретлердің бир бириниң үстине түсиуі орын алады. Бул унамсыз жағдайдан қашыу мақсетинде бизиң қолланыуымыз ушын керекли болған дифракциялық мүйештиң мәнислериниң интервалын табамыз. Әпиуайы геометриялық таллау θ дифракциялық мүйешиниң төменги шәртти қанаатландыруының керек екенлигин көрсетеди:

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

Өткерилген экспериментлер (2-3), (2-4) хәм (2-5) формулалардың дурыс екенлигин тастыйықлады.



a)



11-сүүрет. Улги-фотоплентка арасындағы қашықлық R_2 ниң хәр қыйлы мәнислеринде алынған топографиялық сүүретлер.

a) $R_2 = 14 \text{ см}$, b) $R_2 = 25 \text{ см}$.

Рентген нурлары оптикасында кристалл арқалы тутас спектрге ийе рентген нуры өтетуғын болса, бул нурдың радиал бағытта фокусланатуғынлығы белгили [22-23]. Бул кубылысты баклау ушын хәм фокуслық қашықлықты экспериментте өлшеу ушын топографиялық сүүретке түсириулердің бир сериясы өткерилди. Бул жағдай 12-сүүретте

демонстрацияланған. 12-а сүўретте алынған топограмма $R_2 = 14$ см болғанда, ал екінші топограмма $R_2 = 25$ см болғанда түсірілді. Есаплаулар еки жағдайда да фокус пенен үлги арасындағы қашықтықтың 13 см болғанлығын хәм бул қашықтықтың R_1 диң шамасына тең екенлигин көрсетти (бизиң экспериментлеримизде R_1 диң шамасы хақыйқатында да 13 см ге тең еди). Демек (2-4) формуладағы $R_1 = R_2$ болған жағдайда усылдың радиал бағыттағы үлкейтиў коэффициенти болған P_R шамасының нолге тең болатуғынлығының (яғный $R_1 = 0$) себеби полихромат рентген нурларының гониометрдиң көшерине параллель болған сызыққа фокусланыўы болып табылады екен.

Солай етип $\theta < 45^\circ$ болған жағдайларда азимутал бағытта созылған сызықтың бойынша полихромат рентген нурларының фокусланыўы орын алады екен. Бул фокусланыўдың себеби пайдаланылған рентген спектриниң үзликсизлиги болып табылады.

Монохромат нурланыўды пайдаланғанда хәм кристалды $\Delta\phi$ мүйешлик интервалында сканнерлегенимизде кристалдың хәр қыйлы ноқатларынан шыққан барлық дифракцияға ушыраған нурлар полихроматик нурланыў ушын фокуста жататуғын бир сызық арқалы өтеди. Сонлықтан $R_2 > R_1$ шәрти орынланғанда топограммада кристалдың 180° қа айландырылған сүўрети пайда болады (яғный радиал бағыттағы оңы менен шеп тәрәпи алмасқан, басқа сөз бенен айтқанда 8- хәм 9-сүўретлердеги О ноқатының этирапында 180 градусқа бурылған).

Бул жумыста Фудживара усылын менен өтиўге тийкарланған мүйешлик сканнерлеў усылы менен салыстырыў болып табылады. Усы усыллардың өзгешеликлерин хәм артықмашлығын анықлаў ушын дифракциялық экспериментлер сериясы өткерилип, олар төмендегидей нәтийжелерди берди:

1). Радиал бағытта кристалдың өлшеми менен оның сүўретиниң өлшеминиң бирдей болыўы ушын кристалл менен фотопленканың бирдей мүйешлик тезлик пенен сканнерлениўи керек. Бундай жағдайда кристаллық үлги ω мүйешлик тезлиги менен, ал фотопленка болса сол бағытта 2ω мүйешлик тезлиги менен қозғалыўы шәрт. Фудживара хәм мүйешлик сканнерлеў усылы менен алынған топографиялық сүўретлерди бир бири менен салыстырыў кристалл менен фотопленка биргеликте қозғалғанда үлги менен топографиялық сүўреттиң үлкнеликлери радиаллық бағытта базы бир шамаға айрылады (мысалы $R_2 = 25$ см болғанда мүйешлик сканнерлеў усылында P_R диң шамасы Фудживара усынындағыға қарағанда әдеўир үлкен). Геометриялық таллаў бундай айырманың пайджаланылған рентген нурларының курамына байланысly екенлигин көрсетеди. Фудживара усылында үлгиниң бир бирине қарама-қарсы шетлеринде (8-сүўреттеги А хәм В ноқатлары) дифракциялық шағылысыў хәр қыйлы дифракциялық мүйешлер (Брэгг мүйешлери менен) менен болады. Бул рентген нурларының бир сызыққа фокусланыўын болдырады хәм сызылмаға параллель болған бағытта үлгиден алынатугын сүўреттиң өлшемлерин киширейтеди. Ал мүйешлик сканнерлеў усылында болса кристаллық үлгиниң барлық ноқатларында дифракциялық мүйетиң мәнислери бирдей болады хәм усыған сәйкес үлкейтиў коэффициенти бул жағдайда салыстырмалы үлкен мәниске ийе болады.

2). 12-сүўретте Фудживара усылы менен мүйешлик сканнерлеў усылындағы контрастлықтың хәр қыйлы болатуғынлығы көрсетилген. 12-а хәм 12- сүўретлерди салыстырыў мүйешлик сканнерлеў усылында кристалдығы структуралық дефектлердиң сүўретлериниң үлкен контрастқа ийе болатуғынлығын анық көрсетеди. Фудживара усылы менен алынған топограммада контрастлық төменлеў (тап усындай жағдай Шульц усылы менен шашыраўға тийкарланған мүйешлик сканнерлеў усылын салыстырғанда да бақланған еди). Бул жағдай мүйешлик сканнерлеў усылының (яғный монохромат рентген нурларын қолланыўдың) Фудживара усылының алдындағы артықмашлығын дәлиллейди. Турпайырақ бахалаўлар мүйешлик сканнерлеў усылында контарстлықтың Фудживара усылындағыға қарағанда 1,5 есе үлкен болатуғынлығын көрсетеди.



a)



b)



c)



d)

12-сүүрет. Бир кварц кристаллының өтиўге тийкарланған мүйешлик сканнерлеў (а), Фудживара (b), Ланг (d) ҳәм шашыраўға тийкарланған мүйешлик сканнерлеў (с) усылларының жәрдеминде алынған сүўретлери (а, b, с топограммалары мыс анодының нурланыўында, d сүўреттеги топограмма молибден анодының нурланыўында алынды).

3). 12-с сүўретте көрсетилген топограмма шашыраўға тийкарланған мүйешлик сканнерлеў усылы менен [21] де келтирилген схема бойынша алынды. Сүўретлерди салыстырып көриў бизиң усынып атырған схемамыз бойынша топограммалар түсирилгенде салыстырмалы бай информация алынатугнылығын көрсетеди.

4). 12-d сүўретте алынған рентгентопографиялық сүўрет Ланг усылы менен КРС камерасында молибден анодының нурланыўында түсирилди. Топографиялық сүўретте

структуралық дефетлердің излери (бир теклиликтің жоқлығы, сызықтар хәм басқалар) бақланады) анық көринип тур. Бул жағдай Ланг усылының ажырата алыўшылық қәбилетлигинің мүйешлик сканнерлеў усылының ажырата алыў қәбилетлигинен әдеўир жоқары екенлигин көрсетеди.

5). Экспериментлер мүйешлик сканнерлеў усылында экспозиция ўақытының ~ 2-4 саатты қурайтуғынлығын көрсетти. Бул Фудживара усылындағыға салыстырғанда экспозиция ўақытының шама менен 4 есе кем екенлигин көрсетеди (бирдей рентген нурлары дерегин пайдаланғанда). Рентген нурлары дерегинің (рентген трубкасының) бирдей қуўатында хәм бирдей болған R_1 менен R_2 лерде кварц кристалларын сүүретке алғанда экспозиция ўақыты ушын төмендегидей нәтийжелер алынды:

	Усыл	Экспозиция ўақыты
1	Мүйешлик сканнерлеў усылы (өтиўши толқынлардағы)	2,5 саат.
2	Фудживара усылы	10 саат.
3	Мүйешлик сканнерлеў усылы (шашыраў толқынлары)	0,2 саат
4	Ланг усылы	15 саат.

Алынған сүүретлерде бақланған контрастлы сызықтар, жолақтар хәм басқалар кристаллық үлгидеги жоқары кернеўли участкаларға сәйкес келеди. Бул участкалар экстинкция эффектинің хәлсиреўин тәмийинлейди хәм бул кристалдың шашыратыўшылық қәбилетлигин үлкейтеди.

[25] тин мағлыўматлары бойынша поляризацияланбаған рентген нурлары ушын мозайкалы (идеал жетилиспеген монокристалл ямаса поликристалл) кристаллардағы интеграллық шағылыстырыў төмендегидей формула бойынша есапланады:

$$\rho_m = \frac{N^2 \lambda^3}{2\mu} F^2 \frac{e^2}{m c^2} \frac{1 + \cos^2 2\theta}{2 \sin 2\theta}. \quad (2-6)$$

Идеал жетилискен кристаллар ушын (2-6) ның орнына

$$\rho_i = \frac{8}{3\pi} N F \lambda^2 \frac{e^2}{m c^2} \frac{1 + \cos 2\theta}{2 \sin 2\theta} \quad (2-7)$$

формуласына ийе боламыз. Бул аңлатпаларда N арқалы кристалдың көлеминің бирлигиндеги элементар қутышалар саны, F арқалы сол элементар қутышалардың шашыратыў факторы (структуралық фактор). θ арқалы дифракциялық мүйеш, μ арқалы сызықлы хәлсиреў коэффициенті, $\frac{e^2}{m c^2} = 2,818 \cdot 10^{-13}$ арқалы электронның класскалық радиусы белгиленген. (2-6) менен (2-7) ни салыстырып мынадай санлық мағлыўматларды аламыз:

$$\frac{\rho_m}{\rho_i} = \frac{\frac{N^2 \lambda^3}{2\mu} F^2 \frac{e^2}{m c^2} \frac{1 + \cos^2 2\theta}{2 \sin 2\theta}}{\frac{8}{3\pi} N F \lambda^2 \frac{e^2}{m c^2} \frac{1 + \cos 2\theta}{2 \sin 2\theta}}.$$

Бул катнасқа кварц (SiO_2) ушын сәйкес мәнислерди қойсақ (яғный $F \approx 50$, $N \approx 10^{21} \text{ см}^{-3}$, $\lambda = 1,5418 \cdot 10^{-8} \text{ см}$, $\mu = 200 \text{ см}^{-1}$), онда

$$\frac{\rho_m}{\rho_i} = \frac{\frac{N^2 \lambda^3}{2\mu} F^2 \frac{e^2}{m c^2} \frac{1 + \cos^2 2\theta}{2 \sin 2\theta}}{\frac{8}{3\pi} N F \lambda^2 \frac{e^2}{m c^2} \frac{1 + \cos 2\theta}{2 \sin 2\theta}} = 10 \quad (2-9)$$

шамасын аламыз. Демек мозайкалы кварц кристаллары қурылысы идеал жетілскен кварцқа салыстырғанда рентген нурларын шама менен 10 есе күшлірек шашыратады екен. Бизің жағдайымызда изертленліген кристаллардың хәр қыйлы участкаларында дифракцияланған рентген нурларының интенсивлиги бир биринен 2-3 есе парық қылады. Бул жағдай алынғна эксперименталлық мағлыұматлардың есаплаұлардың нәтижелерине қайшы келмейтуғынлығын көрсетеди.

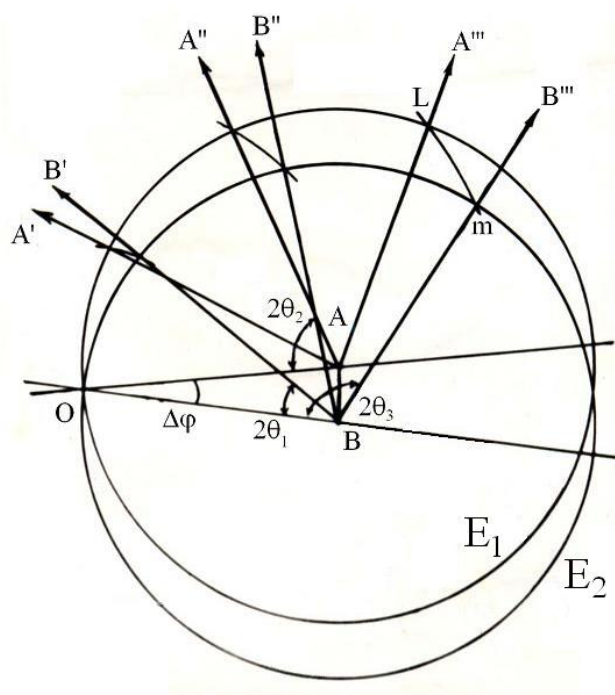
Биз рентгенографиялық сұұреттің сапасының пайдаланылған рентген нурының узынлығына байланысly екенлигин атап өтемиз. Басқа сөз бенен айтқанда сызықлы жутылыұ коэффициенти μ толқын узынлығы λ ниң функциясы болып табылады. Сонлықтан бул мәселени айқын түрде шешиұ максетинде хәр қыйлы толқын узынлықларында экспериментлер өткеріұ зәрүрлиги пайда болады. Бирақ техникалық қыйыншылықларға байланысly бундай экспериментлер исленбеди.

7-§. Дифракциялық схеманың кери кеңисликтеги интерпретациясы

Қәлеген дирфакциялық экспериментти (оптикалық рентгенографиялық, электронлық микроскопиялық, нейтронографиялық, атомлық ямаса ионлық хәм басқалар) кери кеңисликте интерпретациялаұ бул эксперименттің коргизбелилигин жоқарылатады хәм оның тийкарғы физикалық мәнисин терең түсиниұге мүмкиншилик береди.

13-сұұретте мүйешлик сканнерлеұ топограммаларының кери кеңисликте пайда етилиұиниң схемасы көрсетилген. E_1 менен E_2 лер Эвальд сферасының еки аұұхалына сәйкес келеди.

Таллаұларымыздың әпиұайы болыұы ушын Эвальд сферасын O көшери дөгерегинде базы бир $\Delta\varphi$ мүйешлик интервалында қозғалатуғын, сканнерленетуғын деп есаплаймыз. Эвальд сферасының радиусы $\frac{1}{\lambda}$ ге тең болып, λ арқалы характеристикалық нурланыұдың бириниң толқын узынлығы белгиленген.



13-сұұрет.

Мүйешлик сканнерлеұ усылын кери кеңисликте интерпретациялаұ. O арқалы координата басы, A хәм B арқалы E_1 хәм E_2 Эвальд сфераларының орайлары, θ_1 , θ_2 , θ_3 арқалы дифракциялық мүйешлер белгиленген. Кери пәнжерениң түйинлери mL типиндеги сызықлар бойлап созылған.

А хәм В нокатларына кристаллық үлгиниң шетки нокатлары сәйкес келеди. ОА менен ОВ сызықлары арқалы А хәм В нокатларына келип түсетуғын рентген нурлары белгиленген. АА', ВВ', АА'', ВВ'' хәм басқалар дифракцияға ушыраған нурларға сәйкес келеди.

$\theta > 45^\circ$ мүйешлерде рентген сүүретиниң фокусланыуының орын алмайтуғынлығы көринип тур. Фокусланыу $\theta < \theta_\phi$ мүйешлеринде орын алып, бундай жағдайда ВВ' нуры А нокаты арқалы өтеди. Сонлықтан $\theta_\phi = 45^\circ - \Delta\varphi$. Жоқарыда айтылып өтилгениндей $\Delta\varphi$ мүйешиниң шамасы кристаллық үлгиниң радиал бағыттағы өлшемлеринен ғәрезли [(2-2)-формула].

Усылдың радиал бағыттағы ажырата алыу коэффициенті P_R диң АА' хәм ВВ' нурлары арасындағы мүйеш $\Delta\varphi$ хәм дифракциялық мүйеш θ арқалы арықланатуғынлығын жоқарыда айтып өткен едик. усыған байланыслы P_R коэффициентиниң $\Delta\varphi$ хәм θ шамаларынан ғәрезлигин анықлаймыз. R_2 арқалы бурынғыдай үлги менен фотопенка арасындағы қашықтықты белгилеймиз (5-сүүретке қараңыз).

14-сүүретте $\theta = 0$ болғанда фокуслық қашықтықтың Эвальд сферасының радиусына тең болатуғынлығы көринип тур. $\theta = 90^\circ - \Delta\varphi$ шәрти орынланғанда фокус кристалдың бети тегислигинде жайласады. Сонлықтан $\theta = 0$ хәм $R_2 = 2R_1$ шәртлери орынланғанда $P_R = 0$. Ал $\theta = 90^\circ$ хәм $R_2 = R_1$ шәрти орынланғанда $P_R = 2$. Улыўма жағдайда, $\theta = 0$ хәм $R_2 > R_1$ орынланған жағдайда мынадай теңликлерден пайдаланамыз:

$$L = 2 R_2 - R_1 \tan \Delta\varphi, \quad (2-9)$$

$$l = \frac{2R_1 \tan \Delta\varphi}{\cos \theta}. \quad (2-10)$$

Сонлықтан

$$P_R = \frac{L}{l} = \frac{L = 2 R_2 - R_1 \tan \Delta\varphi}{\frac{2R_1 \tan \Delta\varphi}{\cos \theta}} = \frac{R_2}{R_1} - 1 \cos \theta = \frac{R_2}{R_1} - 1. \quad (2-11)$$

Буннан $R_2 = 2R_1$ шәрти орынланғанда ҳақыйқатында да $P_R = 1$ теңлигиниң орынланатуғынлығына исенемиз.

$\theta = 90^\circ$ болған жағдайда

$$\frac{l}{R_1} = \frac{L}{R_1 + R_2}. \quad (2-12)$$

Демек

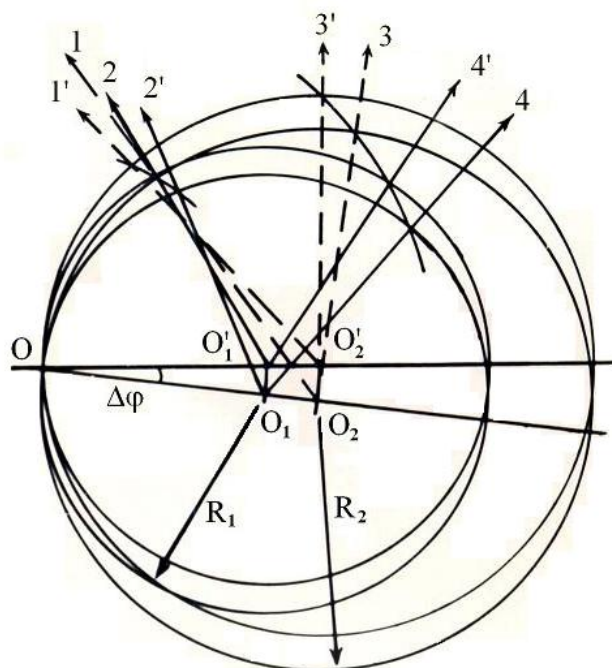
$$P_R = \frac{L}{l} = \frac{R_1}{R_2} + 1 \cos \theta = 0. \quad (2-13)$$

Бул жағдай мынаны аңғартады: $\theta = 90^\circ$ болғанда үлги тегислиги рентген трубкасының фокусына карап турады хәм сүүреттиң өлшемлери усылдың геометриялық өзгешеликлеринен емес, ал кристалдың қалыңлығынан ғана ғәрезли болады (бундай жағдайда дифракциялық сүүрет алынбайды деген сөз).

Солай етип P_R шамасы дифракциялық мүйештиң 0° тан 90° қа шекемги интервалында $\frac{R_2}{R_1} - 1$ ден 0 ге шекем өзгереді екен. Сонлықтан улыўма жағдай ушын

$$P_R == \frac{R_2}{R_1} - 1 \cos \theta \quad (2-14)$$

формуласынан пайдаланамыз. Бул формуланың өткен параграфта келтирилип шығарылғанлығын еске түсіреміз. Енди характеристикалық рентген нурларының дублеттеринің тәсірін қарап шығамыз. Буның үшін $K\alpha_1$ хәм $K\alpha_2$ спектраллық сызықтары үшін Эвальд сфераларын қарап өтеміз.



14-сүрөт.

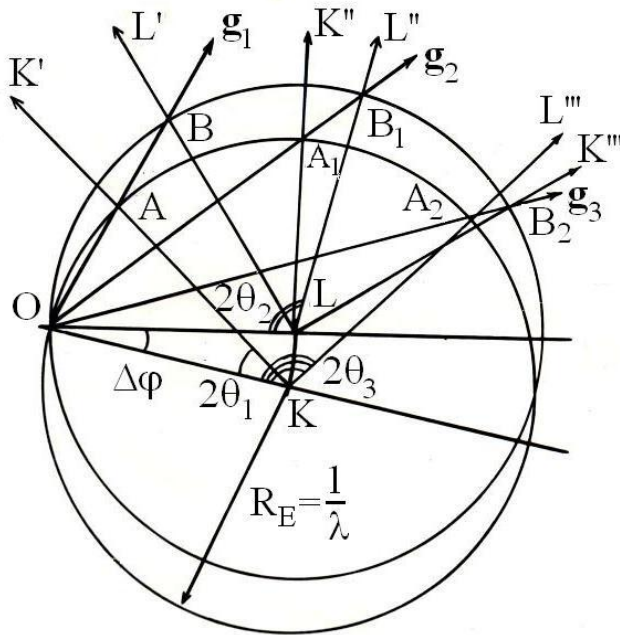
Мүйешлик сканнерлеу усылында рентген нурларының характеристикалық нурланыуының сүүреттің пайда болыуына тәсірін түсиндириу үшін арналған сүүрет.

$R_1 = \frac{1}{\lambda_1}$, $R_2 = \frac{1}{\lambda_2}$. O_1 менен O_2 ноқатлары Эвальд сфераларының орайына сәйкес келеди.

14-сүүретте R_1 менен R_2 арқалы рентген нурларының спектринің $K\alpha_1$ хәм $K\alpha_2$ спектраллық сызықтарына сәйкес келиуіши Эвальд сфераларының радиустары белгиленген. Хәр бир характеристикалық нурланыу үшін өз алдына сүүреттің сәйкес келетуғынлығы көринип тур. Бул сүүреттер O_11 хәм $O_1'1'$, O_12 хәм $O_1'2'$ типіндеги сызықтар менен шекленген.

Жоқарыда келтирилген схемалар тийкарында Фудживара усылын кери кеңісликте интерпретациялау (түсиндириу) мүмкиншилигине ийеміз. Илимий әдебиетларды үйрениу бундай интерпретациялаудың изертлеушілердің дыққатынан шетте қалғанлығын көрсетеди.

Бул жағдайда полихромат нурлардың пайдалныуының себебинен радиусы үзликсиз түрде өзгеретуғын Эвальд сфераларын қоланыуымыз керек деп болжауымыз мүмкин. Бирақ усындайц жоллар менен геометриялық таллау үлкен қыйыншылықларды пайда етеди. Усыған байланысly бир Эвальд сферасы менен үзликсиз спектрге сәйкес келиуіши кери пәнжеренің созылған радиус-векторларын пайдаланамыз.



15-сүрөт.

Кери кеңисликте Фудживара усылын сәулелендириү.

g_1, g_2 хәм g_3 белгилери аркалы кери пәнжерениң радиус-векторлары белгиленген.

Усынылып атырған схема 15-сүрөтте берилген. Бул сүрөтте g_1, g_2 хәм g_3 лер кери пәнжерениң үш радиус-векторына сәйкес келеди. AB_1, A_1B_1 хәм A_2B_2 белгилери менен шекленген вектордың кесиндилери ушын дифракция шәрти орынланады. Ноқаттың сүүрети KK', KK'' хәм KK''' нурлары түрепинен пайда етиледі, ал L ноқатынан болса LL', LL'', LL''' нурлары дифракцияға ушырайды. Сонлықтан биз мынадай жуўмақ шығарамыз: биз қарап атырған жағдайда да, үлгиниң бетиндеги рентген нурларының шашыраўын пайдаланатуғын мүйешлик сканнерлеў усылында да фотоленканың (топограмманың) бетиндеги дифракциялық сүүрет бойынша толқын узынлығы турақлы қалатуғын сызықлардың кесиндилеринен пайда болады. Бундай сызықлардың теңлемеси кеңнен тарқалыўшы дәсте усылы ушын келтирилип шығарылған еди [3]. Усыннан биз тәрепинен усынылып атырған мүйешлик сканнерлеў усылын да, Фудживара усылын да [2,9] жумысларда келтирилген таллаў тийкарында толық түсиндириў мүмкин деп жуўмақ шығарамыз. Биз бундай таллаўды өткермеймиз, себеби бундай физикалық таллаў питкеріў қәнигелик жумысының шеклеринен шығып кетеди.

8-§. Мүйешлик сканнелеў усылын кристаллографиялық дифракциялық экспериментте қолланыў

Жоқарыда келтирилген параграфларда бир неше рет усынылып атырған мүйешлик сканнерлеў усылының өзгешеликлери атап өтилди. Бирақ оның мүмкиншиликлерине дурыс түрде баға беріў ушын оның нәтижелерин басқа да усыллар менен алынған нәтижелер менен салыстырып көріў зәрүр болады. Бундай салыстырўды биз төмендегидей түрде келтиремиз:

Ланг усылы.

Кристаллық үлгиниң қозғалыўы: илгерилемели, қозғалыў жолының узынлығы сол бағыттағы кристаллық үлгиниң узынлығындай.

Фотоленканың қозғалыўы: кристаллық үлги менен бирликте илгерилемели.

Рентген нурларының тутас спектрин қолланыў эффектлери: қолланылмайды, тутас спектр унамсыз нәтижелерди береді.

Кристаллық үлгиниң қалыңлығы: $\mu t \leq 1$.

R_1 менен R_2 ниң шамаларына қойылатуғын талап: $R_2 < R_1$.

Кристаллық үлгиниң гониометрде орнатылыўына қойылатуғын талап: оғада қатаң.

Фудживарап усылы.

Кристаллық үлгинің қозғалыуы: қозғалмайды.

Фотопленканың қозғалыуы: қозғалмайды.

Рентген нурларының тутас спектрін қолланыу эффектлери: рентген нурының тутас спектри қолланылады.

Кристаллық үлгинің қалыңлығы: $\mu t \leq 1$.

R_1 менен R_2 нің шамаларына қойылатуғын талап: $R_2 > R_1$

Кристаллық үлгинің гониометрде орнатылыуына қойылатуғын талап: талап қойылмайды.

Шашырауға тийкарланған мүйешлик сканнерлеу усылы.

Кристаллық үлгинің қозғалыуы: рентген гониометринің көшерине орнатылған кристаллық үгли ω мүйешлик тезлиги менен қозғалады (мүйешлик сканнерленеди).

Фотопленканың қозғалыуы: рентген гониометриндеги дифракцияға ушыраған рентген толқынларын регистрациялаушы есаплағыштың орнына ортанытылады хәм гониометр көшеринің дөгерегінде 2ω мүйешлик тезлигинде фотопленка менен бир бағытта қозғалады.

Рентген нурларының тутас спектрін қолланыу эффектлери: тутас спектр де сүүреттің пайда болыуына қатнасады.

Кристаллық үлгинің қалыңлығы: қөлеген қалыңлықтағы үлгилер пайдаланылады, себеби бул усылда топографиялық сүүретті пайда етиуге кристалдың бетинде шашыраған рентген нурлары қатнасады.

R_1 менен R_2 нің шамаларына қойылатуғын талап: талап қойылмайды.

Кристаллық үлгинің гониометрде орнатылыуына қойылатуғын талап: қатаң емес.

Өтиуге тийкарланған мүйешлик сканнерлеу усылы.

Кристаллық үлгинің қозғалыуы: айланбалы қозғалыс жасайды.

Фотопленканың қозғалыуы: талап қойылмайды.

Рентген нурларының тутас спектрін қолланыу эффектлери: тутас спектр унамсыз тәсирин жасайды.

Кристаллық үлгинің қалыңлығы: $\mu t \leq 1$.

R_1 менен R_2 нің шамаларына қойылатуғын талап: $R_2 > R_1$.

Кристаллық үлгинің гониометрде орнатылыуына қойылатуғын талап: қатаң емес.

16-сүүретте мүйешлик сканнерлеу усылын айқын изертлеулерде, атап айтқанда мезаструктураға ийе кварц кристалларының хақыйкый структурасын изертлеу барысында хәм бул усылда алынған нәтийжелерди басқа усылларда алынған эксперименталлық сүүретлер менен салыстырыу мақсетинде өткерилне экспериментлердің берген нәтийжелери келтирилген.



a)



b)



c)

16-сүрөт.

Мезаструктураға ийе кварц кристалларының
топограммаларының сүрөтлери.

а) өтиўге тийкарланған мүйешлик
сканнерлеў усылында алынған,

б) шағылысыўға тийкарланған мүйешлик
сканнерлеў усылында алынған,

с) Ланг усылында түсирилген.

Пайдаланылған әдебиятлар дизими

1. L.G.Schulz. Method of using a fine focus X-ray tube for examining the surface of single crystals. J.Met: Trans. AIME. **200**. 1954. 1082-1083; L.G.Schulz. Optic constants of si lver, gold, copper and aluminium. 1. Absorption coefficient. - J.Opt.Soc.of America, 1954, v.**44**, N.5, p.357-362; L.G. Schulz. Optic constants of si lver, gold, copper and aluminium. 2. Index of refraction. - J.Opt.Soc.of America, 1954, v.**44**, N. 5, p.362-368.

2. V.V.Aristov, E.V.Shulakov. Determination of angles between blocks from the topographs obtained by the Schultz method. J. Appl. Cryst. 1975. V. **8**. I. 4. 445-451.
3. В.В.Аристов, И.М.Шмытько, Е.В.Шулаков. Изучение несовершенств и кристаллографических характеристик кристаллов методом их сканирования в широко расходящемся пучке рентгеновских лучей. Кристаллография. 1976. 21. 351-356.
4. C.S.Barrett. Structure of Metals, New York. 1952.
5. Takeo Fujiwara. Mem. Defense Acad. (Japan). 1964. IV. 205. Takeo Fujiwara and Shoso Dohi. Mosaic Structure and Virgin Slip in Iron Single Crystal Plates. Journal of the Physical Society of Japan **18** (1963) pp. 1763-1774. Takeo Fujiwara. Mem. Defense Acad. (Japan). 1963. II. 127. Takeo Fujiwara and Shoso Dohi. Effects of Rolling Reduction or Impurity Content on Mosaic Structure in Iron Single Crystal Plates. Journal of the Physical Society of Japan. **20**. 1965. pp. 180-181.
6. Я.С.Уманский. Рентгенография металлов. Издательство "Металлургия. Москва. 1967.
7. В.М.Гундырев, Н.В.Белова, В.О.Есин. С сборнике "Выращивание монокристаллов тугоплавких и редких металлов". Издательство "Наука" Москва. 1978.
8. Е.В.Шулаков, В.В.Аристов. Формирование топографического изображения монокристаллов в методе углового сканирования. Препринт ИФТТ АН СССР. Черноголовка. 1977.
9. Е.В.Шулаков. Формирование топографического изображения монокристаллов при дифракции расходящегося полихроматического луча рентгеновских лучей. Черноголовка. Кандидатская диссертация. Черноголовка. 1978. 167 с.
10. Б.А.Абдикамалов, В.В.Аристов, В.Ш.Шехтман, Е.В.Шулаков. Применение камеры углового сканирования для изучения совершенства реальной структуры кристаллов. Тезисы совещания "50 лет Отечественного приборостроения". Ленинград. 1978.
11. Б.А.Абдикамалов, В.В.Аристов, Л.В.Мухина, В.Ш.Шехтман. Изучение эффектов структурной памяти при низкотемпературных перестройках в кристаллах KDP. Физика твердого тела. Т. **20**. № 5. 1978. С. 1593-1594.
12. A.R.Lang. Direct Observation of Individual Dislocations by X-Ray Diffraction. J. Appl. Phys. **29**, 597-599. 1958.
13. A.R.Lang. The projection topograph: a new method in X-ray diffraction microradiography. Acta Cryst. **12**. 249-250. 1959; A.R.Lang. Studies of individual dislocations in crystals by X-ray diffraction microradiography. J. Appl. Phys. **30**. 1959. 1748-1755.
14. N.Kato. Dynamical Diffraction Theory of Waves in Distorted Crystals. I.General Formulation and Treatment for Perfect Crystals. Acta Cryst. **16**, 1, 276-281, 1963.
15. И.Ш.Слабодетский, Ф.Н. Чуховский, В.Л.Инденбом. Письма в ЖЭТФ. 1968. **8**. 90. В.Л.Инденбом, Ф.Н.Чуховский. Проблема изображения в рентгеновской оптике. Успехи физических наук. Т. **107**. Вып. 2. 229-265. V. L. Indenbom and F. N. Chukovskii. The Problem of Image Formation in X-Ray Optics. Usp. Fiz. Nauk **107**, 229-265 (June, 1972)
16. A.Authier, D.Simon. Application de la théorie dynamique de S. Tagaki au contraste d'un défaut plan en topographie par rayons X. I. Faute d'empilement. Acta Cryst. 1968. **A24**. 517-526.
17. И.Ш.Слабодетский, Ф.Н. Чуховский. Кристаллография. 1970. 15. 1101.
18. А.Гинье. Рентгенография металлов. Теория и практика. Государственное издательство физико-математической литературы. Москва. 1961. 604 с.
19. В.И.Иверонова, Г.П.Ревкевич. Теория рассеяния рентгеновских лучей. Издательство Московского университета. 1978. 246 с.
20. P. W. Kingman. [A method for analyzing image distortion in diffraction topographs](#). Journal of Applied Crystallography. Volume 6, Issue 1, February 1973, Pages: 12–19.
21. Л.И.Миркин. Справочник по рентгеноструктурному анализу поликристаллов. Государственное издательство физико-математической литературы. Москва. 1961.

22. В.В.Аристов, И.М.Шмытько, Е.В.Шулаков. Динамический контраст топографического изображения кристалла в полихроматическом излучении. Препринт Института физики твердого тела АН СССР. Черногловка. 1977.
23. В.Л.Инденбом, И.Ш.Слободецкий, Э.В.Суворов. В сборнике "Материалы IV совещания по динамическим эффектам рассеяния рентгеновских лучей и электронов". Ленинград. 1977.
24. Б.А.Абдикамалов, В.В.Аристов, Л.В.Мухина, В.Ш.Шехтман. Изучение эффектов структурной памяти при низкотемпературных перестройках в кристаллах KDP. Препринт ИФТТ АН СССР. Черногловка. 1978. 7 с.
25. Р.Джеймс. Оптические принципы дифракции рентгеновских лучей. Москва. Издательство иностранной литературы. 1950. 572 с.
26. Современная кристаллография. Том 1. Б.К.Вайнштейн. Симметрия кристаллов. Методы структурной кристаллографии. Издательство "Наука". Москва. 1979. 384 с.
27. В.В.Аристов, В.Ш.Шехтман, И.М.Шмытько. Особенности оптической схемы широкорасходящегося пучка. Препринт Института физики твердого тела АН СССР. Черногловка. 1975. V.V.Aristov, V.Sh.Shekhtman and I.M.Shmyt'ko, Optical features of of the X-ray Divergent Technique" Kristallografia, USSR, 1976, Vol. 21, No.1, pp. 50 - 56.
28. International Tables for X-Ray Crystallography. Volume C. Mathematical, Physical and Chemical Tables. 2004. P. 1020.

4. Литий иодаты кристалларындағы структуралық өзгерістерді рентгенографиялық зерттеу

Кірісі

Қатты денелерде орын алатын фазалық өтулер (фазалық айналыстар) әрқашан да болған физикалық кубылыстар қатарына кіреді. Бір фазадан екінші фазаға өткенде кәсіптік кристаллық ямаса аморфтық заттың барлық физикалық-технологиялық қасиеттері кескін түрде өзгереді. Усы жағдайларға байланысты фазалық өтулер мәселелерін экспериментальды және теориялық зерттеу әзіргі уақыттардағы қатты денелер физикасының ең әрқашан да маңызды бағыттарының бірі болып табылады.

Қатты денелердегі фазалық өтулерді зерттеулер тийкарынан XX ғасырдың басында басталды. Кристаллық денелердегі рентген нурларының дифракциясы, усы кубылыс тийкарында дөріктелген рентгенструктуралық анализ, буннан кейін пайда болған электронография менен электрон микроскопиясы қатты денелердегі фазалық өтулердің нақты механизмдерін ашып көрсетуде анықтайтын орынды иеленді. Фазалық айналыстардың заңдылықтары және олардың нақты механизмдері ашып көрсетілді. Усындай илимий ашылыулар тийкарында берілген технологиялық қасиеттерге ие заттарды алу бойынша үлкен жұмыстар ішленді. Бул XX ғасырдың ақырларында фуллеренлер менен нанокристаллдардың ашылуына, ал XXI ғасырдың басында графеннің алынуына алып келді [1-6]. Солай етип фазалық айналыстардың нақты физикалық механизмдерін терең үйренулер адамзат турмысына пүткіллей жаңа заттардың кирип келуін тәмийинледі.

Жокарыда атап өтилген жетіскенліктер менен бир қатарда айырым кристаллық заттардағы фазалық өтулердің нақты механизмдері еле толық зертленбеген. Сондай кристаллдар қатарына пьезоэлектрик қасиеттерге ие болған литий иодаты ($LiIO_3$) кристаллары кіреді [7-10]. Бул кристаллдарда белгілі болған α , β және γ фазалары менен бир қатарда $70^\circ\text{C} - 120^\circ\text{C}$ температуралары аралығында физикалық қасиеттердің аномалды және қайтымсыз өзгерістері бақланды. Усы тийкарда литий иодаты

кристалларында жоқарыда келтирилген үш фазадан басқа және бир фаза орын алады деп болжайға болады

Литий иодаты ($LiIO_3$) кристалларының атомлық-кристаллық қурылысы хәм базы бир физикалық қәсийетлери

1-§. Литий иодаты кристалларының атомлық-кристаллық қурылысы хәм базы бир физикалық қәсийетлери

Биз литий иодаты кристалларының төмендегидей үш түрли модификациясының бар екенлигин билемиз [11]: гексагоналлық (α); тетрагоналлық (β); орторомбалық (γ). Бул фазалардың кристаллық қурылысының параметрлери 1-кестеде берилген.

Ең дәл деген мағлыұматлар бойынша [12-15] $\alpha - LiIO_3$ кристалларының сингониясы гексагоналлық, симметрияның гексагоналлық-пирамидалық классы болған $C_6(L_6)$ ноқатлық топарға киреди. $\alpha - LiIO_3$ кристалларының қурылысында симметрия орайы жоқ болғанлықтан бундай кристаллар айқын көринетуғын пьезоэлектриклик, сызықлы оптикалық хәм техника ушын басқа да бақалы болған қәсийетлерге ийе.

Литий иодаты кристалларының гексагоналлық α фазасының атомлық-кристаллық қурылысы 1-сүүретте келтирилген [13]. Кислород атомлары гексагоналлық тәқлетте тығыз етип жайластырылған, иодат молекулалары октаэдрлик бослықларды ийелейди. Кислородлық октаэдрлер азмаз майысқан. Атомлық-кристаллық қурылыста C_3 симметрияға ийе айырым IO_3 топарлары бар. Бул дурыс тригоналлық пирамиданың (пирамида IO_3 топарларынан турады) бас көшери элементар қутышаның 3-тәртіпли симметрия көшери менен бағытлас. IO_3 топарларындағы кислород атомлары қоңысылас IO_3 топарындағы кислород атомлары менен 2,892 Å қашықлықта координацияланады. Бул қашықлық Ван-дер-Ваальс радиусларынан (бундай радиустың шамасы $\sim 0,7$ Å ге тең) әдеуір киши. Бир бири менен қоңысылас болған IO_3 топарлары арасындағы күшли тәсир етисийдің нәтийжесинде үш өлшемли беккем тор пайда болады. Бул тордың ишинде атомлар үлкен емес амплитуда менен жыллылық тербелислерине қатнасады.

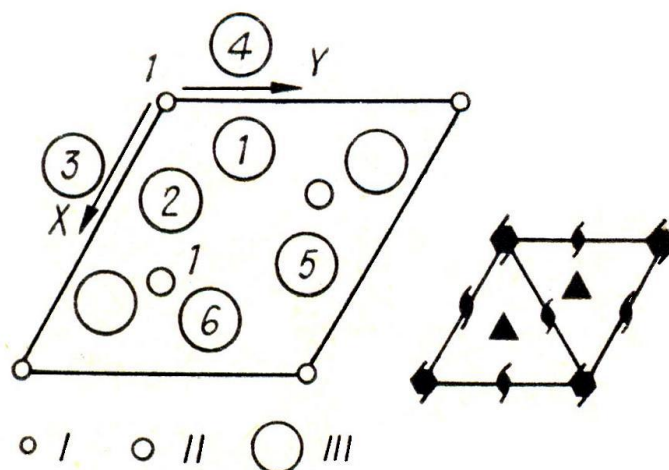
1-кесте.

Литий иодаты кристалларының қурылысының параметрлери

	Модификация						
	α		β		γ		
	a_0	c_0	a_0	c_0	a_0	b_0	c_0
Қутыша параметри, Å	5,4815 ± 0,003;	5,1709 ± 0,004; [12]	9,7329 (7);	6,1566 (7); [19]	T = 253°C		
	5,478 ± 0,003;	5,170 ± 0,002; [13]	9,712 ± 0,005;	6,146 ± 0,005; [16]	5,324(2)	9,428(4)	5,888(2)
	5,484 ± 0,003;	5,177 ± 0,002 [22]	9,66 ± 0,002	6,21 ± 0,001 [18]	T = 265°C		
					19,1	11,14 32 [20]	10,44
Қутышадағы формулалық бирликлер саны	2 [12]		8 [19]		32 [20]		
Симметрияның кеңисликтеги топары	$P6_3$ [12]		$P4_2/n$ [16]		Белгисиз		

Литий атомлары да кислородлық октаэдрлердің орайында жайласқан болып, алтыншы тәртіпли симметрия көшери Z ке параллель шынжыр (дизбек) пайда етеди. $\alpha - LiIO_3$ кристалларының атомлық кристаллық қурылысын дәл анықлау мақсетинде

нейтронографиялық изертлеулер де өткерілген. Бұл изертлеулер литий атомларының кислородлық октаэдрдің орайына салыстырғанда Z көшери бағытында 0,0343 ангстремге (Å) жылысқан екенлігін көрсетті [13]. Жиберілген қателіктер шеклерінде литий октаэдрдің орайында жайласқан. [12]-жұмыстың авторлары болса литий атомлары Z көшерінің кері бағытында 0,291 ангстремге жылысқан деп тастыйықлайды. 2-кестеде α - LiIO_3 кристалларының атомлардың координаталары менен жыллылық параметрлері, 3-кестеде болса атомлар арасындағы қашықтықтар менен ионларды байланыстырыушы туұрылар арасындағы мүйешлер, ал 4-кестеде кристаллографиялық тегісліктер арасындағы қашықтықтар берілген.



1-сүурет. Элементар қутышаның (0001) тегіслігине түсірілген проекциясы.

I – литий ионлары. II – иод ионлары. III – Кислород ионлары.

Ионлардың координаталары: Li (1): $(0,0, Z - \frac{1}{2})$; I(1): $(\frac{2}{3}, \frac{1}{3}, \frac{1}{2})$;

O(1): (X,Y,Z) ; O(2): $X, Y, Z + \frac{1}{2}$; O(3): $Y - X, -X, Z$; O(4): $X - Y, X, Z + \frac{1}{2}$;

O(5): $1 - Y, 1 + X - Y, Z$; O(6): $1 - X, 1 - Y, Z + \frac{1}{2}$.

2-кесте

α - LiIO_3 кристаллары үшін атомлардың координаталары хәм жыллылық параметрлері

Атом-лар	Координаталары хәм жыллылық параметрлері	[12]	[13]	[14]
Li	Z	0,897	0,9110	0,9273
	B_{11}	2,0	1,0	3,381
	B_{22}			B_{11}
	B_{33}			2,005
	B_{12}			1,267
	B_{13}			0
	B_{23}			0
I	B_{11}	0,833	0,53	2,169
	B_{22}	B_{11}	B_{11}	B_{11}
	B_{33}	0,853	0,46	2,393
	B_{12}	$\frac{1}{2} B_{11}$	$\frac{1}{2} B_{11}$	1,204
	B_{13}	0	0	0
	B_{23}	0	0	0
	X	0,0936	0,0940	0,0957

	Y	0,3440	0,3425	0,3437
	Z	0,1698	0,1652	0,1618
	B ₁₁	0,190	0,710	3,479
	B ₂₂	0,985	1,110	3,055
	B ₃₃	1,157	0,990	3,470
	B ₁₂	0,180	0,280	1,542
	B ₁₃	0,541	0,180	0
	B ₂₃	0,419	0,220	0,174

3-кесте.

α - $LiIO_3$ кристалларындағы атомлар арасындағы қашықтықтар (Å) менен градуслардағы мүйешлер [14]

Атомлар	[12]	[13]	[14]
Li ₁ – O ₁	2,038	2,11	2,235
Li ₁ – O ₂	2,220	2,13	2,019
I ₁ – O ₂	1,817	1,809	1,795
I ₁ – O ₃	2,873	2,892	2,908
O ₁ – O ₅	2,756	2,763	2,751
O ₁ – O ₃	2,925	2,908	2,915
O ₁ – O ₂	3,085	3,032	3,085
O ₂ – O ₅		3,535	3,538
O ₃ – O ₄		4,012	4,245
O ₂ – I ₁ – O ₆	98,65	99,50	100,00
O ₁ – I ₁ – O ₆		94,73	94,62
O ₂ – I ₁ – O ₃		78,24	78,03
O ₃ – I ₁ – O ₅		87,85	87,57
O ₃ – I ₁ – O ₆		165,73	165,30

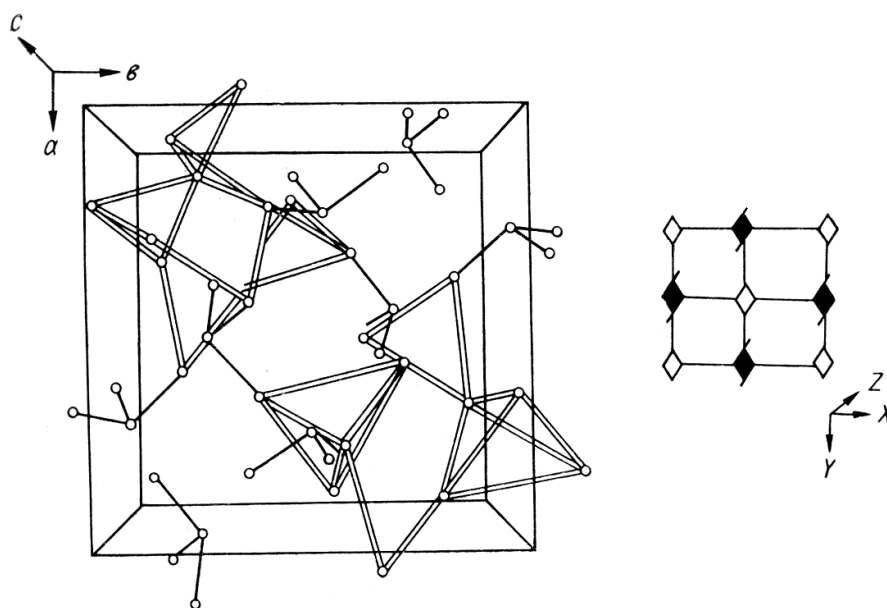
4-кесте

α - $LiIO_3$ кристаллары үшін hkl кристаллографиялық индекстер менен сол тегисликтер арасындағы қашықтықтар (I/I_0 арқалы дебаеграммадағы рентген рефлекслеринің салыстырмалы интенсивлиги белгіленген) [23]

hkl	I/I_0	d, Å	hkl	I/I_0	d, Å
100	23	4,75	104	<1	1,2472
101	100	3,50	213	6	1,2430
110'	27	2,741	222	3	1,2109
002	8	2,587	400	<1	1,1865
111	2	2,422	312	4	1,1732
200	8	2,374	114	2	1,1696
102	10	2,272	401	1	1,1567
201	18	2,138	204	1	1,1354
112	23	1,832	320	<1	1,0891
210	3	1,795	402	1	1,0785
202	3	1,750	321	3	1,0657
211	19	1,696	214	1	1,0489
103	7	1,621	313	2	1,0464
300	6	1,583	410	1	1,0359

212	3	1,473	105	2	1,0109
203	5	1,395	322	1	1,0034
220	3	1,370	304	1	1,0012
302	5	1,349	403	2	0,9775
310	1	1,3162	412	2	0,9617
311	5	1,2755			

$\beta - LiIO_3$ кристаллары татрагоналлық сингонияға, симметрияның тетрагоналлық-дипирамидалық классына, $C_4 L_4PC$ ноқатлық топарына (группасына) киреди [16-19] (2-сүўретте келтирилген). $\beta - LiIO_3$ кристалларының қурылысы да майысқан тригоналлық пирамидалар формаға ийе дискрет IO_3 топарларына ийе. Бул пирамидалардағы қашықлықлар $I - O_1 = 1,79 \text{ \AA}$, $I - O_2 = 1,63 \text{ \AA}$, $I - O_3 = 1,71 \text{ \AA}$ [18]. $\alpha - LiIO_3$ кристалларында кислородтың барлық атомлары $O - I - O$ байланысларын пайда етиўге қатнасады хәм гексагоналлық кислородлық жайластырыўлардың тығызлығы 52 % ке тең. Ал $\beta - LiIO_3$ кристалларында болса кислород атомларының жайластырыўларының тығызлығы 47 процент ғана хәм атомлардың 2/3 бөлеги ғана Z көшерине параллель болған $I - O - I - O$ спираллық байланысын пайда етиўге қатнасады. Бул дизбеклер бир бири менен $O - I - O$ байланысы менен байланысқан. Структуралардың екеўинде де байланыслар қашықлықларының орташа мәнислери бир бирине сәйкес келеди ($\beta - LiIO_3$ кристаллары ушын $I - O_1 = 1,81 \text{ \AA}$, $I - O_3 = 2,89 \text{ \AA}$, $O - I - O$ арасындағы мүйештиң шамасы $99,5^\circ$ қа тең [19]. Ал $\alpha - LiIO_3$ ушын сәйкес мағлыўматлар 3-кестеде берилген.



2-сүўрет. $\beta - LiIO_3$ кристалларындағы IO_3 хәм LiO_4 тетраэдрлериниң орайлық проекциясы [19]. IO_3 топарлары тутас сызықлар менен, ал LiO_4 тетраэдрлериндеги $O - O$ байланыслары қос сызықлар менен сәўлелендирилген. Координаталар басы 1 көшериниң бойынша жайласқан.

$\alpha - LiIO_3$ менен $\beta - LiIO_3$ фазаларының кристаллық қурылысындағы тийкарғы айырма литий атомларының жайласыўында болып табылады. $\alpha - LiIO_3$ кристалларында көшерлер октаэдрлик кислородлық координацияда, ал $\beta - LiIO_3$ кристалларында болса тетраэдрлик кислородлық координацияда жайласқан. $\beta - LiIO_3$ фазасында төрт LiO_4 тетраэдри (0001) тегислигине параллель болған изоляцияланған сақыйналарды пайда етеди. Хәр бир сақыйна төрт татраэдрге ийе болады, олар Z көшериниң бағытында бир бири менен IO_3 топарлары арқалы байланысқан. Ал Z көшерине парпендикуляр бағытта еки IO_3 топары арқалы байланысады. Бир элементар қутыша усындай еки сақыйнаға ийе болады. $Li - O$

арасындағы қашықтық $1,87 - 2,13 \text{ \AA}$, ал олар арасындағы мүйешлер $92 - 123^\circ$ қа тең [21]. $Li - O$ байланысы үшін орташа қашықтық $1,98$ ангстремге тең хәм бал шама кислородтың төрт қайтара координациясындағы орташа қашықтыққа сәйкес келеди. 5-кестеде $\beta - LiIO_3$ кристаллары үшін hkl кристаллографиялық индекслер менен сол тегисликлер арасындағы қашықтықлар берилген.

5-кесте

$\beta - LiIO_3$ кристаллары үшін hkl кристаллографиялық индекслер менен сол тегисликлер арасындағы қашықтықлар (I/I_0 аркалы дебаеграммадағы рентген рефлекслериниң салыстырмалы интенсивлиги белгиленген) [20]

hkl	I/I_0	$d, \text{ \AA}$	hkl	I/I_0	$d, \text{ \AA}$
110	5	6,91	002	5	3,074
101	20	5,19	102	35	2,928
201	60	3,811	301	18	2,862
211	25	3,438	311	8	2,745
220	30	3,432			

Метастабилли $\gamma - LiIO_3$ кристаллары орторомбалы элементар қутышаға ийе болады [21] хәм α менен β фазалары арасындағы аралықтық фаза болып есапланады [20-21]. $\gamma - LiIO_3$ кристалларының дифракциялық картинасы (дебаеграммасы ямаса дифрактограммасы) $\alpha - LiIO_3$ кристалларының дифракциялық сүүретине (картинасына) жақын келеди (3-сүүрет). Бундай жағдайда IO_3 топарлары системасы $\alpha - LiIO_3$ ге салыстырғанда метрлик жақтан бузылған деп есапланады, ал литий атомлары болса $\beta - LiIO_3$ кристалларындағыдай тетраэдрлик координацияларда жайласады.

6-кесте.

$\gamma - LiIO_3$ кристаллары үшін 253°C температурадағы hkl кристаллографиялық индекслер менен сол тегисликлер арасындағы қашықтықлар [21]

hkl	$d_{\text{экспер.}}$	$d_{\text{есаплаў}}$	hkl	$d_{\text{экспер.}}$	$d_{\text{есаплаў}}$
011	4,991	4,994	221	2,158	2,157
020	4,713	4,715	132	1,993	1,992
101	3,945	3,949	212	1,932	1,933
021	3,679	3,679	013	1,921	1,923
111	3,638	3,642	231		1,919
120	3,528	3,529	042	1,840	1,840
121	3,028	3,027	123	1,715	1,715
002	2,950	2,944	232	1,672	1,6714
012	2,808	2,810	311		1,6712
031	2,766	2,772	043	1,510	1,508
200	2,661	2,662	223	1,497	1,498
022	2,501	2,497	331	1,492	1,494
040	2,357	2,357	004	1,472	1,472
211	2,357	2,349	014	1,453	1,454
220	2,317	2,318	322	1,447	1,447
041	2,186	2,188			

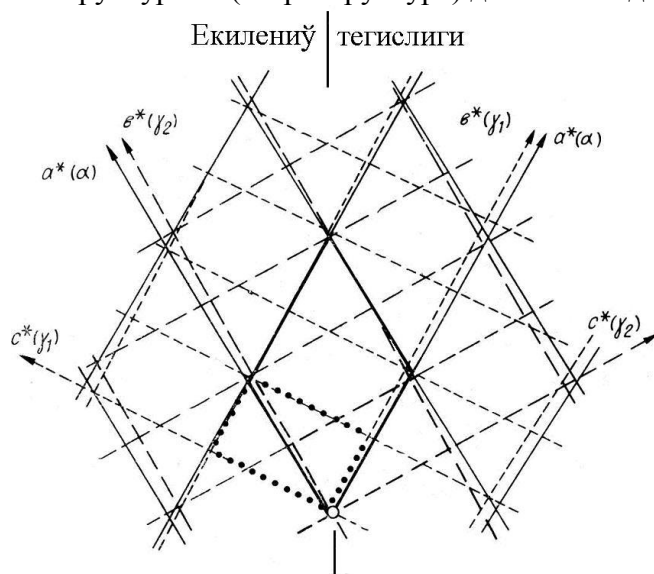
7-кесте

Литий иодаты кристалларының физикалық-химиялық қәсийетлери.

Қәсийетлер	Литий иодаты кристалларының фазалары бойынша эксперименталлық мағлыўматлар		
	α	β	γ
Тығызлығы, г, см^3			

Пикнометрлік 20 ⁰ С	4,48	4,16	
23 ⁰ С	4,45	4,14	
Рентгенографиялық мағлыұматлар бойынша есепленған (265 ⁰ С)	4,39	4,10	4,35
Ериұ температурасы, ⁰ С			
$\beta - LiIO_3$	435		
$\gamma - LiIO_3$	419-420		
Энтродия, ккал/моль			
$\alpha - \gamma - LiIO_3$	0,43		
$\gamma - \beta - LiIO_3$	0,17		
Жылыұ жыллылығы ΔH , ккал/моль			
$\alpha - \gamma - LiIO_3$	5,7		
$\gamma - \beta - LiIO_3$	6,31		
Жыллылық сыйымлығы C_p , кал·град ⁻¹ ·моль ⁻¹	$(15,87 \pm 2,826) \cdot 10^{-2} T$ 24,7		
Жыллылық кеңейіұ коэффициенти, $10^{-6}/^0C$ $\alpha - LiIO_3$ С көшерине параллель		45	
С көшерине перпендикуляр $\beta - LiIO_3$ (2-350 ⁰ С интервалда) С көшерине параллель		25	
С көшерине перпендикуляр		5,4	
С көшерине перпендикуляр		31	
Кюри температурасы T_c , ⁰ С		255 $\pm$ 1	

Бирак $\beta - LiIO_3$ кристалларының дәл атомлық-кристаллық қурылысы усы ұақытларға шекем балгисиз болып келмекте. 6-кестеде бундай кристаллардың орторомбалы қутыша тийкарында есапланған хәм экспериментлерде алынған кристаллографиялық тегисликлер арасындағы қашықлықлардың мәнислери берилген. $LiIO_3$ кристалларының α хәм β фазаларының кристаллық пәнжерелериниң турақлылары арасындағы айырмаларды таллаұ арқалы [20] ның авторлары $LiIO_3$ кристалларының γ -фазасын гексагоналлық α -фазаның асаструктурасы (сверхструктура) деп болжайды.



3-сұұрет.

Литий иодаты кристалларындағы α -фазаның $hk0$ қатламлары (тутас сызықлар) менен екиленген γ_1 хәм γ_2 фазалардың $0kl$ тегисликлери арасындағы ориентациялық қатнас схемасы.

Литий иодаты кристалларының усы ўақытларға шекем белгили болған тийкарғы хэм термодинамикалық кәсийетлери хаққындағы мағлыўматлар 7-кестеде берилди.

2-§. Литий иодаты кристалларындағы $\alpha - \beta - \gamma$ фазалық өтиўлер

Литий иодаты монокристалларын әдетте еритпелерден кристаллизациялануы ұсылы менен алады. Либертцтің (Libertz J.) мағлыұматлары бойынша [16] ұсындай кристаллизациялануыдың салдарынан гексагоналлық, ал Мацамураның мағлыұматлары бойынша [20] «ортормбалық» γ-фаза қәлиплеседи. Бир қатар авторлардың жұмыслары бойынша γ-фаза 250-285⁰С салыстырмалы орнықлы. Бундай фаза гексагоналлық $LiIO_3$ кристалларын 247 – 249⁰С температурасына шекем қыздырғанда алынады. 185⁰ дан жоқары температураларда ямаса 300⁰С температурада экзотремалық рәуиште ямаса 250 - 300⁰С интервалында β-фазаның излери болған жағдайдарда $\gamma \rightarrow \beta$ фазалық өтиуи орын алады [11].

Бир қанша мағлұматлар бойынша литий иодаты еритпесін киші температураларға аса қыздырған жағдайларда ийне тәрізлі ямаса призма тәрізлі монокристаллар түрінде өседі. Жоқары темпратраларға қыздырыу γ -фазаға тийісли болған пластинка тәрізлі кристаллардың өсіуіне алып келеді. β -фаза 435°C , ал γ -фаза 420°C температурада ерийді. Бул жағдай литий иодаты кристалларының екі еріу темпратрасының бар екенлігін билдиреди. $420 - 325^{\circ}\text{C}$ температуралар аралығында γ -фаза бірден (бір неше секундлар дауамында) экзотермалық рәуиште β -фазаға өте алады. Бул жағдайда үлгинің температурасы секирмели түрде $6 - 8^{\circ}$ қа жоқарылайды. Егер жоқарыда көрсетілген температуралар интервалында сондай фазалық өтиу орын алмаса қуйманы $210 - 200^{\circ}\text{C}$ температурасына шекем салқынлатқанда γ -фаза экзотермалық рәуиште α -фазаға айланады. Кери $\alpha \rightarrow \beta$ өтиуі $234 - 244^{\circ}\text{C}$ температураларына шекем жоқарылатқанда орын алады. $250 - 325^{\circ}\text{C}$ температуралар интервалындағы қайтымсыз $\gamma \rightarrow \beta$ өтиуі (ямаса $170 - 250^{\circ}\text{C}$ температураларындағы $\alpha \rightarrow \beta$ өтиулері) бір неше рет қайталанылған қыздырыу – салқынлатыу циклларының нәтижесінде избе-излік пенен қайталанады. Бул жағдайдардың барлығы да 8-кестеде берілген.

8-кесте.

Литий иодаты кристалларындағы үлгілердің таярланыуы менен кристалланыу шәртіне байланысly орын алатуғын фазалық өтiулердiң схемалары

№	$LiIO_3$ кристалларының пайда болуы шарттери	$LiIO_3$ кристалларындағы фазалық өтиўлер, °C
	Кристаллизацияланыў:	
I	Нейтрал орталықтағы кристаллизиция	$ \begin{array}{ccccc} \sim 247 & & \sim 285; 300 & & \sim 435 \\ \alpha & \leftrightarrow & \gamma & \leftrightarrow & \beta \rightarrow \text{еритпе} \\ \sim 200 & & & & \underbrace{\hspace{10em}}_{\sim 390} \end{array} $
II	HIO_3 ямаса β -фаза қатнасқанда; бир неше салқынлатыў – қыздырыў циклинен кейин [11]	$ \begin{array}{ccc} & 240 + 285 & \\ & \gamma \rightarrow \beta & \end{array} $
III	Қышқыл орталықта	$ \begin{array}{ccc} \sim 240 & \sim 435 & \\ \alpha \rightarrow \beta & \leftrightarrow & \text{еритпе} \\ & \sim 435 & \end{array} $
		$ \begin{array}{ccc} \sim 250 & \sim 435 & \\ \alpha \rightarrow \beta & \rightarrow & \text{еритпе} \\ & \sim 435 & \end{array} $
IV	Еритпени аса қыздырыў	
	$< 5^0$	$ \begin{array}{ccc} \sim 435 & & \\ \beta \rightarrow \text{еритпе} & & \\ \sim 435 & & \end{array} $

	$> 5^0$	$ \begin{array}{ccc} 230 \div 244 & & 420 \div 325 \\ \alpha & \xleftrightarrow{\quad} & \gamma & \xrightarrow{\quad} & \beta \\ 200 \div 210 & & \sim 420 & \uparrow \downarrow & \sim 420 \\ & & \text{еритпе} & & \\ & & 250 \div 325 & & \sim 435 \\ \gamma & \xrightarrow{\quad} & \beta & \xleftrightarrow{\quad} & \text{еритпе} \\ \text{әстелик пенен} & & \sim 435 & & \end{array} $
V	Бир неше салқынлатыу – қыздыру циклин басынан кеширген γ -фазадан туратуғын куйма ушын.	
	75^0C температурадан төменги температуралардағы бир неше ай дауамындағы әстелик пенен жүргизилген рекристаллизация.	$ \begin{array}{ccc} & & < 75 \\ & & \beta \rightarrow \alpha \end{array} $

Жокарыда келтирилген кестедеги мағлыұматлар, баска да әдебиятларда орын алған мағлыұматлар тийкарында литий иодаты кристалларындағы фазалық өтиұлер бойынша мынадай жуұмақлар шығарыуға болады:

Нормал басымларда 75^0C температурасына шекем LiIO_3 кристалларының гексагоналлық модификациясы, ал 75^0C да жокары температураларда тетрагоналлық β -фаза орныклы, әдеттегидей шараятларда γ -фаза метастабилли фаза болып табылады, ал $210 - 420^0\text{C}$ температуралар интервалында γ -фаза салыстырмалы орныклы. α -фаза кристаллары $75 - 250^0\text{C}$ температураларында салыстырмалы орныклы. Себеби бул фазаның β -фазаға өтиуи ушын атомлық-кристаллық курылыстың үлкен өзгерислерге ушырауы керек.

[22]-жумыстың авторлары литий иодаты кристалларының гексагоналлық фазасының (α -фазасының) жыллылық кеңейиу коэффициентлериниң мәнислериниң төмендегидей екенлигин көрсетти (7-кестени қараңыз, бул шамалар бизиң эксперименталлық нәтижелеримиз бенен салыстырыу ушын зәрүрли):

$$k_a = 2,81 \cdot 10^{-5} \frac{1}{K},$$

$$k_c = 5,44 \cdot 10^{-5} \frac{1}{K}.$$

3-§. Базы бир жуұмақлар

[11-22] жумысларды үйренип хәм таллап симметрия орайы жоқ литий иодаты кристалларында үш кристаллық фазаның болыуының мүмкин екенлигин көрдик. Сол үш фазаның бирейи болған гексагоналлық α -фаза көбирек қолланылады. Усыған байланысly $\alpha - \text{LiIO}_3$ кристалларының физикалық-технологиялық қәсийетлерин изертлеуге көбирек әхмийетлер берилмекте. Бундай кристаллардан жокары технологиялық қәсийетлерге ийе пьезоэлектрлик түрлендиргишлер соғылады.

Бир қанша эксперименталлық илимий изертлеу жумысларының барысында 70^0C дан 120^0C температуралары орталығында LiIO_3 кристалларының айырым электрфизикалық қәсийетлериниң қайтымсыз өзгеретуғынлығын көрсетти. Бундай өзгерислердиң себеплери, физикалық механизмлери хаққында хеш қандай мағлыұматлар жоқ. Кристаллық объекттиң физикалық қәсийетлериниң қәлеген өзгерислерин оның атомлық-кристаллық курылысының өзгериси менен байланыстырған мақсетке мууапық келеди. Усы жағдайға байланысly литий иодаты кристалларын $70^0\text{C} \div 120^0\text{C}$ температуралар интервалында рентгенографиялық жоллар менен изертлеудиң зәрүрлиги пайда болды.

Солай етип бул лабораториялық жумыс литий иодаты кристалларының физикалық қәсийетлериниң $70^0\text{C} \div 120^0\text{C}$ температуралар интервалындағы қайтымсыз өзгерислерин рентгенографиялық жол менен изертлеу мақсетинде орынланады.

II бап. Эксперименттің техникасы менен усыллары

4-§. Сапалық фазалық таллау

Фазалық таллау деп берілген системадағы фазалардың санын анықлау менен олардың идентификациясына (атомлық-кристаллық қурылысын анықлауға) айтамыз.

Рентгенографияда хәр бир фаза өзине тән дифракциялық сүүретти береді. Бул сүүретлер бир биринен дифракциялық сызықтардың саны, интенсивлиги, орны (мүйешлік координаталарда 2θ мүйеши, θ мүйешиниң мәніси Вульф-Брегг теңлемеси $2d \cdot \sin \theta = n\lambda$ жәрдеминде анықланады) менен айрылады. Ал дифракциялық сызықтардың саны, интенсивлиги, орны болса берілген заттың элементар қуышшаларындағы атомлардың қалай жайласқанлығына тиккелей байланысly. Хәзирги заман рентгенструктуралық анализи бирдей кристаллық структураға ийе болған еки заттың табылмайтуғынлығын айқын түрде көрсетти. Сонлықтан рентгенограммалар (рентген нурларының дифракциясы түсірілген фотопенка) берілген затты бир мәнісли етип анықлай алады. Бир неше кристаллық затлардың араласпасынан туратуғын үлгіден алынған рентгенограммаларда хәр бир затқа тийисли рентгендифракциялық сүүрет қәлиплеседі. Сонлықтан бундай рентгенограмма хәр бир затты айырып алып түсірілген рентгенограммалардың қосындысынан турады.

Дифракциялық анализ бир кристаллық заттағы фазаларды идентификациялаудың туұрыдан-туұры усылы болып табылады. Дифракциялық анализ болса рентгендифракциялық, электронографиялық хәм нейтронографиялық анализлерден турады. Биз питкеріу қәнигелик жумысында рентгендифракциялық анализди (рентген анализинен) пайдаланамыз.

Рентгендифракциялық анализде рентгенограмманы ямаса дифрактограмманы өлшеу арқалы биринши гезекте дифракциялық мүйештиң мәніси, дифракциялық сызықтың (рентген рефлексиниң) интенсивлиги анықланады. Рентгенограммаларда алынған дифракциялық сызықтың интенсивлиги қуралланбаған көз бенен бақаланады (4-6 кестелердеги I/I_0 шамаларының мәніслери көз бенен бақаланған).

Рентгенографиялық анализдиң электронография менен нейтронографиядан артықмашлықлары усылдың жоқары исенимлиги менен экспресслигинде. Усыл бойынша фазалардың бар ямаса жоқ екенлиги туұрыдан туұры анықланады. Буның ушын алынған дебаеграмма ямаса дифрактограмма берілген фаза ушын алдын-ала түсірилип алынған эталон рентгенограмма менен салыстырылады ямаса хәзирги заман компьютерлик технологиялары рентгенограмманы өлшеу жолы менен алынған тегисликлер арасындағы қашықлықлар бойынша (4-6 кестелерди қараңыз) жүргизилген есаплаулар тийкарында кристаллық фазаның элементар қуышшаларының турақлылары анықланады. Бул еки усыл да исенимli усыллардың қатарына киреді.

Бирақ экспериментлер өткеріу барысында бир қатар қыйыншылықлар да ушырасады. Мысалы араласпыдығы фазаның муғдары 1 проценттен кем болса рентгенограммалар менен дифрактограммаларда оларды бақлау мүмкиншилиги болмайды. Бир фазаның табыла алыушылық қәсийетлери бир қатар жағдайларға байланысly: араласпадағы атомлардың атомлық номеринен (себеби дифракциялық сызықтардың интенсивлиги атомлық номердиң үлкейіуі менен бирге үлкейеді), кристалдың элементар қуышшасының өлшемлери менен симметриясынан, және де басқа факторлардан ғәрезли. Кристалдың симметриясы қаншама жоқары болса рентгенограммалардағы сызықтардың саны киши, бирақ олардың интенсивликлери жоқары болады. Буның себеби мыналардан ибарат: кублық кристалларда hkl кристаллографиялық тегислиги 48 рет қайталанады (қайталаныу факторының саны), ал триклинлик кристалда бир сызыққа тек hkl менен hkl еки тегислиги ғана сәйкес келеді (бул жағдайда қайталаныу факторы 2 ге тен).

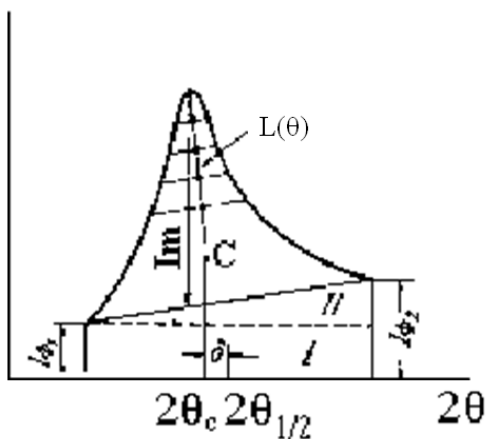
Усылдың сезгирлигин анықлайтуғын әхмийетли факторлардың бири изертленилип атырған заттың кристаллитлериниң өлшемлери болып табылады. Кристаллитлердиң геометриялық өлшемлери қаншама киши болса дифракциялық максимумлардың мүйешлик өлшемлери үлкен болады хәм нәтийжеде дифракциялық сызықлар жайылған болады. Нәтийжеде оларды рентгенограммалардағы фоннан айырып алыу мүмкиншилиги жоғалады. Егер изертленип атырған үлгидеги кристаллитлердиң сызықлы өтшемлери 10^{-5} см ден киши болғанда анық рентген рефлекслерин (дебай сызықларын) алыудың мүмкиншилиги пүткиллей жоғалады [24].

Сапалық фазалық анализде үлгидеги белгили бир кристаллық қурылысқа ийе фазаның бар ямаса жоқ екенлиги ғана анықланады (фазалардың муғдарларының қатнастары хаққындағы мағлыұматлар алынбайды). Биз экспериментлерди УРС-2 ,0 рентген аппаратына орнатылған мыс аноды бар рентген трубкасының нурланыуында РКУ-114 камерасында түсирдик. Цилиндрлик фотопленкасының диаметри 114 мм болған камерада дебаграммалардың түсирилетуғынлығын атап өтемиз. Жоқары температуралардағы сүүретлер ДРОН-2 ,0 рентген дифрактометриниң жәрдемінде түсирилди. Берилген температураны ушлап турыу ушын стандарт болған жоқары температуралы рентгендифрактометрлик УВД-2000 камерасы пайдаланылды. Бул камера температураны $\pm 2^0$ дәлликте ушлап турыуға мүмкиншилик береди.

5-§. Кристаллық пәнжерениң турақлыларының температурадан ғәрезлигин анықлау

Кристалллардың температурасын өзгертиу аркалы структуралық фазалық өтиулерди (биринши хәм екинши тәртипли), айырықша кристаллографиялық бағытлардағы жыллылық кеңейиуи нызамлықларын рентгендифракциялық анықлау усылы басқа дилатометриялық усыллардан артықмашлықларға ийе. Көп фазалы кристаллық бирикпелерде таңлап алынған бир неше фазаның жыллылық кеңейиулерин бир тәжирийбеде өлшеу хәм сол фазалар дүзилисиндеги температуралық өзгерислерди бақлап барыу, нәтийжелердиң қалдық қосымталарда жүретуғын процесслерге байланыссызлығы хәм т.б. [25-27].

Жоқары температураларда кристалллар дүзилисин үйрениу ДРОН типиндеги стандарт дифрактометрлерде УВД-2000 температураны орнатыушы қосымша жәрдемінде әмелге асырылады. Бул қосымша дүзилис кристаллдың температурасын басқарылған түрде өзгертиу, кристалл температурасын өлшеу дауамында турақлы ушлап турыу мүмкиншилигин береди. Кристалдың температурасы термопаралар жәрдемінде өлшенеди. Қосымша дүзилис кристаллға түсиуши хәм шашыраған толқынлар интенсивликлериниң минимал жутылыуын тәмийинлеуши жуқа фольгалы айналарға ийе.



4-сүүрет.
Дифракциялық максимумлардың дәл мәнисин анықлау усылын түсиндириу ушын арналған сызылма

Рентгендифрактометрия усылында тәжірийбеде өлшенетуғын шама - еки еселенген дифракция мүйеши. Кристалдан шашыраған рентген нурлары арнаўлы детекторларда (счетчиклердиң жәрдемінде) қабылланып, күшейтилип, диаграммалық потенциометрлерге бериледи. Диаграммалық потенциометрде қағаздың хәм дифрактометрдиң θ - 2θ фокуссланыўында айланыўшы кристалл-детектордың тезликлерин хәр қыйлы қатнастарда өзгерте отырып алынған дифрактограммалар арқалы кристалл турақлыларының берилген температуралардағы мәнислерин үлкен дәлликте өлшеўге болады. Дифрактограммалардан максимум орайларын анықлаў рентгенография әмелиятында бир неше усыллар жәрдемінде жүргизиледи. Биз максимум орнын анықлаўда төменги усылды қолландық: фонлық шашыраў интенсивлиги ажыратылғаннан кейин максимум бийиклигиниң ярымын анықлаймыз, сол бийикликтеги максимум кеңлигиниң ярымынан ултанға түсирилген нормаль 2θ мәнисин береді (4-сүўрет). Өлшенген дифракция мүйеши арқалы Вульф-Брегг теңлемеси жәрдемінде атомлық тегисликлер арасындағы қашықлықлар d (d_{hkl}) анықланады. Атомлық тегисликлер арасындағы қашықлықлар арқалы квадратлық теңлемелер деп аталыўшы кристаллографиялық аңлатпалар жәрдемінде кристаллық пәнжере турақлыларын анықлаўға болады.

Кристаллық пәнжере турақлыларының жыллылық кеңейиўи коэффициентин анықлаў ушын хәр қыйлы температураларда дифракция мүйеши өлшенеди. Вульф-Брегг теңлемеси арқалы сол температуралардағы кристалл турақлылары анықланады. Мейли, T_1 хәм T_2 температураларда кристаллық пәнжере турақлылары сәйкес d_1 хәм d_2 болсын. Онда жыллылық кеңейиўи коэффициентин төмендеги аңлатпа тийкарында анықлаўға болады:

$$\alpha = \frac{1}{l_c} \frac{d_2 - d_1}{T_2 - T_1}.$$

Бунда l_c арқалы әдеттеги температурадағы кристаллық пәнжере турақлысы.

Өлшеўлерди хәр қыйлы температураларда жүргизе отырып $f = f(T)$ графигин дүзсек таңлап алынған фазаның пәнжере турақлысының температураға байланыслы өзгерисин хәм жыллылық кеңейиўи коэффициентиниң мәнисин анықлаймыз.

6-§. Рентгентопографиялық мүйешлик сканнерлеў усылы

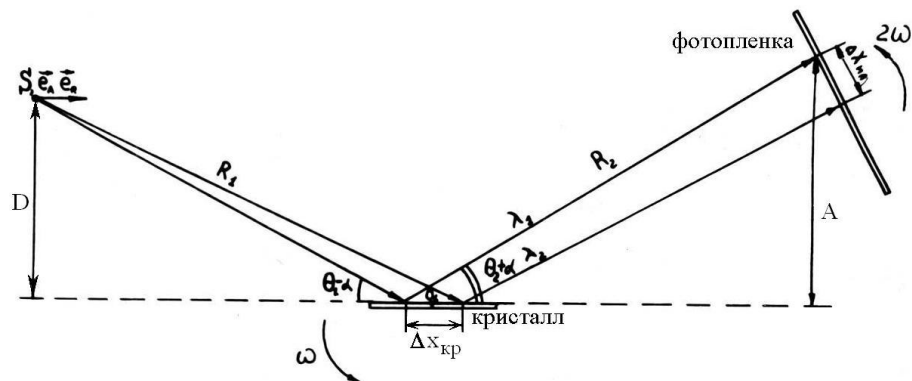
[28]-жумыстың авторлары кристаллардағы фазалық өтиўлерди изертлегенде рентгентопографиялық усылды сайлап алыўда төмендегидей талаптарды басшылыққа алыўдың зәрүр екенлиги көрсетилген:

а) схема жеткилики дәрежеден үлкен болған рентген нурлары дереги – изертленетуғын үлги және изертленетуғын үлги – фотопенка қашықлықларына ийе болыўы керек. Бул изертленетуғын үлгиге хәр қыйлы физикалық тәсирлер (жыллылық, механикалық, электрлик, оптикалық хәм басқалар) түсириў ушын керек.

б) кристаллардың субструктурасының фрагментлеринен (бөлимлерин) алынатуғын контрастар олардың бағыттарының хәр қыйлы болатуғынлығынан ғәрезли болмаўы керек.

в) хәр қыйлы температураларда рентгендифракциялық изертлеў жумысларын жүргизиў ушын усыл жеткилики дәрежеде экспресс болыўы керек.

Рентгентопографиялық усыллардың экспресслигин (киши ўақытлар ишинде топографиялық сүўретлер алыў) арттырыў, соның менен бирге жоқарыда келтирилген а) және б) пунктлерде келтирилген шәртлерди қанаатландырыў мақсетинде кристаллардың топографиялық сүўретин алыўды нурланыўдың характеристикалық спектрин қосымша түрде пайдаланыў усынылды [29]. Бундай усылдың оптикалық схемасы 5-сүўретте берилген.



5-сүүрет. Мүйешлик сканнерлеу усылының оптикалық схемасы [29].

S аркалы рентген нурлары дереги, e_R хәм e_A аркалы сәйкес радиаллық хәм азимуталлық бағатылар (кейингиси сүүрет тегислигине перпендикуляр), R_1 хәм R_2 аркалы сәйкес дерек-үлги хәм үлги-фотопенка қашықлықтары белгиленген.

S аркалы белгиленген нокатлық рентген нурлары дерегинен рентген гониометрии көшерине орнатылған үлгиге келип түседі. Кристаллық үлгиден A қашықлығына жайластырылған фотопенкада Шульц усылындағы жағдайдағыдай хәр бир ўақыт моментинде кристалдың бетиниң топографиялық сүүрети қәлиплеседи. Экспозиция барысында кристалл O_1 көшериниң дөгерегинде $\Delta\varphi$ мүйешлик интервалында ω мүйешлик тезлиги менен сканнерленеди (буны мүйешлик сканнерлеу деп атаймыз). Ал пленка болса курамалы түрде қозғалыуы керек. Ол O_1 көшери дөгерегинде 2ω мүйешлик тезлиги, ал O_2 көшери дөгерегинде $-\omega$ тезлиги менен қозғалады. Бундай қозғалыста фотопенканың бети кристалдың бетине параллель болып қалады, ал O_1 нокатында дифракцияға ушыраған нур O_2 нокатына келип түседі. Кристалдың хәр бир учаскасының топографиялық сүүрети хәр қыйлы ўақыт моментинде хәр қыйлы узынлықтағы толқынлар тәрөпинен пайда етиледі. Бундай геометрияда сүүретке түсиргенде сүүретлердиң сәйкес нокатлары бир бириниң үстине түседі. Сонлықтан сүүретти пайда етиўши толқын узынлықлары интервалына характеристикалық спектр сызығы киретуғын болса топограмма алыў ушын кететуғын ўақыт Шульц усылында топограмма алыў ушын керек болған ўақытқа салыстырғанда әдеўир кемейеди.

Егер дерек-үлги хәм үлги фотопенка қашықлықлары R_1 хәм R_2 (ямаса A хәм D) изертленетуғын кристаллық үлгиниң сызықлы өлшемлерине салыстырғанда әдеўир үлкен болса, онда кристалдың хәр қыйлы нокатлары арасындағы қашықлықлар R_1' хәм R_2' шамаларының өзгерисин аз деп есаплаўға, соның менен бирге бул қашықлықларды R_1 хәм R_2 қашықлықларына тең деп қабыл етиў мүмкин. Бул усылда R_1 хәм R_2 шамалары өзгерисиз қалады, ал кристалдың сүүретин пайда етиўге қатнасатуғын толқын узынлықлары ушын θ мүйеши хәр қыйлы мәнислерге ийе болады. $\alpha \neq 0$ хәм $\alpha \neq \frac{\pi}{2}$ болған жағдайларда $P_R = P_R(\theta)$ хәм усыған сәйкес кристалдың сүүрети хәр бир толқын узынлығында өзине сәйкес P_R үлкейтиў коэффициенті менен бериледи. Усындай аўхалдың ақыбетинен мүйешлик сканнерлеу усылының сызықлы хәм мүйешлик ажырата алыўшылық қәбилетликлери Шульц усылының айыра алыў қәбилетликлеринен төмен болады.

Солай етип мүйешлик сканнерлеу ұсылы Шульц ұсылының дәл аналогы болып табылмайды. Бул ұсылдың ажырата алыу қабилетлиги үлгини сканнерлеу интервалы $\Delta\varphi$, θ , α мүйешлериниң функциялары болып табылады.

[29]-жұмыста $\Delta\varphi \leq 2 - 3^\circ$ болған жағдайларда экспозиция ұақтының (топограмманы алыу ұшын кететуғын ұақыт) Шульц ұсылындағы экспозиция ұақытына салыстырғанда 5-10 есе кем болатуғынлығы көрсетилди. Соның менен бирге сканнерлеудің үлкен емес интерваллары пайдаланылғанда ($< 5^\circ$) ұсыл жеткилике дәрежедеги анық топографиялық сүүреттің алынуғынлығы, соның менен бирге O_2 көшери дөгергіндеги фотоленканың айланыушы қозғалысының зөрүрлигиниң жоқлығы көрсетилди. Бул жағдай қолланылған ұсылды әдеуір әпиұайыластырды.

Мүйешлик сканнерлеу камерасын изертленетуғын кристаллық үлги менен есаплағыштың тезликлери сәйкес ω хәм 2ω болған қәлеген рентген гониометри тийкарында соғыу мүмкин. Бул питкеріу қәнигелик жұмысын орынлау ұшын ГУР-4 (УРС-50 аппараты), ГУР-5 (ДРОН-2 аппараты) хәм ГУР-8 (ДРОН-2 аппараты) рентген гониометрлери қолланылды.

7-§. Литий иодаты кристалларының кристаллық пәнжереси турақлыларының температурадан ғәрезлиги

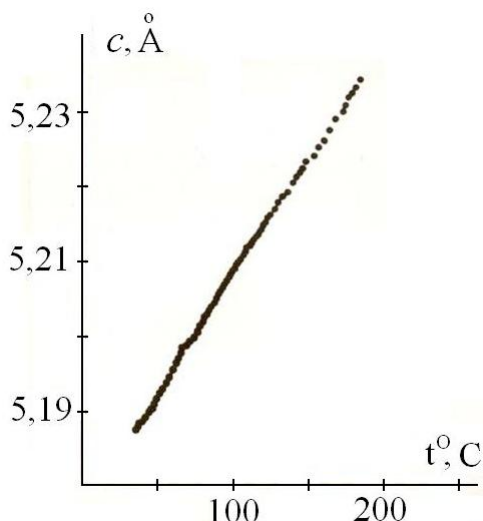
Литий иодаты кристалларының $70 - 120^\circ\text{C}$ температуралар интервалындағы физикалық қәсийетлериниң аномал өзгерислериниң орын алыуы усы районда фазалық өтиудің орын алатуғынлығы хәм жыллылық кеңейіу коэффициентлериниң өзгериске ушырайтуғынлығы хәққындағы ойларға алып келеди. Бул мәселени айқынластыруу ұшын литий иодаты кристалларының кристаллық пәнжере турақлыларының температурадан ғәрезлиги изертленди.

Кристаллық пәнжере турақлыларының температурадан ғәрезлиги ДРОН-2 дифрактометрінде мыс анодының нурланыуында өткерилди. Берилген температураны алыу ұшын жоқары температуралы рентген аппараты УВД-2000 қолланылды. Бул установка $20 - 300^\circ\text{C}$ интервалында температураны $\pm 0,5^\circ$ дәллигинде ұслап тура алады. Усындай температуралар интервалында кристаллық пәнжерениң сызықлы параметрлериниң салыстырмалы өзгерислерин $\pm 0,0005 \text{ \AA}$ дәллигинде анықланды.

Экспериментлерде бетиниң майданы $\sim 1 \text{ см}^2$ болған монокристаллық үлгилер пайдаланылды. Олардың бетлери (0001) хәм (1010) кристаллографиялық тегисликлер семействоларына параллель етип кесип алынды. $(0006)_\beta$ ($2\theta = 107,7^\circ$) хәм (6060) ($2\theta = 140,1^\circ$) дифракциялық шағылысулары сайлап алынды.

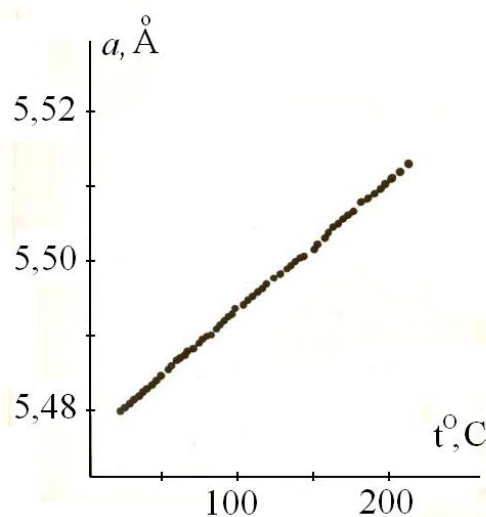
Алынған эксперименталлық нәтижелер 6- хәм 7-сүүретлерде көрсетилген.

6-сүүретте «с» параметриниң температурадан ғәрезлилигин көремиз. Бул сүүретти дыққат пенен үйрениу 80°C этирапында ғәрезликтиң қыялығының өзгерислерге ушырайтуғынлығын айқын түрде көрсетеди. 20°C дан 80°C ға шекемги температуралар интервалында жыллылық кеңейіу коэффициентиниң мәниси $\alpha_c = 6,3 \cdot 10^{-5} \text{ 1/град}$ шамасына тең. Ал 90°C дан жоқары температураларда жыллылық кеңейіу коэффициентиниң мәниси кемейеди хәм $5,7 \cdot 10^{-5} \text{ 1/град}$ шамасына тең болады.



6-сүрет.

«с» параметринің температурадан ғәрезлиги.



7-сүрет.

«а» параметринің температурадан ғәрезлиги.

Биз жоқарыда қарап өткен температуралар интервалында «а» параметринің мәніслери температурадан ғәрезли сызықлы түрде өзгереді хәм сәйкес жыллылық кеңейіуі коэффициентинің мәніси $5,7 \cdot 10^{-5}$ 1/град шамасына тең.

Жыллылық кеңейіуі коэффициентинің «с» көшери бағытындағы 60°C температурасы этирапындағы өзгеріси бурын бақланған жоқ. Соның менен бирге биз алған мағлыұматлар [30]-жумыстың авторы тәрепинен алынған мағлыұматлардан бир қанша айырмаға ийе. Биз алған мағлыұматлар менен [30] дың авторының мағлыұматлары төмендегі 9-кестеде берілген.

9-кесте

Литий иодаты кристаллары ушын жыллылық кеңейіуі коэффициентлеринің мәніслери, 10^{-5} 1/град.

α	[30] бойынша	Бизиң мағлыұматларымыз	
		80°C дан төменде	80°C дан жоқарыда
«с» көшери бойынша	5,44	6,3	5,7
«а» көшери бойынша	2,81	3,3	3,3

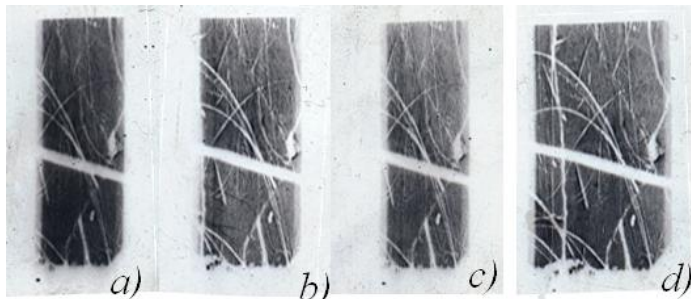
Кристаллық пәнжере турақлыларының үлгилерди қыздырғанда алынған температурадан ғәрезлиги менен үлгилерди салқынлатқанда алынған ғәрезлиги бирдей. Бул мағлыұматлардың барлығы да литий иодаты LiIO_3 кристалларында 80°C температурасы этирапында структуралық фазалық өтиў орын алады деп болжаўға мүмкиншилик береді. Бул фазалық өтиўдің өзгешеликлери кейингі параграфларда талланады. Соның менен бирге 80°C температурасы этирапындағы фазалық өтиўде кристалдың қурылысы сезилерликтей үлкен дәрежеде өзгеріслерге ушырамаўы керек. Бул «с» көшери бойынша жыллылық кеңейіуі коэффициентинің киши шамаға өзгеріуінен көринип тур. Соның менен бирге бундай киши структуралық өзгеріслердің орын алатуғынлығы рентгенопографиялық изертлеўлерде де бақланды.

8-§. Рентгенопографиялық изертлеў

$70 - 120^\circ\text{C}$ температуралар интервалында LiIO_3 кристалларында орын алатуғын структуралық өзгеріслерди тараңирек изертлеў мақсетинде рентгенопографиялық сүўретке түсириўлер әмелге асырылды. (1120) хәм (0001) тегисликлер семействоларына

параллель етип кесип алынған пластинка тәрізлі үлгілер пайдаланылды. Киши тәртіпті рентген шағылысыұлары пайдаланылды ($\theta < 25^\circ$).

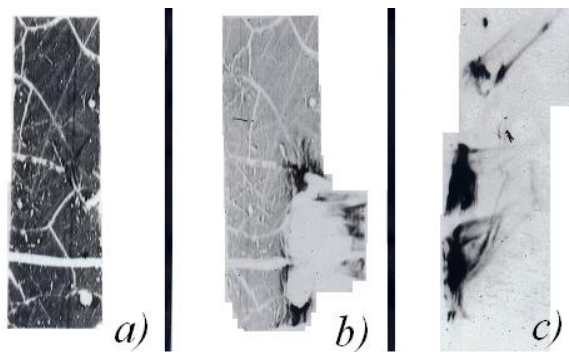
8-сұйретте литий иодаты кристалларының (1120)-кесиминен хәр қыйлы температураларда алынған мүйешлик сканнерлеу топограммалары келтирилген. Бул топограммаларда $LiIO_3$ кристалларында 120°C этирапында сезилерликтей структуралық өзгерислердің орын алмайтуғынлығы айқын түрде көринеди. Соның менен бирге 120°C температурасында үлгини узақ ўақытлар услап турыўдың да сезилерликтей структуралық өзгерислерге алып келмейтуғынлығын көрсетти (8-d сұйрет).



8-сұйрет.
 $LiIO_3$ кристалларын (1120)-кесиминен түсірилген топограммалар. а) – өжире температурасында, б) - 120°C , в) - 120°C (еки сааттан кейин алынған), д) - 120°C (6 сааттан кейин алынған)

Жоқарырақ температураларда түсірилген рентген топограммаларында кескин түрде жүретуғын структуралық өзгерислер айқын түрде көринди. 9-сұйретте келтирилген топограммалар 20°C хәм 200°C температураларында түсірилген. Рентгентопографиялық экспериментлер 160°C температурасына шекемги температураларда $LiIO_3$ кристалларында сезилерликтей структуралық өзгерислердің болмайтуғынлығын көрсетти. 200°C температурасында үлгиниң әстелик пенен қыйраўының орын алатуғынлығы мәлим болды (9-b сұйрет). Үлгиниң қыйраўының турақлы температурада ўақыттың өтиўи менен жүретуғынлығы айқын болды (9-с сұйрет). Усындай өзгерислердің салдарынан дәслепки мөлдир кристалл өзиниң мөлдирлигин толық жоғалтты, ал оннан өжире температураларда алынған дебаеграммалардағы дифракциялық сызықлардың барлығы да β -фазаға сәйкес келди. Демек биз изертлеген кристалларда 200°C температурасы этирапында қайтымсыз фазалық өтиў орын алады деген сөз.

Солай етип $LiIO_3$ кристалларын рентгентопографиялық изертлеўлер $70-120^\circ\text{C}$ температуралар интервалында сезилерликтей структуралық өзгерислердің орын алмайтуғынлығы көрсетти. 200°C температурада болса фазалық өтиў жүрип, бул үлгилердің ыдыраўына (қыйраўына) алып келеди. Бул кубылыстың төмендегидей жағдайлар менен байланыслы болыўы итимал:



9-сұйрет.
Литий иодаты кристалларының (1120)-кесиминен алынған мүйешлик сканнерлеу топограммалары.
а) – өжире температураларында, б) - 200°C хәм в) - 200°C температурасында 4 саат услап турылғаннан кейин.

[11]-жумыстың авторлары α - хәм β -фазалардың тығызлықларының сәйкес $4,48$ хәм $4,16 \text{ г/см}^3$ екенлигин көрсеткен. Сонлықтан $\alpha \rightarrow \beta$ фазалық өтиўинде кристалдың көлеми $7,2$ проценке өзгериўи шәрт. Көлемниң усындай үлкен шамаларға өзгерислери әдетте

монокристаллардың бузылыуына алып келеді. Тап усындай фазалық өтиўдің $Sm_{1-x}Gd_xS$ кристалларында да орны алатуғынлығын атап өтеміз [26-27].

Буннан кейин өткерилген дифракциялық экспериментлер α -фазаның β -фазаға өтиўиниң аралықлық γ -фаза арқалы жүзеге келетуғынлығын көрсетти. Бул ҳаққында келеси параграфларда гәп етиледі.

9-§. Фазалық өтиўлерди рентгендифрактометрлик изертлеў

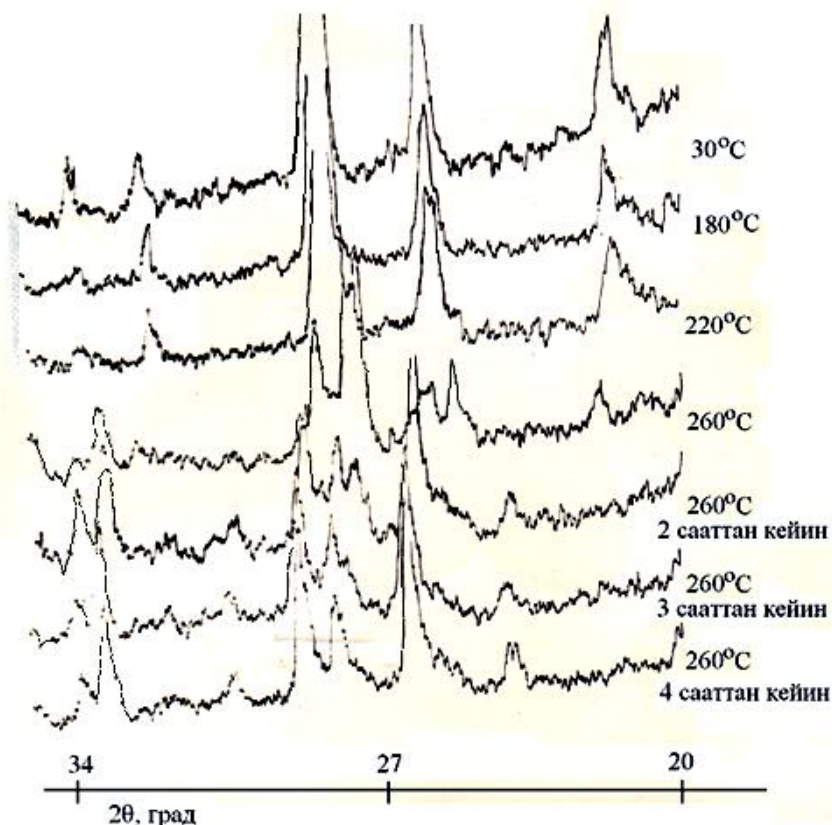
$LiIO_3$ кристалларындағы $\alpha \rightarrow \beta$ фазалық өтиўиниң кинетикалық өзгешеликлерин изертлеў мақсетинде унталған кристаллар менен хәр қыйлы температураларда рентгендифрактометрлик эксперименттер өткерилди. Бул экспериментлер ДРОН-2 рентген дифрактометринде мыс аноды нурланыуында әмелге асырылды. Рентген гониометриниң дифракцияға ушыраған рентген нурларын регистирциялаўшы есаплағышының мүйешлик айланыу тезлиги 2 град/мин шамасын қурады. Алынған дифрактограммалардың фрагментлери 10-сүўретте келтирилген.

Сүўретте келтирилген дифракциялық сызықларды дыққат пенен үйрениў 180°C температурасына шекем тек α -фазаға тийисли дифракциялық сызықлардың болатуғынлығын көрсетти. 230°C температурасында алынған дифрактограмма үлкен өзгешекликлерге ийе. Бундай дифрактограммаларда γ -фазаға сәйкес келиўши дифракциялық сызықлар орын алады. Температураны 260°C ға шекем көтергенде бул сызықлардың интенсивликлери әдеўир үлкейди. Бирақ сол температурада еки сааттан кейин бундай сызықлар толық жоғалды, ал қалған дифракциялық сызықлардың барлығы да тек β -фазаға сәйкес келди. Усындай экспериментлердиң берген мағлыўматлары бойынша метастабилли деп аталатуғын γ -фазаның α - хәм β -фазалар арасында жеңил бақланатуғынлығына көз жеткеремиз. Соның менен бирге $\alpha \rightarrow \gamma \rightarrow \beta$ фазалық өтиўлери ушын тек температура емес, ал базы бир ўақыттың өтиўиниң де зәрүр екенлигине көз жеткеремиз.

Буннан кейин өткерилген айырым экспериментлерде дифракциялық сүўреттиң өзгерисиниң 70°C этирапында жүзеге келетуғынлығы мәлим болды. Ал айырым унталған кристалларда болса фазалық өтиў 230 - 260°C интервалында бақланды. Бирақ фазалық өтиўдиң тийкарынан 200°C этирапында жүретуғынлығына биз жоқарыда көз жеткерген едик.

Буннан кейин өткерилген экспериментлер фазалық өтиўдиң хәр қыйлы үлгиде хәр қыйлы температурада жүретуғынлығын толық тастыйықлады. Солай етип фазалық өтиў ноқатына үлгиниң тарийхы менен басқа да өзгешеликлери (хақыйқый структурасы) тәсир етеди деген сөз.

Солай етип $LiIO_3$ кристалларын рентгендифрактометрлик изертлеў жоқары температураларда қайтымсыз $\alpha \rightarrow \gamma \rightarrow \beta$ фазалық өтиўлериниң орын алатуғынлығын көрсетти. Фазалық өтиў ноқаты үлгиниң тарийхы менен хақыйқый структурасына байланысly.

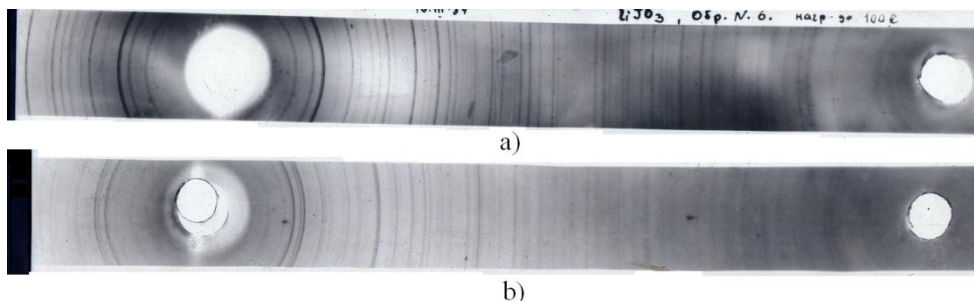


10-сүүрет.
Литий иодаты
кристалларынан хэр
кыйлы температураларда
алынган рентген
дифрактограммалары.

10-§. Дебаеграммаларды таллау

11-сүүретте унталган литий иодаты кристалларының α - хэм β -фазаларының дебаеграммалары көрсетилген. α -фазаның дебаеграммаларындагы дифракциялық сызықлар еки сызыктан турады. Сол қос сызықлардың хэлсизлерине киши дифракциялық мүйешлер сәйкес келеди. Бул кристаллар β -фазаға өткенде еки кристалға сәйкес келиўши дифракциялық сызықлар системасы пайда болады. Бул еки кристал ноқатлық симметриясы бойынша бирдей, ал кристаллық пәнжересиниң параметрлери бойынша 1-2 процентке айрылады.

Дебаеграммаларда киши параметрлерге ийе кристаллардың муғдары бойынша да аз екенлиги айқын көринеди (5 проценттен киши).



11-сүүрет. Литий иодаты кристалларының дебаеграммалары. а) α -фазаға хэм б) β -фазаға тийисли. Дебаеграммаларда $Li_{1-x}H_xIO_3$ қатты еритпесине тийисли болған дифракциялық сызықларды табыўға болады.

Хэр кыйлы турақлыларға ийе еки кристалдың бир ўақытта жасай алыў себеби айырым үлгилерде водородтың ионының ямаса атомының бар екенлигинде деп болжаймыз.

Бундай ионлар ямаса атомлар қатты еритпени пайда етеди. Бундай еритпениң химиялық формуласын $Li_{1-x}H_xIO_3$ түрінде жазыу керек.

Киргизилген атомлар (қатты еритпени пайда етиуши атомлар) кристалды кеңейтеди. Усының нәтижесинде қатты еритпеге киши дифракциялық мүйешке сәйкес келиуши дифракциялық сызықлар сәйкес келеди. Усы тийкарда литий иодаты кристалларының дебаеграммаларындағы дифракциялық сызықларды екиге ажыратыу зәрүрлиги пайда болады: бириншиси таза $LiIO_3$ кристалларына, ал екиншиси $Li_{1-x}H_xIO_3$ қатты еритпесине тийисли.

$\alpha - LiIO_3$ кристалларының дебаеграммасын индекслеудин нәтижелери 10-кестеде берилген.

10-кесте

 $\alpha - LiIO_3$ кристалларының дебаеграммасын есаплау

№	2θ , град	θ , град	$\sin(\theta)$	d , Å	hkl	d , Å, есапланған
1	18,68	9,34	0,1623	4,7500	100	18,76
2	25,5	12,75	0,2206	3,4930	101	25,55
3	29,9	14,95	0,2579	2,9882	110	29,87
4	34,6	17,3	0,2973	2,5924	002	34,66
5	37,9	18,95	0,3247	2,3838	200	38,06
6	39	19,5	0,3338	2,3094	102	39,8
7	42	21	0,3583	2,1511	201	42,03
8	48,4	24,2	0,4099	1,8805	112	48,10
9	51	25,5	0,4305	1,7906	211	51,45
10	52,4	26,2	0,4415	1,7460	202	52,494
11	56,9	28,45	0,4763	1,6182	103	56,96
12	58,4	29,2	0,4878	1,5801	300	58,56
13	60	30	0,5	1,5418	212	60,71
14	67	33,5	0,5519	1,3967	203	67,31
15	68,3	34,15	0,5613	1,3732	310	68,77
16	69,7	34,85	0,5714	1,3490	302	69,93
17	71,7	35,87	0,5856	1,3162	311	71,49
18	73,2	36,6	0,5962	1,2929	222	73,15
19	74,5	37,25	0,6052	1,2735	213	74,57
20	76,7	38,35	0,6204	1,2424	104	76,55
21	79	39,5	0,63607	1,2119	312	79,47
22	82,5	41,25	0,6593	0,6652	114	81,20
23	83,4	41,7	0,6652	1,1588	401	83,98
24	85,3	42,65	0,6775	1,1378	204	85,80
25	92,8	46,4	0,7241	1,0645	410	92,87
26	99,5	49,75	0,7632	1,0100	105	99,73
27	101,1	50,65	0,7732	0,9970	304	
28	103,8	51,9	0,7869	0,9796	412	
29	93,19	46,59	0,7265	1,0620	322	

Есаплаулар $\alpha - LiIO_3$ кристалларының кристаллық пәнжересиниң турақлыларының төмендегидей екенлигин көрсетти:

$$a = 5,46 \pm 0,01 \text{ Å};$$

$$c = 5,16 \pm 0,01 \text{ Å}.$$

Бизиң мағлыұматларымыздың әдебиятта бар мағлыұматлардан парқының бар екенлигин аңғарамыз.

Солай етип дебаграммаларды таллау барысында биз изертленген кристаллардың таза литий иодаты хэм аз муғдардағы $Li_{1-x}H_xIO_3$ катты еритпесинен туратығынлығын көрсетти.

11-§. Гейпара жуўмақлар

Жокарыда келтирилген эксперименталлық мағлыўматлар тийкарында $LiIO_3$ кристалларында 70-120⁰С интервалында орын алатуғын физикалық қәсийетлердің қайтымсыз өзгерислериниң физикалық себеплери ҳаққында төмендегидей жуўмақлар шығара аламыз:

Бизиң пикиримизше $LiIO_3$ кристалларында 70⁰С этирапында $\alpha \rightarrow \gamma \rightarrow \beta$ фазалық өтиўлери жүриўи, ал бундай фазалық өтиўлерде кристалдың көлеми 7,2 % шамасына өзгериўи шәрт. Фазалық өтиўлердің кристалдағы структуралық дефектлер бар орынларда басланатуғынлығы бәршеге мәлим (дислокациялар, ноқатлық дефектлер комплекслери хэм т.б. дефектлер этирапында). Бул кристалдың ишинде басымның үлкейиўине алып келеди (кристалды толығы менен басым астына қойған менен барабар). Ал басым болса фазалық өтиў ноқатын өзгертеди. Биз қарап атырған жағдайларда кристалл ишинде пайда болған қосымша басым фазалық өтиў ноқатын 200-250⁰С ға шекем жылыстырады. Биз изертлеген кристаллардағы $\alpha \rightarrow \gamma \rightarrow \beta$ фазалық өтиўлери қайтымсыз жүретуғын болғанлықтан литий иодаты кристалларының 70-120⁰С районындағы физикалық қәсийетлериниң өзгерислери де қайтымсыз рәўиште бақланады. Тап усындай кубылыстың басқа да кристалларда да орын алатуғынлығын биз билемиз.

Енди қайтымсыз $\alpha \rightarrow \gamma \rightarrow \beta$ фазалық өтиўлериниң механизмлери ҳаққында толық айта аламыз. Буның ушын биз бақлаған фазалық өтиўлердің төмендегидей өзгешеликлериниң бар екенлигин еслетип өтемиз:

1. Фазалық өтиўдің дәрежеси ўақыттан ғәрезли.

2. Фазалық өтиў дәрежеси температураның функциясы болып табылады, температура қанша жоқары болса $\alpha \rightarrow \gamma \rightarrow \beta$ фазалық өтиўлериниң де тезлиги соншама жоқары болады.

3. Бақланған фазалық өтиўлер қайтымсыз рәўиште жүреди.

Бул мағлыўматлардың барлығы да биз үйренген фазалық өтиўлерде атомлар менен молекулалардың диффузиясының үлкен орынды ийелейтуғынлығын билдиреди. Солай етип литий иодаты кристалларындағы фазалық өтиўлер мартенситлик фазалық өтиўлер болып табылмайды.

Бул жуўмақлардың дурыслығын [31-32] жумыслардың нәтийжелери де тастыйықлайды.

Пайдаланылған әдебиятлар дизими

1. Андре Гейм, Филип Ким. Углерод – страна чудес. «В мире науки». 2008. Июль. 30-37.
2. Novoselov K. S. et al. «Electric Field Effect in Atomically Thin Carbon Films», *Science* 306, 666 (2004).
3. Geim A. K., Novoselov K. S. The rise of graphene. *Nat. Mat.* **6**, 183 (2007).
4. Елецкий А. В., Смирнов Б. М. Фуллерены и структуры углерода. — Успехи физических наук, 1995, № 9.
5. Борщевский А. Я., Иоффе И. Н., Сидоров Л. Н., Троянов С. И., Юровская М. А. Фуллерены — Нанометр, июнь 2007.
6. Фуллеренлер ҳаққында мақалалар: <http://fulleren.com/articlesf1.php>.

7. D. Campbell, [A. McL Mathieson](#) and M. F. Mackay. The absolute structure of LiIO_3 crystals. *Acta Cryst.* (1969). B25, 1214-1215.
8. A. E. Aliev, A. Sh. Akramov, L. N. Fershtat, P. K. Khabibullaev. Mechanism of a superior phase transition in $\alpha\text{-LiIO}_3$. *Physica status solidi (a)*. Volume 108, Issue 1, pages 189–196, 16 July 1988.
9. [Viera Trmoucová](#), [František Hanic](#), [Tatjana Šrámková](#), Andrej Škubla. Martensitic $\alpha \leftrightarrow \gamma$ Phase Transition and Ionic Conductivity in "Pure" and Doped LiIO_3 Single Crystals. *Materials Science Forum* (Volumes 480 – 481 Cross-Disciplinary Applied Research in Materials Science and Technology) p. 405-410.
10. Chen Liguan. Phase transition of the dispersed system LiIO_3 ($\gamma\text{-Al}_2\text{O}_3$). *Chinese Phys. Lett.* 4. 169. 1987.
11. Arend H., Remoissenet M., Staehlin W. Thermoanalytical study of the polymorphism in LiIO_3 .—*Mat. Res. Bull.*, 1972, v. 7, N 9, p. 869—872.
12. Rosenzweig A., Morosin R. A reinvestigation of the crystal structure of LiIO_3 .—*Acta crystallogr.*, 1966, v. 20, N 6, p. 758—761.
13. De Boer J. L., Van-Bolhuis F., Olthof-Hazekamp R., Vos A. A reinvestigation of the crystal structure of lithium iodate.— *Acta crystallogr.*, 1966, v. 21, N 5, p. 841—843.
14. Эмирамиев А., Кочаров А. Г., Ямзин И. И., Любимцев В. А. Нейтронодифракционное уточнение структуры $\alpha\text{-LiIO}_3$.— *Кристаллография*, 1973, т. 18, № 6, с. 1177—1181.
15. Эмирамиев А., Кочаров А. Г., Ямзин И. И., Любимцев В. А. Тепловые параметры атомов в $\alpha\text{-LiIO}_3$.— *Кристаллография*, 1976, т. 21, № 2, с. 391.
16. Libertz J. Dimorphie von Lithiumjodat.— *Z. Phys. Chem.*, N. F., 1969, Bd 67, N 1—3, S. 94—97.
17. Umezawa T., Ninomiya Y., Tatuoka S. Crystal growth and dimorphism of lithium iodate.— *J. Appl. Crystallogr.*, 1970, v. 3, N 5, p. 417—419.
18. Азарова Л. А., Виноградов Е. Е., Михайлова Е. М., Пахомов В. И. О подобии структур кристаллов тетрагональной β -модификации LiIO_3 и $\text{Ce(IO}_3)_4$.— *Доклады АН СССР*, 1972, т. 206, № 3, с. 613-616.
19. Schulz H. The structure of $\beta\text{-LiIO}_3$.— *Acta crystallogr.*, 1973, v. B 29, N 10, p. 2285—2289.
20. Matsumura S. Polymorphism of lithium iodate.—*Mat. Res. Bull.*, 1971, v. 6, N 5, p. 469—478.
21. Czank M., Schulz H., Wiedemann H. G. The thermal behaviour of LiIO_3 — *Z. Kristallographie*, 1976, Bd 143, N 1; S. 99—111.
22. [А. В. Яценко](#). Электростатическая модель пьезоэлектрика $\alpha\text{-LiIO}_3$. *Кристаллография*. 2005. Т. 50. Вып. 6. 1054-1059. Кутюлин С. А., Белова Л. Ф., Самойлова Р. П. и др. Оптические и физико-химические свойства монокристаллов $\alpha\text{-LiIO}_3$.—*Изв. АН СССР. Неорганические материалы*, 1975, т. II, № 5, с. 862-865.
23. Powder diffraction file. Pennsylvania, ASTM, 1975.
24. А.И.Китайгородский. Рентгенструктурный анализ. Государственное издательство технико-теоретической литературы. Москва-Ленинград. 1950. 650 с.
25. Абдикамалов Б.А., Иванов В.И., Шехтман В.Ш., Шмытько И.М. Исследование низкотемпературного структурного превращения в кристаллах прустита. *Физика твердого тела*. Т.20. № 10. 1978. С. 2963-2968.
26. Абдикамалов Б.А., Аптекарь И.Л., Сергеева В.М., Тонков Е.Ю. Фазовый переход в сплаве $\text{Sm}_{0.8}\text{Gd}_{0.2}\text{S}$ при низких температурах. *Физика твердого тела*. Т. 18. № 10. С. 2975-2979.
27. Абдикамалов Б.А., Аптекарь И.Л., Сергеева В.М., Тонков Е.Ю. Рентгенографическое исследование фазовых переходов в соединении $\text{Sm}_{0.85}\text{Gd}_{0.15}$. *Физика твердого тела*. Т.21. № 1. С. 187-188.

28. Абдикамалов Б.А., Аристов В.В., Мухина Л.В., Шехтман В.Ш. Эффекты структурной памяти при низкотемпературных перестройках в кристаллах KDP. Физика твердого тела. Т. 20. № 5. 1978. С. 1593-1594.

29. Абдикамалов Б.А. Аристов В.В., Шехтман В.Ш., Шулаков Е.В. Применение камеры углового сканирования для изучения совершенства реальной структуры монокристаллов. Тезисы докладов Всесоюзного совещания «50 лет отечественного рентгеновского приборостроения» и XII Всесоюзного совещания по рентгеновской спектроскопии. Ленинград. 1978.

30. А.А.Бойко. В сборнике «Аппаратура и методы рентгеновского анализа». 1968. Вып. 3. Стр. 225.

31. С.С. Уварова. Анизотропия микротвердости кристаллов α -LiIO₃. 65-е дни науки студентов МИСиС: международные, межвузовские и институтские научно-технические конференции. Сборник докладов. Москва. 2010. 343-344.

32. Д.Г. Харламов. Исследование распределения катионных примесей в кристаллах иодата лития α -LiIO₃, полученных из раствора. 65-е дни науки студентов МИСиС: международные, межвузовские и институтские научно-технические конференции. Сборник докладов. Москва. 2010. 344-345.